

# Molekular-Dynamik-Simulationen zu Strahlenschäden in Silizium

DISSERTATION  
zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktors der Naturwissenschaften

vorgelegt von  
Diplom-Physiker Harald Hutter  
aus Marl (Westf.)

Dortmund  
Juni 1998

Datum der Disputation: 3. Juli 1998

Sprecher des Fachbereichs  
Physik und Vorsitzender  
des Promotionsausschusses: Prof. Dr. E. Reya  
Erster Gutachter: Prof. Dr. W. Weber  
Zweiter Gutachter: Prof. Dr. H. Keiter  
Vertreter der promovierten  
wissenschaftlichen Mitarbeiter: Dr. R. Wunstorf

# Für Katrin

Die wundersame Welt der Atomis



Zzeichnung P. Evers

*ATOMIS SIND FROH, WENN SIE KAMERADEN HABEN,  
DIE IHNEN HELFEN, DEN RÜCKSTOSS AUFZUFANGEN.*



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Grundlagen von Molekular-Dynamik(MD)-Simulationen</b>	<b>5</b>
1.1 Periodische Randbedingungen . . . . .	5
1.2 Bewegungsgleichungen . . . . .	5
1.3 Die Potentialfunktion von Stillinger und Weber (SW) . . . . .	7
1.3.1 Zweikörperpotential . . . . .	8
1.3.2 Dreikörperpotential . . . . .	10
1.4 Andere empirische MD-Potentiale für Silizium . . . . .	11
1.5 Grenzen des MD-Modells mit empirischem Potential . . . . .	12
1.6 Alternativen zur empirischen MD . . . . .	13
1.6.1 Quantenmechanische Rechnungen . . . . .	13
1.6.2 “Binary-Collision”(BC)-Näherung . . . . .	14
<b>2 Grundlagen von Strahlenschäden in Silizium</b>	<b>17</b>
2.1 Wechselwirkung von Strahlung mit Materie . . . . .	17
2.2 Lindhard-Theorie für Atom-Atom-Streuung . . . . .	17
2.3 Abhängigkeit von der Primärstrahlung . . . . .	21
2.4 Schwellenenergie . . . . .	25
2.4.1 Schwellenfunktionen . . . . .	26
2.4.2 Anisotropie . . . . .	28
2.5 PKA-Energien jenseits der Schwellenenergie . . . . .	29
2.6 Kinchin-Pease-Gleichung . . . . .	30

<b>3</b>	<b>MD-Simulation zu Strahlenschäden</b>	<b>33</b>
3.1	Einzelheiten der MD-Rechentechnik . . . . .	33
3.1.1	MD-Zeitschritt . . . . .	33
3.1.2	Thomas-Fermi-Abschirmung . . . . .	34
3.1.3	Potential in Tabellenform zur höheren Programmeffizienz . . . . .	37
3.1.4	Nachbarschaftslisten . . . . .	37
3.1.5	Energieintervallselektion . . . . .	37
3.2	Initialisierung . . . . .	38
3.2.1	Superzelle vor dem Stoß . . . . .	38
3.2.2	Energieübertrag auf das PKA . . . . .	38
3.2.3	Implementierung der Lindhard-Theorie in MD-Simulationen . . . . .	41
3.3	Bestimmung der deponierten Energie . . . . .	41
3.4	Defektselektion nach Kenngrößen . . . . .	44
3.4.1	Selektionsalgorithmus . . . . .	44
3.4.2	Die deponierte Energie als Kenngröße . . . . .	47
3.4.3	Bestimmung der Anzahl der Fehlstellenpaare . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Defektklassifizierung</b>	<b>49</b>
4.1	Überblick über Defekte . . . . .	49
4.2	Isolierte Einzeldefekte . . . . .	50
4.3	Verbundene Einzeldefekte . . . . .	54
4.4	Frenkel-Paare . . . . .	54
4.5	Doppeldefekte . . . . .	55
4.6	Weitere Defekte . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Systematische Fehler</b>	<b>61</b>
5.1	MD ohne Kühlung der SZ . . . . .	61
5.2	SZ-Größe . . . . .	62
5.3	Härte des Zweikörperpotentials . . . . .	65
5.4	Simulationszeit . . . . .	65

<b>6</b>	<b>Schwellenenergie für Einzeldefekte</b>	<b>69</b>
6.1	Definition verschiedener Schwellenenergien . . . . .	69
6.2	Simulationsbedingungen . . . . .	70
6.3	Anisotropie . . . . .	71
6.3.1	I-Schwelle . . . . .	71
6.3.2	/-Schwelle . . . . .	73
6.3.3	N-Schwelle . . . . .	73
6.3.4	Kristallrichtungen mit nicht monotonem Verlauf . . . . .	74
6.3.5	Ergebnisse der Anisotropie . . . . .	74
6.4	Gemittelter Schwellenwert . . . . .	76
6.5	Vergleich mit Literaturwerten . . . . .	79
<b>7</b>	<b>PKA-Energien jenseits der Schwellenenergie</b>	<b>85</b>
7.1	Kinchin-Pease-Gleichung . . . . .	85
7.1.1	Rekombinationsradius . . . . .	85
7.2	Schaden bei $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$ . . . . .	87
7.2.1	Verhältnis von Leerstellen zu Zwischengitterplätzen . . . . .	89
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>93</b>
<b>A</b>	<b>Raumwinkelmittelung</b>	<b>I</b>
<b>B</b>	<b>Vermeidung unphysikalischer Kühlung</b>	<b>III</b>
<b>C</b>	<b>Klassifizierte Defekte</b>	<b>V</b>
C.1	Kenngößen und Häufigkeit . . . . .	V
C.1.1	Defekt-Cluster bei der PKA-Energie von $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$ . . . . .	IX
C.2	Koordinaten und Energien einzelner Atome in verschiedenen Defekten . . . . .	XIV
C.2.1	isolierte Einzeldefekte . . . . .	XIV
C.2.2	verbundene Einzeldefekte . . . . .	XVI
C.2.3	Frenkel-Paare . . . . .	XVIII
C.2.4	Doppeldefekte . . . . .	XIX

C.2.5	Weitere Defekte . . . . .	XX
C.3	Verschiedene Kristallrichtungen . . . . .	XXIII

# Einleitung

Naturwissenschaftler haben seit jeher das von Goethe 1770–75 im „URFAUST“ formulierte Ziel:

*Daß ich erkenne was die Welt  
Im innersten zusammenhält.*

Die heutige Festkörperphysik verfolgt dieses Ziel in den beiden traditionellen Bereichen der theoretischen und der experimentellen Physik auch mittels Simulationsrechnungen.

Das Ziel der theoretischen Festkörperphysik ist u.a., die Vielzahl der Phänomene zu ergründen, die die Folge der kristallinen Struktur der Materie sind. Dies wird mit Hilfe einer elementaren Behandlung von fundamentalen theoretischen Konzepten versucht, d.h. aus “ersten Prinzipien”. Statistische Mechanik und Quantentheorie bilden das Herz der Festkörpertheorie [AM76]. In der theoretischen Physik gibt es nur einige wenige nicht triviale Probleme, die exakt lösbar sind [Bax82]. Strahlenschäden in Materie sind so kompliziert, daß sie nicht analytisch exakt behandelt werden können. Es besteht jedoch die Möglichkeit einzelne Phänomene durch Näherungen zu erklären.

Die experimentelle Physik stellt Datenmaterial aus Messungen der genannten Phänomene zur Verfügung. Die erste zukunftsweisende Arbeit über die Versetzung von Atomen auf Grund von Teilchenbestrahlung stammt von Seitz und Kohler [SK56]. Zu jener Zeit war sehr wenig mit Gewißheit bekannt sowohl über die Wechselwirkung von energiereichen Teilchen mit Materie als auch über die Eigenschaften der erzeugten Defekte. Der Anfang der Forschung an Strahlenschäden wurde stark durch Wigners Erkenntnis [Sei52] motiviert, daß an Graphit-Moderatoren abgebremste Neutronen im Uran-Brennstoff Kernreaktionen auslösen. Der Bau neuer Teilchenbeschleuniger und Kernreaktoren gab neue Impulse, da Einzeldefekte nun in kontrollierbarer Weise erzeugt werden konnten. Für moderne Beschleuniger mit hoher Luminosität begrenzt die Strahlung aus den Kollisionen im Wechselwirkungspunkt des Experiments die Haltbarkeit von Halbleiterdetektoren. Wunstorf [Wun97] gibt einen aktuellen Status über die Strahlenresistenz von Silizium, die ausführlich untersucht wurde. Erwähnenswert in diesem Zusammenhang ist die ROSE-Kollaboration<sup>1</sup> [RC96, RC97], die sich das Ziel gesteckt hat, strahlenhärtere Silizium-Detektoren zu entwickeln. Sie schließt beinahe alle Gruppen ein, die weltweit auf diesem Gebiet arbeiten. Der experimentelle Zugang der Physik zur Erforschung von Strahlenschäden ist auch heute noch recht schwierig. Das ist hauptsächlich bedingt durch die Zeitskala, in der die Dynamik der Schädigung stattfindet, und bei Einzeldefekten die geringe Längenskala. Fehlstellenmobilität macht bei den ex-

---

<sup>1</sup>Der Name der ROSE-Kollaboration “(R&d) On Silicon for future Experiments” symbolisiert die Ähnlichkeit des Schadens (z.B. der Abbildung 2.9) mit einer Rose.

perimentell zur Verfügung stehenden Temperaturen verschiedene Reaktionen möglich. Leerstellen und Zwischengitterplätze können rekombinieren, zwei gleichartige Fehlstellen können aufeinandertreffen, Defekt-Cluster können sich durch solche Agglomerate bilden und experimentell vorhandene Fremdatome können sich anlagern. Elektronische Effekte, wie z.B. die Umladung von Störstellen, können zum einen die Mobilität erhöhen, zum anderen eventuelle Rückbildung von Defekt-Clustern beschleunigen. Auf Grund der Zeitskala dieser Reaktionen ist im Bestrahlungsexperiment die Bestrahlung von der Messung in der Regel zeitlich getrennt. Nach [BHT92] gibt es keine glaubwürdigen experimentellen Daten zu den Gleichgewichtsenergien und -strukturen für die durch Bestrahlung erzeugten Defekte.

Computersimulationen geben einen direkten Einblick sowohl in mikroskopische Details (Wechselwirkung zwischen Atomen, Geometrie von Atomen) als auch in makroskopische Eigenschaften (Transportgrößen, Strukturparameter, elektronische Eigenschaften). Die Computerprogramme gliedern sich in zwei Kategorien:

**MD** molekular-dynamische Simulationen lösen die Newtonschen Bewegungsgleichungen simultan für alle  $N$  Atome einer Superzelle (SZ). Diese Methode wird in dieser Arbeit benutzt, weil sie im Gegensatz zu BC-Simulationen die räumliche Konfiguration von Strahlenschäden in Materie ermitteln kann. Es werden Mehrkörperwechselwirkungen berücksichtigt, die bei Energien in der Nähe des Gleichgewichtszustandes in Materialien mit kovalenten Bindungen essentiell sind.

**BC** “binary collision” Gitter-Simulationen berechnen eine Folge von Zweierstößen, bei denen die Stoßpartner in einer Kristallstruktur angeordnet sind (siehe Abschnitt 1.6.2). Ein bekannter Vertreter dieser Kategorie ist das Programm MARLOWE [RT74]. Diese im Vergleich zur MD weniger rechenintensive Methode wird heute in dem Energiebereich angewandt, in dem MD aufgrund der nur begrenzt nutzbaren Rechenzeit nicht anwendbar ist. Dabei kann auch mit Hybrid-Programmen aus BC und MD gerechnet werden (z.B. [JGSDdlR95]). Direkte Monte Carlo BC-Simulationen verfolgen eine Kette von Zweierstößen, bei denen die Stoßpartner jeweils zufällig ausgewählt werden. Ein bekannter Vertreter ist das Programm TRIM [BH80] [ZBL85].

MD-Simulationen gliedern sich wiederum in zwei Klassen, die sich in dem Aufwand bei der Berechnung der Kräfte unterscheiden (siehe Abschnitt 1.6): **a**) rein klassische Berechnung der Kräfte aus empirischen Potentialen und **b**) quantenmechanische Berechnung der Kräfte. Letzteres kann sowohl mittels empirischer Methoden, wie z.B. mit einem “Tight-Binding”-Verfahren, als auch “ab initio” mittels Dichtefunktionaltheorie geschehen. Da Strahlenschäden eine große räumliche Ausdehnung haben, benötigen diese Rechnungen sehr viele Atome in der SZ. Simulationen von Strahlenschäden mit quantenmechanischen Verfahren (die auch die elektronischen Eigenschaften der Atome berücksichtigen), sind selbst auf den modernsten heute zur Verfügung stehenden Rechnern wegen der benötigten Rechenzeit nicht sinnvoll durchführbar. Aus diesem Grunde kommt für die Fragestellungen dieser Arbeit zur Zeit nur MD mit empirischem Mehrkörperpotential in Frage.

Für die Berechnung empirischer Mehrkörperpotentiale gibt es zwei Ansätze: Funktionen und Funktionale. Die Potentialfunktionen berechnen Zwei- und Dreikörperkräfte separat aus den Koordinaten dieser zwei bzw. drei Atome. Potentialfunktionale haben die Form einer reinen Zweikörperkraft, deren Stärke aber von der lokalen Umgebung der zwei Atome abhängt (siehe

Abschnitt 1.4).

Strahlenschäden in Silizium werden in dieser Arbeit mittels klassischer MD mit den empirischen Funktionen für das Zwei- und das Dreikörperpotential von Stillinger und Weber [SW85] untersucht. Dieses Potential hat sich im Vergleich zu anderen vorgeschlagenen Potentialen in vielen Anwendungen gut bewährt und ist auch numerisch einfach zu handhaben (siehe Abschnitt 1.3). Zu Beginn der Simulation wird auf ein Atom ein Impuls übertragen. Dieses Atom wird als PKA (für “Primary Knock-on Atom”) bezeichnet. Dann werden die Newtonschen Gleichungen (1.1) für einen Zeitraum von 10–20 ps gelöst. Nach dieser Zeit ist die Energie des PKA auf alle Atome der SZ verteilt. Ein längerer Zeitraum  $\approx 2$  ns, in dem z.B. die Migration einzelner Defekte stattfinden kann, ist nur für kleinere ausgewählte Systeme zugänglich. Aussagen über die oben beschriebenen Effekte auf langen Zeitskalen sind demnach mit diesen MD-Simulationen nicht möglich.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die Strukturen von verschiedenen Einzeldefekten und eventuell auch von Mehrfachdefekten in Silizium zu ergründen. Die Häufigkeit des Vorkommens kann in verschiedenen Kristallrichtungen des PKA bzw. bei verschiedenen PKA-Energien variieren. Sehr detaillierte Messungen, in denen Silizium-Atome mittels Neutronen-Einfang und sofortiger Gamma-Emission eine Rückstoßenergie von genau 1 keV haben, werden in der nahen Zukunft zum Vergleich zur Verfügung stehen [Lin98]. Aus diesem Grunde wird der Schaden bei dieser recht hohen Energie sehr genau untersucht.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen. In Kapitel 1 wird die Methode der benutzten MD-Simulationsrechnungen beschrieben. Dazu gehört auch das Stillinger-Weber-Potential. Im darauf folgenden Kapitel werden die Strahlenschäden im Festkörper, verursacht durch die Wechselwirkungen von energiereichen Teilchen, diskutiert. Hier werden wesentlichen Größen eingeführt, die in der Analyse dieser Arbeit bestimmt werden, wie z.B. die Schwellenenergie für Einzeldefekte und die Anzahl der Einzeldefekte als Funktion der PKA-Energie. Kapitel 3 beinhaltet Details der MD-Rechentechnik und der Analyse der Ergebnisse. In Kapitel 4 werden die Geometrien der verschiedenen Defekte dargestellt. Kapitel 5 beinhaltet die Berechnung systematischer Fehler, die in MD-Simulationsrechnungen vorkommen können. In Kapitel 6 wird nach Definition verschiedener Schwellenenergien sowohl die Abhängigkeiten derselben von der Energie und der Kristallrichtung des PKA als auch ein Gesamtergebnis als Mittelung über den gesamten Raumwinkel bestimmt. Das Kapitel endet mit einem Vergleich der verschiedenen Schwellenenergien mit Literaturwerten aus Theorie, Experimenten und anderen Simulationen. Die Untersuchung des Schadens bei PKA-Energien jenseits der Schwellenenergie ist das Thema des siebten und letzten Kapitels dieser Arbeit. Es werden die Anzahl der Einzeldefekte bestimmt, die Geometrie von ausgedehnten Defekten beispielhaft dargestellt und der Schaden bei 1 keV detailliert untersucht.



# Kapitel 1

## Grundlagen von Molekular-Dynamik(MD)-Simulationen

### 1.1 Periodische Randbedingungen

Eine Übersicht über die Grundlagen der MD-Simulationen geben Allen und Tildesley [AT87] bzw. Rapaport [Rap95].

In dieser Arbeit sollen Effekte im Inneren eines Festkörpers untersucht werden. Um Oberflächeneffekte zu vermeiden, werden periodische Randbedingungen [BK12] eingeführt. Eine kubische Superzelle (SZ) wird in drei Dimensionen periodisch ergänzt, so daß ein unendlich großes Gitter entsteht. Die fünf Ovale in Abbildung 1.1 symbolisieren Atome einer z.B. amorphen Struktur. Bewegt sich während der Simulation ein Atom  $i$  in der ursprünglichen SZ, so bewegen sich auch seine Abbilder  $i_A, i_B$ , usw. in den benachbarten Superzellen. In dem Fall, daß ein Atom die ursprüngliche SZ verläßt, tritt eines seiner Abbilder an der gegenüberliegenden Seite ein. So gibt es weder Wände noch Atome, die sich an der Oberfläche befinden.

### 1.2 Bewegungsgleichungen

Die Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$\vec{f}_i = m_i \vec{a}_i \quad (1.1)$$

beschreiben die Beschleunigung  $\vec{a}_i$ , die ein Atom  $i$  der Masse  $m_i$  erfährt, wenn eine Kraft

$$\vec{f}_i = - \frac{\partial E_{\text{pot}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \quad (1.2)$$

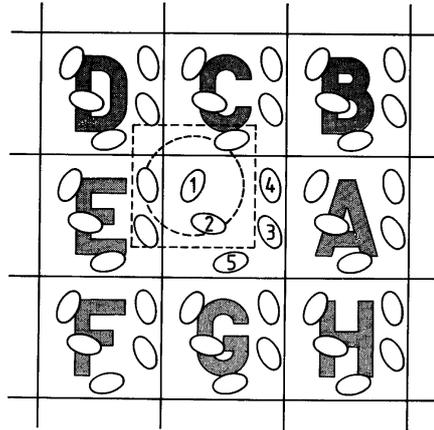


Abbildung 1.1: Ein zweidimensionales periodisches System. Atome können die SZ durch alle vier Kanten betreten oder verlassen (in drei Dimensionen durch sechs Flächen). Der gestrichelte Kreis stellt den Radius  $r_c$  dar, bezogen auf Atom 1.

auf dieses Atom wirkt. Die Kräfte für alle  $i = 1, 2, \dots, N$  Atome einer Superzelle (SZ) berechnen sich als Gradient der potentiellen Energie

$$E_{\text{pot}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N v_1(\vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N v_2(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j>i}^N v_3(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}, \Theta_{kij}, \Theta_{kji}, \Theta_{ikj}) + \dots \quad (1.3)$$

Die potentielle Energie kann aufgespalten werden in Potentialterme von einzelnen Atomen  $v_1$ , Atompaaaren oder Zweikörperpotentialen  $v_2$ , Atomtripeln oder Dreikörperpotentialen  $v_3$ , usw. Das Potential für einzelne Atome  $v_1$  beschreibt z.B. Wände oder externe Kräfte des Systems. Da solche Kräfte nicht Gegenstand dieser Arbeit sind, wird  $v_1 = 0$  gesetzt. Offensichtlich ist  $v_2$  nur eine Funktion des Abstandes  $r_{ij} = |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ , dagegen ist  $v_3$  eine Funktion z.B. von Zweierabständen und Winkeln zwischen den Verbindungsvektoren. Die allgemeine Form solcher Mehrkörperkräfte ist von Keating [Kea66] diskutiert. Beide Potentiale ( $v_2$  und  $v_3$ ) beinhalten die volle Translations- und Rotationsinvarianz.

Die numerische Lösung der Bewegungsgleichungen (1.1) gelingt mit der Methode der finiten Elemente (Abschnitt 3.1.1).

Ein bekanntes Zweikörperpotential ist das Lennard-Jones(LJ)-Potential

$$v_{2,\text{LJ}}(r_{ij}) = -4 \cdot \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1.4)$$

mit den Parametern  $\epsilon$  und  $\sigma$ . Mit dem LJ-Potential werden Edelgase (Ar, Kr, Xe) beschrieben. Mit einem solchen Potential erhält man als Grundzustandsstruktur immer eine dichteste Kugelpackung. Im Silizium-Kristall ist wegen der starken kovalenten Bindungen die Diamantstruktur diejenige mit der niedrigsten Energie. Deshalb werden Potentiale für Silizium aus einer Kombination von Zweikörperterm  $v_2$  und Dreikörperterm  $v_3$  modelliert, zuweilen sogar mit einem Vierkörperterm  $v_4$  [BA90].

Eine Übersicht über die Grundlagen von Potentialfunktionen zur Beschreibung von Halbleitern und deren theoretische Berechtigung wurde von Carlsson [Car90] gegeben. Dort werden auch die beiden Ansätze des Potentials als

- Funktional (z.B. [Ter88b], [Ter88a], [Ter89], [Dod87]) bzw. als
- Funktion (z.B. [SW85], [PaTHT84] [BH87])

zur Behandlung von gerichteten Bindungen in Halbleitern in Hinsicht auf die Implementierung und Anwendung diskutiert.

Potentialfunktionale dagegen haben die Form einer Zweikörperkraft, wie am Beispiel der potentiellen Energie bei dem Tersoff-Potential [Ter89]

$$E_{\text{pot}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1, j \neq i}^N v_{ij}^{(k)} \quad (1.5)$$

verdeutlicht werden kann.  $v_{ij}^{(k)}$  ist eine Art Zweikörperpotential, dessen Stärke von den  $k$  Atomen mit  $k \neq i, j$  abhängt, welche die Atome  $i$  und  $j$  umgeben, was effektiv eine Mehrkörperwechselwirkung darstellt.  $v_{ij}^{(k)}$  hat die Form eines Morse-Potentials ( $\lambda_1 = 2\lambda_2$ )

$$v_{ij}^{(k)} = f_c(r_{ij}) \left( A e^{-\lambda_1 r_{ij}} - B_{ij}^{(k)} e^{-\lambda_2 r_{ij}} \right). \quad (1.6)$$

Bindungen zwischen zwei Atomen werden mit dem interatomaren Abstand gewichtet, so daß die näher liegenden Atome stärker berücksichtigt werden als weiter entfernt liegende.  $B_{ij}^{(k)}$  enthält die gewichtete mittlere Anzahl der  $k$  Bindungen von  $i$  nach  $k$ , die mit der Bindung von  $i$  nach  $j$  konkurrieren. Im allgemeinen ist  $B_{ij}^{(k)} \neq B_{ji}^{(k)}$ , da Atom  $j$  eine andere lokale Umgebung haben kann als Atom  $i$ . Aus diesem Grund muß das Potentialfunktional  $v_{ij}^{(k)}$  nicht symmetrisch in  $ij$  sein. Das bedeutet, daß eine gegebene Bindung nicht zu gleichen Teilen zwischen zwei Atomen in Gleichung (1.5) aufgeteilt wird. In Gleichung (1.6) ist  $f_c(r_{ik})$  eine glatte Abschneidefunktion.

Die Potentialfunktionen berechnen Zwei- und Dreikörperkräfte separat und werden im folgenden Abschnitt beschrieben.

### 1.3 Die Potentialfunktion von Stillinger und Weber (SW)

Stillinger und Weber [SW85] haben eine Modellform des Potentials für Silizium entwickelt, bestehend aus Zwei- und Dreikörpertermen  $v_2$  und  $v_3$ , die sowohl den festen als auch den flüssigen Zustand beschreibt.

### 1.3.1 Zweikörperpotential

Das Zweikörperpotential  $v_2$  hat die Form

$$v_2(r_{ij}) = \begin{cases} \epsilon \cdot A [B(\sigma/r_{ij})^p - 1] \exp[\sigma/(r_{ij} - r_c)] & , \text{für } r_{ij} < r_c \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (1.7)$$

mit den positiven Größen

$$A = 7.050$$

$$B = 0.6022$$

$$p = 4$$

$$r_c = 1.8$$

und ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Das Potential  $v_2$  wird bei dem Radius  $r_c$  glatt<sup>1</sup> bei dem Wert  $r_c \cdot \sigma = 3.8 \text{ \AA}$  abgeschnitten, der etwas kleiner ist als der übernächste Nachbarabstand  $r_{2nn} = 3.9 \text{ \AA}$ .

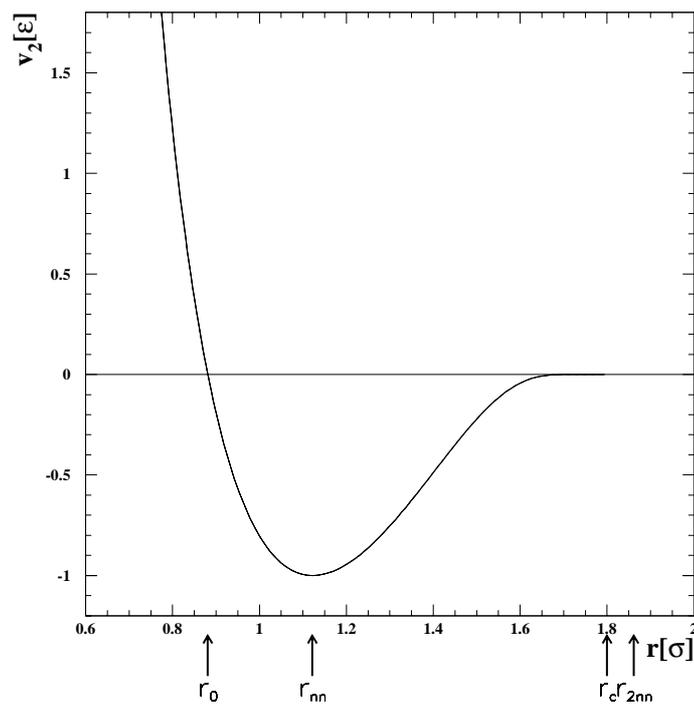


Abbildung 1.2: Zweikörperpotential von Stillinger und Weber [SW85]

Bei kleinen interatomaren Abständen dominiert der Term  $\epsilon A [B(r_{ij}/\sigma)^p - 1]$  in Gleichung (1.7) und übernimmt den abstoßenden Teil des Potentials. Der anziehende Teil des Potentials für  $r > r_0$

<sup>1</sup>stetig in allen Ableitungen von  $v_2$

wird im wesentlichen durch die Abschneidefunktion  $\exp[\sigma/(r_{ij} - r_c)]$  in Gleichung (1.7) erzwungen. An der Stelle  $r_0 = 1.8456 \text{ \AA}$  hat  $v_2$  eine Nullstelle.

Die Gitterkonstante  $a = 5.43 \text{ \AA}$  [Mad96] des Silizium ist mit dem Abstand nächster Nachbarn  $r_{nn}$  in der Diamantstruktur über die Beziehung  $r_{nn} = \sqrt{3}a/4$  verknüpft. Die Minimalstelle des Zweikörperpotentials

$$v_2'(r_{nn}/\sigma) \stackrel{!}{=} 0 \quad (1.8)$$

gibt so auch die Gitterkonstante vor. Der Parameter  $\sigma = 2.0951 \text{ \AA}$  ist so gewählt, daß diese Bedingung bei dem Wert  $r_{nn}/\sigma = 2^{1/6}$  wie im Lennard-Jones-Potential erfüllt ist. An dieser Stelle hat das Zweikörperpotential den Wert

$$v_2(r_{nn}/\sigma) = -\epsilon. \quad (1.9)$$

Damit ist für den idealen Silizium-Kristall in der Diamantstruktur bei einer Temperatur  $T = 0 \text{ K}$ , bei der das Dreikörperpotential  $v_3$  (siehe Abschnitt 1.3.2) identisch Null ist, die Grundzustandsenergie

$$E_{\text{pot,SW}} = -2 \cdot \epsilon. \quad (1.10)$$

Mit  $\epsilon = 2.16724 \text{ eV}$  folgt

$$E_{\text{pot,SW orig.}} = -4.33 \text{ eV}. \quad (1.11)$$

Die experimentell gemessene Grundzustandsenergie hat den Wert [BHT92]

$$E_{\text{pot,exp.}} = -4.63 \text{ eV}. \quad (1.12)$$

Um die Grundzustandsenergie besser zu beschreiben und so die Formationsenergie von Defekten besser zu berechnen, werden in dieser Arbeit alle Energien nach dem Vorschlag von Balamane, Halicioğlu und Tiller [BHT92] um den Faktor 1.07 skaliert:

$$\begin{aligned} E_{\text{pot,SW skal.}} &= 1.07 \cdot E_{\text{pot,SW orig.}} \\ &= -4.63 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Diese Skalierung beeinflußt in keiner Weise die Gleichgewichtsstruktur, da das Verhältnis von Zwei- zu Dreikörperpotential nicht geändert wird. Sie kann daher auch, wie in dieser Arbeit geschehen, nach erfolgter Rechnung mit den ursprünglichen Parametern angebracht werden.

Im Falle kleiner Schwingungen ist die potentielle Energie eine quadratische Funktion der Koordinaten und nach dem Virial-Theorem [LL79, Band I] gilt

$$\overline{E_{\text{kin}}} = \overline{E_{\text{pot}}}. \quad (1.14)$$

Anhand dieser Gleichung wird deutlich, daß bei einer nachträglichen Skalierung der potentiellen Energie nach (1.13) auch die Temperatur skaliert werden muß:

$$T_{\text{SW skal.}} = 1.07 \cdot T_{\text{SW orig.}}. \quad (1.15)$$

Die Temperatur  $T$  zu einem bestimmten Zeitpunkt berechnet sich aus der mittleren kinetischen Energie der  $i = 1, N$  Atome in der SZ [AT87]

$$\overline{E_{\text{kin}}} = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad (1.16)$$

wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante mit dem Wert  $k_B = 11604 \text{ K/eV}$  und  $\langle v^2 \rangle = \sum_{i=1}^N v_i^2 / N$  ist.

Mit einer klassischen MD können quantenmechanische Effekte nicht beschrieben werden, wie z.B. die Nullpunktsschwingungen der Atome Bei  $T = 0 \text{ K}$ . In [ADdlR97] wird daher empfohlen MD-Simulationen nur bei hinreichend hohen Temperaturen (z.B.  $T \approx 80 \text{ K}$ ) durchzuführen, bei denen sich der Kristall schon relativ nahe am klassischen Grenzfall befindet.

### 1.3.2 Dreikörperpotential

Das Dreikörperpotential schreibt sich als

$$v_3(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}, \Theta_{kij}, \Theta_{kji}, \Theta_{ikj}) = \epsilon [h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \Theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \Theta_{ikj})], \quad (1.17)$$

wobei  $\Theta_{jik}$  der Winkel zwischen  $\vec{r}_{ij}$  und  $\vec{r}_{ik}$  ist. Auch das Dreikörperpotential  $v_3$  wird ohne Diskontinuitäten bei demselben Radius  $r_c$  analog zu Gleichung (1.7) abgeschnitten. So hat die Funktion  $h$  die Form

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{jik}) = \begin{cases} \lambda \cdot \exp \left[ \gamma \left( \frac{\sigma}{r_{ij}-r_c} + \frac{\sigma}{r_{ik}-r_c} \right) \right] \cdot \left( \cos \Theta_{jik} + \frac{1}{3} \right)^2 & , \text{für } \max(r_{ij}, r_{ik}) < r_c \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (1.18)$$

mit ihren zwei Parametern  $\lambda = 21$  und  $\gamma = 1.2$ . Die Wahl des idealen Tetraederwinkels

$$\cos \Theta_0 = -\frac{1}{3} \quad \text{mit} \quad \Theta_0 = 109.47^\circ \quad (1.19)$$

bewirkt, daß bei idealer Diamantstruktur und  $T = 0 \text{ K}$  das Dreikörperpotential keinen Beitrag leistet. Bei anderen Strukturen und damit anderen Winkeln sorgt das Dreikörperpotential dafür, daß Energiestrafen gezahlt werden müssen:

$$\text{einfach kubisch: } \cos \Theta_{sc} = 0 \quad \text{mit} \quad \Theta_{sc} = 90^\circ$$

$$\text{kubisch innenzentriert: } \cos \Theta_{bcc} = 1/3 \quad \text{mit} \quad \Theta_{bcc} = 71^\circ$$

$$\text{kubisch flächenzentriert: } \cos \Theta_{fcc} = 1/2 \quad \text{mit} \quad \Theta_{fcc} = 60^\circ$$

$$\text{Graphit: } \cos \Theta_{\text{Graphit}} = -1/2 \quad \text{mit} \quad \Theta_{\text{Graphit}} = 120^\circ$$

Diese alternativen Strukturen kompensieren die Energiestrafen zum Teil durch höhere Koordination und gewinnen damit Stabilisierung durch das Zweikörperpotential. Gesucht wurde ein

geeignetes Gleichgewicht zwischen den beiden konkurrierenden Effekten. Die sechs Parameter ( $A, B, p, r_c, \lambda$  und  $\gamma$ ) wurden so bestimmt [SW85], daß nachdem die potentielle Energie im festen Zustand für die Diamantstruktur niedrigere Werte hat als für sc-, fcc- und bcc-Strukturen, sowohl der Schmelzpunkt als auch die Struktur der Flüssigkeit in angemessener Übereinstimmung mit dem Experiment sind. Mehrere Autoren, die auch das SW-Potential benutzt haben, bestimmen nach [BHT92] den Schmelzpunkt mit dem skalierten SW-Potential im Bereich von

$$T_{m,SW} = (1776-1867) \text{ K.} \quad (1.20)$$

Letztere sind in guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert  $T_m = 1685 \pm 2 \text{ K}$  [Mad96]. Auch die elastischen Eigenschaften des Silizium werden recht gut beschrieben [BHT92].

## 1.4 Andere empirische MD-Potentiale für Silizium

Um zu entscheiden, welches Potential das geeignetste ist, um Strahlenschäden in Silizium zu beschreiben, sind folgende Punkte wichtig.

- In einer Kollisionskaskade wird eine kleine Region plötzlich aufgeheizt und es entsteht lokal geschmolzenes Silizium mit signifikanter Abweichung von der vierfachen Koordination. Deshalb ist die Qualität des Potentials, auch flüssiges Silizium gut zu beschreiben, für diese Analyse wichtig.
- Die Formationsenergien der Einzeldefekte sollen möglichst gut beschrieben werden. Als Vergleichswerte dienen Simulationen mit der besten verfügbaren Genauigkeit, da es nach [BHT92] keine glaubwürdigen experimentellen Daten zu den Gleichgewichtsenergien und -strukturen für die durch Bestrahlung erzeugten Defekte gibt.
- Bei gleicher Qualität sollte das Potential möglichst einfach zu programmieren sein.

Das erste Kriterium wird von dem SW-Potential sehr gut erfüllt. Es gibt nach [BHT92] die beste Beschreibung des flüssigen Silizium von allen empirischen Potentialen, die die Autoren getestet haben (siehe Abbildung 1.3). Das Potential von [Ter89] wurde dort nicht getestet.

Auch das zweite Kriterium wird von dem SW-Potential sehr gut erfüllt, denn es liefert dieselbe Größenordnung für Formationsenergien von Zwischengitterplätzen, wie die Dichtefunktionaltheorie [BAC87] und im Gegensatz zu dem Tersoff-Potential [Ter88a] ist die Reihenfolge der Einzeldefektenergien richtig.

Das SW-Potential erfüllt nicht nur die ersten beiden Kriterien ausgezeichnet, es ist auch einfach zu programmieren. Es ist das bei weitem am häufigsten benutzte Potential [BHT92], was zur Folge hat, daß sehr viele Modelleigenschaften auf ihre Gültigkeit untersucht worden sind. So ist z.B. auch bekannt, daß das SW-Potential nach [BA90] sowohl über- als auch unterkoordiniertes Silizium nicht mit angemessener Genauigkeit beschreibt, so daß es z.B. für Oberflächenstudien nicht brauchbar ist.

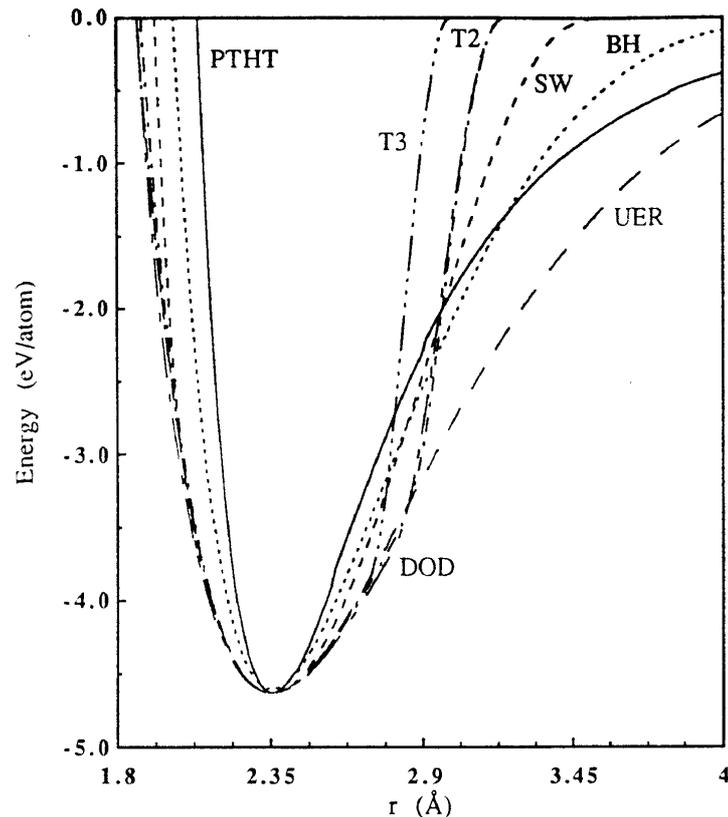


Abbildung 1.3: Grundzustandsenergie verschiedener MD-Potentiale. Die gestrichelte Linie zeigt das skalierte SW-Potential [SW85]. (PTHT: [PaTHT84], BH: [BH87], T2: [Ter88b], T3: [Ter88a], DOD: [Dod87]) nach [BHT92] und universelle Energie-Abstands-Relation (UER) nach [RSGF84].

## 1.5 Grenzen des MD-Modells mit empirischem Potential

Das empirische SW-Potential beschreibt den Einfluß der Valenzelektronen nicht direkt, sondern im effektiven Zwei- und Dreikörperpotential. Im folgenden werden einige Grenzen dieses Modells beschrieben.

### Ladungscharakterisierung von Defekten

Da es auch bei Kristalldefekten nicht möglich ist die elektronischen Defektzustände mittels empirischer MD zu berechnen, können keine Angaben über den Ladungszustand der Fehlstellen gemacht werden. Das betrifft die Zuverlässigkeit der Rechnungen nicht, da die Simulationszeiten von 20 ps bei den meisten Rechnungen (bis auf Langzeitstudien an ausgewählten Systemen) nicht überschritten wurden. Der Ladungszustand kann einen nicht verschwindenden Einfluß auf die Diffusion von Einzeldefekten haben, die jedoch auf einer Zeitskala im Bereich von einigen ns relevant sind.

## Graphitstruktur

Es ist bislang nicht gelungen mit einem Dreikörperpotential beide Strukturen gleichberechtigt zu realisieren, nämlich die Diamantstruktur, beruhend auf  $sp^3$ -Hybriden der Valenzorbitale und die Graphitstruktur, beruhend auf planaren  $sp^2$ -Hybriden. Das liegt daran, daß sich der kovalente Anteil der Bindung ändert und sich so auch das Dreikörperpotential in komplizierter Weise ändern muß. Ansätze dazu gibt es in neuerer Zeit von [BKJ97]. Wie gut welche Struktur von einigen empirischen MD-Potentialen beschrieben wird, darunter auch die Graphit-Struktur, ist in [BHT92] diskutiert. Wie wichtig der elektronische Einfluß während der Entstehung von Kollisionskaskaden wirklich ist, kann heute nicht mit Sicherheit gesagt werden.

## Hochangeregte Zustände

Man könnte argumentieren, daß die empirische MD prinzipiell nicht in der Lage ist lokal hochangeregte Zustände zu beschreiben, wie sie in einer Kollisionskaskade auftreten. Jedoch sprechen die Erfolge der empirischen MD bei der Beschreibung des flüssigen Silizium dagegen (immerhin handelt es sich hier um ein Metall). Desweiteren spricht die Erfahrung der Strahlenschädigung mit energiereichen Elektronen dagegen. Diese haben einen wesentlich höheren Anteil elektronischer Anregung als nicht ionisierenden Energieverlust. Es ist aber fast ausschließlich der nicht ionisierende Energieverlust, der die Strahlenschäden verursacht (siehe Kapitel 2).

# 1.6 Alternativen zur empirischen MD

## 1.6.1 Quantenmechanische Rechnungen

Es gibt zwei Alternativen zur empirischen MD, die auch die elektronischen Eigenschaften der Atome berücksichtigen: *ab initio*-MD und "Tight-Binding"-MD.

***ab initio*-MD:** Interatomare Kräfte werden mittels Dichtefunktionaltheorie berechnet, welche die Quantenmechanik des Systems beschreibt. Beste Verfahren rechnen derzeit mit "ultrasoft" Pseudopotentialen bis zu 200 Atomen in der SZ (z.B. [KF96]).

**"Tight-Binding"-MD:** Hier werden die Kräfte teilweise mittels quantenmechanischer Verfahren und teilweise mittels empirischer Potentiale bestimmt. Insbesondere wird der Beitrag der Valenzelektronen mittels tight-binding-Hamiltonian beschrieben. Die Hoffnung ist, die über die Valenzelektronen vermittelten Mehrkörperkräfte besser als mit klassischen Mehrkörperpotentialen zu beschreiben. Die Modellierung der Valenzelektronenbandstruktur ist aber nicht unproblematisch. Derzeit können bis zu 1000 Atome in der SZ gerechnet werden.

Da Strahlenschäden eine große räumliche Ausdehnung haben, benötigen diese Rechnungen sehr viele Atome in der SZ. Selbst die modernsten heute zur Verfügung stehenden Rechner reichen noch nicht aus, um elektronische Eigenschaften in MD-Simulationen zu berücksichtigen.

### 1.6.2 “Binary-Collision”(BC)-Näherung

Diese im Vergleich zur MD weniger rechenintensive Methode wird heute in dem Energiebereich angewandt, in dem MD aufgrund der nur begrenzt nutzbaren Rechenzeit nicht anwendbar ist. Da einige BC-Simulationsergebnisse in dieser Arbeit diskutiert werden, wird die Methode etwas genauer beschrieben.

In der BC-Näherung wird die Wechselwirkung zweier Teilchen durch eine abstoßende konservative Zentralkraft berechnet. Die Positionen der Teilchen und des Massenschwerpunktes ist in Abbildung 1.4 in der Apsis der Kollision gezeigt. Dort ist  $s$  der Stoßparameter,  $A$  das Verhältnis der Targetmasse zur Projektilmasse und  $\theta$  der Streuwinkel im Schwerpunktsystem. Die Streuwinkel im Laborsystem  $\vartheta$  und  $\Phi$  sind für das Projektilatom bzw. das Targetatom ebenfalls gezeigt.

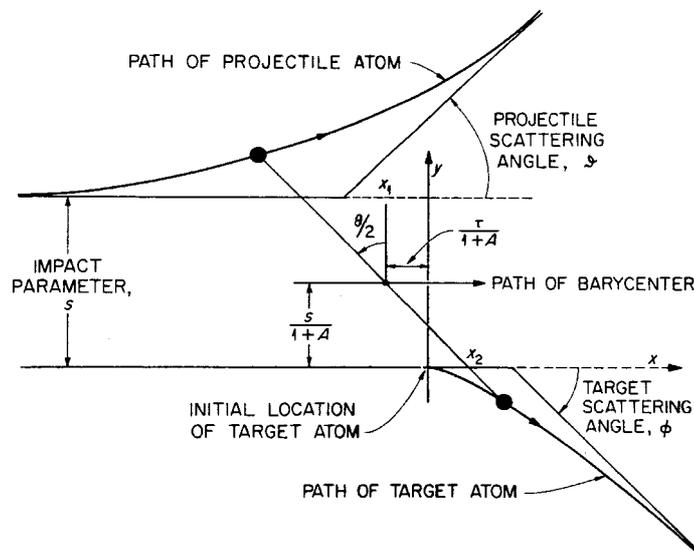


Abbildung 1.4: Zweikörperstöße in der BC-Näherung (aus [RT74]).

Wenn die Rückstoßenergie  $E_{\text{Target}}$  eines gestoßenen Targetatoms die Schwellenenergie  $E_d$  überschreitet, so nimmt dieses Atom mit der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}} = E_{\text{Target}} - E_b$  am Ensemble der bewegten Atome teil, wobei  $E_b$  die Bindungsenergie im Gitter ist [ADdIR97]; andernfalls ( $E_{\text{Target}} < E_d$ ) wird das Atom nicht weiter berücksichtigt. Alle Atome bleiben im Ensemble der sich bewegenden Atome, bis ihre Energie durch Energieabgabe weiterer Stöße unter eine Energieschwelle  $E_{\text{cut}}$  fällt. Man kann zwei Fälle unterscheiden:

- (a)  $E_{\text{Projektil}} < E_{\text{cut}}$  und  $E_{\text{Target}} > E_d$  : Platzwechsel
- (b)  $E_{\text{Projektil}} < E_{\text{cut}}$  und  $E_{\text{Target}} < E_d$  : Projektilatom wird Zwischengitterplatz

Wenn nun (a) nach einer Zweikörperkollision die Energie des Projektilatoms  $E_{\text{Projektil}}$  unter den Wert  $E_{\text{cut}}$  fällt, aber gleichzeitig  $E_{\text{Target}} > E_d$  ist, so ersetzt das Projektilatom das Targetatom. Wenn andernfalls (b)  $E_{\text{Target}} < E_d$  ist, und die Projektilenergie  $E_{\text{Projektil}}$  kleiner als  $E_{\text{cut}}$ , so wird das Projektilatom ein Zwischengitterplatz. Die Anzahl und Orte der Zwischengitterplätze, Leerstellen

und Atome, die auf dem regulären Gitterplatz eines anderen Atoms sitzen (Platzwechsel), werden auf diese Weise bestimmt.

Computerprogramme, die nach der BC-Methode die Defektstrukturen in Kollisionskaskaden berechnen, stammen z.B. von [Yos61], [BB63], [RT74], [BH80].

Nach [KGM95] ist es eine wohlbekannte Tatsache, daß quantitative Berechnungen, die auf der BC-Näherung basieren, die Wirkungsquerschnitte für Defektbildung nicht mit der nötigen Genauigkeit berechnen. MD-Simulationen mit Mehrkörperkräften gehen in der Genauigkeit über BC-Simulationen hinaus und können auch Defektgeometrien berechnen.



# Kapitel 2

## Grundlagen von Strahlenschäden in Silizium

### 2.1 Wechselwirkung von Strahlung mit Materie

Ein energiereiches Teilchen, das in einen Festkörper eindringt, wechselwirkt mit dessen Elektronen und Kernen [vLFL<sup>+</sup>80]. Es verliert Energie durch verschiedene Prozesse, die von der Teilchenart und -energie abhängen. Die wichtigsten sind

- Rutherford-Streuung (Coulomb-Streuung) zwischen geladenen Teilchen, z.B. einfallende Teilchen, Kerne, Valenz- bzw. Rumpfelektronen und teilweise geladene Rückstoßatome,
- Photon-Wechselwirkungen, die energiereiche Elektronen erzeugen (z.B. Compton-Effekt),
- Kernwechselwirkungen, hauptsächlich durch ungeladene Neutronen verursacht, und
- Ionisation in Halbleitern (Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren).

Die endgültige Schadenskonfiguration hängt von der Art der primären Strahlung, der Ladung, der Masse und der Energie ab. Wechselwirkungen mit den Atomkernen erzeugen Rückstoßatome.

Das erste von der Primärstrahlung erzeugte Rückstoßatom, im folgenden mit PKA (für “Primary Knock-on Atom”) abgekürzt, verliert seine Energie einerseits durch Ionisation andererseits durch die Erzeugung weiterer (sekundärer etc.) Rückstoßatome, die ihre Energie ebenso wieder verlieren.

### 2.2 Lindhard-Theorie für Atom-Atom-Streuung

Lindhard et al. [LNST63], [LSS63] haben theoretische Studien der elektronischen Abbremsung von Ionen durchgeführt und herausgefunden, daß die Bremskraft proportional zu der Geschwindigkeit des Ions ist. Die Abgabe der kinetischen Energie eines rückgestoßenen Atoms durch mehrere inelastische Kollisionen wird nach der Lindhard-Theorie zusammenhängend im Rahmen der

Thomas-Fermi-Näherung der Atome behandelt. Die Lindhard-Theorie teilt den Energieverlust eines Atoms in einem Festkörper in zwei Anteile:

**nukleare** Abbremsung, resultierend aus der abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung des Projektils mit den Festkörperatomen, und

**elektronische** Abbremsung, resultierend aus dem inelastischen Energieverlust.

Die PKA-Energie  $E_{\text{PKA}}$  abzüglich des Energieverlustes  $Q$  durch elektronische Anregung, und zwar nicht nur die elektronische Anregung durch das PKA sondern auch die durch sekundäre Rückstoßatome etc., liefert den Anteil der PKA-Energie

$$E_{\text{NIEL}} = E_{\text{PKA}} - Q, \quad (2.1)$$

der zu nicht ionisierendem Energieverlust ("Non Ionizing Energy Loss" NIEL) führt. Diese Definition beruht auf der Annahme, daß die Stoßereignisse nicht durch die detaillierte Art und Weise beeinflußt werden, auf die die Energie während der Kollisionen an das elektronische System abgegeben wird.

Die NIEL-Energie kann nach der Lindhard-Theorie durch den Ausdruck

$$E_{\text{NIEL}} = \frac{E_{\text{PKA}}}{1 + F_L \cdot g(\epsilon)} \quad (2.2)$$

mit

$$\epsilon = E_{\text{PKA}}/E_I \quad (2.3)$$

berechnet werden mit den materialabhängigen Größen

$$E_I = 30.724 \cdot Z_{\text{PKA}} Z_L (Z_{\text{PKA}}^{2/3} + Z_L^{2/3}) \frac{A_{\text{PKA}} + A_L}{A_L} \quad (2.4)$$

$$F_L = \frac{0.0793 \cdot Z_{\text{PKA}}^{2/3} Z_L^{1/3} (A_{\text{PKA}} + A_L)^{3/2}}{(Z_{\text{PKA}}^{2/3} + Z_L^{2/3})^{3/4} A_{\text{PKA}}^{3/2} A_L^{1/2}}. \quad (2.5)$$

Hierbei bezeichnen  $A_L$  und  $Z_L$  die Massenzahl bzw. die Kernladungszahl der Gitteratome. Für  $A_{\text{PKA}}$  und  $Z_{\text{PKA}}$  sind entsprechend die Massenzahl bzw. die Kernladungszahl des Rückstoßatoms einzusetzen. Für Silizium ist  $F_{L,\text{Si}} = 0.146$  und  $E_{I,\text{Si}} = 41.1 \text{ keV}$  mit  $A_{\text{PKA}} = A_L = 28u$  und  $Z_{\text{PKA}} = Z_L = 14$ .

Die Funktion  $g(\epsilon)$  in Gleichung (2.2) ist in [LNST63] graphisch gegeben und wurde von Robinson [Rob76] numerisch durch

$$g(\epsilon) = 3.4008 \cdot \epsilon^{1/6} + 0.40244 \cdot \epsilon^{3/4} + \epsilon \quad (2.6)$$

angepaßt (siehe Abbildung 2.1).

Lindhards semiempirische Funktion  $g(\epsilon)$  interpoliert zwischen den beiden Extremfällen

$$g(\epsilon) = \begin{cases} 0 & , \text{für } \epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon & , \text{für } \epsilon \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.7)$$

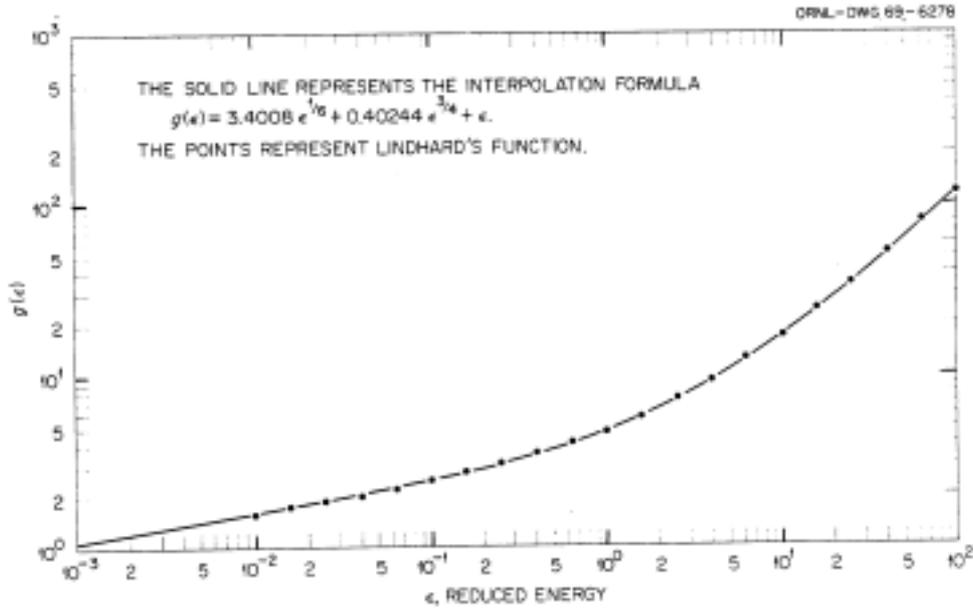


Abbildung 2.1: Lindhards semiempirische Funktion  $g(\epsilon)$ . Die Linie repräsentiert die numerische Anpassung von [Rob76] nach Gleichung (2.6). Die Punkte sind Werte von Lindhard et al. [LNST63].

sehr kleiner bzw. sehr großer PKA-Energie [LNST63]. Die dieser Arbeit untersuchten PKA-Energien liegen mit  $\epsilon_{\min} \approx 0.00048$  bis  $\epsilon_{\max} \approx 0.025$  im unteren Drittel des in Abbildung 2.1 dargestellten Bereichs.

Bis auf einige Abweichungen wie z.B. die der Bremskraft vom linearen Zusammenhang mit der Geschwindigkeit des rückgestoßenen Atoms und Oszillationen der Bremskraft bei konstanter Geschwindigkeit, die sich aus der quasi-klassischen Näherung und der Vernachlässigung der Austauschwechselwirkung zwischen Elektronen ergeben, werden nach Robinson [Rob70] experimentelle Daten der Abbremsung von Ionen in verschiedenen Substanzen gut mit der Lindhard-Theorie beschrieben.

Um die Schädigungseffizienz eines PKA in Silizium zu verdeutlichen, ist in Abbildung 2.2 der Anteil der Rückstoßenergie  $E_{\text{NIEL}}/E_{\text{PKA}}$ , der nicht durch Ionisation verbraucht wird, für den in dieser Arbeit interessanten Energiebereich dargestellt. Demnach verliert z.B. ein PKA der Energie  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  etwa 21 % seiner Energie durch Ionisation und die übrige Energie

$$E_{\text{NIEL}}(E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}) = 786.6 \text{ eV} \quad (2.8)$$

wird in Stoßprozessen an andere Gitteratome abgegeben, die dadurch aus ihrem Gitterplatz geschlagen werden können.

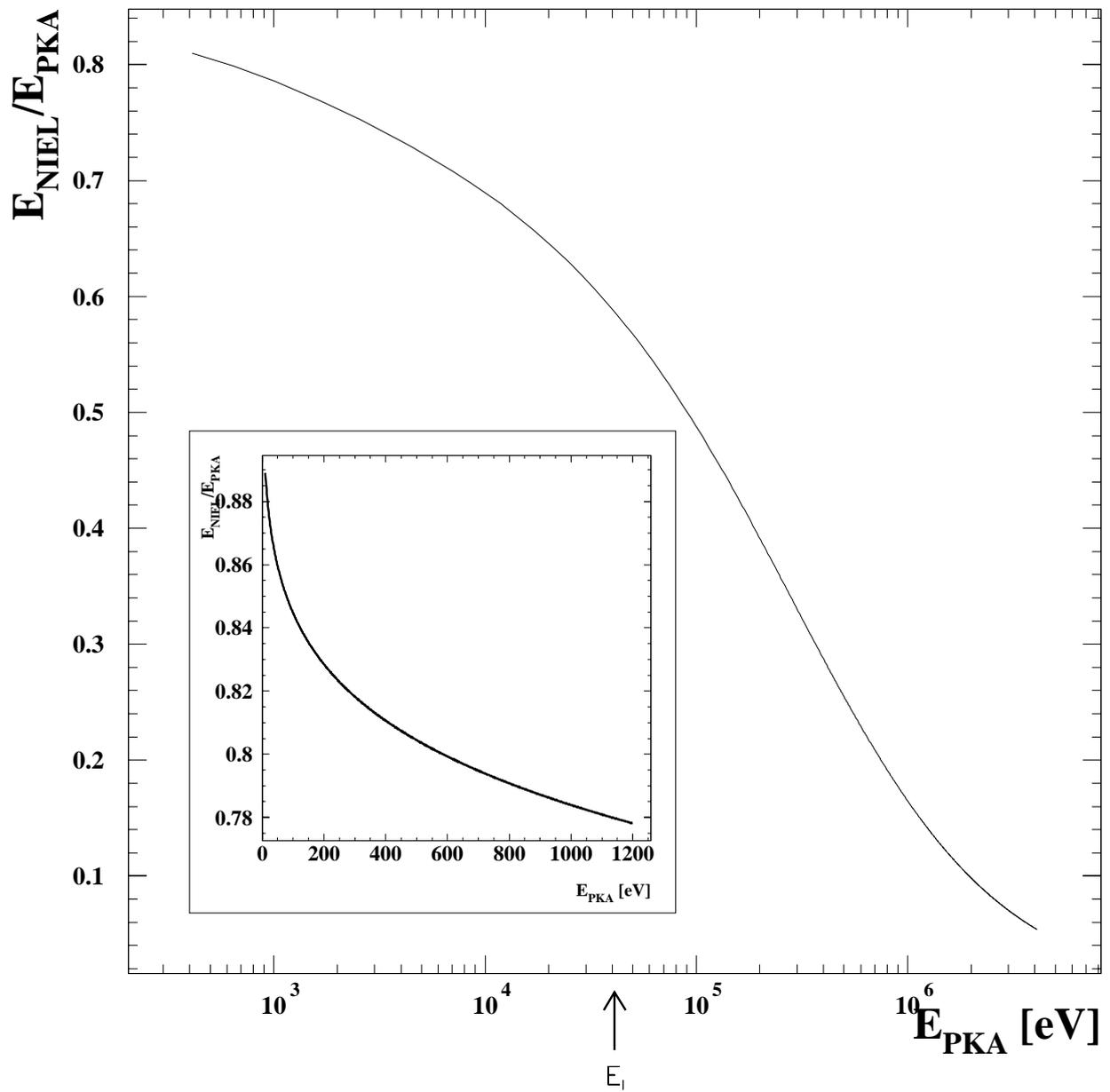


Abbildung 2.2: NIEL-Energie  $E_{\text{NIEL}}$  in Abhängigkeit der PKA-Energie  $E_{\text{PKA}}$ .

## 2.3 Abhängigkeit von der Primärstrahlung

Je nach Strahlungsart treten verschiedene Wechselwirkungen mit der Materie auf, deren jeweilige Wahrscheinlichkeit auch von der Energie der Primärstrahlung abhängt. Hieraus ergeben sich Unterschiede bezüglich der im Silizium-Kristall induzierten Schädigung. Der Energieverlust aller Teilchen erfolgt zu einem erheblichen Anteil über Ionisation. Da die Ionisation in Halbleitern ein vollständig reversibler Prozeß ist, bleibt keine Schädigung im Silizium-Kristall zurück.

Der nicht ionisierende Energieverlust erfolgt für geladene Teilchen hauptsächlich über Rutherford-Streuung. Neutronen verlieren ihre Energie im wesentlichen durch elastische Streuung am Kern. In Tabelle 2.1 sind die wichtigsten charakteristischen Daten für einen Vergleich der verschiedenen Wechselwirkungen von Elektronen, Protonen und Neutronen mit Silizium zusammengefaßt.

	Elektron	Proton	Neutron	Si <sup>+</sup> -Ion
Wechselwirkung	Coulomb-Streuung	Coulomb-Streuung	Elastische Streuung am Kern	Coulomb-Streuung
a) Transferenergie für 1 MeV Einschußenergie $E_{PKA}^{\max}$ [eV] $\langle E_{PKA} \rangle$ [eV] $\sigma$ [barn] (s.Abb. 2.3)	155 46 44	133700 210 17950	133900 50000 3.7	1000000 265 502500
b) Minimale Einschußenergie [eV] für Einzeldefekte für Defekt-Cluster	260000 4600000	190 15000	190 15000	25 2000

Tabelle 2.1: **a)** Die maximale und mittlere Energieüberträge auf ein Silizium-Atom von Elektronen, Protonen, Neutronen und Si<sup>+</sup>-Ionen der Energie  $E_i = 1$  MeV (aus [Wun92]).

**b)** Die sich aus der Stoßkinetik ergebenden Mindestenergien zur Erzeugung von Einzeldefekten bzw. Defekt-Clustern bei einer Schwellenenergie  $E_d = 25$  eV (aus [Wun92]).

Der maximale Energieübertrag  $E_{PKA}^{\max}$  ergibt sich direkt aus den Bedingungen für den zentralen Stoß. Danach gilt

$$E_{PKA}^{\max} = 4 \frac{M m_i}{(M + m_i)^2} E_i, \quad (2.9)$$

wobei  $M$  die Masse des Silizium-Targetatoms bezeichnet und  $m_i$  die Masse des eingeschossenen Primärteilchens mit der Energie  $E_i$ . Für Elektronen sind relativistische Effekte zu berücksichtigen, und dann ergibt sich [ADdlR97]

$$E_{PKA}^{\max} = 2 \frac{(E_e + 2m_e c^2)}{M c^2} E_e \quad (2.10)$$

mit der kinetischen Energie  $E_e$  und der Ruhemasse  $m_e$  des Elektrons.

Die Wahrscheinlichkeit, mit der es bei einem Stoß zu einem bestimmten Energieübertrag kommt, ist durch die jeweilige Wechselwirkung der Primärstrahlung gegeben. Wie Abbildung 2.3 zu entnehmen ist, ist für Neutronen jede Transferenergie annähernd gleich wahrscheinlich, während bei der Rutherford-Streuung kleine Energieüberträge deutlich überwiegen. Für die Rutherford-Streuung läßt sich die mittlere Übertragungsenergie  $\langle E_{\text{PKA}} \rangle$  mit

$$\langle E_{\text{PKA}} \rangle \approx E_d \ln \frac{E_{\text{PKA}}^{\text{max}}}{E_d} \quad (2.11)$$

abschätzen [GS85].

In Tabelle 2.1 sind  $E_{\text{PKA}}^{\text{max}}$  und  $\langle E_{\text{PKA}} \rangle$  zum Vergleich jeweils für die Einschußenergie  $E_i = 1 \text{ MeV}$  angegeben. Abbildung 2.3 zeigt, ebenfalls für  $E_i = 1 \text{ MeV}$ , den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Transferenergie  $E$  auf ein Silizium-Atom. Der in Tabelle 2.1 aufgeführte totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  ist das Integral von der Schwellenenergie  $E_d = 25 \text{ eV}$  bis  $E_{\text{PKA}}^{\text{max}}$  [Cor70].

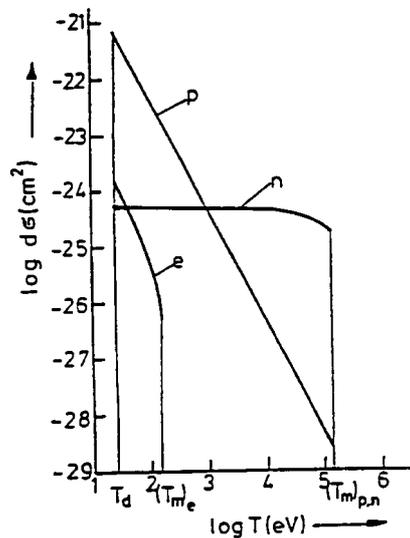


Abbildung 2.3: Differentieller Wirkungsquerschnitt für den Energieübertrag von Elektronen, Protonen und Neutronen auf ein Silizium-Atom ( $E_i = 1 \text{ MeV}$ ) [Cor70].

In Tabelle 2.1 sind zusätzlich auch die minimalen Einschußenergien für die verschiedenen Teilchen angegeben, oberhalb derer die Bildung von Einzeldefekten bzw. Defekt-Clustern nach der Stoßkinetik überhaupt erst möglich wird. Für Neutronen und Protonen ergeben sich aufgrund der fast gleich großen Massen zwar dieselben Mindestenergien, aber bei der Coulomb-Wechselwirkung der Protonen sind kleinere Energieüberträge sehr viel wahrscheinlicher. Dies zeigt sich auch in dem fast 250fach größeren mittleren Energieübertrag der Neutronen gegenüber den Protonen bei gleicher Einschußenergie von  $E_i = 1 \text{ MeV}$  (Tabelle 2.1). Insbesondere folgt hieraus, daß Protonen im Vergleich zu Neutronen eine größere Anzahl an Einzeldefekten induzieren. Für höhere Protonenenergien steigt die Wahrscheinlichkeit der Bildung von intermediären und hochenergetischen PKA, die dann das gleiche Mischungsverhältnis von Einzeldefekten zu Defekt-Clustern wie bei Neutronenschädigung erwarten lassen.

Das Energiespektrum der sekundären Rückstoßatome kann aus BC-Simulationsrechnungen bestimmt werden [WDS<sup>+</sup>81]. Auch in diesem Spektrum sind Atome vorhanden mit Energien, die ausreichen, um Einzeldefekte und mehrere Defekt-Cluster zu erzeugen. Diese Atome geben ihre Energie in weiteren Stößen an Silizium-Targetatome ab. Daraus ergibt sich das reduzierte Spektrum. Dieses reduzierte Spektrum gibt die gesamte Energie an, die zur Bildung bestimmter Defekte führt (Einzeldefekte bzw. Defekt-Cluster), wobei die Defekte nach der zu ihrer Erzeugung aufgewandten Energie unterschieden werden. Wichtigstes Ergebnis dieser BC-Simulationen ist die Feststellung, daß das Verhältnis der Energie, die insgesamt für die Bildung von Einzeldefekten und von Defekt-Clustern verbraucht wird, zur PKA-Energie unabhängig von der PKA-Energie  $E_{\text{PKA}}$  ist, wenn diese größer als

$$E_{\text{PKA}} \gtrsim 2 \text{ keV} \quad (2.12)$$

ist [WDS<sup>+</sup>81].

Für ein Rückstoßatom der Energie  $E_{\text{PKA}}$  läßt sich mit Gleichung (2.2) die Energie  $E_{\text{NIEL}}$  berechnen, die für die Bildung von Defekten zur Verfügung steht. Damit läßt sich für jedes Teilchen  $i$  mit der Einschußenergie  $E_i$  die sogenannte Schädigungsfunktion  $D(E)$  formulieren, die hier in der Form von [LWJ87] wiedergegeben wird:

$$D(E_i) = \sum_{\nu} \sigma_{\nu}(E_i) \int_{E_d}^{E_{\text{PKA}}^{\text{max}}} f_{\nu}(E_i, E_{\text{PKA}}) E_{\text{NIEL}} dE_{\text{PKA}} \quad (2.13)$$

Der Index  $\nu$  durchläuft alle Reaktionsmöglichkeiten und  $\sigma_{\nu}(E_i)$  bezeichnet den Wechselwirkungsquerschnitt dieser Reaktion bei der Einschußenergie  $E_i$ . Die Funktion  $f_{\nu}(E, E_{\text{PKA}})$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der bei der  $\nu$ -ten Reaktion ein PKA der Energie  $E_{\text{PKA}}$  entsteht. In Abbildung 2.4 ist die auf  $D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV})$  normierte Schädigungsfunktion für verschiedene Teilchen als Funktion der jeweiligen Einschußenergie  $E_i$  aufgetragen [RC97]. Zum Vergleich der Schädigungseffizienzen verschiedener Teilchen mit individuellen Energiespektren wird ein auf 1 MeV Neutronen normierter Härtefaktor  $\kappa$  definiert

$$\kappa = \frac{\int_{E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} \Phi(E_i) D(E_i) dE_i}{D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV}) \int_{E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} \Phi(E_i) dE_i}, \quad (2.14)$$

wobei  $\Phi(E)$  die Fluenz (das zeitliche Integral des Teilchenflusses) mit der Einheit [Teilchen pro Fläche] bezeichnet. Die Normierung auf  $D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV})$  ist allgemeiner Standard und in Hochenergiephysik-Experimenten sinnvoll, da die neutroneninduzierte Schädigung die Kristalldefekte dominiert und das zu erwartende Energiespektrum eine Verteilung um 1 MeV ist [Wun92].

Die Art der Defekte ist von der Teilchenart und der Einschußenergie der Primärstrahlung unabhängig, wenn überwiegend PKA mit  $E_{\text{PKA}} \geq 2 \text{ keV}$  erzeugt werden [WDS<sup>+</sup>81]. In diesem

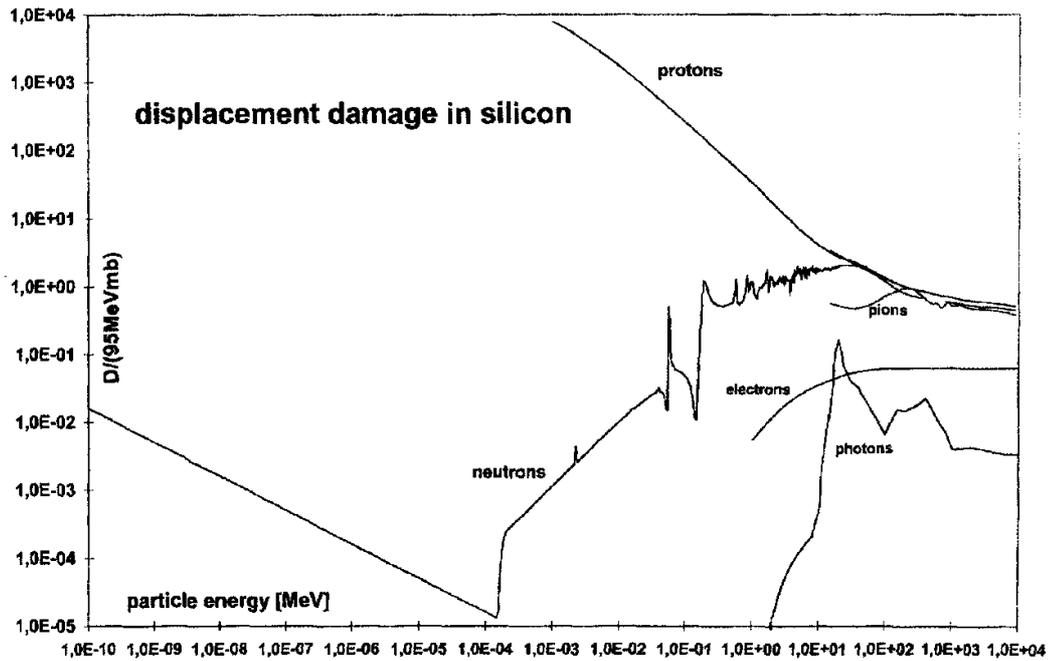


Abbildung 2.4: Schädigungsfunktion  $D(E)$  normiert auf  $D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV})$  Neutronen [RC97].

Fall skaliert die Strahlenschädigung mit dem nicht ionisierenden Energieverlust (NIEL) des eingeschossenen Teilchens. In Abbildung 2.5 ist die Fluenzabhängigkeit

$$\frac{\Delta I}{V} = \alpha \cdot \Phi_{\text{norm}} \quad (2.15)$$

des von der Primärstrahlung induzierten Volumengenerationstroms  $\frac{\Delta I}{V}$  gezeigt. Dieser ist die wesentliche Komponente des Dunkelstromanstiegs des Halbleiterdetektors. Die Fluenzen  $\Phi_{i,\text{norm}}$  der verschiedenen Bestrahlungen wurden mit dem Härtefaktor  $\kappa$  auf  $D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV})$  normiert. Mit dieser Normierung auf den nicht ionisierenden Energieverlust ergeben die Neutronen- und Protonenbestrahlungen für alle Energien dieselbe Fluenzabhängigkeit. Die durchgezogene Gerade entspricht einer Schädigungsrate  $\alpha = 8.0 \cdot 10^{-17} \text{ A/cm}$ . Dies entspricht einem einheitlichen Defektspektrum, das quantitativ mit dem nicht ionisierenden Energieverlust NIEL skaliert.

Die Schädigungsrate der Elektronen ist vier Größenordnungen kleiner, wenn nicht normierte Fluenzen verglichen werden. Selbst der Versuch die normierten Fluenzen zu vergleichen, resultiert in einer Abweichung von einer Größenordnung. Elektronen mit  $E_i = 1.8 \text{ MeV}$  können nach Tabelle 2.1 auf Grund ihres niedrigen Energieübertrags ausschließlich Einzeldefekte und keine Defekt-Cluster erzeugen. Nach der Relation (2.12) haben sie nicht genügend Energie, um im reduzierten Spektrum der sekundären Atome ein von der PKA-Energie unabhängiges Mischungsverhältnis der Energie zu erzeugen, die in Einzeldefekten bzw. in Defekt-Clustern deponiert werden. Das ist jedoch Voraussetzung, damit die Schädigung mit dem nicht ionisierenden Energieverlust NIEL skaliert.

Diese Abbildung zeigt deutlich, daß sich die Schädigung qualitativ ändert, wenn die PKA-Energie die Schwelle zur Erzeugung von Defekt-Clustern überschreitet. Dieser Abschnitt hat

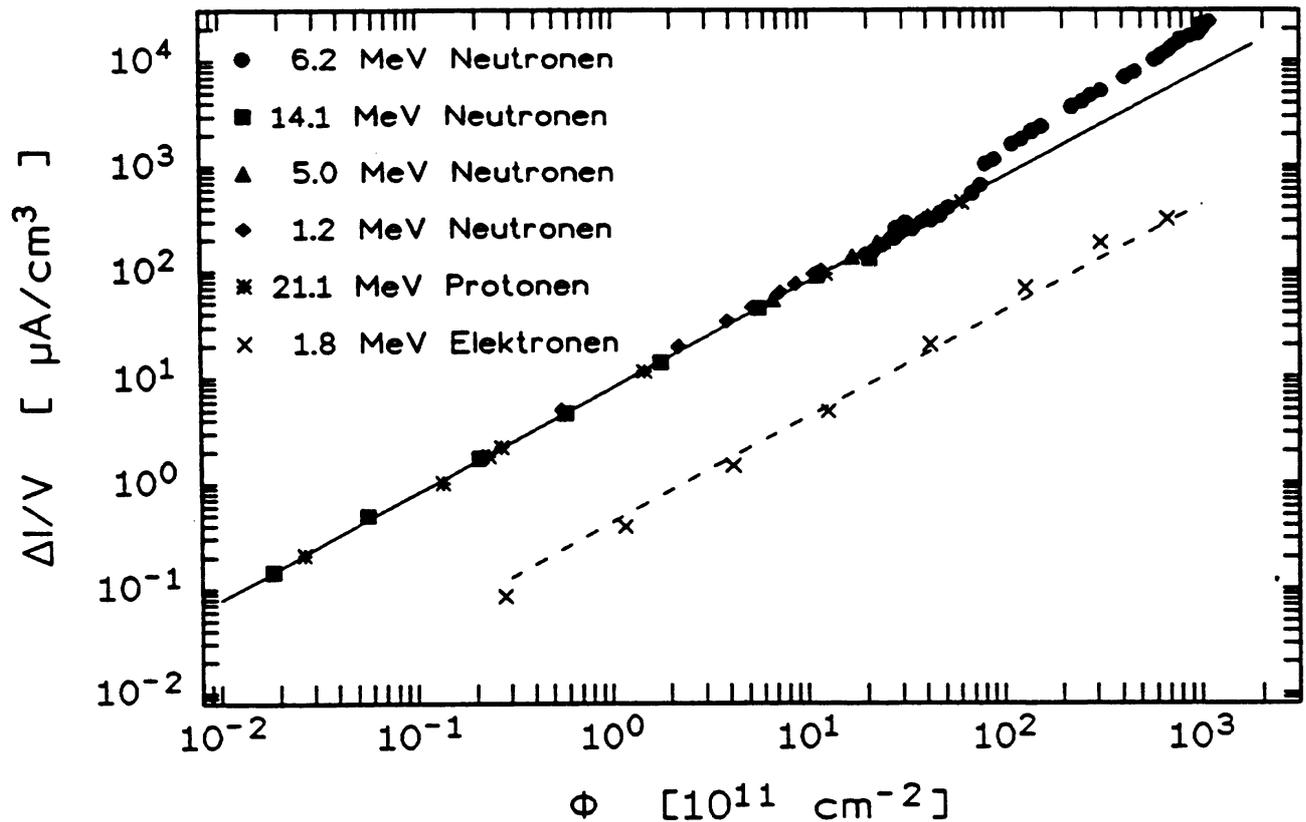


Abbildung 2.5: Anstieg der Volumengenerationstromdichte in Abhängigkeit von der auf  $D(E_{\text{Neutron}} = 1 \text{ MeV})$  normierten Fluenz  $\Phi$  (aus [Wun92]).

Die sichtbare Änderung der Fluenzabhängigkeit des Volumengenerationsstroms bei der Fluenz  $\Phi \approx 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  ist mit der Konvertierung des Leitungstyps korreliert. Bei den Bestrahlungsexperimenten mit Neutronen wurden so hohe Fluenzen erreicht, daß das n-leitende Ausgangsmaterial zur p-Leitung konvertierte.

gezeigt, daß die PKA-Energie die relevante Größe in der Beschreibung der Strahlenschäden ist, und sich Energien der Primärstrahlung in PKA-Energien umrechnen lassen. Die MD-Simulationsrechnungen dieser Arbeit setzen an dem Zeitpunkt an, an dem die Primärstrahlung das erste Rückstoßatom erzeugt hat, und untersuchen bei  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  die unmittelbare Nähe dieser Schwelle.

## 2.4 Schwellenenergie

Die minimale PKA-Energie, die nötig ist, um ein Atom permanent von seinem regulären Gitterplatz zu entfernen und im Kristall an einen Zwischengitterplatz zu transportieren, heißt Schwellenenergie  $E_{\text{min}}$ .

Die erste Abschätzung für  $E_{\min} \approx 4E_S$  als vierfache Sublimationsenergie stammt von Seitz [Sei49]. Da bei Materialien mit kovalenten Bindungen die Sublimationsenergien in der Größenordnung  $\approx 5\text{--}6$  eV liegen, schätzte er die Schwellenenergie als

$$E_d \approx 25 \text{ eV} \quad (2.16)$$

für die meisten Festkörper ab. Eine Verbesserung dieser Näherung konnte mittels MD-Simulationen erreicht werden. Die ersten Rechnungen dieser Art stammen von Gibson, Goland, Milgram und Vineyard [GGMV60] und behandeln metallisches Kupfer. Einen Überblick über Defektbildung in der Nähe und jenseits der Schwelle in Metallen und Halbleitern geben Averback und Díaz de la Rubia [ADdIR97]. In Silizium lag bislang noch keine systematische MD-Studie der Schwellenenergie, insbesondere auch in Abhängigkeit der PKA Stoßrichtung vor.

### 2.4.1 Schwellenfunktionen

Die Wahrscheinlichkeit  $P_d$ , daß ein Atom von seinem Gitterplatz entfernt wird, als Funktion der Rückstoßenergie  $E_{\text{PKA}}$  ist in Abbildung 2.6a dargestellt. Nach [Hol65] ist dies die generelle Form von  $P_d$ , ohne daß ein analytischer Funktionsverlauf angegeben wird. Wegen der Komplexität den Versetzungsprozess als Funktion des Potentials, in dem reguläre Atome sitzen, zu betrachten, wird die Wahrscheinlichkeit  $P_d$  für einen Versetzungsdefekt oft in einer groben Näherung als Stufenfunktion mit der Schwelle  $E_d$  angenommen [vLFL<sup>+</sup>80]. Diese Schwelle ist in Abbildung 2.6a als gestrichelte Linie dargestellt.

Im Teil b derselben Abbildung sind verschiedene phänomenologische Schwellenfunktionen gezeigt. Nach dem Ende der 60er Jahre wurden diese Schwellenverläufe weniger betrachtet. Stattdessen wurde versucht die Anzahl der Einzeldefekte mit der in Abschnitt 2.6 beschriebenen Methode zu berechnen [CB75].

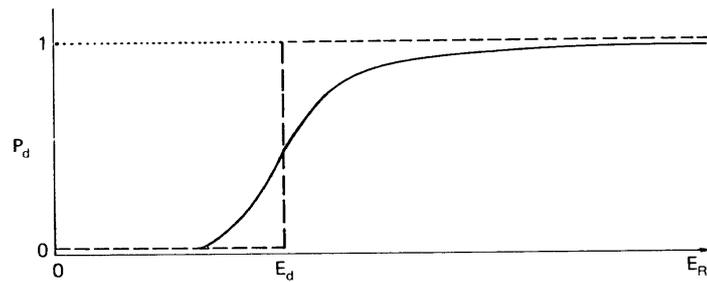
Die in Teil c der Abbildung dargestellte Schwellenfunktion basiert auf dem zentralen Grenzwertsatz und nimmt man an, daß die Schwellenenergie als statistischer Prozeß eine Gauß-Verteilung besitzt mit dem Mittelwert  $E_d$  und der Varianz  $\sigma_{E_d}^2$ . Die resultierende Schwelle

$$\begin{aligned} P_d(E; 0, 1) &= 0.5 \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{E - E_d}{\sigma_{E_d} \sqrt{2}} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\sigma_{E_d} \sqrt{2\pi}} \int_0^E \exp \left[ -\frac{(E_{\text{PKA}} - E_d)^2}{2\sigma_{E_d}^2} \right] dE_{\text{PKA}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

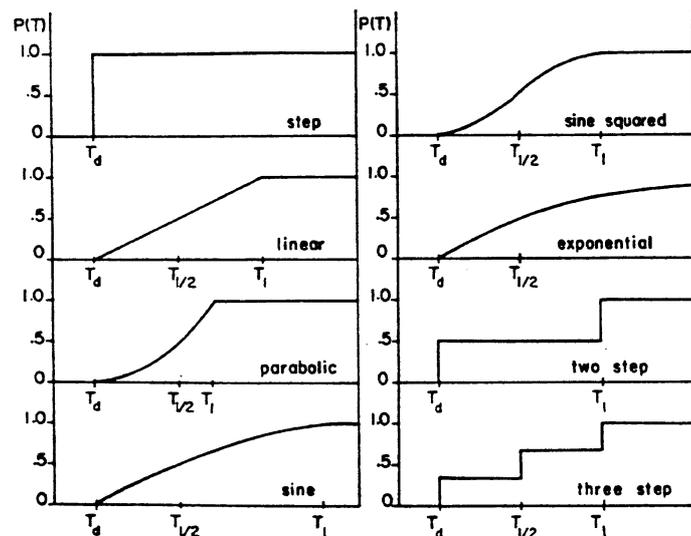
ist das Integral über die Gauß-Funktion.  $P_d(E; 0, 1)$  enthält die Fehlerfunktion  $\operatorname{erf}(a)$ . An der Stelle  $E_d$  hat die Funktion  $P_d(E; 0, 1)$  den Wert  $P_d(E_d; 0, 1) = 1/2$ .

So kann die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Defektes samt Breite  $\sigma_{E_d}$  der Verteilung angegeben werden. In dieser Arbeit werden in Kapitel 6 verschiedene Schwellenenergien durch Anpassung des Funktionsverlaufes nach Gleichung (2.17) an Meßwerte der MD-Simulation gewonnen. Allerdings wird sich zeigen, daß die in Gleichung (2.17) definierte Schwellenfunktion nicht immer eine gute Beschreibung der Schwelle liefert.

a)



b)



c)

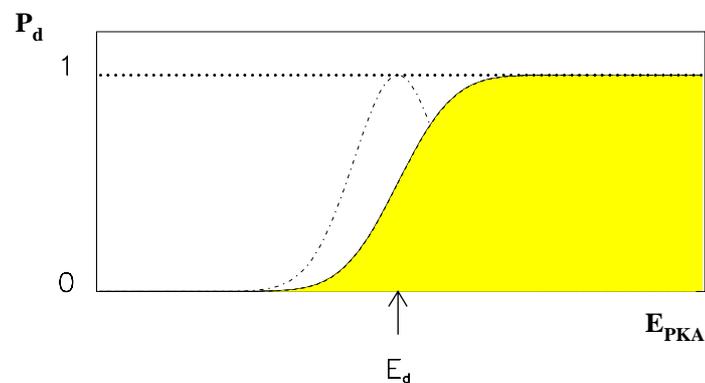


Abbildung 2.6: **a)** Wahrscheinlichkeit  $P_d$  für eine Versetzung in Abhängigkeit von der Rückstoßenergie  $E_R \equiv E_{PKA}$  nach [Hol65].

**b)** Verschiedene Schwellenfunktionen nach [SLB66]. Bei dem Wert  $T_d$  setzt die Schwelle an, das ist in der Notation dieser Arbeit die minimale Energie  $E_{\min}$ , die für Versetzungen benötigt wird. Bei dem Wert  $T_{1/2}$  beträgt die Wahrscheinlichkeit für einen Defekt  $1/2$ .

**c)** In dieser Arbeit benutzte Schwellenfunktion nach Gleichung (2.17). Zusätzlich ist die dazugehörige Gauß-Funktion eingezeichnet.

### 2.4.2 Anisotropie

Der Wert der Schwellenenergie ist in verschiedenen Kristallrichtungen unterschiedlich hoch. Wie in Abbildung 2.7 dargestellt, hängt die benötigte Energie, um ein Atom von seinem regulären Gitterplatz zu entfernen, von der Geometrie der Wechselwirkung ab. Die Richtungen, in die das PKA gestoßen werden kann, unterscheiden sich in der für das PKA benötigten Energie, um seinen Gitterplatz zu verlassen. In der Richtung des Potentialsattelpunktes zwischen zwei Nachbaratomen ist es einfacher als in der Richtung direkt auf ein Nachbaratom.

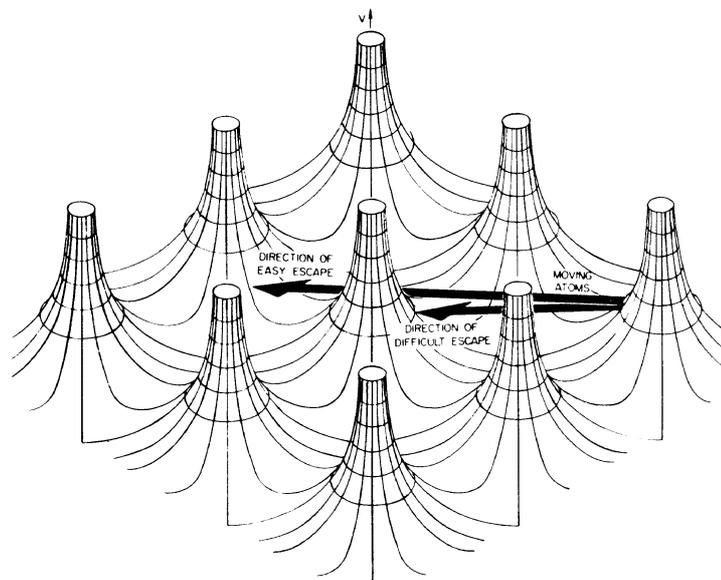


Abbildung 2.7: Flucht eines Gitteratoms aus seinem Potentialtopf [Hol65]

Im zuletzt genannten Fall kann die Stoßfolge so ablaufen, daß das rückgestoßene Atom den Gitterplatz seines Nachbaratoms einnimmt (siehe Abbildung 2.8). Ganze Kollisionsketten, in denen dieser Effekt mehrmals hintereinander auftritt, können die Folge sein. Durch solche Fokussierungseffekte sind die erzeugte Leerstelle und das Zwischengitteratom deutlich weiter voneinander entfernt als in dem nicht fokussierten Fall. Wegen der größeren Packungsdichte in Metallen und dem kleineren Anteil der Mehrkörperkräfte, sind diese Effekte in Metallen weitaus häufiger als in Halbleitern [ADdlR97]. Außerdem ist es nach Abbildung 2.8 für Fokussierungseffekte nicht günstig, daß z.B. in der  $[111]$ -Richtung der interatomare Abstand zwischen den Werten  $0.43a$  und  $1.30a$  alterniert.

Das Verlassen des Gitterplatzes des PKA ist aber nur der Anfang einer Kollisionskaskade. Ob sich ein Defekt bildet, der stabil ist, hängt auch sehr stark von der Möglichkeit zur Rekombination ab, die ebenfalls von der Kristallrichtung abhängt.

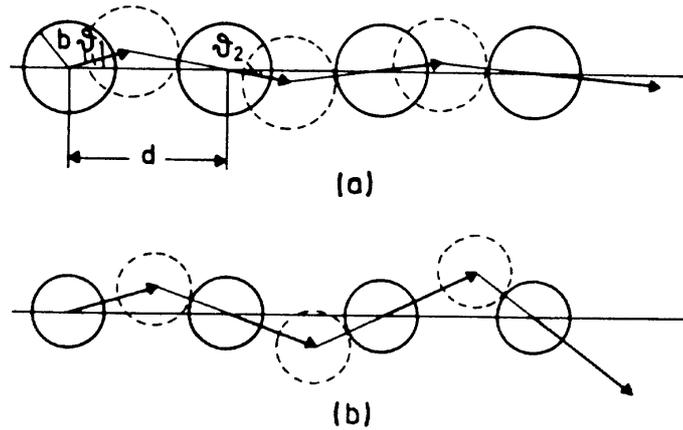


Abbildung 2.8: Fokussierende (a) und defokussierende (b) Stoßfolge im Hartekugelmodell. In beiden Fällen startet die erste Kugel unter dem gleichen Winkel gegenüber der Verbindungsgeraden der Kugelzentren, lediglich der Kugelradius ist in den beiden Reihen unterschiedlich groß (aus [Kop93]).

## 2.5 PKA-Energien jenseits der Schwellenenergie

Eine Kollisionskaskade in kristallinem Silizium, ausgelöst durch ein energiereiches PKA, deponiert die Energie lokal durch Stöße und zu einem Teil durch Ionisation. Ein großer Teil der Stoßenergie und praktisch die gesamte Ionisationsenergie wird dabei in Wärme umgewandelt. Dieses Szenario wurde von Seitz und Kohler [SK56] als “thermal” bzw. “displacement spike” beschrieben. Das Volumen  $V = r_m^3$ , in dem die Wärme deponiert wird, wird bis zum Schmelzpunkt und darüber hinaus erhitzt, je nach Energie des PKA. Wegen der Schmelztemperatur  $T_m \approx 1800$  K ist dazu die Energie  $3k_B T_m \approx 0.5$  eV pro Atom nötig. Diese Wärme fließt nach außen in den Kristall ab. Das geordnete Gitter außerhalb der geschmolzenen Zone mit dem Radius  $r_m$  bewirkt die weitgehende Wiederherstellung der kristallinen Ordnung innerhalb  $r_m$ . Der geordnete Bereich sollte von den Grenzen nach innen wachsen, während die Wärme abfließt. Defekte treten nach [SK56] auf, weil Fluktuationen der Dichte während der frühen Stadien der Kaskade eingefroren werden. Es steht nicht genügend Zeit zur Verfügung, die komplette Ordnung während der Abkühlung wiederherzustellen.

Der erwartete Schaden für (a) niederenergetische, (b) intermediäre und (c) hochenergetische PKA läßt sich nach jeweils spezifischen Defektarten klassifizieren [WDS<sup>+</sup>81] (Abbildung 2.9):

- (a)  $E_d < E < E_l$  Einzeldefekte
- (b)  $E_l < E < E_u$  Einzeldefekte und höchstens ein Defekt-Cluster
- (c)  $E_u < E$  Einzeldefekte und mehrere Defekt-Cluster

Die Energie  $E_l$  ist nicht als scharfe Schwellenenergie zu interpretieren, sondern gibt eine Größenordnung an  $E_l \approx 1\text{--}2$  keV. Der Energiebereich in der Größenordnung  $E_u \approx 12\text{--}20$  keV ist mit der in dieser Arbeit beschriebenen Methode heute nicht erreichbar (Werte nach [WDS<sup>+</sup>81]). Die MD-Simulationen dieser Arbeit sind mit  $E_{\text{PKA}} = 1$  keV in der unmittelbaren Nähe von  $E_l$ , deren

genauer Wert noch nicht bekannt ist.

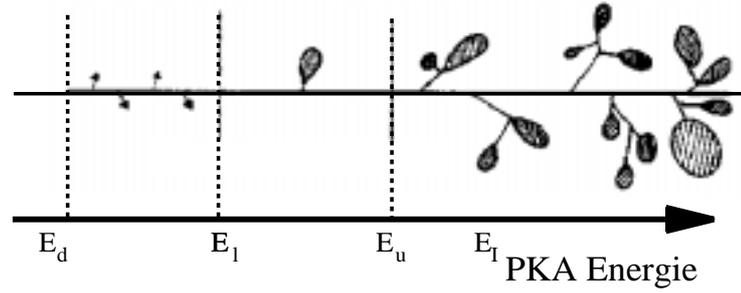


Abbildung 2.9: Erwarteter Schaden nach [WDS<sup>+</sup>81]. Zusätzlich ist die Skalierungsenergie der Lindhard-Theorie  $E_l > E_u$  eingetragen. Die MD-Simulationen dieser Arbeit berechnen die Schwelle  $E_d$  und untersuchen den Schaden in der Nähe von  $E_l$ .

## 2.6 Kinchin-Pease-Gleichung

Die mittlere Anzahl der Einzeldefekte  $n(E_{\text{PKA}})$ , ausgelöst durch ein PKA der Energie  $E_{\text{PKA}}$ , berechnet sich unter der Annahme, daß die erwartete Anzahl der Einzeldefekte gleich der Summe der produzierten Einzeldefekte von dem primären und dem sekundären Rückstoßatom nach dem ersten Zweierstoß sind. Nach dem ersten Zweierstoß haben die Atome die Energien  $E_{\text{PKA}} - E$  bzw.  $E$ . Nach [Hol65] wird diese Annahme von der Integralgleichung

$$n(E_{\text{PKA}}) = \int_0^{E_{\text{PKA}}} n(E_{\text{PKA}} - E)K(E_{\text{PKA}}, E)P_d(E_{\text{PKA}} - E)dE + \int_0^{E_{\text{PKA}}} n(E)K(E_{\text{PKA}}, E)P_d(E)dE \quad (2.18)$$

beschrieben. In dieser Gleichung ist  $K(E_{\text{PKA}}, E)$  der Wirkungsquerschnitt für den Energieübertrag der kinetischen Energie  $E$  auf das gestoßene Atom (von einem bewegten Atom der Energie  $E_{\text{PKA}}$ ). Außerdem ist  $P_d(E)$  die Wahrscheinlichkeit für einen Versetzungsdefekt. Gleichung (2.18) kann unter folgenden vereinfachten Annahmen berechnet werden [Hol65].

1. Für Streuung harter Kugeln mit

$$K(E_{\text{PKA}}, E) = 1/E_{\text{PKA}},$$

was bedeutet, daß alle Energieüberträge gleich wahrscheinlich sind.

2. Scharfe Wahrscheinlichkeit  $P_d$  für einen Einzeldefekt,

$$P_d(E) = \begin{cases} 0 & , \text{für } E < E_d \\ 1 & , \text{für } E \geq E_d \end{cases}.$$

Die Lösung von Gleichung (2.18) ist dann

$$n(E) = \frac{E}{2E_d} \quad \text{für } E \geq E_d. \quad (2.19)$$

Kinchin und Pease [KP55] haben die Gleichung (2.19) zuerst gezeigt. Sie führt zu einem recht einfachen ‘‘Gleichverteilungs’’-Modell der Energie. In der  $n$ -ten Kollisionsstufe sind  $2^n$  Atome von ihrem Gitterplatz entfernt. Die Energie wird solange auf zwei Atome geteilt, bis sie unter  $2E_d$  fällt und dann nicht mehr ausreicht, um versetzte Atome zu produzieren.

Der Formalismus zum Zählen der Defekte, ist nach [Hol65] folglich mit Gleichung (2.18) abgeschlossen und hängt ‘‘nur’’ von der genauen Kenntnis des Wechselwirkungspotentials für elastische Streuung ab.

Unter Verwendung von realistischen interatomaren Potentialen und Berücksichtigung von elektronischen Anregungen modifiziert sich die KP-Gleichung nach [NRT75] zu

$$n(E) = \begin{cases} 0 & , \text{ für } E < E_d \\ 1 & , \text{ für } E_d < E < 2E_d \\ E/(2E_d) & , \text{ für } 2E_d < E < E_I \\ E_I/(2E_d) & , \text{ für } E_I < E < \infty \end{cases} \quad (2.20)$$

wobei  $E_I$  die Art des Energieverlustes unterscheidet. Dieser findet bei PKA-Energien unterhalb von  $E_I$  meistens durch Stöße mit Atomkernen und oberhalb von  $E_I$  hauptsächlich durch elektronische Anregung statt (siehe Gleichung (2.4)).

BC-Simulationen bestätigen nach [ADD1R97] die modifizierte Kinchin-Pease-Gleichung (2.20). Diese Erkenntnis scheint auf den ersten Blick einsichtig, da Gleichung (2.18) auf der BC-Näherung beruht. Darüber hinaus liefern BC-Simulationen die Orte von Leerstellen und Zwischengitteratomen, so daß geprüft werden kann, ob eine Leerstelle (Zwischengitterplatz) mit einem anderen in derselben Kaskade produzierten Zwischengitterplatz (Leerstelle) rekombinieren kann. Der Vergleich von MD-Simulationsrechnungen mit Gleichung (2.20) ist in Abschnitt 7.1.1 im Energiebereich von unterhalb  $E_d$  bis zu  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  durchgeführt.



# Kapitel 3

## MD-Simulation zu Strahlenschäden

### 3.1 Einzelheiten der MD-Rechentechnik

Ein großer Energieübertrag auf das PKA in MD-Simulationen von Kollisionskaskaden erfordert einige Eigenschaften des MD-Programms, die Programme zur Bestimmung von reinen Gleichgewichtseigenschaften nicht benötigen. Andere hier gezeigte Details vereinfachen bzw. beschleunigen die Berechnung des Potentials.

#### 3.1.1 MD-Zeitschritt

Die numerische Lösung der Bewegungsgleichungen (1.1) gelingt mit der Methode der finiten Elemente. Hier werden aus den gegebenen Positionen  $\vec{r}_i(t)$  und Geschwindigkeiten  $\vec{v}_i(t)$  der Atome zum Zeitpunkt  $t$  die Positionen  $\vec{r}_i(t + \delta t)$  und Geschwindigkeiten  $\vec{v}_i(t + \delta t)$  der Atome zu einem späteren Zeitpunkt  $t + \delta t$  mit hinreichender Genauigkeit berechnet. Dabei ist  $\delta t$  der MD-Zeitschritt (ZS).

Verschiedene Algorithmen, die die Methode der finiten Elemente benutzen, sind in [AT87] beschrieben. Ein weit verbreiteter Algorithmus ist der von Verlet [Ver67]. Eine Form des Verlet-Algorithmus', welche die Positionen, Geschwindigkeiten und Beschleunigungen aller Atome zu derselben Zeit  $t$  berechnet und Rundungsfehler minimiert, ist der Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus [SABW82], der in dem MD-Programm dieser Arbeit benutzt wurde und im folgenden beschrieben wird.

Die neuen Atompositionen  $\vec{r}_i(t + \delta t)$  werden in einem Schritt aus  $\vec{r}_i(t)$ ,  $\vec{v}_i(t)$  und  $\vec{a}_i(t)$  nach einer Reihenentwicklung von Taylor berechnet

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\delta t^2 \quad (3.1)$$

$$\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2}\delta t [\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \delta t)]. \quad (3.2)$$

Aus den neuen Atompositionen  $\vec{r}_i(t + \delta t)$  werden die Beschleunigungen  $\vec{a}_i(t + \delta t)$  nach Gleichung (1.1) berechnet. Die Geschwindigkeiten  $\vec{v}_i(t + \delta t)$  werden nach Gleichung (3.2) in zwei Schritten als Mittelwert aus den Beschleunigungen zu den Zeitpunkten  $t$  und  $t + \delta t$  berechnet.

Stillinger und Weber [SW85] haben mit einem konstanten Zeitschritt von  $\delta t = 0.38$  fs gerechnet. Wegen der hohen Geschwindigkeit des PKA zu Anfang der Kaskade, würde ein konstanter Zeitschritt dieser Größenordnung die Energieerhaltung in (3.1) verletzen [ADdlr97]. Deshalb variiert der Zeitschritt  $\delta t$  für die Integration der Bewegungsgleichung in Abhängigkeit vom Stadium der Kollisionskaskade: er ändert sich während der Kaskade nach dem Kriterium, daß das schnellste Atom nicht mehr als  $1/20$  des Abstandes nächster Nachbarn  $r_{nn} = 2.35 \text{ \AA}$  zurücklegt. Simulationen mit einem kleineren  $\delta t$  erzeugen im Rahmen der erforderlichen Rechengenauigkeit identische Trajektorien. Ein typischer Wert zu Beginn der Kaskade ist in der Größenordnung von  $\delta t_0 \approx 10^{-2}$  fs. Dieser wächst während der Simulation auf einen Maximalwert von  $\delta t_{\max} \approx 0.1$  fs an.

### 3.1.2 Thomas-Fermi-Abschirmung

Der Potentialverlauf von SW sollte ursprünglich Silizium beschreiben, das sich im Gleichgewichtszustand befindet. Dort sind interatomare Abstände typisch, die nicht zu sehr von dem Abstand nächster Nachbarn  $r_{nn} = 2.35 \text{ \AA}$  abweichen. Bei der MD-Simulation einer Kollisionskaskade mit einem hohen Energieübertrag auf das PKA wird der interatomare Abstand sehr gering. Bei Abständen, die kleiner als  $r_1 = 1.2 \text{ \AA}$  sind, kann das repulsive Potential für die Wechselwirkung zwischen zwei Atomen als abgeschirmtes Coulomb-Potential

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \cdot \Phi(r/a) \quad (3.3)$$

mit  $Z_1 = Z_2 = 14$  und der Elektronenladung  $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$  C genähert werden [LL79, Band III] [AM76], wobei  $\Phi(x)$  die Thomas-Fermi-Abschirmfunktion,  $r$  der interatomare Abstand und  $a$  die Abschirmlänge ist. Für  $\Phi(x)$  werden für Silizium zwei voneinander abweichende Darstellungen angegeben. In Abbildung 3.1 werden diese mit dem SW-Potential in dem interessanten Bereich kleiner interatomarer Abstände verglichen.

Die erste Darstellung stammt von Ziegler, Biersack und Littmark [ZBL85], heißt ‘‘universale’’-Abschirmfunktion und lautet [Pos94]

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^4 A_i \exp(-B_i x) \quad (3.4)$$

$$\begin{array}{llll} A_1 = 0.1818 & A_2 = 0.5099 & A_3 = 0.2802 & A_4 = 0.02817 \\ B_1 = 3.2 & B_2 = 0.9423 & B_3 = 0.4028 & B_4 = 0.2016 \end{array} ,$$

wobei

$$a = \frac{0.8853 \cdot a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (3.5)$$

die “universale”-Abschirmlänge mit dem Bohrschen Radius  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  ist.

Die zweite Form, die in dieser Arbeit zum Einsatz kommt, stammt von Gärtner und Hehl [GH79], [Gä96] und benutzt die von Lindhard, Scharff und Schiott [LSS63] vorgeschlagene Abschirmlänge

$$a = \frac{0.8853 \cdot a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}. \quad (3.6)$$

Diese Abschirmfunktion liegt nur in tabellarischer Form vor.

Für beide Darstellungen werden auch Polynome dritten Grades angegeben

$$V(r) = (a_0 + a_1 \cdot r + a_2 \cdot r^2 + a_3 \cdot r^3), \quad (3.7)$$

die den Übergang von dem abgeschirmten repulsiven Coulomb-Potential (3.3) bei  $r_1 = 1.21 \text{ \AA}$  bis zu dem SW-Zweikörperpotential  $v_2$  bei  $r_0 = 1.85 \text{ \AA}$  beschreiben und deshalb für die Einbindung in die MD-Simulation sehr gut geeignet sind.

Die Parameter der Polynome lauten [Gä96]

$$\begin{aligned} a_0 &= 399.85 \text{ eV} \\ a_1 &= -578.35 \text{ eV\AA}^{-1} \\ a_2 &= 280.62 \text{ eV\AA}^{-2} \\ a_3 &= -45.861 \text{ eV\AA}^{-3} \end{aligned} \quad (3.8)$$

bzw. [G<sup>+</sup>95]

$$\begin{aligned} a_0 &= 335.06 \text{ eV} \\ a_1 &= -492.39 \text{ eV\AA}^{-1} \\ a_2 &= 244.53 \text{ eV\AA}^{-2} \\ a_3 &= -41.235 \text{ eV\AA}^{-3} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die Gleichgewichtskonfigurationen, also die Geometrie der relaxierten Defekte, werden durch diese Änderung nicht beeinflusst, da für  $v_2 < 0$  das SW-Potential benutzt wird. Der Einfluß auf Resultate der Kollisionskaskaden wird in Abschnitt 5.3 beschrieben.

Testsimulationen zeigen, daß bei PKA-Energien unter 100 eV der minimale interatomare Abstand von  $r_1 = 1.2 \text{ \AA}$  gerade erreicht, aber nicht unterschritten wird. Bei diesen Energien ist eine Änderung des SW-Potentials gar nicht nötig.

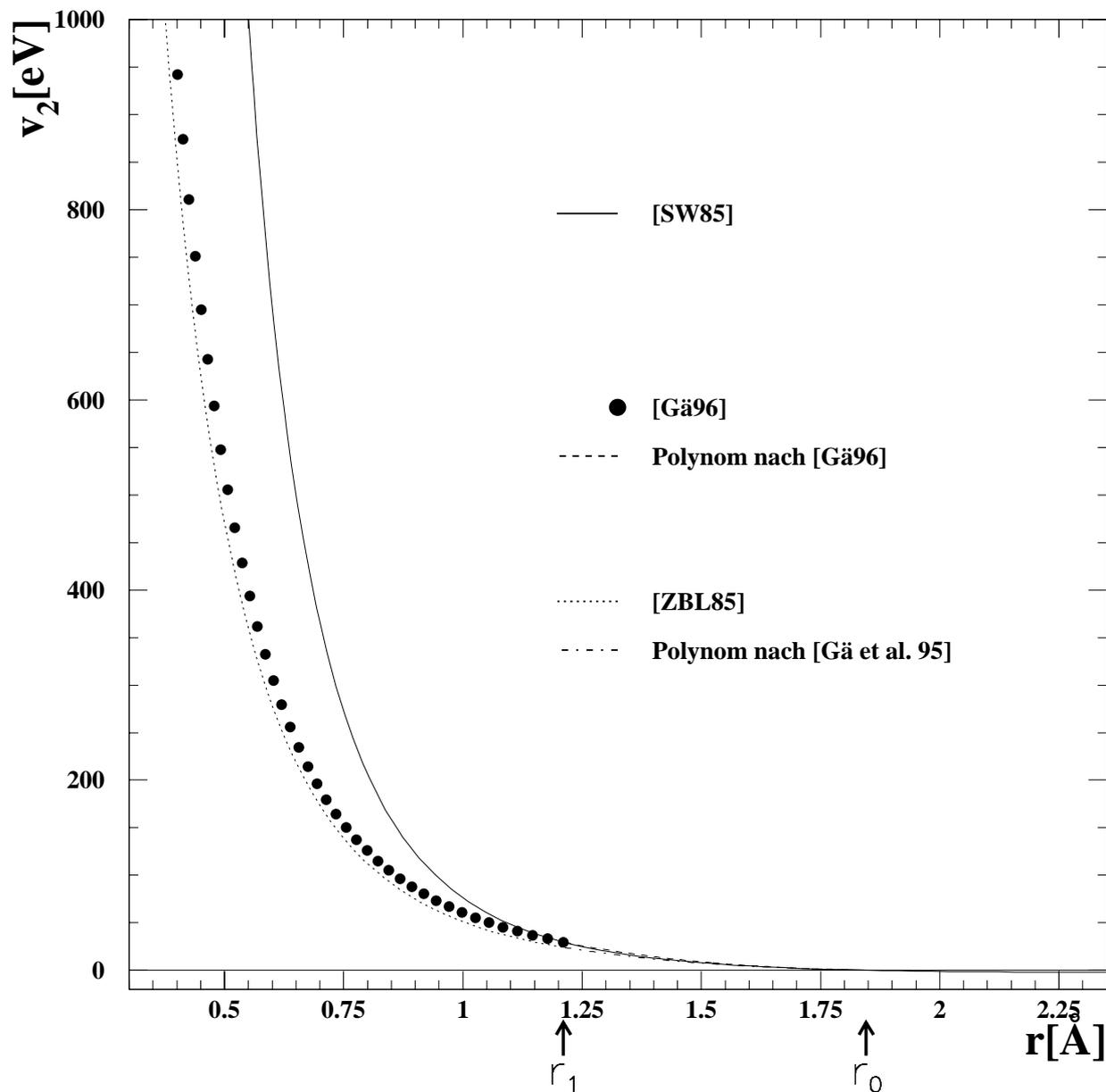


Abbildung 3.1: Abgeschirmtes Coulomb-Potential (3.3) berechnet aus der Thomas-Fermi Abschirmfunktion gegen den interatomaren Abstand. Zum Vergleich dazu das SW-Potential  $v_2$  (1.7).

### 3.1.3 Potential in Tabellenform zur höheren Programmeffizienz

Für komplizierte Potentialfunktionen kann es vorteilhaft sein die direkte Berechnung des Potentials und der Kräfte durch die Benutzung vorbereiteter Tabellen zu umgehen [Rap95]. Die Tabelle wird einmal beim Start der Simulation angelegt. Der Potentialwert bei einem interatomaren Abstand  $r_{ij}$  wird aus den Tabellenwerten interpoliert. Dazu stehen eine Vielzahl von Interpolationsalgorithmen zur Verfügung [AT87]. In dieser Arbeit wird die Vorwärtsdifferenzmethode von Newton und Gregory angewandt [Boo72].

Bei der Berechnung des SW-Potentials ist der Zugriff auf die Tabelle mit einer geeignet großen Zahl an Stützstellen um einen Faktor  $\approx 30$  schneller als die explizite Berechnung unter Benutzung der Exponential-Funktion, ohne daß Verluste an numerischer Genauigkeit auftreten.

### 3.1.4 Nachbarschaftslisten

Wenn die Systemgröße  $N \approx 1000$  Atome in der SZ erreicht, wird die Zellindexmethode der konventionellen Nachbarschaftsliste überlegen [AT87] [Rap95].

Die kubische SZ mit dem Volumen  $L^3$  wird in ein reguläres Gitter von  $M \times M \times M$  Zellen zerlegt, wobei die Grundseite  $l = L/M$  dieser Zellen größer ist als der Radius  $r_c$  der Potentialfunktion. Bei gleichmäßig verteilten Atomen sind  $N_c = N/M^3$  Atome in einer Zelle.

Um alle Wechselwirkungen zu berechnen, müssen für  $N$  Atome  $\frac{1}{2} \times N \times N_c$  Wechselwirkungen in einer Zelle und alle weiteren in den 26 Nachbarzellen (in drei Dimensionen) berechnet werden. Das sind mit dieser Zellstruktur  $(27/2) \times N \times N_c$  Wechselwirkungen an Stelle von  $\frac{1}{2}N(N-1)$  für den Ansatz ohne Zellindexmethode. Der Faktor  $1/2$  folgt aus der Symmetrie der Potentialfunktionen  $v_{ij} = v_{ji}$ .

### 3.1.5 Energieintervallselektion

Eine weitere Reduzierung der CPU-Zeit wäre nach [MRJ<sup>+</sup>95] mit dem dort beschriebenen Algorithmus zur Energieintervallselektion um einen Faktor 3.5 bis 4.8 je nach SZ-Größe möglich gewesen. Der Algorithmus sortiert alle Atome der SZ in bestimmte Energieintervalle und löst die Bewegungsgleichung für Atome eines bestimmten Energieintervalls erst nach einer bestimmten Anzahl von Zeitschritten, die durch das Verhältnis der oberen Energie des Intervalls und der maximalen Energie der SZ festgelegt ist. Das Problem der Wechselwirkung zwischen hoch- und niederenergetischen Atomen wird durch Beachtung folgender zwei Punkte gelöst. Erstens, wenn Atome eines Energieintervalls integriert werden, so werden die nächsten Nachbarn mit integriert, und zweitens, wenn ein Atom zu einem Zeitschritt nicht integriert wird, so wird seine Position stattdessen durch Taylor-Entwicklung vorhergesagt.

Durch Anwendung der Energieintervallselektion erhält man nach geeigneter Wahl der Energieintervalle im Rahmen der erforderlichen Rechengenauigkeit identische Trajektorien [MRJ<sup>+</sup>95]. Eine

Anwendung in dieser Arbeit wäre nur mit umfangreichem Programmieraufwand möglich gewesen. Da die Dauer einer Implementierung nicht übersehbar war, wurde auf eine Anwendung verzichtet.

## 3.2 Initialisierung

### 3.2.1 Superzelle vor dem Stoß

Die Temperatur während der Simulationsrechnung einer Kaskade setzt sich aus der Temperatur der SZ vor dem Stoß und der fast vollständig in Form von Wärme umgesetzten Energie des PKA zusammen. Systematische Fehler der MD-Simulation werden weitgehend vermieden, wenn die SZ nach der Kaskade eine Temperatur von  $T \lesssim 800$  K nicht überschreitet. Da die SZ nicht auf sinnvolle Weise gekühlt werden kann (siehe Abschnitt B), wird die SZ vor dem Stoß so gering wie möglich gehalten. Die Atome werden zunächst auf ideale Kristallpositionen gesetzt. Ihre Geschwindigkeiten werden aus Zufallszahlen nach der Maxwell-Verteilung bei einer sehr niedrigen Temperatur von

$$T_{\text{SZ vor dem Stoß}} = 10 \text{ K} \quad (3.10)$$

gewonnen. Die Bewegungsgleichungen (1.1) werden dann für einen langen Zeitraum gelöst (70000 ZS). Das Erreichen des thermischen Gleichgewichts wurde durch Beobachtung des zeitlichen Verhaltens des Geschwindigkeitsspektrums der bewegten Atome kontrolliert. Ein stationäres Geschwindigkeitsspektrum ist nach weniger als 2000 ZS erreicht. Dann wird einem Atom ein energetischer Rückstoß übertragen.

### 3.2.2 Energieübertrag auf das PKA

Abbildung 3.2a zeigt einen Ausschnitt aus der SZ. Inäquivalente Atome unterscheiden sich durch ihre Helligkeit. Der Energieübertrag auf ein als PKA ausgewähltes Atom ist schematisch durch einen Pfeil angezeigt. Zu dem geringen thermischen Impuls des PKA vor dem Stoß wird der Stoßübertrag addiert. Zur besseren Beobachtung der Atome wird ein Initialsystem gewählt, das sich mit dem  $N$ -ten Teil des Impulsübertrags bewegt. In diesem System schwingen alle Atome nach der Thermalisierung des PKA um ihre Ruhelagen.

Der betrachtete kleinste repräsentative Raumwinkel  $\Omega = 2 \cdot \Omega' = 2 \cdot 4\pi / (6 \cdot 8)$  wird durch die drei Kristallrichtungen [100], [110] und [111] und zwei inäquivalente Atome dargestellt. Dabei wurde  $\Omega'$  in zehn approximativ gleich große Einheitsraumwinkel geteilt, welche die Richtung des Impulsübertrags auf das PKA festgelegt haben (siehe Abbildung 3.2b). In der tabellarischen Darstellung von  $\Omega'$  in Teil c finden sich die Werte sämtlicher Winkel zur Beschreibung der PKA-Richtung. Der Azimutwinkel  $\phi$  gibt, wie in Zylinderkoordinaten, den Winkel zur  $\vec{x}$ -Achse an, der Polarwinkel  $\Theta$  den Winkel zur  $\vec{z}$ -Achse. Mit diesen beiden Winkeln ist die Richtung eindeutig beschrieben. Der Winkel  $\phi_{[100]}$  ist eine weitere mögliche Darstellung, die im Gegensatz zum Azimutwinkel keine Projektion in die x-y-Ebene, sondern der direkte Winkel zur x-Achse ist.

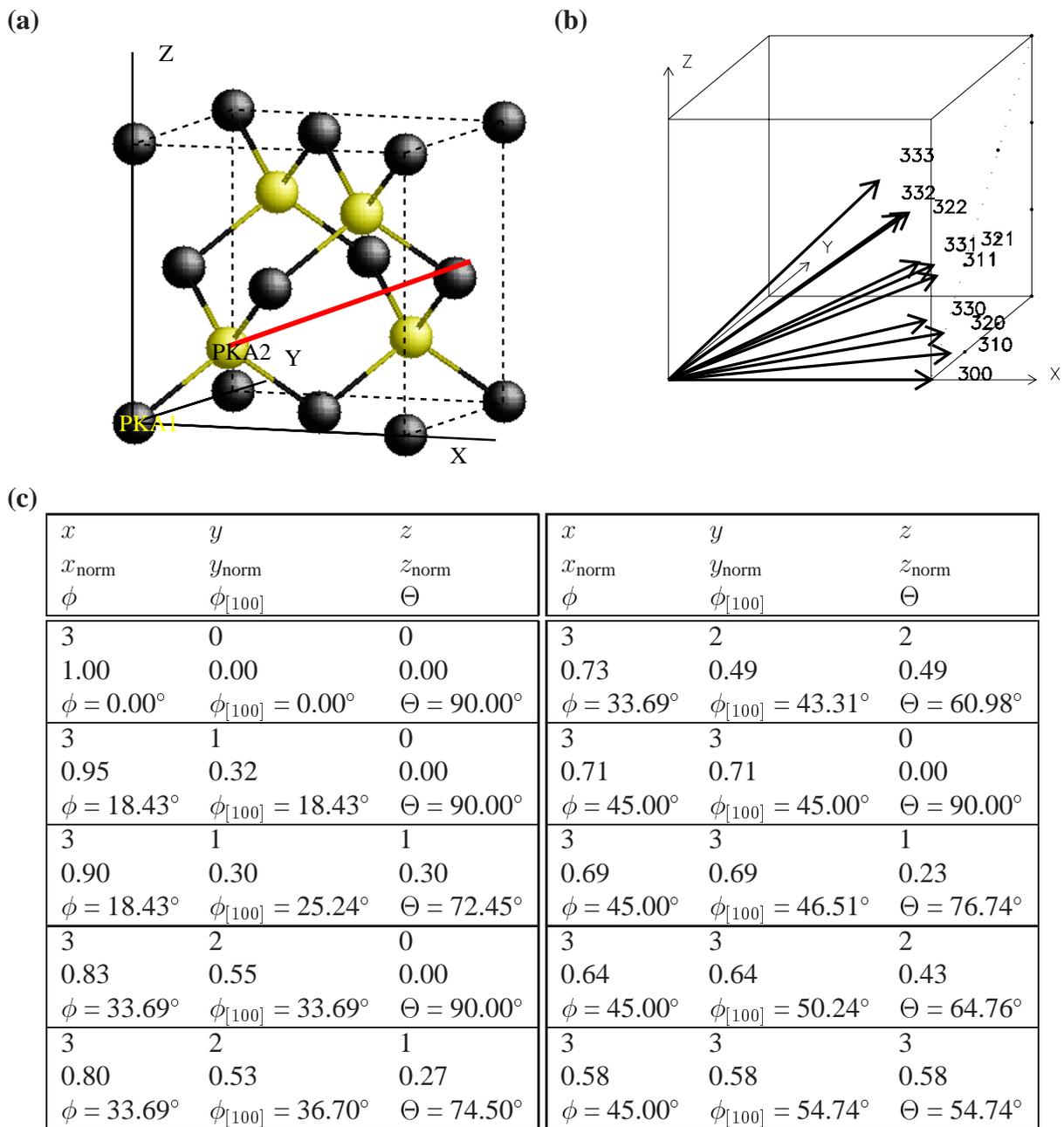


Abbildung 3.2: (a) Einheitszelle mit 8 Atomen. Eingezeichnet ist eine [321]-Richtung eines PKA. (b) Die zehn verschiedenen Richtungen des Raumwinkels  $\Omega'$ . (c) Darstellung des Raumwinkels  $\Omega'$  in tabellarischer Form.

Die Verlängerungen der [300]-, [330]- und der [333]-Richtung bis zum Rand des gezeichneten Würfels spannen einen regelmäßigen Tetraeder auf, der 1/6 des Volumens des Würfels einnimmt. Die [310]-, [320]-, [311]-, [331]-, [322]- und [332]-Richtung liegen auf den Außenflächen dieses Tetraeders. Die [321]-Richtung ist eine allgemeine Richtung und liegt im Inneren. Den gesamten Raumwinkel kann man auch durch ein PKA und 18 Richtungen darstellen. Dann kommen zu den 10 beschriebenen noch 8 mit einem Minuszeichen über dem Index versehenen Richtungen hinzu. Die folgenden beiden Richtungen sind für ein PKA äquivalent:

$$\begin{aligned} [300] &\equiv [\overline{300}] \\ [330] &\equiv [\overline{330}] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Im Gegensatz dazu ist die [333]-Richtung für die beiden inäquivalenten Atome nicht äquivalent:

$$[333] \neq [\overline{333}]. \quad (3.12)$$

In einem Fall ist die Richtung *geschlossen*, d.h. mit einem Targetatom besetzt, in dem anderen Fall *offen*.

Nach [Har88] liefert solch eine feste Auswahl an ungefähr gleich großen Einheitsraumwinkeln eine bessere statistische Genauigkeit zur Bestimmung der Anisotropie als in zufällig verteilte Richtungen innerhalb von  $\Omega'$  zu schießen.

Besonders ausgezeichnete Richtungen in diesem Kristall sind die [300]-, [330]- und die [333]-Richtung. Diese haben ein Targetatom direkt in der Schußrichtung. In der [300]-Richtung wird vor dem direkten Stoß der längste Weg zurückgelegt. In der [330]-Richtung sind die Bindungskräfte entlang der [110]-Ketten besonders stark. Das sieht man deutlich in dem von Weber [Web77] gefundenen Bond-Charge-Modell, das Phononen in Silizium beschreibt.

Der Mittelwert  $f_D$  einer Meßgröße  $f_a([hkl])$  der einzelnen Kristallrichtungen  $[hkl]$  wird durch das gewichtete Mittel

$$\begin{aligned} f_D = 1/1008 &\left[ 17(f_a([300]) + f_a([\overline{300}])) \right. \\ &+ 64(f_a([310]) + f_a([\overline{310}])) \\ &+ 60(f_a([311]) + f_a([\overline{311}])) \\ &+ 60(f_a([320]) + f_a([\overline{320}])) \\ &+ 112(f_a([321]) + f_a([\overline{321}])) \\ &+ 52(f_a([322]) + f_a([\overline{322}])) \\ &+ 28(f_a([330]) + f_a([\overline{330}])) \\ &+ 52(f_a([331]) + f_a([\overline{331}])) \\ &+ 48(f_a([332]) + f_a([\overline{332}])) \\ &\left. + 11(f_a([333]) + f_a([\overline{333}])) \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

über den gesamten Kristall bestimmt (siehe Anhang A).

### 3.2.3 Implementierung der Lindhard-Theorie in MD-Simulationen

Bei Simulationen mit empirischen MD-Potentialen wird die elektronische Anregung  $Q$  nicht berechnet. Die gesamte Energie  $E_{\text{MD}}$ , die in der MD-Simulation auf ein PKA übertragen wird, ist nach Gleichung (2.1) mit der NIEL-Energie

$$E_{\text{NIEL}} \equiv E_{\text{MD}} \quad (3.14)$$

identisch. Um ein PKA der Energie  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  zu beschreiben, ist nach Gleichung (2.8) ein Energieübertrag von

$$E_{\text{MD}} = 786.6 \text{ eV} \quad (3.15)$$

nötig. MD-Simulationen ohne Implementierung der Lindhard-Theorie beinhalten bei der Berechnung der Schwellenenergie  $E_d$  eine systematische Unterschätzung von 10–15 %, da der Energieverlust durch die elektronischen Anregungen vollständig außer Acht gelassen wird.

## 3.3 Bestimmung der deponierten Energie

Nach 75000 Zeitschritten (ZS) hat die Thermalisierung des PKA und die Relaxation eventuell vorhandener Defekte stattgefunden. Die Atombewegungen sind Vibrationen um ihre Gleichgewichtspositionen. Die Anzahl der ZS ist groß genug, um systematische Fehler der Simulation durch eine zu kurze Simulationsdauer klein zu halten (siehe Abschnitt 5.4).

An dieser Stelle beginnt die Analyse des Ergebnisses der Kollisions-Kaskade. Der erste wichtige Parameter ist die deponierte Energie

$$E_{\text{dep}} = E_{\text{pot}} - E_{\text{pot}, 0}, \quad (3.16)$$

die sich aus der Differenz der potentiellen Energie der SZ ( $E_{\text{pot}}$ , gemessen in jedem Zeitschritt) und des Mittelwerts der potentiellen Energie

$$E_{\text{pot}, 0}(T) = E_{\text{pot}, 0}(T = 0 \text{ K}) + \frac{3}{2} k_B T \quad (3.17)$$

des idealen Kristalls bei einer bestimmten Temperatur  $T$  berechnet.

Die thermischen Bewegungen der Atome verhindern eine genauere Bestimmung der potentiellen Energie (jedes Atoms). Deshalb wird die SZ durch Entzug von kinetischer Energie abgekühlt. Dies geschieht, indem die Geschwindigkeiten  $\vec{v}_i$  aller  $N$  Atome der SZ in 20000 Zeitschritten von  $ZS = 75000$  bis  $ZS = 95000$  in jedem Zeitschritt nach [Gei96] mit dem Faktor

$$F(\text{ZS}) = \sqrt{\left[ \frac{T_{75000}}{T_{\text{SZ}}(\text{ZS})} + \frac{T_{\text{Soll}} - T_{75000}}{T_{\text{SZ}}(\text{ZS})} \cdot \frac{\text{ZS} - 75000}{95000 - 75000} - 1 \right] \cdot 0.1 + 1} \quad (3.18)$$

skaliert werden. Nach der Skalierung hat die kinetische Energie so weit abgenommen, daß die Temperatur der SZ auf  $T_{\text{Soll}} = 1 \text{ K}$  gefallen ist (siehe Abbildung 3.3).

In dieser Gleichung (3.18) bedeuten 75000 bzw. 95000 den Anfang bzw. das Ende der Skalierung. Dann ist  $T_{75000}$  die Temperatur, die die SZ zu diesem Zeitschritt hat.  $T_{75000}$  ist in Gleichung (3.18) im Sinne der Skalierung eine Konstante.  $T_{\text{Soll}}$  war bei allen Simulationsrechnungen  $T_{\text{Soll}} = 1$  K. Die Größe der Skalierung richtet sich nach der aktuellen Temperatur  $T_{\text{SZ}}(\text{ZS})$  der SZ.

(a)  $E_{\text{PKA}} = 60$  eV,  $N=1728$ ,  $\Delta T_{\text{SW orig.}} \approx 15$  K

(b)  $E_{\text{PKA}} = 1$  keV,  $N=13824$

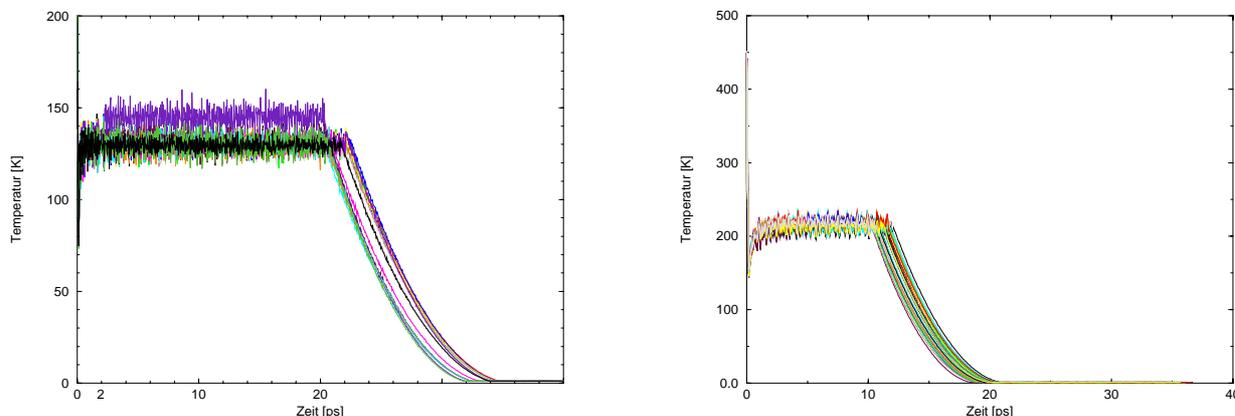


Abbildung 3.3: Temperatur der SZ aufgetragen gegen die Zeit. Nach Thermalisierung des PKA und Relaxation des Defektes werden die Geschwindigkeiten aller Atome zur Messung von  $\Delta E_{\text{pot}}$  skaliert.

Es wurde darauf geachtet, daß die Skalierung langsam genug erfolgte, um nicht thermisch ausgelegte Atome einzufrieren. Die hier benutzte Rate ist  $10^{12}$  K/s.

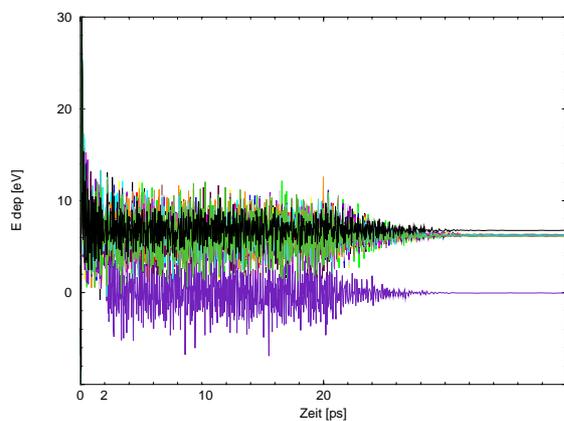
Die Bewegungsgleichungen (1.1) werden weiter 5000 ZS ohne Skalierung gelöst. Die deponierte Energie wird als Mittelwert der letzten 2000 ZS nach Gleichung (3.16) mit einer Genauigkeit von 0.01 eV bestimmt.

Es ist ein Schaden entstanden, wenn die deponierte Energie  $E_{\text{dep}}$  nicht den Wert Null annimmt. Das ist in Abbildung 3.4 dargestellt, wobei einige Kaskaden in Teil a vollständig ausgeheilt sind. Der Energieunterschied beträgt  $\Delta E_{\text{pot,SW orig.}} = 6.25 \pm 0.01$  eV bzw.  $\Delta E_{\text{pot,SW orig.}} = 7.00 \pm 0.01$  eV. Diese Werte werden nach (1.13) mit 1.07 multipliziert:  $\Delta E_{\text{pot,SW skal.}} = 6.69 \pm 0.01$  eV bzw.  $\Delta E_{\text{pot,SW skal.}} = 7.49 \pm 0.01$  eV. Sowohl kinetische als auch potentielle Energie streuen bei einer bestimmten Temperatur um ihre Mittelwerte. An dieser Abbildung wird graphisch deutlich, warum der SZ die kinetische Energie entzogen werden muß, um ein Maß für den Schaden genau zu bestimmen.

(a)  $E_{\text{PKA}} = 60 \text{ eV}$ ,  $N=1728$

$$\Delta E_{\text{pot,SW orig.}} = 6.25 \pm 0.01 \text{ eV bzw.}$$

$$\Delta E_{\text{pot,SW orig.}} = 6.99 \pm 0.01 \text{ eV}$$



(b)  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$ ,  $N=13824$

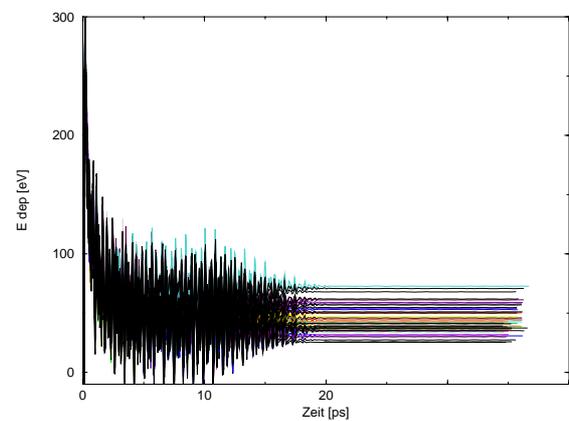


Abbildung 3.4: Deponierte Energie  $E_{\text{dep}}$  aufgetragen gegen die Zeit. Nach Thermalisierung des PKA und Relaxation des Defektes werden die Geschwindigkeiten aller Atome der SZ zur Messung von  $\Delta E_{\text{dep}}$  skaliert.

## 3.4 Defektselektion nach Kenngrößen

### 3.4.1 Selektionsalgorithmus

Nach der Bestimmung der deponierten Energie  $E_{dep}$  wird der Schaden in der SZ in vier Schritten weiter untersucht.

- (a) Bestimmung der Atome, die nicht auf ihrem regulären Gitterplatz sind.
- (b) Bestimmung der Atome, die den Gitterplatz eines anderen Atoms eingenommen haben (Platzwechsel).
- (c) Bestimmung der Atome, die zu einem Defekt gehören.
- (d) Anschließend werden einige Kenngrößen des Defektes bestimmt.

In diesem Abschnitt wird der Algorithmus beschrieben, der die vier Schritte ausführt.

(a) Zunächst werden die  $(N - n_{\text{Gitter}})$  Atome bestimmt, die nicht mehr ihren regulären Gitterplatz besetzen. Die aktuelle Position aller  $i = 1, \dots, N$  Atome der SZ nach 100000 ZS ist bekannt und der Abstand  $|\vec{r}_{i,100000} - \vec{r}_{i,0}|$  zu der Gitterposition zum Zeitpunkt  $t_0$  (vor dem Rückstoß des PKA) wird berechnet. Sollte dieser Abstand größer sein als

$$|\vec{r}_{i,100000} - \vec{r}_{i,0}| > \Delta r_{\text{Gitter}} \quad (3.19)$$

mit der maximalen Auslenkung

$$\Delta r_{\text{Gitter}} = 1.075 \text{ \AA}, \quad (3.20)$$

so ist das Atom  $i$  nicht auf seinem Gitterplatz. Der Wert für  $\Delta r_{\text{Gitter}}$  ist in einigen Testsimulationen variiert worden. Dabei hat sich der Wert von  $1.075 \text{ \AA}$  als optimal für die Defektanalyse erwiesen. Er ist etwas kleiner als die Hälfte des Abstandes nächster Nachbarn im ungestörten Kristall. Nun sind damit auch alle regulär besetzten Gitterplätze bestimmt.

(b) Von den  $(N - n_{\text{Gitter}})$  Atomen wird der Abstand  $|\vec{r}_{i,100000} - \vec{r}_{j,0}|$  eines Atoms  $i$  zu den regulären (unbesetzten) Gitterplätzen  $j \neq i$  berechnet und mit der maximalen Auslenkung nach (3.20) verglichen. Ist der Abstand kleiner, so hat dieses Atom  $i$  den regulären Platz eines anderen Atoms  $j$  eingenommen. Diese Platzwechselatome werden genauso behandelt wie ein Atom, das auf einem regulären Gitterplatz geblieben ist. Bei der Suche nach Kristallschäden werden alle diese Atome ignoriert.

(c) Alle “versetzten” Atome sind jetzt bekannt. Nun ist es wichtig zu wissen, welche versetzten Atome zu einem Defekt gehören. Als Kriterium, ob ein Atom zu einem Defekt gehört, wird nach [Rap95] rekursiv der minimale interatomare Abstand  $\min_{i=1,n} |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$  eines Atoms  $j$  zu allen Atomen  $i = 1, \dots, n$  eines Defekts gemessen. Atom  $j$  gehört nur dann zu demselben Cluster, wenn  $\min_{i=1,n} |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$  kleiner ist als ein Schwellenabstand  $r_d$ . Es wurden verschiedene Schwellenabstände getestet. Wenn  $r_d$  zu klein ist, so zerfallen zusammenhängende Defekte in Einzeldefekte. Ist  $r_d$

dagegen zu groß, so werden eng beieinander liegende Defekte nicht mehr getrennt, sondern wegen ihrer Verzerrungsfelder miteinander verbunden. Es hat sich der Wert

$$r_d = 3.0 \text{ \AA} \quad (3.21)$$

als sinnvoll erwiesen, der zwischen dem Abstand nächster bzw. übernächster Nachbarn im idealen Kristall ist ( $r_{nn} < r_d < r_{2nn}$ ).

(d) Die wichtigsten Kenngrößen zur Unterscheidung verschiedener Defekte sind die folgenden:

$n_{\text{Def}}$ : Die Anzahl  $n_{\text{Def}}$  der Atome in einem Defekt. So besteht die Leerstelle typischerweise aus  $n_{\text{Def}} = 4$  Atomen, der Zwischengitterplatz aus  $n_{\text{Def}} = 6$  bis 9 Atomen, der Doppelzwischengitterplatz aus  $n_{\text{Def}} = 7$  bzw. 15 Atomen und die Doppelleerstelle aus  $n_{\text{Def}} = 18$ . Der größte in den Simulationen dieser Arbeit aufgetretene Defekt bestand aus  $n_{\text{Def}} = 117$  Atomen. Die Anzahl der Atome im Defekt ist die erste wichtige Größe zur Unterscheidung verschiedener Defekte.

$r_{\text{Gy}}$ : Der ‘‘Gyrationsradius’’

$$r_{\text{Gy}} = \frac{1}{n_{\text{Def}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{Def}}} |\vec{r}_i - \langle \vec{r} \rangle| \quad (3.22)$$

des Defekts ist der mittlere Abstand aller  $n_{\text{Def}}$  Atome vom Massenschwerpunkt  $\langle \vec{r} \rangle$ . Dieser hat typischerweise bei der Leerstelle einen Wert von  $r_{\text{Gy}} = 1.8 \text{ \AA}$ , bei dem Zwischengitterplatz von  $r_{\text{Gy}} = 2.7\text{--}3.0 \text{ \AA}$ , bei Doppelleerstelle und Doppelzwischengitterplatz von  $r_{\text{Gy}} = 3.3 \text{ \AA}$ . Der größte in den MD-Simulationen aufgetretene Gyrationsradius bei einem Defekt-Cluster hatte den Wert  $r_{\text{Gy}} = 15.4 \text{ \AA}$ .

$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$ : Das zweite Moment

$$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2} = \sqrt{\frac{1}{n_{\text{Def}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{Def}}} |\vec{r}_i - \langle \vec{r} \rangle|^2} \quad (3.23)$$

des Gyrationsradius  $r_{\text{Gy}}$  ist die Quadratwurzel des mittleren quadratischen Abstands aller  $n_{\text{Def}}$  Atome vom Massenschwerpunkt  $\langle \vec{r} \rangle$ . Diese Kenngröße erlaubt es z.B. die Doppelleerstelle und den Doppelzwischengitterplatz mit  $n_{\text{Def}} = 14$  voneinander zu trennen. Beide Defekte haben einen Gyrationsradius  $r_{\text{Gy}} = 3.2 \text{ \AA}$ . Aber  $\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$  hat in dem Fall der Doppelleerstelle den Wert  $\sqrt{r_{\text{Gy}}^2} = 8.2 \text{ \AA}$  und in dem Fall des Doppelzwischengitterplatzes den Wert  $\sqrt{r_{\text{Gy}}^2} = 8.3 \text{ \AA}$ .

Die Bilder der Defekte werden mit dem Program RasMol [SB92] zur realistischen Darstellung von molekularen Strukturen produziert und die Farben der Atome repräsentieren ihre potentielle Energie (Abbildung 3.5 a,b). Dort sind sowohl die Defektatome als große Kugeln zu sehen als auch die Umgebungsatome als kleine Kugeln, deren Kristallposition sich nur unwesentlich geändert hat. Bei diesen Umgebungsatomen ist die potentielle Energie mehr als 0.01 eV von der idealen Energie verschieden. Defekte mit gleichen Kenngrößen werden graphisch untersucht und nach Art des Defektes benannt. Insgesamt wurden  $\approx 4000$  Defekte erzeugt, 90 % konnten identifiziert werden. Kein Defekt wurde falsch identifiziert, da alle gefundenen Defekte graphisch überprüft wurden.

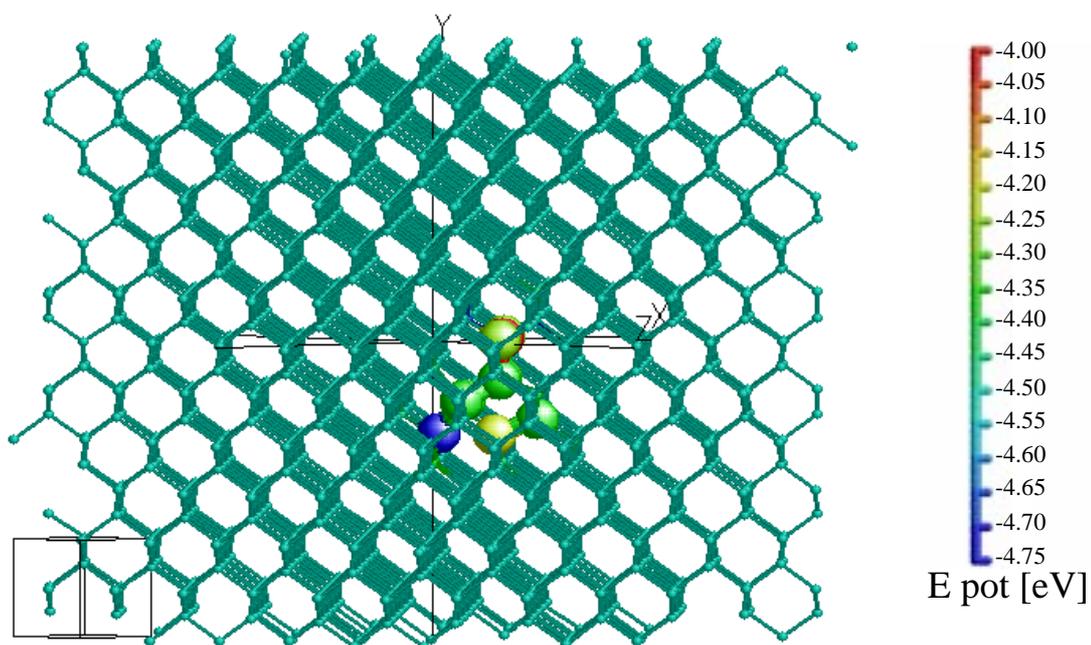


Abbildung 3.5: a) Die gesamte Superzelle einschließlich des hinter den anderen Atomen versteckten Defekts.

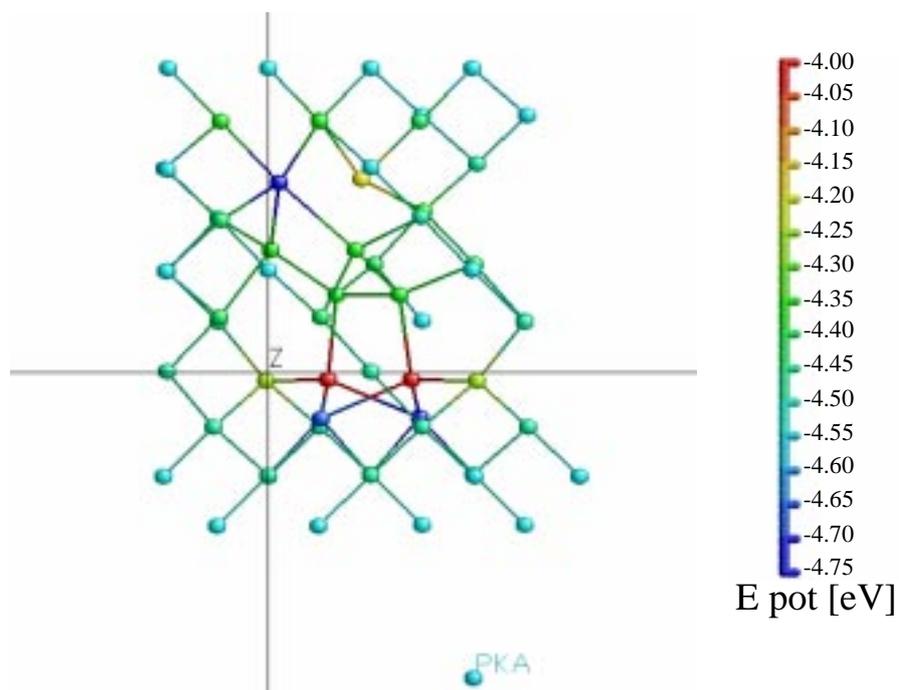


Abbildung 3.5: b) Beschränkung auf interessante Atome (siehe Text). Der Defekt ist umgeben von 36 Atomen, die in ihrer potentiellen Energie und Position nur leicht gestört sind.

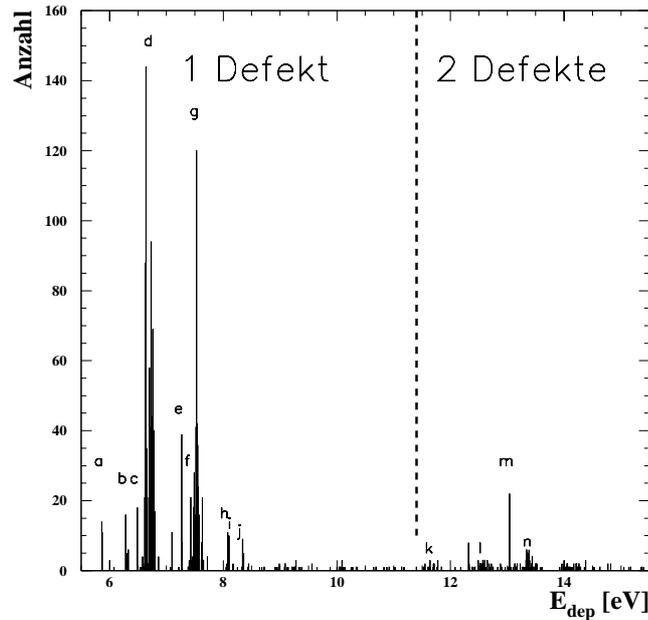


Abbildung 3.6: Histogramm der deponierten Energie und Anzahl Defektpaare. Die gestrichelte Linie ist in Gleichung (3.24) motiviert.

### 3.4.2 Die deponierte Energie als Kenngröße

Der Wert der deponierten Energie  $E_{\text{dep}}$  variiert bei verschiedenen Simulationsläufen selbst bei festgehaltener PKA-Energie  $E_{\text{PKA}}$  und PKA-Richtung, sowohl wenn verschiedene (äquivalente) Atome als PKA benutzt werden als auch wenn dasselbe Atom als PKA zu einer anderen Zeit gestoßen wird. Das ist ein statistischer Effekt, der aus der von Null verschiedenen Temperatur der SZ vor dem Stoß resultiert.

Um einen ersten Überblick zu gewinnen, ist in Abbildung 3.6 ein Ausschnitt der Werte der deponierten Energie als Häufigkeitsverteilung dargestellt. Diese Werte und alle weiteren deponierten Energien, die in dieser Arbeit genannt werden, wurden aus Gleichung (3.16) gewonnen und nach (1.13) skaliert. In der Abbildung liegen alle  $E_{\text{dep}}$ -Werte, die kleiner als der dargestellte Bereich waren, in dem Kanal bei 0.00 eV. Die Breite der Kanäle beträgt 0.01 eV. Einige  $E_{\text{dep}}$ -Werte häufen sich in einem oder zwei Kanälen, scharf getrennt von den restlichen Einträgen. Diese sind in der Abbildung mit Buchstaben versehen und werden ab jetzt als “Linie” bezeichnet. Es fällt auf, daß zu einigen Linien eine weitere Linie bei der doppelten deponierten Energie vorhanden ist (z.B. bei  $a = 5.81$  eV mit  $2a = k = 11.62$  eV oder  $d = 6.68$  eV mit  $2d = n = 13.35$  eV).

Die Defektzusammensetzung der Linien wurde sowohl mit dem Selektionsalgorithmus als auch visuell untersucht. Linien mit einer Breite von ein bis zwei Kanälen enthalten nur eine Defektart.

### 3.4.3 Bestimmung der Anzahl der Fehlstellenpaare

Der in Abschnitt 3.4.1 beschriebene Algorithmus erkennt 90 % aller Defekte. Er liefert sehr detaillierte Information über sie, die nicht für alle Analysen gleich wichtig sind. Wenn nur die Anzahl der Fehlstellenpaare gesucht ist, gibt es neben dem Algorithmus eine weitere Möglichkeit diese Größe zu bestimmen. Das geschieht mit Hilfe der deponierten Energie.

Wie in Abbildung 3.6 gesehen, separieren die Linien, die zu bestimmten Defekten gehören. Die gestrichelte Linie trennt zwei Bereiche, in denen 1 bzw. 2 Fehlstellenpaare entstanden sind. Die Anzahl der Fehlstellenpaare berechnet sich nach folgender Formel

$$\#FSP = \begin{cases} 0 & \text{für } 0.0 \text{ eV} < E_{\text{dep}} \leq 5.7 \text{ eV} \\ 1 & \text{für } 5.7 \text{ eV} < E_{\text{dep}} \leq 11.4 \text{ eV} \\ 2 & \text{für } 11.4 \text{ eV} < E_{\text{dep}} \leq 17.1 \text{ eV} \\ 3 & \text{für } 17.1 \text{ eV} < E_{\text{dep}} \leq 22.8 \text{ eV} \\ \vdots & \\ n & \text{für } n \cdot 5.7 \text{ eV} < E_{\text{dep}} \leq (n + 1) \cdot 5.7 \text{ eV} \end{cases} \quad (3.24)$$

Die Energiebereiche der deponierten Energie sind Vielfache des Wertes 5.7 eV. Dieser Wert ist  $\Delta E_{\text{dep}} \approx 0.1 \text{ eV}$  kleiner als die minimale Formationsenergie für ein Fehlstellenpaar ( $E_{\text{form,FP110E}} = 5.81 \pm 0.01 \text{ eV}$ ). Bei Mehrfachdefekten kann die deponierte Energie auch kleiner als die Summe der Formationsenergien sein, wenn sich die zusammengesetzten Defekte die Energie des Verzerrungsfeldes teilen, d.h. eine nicht verschwindende Bindungsenergie besitzen. Dieser Effekt wird mit Vielfachen von  $\Delta E_{\text{dep}}$  berücksichtigt. Mit Hilfe des Selektionsalgorithmus wurde (3.24) an vielen Simulationsläufen stichprobenartig getestet und bestätigt.

Der Einsatz von Gleichung (3.24) in den MD-Simulationen teilt sich in zwei Bereiche.

#### (a) Schwellenenergie

Im Bereich der Schwellenenergie ist die Anzahl der Fehlstellenpaare nach (3.24) in der Regel  $\#FSP = 0, 1, 2$ . Drei Fehlstellenpaare sind im unmittelbaren Bereich der Schwellenenergie sehr unwahrscheinlich. Mit dieser Methode werden in diesem Energiebereich mehr als  $\gtrsim 99 \%$  aller Defekte richtig eingeordnet. Der entstehende Fehler aus den  $\lesssim 1 \%$  der Defekte, die sich in der direkten Umgebung der Bereichsgrenze befinden, ist in Bezug auf seine Auswirkung zur Bestimmung der Schwellenenergie vernachlässigbar klein.

#### (b) Jenseits der Schwellenenergie

Bei PKA-Energien jenseits der Schwelle wird z.B. bei  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  bis zu  $E_{\text{dep}} = 70 \text{ eV}$  deponiert. In dem Bereich entstehen Defekt-Cluster, die sich physikalisch ganz anders verhalten als Einzeldefekte. Eine Anzahl an Fehlstellenpaaren kann hier nicht eindeutig definiert werden. Wenn es überhaupt eine Möglichkeit gibt, eine Zahl anzugeben, die der Anzahl der Fehlstellenpaare  $\#FSP$  in einem Defekt-Cluster entspricht, so mittels Gleichung (3.24).

# Kapitel 4

## Defektklassifizierung

### 4.1 Überblick über Defekte

Bei der Untersuchung der räumlichen Anordnung der Atome zeigt sich, daß sich die Defekte in folgende Gruppen einteilen lassen:

- isolierte Einzeldefekte (Leerstelle oder Zwischengitterplatz)
- über ihr Verzerrungsfeld verbundene Einzeldefekte
- Frenkel-Paare
- Doppeldefekte (Doppelleerstelle oder Doppelzwischengitterplatz)
- sonstige Defekte (u.a. Defekt-Cluster)

Die ersten drei Gruppen bilden Fehlstellenpaare, bestehend aus einer Leerstelle und einem Zwischengitterplatz. Die Geometrie eines Fehlstellenpaares wird nach [Bee83] durch den Separationsvektor

$$\vec{S} = \langle \vec{r}_I \rangle - \langle \vec{r}_V \rangle, \quad (4.1)$$

charakterisiert, der von dem Massenschwerpunkt der Leerstelle  $\langle \vec{r}_V \rangle$  zu dem des Zwischengitteratoms  $\langle \vec{r}_I \rangle$  führt. Eine weitere Angabe zur Geometrie läßt sich bei gespaltenen (“split”) Zwischengitterplätzen machen, in denen sich zwei Atome einen regulären Gitterplatz teilen. Der Orientierungsvektor

$$\vec{A}_I = \langle \vec{r}_{I_2} \rangle - \langle \vec{r}_{I_1} \rangle, \quad (4.2)$$

gibt die ausgezeichnete Richtung des Zwischengitterplatzes an. Bei komplizierteren Zwischengitterplätzen, die aus mehr als zwei Atomen bestehen ist die Berechnung nach Gleichung (4.2) nicht möglich. Es zeigt sich aber, daß fast immer bei Defekten dieser Art alle Atome in einer Ebene liegen. In solchen Fällen ist der Normalenvektor der Ebene der Orientierungsvektor des Zwischengitterplatzes.

Die Trennung der Fehlstellenpaare in drei Gruppen wird in Abbildung 4.1 verdeutlicht. Dort sind Leerstelle und Zwischengitterplatz in drei Varianten zu sehen: **(a)** EDI, **(b)** EDV und **(c)** FP. Sie unterscheiden sich sowohl in dem Betrag ihrer Separationsvektoren  $|\vec{S}|$  als auch in der deponierten Energie  $E_{\text{dep}}$ . Beide Größen nehmen von **(a)** nach **(c)** ab. Für isolierte Einzeldefekte wurden auch weit größere Abstände  $|\vec{S}|$  zwischen isolierten Leerstellen und Zwischengitterplätzen beobachtet. In den folgenden Abschnitten werden die verschiedenen Defektgruppen untersucht.

## 4.2 Isolierte Einzeldefekte

Isolierte Einzeldefekte (EDI) in Halbleitern werden schon seit langem von der theoretischen Festkörperphysik untersucht. Es hat sich ein sehr großer Forschungsbereich gebildet, da das Verständnis der EDI die Voraussetzung für das Verständnis der Strahlenschäden bildet. Das Interesse gilt zum einen elektronischen Störstellen, gerade weil diese die elektronischen Eigenschaften von Halbleitern ändern können, z.B. bei Dotierung durch Fremdatome. Zum anderen sind “intrinsische” Defekte von großem Interesse, u.a. weil sie als Strahlenschäden auftreten. Es gibt Übersichtsberichte z.B. von Corbett und Bourgoïn [CB75], von Lannoo und Bourgoïn [LB81] [LB83], von Pantelides [Pan86b] und neueren Datums von Madelung [Mad96], der nicht nur auf Einzeldefekte eingeht.

Die Struktur der isolierten Leerstelle (“Vacancy” V) liegt auf der Hand. Ein Atom fehlt an seinem Platz und die vier Nachbarn relaxieren nach innen. Andererseits war die Form des Zwischengitterplatzes lange Zeit ungeklärt. So wurde der tetraedrische Zwischengitterplatz (IT), der die relativ große tetraedrische Lücke (im Zentrum von Abbildung 3.2a) besetzt, für die Grundzustandsform gehalten. Allerdings haben in dieser Konfiguration vier Atome eine fünffache Koordination. Es wurden weitere Zwischengitterplatzformen aus Symmetrieüberlegungen vermutet. Ein typisches Beispiel dafür ist der “Jackson-Interstitial” [TMS87], bei dem darauf geachtet wurde, daß die vierfache Koordination bei allen Atomen erfüllt ist, die den Zwischengitterplatz bilden. Auf diese Weise werden ungesättigte Bindungen vermieden und die Formationsenergie ist niedriger. Bei Versuchen diese vermuteten Geometrien mittels MD-Simulation zu relaxieren, hat es sich jedoch gezeigt, daß der Grundzustand eine andere Form hat. Ab initio Dichtefunktionalrechnungen von Car, Blöchl und Smargiassi [CBS92] ergaben, daß der Grundzustand des Zwischengitterplatzes eine “Split Interstitial” (SI110) Form besitzt, dessen Orientierungsvektor  $\vec{A}$  in die [110]-Richtung zeigt. Es ist ein ausgedehnter Defekt, der interessanterweise keine Zustände in der Bandlücke aufweist. Nach [CBS92] beträgt die Formationsenergie  $E_{\text{form,SI110,ab initio}} = 3.3$  eV. Das Verzerrungsfeld hat bei MD-Simulationen mit konstantem Volumen noch einen merkbaren Einfluß auf Atome der 24-ten Nachbarschale. Aus diesem Grund ist nach [BHT92] die Berechnung der Formationsenergie mit  $N = 64 \pm 1$  Atomen in der SZ nicht genauer als  $\approx 0.3$  eV. Den Zwischengitterplatz mit der niedrigsten Formationsenergie für das SW-Potential hat zuerst Schober [Sch89] gefunden. Er hat, ausgehend von Symmetrieüberlegungen, MD-Relaxationen durchgeführt und festgestellt, daß der von ihm benannte “extended Split Interstitial” (SI110E) in diesem Potential den Grundzustand darstellt. Nach [CDdIRG95] unterscheiden sich der (SI110E) und der (SI110) in der Form nur geringfügig, so daß auch der Grundzustand des SW-Potentials in sehr guter Übereinstimmung mit dem ab initio Ergebnis von [CBS92] ist.

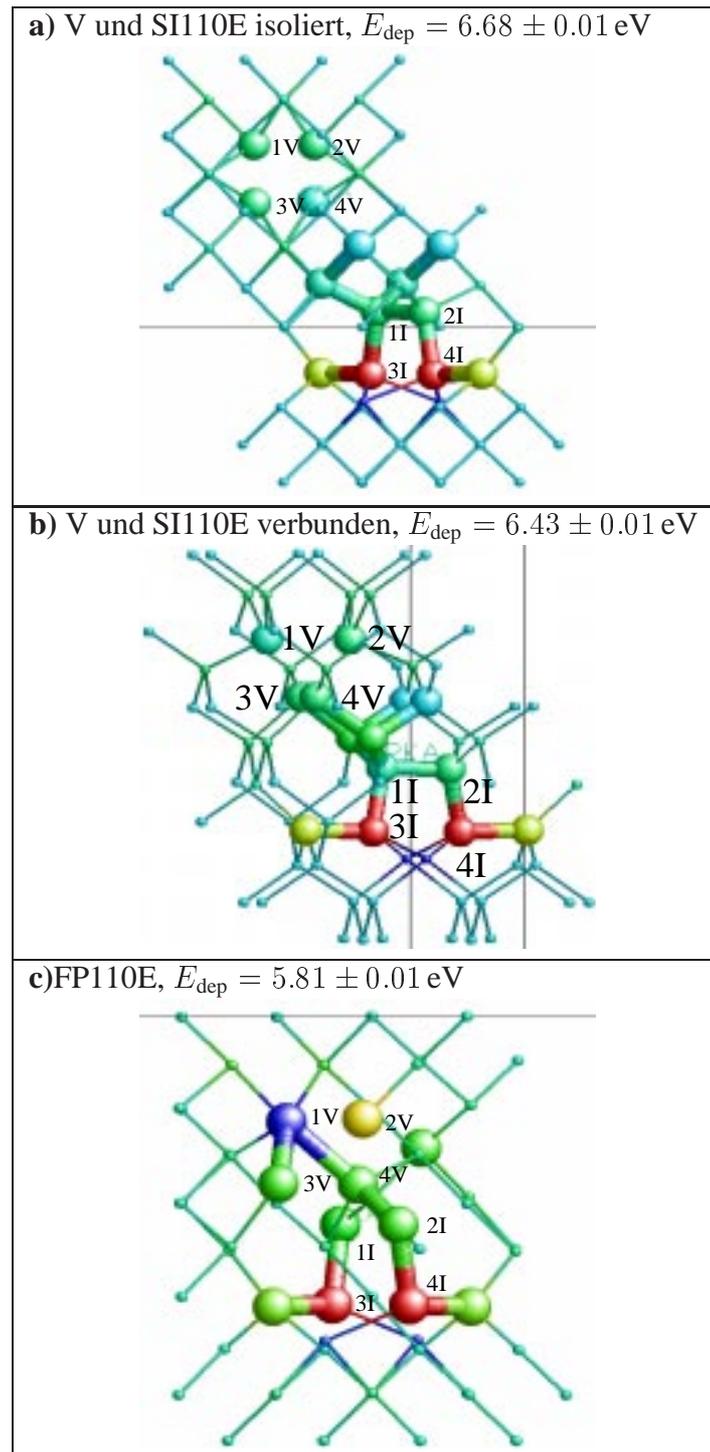


Abbildung 4.1: Leerstelle und Zwischengitterplatz in drei verschiedenen von **a)** bis **c)** abnehmenden Abständen zueinander.

In Teil **a)** sind sie isoliert voneinander, in Teil **b)** über ihre Verzerrungsfelder verknüpft und in Teil **c)** bilden sie ein Frenkel-Paar.

Eine andere Methode Defekte zu finden ist in dieser Arbeit durchgeführt worden. Ausgehend vom idealen Kristall wird ein PKA erzeugt und der Schaden analysiert. So findet man nicht nur nahezu alle Defekte, sondern auch bei welcher Energie und Richtung sie auftreten. Mit dieser Methode wurden Defekte gefunden, die in der Literatur völlig unbeachtet sind. Andere Defekte dagegen sind in der Literatur ausführlich diskutiert, wurden in diesen Simulationen aber nicht erzeugt. Das kann drei Gründe haben: Es kann erstens die Formationsenergie dieser Defekte höher liegen als die höchste der gefundenen EDI, zweitens das Potentialminimum dieser Defekte sehr flach sein und drittens kann es eine Eigenart des SW-Potentials sein. Formationsenergien einiger EDI, berechnet mit verschiedenen Potentials und Methoden, sind im Anhang C.2 zu finden.

Eine Übersicht der Geometrien der mit SW-MD-Simulationen gefundenen Zwischengitterplätze ist in Abbildung 4.2 gezeigt. Die Formationsenergien aller klassifizierten Defekte stehen in Tabelle 4.1. Die genauen Atompositionen der Einzel- und Doppeldefekte und einiger weiterer Defekte sind in tabellarischer Form im Anhang C.2 zu finden.

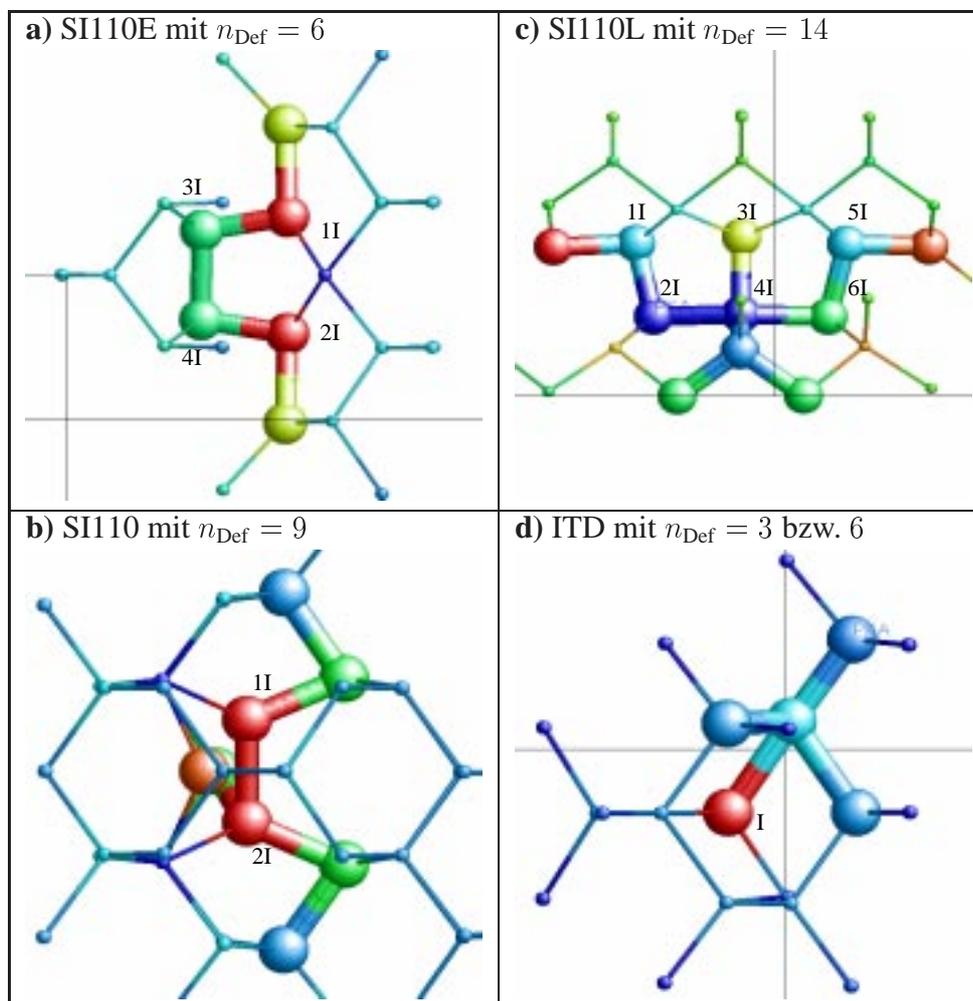


Abbildung 4.2: Übersicht der Zwischengitterplätze.

V Die Einzelleerstelle hat die einfachste Geometrie von allen Defekten (siehe Abbildung 4.1).

Ein Atom fehlt an seinem Platz und die  $n_{\text{Def}} = 4$  Nachbarn relaxieren nach innen. MD-Simulation mittels Dichtefunktionaltheorie liefert eine Formationsenergie von  $E_{\text{form,DFT}} = 3\text{--}4$  eV [BHT92]. Die mit SW-Potential berechnete Formationsenergie  $E_{\text{form,SW}} = 2.77 \pm 0.01$  eV liegt in der richtigen Größenordnung.

**SI110E** Ein Zwischengitterplatz mit einem Orientierungsvektor  $\vec{A}$ , der in die  $[110]$ -Richtung zeigt. Der “Extended Split 110 Interstitial” SI110E ist der Zwischengitterplatz mit der kleinsten Formationsenergie  $E_{\text{form,SW}} = 3.91 \pm 0.01$  eV im SW-Potential. Er besteht aus  $n_{\text{Def}} = 6$  Atomen. Der Name ausgedehnt (“Extended Split”) bezieht sich darauf, daß nicht nur zwei Atome sich einen Gitterplatz teilen, sondern vier Atome sich den Raum von drei regulären Plätzen teilen. Dieser Defekt scheint mit anderen MD-Potentialen nicht stabil zu sein. Nach [RCT96] transformiert sich der SI110E bei Relaxation mittels empirischer Tight-Binding-MD in einen IT. Die Autoren benutzten eine SZ von 64-Atomen.

**SI110** Der SI110 hat eine Formationsenergie von  $E_{\text{form,SW}} = 4.72 \pm 0.01$  eV und besteht aus  $n_{\text{Def}} = 9$  Atomen.

**SI110L** eine weitere Form eines Zwischengitterplatzes. Der “Large Split 110 Interstitial” SI110L ist in der Literatur nicht erwähnt. Der SI110L hat eine Formationsenergie von  $E_{\text{form,SW}} = 5.34 \pm 0.01$  eV und besteht aus  $n_{\text{Def}} = 14$  Atomen.

**IT** Der tetraedrische Zwischengitterplatz IT ist aufgrund seiner einfachen Geometrie in der Literatur schon früh diskutiert. Er besetzt die relativ große tetraedrische Lücke (im Zentrum von Abbildung 3.2a). Jedoch wurde er in diesen Studien gar nicht gefunden, obwohl seine Formationsenergie in Testsimulationen den Wert von  $E_{\text{form,SW}} = 4.65 \pm 0.01$  eV hat und damit um  $\approx 0.7$  eV kleiner als die höchste Formationsenergie für Zwischengitterplätze ist, die in diesen MD-Simulationen gefunden wurde.

**ITD** Eine ähnliche Form hat der “Distorted Tetrahedral Interstitial” ITD. Er ist in der  $[111]$ -Richtung verzerrt. Er besteht aus  $n_{\text{Def}} = 3$  bzw. 6 Atomen. Dieser Defekt wurde bei Stößen in die “offene”  $[333]$ -Richtung mit Energien nahe der Schwelle  $E_d$  gefunden. Seine Formationsenergie beträgt  $E_{\text{form,SW}} = 5.25 \pm 0.01$  eV. Der Grund für sein spärliches Auftreten kann daher sowohl in der hohen Formationsenergie als auch in dem Durchlaufen eines Potentialwalls bei der Erzeugung begründet sein. Der ITD wird in der Literatur nicht erwähnt.

**SI100** Der Zwischengitterplatz SI100 in der 100-Richtung ist mit dem SW-Potential nur unter sehr hohem Druck, also bei kleinerer Gitterkonstante stabil. Bei normaler Gitterkonstante liegt die mit dem SW-Potential berechnete Formationsenergie bei  $E_{\text{form,SI100}} = 5.62 \pm 0.01$  eV. Der Defekt transformiert sich bei  $T = 300$  K spontan in einen SI110E.

**IB, IH** Die beiden Zwischengitterplätze “bond-centered” IB und “hexagonal” IH wurden in den Simulationen ebenfalls nicht gefunden. Diese zwei Defekte und der SI100 sind in der Literatur eingehend diskutiert (u.a. in [BHT92]). Ihre Formationsenergien mit SW-Potential liegen mit  $E_{\text{form,IB}} = 5.99$  eV bzw.  $E_{\text{form,IH}} = 6.95$  eV über der höchsten Formationsenergie für Zwischengitterplätze, die in diesen Simulationen gefunden wurde.

### 4.3 Verbundene Einzeldefekte

Folgende Defektformen für verbundene Einzeldefekte (EDV) wurden gefunden, die über ihr Verzerrungsfeld miteinander verbunden sind.

**V+V** Zwei Leerstellen, deren Verzerrungsfelder Kontakt miteinander haben. Die typische Anzahl der Atome ist  $n_{\text{Def}} = 9$  bis 11. Typische Abstände beider Leerstellen sind

$$\vec{S}_{V+V} = (1.29 \text{ \AA}, 3.96 \text{ \AA}, 1.30 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{V+V}| \approx 0.80 \cdot a. \quad (4.3)$$

Der Betrag des Separationsvektors  $|\vec{S}|$  wird als Bruchteil der Gitterkonstante  $a = 5.34 \text{ \AA}$  angegeben.

**V+SI110E** Analog mit V und dem Zwischengitterplatz SI110E.

$$\vec{S}_{V+SI110E} = (6.03 \text{ \AA}, -1.34 \text{ \AA}, 1.34 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{V+SI110E}| \approx 1.16 \cdot a \quad (4.4)$$

**V+SI110** Der Defekt V+SI110 kommt mit annähernd gleicher Häufigkeit in zwei Varianten vor. Zum einen mit der Formationsenergie  $E_{\text{form,SW}} = 7.22 \pm 0.01 \text{ eV}$  und

$$\vec{S}_{V+SI110} = (4.57 \text{ \AA}, 2.51 \text{ \AA}, 2.86 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{V+SI110}| \approx 1.10 \cdot a \quad (4.5)$$

und zum anderen mit der Formationsenergie  $E_{\text{form,SW}} = 7.44 \pm 0.01 \text{ eV}$  und

$$\vec{S}_{V+SI110} = -(5.32 \text{ \AA}, 4.61 \text{ \AA}, 5.60 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{V+SI110}| \approx 1.66 \cdot a. \quad (4.6)$$

In der ersten Variante sind sich die Leerstelle und der Zwischengitterplatz zwar recht nahe, aber beide Defektformen sind nahezu unverändert. Aus diesem Grunde handelt es sich nicht um ein Frenkel-Paar.

**V+SI110L**

$$\vec{S}_{V+SI110L} = -(5.97 \text{ \AA}, 4.04 \text{ \AA}, 4.04 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{V+SI110L}| \approx 1.55 \cdot a \quad (4.7)$$

### 4.4 Frenkel-Paare

Eine Übersicht der Geometrien der gefundenen Frenkel-Paare (FP) ist in Abbildung 4.3 gezeigt.

Beide gefundenen Frenkel-Paare haben eine veränderte Struktur als die entsprechenden Einzeldefekte, sichtbar durch die veränderte potentielle Energie einzelner Atome. So ist z.B. die Leerstelle nicht mehr symmetrisch. Beide FP haben denselben Orientierungsvektor  $\vec{A} = (1, 1, 0)$ .

**FP110E** Frenkel-Paar mit SI110E und V. Der FP110E ist der Defekt aus Zwischengitterplatz und Leerstelle mit dem kleinsten möglichen Abstand

$$\vec{S}_{\text{FP110E}} = (-1.36 \text{ \AA}, 3.23 \text{ \AA}, 1.37 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{\text{FP110E}}| \approx 0.70 \cdot a. \quad (4.8)$$

Daraus resultiert die niedrigste Formationsenergie. Diese liegt mit  $\Delta E_{\text{FP110E}} = 5.44 \pm 0.01 \text{ eV}$  um  $0.81 \text{ eV}$  niedriger als die Summen der Formationsenergien von isolierter Leerstelle und SI110E.

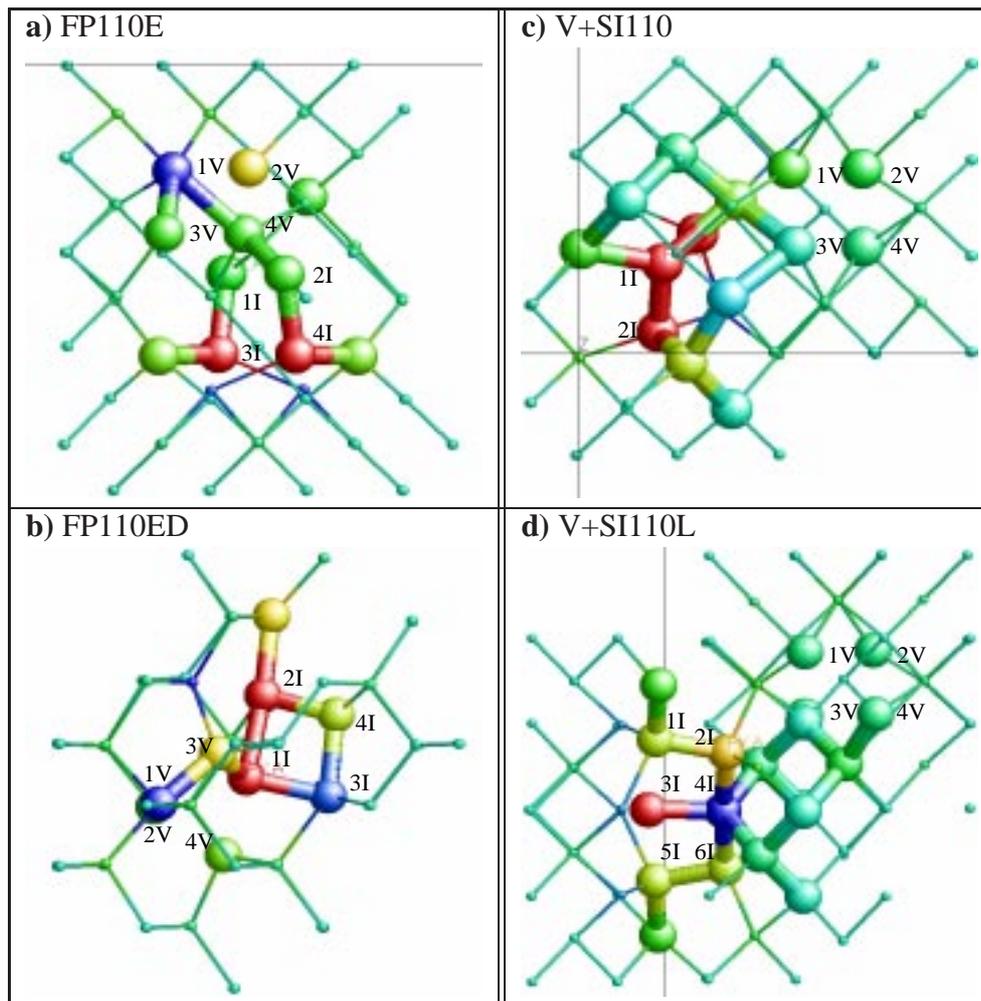


Abbildung 4.3: Übersicht der Frenkelpaare und verbundenen Einzeldefekte.

**FP110ED** Variation des Frenkel-Paars mit SI110E und V. Hier liegt die Leerstelle nicht in der Nähe von Atom 1 oder 2 sondern bei Atom 3 oder 4.

$$\vec{S}_{\text{FP110ED}} = (0.06 \text{ \AA}, 2.67 \text{ \AA}, 3.21 \text{ \AA}) \quad |\vec{S}_{\text{FP110ED}}| \approx 0.78 \cdot a. \quad (4.9)$$

Der FP110ED hat eine Formationsenergie von  $E_{\text{form,SW}} = 6.22 \pm 0.01 \text{ eV}$ .

## 4.5 Doppeldefekte

Eine Übersicht der Geometrien der gefundenen Doppeldefekte ist in Abbildung 4.4 gezeigt.

**VV** Doppelleerstelle. Bei diesem Defekt sind zwei benachbarte Atome herausgenommen. Das erkennt man am Fehlen der großen Kugeln in Abbildung 4.4b im Zentrum. Die kleinen Kugeln im Zentrum sind Atome des Verzerrungsfeldes, die den Defekt in der Bildtiefe nach oben

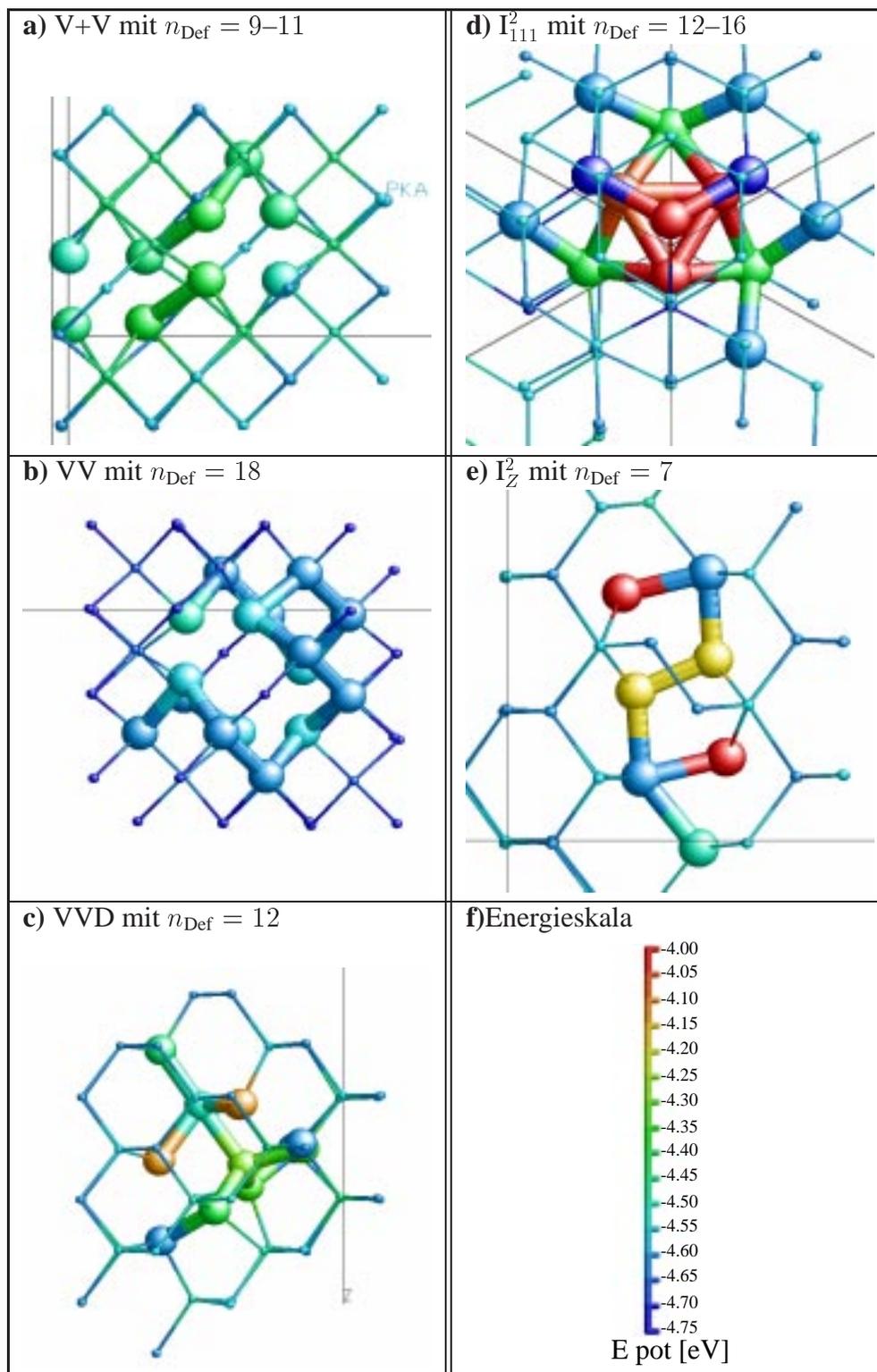


Abbildung 4.4: Übersicht der Doppeldefekte.

bzw. nach unten begrenzen. Die Existenz dieses Defektes wurde aufgrund seiner einfachen Geometrie schon früh vermutet. Die Formationsenergie beträgt  $E_{\text{form,SW}} = 4.34 \pm 0.01$  eV.

**VVD** Hier fehlen in einem zusammenhängenden Defekt zwei Atome, wobei sich alle Atome des Defektes in ihren Positionen verändert haben. Dieser Defekt wird in der Literatur nicht erwähnt. Seine Formationsenergie beträgt  $E_{\text{form,SW}} = 6.12 \pm 0.01$  eV.

**I<sub>111</sub><sup>2</sup>, I<sub>Z</sub><sup>2</sup>** Doppelzwischengitterplatz. Beide Defekte wurden mit SW-MD zuerst von [RCT96] gefunden und benannt. Der I<sub>Z</sub><sup>2</sup> Zwischengitterplatz liegt in der [110]-Richtung und hat eine Formationsenergie von  $E_{\text{form,SW}} = 6.08 \pm 0.01$  eV. Der I<sub>111</sub><sup>2</sup> liegt in der [111]-Richtung mit  $E_{\text{form,SW}} = 6.12 \pm 0.01$  eV.

## 4.6 Weitere Defekte

Eine kleine Auswahl der Geometrien weiterer gefundener Defekte ist in Abbildung 4.5 gezeigt.

**CE** “Concerted-Exchange”. Zwei Atome wechseln sowohl ihre Positionen als auch ihre Bindungslängen in einer sonst unveränderten Umgebung. Er kommt in zwei Formen CEa und CEb vor. Dieser Defekt wurde zuerst von [WWW85] und [Pan86a] diskutiert. Dort sind auch Abbildungen dieses Defektes zu sehen. Der Name wurde aus [Pan86a] übernommen. In [TCZDdlR97] wird derselbe Defekt mit “new metastable I-V-complex” bezeichnet und keine der oben genannten Arbeiten erwähnt.

**VZF** Defekte mit  $0 < n_{\text{Def}} \leq 9$ , die in der direkten Nähe eines Defektes liegen, aber doch gerade so weit weg, daß sie nach dem Kriterium der Relation (3.21) nicht mehr zu diesem gehören. Diese Atome liegen im Verzerrungsfeld der benachbarten Defektstruktur. Diese Defektart kommt meistens mit  $n_{\text{Def}} = 1, 2$  vor. Für  $n_{\text{Def}} > 3$  kommt sie sehr selten vor (ca. 10 mal). Ein Sonderfall ist, daß ein Defekt in Teile zerfällt, die weiter als der Schwellenabstand  $r_d = 3.0$  Å entfernt sind. Es kam ein Mal vor, daß ein Defekt in vier solche Teile zerfallen ist, die sehr symmetrisch angeordnet waren. Visuelle Identifikation beschreibt diese vier Teile als einen sehr ausgedehnten Zwischengitterplatz.

**Defekte mit  $10 < n_{\text{Def}} \leq 19$ :** In dem Bereich zwischen 10 und 20 Atomen pro Defekt handelt es sich um Einzel- bzw. Doppeldefekte. Die verbundenen Einzeldefekte V+SI110E und V+SI110 haben sehr viele Realisationsmöglichkeiten mit unterschiedlichen Kenngrößen nach des Gyrationradius und seines zweiten Moments. Etwa 50 % der Defekte mit  $10 < n_{\text{Def}} \leq 19$  sind visuell als V+SI110E oder V+SI110 zu identifizieren. Solche visuellen Identifikationen könnten eventuell durch selbst lernende Algorithmen ersetzt werden, wie sie z.B. bei neuronalen Netzen verwendet werden.

**Defekte mit  $n_{\text{Def}} > 19$ :** Defekte mit dieser Teilchenzahl sind in dieser Arbeit als Defekt-Cluster definiert. Ihre Geometrie ist selbst visuell nicht immer zu erklären. Es gibt jedoch Fälle, in denen diese Defekte als zusammengesetzte Einzeldefekte erkennbar sind, die verbunden sind durch ein ausgedehntes Verzerrungsfeld der Randatome (ein EDV höherer Ordnung). Als Beispiel ist in Teil **c**) und **d**) der Abbildung 4.5 derselbe Defekt mit  $n_{\text{Def}} = 28$  aus der

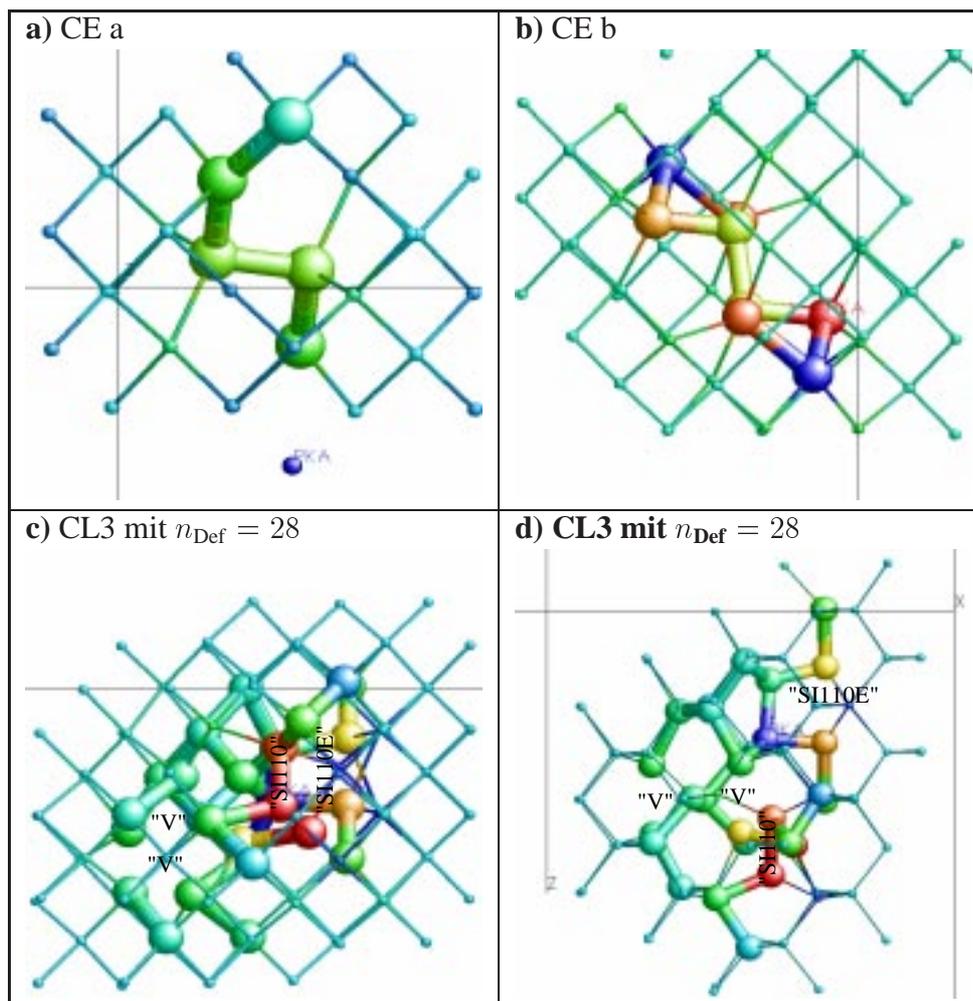


Abbildung 4.5: Beispiele weiterer Defekte. In Teil **c)** und **d)** ist derselbe Defekt aus der 100- bzw. der 110-Richtung gezeigt.

[100]- bzw. der [110]-Richtung gezeigt. Der Defekt stellt sich als  $V+V+SI110E+SI110$  dar. Er kam nur in der [321]-Richtung mit PKA-Energien im Bereich  $44 \text{ eV} < E_{PKA} < 54 \text{ eV}$  vor, dort aber recht häufig. Die Formationsenergie liegt mit  $E_{\text{form,SW}} = 12.98 \pm 0.01 \text{ eV}$  um  $\approx 1.2 \text{ eV}$  niedriger als die Summe der einzelnen Formationsenergien (Tabelle 4.1). Die mit Gleichung (3.24) bestimmte Anzahl der Fehlstellenpaare liegt bei  $\#FSP = 2$ . Der atomreichste identifizierbare Defekt (VV) hatte eine Größe von  $n_{\text{Def}} = 18$  Atomen. Deshalb wurden Defekt-Cluster von Einzel- bzw. Doppeldefekten ab einer Größe von  $n_{\text{Def}} = 19$  getrennt.

isolierte ED:

V	2.77 eV	1605
SI110E	3.91 eV	1673
IT	4.65 eV	-
SI110	4.72 eV	480
SI110L	5.34 eV	19
ITD	5.25 eV	12
SI100	5.62 eV	-
IB	5.99 eV	-
IH	6.95 eV	-

verbundene ED:

V+SI110E	6.58 eV	267
V+SI110	7.21 eV	68
	7.44 eV	75
V+SI110L	8.28 eV	4

FP:

FP110E	5.81 eV	67
FP110ED	6.22 eV	97

DD:

V+V	5.54 eV	26
VV	4.34 eV	79
VVD	6.12 eV	16
II110	6.08 eV	46
II111	6.12 eV	43

sonstige:

CEa	3.60 eV	5
CEb	6.01 eV	4
Defekt-Cluster $N = 28$ "m"-Linie in Abb. 3.6 "V+V+SI110E+SI110"	12.98 eV	10

Tabelle 4.1: Formationsenergien klassifizierter Defekte, berechnet mittels SW-Potential. Der Fehler beträgt 0.01 eV.



# Kapitel 5

## Systematische Fehler

### 5.1 MD ohne Kühlung der SZ

Eine Kollisionskaskade in kristallinem Silizium, ausgelöst durch ein energiereiches PKA, deponiert die Energie lokal durch Stöße und Ionisation. Ein großer Teil der Energie wird dabei in Wärme umgewandelt (siehe Abschnitt 2.5). MD-Simulationen mit periodischen Randbedingungen können die Wärme in der SZ nur verteilen. Die Wärme kann nicht in einen unendlich großen Kristall abfließen. Nach [SJWC95] ist der aus periodischen Randbedingungen folgende Energierückfluß unphysikalisch. Unphysikalische Ausheilvorgänge auf Grund zu hoher Temperaturen müssen vermieden werden. In [SJWC95] wird vorgeschlagen die SZ durch äußere Atomschichten mit konstanter Temperatur (Wärmebad) zu kühlen. Eine solche Kühlung ist aber nur dann physikalisch sinnvoll, wenn die Wärme mit Geschwindigkeiten unterhalb der Schallgeschwindigkeit  $v_{Si} = 8 \text{ km/s} = 0.08 \text{ \AA/fs}$  abfließt. Das geschieht erst bei Systemgrößen mit einer kubischen Kantenlänge von

$$L > 225 \text{ \AA} \quad (5.1)$$

(siehe Anhang B). Die SZ in dieser Arbeit waren viel kleiner, so daß auf ein Wärmebad verzichtet wurde. Bei einer genügend großen SZ ist eine Kühlung nicht erforderlich, da die Temperatur trotz periodischer Randbedingungen klein genug ist (Abschnitt 5.2). Alle Simulationen dieser Arbeit wurden mit konstanter Gesamtenergie gerechnet, also ohne Wärmebad.

Wenn man einem System kurz nach der Kollisionsentwicklung die Energie zu schnell entzieht, können Ausheilvorgänge nicht stattfinden, und Fehlstellen werden eingefroren, die bei genügend langsamem Wärmeabfluß ausheilen würden. In [NKK94] berichten die Autoren von ihrem Problem, daß die Anzahl der Leerstellen den Wert der Vorhersage nach der Kinchin-Pease Gleichung (2.20) deutlich überschreitet. Sie erhalten bei einer PKA-Energie von  $E_{\text{PKA}} = 300 \text{ eV}$  ungefähr 15 Leerstellen. Die Kühlung ist der augenscheinlich größte Unterschied der Simulation zu den Simulationen dieser Arbeit, in denen nicht gekühlt wurde. Der größte Unterschied der Analyse ist die unterschiedlich vorgenommene Bestimmung der Fehlstellen. In [NKK94] werden unbesetzte reguläre Gitterplätze als Leerstellen gezählt. Ein Gitterplatz gilt dort als unbesetzt, wenn innerhalb eines Radius von  $r = 1.2 \text{ \AA}$  kein Atom zu finden ist. In dieser Arbeit werden Einzeldefekte als

Leerstellen identifiziert, wenn die Kenngrößen des gesamten Defektes in einem bestimmten für die Leerstelle typischen Bereich liegen, bzw. über die Anzahl der Fehlstellenpaare nach Gleichung (3.24) bei großer Kristallschädigung bestimmt.

## 5.2 SZ-Größe

Die Abhängigkeit der deponierten Energie  $E_{\text{dep}}$  von der PKA-Energie  $E_{\text{PKA}}$  ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Die unterschiedlichen Symbole kennzeichnen Simulationsläufe mit unterschiedlichen SZ-Größen. Die ausgefüllten Symbole zeigen einen linearen Zusammenhang

$$\frac{E_{\text{dep}}}{E_{\text{PKA}}} = 0.042 \pm 0.002. \quad (5.2)$$

Das bedeutet, daß  $\approx 95\%$  der Energie in Wärme umgewandelt wird. Bei festgehaltener Systemgröße steigt mit der PKA-Energie auch die spätere Gleichgewichtstemperatur der SZ. Die gesamten quadratischen Symbole zeigen ab einer PKA-Energie von  $E_{\text{PKA}} \approx 500$  eV eine Abweichung von diesem linearen Verlauf nach Gleichung (5.2). Bei dieser PKA-Energie und  $N = 4096$  Atomen in der SZ wurde eine Endtemperatur von

$$T_{\text{SZ, max}} \approx 800 \text{ K} \quad (5.3)$$

erreicht. Ab dieser PKA-Energie ist eine Abweichung vom linearen Verlauf zu erkennen, es sind deutlich mehr Defekte ausgeheilt. Daher sollte die SZ immer so groß gewählt werden, daß die Endtemperatur deutlich unter 800 K liegt. Die Tatsache des linearen Zusammenhangs  $E_{\text{dep}}/E_{\text{PKA}} = 0.042$  bis über 1 keV bei genügend großer SZ zeigt auch, daß der von [SJWC95] befürchtete Energierückfluß unbedeutend sein dürfte (Der Rückfluß sollte sich nicht linear äußern).

Zwei Energiebereiche werden im folgenden unter strenger Berücksichtigung der Endtemperatur untersucht:

### (a) Energien im Bereich der Schwellenenergie

Die ausgefüllten Kreise zeigen die Simulationen, mit denen in Kapitel 6 die Schwellenenergie bestimmt wird. Die PKA-Energien liegen alle unterhalb der maximalen PKA-Energie  $E_{\text{PKA, max, 1728}} \approx 204$  eV, die der maximalen Temperatur  $T_{\text{SZ, max}}$  bei dieser SZ-Größe mit  $N = 1728$  Atomen entspricht. Bei  $E_{\text{PKA}} \approx 60$  eV ist die Temperatur  $T_{\text{SZ}} \approx 160$  K deutlich unterhalb von  $T_{\text{SZ, max}} = 800$  K (siehe Abbildung 3.3a).

Die deponierte Energie bei  $E_{\text{PKA}} \approx 100$  eV ist für beide SZ-Größen (1728 und 4096) innerhalb des statistischen Fehlers gleich groß, wobei die Statistik bei der Bestimmung der Schwellenenergie viel größer war. Falls dies ein systematischer Effekt wäre, bedingt durch die SZ-Größe, dann sorgte er dafür, daß die in dieser Arbeit bestimmte Schwelle kleiner wäre als die wirkliche Schwelle.

Diese Betrachtungen rechtfertigen die Berechnung der Schwellenenergie mit einer SZ von  $N = 1728$ .

**(b)** Energien jenseits der Schwellenenergie bei  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$ 

Die Simulationen bei  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  wurden mit  $N = 13824$  Atomen in der SZ durchgeführt. Die Temperatur  $T_{\text{SZ}} \approx 225 \text{ K}$  war deutlich unterhalb von  $T_{\text{SZ,max}}$  (siehe Abbildung 3.3b). Damit ist auch diese SZ-Größe gerechtfertigt.

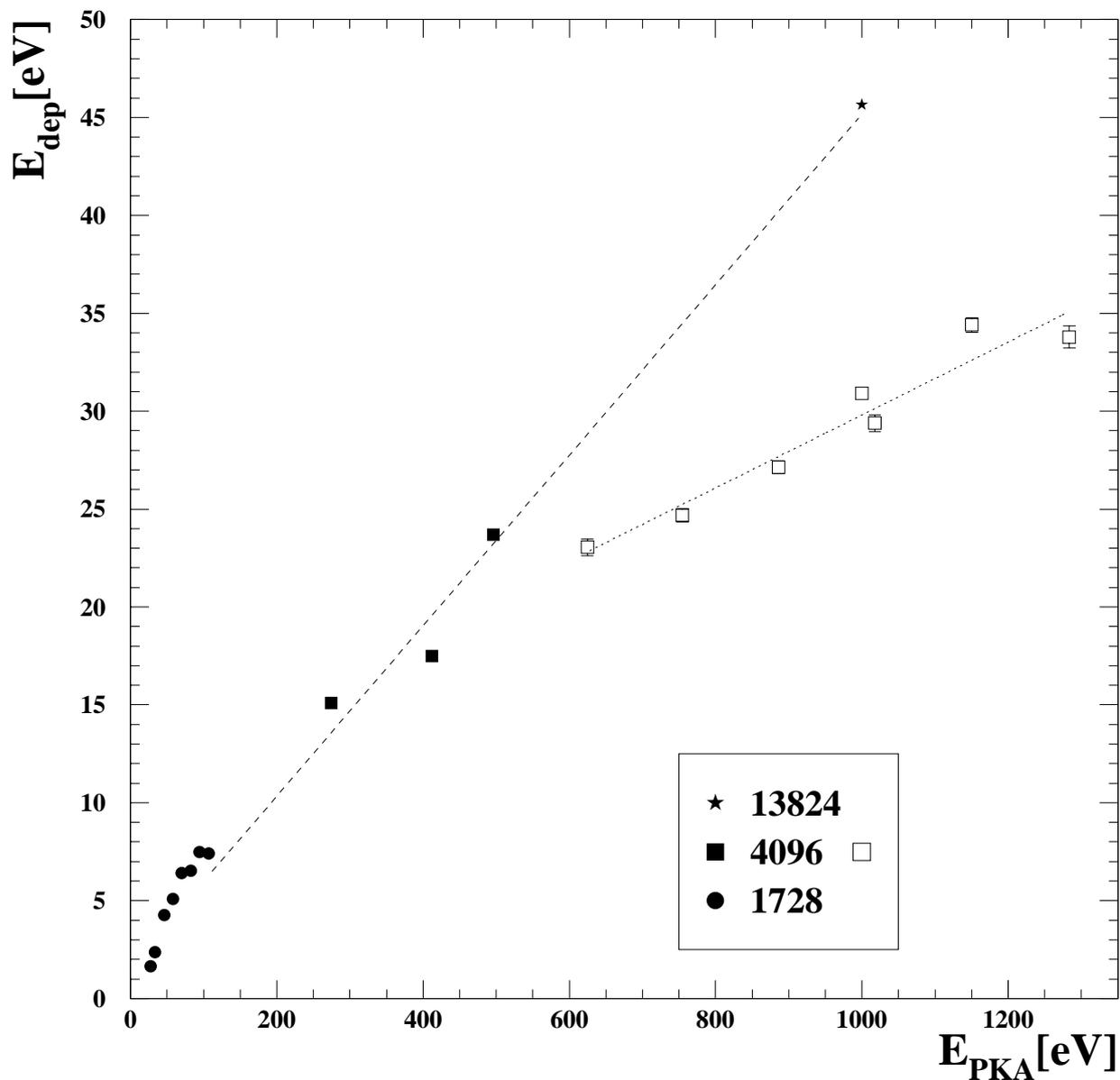


Abbildung 5.1: Deponierte Energie in Abhängigkeit von der PKA-Energie und der SZ-Größe. Die ausgefüllten Kreise (●) zeigen die Simulationen, mit denen in Kapitel 6 die Schwellenenergie bestimmt wurde. Quadrate (■, □) zeigen MD-Simulationen mit jeweils 4096 Atome in der SZ. Die Simulationen bei  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  wurden mit  $N = 13824$  Atomen in der SZ durchgeführt (★).

## 5.3 Härte des Zweikörperpotentials

In diesem Abschnitt wird der Effekt bei Verwendung zweier unterschiedlicher Zweikörperpotentiale untersucht (siehe Abbildung 3.1).

- Das SW-Potential  $v_2$  [SW85] nach Gleichung (1.7) und
- ein Thomas-Fermi-abgeschirmtes-Potential nach [Gä96].

Die Simulationsergebnisse sind in Tabelle 5.1 gezeigt. Es wurden acht Simulationsläufe in neun verschiedene Kristallrichtungen gerechnet.

Der Unterschied in der deponierten Energie und der Häufigkeit der erzeugten Defekte pro Simulationslauf ist innerhalb der berechneten Genauigkeit kleiner als eine Standardabweichung und somit in keinem Fall signifikant. Bei der Erzeugung von speziellen Defekten ist dies ebenso.

Dieses Ergebnis zeigt, daß die Verwendung eines Thomas-Fermi-abgeschirmten-Potentials bei Energien unterhalb von  $E_{\text{PKA}} \leq 1 \text{ keV}$  unnötig ist. Der minimale interatomare Abstand bei einer Kaskadensimulation mit dem SW-Potential hat bei einer PKA-Energie von  $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$  eine Größe von  $r_{ij,\text{min}} = 0.9 \text{ \AA}$  (siehe Abbildung 3.1).

## 5.4 Simulationszeit

Die Entwicklung einer Kaskade kann man nach [KB83] in drei aufeinander folgende Zeitabschnitte teilen: Kollision, spontane Relaxation und Thermalisierung.

Nach [KGM95] berechnet sich die Dauer  $t_{\text{Kol.}}$  der Kollisionsphase einer Kaskade in Silizium mit  $E_{\text{PKA}} = 100 \text{ eV}$  zu  $t_{\text{Kol.}} = 0.11 \text{ ps}$ . Nach dieser Zeit  $t_{\text{Kol.}}$  hat kein Atom der SZ eine kinetische Energie größer als  $E_{\text{kin}} = 5 \text{ eV}$ . Dieser Wert wird von den MD-Simulationen dieser Arbeit bestätigt.

Die Thermalisierungsphase beginnt nach [KGM95] zu der Zeit  $t_{\text{Therm.Anf.}} = 0.43 \text{ ps}$  und endet nach  $t_{\text{Therm.End.}} = 0.65 \text{ ps}$ . Die Autoren nennen den erreichten Zustand "thermodynamisches Gleichgewicht" und weisen ihn mit einem stationären Geschwindigkeitsspektrum nach.

Die Eigenschaft der Geschwindigkeitsverteilung, stationär zu sein, ist schlecht meßbar wegen Fluktuationen der Verteilung durch statistische Schwankungen. Die Simulationsrechnungen dieser Arbeit zeigen zwei Argumente, die gegen den Wert  $t_{\text{Therm.End.}} = 0.65 \text{ ps}$  für das Erreichen eines stationären Zustandes sprechen.

### (a) Spontane Relaxation eines Einzeldefekts nach $t \gtrsim 2 \text{ ps}$

Es gibt eine Meßgröße, die das Defizit der schlechten Meßbarkeit nicht hat. Das ist die deponierte Energie  $E_{\text{dep}}$ , weil sie durch die hier relevanten Atome bestimmt ist. Sie ist in Abbildung 3.4 dargestellt, wobei einige Kaskaden mit  $E_{\text{PKA}} = 60 \text{ eV}$  in Teil a nach  $t \approx 2 \text{ ps}$  vollständig ausgeheilt sind. Es gibt sehr viel seltener auch Simulationsläufe, bei denen erst nach  $t \approx 3 \text{ ps}$  solch eine Relaxation stattfindet. Also war die SZ noch nicht in einem stationären Zustand. Deshalb zeigt die Simulation dieser Arbeit, daß ein stationärer Zustand

Potential	Stillinger-Weber	Thomas-Fermi
# Sim.-Läufe	72	72

Ergebnis pro Simulationslauf

$\langle E_{\text{dep}} \rangle$ [eV]	$46.2 \pm 1.5$	$45.53 \pm 1.3$
Platzwechsel	$42.90 \pm 0.77$	$43.19 \pm 0.77$
a) $\sum$ FP	$0.11 \pm 0.06$	$0.08 \pm 0.04$
b) $\sum$ EDV	$0.06 \pm 0.03$	$0.10 \pm 0.05$
c) $\sum$ EDI	$2.75 \pm 0.20$	$2.64 \pm 0.19$

a) FP:

FP110E	6	5
FP110ED	2	1

b) verbundene ED:

V+SI110E	3	7
V+SI110	1	—
V+SI110L	—	—

c) isolierte ED:

V	102	97
SI110E	136	132
SI110	43	38
SI110L	1	—
ITD	—	—

DD:

V+V	—	—
VV	3	5
VVD	—	—
$I_Z^2$	4	7
$I_{111}^2$	2	4

weitere:

CEa+CEb	—	—
VZF mit $n_{\text{Def}} = 1$	3	3
VZF mit $n_{\text{Def}} = 2$	3	4
VZF mit $3 \leq n_{\text{Def}} \leq 10$	15	19
Defekte mit $10 < n_{\text{Def}} \leq 19$	42	42
Defekte mit $n_{\text{Def}} > 19$	95	102

Tabelle 5.1: Einfluß der Härte des Zweikörperpotentials (links SW-Potential  $v_2$  [SW85], rechts Thomas-Fermi-Potential [Gä96], siehe Abbildung 3.1). Es wurden acht Simulationsläufe in jeder der folgenden Richtungen berechnet: [310],[311],[320],[321],[322],[330],[331],[332] und [333].

Defekt	Zeit [ns]	$N$ der SZ
FP110E	2.11	216
SI110E	2.05	217
V	3.34	215
VV	3.68	214

Tabelle 5.2: Langzeit Studien bei einer Temperatur  $T_{SZ} = 300$  K. Nach den angegebenen Zeiten wurden die Simulationen abgebrochen.

einer Kaskade in Silizium mit  $E_{PKA} = 60$  eV erst nach der Zeit

$$t_{\text{Therm.End.}} \gtrsim 3 \text{ ps} \quad (5.4)$$

ansetzt. Hätte man nach einer Simulationszeit von  $t \approx 1$  ps die Simulation beendet und den Schaden bestimmt, so hätte man ein isoliertes Fehlstellenpaar gefunden. Dieser systematische Fehler kann durch eine Simulationszeit von  $t \approx 10\text{--}20$  ps vermieden werden.

**(b) Geschwindigkeitsinversionsrechnungen**

Nach streng thermodynamischer Sicht handelt es sich dann um thermisches Gleichgewicht, wenn die Information über den Ausgangszustand vollständig verloren ist. Es wurden Geschwindigkeitsinversionsrechnungen durchgeführt. Das sind Simulationsrechnungen, bei denen nach  $t \approx 3$  ps alle Geschwindigkeiten mit einem Vorzeichen versehen wurden. Es wurde dieselbe Anzahl an ZS noch einmal gerechnet, mit dem Resultat, daß sich alle Atome wieder auf ihren regulären Gitterplätzen befanden. Der Ausgangszustand wurde erreicht.

Es wurden in einer kleinen SZ mit  $N = 216$  Atomen Langzeitstudien für Einzeldefekte bei einer Temperatur von  $T_{SZ} = 300$  K durchgeführt. Nach der in der Tabelle 5.2 angegebenen Zeit wurde der Versuch gestoppt. Keiner der Defekte hatte sich in seiner Geometrie geändert. Es fanden weder Platzwechsel noch Rekombination statt, sondern nur Gitterschwingungen. Bei diesen Simulationszeiten kann man getrost von thermodynamischem Gleichgewicht sprechen (im Gegensatz zu dem oben erwähnten pseudothermodynamischem Gleichgewicht), denn der Endzustand hat jede Information des Ausgangszustandes verloren. Der Effekt der Thermodynamik wird durch Rundungsfehler verursacht.

Nachdem die systematischen Fehler in MD-Simulationsrechnungen und deren Vermeidung diskutiert wurden, folgen in den nächsten zwei Kapiteln die Untersuchungen der Strahlenschäden für PKA-Energien im Bereich der Schwellenenergie für Einzeldefekte und jenseits dieser Energie.



# Kapitel 6

## Schwellenenergie für Einzeldefekte

### 6.1 Definition verschiedener Schwellenenergien

Die Analyse in dieser Arbeit erlaubt es, mehrere Schwellen zu definieren, je nach

- dem Schaden, der entstanden ist,
- der Art der Schwelle (Minimalenergie oder wahrscheinlichster Schwellenwert) oder
- der Anisotropie bzw. Mittelung über alle Richtungen als Gesamtergebnis.

Bei Einzeldefekten ist die Entfernung  $|\vec{S}|$  von der Leerstelle zu dem Zwischengitterplatz von Bedeutung, wenn argumentiert wird [MBPP94a], daß Frenkel-Paare auf experimentellen Zeitskalen kurzlebige Defekte sind, isolierte (nicht wechselwirkende) Einzeldefekte dagegen stabil sind. Neuere Messungen bestätigen, daß Frenkel-Paare nur bei einer sehr tiefen Temperatur von  $T \approx 4$  K stabil sind [ZE97]. MD-Simulationsrechnungen [SJB96] mit dem SW-Potential zeigen bei genügend hoher Temperatur das Arrhenius-Verhalten der Migrationskoeffizienten von Einzeldefekten in Abhängigkeit von der Temperatur. Testsimulationen dieser Arbeit bestätigen das. Die Extrapolation zu tiefen Temperaturen, die zwei Größenordnungen kleiner sind, ist jedoch schwierig. Die Unterscheidung der Schwellenenergien für verschieden langlebige Defekte kann deshalb von MD-Simulationen nur über den Abstand  $|\vec{S}|$  angegeben werden, da Simulationszeiten für Rekombinationen sehr groß sind.

Ein weiterer Unterschied in der Schwellendefinition besteht in der Form der Schwelle. Vorhandene (experimentelle) Schwellenenergien sind als Minimalenergie gemessen worden. Mehr Information ist aus einer Schwellenfunktion nach Gleichung (2.17) zu gewinnen, die den Wert der größten Wahrscheinlichkeit für einen Einzeldefekt und die zugehörige Standardabweichung liefert. Diese Information ist im Gegensatz zu den experimentellen Daten aus den MD-Simulationsdaten für die gesamte Anzahl an Fehlstellenpaaren nach Gleichung (3.24) zu gewinnen. Für die unterschiedlichen Defekte dagegen kann nur eine minimale Schwellenenergie angegeben werden.

$E_{\text{Platzw.,min}}$ : Diese Schwelle bezeichnet die minimale Energie, die nötig ist, um ein Atom von seinem Gitterplatz zu entfernen, ohne daß es spontan auf seinen eigenen Gitterplatz zurückfällt.

Bei dieser Schwelle entsteht im allgemeinen *kein* Defekt, sondern es bleibt der ideale Kristall, bei dem zwei (oder mehr) Atome ihre Positionen getauscht haben.

$E_{\text{FP,min}}$ : Die minimale Energie, die nötig ist, um ein Frenkel-Paar zu erzeugen.

$E_{\text{EDI,min}}$ : Die minimale Energie, die nötig ist, um zwei (ein Paar) isolierte Einzeldefekte zu erzeugen.

$E_{\text{CL,min}}$ : Die minimale Energie, die nötig ist, um ein Defekt-Cluster mit mehr als  $n_{\text{Def}} > 19$  Atomen zu erzeugen.

$E_{\text{ges,d}}$ : Energie, bei der eine Schwellenfunktion  $f(E)$ , die von dem Wert  $f(E) = 0$  unterhalb der Schwelle auf den Wert  $f(E) = 1$  oberhalb der Schwelle anwächst, und an der Stelle  $E_d$  den Wert  $f(E_d) = 0.5$  annimmt. Diese Definition beinhaltet zwei Spezialfälle:

- a) “Rekombination jenseits der Schwelle” tritt auf, wenn zuvor bei einer niedrigeren PKA-Energie der Schwellenwert  $f(E) = 1$  bereits erreicht wurde.
- b) Eine “durch Rekombination verzögerte Schwelle” tritt auf, wenn in einem Energiebereich deutlich vor der Schwelle Werte der Schwellenfunktion in der Größenordnung von  $f(E) \approx 0.3$  auftreten.

In dieser Arbeit wird die Schwellenfunktion nach Gleichung (2.17) benutzt (zur Begründung siehe Abschnitt 2.4.1).

Der Index “ges” steht für die Summe aller Fehlstellenpaare in einem Simulationslauf nach Gleichung (3.24).

$E_{\text{ges,D}}$ : Richtungsunabhängiges Gesamtergebnis. An die nach Gleichung (3.13) über den Raumwinkel  $\Omega$  gemittelte der Anzahl der Fehlstellenpaare wird die Schwellenfunktion zur Berechnung der Parameter  $E_{\text{ges,D}}$  bzw.  $\sigma E_{\text{ges,D}}$  angepaßt.

## 6.2 Simulationsbedingungen

Bei festgehaltener PKA-Richtung wird die PKA-Energie ausgehend von einem Wert, bei dem kein Schaden entsteht, mit einer Schrittweite von 5–10 eV bis zu einer Energie oberhalb der Schwellenenergie erhöht ( $E_{\text{PKA}} \approx 100$  eV). Dabei werden bei jeder PKA-Energie acht Simulationsläufe durch Auswahl verschiedener äquivalenter Rückstoßatome berechnet. Diese werden in 18 verschiedene Richtungen geschossen (siehe Abschnitt 3.2.2). Nach dem in Kapitel 3 beschriebenen Verfahren wird nach 75000 ZS ( $\approx 20$  ps) die in der SZ die deponierte Energie  $E_{\text{dep}}$  gemessen und der Schaden analysiert.

Die Analyseergebnisse aller Kristallrichtungen befinden sich im Anhang C.3 in Form einer Abbildung mit zugehöriger Tabelle. Die gezeichneten Punkte einschließlich Fehlerbalken in den Abbildungen stellen die Anzahl der Fehlstellen nach Gleichung (3.24) dar. Die Größe des Fehlers ist die Standardabweichung geteilt durch die Quadratwurzel der Anzahl der Simulationsläufe. Wenn sich in allen acht Fällen kein Fehlstellenpaar gebildet hat, so wurde der Fehler abgeschätzt durch die Größe, die der Fehler bei einem weiteren Versuch *mit* einem Fehlstellenpaar gehabt hätte. Wenn

sich in allen acht Fällen ein Fehlstellenpaar gebildet hat, so wurde der Fehler abgeschätzt durch die Größe, die der Fehler bei einem weiteren Versuch *ohne* ein Fehlstellenpaar gehabt hätte. Aus der Anpassung der Schwellenfunktion (2.17) werden die Schwellenenergie  $E_{\text{ges,d}}$  und die zugehörige Standardabweichung  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}}$  gewonnen. Die Minimalenergien der Schwellen (z.B.  $E_{\text{Platzw.,min}}$ ) werden direkt (ohne Anpassung) aus den Daten bestimmt.

Es gibt wenig Hinweise, daß die tiefe Temperatur  $T = 10$  K der SZ vor dem Stoß einen Einfluß auf die Größe der Schwellenenergie  $E_{\text{ges,d}}$  hat. Bei einer Temperatur von  $T = 300$  K vor dem Stoß ist in der  $[300]$ -Richtung die Abweichung

$$\frac{(E_{\text{ges,d},T=10\text{ K}} - E_{\text{ges,d},T=300\text{ K}})}{E_{\text{ges,d},T=10\text{ K}}} \lesssim 0.001. \quad (6.1)$$

Eine minimale Schwellenenergie ist dagegen sehr wohl von der Temperatur abhängig, denn es zeigt sich in derselben Kristallrichtung, daß die Breite  $\sigma_{E_{\text{ges,d},T=300\text{ K}}} = 2.0$  eV bei  $T = 300$  K deutlich größer ist als bei  $T = 10$  K ( $\sigma_{E_{\text{ges,d},T=10\text{ K}}} = 0.3$  eV).

Um den systematischen Fehler bei der Bestimmung des Mittelwerts über den Raumwinkel  $\Omega$  abzuschätzen, wurden Variationen der Gewichte in Gleichung (3.13) in ihren Auswirkungen auf das Gesamtergebnis der Schwellenenergie  $E_{\text{ges,D}}$  untersucht. Selbst wenn alle Gewichte gleich  $G_d([hkl]) = 1$  gesetzt werden ist die Änderung der Schwellenenergie kleiner als  $\approx 2\%$ .

## 6.3 Anisotropie

Die Schwellenverläufe unterscheiden sich in verschiedenen Kristallrichtungen in ihrer Form wie in Abschnitt 2.4 erwartet. Vergleicht man die Formen der Schwellenverläufe, so kann man die Schwellen in drei Klassen einteilen, deren Namensgebung den Schwellenverlauf symbolisieren soll:

**I** -Schwelle: Form einer Stufe,

**/** -Schwelle: Eine durch Rekombination verzögerte Schwelle in der Form einer Rampe,

**N** -Schwelle: Rekombination jenseits der Schwelle in Form des Buchstaben "N".<sup>1</sup>

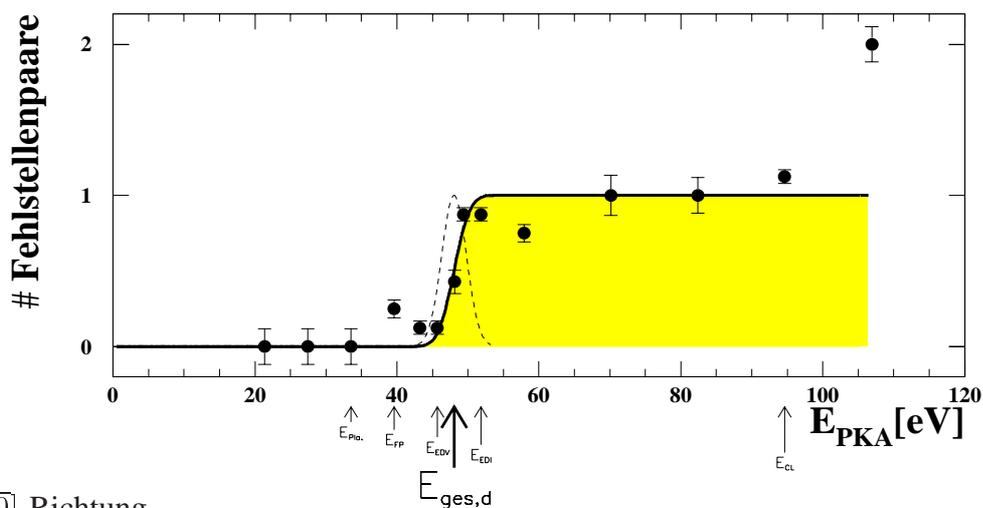
Für jede dieser Klassen zeigt Abbildung 6.1 je ein Beispiel, in dem die Anzahl der erzeugten Fehlstellenpaare gegen die PKA-Energie aufgetragen ist.

### 6.3.1 I-Schwelle

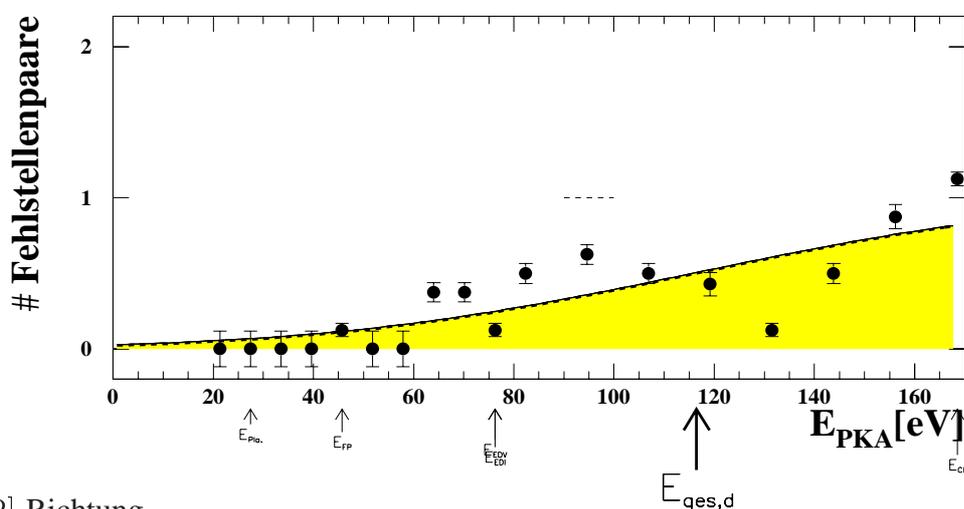
Diese Form zeichnet sich durch einen steilen, stufenförmigen Übergang von  $f(E) = 0$  auf  $f(E) = 1$  aus, was kleinen Werten in der Breite  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} \approx 0-2$  eV entspricht. Diese Schwelle trat in

<sup>1</sup>Der Effekt der Rekombination jenseits der Schwelle wurde nach [MBPP94b] zuerst von [KB81] in Kupfer gesehen.

a) z.B.  $[320]$ -Richtung



b) z.B.  $[310]$ -Richtung



c) z.B.  $[322]$ -Richtung

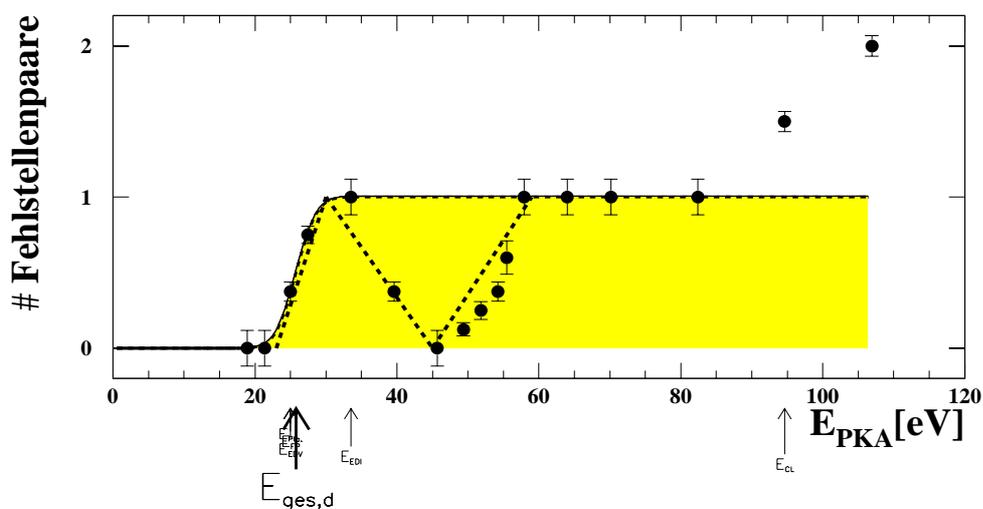


Abbildung 6.1: Schwellenklassen: **a)** I-Schwelle. Die gestrichelte Linie zeigt die zu der Schwellenfunktion gehörende Gauß-Kurve im Bereich  $\pm 3\sigma$ . **b)** /-Schwelle. Der Wert der Schwelle ist sehr hoch. Der dargestellte Energiebereich reicht bis zu  $E_{PKA} \approx 170$  eV. **c)** N-Schwelle. Zur Verdeutlichung der Namensgebung wurde das N gestrichelt eingezeichnet.

den folgenden Kristallrichtungen auf:

[330]			[333]
[320]			
	[311]'		
[300]			

$\overline{[330]}$ *	[331]		[333]
$\overline{[300]}$ *			

In sechs von neun Fällen sind das Hochsymmetriesichtungen ([100], [110], [111]). Die [311]'-Richtung ist mit einem (') versehen, da eine eindeutige Einteilung in I oder N-Schwelle nicht möglich war. Die der [300]-Richtung äquivalente  $\overline{[300]}$ -Richtung wurde ebenso wie die  $\overline{[330]}$ -Richtung nicht extra simuliert. Beide sind mit einem (\*) markiert.

### 6.3.2 /-Schwelle

Diese Schwelle hat die Form einer Rampe. Der Funktionsverlauf der Schwellenfunktion  $f(E)$  steigt langsam von  $f(E) = 0$  auf  $f(E) = 1$ , was sich in der Namensgebung durch die flachere Steigung von dem Zeichen "l" im Vergleich zu dem Buchstaben "I" widerspiegelt. Die /-Schwelle ist eine sehr breite Schwelle mit Werten von  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} \approx 10\text{--}30$  eV.

[310]			

[320]	[321]'		
[310]			

Die  $\overline{[321]}$ '-Richtung ist mit einem (') versehen, da eine eindeutige Einteilung in /- oder N-Schwelle nicht möglich war. In den /-Richtungen ist selbst bei Energien von  $E_{\text{PKA}} \approx 160$  eV in seltenen Fällen nur Umordnungen der Atome geschehen. Der Kristall weist aber keinen Defekt auf. In diesen Richtungen waren die Schwellenenergien mit Abstand am höchsten.

### 6.3.3 N-Schwelle

In der Abbildung 6.1c ist die Anzahl der Fehlstellenpaare der [322]-Richtung dargestellt. Bei der Energie  $E_{\text{PKA}} = 21.3$  eV unterhalb der Schwelle finden in der SZ noch nicht einmal Platzwechsel statt; dort ist  $f(E) = 0$ . Bei der PKA-Energie  $E_{\text{PKA}} = 33.5$  eV ist in jedem Simulationslauf ein Fehlstellenpaar entstanden; dort ist  $f(E) = 1$ . Die Schwelle selbst liegt bei  $E_{\text{ges,d}} = 25.8$  eV. Bei einer weiteren Steigerung der PKA-Energie finden bei  $E_{\text{PKA}} = 45.7$  eV ausschließlich Platzwechsel statt. Die SZ ist frei von Defekten. Nach einer weiteren Steigerung der PKA-Energie wird bei  $E_{\text{PKA}} = 57.9$  eV genau ein Fehlstellenpaar erzeugt. Die Form der Schwelle gleicht dem

Buchstaben “N”. Folgende Kristallrichtungen zeigten diese Form.

	[331]	[332]	
	[321]	[322]	
	[311]'		

		[332]	
	[321]'	[322]	
	[311]		

Die  $[311]'$ - und die  $[\bar{3}21]'$ -Richtung sind nicht eindeutig einzuordnen.

### 6.3.4 Kristallrichtungen mit nicht monotonem Verlauf

Bei drei der 18 simulierten Kristallrichtungen ist der Verlauf der Fehlstellenpaare nicht monoton in der Abhängigkeit von der PKA-Energie. In zwei Fällen ist es eine Folge einer verzögerten Schwelle. Eine streng monotonen Schwellenfunktion  $f(E)$  an nicht monotone Daten anzupassen resultiert in einem größeren  $\chi^2$ -Wert der Anpassung. Dennoch wird mit der Schwellenfunktion (2.17) der Mittelwert und die Breite der Schwellenenergie sinnvoll definiert. Vor der Aussagekraft der Minimalenergieschwelle muß gerade in diesem Fall wegen der Rekombinationswahrscheinlichkeit gewarnt werden (siehe Abbildung 6.2).

Einzig in der  $[321]$ -Richtung traten Mehrfachdefekte direkt oberhalb der Schwellenenergie auf (siehe Abbildung 6.2c). Die N-Form der Schwelle entsteht hier durch eine rasche Abfolge von mehreren Resonanzenergien. Die erste liegt bei  $E_{\text{PKA}} = 37.5 \text{ eV}$  an der linken aufsteigenden Seite des “N” und erzeugt Frenkel-Paare. Die Minimalenergie zur Erzeugung von Frenkel-Paaren liegt  $\approx 5 \text{ eV}$  tiefer. Eine weitere Resonanzenergie liegt bei  $E_{\text{PKA}} = 43.7 \text{ eV}$  an der rechten Seite des “N”. Das ist die Schwellenenergie zur Erzeugung des in Abschnitt 4.6 beschriebenen Defekt-Clusters mit  $n_{\text{Def}} = 28$  Atomen.

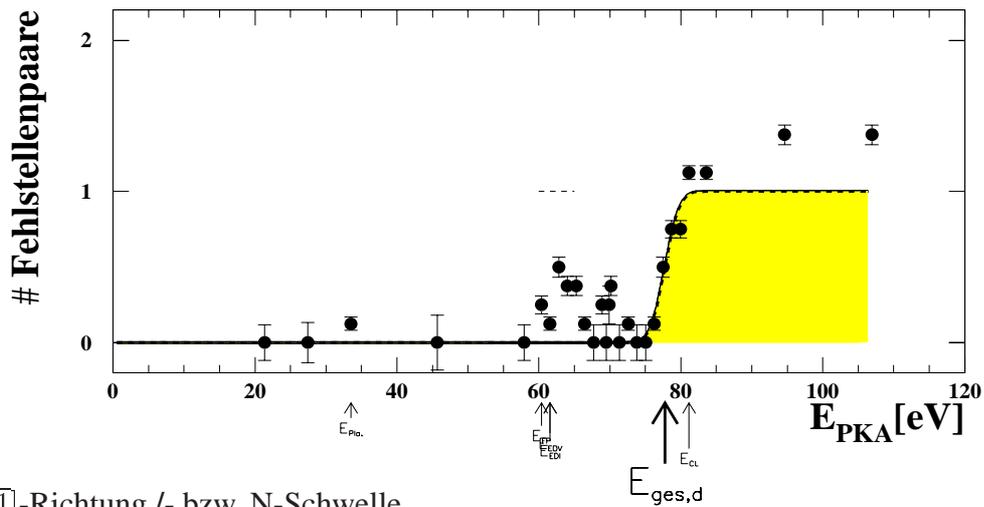
### 6.3.5 Ergebnisse der Anisotropie

Die verschiedenen Schwellen als Funktion der Raumwinkel werden in den Abbildungen 6.3 und 6.4 dargestellt. Alle Schwellenwerte, die hier als Zahlen (in der Einheit [eV]) in der jeweiligen Kristallrichtung eingetragen sind, finden sich im Anhang C.3. Der Grauton ist proportional zum jeweiligen Schwellenwert.

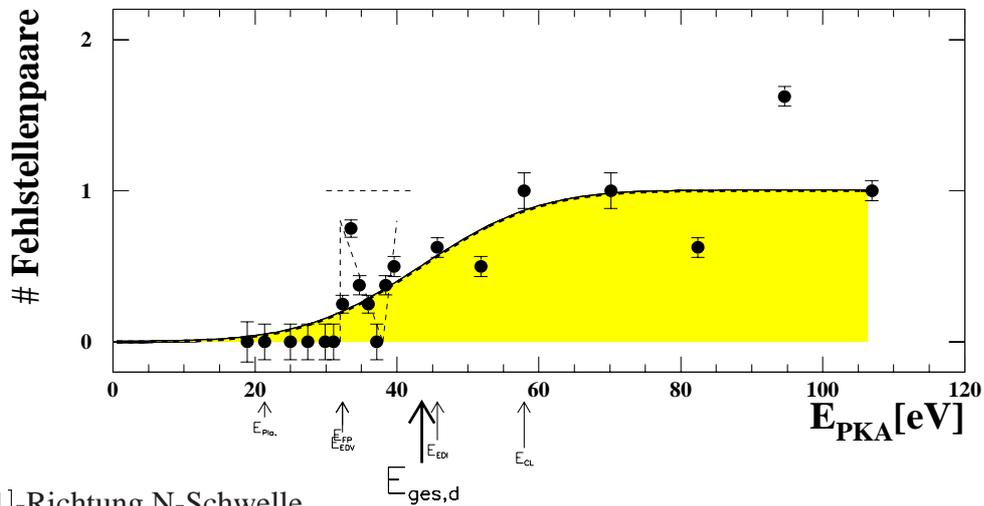
Die Abbildung besteht aus mehreren Teilen:

- a) Kristallrichtungen und die dazugehörigen Schwellenklassen (I,/,N)
- b) Die Richtungsabhängigkeit der Schwellenenergie  $E_{\text{ges,d}}$  ist sehr groß und die Werte der Schwellenenergie für /- und N-Schwellen größer als für I-Schwellen. Die größten Schwellen mit Werten von über 100 eV liegen in der  $[310]$ - und der  $[\bar{3}10]$ -Richtung. Die minimale mittlere Schwelle liegt in der offenen  $[\bar{3}33]$ -Richtung mit dem Wert 17.8 eV.

a) z.B.  $[330]$ -Richtung I-Schwelle



b) z.B.  $[321]$ -Richtung /- bzw. N-Schwelle



c) z.B.  $[321]$ -Richtung N-Schwelle

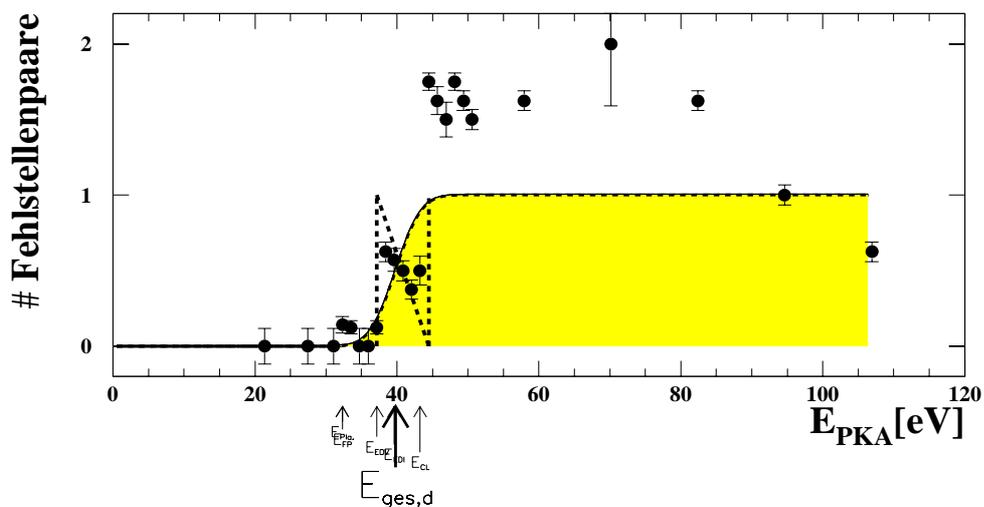


Abbildung 6.2: Kristallrichtungen mit nicht monotoner Abhängigkeit der Fehlstellenpaare von der PKA-Energie.

Der in Teil a) von dem Algorithmus nicht identifizierte Defekt bei  $E_{PKA} = 33.5$  eV wurde visuell als V+SI110L identifiziert. Demnach ist dies die Minimalschwelle für verbundene Einzeldefekte bzw. Frenkel-Paare.

- c) Die Werte der Standardabweichung  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}}$  sind in dem Falle der /- und N-Schwellen besonders groß. Die größten Werte waren in der  $[310]$ -  $[\overline{310}]$ -Richtung mit Werten über 50 eV. Bei einigen I-Schwellen liegen die Werte zwischen 0 und 1 eV und sind nicht als Zahlenwert in der Abbildung eingetragen (genauer Wert: siehe Anhang).
- d) Die Minimalenergieschwelle für die Erzeugung von Platzwechsellatomen  $E_{\text{Pla.,min}}$  zeigt fast keine Richtungsabhängigkeit. Der minimale Wert liegt in der offenen  $[\overline{333}]$ -Richtung. Daran sieht man, daß die Anisotropie der Schwellenenergie nicht allein durch die Richtungen des einfachen Entkommens eines PKA von seinem Gitterplatz bestimmt ist (siehe Abbildung 2.7), sondern der Einfluß der Rekombination die Werte der Schwellenenergie  $E_{\text{ges,d}}$  (Teil b) bestimmt.
- e) Die Minimalenergieschwelle für Frenkel-Paare  $E_{\text{FP,min}}$ ,
- f) für verbundene Einzeldefekte  $E_{\text{EDV,min}}$  und
- g) für isolierte Einzeldefekte  $E_{\text{EDI,min}}$  zeigen eine ähnliche Anisotropie wie  $E_{\text{ges,d}}$  in Teil b. Die Werte der Schwellenenergie für /- und N-Schwellen sind größer als für I-Schwellen.
- h) Auffällig an der Minimalenergieschwelle für Defekt-Cluster (mit  $n_{\text{Def}} > 19$ )  $E_{\text{CL,min}}$  ist die  $[\overline{333}]$ -Richtung, deren Schwelle  $E_{\text{CL,min}} = 18.3$  eV den kleinsten Wert hat. Dies ist ein Resonanzeffekt, da bei größeren PKA-Energien  $E_{\text{PKA}} = 20$  eV bzw. 30 eV keine Mehrfachdefekte mehr auftreten. In den Richtungen  $[311]$ ,  $[322]$ ,  $[332]$ ,  $[333]$ ,  $[\overline{311}]$  und  $[\overline{332}]$  wurde gar kein Defekt-Cluster in dem untersuchten Bereich der Schwellenenergie gefunden.

Die verschiedenen Schwellenenergien unterscheiden sich bei gleicher Richtung aber inäquivalenten Atomen kaum.

## 6.4 Gemittelter Schwellenwert

Der Schwellenwert  $E_{\text{ges,D}}$  für den gesamten Raumwinkel wird folgendermaßen als Mittelwert bestimmt. Bei acht PKA-Energien werden jeweils acht Simulationsläufe in alle 18 Richtungen berechnet. Dann werden bei allen 144 Simulationsläufen jeder Energie die Anzahl der Fehlstellenpaare nach Gleichung (3.24) bestimmt. Aus den Werten  $\#FSP_d([hkl])$  der einzelnen Kristallrichtungen wird nach Gleichung (3.13) die über den Raumwinkel gemittelte mittlere Anzahl der Fehlstellenpaare  $\#FSP_D$  gegen die PKA-Energie aufgetragen und die Schwellenenergie durch Anpassung der Parameter der Schwellenfunktion (2.17) bestimmt (siehe Tabelle 6.1 und Abbildung 6.5).

Der Schwellenwert  $E_{\text{ges,D}}$  für den gesamten Raumwinkel ist dann

$$E_{\text{ges,D}} = (43.6 \pm 0.1) \text{ eV.} \quad (6.2)$$

Ebenso berechnet sich die mittlere Standardabweichung

$$\sigma_{E_{\text{ges,D}}} = (16.3 \pm 0.1) \text{ eV.} \quad (6.3)$$

a) Richtung und Schwellenklasse

330 I	331 N	332 N	333 I	$\bar{3}30^*$ I	$\bar{3}31$ I	$\bar{3}32$ N	$\bar{3}33$ I
320 I	321 N	322 N		$\bar{3}20$ /	$\bar{3}21$ /,N	$\bar{3}22$ N	
310 /	311 I,N			$\bar{3}10$ /	$\bar{3}11$ N		
300 I				$\bar{3}00^*$ I			

b) Schwellenenergie gesamte Fehlstellenpaare  $E_{\text{ges,d}}$  [eV]

77	38	24	22	77	59	21	17
48	39	25		47	43	21	
107	36			116	22		
25				25			

c) Breite  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}}$  [eV]

1	1			1	1	1	
1	2	2		11	13		
57				58			

d) Schwellenenergie Platzw.  $E_{\text{Platzw.,min}}$  [eV]

33	37	23	22	33	27	18	17
33	32	24		33	21	18	
27	33			27	22		
23				23			

Abbildung 6.3: Defektkontur. Alle Werte, die hier als Zahlen (in der Einheit [eV]) in der jeweiligen Kristallrichtung eingetragen sind, finden sich im Anhang C.3. Der Grauton ist proportional zum jeweiligen Schwellenwert.

**a)** Richtung und Schwellenklasse (I/,N) **b)** Schwellenenergie  $E_{\text{ges,d}}$  der Meßwerte, gewonnen durch Anpassung der Schwellenfunktion  $f(E)$ , **c)** Standardabweichung  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}}$  der Schwelle  $E_{\text{ges,d}}$ , **d)** minimale Schwellenenergie für Platzwechselfvorgänge  $E_{\text{Platzw.,min}}$ .

e) Schwellenenergie Frenkel–Paare  $E_{FP,min}$  [eV]

60	37	23	21	60	57	18	17
39	32	24		39	32	21	
62	36			45	22		
25				25			

f) Schwellenenergie verbundene ED  $E_{EDV,min}$  [eV]

61	38	23	21	61	57	18	17
45	37	24		45	32	21	
62	36			76	22		
25				25			

g) Schwellenenergie isolierte ED  $E_{EDI,min}$  [eV]

61	39	42	22	61	57	21	17
51	39	33		57	45	23	
62	39			76	24		
27				27			

h) Schwellenenergie Defekt–Cluster  $E_{CL,min}$  [eV]

81	70	106	106	81	106	82	18
94	43	94		106	57	57	
143	106			168	106		
57				57			

Abbildung 6.4: Defektkontur. Alle Werte, die hier als Zahlen (in der Einheit [eV]) in der jeweiligen Kristallrichtung eingetragen sind, finden sich im Anhang C.3. Der Grauton ist proportional zum jeweiligen Schwellenwert.

**e)** minimale Schwellenenergie für Frenkel–Paare  $E_{FP,min}$ , **f)** minimale Schwellenenergie für verbundene Einzeldefekte  $E_{EDV,min}$  **g)** minimale Schwellenenergie für isolierte Einzeldefekte  $E_{EDI,min}$  **h)** minimale Schwellenenergie für Defekt–Cluster (mit  $n_{Def} > 19$ )  $E_{CL,min}$ .

Ein Test der Konsistenz erlaubt das nach Gleichung (3.13) gewonnene gewichtete Mittel aus den Werten  $E_{ges,d}([hkl])$  der einzelnen Kristallrichtungen. Der Schwellenwert  $\overline{E_{ges,d}}$  für den gesamten Raumwinkel ist dann

$$\overline{E_{ges,d}} = (48.0 \pm 2.2) \text{ eV.} \quad (6.4)$$

Innerhalb der Fehlergrenzen stimmen  $\overline{E_{ges,d}}$  und  $E_{ges,D}$  überein, wobei  $E_{ges,D}$  aus der genaueren Methode zur Berechnung der Schwellenenergie stammt. Die mittlere Standardabweichung

$$\overline{\sigma_{E_{ges,d}}} = (10.4 \pm 0.9) \text{ eV.} \quad (6.5)$$

ist etwas geringer als der Wert  $\sigma_{E_{ges,D}}$  aus Gleichung (6.3). Das kommt daher, daß diese Methode der Mittelwertbildung als  $\overline{E_{ges,d}}$  den Effekt der Rekombination nicht berücksichtigt. Dieser hat in den einzelnen Kristallrichtungen als ‘‘Rekombination nach der Schwelle’’ nur sehr wenig Einfluß auf  $E_{ges,d}([hkl])$  und die Breite  $\sigma_{E_{ges,d}}([hkl])$ . Anders ist es bei der Bestimmung von  $E_{ges,D}$ . Hier hat die gemittelte Anzahl der Fehlstellenpaare einen monoton steigenden Verlauf.

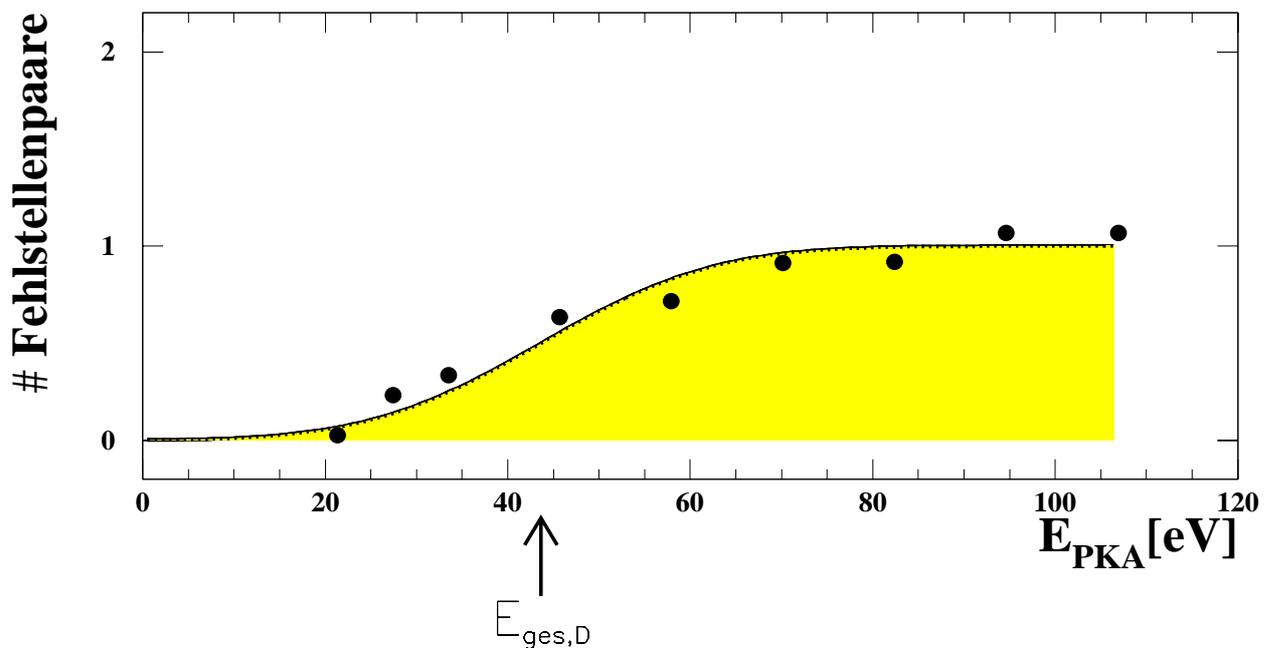


Abbildung 6.5: Bestimmung des Gesamtergebnisses  $E_{ges,D}$  des Mittelwerts der Schwellenenergie über die Kristallrichtungen

## 6.5 Vergleich mit Literaturwerten

Literaturwerte der Schwellenenergie sowohl aus Experimenten als auch aus Simulationen sind in Tabelle 6.2 dargestellt. Sämtliche Angaben in dieser Tabelle beziehen sich auf die Minimalschwellenenergie für Einzeldefekte. Die Literaturwerte sind mit der Schwelle  $E_{FP,min}$  dieser Arbeit verglichen. Bei Elektronenstrahllexperimenten ist sowohl die minimale Elektronenenergie der jeweiligen

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	33.5	45.7	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	134	142	139	143	133	135	143	143

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	0.27	2.96	4.26	4.99	6.53	6.59	7.33	7.56
HOP	0.39	1.15	1.37	1.41	1.33	1.86	1.99	2.94
a) $\sum$ FP	0.01	0.02	0.09	0.04	0.04	0.02	0.03	0.03
b) $\sum$ EDV	-	0.10	0.20	0.13	0.08	0.05	0.08	0.06
c) $\sum$ EDI	0.01	0.22	0.19	0.42	0.70	0.69	0.73	0.71

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	2	1	1	3
FP110ED	-	3	10	1	2	2	3	2
FP110	1	-	3	4	1	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	12	19	16	9	6	9	6
V+SI110	-	2	9	2	1	1	3	3
V+SI110L	-	-	-	1	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	1	31	25	54	89	89	93	82
SI110E	1	3	15	29	55	48	66	69
SI110	-	23	10	28	31	34	29	25
SI110L	-	-	-	1	-	-	-	2
IT	-	-	-	1	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	3
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-
II110	-	-	-	-	2	-	1	-
II111	-	-	-	-	-	1	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	2	1	1	2
VZF: $2 < n \leq 10$	-	6	2	4	5	4	9	9
DEF: $10 < n \leq 19$	3	10	7	9	11	14	14	11
CL: $n > 19$	-	-	6	6	4	9	12	21

Tabelle 6.1: Bestimmung des Gesamtergebnisses  $E_{ges,D}$  des Mittelwerts der Schwellenenergie über die Kristallrichtungen.

Autoren als auch die Umrechnung auf die maximale PKA-Energie nach der Stoßkinetik angegeben (Gleichung (2.10)). Die Angaben sind nach dem Publikationsjahr geordnet und beginnen mit der schon beschriebenen Arbeit von Seitz [Sei49].

Die experimentellen Arbeiten umfassen den Zeitraum von 1955 bis 1986. Die dort bestimmte Schwellenenergie variiert von  $E_{\min} = 11$  eV bis  $E_{\min} = 28$  eV. Eine Beschreibung der Schwierigkeiten der experimentellen Bestimmung von  $E_{\min}$  findet sich u.a. in [LB83].

Simulationsrechnungen mit dem SW-Potential [CDdIRG94] und mit dem Tersoff [Ter89]-Potential [MBPP94b], [MBPP94a] haben die Schwellenenergie in Abhängigkeit von der Kristallrichtung bestimmt. Die Werte liegen im Bereich von  $E_{\min} = 10$  eV bis 45 eV. Die detaillierte Winkelabhängigkeit ist im Vergleich mit den Werten dieser Arbeit in Abbildung 6.6 gezeigt. Die Werte mit dem SW-Potential von [CDdIRG94] stimmen gut mit den Werten der Minimalschwelle dieser Arbeit überein. Leider geht aus [MBPP94b] [MBPP94a] nicht hervor, welches PKA benutzt wurde bzw. ob in die “+ + +”- oder die “- - -”-Richtung geschossen wurde. Aus diesem Grunde sind die Werte in beiden Richtungen eingetragen. Die Autoren geben selbst an, daß ihre Absolutwerte einen Faktor 2/3 zu klein sind im Vergleich mit Werten von [HS68] [HS70], sagen aber nicht, warum. Ihre Richtungsabhängigkeit stimme jedoch sehr gut mit [HS68] [HS70] überein. Diese ist sehr klein verglichen mit der Anisotropie bei Benutzung des SP-Potentials. Diese MD-Simulationen ([CDdIRG94], [MBPP94b], [MBPP94a]) benutzen die PKA-Energie ohne Energieskalierung nach der Lindhard-Theorie. Ihre Schwellenenergien sind demnach 10–15% zu niedrig (Abschnitt 2.2). Ob die deutliche Anisotropie ein Artefakt des SW-Potentials ist, ist noch nicht geklärt. Das Tersoff-Potential zeigt keine so ausgeprägte Abhängigkeit der Minimalschwelle von der Kristallrichtung.

BC-Simulationen (TRIM, MARLOWE) rechnen für Silizium mit einer Schwellenenergie von  $E_{\min} = 15$ –25 eV. Dieser Wert ist wegen der diskutierten Rekombinationswahrscheinlichkeit fast einen Faktor  $\approx 2$ –3 zu klein. BC-Simulationen sollten zukünftig den Wert  $E_{\text{ges,D}} = 43.6$  eV nach (6.2) benutzen, die mittels Schwellenfunktion (2.17) gewonnen wurde.

Zitat	Schwellenenergie des PKA	Methode (eventuell Elektronenenergieschwelle $E_B$ )
[Sei49]	$E_{FP,min} \approx 25 \text{ eV}$	Theoretische Abschätzung als $E_{FP,min} \approx 4E_S$ vierfache Sublimationsenergie.
[LR55]	$E_{FP,min} = 26.7 \text{ eV}$	Minority Carrier Lifetime $\tau$ , $T = 290 \text{ K}$
[LR58] [LR59]	$E_{FP,min} = 14.5 \text{ eV}$ $E_{Gl.(2.10)} = 12.9 \text{ eV}$	Minority Carrier Lifetime $\tau$ , $T = 290 \text{ K}$ , $E_B = 145 \text{ keV}$
[VPYG61]	$E_{FP,min} = 14 \text{ eV}$	Messung der Hallkonstanten bei $T = 300 \text{ K}$
[Nov63]	$E_{FP,min} = 21 \text{ eV}$	Messung der Hallkonstanten bei $T \approx 63 \text{ K}$
[CW65]	$E_{FP,min} = 21 \text{ eV}$	Elektron-Paramagnetische-Resonanz(EPR)-Messung. Sehr kleine Abhängigkeit von der Orientierung.
[Gri66] <sup>a</sup>	$E_{FP,min} = 12 \text{ eV}$	Messung des "short circuit current" in Abhängigkeit der Einschußrichtung
[KRV67]	$E_{300\text{K}} \approx 14 \text{ eV}$ , $E_{80\text{K}} \approx 20 \text{ eV}$	Änderung in der elektrischen Leitfähigkeit durch Elektronenbeschuß $E_{B,300\text{K}} = 145 \pm 20 \text{ keV}$ $E_{B,80\text{K}} = 220 \pm 30 \text{ keV}$
[Ban68]	$E_{FP,min} = 22 \text{ eV}$	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration ("carrier removal rate") im Vergleich mit theoretischen Rechnungen.
[HS68] [HS70] <sup>b</sup>	$E_{FP,min<111>} = 22 \text{ eV}$ in anderen Richtungen wahrscheinlich über $30 \text{ eV}$	Temperaturabhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration ("carrier removal rate") bei $T = 80$ und $245 \text{ K}$ im Vergleich mit theoretischen Rechnungen.
[GDPS72]	$E_{FP,min} = 11 \pm 1.1 \text{ eV}$ $\Delta E_{Gl.(2.10)} = 13\text{--}28 \text{ eV}$	Elektron-Paramagnetische-Resonanz(EPR)-Messung der Konzentration einiger Farbzentren, in denen Frenkel-Paare enthalten sind $E_B = 125 \pm 20 \text{ keV}$ $\Delta E = 125\text{--}280 \text{ keV}$
[FADS86]	$E_{FP,min} = 14 \text{ eV}$ $E_{Gl.(2.10)} = 13\text{--}24 \text{ eV}$	Elektronenmikroskopie bei $T = 300\text{--}800 \text{ K}$ $E_B = 145\text{--}250 \text{ keV}$
[MBPP94b] [MBPP94a]	$E_{FP,min} = 10\text{--}20 \text{ eV}$	MD-Simulation mit dem Tersoff-Potential [Ter89]
[CDdIRG94]	$E_{FP,min} = 25\text{--}45 \text{ eV}$	MD-Simulation mit dem SW-Potential
diese Arbeit	$E_{FP,min} = 17\text{--}37 \text{ eV}$	MD-Simulation mit dem SW-Potential.

<sup>a</sup>Diese Literaturangabe wird mehrfach falsch mit dem Wert  $E_{FP,min} = 45 \text{ eV}$  zitiert.

<sup>b</sup>Das Rückstreuungsspektrum wird aus der Elektronen-Strahl-Dispersion und Energieverlust nach der Rutherford-Streuung berechnet. Die Autoren geben sehr geringe Sensitivität im Bereich  $E > 30 \text{ eV}$  an.

Tabelle 6.2: Literaturwerte der Schwellenenergie im Vergleich.

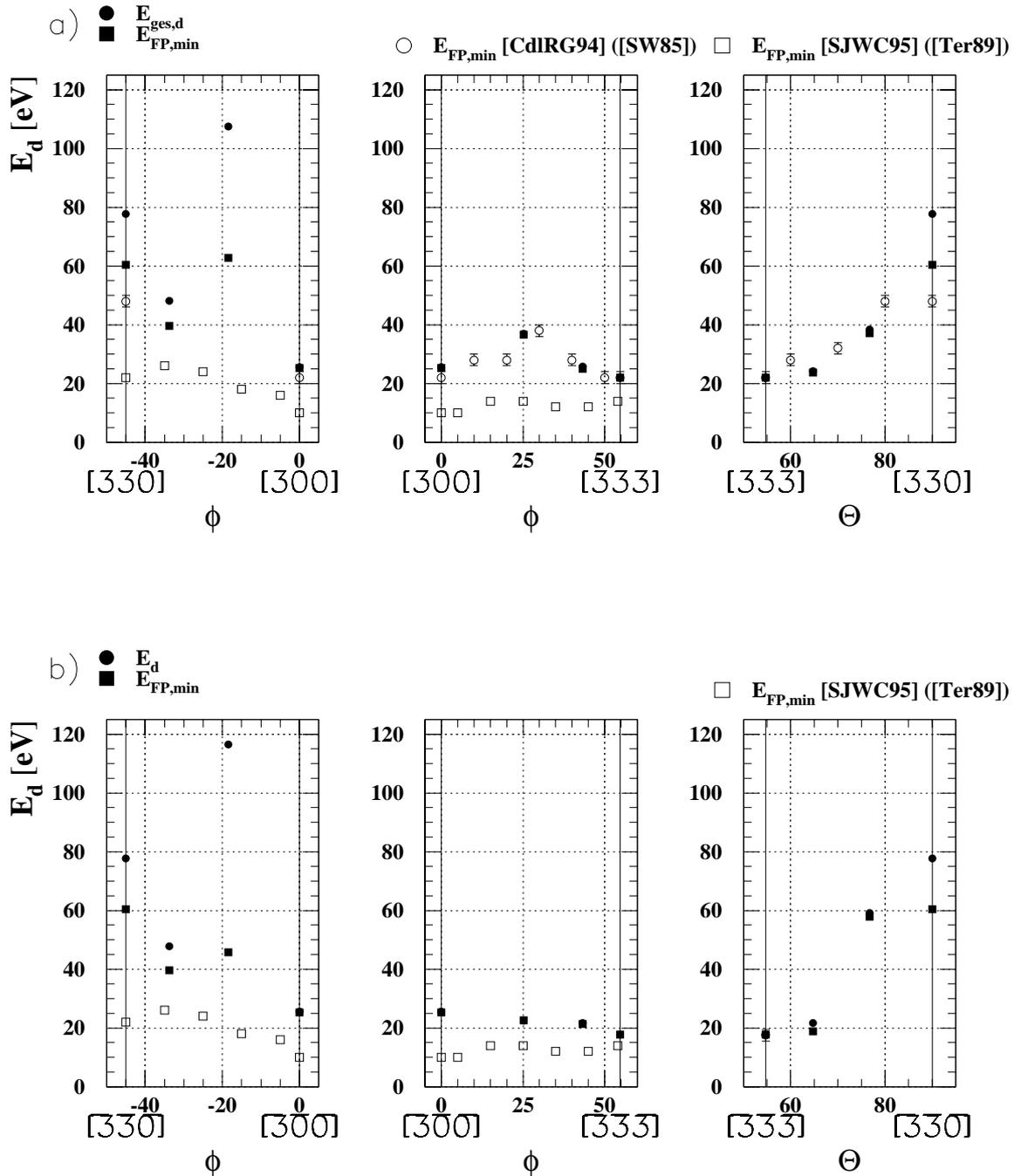


Abbildung 6.6: Abhängigkeit der Schwelle  $E_{\text{ges,d}}$  (●) bzw.  $E_{\text{FP,min}}$  (■) von der Kristallrichtung. Teil a) und b) unterscheiden sich bei gleichem Winkel  $\phi$  bzw.  $\Theta$  in der Kristallrichtung durch ein Vorzeichen.

Neben den ausgefüllten Symbolen, die Werte dieser Arbeit entsprechen, sind Werte von [MB-PP94b], [MBPP94a] (□) bzw. [CdIRG94] (○) eingezeichnet (siehe Text, Winkelbezeichnung Tabelle 3.2c).

In Teil b) ist der Wert  $E_{\text{FP,min}} = 17.5 \text{ eV}$  [CdIRG94] in der  $\overline{[333]}$ -Richtung ( $\Theta = 54.7^\circ$ ) deckungsgleich mit den Werten dieser Arbeit.



# Kapitel 7

## PKA-Energien jenseits der Schwellenenergie

### 7.1 Kinchin-Pease-Gleichung

Die nach Gleichung (3.24) aus der Analyse erhaltene Anzahl der Fehlstellenpaare ist in Abbildung 7.1 in der Lethargie-Darstellung<sup>1</sup> und mit der modifizierten Kinchin-Pease-Gleichung (2.20) verglichen (Daten siehe Tabelle 7.1). Es sind zwei Szenarien mit unterschiedlicher Schwellenenergie eingezeichnet. Zum einen mit dem in der BC-Simulation [MG80] benutzten Wert von 15 eV, zum anderen mit dem aus Gleichung (6.2) gewonnenen Wert von  $E_{\text{ges,D}} = (43.6 \pm 0.1)$  eV. Die Näherung der modifizierten Kinchin-Pease-Gleichung stimmt mit den MD-Werten von der PKA-Energie der Schwelle gut überein, wenn der aus Gleichung (6.2) gewonnene Wert für die Schwellenenergie benutzt wird. Die KP-Gleichung startet bei der jeweiligen Schwellenenergie und ist unterhalb identisch Null, und somit nicht gezeichnet. Diese Abbildung sollte aber auf keinen Fall zu einer Abschätzung der Schwellenenergie mißbraucht werden. Diese wurde in Abschnitt 6 genauer berechnet. Auch der Wert bei  $E_{\text{PKA}} = 1$  keV wurde aus Gleichung (3.24) gewonnen, obwohl bei diesen Energien bei jedem Simulationslauf mindestens ein Defektcluster mit mehr als  $n_{\text{Def}} \geq 19$  Atomen entsteht (Abschnitt 5.3). Die Meßgröße “Anzahl der Fehlstellenpaare” ist in diesem Energiebereich nicht mehr klar definiert. Der Wert dieser Meßgröße der MD-Simulation ist  $\#FSP_{\text{MD}}(E_{\text{PKA}=1 \text{ keV}}) = 7.5$  im gegensatz zu der Kinchin-Pease-Meßgröße  $\#FSP_{\text{KP}}(E_{\text{PKA}=1 \text{ keV}}) = 11.5$ .

#### 7.1.1 Rekombinationsradius

In Abbildung 7.2 ist ebenfalls die der erhaltenen Anzahl der Fehlstellenpaare äquivalente Größe der Anzahl der Leerstellen einer BC-Simulation [MG80] mit dem Programm MARLOWE in der

---

<sup>1</sup>Der Quotient aus der Anzahl der Fehlstellenpaare und der PKA-Energie in eV ist gegen die PKA-Energie aufgetragen.

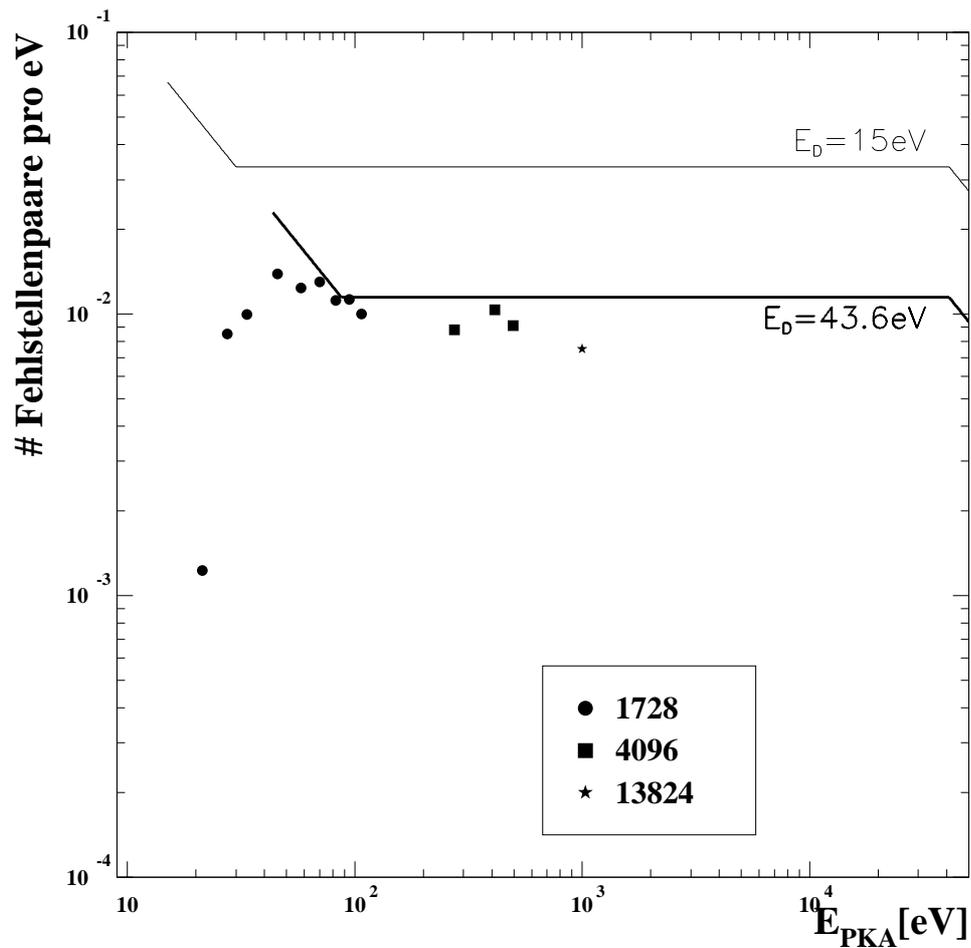


Abbildung 7.1: Anzahl Fehlstellen pro Einschüßenergie, Punkte: gerechnet mit SW-MD, Linie: modifiziertes KP-Modell mit der Schwellenenergie  $E_D$  und der Skalierungsenergie  $E_I = 41.1$  keV

Lethargiedarstellung gegen die PKA-Energie aufgetragen. Die Autoren rechnen mit einer Schwellenenergie von  $E_D = 15$  eV.

Verschiedene Rekombinationsradien sind ebenfalls gezeigt. Der Rekombinationsradius gibt an, wie weit sich Leerstelle und Zwischengitterplatz während der Kaskade voneinander entfernen müssen, um nicht mehr rekombinieren zu können. Die Zahlen geben verschiedene Werte für Rekombinationsradien als Vielfache der Gitterkonstanten an. ALL bedeutet, daß der Rekombinationsradius identisch Null ist, so daß alle Versetzungen als Schaden auftreten und keine Rekombination stattfindet. CLOSE bedeutet einen Rekombinationsradius kleiner als eine Gitterkonstante.

Die MD-Simulationen dieser Arbeit erlauben es eine obere Grenze für den Rekombinationsradius

$N$	$E_{PKA} [\text{eV}]$	$E_{\text{dep}} [\text{eV}]$	$\#FSP$
1728	21.3	$0.1902 \pm 0.0001$	$0.02618 \pm 0.00001$
	27.4	$1.6554 \pm 0.0004$	$0.2328 \pm 0.0001$
	33.5	$2.3664 \pm 0.0004$	$0.3346 \pm 0.0001$
	45.7	$4.2786 \pm 0.0005$	$0.6336 \pm 0.0001$
	57.9	$5.0921 \pm 0.0005$	$0.7172 \pm 0.0001$
	70.1	$6.4136 \pm 0.0004$	$0.9145 \pm 0.0001$
	82.4	$6.5265 \pm 0.0005$	$0.9201 \pm 0.0001$
	94.6	$7.4972 \pm 0.0004$	$1.0676 \pm 0.0001$
	106.9	$7.3988 \pm 0.0005$	$1.0679 \pm 0.0001$
4096	274.3	$15.103 \pm 0.006$	$2.408 \pm 0.001$
	411.8	$17.481 \pm 0.002$	$4.271 \pm 0.002$
	495.9	$23.683 \pm 0.003$	$4.510 \pm 0.001$
13824	1000.0	$45.667 \pm 0.001$	$7.512 \pm 0.0003$

Tabelle 7.1: MD-Simulationsdaten zu Abbildung 7.1.

anzugeben. Dieser ist

$$r_{\text{rek}} \leq \min_{\text{FP}} \left| \vec{S}_{\text{FP}} \right| \quad (7.1)$$

$$\Rightarrow r_{\text{rek}} \leq 0.70a \quad \text{mit } a = 5.34 \text{ \AA}$$

kleiner als der kleinste stabile Abstand  $\min_{\text{FP}} \left| \vec{S}_{\text{FP}} \right|$  zwischen Leerstelle und Zwischengitterplatz.

Das ist in Einklang mit Werten von [SJWC95], die einen Rekombinationsradius im Bereich von  $r_{\text{rek}} = 0.35a$  bis  $0.55a$  für verschiedene Kristallrichtungen mittels MD berechnet haben.

Die in Abbildung 7.1 dargestellten Werte erlauben nur bei einer Wiederholung der BC-Rechnungen mit der Schwellenenergie von  $E_{\text{ges,D}} = (43.6 \pm 0.1) \text{ eV}$  eine für BC-Simulationen sinnvolle Berechnung des Rekombinationsradius. Der Rekombinationsradius ist in diesem Sinne ein Parameter der BC-Simulation, der deshalb auch mittels BC-Simulationen angepaßt werden sollte.

## 7.2 Schaden bei $E_{PKA} = 1 \text{ keV}$ .

Bei der PKA-Energie  $E_{PKA} = 1 \text{ keV}$  war die Anisotropie nicht mehr signifikant. Die Defektzusammensetzung bei der PKA-Energie  $E_{PKA} = 1 \text{ keV}$  ist in Tabelle 7.2 dargestellt. Da sich in Abschnitt 5.3 kein signifikanter Unterschied in den Potentialen (SW bzw. Thomas-Fermi) gezeigt hat, werden hier alle 152 Simulationsläufe verschiedener Kristallrichtungen zusammen analysiert.

Im Mittel wird die Energie

$$\langle E_{\text{dep}} \rangle = 46.1 \pm 1.0 \text{ eV} \quad (7.2)$$

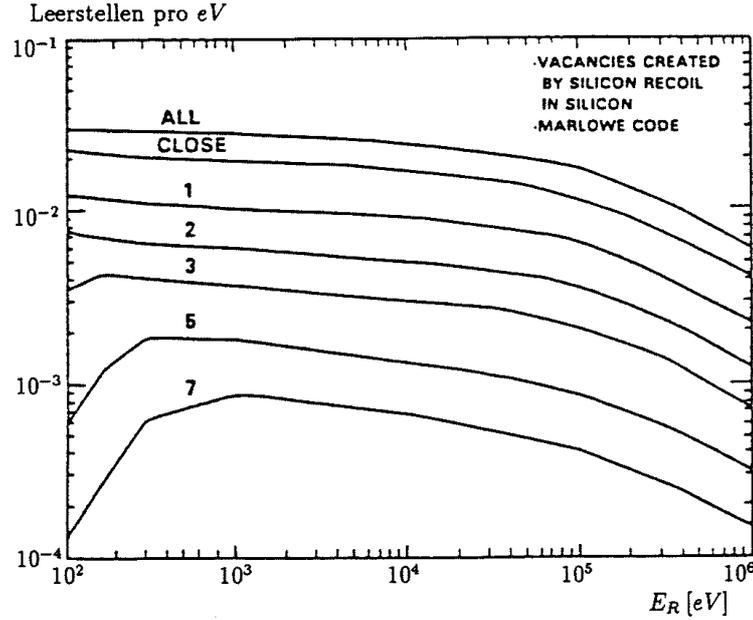


Abbildung 7.2: Anzahl Leerstellen pro Einschussenergie, gerechnet mit MARLOWE nach [MG80] mit einer Schwellenenergie von  $E_D = 15$  eV. (Bezeichnungen siehe Text).

deponiert, und es wechseln

$$\# \text{ Platzwechsel} = 43.2 \pm 3.5 \quad (7.3)$$

Atome ihren Platz mit einem anderen Atom, ohne dabei einen Defekt zu formen. Die Einzeldefekte setzten sich wie folgt aus Frenkel-Paaren (FP), über ihr Verzerrungsfeld verbundenen Einzeldefekten (EDV) und isolierten Einzeldefekten (EDI) zusammen:

$$\text{FP} = 0.12 \pm 0.01, \quad (7.4)$$

$$\text{EDV} = 0.07 \pm 0.01, \quad (7.5)$$

$$\text{EDI} = 2.68 \pm 0.22. \quad (7.6)$$

Die Simulationen zeigen die Entstehung weniger Frenkel-Paare im Vergleich zu isolierten Leerstellen und Zwischengitterplätzen in statistisch signifikanter Weise. Die Ergebnisse bestätigen [ADDIR97] in quantitativer Weise, die diese Vermutung äußern. Es traten Doppelleerstellen (VV) und Doppelzwischengitterplätze (II) auf:

$$\text{VV} = 0.053 \pm 0.004 \quad (7.7)$$

$$\text{II} = 0.112 \pm 0.009. \quad (7.8)$$

Außerdem kamen Defekt-Cluster mit  $n_{\text{Def}} > 19$  Atomen pro Defekt vor:

$$\text{Defekt-Cluster} = 1.36 \pm 0.11. \quad (7.9)$$

Der zweitgrößte Anteil der Schäden nach den isolierten Einzeldefekten sind Defekt-Cluster mit  $n_{\text{Def}} > 19$ . Die Kenngrößen dieser Defekte sind im Anhang C.1.1 gezeigt. Vier Beispiele sind

in Abbildung 7.2 dargestellt. Die Randbereiche dieser Defekt-Cluster sind als verbundene Einzeldefekte zu erkennen, während die inneren Bereiche auch visuell nicht weiter identifizierbar sind. [CDdIRMG96] nennen den so entstandenen Schaden “amorphous pockets”. Sie simulieren den Beschuß schwerer Atome (bzw. Ionen) in Silizium mittels SW-MD.

### 7.2.1 Verhältnis von Leerstellen zu Zwischengitterplätzen

Experimentelle “Deep Level Transient Spectroscopy” DLTS-Messungen an Silizium wurden von [MHF<sup>+</sup>97] durchgeführt. Dabei wurde das DLTS-Spektrum von Silizium, das mit Neutronen der Energie  $E_{\text{Neutron}} \approx 1 \text{ MeV}$  bestrahlt wurde, mit dem DLTS-Spektrum von Silizium, das mit Gamma-Quanten einer  $^{60}\text{Co}$ -Quelle bestrahlt wurde, verglichen. Die Differenz der beiden Spektren rührt von der Tatsache her, daß der Energietransfer der Gamma-Quanten auf Silizium-Atome zu klein ist, um Defekt-Cluster zu erzeugen. Nach Tabelle 2.1 erzeugen diese Neutronen PKA-Energien von  $\langle E_{PKA} \rangle \approx 50 \text{ keV}$ . Der Vergleich der DLTS-Spektren erlaubt demnach den Einfluß der verschiedenen Defekte (Einzeldefekte im Vergleich mit Defekt-Clustern) auf das DLTS-Signal zu messen.

Nach [MHF<sup>+</sup>97] ist das Verhältnis zwischen Leerstellendefekten zu Zwischengitterplatzdefekten ( $V/I$ ) davon abhängig, ob sich Cluster bilden. Bei der Größe  $V/I$  werden Doppeldefekte mitgerechnet. So zählt eine Doppelleerstelle als zwei Leerstellen-induzierte Defekte. Das Verhältnis bei  $^{60}\text{Co}$ - $\gamma$  Bestrahlung ist

$$V/I|_{\text{exp.}} = 1. \quad (7.10)$$

Bei Neutronen-Bestrahlung wird das Verhältnis

$$V/I|_{\text{exp.}} = 1.36 \quad (7.11)$$

gefunden. Hier entstehen PKA-Energien von ca.  $\langle E_{PKA} \rangle \approx 50 \text{ keV}$  und damit auch Cluster.

Die MD-Simulationsrechnungen dieser Arbeit ergeben bei PKA-Energien im Bereich der Schwellenenergie ein Verhältniss von

$$V/I|_{\text{sw}} = 1. \quad (7.12)$$

Bei  $E_{PKA} = 1 \text{ keV}$  dagegen ergibt sich ein Verhältnis

$$V/I|_{\text{sw}} = 256/430 = 0.6 < 1 \quad (7.13)$$

kleiner als 1. MD-Defekt-Cluster sind also reicher an Leerstellen. Die unterschiedlichen  $V/I$ -Werte in Messung und Simulation können viele Ursachen haben. Die unterschiedliche Zeitskala der DLTS-Messung (einige Minuten) und der MD-Simulationen ( $\approx 10 \text{ ps}$ ) hat dabei den größten Anteil. Es stellt sich die Frage, ob Defekt-Cluster auf einer langen Zeitskala rekombinieren und dabei Leerstellen emittieren bzw. verdampfen können. Detaillierte Studien zum Ausheilverhalten von Defekt-Clustern nach dem Ansatz von [CDdIRMG96] sind notwendig. MD-Simulationen mit PKA-Energien von  $E_{PKA} \approx 50 \text{ keV}$ , also im Bereich der Skalierungsenergie  $E_I$ , sind heutzutage

$E_{PKA}$ [eV]	1000
$E_{MD}$ [eV]	786.604
# Sim.-Läufe	152

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	$46.1 \pm 1.0$
Platzw.	$43.2 \pm 3.5$
a) $\sum$ FP	$0.12 \pm 0.01$
b) $\sum$ EDV	$0.07 \pm 0.01$
c) $\sum$ EDI	$2.68 \pm 0.22$

a) FP:

FP110E	13
FP110	-
FP110ED	5

b) verbundene ED:

V+SI110E	10
V+SI110	1
V+110L	-

c) isolierte ED:

V	211
SI110E	281
SI110	85
SI110L	1
IT	-

DD:

V+V	-
VV	8
VVD	-
II110	11
II111	6

sonstige:

CEa+CEb	-
VZF: $n = 1$	6
VZF: $n = 2$	9
VZF: $2 < n \leq 10$	38
DEF: $10 < n \leq 19$	89
CL: $n > 19$	207

Tabelle 7.2: Defektzusammensetzung bei  $E_{PKA} = 1$  keV.

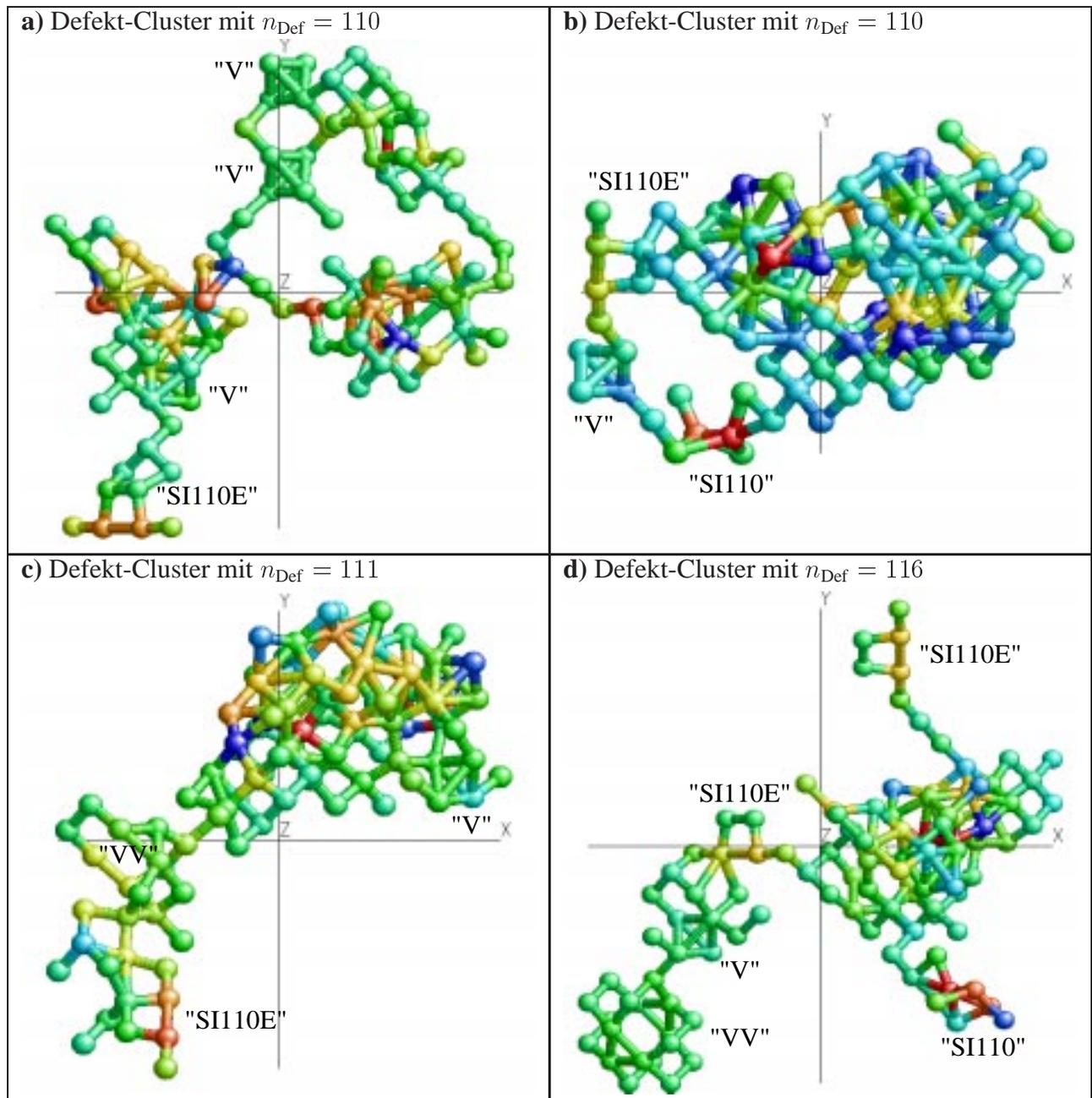


Abbildung 7.3: Beispiele der entstandenen Defekt-Cluster bei einer PKA-Energie von  $E_{PKA} = 1 \text{ keV}$ . Im Gegensatz zu der Darstellung der Defekt-Cluster in Abbildung 4.5c,d sind hier die Atome des Verzerrungsfeldes nicht gezeigt, sondern nur die  $n_{\text{Def}}$  Atome.

mit der nötigen Statistik noch nicht gerechnet. Um eine reine MD-Rechnung mit einer Endtemperatur unter  $T_{\max} = 800$  K durchzuführen, würden etwa  $N = 300000$  Atome in der SZ benötigt. Zwar ist bei den MD-Simulationen dieser Arbeit die Schwelle zu der Erzeugung von Defekt-Clustern erreicht worden (siehe Abbildung 7.2 und Anhang C.1.1), doch kann das Verhältnis bei einer PKA-Energie, die einen Faktor 50 größer ist, auch ganz anders aussehen.

# Zusammenfassung

Es wurden molekulardynamische Simulationen zu Strahlenschäden in Silizium durchgeführt. Das benutzte Potential von Stillinger und Weber wurde für Silizium konstruiert und beschreibt die kovalente Bindung mit einem Dreikörperpotential. Die Simulation verlief so, daß einem ausgewählten Atom (PKA) ein Impuls entsprechend einer kinetischen Energie zwischen 10 eV und 1000 eV übertragen wurde. Die Vorgehensweise wird durch experimentelle Messungen gerechtfertigt, die zeigen, daß die Kristallschädigung durch direkte Stöße der Silizium-Atome herrührt. Die Größe der Superzelle (SZ) wurde stets so gewählt, das der Temperaturanstieg nach dem Stoß niedrig genug war, keine vermehrten Rekombinationen hervorzurufen. Die Anzahl  $N$  der Atome in der SZ stieg von  $N=1728$  bis auf  $N=13824$  an. Im Bereich der Schwellenenergie waren 3000 Simulationsläufe (SL) notwendig, insbesondere wegen der starken Anisotropie von Lage und Breite der Schwellen.

Die insgesamt 4000 erzeugten Defekte wurden von einem Selektionsalgorithmus zu 90 % identifiziert, wobei die jeweilige Geometrie analysiert wurde. Dabei wurden bekannte Defekt-Konfigurationen bestätigt und neue gefunden. Die Anzahl der Fehlstellenpaare konnte auch bei den nicht identifizierten Defekten, in der Regel Defekt-Cluster bestehend aus mehr als 20 Atomen, bestimmt werden.

So konnten Minimalenergien für die Bildung von isolierten Leerstellen (V) und interstitiellen Defekten (I), Frenkel-Paaren (Komplexen aus eng benachbarten V-I-Defekten) oder auch Defekt-Clustern bestimmt werden. Die Energien stimmen gut mit experimentell gefundenen Werten überein. Besonders detailliert wurde die mittlere Schwellenenergie für Einzeldefekte und ihre Breite als Funktion der PKA-Richtung untersucht. Der Grund dafür war, daß es aus verschiedenen MD-Simulationen einerseits Hinweise auf eine stärkere Anisotropie gab, andererseits auch fast völlig isotrope Werte angegeben wurden. In unserer Untersuchung wurde eine sehr starke Anisotropie sowohl der Schwellenenergie als auch der Breite gefunden. So liegt die Schwellenenergie in der "offenen"  $[333]$ -Richtung (Stoß in die Tetraeder-Lücke) bei 17.8 eV (Breite 0.2 eV), andererseits in der  $[\bar{3}10]$ -Richtung bei 116 eV (bei einer Breite von 58 eV). Oberhalb der Schwellenenergien werden häufig Rekombinationseffekte beobachtet, d.h. bei höheren PKA-Energien treten weniger Defekte auf. Räumlich gemittelt liegt die mittlere Schwellenenergie bei 43.6 eV mit einer Breite von 15 eV. Dieser Wert liegt deutlich über den bisher in "Binary-Collision"-Simulationen benutzten Werten, die zwischen 15 eV und 25 eV liegen.

Bei der PKA-Energie  $E_{PKA} = 1$  keV war die Anisotropie nicht mehr signifikant. Neben den  $2.68 \pm 0.22$  erzeugten isolierten Einzeldefekten traten auch  $1.36 \pm 0.09$  Defekt-Cluster pro SL auf.

Das Verhältnis der Häufigkeiten von V- und I-Defekten liegt bei  $n_V/n_I = 0.6$ . Daraus geht hervor, daß die Defekt-Cluster reicher an Leerstellen (V) als an Zwischengitterplätzen (I) sind. Die PKA-Energie von 1 keV wurde deshalb genauer untersucht, da in naher Zukunft Messungen zum Vergleich zur Verfügung stehen werden, bei denen Silizium Atome nach Neutronen-Einfang und sofortiger Gamma-Emission genau diese Rückstoßenergie haben. Für PKA-Energien von  $\approx 50$  keV liegt der experimentelle Wert für das Verhältnis  $n_V/n_I$  bei 1.36. Es bleibt abzuwarten, ob ähnliche Werte auch bei 1 keV gefunden werden.

# Anhang A

## Raumwinkelmittelung

Gesucht sind die Gewichte  $G([hkl])$  der Funktion

$$f_D = \sum_{\Omega} G([hkl]) \cdot f_a([hkl]) \quad (\text{A.1})$$

zur Berechnung eines Mittelwerts einer Meßgröße  $f_a([hkl])$  der einzelnen Kristallrichtungen. Eine gute Näherung ist die lokal planaren Gewichtung

$$G_{LP} = \begin{array}{cccc} & 330 & & 333 \\ \hline 2 & 4 & 4 & 1 \\ \hline 4 & 8 & 4 & \\ \hline 4 & 4 & & \\ \hline 1 & & & \\ \hline & 300 & & \end{array}, \quad (\text{A.2})$$

in der angenommen wird, daß jeder Einheitsraumwinkel gleich groß ist. Verbessert wird diese Näherung, wenn die Gewichte  $G_{LP}$  mit der Größe der sphärischen Oberflächenelemente

$$G_{\text{sph. WSO}} = \begin{array}{cccc} & 330 & & 333 \\ \hline 14 & 13 & 12 & 11 \\ \hline 15 & 14 & 13 & \\ \hline 16 & 15 & & \\ \hline 17 & & & \\ \hline & 300 & & \end{array} \quad (\text{A.3})$$

nach einer Wigner-Seitz-Konstruktion skaliert werden.

$$G([hkl]) = G_{LP} \cdot G_{\text{sphä. WSO}}$$

$$= \begin{array}{cccc} & 330 & & 333 \\ \hline 28 & 52 & 48 & 11 \\ \hline 60 & 112 & 52 & \\ \hline 64 & 60 & & \\ \hline 17 & & & \\ \hline & 300 & & \end{array} \quad (\text{A.4})$$

Die Gewichte in Gleichung (3.13) wurden so berechnet.

# Anhang B

## Vermeidung unphysikalischer Kühlung

Die Gleichung für die Wärmeleitung lautet

$$\begin{aligned} F &= -K \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{K}{c\rho} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

wobei  $F$  der Wärmefluß in  $x$ -Richtung beschreibt,  $\rho$  die Dichte und  $c$  die spezifische Wärme, so daß  $\rho c$  die Wärmekapazität pro Einheitsvolumen beschreibt. Mit der thermischen Leitfähigkeit  $K = 148 \text{ J}/(\text{s m K})$ , der spezifischen Wärme  $c = 20.0 \text{ J}/(\text{mol K})$  und der Dichte  $\rho = 2.32 \text{ g}/(\text{cm}^3)$  folgt

$$D = \frac{K}{c\rho} \Rightarrow D = 89.2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}.$$

Seitz und Kohler [SK56] lösen die Wärmeleitungsgleichung analytisch sowohl für eine sphärische als auch für eine zylindersymmetrische Geometrie im “thermal”- bzw. “displacement spike”-Modell. Möchte man nun Gleichung (B.1) numerisch lösen, so kann man das nach den in [PFTV86] beschriebenen Verfahren tun. Zuerst wird die Gleichung als Differenzengleichung mit  $\Delta t$  und  $\Delta x$  geschrieben. Das Stabilitätskriterium nach [PFTV86] zum Lösen von Differentialgleichungen lautet

$$\frac{2D\Delta t}{(\Delta x)^2} \equiv a \leq 1 \quad \text{mit} \quad D = \frac{K}{c\rho} \quad (\text{B.2})$$

und besagt physikalisch interpretiert, daß der größte erlaubte Zeitschritt  $\Delta t$  zur Lösung der Diffusionsgleichung bis auf einen numerischen Faktor gleich der Diffusionszeit durch die Zelle der Größe  $\Delta x$  ist. Numerische Stabilität ist erst bei Werten  $a \approx 0.01$  erfüllt [PFTV86].

Wie skaliert nun die die Transport“geschwindigkeit”  $\Delta x/\Delta t$  der Wärmeleitung mit der Zellgröße? Je kleiner  $\Delta x$  ist, desto größer ist die Geschwindigkeit der Wärmeleitung. Bei einer physikalisch sinnvollen minimalen Zellgröße  $\Delta x$  ist die Geschwindigkeit der Wärmeleitung gerade so groß wie die Schallgeschwindigkeit  $v_{Si} = 8 \text{ km}/\text{s} = 0.08 \text{ \AA}/\text{fs}$ . Es ergibt sich als minimale Zellgröße

$$\Delta x \geq 225 \text{ \AA}, \quad (\text{B.3})$$

wenn  $\Delta x/\Delta t \leq v_{Si}$  gefordert wird. Das bedeutet, daß die Wärmeleitung in Zellen mit kleinerer Kantenlänge als  $\Delta x = 225 \text{ \AA}$ , mit Überschallgeschwindigkeit abläuft und somit unphysikalisch ist. Wärmeleitung ist wie erwartet ein makroskopisches Phänomen. Die größte in dieser Arbeit benutzte Zelle hatte eine Kantenlänge von  $l \approx 65 \text{ \AA}$ . Damit ist eine Kühlung nicht sinnvoll.

# Anhang C

## Klassifizierte Defekte

### C.1 Kenngrößen und Häufigkeit

Die Kenngrößen der Atomanzahl  $n_{\text{Def}}$ , des Gyrationradius  $r_{\text{Gy}}$  und des zweiten Moments des Gyrationradius  $\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$  sind in Abschnitt 3.4.1 definiert.

Häufigkeit	Defektart	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
77	Platzw.	2	1.2	0.8
51	VZF $_{n_{\text{Def}}=2}$	2	1.2	1.0
6	IT	3	2.0	2.8
1299	V	4	1.8	1.8
183	V	4	1.8	1.9
3	V	5	2.2	3.5
41	V	5	2.2	3.6
4	VZF $_{2 < n_{\text{Def}} \leq 9}$	5	2.3	4.0
5	SI110E	5	2.3	4.0
10	SI110E	5	2.3	4.1
3	IT	6	2.2	3.3
11	V	6	2.3	4.2
5	II110	6	2.5	4.6
3	VZF $_{2 < n_{\text{Def}} \leq 9}$	6	2.7	6.5
194	SI110E	6	2.7	6.6
1022	SI110E	6	2.8	6.6
147	SI110E	6	2.8	6.7
3	SI110E	6	2.8	6.8
14	SI110	7	2.5	5.3
3	SI110E	7	2.6	5.4
6	SI110E	7	2.7	6.1

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite				
Häufigkeit	Defektart	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
7	SI110E	7	2.7	6.2
33	II110	7	2.9	7.0
13	SI110	7	2.9	7.3
12	SI110	7	2.9	7.4
4	SI110E	7	3.0	8.3
6	SI110E	7	3.0	8.4
13	SI110E	7	3.1	8.4
4	SI110E	7	3.1	8.5
13	SI110	8	2.9	6.8
21	SI110	8	2.9	6.9
9	SI110E	8	2.9	7.3
6	SI110E	8	2.9	7.4
3	TP	8	3.0	7.2
4	SI110E	8	3.0	7.3
72	SI110E	8	3.0	7.4
6	SI110E	8	3.1	7.7
5	SI110	9	2.9	7.1
109	SI110	9	3.0	7.2
3	SI110E	9	3.0	7.2
3	SI110	9	3.0	7.3
17	SI110E	9	3.0	7.3
5	V	9	3.0	7.5
14	V+V	9	3.0	7.6
46	FP	9	3.1	8.1
15	FPD	9	3.1	8.3
7	SI110	9	3.3	9.6
13	SI110	9	3.3	9.7
3	V	9	3.3	9.8
152	SI110	9	3.4	9.7
11	SI110	9	3.4	9.8
3	V	10	3.0	7.1
3	V	10	3.0	7.2
10	SI110E	10	3.0	7.2
12	SI110E	10	3.0	7.3
3	VZF <sub>2 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 9</sub>	10	3.0	8.4
24	SI110E	10	3.1	7.2
21	SI110E	10	3.1	7.3
8	VZF <sub>2 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 9</sub>	10	3.1	7.6
3	V+V	10	3.1	7.7
6	VZF <sub>2 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 9</sub>	10	3.1	8.0

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite				
Häufigkeit	Defektart	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
3	VZF <sub>2 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 9</sub>	10	3.3	9.4
26	SI110	10	3.4	9.6
6	VZF <sub>2 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 9</sub>	10	3.4	10.1
12	V	10	3.4	10.4
6	SI110	10	3.5	10.1
8	FPD	10	4.1	14.7
15	FPD	10	4.5	17.5
9	SI110E	11	3.1	7.3
29	SI110	11	3.1	7.6
4	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	11	3.1	9.6
7	FP	11	3.2	7.9
4	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	11	3.4	9.8
3	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	11	3.6	11.4
8	FPD	11	3.9	13.5
4	V+SI110E	11	4.5	18.2
6	V+SI110E	11	4.5	18.3
3	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	12	3.1	7.4
14	VVD	12	3.2	7.8
7	FP	12	3.2	8.0
5	SI110	12	3.4	9.7
24	FPD	12	3.4	10.4
17	V+SI110E	12	3.6	10.5
3	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	12	3.8	12.5
3	V+SI110E	12	3.8	13.0
26	V+SI110	12	3.9	13.4
13	V+SI110E	12	4.1	14.0
13	V+SI110E	12	4.1	14.1
7	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	12	5.2	23.6
4	V+SI110E	12	5.2	23.6
3	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	13	3.1	8.3
7	II111	13	3.2	8.3
10	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	13	3.7	13.2
6	V+SI110	13	4.0	14.3
3	VZF <sub>9 &lt; n<sub>Def</sub> ≤ 19</sub>	13	4.1	14.3
4	VV	14	3.2	8.2
3	II111	14	3.2	8.4
5	II111	14	3.3	8.7
22	FPD	14	3.3	9.3
3	FP	14	3.4	10.6
33	FP	14	3.4	10.7

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite				
Häufigkeit	Defektart	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
120	V+SI110E	14	3.6	10.6
24	V+SI110E	14	3.6	10.7
16	SI110L	14	3.6	10.8
4	V+SI110E	14	3.7	12.3
19	V+SI110E	14	3.7	12.4
5	V+SI110E	14	4.7	18.5
17	II111	15	3.3	8.8
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	3.4	10.1
6	FP	15	3.4	10.9
5	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	3.6	10.7
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	3.6	11.7
11	V+SI110E	15	3.7	12.1
9	FP	15	4.1	14.9
4	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	4.2	15.9
4	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	4.2	16.0
4	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	4.9	19.1
3	V+SI110	15	4.9	19.1
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	15	4.9	19.2
5	V+SI110	15	4.9	19.2
3	II111	16	3.3	8.8
3	VV	16	3.4	8.9
6	V+SI110E	16	3.6	11.8
11	V+SI110E	16	3.6	11.9
13	FP	16	3.6	12.5
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	16	4.1	14.7
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	16	4.1	15.6
11	VV	17	3.4	9.2
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	17	3.4	9.2
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	17	4.0	14.2
3	V+SI110	17	4.5	17.5
3	VZF $_{9 < n_{\text{Def}} \leq 19}$	17	4.6	18.0
45	VV	18	3.4	9.3
23	V+SI110	18	3.8	12.7
4	FP	19	4.3	15.0
3	Defekt-Cluster	20	5.2	22.1
3	Defekt-Cluster	22	4.0	13.5
3	Defekt-Cluster	22	4.0	13.9
4	Defekt-Cluster	23	4.1	14.6
4	Defekt-Cluster	24	4.2	15.1
3	Defekt-Cluster	26	4.5	17.6

### C.1.1 Defekt-Cluster bei der PKA-Energie von $E_{\text{PKA}} = 1 \text{ keV}$

Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
1	20	3.63	12.54
1	20	3.87	13.52
1	20	3.88	12.16
1	20	3.89	13.51
1	20	3.90	12.92
1	20	4.53	20.58
1	20	4.79	19.81
1	21	3.90	12.38
1	21	4.02	14.54
1	21	4.30	17.96
1	21	4.80	22.50
1	21	6.40	34.25
1	22	3.95	13.42
1	22	4.01	13.20
1	22	4.04	14.21
1	22	4.38	17.87
1	22	6.04	33.91
1	23	4.31	16.10
1	23	4.47	19.07
1	23	4.82	20.49
1	23	4.86	21.83
1	23	4.92	21.20
1	23	5.48	28.12
1	23	7.28	49.08
1	23	7.49	52.22
1	24	4.24	15.73
1	24	4.35	16.66
1	24	4.36	16.78
1	24	4.62	18.62
1	24	4.95	21.77
1	24	5.19	26.26
1	24	5.35	24.09
1	24	5.36	27.36
1	25	4.16	16.08
1	25	4.45	16.66
1	25	4.59	20.16
1	25	4.80	19.95
1	25	4.82	20.71
1	25	5.36	26.51

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite			
Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
1	25	5.38	27.44
1	26	4.48	18.30
1	26	4.52	17.56
1	26	4.52	17.57
1	26	4.97	22.10
1	26	5.35	25.54
1	26	5.37	25.27
1	26	7.03	51.74
1	27	4.39	16.70
1	27	4.69	22.38
1	27	4.87	21.12
1	27	4.96	23.52
1	28	4.40	16.12
1	28	4.50	18.29
1	28	4.54	20.71
1	28	4.68	19.09
1	28	4.99	25.23
1	28	5.81	30.70
1	28	6.41	37.39
1	29	5.12	22.38
1	29	5.12	22.38
1	29	5.30	28.25
1	29	6.06	31.20
1	29	6.07	31.24
1	30	4.53	17.67
1	30	4.66	19.05
1	30	5.38	27.39
1	30	5.40	30.45
1	30	5.88	29.96
1	31	4.57	17.90
1	31	4.71	19.29
1	31	4.75	20.20
1	31	7.62	50.65
1	32	4.72	19.98
1	32	4.83	20.02
1	32	5.24	28.49
1	32	5.31	31.43
1	32	5.60	32.01
1	32	6.20	34.76
1	33	4.67	19.77

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite			
Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
1	33	5.57	30.47
1	33	5.57	28.92
1	34	4.84	21.20
1	34	5.85	30.89
1	34	5.87	28.67
1	34	5.90	32.89
1	34	6.01	33.26
1	35	4.33	16.35
1	35	5.00	22.75
1	35	5.24	24.74
1	35	5.30	24.84
1	35	5.50	26.54
1	35	6.05	33.98
1	35	6.25	38.00
1	35	6.55	38.90
1	36	4.81	20.46
1	36	5.10	24.05
1	36	6.10	38.71
1	37	5.18	22.78
1	37	5.24	24.82
1	37	5.65	27.55
1	37	5.82	31.93
1	37	6.93	42.17
1	38	4.83	19.78
1	38	5.37	24.26
1	38	6.50	39.38
1	38	7.53	56.26
1	39	5.18	23.40
1	39	6.16	34.61
1	40	4.82	20.63
1	40	4.96	21.09
1	40	5.42	26.27
1	40	5.89	34.60
1	41	5.86	30.42
1	41	6.50	40.08
1	41	6.83	40.12
1	41	7.05	43.95
1	42	5.53	28.87
1	42	5.79	33.37
1	42	5.98	34.48

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite			
Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
1	43	5.26	24.02
1	43	6.41	36.05
1	44	5.68	32.60
1	44	6.04	31.85
1	44	7.00	41.28
1	44	7.82	67.81
1	45	5.61	29.85
1	45	6.41	37.72
1	45	6.87	50.76
1	46	5.52	27.84
1	46	7.03	48.56
1	48	5.76	29.06
1	48	6.36	40.21
1	49	6.78	46.32
1	50	5.22	25.25
1	50	6.18	41.74
1	50	6.93	45.56
1	50	6.99	47.60
1	50	7.64	66.27
1	50	8.82	72.23
1	53	5.71	29.17
1	53	5.84	31.05
1	53	6.78	40.14
1	53	6.79	43.59
1	53	7.42	54.06
1	56	6.18	34.24
1	56	6.59	39.77
1	56	6.98	42.93
1	56	8.04	56.40
1	57	6.97	41.32
1	57	8.43	65.36
1	59	5.55	27.09
1	60	6.61	37.32
1	61	5.93	34.30
1	61	7.22	46.42
1	62	7.42	47.29
1	62	7.82	60.19
1	63	6.11	33.93
1	64	7.09	45.77
1	64	8.93	68.89

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite			
Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$
1	64	10.17	85.53
1	66	6.36	38.05
1	66	7.54	53.70
1	67	6.13	33.07
1	67	8.78	65.66
1	68	6.20	34.08
1	68	6.80	48.23
1	69	7.59	48.51
1	69	7.83	56.66
1	69	9.21	76.03
1	69	9.30	86.45
1	70	7.55	48.24
1	70	7.98	57.90
1	71	6.46	38.53
1	72	7.47	56.65
1	73	7.81	54.54
1	73	7.92	62.11
1	74	7.68	54.62
1	74	8.87	70.33
1	75	8.24	63.46
1	79	6.00	32.55
1	79	8.26	63.42
1	80	9.48	101.36
1	82	8.12	62.01
1	84	6.37	36.94
1	85	10.70	131.13
1	87	6.52	38.46
1	87	9.03	74.42
1	90	11.46	110.12
1	93	7.18	54.86
1	94	7.97	62.23
1	95	8.41	63.19
1	95	9.69	107.09
1	95	10.59	102.06
1	96	6.95	45.12
1	101	10.91	118.53
1	102	9.00	78.27
1	106	9.60	85.15
1	108	8.76	77.81
1	109	10.76	112.88

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Fortsetzung der vorhergehenden Seite				
Häufigkeit der Defekt-Cluster	$n_{\text{Def}}$	$r_{\text{Gy}}$	$\sqrt{r_{\text{Gy}}^2}$	
	1	110	8.18	65.09
	1	110	12.43	127.34
	1	111	8.45	67.13
	1	111	11.29	114.28
	1	114	8.77	86.84
	1	116	11.59	122.41
	1	142	8.84	80.56
	1	146	9.12	72.06

## C.2 Koordinaten und Energien einzelner Atome in verschiedenen Defekten

In diesem Abschnitt werden die klassifizierten Defekte genauer auf ihre Geometrie untersucht. Mit #NN werden die Anzahl der Nachbaratome bezeichnet, die nicht weiter als  $r_{\text{max}} = 3.0 \text{ \AA}$  von dem betreffenden Atom entfernt war. Dabei sind nicht nur Defektatome eingeschlossen sondern auch Atome, die reguläre Gitterplätze besetzen.

### C.2.1 isolierte Einzeldefekte

#### Leerstelle V

#NN	Name	$x [\text{\AA}]$	$y [\text{\AA}]$	$z [\text{\AA}]$	$E_{\text{pot}} [\text{eV}]$
6	V	0.004	0.012	2.081	-4.486
6	V	0.000	2.050	0.001	-4.486
6	V	2.060	2.053	2.076	-4.486
6	V	2.060	0.000	0.000	-4.497

#### Zwischengitterplatz SI110E

#NN	Name	$x [\text{\AA}]$	$y [\text{\AA}]$	$z [\text{\AA}]$	$E_{\text{pot}} [\text{eV}]$
4	SI110E(I)	2.249	3.890	1.700	-3.963
4	SI110E(I)	2.244	1.695	3.893	-3.974
4	SI110E	2.190	0.000	5.599	-4.230
4	SI110E	2.190	5.595	0.000	-4.230
4	SI110E(I)	0.000	1.966	3.632	-4.444
4	SI110E(I)	0.002	3.629	1.971	-4.444

### Zwischengitterplatz SI110

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
5	SI110(I)	0.977	2.222	3.918	-3.685
5	SI110(I)	0.978	3.928	2.244	-3.685
5	SI110	0.000	4.789	4.782	-3.813
5	SI110	0.275	1.423	1.427	-4.305
4	SI110	3.173	1.449	4.508	-4.305
4	SI110	3.174	4.499	1.452	-4.315
4	SI110	1.808	0.000	5.864	-4.572
4	SI110	1.818	5.856	0.000	-4.572

### Zwischengitterplatz SI110L

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
5	SI110L(I)	0.000	3.971	3.975	-3.739
4	SI110L(I)	2.423	2.139	2.140	-4.134
4	SI110L(I)	2.432	5.819	5.825	-4.134
4	SI110L(I)	0.217	1.748	1.743	-4.177
4	SI110L(I)	0.208	6.193	6.201	-4.187
4	SI110L	0.301	0.000	0.000	-4.347
4	SI110L	0.303	7.936	7.942	-4.347
4	SI110L	3.474	5.440	2.549	-4.486
4	SI110L	3.470	2.546	5.449	-4.486
4	SI110L	4.826	1.243	4.074	-4.593
4	SI110L	4.825	4.068	1.244	-4.593
4	SI110L	4.846	6.735	3.924	-4.593
4	SI110L	4.847	3.920	6.743	-4.593
5	SI110L(I)	2.349	3.981	3.985	-5.010

### Zwischengitterplatz ITD

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
10	ITD(I)	0.030	0.006	0.007	-3.333
5	ITD	1.493	1.498	1.500	-4.326
5	ITD	2.938	0.000	0.000	-4.347
5	ITD	0.000	0.000	2.931	-4.358
5	ITD	0.002	2.930	0.002	-4.358
4	ITD	2.848	2.846	2.847	-4.454

## C.2.2 verbundene Einzeldefekte

### Zwei verbundene Leerstellen V+V

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
6	V2(1)	2.191	0.049	2.270	-4.412
6	V2(2)	3.977	3.285	1.542	-4.412
6	V2(2)	3.983	1.302	3.533	-4.422
6	V2(1)	2.187	2.028	0.287	-4.433
6	V2(2)	6.127	3.332	3.585	-4.444
6	V2(1)	0.041	0.000	0.224	-4.454
4	V2(VZF)	5.052	4.898	0.000	-4.465
6	V2(1)	0.000	2.021	2.259	-4.497
6	V2(2)	6.162	1.311	1.552	-4.508

### Verbundene Leerstelle mit Zwischengitterplatz V+SI110E

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	V+SI110E(I)	8.152	1.700	3.758	-3.963
4	V+SI110E(I)	8.173	3.897	1.581	-3.974
4	V+SI110E	8.129	5.596	0.042	-4.230
4	V+SI110E	8.130	0.000	5.458	-4.241
4	V+SI110E	3.460	1.479	1.259	-4.422
4	V+SI110E	3.470	4.213	3.997	-4.433
6	V+SI110E(V)	2.035	5.194	0.269	-4.444
4	V+SI110E(I)	5.916	3.639	1.828	-4.454
4	V+SI110E(I)	5.900	1.987	3.485	-4.454
6	V+SI110E(V)	0.000	5.193	2.369	-4.486
6	V+SI110E(V)	0.000	3.104	0.270	-4.486
4	V+SI110E	4.936	2.720	0.000	-4.508
4	V+SI110E	4.905	0.102	2.555	-4.508
4	V+SI110E	4.910	2.920	5.376	-4.508
6	V+SI110E(V)	1.986	3.114	2.368	-4.518

## V+SI110

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	V+SI110(I)	5.618	5.001	4.590	-3.803
5	V+SI110	4.540	2.250	5.564	-3.867
6	V+SI110(I)	5.487	3.074	3.236	-3.974
5	V+SI110	4.847	5.865	2.360	-4.187
5	V+SI110	3.486	1.318	3.306	-4.241
4	V+SI110	7.746	2.680	2.370	-4.305
6	V+SI110(V)	2.026	0.439	0.000	-4.347
5	V+SI110(V)	0.018	0.451	2.140	-4.444
4	V+SI110	5.113	0.000	2.257	-4.497
5	V+SI110(V)	0.000	2.622	0.027	-4.529
6	V+SI110(V)	1.881	2.604	2.031	-4.572
4	V+SI110	6.479	1.330	0.863	-4.572
4	VZF <sub>1</sub>	6.471	7.175	6.677	-4.593
4	V+SI110	3.594	7.184	3.863	-4.615
5	V+SI110	3.715	4.033	1.188	-4.689

## V+SI110L

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
5	V+SI110L(I)	0.000	3.978	3.976	-3.749
4	V+SI110L(I)	2.448	5.810	5.805	-4.145
4	V+SI110L(I)	2.421	2.129	2.126	-4.166
4	V+SI110L(I)	0.197	1.744	1.745	-4.177
4	V+SI110L(I)	0.228	6.201	6.199	-4.187
4	V+SI110L	0.309	0.000	0.000	-4.337
4	V+SI110L	0.327	7.936	7.937	-4.347
4	V+SI110L	6.124	5.434	5.437	-4.433
6	V+SI110L(V)	7.087	7.024	7.026	-4.476
6	V+SI110L(V)	4.898	6.985	9.004	-4.476
6	V+SI110L(V)	4.901	9.007	6.986	-4.476
6	V+SI110L(V)	7.011	9.051	9.054	-4.476
4	V+SI110L	3.488	5.450	2.563	-4.486
4	V+SI110L	3.485	2.562	5.440	-4.486
4	V+SI110L	4.861	6.746	3.927	-4.582
4	V+SI110L	4.856	3.924	6.739	-4.582
4	V+SI110L	4.830	1.250	4.074	-4.593
4	V+SI110L	4.833	4.079	1.249	-4.593
5	V+SI110L(I)	2.352	3.956	3.951	-5.010

### C.2.3 Frenkel-Paare

#### Frenkel-Paar FP110E

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	FP110E(I)	3.914	5.340	3.837	-3.931
4	FP110E(I)	1.726	5.330	1.648	-3.942
3	vzf(V)	3.038	0.000	2.513	-4.187
4	FP110E	0.000	5.384	0.000	-4.283
4	FP110E	5.570	5.396	5.559	-4.283
4	FP110E(V)	5.412	1.866	2.367	-4.401
4	FP110E(V)	3.183	1.869	0.148	-4.412
4	vzf	1.406	0.834	4.167	-4.412
4	FP110E(I)	3.703	3.056	3.515	-4.412
4	FP110E(I)	2.050	3.050	1.879	-4.433
5	FP110E(V)	5.191	0.095	0.360	-4.903

#### Frenkel-Paar FP110ED

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
5	FP110ED(I)	1.702	4.887	3.302	-3.877
8	FP110ED(I)	3.230	2.799	2.814	-4.070
4	FP110ED(V)	1.255	1.897	1.920	-4.112
4	FP110ED	0.000	6.672	3.579	-4.123
4	FP110ED(I)	2.123	4.477	5.538	-4.187
6	FP110ED(V)	3.861	0.000	2.087	-4.315
6	FP110ED(V)	3.842	2.144	0.000	-4.337
5	FP110ED(I)	3.869	2.658	5.309	-4.785
6	FP110ED(V)	1.722	0.126	0.119	-4.914

## C.2.4 Doppeldefekte

### Doppelleerstelle VV

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
5	VV	1.410	3.039	1.405	-4.358
5	VV	3.027	1.409	5.035	-4.369
5	VV	3.408	5.055	1.398	-4.369
5	VV	5.033	3.412	5.026	-4.369
5	VV	5.030	1.414	3.031	-4.369
5	VV	1.397	5.041	3.388	-4.380
4	VV	2.515	6.450	5.065	-4.465
4	VV	2.519	1.356	0.000	-4.476
4	VV	0.000	3.931	5.068	-4.476
4	VV	5.081	3.928	0.003	-4.476
4	VV	6.429	5.102	3.913	-4.476
4	VV	3.909	5.101	6.425	-4.476
4	VV	1.360	0.000	3.906	-4.476
4	VV	3.922	0.004	1.349	-4.476
4	VV	6.440	2.541	1.353	-4.476
4	VV	5.082	6.458	2.516	-4.476

### Doppelleerstelle VVD

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	VVD	0.000	2.323	2.983	-4.102
4	VVD	2.900	2.240	0.000	-4.112
4	VVD	2.977	5.210	2.895	-4.123
4	VVD	3.047	2.161	3.053	-4.305
4	VVD	3.217	0.000	1.995	-4.369
4	VVD	5.209	3.211	3.225	-4.369
4	VVD	1.991	1.995	5.210	-4.380
4	VVD	0.048	5.162	0.053	-4.444
5	VVD	1.502	3.716	1.498	-4.508
5	VVD	5.139	5.141	4.881	-4.636
5	VVD	4.888	0.069	0.082	-4.636
5	VVD	0.077	0.315	5.140	-4.636

### Doppelzwischengitterplatz $I_Z^2$

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
7	$I_Z^2$	0.000	5.233	0.431	-3.621
7	$I_Z^2$	2.969	1.874	3.803	-3.632
5	$I_Z^2$	2.588	3.894	1.764	-3.877
5	$I_Z^2$	0.394	3.210	2.453	-3.888
5	$I_Z^2$	2.198	0.000	5.666	-4.454
5	$I_Z^2$	2.428	5.654	0.000	-4.593
5	$I_Z^2$	0.543	1.455	4.217	-4.615

### Doppelzwischengitterplatz $I_{111}^2$

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
3	$I_{111}^2$	4.810	0.987	0.990	-3.675
7	$I_{111}^2$	3.896	3.800	1.891	-3.739
7	$I_{111}^2$	3.909	1.895	3.799	-3.749
7	$I_{111}^2$	2.005	1.901	1.898	-3.760
5	$I_{111}^2$	1.363	1.282	4.451	-4.283
5	$I_{111}^2$	1.350	4.449	1.279	-4.283
5	$I_{111}^2$	4.526	4.453	4.425	-4.305
5	$I_{111}^2$	2.921	0.000	5.792	-4.636
5	$I_{111}^2$	0.000	2.889	0.000	-4.636
5	$I_{111}^2$	5.802	5.807	2.884	-4.636
5	$I_{111}^2$	0.018	0.014	2.888	-4.647
5	$I_{111}^2$	5.797	2.901	5.779	-4.647
5	$I_{111}^2$	2.671	0.145	0.140	-4.839
5	$I_{111}^2$	5.666	0.140	3.114	-4.860

## C.2.5 Weitere Defekte

### CEa

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	CE(a)	0.000	2.029	2.064	-4.251
4	CE(a)	2.201	1.756	1.725	-4.251
4	CE	1.999	0.000	0.000	-4.347
4	CE	0.176	3.801	3.793	-4.358
4	CE	1.679	5.152	5.177	-4.497

**CEb**

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
4	CE	4.883	2.817	2.373	-4.059
4	CE	2.501	2.811	0.000	-4.059
4	CE	0.000	0.000	2.503	-4.059
4	CE	2.371	0.008	4.885	-4.070
4	CE(b)	2.585	2.589	2.297	-4.219
4	CE(b)	2.298	0.227	2.585	-4.219
5	CE	0.371	30.930	4.526	-4.882
5	CE	4.510	4.477	0.357	-4.882

**Defekt-Cluster mit  $n_{\text{Def}} = 28$  Atomen**

#NN	Name	$x$ [Å]	$y$ [Å]	$z$ [Å]	$E_{\text{pot}}$ [eV]
6	CL	4.767	4.217	11.507	-3.675
4	CL	5.666	3.382	8.953	-3.749
4	CL	4.783	6.067	10.088	-3.813
4	CL	6.869	4.238	3.903	-3.920
4	CL	6.909	6.400	1.713	-3.984
5	CL	3.540	3.018	7.821	-3.995
4	CL	6.868	2.554	5.558	-4.230
5	CL	5.474	6.926	12.382	-4.262
4	CL	6.893	8.080	0.000	-4.262
5	CL	3.555	5.154	6.021	-4.283
4	CL	2.571	3.729	12.365	-4.315
5	CL	0.000	3.416	4.364	-4.315
4	CL	4.556	4.395	3.850	-4.358
5	CL	2.008	1.388	4.369	-4.358
4	CL	3.593	2.495	2.870	-4.390
5	CL	0.040	1.414	6.362	-4.412
4	CL	4.680	6.041	2.088	-4.422
4	CL	1.057	5.112	2.943	-4.422
4	CL	3.745	0.013	5.429	-4.433
5	CL	1.635	5.149	7.976	-4.444
4	CL	2.348	6.544	4.348	-4.465
4	CL	3.704	7.972	2.979	-4.465
4	CL	1.173	0.000	8.019	-4.476
4	CL	0.029	3.952	9.399	-4.476
4	CL	3.744	5.181	0.113	-4.518
4	CL	2.326	3.822	1.415	-4.550
4	VZF	3.924	8.279	8.063	-4.561
4	CL	3.906	2.379	13.835	-4.572
4	CL	6.768	8.231	10.884	-4.636

Zitat	Methode	V	IT	IB	SI100	SI110	SI110E
[CKOP84]	sc Greens F.	4-6		5-8	5-8		
[BAC87]	<b>SW</b>		4.95	5.61	5.26		
[Sch89]	<b>SW</b> MFF BH KP		4.18 1.92		2.43	4.42 5.03 2.11 4.03	3.76 5.81 2.29 3.8
[BNW89]	embed. atom	3.19	4.81	5.88			
[WCH91]	TB 64 TB 216 TB 512 LDA-Ref	3.67 3.96 4.12 3.6-5.0	4.39 4.40 4.41 4.3-6.2				
[CBS92]	ab initio					3.3	
[BHT92]	DFT PHTT BH <b>SW</b> DOD T2 T3	3-4 0.77 2.12 2.82 2.57 2.81 3.70	5-6 0.63 1.56 5.25 3.03 5.03 3.45	4-5 1.92 2.54 5.99 4.39 2.84 5.86	1.47 3.30 5.62 3.49 2.32 4.70		
[MB93a]	<b>SW</b> MEAM		4.84 4.81	5.67 5.88	5.38		3.66
[BSC <sup>+</sup> 93]	LDA	4.1				3.3	
[MB93b]	<b>SW</b> MEAM	2.66 3.19	4.84 4.81	5.67 5.88	5.38		3.66
[KBW <sup>+</sup> 94]	TB 64 TB 216 LDA-Ref	3.46 3.93 3.6-4.1	3.61 5.13 5.0-6.0			3.52 3.84 3.3	
[UHT94]	T3	3.70	3.42	4.12	4.68	4.39	
[ZYM <sup>+</sup> 95]	ab initio	3.7				3.25	
[RCT96]	<b>SW</b> ETB ETB	3.15 <sup>0</sup> 2.9 <sup>-1</sup>	4.7 <sup>0</sup> 3.5 <sup>+2</sup>		5.4 <sup>0</sup> 4.5 <sup>+2</sup>	4.6 5.0 <sup>0</sup>	3.86
[NBY96]	<b>SW</b> TB-Ref LDA-Ref		5.28 4.12	6.00	5.59	4.68 3.3	3.91
[ZDdlRY <sup>+</sup> 96]	ab initio					3.2	
[LKK <sup>+</sup> 97]	TB 64 TB 144 TB 192 TB 216 ab initio TB-Ref1 TB-Ref2 TB-Ref3	3.397 3.708 3.675 3.780 3.70(10) 3.93(20) 4.12(20) 3.76	3.552 3.600 3.749 3.15(10) 4.42(20) 4.41(5) 4.95				
[TCZDdlR97]	TB LDA-Ref LDA-Ref <b>SW</b>	3.97 3.65 3.96 2.64	4.39 5.1 4.40 4.84			3.80 3.7 5.04	3.65

Tabelle C.3: Literaturliste der Formationsenergien von Einzeldefekten mit verschiedenen Methode berechnet.

### **C.3 Verschiedene Kristallrichtungen**

[300]-Richtung

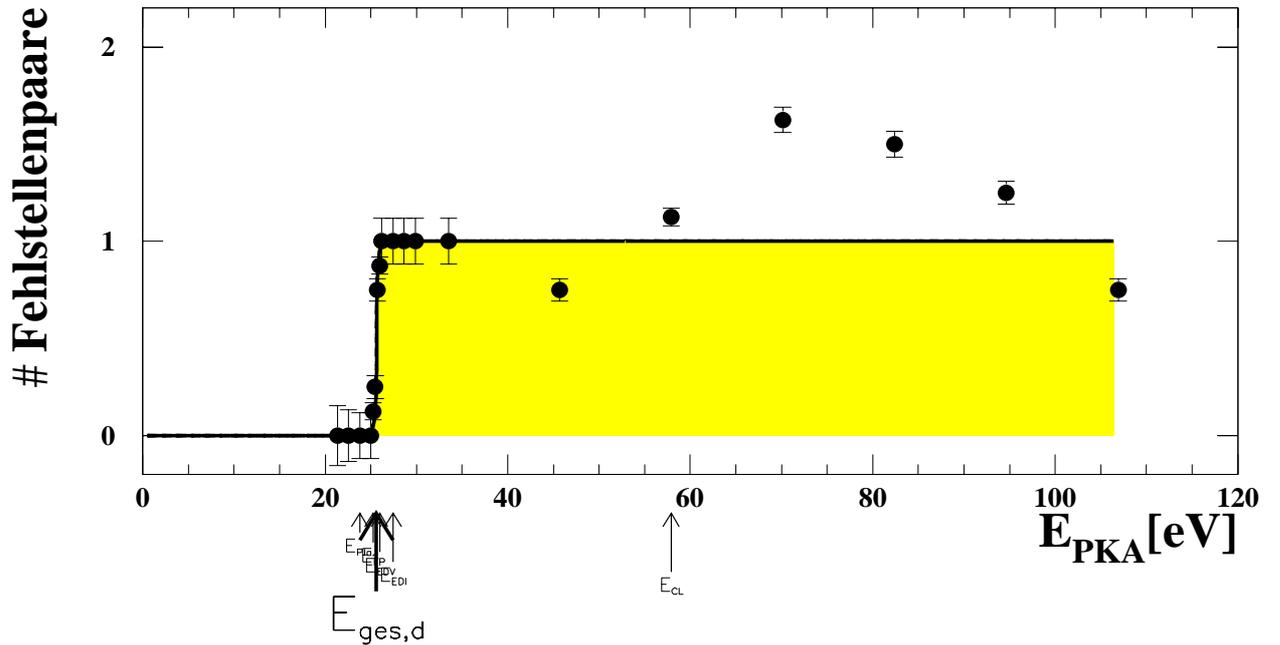
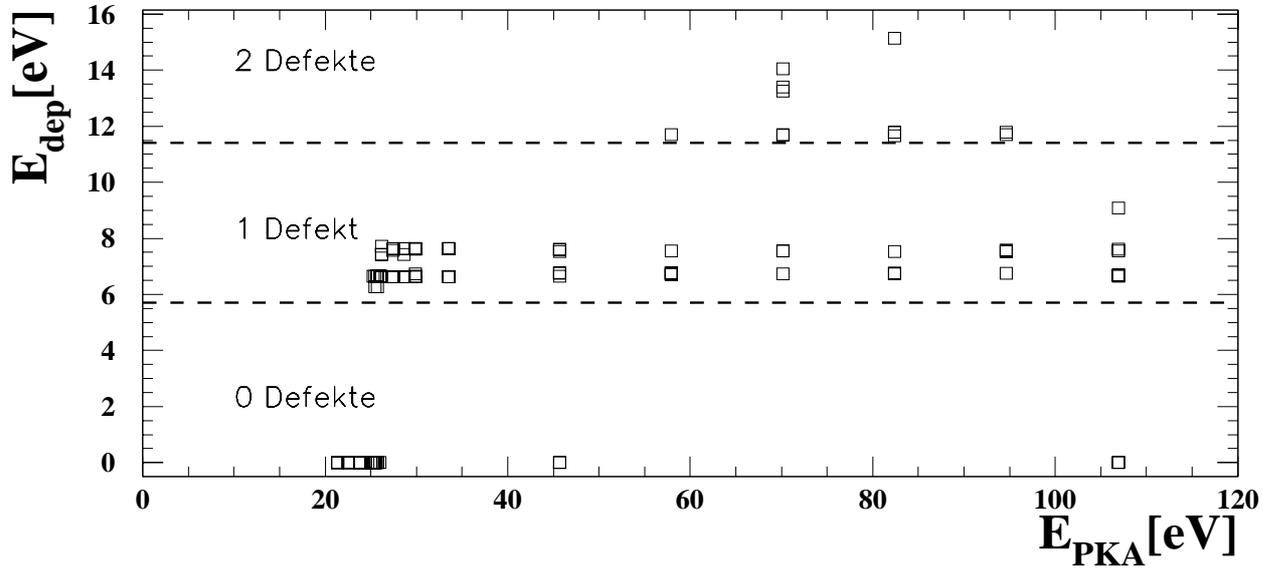


Abbildung C.1: Schwellenenergie in [300]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 25.60 \pm 0.01 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 0.25 \text{ eV}$  und  $E_{\text{Pla.,min}} = 23.8 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 25.2 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 26.0 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDI,min}} = 27.4 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 57.9 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	22.6	23.8	25.0	25.2	25.5	25.7	26.0	26.2	27.4	28.6	29.9	33.5	45.7	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	21.0	22.0	23.0	23.2	23.4	23.6	23.8	24.0	25.0	26.0	27.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	6	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	0.83	1.62	4.94	5.82	6.97	7.00	6.98	7.14	7.13	5.37	7.46	10.74	9.76	8.50	5.54
HOP	-	-	1.00	1.75	1.50	1.50	0.63	0.25	-	0.13	-	0.13	-	1.13	2.25	1.75	1.75	3.25	4.75
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	0.13	0.25	0.75	0.63	0.50	-	0.13	-	-	0.13	-	-	-	-	0.13
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	0.25	0.50	0.63	0.63	0.25	0.50	-	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	0.38	0.25	0.75	0.50	0.63	0.88	1.25	1.25	1.13	0.63	-

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	2	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	1	2	6	5	2	-	-	-	-	1	-	-	-	-	1

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	2	4	5	5	2	4	-	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	-	3	2	6	4	5	7	8	10	9	5	-
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	2	1	2	6	3	3	2	2	-
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	2	2	4	3	3	1	3	1	4	2	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ITD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	1	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3	4	1	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	-	-

Tabelle C.4: Schwellenenergie in [300]-Richtung.

[310]-Richtung

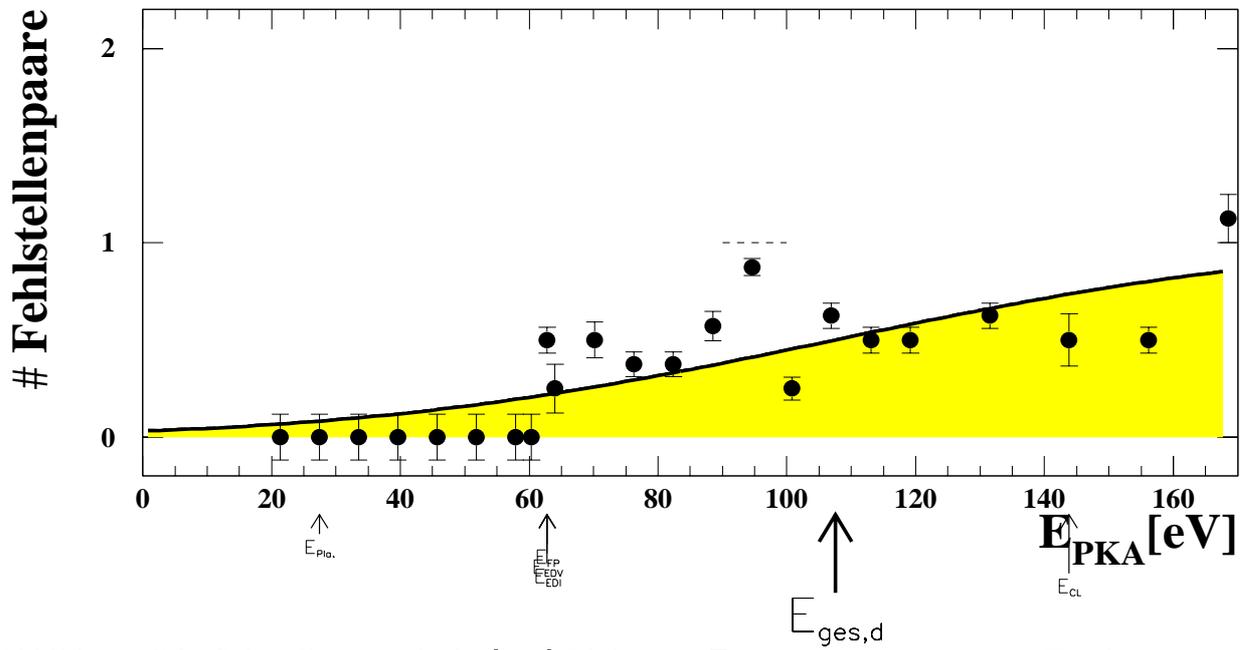
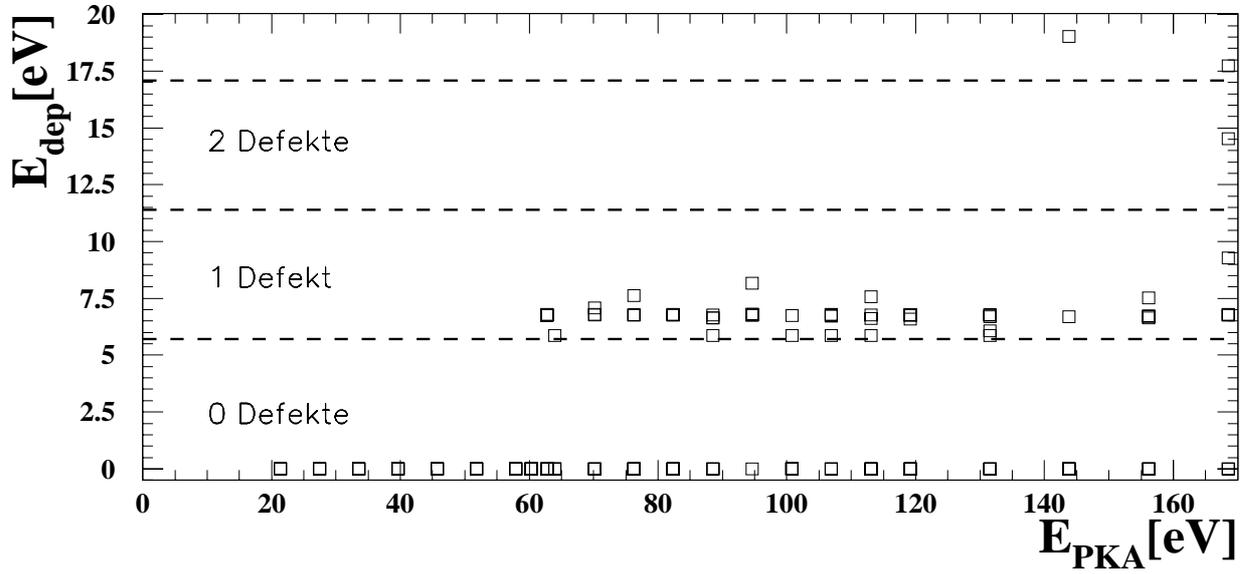


Abbildung C.2: Schwellenenergie in [310]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 107.54 \pm 0.15 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 57.6 \text{ eV}$  und  $E_{\text{Pla.,min}} = 27.4 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 62.8 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 62.8 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDI,min}} = 62.8 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 143.8 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	39.6	45.7	51.8	57.9	60.4	62.8	64.0	70.1	76.3	82.4	88.5	94.6	100.8	106.9	113.1	119.2	131.5	143.8	156.2	168.5
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	52.0	54.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	95.0	100.0	110.0	120.0	130.0	140.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	4	6	8	8	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	-	-	-	3.38	1.47	3.44	2.65	2.54	3.70	6.11	1.58	4.11	3.36	3.36	4.02	3.22	3.45	7.73	
HOP	-	2.00	2.00	2.00	3.00	2.88	3.00	3.00	1.38	2.00	1.83	2.25	2.13	1.29	0.63	3.13	3.13	3.00	3.25	3.63	7.50	9.25	7.25
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	-	-	0.13	0.25	-	0.13	-	0.14	0.13	0.13	0.13	0.25	-	0.13	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	0.25	-	0.17	-	-	0.43	0.13	0.13	-	-	-	-	-	-	0.13	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	0.17	0.25	0.38	-	0.50	-	0.50	0.25	0.25	0.25	-	0.38	0.50	-

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	1	1	1	1	-	1	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	1	-	1	-	1	-	1	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	2	-	1	-	-	-	-	-	-	-	1	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	2	3	-	4	-	4	2	2	2	-	3	3
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	1	3	-	4	-	4	1	2	2	-	2	4
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{Z}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	1	1	1	-	1	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	-	-	-	2	1	2	-	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	2

Tabelle C.5: Schwellenenergie in [310]-Richtung.

[311]-Richtung

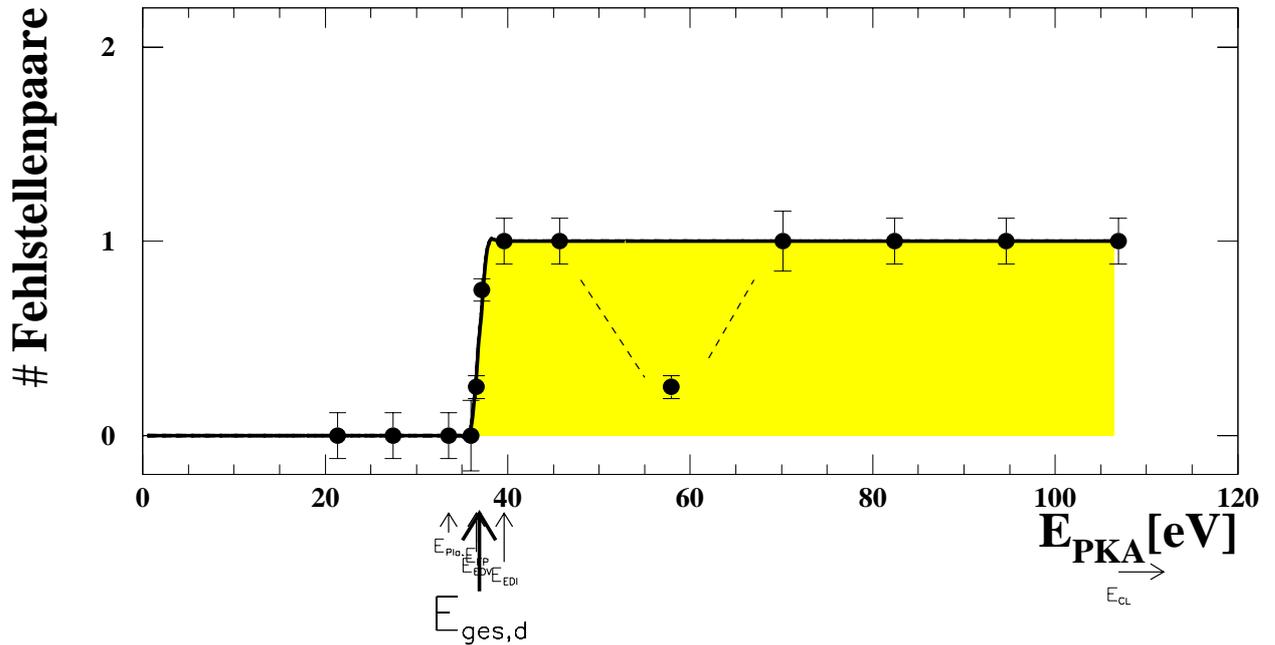
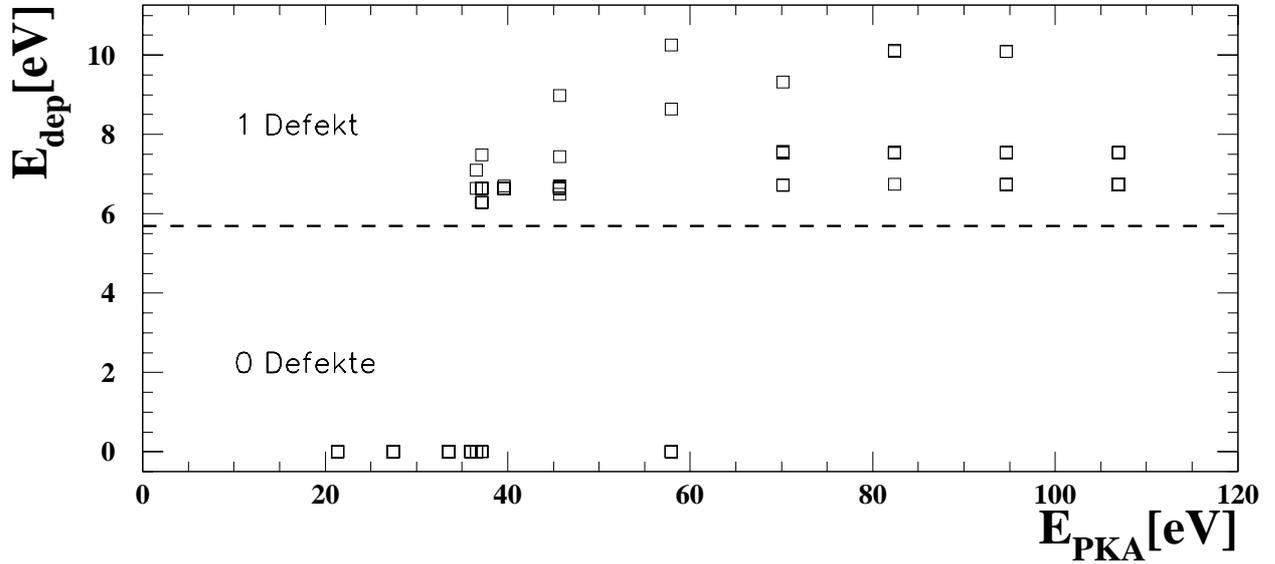


Abbildung C.3: Schwellenenergie in [311]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 36.87 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 0.45$  eV und  $E_{\text{Pla.,min}} = 33.5$  eV,  $E_{\text{FP,min}} = 36.6$  eV,  $E_{\text{EDV,min}} = 36.6$  eV,  $E_{\text{ED1,min}} = 39.6$  eV,  $E_{\text{CL,min}} > 107$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	36.0	36.6	37.2	39.6	45.7	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	32.0	32.5	33.0	35.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	5	8	8	8	8	8	6	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	1.72	4.99	6.65	7.03	2.36	7.57	8.08	7.78	6.94
HOP	-	-	2.00	2.00	1.88	0.75	0.13	0.38	2.50	2.00	1.13	2.00	2.50
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	0.25	-	0.13	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	0.13	0.38	0.88	0.50	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	0.13	0.25	0.13	1.00	1.00	1.00	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	1	3	7	4	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	1	2	-	5	6	6	8
SI110E	-	-	-	-	-	-	1	2	-	4	2	5	6
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	1	2	5	3	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	1	1	1
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	1	1	-	1	1	-	2	1	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabelle C.6: Schwellenenergie in [311]-Richtung.

[320]-Richtung

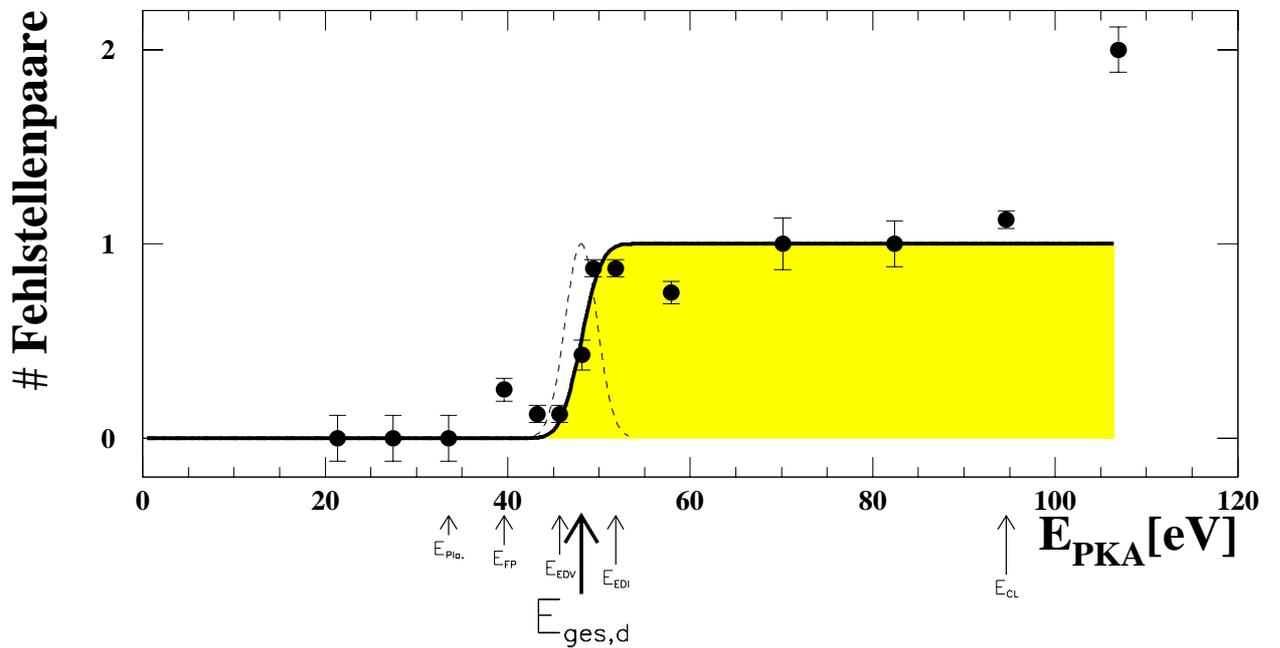
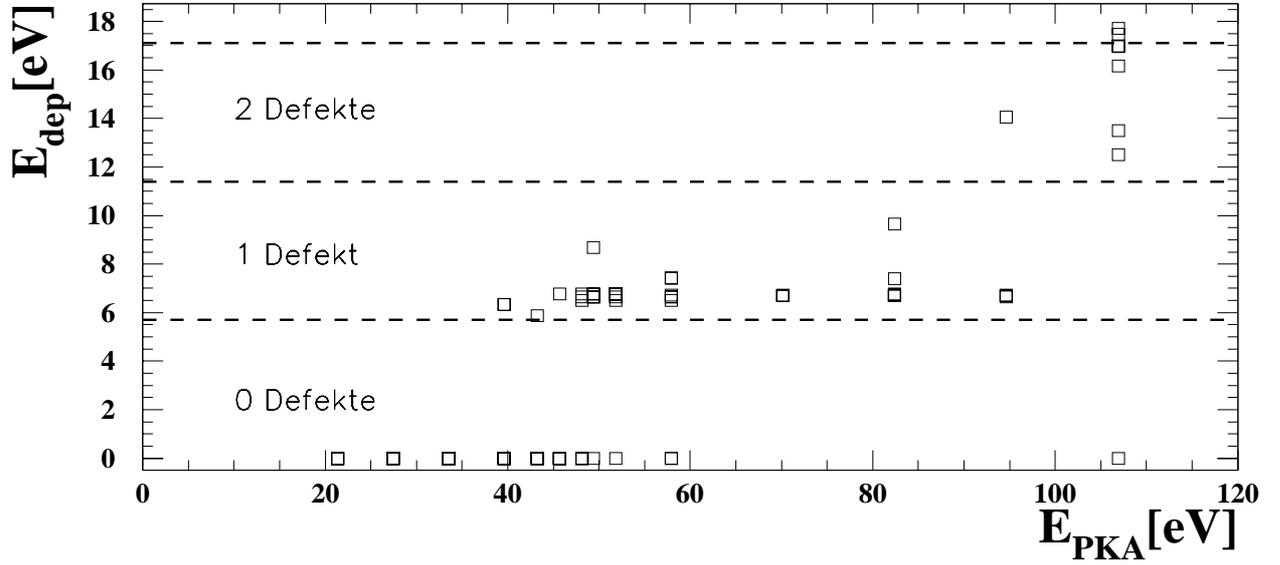


Abbildung C.4: Schwellenenergie in [320]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 48.05 \pm 0.03 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 1.7 \text{ eV}$ .  
 $E_{\text{Pl.,min}} = 33.5 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 39.6 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 45.7 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDI,min}} = 51.8 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 94.6 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	39.6	43.3	45.7	48.1	49.4	51.8	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	35.0	38.0	40.0	42.0	43.0	45.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	7	8	8	8	7	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	1.58	0.73	0.85	2.84	6.10	5.87	5.17	6.70	7.16	7.61	13.92
HOP	-	-	3.00	2.38	3.63	3.00	1.86	1.00	0.38	1.25	1.00	1.50	1.63	2.00
a) $\sum$ FP	-	-	-	0.25	0.13	-	-	-	-	0.25	-	0.13	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	0.13	0.43	0.75	0.38	0.38	-	-	0.13	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	0.38	0.13	1.00	0.50	0.75	0.50

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	2	4	1	3	-	-	1	-
V+SI110	-	-	-	-	1	1	2	2	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	3	1	7	4	6	-
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	3	1	6	3	6	3
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	1	1	-	1	4	-	1
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	7

Tabelle C.7: Schwellenenergie in [320]-Richtung.

[321]-Richtung

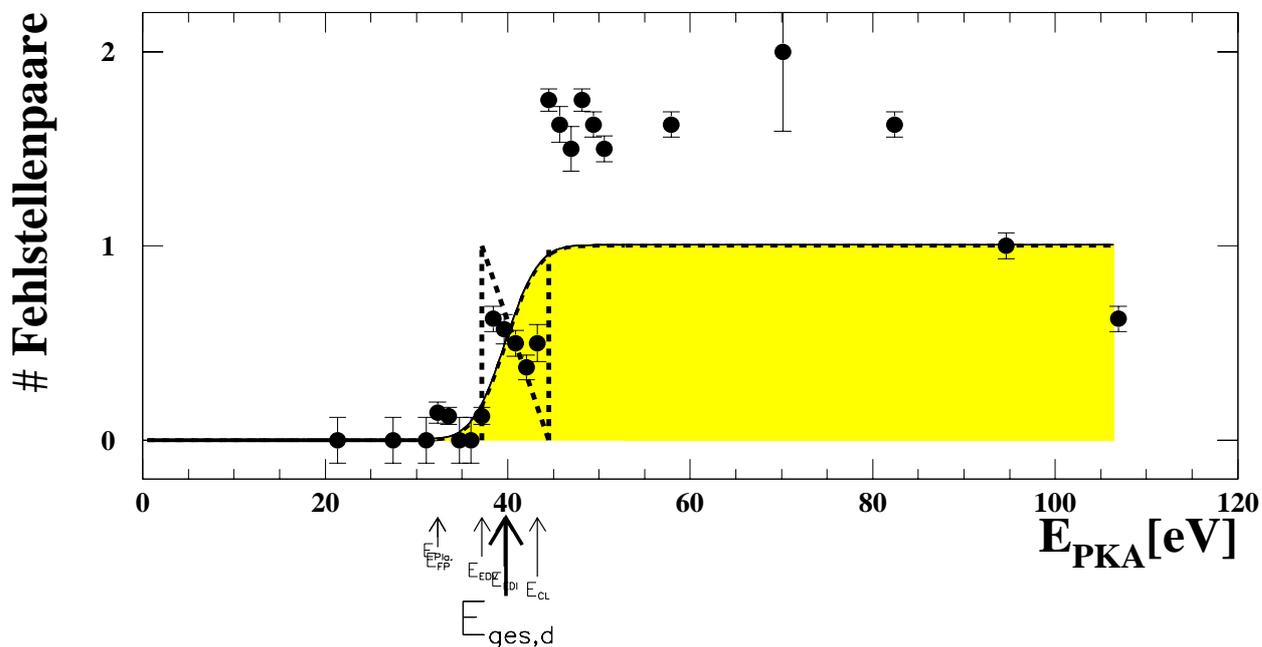
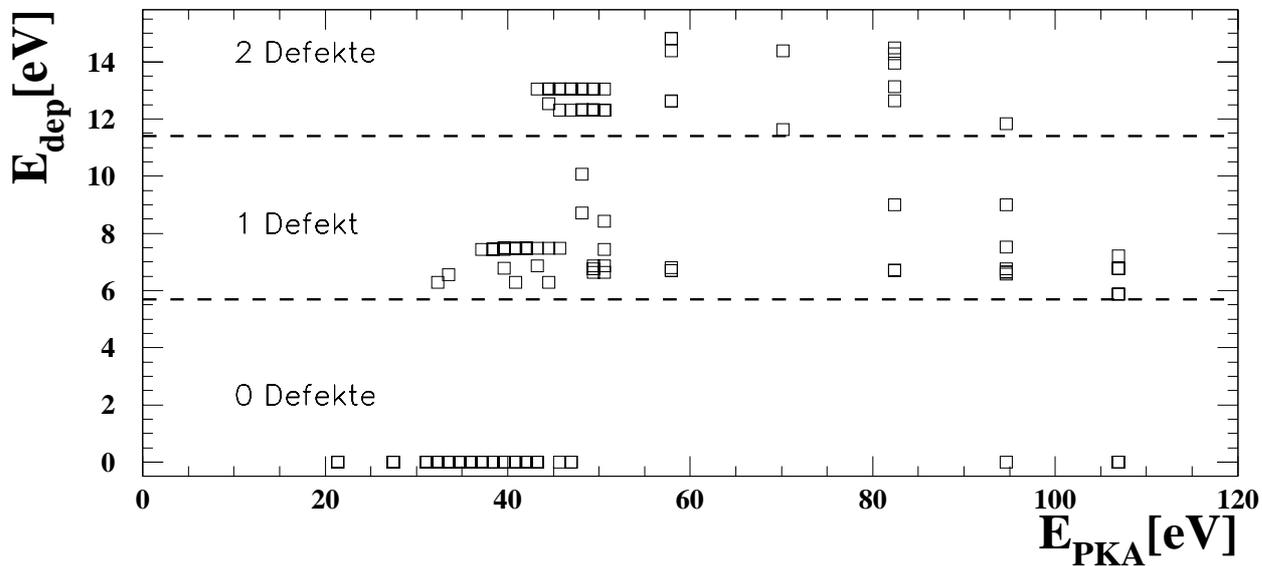


Abbildung C.5: Schwellenenergie in [321]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 39.80 \pm 0.01 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 2.85 \text{ eV}$ .  
 $E_{\text{Pla.,min}} = 32.3 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 32.3 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 37.2 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDL,min}} = 39.6 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 43.3 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	31.1	32.3	33.5	34.7	36.0	37.2	38.4	39.6	40.8	42.0	43.3	44.5	45.7	46.9	48.1	49.4	50.6	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	28.0	29.0	30.0	31.0	32.0	33.0	34.0	35.0	36.0	37.0	38.0	39.0	40.0	41.0	42.0	43.0	44.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	7	8	8	8	8	8	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	2	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	0.90	0.82	-	-	0.93	4.65	4.17	3.59	2.80	3.42	11.44	10.63	9.69	11.95	10.41	9.92	11.19	13.01	11.37	6.87	4.06
HOP	-	-	-	0.71	1.00	3.00	3.63	3.13	1.00	1.43	2.13	3.38	3.38	0.25	0.50	0.50	-	0.63	0.75	0.63	1.00	0.25	2.25	6.38
a) $\sum$ FP	-	-	-	0.14	-	-	-	0.13	0.50	0.14	0.25	0.25	0.13	0.25	0.13	-	-	-	-	-	-	-	0.13	0.25
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	0.13	-	-	-	0.13	0.13
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	0.14	-	-	0.13	-	0.13	0.13	0.25	0.50	0.50	1.00	0.50	0.50	0.38	0.13	0.13

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
FP110ED	-	-	-	1	-	-	-	-	-	1	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-
FP110	-	-	-	-	-	-	1	4	1	1	2	1	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	1	-	-	-	-	-	1	1	3	-	2	3	1	-
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	1	-	1	1	2	4	3	7	1	4	3	1	-	-
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{Z}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	3	1	-	-	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	1	-	-	-	1	2	2	1	-	-	-	-	2	1	2	2	1	1	1	1	1
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	6	6	6	6	5	4	3	1	5	1	-	-

Tabelle C.8: Schwellenenergie in [321]-Richtung.

[322]-Richtung

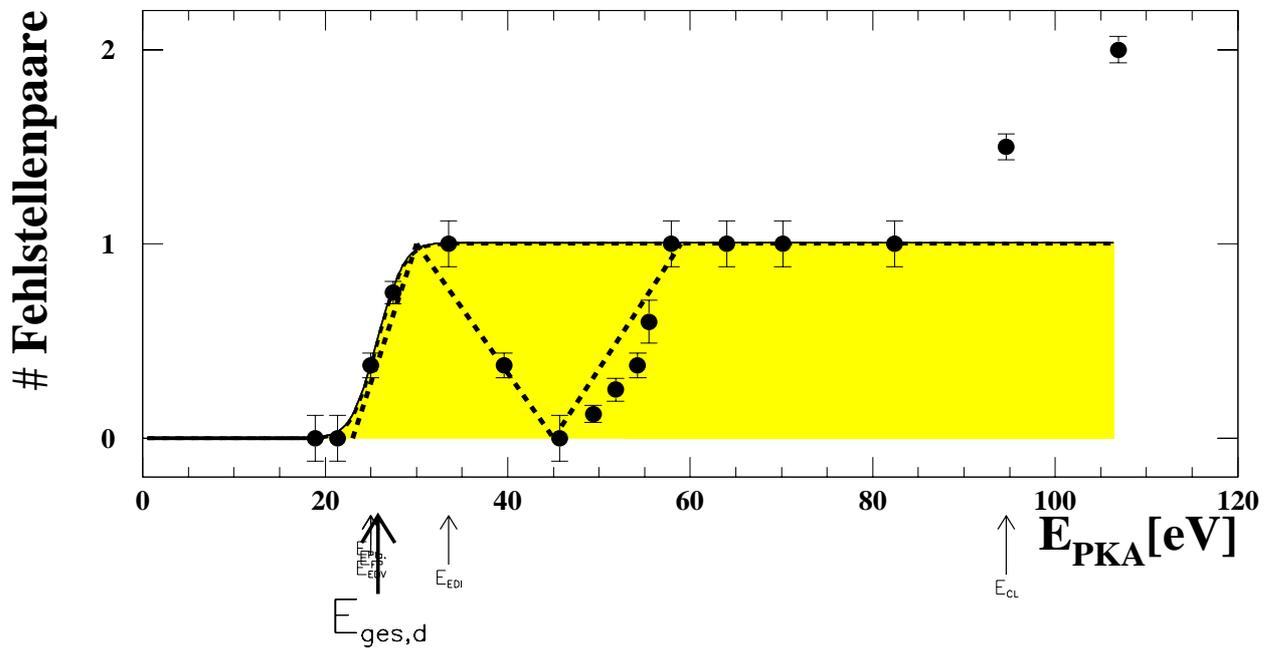
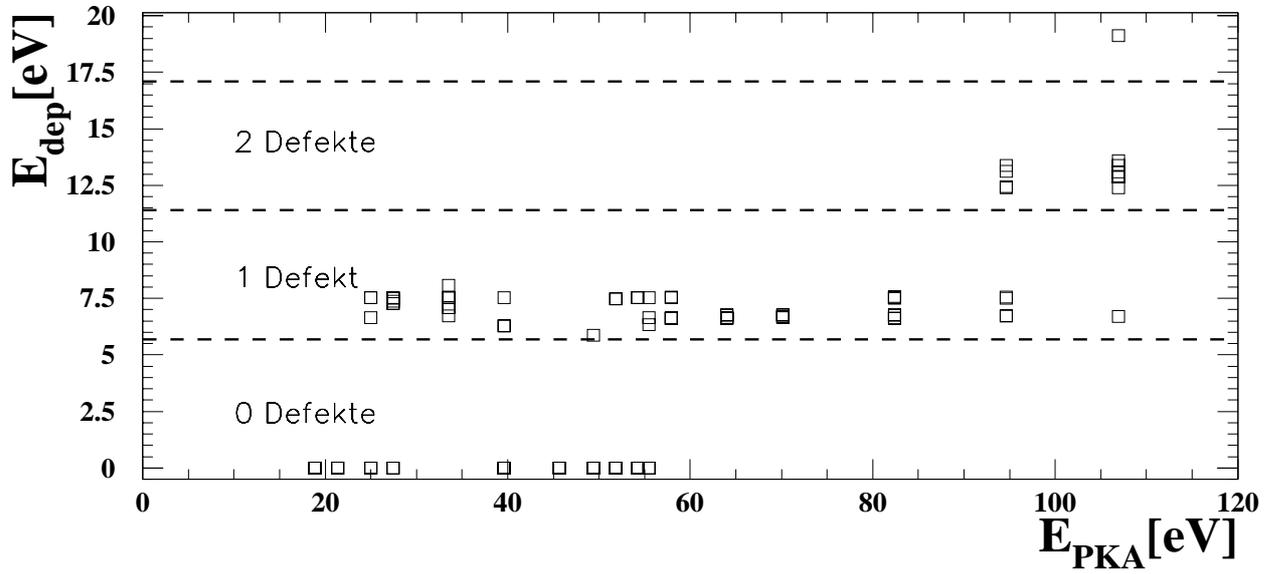


Abbildung C.6: Schwellenenergie in [322]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 25.80 \pm 0.01 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 2.3 \text{ eV}$ .  
 $E_{\text{Pla.,min}} = 24.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 24.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 24.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDi,min}} = 33.5 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 94.6 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	18.9	21.3	25.0	27.4	33.5	39.6	45.7	49.4	51.8	54.2	55.5	57.9	64.0	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	18.0	20.0	23.0	25.0	30.0	35.0	40.0	43.0	45.0	47.0	48.0	50.0	55.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	5	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	2.71	5.56	7.39	2.51	-	0.73	1.87	2.82	4.10	6.97	6.67	6.72	7.12	9.98	13.01
HOP	-	-	1.88	0.75	-	1.63	2.50	2.75	2.25	1.88	1.20	0.13	0.13	0.13	0.25	1.88	2.00
a) $\sum$ FP	-	-	0.13	0.25	-	0.25	-	0.13	-	-	0.40	0.13	0.13	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	0.25	0.25	0.13	0.13	-	-	-	0.25	0.20	0.63	0.50	0.13	0.25	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	0.50	-	-	-	-	0.13	-	0.13	0.25	0.88	0.75	0.75	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	1	-	-	2	-	-	-	2	1	1	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4	4	1	2	-	-
V+SI110	-	-	2	2	1	1	-	-	2	1	1	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	4	-	-	-	-	1	-	1	2	7	6	4	1
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	7	4	4	6
SI110	-	-	-	-	2	-	-	-	1	-	1	-	-	1	1	2	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	1	2	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	2	3	-	-	2	-	-	1	1	-	-	2	1	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3	6	-

Tabelle C.9: Schwellenenergie in [322]-Richtung.

[330]-Richtung

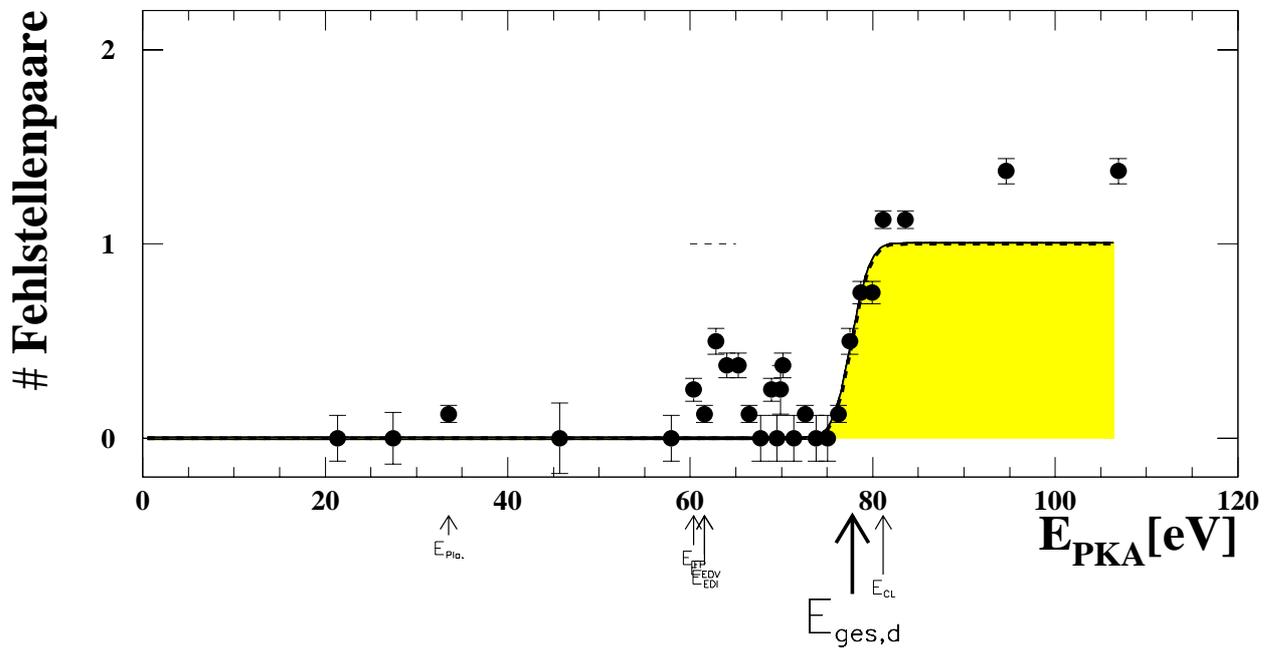
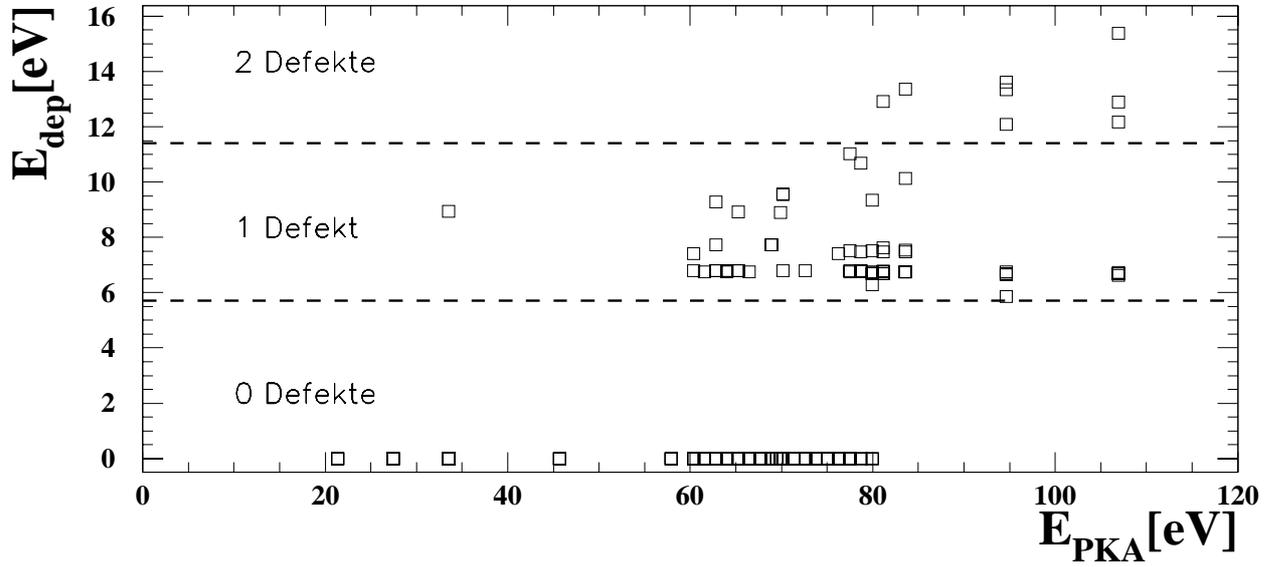


Abbildung C.7: Schwellenenergie in [330]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 77.76 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 1.6$  eV.  $E_{\text{Pla.,min}} = 33.5$  eV,  $E_{\text{FP,min}} = 60.4$  eV,  $E_{\text{EDV,min}} = 61.6$  eV,  $E_{\text{EDI,min}} = 61.6$  eV,  $E_{\text{CL,min}} = 81.2$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	45.7	57.9	60.4	61.6	62.8	64.0	65.2	66.5	67.7	68.9	69.5	69.9	70.1	71.4	72.6	73.8	75.0	76.3	77.5	78.7	79.9	81.2	83.6	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	40.0	50.0	52.0	53.0	54.0	55.0	56.0	57.0	58.0	59.0	59.5	59.8	60.0	61.0	62.0	63.0	64.0	65.0	66.0	67.0	68.0	69.0	71.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	7	8	5	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	4	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$(E_{dep})$ [eV]	-0.00	-	1.12	-	-	1.77	0.84	3.83	2.54	2.82	0.85	-	1.93	-	2.23	3.24	-	0.85	-	-	0.93	4.01	5.66	5.41	7.72	8.19	8.96	9.24	
HOP	-	-	0.25	-	0.50	0.75	1.75	0.25	1.00	0.88	1.13	1.00	0.50	1.25	0.50	0.75	1.50	1.63	2.13	1.88	1.00	1.63	1.38	2.75	1.25	2.38	2.75	4.50	
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	0.13	-	0.25	0.25	0.25	-	-	-	-	-	0.13	-	0.13	-	-	-	-	0.13	0.25	0.13	0.13	-	0.13	
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	-	-	-	0.13	
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	0.13	-	0.13	0.13	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.25	0.38	0.50	0.75	0.63	0.63	0.63

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-
FP110ED	-	-	-	-	-	1	-	2	2	2	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	-	1	1	1	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	-	

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	3	3	6	5	4	4	
SI110E	-	-	-	-	-	-	1	-	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	3	4	5	4	4	4	-	-	-	-	-	-	
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{11}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
$I_{111}^3$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-			
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-		
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-		
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	1	1	-	2	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	1	-	-	1	-	2	-	-	-	-	2	-	1	2	-	-	-	-	-	-	1	-	1	1	-	1	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	2	3

Tabelle C.10: Schwellenenergie in [330]-Richtung.

[331]-Richtung

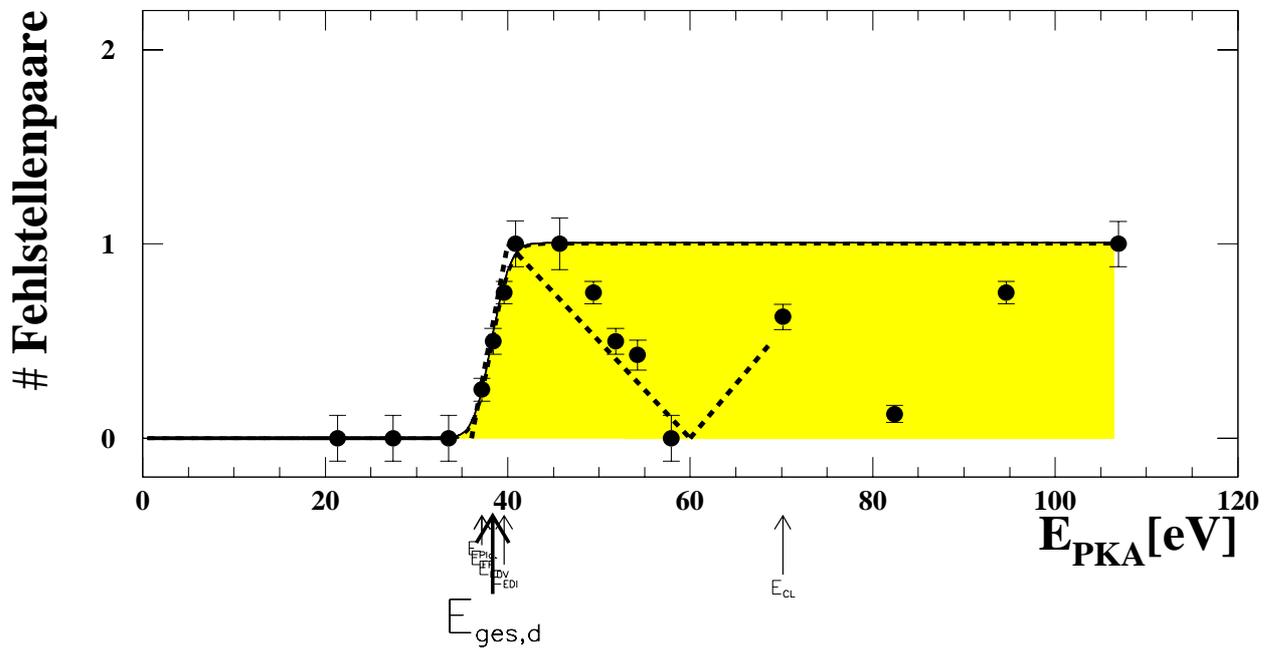
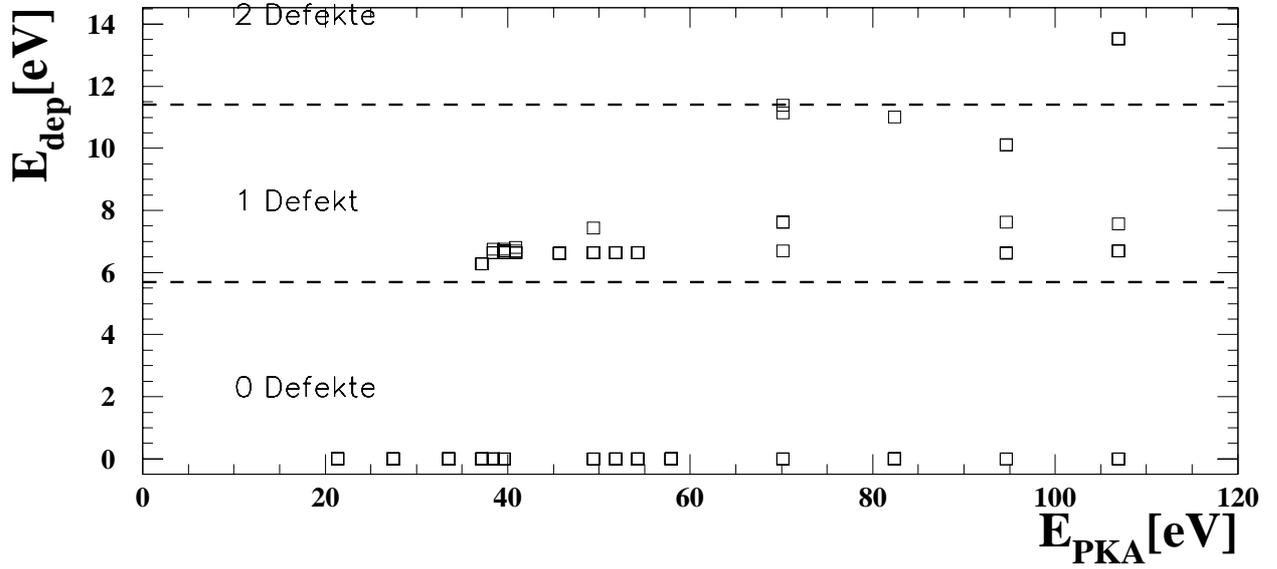


Abbildung C.8: Schwellenenergie in [331]-Richtung.  $E_{ges,d} = 38.35 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 1.6$  eV.  $E_{Pla.,min} = 37.2$  eV,  $E_{FP,min} = 37.2$  eV,  $E_{EDV,min} = 38.4$  eV,  $E_{EDI,min} = 39.6$  eV,  $E_{CL,min} = 70.1$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	37.2	38.4	39.6	40.8	45.7	49.4	51.8	54.2	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	33.0	34.0	35.0	36.0	40.0	43.0	45.0	47.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	7	8	8	7	8	8	8	8	7

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-0.00	-	-	1.57	3.33	5.02	6.67	6.62	5.08	3.32	2.84	-	5.56	1.38	5.97	6.86
HOP	-	-	-	2.50	1.75	0.75	-	1.00	1.00	2.00	2.29	0.75	2.38	3.25	0.88	3.00
a) $\sum$ FP	-	-	-	0.25	-	-	-	1.00	0.13	-	-	-	-	-	0.13	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	0.50	0.25	0.75	-	0.63	0.50	0.43	-	-	-	0.25	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	0.50	0.25	-	-	-	-	-	0.38	-	0.38	0.71

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	2	-	-	-	7	-	-	-	-	-	-	1	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	3	2	6	-	5	4	3	-	-	-	2	-
V+SI110	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	4	2	-	-	-	-	-	3	-	2	2
SI110E	-	-	-	-	-	4	2	-	-	-	-	-	1	-	1	3
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	1	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	2
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	1	-	-

Tabelle C.11: Schwellenenergie in [331]-Richtung.

[332]-Richtung

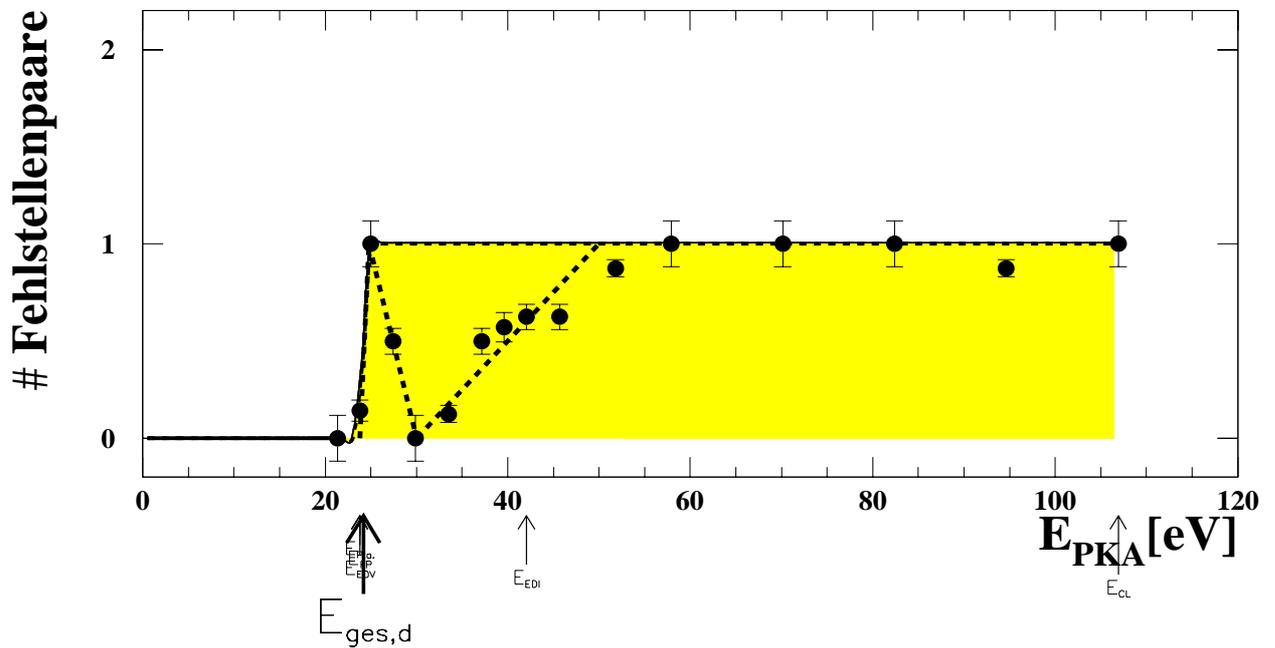
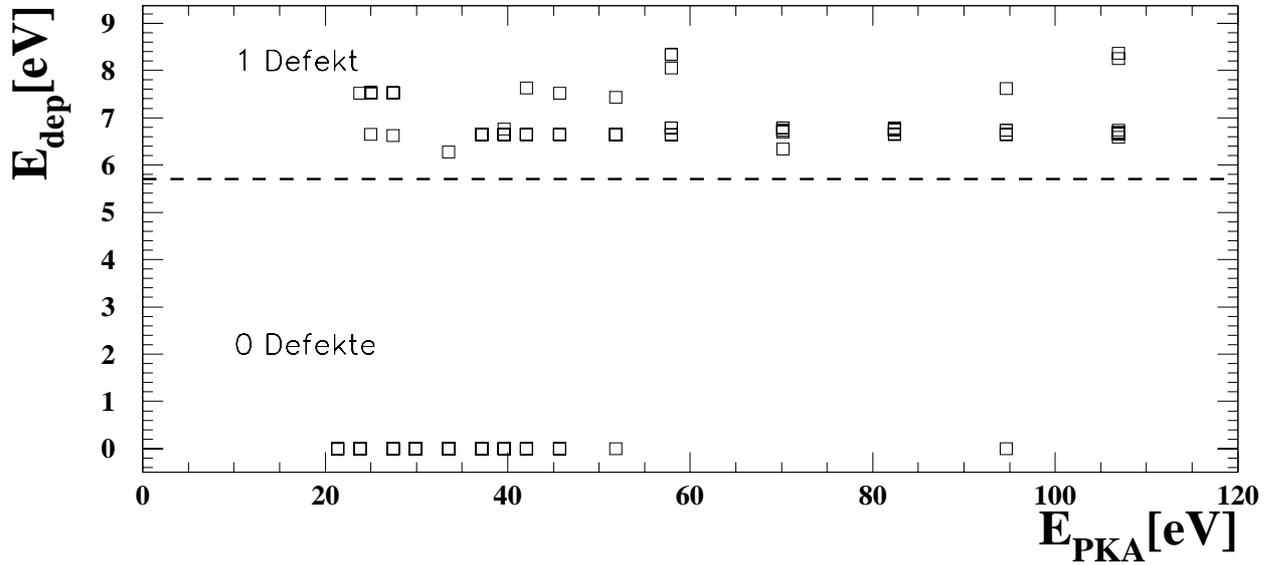


Abbildung C.9: Schwellenenergie in [332]-Richtung.  $E_{ges,d} = 24.17 \pm 0.06$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 0.4$  eV.  $E_{Pla.,min} = 23.8$  eV,  $E_{FP,min} = 23.8$  eV,  $E_{EDV,min} = 23.8$  eV,  $E_{EDI,min} = 42.0$  eV,  $E_{CL,min} > 107$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	23.8	25.0	27.4	29.9	33.5	37.2	39.6	42.0	45.7	51.8	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	22.0	23.0	25.0	27.0	30.0	33.0	35.0	37.0	40.0	45.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	7	8	8	8	8	8	7	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-0.00	1.07	7.41	3.65	-	0.79	3.32	3.81	4.28	4.26	5.91	7.30	6.70	6.72	5.96	7.08
HOP	-	2.57	-	1.88	3.00	2.63	0.75	0.57	1.25	0.88	0.38	0.50	-	0.25	0.38	1.75
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	0.13	-	0.14	-	-	0.13	0.13	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	0.14	1.00	0.38	-	-	0.50	0.43	0.50	0.50	0.75	0.25	0.13	0.38	0.50	0.25
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	-	0.50	0.38	0.63	0.38	0.50

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	1	-	-	-	4	3	4	4	6	2	1	3	4	1
V+SI110	-	1	7	3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	4	3	5	3	4
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3	3	5	2	4
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	3	-	-	1
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1

Tabelle C.12: Schwellenenergie in [332]-Richtung.

[333]-Richtung

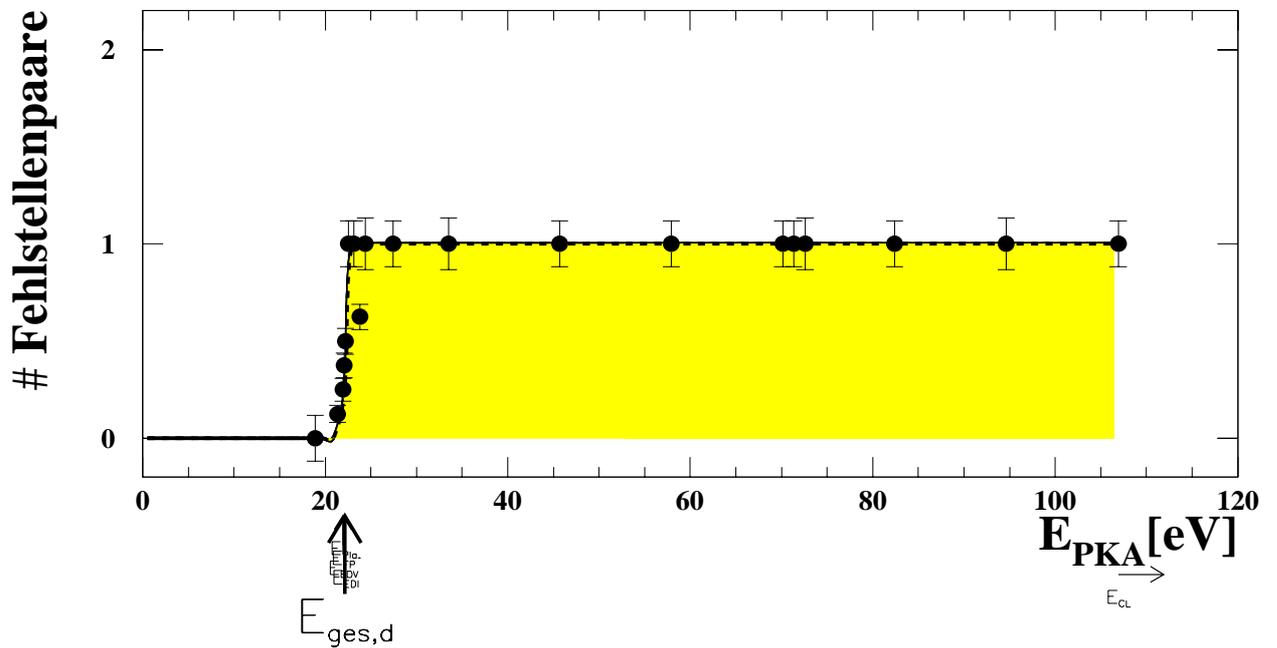
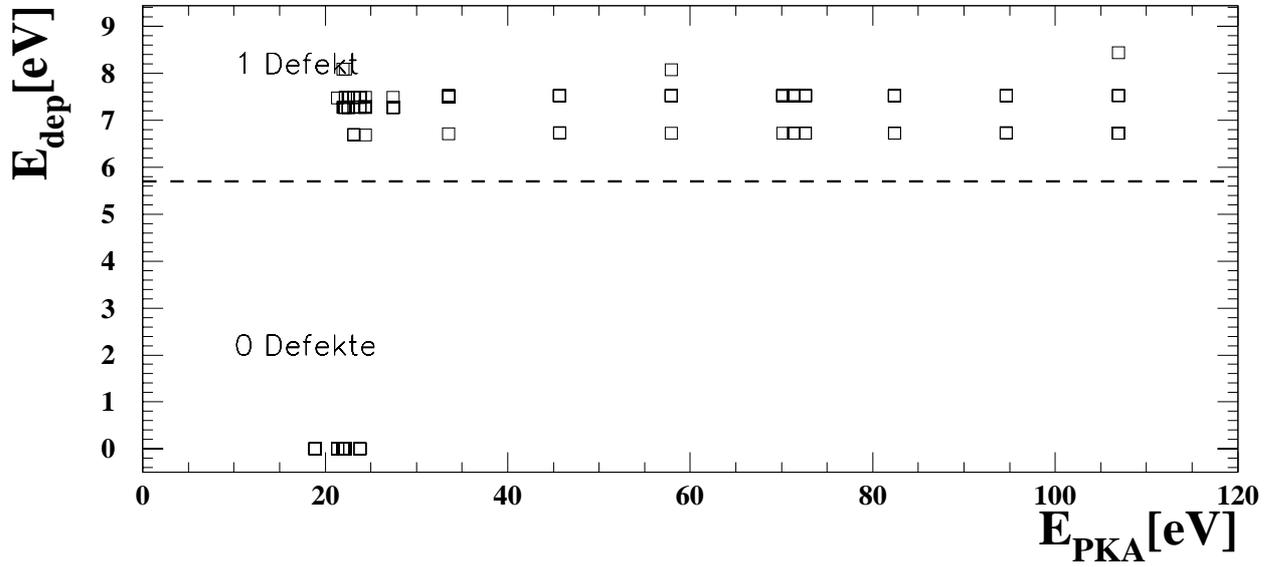


Abbildung C.10: Schwellenenergie in [333]-Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 22.16 \pm 0.01 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 0.3 \text{ eV}$ .  
 $E_{\text{Pla.,min}} = 22.0 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 22.0 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 22.0 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDI,min}} = 22.2 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} > 107 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	18.9	21.3	22.0	22.1	22.2	22.6	23.2	23.8	24.4	27.4	33.5	45.7	57.9	70.1	71.4	72.6	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	18.0	20.0	20.5	20.6	20.7	21.0	21.5	22.0	22.5	25.0	30.0	40.0	50.0	60.0	61.0	62.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	7	8	7	8	8	8	8	7	8	7	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	0.93	1.92	2.73	3.79	7.36	7.26	4.63	7.22	7.30	7.40	7.33	7.50	7.43	7.23	7.30	7.33	7.19	7.14
HOP	-	-	-	-	0.75	-	-	1.13	-	-	-	-	2.13	2.00	2.00	2.00	2.75	3.14	3.00
a) $\sum$ FP	-	-	0.13	0.38	0.13	0.63	0.13	0.38	0.71	0.63	-	-	-	-	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	0.25	0.13	0.25	0.25	-	0.13	-	0.25	-	-	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	0.13	0.13	0.38	0.13	0.14	-	0.86	0.50	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	1	3	1	5	1	2	5	5	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	2	1	2	2	-	1	-	2	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	1	1	3	1	1	-	6	4	8	8	8	7	8	7	8
SI110E	-	-	-	-	-	-	2	-	1	-	1	2	1	1	3	3	2	3	5
SI110	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	5	2	6	6	5	4	6	4	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
IT	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	1
DEF: $10 < n \leq 19$	-	1	1	-	-	2	2	-	1	2	1	2	-	-	-	-	-	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabelle C.13: Schwellenenergie in [333]-Richtung.

$[310]$ -Richtung

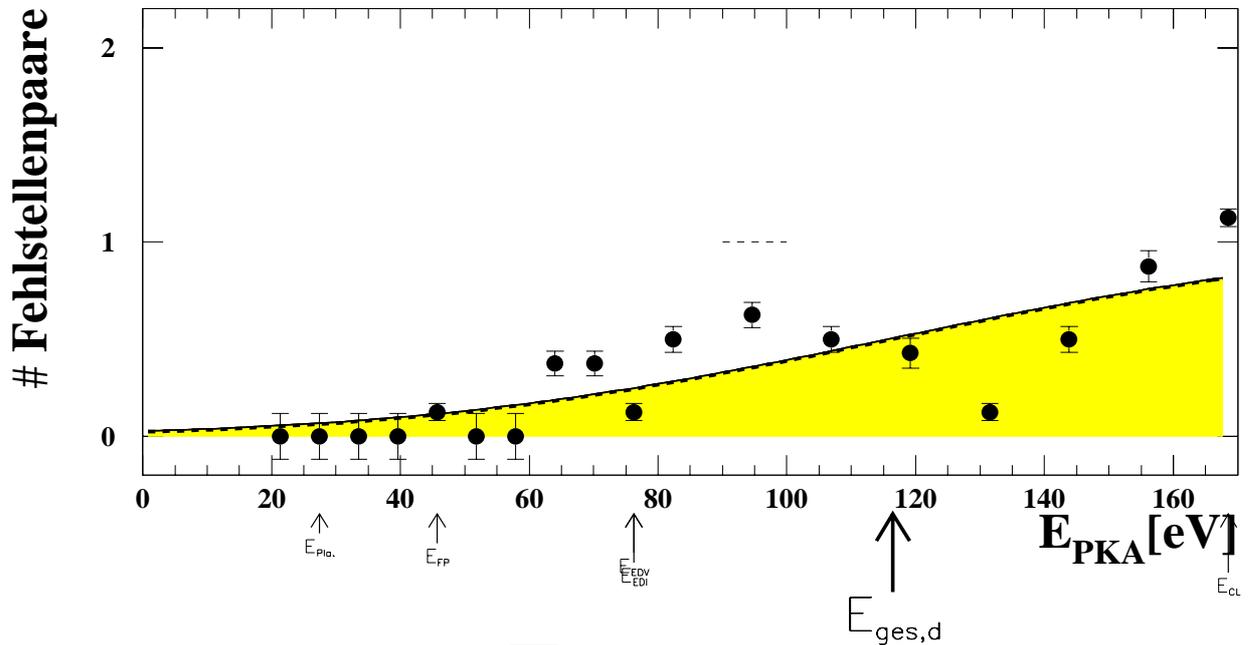
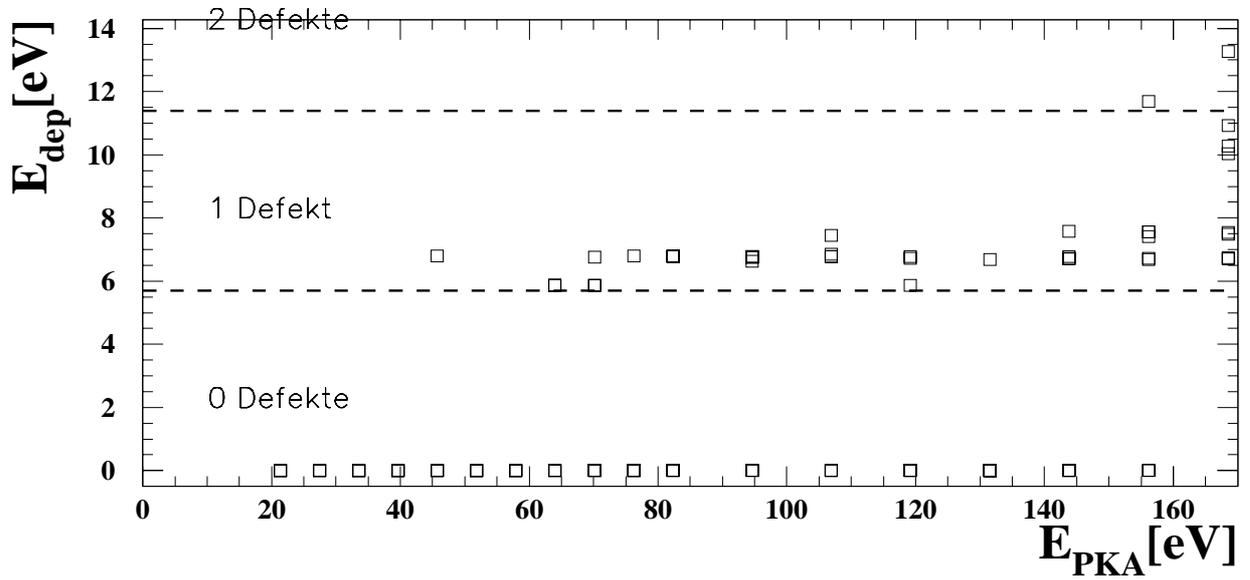


Abbildung C.11: Schwellenenergie in  $[310]$ -Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 116.47 \pm 0.18 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 58.0 \text{ eV}$ .

$E_{\text{Pla.,min}} = 27.4 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 45.7 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 76.3 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDI,min}} = 76.3 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 168.5 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	39.6	45.7	51.8	57.9	64.0	70.1	76.3	82.4	88.5	94.6	100.7	106.9	113.0	119.2	125.3	131.5	137.6	143.8	149.9	156.2	162.3	168.5	
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	95.0	100.0	105.0	110.0	115.0	120.0	125.0	130.0	135.0	140.0	145.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	0.85	-	-	2.20	2.31	0.85	3.39	4.22	3.48	2.77	0.83	3.47	5.95	9.12								
HOP	-	2.00	2.00	2.00	2.63	3.00	3.00	1.75	2.00	3.38	1.63	1.50	3.00	3.57	7.00	8.38	8.13	5.50								
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	0.13	-	-	0.38	0.38	-	-	-	-	0.14	-	-	-	-								
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.25	-	-	-	-	-	-	-								
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	0.50	0.38	0.38	0.29	-	0.38	0.63	0.75								

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	3	2	-	-	-	-	1	-	-	-	-								
FP110ED	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-								
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-								
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	4	3	3	2	-	3	5	5								
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	4	3	3	2	-	3	2	1								
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	3								
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	3	2	-	-	-	-	1	-	-	-	-								
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	1	2	3								
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-								1

Tabelle C.14:  $[\bar{3}10]$ -Richtung.

$[311]$ -Richtung

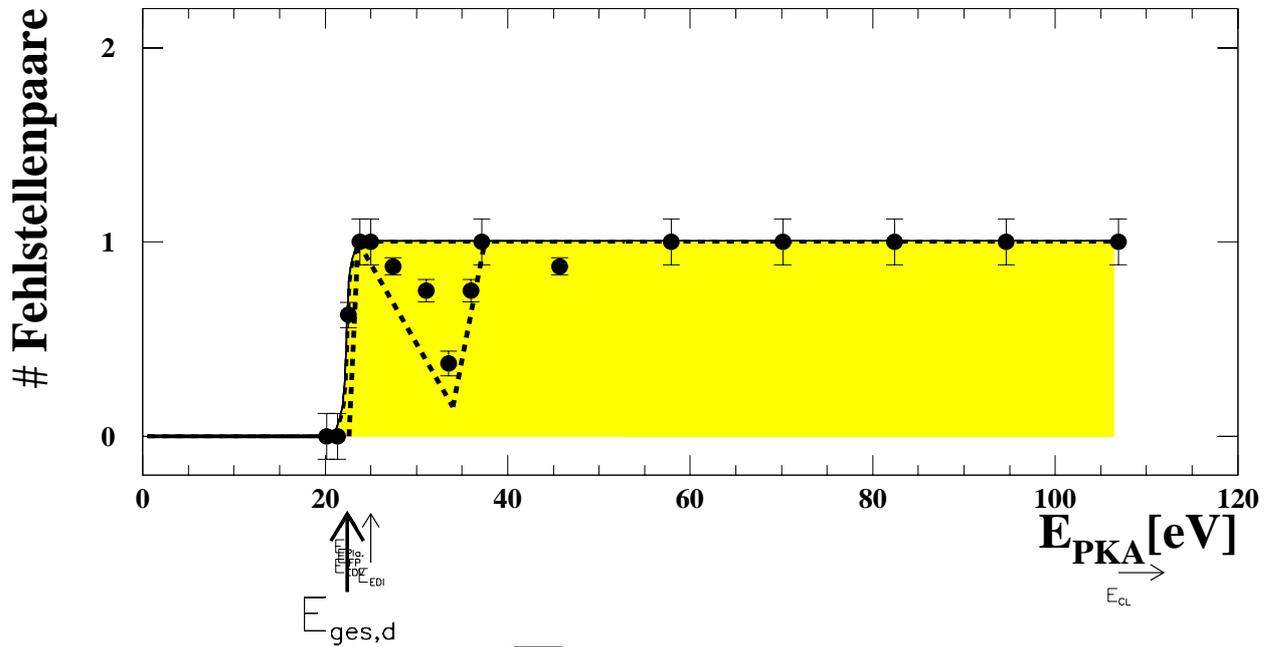
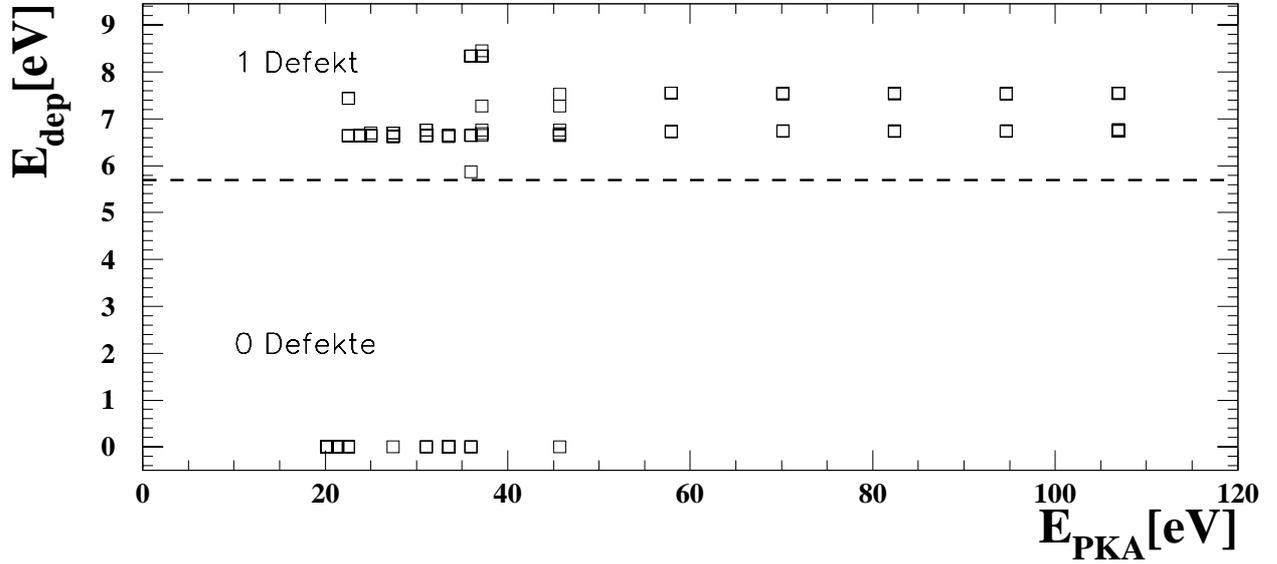


Abbildung C.12: Schwellenenergie in  $[311]$ -Richtung.  $E_{ges,d} = 22.41 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 0.46$  eV.

$E_{Pla,min} = 22.6$  eV,  $E_{FP,min} = 22.6$  eV,  $E_{EDV,min} = 22.6$  eV,  $E_{EDI,min} = 25.0$  eV,  $E_{EDI,min} > 107$  eV

$\bar{E}_{PKA}$ [eV]	20.1	21.3	22.6	23.8	25.0	27.4	31.1	33.5	36.0	37.2	45.7	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	25.0	28.0	30.0	32.0	33.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	4.35	6.64	6.65	5.83	5.01	2.49	5.52	7.61	6.02	7.24	7.34	7.14	7.24	7.15
HOP	-	-	1.38	-	-	0.50	0.63	1.75	0.88	-	0.63	1.00	1.75	2.13	2.63	3.00
a) $\sum$ FP	-	-	0.25	-	-	0.25	-	0.13	0.38	0.13	0.13	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	0.38	1.00	0.88	0.25	0.75	0.25	0.25	0.13	0.38	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	0.13	0.38	-	-	0.13	0.75	0.13	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	2	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	2	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	3	8	7	2	4	2	2	1	2	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	1	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	1	3	-	-	1	6	1	8	8	8	8	8
SI110E	-	-	-	-	1	3	-	-	-	2	1	3	3	4	3	4
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5	5	3	5	4
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	1	4	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabelle C.15:  $[\bar{3}11]$ -Richtung.

$[320]$ -Richtung

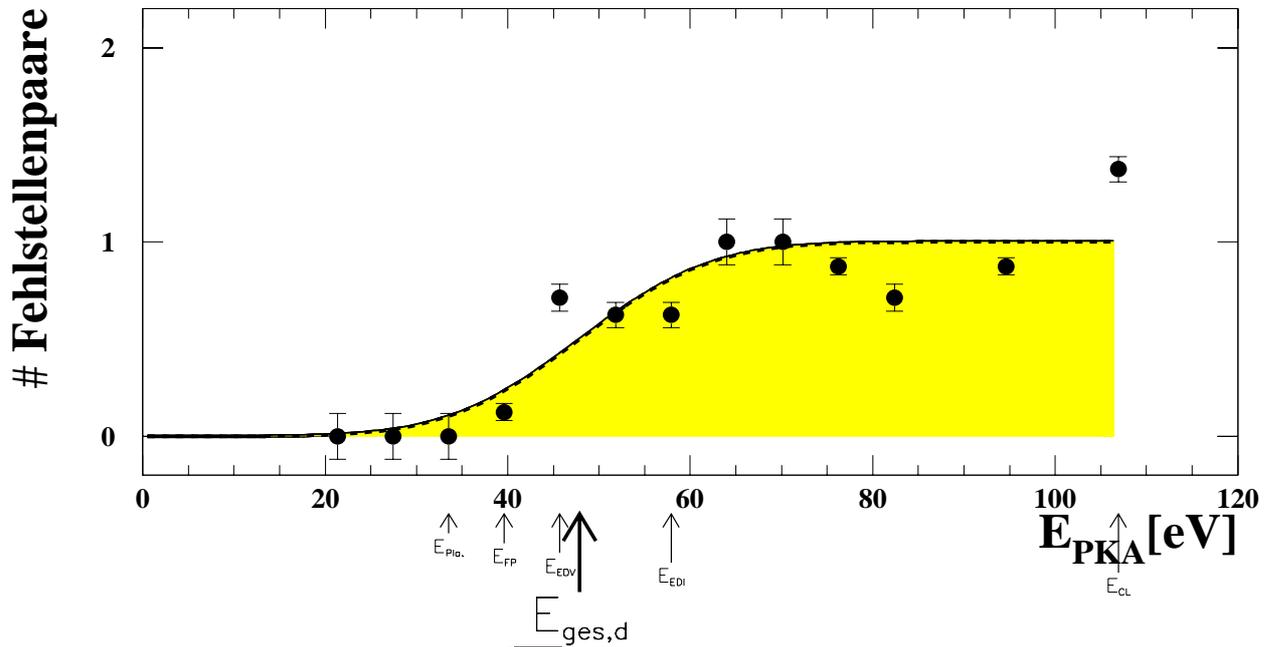
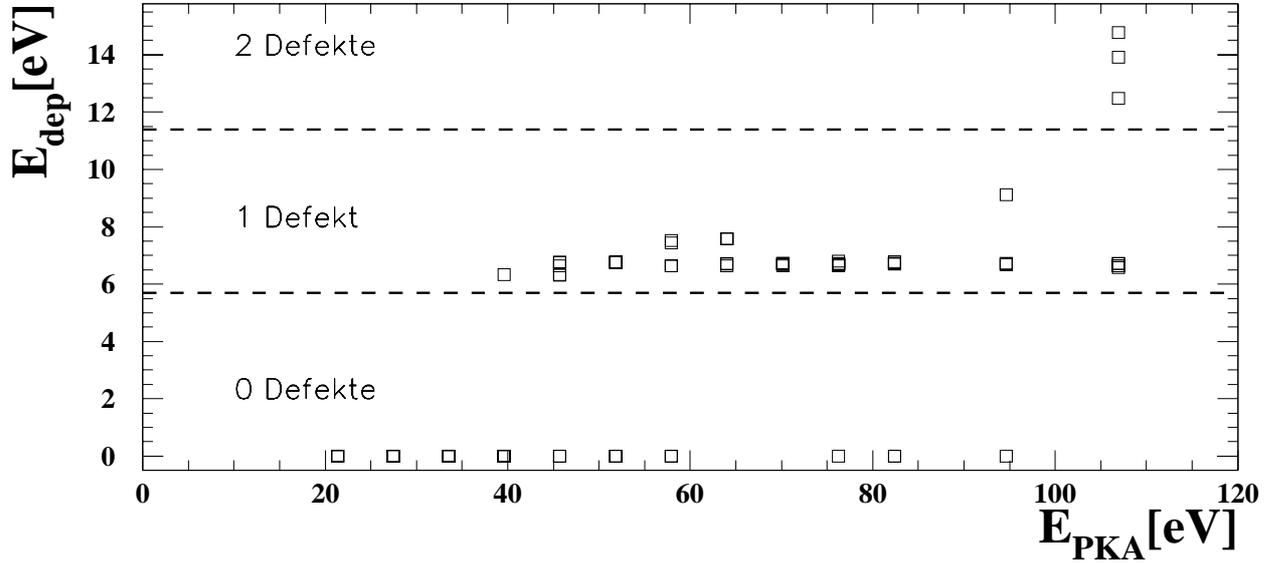


Abbildung C.13: Schwellenenergie in  $[320]$ -Richtung.  $E_{ges,d} = 47.88 \pm 0.06$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 11.4$  eV.

$E_{Pl.,min} = 33.5$  eV,  $E_{FP,min} = 39.6$  eV,  $E_{EDV,min} = 45.7$  eV,  $E_{EDI,min} = 57.9$  eV,  $E_{CL,min} = 107$  eV.

$\bar{E}_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	39.6	45.7	51.8	57.9	64.0	70.1	76.3	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	55.0	60.0	65.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	7	8	8	8	8	8	7	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	0.79	4.69	4.23	4.36	7.24	6.70	5.87	4.81	6.17	9.31
HOP	-	-	3.00	2.25	1.43	1.13	2.00	1.00	1.13	1.75	1.71	3.00	3.13
a) $\sum$ FP	-	-	-	0.13	0.14	0.25	0.13	-	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	0.29	0.38	0.38	0.13	0.13	0.13	-	-	0.38
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	0.13	0.88	0.88	0.63	0.57	0.75	0.25

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	1	1	2	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	1	-	2	1	1	1	-	-	2
V+SI110	-	-	-	-	1	3	1	-	-	-	-	-	1
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	1	7	7	5	4	6	2
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	2	7	5	4	6	2
SI110	-	-	-	-	-	-	1	5	-	-	-	-	-
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	1	-	-	-	-	1	1	1	2
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2

Tabelle C.16:  $[\bar{3}20]$ -Richtung.

**[321]-Richtung**

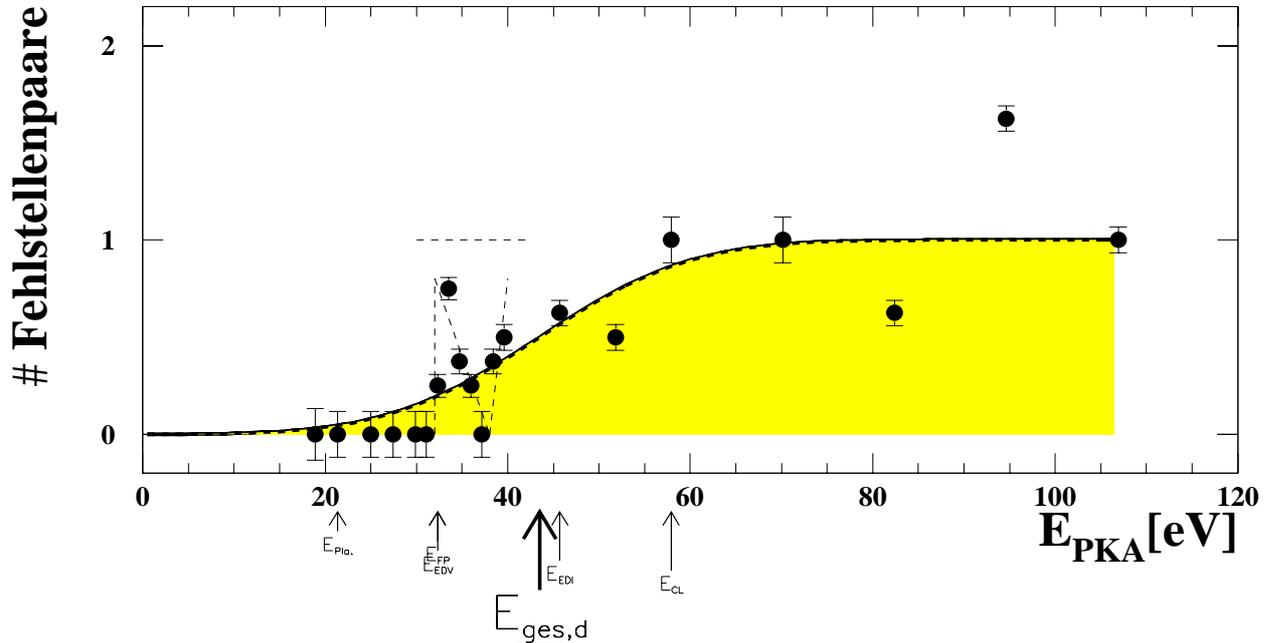
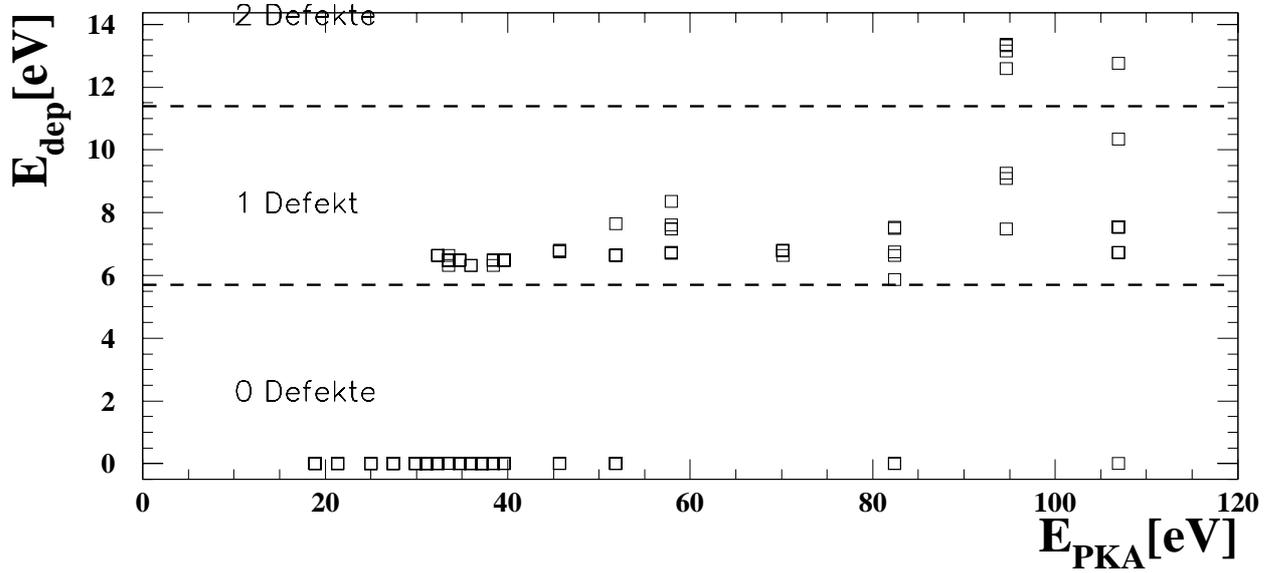


Abbildung C.14: Schwellenenergie in [321]-Richtung.  $E_{ges,d} = 43.50 \pm 0.05$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 13.1$  eV.

$E_{Pla,min} = 21.3$  eV,  $E_{FP,min} = 32.3$  eV,  $E_{EDV,min} = 32.3$  eV,  $E_{EDI,min} = 45.7$  eV,  $E_{CL,min} = 57.9$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	18.9	21.3	25.0	27.4	29.9	31.1	32.3	33.5	34.7	36.0	37.2	38.4	39.6	45.7	51.8	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	18.0	20.0	23.0	25.0	27.0	28.0	29.0	30.0	31.0	32.0	33.0	34.0	35.0	40.0	45.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	-	-	1.66	4.87	2.44	1.58	-	2.41	3.25	4.23	3.45	7.23	6.77	4.28	11.45	7.40
HOP	-	1.88	3.00	3.00	3.00	2.63	2.25	0.88	2.00	2.50	3.00	2.00	1.50	2.25	1.75	-	-	3.88	1.50	1.75
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	0.13	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	0.13	0.63	0.38	-	-	0.13	0.50	0.38	0.38	-	0.13	0.13	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.25	0.13	0.38	0.88	0.25	0.50	0.75

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	1	5	3	-	-	1	4	-	3	-	1	1	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	1	3	7	2	-	5
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	2	7	2	3	3
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1	-	-	1	3
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{11}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	1	-	2	-	1	-	-	-	-	-	-	1	1
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	1	-	-	-	3	-	1	2	1
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	5	1

Tabelle C.17:  $[\bar{3}21]$ -Richtung.

$[322]$ -Richtung

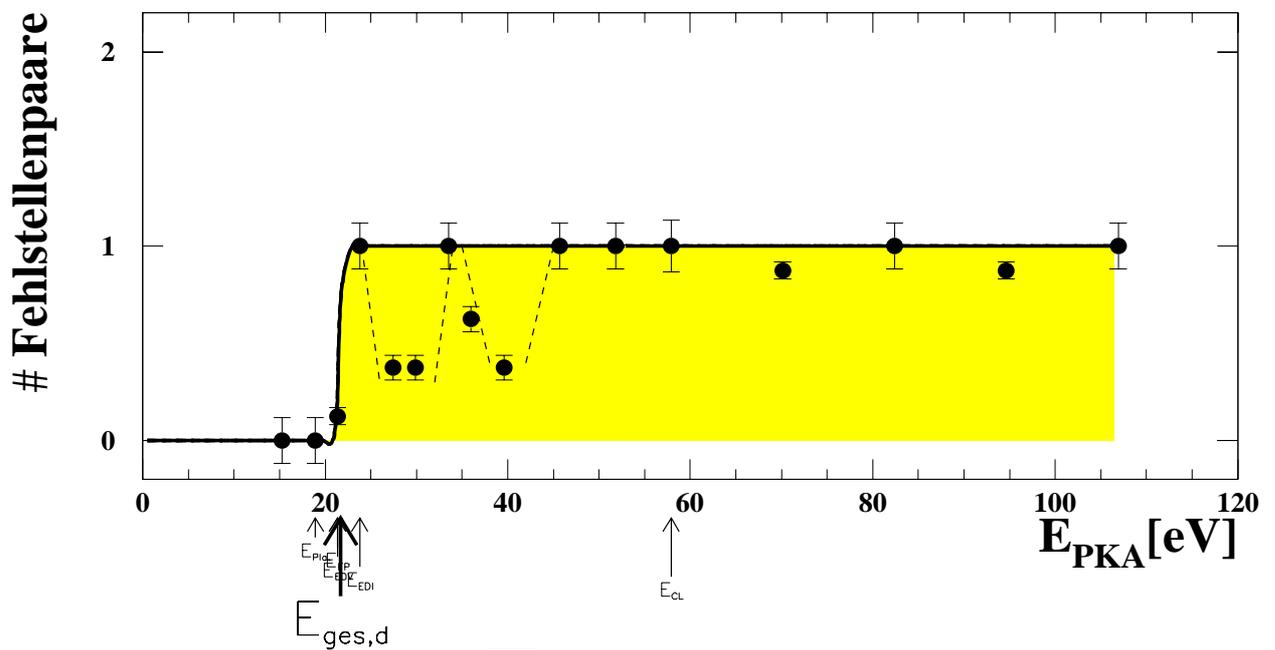
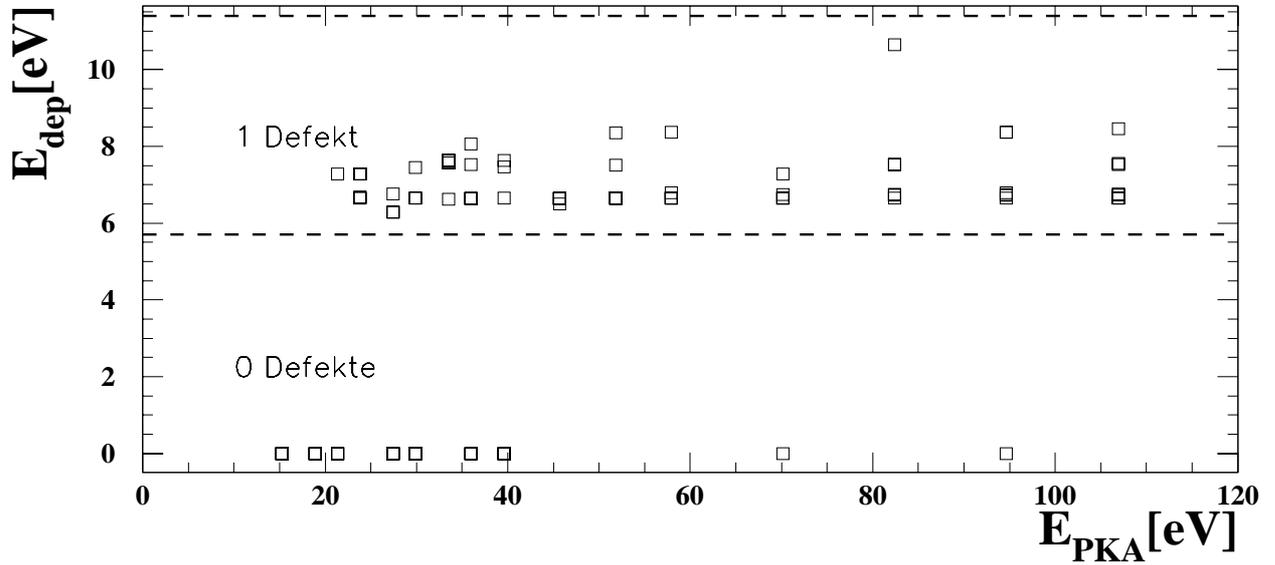


Abbildung C.15: Schwellenenergie in  $[322]$ -Richtung.  $E_{ges,d} = 21.66 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 0.3$  eV.  $E_{Pla,min} = 18.9$  eV,  $E_{FP,min} = 21.3$  eV,  $E_{EDV,min} = 23.3$  eV,  $E_{EDI,min} = 23.8$  eV,  $E_{CL,min} = 57.9$  eV.

$\bar{E}_{PKA}$ [eV]	15.3	18.9	21.3	23.8	27.4	29.9	33.5	36.0	39.6	45.7	51.8	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	15.0	18.0	20.0	22.0	25.0	27.0	30.0	32.0	35.0	40.0	45.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	7	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	0.91	7.04	2.42	2.59	7.48	4.44	2.72	6.62	6.96	6.91	5.91	7.51	6.29	7.12
HOP	-	2.50	2.63	-	1.13	1.38	-	0.38	3.13	-	-	-	0.38	0.63	1.38	0.63
a) $\sum$ FP	-	-	0.13	0.63	0.25	-	0.13	-	0.13	-	0.13	-	0.13	-	-	0.13
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	0.25	-	0.38	-	1.00	0.75	0.71	0.63	0.13	0.13	0.25
c) $\sum$ EDI	-	-	-	0.25	-	-	0.88	0.25	0.13	-	0.13	0.14	0.13	0.63	0.63	0.63

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	1	2	-	1	-	1	-	-	-	-	-	-	1
FP110	-	-	1	4	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	2	-	3	-	8	6	5	5	-	1	2
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	2	-	-	7	2	1	-	1	1	1	5	5	5
SI110E	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	1	1	3	4	2
SI110	-	-	-	-	-	-	6	1	1	-	1	-	-	2	-	2
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	1	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	1	1	1	1	-	1	-	-	-	-	1	2	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-

Tabelle C.18:  $[\bar{3}22]$ -Richtung.

$[331]$ -Richtung

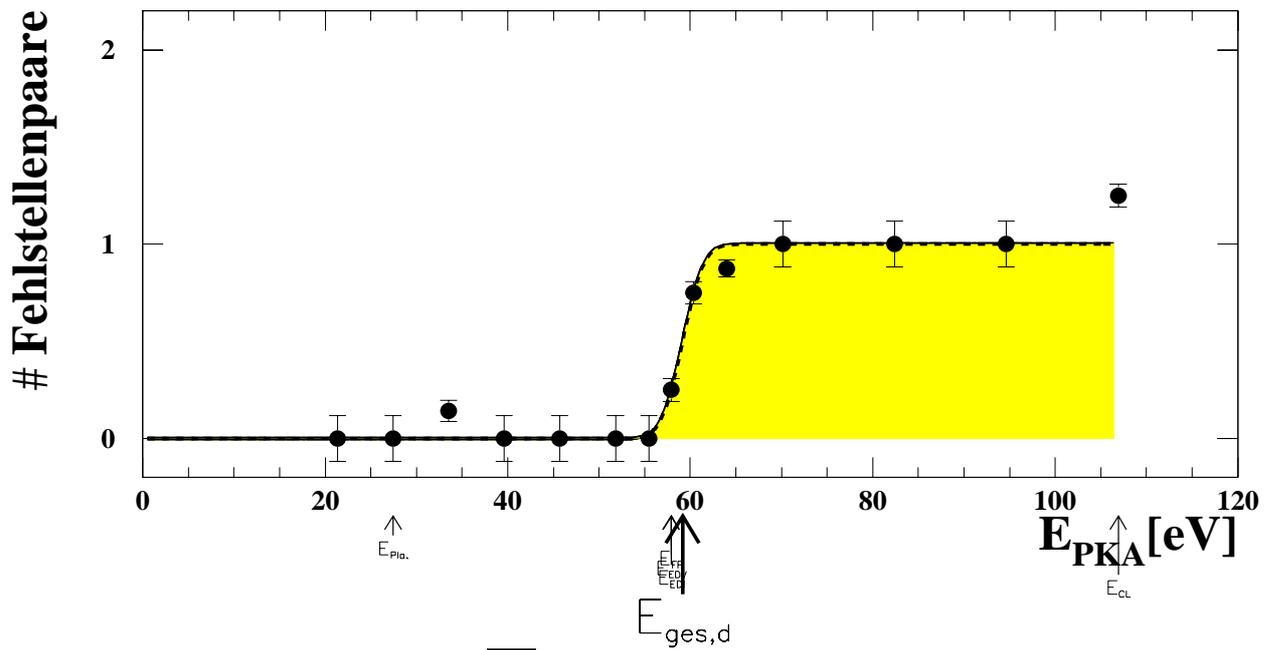
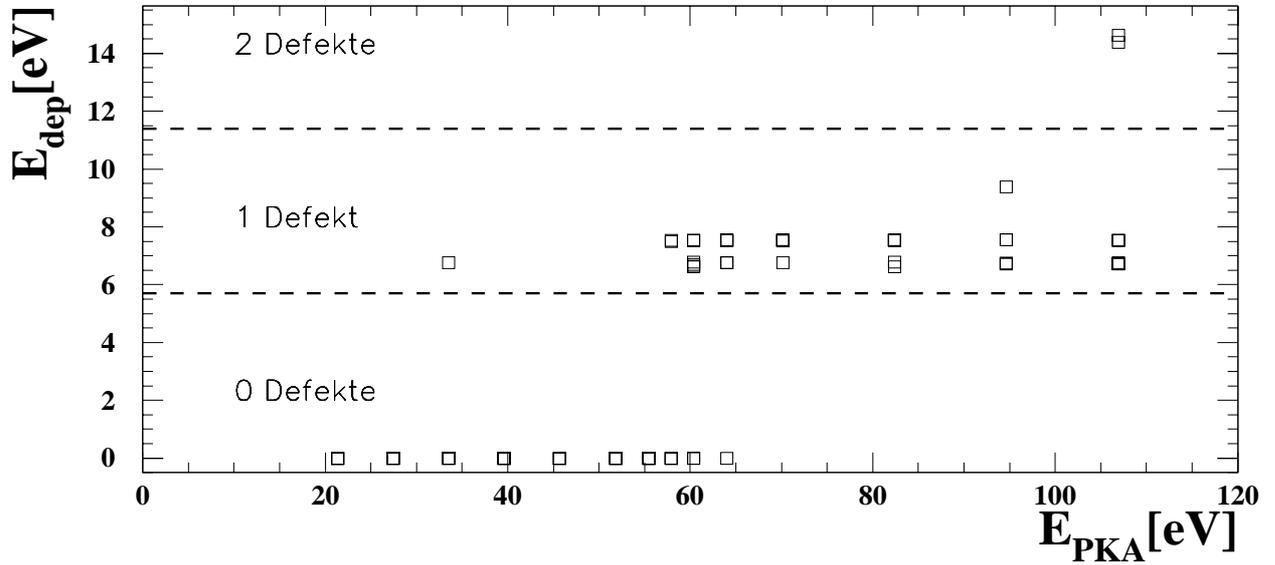


Abbildung C.16: Schwellenenergie in  $[331]$ -Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 59.16 \pm 0.01 \text{ eV}$  mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 1.8 \text{ eV}$ .  $E_{\text{Pla.,min}} = 27.4 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{FP,min}} = 57.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDV,min}} = 57.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{EDL,min}} = 57.9 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{CL,min}} = 107 \text{ eV}$ .

$E_{PKA}$ [eV]	21.3	27.4	33.5	39.6	45.7	51.8	55.5	57.9	60.4	64.0	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	48.0	50.0	52.0	55.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	0.97	-	-	-	-	1.88	5.22	6.30	7.45	7.33	7.27	8.88
HOP	-	3.25	1.43	2.63	3.00	3.00	2.50	2.25	1.13	0.88	2.13	2.13	2.38	2.00
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	-	-	0.25	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	-	0.25	0.25	0.75	1.00	0.88	1.00	1.13

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	-	-	2	2	6	8	7	7	6
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	2	3	3	1	6	5
SI110	-	-	-	-	-	-	-	2	-	3	5	6	2	3
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{111}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	1
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	1	-	-	-	-	-	2	1	-	-	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1

Tabelle C.19:  $[\bar{3}31]$ -Richtung.

$[332]$ -Richtung

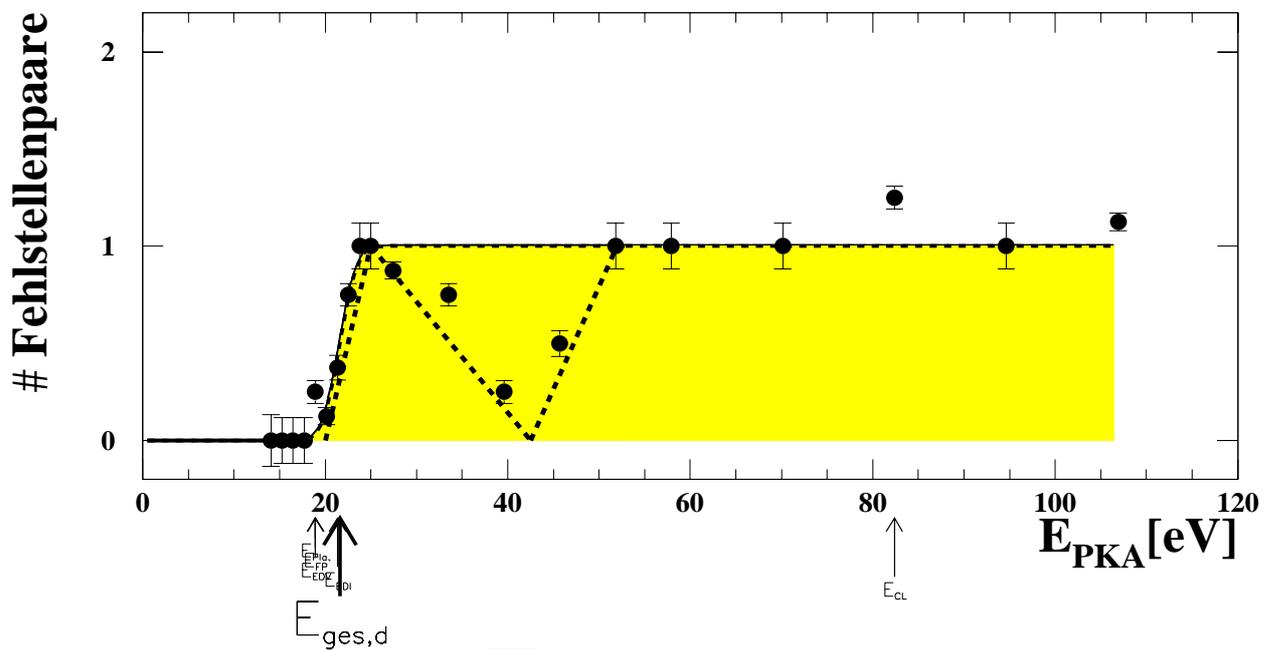
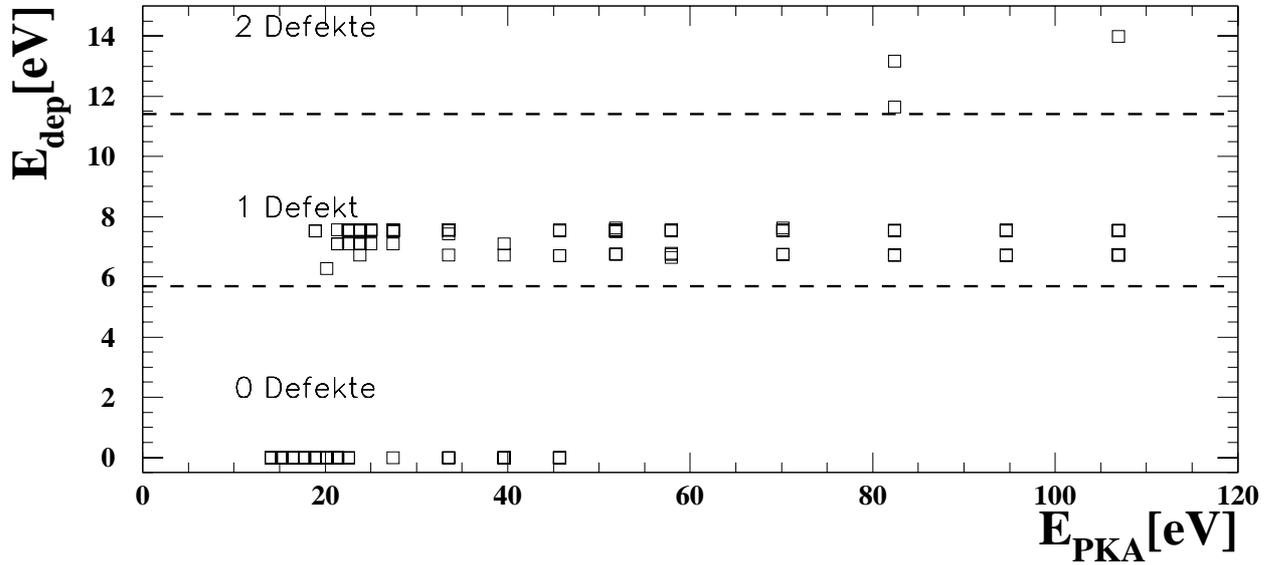


Abbildung C.17: Schwellenenergie in  $[332]$ -Richtung.  $E_{ges,d} = 21.60 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{ges,d}} = 1.5$  eV.  $E_{Pla.,min} = 18.9$  eV,  $E_{FP,min} = 18.9$  eV,  $E_{EDV,min} = 18.9$  eV,  $E_{EDI,min} = 21.3$  eV,  $E_{CL,min} = 82.4$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	14.0	15.3	16.5	17.7	18.9	20.1	21.3	22.6	23.8	25.0	27.4	33.5	39.6	45.7	51.8	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	1.88	0.79	2.72	5.61	7.34	7.50	6.55	5.55	1.73	3.56	7.35	7.24	7.25	8.45	7.23	7.94
HOP	-	-	-	-	2.00	3.13	2.00	0.88	-	-	0.50	0.75	2.25	1.75	0.50	1.25	1.75	2.25	1.00	2.00
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	0.13	-	-	-	-	-	-	-	0.13	-	-	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	-	0.13	0.50	0.63	0.88	0.63	0.50	-	0.50	1.00	0.88	1.00	0.88	1.00	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	1	4	5	7	5	4	-	4	8	7	8	7	8	8	8
SI110E	-	-	-	-	-	1	-	2	1	1	1	-	3	2	3	3	3	3	3	5
SI110	-	-	-	-	-	-	3	3	6	3	3	-	1	5	4	4	3	4	3	3
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{11}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	1	-	-	-	1	-	1	-	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	1	-	2	2	3	1	2	2	1	-	-	1	-	-	1	1
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-

Tabelle C.20:  $[\bar{3}3\bar{2}]$ -Richtung.

$[333]$ -Richtung

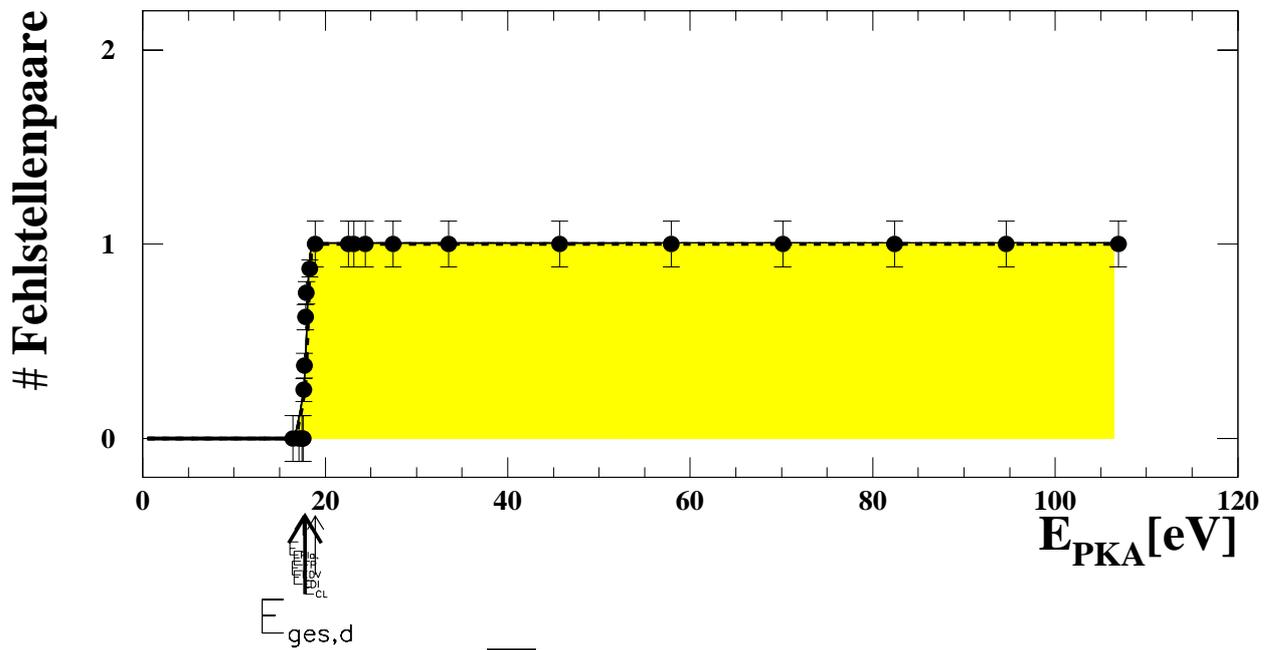
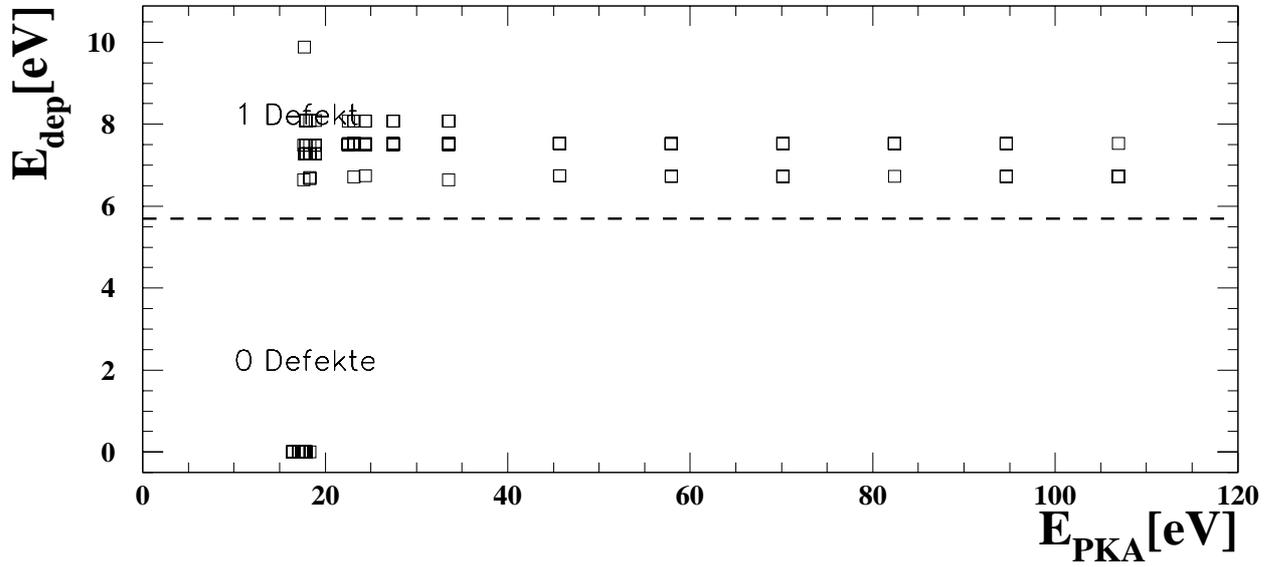


Abbildung C.18: Schwellenenergie in  $[333]$ -Richtung.  $E_{\text{ges,d}} = 17.78 \pm 0.01$  eV mit  $\sigma_{E_{\text{ges,d}}} = 0.2$  eV.  $E_{\text{Pla.,min}} = 17.6$  eV,  $E_{\text{FP,min}} = 17.7$  eV,  $E_{\text{EDV,min}} = 17.8$  eV,  $E_{\text{EDL,min}} = 17.8$  eV,  $E_{\text{CL,min}} = 18.9$  eV.

$E_{PKA}$ [eV]	16.5	17.1	17.5	17.6	17.7	17.8	17.9	18.3	18.9	22.6	23.2	24.4	27.4	33.5	45.7	57.9	70.1	82.4	94.6	106.9
$E_{MD}$ [eV]	16.0	16.5	16.8	16.9	17.0	17.1	17.2	17.5	18.0	21.0	21.5	22.5	25.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0
# Sim.-Läufe	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8

Ergebnis pro Simulationslauf:

$\langle E_{dep} \rangle$ [eV]	-	-	-	-	3.05	4.88	5.79	6.35	7.49	7.58	7.56	7.56	7.73	7.55	7.33	7.33	7.13	7.43	7.13	6.83
HOP	-	-	-	0.50	-	-	-	0.38	-	-	0.13	-	-	-	0.13	2.00	2.00	4.00	3.75	4.38
a) $\sum$ FP	-	-	-	-	0.25	0.13	0.25	0.38	0.25	0.13	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
b) $\sum$ EDV	-	-	-	-	-	-	0.13	0.13	0.25	0.13	-	-	-	0.25	0.13	-	-	-	-	-
c) $\sum$ EDI	-	-	-	-	-	0.38	0.38	0.25	-	0.88	0.88	1.00	0.88	0.75	0.88	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00

a) FP:

FP110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110ED	-	-	-	-	-	-	-	1	-	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
FP110	-	-	-	-	2	1	2	2	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

b) verbundene ED:

V+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-
V+SI110	-	-	-	-	-	-	1	-	2	1	-	-	-	1	1	-	-	-	-	-
V+SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

c) isolierte ED:

V	-	-	-	-	-	3	3	2	-	7	7	8	7	6	7	8	8	8	8	8
SI110E	-	-	-	-	-	-	-	1	-	-	3	1	1	-	2	2	4	1	4	7
SI110	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5	2	5	3	4	4	6	4	7	4	1
SI110L	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IT	-	-	-	-	-	2	3	-	-	1	1	2	1	-	-	-	-	-	-	-

DD:

V+V	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VV	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VVD	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SI110E+SI110E	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_Z^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
$I_{11}^2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

sonstige:

CEa+CEb	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 1$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $n = 2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VZF: $2 < n \leq 10$	-	-	-	-	1	1	-	-	-	1	-	2	2	1	-	-	-	-	-	-
DEF: $10 < n \leq 19$	-	-	-	-	-	1	-	2	2	-	1	-	1	-	-	-	-	-	-	-
CL: $n > 19$	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabelle C.21:  $[333]$ -Richtung.



# Literaturverzeichnis

- [ADdlR97] AVERBACK, R.S. and T. DÍAZ DE LA RUBIA: *Displacement damage in irradiated metals and semiconductors*. Sol. Sta. Phys., 51:281, 1997.
- [AM76] ASHCROFT, N.W. and N.D. MERMIN: *Solid State Physics*. W.B. Saunders Company, 1976.
- [AT87] ALLEN, M.P. and D.J. TILDESLEY: *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [BA90] BOLDING, BARRY C. and HANS C. ANDERSEN: *Interatomic potential for silicon clusters, crystals, and surfaces*. Phys. Rev., B 41(15):10568, 1990.
- [BAC87] BATRA, INDER P., FARID F. ABRAHAM, and S. CIRACI: *Molecular-dynamics study of self-interstitials in silicon*. Phys. Rev., B 35(18):9552, 1987.
- [Ban68] BANBURY, P.C.: *Energy and orientation dependence of defect production in semiconductors*, 1968. In *Radiation Effects in Semiconductors*, edited by F.L. Vook (Plenum, New York).
- [Bax82] BAXTER, R. J.: *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, London, 1982.
- [BB63] BEELER, J.R. and D.G. BESCO: *Range and damage effects of tunnel trajectories in a wurzite structure*. J. Appl. Phys., 34:2873, 1963.
- [Bee83] BEELER, J.R.: *Radiation Effects in Computer Experiments*. North-Holland Publishing Company, 1983.
- [BH80] BIERSACK, J.P. and L.G. HAGGMARK: *A monte carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., 174:257, 1980.
- [BH87] BISWAS, R. and D.R. HAMANN: *New classical models for silicon structural energies*. Phys. Rev., B 36:6434, 1987.
- [BHT92] BALAMANE, H., T. HALICIOGLU, and W.A. TILLER: *Comparative study of silicon empirical interatomic potentials*. Phys. Rev., B 46(4):2250, 1992.
- [BK12] BORN, M. und TH. VON KARMAN: *Über Schwingungen in Raumgittern*. Physik. Z., 13:297, 1912.

- [BKJ97] BAZANT, MARTIN Z., EFTHIMIOS KAXIRAS, and J.F. JUSTO: *Environment-dependent interatomic potential for bulk silicon*. Phys. Rev., B 56(14):8542, 1997.
- [BNW89] BASKES, M. I., J. S. NELSON, and A. F. WRIGHT: *Semiempirical modified embedded-atom potentials for silicon and germanium*. Phys. Rev., B 40(9):6085, 1989.
- [Boo72] BOOTH, A.D.: *Numerical Methods*. Butterworth, London, 1972.
- [BSC<sup>+</sup>93] BLÖCHL, PETER E., ENRICO SMARGIASSI, R. CAR, D. B. LAKS, W. ANDREONI, and S. T. PANTELIDES: *First-principles calculations of self-diffusion constants in silicon*. Phys. Rev. Lett., 70(16):2435, 1993.
- [Car90] CARLSSON, A.E.: *Beyond pair potentials in elemental transition metals and semiconductors*, 1990. In *Solid State Physics: Advances in Research and Application*, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull, (Academic, New York), Vol. 43.
- [CB75] CORBETT, J.W. and J.C. BOURGOIN: *Point Defects in Solids 2. Semiconductors and Molecular Crystals*. edited by J.H. Crawford Jr. and L. M. Slifkin (Plenum Press, New York), p 102, 1975.
- [CBS92] CAR, R., P. BLÖCHL, and E. SMARGIASSI: *Ab-initio molecular dynamics of semiconductor defects*. Mat. Sci. For., Vol. 83-87:433, 1992.
- [CDdlRG94] CATURLA, M. J., T. DÍAZ DE LA RUBIA, and G. H. GILMER: *Point defect production, geometry and stability in silicon: A molecular dynamics simulation study*. Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 316:141, 1994.
- [CDdlRG95] CATURLA, M.J., T. DÍAZ DE LA RUBIA, and G.H. GILMER: *Disordering and defect production in silicon by keV ion irradiation studied by molecular dynamics*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:1, 1995.
- [CDdlRMG96] CATURLA, M.J., T. DÍAZ DE LA RUBIA, L.A. MARQUES, and G.H. GILMER: *Ion-beam processing of silicon at keV energies: A molecular dynamics study*. Phys. Rev., B 54(23):16683, 1996.
- [CKOP84] CAR, ROBERTO, PAUL J. KELLY, ATSUSHI OSHIYAMA, and SOKRATES T. PANTELIDES: *Microscopic theory of atomic diffusion mechanisms in silicon*. Phys. Rev. Lett., 52(20):1814, 1984.
- [Cor70] CORBETT, J.W.: *Radiation damage in silicon and germanium*, 1970. In *Radiation Effects*, p. 3. Gordon and Breach, Science Publishers Ltd.
- [CW65] CORBETT, J.W. and G.D. WATKINS: *Production of divacancies and vacancies by electron irradiation of silicon*. Phys. Rev., 138:A555, 1965.
- [Dod87] DODSON, B.W.: *Development of a many-body Tersoff-type potential for silicon*. Phys. Rev., B 35:2795, 1987.

- [FADS86] FEDINA, L.I., A.L. ASEEV, S.G. DENISENKO, and L.S. SMIRNOV: *Threshold energy of formation of point defects in silicon deduced from microscopy data*. Sov. Phys. Semi., 21(4):363, 1986.
- [G<sup>+</sup>95] GÄRTNER, K. and OTHERS: *Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:183, 1995.
- [Gä96] GÄRTNER, K., 1996. private communication (PROGRAM INDPOT, INDIVIDUAL INTERATOMIC INTERACTION POTENTIAL, theoretical description given in [GH79]).
- [GDPS72] GERASIMENKO, N.N., A.Z. DVURECHENSKII, V.I. PANOV, and L.S. SMIRNOV: *Threshold energy for formation of radiation defects in semiconductors*. Sov. Phys. Semi., 5:1439, 1972.
- [Gei96] GEIGER, PROF. DR. A., 1996. persönliches Gespräch.
- [GGMV60] GIBSON, J.B., A.N. GOLAND, M. MILGRAM, and G.H. VINEYARD: *Dynamics of radiation damage*. Phys. Rev., 120(4):1229, 1960.
- [GH79] GÄRTNER, K. and K. HEHL: *Theoretical description of elastic atom-atom scattering*. Phys. Stat. Sol., (b) 94:231, 1979.
- [Gri66] GRIMSHAW, J.A.: *Electron damage orientation effects in silicon solar cells*. Phys. Lett., 22(4):372, 1966.
- [GS85] GOVER, J.E. and J.R. SROUR: *Basic radiation effects in nuclear power electronics technology*, 1985. Technical Report SAND85-0776, Sandia National Laboratories, May.
- [Har88] HARRISON, D.E.: *Critical Reviews in Solid State and Material Science*, 1988. edited by J.E. Greene (CRC, Boca Raton).
- [Hol65] HOLMES, D.K.: *Current Problems in the Theory of Radiation Damage*, 1965. In *Radiation Effects*, ed. W.F. Sheely, Gordon and Breach, New York, (Vol. 37 of Metallurgical Society Conferences).
- [HS68] HEMMENT, P.L.F. and P.R.C. STEVENS: *A theoretical technique to determine the anisotropy of radiation damage rate in silicon*, 1968. In *Radiation Effects in Semiconductors*, edited by F.L. Vook (Plenum, New York).
- [HS70] HEMMENT, P.L.F. and P.R.C. STEVENS: *The use of anisotropic damage rate in determining atomic displacement energies*, 1970. In *Atomic Collision Phenomena in Solids*, edited by D.W. Palmer and M.W. Thompson and P.D. Townsend (North-Holland, Amsterdam).
- [JGSDdlR95] JARAIZ, M., G.H. GILMER, D.M. STOCK, and T. DÍAZ DE LA RUBIA: *Defects from implantation in silicon by linked MARLOWE-molecular dynamics calculations*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:180, 1995.

- [KB81] KING, W.E. and R. BENEDEK: *Computer simulation study of the displacement threshold-energy surface in cu.* Phys. Rev., B 23:6335, 1981.
- [KB83] KING, W.E. and R. BENEDEK: *Molecular dynamics simulation of low energy displacement cascades in Cu.* J. nucl. Mater., 117:26, 1983.
- [KBW<sup>+</sup>94] KWON, I., R. BISWAS, C.Z. WANG, K.M. HO, and C.M. SOUKOULIS: *Transferable tight-binding models for silicon.* Phys. Rev., B 49(11):7242, 1994.
- [Kea66] KEATING, P.N.: *Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the sdiamond structure.* Phys. Rev., 145:637, 1966.
- [KF96] KRESSE, G. and J. FURTHMÜLLER: *Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set.* Comput. Mat. Scie., 6:15, 1996.
- [KGM95] KONOPOLEV, V. and A. GRAS-MARTI: *Molecular dynamics simulation of low-energy collision cascades and atomic mixing in silicon.* Phil. Mag., A 71(6):1265, 1995.
- [Kop93] KOPITZKI, K.: *Einführung in die Festkörperphysik.* Teubner Studienbücher Physik, 1993.
- [KP55] KINCHIN, G.H. and R.S. PEASE: *The displacement of atoms in solids by radiation.* Rep. Progr. Phys., 18:1, 1955.
- [KRV67] KOLOMENSKAYA, T.I., S.M. RAZUMOVSKII, and S.I. VINTOVKIN: *Temperature dependence of the threshold for the formation of radiation defects in silicon bombarded with electrons.* Sov. Phys. Semi., 1(5):652, 1967.
- [LB81] LANNOO, M. and J. BOURGOIN: *Point Defects in Semiconductors I Theoretical Aspects.* Springer-Verlag, 1981.
- [LB83] LANNOO, M. and J. BOURGOIN: *Point Defects in Semiconductors II Experimental Aspects.* Springer-Verlag, 1983.
- [Lin98] LINDSTRÖM, G., 1998. persönliches Gespräch.
- [LKK<sup>+</sup>97] LENOSKY, THOMAS J., JOEL D. KRESS, INHEE KWON, ARTHUR F. VOTER, BYARD EDWARDS, DAVID F. RICHARDS, SANG YANG, and JAMES B. ADAMS: *Highly optimized tight-binding model of silicon.* Phys. Rev., B 55(3):1528, 1997.
- [LL79] LANDAU, L.D und E.M. LIFSCHITZ: *Lehrbuch der theoretischen Physik.* Akademie-Vergag Berlin, 1979.
- [LNST63] LINDHARD, J., V. NIELSEN, M. SCHARFF, and P.V. THOMSEN: *Integral equations governing radiation effects.* Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 33(10), 1963.
- [LR55] LOFERSKI, J.J. and P. RAPPAPORT: *Electron voltaic study of electron bombardment damage and its thresholds in Ge and Si.* Phys. Rev., 98:1861, 1955.

- [LR58] LOFERSKI, J.J. and P. RAPPAPORT: *Radiation damage in Ge and Si detected by carrier lifetime changes: Damage thresholds*. Phys. Rev., 111:432, 1958.
- [LR59] LOFERSKI, J.J. and P. RAPPAPORT: *Displacement thresholds in semiconductors*. J. Appl. Phys., 30:1296, 1959.
- [LSS63] LINDHARD, J., M. SCHARFF, and H.E. SCHIOTT: *Range concepts and heavy ion ranges*. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 33(14), 1963.
- [LWJ87] LAZO, MAXIMO S., DAVID M. WOODALL, and PATRICK J.MCDANIEL: *Silicon and silicon dioxide neutron damage functions*, 1987. In *Proc. Fast Burt React. Workshop*, 1986, pages 85–103. Sandia National Laboratories [Tech. Rep.] SAND, SAND87-0098 Vol.1.
- [Mad96] MADELUNG, O.: *Semiconductors*. Springer-Verlag, 1996.
- [MB93a] MAROUDAS, DIMITRIS and ROBERT A. BROWN: *Atomic calculation of the self-interstitial diffusivity in silicon*. Appl. Phys. Lett., 62(2):172, 1993.
- [MB93b] MAROUDAS, DIMITRIS and ROBERT A. BROWN: *Calculation of thermodynamic and transport properties of intrinsic point defects in silicon*. Phys. Rev., B 47(23):15562, 1993.
- [MBPP94a] MILLER, L.A., D.K. BRICE, A.K. PRINJA, and S.T. PICRAUX: *Displacement-threshold energies in Si calculated by molecular dynamics*. Phys. Rev., B 49(24):16953, 1994.
- [MBPP94b] MILLER, LEANN A., DAVID K. BRICE, ANIL K. PRINJA, and S. THOMAS PICRAUX: *Molecular dynamics simulations of bulk displacement threshold energies in Si*. Rad. Eff. Def. Solids, 129:127, 1994.
- [MG80] MUELLER, G.P. and C.S. GUENZER: *Simulation of cascade damage in silicon*. IEEE Trans. Nuc. Sci., NS-27(6):1474, 1980.
- [MHF<sup>+</sup>97] MOLL, M., H.FEICK, E. FREDWURST, G. LINDSTRÖM, and C. SCHÜTZE: *Comparison of defects produced by fast neutrons and <sup>60</sup>Co-gammas in high resistivity silicon detectors using deep level transient spectroscopy*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., A388:335, 1997.
- [MRJ<sup>+</sup>95] MARQUES, L.A., J.E. RUBIO, M. JARAIZ, L. ENRIQUEZ, and J. BARBOLLA: *An improved molecular dynamics scheme for ion bombardment simulations*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:7, 1995.
- [NBY96] NASTAR, MAYLISE, VASILY V. BULATOV, and SIDNEY YIP: *Saddle-point configurations for self-interstitial migration in silicon*. Phys. Rev., B 53(20):13521, 1996.
- [NKK94] NORDLUND, K., J. KEINONEN, and A. KURONEN: *Effect of the interatomic Si-Si-potential on vacancy production during ion implantation of Si*. Phys. Scripta, T54:34, 1994.

- [Nov63] NOVAK, R. L.: *Temperature and energy dependence of the introduction and annealing rates of electron-induced defects in n- and p-type Si*. Bull. Am. Phys. Soc., 8:235, 1963.
- [NRT75] NORGETT, M.J., M.T. ROBINSON, and I.M. TORRENS: *A proposed method of calculating displacement dose rates*. Nucl. Eng. Des., 33:50, 1975.
- [Pan86a] PANDEY, K.C.: *Diffusion without vacancies or interstitials: A new concerted exchange mechanism*. Phys. Rev. Lett., 57(18):2287, 1986.
- [Pan86b] PANTELIDES, SOKRATES T.: *Deep Centers in Semiconductors*. Gordon and Breach Science Publishers, 1986.
- [PaTHT84] PEARSON, E., T. TAKAI AND T. HALICIOGLU, and W.A. TILLER: *Computer modeling of Si and SiC surfaces and surfaces relevant to crystal growth from the vapor*. J. Cryst. Growth, 70:33, 1984.
- [PFTV86] PRESS, W.H., B.P. FLANNERY, S.A. TEUKOLSKY, and W.T. VETTERLING: *Numerical Recipes*. Cambridge Univ. Press, 1986.
- [Pos94] POSSELT, M.: *Crystal-TRIM and its application to investigations on channeling effects during ion implantation*. Rad. Eff. Def. Solids, 130-131:87, 1994.
- [Rap95] RAPAPORT, D.C.: *The Art of Molecular Dynamics Simulations*. Cambridge University Press, 1995.
- [RC96] ROSE-COLLABORATION, THE, 1996. Proposal P62/LHC R&D CERN/LHCC 96-23.
- [RC97] ROSE-COLLABORATION, THE: *RD48 status report, the rose collaboration (r&d) on silicon for future experiments*, 1997. Status Report/RD48 CERN/LHCC 97-39.
- [RCT96] RASBAND, PAUL B., PAULETTE CLANCY, and MICHAEL O. THOMPSON: *Equilibrium concentrations of defects in pure and B-doped silicon*. J. Appl. Phys., 79(12):8998, 1996.
- [Rob70] ROBINSON, M.T.: *The energy dependence of neutron radiation damage in solids*, 1970. B.N.E.S. Nuclear Fusion Reactor Conference at Culham Laboratory, September 1969, In J.L. Hall and J.H.C. Maples, editors, *Nuclear Fusion Reactors*, page 364–378, British Nuclear Engineering Society, London.
- [Rob76] ROBINSON, M.T.: *The theory of radiation induced defect production*, 1976. In N.L. Peterson and S.D. Harkness, editors, *Radiation Damage in Metals*, page 1–27, American Society for Metals.
- [RSGF84] ROSE, JAMES H., JOHN R. SMITH, FRANCISCO GUINEA, and JOHN FER-  
RANTE: *Universal features of the equation of state of metals*. Phys. Rev., B 29:2963, 1984.

- [RT74] ROBINSON, MARK T. and IAN M. TORRENS: *Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation*. Phys. Rev., B 9:5008, 1974.
- [SABW82] SWOPE, W.C., H.C. ANDERSEN, P.H. BERENS, and K.R. WILSON: *A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: application to small water clusters*. J. Chem. Phys., 76:637, 1982.
- [SB92] SAYLE, R. and A. BISSELL: *RasMol: A program for fast realistic rendering of molecular structures with shadows*. In *Proceedings of the 10th Eurographics UK'92 Conference*, University of Edinburgh, Scotland, 1992.
- [Sch89] SCHOBER, H. R.: *Extended interstitials in silicon and germanium*. Phys. Rev., B 39(17):13013, 1989.
- [Sei49] SEITZ, F.: *On the disordering of solids by action of fast massive particles*. Disc. Faraday Soc., 5:271, 1949.
- [Sei52] SEITZ, F.: *Radiation effects in solids*. Phys. Today, 5:6, 1952.
- [SJB96] SINNO, TALID, Z. KURT JIANG, and ROBERT A. BROWN: *Atomistic simulation of point defects in silicon at high temperature*. Appl. Phys. Lett., 68(21):3028, 1996.
- [SJWC95] SAYED, M., J.H. JEFFERSON, A.B. WALKER, and A.G CULLIS: *Computer simulation of atomic displacements in Si, GaAs, and AlAs*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:232, 1995.
- [SK56] SEITZ, F. and J.S. KOEHLER: *Displacement of atoms during irradiation*. Sol. Sta. Phys., 2:305, 1956.
- [SLB66] SHERMAN, CHARLES H., L.F. LOWE, and E.A. BURKE: *Probability of atomic displacement in platinum*. Phys. Rev., 145:568, 1966.
- [SW85] STILLINGER, FRANK H. and THOMAS A. WEBER: *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon*. Phys. Rev., B 31(8):5262, 1985.
- [TCZDdlR97] TANG, MEIJIE, L. COLOMBO, JING ZHU, and T. DÍAZ DE LA RUBIA: *Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes*. Phys. Rev., B 55(21):14279, 1997.
- [Ter88a] TERSOFF, J.: *Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties*. Phys. Rev., B 38:9902, 1988.
- [Ter88b] TERSOFF, J.: *New empirical approach for the structure and energy of covalent systems*. Phys. Rev., B 37:6991, 1988.
- [Ter89] TERSOFF, J.: *Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multi-component systems*. Phys. Rev., B 39(8):5566, 1989.

- [TMS87] TORRES, V. J. B., P. M. MASRI, and A. M. STONEHAM: *Two-level systems: a possible structure and its role in amorphisation*. J. Phys. C. Solid State Phys., 20:L143, 1987.
- [UHT94] UNGAR, P.J., T HALICIOGLU, and W.A. TILLER: *Free energies, structures, and diffusion of point defects in Si using an empirical potential*. Phys. Rev., B 50(11):7344, 1994.
- [Ver67] VERLET, L.: *Computer experiments on classical fluids. I. thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*. Phys. Rev., 159:98, 1967.
- [vLFL<sup>+</sup>80] LINT, V.A.J. VAN, T.M. FLANAGAN, R.E LEADON, J.A NABER, and V.C. ROGERS: *Mechanisms of Radiation Effects in Electronic Materials*, volume 1. John Wiley & Sons, 1980.
- [VPYG61] VAVILOV, V.S., V.M. PATSKEVICH, B.YA. YURKOV, and P.YA. GLAZUNOV: *The effect of fast-electron bombardment on the electrical conductivity of silicon and the dependence of the rate of defect formation on the orientation of a crystal with respect to the electron beam*. Sov. Phys. Sol. Sta., 2:1301, 1961.
- [WCH91] WANG, C. Z., C. T. CHAN, and K. M. HO: *Tight-binding molecular-dynamics study of defects in silicon*. Phys. Rev. Lett., 66(2):189, 1991.
- [WDS<sup>+</sup>81] WOOD, SUSAN, N.J. DOYLE, J.A. SPITZNAGEL, W.J. CHOYKE, R.M. MORE, J.N. MCGRUER, and R.B. IRWIN: *Simulation of radiation damage in solids*. IEEE Trans. Nuc. Sci., NS-28(6):4107, 1981.
- [Web77] WEBER, W.: *Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn*. Phys. Rev., B 15(10):4789, 1977.
- [Wun92] WUNSTORF, R.: *Systematische Untersuchungen zur Strahlenresistenz von Silizium-Detektoren für die Verwendung in Hochenergiephysik-Experimenten*. Doktorarbeit, Univ. Hamburg, 1992.
- [Wun97] WUNSTORF, R.: *Radiation Hardness of Silicon Detectors: Current Status*. IEEE Trans. Nuc. Sci., NS-44(3):806, 1997.
- [WWW85] WOOTEN, F., K. WINER, and D. WEAIRE: *Computer generation of structural models of amorphous Si and Ge*. Phys. Rev., B 54(13):1392, 1985.
- [Yos61] YOSHIDA, M.: *Distribution of interstitials and vacancies produced by an incident fast neutron*. J. Phys. Soc. Jpn., 16:44, 1961.
- [ZBL85] ZIEGLER, J.F., J.P. BIRSACK, and U. LITTMARK: *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, New York, 1985.
- [ZDdlRY<sup>+</sup>96] ZHU, JING, THOMAS DÍAZ DE LA RUBIA, L.H. YANG, CHRISTIAN MAILHIOT, and GEORGE H. GILMER: *Ab initio pseudopotential calculations of B diffusion and pairing in Si*. Phys. Rev., B 54(7):4741, 1996.

- [ZE97] ZILLGEN, H. and P. EHRHART: *Bound vacancy interstitial pairs in irradiated silicon*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 127/128:27, 1997.
- [ZYM<sup>+</sup>95] ZHU, JING, L.H. YANG, C. MAILHIOT, THOMAS DÍAZ DE LA RUBIA, and G.H. GILMER: *Ab initio pseudopotential calculations of point defects and boron impurity in silicon*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., B 102:29, 1995.



# Danksagung

Ganz speziell und herzlich danke ich Prof. Dr. Werner Weber. Nicht nur für seine fachlich sehr gute Betreuung und seine Bemühungen mir seine Art der Physik nahe zu bringen, sondern auch für seine Menschlichkeit, mich zu unterstützen, in einer Zeit, in der ich selbst voller Zweifel war. Er ist ein wahrer “Doktor-Vater.”

Ich danke Prof. Dr. H. Keiter für seine Arbeit als Zweitgutachter.

Ich danke Dr. E. Fretwurst, Prof. Dr. C. Gößling, Ch. Lange, Prof. Dr. G. Lindström, Prof. Dr. J. Stolze und Dr. R. Wunstorf für ihre hilfreichen Diskussionen.

Die Rechnungen in dieser Arbeit wurden meistens auf dem SP-2 Rechner des HRZ in Dortmund und auf dem Workstation-Cluster der experimentellen Hochenergiephysik durchgeführt. Auch diesen beiden Institutionen gilt mein Dank.

Mein Dank für das Bearbeiten des Manuskriptes gilt Christian Lange, Renate Wunstorf und Joachim Stolze. Alle Drei haben mir sehr geholfen.

Ich danke den Mitgliedern des Lehrstuhls T2. Es zeigte sich bei regen Gesprächen beim Essen, daß das Leben nicht nur aus Physik besteht.

Ich danke Holger, meinem Bürokollegen, der sich mit Katrin quasi mit meiner Betreuung abwechselt hat, für die schöne Zeit. Und das Telefon steht fest an seinem Platz. ☺

Ich danke meinen Eltern, die mir das Studium der Physik ermöglicht haben.

Ohne ein harmonisches, geordnetes Zuhause ist so eine Arbeit um ein Vielfaches schwieriger. Ohne die Entlastung von sämtlichen “Hausaufgaben” wäre mein Zeitplan, der letzten zwei Monate nie und nimmer einzuhalten gewesen. Den Dank an dich, Katrin, kann ich nicht in Worte fassen, aber ich fühle ihn sehr deutlich!