

**Monika Schefzik**

---

**Zwei neue  
paramagnetische Myonspezies  
in kristallinem Silizium**

---



**Cuvillier Verlag Göttingen**

**Zwei neue  
paramagnetische Myonspezies  
in kristallinem Silizium**

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

vorgelegt von  
Dipl.-Phys. MONIKA SCHEFZIK  
aus Sindelfingen

Hauptberichter: Prof. Dr. Dr. h.c. A. Seeger  
Mitberichter: Prof. Dr. D. Schweitzer  
Tag der mündlichen Prüfung: 17. Mai 2001

INSTITUT FÜR THEORETISCHE UND  
ANGEWANDTE PHYSIK DER  
UNIVERSITÄT STUTTGART

MAX-PLANCK-INSTITUT  
FÜR METALLFORSCHUNG  
STUTTGART-BÜSNAU

2001

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

**Schefzik, Monika:**

Zwei neue paramagnetische Myonspezies in kristallinem Silizium  
/ vorgelegt von Monika Schefzik. -

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2001

Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2001

ISBN 3-89873-180-4

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2001

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

[www.cuvillier.de](http://www.cuvillier.de)

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung  
des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile  
daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie)  
zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2001

Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-89873-180-4

*Anything protons do, muons do better.*

S. F. J. Cox, Workshop on Hydrogen  
in Semiconductors, Exeter, UK, 1999.



# Kurzfassung

MONIKA SCHEFZIK:

## Zwei neue paramagnetische Myonspezies in kristallinem Silizium

Das positive Myon bildet in Silizium mit einem Elektron gebundene Zustände, die sogenannten Myonspezies, welche mit dem Wasserstoff verwandt sind. In dieser Arbeit wurde das Verhalten positiver Myonen in einkristallinem Silizium in Abhängigkeit von der Dotier- sowie Sauerstoffkonzentration der Proben untersucht. Dabei konnten zwei neue, bisher unbekannte paramagnetische Myonspezies in Silizium identifiziert und charakterisiert werden, welche mit  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_V$  bezeichnet werden. Diese reißen sich in die Liste der bisher bekannten Myonspezies ein, die sich aus zwei paramagnetischen Spezies, dem beweglichen normalen Myonium  $\text{Mu}_T$  und dem auf einem „bond centre“-Platz lokalisierten anomalen Myonium  $\text{Mu}_{BC}$ , sowie den diamagnetischen Spezies  $\mu^d$  zusammensetzt. Die zwei neuen Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_V$  zeigen, im Gegensatz zu den bisher bekannten Spezies, nur sehr schwache Signale. Daher war deren Identifikation erst durch verbesserte Experimentierbedingungen sowie erweiterte Auswertemethoden möglich.

Die Myonspezies  $\text{Mu}_X$  konnte in Transversalfeld- $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen anhand des Auftretens eines bisher unbekanntes Präzessionssignals bei einer Temperatur von 5 K in einem äußeren Magnetfeld von 4 mT identifiziert werden. Dieses Signal war nicht in allen Proben beobachtbar, sondern nur in solchen, bei denen die Konzentration von Sauerstoff die der Dotieratome deutlich überstieg. Des Weiteren wurde eine starke Orientierungsabhängigkeit dieses Signals beobachtet. Untersuchungen der Magnetfeldabhängigkeit dieses Signals erlaubten die Bestimmung des Hyperfeintensors der Spezies  $\text{Mu}_X$ . Dieser ist axialsymmetrisch bzgl. der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung, wobei die Tensorkomponenten zu  $A_x = A_y = -(82,6 \pm 3,0)$  MHz und  $A_z = (5,3 \pm 3,0)$  MHz bestimmt wurden. Die Spezies  $\text{Mu}_X$  wird aufgrund der beschriebenen Erkenntnisse als Myonium-Sauerstoff-Komplex interpretiert, wobei das Myon auf dem „bond centre“-Platz lokalisiert ist. Bei Untersuchungen in einem elektrostatischen Feld ergaben sich deutliche Unterschiede im Verhalten der Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{BC}$ , obwohl das Temperaturverhalten beider Spezies analog ist. Ein möglicher Zusammenhang zwischen der Spezies  $\text{Mu}_X$  und kürzlich gefundenen Wasserstoff-Sauerstoff-Komplexen sowie mit der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion werden diskutiert.

Die Spezies  $\text{Mu}_V$  wurde in „Longitudinal Field Quenching“-Untersuchungen bei einer Temperatur von 10 K nachgewiesen, wobei  $\text{Mu}_V$  nur in eigenleitenden, jedoch nicht in dotierten Proben beobachtbar ist. Es zeigte sich, daß die Spezies  $\text{Mu}_V$  nahezu ausschließlich aus dem Vorläufer  $\text{Mu}_T$  mit einer Rate von  $10^6 \text{ s}^{-1}$  gebildet wird. Untersuchungen der Myonspin-Präzession in Abwesenheit eines äußeren Magnetfelds erlauben die Bestimmung des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$ . Dieser besitzt die Parameter  $A_x = A_y = (-12,0 \pm 0,1)$  MHz sowie  $A_z = (27,9 \pm 0,1)$  MHz und ist axialsymmetrisch bzgl. der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung. Der Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_V$  entspricht dem einer Wasserstoffspezies VH.  $\text{Mu}_V$  wird als in einer Silizium-Leerstelle gebundenes Myonium interpretiert. Die Leerstellen in Silizium, in denen das  $\text{Mu}_T$ , als Vorläufer von  $\text{Mu}_V$ , eingefangen wird, sind vom Myon beim Abbremsvorgang selbst erzeugt. Eine Abschätzung der Diffusionskonstante der Myonium-Diffusion anhand des Abbremsprozesses des Myons sowie des Einfangprozesses des  $\text{Mu}_T$  ist in guter Übereinstimmung mit den Literaturdaten. Die Unbeobachtbarkeit von  $\text{Mu}_V$  in den dotierten Proben wird auf den Konkurrenzprozeß des Einfangs von  $\text{Mu}_T$  an Dotieratomen zurückgeführt, welcher zur Bildung von  $\mu^d$  führt. Ein direkter Nachweis der Beteiligung von Leerstellen an der Bildung von  $\text{Mu}_V$  über Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben war nicht möglich, da der erwartete geringe Effekt durch weitere Prozesse überdeckt wurde.



# Abstract

MONIKA SCHEFZIK:

## Two novel paramagnetic muon species in crystalline silicon

Positive muons behave in condensed matter like short-lived (mean lifetime 2.2  $\mu\text{s}$ ) light protons, with a mass of approximately 1/9 of the proton mass. Chemically  $\mu^+$  and protons behave essentially identically. In semiconductors for instance,  $\mu^+$  can bind an electron to form paramagnetic muonium-like species ( $\text{Mu} = \mu^+ e^-$ ). Muonium and hydrogen occupy the same or similar sites and they occur in similar configurations. Systematic investigations have been carried out in the present work of the behaviour of positive muons in silicon samples with different dopant and oxygen concentrations. These investigations led to the identification of two novel, hitherto unknown, paramagnetic muon species, termed  $\text{Mu}_X$  and  $\text{Mu}_V$ . These two species add to the list of known muon species, i.e. normal (tetrahedral location,  $\text{Mu}_T$ ) and anomalous (bond-centre location,  $\text{Mu}_{BC}$ , analogous to the AA9 hydrogen centre) muonium and the diamagnetic muon species.

The species  $\text{Mu}_X$  was identified via the occurrence of a new precession frequency in transverse-field  $\mu\text{SR}$  (TF $\mu\text{SR}$ ) experiments at applied magnetic fields between 20 G and 60 G at  $T = 5$  K in some of the samples investigated. Since this frequency is strongly dependent on the orientation of the applied magnetic field, it must belong to an anisotropic muon species. The hyperfine tensor of this species was determined from the magnetic-field dependence of the observed frequency (Schefzik et al., *Phil. Mag.* **B 79** (1999) 1561). The hyperfine tensor is axially symmetric around the  $\langle 111 \rangle$  crystallographic axis with the components  $A_x = A_y = (-82.6 \pm 3)$  MHz,  $A_z = (5.3 \pm 3)$  MHz. These hyperfine parameters are similar to those of  $\text{Mu}_{BC}$  ( $A_x = A_y = -92.6$  MHz,  $A_z = -16.8$  MHz with the  $z$ -axis being also parallel to  $\langle 111 \rangle$ ). The  $\text{Mu}_X$  species is observable only if the oxygen concentration of the sample is much larger than the dopant concentration.  $\text{Mu}_X$  is interpreted as a muonium–oxygen complex. Since the hyperfine parameters of  $\text{Mu}_X$  and  $\text{Mu}_{BC}$  are similar to each other, it is assumed that the muon in the species  $\text{Mu}_X$  is located at a bond-centered site as is the case for  $\text{Mu}_{BC}$ . The interaction with a nearby oxygen, presumably also located at a bond-centered site, may account for the deviation of the  $\text{Mu}_X$  hyperfine parameters from those of  $\text{Mu}_{BC}$ . A clearly different behaviour of  $\text{Mu}_X$  on the one site and  $\text{Mu}_{BC}$  on the other site is seen in TF $\mu\text{SR}$  experiments with electrostatic fields applied parallel to the muon-spin direction. Whereas the damping rate of the precession signal of  $\text{Mu}_X$  is influenced by an electrostatic field, this is not the case for the signals from  $\text{Mu}_T$ ,  $\text{Mu}_{BC}$ , and the diamagnetic species. The precession signal of  $\text{Mu}_X$ , however, shows a temperature dependence which is very similar to that of  $\text{Mu}_{BC}$ . The species  $\text{Mu}_X$  may play a role in the enhancement of the oxygen diffusion in silicon in the presence of hydrogen.

Low-temperature investigations of positive muons ( $\mu^+$ ) in crystalline silicon by means of longitudinal field quenching (LFQ) and zero-field  $\mu\text{SR}$  (ZF $\mu\text{SR}$ ) provided us with evidence of the muon species  $\text{Mu}_V$  with weak, anisotropic hyperfine interaction. The signatures of  $\text{Mu}_V$  are found in intrinsic but not in doped samples (dopant concentration about  $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ ). LFQ experiments reveal that  $\text{Mu}_V$  is not formed promptly (Schefzik et al., *Solid State Comm.* **107** (1998) 395). It results from a reaction in which normal muonium transforms into  $\text{Mu}_V$ , the reaction rate at  $T = 10$  K was found to be about  $10^6$   $\text{s}^{-1}$ . The hyperfine coupling of  $\text{Mu}_V$  could be determined with high accuracy from ZF $\mu\text{SR}$  experiments (Schefzik et al., *Physica* **B 289-290** (2000) 511). The hyperfine tensor is axially symmetric about the  $\langle 110 \rangle$  crystallographic direction with the components  $A_x = A_y = (-12.0 \pm 0.1)$  MHz,  $A_z = (29.7 \pm 0.1)$  MHz. It corresponds, after rescaling, to the hyperfine tensor of the hydrogen centre termed VH, which was discovered recently by Bech Nielsen et al. (*Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 1507) in proton-irradiated crystalline



silicon samples and which has been attributed to hydrogen trapped in vacancies. The novel muon species  $\text{Mu}_V$  is therefore interpreted as muonium trapped in vacancies, which must be those created during deceleration of the implanted muon close to the end of its stopping track, since thermal vacancies are not available at lower temperatures. The fact that  $\text{Mu}_V$  is not found in doped samples can be easily explained since it is known from other investigations that muonium–dopant complexes are formed readily. Already at the doping levels ( $\approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) of the investigated doped samples those complexes form prior to the trapping of muonium at the vacancies i. e. formation of  $\text{Mu}_V$ .

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der <math>\mu</math>SR in Halbleitern</b>	<b>9</b>
2.1	Erzeugung, Eigenschaften und Zerfall positiver Myonen . . . . .	10
2.2	Prinzip der $\mu$ SR . . . . .	13
2.3	$\mu$ SR-Methoden . . . . .	16
2.3.1	Durchführung der Experimente . . . . .	17
2.4	Transversalfeld- $\mu$ SR (TF $\mu$ SR) . . . . .	18
2.4.1	Nullfeld- $\mu$ SR (ZF $\mu$ SR) . . . . .	21
2.4.2	Normierung durch Messungen an Aluminium . . . . .	22
2.5	„Longitudinal Field Quenching“- $\mu$ SR (LFQ) . . . . .	22
2.5.1	Normierung durch Messungen an Aluminium . . . . .	25
2.6	Auswertung der Meßdaten . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Myonen in Silizium</b>	<b>29</b>
3.1	Die Spezies $\text{Mu}_T$ , $\text{Mu}_{BC}$ und $\mu^d$ . . . . .	30
3.1.1	Die paramagnetischen Spezies $\text{Mu}_T$ und $\text{Mu}_{BC}$ . . . . .	30
3.1.2	Die diamagnetischen Spezies $\mu^d$ . . . . .	33
3.2	Die neuen Spezies $\text{Mu}_X$ und $\text{Mu}_Y$ . . . . .	33
3.2.1	Die Spezies $\text{Mu}_X$ . . . . .	33
3.2.2	Die Spezies $\text{Mu}_Y$ . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Berechnung der Histogramme</b>	<b>37</b>
4.1	TF $\mu$ SR . . . . .	37
4.2	ZF $\mu$ SR . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Berechnung der Quenching-Kurven</b>	<b>51</b>

5.1 Das statische Modell . . . . .	52
5.2 Das dynamische Modell . . . . .	59
5.3 Um $\text{Mu}_V$ erweitertes Modell . . . . .	62
<b>6 Probencharakterisierung</b>	<b>67</b>
<b>7 Entdeckung und Charakterisierung der Spezies <math>\text{Mu}_X</math></b>	<b>71</b>
7.1 Experimentelle Ergebnisse . . . . .	71
7.1.1 Untersuchungen zur Abhängigkeit der Präzessionssignale von den Proben- eigenschaften . . . . .	75
7.1.2 Untersuchungen zur Magnetfeldabhängigkeit der Präzessionssignale . . . . .	78
7.1.3 Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Präzessionssignale . . . . .	81
7.1.4 Einfluß eines angelegten elektrostatischen Felds . . . . .	82
7.1.5 Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse . . . . .	84
7.2 Bestimmung des Hyperfeintensors von $\text{Mu}_X$ . . . . .	85
<b>8 Ist <math>\text{Mu}_X</math> ein Myonium–Sauerstoff-Komplex?</b>	<b>93</b>
8.1 Das Verhalten von Wasserstoff und Sauerstoff in Silizium . . . . .	93
8.2 Ist $\text{Mu}_X$ ein $\text{Mu}_{BC}$ –Sauerstoff-Komplex? . . . . .	95
<b>9 Entdeckung und Identifikation der Spezies <math>\text{Mu}_V</math></b>	<b>101</b>
9.1 LFQ-Untersuchungen an unterschiedlich dotierten Proben . . . . .	101
9.1.1 Auswertung der Experimente . . . . .	103
9.2 ZF $\mu$ SR-Untersuchungen an undotierten Proben . . . . .	112
9.2.1 ZF $\mu$ SR-Experimente . . . . .	113
9.2.2 Auswertung der ZF $\mu$ SR-Experimente . . . . .	114
9.3 Ist $\text{Mu}_V$ ein Myonium–Leerstellen-Komplex? . . . . .	118
9.4 Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben . . . . .	121
9.4.1 Experimentelle Ergebnisse . . . . .	122

---

9.4.2 Interpretation der Ergebnisse . . . . .	126
<b>10 Zusammenfassung</b>	<b>131</b>
<b>A Kupferprobenhalter</b>	<b>135</b>
<b>B Probenhalter für Untersuchungen im elektrostatischen Feld</b>	<b>137</b>
<b>C Matrix zur Berechnung der Myonspinpolarisation</b>	<b>139</b>
<b>D Tabellen und Abbildungen</b>	<b>141</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>147</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Bei der Fertigung von Halbleiter-Bauelementen ist bei praktisch jedem Prozeßschritt Wasserstoff anwesend. Es ist bekannt, daß dieser die elektrischen Eigenschaften des Halbleiters wesentlich beeinflussen kann (PANKOVE 1991, PEARTON 1992, MYERS 1992), z. B. können elektrisch aktive Störstellen durch Wasserstoff passiviert werden. Weiterhin ist bekannt, daß in kristallinem Silizium Wasserstoff die Diffusion von interstitiellem Sauerstoff in einem bestimmten Temperaturbereich dramatisch beschleunigt (NEWMAN 1991) und damit auch einige Prozesse die zur Änderung der elektrischen Eigenschaften führen und an denen Sauerstoff beteiligt ist (FULLER 1957). Die der Beschleunigung der Sauerstoffdiffusion zugrunde liegenden mikroskopischen Mechanismen sind bisher weitgehend unverstanden (ESTREICHER 1990, JONES 1992). Klar ist aber, daß in beiden genannten Beispielen die Komplexbildung von Wasserstoff mit anderen im Halbleiter vorhandenen Störstellen von entscheidender Bedeutung ist, wobei wir hier unter einem Wasserstoff-Störstellen-Komplex einfach die Zusammenlagerung von Wasserstoff und einer Störstelle verstehen wollen, wie auch immer die Bindung zwischen beiden beschaffen sei. Im ersten Fall, der Passivierung, bildet Wasserstoff mit elektrisch aktiven Dotieratomen elektrisch inaktive Dotieratom-Wasserstoff-Komplexe (ESTREICHER 1995). Auch im zweiten Fall ist zu vermuten, daß durch die Bildung von Wasserstoff-Sauerstoff-Komplexen die Bewegung von Sauerstoff über Diffusionspfade mit stark erniedrigten Energiebarrieren erfolgen kann, wenn man diese mit den bei der Diffusion von isoliertem interstitiellem Sauerstoff auftretenden Barrieren vergleicht. Die Absättigung von ansonsten auftretenden „dangling bonds“ durch Wasserstoff könnte hierbei eine Rolle spielen.

Wasserstoff-Sauerstoff-Komplexe, die ein einzelnes Wasserstoffatom enthalten, wurden in der Tat in Infrarotabsorptions-Messungen gefunden (BECH NIELSEN 1997b). Die mikroskopische Struktur dieser Komplexe kann allerdings noch nicht als geklärt betrachtet werden und deren Rolle bei der Beschleunigung der Sauerstoffdiffusion oder auch der Prozeß der Bildung dieser Komplexe ist noch gänzlich unverstanden.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung von Wasserstoff in kristallinem Silizium und speziell mit dem oben skizzierten Fragenkreis der Komplexbildung von Wasserstoff mit anderen Fremdatomen oder mit Kristallbaufehlern. In den hier dargestellten Untersuchungen wurden aber nicht Wasserstoff selbst bzw. Protonen studiert,

sondern stattdessen positive Myonen ( $\mu^+$ ) eingesetzt. Diese verhalten sich im Festkörper, abgesehen von ihrer endlichen Lebensdauer ( $\tau_\mu \approx 2,2 \cdot 10^{-6}$  s), ganz analog zu Protonen bzw. zu Wasserstoff. Dies ist insbesondere deshalb erstaunlich, weil Myonen und Protonen zu unterschiedlichen Teilchenklassen gehören und auch deutlich unterschiedliche Massen besitzen. Das positive Myon, dessen Masse etwa  $1/9$  der des Protons beträgt, kann in Halbleitern ein Elektron einfangen und an sich binden. Dieser gebundene Zustand wird Myonium genannt und seine elektronischen Eigenschaften sind nahezu identisch mit denen der entsprechenden Wasserstoffspezies (siehe Kapitel 3).

Da Myonen einen Spin ( $1/2$ ) und ein magnetisches Moment tragen, Myonen weiterhin mit 100 % Spinpolarisation erzeugt werden und ihre Spinorientierung beim Zerfall über die Emissionsrichtung der Zerfallsprodukte nachgewiesen werden kann (siehe Kapitel 2), lassen sich mit ihnen Experimente durchführen, die bezüglich ihres Informationsgehalts mit der NMR (Kernspinresonanz, „nuclear-magnetic resonance“) bzw. der EPR (Elektronspinresonanz, „electron paramagnetic resonance“) vergleichbar sind. Insbesondere läßt sich bei den paramagnetischen Myonspezies, d. h., wenn sich in der Nachbarschaft des Myons ein ungepaartes Elektron befindet, die magnetische Hyperfeinwechselwirkung bestimmen. Die auf den oben angegebenen Eigenschaften beruhenden Methoden werden als  $\mu$ SR-Methoden bezeichnet, wobei  $\mu$ SR für Myonspin-Rotation, -Relaxation oder -Resonanz steht.

Ein großer Vorteil der  $\mu$ SR-Methoden gegenüber z. B. der NMR oder EPR ist die sehr viel höhere Nachweisempfindlichkeit. Die  $\mu$ SR-Methoden eignen sich somit auch zur Untersuchung von isoliertem interstitiellem Wasserstoff in Halbleitern, dessen Gleichgewichtskonzentration generell sehr gering ist. So liegt z. B. die Gleichgewichtskonzentration von interstitiellem Wasserstoff in kristallinem Silizium bei Raumtemperatur bei  $10^5 \text{ cm}^{-3}$  (überschüssiger Wasserstoff scheidet sich u. a. in Form sogenannter Platelets ab) und somit um viele Größenordnungen unter der Nachweisgrenze der EPR und der NMR. Bei den meisten  $\mu$ SR-Methoden werden dagegen einzelne Myonen nacheinander implantiert und einzeln nachgewiesen, wobei sich das Meßergebnis aus etwa  $10^7$  Einzelereignissen aufbaut (siehe Kapitel 2.2). Dabei befindet sich in der Regel immer nur ein Myon in der Probe.

Seit langem ist bekannt, daß sich in Silizium, in den anderen Elementhalbleitern der Gruppe IV und in vielen III–V-Halbleitern mehrere Arten von Myonspezies bilden (PATTERSON 1988). Zwei dieser Spezies sind paramagnetisch. Hierzu gehört das sogenannte normale Myonium  $\text{Mu}_T$ , welches auf Tetraederplätzen lokalisiert ist und weiterhin das sogenannte anomale Myonium  $\text{Mu}_{BC}$ , das auf einem „bond centre“-Platz im Zentrum einer Si–Si-Bindung (im Falle des Silizium) lokalisiert ist. Ferner gibt es diamagnetische Spezies  $\mu^d$  (ohne Hyperfeinwechselwirkung), die sich spektroskopisch in  $\mu$ SR-Experimenten nicht voneinander trennen lassen (siehe auch Kapitel 3).

Die Übertragbarkeit der über Myonspezies in Halbleitern gewonnenen Erkenntnisse auf analoge Wasserstoffspezies läßt sich anhand des anomalen Myoniums  $\text{Mu}_{BC}$  demonstrieren. Das in Silizium in EPR-Experimenten gefundene AA9-Wasserstoff-Zentrum (GORELKINSKII 1987) ist das direkte Analogon von  $\text{Mu}_{BC}$ ; die Hyperfeintensoren der beiden Spezies stimmen nach Reskalierung gemäß den gyromagnetischen Verhältnissen von Proton und

Myon vollkommen miteinander überein. Dieses Beispiel zeigt aber auch, welchen kaum zu überschätzenden Beitrag die  $\mu$ SR bei den Untersuchungen von Wasserstoff in Halbleitern liefern kann. Das dem  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  analoge Wasserstoffzentrum AA9 wurde erst 14 Jahre nach  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  an protonenbestrahltem Silizium in EPR-Experimenten unter gleichzeitiger Lichteinstrahlung entdeckt, also unter nicht völlig auf der Hand liegenden experimentellen Bedingungen. Das dem  $\text{Mu}_{\text{T}}$  analoge Wasserstoffzentrum wurde bisher noch nicht nachgewiesen und diamagnetische Spezies, die  $\mu^{\text{d}}$  entsprechen würden, sind mit der EPR ohnehin nicht nachweisbar.

Außer zur Identifizierung verschiedener Myonspezies und damit deren Wasserstoffanaloge kann die  $\mu$ SR zur Untersuchung von dynamischen Prozessen, wie z. B. Übergängen zwischen verschiedenen Spezies oder Spinaustauschprozessen, eingesetzt werden (KREITZMAN 1995, SCHEUERMANN 1995, SCHEUERMANN 1997b). Man kann sagen, daß fast alle Erkenntnisse über die Dynamik von isoliertem interstitiellem Wasserstoff auf  $\mu$ SR-Untersuchungen beruhen. Die Erkenntnisse über die Dynamik der verschiedenen Myonspezies lassen sich direkt auf Wasserstoff übertragen, sofern es sich um rein elektronische Prozesse, wie z. B. Locherfang handelt. Spielt jedoch die Bewegung des Myons selbst eine Rolle, so ist zu bedenken, daß Myonen im Vergleich zu Wasserstoff eine viel kleinere Masse haben, was häufig zu einer Beschleunigung der dynamischen Prozesse führt. Trotz der Massendifferenz von Myon und Proton entspricht die reduzierte Masse des Elektrons in Myonium allerdings der des Elektrons in Wasserstoff.

Die vorliegende Arbeit konzentriert sich auf die Wechselwirkung von Myonen mit Störstellen bzw. Gitterbaufehlern in Silizium. Bereits aus früheren Arbeiten ist bekannt, daß Veränderungen der Konzentration von Dotieratomen einen deutlichen Einfluß auf die Beobachtbarkeit der Spezies  $\text{Mu}_{\text{T}}$  hat, insbesondere aber die dynamischen Prozesse aller bekannten Myonspezies beeinflußt (SCHENCK 1985). Dies geschieht einerseits über die Änderungen in den elektronischen Eigenschaften, z. B. der Ladungsträgerkonzentration (SCHEUERMANN 1995, PATTERSON 1988), andererseits über den Einfang von z. B.  $\text{Mu}_{\text{T}}$  an Dotieratomen und Bildung eines diamagnetischen Myonium-Dotieratom-Komplexes (SCHEUERMANN 1997b, KREITZMAN 1995). Weiterhin wurden deutliche Unterschiede in den Signalen der bekannten Myonspezies beobachtet, sofern die Messungen an nach verschiedenen Ziehverfahren gewonnenen Kristallen, dem Zonenschmelzverfahren (floatzone, FZ) einerseits und dem Czochralski-Verfahren (CZ) andererseits, durchgeführt wurden (SCHEUERMANN 1995, PATTERSON 1988). Da bekannt ist, daß CZ-Si-Kristalle wesentlich höhere Sauerstoffkonzentrationen als FZ-Si-Kristalle enthalten, kann vermutet werden, daß für diese Veränderungen Sauerstoff und möglicherweise die Bildung von Myonium-Sauerstoff-Komplexen verantwortlich sind. Derartige Komplexe konnten aber bisher mittels  $\mu$ SR-Experimenten nicht nachgewiesen werden.

Um den genannten Fragen genauer nachzugehen, wurden im Rahmen dieser Arbeit systematische  $\mu$ SR-Untersuchungen an unterschiedlich dotierten Silizium-Einkristallen bei verschiedenen Dotieratomkonzentrationen durchgeführt; außerdem wurden Proben mit verschiedenen Sauerstoffkonzentrationen und insbesondere auch unterschiedlichen Verhältnissen von Dotieratom- zu Sauerstoff-Konzentrationen untersucht. Bei diesen Messungen wurden zwei bisher unbekannte paramagnetische Myonspezies entdeckt, die im folgenden mit  $\text{Mu}_{\text{V}}$  und  $\text{Mu}_{\text{X}}$  bezeichnet werden. Die beiden Spezies wurden im Rahmen der vor-



liegenden Arbeit charakterisiert, z.B. deren Hyperfeintensoren bestimmt. Dabei konnte  $\text{Mu}_V$  einer Myonspezies in einer Leerstelle zugeschrieben werden (siehe Kapitel 9). Die Spezies  $\text{Mu}_X$  wurde mit Sauerstoff in Verbindung gebracht (siehe Kapitel 8).

Aufgrund der kurzen Zeitspanne zwischen Myonimplantation und der Detektion der Myonspezies besteht in  $\mu\text{SR}$ -Experimenten auch die Chance, die schnell ablaufende Bildung von Komplexen aus einer isolierten interstitiellen Myonspezies zu verfolgen. Wenn dynamische Prozesse auftreten, dann ist es sinnvoll, verschiedene  $\mu\text{SR}$ -Methoden einzusetzen, denn bei der Standardmethode, der Transversalfeld- $\mu\text{SR}$  ( $\text{TF}\mu\text{SR}$ ), bei der die kohärente Präzession der Spins eines Myonensembles detektiert wird, können stochastische dynamische Prozesse dazu führen, daß die Phasenkohärenz der Spinpräzession massiv gestört und das interessierende Signal somit unbeobachtbar wird. Daher wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit neben der  $\text{TF}\mu\text{SR}$ , die in Kapitel 2.4 beschrieben wird, auch die sogenannte „Longitudinal Field Quenching“- $\mu\text{SR}$  ( $\text{LFQ}$ ) eingesetzt (siehe Kapitel 2.5), die nicht auf Spin-Phasenkohärenz angewiesen ist und sich insbesondere zum Nachweis schneller dynamischer Prozesse eignet. Zur Auswertung der  $\text{LFQ}$ -Daten unter Einbeziehung der neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  mußte das bestehende theoretische Modell (ODERMATT 1988, MEIER 1982, IWANOWSKI 1994), das bisher nur die Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  beinhaltet, erweitert werden (siehe Kapitel 5).

Weitere Untersuchungen im Zusammenhang mit der neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  (Myonium in einer Leerstelle) erforderten Experimente an elektronenbestrahlten Silizium-Einkristallen. Zur Durchführung dieser Messungen war die Konstruktion eines speziellen Probenhalters erforderlich (siehe Kapitel 2.3). Auch zum Zwecke von  $\mu\text{SR}$ -Messungen in einem angelegten elektrostatischen Feld, die bisher noch nie von unserer Gruppe durchgeführt wurden, war die Herstellung eines speziellen Probenhalters erforderlich (siehe Kapitel 2.3).

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert: Nach der Beschreibung der wesentlichen Grundlagen der  $\mu\text{SR}$  sowie der verwendeten  $\mu\text{SR}$ -Methoden in Kapitel 2 werden in Kapitel 3 die verschiedenen in Silizium existierenden Myonspezies beschrieben, wobei bereits kurz auf die wesentlichen Eigenschaften der im Rahmen der vorliegenden Arbeit identifizierten Myonspezies eingegangen wird. Daran anschließend werden in Kapitel 4 und 5 die theoretischen Grundlagen der verwendeten  $\mu\text{SR}$ -Methoden beschrieben. An das Kapitel 6, welches der Charakterisierung der verwendeten Siliziumproben gewidmet ist, schließen sich die Ergebnisse der  $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen sowie deren Diskussion in Kapitel 7 bis 9 an. Den Abschluß bildet eine Zusammenfassung der im Rahmen der vorliegenden Arbeit gewonnenen Erkenntnisse, insbesondere im Hinblick auf den Beitrag zum Verständnis des Verhaltens von interstitiellem Wasserstoff in Silizium.

# Kapitel 2

## Grundlagen der $\mu$ SR in Halbleitern

Positive und negative Myonen sind Elementarteilchen und gehören zur Teilchenfamilie der Leptonen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich das Verhalten positiver Myonen ( $\mu^+$ ) betrachtet. Daher wird das positive Myon im folgenden kurz als Myon bezeichnet.

Die Myonen verhalten sich im Festkörper und bei chemischen Reaktionen wie „leichte“ Protonen. Die Protonen gehören zwar zur Teilchenfamilie der Hadronen, im Festkörper ist jedoch allein die elektromagnetische Wechselwirkung entscheidend. Zwei Teilchen aus unterschiedlichen Teilchenfamilien können somit ein ähnliches Verhalten im Festkörper aufweisen. Wichtig ist hier, daß Myonen genauso wie Protonen einfach positiv geladen sind, und daß weiterhin Myonen mit einer Masse von ca.  $1/9$  der Protonenmasse immer noch sehr viel schwerer sind als Elektronen. Im Vakuum, in Halbleitern und vielen Isolatoren kann das positive Myon mit einem Elektron einen gebundenen Zustand, das sogenannte Myonium ( $\mu^+e^-$ ) bilden. Die reduzierte Masse des Elektrons von Myonium ist nahezu gleich der von Wasserstoff. Das Myon bzw. Myonium verhält sich daher in Halbleitern sehr ähnlich zu einem Wasserstoffatom und wird in diesem Sinn auch als leichtes Wasserstoffisotop bezeichnet. Es existieren sowohl mehrere unterschiedliche Myonspezies (siehe Kapitel 3) als auch Wasserstoffspezies in Halbleitern, und es besteht eine Analogie zwischen den jeweiligen Myon- und Wasserstoffspezies.

Die „isolierten“ Wasserstoffspezies, d. h. Wasserstoffatome, welche keine elektronische Bindung mit z. B. Dotieratomen oder anderen Wasserstoffatomen eingegangen sind, werden im folgenden mit  $H_a^b$  bezeichnet und die entsprechenden Myoniumspezies mit  $Mu_a^b$ , wobei  $a$  die kristallographische Lage (T steht z. B. für Tetraederplatz, BC für „bond centre“-Platz, V für Leerstelle (engl.: vacancy)) und  $b$  den Ladungszustand, d. h. die Gesamtladung der Wasserstoff- bzw. Myoniumspezies (+1, 0, -1), angibt.

Die Spezies mit Gesamtladung Null besitzen alle ein ungepaartes Elektron. Sie sind paramagnetisch, wobei eine Hyperfeinwechselwirkung zwischen Elektron und Myon vorhanden ist. Bei Gesamtladung Null wird im folgenden auf den oberen Index verzichtet. Die Spezies mit ungerader Gesamtladung besitzen keine ungepaarten Elektronen. Sie sind diamagnetisch und besitzen keine Hyperfeinwechselwirkung. Sie sind bei Untersuchungen mit-

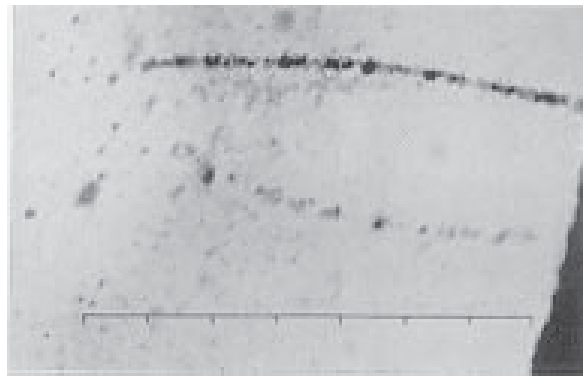


Abbildung 2.1: Reproduktion aus KUNZE (1933): Ionisationskammeraufnahme. Die untere Spur zeigt ein Elektron. Die obere Spur zeigt ein Myon und wurde von Kunze damals beschrieben durch: „Die Natur des oberen positiven Korpuskel ist nicht sicher bekannt.“ „Für ein Proton ionisiert sie wohl zu wenig, und für ein positives Elektron zu viel.“

tels positiver Myonen nicht voneinander unterscheidbar. Die diamagnetischen Ladungszustände der verschiedenen isolierten Myonspezies sowie aller diamagnetischen Spezies, bei denen Myonium an z. B. Dotieratome chemisch gebunden ist, werden daher ohne weitere Unterscheidung mit einem einzigen Symbol  $\mu^d$  bezeichnet.

Bei den  $\mu$ SR-Methoden (Myonspin-Rotation, -Relaxation, -Resonanz) wird die Myonspinrichtung in Abhängigkeit von der Zeit nachgewiesen, woraus sich Rückschlüsse auf die magnetische Wechselwirkung am Ort des Myons ziehen lassen. Analog dazu ist die NMR- (Kernspinresonanz, engl: nuclear magnetic resonance) oder EPR-Methode (Elektronspinresonanz, engl.: electron paramagnetic resonance).

Die hohe Empfindlichkeit der  $\mu$ SR-Methoden beruht auf zwei Tatsachen (SCHENCK 1985, siehe auch Kapitel 2.1). Zum Einen sind die Myonen zum Implantationszeitpunkt 100 % spinpolarisiert. Dies ist eine Folge des vorausgehenden Pionzerfalls. Die  $\mu$ SR-Methoden beruhen des weiteren auf dem asymmetrischen Zerfall des Myons. Der Nachweis der Myonspinrichtung zum Zeitpunkt ihres Zerfalls erfolgt über die Zerfallsprodukte des  $\beta$ -Zerfalls des Myons. Die Zerfallsprodukte des Myonzerfalls sind u. a. hochenergetische Positronen, welche mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit nachweisbar sind.

## 2.1 Erzeugung, Eigenschaften und Zerfall positiver Myonen

Das Myon wurde erstmals 1933 von KUNZE (1933) in der Höhenstrahlung beobachtet. Die Spur des Myons wurde damals in einer Ionisationskammer nachgewiesen und als Reaktionsprodukt einer Kernreaktion interpretiert. Die Originalabbildung aus KUNZE (1933) ist in Abbildung 2.1 wiedergegeben. Das „unbekannte positive Korpuskel“ ist mittlerweile als Myon bekannt. Im Zusammenhang mit der Entdeckung des Myons wird jedoch häufig die spätere Arbeit von ANDERSON und NIEDERMEYER (1936) zitiert, welche das Myon ebenfalls in der Höhenstrahlung nachgewiesen haben. Auch hier wurde vermutet, daß

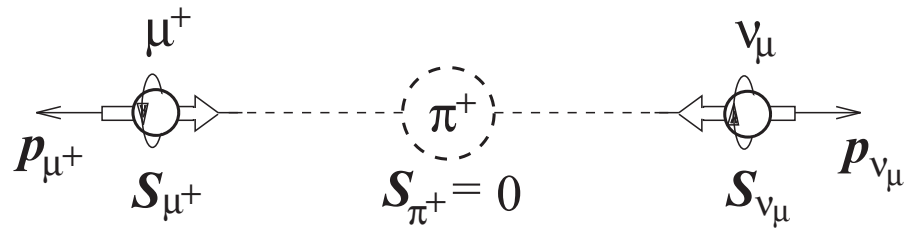
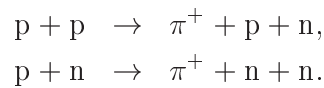


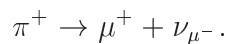
Abbildung 2.2: Pionzerfall im Ruhesystem des Pions, die entstehenden Myonen und Myonenneutrinos sind vollständig (longitudinal) spinpolarisiert. Die dünnen Pfeile beschreiben die Impulsrichtung des Myons bzw. Myonenneutrinos, wohingegen die dicken Pfeile die Spinrichtung des Myons bzw. Myonenneutrinos darstellen.

das beobachtete positive Teilchen das Reaktionsprodukt einer Kernreaktion sei. Erst im Nachhinein wurde klar, daß bei diesen Untersuchungen tatsächlich das Myon beobachtet wurde.

Für Experimentierzwecke werden die Myonen in Protonenbeschleunigern in sogenannten “Mesonen-Fabriken” erzeugt. Am Paul Scherrer Institut (PSI), Villigen, Schweiz, an welchem sämtliche im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgestellten Experimente durchgeführt wurden, werden Protonen mit einer Energie von ca. 590 MeV auf ein Kohlenstofftarget geschossen (PSI 1994). Dabei entstehen durch folgende Kernreaktionen positive Pionen ( $\pi^+$ ) gemäß



Die Pionen zerfallen mit der mittleren Lebensdauer von  $\tau_\pi = 26$  ns in Myonen und Myonenneutrinos gemäß



Die aus den spinlosen Pionen entstehenden Myonenneutrinos besitzen die Helizität  $\mathcal{H} = -1$ . Die Drehimpulserhaltung beim Zerfall fordert, daß auch die entstehenden Myonen Helizität  $\mathcal{H} = -1$  besitzen, d. h. Spin und Impuls des Myons sind antiparallel zueinander gerichtet. Durch die Nichterhaltung der Parität bei der schwachen Wechselwirkung und damit beim Pionzerfall sind die Myonen somit im Ruhesystem der Pionen vollständig spinpolarisiert, siehe dazu Abbildung 2.2.

Die Eigenschaften der Myonen im Vergleich zu denen der Protonen sind in Tabelle 2.1 zusammengestellt.

Die Nichterhaltung der Parität beim Pionzerfall und die daraus resultierende Helizität von  $\mathcal{H} = -1$  der Myonen wird ausgenutzt, um polarisierte Myonstrahlen zu erzeugen,

	Myon	Proton
Masse	$m_\mu = 105,66 \text{ MeV}/c^2$	$m_p = 938,37 \text{ MeV}/c^2$
Ladung	$e$	$e$
Spin	$\hbar/2$	$\hbar/2$
magnetisches Moment	$\mu_\mu = 4,4905 \cdot 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$	$\mu_p = 1,4106 \cdot 10^{-26} \text{ J T}^{-1}$
gyromagnetisches Verhältnis	$\gamma_\mu = 8,516 \cdot 10^8 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$\gamma_p = 2,675 \cdot 10^8 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$
mittlere Lebensdauer	$\tau_\mu = 2,197 \cdot 10^{-6} \text{ s}$	$\tau_p > 1,6 \cdot 10^{25} \text{ a}$

Tabelle 2.1: *Eigenschaften positiver Myonen und Protonen* ( $e = 1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  ist die positive Elementarladung,  $h = 2\pi\hbar$ ).

wie sie beispielsweise am PSI zur Verfügung stehen. Nach der Implantation in die zu untersuchende Probe zerfällt das Myon seinerseits mit der mittleren Lebensdauer von  $\tau_\mu = 2,197 \mu\text{s}$  in ein Positron  $e^+$  und zwei Neutrinos gemäß

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_{e^-} + \nu_{\mu^+}.$$

Die maximale Gesamtenergie der Zerfallspositronen beträgt  $E_{\max} = 52,83 \text{ MeV}$ . Die Positronen können aufgrund ihrer hohen kinetischen Energie mit nuklearen Methoden gut nachgewiesen werden. Daher handelt es sich bei den  $\mu$ SR-Untersuchungen um nukleare Methoden. Die differentielle Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Positrons der normierten Energie  $\varepsilon = E/E_{\max}$  zwischen  $\varepsilon$  und  $\varepsilon + d\varepsilon$  in ein Raumwinkelelement  $d\Omega$  um einen Winkel  $\vartheta$  zur Spinrichtung des Myons ist im Ruhesystem des Myons gegeben durch (SEGRÉ 1977)

$$dW(\varepsilon, \vartheta) = \frac{3 - 2\varepsilon}{2\pi\tau_\mu} [1 + A(\varepsilon) \cos \vartheta] \varepsilon^2 d\varepsilon d\Omega \quad (2.1)$$

mit dem Asymmetriefaktor

$$A(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon - 1}{3 - 2\varepsilon}. \quad (2.2)$$

Die Mittelung der Emissionswahrscheinlichkeit  $dW$  über das gesamte Energiespektrum der Zerfallspositronen liefert die Winkelverteilung der Positronen. Die Anzahl  $N$  der emittierten Positronen in Abhängigkeit des Winkels  $\vartheta$  zwischen Myonspinrichtung und Emissionsrichtung der Positronen ist gegeben zu

$$N(\vartheta) \propto \left(1 + \frac{1}{3} \cos \vartheta\right). \quad (2.3)$$

Daraus läßt sich entnehmen, daß die Positronen bevorzugt in Myonspinrichtung emittiert werden. Die Emissionsrichtung des Zerfallspositrons ist daher mit der Spinrichtung des Myons zum Zeitpunkt des Zerfalls korreliert. Diese Asymmetrie der Positronemission zusammen mit der 100 %-igen Spinpolarisation der Myonen bildet die Grundlage sämtlicher  $\mu$ SR-Untersuchungen. Die zeitliche Änderung der Spinpolarisation, bezogen auf einen bestimmten Raumwinkelbereich, läßt sich durch Zählen der auf geeignet positionierte Zähler auftreffenden Positronen, die gleichzeitige Bestimmung des Zerfallszeitpunktes (Zeit zwischen Implantation des Myons und Detektion des Positrons) und gleichzeitiges Sortieren der Ereignisse in Zeithistogramme verfolgen.

## 2.2 Prinzip der $\mu$ SR

Die  $\mu$ SR-Methoden machen von der Nichterhaltung der Parität in der Zerfallsreihe  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ \rightarrow e^+$  und der daraus resultierenden Polarisation der Myonen sowie der Korrelation der Emissionsrichtung des Zerfallspositrons mit der Myonspinrichtung zum Zeitpunkt des Zerfalls (GARWIN 1957) Gebrauch. Das erste auf dieser Tatsache basierende  $\mu$ SR-Experiment wurde 1957, im Jahr der Entdeckung der Nichterhaltung der Parität (WU 1957), von GARWIN und Mitarbeitern (1957) vorgeschlagen, um die Nichterhaltung der Parität beim Pion- sowie Myonzerfalls zu überprüfen, welche zu einer Spinpolarisation der Myonen sowie einer asymmetrischen Emission der daraus resultierenden Zerfallspositronen führen sollte. Diese Tatsache, welche von LEE und YANG (1956) vorausgesagt wurde und die Grundlage aller  $\mu$ SR-Methoden darstellt, konnte mit diesem Experiment bestätigt werden. Außerdem wurde im Rahmen dieses ersten  $\mu$ SR-Experiments das magnetische Moment des Myons bestimmt.

Das allgemeine Prinzip aller zeitdifferentiellen  $\mu$ SR-Methoden ist wie folgt: Spinpolarisierte Myonen werden in die Probe implantiert, wobei sie einen Detektor, den sogenannten Myonen-Zähler (M), durchqueren, welcher den Startpunkt der Zeitmessung festlegt. Die Polarisation der Myonen bleibt während der im Vergleich zur Lebensdauer kurzen Abbremsphase im Festkörper erhalten (BREWER 1975, FORD 1957), und die Anfangsposition des Myons in der Probe nach dem Abbremsen auf thermische Energien entspricht somit der Spinrichtung des Myons im Myonstrahl. Das Myon erfährt in der Probe unter Umständen eine Wechselwirkung mit einem Magnetfeld, wodurch sich die Spinrichtung des Myons mit der Zeit ändern kann. Beim Myonzerfall werden hochenergetische Positronen bevorzugt in Richtung der Myonspinrichtung zum Zeitpunkt des Zerfalls ausgesandt, welche in entsprechenden Zählern, den sogenannten Positronenzählern, nachgewiesen werden und das Stoppsignal der Zeitmessung liefern. Bei dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten Spektrometer werden zwei Positronendetektoren verwendet. Der Detektor in Strahlrichtung (von der Probe aus gesehen) wird als Vorwärts-Zähler (engl.: forward, FW) bezeichnet und derjenige entgegen der Strahlrichtung als Rückwärts-Zähler (engl.: back-

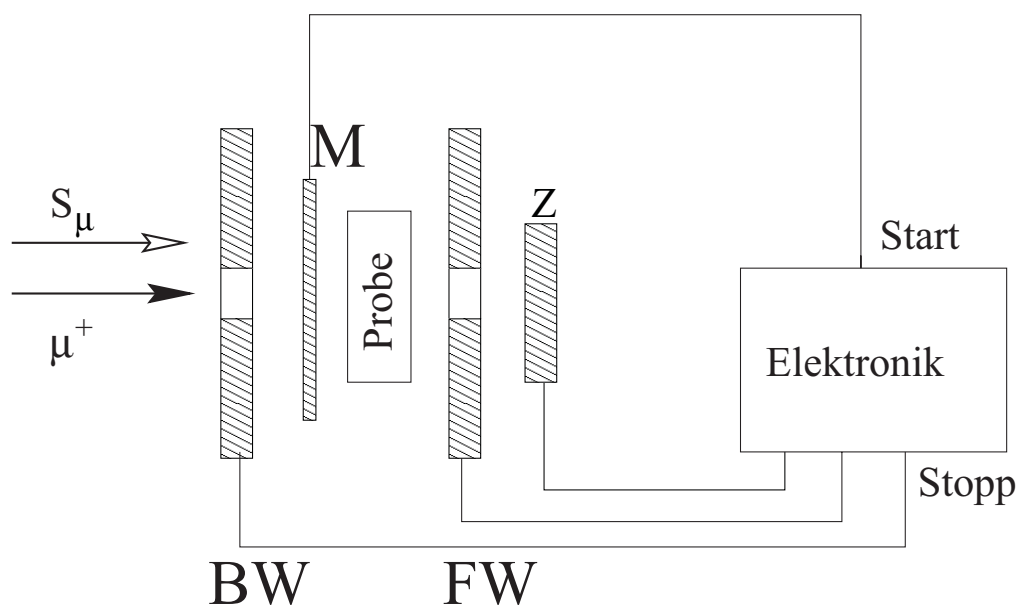


Abbildung 2.3: Schematischer Versuchsaufbau eines  $\mu$ SR-Experiments. Die Myonen mit Spin  $S_\mu$  werden bei der Implantation im Myonenzähler (M) detektiert. Mit Hilfe der Datenerfassungselektronik wird die Zeitdifferenz zwischen Implantation und Zerfall des Myons, welcher durch Detektion des Zerfallspositrons in einem der Positronenzähler (z. B. dem Vorwärts(FW)-, Rückwärts(BW)- oder Zusatzzähler (Z)) nachgewiesen wird, bestimmt.

ward, BW). Die Positronendetektoren sind in Abbildung 2.3 entsprechend mit FW bzw. BW bezeichnet. Der Myonenzähler (M) ist ebenfalls in dieser Abbildung eingezeichnet.

Die Zeit zwischen Implantation und Zerfall des Myons, zusammen mit der Information, in welchem Detektor (FW oder BW) das Stoppsignal detektiert wurde, wird in der Datenerfassungs-Elektronik aufbereitet (SCHMIDL 1997). Diese erfaßten Ereignisse werden nach der zugehörigen detektierten Zeitdifferenz zwischen Implantation und Zerfall des Myons sowie der Information, in welchem Zähler das Ereignis erfaßt wurde, sortiert und aufsummiert. Die daraus resultierende Anzahl gemessener Ereignisse, aufgetragen über der zugehörigen Zeitdifferenz, stellt das im jeweiligen Zähler gemessene Zeithistogramm dar. Zu beachten ist jedoch, daß eine eindeutige Zuordnung der Zeitdifferenz zwischen Implantation und Zerfall des Myons nur gewährleistet ist, sofern sich jeweils nur ein einzelnes Myon in der Probe befindet. Diese Forderung wird durch die Datenerfassungs-Elektronik realisiert, indem jene alle Ereignisse verwirft, welche zustande kommen, sobald sich mehr als ein Myon in der Probe befindet (SCHMIDL 1997). In den Histogrammen sind somit nur gültige Ereignisse enthalten.

Nur ein Teil des Raumwinkelbereichs ist bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Experimenten mit Detektoren versehen. Es kann somit vorkommen, daß das Zerfallspositron eines im M-Zähler registrierten Myons nicht beobachtet wird. Die Datenerfassungs-Elektronik wurde bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Messungen so eingestellt, daß, sofern innerhalb von  $10 \mu\text{s}$  (ca. 5-fache mittlere Lebensdauer des Myons) kein Zerfallspositron registriert wurde, angenommen wird, daß das Myon bereits zerfallen ist, ohne das Zerfallspositron beobachtet zu haben. Die Wahr-

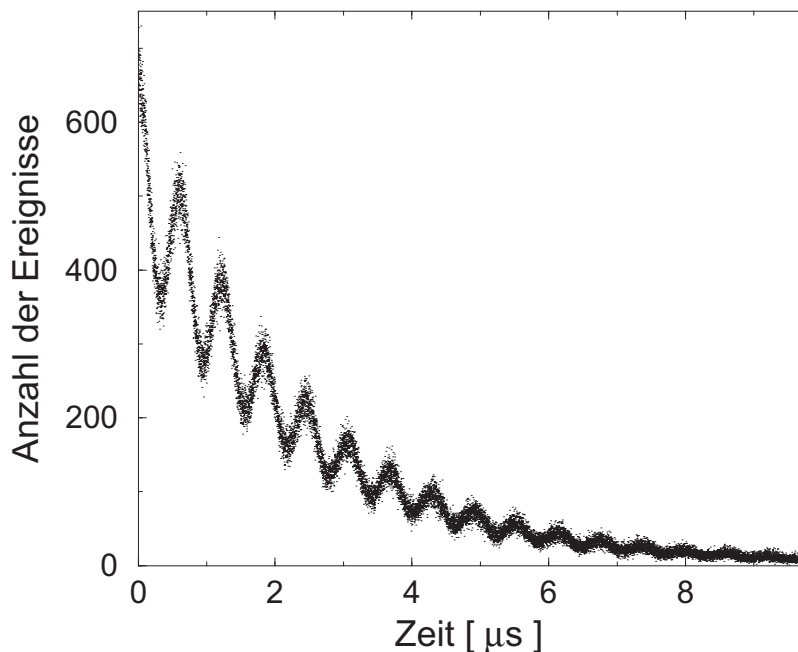


Abbildung 2.4: Histogramm im FW-Zähler, aufgenommen an einer Aluminiumprobe bei Raumtemperatur in einem äußeren Magnetfeld von 12 mT. Die dem exponentiellen Zerfall überlagerte Präzessionsfrequenz entspricht einem lokalen Magnetfeld von 12 mT am Myonort.

scheinlichkeit, daß das Myon doch noch nicht zerfallen ist, ist sehr gering (1,05 %). Die Datenerfassungs-Elektronik ist so ausgelegt, daß sie nach 10  $\mu$ s ohne Stoppsignal das nächste im M-Zähler registrierte und implantierte Myon als „neues“ Startsignal der Zeitbestimmung wertet. Die Zeitaufösung der Datenerfassungs-Elektronik liegt bei 0,625 ns. Die Zeithistogramme besitzen eine Länge von 16000 Kanälen, welche 10  $\mu$ s entspricht. Eine genaue Beschreibung der Datenerfassungs-Elektronik, welche kürzlich ausgearbeitet, getestet und eingeführt wurde und den früher verwendeten Aufbau in seiner Leistungsfähigkeit deutlich übertrifft findet sich in SCHMIDL (1997) und MAJOR (2000).

Prinzipiell ist jedes einzelne Myon nachweisbar, wobei sich eine Messung jedoch aus mindestens  $10^7 - 10^8$  detektierten Myonen zusammensetzt. Diese Anzahl an Myonen, welche alle nacheinander in die Probe implantiert und detektiert werden, ist notwendig, um ein ausreichendes Signal zu Rauschverhältnis insbesondere zur Anpassung einer entsprechenden Theoriefunktion an die Meßdaten zu erreichen. Dadurch liegt die Nachweisgrenze der  $\mu$ SR-Methoden bei  $10^7 - 10^8$  Myonen.

Ein typisches Histogramm von Aluminium, bei welchem die Präzession des Myons im von außen an die Probe angelegten Magnetfeld deutlich zu beobachten ist, ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Dem exponentiellen Zerfall des Myons ist ein Präzessionssignal der diamagnetischen Myonspezies  $\mu^d$  überlagert, deren Frequenz von der Stärke des Magnetfelds am Myonort abhängt.



Zeitweise wurde ein weiterer Detektor, der sogenannte Zusatz-Detektor (Z), verwendet. Dieser ist notwendig, um Positronen, welche unter einem kleinen Winkel zur Strahlrichtung emittiert werden, nachzuweisen. Damit die Myonen überhaupt in die Probe implantiert werden können, muß der BW-Zähler eine Aussparung besitzen. Aus Symmetriegründen (Gleichheit der Detektorfläche) besitzt auch der FW-Zähler eine analoge Aussparung. Der durch diese Aussparung hervorgerufene Verlust an Zählrate im FW-Zähler ist für die meisten Untersuchungen vernachlässigbar. Die Symmetrie zwischen FW- und BW-Zähler ist meist viel wichtiger. Bei einigen Untersuchungen kann es jedoch entscheidend sein, gerade die infolge dieser Aussparung nicht registrierbaren Ereignisse zu untersuchen, insbesondere, wenn das Signal eines einzigen Zählers eine Aussage erlaubt und die Symmetrie zwischen den Zählern eine eher untergeordnete Rolle spielt. In solchen Fällen wurde der Zusatz-Zähler (Z) verwendet und direkt hinter der Aussparung des FW-Zählers angebracht. Dieser ist im Vergleich zu den FW-/BW-Zählern deutlich kleiner und deckt lediglich die in diesen Zählern vorhandenen Aussparungen ab. Dieser Zähler ist im schematischen Aufbau in Abbildung 2.3 ebenfalls eingezeichnet.

Die vergleichbare NMR-Methode beruht auf der Ausrichtung der magnetischen Dipolmomente im Magnetfeld. Die erreichte Magnetisierung ist durch die Zeeman-Aufspaltung der Energieniveaus im Magnetfeld und der daraus resultierenden Unterschiede in der Besetzungswahrscheinlichkeit der aufgespaltenen Niveaus bestimmt. Die Aufspaltung der Energieniveaus ist sehr gering, woraus sich in einem typischen Magnetfeld von 1 T bei Raumtemperatur ein Besetzungszahlunterschied der Niveaus von ca.  $10^{-6}$  ergibt. Dieser Unterschied entspricht der Polarisation der Protonen in der Probe. Die untere Nachweisgrenze liegt aufgrund dieser sehr geringen Polarisation der Protonen bei  $10^{15} - 10^{18}$  Protonen, welche sich alle in derselben Umgebung befinden müssen. Dies stellt einen limitierenden Faktor der NMR-Methode dar.

## 2.3 $\mu$ SR-Methoden

Bei den unterschiedlichen  $\mu$ SR-Methoden (SEGER 1984, SCHENCK 1985, COX 1987, BREWER 1994) wird fast immer ein Magnetfeld von außen angelegt. Je nach Richtung des äußeren Magnetfelds  $\vec{B}_a$ , bezogen auf die Myonspinrichtung  $\vec{S}_\mu$  im Strahl, wird zwischen Transversalfeld- $\mu$ SR (TF $\mu$ SR) mit  $\vec{B}_a \perp \vec{S}_\mu$  und Longitudinalfeld- $\mu$ SR (LF $\mu$ SR) mit  $\vec{B}_a \parallel \vec{S}_\mu$  unterschieden. Diese Einteilung der  $\mu$ SR-Methode anhand der Richtung des von außen angelegten Magnetfelds ist nur sinnvoll, sofern in der Probe keine starken statischen inneren magnetischen Felder vorhanden sind, was im Falle von Silizium erfüllt ist.

Bei der TF $\mu$ SR wird die Präzession des Myonspins um das von außen angelegte Magnetfeld beobachtet, welches senkrecht zur Anfangsspinrichtung der Myonen ausgerichtet ist. Diese Präzession kann in beliebiger Richtung senkrecht zum Magnetfeld beobachtet werden. Die TF $\mu$ SR wurde traditionell zur Identifikation der Myonspezies verwendet. Des weiteren läßt sich mit der TF $\mu$ SR auch teilweise das dynamische Verhalten der Myonspezies untersuchen.

Bei der Nullfeld- $\mu$ SR (ZF $\mu$ SR, engl.: zero-field  $\mu$ SR) ist kein von außen angelegtes Magnetfeld vorhanden. Die einzige ausgezeichnete Richtung ist bei der ZF $\mu$ SR die Strahlrichtung, welche parallel zur Anfangsmyonspinrichtung ist. Die charakteristischen Präzessions-signale der Myonspezies können lediglich parallel zur Strahlrichtung beobachtet werden. Diese Detektionsrichtung ist allen LF $\mu$ SR-Methoden gemein. Daher wird die ZF $\mu$ SR als Spezialfall der LF $\mu$ SR-Methoden angesehen. In Halbleitern lassen sich nur die paramagnetischen Myonspezies mittels ZF $\mu$ SR untersuchen.

Im Gegensatz zur TF $\mu$ SR existieren im Falle der LF $\mu$ SR mehrere unterschiedliche Methoden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sei die „Logitudinal Field Quenching“- $\mu$ SR (LFQ) sowie die Hochfrequenz- $\mu$ SR (HF $\mu$ SR) erwähnt.

Bei der LFQ, die in Kapitel 2.5 näher beschrieben wird, wird die Stärke des von außen angelegten Magnetfelds variiert, um eine graduelle Entkopplung der Präzession von Myonspin und Elektronenspin der paramagnetischen Spezies zu erzielen. Diese Methode ist insbesondere zur Untersuchung dynamischer Prozesse geeignet.

Bei der HF $\mu$ SR wird zusätzlich zum longitudinalen Magnetfeld ein transversales hochfrequentes Wechselfeld angelegt, um Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus einer Myonspezies zu induzieren. Je nach Wahl der Frequenz des Wechselfelds kann eine spezifische Myonspezies ausgewählt werden. Die HF $\mu$ SR findet im Rahmen der vorliegenden Arbeit keine Verwendung, wird jedoch ebenfalls von unserer Gruppe angewandt (z. B. SCHEUERMANN 1997a, b, SCHEUERMANN 1995).

Die  $\mu$ SR-Methoden TF $\mu$ SR, ZF $\mu$ SR, LFQ sowie HF $\mu$ SR werden von uns mit ein und demselben, in Kapitel 2.2, Abbildung 2.3 schematisch dargestellten Versuchsaufbau durchgeführt. Dadurch können Untersuchungen mit verschiedenen  $\mu$ SR-Methoden an einer Probe ohne Probenausbau durchgeführt werden. Somit ist insbesondere die Vergleichbarkeit der mit unterschiedlichen Methoden gewonnenen Ergebnisse garantiert. Des weiteren erleichtert ein einziger universell einsetzbarer Versuchsaufbau die Handhabung.

Die Grundzüge der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten  $\mu$ SR-Methoden, TF $\mu$ SR, ZF $\mu$ SR und LFQ werden in den Kapiteln 2.4 und 2.5 zusammen mit dem jeweiligen prinzipiellen Vorgehen bei der Auswertung der Meßdaten beschrieben.

### 2.3.1 Durchführung der Experimente

Alle im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgestellten Experimente wurden am PSI im Experimentierareal  $\mu$ E4 durchgeführt. Der Myonimpuls liegt bei ca. 35 MeV/c, was einer Energie von ca. 4 MeV und damit einer Eindringtiefe der Myonen in Silizium von ca. 750  $\mu$ m entspricht. Es handelt sich um einen quasikontinuierlichen Strahl, wobei der Myonspin parallel zur Strahlrichtung ausgerichtet ist.

Die Proben können unter verschiedenen Bedingungen untersucht werden. Die Temperatur kann zwischen  $T = 5$  K und 300 K variiert werden. Dazu ist die Probe in einen Kryostaten eingebaut, welcher bei SCHMIDL (1997) genauer beschrieben ist. Das von außen angelegte Magnetfeld ist zwischen 0 und 0,5 T variabel. Das Erdmagnetfeld sowie die

durch die Strahlführungsmagnete am Ort der Probe verursachten Magnetfelder werden mit drei Helmholtzspulenpaaren kompensiert. Die Magnetfeldstabilität dieser Kompensation beträgt  $10^{-6}$  T.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden u. a. Messungen an bei 77 K elektronenbestrahlten Proben durchgeführt. Um ein Ausheilen der bestrahlungsinduzierten Fehlstellen zu verhindern, mußte ein Einbau ohne wesentliche Erwärmung der bei  $T = 77$  K in flüssigem Stickstoff gelagerten Proben durchgeführt werden. Für den Einbau bei 77 K mußte ein spezieller Probenhalter konstruiert werden. Dieser besteht aus einem Kupferkühlfinger mit einem Reservoir für flüssigen Stickstoff, siehe Anhang A. Damit konnte erreicht werden, daß die Temperatur, welche die Probe während des Einbaus annimmt, nicht höher als 80 K liegt. Sofort nach dem Einbau wird die Probe dann auf 5 K abgekühlt.

Von unserer Gruppe wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit erstmals TF $\mu$ SR-Untersuchungen mit zusätzlich angelegtem elektrostatischem Feld durchgeführt. Das elektrostatische Feld wurde dazu parallel bzw. antiparallel zur Strahlrichtung ausgerichtet und damit senkrecht zum von außen angelegten Magnetfeld. Die Probe wurde dazu mit selbstklebender aluminisierter Mylar-Folie beklebt, welche kontaktiert wurde. Die Aluminiumbeschichtung der Folie dient dabei als Kondensatorplatte. Eine schematische Abbildung dieses Aufbaus ist in Anhang B dargestellt. Die Probendicke liegt bei 2,5 mm, womit sich die aluminisierten Mylar-Folien in diesem Abstand befinden. Mit diesem Aufbau konnten Spannungen von bis zu 3500 V zwischen den beiden Folien erreicht werden.

## 2.4 Transversalfeld- $\mu$ SR (TF $\mu$ SR)

In Transversalfeld- $\mu$ SR-Experimenten wird die Präzession des Myons im lokalen Magnetfeld mit für die unterschiedlichen Myonspezies charakteristischen Präzessionsfrequenzen untersucht.  $\mu$ SR steht in diesem Fall für Myon-Spin-Rotation. Im Zeithistogramm sind alle in der Probe vorhandenen Präzessionssignale überlagert. Es ergibt sich hierfür die folgende Beschreibung

$$N(t) = U + N_0 e^{-t/\tau_\mu} \left[ 1 + \sum_i a_i \cdot e^{-\lambda_i t} \cdot \cos(\omega_i t + \phi_i) \right]. \quad (2.4)$$

Dabei bezeichnet  $U$  den Untergrund, welcher durch unkorrelierte Ereignisse zustande kommt und zeitunabhängig ist. Die unterschiedlichen Präzessionssignale (der verschiedenen Myonspezies) unterscheiden sich in der Frequenz  $\omega_i$ , der Phasenlage  $\phi_i$ , der Dämpfung  $\lambda_i$  und der Asymmetrie  $a_i$ . Die Asymmetrie  $a_i$  hängt dabei von der Bildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies sowie von den experimentellen Gegebenheiten (Detektorgeometrie, Probengeometrie und Orientierung usw.) ab. Die Summation über  $i$  schließt die Präzessionssignale aller möglichen Übergänge innerhalb der Energieniveauschemata der diversen paramagnetischen Spezies sowie das Signal der diamagnetischen Spezies ein. Das um die Lebensdauer und den Untergrund korrigierte sowie auf  $N_0$  normierte Histo-

gramm ist in Abbildung 2.5 für eine Siliziumprobe dargestellt. Mittels Fouriertransformation lassen sich anhand der Präzessionssignale sowohl die einzelnen Spezies als auch die Übergänge innerhalb der paramagnetischen Spezies trennen. Das Fourierspektrum des Abbildung 2.5 zugrundeliegenden Histogramms ist in Abbildung 2.6 zu sehen. Die einzelnen Präzessionssignale können den unterschiedlichen Myonspezies zugeordnet werden und sind in Abbildung 2.6 entsprechend vermerkt. Auf die Zuordnung der Präzessionssignale zu den einzelnen Spezies wird in Kapitel 4 näher eingegangen.

Eine wichtige Voraussetzung für die TF $\mu$ SR-Methode ist, daß eine eindeutige Beziehung zwischen der Zeit nach der Implantation des Myons und der Phasenlage der Myonspinpräzession für alle Mitglieder eines Ensembles von mit einer bestimmten Frequenz präzessierenden Myonen vorhanden ist, und zwar über Zeiten, welche groß gegen die Präzessionsperioden sind. Dies wird als Phasenkohärenz bezeichnet.

Die Phasenkohärenz kann auf verschiedene Weisen gestört werden. Zum Beispiel dadurch, daß eine bestimmte Myonspezies nicht sofort nach der Myonimplantation gebildet wird, sondern mit einer bestimmten Übergangsrate in einem stochastischen Prozeß aus einer Vorläuferspezies hervorgeht. Die Spinpräzession mit den für die gebildeten Spezies charakteristischen Frequenzen wird somit für verschiedene Mitglieder des betrachteten Myonspinensembles zu unterschiedlichen Zeiten, deren Verteilung durch eine für den jeweiligen Prozeß bestimmte Wahrscheinlichkeitsfunktion gegeben ist, gestartet. Zu einer gegebenen Zeit ergibt sich bereits hierdurch eine Verteilung für die Phasenlage der Spinpräzession, welche umso breiter wird, je kleiner die Übergangsrate im Verhältnis zu den relevanten Präzessionsfrequenzen ist. Hinzu kommt meist noch ein entsprechender Effekt infolge der unterschiedlichen Präzessionsdauern im Vorläuferzustand. Hier sind dann die Präzessionsfrequenzen im Vorläuferzustand entscheidend. Bei sehr langsamen Übergängen, d. h. sehr kleinen Verhältnissen von Übergangsrate zu Spinpräzessionsfrequenz (im Vorläufer- oder Endzustand), kommt es zu einem völligen oder fast völligen Verlust der Phasenkohärenz der Präzessionssignale der verspätet gebildeten Spezies. Diese Spezies ist dann in TF $\mu$ SR-Experimenten nicht beobachtbar, selbst wenn ein beträchtlicher Anteil der implantierten Myonen diese Spezies innerhalb der mittleren Myonlebensdauer bilden sollte. Gleichzeitig kann es sein, daß auch die Vorläuferspezies in TF $\mu$ SR-Experimenten unbeobachtbar ist, und zwar dann, wenn die Übergangsrate groß gegen deren charakteristische Präzessionsfrequenzen ist. In diesem Fall bleibt der mit dieser Spezies verbundene Anteil der Spinpolarisation der implantierten Myonen in TF $\mu$ SR-Experimenten unbeobachtbar, d. h. nicht alle implantierten Myonen tragen zu einem Präzessionssignal bei. Der fehlende unbeobachtbare Anteil wird als „missing fraction“ bezeichnet. Zum teilweisen Verlust der Phasenkohärenz sowie zu einer mehr oder weniger starken Dämpfung (Relaxation) der Präzessionssignale können auch zeitliche Fluktuationen des auf den Myonspin einer bestimmten Myonspezies wirkenden lokalen Magnetfelds führen. Diese zeitlichen Fluktuationen können z. B. durch Diffusion der betreffenden Myonspezies zwischen Plätzen mit unterschiedlichen magnetischen Umgebungen hervorgerufen werden oder im Fall von Myonium durch Streuprozesse von Elektronen (oder Löchern) an Myonium, wobei der Spinzustand des Myoniumelektrons geändert wird, sogenannte Spinaustauschprozesse. Weitere Prozesse, welche zur Dämpfung von Präzessionssignalen führen können, sind zyklische Reaktionen zwischen verschiedenen Myonspezies. Die Größe der Relaxationsraten wird jeweils durch die Amplitude der fluktuierenden magnetischen Wechselwirkung sowie

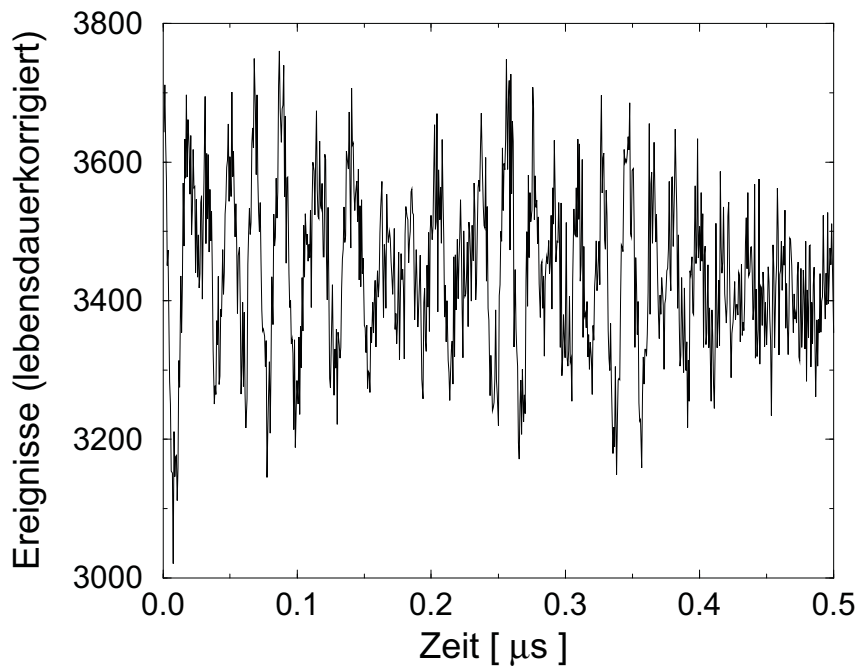


Abbildung 2.5: Lebensdauer- und Untergrund-korrigiertes  $TF\mu$ SR-Histogramm aufgenommen an einer intrinsischen einkristallinen Silizium-Probe (42772/02) bei einer Temperatur von 5 K in einem äußeren Magnetfeld von 4 mT, mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ .

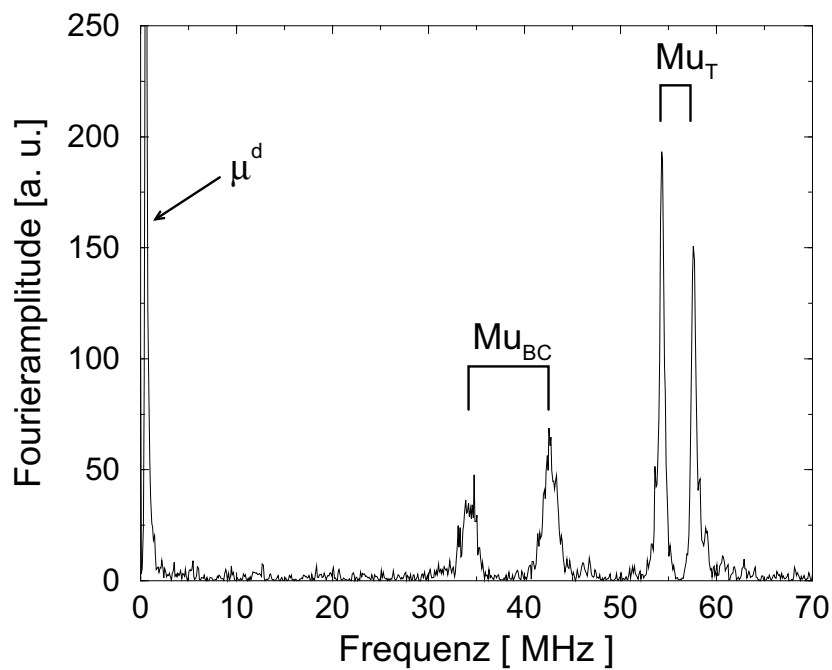


Abbildung 2.6: Fourierspektrum des Abbildung 2.5 zugrundeliegenden Histogramms. Die auftretenden Präzessionsfrequenzen sind den verschiedenen Myonspezies zugeordnet.

der Fluktuationsrate bestimmt.

Die TF $\mu$ SR ist die traditionell verwendete Methode zur Untersuchung und Identifikation der verschiedenen Myonspezies (BREWER 1973). Die Auswertung der Daten ist dann besonders durchsichtig, wenn keine dynamischen Prozesse und somit keine Probleme durch Verluste der Phasenkohärenz auftreten. Die aus einer Anpassung der Gleichung (2.4) an die Meßdaten erhaltenen Asymmetrien spiegeln dann direkt die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies wider. Weiterhin enthalten die Präzessionsfrequenzen im Falle von paramagnetischen Myonspezies Informationen über deren Hyperfeinwechselwirkung. Weitere Informationen über die Natur der verschiedenen Myonspezies stecken in den Relaxationsraten.

Zur quantitativen Auswertung der beobachteten Asymmetrien und Präzessionsfrequenzen müssen für die verschiedenen bereits charakterisierten Myonspezies die Präzessionsfrequenzen und bei gegebenem Anteil der Spezies die Amplituden der zugehörigen Präzessions-signale bei unterschiedlicher Stärke des von außen angelegten Magnetfelds für die jeweilige Probenorientierung aus den bekannten Hyperfeinparametern etc. berechnet werden. Für noch nicht charakterisierte Spezies benötigt man derartige Rechnungen, um aus Anpassungen der gemessenen Werte auf die entsprechenden Werte, z. B. die Hyperfeinparameter, zu schließen. Solche Berechnungen werden in Kapitel 4 beschrieben.

Treten in den Proben dynamische Prozesse auf, wird die Auswertung schwieriger. Die beobachteten Asymmetrien müssen dann nicht unbedingt Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Spezies widerspiegeln. Es ist auch meist nicht ohne weiteres möglich, die beobachteten Dämpfungen eindeutig auf einen bestimmten dynamischen Prozesse, wie z. B. Spinaustausch oder Übergänge zwischen verschiedenen Spezies, zurückzuführen, da diese unterschiedlichen Prozesse sehr oft zu ähnlichen Änderungen in den TF $\mu$ SR-Signalen führen.

### 2.4.1 Nullfeld- $\mu$ SR (ZF $\mu$ SR)

Nullfeld- $\mu$ SR (ZF $\mu$ SR)-Messungen werden in Abwesenheit eines von außen angelegten Magnetfelds durchgeführt.  $\mu$ SR ist hier als Myon-Spin-Rotation bzw. -Relaxation zu interpretieren.

Analog zur TF $\mu$ SR werden bei der ZF $\mu$ SR die charakteristischen Präzessionssignale der verschiedenen Spezies beobachtet. Daher wird diese Methode im Rahmen der TF $\mu$ SR-Methode besprochen. Im Nullfeld sind die Präzessionsfrequenzen durch innere Magnetfelder bestimmt. Für Myonium z. B. treten Oszillationen aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung auf. Von den in Halbleitern auftretenden Myonspezies lassen sich im Nullfeld ausschließlich paramagnetische Spezies beobachten. Dies ist uns jedoch nur möglich, sofern die Präzessionsfrequenzen nicht höher als ca. 300 MHz liegen. Diese Begrenzung ergibt sich aus der in Standardexperimenten erreichbaren Zeitauflösung. In Kapitel 4.2 wird auf die Berechnung der in der ZF $\mu$ SR beobachtbaren Präzessionsfrequenzen eingegangen.

In Halbleitern wird die ZF $\mu$ SR zur Bestimmung der Hyperfeinparameter von paramagnetischen Spezies angewandt.

## 2.4.2 Normierung durch Messungen an Aluminium

Um aus den experimentell bestimmten Asymmetrien die Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Spezies berechnen zu können, muß die gemessene Asymmetrie auf die Strahlasymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  bezogen werden, siehe Kapitel 4. Die Größe  $a_{\text{Strahl}}$  definiert die maximal meßbare Asymmetrie der Präzessionssignale, welche auf Eins festgelegt ist und 100 % Myonspinpolarisation entspricht.

Für Aluminium ist bekannt, daß sich lediglich die Spezies  $\mu^d$  bildet und dies zu 100 %. Des weiteren unterliegt die Spezies nahezu keiner Dämpfung, was eine gut beobachtbare Oszillation zur Folge hat. Die Stoppdichte der Myonen in Aluminium ist mit derjenigen in Silizium vergleichbar. Aluminium ist daher zur Bestimmung der maximal meßbaren Asymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  gut geeignet. In Abbildung 2.4, Seite 15, ist ein typisches an Aluminium aufgenommenes Histogramm dargestellt, hierbei ist lediglich die Präzessionsfrequenz der Spezies  $\mu^d$  beobachtbar.

Die zur Bestimmung von  $a_{\text{Strahl}}$  herangezogene Probe besteht aus hochreinem Aluminium und besitzt die gleichen Abmessungen wie die im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten Siliziumproben. TF $\mu$ SR-Untersuchungen an dieser Aluminiumprobe liefern die Myonzerfallsasymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  des Myonstrahls, welche von der Strahlgeometrie des Myonstrahls abhängig ist. Daher wird diese nach jedem Versuchsaufbau erneut gemessen. Die Strahlasymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  erhält man durch Anpassung von Gleichung (2.4), mit lediglich einer Präzessionsfrequenz, an das gemessene Histogramm gemäß Abschnitt 2.6. Die theoretisch maximal mögliche Asymmetrie liegt bei 1/3, siehe Gleichung (2.3). Für das Experimentierareal  $\mu$ E4 am PSI wurde die maximal meßbare Asymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  zu 0,22 bestimmt.

## 2.5 „Longitudinal Field Quenching“- $\mu$ SR (LFQ)

Die „Longitudinal Field Quenching“- $\mu$ SR (LFQ) gehört zu den Longitudinalfeld-Methoden. Die Methode wurde erstmals 1957 von FERRELL und CHAOS (1957) vorgeschlagen, um den im Nullfeld aufgrund der Hyperfeinkopplung zwischen Myon und Elektron beobachteten scheinbaren Polarisationsverlust in hohen Magnetfeldern zu „quenchen“ (engl.: to quench = dämpfen, löschen). Der zugrunde liegende Mechanismus wird weiter hinten im Detail besprochen. Noch im selben Jahr des Vorschlags dieser Methode wurden die ersten Experimente mittels dieser Methode sowohl von OREAR und Mitarbeitern (1957) als auch von SENS und Mitarbeitern (1957) durchgeführt. Diese Untersuchungen an Emulsionen bestätigten, daß in Magnetfeldern von einigen 100 mT ein geringerer Polarisationsverlust im Vergleich zum Nullfeld beobachtet wird. Bereits 1960 wurden von FEHER und Mitarbeitern (1960) erste Messungen an Silizium durchgeführt. Im Rahmen von TF $\mu$ SR-Untersuchungen wurde an einer Siliziumprobe auch der Polarisationsgewinn in einem longitudinalen Magnetfeld beobachtet. Die ersten systematischen Untersuchungen an Silizium wurden von EISENSTEIN und Mitarbeitern (1966) durchgeführt. Sie beobachteten einen ungewöhnlichen Verlauf der gemessenen Myonspinpolarisation in Abhängigkeit der Stärke des angelegten Magnetfelds. Bereits ab ca. 10 mT wurde in einigen Siliziumproben

ein deutlicher Polarisationsgewinn beobachtet, wohingegen dieser laut den damals vorliegenden Berechnungen erst ab einigen 100 mT einsetzen sollte. Dieses Verhalten blieb bis zum Jahre 1973 unverstanden, als die für diesen Verlauf verantwortliche Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  (BREWER 1973) identifiziert wurde, welche bereits bei Magnetfeldern von einigen mT einen deutlichen Polarisationsgewinn verursacht. Die LFQ-Methode wurde früher häufig angewandt, wohingegen sie heute eher selten Verwendung findet.

Das Zeithistogramm der im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten zeitdifferentiellen Version der LFQ (ODERMATT 1988) läßt sich gemäß

$$N_i(t) = U_i + N_{0,i} e^{-t/\tau_\mu} (1 \pm a_i e^{-\lambda t}) ; \quad i = \text{FW}, \text{BW} \quad (2.5)$$

beschreiben.  $U$  beschreibt den zeitunabhängigen Untergrund unkorrelierter Ereignisse. Der Index FW, BW bezieht sich auf den Vorwärts- bzw. Rückwärts-Zähler.  $a_i$  bezeichnet die Asymmetrien und  $\lambda$  die Dämpfung. Obwohl die Zeitinformation in den bisherigen und auch in den im Rahmen der vorliegenden Arbeit dargestellten LFQ-Untersuchungen nicht verwendet wird, erweist sich eine zeitdifferentielle Datenerfassung als unerlässlich, um eine notwendige Untergrundkorrektur durchführen zu können. Die untergrundkorrigierten Histogramme sind gegeben durch

$$n_i(t) = N_i(t) - U_i. \quad (2.6)$$

Aus diesen Daten wird die zeitintegrale Asymmetrie zwischen Vorwärts- und Rückwärts-Zähler (FW/BW) mittels

$$a_{\text{LFQ}}(B_a) = \frac{\int [n_{\text{FW}}(t) - n_{\text{BW}}(t)] dt}{\int [n_{\text{FW}}(t) + n_{\text{BW}}(t)] dt} \quad (2.7)$$

berechnet. Diese hängt im allgemeinen von der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds ab und liefert Informationen über die Magnetfeldabhängigkeit der Myonspinpolarisation. Die Meßgröße  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  läßt sich mit Hilfe von Normierungsmessungen an Aluminium direkt in die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  umrechnen, siehe dazu Abschnitt 2.5.1. Das äußere Magnetfeld ist mit dem von uns verwendeten Spektrometer zwischen 0 und 0,5 T variierbar. Ein typisches Resultat der bei einem Magnetfelddurchlauf gemessenen Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  an einer Siliziumprobe ist in Abbildung 2.7 dargestellt.

Der Effekt des „Quenching“, d. h. des scheinbaren Polarisationsgewinns im statischen longitudinalen Magnetfeld läßt sich wie folgt verstehen. Aufgrund der Hyperfeinkopplung zwischen Myon- und Elektronspin in den paramagnetischen Myonspezies wird der Myonspin (je nach Spinzustand des Elektrons) aus seiner Ausgangsrichtung herausgedreht. Es kommt zu Oszillationen der Myonspinpolarisation, den Hyperfeinoszillationen. Über die Zeit gemittelt ist daher die Projektion der Myonspinpolarisation auf die Richtung der



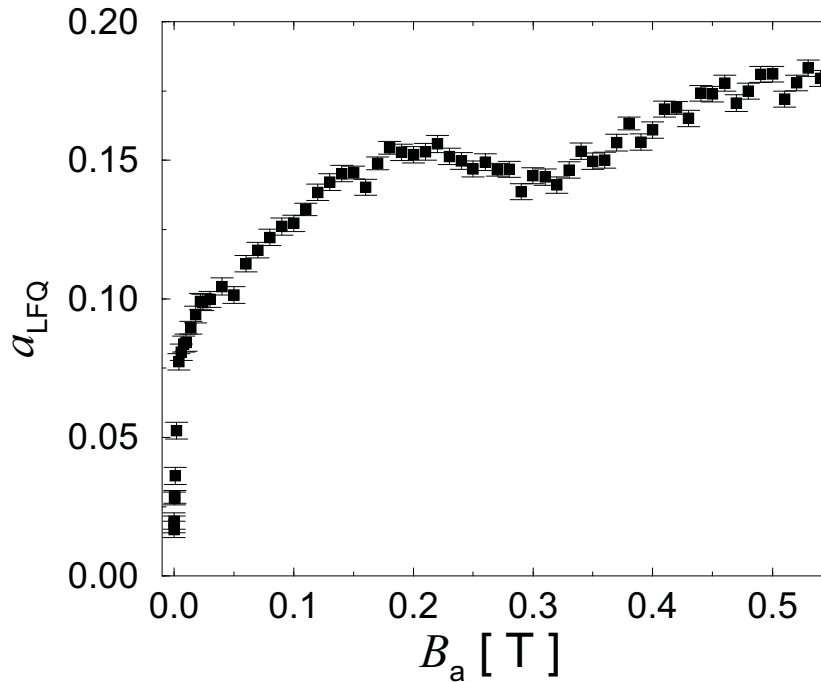


Abbildung 2.7: Zeitintegrale Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$ , aufgenommen an der phosphordotierten Siliziumprobe Si:P bei  $T = 10 \text{ K}$  mit  $B_a \parallel \langle 111 \rangle$ .

anfänglichen Spinorientierung (gleichzeitig Strahlrichtung und Beobachtungsrichtung) gegenüber der Ausgangsspinnpolarisation reduziert. Wie groß die verbleibende mittlere Myonspinnpolarisation bei verschwindendem Magnetfeld ist, hängt von der Symmetrie der Hyperfeinwechselwirkung der Myonspezies (sphärische Symmetrie, Axialsymmetrie etc., siehe Kapitel 5), sowie von der Spinpolarisation der Elektronen zum Zeitpunkt der Myoniumbildung ab. Üblicherweise, so auch in der vorliegenden Arbeit, setzt man ein unpolarisiertes Elektronensystem voraus. Für die in der vorliegenden Arbeit diskutierten Anwendungen ist diese Annahme sehr gut erfüllt.

Legt man nun ein statisches Magnetfeld parallel zur Richtung der anfänglichen Myonspinnpolarisation an, so ist dieses Feld bestrebt, den Myonspin in der Ausgangs- und Magnetfeldrichtung festzuhalten. Diesem Bestreben entgegengerichtet ist allerdings die Hyperfeinwechselwirkung. Erst bei Magnetfeldern, die stark genug sind, so daß die Zeeman-Energie die Hyperfeinwechselwirkung deutlich übersteigt, bleibt die Myonspinnpolarisation tatsächlich in der Magnetfeldrichtung (= Anfangs- und Beobachtungsrichtung) fixiert. Man beobachtet dann die maximale LFQ-Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$ , welche der vollen Myonspinnpolarisation zum Zeitpunkt der Implantation entspricht, vorausgesetzt, es finden keine Spinrelaxationsprozesse statt. Bei kleineren Magnetfeldern findet eine mit wachsendem Magnetfeld zunehmende Ausrichtung des Myonspins entlang der Magnetfeldrichtung statt, welche sich in einer Zunahme der Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  bemerkbar macht, siehe Abbildung 2.7.

In der Literatur wird diese Methode öfter auch als „longitudinale Repolarisation“ bezeich-

net. Diese Bezeichnung suggeriert allerdings, daß die Myonspinpolarisation bei kleinen Magnetfeldern verloren geht und bei höheren Feldern wiedergewonnen wird, und ist daher etwas irreführend. Die Myonspinpolarisation ist selbst bei kleinen Magnetfeldern nie verringert, sondern ist durch die Hyperfeinwechselwirkung nur nicht vollständig in Beobachtungsrichtung ausgerichtet. Jede Myonspezies besitzt einen charakteristischen Verlauf der zeitintegralen Myonspinpolarisation über der Stärke des angelegten Magnetfelds, siehe Kapitel 5. Bei einer anisotropen Spezies ist dieser Verlauf noch von der kristallographischen Orientierung des Magnetfelds abhängig. Die zeitintegrale Myonspinpolarisation in Abhängigkeit der Stärke des angelegten Magnetfelds wird als „Quenching“-Kurve bezeichnet.

Bei der LFQ werden alle Spezies simultan beobachtet, und im Gegensatz zur TF $\mu$ SR ist keine Phasenkohärenz des Myonspinsensembles notwendig. Falls dynamische Prozesse auftreten, stellt dies einen enormen Vorteil im Vergleich zur TF $\mu$ SR dar. Die LFQ ist daher insbesondere geeignet, dynamische Prozesse zu beobachten und zu identifizieren. Aufgrund der Notwendigkeit der Bestimmung der magnetfeldabhängigen Asymmetrie für viele verschiedene Magnetfeldwerte ist die LFQ-Methode etwas zeitaufwendig. Von entscheidender Bedeutung ist die Strahlstabilität während des Magnetfelddurchlaufs, damit gewährleistet ist, daß die einzelnen bei verschiedenen Magnetfeldern gewonnenen Meßdaten unter identischen Bedingungen aufgenommen werden. Im Gegensatz zur TF $\mu$ SR kann man die Beiträge der einzelnen Spezies nicht direkt voneinander trennen. Dies ist erst durch Anpassung der Quenching-Kurven an die Meßdaten möglich. Die Berechnung der Quenching-Kurven unter Einbeziehung verschiedener dynamischer Prozesse wird in Kapitel 5 detailliert geschildert.

### 2.5.1 Normierung durch Messungen an Aluminium

Die in der LFQ zu bestimmende Größe ist die zeitgemittelte Myonspinpolarisation  $P_\mu$ . Diese läßt sich aus der gemessenen Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$  nach

$$P_\mu = \frac{a_{\text{LFQ}} - a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)}{a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1) - a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)} \quad (2.8)$$

berechnen (SCHEUERMANN 1995). Dabei bezeichnet  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$  die Asymmetrie für vollständige Myonspinpolarisation und  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)$  die Asymmetrie für verschwindende Myonspinpolarisation. Um nun die im Experiment bestimmte Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$  in die zeitgemittelte Myonspinpolarisation  $P_\mu$  umrechnen zu können, müssen die Asymmetrien für vollständige bzw. verschwindende Myonspinpolarisation bekannt sein. Diese Größen werden an einer hochreinen Aluminiumprobe bestimmt, welche keinerlei Depolarisation aufweist. Die an Aluminium gemessene Asymmetrie ist somit  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$ .

Die Asymmetrie für vollständige Polarisation  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$  kann durch eventuell vorhandene Fokussierungseffekte des Helmholtzspulenpaares, welche das longitudinale Magnetfeld erzeugen, in Abhängigkeit der Stärke des angelegten Magnetfelds verändert werden. Daher wird die Asymmetrie für vollständige Polarisation  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$  in Abhängigkeit

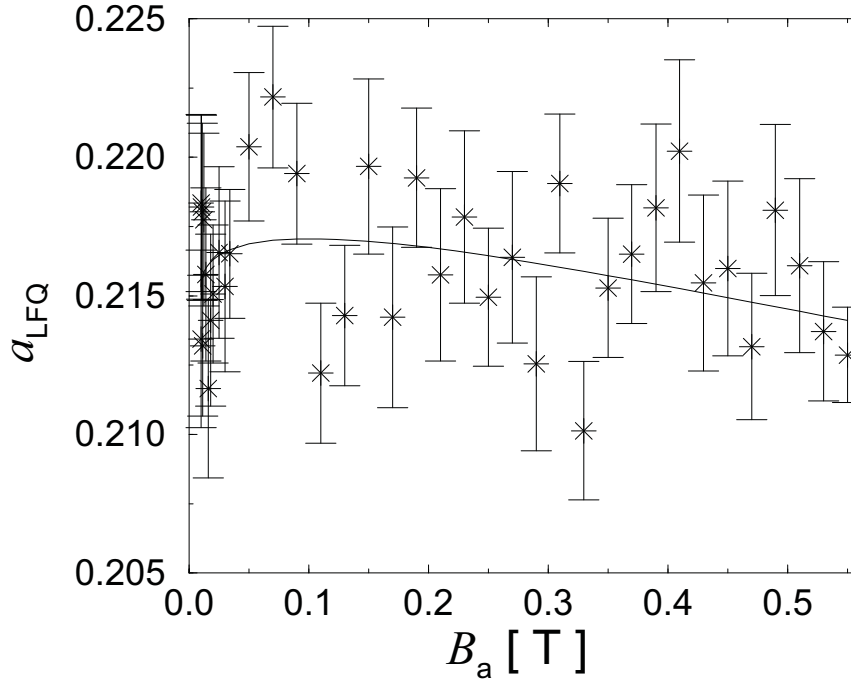


Abbildung 2.8: LFQ-Normierungsmessungen an einer hochreinen Aluminiumprobe bei Raumtemperatur. Die durchgezogene Linie stellt eine Interpolation der Meßdaten dar.

der Stärke des äußeren angelegten Magnetfelds bestimmt. In Abbildung 2.8 ist ein Beispiel der so bestimmten maximal möglichen Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$  in Abhängigkeit des Magnetfelds dargestellt.

Die Größe  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)$ , welche die gemessene Asymmetrie bei vollständiger Depolarisation beschreibt, kann nur indirekt anhand von TF $\mu$ SR-Untersuchungen bestimmt werden. Die bei TF $\mu$ SR-Untersuchungen in FW- bzw. BW-Zähler gemessenen Histogramme werden beschrieben durch

$$N_{\text{FW}}(t) = U_{\text{FW}} + N_{0,\text{FW}} e^{-t/\tau_\mu} (1 + a_{\text{FW}} \cos(\omega t + \phi_i)) \quad (2.9)$$

$$N_{\text{BW}}(t) = U_{\text{BW}} + N_{0,\text{BW}} e^{-t/\tau_\mu} (1 - a_{\text{BW}} \cos(\omega t + \phi_i)), \quad (2.10)$$

vergleiche Gleichung (2.4).  $a_{\text{FW}}$  sowie  $a_{\text{BW}}$  entsprechen wiederum der Asymmetrie für vollständige Polarisation. Um aus dieser Untersuchung die Größe  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)$  bestimmen zu können, wird die Asymmetrie in FW- und BW-Zähler rechnerisch auf Null gesetzt, d.h.  $a_{\text{FW}} = a_{\text{BW}} = 0$ . Dies entspricht dem Fall der vollständigen Depolarisation, welche der Unbeobachtbarkeit jeglicher Präzession entspricht.  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)$  ergibt sich gemäß Gleichung (2.7) somit zu

$$a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0) = \frac{N_{0,\text{FW}} - N_{0,\text{BW}}}{N_{0,\text{FW}} + N_{0,\text{BW}}}. \quad (2.11)$$

Damit sind die zur Umrechnung der beobachteten Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$  in die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  notwendigen Größen  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 1)$  sowie  $a_{\text{LFQ}}(P_\mu = 0)$  bestimmt.

## 2.6 Auswertung der Meßdaten

Die Auswertung der Meßdaten geschieht mittels Anpassung einer entsprechenden Theoriefunktion nach der Methode der gewichteten kleinsten Fehlerquadrate. Grundlage aller im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten Anpassungsprogramme sind die Minimierungsroutinen des Programmpakets MINUIT (JAMES 1992).

Die Anpassung erfolgt durch Minimierung der Funktion

$$\chi^2 = \frac{1}{n} \sum_n \frac{(f_{\text{exp}}(x_n) - f_{\text{theo}}(x_n))^2}{\sigma_n^2}, \quad (2.12)$$

wobei  $f_{\text{exp}}(x_n)$  die gemessenen Werte sind und  $n$  der Index der einzelnen Meßwerte ist.  $f_{\text{theo}}(x_n)$  stellt die an die Meßdaten anzupassende Theoriefunktion an den Stellen  $x_n$  dar. Dabei kann  $x_n$  die Zeit oder das von außen angelegte Magnetfeld repräsentieren.  $\sigma_n$  bezeichnet die Standardabweichung der Meßwerte.

Bei der TF $\mu$ SR bzw. ZF $\mu$ SR stellt die Größe  $x_n$  die Lebensdauer der einzelnen Myonen dar. Als Resultat der Messung ergeben sich die Histogramme  $H(t)$ , welche in 16000 Kanäle aufgeteilt sind. Die Auswertung der Messung erfolgt durch Anpassung der Theoriefunktion  $f_{\text{theo}}$ , d. h. Gleichung (2.4), Seite 18, an die Meßdaten. Daraus ergeben sich die physikalischen Parameter. Dies sind die Asymmetrien, Dämpfungen sowie Frequenzen der beobachteten Präzessionssignale. Für die Auswertung der TF $\mu$ SR-Histogramme existiert ein von REID (1993) geschriebenes Auswerteprogramm MINFIT, welches auf dem Programmpaket MINUIT basiert.

Bei der LFQ ist der Auswerteprozess zweistufig. Zuerst werden die zeitdifferentiellen Histogramme, welche bei unterschiedlichen von außen angelegten Magnetfeldern gewonnen wurden, zur Untergrundbestimmung gemäß Gleichung (2.5) einzeln angepaßt. Bei dieser Anpassung spiegelt die Größe  $x_n$ , wie bei der TF- und ZF $\mu$ SR, die Zeitintervalle wieder. Danach wird aus den untergrundkorrigierten Histogrammen die zeitintegrale, vom äußeren angelegten Magnetfeld abhängige Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  gemäß Gleichung (2.7) berechnet. Hierbei ist die Größe  $x_n$  dann durch die Stärke des von außen angelegten Magnetfelds gegeben. Die Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  wird ihrerseits mittels Gleichung (2.8) in die Myonspinpolarisation  $P_\mu(B_a)$  umgerechnet. Nun wird an die aus dem Experiment

bestimmte Myonspinpolarisation  $P_\mu(B_a)$  eine theoretische Quenching-Kurve, welche die zeitintegrale Myonspinpolarisation in Abhängigkeit des Magnetfelds beschreibt, angepaßt. Die Berechnung der Quenching-Kurven wird in Kapitel 5 beschrieben. Erst die Anpassung der Quenching-Kurve an die experimentell bestimmte magnetfeldabhängige zeitintegrale Myonspinpolarisation liefert die physikalischen Parameter. Dies sind die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies, die Übergangsraten zwischen den einzelnen Spezies sowie die Spinaustauschraten der paramagnetischen Spezies.

# Kapitel 3

## Myonen in Silizium

In Metallen wird die positive Ladung des Myons durch die Leitungselektronen abgeschirmt, ein gebundener Zustand mit einem Elektron existiert allerdings nicht. Im Gegensatz dazu kann das Myon in Halbleitern und Isolatoren einen gebundenen Zustand mit einem Elektron ( $e^-$ ) ausbilden. Dieser elektrisch neutrale gebundene Zustand ( $\mu^+e^-$ ) wird als Myonium bezeichnet und ist dem Wasserstoffatom ähnlich. Auch im Vakuum kann ein gebundener Zustand aus Myon und Elektron gebildet werden, welcher als Vakuummyonium bezeichnet wird.

Als paramagnetisch werden Spezies bezeichnet, welche wie das oben beschriebene Myonium, ein ungepaartes Elektron besitzen, dessen Spin über die Hyperfeinwechselwirkung an den Spin des Myons gekoppelt ist. Diamagnetische Spezies besitzen kein ungepaartes Elektron. In Silizium (wie auch in Germanium und Diamant) konnten drei unterschiedliche Myonspezies mittels  $\mu$ SR identifiziert werden (PATTERSON 1988, SCHENCK 1985). Es existieren sowohl paramagnetische als auch diamagnetische Spezies. Zu den paramagnetischen Spezies zählt das normale Myonium  $\text{Mu}_T$  sowie das anomale Myonium  $\text{Mu}_{BC}$ . Diamagnetische Spezies sind anhand von  $\mu$ SR-Untersuchungen nicht voneinander unterscheidbar und werden somit alle mit einem einzigen Symbol  $\mu^d$  bezeichnet. In diesem Kapitel sollen die wesentlichen Eigenschaften dieser Myonspezies in Silizium beschrieben werden.

Neben den in der Literatur bekannten Myonspezies wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit erstmals zwei weitere bisher unbekannte Myonspezies in Silizium identifiziert. Es handelt sich dabei um paramagnetische Myonspezies mit anisotroper Hyperfeinwechselwirkung. Diese beiden Spezies sollen mit  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_V$  bezeichnet werden. Die grundlegenden Eigenschaften dieser Spezies sollen der Vollständigkeit halber bereits hier beschrieben werden, obwohl dies einen Vorgriff auf die in Kapitel 7 bis 9 beschriebenen experimentellen Ergebnisse und deren Interpretation darstellt.

Sofern man voraussetzt, daß die betrachtete Myonspezies nicht mit ihrer Umgebung wechselwirkt (z.B. mit benachbarten Kernspins über die nukleare Hyperfeinwechselwirkung), besitzt der Spinanteil des Hamilton-Operators der verschiedenen hier betrachteten Myonspezies unter Berücksichtigung der Hyperfeinwechselwirkung zwischen Myon und Elektron

ganz allgemein die Form

$$\mathcal{H} = \hbar \vec{S}_\mu \mathbf{A} \vec{S}_e - \hbar \gamma_\mu \vec{S}_\mu \vec{B}_a + \hbar \gamma_e \vec{S}_e \vec{B}_a \quad (3.1)$$

mit

- $\vec{S}_\mu$  : Myonspinoperator,
- $\vec{S}_e$  : Elektronspinoperator,
- $\vec{B}_a$  : äußeres angelegtes Magnetfeld,
- $\mathbf{A}$  : Hyperfeinwechselwirkungstensor,
- $\gamma_\mu$  : gyromagnetisches Verhältnis des Myons,
- $\gamma_e$  : gyromagnetisches Verhältnis des Elektrons.

Das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons ist gegeben zu  $\gamma_e = 1760,813 \cdot 10^8 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Das gyromagnetische Verhältnis des Myons ist in Tabelle 2.1, Seite 12, angegeben. Bei den gyromagnetischen Verhältnissen ist jeweils der Betrag des Wertes gemeint.

Die nukleare Hyperfeinwechselwirkung spielt im Rahmen der vorliegenden Arbeit keine Rolle, da die natürliche Isotopenzusammensetzung von Silizium durch 92,28 %  $^{28}\text{Si}$ , 3,05 %  $^{30}\text{Si}$  und 4,67 %  $^{29}\text{Si}$  gegeben ist und nur  $^{29}\text{Si}$  einen Kernspin ( $I=1/2$ ) besitzt (LANDOLT-BÖRNSTEIN 1976).

## 3.1 Die Spezies $\text{Mu}_T$ , $\text{Mu}_{BC}$ und $\mu^d$

Die Myonspezies  $\mu^d$  und  $\text{Mu}_T$  wurden in Silizium unmittelbar nach der Entdeckung der Nichterhaltung der Parität in den ersten  $\mu\text{SR}$ -Experimenten vermutet und bald darauf identifiziert. Die Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  wurde in Silizium jedoch erst einige Jahre später entdeckt.

### 3.1.1 Die paramagnetischen Spezies $\text{Mu}_T$ und $\text{Mu}_{BC}$

#### Normales Myonium $\text{Mu}_T$

Die Existenz von Myonium wurde bereits im Jahre 1958 von SWANSON und Mitarbeitern (1958) vermutet und im Jahre 1960 von HUGHES und Mitarbeitern (1960) erstmals in Argon identifiziert. Das normale Myonium  $\text{Mu}_T$ , in der Literatur früher als  $\text{Mu}$  bezeichnet, wurde in Silizium ebenfalls im Jahre 1960 von FEHER und Mitarbeitern (1960) beobachtet. Es besitzt eine isotrope Hyperfeinwechselwirkung  $\mathbf{A} = A \cdot \mathbf{I}$ , wobei  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix bezeichnet. In Silizium ist  $A = 2006,3 \text{ MHz}$ .  $\text{Mu}_T$  ist vergleichbar mit Vakuummyonium, siehe dazu Tabelle 3.1.

	$A_x$ [MHz]	$A_y$ [MHz]	$A_z$ [MHz]
Vakuum	4463,3	4463,3	4463,3
$Mu_T$	2006,3	2006,3	2006,3
$Mu_{BC}$	-92,6	-92,6	-16,8
$Mu_X$	-82,6	-82,6	5,3
$Mu_V$	-12,0	-12,0	27,9
$H_{BC}(AA9)$	-31,4	-31,4	-6,2
$H_{BC}(\text{skaliert})$	-98,7	-98,7	-19,5
VH	-3,3	-4,6	8,5
VH (skaliert)	-10,4	-14,5	26,7

Tabelle 3.1: Für  $T \rightarrow 0$  extrapolierte Werte der Hyperfeinkopplungskonstanten der Myonspezies  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  in Silizium (SCHENCK 1985) sowie des Vakuummyoniums (PATERSON 1988). Des Weiteren sind die Hyperfeinparameter der im Rahmen der vorliegenden Arbeit identifizierten weiteren Myonspezies  $Mu_X$  und  $Mu_V$  angegeben. Zum Vergleich mit  $Mu_{BC}$  ist das dazu äquivalente Wasserstoffzentrum  $H_{BC}$  (GORELKINSKII 1987) aufgenommen, ebenso wie das zur Spezies  $Mu_V$  analoge Wasserstoffzentrum VH. Für die Wasserstoffzentren sind auch die auf die Verhältnisse für Myonen skalierten Werte der Hyperfeintensoren angegeben. Die Skalierung ergibt sich aus dem Verhältnis der magnetischen Momente von Myon und Proton. Die z-Achse kann bei Vakuummyonium und  $Mu_T$  beliebig orientiert sein. Für  $Mu_{BC}$ ,  $H_{BC}$  sowie  $Mu_X$  ist die z-Achse parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung ausgerichtet. Bei  $Mu_V$  verläuft die z-Achse parallel zur  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung und bei VH schließt diese mit der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung einen Winkel von 8 Grad ein.

Die Isotropie des Hyperfeintensors von normalem Myonium wird verständlich, wenn man annimmt, daß sich  $Mu_T$  auf hochsymmetrischen Tetraederplätzen (T) (siehe Abbildung 3.1) aufhält. Allerdings kann auch nicht ausgeschlossen werden, daß es sich bei  $Mu_T$  um eine Spezies handelt, welche eine sehr schnelle lokale Bewegung zwischen den verschiedenen einen Tetraederplatz umgebenden „anti-bond centre“ (AB) Plätzen (siehe Abbildung 3.1) ausführt, wodurch sich etwaige Anisotropien ausmitteln würden (COX 1986). Es ist bekannt, daß  $Mu_T$  sehr mobil ist und bis zu 20 K herab schnell im Kristall diffundieren kann (DÖRING 1984).  $Mu_T$  ist daher nicht chemisch im Kristall eingebunden.

### Anomales Myonium $Mu_{BC}$

Das anomale Myonium  $Mu_{BC}$ , in der Literatur früher als  $Mu^*$  bezeichnet, wurde im Jahre 1973 von BREWER und Mitarbeitern (1973) in Silizium entdeckt. Es besitzt eine anisotrope Hyperfeinwechselwirkung. Der Hyperfeintensor von  $Mu_{BC}$  ist axialsymmetrisch



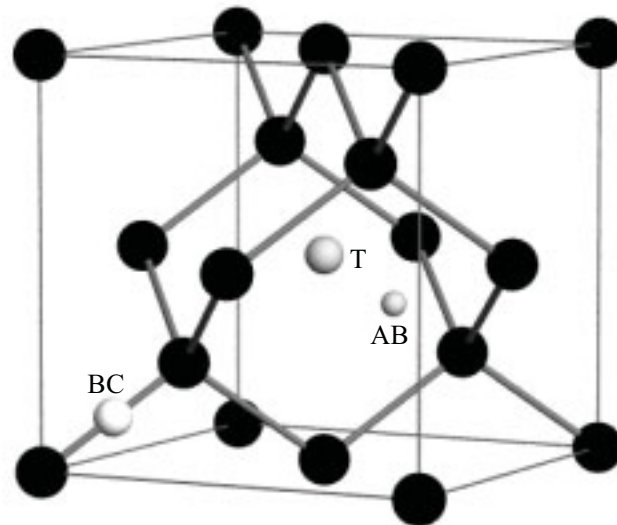


Abbildung 3.1: Silizium-Kristall mit  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$ . Die schwarzen Punkte beschreiben die Siliziumatome und die grauen Punkte die Myonen. Das in eine Si-Si-Bindung eingebundene Myon befindet sich auf einem „bond centre“-Platz (BC) und repräsentiert das anomale Myonium  $Mu_{BC}$ . Das ungebundene Myon befindet sich auf dem Tetraeder-Platz (T) und repräsentiert das normale Myonium  $Mu_T$ . Der „anti-bond centre“-Platz (AB) ist ebenfalls eingezeichnet.

bezüglich der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung. Er besitzt zwei unabhängige Eigenwerte  $A_x = A_y$  und  $A_z$ , ( $\hat{z} \parallel \langle 111 \rangle$ ). Die Hyperfeinparameter von  $Mu_{BC}$  sind um eine Größenordnung kleiner als die des normalen Myoniums  $Mu_T$ , siehe Tabelle 3.1.

Die Struktur dieser Spezies war lange Zeit unklar. Von SAHOO und Mitarbeitern (1985) wurde 1985 eine Lokalisation des Myons in einer Silizium-Leerstelle vorgeschlagen, wodurch heftige Diskussionen ausgelöst wurden (ESTREICHER 1986, SAHOO 1986). Mittlerweile ist, insbesondere als Ergebnis der Untersuchungen der  $^{29}\text{Si}$ -Hyperfeinstruktur der in  $\text{TF}\mu\text{SR}$  beobachteten Präzessionsfrequenzen, allgemein akzeptiert, daß  $Mu_{BC}$  auf einem „bond centre“-Platz (BC) (siehe Abbildung 3.1) zwischen zwei Siliziumatomen lokalisiert ist (COX 1986, KIEFL 1988). Die Bestimmung des Vorzeichens der Hyperfeinparameter von  $Mu_{BC}$  ist nur anhand aufwendiger Experimente möglich. Kiefl und Mitarbeiter konnten aus Untersuchungen der  $^{29}\text{Si}$ -Hyperfeinstruktur der Präzessionsfrequenzen von  $Mu_{BC}$  das Vorzeichen der Hyperfeinparameter bestimmen (KIEFL 1988). Es ist in Tabelle 3.1 entsprechend berücksichtigt. In der Spezies  $Mu_{BC}$  geht das Myon eine Dreizentrenbindung mit den beiden benachbarten Siliziumatomen ein und ist somit chemisch in den Kristall eingebunden. Es ist daher bei weitem nicht so mobil wie die Spezies  $Mu_T$ . Es ist allgemein akzeptiert, daß  $Mu_{BC}$  die stabilere Konfiguration von  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  darstellt (SCHEUERMANN 1997a, COX 1986, SYMONS 1984).

In Silizium existiert eine dem  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  äquivalente Wasserstoffspezies  $\text{H}_{\text{BC}}$ , welche im Jahre 1987 mittels EPR von GORELKINSKII und NEVINNYI (1987) bei  $T = 77$  K an protonenbestrahltem Silizium bei gleichzeitiger Beleuchtung der Proben identifiziert und als AA9-Zentrum bezeichnet wurde, also rund 14 Jahre nach der Entdeckung der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ . Die Hyperfeinparameter von  $\text{H}_{\text{BC}}$  (AA9-Zentrum) in Silizium sind zum Vergleich in Tabelle 3.1 eingetragen. Um die Hyperfeinparameter von Wasserstoff und Myonium vergleichen zu können, müssen diese mit dem Verhältnis der im Vakuum bestimmten Hyperfeinparameter der Wasserstoff- zu Myonspezies bzw. mit dem Verhältnis der magnetischen Momente von Proton zu Myon skaliert werden. Aus Tabelle 3.1 ist unzweifelhaft entnehmbar, daß die Hyperfeinparameter von  $\text{H}_{\text{BC}}$  nach Skalierung sehr gut mit denen von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  übereinstimmen, wobei die Vorzeichen unabhängig voneinander bekannt sind. Es handelt sich bei  $\text{H}_{\text{BC}}$  (AA9) somit um eine zu  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  analoge Spezies. Damit ist gezeigt, daß die Myon- und Wasserstoffspezies chemisch identisch sind und das Myon in Silizium tatsächlich als Wasserstoffisotop betrachtet werden kann.

### 3.1.2 Die diamagnetischen Spezies $\mu^d$

Diamagnetische Myonspezies besitzen kein ungepaartes Elektron. In diesem Fall ist die Wechselwirkung, welche das magnetische Moment des Myons erfährt, vollständig durch diejenige mit dem Magnetfeld dominiert. Wechselwirkungen mit induzierten magnetischen Momenten sind viel zu klein, um zu einer in  $\mu\text{SR}$ -Experimenten detektierbaren Verschiebung der Spinpräzessionsfrequenz (chemische Verschiebung) zu führen. Die verschiedenen diamagnetischen Myonspezies können also nicht anhand ihrer Spinpräzessionsfrequenzen unterschieden werden. Deren Signale lassen sich somit nicht trennen, von Einzelfällen abgesehen, in denen eine Trennung anhand hinreichend unterschiedlicher Relaxationsraten im Prinzip vorstellbar ist. Die verschiedenen in den Proben vorhandenen diamagnetischen Myonspezies werden daher zusammengefaßt und pauschal mit  $\mu^d$  bezeichnet. Hinter der Bezeichnung  $\mu^d$  können sich also ganz unterschiedliche Myonspezies verbergen. Im Prinzip, wenngleich wenig wahrscheinlich, könnte es sich um ein ungebundenes positives Myon handeln. Realistisch hingegen sind ionisierte paramagnetische Spezies, z.B.  $\text{Mu}_T^-$  bzw.  $\text{Mu}_{\text{BC}}^+$  oder Komplexe, bei denen Myonium mit z. B. Dotieratomen eine abgesättigte chemische Bindung eingeht.

## 3.2 Die neuen Spezies $\text{Mu}_X$ und $\text{Mu}_Y$

Wie bereits erwähnt, werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit zwei weitere über die bisher bekannten Myonspezies hinausgehenden Myonspezies identifiziert. Sie sind paramagnetisch und sollen mit  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_Y$  bezeichnet werden.

### 3.2.1 Die Spezies $\text{Mu}_X$

Die Existenz der Spezies  $\text{Mu}_X$  konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit anhand von  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen nachgewiesen werden. Über die Konfiguration der Umgebung des

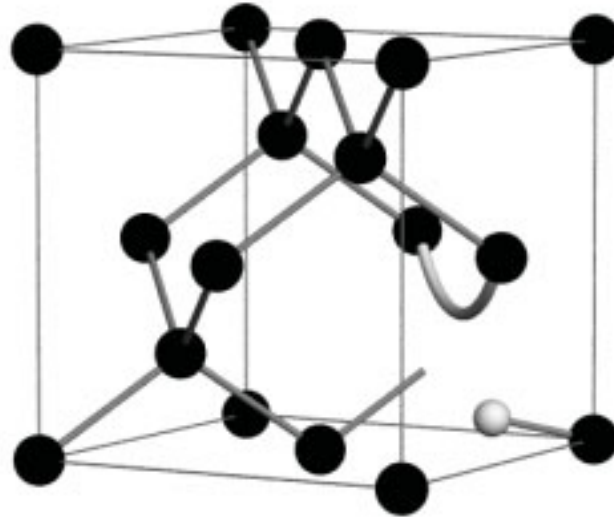


Abbildung 3.2: *Silizium-Kristall mit Leerstelle und  $Mu_V$ . Die dunklen Punkte stellen die Siliziumatome und der helle Punkt das Myon in der Spezies  $Mu_V$  dar.*

Myons in dieser Spezies ist noch nichts näheres bekannt. Daher wird diese Spezies mit  $Mu_X$  bezeichnet. Der Hyperfeintensor von  $Mu_X$  konnte anhand der mittels  $TF\mu SR$  gewonnenen Resultate bestimmt werden. Er ist axialsymmetrisch bzgl. der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung.

Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit in Kapitel 7 bestimmten Hyperfeinparameter der Spezies  $Mu_X$  sind in Tabelle 3.1 im Vergleich mit den entsprechenden Werten für  $Mu_{BC}$  eingetragen. Eine ausführliche Diskussion der Spezies  $Mu_X$  findet sich in Kapitel 8, siehe auch SCHEFZIK (1999, 2000b).

### 3.2.2 Die Spezies $Mu_V$

Die Spezies  $Mu_V$  wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit mittels LFQ-Untersuchungen identifiziert. Bei  $Mu_V$  handelt es sich ebenfalls um eine paramagnetische Spezies mit anisotroper Hyperfeinwechselwirkung. Sie wird als Myonium in einer Silizium-Leerstelle (engl.: vacancy) interpretiert, womit sich die Bezeichnung  $Mu_V$  erklärt (SCHEFZIK 1998). Die Konfiguration von  $Mu_V$  ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Der Hyperfeintensor von  $Mu_V$  ist anhand von  $ZF\mu SR$ -Untersuchungen bestimmbar, und es zeigt sich, daß er bezüglich der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung axialsymmetrisch ist (SCHEFZIK 2000a). Die aus den experimentellen Ergebnissen abgeleiteten Hyperfeinparameter für  $Mu_V$ , Kapitel 9, sind in Tabelle 3.1 angegeben.  $Mu_V$  besitzt deutlich kleinere Hyperfeinparameter als alle bisher bekannten Myonspezies.

Im Jahr 1997 wurde von BECH NIELSEN und Mitarbeitern (1997a) ein Wasserstoffzentrum VH mittels EPR an protonenbestrahltem Silizium nachgewiesen. Bei  $T = 45$  K wurde aus den Ergebnissen der Hyperfeintensor von VH bestimmt, wobei die Hauptachse um 8 Grad zur  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung verkippt ist. Die Hyperfeinparameter dieses Zentrums sowie die auf das Myon skalierten Werte sind im Vergleich zu den im Rahmen der vorliegenden Arbeit für die Spezies  $Mu_V$  bestimmten Werten in Tabelle 3.1 eingetragen. Die Korrespondenz zwischen den Zentren  $Mu_V$  und VH ist sehr eng, worauf in Kapitel 9 bei der Diskussion der Spezies  $Mu_V$  näher eingegangen wird.



# Kapitel 4

## Berechnung der Histogramme

### 4.1 TF $\mu$ SR

In der TF $\mu$ SR wird die Präzession des Myonspins in einem zum Myonspin senkrecht stehenden, von außen angelegten Magnetfeld beobachtet, siehe Abschnitt 2.4. Die Präzessionssignale sind für die verschiedenen Myonspezies unterschiedlich. Die Stärke (Amplitude) der die jeweilige Myonspezies charakterisierenden Präzessionssignale ist ein Maß für die Bildungswahrscheinlichkeit dieser Spezies. Die Dämpfung der Signale liefert Aussagen über die dynamischen Prozesse, denen die betreffende Spezies ausgesetzt ist, wie z. B. Spinaustauschprozesse oder Übergänge zwischen verschiedenen Spezies. In diesem Kapitel werden die Myonspin-Präzessionsfrequenzen sowie die zugehörigen Amplituden (Myon-Zerfalls-Asymmetrien) für die einzelnen Myonspezies als Funktion des angelegten Magnetfelds berechnet. Auf die Berechnung der Bildungswahrscheinlichkeiten aus den gemessenen Asymmetrien soll ebenfalls in diesem Kapitel eingegangen werden.

In einem Unterabschnitt wird auf die Besonderheiten der ZF $\mu$ SR eingegangen. Mit Hilfe von ZF $\mu$ SR-Experimenten konnten im Rahmen der vorliegenden Arbeit erstmals die Hyperfeinparameter der neuen Myonspezies  $\text{Mu}_V$  bestimmt werden, siehe Kapitel 9.

Bei Myonium handelt es sich um ein 2-Spin- $\frac{1}{2}$ -System. Sämtliche Betrachtungen werden im vierdimensionalen Produktraum der Myon-Elektron-Spinzustände durchgeführt. Der Spinanteil des Hamilton-Operators  $\mathcal{H}$  unter Berücksichtigung der Hyperfeinwechselwirkung zwischen Myon und Elektron ist, wie in Gleichung (3.1), Seite 30, gegeben durch

$$\mathcal{H} = \hbar \vec{S}_\mu \mathbf{A} \vec{S}_e - \hbar \gamma_\mu \vec{S}_\mu \vec{B}_a + \hbar \gamma_e \vec{S}_e \vec{B}_a. \quad (4.1)$$

Mit Hilfe der Pauli-Spin-Operatoren  $\vec{\sigma}$ ,  $\vec{\tau}$  des Myons bzw. Elektrons läßt sich der Hamilton-Operator umschreiben zu

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4}\hbar\vec{\sigma}\mathbf{A}\vec{\tau} - \frac{1}{2}\hbar\gamma_{\mu}\vec{\sigma}\vec{B}_a + \frac{1}{2}\hbar\gamma_e\vec{\tau}\vec{B}_a. \quad (4.2)$$

Als Basis zur Darstellung der Eigenzustände des Hamilton-Operators  $\mathcal{H}$  wählen wir die Produktzustände des 2-Spin-Systems  $\{|\chi_i\rangle = |m_{\mu}m_e\rangle\}$ , wobei  $m_{\mu}$  und  $m_e$  die magnetischen Quantenzahlen des Myons bzw. Elektrons beschreiben. Die Basisvektoren  $\{|\chi_i\rangle\}$  sind gegeben durch

$$\begin{aligned} |\chi_1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |\chi_2\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle, \\ |\chi_3\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle, \\ |\chi_4\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Hierbei bezeichnet der Doppelpfeil  $\uparrow$  ( $\downarrow$ ) die Quantenzahl  $m_{\mu} = +\frac{1}{2}$  ( $m_{\mu} = -\frac{1}{2}$ ) des Myons und der Einfachpfeil  $\uparrow$  ( $\downarrow$ ) die Quantenzahl  $m_e = +\frac{1}{2}$  ( $m_e = -\frac{1}{2}$ ) des Elektrons.

Bei der TF $\mu$ SR wird ein statisches (zeitunabhängiges) äußeres Magnetfeld senkrecht zur Anfangsspinrichtung der Myonen angelegt. Das Koordinatensystem sei so gewählt, daß das Magnetfeld parallel zur  $z$ -Richtung steht und die Anfangsspinrichtung der Myonen, welche der Beobachtungsrichtung entspricht, in der  $xy$ -Ebene liegt. Es gilt somit für das Magnetfeld  $\vec{B}_a = B_a \cdot \hat{z}$  wobei  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  die Einheitsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen bezeichnen.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das 2-Spin-System

$$\mathcal{H} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad (4.4)$$

liefert die Energie-Eigenwerte  $E_i$  sowie die zugehörigen Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$ , welche jeweils noch von der Stärke des angelegten Magnetfelds  $B_a$  abhängen. Die Eigenvektoren sind Linearkombinationen der Basisvektoren. Sie sind gegeben durch

$$|\psi_i\rangle = \sum_k c_{ki} |\chi_k\rangle, \quad c_{ki} = \langle \chi_k | \psi_i \rangle. \quad (4.5)$$

Die  $c_{ki}$  sind die Entwicklungskoeffizienten.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels wird die Lösung der Schrödinger-Gleichung für unterschiedliche Hyperfeinwechselwirkungstensoren beschrieben. Zuerst wird auf den Spezialfall eines isotropen Hyperfeinwechselwirkungstensors der Myonspezies eingegangen. Daran anschließend wird der Fall eines anisotropen Hyperfeinwechselwirkungstensors betrachtet.

Im Falle eines isotropen Hyperfeinwechselwirkungstensors  $\mathbf{A} = A \cdot \mathbf{I}$  der betrachteten Myonspezies, wie es z.B. für  $\text{Mu}_T$  der Fall ist, existiert eine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.4). Die Energie-Eigenwerte  $E_i$  sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{1}{4}hA + \frac{1}{2}\hbar(\gamma_e - \gamma_\mu)B_a, \\
E_2 &= -\frac{1}{4}hA + \frac{1}{2}hA\sqrt{1+x^2}, \\
E_3 &= \frac{1}{4}hA - \frac{1}{2}\hbar(\gamma_e - \gamma_\mu)B_a, \\
E_4 &= -\frac{1}{4}hA - \frac{1}{2}hA\sqrt{1+x^2},
\end{aligned} \tag{4.6}$$

mit  $x = B_a \cdot (\gamma_e + \gamma_\mu)/(2\pi A)$ . Die zugehörigen Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  ergeben sich zu

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\
|\psi_2\rangle &= s|\uparrow\downarrow\rangle + c|\downarrow\uparrow\rangle, \\
|\psi_3\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle, \\
|\psi_4\rangle &= c|\uparrow\downarrow\rangle - s|\downarrow\uparrow\rangle,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

wobei  $s = 2^{-1/2}\sqrt{1 - x/\sqrt{1+x^2}}$  und  $c = 2^{-1/2}\sqrt{1 + x/\sqrt{1+x^2}}$  gilt.

Das Breit-Rabi-Diagramm, welches die Energie-Eigenwerte  $E_i$  in Abhängigkeit des angelegten Magnetfelds  $B_a$  angibt, ist für  $\text{Mu}_T$  in Abbildung 4.1 dargestellt.

Sofern es sich um einen anisotropen Hyperfeinwechselwirkungstensor handelt, wie es z. B. für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  der Fall ist, existiert im allgemeinen keine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.4). Die Energie-Eigenwerte  $E_i$  und Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  müssen numerisch bestimmt werden. Nur in einigen Spezialfällen ist eine analytische Lösung möglich; so z. B., wenn der Winkel zwischen Hauptachse des Hyperfeintensors und der Beobachtungsrichtung ( $x$ -Richtung des Laborsystems) 0 bzw. 90 Grad beträgt (PATTERSON 1988). Im Falle einer anisotropen Hyperfeinwechselwirkung ist zu beachten, daß im Siliziumkristall für das Myon mehrere Gitterplätze gleicher Symmetrie mit kristallographisch äquivalenten Umgebungen, jedoch unterschiedlichen Orientierungen der Symmetrieachse existieren. Im Experiment werden die Myonen die verschiedenen kristallographisch äquivalenten Gitterplätze mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzen. (Die Besetzung läßt sich nur in geringem Umfang durch Symmetrierniedrigung, z. B. durch Anlegen uniaxialer Verzerrungen beeinflussen.) Es wird also eine Mittelung über die Signale der auf äquivalenten Gitterplätzen lokalisierten Myonen beobachtet. Die zu den äquivalenten Gitterplätzen gehörenden Hyperfeintensoren besitzen unterschiedliche Hauptachsenrichtungen. Besitzt der Hyperfeintensor z.B. eine entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung ausgerichtete Symmetrieachse, so existieren im Siliziumkristall vier äquivalente Hauptachsenrichtungen des zugehörenden Hyperfeintensors, welche durch  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}11 \rangle$ ,  $\langle 1\bar{1}1 \rangle$  sowie  $\langle 11\bar{1} \rangle$  gegeben sind. Für



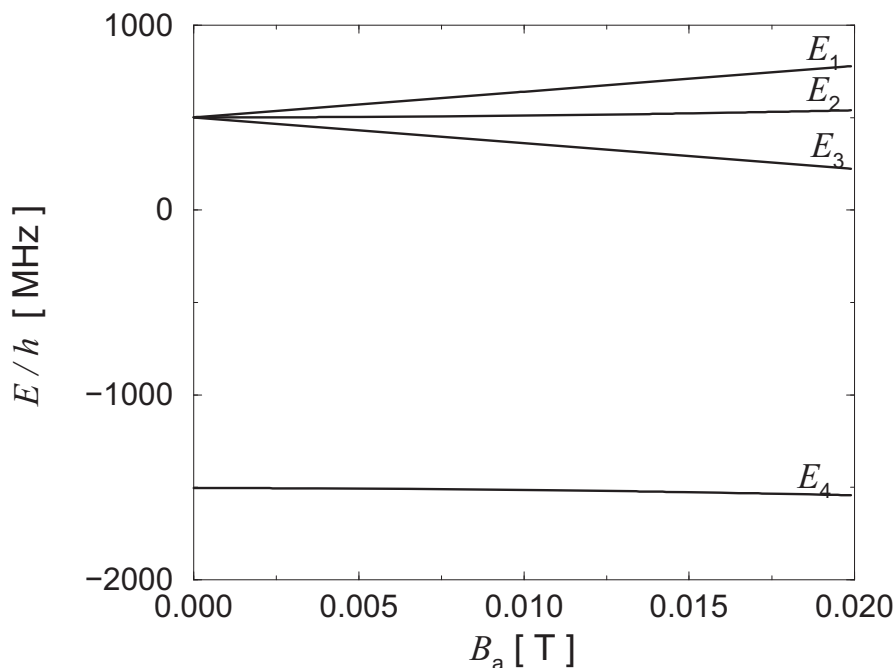


Abbildung 4.1: Breit-Rabi-Diagramm der Myonspezies  $\text{Mu}_T$ . Die Bezeichnung der Energieniveaus ist so gewählt, daß der Eigenzustand zur Energie  $E_i$  im Grenzfall  $B_a \rightarrow \infty$  der Basisvektor  $|\chi_i\rangle$  ist.

den Fall einer  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung des Hyperfeintensors existieren drei äquivalente Gitterplätze des Myons und für eine  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung sogar sechs äquivalente Gitterplätze. Die Berechnung der Energie-Eigenwerte  $E_i$  und Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  muß nun für jeden der äquivalenten Gitterplätze des Myons separat erfolgen, da sich für anisotrope Myonspezies je nach Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors zur Magnetfeldrichtung unterschiedliche Energieniveauschemata und Eigenzustände ergeben.

$\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist ein Beispiel für eine Spezies mit anisotroper Hyperfeinwechselwirkung. Die Hauptachse ist parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung. Es existieren für diese Spezies somit vier im Experiment ununterscheidbare, äquivalente Gitterplätze des Myons. Ist das äußere Magnetfeld parallel zur  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung angelegt, so schließen die resultierenden äquivalenten Hauptachsenrichtungen des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  mit der Magnetfeldrichtung alle denselben Winkel von 54,7 Grad ein. In diesem Fall sind auch die zu den vier Hauptachsenrichtungen gehörenden Energieniveauschemata identisch. Das Breit-Rabi-Diagramm ist für diese Konstellation in Abbildung 4.2 dargestellt.

Aus den Differenzen der Energie-Eigenwerte  $E_i$  ergeben sich die im Prinzip möglichen Präzessionsfrequenzen und deren Magnetfeldabhängigkeiten. Eine Präzessionsfrequenz ist allerdings im Experiment nur dann beobachtbar, sofern das zugehörige Präzessionssignal eine nicht verschwindende Amplitude besitzt. Zur Bestimmung dieser Amplituden muß die Zeitentwicklung der Myonspinpolarisation betrachtet werden. Deren Berechnung erfolgt im Rahmen des Dichtematrixformalismus.

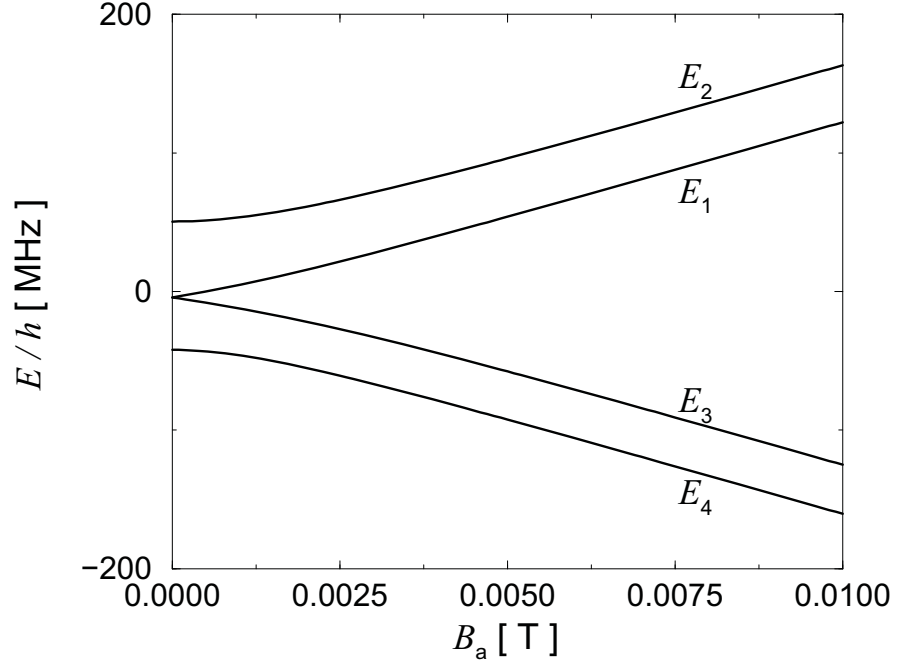


Abbildung 4.2: Breit-Rabi-Diagramm von  $Mu_{BC}$  mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ . Die vier äquivalenten Hauptachsenrichtungen schließen mit  $\vec{B}_a = B_a \hat{z}$  alle einen Winkel von  $54,7$  Grad ein. Die Bezeichnung der Energieniveaus ist so gewählt, daß der Eigenzustand zur Energie  $E_i$  im Grenzfall  $B_a \rightarrow \infty$  der Basisvektor  $|\chi_i\rangle$  ist.

Die Spin-Dichtematrix  $\rho(t)$  des Zwei-Teilchen-Systems aus Myon und Elektron läßt sich in der Form

$$\rho(t) = \frac{1}{4} \left( 1 + \vec{p}_\mu(t) \cdot \vec{\sigma} + \vec{p}_e(t) \cdot \vec{\tau} + \sum_{i,j} p^{ij}(t) \sigma_i \tau_j \right) \quad (4.8)$$

darstellen.  $\vec{p}_\mu(t)$  ist hierbei die Myonspinpolarisation und stellt die eigentlich interessierende Größe dar,  $\vec{p}_e(t)$  beschreibt die Elektronspinpolarisation und  $p^{ij}(t)$  charakterisiert gemischte Spinzustände. Aus der Spindichtematrix lassen sich diese Größen durch Spurbildung (Sp) gemäß

$$\vec{p}_\mu(t) = \text{Sp}(\rho(t) \vec{\sigma}) , \quad (4.9)$$

$$\vec{p}_e(t) = \text{Sp}(\rho(t) \vec{\tau}) , \quad (4.10)$$

$$p^{ij}(t) = \text{Sp}(\rho(t) \sigma^i \tau^j) \quad (4.11)$$

berechnen. In den hier diskutierten Experimenten ist zum Zeitpunkt der Implantation des Myons in die Probe nur der Myonspin polarisiert. Der Elektronenspin in der Probe

ist unpolarisiert, wodurch bei der Myoniumbildung jede Elektronspinrichtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorhanden ist. Zum Zeitnullpunkt (Implantationszeitpunkt) gilt daher für die Dichtematrix

$$\rho(0) = \frac{1}{4} (1 + \vec{P}_\mu(0) \cdot \vec{\sigma}). \quad (4.12)$$

Die Bewegungsgleichung für die Dichtematrix  $\rho(t)$  ist durch die von Neumann-Gleichung

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [\mathcal{H}, \rho(t)] \quad (4.13)$$

gegeben.  $\dot{\rho}(t)$  bezeichnet dabei die zeitliche Ableitung von  $\rho(t)$ . Gleichung (4.13) besitzt die formale Lösung

$$\rho(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right) \rho(0) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right). \quad (4.14)$$

Die zeitabhängige Myonspinpolarisation  $\vec{p}_\mu(t)$  berechnet sich gemäß (4.9) durch

$$\begin{aligned} \vec{p}_\mu(t) &= \text{Sp}(\rho(t)\vec{\sigma}) \\ &= \sum_n \langle \psi_n | \rho(t)\vec{\sigma} | \psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Einsetzen von Gleichung (4.14) in obige Beziehung und Einfügen eines Einheitsoperators anhand eines vollständigen Basissatzes ( $\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = \mathbf{1}$ ) liefert für die Myonspinpolarisation

$$\begin{aligned} \vec{p}_\mu(t) &= \sum_{n,m} \exp\left(i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t\right) \langle \psi_n | \rho(0) | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \vec{\sigma} | \psi_n \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{n,m} \exp(i\omega_{mn}t) \langle \psi_n | \vec{P}_\mu(0) \cdot \vec{\sigma} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \vec{\sigma} | \psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Hierbei wurde von Gleichung (4.12) und  $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$  Gebrauch gemacht.

In TF $\mu$ SR-Experimenten wird die Projektion der zeitabhängigen Myonspinpolarisation  $\vec{p}_\mu(t)$  auf die Beobachtungsrichtung detektiert. Die Beobachtungsrichtung ist senkrecht zum äußeren Magnetfeld und parallel zur Anfangsmyonspinpolarisation  $\vec{P}_\mu(0)$ . Da das

Magnetfeld entlang der  $z$ -Richtung ausgerichtet ist, liegt die Anfangsmyonspinpolarisation  $\vec{P}_\mu(0)$  in der  $xy$ -Ebene und kann mittels  $\vec{P}_\mu(0) = (p_x(0), p_y(0), 0)$  dargestellt werden. (Die hier verwendete allgemeine Schreibweise für die Anfangsspinpolarisation  $\vec{P}_\mu(0)$  hat den Vorteil, daß man später bei der Diagonalisierung der Hamiltonmatrix ein geeignetes spezielles Koordinatensystem verwenden kann.) Die beobachtete Projektion der zeitabhängigen Myonspinpolarisation auf die Anfangsspinrichtung ist somit gegeben durch

$$\begin{aligned} p_{\mu,\text{exp}} &= \vec{p}_\mu(t) \cdot \vec{P}_\mu(0) \cdot \frac{1}{P_\mu(0)} \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{P_\mu(0)} \sum_{n,m} \exp(i\omega_{mn}t) \langle \psi_n | \vec{P}_\mu(0) \cdot \vec{\sigma} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \vec{P}_\mu(0) \cdot \vec{\sigma} | \psi_n \rangle . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Die Gleichung für die Myonspinpolarisation ist bisher in der Basis der Energie-Eigenvektoren  $|\psi_i\rangle$  dargestellt worden. Transformation auf das Basissystem  $\{|\chi_i\rangle\}$  des 2-Spin-Systems liefert für die im Experiment beobachtbare Projektion der Myonspinpolarisation  $p_{\mu,\text{exp}}(t)$  die folgende Gleichung

$$\begin{aligned} p_{\mu,\text{exp}} &= \frac{1}{4} \frac{1}{P_\mu(0)} \sum_{n,m} \exp(i\omega_{mn}t) \\ &\cdot \left\{ p_x^2(0) \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^x | \chi_i \rangle \cdot \sum_{k,l} c_{km}^* c_{ln} \langle \chi_k | \sigma^x | \chi_l \rangle \right. \\ &+ p_x(0) \cdot p_y(0) \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^x | \chi_i \rangle \cdot \sum_{k,l} c_{km}^* c_{ln} \langle \chi_k | \sigma^y | \chi_l \rangle \\ &+ p_y(0) \cdot p_x(0) \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^y | \chi_i \rangle \cdot \sum_{k,l} c_{km}^* c_{ln} \langle \chi_k | \sigma^x | \chi_l \rangle \\ &\left. + p_y^2(0) \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^y | \chi_i \rangle \cdot \sum_{k,l} c_{km}^* c_{ln} \langle \chi_k | \sigma^y | \chi_l \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{P_\mu(0)} \sum_{n,m} \exp(i\omega_{mn}t) \cdot \left[ p_x^2(0) |S_{nm}|^2 + p_y^2(0) |\tilde{S}_{nm}|^2 \right. \\ &\quad \left. + i p_x(0) p_y(0) (-S_{nm} \tilde{S}_{nm}^* + S_{nm}^* \tilde{S}_{nm}) \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

mit

$$\begin{aligned} S_{nm} &= \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^x | \chi_i \rangle \\ &= c_{1n}^* c_{2m} + c_{3n}^* c_{4m} + c_{2n}^* c_{1m} + c_{4n}^* c_{3m} , \end{aligned} \quad (4.20)$$

und

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{nm} &= i \sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^y | \chi_i \rangle \\ &= c_{1n}^* c_{2m} + c_{3n}^* c_{4m} - c_{2n}^* c_{1m} - c_{4n}^* c_{3m} , \end{aligned} \quad (4.21)$$

wobei  $c_{ij}^*$  die komplexe Konjugation von  $c_{ij}$  bezeichnet und die Koeffizienten  $c_{ij}$  gemäß Gleichung (4.5) definiert sind.

Mit  $p_{\mu,\text{exp}}(t)$  ist nun die zeitabhängige beobachtbare Projektion der Myonspinpolarisation gegeben. Diese ist von der Lage der Anfangsmyonspinpolarisation  $\vec{P}_\mu(0) = (p_x(0), p_y(0), 0)$  abhängig. Unter Berücksichtigung der Tatsache, daß  $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$  und somit  $\cos(\omega_{mn}t) = \cos(\omega_{nm}t)$  gilt, läßt sich Gleichung (4.19) in der Form

$$p_{\mu,\text{exp}}(t) = \sum_{n \geq m} a_{mn} \cdot \cos(\omega_{mn}t) \quad (4.22)$$

darstellen, wobei  $a_{mn}$  durch

$$a_{mn} = \frac{1}{4} \frac{1 + \delta_{nm}}{P_\mu(0)} \left[ p_x^2(0) |S_{nm}|^2 + p_y^2(0) |\tilde{S}_{nm}|^2 + i p_x(0) p_y(0) (-S_{nm} \tilde{S}_{nm}^* + S_{nm}^* \tilde{S}_{nm}) \right]$$

bestimmt ist, wobei  $\delta_{nm}$  das Kronecker-Symbol darstellt.

Bei anisotropen Myonspezies, wie z. B.  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ , existieren mehrere kristallographisch äquivalente Orientierungen der Hauptachsen des Hyperfeintensors. Für jede dieser Richtungen muß  $p_{\mu,\text{exp}}$  bestimmt werden, wobei sowohl die Amplituden  $a_{mn}$  als auch die Frequenzen  $\omega_{mn}$  in Gleichung (4.22) von der Lage der Hauptachsen abhängig sein können. Selbst wenn das Frequenzspektrum für zwei äquivalente Orientierungen des Hyperfeintensors vollständig identisch sein sollte, so sind doch die Amplituden im allgemeinen verschieden, da die Anfangsspinpolarisation der Myonen eine feste Orientierung zu den Kristallkoordinaten hat, die beiden Hyperfeintensoren aber verschieden liegen. Im Fall von z. B.  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  tritt dieser Fall auf, wenn die Rotationsachsen der beiden Hyperfeintensoren mit dem statischen Magnetfeld den gleichen Winkel einschließen.

Wird nun eine Myonspezies zu 100 % gebildet, so ergibt sich für die beschriebene Geometrie der  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimente das Zeithistogramm

$$\begin{aligned} H(t) &= U + N_0 \cdot e^{-t/\tau_\mu} [1 + a \cdot p_{\mu,\text{exp}}(t)] \\ &= U + N_0 \cdot e^{-t/\tau_\mu} \left[ 1 + a_{\text{Strahl}} \cdot \sum_{n \geq m} \sum_{\beta_i} r(\beta_i) \cdot a_{mn} \cdot \cos(\omega_{mn}t) \right]. \end{aligned} \quad (4.23)$$

$U$  beschreibt dabei den Untergrund, welcher durch unkorrelierte Ereignisse zustande kommt und zeitunabhängig ist.  $a$  bezeichnet den mittleren Asymmetriekoeffizient des Myonzerfalls und  $r(\beta_i)$  die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der äquivalenten Orientierung.  $a_{\text{Strahl}}$  beschreibt die maximal beobachtbare Myon-Zerfalls-Asymmetrie, welche vom Myonstrahl und der Geometrie des Versuchsaufbaus abhängig ist und gemäß Abschnitt 2.4.2 für die von uns durchgeführten Experimente zu 0,22 bestimmt wurde.

Im Experiment wird jeweils ein Histogramm im FW- und BW-Zähler aufgenommen. Die Phasen der Präzessionssignale sind um 180 Grad zueinander verschoben. Um beide erhaltenen Histogramme mit ein und derselben Formel beschreiben zu können, wird in obige Gleichung der Beschreibung des Histogramms ein Phasenwinkel  $\varphi$  eingeführt. In der bisher beschriebenen Ableitung wurden keinerlei Relaxationsprozesse betrachtet. Diese werden phänomenologisch als exponentielle Dämpfung mit Parameter  $\lambda$  eingeführt (Nosov 1963). In diesem exponentiellen Ansatz sind Elektronenspinaustausch-Prozesse und Übergänge zwischen verschiedenen Myonspezies, welche zum Verlust der Phasenkohärenz des Myonspinensembles führen können, enthalten. Für die Histogramme einer Myonspezies ergibt sich somit

$$H(t) = U + N_0 \cdot e^{-t/\tau_\mu} \cdot \left[ 1 + a_{\text{Strahl}} \cdot \sum_{n \geq m} \sum_{\beta_i} r(\beta_i) \cdot a_{mn} \cdot e^{-\lambda_{mn} t} \cdot \cos(\omega_{mn} t + \varphi_{mn}) \right].$$

Die Beschreibung von Histogrammen, welche sich aus den Beiträgen der verschiedenen Myonspezies zusammensetzen ergibt sich damit zu

$$H(t) = U + N_0 e^{-t/\tau_\mu} \cdot \left[ 1 + a_{\text{Strahl}} \sum_{\alpha} \sum_{n \geq m} \sum_{\beta_i} r(\beta_i) \cdot f(\alpha) \cdot a_{mn} \cdot e^{-\lambda_{mn}^\alpha t} \cdot \cos(\omega_{mn}^\alpha t + \varphi_{mn}^\alpha) \right]. \quad (4.24)$$

Der Index  $\alpha$  steht für die Myonspezies, z. B.  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  oder  $\text{Mu}_{BC}$ , und  $f(\alpha)$  beschreibt die Bildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies. Vergleiche hierzu die Beschreibung des TF $\mu$ SR-Histogramms aus Abschnitt 2.4, Gleichung (2.4).

Die im Experiment bestimmbaren Größen sind die Asymmetrien  $a_{mn}^\alpha = f(\alpha) \cdot a_{mn}$ , die Relaxationsraten  $\lambda_{mn}^\alpha$  sowie die Frequenzen  $\omega_{mn}^\alpha$  der unterschiedlichen Präzessionssignale der verschiedenen Spezies. Die Frequenzen und zugehörigen Amplituden sind für 100 % Bildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies aus obiger Ableitung bestimmbar. Für die Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  sind diese Werte in Tabelle 4.1 für ein äußeres Magnetfeld von 4 mT angegeben.

Für  $\text{Mu}_{BC}$  müssen die vier äquivalenten Gitterplätze des Myons berücksichtigt werden. Dazu werden die Amplituden und Frequenzen entsprechend Gleichung (4.22) bzw. (4.19) für die vier unterschiedlichen Hauptachsenrichtungen des Hyperfeinwechselwirkungstensors bestimmt. Die Amplituden von mehrfach, d. h. für unterschiedliche Hauptachsenrichtungen, auftretenden Frequenzen werden statistisch gewichtet und addiert, um mit dem Experiment vergleichbare Amplituden zu erhalten.

Die Frequenzen und Amplituden der Präzessionssignale sind von der Orientierung des Magnetfelds, den Hyperfeinparametern der Myonspezies sowie der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds abhängig.

Spezies	Magnetfeldrichtung	Frequenz $\nu_{ij}$ [MHz]	Amplitude $a_{ij}$
$\mu^d$	beliebig	0,54	1,0
$Mu_T$	beliebig	54,2	0,26
		1951,8	0,26
		57,4	0,24
		2063,4	0,24
		111,6	0,0
		2009,2	0,0
$Mu_{BC}$	$\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$	42,8	0,43
		34,4	0,23
		85,6	0,03
		162,8	0,03
		120,0	0,02
		128,4	0,003
$Mu_{BC}$	$\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$	42,6	0,230
		50,0	0,230
		34,9	0,209
		24,7	0,022
		75,2	0,020
		167,8	0,020
		96,7	0,015
		156,3	0,014
		121,4	0,012
		131,6	0,006
		117,8	0,0
125,2	0,0		

Tabelle 4.1: Frequenzen und Amplituden für  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  im äußeren Magnetfeld von 4 mT. Für  $Mu_{BC}$  sind für die zwei Magnetfeldrichtungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ , mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 100 \rangle$ , und  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ , mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$ , die über die vier äquivalenten Gitterplätze gemittelten Amplituden angegeben.

Aus Tabelle 4.1 ist zu entnehmen, daß für die Spezies  $\text{Mu}_T$  in einem äußeren Magnetfeld von 4 mT prinzipiell vier unterschiedliche Präzessionsfrequenzen zu beobachten sind. Für die zwei übrigen Frequenzen verschwindet die Amplitude, und sie sind damit unbeobachtbar. Im Experiment werden von uns jedoch nur zwei Präzessionssignale beobachtet. Dies liegt an der verwendeten Zeitaufösung von 0,625 ns, welche die Beobachtung von Frequenzen oberhalb von ca. 300 MHz verhindert. Für  $\text{Mu}_{BC}$  sind je nach Orientierung des Magnetfelds zwei bzw. drei Präzessionssignale sichtbar. Die weiteren Präzessionssignale sind im Experiment wegen der zu geringen Amplitude unbeobachtbar. Die unterschiedlichen Präzessionsfrequenzen sind im Fourierspektrum der Histogramme deutlich zu erkennen. In Abbildung 2.6, Seite 20, ist das Fourierspektrum eines experimentell bestimmten Histogramms dargestellt, welches bei einem äußeren Magnetfeld von 4 mT aufgenommen wurde. Die beobachteten Präzessionssignale sind dort den entsprechenden Myonspezies zugeordnet.

Die verschiedenen Myonspezies können alle gleichzeitig in der Probe vorhanden sein. Die Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Myonspezies sind wichtige Größen, insbesondere beim Vergleich unterschiedlicher Siliziumproben. Die Anpassung der oben abgeleiteten Gleichung (4.24) bzw. Gleichung (2.4) zur Beschreibung eines Histogramms an die Meßdaten liefert die Relaxationsraten  $\lambda_{ij}^\alpha$ , die Asymmetrien  $a_{ij}^\alpha = f(\alpha) a_{ij}$  sowie die Frequenzen  $\omega_{ij}^\alpha$  der verschiedenen Präzessionssignale der Myonspezies  $\alpha$ . Aus den experimentell bestimmten Asymmetrien lassen sich unter der Annahme, daß kein Verlust der Phasenkohärenz des Myonspinensembles auftritt, die Bildungswahrscheinlichkeiten  $f(\alpha)$  der jeweiligen Spezies bestimmen. Dabei ist zu beachten, daß die gemessene Asymmetrie  $a_{ij}^\alpha$  auf die theoretisch mögliche Amplitude  $a_{ij}$  bezogen werden muß, wobei außerdem die maximal meßbare Asymmetrie  $a_{\text{Strahl}}$  zu berücksichtigen ist. Die Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Spezies berechnen sich aus den für die jeweiligen Frequenzen bestimmten Asymmetrien gemäß

$$f(\mu^d) = \frac{a^{\mu^d}}{a_{\text{Strahl}}}, \quad (4.25)$$

$$f(\text{Mu}_T) = \frac{a_{ij}^{\text{Mu}_T}}{a_{ij} \cdot a_{\text{Strahl}}}, \quad (4.26)$$

$$f(\text{Mu}_{BC}) = \frac{a_{ij}^{\text{Mu}_{BC}}}{a_{ij} \cdot a_{\text{Strahl}}}. \quad (4.27)$$

Die Summe der Bildungswahrscheinlichkeiten sollte 100 % liefern. Häufig ist diese jedoch deutlich geringer. Dies kann zum einen an dem durch Phasenverlust des Myonspinensembles unbeobachtbar gewordenen Anteil der Myonen liegen. Zum anderen kann eine eventuell vorhandene starke Relaxation zur Unbeobachtbarkeit des Präzessionssignals führen, wodurch im Experiment eine geringere Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies vorgetauscht wird. Der im Experiment unbeobachtete Anteil der Myonen wird als „missing fraction“ bezeichnet. Dieser kann für jede Probe unterschiedlich sein.



## 4.2 ZF $\mu$ SR

Insbesondere die ZF $\mu$ SR ist geeignet, die Hyperfeinparameter einer Myonspezies direkt zu bestimmen. Zwar ist die Bestimmung der Hyperfeinparameter einer Myonspezies auch mittels TF $\mu$ SR-Untersuchungen möglich, sofern die Orientierungs- und Magnetfeldabhängigkeit der Präzessionsfrequenzen bekannt sind, d. h. untersucht wurde, doch lassen sich bei der ZF $\mu$ SR die Hyperfeinparameter direkt aus den Differenzen der im Nullfeld beobachteten Präzessionsfrequenzen berechnen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnten anhand von ZF $\mu$ SR-Untersuchungen die Hyperfeinparameter der neuen Myonspezies  $\text{Mu}_V$  bestimmt werden, siehe Kapitel 9.

Bei der ZF $\mu$ SR ist kein äußeres Magnetfeld vorhanden. Somit ist die Myonspinrichtung als einzige Vorzugsrichtung gegeben. Die Bestimmung der Energie-Eigenwerte  $E_i$  kann in einem beliebigen Koordinatensystem erfolgen. Im Hauptachsensystem des Hyperfeintensors sind die Energie-Eigenwerte  $E_i$  im allgemeinsten Fall eines anisotropen Hyperfeinwechselwirkungstensor gegeben durch

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \frac{1}{4}(A_x - A_y + A_z) , \\
 E_2 &= -\frac{1}{4}(A_x + A_y + A_z) , \\
 E_3 &= \frac{1}{4}(-A_x + A_y + A_z) , \\
 E_4 &= \frac{1}{4}(A_x + A_y - A_z) .
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

Die Darstellung der Energie-Eigenvektoren ist von der Wahl des Basissystems abhängig. Die Präzessionsfrequenzen sind durch die Energiedifferenzen der Energie-Niveaus bestimmt. Im allgemeinsten Fall eines anisotropen Hyperfeinwechselwirkungstensors ( $A_x \neq A_y \neq A_z$ ) sind sechs unterschiedliche Frequenzen vorhanden. Im Fall eines axialsymmetrischen Hyperfeintensors ( $A_x = A_y \neq A_z$ ) sind maximal drei unterschiedliche Präzessionsfrequenzen im Nullfeld beobachtbar. Für  $\text{Mu}_{BC}$  sind diese gegeben durch  $\nu_1 = 92,6$  MHz,  $\nu_2 = 54,7$  MHz und  $\nu_3 = 37,9$  MHz. Für einen isotropen Hyperfeintensor ist im Nullfeld nur eine Frequenz beobachtbar, welche dem Hyperfeinparameter entspricht. Für  $\text{Mu}_T$  liegt diese Frequenz bei 2006,3 MHz. Diese ist mit dem von uns verwendeten Versuchsaufbau aufgrund der Zeitauflösung von 0,625 ns jedoch nicht beobachtbar.

Die Amplitude der zugehörigen Präzessionssignale sind für anisotrope Myonspezies, wie bei der TF $\mu$ SR, orientierungsabhängig, im Falle der ZF $\mu$ SR von der kristallographischen Orientierung der Myonspinrichtung zum Implantationszeitpunkt. Dies liegt in der orientierungsabhängigen Darstellung der Energie-Eigenvektoren begründet. Es kann somit je nach Orientierung der Myonspinrichtung relativ zur Kristallorientierung durchaus eine unterschiedliche Anzahl von Präzessionsfrequenzen beobachtbar sein.

Die Berechnung der Amplituden der Präzessionssignale verläuft analog zur TF $\mu$ SR. Dabei muß nun jedoch beachtet werden, daß die einzige ausgezeichnete Richtung die Strahl-

richtung, d. h. die Myonspinrichtung zum Zeitpunkt der Implantation, ist. Damit läßt sich die Anfangsmyonspinpolarisation  $\vec{P}_\mu(0)$  durch  $\vec{P}_\mu(0) = (0, 0, p_\mu^z(0))$  darstellen. Zur Amplitudenberechnung muß zuerst die zeitabhängige Myonspinpolarisation  $\vec{p}_\mu(t)$ , siehe Gleichung (4.16), bestimmt werden. Die Strahlrichtung wurde dabei in  $z$ -Richtung festgelegt. In der ZF $\mu$ SR findet die Beobachtung auch in dieser Richtung statt, somit muß nun die Komponente  $p_\mu^z(t)$  der zeitabhängigen Myonspinpolarisation  $\vec{p}_\mu(t)$  bestimmt werden. Diese ist gegeben durch

$$\begin{aligned} p_\mu^z(t) &= \frac{1}{4} \frac{1}{P_\mu(0)} p_\mu^z(0) \sum_{m,n} \exp(i \omega_{mn} t) \cdot \frac{\sum_{i,j} c_{jn}^* c_{im} \langle \chi_j | \sigma^z | \chi_i \rangle}{\sum_{k,l} c_{km}^* c_{ln} \langle \chi_k | \sigma^z | \chi_l \rangle} \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{P_\mu(0)} p_\mu^z(0) \sum_{n,m} \exp(i \omega_{mn} t) \cdot |S_{mn}^{\text{ZF}}|^2 \end{aligned} \quad (4.29)$$

mit

$$\begin{aligned} S_{mn}^{\text{ZF}} &= \sum_{i,j} c_{jm}^* c_{in} \langle \chi_j | \sigma^z | \chi_i \rangle \\ &= c_{1m}^* c_{1n} - c_{2m}^* c_{2n} + c_{3m}^* c_{3n} - c_{4m}^* c_{4n} , \end{aligned} \quad (4.30)$$

wobei  $c_{ij}^*$  die komplexe Konjugation von  $c_{ij}$  bezeichnet und die Koeffizienten  $c_{ij}$  gemäß Gleichung (4.5) definiert sind.

Mit  $p_\mu^z(t)$  ist nun die im ZF $\mu$ SR-Experiment beobachtbare zeitabhängige Myonspinpolarisation gegeben. Unter Berücksichtigung der Tatsache, daß  $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$  und somit  $\cos(\omega_{mn} t) = \cos(\omega_{nm} t)$  gilt, sowie  $|S_{mn}^{\text{ZF}}|^2 = |S_{nm}^{\text{ZF}}|^2$  erfüllt ist, läßt sich obige Gleichung für die im Experiment beobachtbare Myonspinpolarisation  $p_\mu^z(t)$  in der Form

$$p_\mu^z(t) = \sum_{n \geq m} a_{mn} \cdot \cos(\omega_{mn} t) \quad (4.31)$$

darstellen, wobei die Amplituden  $a_{mn}$  durch

$$a_{mn} = \frac{1}{4} \frac{1 + \delta_{mn}}{P_\mu(0)} p_\mu^z(0) \cdot |S_{mn}^{\text{ZF}}|^2 \quad (4.32)$$

bestimmt sind. Bei der Berechnung der im Experiment beobachtbaren Amplitude eines Präzessionssignals müssen auch hier wieder die äquivalenten Gitterplätze des Myons berücksichtigt werden. Die beobachtbare Amplitude ergibt sich durch Mittelung über die

Amplituden, welche für die verschiedenen Hauptachsenrichtungen bestimmt werden. In Tabelle 9.4, Seite 116, sind die Amplituden für verschiedene Hauptachsenrichtungen einer axialsymmetrischen Myonspezies in Abhängigkeit der Probenorientierung angegeben.

Bei anisotropen Hyperfeintensoren ist die Beobachtbarkeit der Präzessionsfrequenzen im Nullfeld, wie bereits erwähnt, unter Umständen orientierungsabhängig. Diese Tatsache kann ausgenutzt werden, um neben den Hyperfeinparametern auch die Lage der Hauptachsenrichtung einer Myonspezies zu bestimmen. In Kapitel 9 wird davon bei der Bestimmung des Hyperfeintensors der Spezies  $\text{Mu}_V$  Gebrauch gemacht.

# Kapitel 5

## Berechnung der Quenching-Kurven

Die LFQ-Methode wurde bereits in Kapitel 2.5 vorgestellt. Die Meßgröße ist die zeitgemittelte Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}(B_a)$  in Abhängigkeit des von außen angelegten Magnetfelds  $B_a$ . Daraus läßt sich, gemäß Kapitel 2.5.1, die zeitgemittelte Myonspinpolarisation  $P_\mu(B_a)$  bestimmen. Die zeitgemittelte Myonspinpolarisation  $P_\mu(B_a)$ , als Funktion des angelegten Magnetfelds, wird als „Quenching“-Kurve bezeichnet. Derartige Kurven werden in diesem Kapitel für die unterschiedlichen Myonspezies, unter Einbeziehung von Spinaustauschprozessen sowie Übergängen zwischen verschiedenen Myonspezies, berechnet. Die so erhaltenen Quenching-Kurven  $P_\mu(B_a)$  werden zur Anpassung an die experimentellen Daten verwendet, siehe Kapitel 2.6.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnte anhand von LFQ-Untersuchungen die Spezies  $\text{Mu}_V$  identifiziert werden. Das bisher existierende Modell zur Beschreibung von Quenching-Kurven, welches die Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  beinhaltet, muß also um diese Spezies erweitert werden. Dieses erweiterte Modell wird in Kapitel 5.3 beschrieben. In der Literatur wurde bei der Herleitung der Quenching-Kurven bisher nur der Fall eines axialsymmetrischen Hyperfeintensors betrachtet (ODERMATT 1988, MEIER 1982). A priori ist jedoch unklar, welche Symmetrie der Hyperfeintensor einer weiteren Spezies besitzen wird. Daher wird das in der Literatur beschriebene Modell hier für den Fall eines allgemeinen Hyperfeintensors durchgerechnet. Bei Einschränkung auf axialsymmetrische Hyperfeintensoren ergeben sich natürlich genau die in der Literatur beschriebenen Bestimmungsgleichungen der Quenching-Kurven.

Zur Bestimmung der Quenching-Kurven  $P_\mu(B_a)$  soll nun wie folgt vorgegangen werden. Zuerst betrachten wir in Kapitel 5.1 den rein statischen Fall für die drei bisher bekannten Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$ . Der Einfachheit halber gehen wir davon aus, daß jeweils nur eine einzige Spezies zu 100 % vorhanden ist und diese keinerlei dynamischen Prozessen unterliegt; falls mehrere Spezies gleichzeitig vorliegen, aber keine Reaktionen zwischen den Spezies stattfinden, kann man die Quenching-Kurve durch Überlagerung der Einzelbeiträge, gewichtet mit den jeweiligen Bildungswahrscheinlichkeiten, erhalten. Die Fallunterscheidung der einzelnen Spezies erfolgt erst nach Ableitung der allgemeinen Bestimmungsgleichung zur Berechnung der Quenching-Kurve  $P_\mu(B_a)$  für einen beliebigen Hyperfeintensor der Myonspezies. Auf diese ganz allgemein gehaltene Ableitung kann

bei der Erweiterung des Modells in Kapitel 5.3 direkt zurückgegriffen werden. In einem nächsten Schritt (Kapitel 5.2) sollen dann dynamische Prozesse, wie Elektronenspinaustausch oder Übergänge zwischen verschiedenen Myonspezies berücksichtigt werden. Dabei wird das bisher in der Literatur existierende Modell (ODERMATT 1988, MEIER 1982) so erweitert, daß die die verschiedenen Myonspezies beschreibenden Hyperfeintensoren beliebige Symmetrien besitzen dürfen.

In Kapitel 5.3 werden wir die Erweiterung des bis dahin vorgestellten Modells um eine weitere Spezies vorstellen. Dabei werden auch alle zugehörigen dynamischen Prozesse einbezogen. Als Beispiel für die weitere Spezies werden die Quenching-Kurven für die Spezies  $\text{Mu}_V$  mit den aus den Experimenten bestimmten Hyperfeinparametern, siehe Kapitel 9, vorgestellt.

## 5.1 Das statische Modell

Die Charakterisierung eines Modells als statisch besagt hier, daß weder Übergänge zwischen verschiedenen Myonspezies noch Spinaustauschprozesse stattfinden; der die Myonspezies beschreibende Spin-Hamilton-Operator soll keine fluktuierenden Kopplungen oder Felder enthalten. Da keine Kopplung zwischen verschiedenen Myonspezies besteht, kann man jede Spezies getrennt untersuchen und, falls gleichzeitig mehrere Myonspezies vorliegen, die resultierenden Quenching-Kurven durch gewichtete Überlagerung erhalten. Die zeitliche Entwicklung der Spinzustände der unterschiedlichen Myonspezies ist im beschriebenen statischen Fall dann durch den zeitunabhängigen Hamilton-Operator in Gleichung (3.1) bestimmt.

Führt man, wie in Gleichung (4.2), die Pauli-Spinoperatoren  $\vec{\sigma}$  des Myons und  $\vec{\tau}$  des Elektrons und weiterhin die Vektoren  $\vec{\omega}_\mu = \gamma_\mu \vec{B}_a$ ,  $\vec{\omega}_e = \gamma_e \vec{B}_a$  ein, so erhält man aus Gleichung (3.1)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} h \vec{\sigma} \mathbf{A} \vec{\tau} - \frac{1}{2} \hbar \vec{\omega}_\mu \vec{\sigma} + \frac{1}{2} \hbar \vec{\omega}_e \vec{\tau}, \quad (5.1)$$

wobei die allgemeinste Form des Hyperfeintensors einer Myonspezies in Hauptachsenform durch

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_x & 0 & 0 \\ 0 & A_y & 0 \\ 0 & 0 & A_z \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

gegeben ist. Dieser Hyperfeintensor  $\mathbf{A}$  wird im weiteren Verlauf zur Ableitung der Myonspinpolarisation  $P_\mu$  verwendet. Damit ist sichergestellt, daß keinerlei Einschränkung bzgl. der Symmetrie des Hyperfeintensors besteht. Erst nach erfolgter Ableitung der Myonspinpolarisation  $P_\mu$  werden die einzelnen Spezies separat betrachtet.

Die Hyperfeintensoren für die bekannten Myonspezies  $\text{Mu}_T$ ,  $\text{Mu}_{BC}$  und als Grenzfall  $\mu^d$  ergeben sich hieraus durch Spezialisierung wie folgt

$$\begin{aligned} \text{Mu}_{BC} &: A_x = A_y = A_\perp, A_z = A_\parallel, \gamma_e \neq 0, \hat{z} \parallel \langle 111 \rangle, \\ \text{Mu}_T &: A_x = A_y = A_z = A, \gamma_e \neq 0, \\ \mu^d &: A_x = A_y = A_z = 0, \gamma_e = 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

In der LFQ-Methode ist das äußere angelegte Magnetfeld  $\vec{B}_a$  parallel zur Myonspinrichtung. Legt man das Koordinatensystem so fest, daß der Myonspin in  $z$ -Richtung polarisiert ist, dann läßt sich das äußere Magnetfeld als  $\vec{B}_a = (0, 0, B_a)$  darstellen. Diese Wahl der  $z$ -Achse definiert das Laborsystem. Bisher waren die Hyperfeintensoren im jeweiligen Hauptachsensystem gegeben. Die weitere Ableitung geschieht jedoch im Laborsystem. Die Hyperfeintensoren müssen daher vom Hauptachsensystem ins Laborsystem transformiert werden. Im Laborsystem besitzt der Hyperfeintensor dann die Form

$$\mathbf{A}_{\text{Labor}} = \begin{pmatrix} A_{xx} & A_{xy} & A_{xz} \\ A_{xy} & A_{yy} & A_{yz} \\ A_{xz} & A_{yz} & A_{zz} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

wobei die Einträge  $A_{ij}$  von den Parametern  $A_x$ ,  $A_y$  und  $A_z$  sowie der Lage des Hauptachsensystems relativ zum Laborsystem abhängen.

Die Ableitung der Myonspinpolarisation  $P_\mu(B)$  geschieht im Rahmen des Dichtematrixformalismus. Eine allgemeine Form für die Dichtematrix  $\rho(t)$  des Myon-Elektron-Systems wurde bereits in Kapitel 4, Gleichung (4.8), angegeben. Die Anfangsbedingung für die Dichtematrix  $\rho(0)$  wurde ebenfalls bereits in Kapitel 4, Gleichung (4.12), vorgestellt, dabei ist zu beachten, daß zum Implantationszeitpunkt lediglich der Myonspin, jedoch nicht der Elektronenspin, polarisiert ist.

Die Bewegungsgleichung für die Dichtematrix ist wieder die von Neumann-Gleichung (4.13), d. h.

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [\mathcal{H}, \rho(t)]. \quad (5.5)$$

Drückt man die Dichtematrix  $\rho(t)$  gemäß Gleichung (4.8) durch die Spinpolarisationsvektoren  $\vec{p}_\mu(t)$ ,  $\vec{p}_e(t)$  und  $p^{ij}(t)$  der reinen und gemischten Zustände von Myon und Elektron aus und setzt diese in Gleichung (5.5) ein, so erhält man gekoppelte Bewegungsgleichungen für die oben genannten Spinpolarisationsvektoren. Diese lassen sich durch Einführung eines 15-dimensionalen Vektors  $\vec{P}(t)$  kompakter darstellen. Dieser Vektor  $\vec{P}(t)$  setzt sich aus je drei Komponenten des Myonspins  $P^{i0}$  ( $p_\mu^i$ ) und des Elektronenspins  $P^{0j}$  ( $p_e^j$ ) sowie den neun möglichen Mischzuständen  $P^{ij}$  ( $p^{ij}$ ) zusammen. Es gilt

$$\vec{P}(t) = (P^{10}(t), P^{20}(t), P^{30}(t), P^{01}(t), P^{02}(t), P^{03}(t), P^{11}(t), P^{12}(t), \dots, P^{33}(t)). \quad (5.6)$$

Die Bewegungsgleichungen für die einzelnen Komponenten dieses Spinpolarisationsvektors lassen sich dann in der Form

$$\begin{aligned} \dot{P}^{i0}(t) &= \sum_{k,l} \varepsilon_{ikl} \left( \frac{1}{2} \sum_m A_{km} P^{lm} - \omega_\mu^k P^{l0} \right), \\ \dot{P}^{0j}(t) &= \sum_{k,l} \varepsilon_{ikl} \left( \frac{1}{2} \sum_m A_{mk} P^{ml} - \omega_e^k P^{0l} \right), \\ \dot{P}^{ij}(t) &= \sum_{k,l,m} \varepsilon_{ikl} \delta_{mj} \left( \frac{1}{2} A_{km} P^{l0} - \omega_\mu^k P^{lm} \right) \\ &\quad + \sum_{k,l,m} \varepsilon_{jkl} \delta_{mi} \left( \frac{1}{2} A_{mk} P^{0l} + \omega_e^k P^{ml} \right) \end{aligned} \quad (5.7)$$

schreiben. Dabei beschreibt  $\varepsilon_{ijk}$  den total antisymmetrischen Einheitstensor. Diese Gleichungen lassen sich auch in kompakter Form als

$$\dot{\vec{P}}(t) = \mathbf{M} \vec{P}(t) \quad (5.8)$$

darstellen, wobei die Matrix  $\mathbf{M}$  sowohl vom äußeren Magnetfeld  $B_a$ , der Lage des Hauptachsensystems der Myonspezies relativ zum Laborsystem als auch von den Hyperfeinparametern  $A_x, A_y$  und  $A_z$  der jeweiligen Spezies abhängt. Die Matrix  $\mathbf{M}$  ist in Anhang C angegeben. Bei isotroper Hyperfeinwechselwirkung, d. h. der Spezies  $\text{Mu}_T$ , ist das Gleichungssystem (5.8) in zwei unabhängige Gleichungssysteme entkoppelt. Für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist dies der Fall, sofern die Hauptachse des Hyperfeintensors parallel oder senkrecht zur Magnetfeldrichtung und damit zur Myonspinrichtung im Strahl ausgerichtet ist (ODERMATT 1988). Dies entspricht den Bedingungen, unter welchen für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  analytische Lösungen der Myonspinpolarisation existieren (MEIER 1982). Die Lösung des Differentialgleichungssystems (5.8) liefert unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung

$$\vec{P}(0) = (0, 0, 1, 0, \dots, 0), \quad (5.9)$$

d. h. für einen Myonstrahl, der zum Zeitpunkt der Implantation der Myonen ( $t = 0$ ) in die Probe vollständig in  $z$ -Richtung polarisiert ist, die zeitabhängigen Komponenten des Polarisationsvektors  $\vec{P}(t)$ .

Die Detektoren sind bei der LFQ-Methode in Strahlrichtung bzw. entgegen der Strahlrichtung angeordnet (d. h. in  $\pm z$ -Richtung). Die beobachtbare Myonzerfallsasymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$  und damit die daraus nach Normierung bestimmbare Myonspinpolarisation  $P_\mu$  entspricht daher genau der  $z$ -Komponente des Myonspinpolarisationsvektors  $p_\mu^z$ , d.h. der Komponente  $P^{30}$  des Polarisationsvektors. Es ist also ausreichend, die  $z$ -Komponente des Myonspinvektors, d. h.,  $P^{30}$  aus Gleichung (5.8), zu bestimmen. Die weiteren Komponenten sind dem Experiment unzugänglich. Weiterhin werden die LFQ-Daten üblicherweise nur zeitintegral ausgewertet, d. h. lediglich die zeitgemittelte und mit der Wahrscheinlichkeit, daß das Myon zur Zeit  $t$  noch nicht zerfallen ist, gewichtete Myonspinpolarisation  $\langle P^{30} \rangle$  wird beobachtet. Diese sogenannte zeitgemittelte Myonspinpolarisation  $\langle P^{30} \rangle$  bestimmt sich aus der zeitabhängigen Komponente des Polarisationsvektors  $P^{30}(t)$  gemäß

$$\langle P^{30} \rangle = \frac{\int_0^\infty dt e^{-t/\tau_\mu} P^{30}(t)}{\int_0^\infty dt e^{-t/\tau_\mu}}. \quad (5.10)$$

Diese Größe  $\langle P^{30} \rangle$  stellt die im Experiment direkt aus der Vorwärts-Rückwärts-Asymmetrie  $a_{\text{LFQ}}$  bestimmbare effektive Myonspinpolarisation dar und soll im folgenden mit  $P_\mu$  bezeichnet werden.

$$P_\mu := \langle P^{30} \rangle. \quad (5.11)$$

Zur Berechnung der zeitgemittelten Myonspinpolarisation  $P_\mu$  bedienen wir uns der Laplace-Transformation. Die 15-dimensionale Differentialgleichung (5.8) läßt sich mittels Laplace-Transformation in ein 15-dimensionales lineares Gleichungssystem überführen. Die Laplacetransformierte  $\mathcal{F}$  einer zeitabhängigen Größe  $F(t)$  ist durch

$$\mathcal{F}(\lambda) = \int_0^\infty dt F(t) e^{-\lambda t} \quad (5.12)$$

mit dem Laplace-Parameter  $\lambda$  definiert. Die gesuchte Größe  $\langle P^{30} \rangle$  ist direkt durch  $\mathcal{P}^{30}(\lambda = 1/\tau_\mu)$  bestimmt. Die Laplace-Transformation der Differentialgleichung (5.8) mit dem Laplace-Parameter  $\lambda = 1/\tau_\mu$  führt auf das lineare Gleichungssystem

$$\left( \mathbf{M} - \frac{1}{\tau_\mu} \mathbf{I} \right) \vec{\mathcal{P}} \left( \lambda = \frac{1}{\tau_\mu} \right) = \vec{P}(0), \quad (5.13)$$

wobei die gemäß (5.10) berechnete zeitgemittelte Polarisation  $\langle \vec{P} \rangle = 1/\tau_\mu \cdot \vec{\mathcal{P}}(1/\tau_\mu)$  ist. Die oft aufwendige Laplace-Rücktransformation entfällt daher. Aus obiger Gleichung ergibt sich daher die folgende Beziehung für den zeitgemittelten Polarisationsvektor  $\langle \vec{P} \rangle$



$$\langle \vec{P} \rangle = - \left( \mathbf{M} - \frac{1}{\tau_\mu} \mathbf{I} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{\tau_\mu} \cdot \vec{P}(0). \quad (5.14)$$

Die im Experiment beobachtete Myonspinpolarisation  $P_\mu$  ist die dritte Komponente  $\langle P^{30} \rangle$  der Gleichung (5.14). Die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  hängt sowohl von der Stärke des äußeren Magnetfelds  $B_a$  als auch von den Hyperfeinparametern  $A_x, A_y$  und  $A_z$  ab, d. h.

$$P_\mu = P_\mu(B_a, A_x, A_y, A_z). \quad (5.15)$$

Die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  für die unterschiedlichen Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  läßt sich anhand von Gleichung (5.14) bestimmen, wenn man die in Gleichung (5.3) angegebenen Spezialisierungen berücksichtigt.

Im folgenden sollen die entsprechenden Ergebnisse vorgestellt werden. Die Quenching-Kurven sind in Abbildung 5.1 dargestellt.

Für  $\mu^d$  ist die Myonspinpolarisation dank nicht vorhandener Hyperfeinwechselwirkung magnetfeldunabhängig. Sie ist für ein mit einem longitudinalen äußeren Magnetfeld wechselwirkendes Myon identisch Eins.

Im Falle von  $\text{Mu}_T$  ergibt sich die analytische Lösung

$$P_\mu = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{x^2}{1+x^2} = \frac{1+2x^2}{2+2x^2}, \quad (5.16)$$

welche bereits 1960 von FERRELL und Mitarbeitern (1960) angegeben wurde, wobei  $x = B_a/B_0$  mit  $B_0 = 2\pi A/(\gamma_\mu + \gamma_e)$  ein dimensionsloses Magnetfeld darstellt. Im Nullfeld ist die zeitgemittelte Myonspinpolarisation genau 50 %. Dies liegt in der Tatsache begründet, daß die Elektronen in der Probe nicht spinpolarisiert sind. Das Myon kann somit mit gleicher Wahrscheinlichkeit eine Bindung mit einem Elektron mit Spinrichtung in Myonspinrichtung bzw. entgegen der Myonspinrichtung eingehen. Nur bei gleicher Myon- und Elektronspinrichtung liegt ein Eigenzustand des Systems vor, d. h. es tritt keine zeitliche Entwicklung und damit keine Änderung der Myon- bzw. Elektronspinorientierung auf. Im anderen Fall treten Hyperfeinoszillationen auf, und die mittlere Myonspinpolarisation in Beobachtungsrichtung verschwindet. Im Nullfeld trägt also nur die Hälfte des gebildeten  $\text{Mu}_T$  zur zeitgemittelten Spinpolarisation bei, und nur 50 % des maximal möglichen Signals sind daher beobachtbar. Bei steigendem Magnetfeld findet eine immer stärkere Entkopplung zwischen der Bewegung von Myonspin und Elektronspin statt. Die Myonspins werden immer mehr in ihrer anfänglichen Richtung parallel zum äußeren Magnetfeld festgehalten, wodurch die beobachtbare Myonspinpolarisation ansteigt.

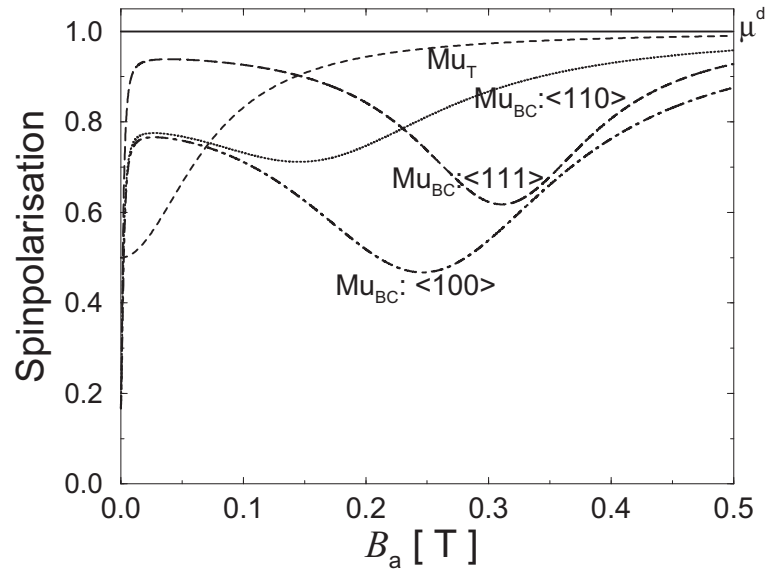


Abbildung 5.1: Quenching-Kurven  $P_\mu(B_a)$  der Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$ . Für  $Mu_{BC}$  sind die drei Magnetfeldrichtungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$  berücksichtigt.

Im Falle von  $Mu_{BC}$  existiert im allgemeinen keine analytische Lösung. Nur in Spezialfällen ist eine analytische Lösung für die Myonspinpolarisation möglich. Dies ist der Fall, sofern der Winkel zwischen Hauptachse des Hyperfeintensors und Myonspinrichtung im Strahl, welche der Magnetfeldrichtung entspricht, 0 Grad oder 90 Grad beträgt (MEIER 1982). Für  $Mu_{BC}$  muß außerdem noch berücksichtigt werden, daß vier äquivalente Gitterplätze für das Myon mit unterschiedlichen Orientierungen der Hauptachsen des Hyperfeintensors existieren. Für die äquivalenten Orientierungen ist der Winkel zwischen Hauptachse des Hyperfeintensors und Magnetfeld unterschiedlich, und es ergeben sich somit vier verschiedene Polarisationsfunktionen  $P_\mu$ . Für die Durchführung der Rechnungen empfiehlt sich die Transformation des Hyperfeintensors in ein gemeinsames Koordinatensystem, das Laborsystem. Solange keine Störung der kubischen Symmetrie des Siliziumgitters vorliegt, ist keine der vier äquivalenten Orientierungen ausgezeichnet. Somit wird im Experiment eine gleichgewichtete Mittelung über alle vier Polarisationsfunktionen beobachtet. Diese bereits gemittelten Kurven sind in Abbildung 5.1 eingezeichnet. Aufgrund der Anisotropie der Hyperfeinwechselwirkung von  $Mu_{BC}$  ergeben sich je nach Orientierung des äußeren Magnetfeldes unterschiedliche Quenching-Kurven. Diese besitzen für  $Mu_{BC}$  ein charakteristisches lokales Minimum der Polarisation, dessen Lage und Gestalt wegen der Anisotropie der Hyperfeinwechselwirkung von der Magnetfeldrichtung abhängt. In Abbildung 5.1 sind die Quenching-Kurven für  $Mu_{BC}$  für drei verschiedene Magnetfeldrichtungen zusammen mit den orientierungsunabhängigen Kurven von  $Mu_T$  und  $\mu^d$  eingezeichnet. Dabei wurde von jeweils 100 % Bildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies ausgegangen.

Eine gemeinsame Eigenschaft aller Polarisationskurven ist die Zunahme der Myonspinpolarisation bei höheren Magnetfeldern. Bei kleinen Magnetfeldern dominiert die Hyperfeinwechselwirkung zwischen Myon- und Elektronspin, wodurch der Myonspin (und der Elektronspin) im zeitlichen Mittel aus der Beobachtungsrichtung herausgedreht wird. Dies

macht sich in einer verringerten Myonspinpolarisation in Magnetfeldrichtung bemerkbar. Je geringer die Hyperfeinkopplungsparameter sind, um so schneller wird die Entkopplung erreicht. Die Quenching-Kurven von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zeigen bereits bei kleineren Magnetfeldern einen steileren Anstieg als diejenige von  $\text{Mu}_{\text{T}}$ . Bereits 1966 wurde von Eisenstein und Mitarbeitern (EISENSTEIN 1966) ein steiler Anstieg der Polarisation bei kleinen Magnetfeldern ( $B_{\text{a}} < 10$  mT) beobachtet, wie er typisch für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist. Dieser steile Anstieg blieb damals jedoch unverstanden, denn die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  wurde erst 1973 mittels  $\text{TF}\mu\text{SR}$  identifiziert (BREWER 1973).

Aus den experimentell bestimmten LFQ-Kurven lassen sich die Hyperfeinparameter der verschiedenen Myonspezies nur schwer bestimmen. Meist ist es nur möglich, die Größenordnung der Hyperfeinparameter abzuschätzen. Dies liegt darin begründet, daß die Gestalt der Quenching-Kurven auch stark durch dynamische Prozesse beeinflusst wird (siehe Kapitel 5.2), und sich die gemessenen LFQ-Kurven außerdem aus einer Überlagerung der Signale sämtlicher in der Probe vorhandener Myonspezies ergibt.

### Überlagerung mehrerer statischer Myonspezies

Bisher sind wir davon ausgegangen, daß jeweils nur eine einzige Myonspezies zu 100 % in der Probe gebildet wird und das Myon von der Implantation bis zum Zerfall in dieser Spezies verweilt. Dies entspricht natürlich nicht der Realität. Bei den LFQ-Experimenten werden alle in der Probe vorhandenen Spezies gleichzeitig beobachtet. Die im Experiment bestimmte Myonspinpolarisation  $P_{\mu}$  besteht somit, solange keine Übergänge zwischen verschiedenen Myonspezies stattfinden, aus einer Überlagerung der Myonspinpolarisationsfunktionen der einzelnen Spezies jeweils gewichtet mit deren Bildungswahrscheinlichkeit. Es gilt

$$P_{\mu}(B) = f_{\mu^{\text{d}}} \langle P^{30} \rangle_{\text{Mu}^{\text{d}}} + f_{\text{Mu}_{\text{T}}} \langle P^{30} \rangle_{\text{Mu}_{\text{T}}} + f_{\text{Mu}_{\text{BC}}} \langle P^{30} \rangle_{\text{Mu}_{\text{BC}}} , \quad (5.17)$$

wobei  $f_{\mu^{\text{d}}}$ ,  $f_{\text{Mu}_{\text{T}}}$  und  $f_{\text{Mu}_{\text{BC}}}$  die Bildungswahrscheinlichkeiten der jeweiligen Spezies zum Implantationszeitpunkt ( $t = 0$ ) bezeichnen. Unter Umständen müssen noch weitere Spezies einbezogen werden. Zugunsten einer expliziten Notation verzichten wir hier jedoch auf die Einführung weiterer Spezies, so daß die Bedingung

$$f_{\mu^{\text{d}}} + f_{\text{Mu}_{\text{T}}} + f_{\text{Mu}_{\text{BC}}} = 1 \quad (5.18)$$

erfüllt sein muß. Sie besagt, daß sich jedes Myon in genau einer der Spezies  $\mu^{\text{d}}$ ,  $\text{Mu}_{\text{T}}$  oder  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  befindet. Mit diesem einfachen Modell lassen sich schon viele experimentell bestimmten LFQ-Kurven befriedigend anpassen, obwohl bisher noch keinerlei dynamische Prozesse, wie z. B. Übergänge zwischen den einzelnen Spezies, berücksichtigt wurden. Die Beobachtbarkeit dynamischer Prozesse stellt jedoch den Hauptvorteil der LFQ-Methode dar. Daher wird das bisher vorgestellte statische Modell im folgenden Kapitel um dynamische Prozesse erweitert.

## 5.2 Das dynamische Modell

Als dynamische Prozesse sollen hier Spinaustauschprozesse und Übergänge zwischen den einzelnen Spezies berücksichtigt werden. Diese Prozesse sollen in das oben beschriebene statische Modell zur LFQ-Methode integriert werden.

### Spinaustausch-Prozesse

Zuerst betrachten wir den Spinaustauschprozeß der Elektronen. Dieser wurde bereits 1963 von NOSOV und Mitarbeitern (1963) diskutiert. Es wird davon ausgegangen, daß es aufgrund von Stößen zu einem Austausch des gebundenen Elektrons und damit verbunden zu einem Spinwechsel des gebundenen Elektrons kommt. Hierdurch werden die quantenmechanischen Zustandsvektoren abrupt geändert, was in der von Neumann-Gleichung für die Dichtematrix durch Übergänge zwischen den verschiedenen Elementen der Dichtematrix erfaßt werden kann (MAJOR 1997). Vereinfacht kann man diesen Effekt durch eine Dämpfung der Elektronenspinpolarisation beschreiben (IVANTER 1968, MEIER 1982). Diese Dämpfung der Elektronenspinpolarisation wird phänomenologisch in die Bewegungsgleichungen (5.7) des Polarisationsvektors einbezogen und zwar nur in den elektronenbeteiligten Komponenten  $P^{0j}$  und  $P^{ij}$ . Unter Berücksichtigung der Elektronenspinaustauschrates  $\nu$  lauten die modifizierten Bewegungsgleichungen des Polarisationsvektors  $\vec{P}(t)$  wie folgt

$$\begin{aligned}\dot{\check{P}}^{i0}(t) &= \dot{P}^{i0}(t) , \\ \dot{\check{P}}^{0j}(t) &= \dot{P}^{0j}(t) - 2\nu P^{0j}(t) , \\ \dot{\check{P}}^{ij}(t) &= \dot{P}^{ij}(t) - 2\nu P^{ij}(t) .\end{aligned}\tag{5.19}$$

Dies führt zu einer modifizierten Matrix  $\tilde{\mathbf{M}}$  im Vergleich zu der in Gleichung (5.8) definierten Matrix  $\mathbf{M}$ . Diese modifizierte Matrix ist wie bisher von der Stärke des äußeren Magnetfelds  $B_a$ , den Hyperfeinparametern  $A_x, A_y$  und  $A_z$  der Myonspezies und nun zusätzlich noch von der Elektronenspinaustauschrates  $\nu$  abhängig, so daß gilt

$$\tilde{\mathbf{M}} = \tilde{\mathbf{M}}(B_a, A_x, A_y, A_z, \nu).\tag{5.20}$$

Für die beiden paramagnetischen Spezies  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  existiert jeweils eine modifizierte Matrix  $\tilde{\mathbf{M}}_{\text{Mu}_T}$  bzw.  $\tilde{\mathbf{M}}_{\text{Mu}_{BC}}$  mit den Spinaustauschrates  $\nu_{\text{Mu}_T}$  bzw.  $\nu_{\text{Mu}_{BC}}$ . Die Matrix von  $\mu^d$  bleibt, aufgrund der nicht vorhandenen Wechselwirkung mit Elektronen, unverändert. Sie soll hier jedoch der Übersichtlichkeit halber mit  $\tilde{\mathbf{M}}_{\mu^d}$  bezeichnet werden. Damit ist der Prozeß des Elektronenspinaustausches in das im vorigen Kapitel beschriebene statische Modell integriert. Es ergibt sich eine zu Gleichung (5.8) analoge Differentialgleichung mit den modifizierten Matrizen  $\tilde{\mathbf{M}}$ . Die Berechnung der Myonspinpolarisation  $P_\mu$  erfolgt analog zum statischen Modell mittels Laplace-Transformation und Matrixinvertierung,

vergleiche dazu Gleichung (5.8) bis (5.14). Für die graphische Darstellung der Änderung der Quenching-Kurven in Abhängigkeit der Elektronenspinaustauschrate  $\nu$  der Spezies  $\text{Mu}_T$  bzw.  $\text{Mu}_{BC}$  sei auf IWANOWSKI (1994) verwiesen.

### Übergänge zwischen verschiedenen Spezies

Als weitere dynamische Prozesse sollen Übergängen zwischen den verschiedenen Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  in Betracht gezogen werden. Es existieren sechs mögliche Übergänge zwischen den einzelnen Spezies, wie in Abbildung 5.2 eingezeichnet. Zu deren Beschreibung werden sechs Übergangsraten  $\Delta_{ij}$  benötigt. Die einzelnen Myonspezies können nun nicht mehr separat betrachtet werden, sondern die sie beschreibenden Differentialgleichungssysteme sind miteinander gekoppelt.

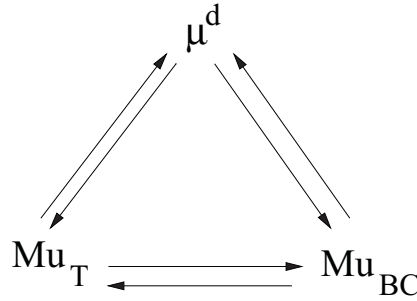


Abbildung 5.2: Mögliche Übergänge zwischen den einzelnen Myonspezies.

Bei drei Spezies –A, B und C– setzt sich die Änderung der beobachtbaren Polarisation der Spezies A zusammen aus der Polarisationsänderung dieser Spezies aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung sowie der Wechselwirkung mit dem angelegten Magnetfeld gemäß Gleichung (5.8), abzüglich der Polarisation, welche durch Umwandlung in die Spezies B bzw. C verloren geht. Dafür ergibt sich aus den Übergängen von B bzw. C nach A ein Polarisationsgewinn entsprechend der Polarisation der Vorläuferspezies B bzw. C. Damit läßt sich die gekoppelte Bewegungsgleichung der Polarisationsvektoren  $\vec{P}_A$ ,  $\vec{P}_B$  und  $\vec{P}_C$  darstellen als

$$\begin{pmatrix} \dot{\vec{P}}_A \\ \dot{\vec{P}}_B \\ \dot{\vec{P}}_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{M}}_A - \Delta_{AB}\mathbf{I} - \Delta_{AC}\mathbf{I} & \Delta_{BA}\mathbf{R} & \Delta_{CA}\mathbf{R} \\ \Delta_{AB}\mathbf{R} & \tilde{\mathbf{M}}_B - \Delta_{BA}\mathbf{I} - \Delta_{BC}\mathbf{I} & \Delta_{CB}\mathbf{R} \\ \Delta_{AC}\mathbf{R} & \Delta_{BC}\mathbf{R} & \tilde{\mathbf{M}}_C - \Delta_{CA}\mathbf{I} - \Delta_{CB}\mathbf{I} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{P}_A \\ \vec{P}_B \\ \vec{P}_C \end{pmatrix},$$

wobei  $\vec{P}_A$  den Polarisationsvektor der Spezies A beschreibt, analog für die Spezies B und C. Die Spezies A, B und C werden mit den Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  identifiziert.

Sofern die Elektronenspinpolarisation beim Übergang zwischen zwei Spezies erhalten bleibt, bezeichnet  $\mathbf{R}$  die 15-dimensionale Einheitsmatrix. Im Falle des vollständigen Polarisationsverlusts des Elektronenspins (die Spinpolarisation des Myons bleibt weiterhin erhalten) gilt  $R_{11} = R_{22} = R_{33} = 1$ , während alle anderen Komponenten Null sind, vergleiche

hierzu auch (IWANOWSKI 1994, ODERMATT 1988, MEIER 1982, SCHEUERMANN 1995). Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde vom vollständigen Polarisationsverlust des Elektronspins ausgegangen.

Durch Einführung eines 45-dimensionalen Polarisationsvektors  $\vec{P}$  mit

$$\vec{P} = (\vec{P}_A, \vec{P}_B, \vec{P}_C) \quad (5.21)$$

läßt sich das obige gekoppelte Differentialgleichungssystem in kompakter Form darstellen als

$$\dot{\vec{P}} = \mathbf{M}_{\text{dyn}} \cdot \vec{P}. \quad (5.22)$$

Die 45-dimensionale Matrix  $\mathbf{M}_{\text{dyn}}$  ist nun sowohl vom äußeren Magnetfeld  $B_a$ , den Hyperfeinparametern  $A_x^i, A_y^i$  und  $A_z^i$  der einzelnen Spezies, den Spinaustauschraten  $\nu_i$  sowie den Übergangsraten  $\Delta_{ij}$  abhängig, d.h.

$$\mathbf{M}_{\text{dyn}} = \mathbf{M}_{\text{dyn}}(B_a, A_x^i, A_y^i, A_z^i, \nu_i, \Delta_{ij}). \quad (5.23)$$

Die Summe der Komponenten der Gesamtpolarisation  $\vec{P}$  ist auf Eins festgelegt. Daher müssen die Anfangsbedingungen  $\vec{P}_A(0)$ ,  $\vec{P}_B(0)$  und  $\vec{P}_C(0)$  mit den Bildungswahrscheinlichkeiten  $f_A, f_B$  und  $f_C$ , z. B.  $f_{\mu^d}$ ,  $f_{\text{MuT}}$  und  $f_{\text{MuBC}}$ , der jeweiligen Spezies, welche die Bedingung  $f_{\mu^d} + f_{\text{MuT}} + f_{\text{MuBC}} = 1$  erfüllen, multipliziert werden.

Die Differentialgleichung des Polarisationsvektors  $\vec{P}$  ist analog zu Gleichung (5.8) des statischen Modells, statt eines 15-dimensionalen Polarisationsvektors ist nun jedoch ein 45-dimensionaler Polarisationsvektor zu betrachten. Die Differentialgleichung läßt sich, wie bereits in Kapitel 5.1 beschrieben, mit Hilfe von Laplace-Transformation und Matrixinvertierung lösen, vergleiche Gleichung (5.8) bis (5.14). Als Lösung ergibt sich der 45-dimensionale zeitgemittelte Polarisationsvektor  $\langle \vec{P} \rangle$ . Die beobachtbare Myonspinpolarisation ergibt sich daraus zu

$$P_\mu = \langle P^{30} \rangle_A + \langle P^{30} \rangle_B + \langle P^{30} \rangle_C, \quad (5.24)$$

d. h., die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  ist die Summe der Myonspinpolarisationen der einzelnen Spezies. Die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  ist, wie die Matrix  $\mathbf{M}_{\text{dyn}}$ , von der Stärke des äußeren Magnetfelds  $B_a$ , den Hyperfeinparametern  $A_x^i, A_y^i$  und  $A_z^i$  der einzelnen Spezies, den Elektronenspinaustauschraten  $\nu_i$  sowie den Übergangsraten  $\Delta_{ij}$  abhängig, wobei  $i$

die einzelnen Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  beschreibt. Des weiteren ist  $P_\mu$  noch von den Bildungswahrscheinlichkeiten  $f_i$  der einzelnen Spezies abhängig, d. h., es gilt

$$P_\mu = P_\mu(B, A_x^i, A_y^i, A_z^i, f_i, \nu_i, \Delta_{ij}). \quad (5.25)$$

Die hier abgeleitete Quenching-Kurve  $P_\mu(B_a)$  dient nun als Grundlage zur Anpassung an die Meßdaten. Für die graphische Darstellung der Änderung der Quenching-Kurven in Abhängigkeit der verschiedenen Übergangsraten sei auf SCHMIDL (1997) und IWANOWSKI (1994) verwiesen. Durch Anpassung der Quenching-Kurve an die Meßdaten lassen sich die freien Parameter  $f_i, \nu_i$  und  $\Delta_{ij}$  des Modells bestimmen. Auf das prinzipielle Vorgehen bei der Anpassung der Quenching-Kurve an die experimentell bestimmten LFQ-Kurven wurde bereits in Kapitel 2.6 eingegangen.

### 5.3 Um $\text{Mu}_V$ erweitertes Modell

Das bisherige dynamische Modell zur Berechnung der Quenching-Kurven soll in diesem Kapitel um eine zusätzliche paramagnetische Spezies erweitert werden. Es wird sich herausstellen, daß diese weitere Spezies die Spezies  $\text{Mu}_V$  sein wird, deren Hyperfeinparameter in Kapitel 3 schon kurz beschrieben wurden und welche anhand der in Kapitel 9 vorgestellten Messungen identifiziert werden konnte. Die Behandlung der weiteren Spezies  $\text{Mu}_V$  im Rahmen des bisher vorgestellten Modells soll bereits hier diskutiert werden, damit das entsprechend erweiterte Modell bei der Auswertung der Meßdaten bereits zur Verfügung steht.

Die Vorgehensweise zur Ableitung der Myonspinpolarisation  $P_\mu$  des erweiterten Modells ist analog zu derjenigen in den vorhergehenden Kapiteln. Zuerst soll der statische Fall (100 % Bildungswahrscheinlichkeit der weiteren Spezies) betrachtet werden. Daran wird sich die Behandlung der zugehörigen dynamischen Prozesse anschließen.

#### Statisches Modell

Der Polarisationsvektor  $\langle \vec{P} \rangle$  aus Gleichung (5.14) muß mit der in Anhang C gegebenen Matrix  $\mathbf{M}$ , nun mit den Hyperfeinparametern der Spezies  $\text{Mu}_V$ , mittels Matrixinvertierung berechnet werden, vgl. Kapitel 5.1. Ganz analog zu den bisherigen statischen Modellen läßt sich die Myonspinpolarisation für 100 % Bildungswahrscheinlichkeit dieser Spezies mit allgemeiner Hyperfeinwechselwirkung, bzw. für  $\text{Mu}_V$ , bestimmen.

Wie für  $\text{Mu}_{BC}$  ist zu beachten, daß über die äquivalenten Gitterplätze des Myons gemittelt werden muß. Es ist wieder keiner dieser äquivalenten Gitterplätze ausgezeichnet. Die Anzahl der äquivalenten Gitterplätze ist je nach Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors unterschiedlich. Für eine Hauptachsenrichtung des Hyperfeintensors entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung existieren drei äquivalente Gitterplätze, für die  $\langle 110 \rangle$ -Richtung sechs und für die  $\langle 111 \rangle$ -Richtung vier äquivalente Gitterplätze. Bei der Spezies  $\text{Mu}_V$ , welche eine

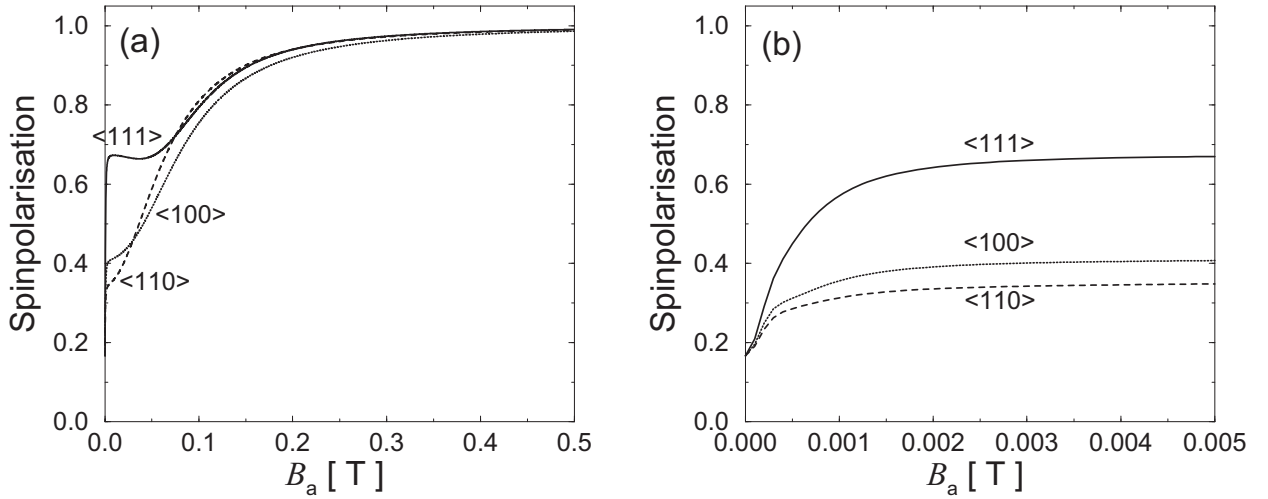


Abbildung 5.3: Quenching-Kurven der Myonspezies  $Mu_V$  (a) im Magnetfeldbereich bis 0,5 T (b) Ausschnittvergrößerung des Magnetfeldbereichs bis 0,005 T für die drei Magnetfeldrichtungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  und  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$ .

Hauptachsenrichtung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung besitzt, siehe Kapitel 3 und 9, sind somit sechs äquivalente Gitterplätze zu berücksichtigen. Die über die Gitterplätze gemittelten Polarisationsfunktionen sind wieder orientierungsabhängig. Für die Myonspinpolarisation gilt

$$P_\mu = P_\mu(B_a, A_x, A_y, A_z). \quad (5.26)$$

Verwendet man für  $Mu_V$  die später in Kapitel 9 experimentell bestimmten, und in Kapitel 3 bereits vorweggenommenen, Werte der Hyperfeinparameter  $A_x$ ,  $A_y$  und  $A_z$ , mit Hauptachse in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung, so erhält man nach Mittelung über die sechs äquivalenten Richtungen die in Abbildung 5.3 dargestellten Polarisationsfunktionen, welche von der Richtung des äußeren Magnetfelds abhängig sind. Die Orientierungsabhängigkeit der Quenching-Kurven ist eine Folge der Anisotropie der Spezies  $Mu_V$ . Zum Vergleich sind in Abbildung 5.4 die Kurven für  $\mu^d$ ,  $Mu_T$ ,  $Mu_{BC}$  und  $Mu_V$  für eine Magnetfeldrichtung angegeben.

In den Abbildungen 5.3(b) und 5.4(b) sind Ausschnittvergrößerungen des steilen Anstiegsbereichs bei kleinen Magnetfeldern gezeigt. In Abbildung 5.4(b) ist deutlich erkennbar, daß die Kurven für  $Mu_V$  einen steileren Anstieg bei sehr kleinen Magnetfeldwerten besitzen als diejenigen der Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  oder  $Mu_{BC}$ . Des weiteren ist in Abbildung 5.4(a) zu erkennen, daß sich die Quenching-Kurve von  $Mu_V$  im Magnetfeldbereich oberhalb von 0,1 T kaum von der für  $Mu_T$  unterscheidet. Ein Nachweis der Spezies  $Mu_V$  muß somit bei kleinen Magnetfeldwerten erfolgen.



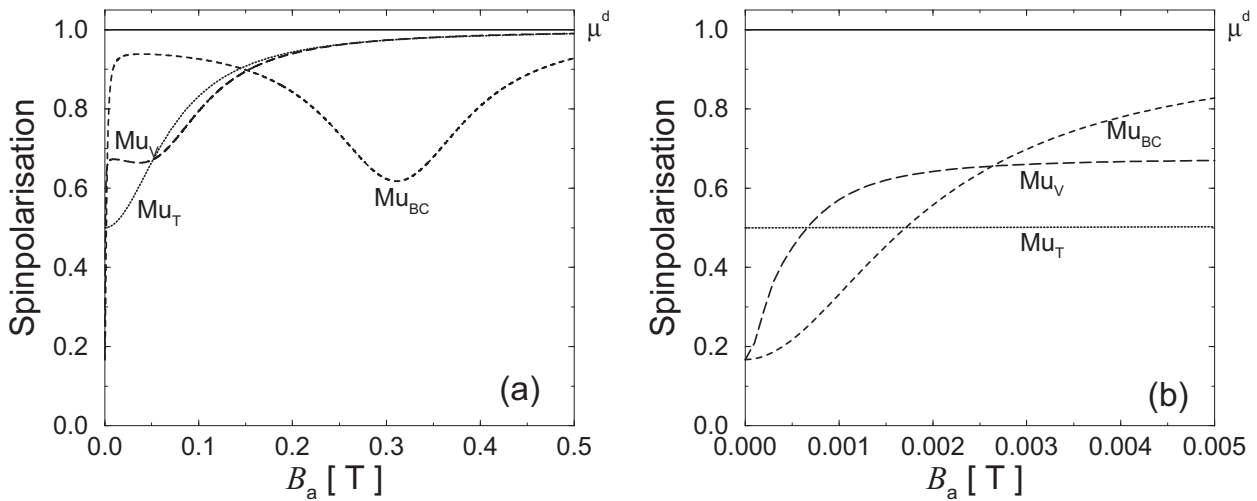


Abbildung 5.4: Quenching-Kurven der Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$ ,  $Mu_{BC}$  und  $Mu_V$  (a) im Magnetfeldbereich bis 0,5 T (b) Ausschnittvergrößerung des Magnetfeldbereichs bis 0,005 T. Im Falle von  $Mu_{BC}$  und  $Mu_V$  ist die Magnetfeldrichtung  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$  dargestellt.

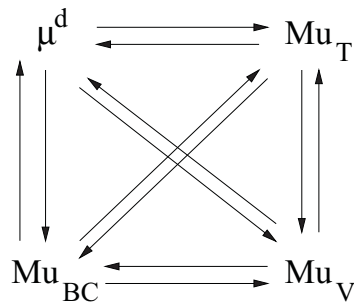


Abbildung 5.5: Mögliche Übergänge zwischen den einzelnen Myonspezies unter Einbeziehung einer weiteren Myonspezies, z. B.  $Mu_V$ , mit allgemeinem Hyperfeintensor.

## Dynamisches Modell

Eine allgemeine paramagnetische Spezies, z.B.  $Mu_V$ , soll nun in das existierende, derzeit die drei Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  berücksichtigende, dynamische Modell integriert werden, vgl. Kapitel 5.2. Dabei ist zu beachten, daß die Spezies mit allgemeinem Hyperfeintensor sowohl Spinaustauschprozessen als auch Übergängen zu oder von anderen Spezies unterliegen kann. Unter Einbeziehung der Spinaustauschprozesse mit Austauschrate  $\nu$  erhält man, analog zu Kapitel 5.2, eine modifizierte Matrix  $\tilde{\mathbf{M}}_{\text{allg}}$  dieser allgemeinen Spezies. Es sind nun Übergänge zwischen vier unterschiedlichen Myonspezies zu berücksichtigen, womit sich zwölf mögliche Übergangsraten ergeben, siehe Abbildung 5.5.

Der 45-dimensionale Polarisationsvektor  $\vec{P}$  aus Gleichung (5.21) des dynamischen Modells wird nun zu einem 60-dimensionalen Vektor

$$\vec{P} = (\vec{P}_A, \vec{P}_B, \vec{P}_C, \vec{P}_D) \quad (5.27)$$

erweitert, wobei der Index D für die weitere Spezies mit allgemeinem Hyperfeintensor, bzw.  $Mu_V$ , steht. Es ergibt sich, analog zu Kapitel 5.2, folgendes Differentialgleichungssystem für den 60-dimensionalen Polarisationsvektor  $\vec{P}$

$$\dot{\vec{P}} = \mathbf{M}_{\text{erw}} \vec{P} \quad (5.28)$$

mit

$\mathbf{M}_{\text{erw}} =$

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{M}}_A - \Delta_{AB}\mathbf{I} \\ -\Delta_{AC}\mathbf{I} - \Delta_{AD}\mathbf{I} \end{pmatrix} & \Delta_{BA}\mathbf{R} & \Delta_{CA}\mathbf{R} & \Delta_{DA}\mathbf{R} \\ \Delta_{AB}\mathbf{R} & \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{M}}_B - \Delta_{BA}\mathbf{I} \\ -\Delta_{BC}\mathbf{I} - \Delta_{BD}\mathbf{I} \end{pmatrix} & \Delta_{CB}\mathbf{R} & \Delta_{DB}\mathbf{R} \\ \Delta_{AC}\mathbf{R} & \Delta_{BC}\mathbf{R} & \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{M}}_C - \Delta_{CA}\mathbf{I} \\ -\Delta_{CB}\mathbf{I} - \Delta_{CD}\mathbf{I} \end{pmatrix} & \Delta_{DC}\mathbf{R} \\ \Delta_{AD}\mathbf{R} & \Delta_{BD}\mathbf{R} & \Delta_{CD}\mathbf{R} & \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{M}}_D - \Delta_{DA}\mathbf{I} \\ -\Delta_{DB}\mathbf{I} - \Delta_{DC}\mathbf{I} \end{pmatrix} \end{pmatrix},$$

wobei mit A, B, C und D die Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$ ,  $Mu_{BC}$  sowie  $Mu_V$  bezeichnet werden. Dabei beschreibt  $\tilde{\mathbf{M}}_D$  die um die Elektronenspinaustauschrate  $\nu_D$  erweiterte Matrix  $\mathbf{M}_D$  der Spezies mit allgemeiner Hyperfeinwechselwirkung, bzw.  $Mu_V$ .

Die Summe aller Komponenten von  $\vec{P}$  ist auf Eins festgelegt. Die Anfangsbedingungen  $\vec{P}_A(0), \vec{P}_B(0), \vec{P}_C(0)$  und  $\vec{P}_D(0)$  müssen daher mit den Bildungswahrscheinlichkeiten  $f_A, f_B, f_C$  und  $f_D$  der jeweiligen Spezies multipliziert werden, wobei die Bedingung  $f_A + f_B + f_C + f_D = 1$  erfüllt sein muß. Das 60-dimensionale Differentialgleichungssystem des Polarisationsvektors  $P$  läßt sich, wie bereits in Kapitel 5.1 beschrieben, mittels Laplace-Transformation und Matrixinvertierung lösen, vergleiche Gleichung (5.8) bis (5.14). Daraus ergibt sich eine Lösung für den zeitgemittelten Polarisationsvektor  $\langle \vec{P} \rangle$ . Die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  ist nun die Summe über die entsprechenden Komponenten des zeitgemittelten Polarisationsvektors  $\langle \vec{P} \rangle$

$$P_\mu = \langle P^{30} \rangle_A + \langle P^{30} \rangle_B + \langle P^{30} \rangle_C + \langle P^{30} \rangle_D, \quad (5.29)$$

d. h., die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  ist die Summe der Myonspinpolarisationen der einzelnen Spezies. Diese sind durch die Übergangsraten miteinander gekoppelt. Über die Anfangsbedingung werden die Polarisationsbeiträge der Spezies mit den Bildungswahrscheinlichkeiten der jeweiligen Spezies gewichtet.

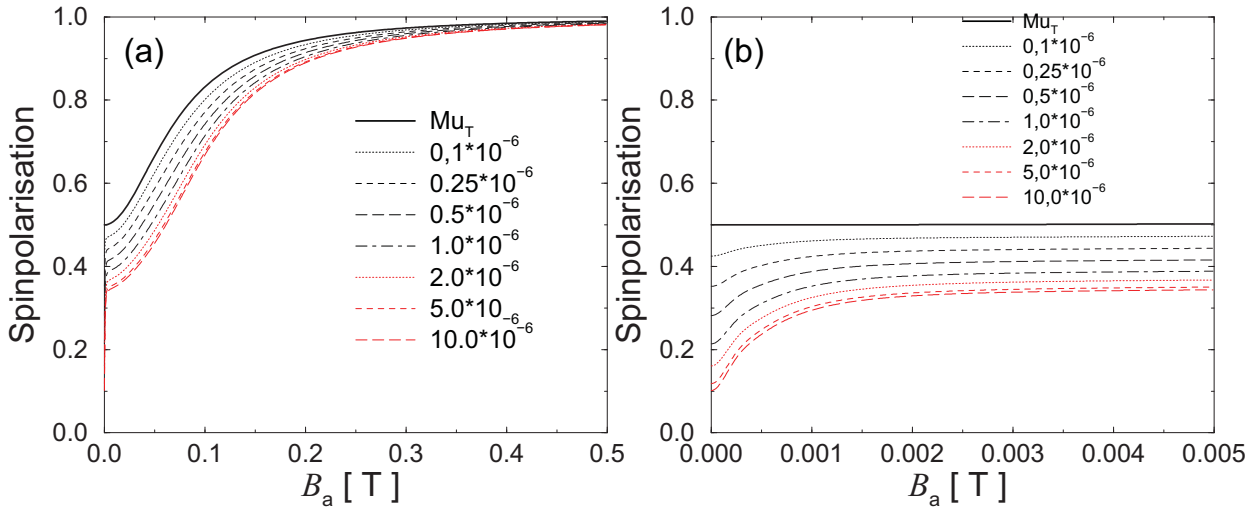


Abbildung 5.6: Quenching-Kurven (a) im Magnetfeldbereich bis 0,5 T (b) Ausschnittvergrößerung des Magnetfeldbereichs bis 0,005 T in Abhängigkeit der Übergangsrate  $\Delta_{BD}$  von  $Mu_T$  nach  $Mu_V$  bei 100 % Bildungswahrscheinlichkeit von  $Mu_T$  für die Magnetfeldorientierung  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$ .

Die Myonspinpolarisation hängt nun im allgemeinsten Fall vom äußeren angelegten Magnetfeld  $B_a$ , den Hyperfeinparametern  $A_x^i, A_y^i$  und  $A_z^i$ , den Spinaustauschraten  $\nu_i$ , den Bildungswahrscheinlichkeiten  $f_i$  der einzelnen Spezies sowie den Übergangsraten  $\Delta_{ij}$  ab. Es gilt

$$P_\mu = P_\mu(B_a, A_x^i, A_y^i, A_z^i, f_i, \nu_i, \Delta_{ij}). \quad (5.30)$$

Dabei bezeichnet  $i$  die Spezies  $\mu^d, Mu_T, Mu_{BC}$  und  $Mu_V$ .

In Abbildung 5.6 sind als Beispiel die Polarisationsfunktionen für eine anfängliche Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $Mu_T$  von 100 % in Abhängigkeit der Übergangsrate von  $Mu_T$  nach  $Mu_V$  dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, wie sich die Kurve mit zunehmender Übergangsrate immer mehr von der statischen Quenching-Kurve des  $Mu_T$  entfernt und die Charakteristik der Quenching-Kurve von  $Mu_V$  annimmt. Dies ist insbesondere in der Ausschnittvergrößerung für kleine Magnetfeldwerte deutlich erkennbar.

Damit ist das dynamische Modell um eine weitere Spezies mit allgemeiner Hyperfeinwechselwirkung, und damit insbesondere um die Spezies  $Mu_V$ , erweitert worden. Dieses Modell wird nun zur Anpassung an die Meßdaten verwendet, wobei die Hyperfeinparameter, auch die der weiteren Spezies, als gegeben vorausgesetzt werden. Die Bildungswahrscheinlichkeiten  $f_i$ , die Spinaustauschraten  $\nu_i$  der vier Myonpezies sowie die Übergangsraten  $\Delta_{ij}$  zwischen den vier Myonpezies sind die aus dem Experiment bestimmbaren Parameter. Die Anpassung der Modellfunktion für die Myonspinpolarisation  $P_\mu$  an die Meßdaten wurde bereits prinzipiell in Kapitel 2.6 beschrieben.

# Kapitel 6

## Probencharakterisierung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Siliziumproben unterschiedlicher Dotierung mit verschiedenen  $\mu$ SR-Methoden untersucht. Die Proben und ihre Merkmale sind in diesem Kapitel zusammengestellt. Es handelt sich um kommerziell hergestellte Siliziumeinkristalle, welche entweder nach dem Zonenreinigungsverfahren (FZ) oder dem Czochralski-Verfahren (CZ) gezogen wurden. Sämtliche Proben wurden uns freundlicherweise von der Firma Wacker Siltronic AG in Burghausen zur Verfügung gestellt. Die Kristalle wurden in der Abteilung Kristallpräparation des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung auf die von uns benötigte Größe von  $25 \times 25 \times 2,5 \text{ mm}^3$  zugeschnitten. Desweiteren wurde die Oberfläche der Proben chemisch poliert. Die für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Experimente verwendeten Myonen besitzen einen Impuls von ca.  $35 \text{ MeV}/c$  und dringen damit ca.  $750 \text{ }\mu\text{m}$  in die Probe ein. Um in beiden Myonzählern (FW, BW) annähernd gleiche Asymmetrien zu erhalten, sollten die Myonen möglichst in der Mitte der Probe gestoppt werden, weshalb eine Probendicke von  $2,5 \text{ mm}$  gewählt wurde. Die Fläche von  $25 \times 25 \text{ mm}^2$  ist durch den vorhandenen Probenhalter bestimmt. Bei den in den Tabellen angegebenen Konzentrationen elektrisch aktiver Störstellen handelt es sich um die von der Firma Wacker Siltronic AG zur Verfügung gestellten Daten. Einige der Proben wurden freundlicherweise von Herrn Prof. Weber am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung zusätzlich mittels Photolumineszenz untersucht. Die daraus gewonnenen Ergebnisse der Dotieratomkonzentrationen stimmen sehr gut mit den in den Tabellen angegebenen Werten überein.

Die Proben können sowohl in transversaler Geometrie, d. h. für  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimente, als auch in longitudinaler Geometrie, d. h. für  $\text{LFQ}$ - und  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Experimente, verwendet werden. Die Proben wurden in der Abteilung Kristallpräparation des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung so aus den gelieferten Kristallen herausgeschnitten, daß die Normalen der Oberflächen ( $25 \times 25 \text{ mm}^2$ ) der Proben, bezogen auf die Kristallachse, eine niedrig indizierte Orientierung besitzen. Diese Orientierung der Oberflächennormalen ist in der letzten Spalte von Tabelle 6.1 angegeben. Die Proben werden bei allen  $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen so eingebaut, daß die Anfangsspinnpolarisation der Myonen und damit auch die Strahlrichtung parallel zu dieser Oberflächennormale ausgerichtet ist. Bei der  $\text{LFQ}$ -Methode ist das äußere Magnetfeld parallel zur Strahlrichtung und somit parallel

Proben- bezeichnung	Zieh- verfahren	Dotieratom- konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	Sauerstoff- konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	TF $\mu$ SR $B_a \parallel$ zu	LF $\mu$ SR $B_a \parallel$ zu
42772/02	FZ	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$1,4 \cdot 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
42772/02	FZ	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$1,4 \cdot 10^{15}$	$\langle 112 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
42772/02	FZ	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$1,4 \cdot 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
Si(int)	FZ	$< 2,75 \cdot 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
Si(int)	FZ	$< 2,75 \cdot 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
Si(int)	FZ	$< 2,75 \cdot 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
47079/6	FZ	$4,0 \cdot 10^{11}$ [P]	$2,7 \cdot 10^{16}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
Si(i)	FZ	$3,0 \cdot 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
Si:B	FZ	$1,0 \cdot 10^{16}$ [B]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
39762/05	FZ	$1,0 \cdot 10^{16}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
Si:P	FZ	$5,0 \cdot 10^{15}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$

Tabelle 6.1: *Eigenschaften der untersuchten Proben. FZ: Zonenreinigungsverfahren, CZ: Czochralski-Verfahren.*

zur Orientierung der Oberflächennormale ausgerichtet. Bei der ZF $\mu$ SR-Methode ist lediglich die Anfangsmyonspinrichtung, welche immer parallel zur Oberflächennormalen ist, die ausgezeichnete Richtung. In der TF $\mu$ SR-Methode ist das äußere Magnetfeld senkrecht zur Strahlrichtung und damit senkrecht zur Richtung der Oberflächennormalen ausgerichtet. Das Magnetfeld ist somit entlang einer anderen kristallographischen Richtung ausgerichtet, welche allerdings auch eine niedrig indizierte Richtung darstellen sollte. Diese Richtung ist ebenfalls in Tabelle 6.1 in der vorletzten Spalte eingetragen. Zum Teil wurden an mehreren aus einem Kristall präparierten Proben mit verschiedenen kristallographischen Orientierungen parallel zum transversalen Magnetfeld Messungen durchgeführt.

Zur besseren Übersicht ist die Auflistung der Proben nach den verwendeten  $\mu$ SR-Methoden unterteilt. Die in Tabelle 6.1 aufgenommenen Proben wurden mittels LFQ untersucht. Hierbei ist neben den Konzentrationen von Fremdatomen ebenfalls die kristallographische Orientierung des Magnetfelds für transversale und longitudinale Geometrie angegeben. Mittels TF $\mu$ SR wurden 21 Proben unterschiedlicher Dotierung und mit verschiedenen Sauerstoffkonzentrationen untersucht. Deren Eigenschaften sind zusammen mit den daran erhaltenen Ergebnissen in Kapitel 7, Tabelle 7.1, Seite 74, dargestellt.

Proben- bezeichnung	Dotieratom- konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	TF $\mu$ SR $B_a \parallel zu$	LF $\mu$ SR $B_a \parallel zu$	Bestrahlungs- dosis [e <sup>-</sup> /cm <sup>2</sup> ]
39762/05-E1	$1,0 \cdot 10^{16}$ [P]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$1,21 \cdot 10^{18}$
39762/05-E2	$1,0 \cdot 10^{16}$ [P]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	—
42772/02-E1	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$1,14 \cdot 10^{18}$
42772/02-E2	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$1,28 \cdot 10^{17}$
42772/02-E3	$8,15 \cdot 10^{11}$ [P]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	—

Tabelle 6.2: Probencharakteristik der elektronenbestrahlten Proben mit zugehöriger Bestrahlungsdosis.

## Elektronenbestrahlung

Zur gezielten Erzeugung von Leerstellen wurden einige Proben am Stuttgarter Dynamitron mit Elektronen der Energie 2,5 MeV bei 77 K bestrahlt. Die von uns standardmäßig verwendeten Proben ( $25 \times 25 \times 2,5 \text{ mm}^3$ ) waren für den dortigen Probenhalter allerdings zu groß. Somit mußten die für die Elektronenbestrahlung verwendeten Proben speziell präpariert werden. Sie durften maximal eine Größe von  $13 \times 8 \times 1 \text{ mm}^3$  aufweisen. Es wurden zwei Proben unterschiedlicher Dotierung hierzu verwendet, die Probe 39762/05 sowie 42772/02. In der Kristallpräparation des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung wurden Plättchen der Größe  $13 \times 8 \times 1 \text{ mm}^3$  herausgeschnitten. Es handelt sich z. B. bei den Proben 39762/02 sowie 39762/02-E1 und 39762/02-E2 zwar um verschiedene Proben, welche jedoch alle aus dem gleichen Kristall geschnitten wurden. Die Konzentration der Verunreinigungen ist in diesen drei Proben identisch; die Ergänzung E1 bzw. E2 bezieht sich auf die veränderte Probengröße für die Elektronenbestrahlung und die Bestrahlungsdosis, siehe Tabelle 6.2. Damit die Myonen ungefähr in der Mitte der Probe stoppen, wurden jeweils zwei Plättchen übereinander gelegt, um eine Probendicke von 2 mm zu erreichen. Zur besseren Haftung der Plättchen wurden deren Oberflächen geläppt. Eine mittels  $\mu$ SR untersuchte Probe setzt sich aus vier Plättchen zusammen, welche alle gleichzeitig und damit unter gleichen Bedingungen bestrahlt wurden. Dadurch ist eine Probengröße von immerhin  $16 \times 13 \times 2 \text{ mm}^3$  erreichbar, im Vergleich zu der üblichen Probengröße von  $25 \times 25 \times 2,5 \text{ mm}^3$ . Die Probenbezeichnungen sowie die Bestrahlungsdosen sind in Tabelle 6.2 eingetragen. Es wurde jeweils ein Satz von 4 Plättchen je Probe bestrahlt bzw. für Vergleichsmessungen unbestrahlt gelassen. Auch diese Referenzproben sind in Tabelle 6.2 aufgenommen. Ein Eintrag in Tabelle 6.2 bezieht sich immer auf 4 äquivalente Plättchen, welche unter gleichen Bedingungen bestrahlt wurden.

Die Bestrahlungsdosis der Proben wurde so gewählt, daß die Konzentration der durch Bestrahlung erzeugten Leerstellen in der dotierten Probe 39762/05 in der gleichen Größenordnung wie die Dotieratomkonzentration liegt. Die Produktionsrate für Leerstellen liegt

in Silizium bei ca.  $0,01 \text{ cm}^{-1}$  (WATKINS 1975), womit laut Tabelle 6.2 die obige Bedingung erfüllt ist. Die undotierte Probe 42772/02 wurde mit der gleichen Dosis wie die dotierte Probe sowie mit einer etwas geringeren Dosis bestrahlt, siehe Tabelle 6.2. Die Proben wurden nach der Bestrahlung für einige Wochen in flüssigem Stickstoff bei einer Temperatur von 77 K gelagert, bevor sie mittels  $\mu\text{SR}$  am PSI untersucht werden konnten. Die Lagerung in flüssigem Stickstoff ist aufgrund der hohen Diffusivität der Leerstellen in Silizium notwendig, um das Ausheilen der bestrahlungs-induzierten Leerstellen zu verhindern. Um die Probe bei einer Temperatur von 77 K in den Kryostaten einbauen zu können, wurde ein spezieller Kupfer-Probenhalter (siehe Anhang A) konstruiert, womit die Temperatur der Probe während des Einbaus unterhalb 80 K gehalten werden konnte.

# Kapitel 7

## Entdeckung und Charakterisierung der Spezies $\text{Mu}_X$

### 7.1 Experimentelle Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die systematischen  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen, welche zur Identifikation einer neuen Myonspezies  $\text{Mu}_X$  führten, beschrieben werden. In  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimenten werden unterschiedliche Präzessionssignale beobachtet, welche sich einzelnen Myonspezies zuordnen lassen. Aus den Amplituden dieser Präzessionssignale lassen sich die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies bestimmen. Die Relaxationsraten liefern Auskunft über die Beteiligung der jeweiligen Spezies an dynamischen Prozessen, wie z.B. Elektronen-Spinaustausch-Prozessen oder Übergängen zwischen den einzelnen Myonspezies.

Unsere Untersuchungen hatten das Ziel, den Einfluß der Dotierung (mit Bor oder Phosphor) oder des Sauerstoffgehalts auf die Präzessionssignale der verschiedenen Myonspezies zu studieren. Zu diesem Zweck wurden  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimente an einer Vielzahl einkristalliner Siliziumproben durchgeführt.

Um einen ersten Überblick zu gewinnen wurden die Messungen zunächst jeweils nur bei der Temperatur von 5 K und bei einer festen Stärke des äußeren Magnetfelds  $B_a$  von 4 mT durchgeführt. Die gewählte Magnetfeldorientierung war bei den meisten Proben  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ , manche Proben wurden darüberhinaus auch bei  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  untersucht, einige wenige nur für  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ . Für eine einzige Probe, die Probe 42772/02, liegen Messungen für die drei Orientierungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  und  $\vec{B}_a \parallel \langle 112 \rangle$  vor.

Vorrausgesetzt, daß alle bisher für kristallines Silizium bekannten Myonspezies an einer speziellen Probe auch tatsächlich beobachtet werden können, erwartet man bei  $B_a = 4$  mT zwei Präzessionssignale bei 54,2 MHz und 57,4 MHz (unabhängig von der Orientierung von  $\vec{B}_a$ ) die von der Spezies  $\text{Mu}_T$  herrühren, weiterhin drei deutliche  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale für  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  bzw. zwei deutliche Signale für  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ , sowie ein  $\mu^d$ -Signal bei etwa 0,55 MHz. Zusätzliche  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ - oder  $\text{Mu}_T$ -Signale können zwar im Prinzip auftreten, sie



sind aber entweder schwach ( $\text{Mu}_{\text{BC}}$ ) oder liegen bei extrem hohen Frequenzen ( $\text{Mu}_{\text{T}}$ ), so daß sie bei Standard-TF $\mu$ SR-Experimenten (typische Ereigniszahl, keine extrem gute Zeitauflösung wie in stroboskopischen Experimenten) kaum beobachtbar oder gänzlich unbeobachtbar sind.

Bei TF $\mu$ SR-Messungen an z. B. der Probe Si(int) werden auch ganz genau die erwarteten Signale gefunden. Dies zeigen die in Abbildung 7.2 dargestellten Fourierspektren der bei  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  bzw.  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  bestimmten Zeithistogramme. Jede der beobachteten Linien kann hier klar einer der Spezies  $\text{Mu}_{\text{T}}$  oder  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  in der in Abbildung 7.2 angedeuteten Weise zugeordnet werden, die  $\mu^{\text{d}}$ -Linie liegt weit unterhalb des dargestellten Frequenzfensters.

Mit einer einzigen Ausnahme lassen sich auch die Linien in den entsprechenden für die Probe 42772/02 bestimmten Fourierspektren klar den Spezies  $\text{Mu}_{\text{T}}$ ,  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  oder  $\mu^{\text{d}}$  zuordnen, siehe Abbildung 7.1. Die Linie bei ca. 25 MHz, in Abbildung 7.1 mit  $\text{Mu}_X$  bezeichnet, die im bei  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  aufgenommenen Fourierspektrum gefunden wird, läßt sich jedoch nicht so klar zuordnen. Es ist auch zu betonen, daß diese Linie im entsprechenden Fourierspektrum der bereits besprochenen sehr ähnlich dotierten Probe Si(int) völlig fehlt, während sich die an beiden Proben gemessenen Spektren ansonsten sehr ähnlich sind.

Etwas undurchsichtig wird die Sachlage dadurch, daß  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  für  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  und  $B_a = 4$  mT im Prinzip ein Präzessionssignal mit einer Frequenz von 24,7 MHz liefert, die sehr gut zur fraglichen Linie passen würde (siehe Tabelle 4.1, Seite 46). Die Amplitude dieses Präzessionssignals sollte aber um etwa einen Faktor zehn kleiner sein, als die der drei anderen bereits zugeordneten  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung 7.1(a), daß das noch nicht zugeordnete Präzessionssignal eine vergleichbare Stärke besitzt, wie die klar der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zuzuordnenden Signale. Noch klarer wird dies, wenn man die in Tabelle 7.3 angegebenen Asymmetrien und Dämpfungen betrachtet, die sich ergeben, wenn man Funktionen der Form wie Gleichung (2.4), Seite 18, an die für die beiden diskutierten Proben bei  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  ( $B_a = 4$  mT,  $T = 5$  K) erhaltenen Zeithistogramme anpasst. (Die Zahl der in Gleichung (2.4) auftretenden Frequenzen wird hier gleich der Zahl der im Fourierspektrum klar sichtbaren Linien gesetzt.) Tabelle 7.3 zeigt auch, daß alle Amplituden und Dämpfungen der sicher identifizierten  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Linien in den beiden Proben sehr ähnlich sind. Ein davon völlig abweichendes Verhalten der im Prinzip vorhandenen weiteren  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Linie bei 24,7 MHz wäre nur schwer zu verstehen.

Die in den letzten Paragraphen diskutierten Gründe führen uns nun zu der Auffassung, daß das oben beschriebene noch nicht identifizierte Präzessionssignal, welches im folgenden als  $\text{Mu}_X$ -Signal bezeichnet wird, einer bisher unbekanntem paramagnetischen Myonspezies, die wir  $\text{Mu}_X$  nennen, zuzuordnen ist. Bereits an dieser Stelle bemerken wir, daß das  $\text{Mu}_X$ -Signal auf keinen Fall der später beschriebenen neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  zugeschrieben werden kann. Diese Spezies liefert bei  $B_a = 4$  mT definitiv kein TF $\mu$ SR-Signal mit dieser Frequenz.

Um weitere Informationen über die Spezies  $\text{Mu}_X$  zu erhalten, werden wir zunächst versuchen Korrelationen zwischen den Eigenschaften der zahlreichen untersuchten Proben einerseits und den Amplituden und Dämpfungen der verschiedenen Präzessionssignale andererseits herzustellen. Insbesondere wird uns beschäftigen unter welchen Bedingungen

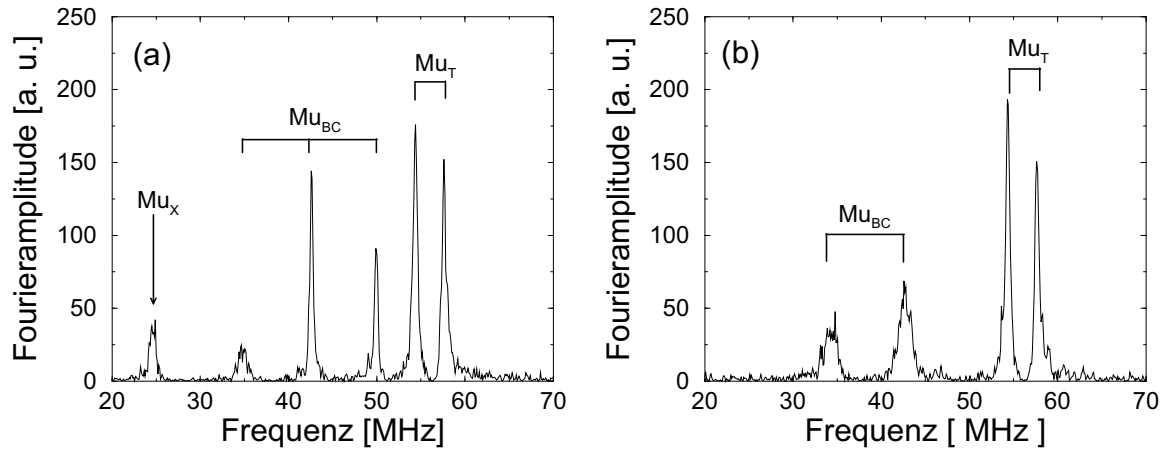


Abbildung 7.1: *Fourierspektrum der Forward-TF $\mu$ SR-Histogramme, aufgenommen an der Probe 42772/02 bei  $T = 5$  K und  $B_a = 4$  mT mit (a)  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  bzw. (b)  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ . Die auftretenden Präzessionsfrequenzen sind den einzelnen Myonspezies zugeordnet.*

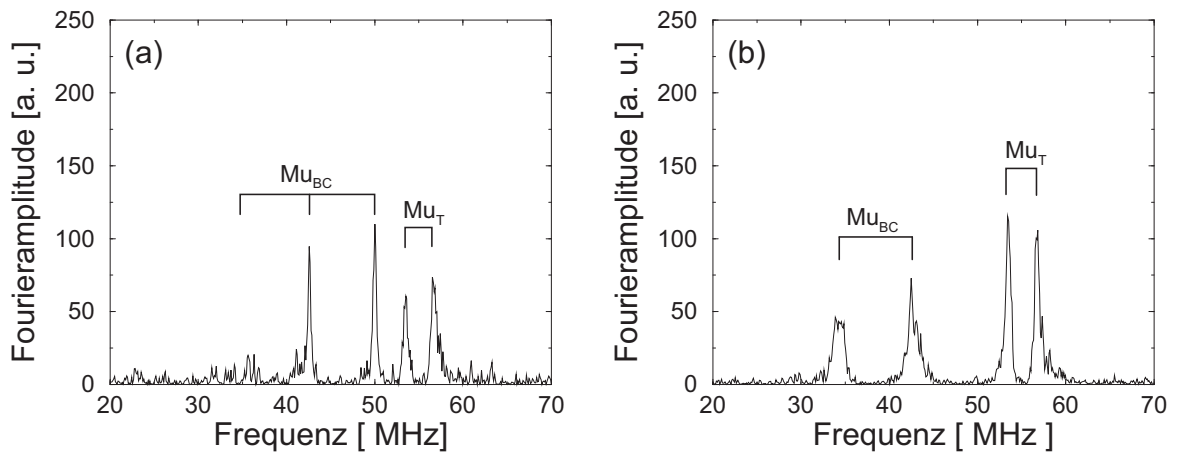


Abbildung 7.2: *Fourierspektrum der Forward-TF $\mu$ SR-Histogramme, aufgenommen an der Probe Si(int) bei  $T = 5$  K und  $B_a = 4$  mT mit (a)  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  bzw. (b)  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ . Die auftretenden Präzessionsfrequenzen sind den einzelnen Myonspezies zugeordnet.*

Proben- bezeichnung	Zieh- verfahren	Dotieratom- konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	Sauerstoff- konzentration [cm <sup>-3</sup> ]	Orientierung von $\vec{B}_a$	Stärke des $\text{Mu}_X$ - Signals
42772/02	FZ	$8,15 \times 10^{11}$ [P]	$1,4 \times 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	—
42772/02	FZ	$8,15 \times 10^{11}$ [P]	$1,4 \times 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	+++
42772/02	FZ	$8,15 \times 10^{11}$ [P]	$1,4 \times 10^{15}$	$\langle 112 \rangle$	—
Si(int)	FZ	$< 2,75 \times 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	—
Si(int)	FZ	$< 2,75 \times 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	—
Si:P-CZ	CZ	$1,8 \times 10^{18}$ [P]	$1,1 \times 10^{18}$	$\langle 100 \rangle$	—
Si:P-CZ	CZ	$1,8 \times 10^{18}$ [P]	$1,1 \times 10^{18}$	$\langle 110 \rangle$	—
47079/6	FZ	$4,0 \times 10^{11}$ [P]	$2,7 \times 10^{16}$	$\langle 110 \rangle$	++
28/1069	CZ	$6,6 \times 10^{12}$ [B]	$2,0 \times 10^{17}$	$\langle 110 \rangle$	+
28/1108	CZ	$5,33 \times 10^{14}$ [B]	$2,0 \times 10^{17}$	$\langle 110 \rangle$	+
2/865	CZ	$1,34 \times 10^{15}$ [B]	$1,4 \times 10^{18}$	$\langle 110 \rangle$	+
28/1212	CZ	$1,46 \times 10^{16}$ [B]	$8,3 \times 10^{17}$	$\langle 100 \rangle$	—
43127/06	FZ	$5,0 \times 10^{11}$ [P]	$< 10^{16}$	$\langle 110 \rangle$	+
38311/26	FZ	$8,15 \times 10^{11}$ [P]	$< 10^{16}$	$\langle 110 \rangle$	—
Si(i)	FZ	$3,0 \times 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	—
39034/2	FZ	$8,0 \times 10^{12}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	—
Si:B	FZ	$1,0 \times 10^{16}$ [B]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	—
39762/05	FZ	$1,0 \times 10^{16}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	—
43531/23	FZ	$1,2 \times 10^{13}$ [B]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	—
Si:P	FZ	$5,0 \times 10^{15}$ [P]	$< 10^{15}$	$\langle 110 \rangle$	—
30039/55	FZ	$2,8 \times 10^{17}$ [B]	$< 10^{15}$	$\langle 100 \rangle$	—

Tabelle 7.1: Probencharakterisierung sowie Beobachtbarkeit bzw. Stärke eines Präzessions-signal  $\text{Mu}_X$  in  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen, welches nicht den Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  zugerechnet werden kann. ( $B_a = 4$  mT und  $T = 5$  K) —: kein  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet; +: schwaches  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet; ++: starkes  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet; +++: sehr starkes  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet. FZ: Zonenreinigungsverfahren, CZ: Czochralski-Verfahren.

Probe	Orientierung von $\vec{B}_a$	Temperatur [ K ]	Magnetfeld [ mT ]	angelegte Spannung [ V ]	Ergebnisse	
					Tabelle	Abbildung
42772/02	$\langle 110 \rangle$	5	4	-	7.3	
		5	2,5 - 20	-	7.4	7.3
					7.5	7.7
		5 - 180	4	-		7.4
47079/6	$\langle 110 \rangle$	5	4 - 10	-	7.4	7.3
					7.5	7.7
		5 - 200	4	-		7.5
		5	4	-4000 - 4000		7.6

Tabelle 7.2: Übersicht der weiterführenden Experimente sowie Verweis auf die Darstellung der Ergebnisse.

überhaupt ein  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet werden kann.

Die Untersuchungen zum Einfluß der Probeneigenschaften wurden alle bei der Standardbedingung  $T = 5 \text{ K}$ ,  $B_a = 4 \text{ mT}$  durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 7.1.1 dargestellt und diskutiert. In kondensierter Form sind sie in Tabelle 7.1 zusammengefaßt. Weitere Untersuchungen betreffen die Abhängigkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signals von der Stärke des angelegten Magnetfelds, von der Temperatur oder auch von einem angelegten elektrostatischen Feld. Eine tabellarische Übersicht über diese ergänzenden Experimente findet sich in Tabelle 7.2. In dieser Tabelle sind Verweise auf die Tabellen und Abbildungen angegeben, in denen detailliertere Darstellungen der Meßergebnisse zu finden sind.

### 7.1.1 Untersuchungen zur Abhängigkeit der Präzessionssignale von den Probeneigenschaften

TF $\mu$ SR-Untersuchungen wurden an unterschiedlich dotierten sowie nach unterschiedlichen Ziehverfahren hergestellten Proben durchgeführt. Die nach dem Czochralski-Verfahren (CZ) gezogenen Kristalle haben im Vergleich zu den nach dem Zonenreinigungsverfahren (FZ) hergestellten Kristallen eine deutlich höhere Sauerstoffkonzentration. Die Eigenschaften der Proben lassen sich aus Tabelle 7.1 entnehmen, in welcher alle untersuchten Proben sowie die jeweiligen Dotieratom- und Sauerstoffkonzentrationen (bzw. obere Grenzwerte hierfür) aufgeführt sind. An allen Proben wurden zunächst TF $\mu$ SR-Experimente unter Standardbedingungen ( $T = 5 \text{ K}$ ,  $B_a = 4 \text{ mT}$ ) durchgeführt. Meist wurde dieselbe Probe bei unterschiedlichen Magnetfeldorientierungen  $\vec{B}_a$  bzgl. der kristallographischen Orientierung der Probe untersucht. Die jeweils gewählte Orientierung von  $\vec{B}_a$  ist ebenfalls in

Tabelle 7.1 angegeben.

Das Kernresultat dieser Messungen, nämlich, ob in der jeweiligen Probe bei der gewählten Magnetfeldorientierung ein neues  $\text{Mu}_X$ -Signal gefunden wurde, ist ebenfalls in Tabelle 7.1 angegeben.

Wie Tabelle 7.1 zeigt, wurde das  $\text{Mu}_X$ -Signal nur in einem Teil der Proben beobachtet. Weiterhin tritt dieses zusätzliche Signal lediglich bei einer Orientierung des Magnetfelds parallel zur  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung auf. Sofern das äußere angelegte Magnetfeld parallel zur  $\langle 100 \rangle$ - bzw.  $\langle 112 \rangle$ -Kristallrichtung ausgerichtet ist, wurde in keiner der untersuchten Proben ein zusätzliches Signal bei ca. 25 MHz beobachtet. Vergleiche hierzu Tabelle 7.1. Für die  $\langle 100 \rangle$ - und  $\langle 112 \rangle$ -orientierten Proben läßt sich des weiteren im gesamten Frequenzbereich kein Präzessionssignal beobachten, welches nicht den Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  oder  $\text{Mu}_{BC}$  zugeordnet werden könnte.

Weder das Ziehverfahren noch der Sauerstoffgehalt der Probe allein entscheidet offenbar über die Beobachtbarkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signals, da das  $\text{Mu}_X$ -Signal sowohl in nach dem CZ-Verfahren als auch nach dem FZ-Verfahren gezogenen Kristallen beobachtet werden kann. Die Beobachtbarkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signal in den  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben scheint allerdings mit dem Verhältnis der Sauerstoff- zur Dotieratomkonzentration der Probe korreliert zu sein. Für einige Proben ist die Sauerstoff- bzw. Dotieratomkonzentration nicht absolut bekannt, und es ist somit keine eindeutige Aussage zum Verhältnis der beiden Konzentrationen möglich. In allen Fällen, in denen das Verhältnis von Sauerstoff- zu Dotieratomkonzentration bekannt ist, trifft allerdings die folgende Aussage zu: Das  $\text{Mu}_X$ -Signal ist nur in solchen  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben beobachtbar, in denen die Sauerstoffkonzentration in der Probe deutlich über der Dotieratomkonzentration liegt.

Die in Tabelle 7.1 gewählte Darstellung teilt die untersuchten Proben entsprechend dem Auftreten bzw. dem Nichtauftreten des  $\text{Mu}_X$ -Signals zwei unterschiedlichen Gruppen zu. Es stellt sich nun die Frage, ob sich diese Gruppeneinteilung nicht in irgendeiner Weise auch in dem Verhalten der anderen Präzessionssignale widerspiegelt.

Die Beantwortung dieser Frage ist deshalb schwierig, weil die Amplituden (Asymmetrien) und Dämpfungen der Präzessionssignale schon innerhalb jeder dieser beiden Gruppen zum Teil starke Schwankungen aufweisen. Die Beobachtbarkeit der Präzessionssignale von  $\text{Mu}_T$  hängt z. B. sehr stark von sowohl der Dotieratom- als auch von der Sauerstoffkonzentration ab. In dotierten FZ-Proben und generell in allen CZ-Proben sind keinerlei Signale der Spezies  $\text{Mu}_T$  beobachtbar (siehe auch PATTERSON (1988), SCHEUERMANN (1997a)). Jede der beiden Probengruppen enthält aber sowohl dotierte als auch intrinsische Siliziumproben, ebenso wie sauerstoffreiche CZ-Proben oder sauerstoffarme Proben. Im Gegensatz zu den  $\text{Mu}_T$ -Signalen sind die  $\text{Mu}_{BC}$ -Signale zwar relativ robust gegenüber Änderungen in der Dotierung oder im Sauerstoffgehalt (PATTERSON 1988), aber auch hier sind die Schwankungen innerhalb jeder der zwei Probengruppen noch so stark, daß kein systematischer Unterschied zwischen den Gruppen zu erkennen ist.

Man kann nun noch versuchen die durch Variation von Dotieratom- und Sauerstoffkonzentration hervorgerufenen Effekte möglichst gering zu halten, indem man jeweils Proben

Proben- bezeichnung	Orientierung von $\vec{B}_a$	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	$\langle 110 \rangle$	$0,55 \pm 0,03$	$1,78 \pm 0,07$	$0,20 \pm 0,02$
		$24,76 \pm 0,04$	$2,11 \pm 0,22$	$1,46 \pm 0,21$
		$34,89 \pm 0,04$	$1,94 \pm 0,16$	$2,13 \pm 0,23$
		$42,62 \pm 0,10$	$1,81 \pm 0,10$	$0,72 \pm 0,06$
		$49,98 \pm 0,11$	$1,68 \pm 0,11$	$0,68 \pm 0,06$
		$54,38 \pm 0,11$	$2,64 \pm 0,13$	$1,18 \pm 0,08$
		$57,55 \pm 0,12$	$3,08 \pm 0,13$	$1,27 \pm 0,07$
Si(int)	$\langle 110 \rangle$	$0,54 \pm 0,04$	$2,18 \pm 0,10$	$0,19 \pm 0,02$
		$36,00 \pm 0,12$	$1,51 \pm 0,29$	$2,29 \pm 0,28$
		$42,58 \pm 0,14$	$1,74 \pm 0,15$	$0,71 \pm 0,10$
		$50,04 \pm 0,16$	$1,49 \pm 0,14$	$0,67 \pm 0,10$
		$53,46 \pm 0,13$	$2,41 \pm 0,22$	$1,42 \pm 0,18$
		$56,64 \pm 0,13$	$2,30 \pm 0,25$	$1,74 \pm 0,23$

Tabelle 7.3: Experimentelle Ergebnisse der in den zwei  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben 42772/02 und Si(int) beobachteten Präzessionssignale bei  $T = 5 \text{ K}$ .

aus den zwei unterschiedlichen Gruppen vergleicht, die in Bezug auf Dotieratom- und Sauerstoffkonzentration möglichst ähnlich sind. Zwei solche Proben sind die mit der Bezeichnung 42772/02, welche das  $\text{Mu}_X$ -Signal zeigt, und die Probe Si(int), an der kein  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet wird. Die bei  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  an diesen beiden Proben gewonnenen Ergebnisse sind in Tabelle 7.3 dargestellt. Die beiden Präzessionssignale bei ca. 54 MHz und 57 MHz sind  $\text{Mu}_T$  zuzuordnen (vergleiche Tabelle 4.1 auf Seite 46). Vergleicht man die Parameter, die für diese beiden Signale bestimmt wurden, so läßt sich kein großer Unterschied zwischen den beiden Proben feststellen. Der Unterschied ist in jedem Fall im Rahmen dessen was man bei einer geringen Änderung der Dotierung und des Sauerstoffgehalts erwartet. Diese moderate Änderung steht aber ganz im Gegensatz zur „sprunghaften“ Änderung beim  $\text{Mu}_X$ -Signal. Die drei Präzessionssignale bei ca. 35 MHz, 42 MHz und 50 MHz sind  $\text{Mu}_{BC}$  zuzuordnen. Vergleicht man jeweils die Parameter der drei Signale in den beiden Proben, so findet man auch hier keine unerwartet großen Unterschiede. Ein Vergleich der Präzessionssignale von  $\mu^d$  bei 0,55 MHz liefert den selben Befund.

Man kann also nicht offensichtlich erkennen, daß z. B. die Amplitude der Signale einer oder mehrerer der bekannten Spezies ( $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$ ,  $\text{Mu}_{BC}$ ) in der Probe 42772/02 im Vergleich zu Si(int) reduziert wären, d. h. daß sich die in der Probe 42772/02 nicht aber in der Probe Si(int) beobachtete Spezies  $\text{Mu}_X$  auf Kosten einer der bekannten Spezies unmittelbar nach

der Myonimplantation gebildet hätte. Ebenso wenig ist in der Probe 42772/02 eine erhöhte Dämpfung von Signalen der bekannten Spezies zu beobachten, was einen Schluß auf die Bildung von  $\text{Mu}_X$  aus dieser Spezies zulassen würde.

Wegen der zu erwartenden Überlagerung der  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale mit weiteren  $\text{Mu}_X$ -Signalen (siehe Kapitel 7.2) läßt sich allerdings eine Bildung von  $\text{Mu}_X$  statt  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  oder aus  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  nicht ausschließen. Weiterhin ist zu beachten, daß sich aus den in  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimenten beobachteten Asymmetrien nur die Anfangsbildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies bestimmen läßt. Die Bildung der Spezies  $\mu^{\text{d}}$  kann als Folge der Ionisation von Myonium bzw. Bildung eines Myonium-Dotieratom-Komplexes deutlich verzögert stattfinden. Dieser Anteil bleibt in  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimenten verborgen. Zusammenfassend kann also gesagt werden, daß die Myonspezies  $\text{Mu}_X$  nicht offensichtlich auf Kosten einer der Myonspezies  $\mu^{\text{d}}$ ,  $\text{Mu}_{\text{T}}$  oder  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  gebildet wird, daß aber genügend Spielraum bleibt, um die Bildung der neuen zusätzlichen Spezies  $\text{Mu}_X$  unterzubringen.

### 7.1.2 Untersuchungen zur Magnetfeldabhängigkeit der Präzessionssignale

An den beiden  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben 42772/02 und 47079/6, die beide ein  $\text{Mu}_X$ -Signal in einem äußeren Magnetfeld von 4 mT bei  $T = 5$  K zeigen, wurde das Verhalten der verschiedenen Präzessionssignale insbesondere aber des  $\text{Mu}_X$ -Signals in Abhängigkeit von der Stärke des äußeren angelegten Magnetfelds untersucht. Das äußere angelegte Magnetfeld wurde hierbei zwischen 2 mT und 20 mT variiert.

An die Zeithistogramme aus den  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Messungen wurden Funktionen vom durch Gleichung (2.4) gegebenen Typ angepaßt. Hierbei wurden insgesamt sieben Präzessionssignale berücksichtigt und zwar ein Signal zur Beschreibung von  $\mu^{\text{d}}$ , zwei für  $\text{Mu}_{\text{T}}$ , drei für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und ein zusätzliches Signal für  $\text{Mu}_X$ . Es wurden also genau so viele Signale berücksichtigt, wie maximal klar zu trennende Linien im Fourierspektrum vorhanden sind. Die das  $\text{Mu}_X$ -Signal beschreibenden Parameter, die aus diesen Anpassungen gewonnen wurden, sind in Tabelle 7.4 zu finden.

Der Verlauf der zusätzlich beobachteten Präzessionsfrequenz als Funktion der Stärke  $B_{\text{a}}$  des angelegten Magnetfelds ist in Abbildung 7.3(a) zusammen mit dem berechneten Verlauf der Frequenz desjenigen  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signals dargestellt, welches wie bereits besprochen, von der viel zu geringen Amplitude abgesehen, zu der beobachteten Frequenz passen könnte. Abbildung 7.3(b) zeigt den berechneten Amplitudenverlauf des  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signals dessen Frequenzverlauf als Funktion von  $B_{\text{a}}$  in Abbildung 7.3(a) dargestellt ist. Man erkennt sofort, daß die Amplitude dieses  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signals unterhalb von etwa 5 mT bis 6 mT so klein ist, daß dieses  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signal bei kleinen Magnetfeldern un beobachtbar sein sollte; die Verhältnisse bei  $B_{\text{a}} = 4$  mT wurden ja eingangs bereits ausführlich diskutiert. Aus diesem Grund schreiben wir die beobachtete Präzessionsfrequenz zumindest im Bereich  $B_{\text{a}} < (5 - 6)$  mT einer noch unbekanntem Spezies  $\text{Mu}_X$  zu, obwohl der Frequenzverlauf in Abhängigkeit der Stärke des Magnetfelds  $B_{\text{a}}$ , vom Ausreißer bei 8 mT (Probe 47079/6) abgesehen, recht gut zu den oben diskutierten  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signalen passen würde. Oberhalb von 6 mT ist die Zuordnung der in Abbildung 7.3(a) dargestellten Frequenz zur Spezies  $\text{Mu}_X$

Proben- bezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT ]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	2,5	$25,58 \pm 0,13$	$1,89 \pm 0,34$	$4,03 \pm 0,98$
	3,0	$24,82 \pm 0,10$	$1,83 \pm 0,29$	$3,08 \pm 0,58$
	4,0	$24,76 \pm 0,04$	$2,11 \pm 0,22$	$1,46 \pm 0,21$
	5,0	$24,70 \pm 0,03$	$1,95 \pm 0,18$	$1,15 \pm 0,16$
	6,0	$24,73 \pm 0,02$	$2,41 \pm 0,18$	$1,38 \pm 0,13$
	7,0	$24,78 \pm 0,02$	$2,28 \pm 0,19$	$1,13 \pm 0,12$
	8,0	$24,84 \pm 0,01$	$2,35 \pm 0,16$	$0,84 \pm 0,08$
	12,0	$24,97 \pm 0,01$	$2,50 \pm 0,12$	$0,73 \pm 0,05$
47079/6	20,0	$24,77 \pm 0,02$	$2,24 \pm 0,13$	$0,63 \pm 0,05$
	4,0	$24,67 \pm 0,04$	$1,46 \pm 0,17$	$1,87 \pm 0,31$
	6,0	$24,71 \pm 0,02$	$1,62 \pm 0,13$	$1,03 \pm 0,11$
	8,0	$24,38 \pm 0,02$	$0,96 \pm 0,12$	$0,55 \pm 0,14$
	10,0	$24,96 \pm 0,01$	$1,76 \pm 0,10$	$0,67 \pm 0,05$

Tabelle 7.4: Experimentelle Ergebnisse der an den Proben 42772/02 und 47079/6 bei  $T = 5 \text{ K}$  zwischen 20 MHz und 30 MHz beobachteten Präzessionssignale in Abhängigkeit der Stärke des äußeren Magnetfelds mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ .

oder  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zunächst unklar. Das  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signal könnte dann durchaus durch Überlagerung von Beiträgen dieser beiden Spezies zustande kommen, oder es könnte sogar dominant durch die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  bestimmt sein. Näheres kann erst nach Berechnung des Amplitudenverlaufs des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals gesagt werden. Hierzu ist aber zunächst die Kenntnis des Hyperfeintensors (HFT) der Spezies  $\text{Mu}_{\text{X}}$  erforderlich. Bei der späteren Bestimmung des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_{\text{X}}$  (Kapitel 7.2) darf aber nur der beobachtete Frequenzverlauf im Bereich  $B_a < 6 \text{ mT}$  herangezogen werden. Im Anschluß an die Bestimmung des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_{\text{X}}$  in Kapitel 7.2 werden verfeinerte Anpassungen an die Zeithistogramme aus den  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Messungen dargestellt. In diesen Anpassungen wird zugelassen, daß sich das  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signal aus zwei Komponenten zusammensetzen könnte. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.5 und in Abbildung 7.7 dargestellt und werden in Kapitel 7.2 diskutiert.



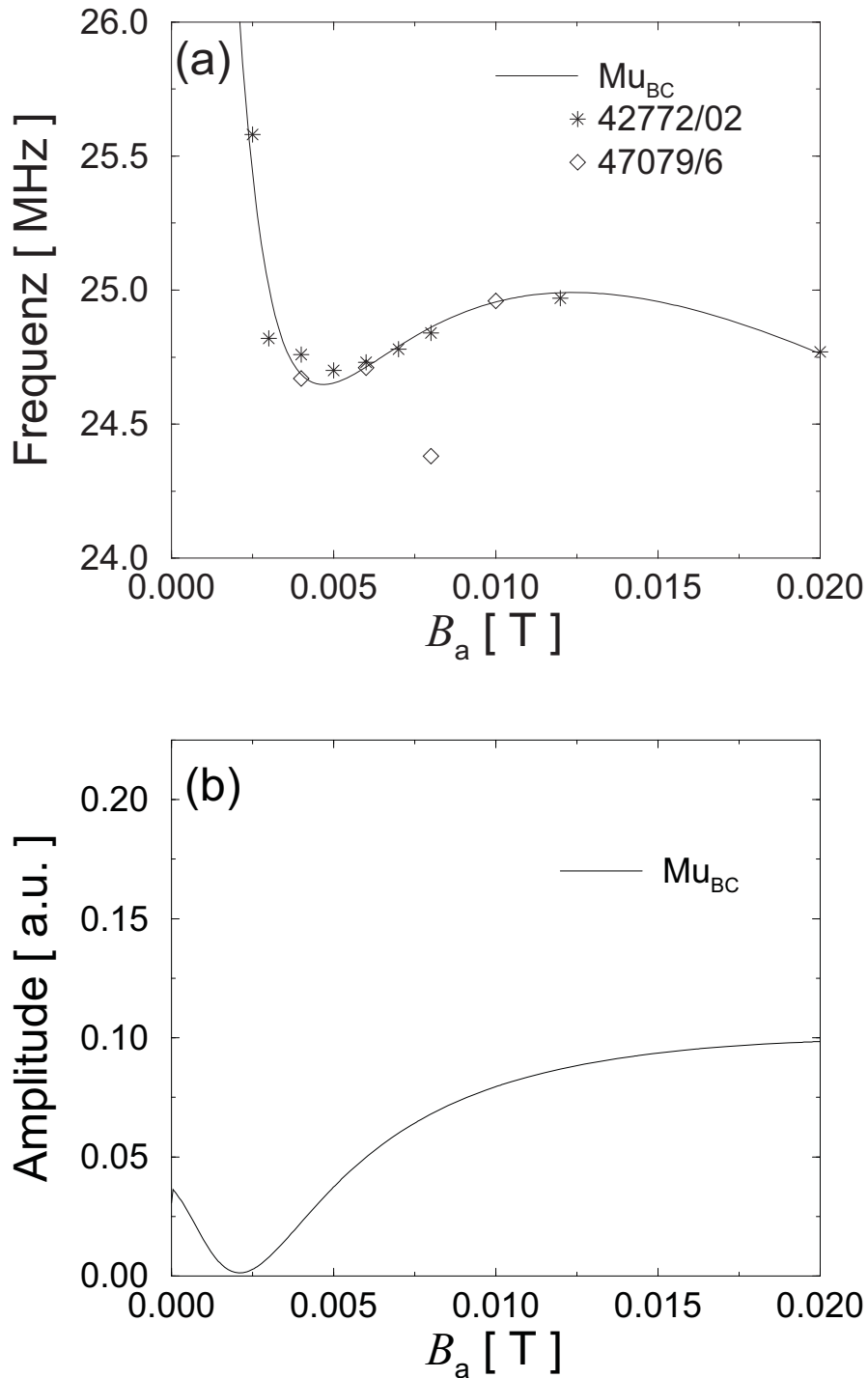


Abbildung 7.3: (a) Für die Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  berechnete Präzessionsfrequenz sowie an der Probe 42772/02 (Sternchen) und 47079/6 (Rauten) gemessene Präzessionsfrequenzen in Abhängigkeit der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds bei einer Temperatur von  $T = 5$  K und  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$ . (b) zugehörige berechnete Amplituden der Präzessionsfrequenz der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ .

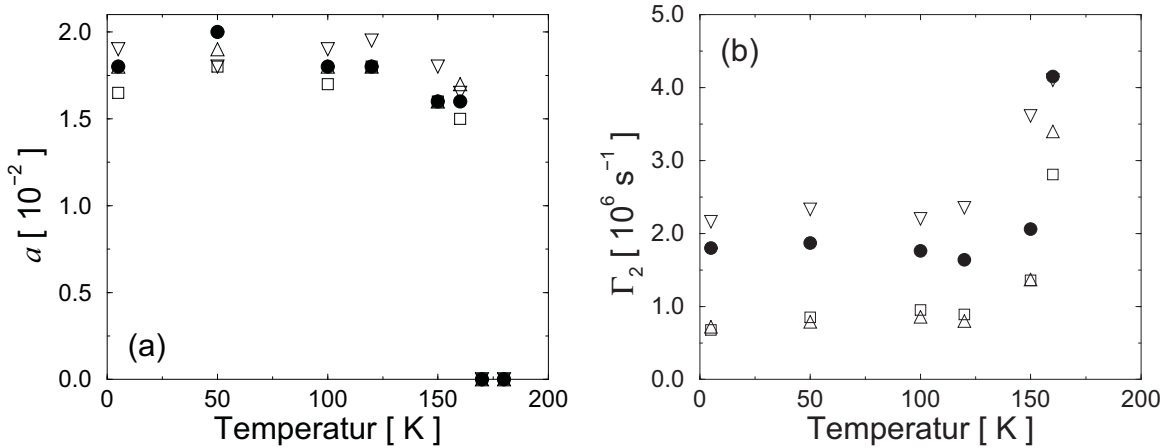


Abbildung 7.4: Temperaturverlauf der Asymmetrie (a) und Relaxationsrate (b) der  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale (unausgefüllte Symbole) und des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals (ausgefüllte Symbole), gemessen an der Probe 42772/02 bei  $B_a = 4 \text{ mT}$  mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ .

### 7.1.3 Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Präzessionssignale

An den beiden Proben 42772/02 und 47079/6, an denen bereits das Magnetfeldverhalten untersucht wurde, wurde zusätzlich das Temperaturverhalten im Bereich von 5 K bis 200 K im äußeren Magnetfeld von 4 mT studiert. Die Präzessionssignale von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  und  $\mu^{\text{d}}$  sind im gesamten betrachteten Temperaturbereich ohne wesentliche Temperaturabhängigkeit beobachtbar. Das beobachtete Temperaturverhalten der Asymmetrie und Relaxationsrate der zu  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  gehörigen Präzessionssignale sowie des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals sind in den Abbildungen 7.4 und 7.5 dargestellt.

Die Präzessionssignale die sich der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zuordnen lassen verschwinden zwischen 160 K und 170 K. Das Temperaturverhalten des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals in der Probe 42772/02, Abbildung 7.4, ist analog zu dem der  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Präzessionssignale. Alle diese Signale verschwinden nach einem Anstieg der Relaxationsraten bei ca. 150 K zwischen 160 K und 170 K. In der Probe 47079/6, Abbildung 7.5, verschwindet das  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signal allerdings bereits zwischen 120 K und 150 K, demnach früher als die  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Präzessionssignale. In der Probe 47079/6 ist das  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signal bei einer Temperatur von 10 K im Vergleich zur Probe 42772/02 bei 5 K deutlich schwächer ausgeprägt. Dies zeigt sich an der aus diesen Experimenten bestimmten geringeren Asymmetrie und höheren Relaxationsrate des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals in der Probe 47079/6 ( $a = 1,1 \cdot 10^{-2}$ ,  $\lambda = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ) im Vergleich zum entsprechenden Signal in der Probe 42772/02 ( $a = 1,8 \cdot 10^{-2}$ ,  $\lambda = 1,8 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ), vergleiche Abbildungen 7.5 und 7.4. Anhand der Ergebnisse der Messungen an der Probe 42772/02 ist erkennbar, daß bei ca. 150 K die Relaxationsraten der zu  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  gehörigen Präzessionssignale sowie des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals ansteigen, siehe Abbildung 7.4. In der Probe 47079/6 sollte ein Anstieg der in diesen Proben ohnehin schon höheren Relaxationsrate zum Verschwinden des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals führen. Dies würde die Unbeobachtbarkeit des  $\text{Mu}_{\text{X}}$ -Signals in der Probe 47079/6 ab 150 K erklären. In der Probe 47079/6 konnte kein Anstieg der

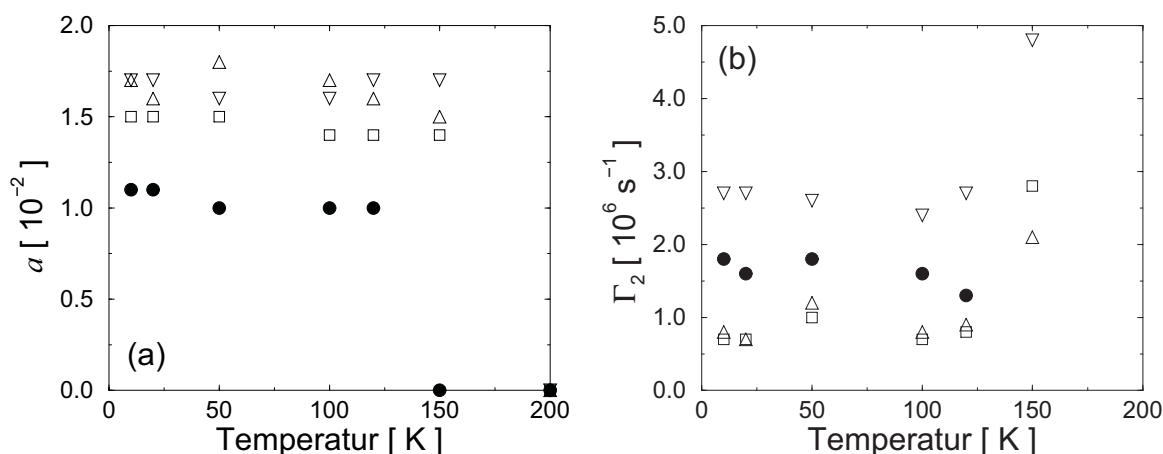


Abbildung 7.5: Temperaturverlauf der Asymmetrie (a) und Relaxationsrate (b) der  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale (unausgefüllte Symbole) und des  $\text{Mu}_X$ -Signals (ausgefüllte Symbole), gemessen an der Probe 47079/6 bei  $B_a = 4 \text{ mT}$  mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ .

Relaxationsrate vor dem Verschwinden des Signals beobachtet werden. Dies ist aber wohl dadurch zu erklären, daß das  $\text{Mu}_X$ -Signal beim ersten signifikanten Anstieg der Relaxationsrate zugleich unbeobachtbar wird. Damit sind die an den beiden Proben gewonnenen Resultate, trotz der auf den ersten Blick erscheinenden Widersprüchlichkeit, durchaus konsistent und führen zu dem Schluß, daß das Temperaturverhalten der Spezies  $\text{Mu}_X$  analog zu der von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist.

#### 7.1.4 Einfluß eines angelegten elektrostatischen Felds

An der Probe 47079/6 wurden  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen in einem zum äußeren Magnetfeld zusätzlich angelegten elektrostatischen Feld durchgeführt. Die Richtung des elektrostatischen Felds ist parallel zur Strahlrichtung und somit senkrecht zum äußeren angelegten Magnetfeld.

Ein elektrostatisches Feld an einer Probe wird üblicherweise durch Anlegen einer Spannung an zwei gegenüberliegenden Probenflächen, welche mit einem leitfähigen Material beschichtet wurden, erzeugt. Die üblichen Beschichtungsverfahren sind für  $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen an Silizium jedoch ungeeignet, weil das leitfähige Material während bzw. nach dem Beschichten eventuell in die Probe eindiffundieren kann, wie es z. B. von Goldkontakten bekannt ist. Es muß sichergestellt werden, daß die Probe durch die Kontaktierung unverändert bleibt.

Bisher wurden  $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen unter Einfluß eines elektrostatischen Felds hauptsächlich an festen Edelgasen durchgeführt (MEILIKHOV 1997, GORELKIN 1997). An Silizium ist bisher nur eine Arbeit von STORCHAK und Mitarbeitern (1997) bekannt, welche einen kommerziell erhältlichen, beidseitig beschichteten Siliziumdetektor verwendeten. Um sicherzustellen, daß die Probe durch die Kontaktierung nicht verändert wurde, wurde von uns eine Methode zur Kontaktierung der Probe entwickelt, welche sich nach

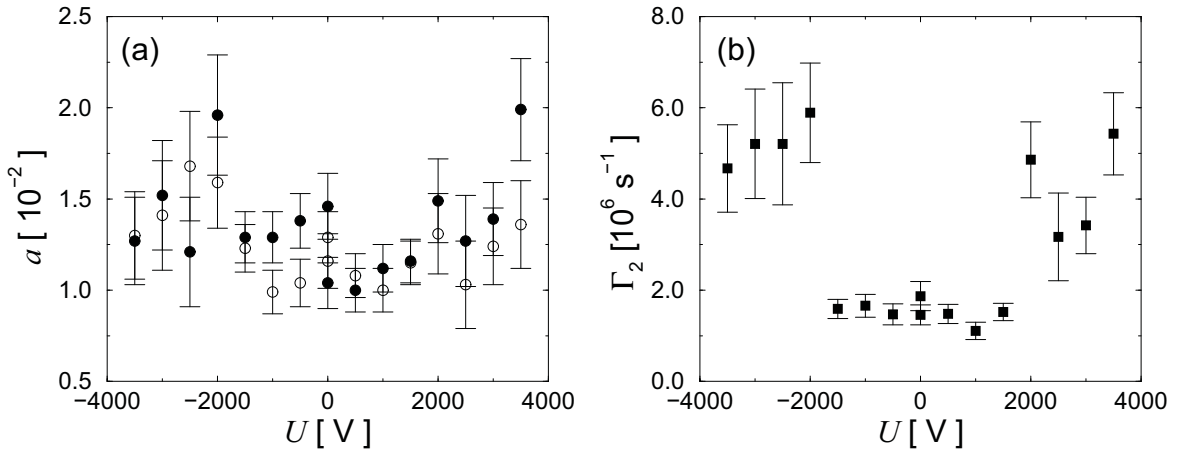


Abbildung 7.6: (a) Asymmetrie im FW-Zähler (ausgefüllte Symbole) und im BW-Zähler (unausgefüllte Symbole) sowie (b) Relaxationsrate des  $\text{Mu}_X$ -Signals in Abhängigkeit der angelegten Spannung, gemessen an der Probe 47079/6 bei  $T = 5 \text{ K}$  in einem äußeren angelegten Magnetfeld von  $B_a = 4 \text{ mT}$  mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$ .

Durchführung der Experimente wieder rückgängig machen läßt. Die Probe wurde vor und nach den Experimenten mit angelegtem elektrostatischem Feld jeweils ohne Kontaktierung vermessen. Es ergeben sich keinerlei Unterschiede zwischen diesen beiden Messungen, womit sichergestellt ist, daß kein nachhaltiger Einfluß der Kontaktierung auf die Probe besteht.

Es wurden zwei unterschiedliche Methoden der Kontaktierung der Probe getestet. Zum einen wurde die Probe auf beiden Stirnflächen mit Leitsilber bzw. Leitkohlenstoff bestrichen. Die durch das Aufbringen von Leitsilber bzw. Leitkohlenstoff entstehenden „Schichten“ konnten kontaktiert werden und dienten als Kondensatorplatten. Sobald bei Temperaturen von  $5 \text{ K}$  jedoch eine Spannung von ca.  $200 \text{ V}$  angelegt wurde, löste sich die Leitsilber- bzw. Leitkohlenstoffbeschichtung von der Probe. Mit dieser Methode war es uns nicht möglich, ein starkes elektrostatisches Feld an die Probe anzulegen. Daraufhin wurde ein weiterer Aufbau getestet. Dazu wurden die Stirnflächen der Probe mit selbstklebender aluminisierter Mylarfolie beklebt. Der Klebstoff verhindert einen direkten Kontakt zwischen Probe und Aluminiumbeschichtung. Dieser Aufbau wurde dem mit einer nicht selbstklebenden Mylarfolie vorgezogen, da der Abstand der aluminisierten Schicht der selbstklebenden Folie zur Probe minimal und besser definiert ist als bei nicht selbstklebender Folie. Die Aluminiumbeschichtung der Folie dient dabei als Kondensatorplatte und konnte nach Entfernung des Klebstoffs an einigen Stellen außerhalb der Probe kontaktiert werden, siehe Anhang B. Die Aluminiumschichten befinden sich im Abstand der Probendicke, welche  $2,5 \text{ mm}$  beträgt. Mit diesem Aufbau konnten Spannungen von bis zu  $3500 \text{ V}$  zwischen den beiden Aluminiumschichten auf den Stirnflächen der Probe angelegt werden, ohne daß Überschläge auftraten. Die Aluminiumbeschichtung war so kontaktiert, daß bei positiver bzw. negativer angelegter Spannung an die Aluminiumbeschichtung die Myonen in Flugrichtung beschleunigt bzw. abgebremst werden.

Alle Messungen mit angelegtem elektrostatischem Feld wurden in einem äußeren Magnetfeld von 4 mT bei einer Temperatur von 5 K an der Probe 47079/6 durchgeführt. Auf die Präzessionssignale der Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  hatte das Anlegen der Spannung keinerlei Einfluß. Weder die Asymmetrien noch die Relaxationsraten der Signale zeigten eine Abhängigkeit von der Stärke der angelegten Spannung. Dagegen konnte eine deutliche Änderung der Relaxationsrate des  $\text{Mu}_X$ -Signals beobachtet werden. Ab einer Spannung von ca. 2000 V steigt, unabhängig davon, ob das elektrostatische Feld parallel oder antiparallel zur Strahlrichtung anliegt, die Relaxationsrate des  $\text{Mu}_X$ -Signals drastisch an, wohingegen die Asymmetrie im Rahmen der Meßgenauigkeit unverändert bleibt. Die Asymmetrie und Relaxationsrate des  $\text{Mu}_X$ -Signals sind in Abhängigkeit der angelegten Spannung in Abbildung 7.6 dargestellt. Der steile Anstieg der Relaxationsrate bei ca. 2000 V könnte unter Umständen damit zusammenhängen, daß erst ab dieser Spannung ein elektrostatisches Feld in der Probe vorhanden ist, während bei niedrigeren Spannungen möglicherweise das Feld hauptsächlich in der isolierenden Klebstoffschicht vorhanden ist. Zum anderen könnte dieser steile Anstieg der Relaxationsrate auch physikalische Eigenschaften der Myonspezies  $\text{Mu}_X$  oder der untersuchten Siliziumprobe darstellen, wenn z. B. die Myonspezies erst ab einem kritischen Wert des elektrostatischen Felds von diesem beeinflußt wird. Es kann auf jeden Fall festgehalten werden, daß das Verhalten des  $\text{Mu}_X$ -Signals im elektrostatischen Feld deutlich unterschiedlich zu den Signalen der Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  ist, welche in den Experimenten gleichzeitig beobachtet werden.

Das unterschiedliche Verhalten der den Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  zugeordneten Präzessionssignale im Vergleich zum  $\text{Mu}_X$ -Signal ist ein weiteres Indiz dafür, daß es sich bei dem  $\text{Mu}_X$ -Signal tatsächlich um die Signatur einer sich von  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  deutlich abzugrenzenden Myonspezies  $\text{Mu}_X$  handelt.

### 7.1.5 Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse

In einigen  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben wurde bei einem Magnetfeld von 4 mT und einer Temperatur von 5 K ein Präzessionssignal bei ca. 25 MHz ( $\text{Mu}_X$ -Signal) beobachtet, welches sich keiner der bekannten Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  oder  $\text{Mu}_{BC}$  zuordnen läßt. In  $\langle 100 \rangle$ - sowie  $\langle 112 \rangle$ -orientierten Proben konnte jedoch kein zusätzliches Präzessionssignal beobachtet werden. Das in  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben teilweise beobachtbare  $\text{Mu}_X$ -Signal ändert sich zwischen 2 mT und 20 mT wenig mit der Magnetfeldstärke. Das Temperaturverhalten des  $\text{Mu}_X$ -Signals ist analog zu dem der  $\text{Mu}_{BC}$ -Präzessionssignale. Im elektrostatischen Feld ist das Verhalten des  $\text{Mu}_X$ -Signals jedoch von den Präzessionssignalen der Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  deutlich verschieden.

Aus der Gesamtheit der oben diskutierten Beobachtungen wird auf die Existenz einer neuen, bisher unbekanntem paramagnetischen Myonspezies in kristallinem Silizium geschlossen, welche mit  $\text{Mu}_X$  bezeichnet wird.

Es wird im folgenden der Versuch gemacht aus der orientierungsabhängigen Beobachtbarkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signals sowie aus der Magnetfeldabhängigkeit dieses Signals einen Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_X$  zu bestimmen.

## 7.2 Bestimmung des Hyperfeintensors von $\text{Mu}_X$

Zur Bestimmung des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_X$  können folgende Erkenntnisse über die Spezies  $\text{Mu}_X$  herangezogen werden. Das Präzessionssignal ist bei einem angelegten Magnetfeld von 4 mT durch die Frequenz 24,7 MHz charakterisiert. Ein Signal mit dieser Frequenz tritt nur bei  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung des Magnetfelds, nicht aber bei  $\langle 100 \rangle$ - oder  $\langle 112 \rangle$ -Orientierung auf. Für die letztgenannten Magnetfeldorientierungen darf der gesuchte Hyperfeintensor also nur zu Signalen führen, die entweder mit bereits bekannten Signalen überlappen, oder unbeobachtbar schwach sind. Ebenso läßt sich die Magnetfeldabhängigkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signals verwenden, wobei jedoch die Komplikation des ab 6 mT zusätzlich auftretenden überlappenden  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Präzessionssignals beachtet werden muß, siehe auch Abbildung 7.3 und die Diskussion in Kapitel 7.1.2.

Aus der Beobachtbarkeit des  $\text{Mu}_X$ -Signals für lediglich eine der drei untersuchten Kristallorientierungen kann geschlossen werden, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  um eine Myonspezies mit anisotropem Hyperfeintensor handeln muß. Ansonsten, d. h. im Falle eines isotropen Hyperfeintensors, müßte das  $\text{Mu}_X$ -Signal unabhängig von der Kristallorientierung immer bei der gleichen Frequenz beobachtbar sein. Die Tatsache, daß überhaupt ein deutliches  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtet wurde, siehe Abbildung 7.1(a), läßt des weiteren darauf schließen, daß der Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_X$  in guter Näherung axialsymmetrisch ist. Wären  $A_x$ ,  $A_y$  und  $A_z$  alle deutlich voneinander verschieden, so müßten sehr viele unterschiedliche Präzessionssignale der Spezies  $\text{Mu}_X$  mit jeweils geringer Amplitude existieren. Dies ist jedoch nicht in Übereinstimmung mit der Beobachtung eines einzigen, deutlich ausgeprägten Präzessionssignals bei ca. 25 MHz. Als mögliche Hauptachsen (Rotationsachsen) des  $\text{Mu}_X$ -Hyperfeintensors werden im folgenden die  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ - sowie die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung in Betracht gezogen.

In einem ersten Schritt wurden axialsymmetrische Hyperfeintensoren mit  $z$ -Achsen (Rotationsachsen) in eine  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ - oder  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung bestimmt, die bei einem äußeren Magnetfeld von 4 mT, das parallel zur  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung anliegt, ein Präzessionssignal von ca. 25 MHz liefern könnten, wobei die Signalamplitude zunächst noch außer acht gelassen wurde. Für jede dieser behandelten Lagen der  $z$ -Achse des Hyperfeintensors gibt es aber mehrere grundsätzlich verschiedene Möglichkeiten diese Frequenz zu reproduzieren. Es gibt nämlich in jedem Fall mehrere kristallographisch äquivalente Orientierungen für die Rotationsachse ( $z$ -Achse) des Hyperfeintensors, die aber mit dem äußeren Magnetfeld unterschiedliche Winkel einschließen können. Zunächst ist aber noch offen, welche dieser Orientierungen für das Präzessionssignal bei 25 MHz verantwortlich ist. Weiterhin gibt es Freiheiten bei der Wahl des Vorzeichens der beiden verschiedenen Komponenten des Hyperfeintensors. Auch können unterschiedliche Übergänge zwischen den Energieniveaus zu der beobachteten Frequenz führen.

Von den zahlreichen mit dem Absolutwert des Präzessionssignals verträglichen Kombinationsmöglichkeiten wurden zunächst diejenigen ausgeschlossen, welche für das Präzessionssignal bei ca. 25 MHz eine so geringe Amplitude liefern, daß das Signal unbeobachtbar wäre. Dadurch konnte schon eine deutliche Reduktion der in Frage kommenden unterschiedlichen Typen von Hyperfeintensoren erzielt werden. Es wurden weiterhin nur solche Hyperfeintensoren betrachtet, welche innerhalb des Magnetfeldbereichs  $2 \text{ mT} < B_a <$

6 mT eine geringe Magnetfeldabhängigkeit der Präzessionsfrequenz liefern, wie sie in den Experimenten beobachtet wird, siehe auch Tabelle 7.4. Dadurch konnte die Zahl der Kombinationsmöglichkeiten bereits auf sechs reduziert werden.

Wenn das äußere Magnetfeld parallel zur  $\langle 100 \rangle$ -Kristallrichtung angelegt war, konnte kein Präzessionssignal beobachtet werden, welches nicht den Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  oder  $\text{Mu}_{BC}$  zugeordnet werden konnte. Dies bedeutet, daß für diese Magnetfeldorientierung entweder kein Präzessionssignal der Spezies  $\text{Mu}_X$  mit zur Beobachtung erforderlicher hinreichend großer Amplitude existiert, oder daß das Signal mit einem der Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  oder  $\text{Mu}_{BC}$  zusammenfällt. Unter Ausnutzung dieser Tatsache bleibt von den sechs bis zu diesem Schritt noch denkbaren Typen von Hyperfeintensoren für  $\text{Mu}_X$  noch genau eine Möglichkeit übrig. Damit ist der Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_X$  bereits prinzipiell bestimmt. Es zeigt sich, daß die Hauptachse ( $z$ -Achse) des Hyperfeintensors die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung ist.

Zur genaueren Bestimmung, d. h. Reduktion der Fehlergrenzen der Hyperfeinparameter des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_X$ , wurde nun noch die experimentell bestimmte Magnetfeldabhängigkeit der zu  $\text{Mu}_X$  gehörigen Präzessionsfrequenz zwischen 2 mT und 6 mT herangezogen. Die oberhalb von 6 mT experimentell bestimmten Präzessionsfrequenzen wurden dabei bewußt ausgeklammert. Nur solange die  $\text{Mu}_{BC}$ -Präzessionsfrequenz eindeutig eine zu geringe Amplitude besitzt, um beobachtbar zu sein, kann sichergestellt werden, daß das beobachtete Präzessionssignal allein der Spezies  $\text{Mu}_X$  zugerechnet werden kann.

Der Hyperfeintensor der Myonspezies  $\text{Mu}_X$  wurde anhand obiger Argumente zu

$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_X} = \begin{pmatrix} (-82,6 \pm 3,0) & 0 & 0 \\ 0 & (-82,6 \pm 3,0) & 0 \\ 0 & 0 & (5,3 \pm 3,0) \end{pmatrix} \text{ MHz} \quad (7.1)$$

bestimmt, wobei, wie bereits erwähnt, die  $z$ -Achse parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung liegt. Es ist zu beachten, daß anhand der im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimente nur das relative Vorzeichen der Hyperfeinparameter untereinander bestimmbar ist, jedoch nicht das Vorzeichen der einzelnen Komponenten. Dies läßt sich nur recht schwer, mittels sehr aufwendiger Experimente, bestimmen, so z.B. aus der  $^{29}\text{Si}$ -Hyperfeinstruktur der Präzessionsfrequenzen, wie sie für  $\text{Mu}_{BC}$  bestimmt wurde (KIEFL 1988). Das Vorzeichen der einzelnen Komponenten wurde hier aufgrund der Ähnlichkeit der Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{BC}$  analog zum Vorzeichen der Komponenten von  $\text{Mu}_{BC}$  gewählt, vergleiche Tabelle 3.1, Seite 31.

Der mit Hilfe dieses Hyperfeintensors berechnete Verlauf der zu  $\text{Mu}_X$  gehörigen Präzessionsfrequenz im Bereich zwischen 20 MHz und 30 MHz sowie der zugehörigen Amplitude ist in Abhängigkeit von der Stärke des äußeren angelegten Magnetfelds in Abbildung 7.7(a) als gestrichelte Linie dargestellt. Die berechneten Präzessionsfrequenzen und Amplituden des entsprechenden zu  $\text{Mu}_{BC}$  gehörigen Signals sind als durchgezogene Linie eingezeichnet. Es zeigt sich, daß das ab 6 mT im Experiment beobachtete Präzessionssignal zwischen 20 MHz und 30 MHz vermutlich aus einer Überlagerung zweier benachbarter Präzessionssignale zustande kommt. Bei der Auswertung der Experimente zur Magnetfeldabhängig-

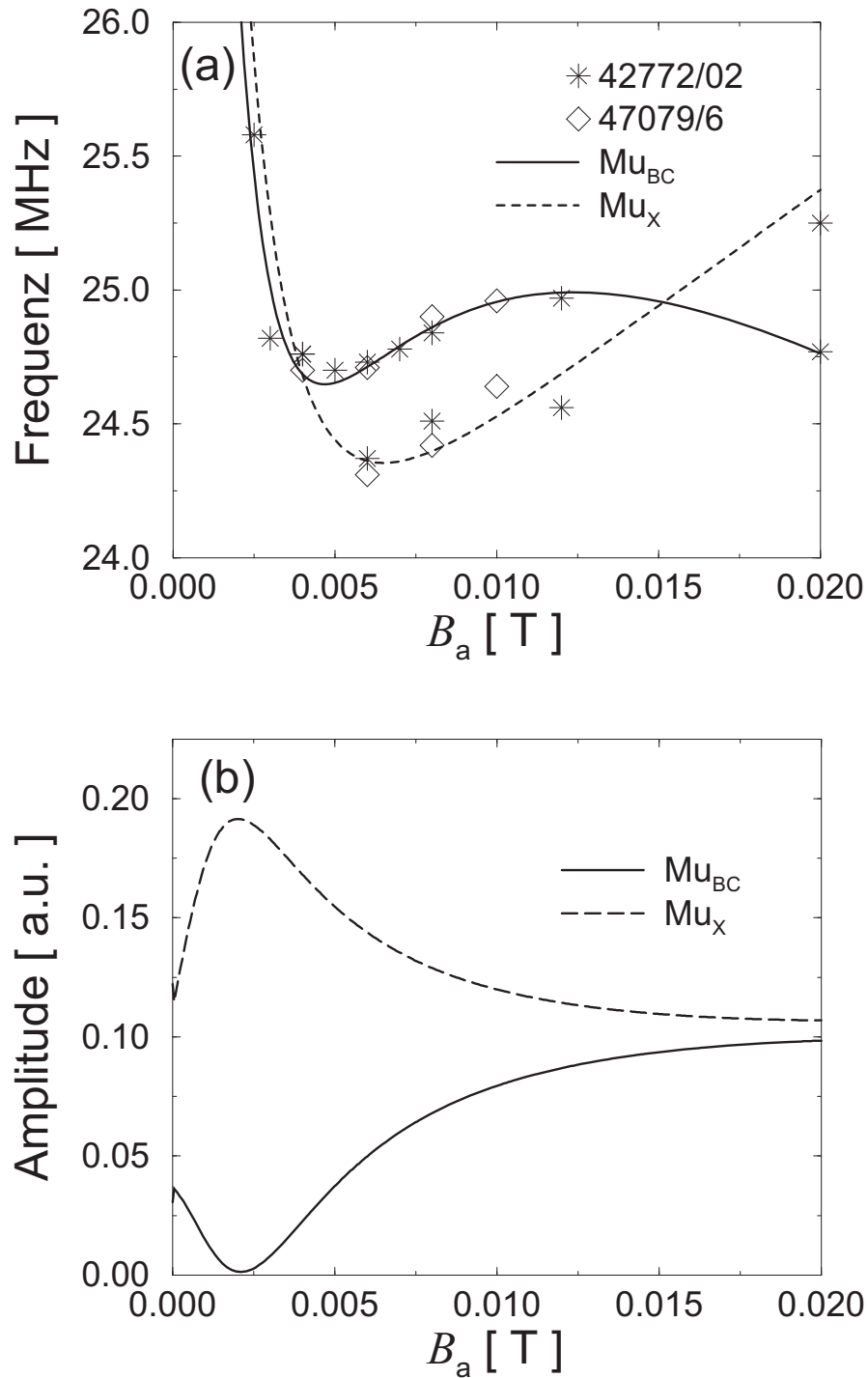


Abbildung 7.7: (a) Berechnete Präzessionsfrequenzen der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  (durchgezogene Linie) und  $\text{Mu}_X$  (gestrichelte Linie) sowie an der Probe 42772/02 (Sternchen) und 47079/6 (Rauten) gemessene Präzessionsfrequenzen in Abhängigkeit der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds mit  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  und Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$  bei einer Temperatur von  $T = 5$  K. (b) zugehörige berechnete Amplituden der Präzessionsfrequenzen der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  (durchgezogene Linie) und  $\text{Mu}_X$  (gestrichelte Linie).



keit, siehe Kapitel 7.1.2 und insbesondere Tabelle 7.4 wurde in diesem Bereich jedoch nur ein Präzessionssignal berücksichtigt. Daher wurde die Auswertung dieser Experimente nochmals durchgeführt, wobei nun im Bereich von 20 MHz bis 30 MHz zwei unterschiedliche Präzessionssignale erlaubt wurden. Bei der Auswertung wurden die jeweils für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$  berechneten Präzessionsfrequenzen als Anfangswerte vorgegeben, wobei eine Variation der Frequenzen in zum Teil überlappenden Frequenzbereichen erlaubt wurde. Bei einigen Werten der Magnetfeldstärke  $B_a$  konnte selbst mit dieser Art der Auswertung im Bereich von 20 MHz bis 30 MHz nur eine einzige Frequenz bestimmt werden.

Die Auswertungen ergaben im Bereich zwischen 20 MHz und 30 MHz die in Tabelle 7.5 dargestellten Ergebnisse. Die so erhaltenen Frequenzen sind ebenfalls in Abbildung 7.7(a) eingetragen. Der beobachtete Frequenzverlauf der Präzessionsfrequenzen stimmt sehr gut mit dem berechneten Verlauf einer der  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Präzessionsfrequenzen bzw. dem der  $\text{Mu}_X$ -Präzessionsfrequenz überein. Im Anhang sind in Tabelle D.1 alle an den Proben 42772/02 und 47079/6 beobachteten Präzessionssignale in Abhängigkeit der Stärke des Magnetfelds angegeben.

Etwas problematisch in der Zuordnung der beobachteten Präzessionssignale zu den Spezies gestaltet sich die Messung bei 5 mT an der Probe 42772/02. Dort lieferte die Anpassung im fraglichen Frequenzbereich nur ein Präzessionssignal, dessen Frequenz sehr gut mit dem für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  berechneten übereinstimmt, siehe Abbildung 7.7(a). Obwohl die Amplitude des Präzessionssignals der Spezies  $\text{Mu}_X$  deutlich höher liegen sollte als jene der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ , siehe Abbildung 7.7(b), war kein zweites Präzessionssignal bestimmbar, welches eindeutig der Spezies  $\text{Mu}_X$  zugeordnet werden könnte. Es gibt nun zwei Möglichkeiten der Interpretation: Zum einen könnte man die beobachtete Frequenz der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zuordnen, damit bleibt aber das Fehlen der zur Spezies  $\text{Mu}_X$  gehörigen Präzessionsfrequenz ungeklärt. Zum anderen könnte man die beobachtete Frequenz der Spezies  $\text{Mu}_X$  zuordnen, wobei dann jedoch unklar ist, weshalb die beobachtete Frequenz etwas außerhalb des sonst beobachteten Frequenzverlaufs des  $\text{Mu}_X$ -Signals der Spezies  $\text{Mu}_X$  liegt. Eine Messung an der Probe 47079/6 bei 5 mT könnte etwas mehr Klarheit in diese Problematik bringen.

Der Verlauf der Präzessionsfrequenz von  $\text{Mu}_X$  ist dem von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  sehr ähnlich. Jedoch ist in Abbildung 7.7(b) bei den Amplituden der Präzessionssignale ein deutlicher Unterschied zu erkennen. Die Amplituden der  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zugeordneten Signale verlaufen bei kleinen Magnetfeldwerten bis ca. 10 mT gegenläufig. Bei minimaler Amplitude für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist die der Spezies  $\text{Mu}_X$  zugeordnete Amplitude maximal. Diese Tatsache ist wesentlich für die Identifikation der Spezies  $\text{Mu}_X$ . Die aus dem Experiment bestimmten Asymmetrien enthalten die Amplitude sowie die Bildungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies. Da die beobachteten Frequenzen zwei unterschiedlichen Spezies zugeschrieben werden, welche unterschiedliche Bildungswahrscheinlichkeiten besitzen können, lassen sich die beobachteten Amplituden der beiden Spezies nicht direkt miteinander vergleichen. Der qualitative Verlauf der Amplituden für jede einzelne Spezies sollte jedoch mit dem berechneten Amplitudenverlauf übereinstimmen. Der Magnetfeldverlauf der in Tabelle 7.5 angegebenen Asymmetrien der der Spezies  $\text{Mu}_X$  bzw.  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zurechenbaren Frequenzen entspricht ungefähr dem berechneten Verlauf in Abbildung 7.7(b).

Proben- bezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT ]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]	
42772/02	2,5	$25,58 \pm 0,13$	$1,89 \pm 0,34$	$4,03 \pm 0,98$	
	3,0	$24,82 \pm 0,10$	$1,83 \pm 0,29$	$3,08 \pm 0,58$	
	4,0	$24,76 \pm 0,04$	$2,11 \pm 0,22$	$1,46 \pm 0,21$	
	5,0	$24,70 \pm 0,03$	$1,95 \pm 0,18$	$1,15 \pm 0,16$	
	6,0		$24,37 \pm 0,01$	$2,79 \pm 0,53$	$1,36 \pm 0,33$
			$24,73 \pm 0,02$	$2,82 \pm 0,48$	$1,67 \pm 0,27$
	7,0	$24,78 \pm 0,02$	$2,28 \pm 0,19$	$1,13 \pm 0,12$	
	8,0		$24,51 \pm 0,02$	$1,84 \pm 0,26$	$1,84 \pm 0,26$
			$24,84 \pm 0,01$	$2,40 \pm 0,17$	$0,86 \pm 0,08$
	12,0		$24,56 \pm 0,02$	$0,72 \pm 0,32$	$0,83 \pm 0,05$
			$24,96 \pm 0,01$	$2,74 \pm 0,12$	$0,90 \pm 0,01$
	20,0		$24,78 \pm 0,02$	$2,37 \pm 0,14$	$0,64 \pm 0,05$
$25,27 \pm 0,02$			$0,21 \pm 0,06$	$0,18 \pm 0,06$	
47079/6	4,0	$24,67 \pm 0,04$	$1,46 \pm 0,17$	$1,87 \pm 0,31$	
	6,0		$24,31 \pm 0,02$	$0,68 \pm 0,37$	
			$24,73 \pm 0,02$	$1,12 \pm 0,13$	
	8,0		$24,42 \pm 0,02$	$0,58 \pm 0,08$	$0,29 \pm 0,10$
			$24,86 \pm 0,01$	$1,47 \pm 0,24$	$3,13 \pm 0,58$
	10,0		$24,64 \pm 0,02$	$0,30 \pm 0,08$	$0,60 \pm 0,05$
$24,96 \pm 0,01$			$1,80 \pm 0,19$	$0,81 \pm 0,01$	

Tabelle 7.5: Experimentelle Ergebnisse der an den Proben 42772/02 und 47079/6 bei  $T = 5 \text{ K}$  zwischen 20 MHz und 30 MHz bestimmten Präzessionssignale in Abhängigkeit der Stärke des äußeren Magnetfelds. Bei der Auswertung wurden zur Beschreibung des  $\text{Mu}_X$ -Signals zwei unterschiedliche Frequenzen zugelassen. Im Anhang sind in Tabelle D.1 alle in diesen Proben beobachteten Präzessionsfrequenzen aufgeführt.

Obwohl in die Bestimmung des Hyperfeintensors die zwischen 6 mT und 20 mT bestimmten Präzessionsfrequenzen, welche der Spezies  $\text{Mu}_X$  zugeordnet werden, nicht mit einbezogen wurden, stimmt der berechnete Magnetfeldverlauf auch in diesem Bereich sehr gut mit den beobachteten Präzessionssignalen überein, siehe Abbildung 7.7 (a).

Die Unbeobachtbarkeit eines  $\text{Mu}_X$ -Signals für die Magnetfeldorientierungen parallel zur  $\langle 112 \rangle$ -Kristallrichtung wurde nicht zur Ableitung des Hyperfeintensors herangezogen. Trotzdem ist der oben bestimmte Hyperfeintensor auch mit diesem Befund im Einklang. In Tabelle 7.6 sind die für die Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$  berechneten Frequenzen sowie Amplituden bei einer Stärke des äußeren Magnetfelds von 4 mT für  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 112 \rangle$  unter den jeweils experimentellen Gegebenheiten der Beobachtungsrichtung angegeben. Hierbei wurden Frequenzen mit zugehörigen Amplituden unterhalb von 0,01 vernachlässigt, da diese im Experiment unbeobachtbar sind. Die fett gedruckten Frequenzen wurden im Experiment an der Probe 42772/02 beobachtet, vergleiche Tabelle D.5 im Anhang auf Seite 145. Die Tabelle 7.6 zeigt, daß bei  $\langle 112 \rangle$ -Orientierung die erwarteten  $\text{Mu}_X$ -Signale mit denen der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  überlappen. Damit sind, in Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten, keine von den Signalen der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  klar abtrennbaren Präzessionssignale der Spezies  $\text{Mu}_X$  zu erwarten. Für die  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung ist erkennbar, daß ebenfalls keine auflösbaren  $\text{Mu}_X$ -Präzessionssignale zu erwarten sind. In  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung wird außer der im Experiment beobachteten Präzessionsfrequenz bei ca. 25 MHz keine weiteres auflösbare Signal der Spezies  $\text{Mu}_X$  erwartet. Der Magnetfeldverlauf der Frequenzen und Amplituden für  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung des Magnetfelds ist im Anhang in Abbildung D.1 dargestellt.

Der aus nur einem Teil der experimentellen Ergebnisse abgeleitete Hyperfeintensor beschreibt also auch die zur Ableitung nicht herangezogenen experimentellen Resultate sehr gut. Lediglich die an der Probe 42772/02 bei einem Magnetfeld von 5 mT gemessene Präzessionsfrequenz ist weder der Spezies  $\text{Mu}_X$  noch  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  eindeutig zuzuordnen (siehe oben) und liegt etwas außerhalb des für die Spezies  $\text{Mu}_X$  berechneten Frequenzverlaufs. Der für  $\text{Mu}_X$  bestimmte Hyperfeintensor ist dennoch konsistent mit allen experimentellen Beobachtungen.

Damit ist der Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_X$  (Gleichung (7.1)) bestimmt und kann als Unterstützung bei dem Versuch der mikroskopischen Charakterisierung der Spezies  $\text{Mu}_X$  herangezogen werden. Die Überlegungen hierzu werden im nächsten Kapitel dargestellt.

Magnetfeld- richtung	$\text{Mu}_{\text{BC}}$		$\text{Mu}_X$	
	Frequenz $\nu_{ij}$ [MHz]	Amplitude $a_{ij}$	Frequenz $\nu_{ij}$ [MHz]	Amplitude $a_{ij}$
$\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$			33,5	0,39
	<b>34,4</b>	0,23	34,9	0,17
	<b>42,8</b>	0,43		
	85,6	0,03	87,6	0,02
	120,0	0,02	122,4	0,03
	162,8	0,03	155,9	0,02
$\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$	24,7	0,022	<b>24,7</b>	0,168
	<b>34,9</b>	0,209		
			40,9	0,233
	<b>42,6</b>	0,230	41,7	0,233
	<b>50,0</b>	0,230		
	75,2	0,020	78,2	0,017
	96,7	0,015		
	121,4	0,012	124,9	0,015
	156,3	0,014		
	167,8	0,020	160,8	0,017
$\vec{B}_a \parallel \langle 112 \rangle$			16,9	0,082
			20,7	0,031
	29,0	0,103		
			36,0	0,218
	<b>37,2</b>	0,163	37,2	0,139
			40,9	0,110
	<b>42,6</b>	0,107	41,7	0,110
	<b>45,3</b>	0,231		
	<b>50,0</b>	0,107		
	75,2	0,018		
	121,4	0,015		
			126,9	0,017
			160,8	0,015
167,8	0,018			

Tabelle 7.6: Berechnete Frequenzen und Amplituden für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$  im äußeren Magnetfeld von 4 mT für die Magnetfeldrichtungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 100 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$  und  $\vec{B}_a \parallel \langle 112 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$ . Es sind die jeweils über die vier äquivalenten Gitterplätze gemittelten Amplituden angegeben. Frequenzen mit zugehörigen Amplituden unterhalb 0,01 wurden hierbei vernachlässigt. Die fett gedruckten Frequenzen wurden im Experiment an der Probe 42772/02 beobachtet, siehe auch Tabelle D.5 im Anhang D.



# Kapitel 8

## Ist $\text{Mu}_X$ ein Myonium–Sauerstoff-Komplex?

Die Existenz des Zustandes  $\text{Mu}_X$  scheint, wie in Kapitel 7 geschildert, mit der Sauerstoffkonzentration in der Probe zusammen zu hängen, wobei das Verhältnis von Sauerstoff- zu Dotieratomkonzentration offenbar die entscheidende Größe ist (vermutlich ist eine gewisse Mindestkonzentration von Sauerstoff erforderlich). Bei  $\text{Mu}_X$  könnte es sich also um einen Myonium–Sauerstoffkomplex handeln. Dessen Wasserstoffanalogon spielt vermutlich eine wichtige Rolle im Wechselspiel zwischen Sauerstoff und Wasserstoff in kristallinem Silizium.

Als Grundlage zur Interpretation von  $\text{Mu}_X$  soll daher zuerst das in der Literatur diskutierte Verhalten von Sauerstoff in kristallinem Silizium, insbesondere in der Gegenwart von Wasserstoff, diskutiert werden.

### 8.1 Das Verhalten von Wasserstoff und Sauerstoff in Silizium

Je nach Herstellungsverfahren ist die Sauerstoffkonzentration typischerweise etwa  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  in nach dem Czochralski-Verfahren gezogenen Siliziumkristallen, liegt aber meist bei nur etwa  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  in Kristallen, welche nach dem Zonenreinigungs-Verfahren gezogen wurden. Die Herstellung von Siliziumkristallen mit einer geringeren Sauerstoffkonzentration als  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  ist technologisch sehr aufwendig und für die kommerzielle Siliziumherstellung nicht relevant. Das Verhalten von Sauerstoff in Silizium wurde intensiv untersucht (JONES 1994, SHIMURA 1994). Es wird durch das Vorhandensein anderer Fremdatome, insbesondere Wasserstoff, stark beeinflusst. Der Sauerstoff liegt in Silizium direkt nach dem Ziehprozeß zum größten Teil interstitiell vor (PAJOT 1994). Interstitieller Sauerstoff ( $\text{O}_i$ ) ist auf dem „bond centre“-Platz lokalisiert.

Im folgenden werden die in der Literatur bekannten Phänomene, welche der Wechselwir-

kung von Sauerstoff und Wasserstoff in Silizium zugeschrieben werden, kurz beschrieben. Es wurden verschiedene Formen der Wechselwirkung zwischen Sauerstoff und Wasserstoff in Silizium beobachtet. Zum einen kann Wasserstoff elektrisch aktive, sauerstoffhaltige Komplexe passivieren (FULLER 1957). Diese sogenannten thermischen Donatoren entstehen üblicherweise in sauerstoffreichen Proben bei Temperaturen um 450 Grad Celsius. Andererseits ist in Gegenwart von Wasserstoff eine deutliche Erhöhung der Produktionsrate von thermischen Donatoren beobachtet worden (WEBER 1996).

Ab einer Temperatur von 350 Grad Celsius ist außerdem eine deutliche Erhöhung der Diffusivität von Sauerstoff in Silizium in der Gegenwart von Wasserstoff beobachtet worden (NEWMAN 1991, MURRAY 1989, MURRAY 1991). Der Wasserstoff scheint hierbei die Rolle eines Katalysators für die Sauerstoff-Diffusion zu spielen.

Es wird vermutet, daß die Absättigung von „dangling bonds“ in der Sattelpunktskonfiguration durch interstitiellen Wasserstoff bei der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion die katalytische Wirkung verursacht. Das mikroskopische Bild dieses Prozesses ist bisher jedoch unklar. Es wurden von mehreren Gruppe theoretische Betrachtungen zu den möglichen der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion zugrundeliegenden mikroskopischen Prozessen durchgeführt. Diese liefern jedoch widersprüchliche Aussagen. Bei sämtlichen im folgenden dargestellten Betrachtungen geht es hauptsächlich um stabile oder metastabile Konfigurationen der diversen Komplexe, in denen die Wechselwirkung von Wasserstoff und Sauerstoff eine entscheidende Rolle spielt.

ESTREICHER (1990) kam bei den ersten Rechnungen zur wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion zu dem Ergebnis, daß die stabilste Konfiguration erreicht wird, sofern der Wasserstoff auf dem dem Sauerstoff nächstgelegenen Tetraeder-Platz lokalisiert ist. Durch Ausbildung einer Si-H Bindung gleichzeitig mit dem Aufbrechen der Si-O-Si-Bindung wird –gemäß den Vorstellungen von Estreicher– die Aktivierungsenergie der Sauerstoff-Diffusion verringert. Nach dem Platzwechsel des Sauerstoffs befinden sich sowohl der Wasserstoff als auch der Sauerstoff auf benachbarten „bond centre“-Plätzen.

Berechnungen von JONES und Mitarbeitern (1992) zeigten ebenso die Herabsetzung der Aktivierungsenergie der Sauerstoff-Diffusion in Gegenwart von Wasserstoff, wobei jedoch ein mikroskopisch etwas anderes Bild gefunden wurde als von ESTREICHER (1990). Der energetisch günstigste Zustand ist in diesem Modell von JONES und Mitarbeitern (1992) gegeben, sofern der Wasserstoff auf einem „anti-bond centre“-Platz in Verlängerung der Si-O-Si-Bindung lokalisiert ist und damit eine H-Si-O-Si-Bindung ausgebildet wird. Aufgrund der Si-H-Bindung wird eine der Si-O-Bindungen etwas abgeschwächt, was zu einer erleichterten Diffusion des Sauerstoffs führt. Die soeben beschriebenen Berechnungen wurden jeweils für neutralen Wasserstoff durchgeführt. Von RAMAMOORTHY und PANTELIDES (1996a, b) wurden Berechnungen für unterschiedliche Ladungszustände des Wasserstoffs durchgeführt, und es zeigt sich, daß die jeweils energetisch günstigste Konfiguration vom Ladungszustand des Wasserstoffs abhängig ist. Im positiven und neutralen Ladungszustand ist der Wasserstoff auf einem dem Sauerstoffatom benachbarten „bond centre“-Platz lokalisiert, wohingegen für den negativen Ladungszustand des Wasserstoffs der „anti-bond centre“-Platz in Verlängerung der Si-O-Si-Bindung energetisch am günstigsten ist.

Von ESTREICHER und Mitarbeitern (1996) wurde 1996 ein dynamisches Modell zur wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion untersucht. Diese Betrachtungen liefern ein weiteres mikroskopisches Bild der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion. Nach diesen Modellvorstellungen befindet sich der Wasserstoff im Ausgangszustand wieder auf dem Tetraederplatz, welcher dem Sauerstoff am nächsten ist. Eine der beiden Si–O-Bindungen wird ebenfalls durch den Wasserstoff aufgebrochen. Im Gegensatz zum statischen Modell bildet sich nun anstelle einer Si–H- eine O–H-Bindung aus. Damit ist der Sauerstoff nur noch an ein Silizium und direkt zum Wasserstoff gebunden, wodurch er sehr beweglich wird. Der gesamte Wasserstoff–Sauerstoff-Komplex diffundiert gemeinsam zum nächsten „bond centre“-Platz.

Obwohl sich die Aussagen, welche anhand der beschriebenen Modelle gewonnen wurden, bzgl. des mikroskopischen Ablaufs der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion deutlich unterscheiden, ist die Bildung eines stabilen Sauerstoff–Wasserstoff-Komplexes allen Modellen gemeinsam. Die einzelnen Rechnungen liefern jedoch unterschiedlichste Konfigurationen dieses stabilen Komplexes. Zum einen kann sich der Wasserstoff auf unterschiedlichen Gitterplätzen befinden, und zum anderen kann er entweder an das Silizium oder den Sauerstoff gebunden sein. Der sich ausbildende stabile Komplex sollte experimentell beobachtbar sein. Er konnte allerdings bisher noch nicht identifiziert werden, womit keines der unterschiedlichen Modelle zum mikroskopischen Ablauf der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion bestätigt bzw. widerlegt werden konnte.

Durch Untersuchungen von lokalen Schwingungsmoden der Siliziumkristalle mittels Infrarot-Absorptions-Spektroskopie konnten von BECH NIELSEN und Mitarbeitern (1997b) in jüngster Zeit zwei Wasserstoff–Sauerstoff-Komplexe identifiziert werden, welche jeweils ein einzelnes Wasserstoffatom beinhalten. Die gewonnenen Resultate werden von den Autoren dahingehend interpretiert, daß sich sowohl der Wasserstoff als auch der Sauerstoff auf „bond centre“-Plätzen befinden, wobei sie zueinander zweit- bzw. drittnächste Nachbarn sind. Der an diesen Komplexen beteiligte Wasserstoff befindet sich dabei jeweils im positiven Ladungszustand.

## 8.2 Ist $\text{Mu}_X$ ein $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Sauerstoff-Komplex?

Wie bereits eingangs von Kapitel 8 erwähnt, bildet sich die Myonspezies  $\text{Mu}_X$  offenbar nur, sofern die Sauerstoffkonzentration die Dotieratomkonzentration der Probe deutlich übersteigt. Man kann vermuten, daß Myonium (z. B.  $\text{Mu}_T$ ) in diesem Fall an O (z. B.  $\text{O}_i$ ) eingefangen wird, bevor es mit Dotieratomen Komplexe bilden kann.  $\text{Mu}_X$  wäre nach diesen Vorstellungen einem paramagnetischen Myonium–Sauerstoff-Komplex zuzuordnen.

Der Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_X$  enthält Informationen über die Natur der in diesem Komplex gebundenen Myonspezies. Laut Gleichung 7.1 gilt



$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_X} = \begin{pmatrix} (-82,6 \pm 3,0) & 0 & 0 \\ 0 & (-82,6 \pm 3,0) & 0 \\ 0 & 0 & (5,3 \pm 3,0) \end{pmatrix} \text{ MHz}, \quad (8.1)$$

wobei die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung parallel zur  $z$ -Achse ist. Dieser Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_X$  ist sehr ähnlich zu dem von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ , welcher durch

$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_{\text{BC}}} = \begin{pmatrix} -92,6 & 0 & 0 \\ 0 & -92,6 & 0 \\ 0 & 0 & -16,8 \end{pmatrix} \text{ MHz} \quad (8.2)$$

gegeben ist, wobei die  $z$ -Achse ebenfalls parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung verläuft, siehe Tabelle 3.1, Seite 31. Auffällig ist jedoch der relative Vorzeichenwechsel der  $z$ -Komponente zwischen den beiden Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ . Das Vorzeichen der Hyperfeinparameter von  $\text{Mu}_X$  kann, wie bereits diskutiert, anhand der im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten TF $\mu$ SR-Experimente nicht bestimmt werden. Wegen der vermuteten Verwandtschaft der Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  wurde das Vorzeichen der dem Betrag nach größeren Komponente von  $\text{Mu}_X$  in Analogie zu dem von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  gewählt.

Die Symmetrieachse der beiden Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist identisch und verläuft entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung. Die Lokalisation des Myons im Kristallgitter des Siliziums könnte allerdings trotz identischer Symmetrieachse der beiden Spezies unterschiedlich sein. Entlang der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung existiert im Siliziumkristallgitter sowohl der „bond centre“- als auch der „anti-bond centre“-Platz. Ein physikalisch durchsichtigerer Vergleich der Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  ist anhand der aus den Hyperfeinparametern  $A_x$  und  $A_z$  berechenbaren Parametern  $A_C = 1/3(A_z + 2A_x)$  und  $A_D = 1/3(A_z - A_x)$  möglich, wobei  $A_C$  durch die Kontakt-Wechselwirkung und damit durch die Spindichte am Myonort,  $A_D$  dagegen durch den dipolaren Anteil zum Hyperfeintensor bestimmt ist (BONAPASTA 1991). Für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$  sind diese gegeben durch

$$\begin{aligned} \text{Mu}_{\text{BC}} &: A_C = -56,1 \text{ MHz}, A_D = 36,5 \text{ MHz}, \\ \text{Mu}_X &: A_C = -53,3 \text{ MHz}, A_D = 29,3 \text{ MHz}. \end{aligned}$$

Es ist zu beachten, daß die Parameter von  $\text{Mu}_X$  eine Fehlergrenze von  $\pm 3$  MHz aufweisen. Der Parameter  $A_C$  von  $\text{Mu}_X$  ist im Rahmen der Fehlergrenzen gegenüber  $A_C$  von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  unverändert. Die Kontakt-Wechselwirkung der Spezies  $\text{Mu}_X$  scheint also gegenüber der von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  nicht oder kaum verändert zu sein und wenn, dann etwas verringert. Der Parameter  $A_D$  ist für die beiden Spezies jedoch deutlicher verschieden, wobei der dipolare Anteil der Spindichte am Myonort in der Spezies  $\text{Mu}_X$  etwas geringer ist als in der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ . Dieser Vergleich der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$  deutet darauf hin, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  um ein Myon auf einem „bond centre“-Platz handelt, wobei vermutlich der Abstand des Myons zu den benachbarten Siliziumatomen, an denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des ungepaarten paramagnetischen Elektrons maximal ist, etwas vergrößert ist. Gleichzeitig mag es sein, daß die durch das ungepaarte Elektron induzierte Spindichte am Myonort

verringert wird. Ein in der Nachbarschaft von „ $\text{Mu}_{\text{BC}}$ “ lokalisierter Defekt könnte derartige Veränderungen bewirken. Bei einer Lokalisation des Myons auf einem „anti-bond centre“-Platz in der Spezies  $\text{Mu}_X$  sollten deutlichere Abweichungen der Parameter  $A_C$  und  $A_D$  von den für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  bestimmten vorhanden sein. Aufgrund des Zusammenhangs der Beobachtbarkeit von  $\text{Mu}_X$  mit der Sauerstoffkonzentration der Probe wird vermutet, daß es sich bei dem in der Nähe des Myons befindlichen Defekt um ein Sauerstoffatom, vermutlich interstitiellen Sauerstoff auf dem „bond centre“-Platz, handelt. Die Spezies  $\text{Mu}_X$  wird daher versuchsweise als  $\text{O}_i$ - $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Komplex interpretiert.

Daß an dem Gebilde  $\text{Mu}_X$  in irgendeiner Weise eine  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -ähnliche Spezies beteiligt sein muß, wird auch durch das Temperaturverhalten des Präzessionssignals von  $\text{Mu}_X$  unterstützt. Das beobachtete Temperaturverhalten von  $\text{Mu}_X$  ist analog zu dem von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ . Die Präzessionssignale beider Spezies verschwinden zwischen 150 K und 160 K. Beide Spezies sind also ab dieser Temperatur in starke dynamische Prozesse involviert, wodurch das Signal unbeobachtbar wird. Das Verschwinden der Präzessionssignale von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  mit steigender Temperatur wird insbesondere aufgrund der kurz vor dem Verschwinden beobachteten ansteigenden Relaxationsrate als thermische Ionisation des Myoniums interpretiert (SCHEUERMANN 1995, PATTERSON 1988). Das analoge Temperaturverhalten, sowohl der Asymmetrien als auch der Relaxationsraten von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ , läßt darauf schließen, daß das Verschwinden des Präzessionssignals von  $\text{Mu}_X$  ebenso durch thermische Ionisation verursacht wird. Die Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  sind sich offenbar so ähnlich, daß ihre Ionisationsenergien praktisch identisch sind.

Der Vergleich der Asymmetrien und Relaxationsraten der Präzessionssignale der verschiedenen Myonspezies in  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Proben, siehe Kapitel 7.1.1, ergab keinen deutlichen Unterschied der Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Spezies in Proben, welche das  $\text{Mu}_X$ -Signal zeigten, und solchen, die es nicht aufwiesen. Die Spezies  $\text{Mu}_X$  wird vermutlich nicht auf Kosten der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  gebildet.  $\text{Mu}_X$  wird entweder prompt gebildet oder über eine sehr schnelle Reaktion, wie z. B.  $\text{Mu}_T \rightarrow \text{Mu}_X$ . Als mögliche Reaktion wäre z. B. der Einfang der schnell diffundierenden Spezies  $\text{Mu}_T$  in der Nähe eines Sauerstoffatoms vorstellbar. Dieser Prozeß müßte sehr schnell ablaufen, so daß kein Phasenverlust des Myonspinensembles stattfindet, da ansonsten im Widerspruch zum experimentellen Befund das Signal des Reaktionsprodukts, d. h.  $\text{Mu}_X$ , unbeobachtbar sein sollte.

Die  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimente in einem zusätzlich zum transversalen Magnetfeld angelegten longitudinalen elektrostatischen Feld weisen einen deutlichen Unterschied zwischen den Spezies  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  auf. Ausschließlich das Präzessionssignal von  $\text{Mu}_X$  zeigt eine Abhängigkeit von der angelegten Spannung, wohingegen die Signale der Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und insbesondere auch von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  unverändert bleiben. Dies zeigt, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  zwar um eine  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -ähnliche jedoch deutlich von dieser abzugrenzende Spezies handelt. Ab einer angelegten Spannung von 2000 V wurde unabhängig von deren Vorzeichen ein Anstieg der Relaxationsrate des Präzessionssignals von  $\text{Mu}_X$  beobachtet. Die Interpretation dieses Verhaltens ist allerdings noch unklar. Zum einen ist aufgrund der nicht exakt definierbaren Dicke der isolierenden Klebeschicht zwischen Probe und Aluminiumfolie unklar, welches elektrostatische Feld bei der jeweils angelegten Spannung in der Probe vorhanden ist. Ab 2000 V war auf jeden Fall eine „Veränderung“ in der Probe vorhan-

den, welche das Präzessionssignal von  $\text{Mu}_X$  beeinflussen konnte. Zum anderen wurde diese Messung an nur einer Probe durchgeführt und somit ist unklar, ob dieser Effekt dotierungsabhängig ist oder nicht.

Bei der Beeinflussung des Präzessionssignals der Spezies  $\text{Mu}_X$  durch ein elektrostatisches Feld könnte es sich um eine Wechselwirkung mit bei der Thermalisierung des Myons erzeugten Ladungsträgern eines Vorzeichens handeln. Je nach Richtung des elektrostatischen Felds werden die bei der Thermalisierung erzeugten Ladungsträger einmal zum Myon hin bzw. vom Myon weg bewegt. In Edelgasen, z. B. flüssigem Neon, ist die Bildungsrate von Myonium von der Stärke und insbesondere auch der Richtung des elektrostatischen Felds abhängig (MEILIKHOV 1997, GORELKIN 1997). Dies wird so interpretiert, daß die durch Thermalisierung erzeugten Ladungsträger an der Myoniumbildung beteiligt sind. Der im Rahmen der vorliegenden Arbeit am Präzessionssignal der Spezies  $\text{Mu}_X$  beobachtete Effekt ist lediglich von der Stärke des elektrostatischen Felds, jedoch nicht von dessen Richtung abhängig. Dieser Effekt läßt sich somit nicht mit einer Beteiligung der bei der Thermalisierung erzeugten Ladungsträger an der Bildung der Spezies  $\text{Mu}_X$  erklären. Durch Anlegen des elektrostatischen Feldes wird außerdem die Relaxation, jedoch nicht die Asymmetrie, des Präzessionssignals der Spezies  $\text{Mu}_X$  beeinflußt. Die Bildungswahrscheinlichkeit wird aber durch die Asymmetrie und die Relaxationsrate durch die dynamischen Prozesse, an denen die Spezies beteiligt ist, bestimmt. Die Bildung der Spezies  $\text{Mu}_X$  bleibt somit vom Anlegen eines elektrostatischen Felds unberührt. Lediglich die Beteiligung an dynamischen Prozessen, welche sich im Ansteigen der Relaxationsrate bemerkbar machen, wird verstärkt. Bei den dynamischen Prozessen, welche die beobachtbare Relaxationsrate erhöhen, muß es sich um Prozesse handeln, welche erst nach der Bildung der Spezies einsetzen, sonst wäre auch die Asymmetrie betroffen. Es könnte sich z. B. um Stoßionisation der Spezies  $\text{Mu}_X$  nach deren Bildung durch im Feld beschleunigte Ladungsträger handeln. Dabei bleibt allerdings unklar, warum die kristallographisch ähnlich angeordnete Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  davon vollkommen unberührt bleibt. Die Interpretation der beobachteten Resultate in Bezug auf das mikroskopische Bild der Spezies  $\text{Mu}_X$  ist gegenwärtig noch unklar. Weitere Untersuchungen an unterschiedlichen Proben sollten hierzu beitragen.

Die Spezies  $\text{Mu}_X$  wird aufgrund der bisherigen Erkenntnisse als  $\text{O}_i$ - $\text{Mu}_{BC}$ -Komplex interpretiert. Die Spezies  $\text{Mu}_X$  könnte daher mit einem der mittels Infrarot-Absorptionsspektroskopie identifizierten schwach gebundenen Wasserstoff-Sauerstoff-Komplexen (BECH NIELSEN 1997b) korrespondieren. Allerdings wurde bei der Deutung der Infrarot-Absorptions-Messungen der positive Ladungszustand des Wasserstoffs auf dem „bond centre“-Platz betrachtet, wohingegen in der Spezies  $\text{Mu}_X$  das neutrale Analogon, d. h. das  $\text{Mu}_{BC}$ , beteiligt ist. Bestimmte Aussagen zur mikroskopischen Natur von  $\text{Mu}_X$  wären möglich, sobald Berechnungen der Hyperfeinparameter für verschiedene  $\text{Mu}_{BC}$ - $\text{O}_i$ -Konfigurationen vorlägen.

Ob es sich bei der bei tiefen Temperaturen (5 K) beobachteten Myonspezies  $\text{Mu}_X$  um eine Konfiguration handelt, welche am Prozeß der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion beteiligt ist, ist völlig unklar. Auch wenn eine Erhöhung der Sauerstoff-Diffusion erst bei Temperaturen oberhalb von 350 Grad Celsius beobachtet wird, ist es durchaus denkbar, daß die für den Prozeß entscheidende Wasserstoff-Sauerstoff-Konfiguration bereits bei

tiefen Temperaturen gebildet wird, die Diffusionsbarriere aber erst ab einer bestimmten Temperatur soweit abgesenkt wird, daß die Diffusion tatsächlich stattfinden kann. Die unterschiedlichen theoretischen Betrachtungen zum mikroskopischen Bild der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion kommen zu dem Ergebnis, daß der Wasserstoff in der Start- und Endkonfiguration des Prozesses entweder auf den „bond centre“ oder auf dem „anti-bond centre“-Platz lokalisiert ist. Wäre  $Mu_X$  das Analogon der relevanten Konfiguration, so müßte der letztgenannte Vorschlag aufgrund obiger Ausführungen ausgeschlossen werden.

Wegen der verbleibenden Unsicherheiten in Bezug auf die Interpretation dieser Myonspezies und der Unklarheit des zugehörigen mikroskopischen Bildes bleiben wir bei der Notation  $Mu_X$  für diese Myonspezies.



# Kapitel 9

## Entdeckung und Identifikation der Spezies $\text{Mu}_V$

In diesem Kapitel werden die  $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen, welche zur Entdeckung und Identifikation der Myonspezies  $\text{Mu}_V$  führten, beschrieben. Die Existenz einer Spezies mit schwacher Hyperfeinwechselwirkung konnte anhand von LFQ-Untersuchungen gezeigt werden. Genaue Werte für den Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_V$  konnten allerdings erst anhand von ZF $\mu\text{SR}$ -Untersuchungen bestimmt werden. Der so bestimmte Hyperfeintensor liegt nach geeigneter Reskalierung sehr nahe bei dem Hyperfeintensor, welcher für ein Wasserstoffzentrum in protonenimplantiertem kristallinem Silizium mittels EPR-Untersuchungen identifiziert wurde. Dieses Wasserstoffzentrum wird einem in einer Leerstelle eingefangenen Wasserstoff zugeordnet. Um diese Zuordnung anhand von  $\mu\text{SR}$ -Experimenten zu untersuchen, wurden LFQ-Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben, welche eine erhöhte Leerstellenkonzentration aufweisen, durchgeführt.

### 9.1 LFQ-Untersuchungen an unterschiedlich dotierten Proben

Bereits früher wurde bei LFQ-Untersuchungen ein wesentlicher Unterschied zwischen den LFQ-Kurven festgestellt, welche an zwei dotierten Siliziumkristallen (Si:P, Si:B) einerseits und einer undotierten Probe (Si(i)) andererseits aufgenommen wurden (SCHMIDL 1997). (Zur Erinnerung: eine „Longitudinal Field Quenching“-Kurve oder LFQ-Kurve beschreibt den Verlauf der zeitlich gemittelten Myonspinpolarisation in Richtung des angelegten Magnetfelds in Abhängigkeit von der Stärke des angelegten Magnetfelds, siehe Kapitel 5.) Bei den dotierten Proben ist die Anpassung des in Kapitel 5 beschriebenen Modells, welches die Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  berücksichtigt, an die Meßdaten im gesamten Magnetfeldbereich sehr gut, wohingegen in der undotierten Probe Si(i) bei sehr kleinen Magnetfeldern  $B_a < 0,003$  T eine deutliche Abweichung zwischen den Meßdaten und der angepaßten Modellfunktion existiert (SCHMIDL 1997). Die Ursache dieser Abweichung blieb jedoch zunächst unklar. Da die Messung an der undotierten Probe bei einer anderen Orientierung

des Magnetfelds bzgl. der kristallographischen Orientierung ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ) durchgeführt wurde als die Messungen an den dotierten Proben ( $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$ ), mußte zunächst geklärt werden, ob es sich bei der beobachteten Abweichung um einen orientierungs- oder dotierungsabhängigen Effekt handelt. Eine starke Orientierungsabhängigkeit würde man z. B. erwarten, wenn die Wechselwirkung mit dem Kernspin des Siliziumisotops  $^{29}\text{Si}$ , welches in natürlichem Silizium in geringen Konzentrationen vorhanden ist, für die beobachteten Abweichungen verantwortlich wäre. Numerische Simulationen zum Einfluß des Kernspins (ESTLE 1984a) liefern eine starke Orientierungsabhängigkeit der durch die nukleare Hyperfeinwechselwirkung hervorgerufenen Myonspinpolarisation. Die Resultate der Experimente an Germanium (ESTLE 1984b) sind in Übereinstimmung mit diesen numerischen Simulationen.

Um den Einfluß der kristallographischen Orientierung des angelegten Magnetfelds  $B_a$  auf die LFQ-Kurven von derjenigen der Dotierung zu trennen, wurde eine weitere undotierte einkristalline Siliziumprobe 47079/6 mit der LFQ-Methode vermessen. Diese Probe wurde so geschnitten, daß die Untersuchungen in einem longitudinalen Magnetfeld durchgeführt werden konnten, welches parallel zur kristallographischen  $\langle 111 \rangle$ -Richtung war. Bei genau dieser kristallographischen Orientierung des angelegten Magnetfelds wurden auch die früheren LFQ-Messungen an den beiden dotierten Siliziumproben, der phosphordotierten Probe Si:P sowie der bordotierten Probe Si:B (SCHMIDL 1997, SCHEUERMANN 1995, IWANOWSKI 1994), durchgeführt. Da die Messungen an der im Rahmen dieser Arbeit erstmals mit der LFQ-Methode untersuchten Probe 47079/6 ( $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$ ) bei einer Temperatur von 10 K durchgeführt wurden, wurde auch an der bisher nur im Temperaturbereich zwischen 16 K und 30 K vermessenen Probe Si:P ( $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$ ) (SCHMIDL 1997) eine LFQ-Kurve bei  $T = 10$  K aufgenommen, um auch hinsichtlich von Temperatureinflüssen absolute Vergleichbarkeit herzustellen. Diese Messung wurde der klaren Systematik wegen durchgeführt, obwohl eigentlich davon auszugehen war, daß das Auftreten oder Nichtauftreten der oben beschriebenen Anomalie in den LFQ-Kurven im Bereich tiefer Temperaturen ( $T < 30$  K) nicht kritisch von der Temperatur abhängt. Anhand der bisherigen LFQ-Untersuchungen konnten nämlich zwischen 5 K und 30 K keine gravierenden Unterschiede der an die gemessenen Kurven angepaßten Parameter festgestellt werden (SCHMIDL 1997, IWANOWSKI 1994). Dies wird sich im weiteren Verlauf dieses Kapitels auch für die Probe Si:P bestätigen.

Zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit der beobachteten Anomalie wurden auch die Messungen an der bereits mit LFQ untersuchten undotierten Probe Si(i) ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ) bei 10 K wiederholt. Die früheren Ergebnisse, insbesondere das Auftreten der Anomalie in den LFQ-Kurven bei sehr kleinen Magnetfeldern, wurden dabei bestätigt. Aus der direkten Reproduzierbarkeit kann man schließen, daß es sich hierbei nicht um eine experimentelle Unschärfe handelt.

Die Eigenschaften der untersuchten Proben sind in Tabelle 6.1 auf Seite 68 aufgelistet. Weiterhin ist in Tabelle 6.1 die kristallographische Orientierung, die bei den LFQ-Messungen jeweils parallel zum angelegten Magnetfeld lag, angegeben. Die an den dotierten Proben Si:P und Si:B sowie undotierten Proben Si(i) und 47079/6 experimentell bestimmten LFQ-Kurven sind in den Abbildungen 9.1 bis 9.5 dargestellt. Im Zusammenhang mit der hier geführten Diskussion sind die Ausschnittvergrößerungen, welche den

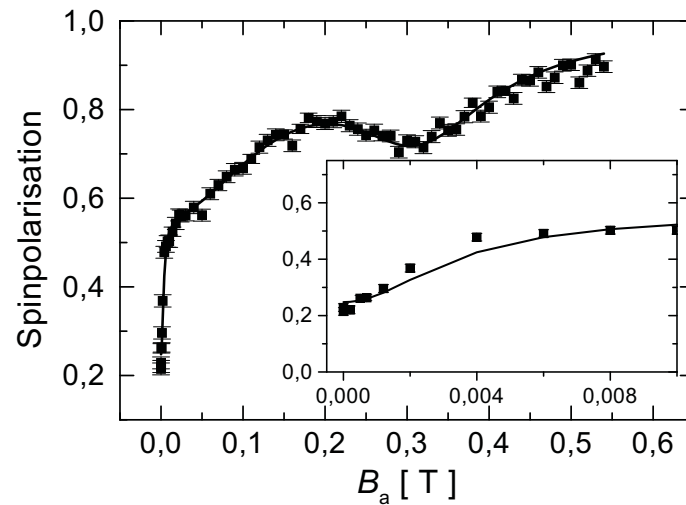


Abbildung 9.1: Ergebnisse der LFQ-Untersuchung an der phosphordotierten Probe Si:P bei  $T = 10$  K. Die experimentellen Ergebnisse sind durch Quadrate dargestellt und die durchgezogene Linie stellt die Anpassung der Quenching-Kurve an die Meßdaten dar. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T.

Bereich sehr kleiner Magnetfelder hervorheben, besonders wichtig.

Zur quantitativen Auswertung von LFQ-Messungen sind Anpassungen von theoretischen Quenching-Kurven an die experimentellen Daten erforderlich. Die Form der theoretisch bestimmten Quenching-Kurven wird sehr stark durch dynamische Prozesse beeinflusst. Selbst ein Modell, in dem nur die drei Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\mu_T$  und  $\mu_{BC}$  mit bekannten Hyperfeinparametern berücksichtigt werden, liefert bereits sehr vielfältige Quenching-Kurven. Dennoch lassen sich nicht alle im Experiment bestimmten LFQ-Kurven mit diesem Modell befriedigend anpassen. Aus diesem Grund mußte eine weitere Myonspezies mit in das Modell aufgenommen werden. Die entsprechenden Auswertungen der LFQ-Kurven werden im folgenden detailliert beschrieben.

### 9.1.1 Auswertung der Experimente

In diesem Kapitel erfolgt die Auswertung der an den Proben Si:P, Si:B, Si(i) sowie 47079/6 bei  $T = 10$  K gemessenen LFQ-Kurven (Abbildung 9.1 bis 9.5). Aus den Anpassungen ergeben sich die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen im theoretischen Modell berücksichtigten Myonspezies sowie die Raten der diversen im Modell enthaltenen dynamischen Prozesse, z. B. für Übergänge zwischen unterschiedlichen Myonspezies sowie für Elektronenspinaustausch. Die an die experimentellen Resultate angepaßten Quenching-Kurven sind in den Abbildungen 9.1 bis 9.5 als durchgezogene Linien dargestellt, wobei in Abbildung 9.1 bis 9.4 nur die wohlbekanntesten Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\mu_T$  und  $\mu_{BC}$  (siehe Kapitel 5) berücksichtigt wurden. In den Bildausschnitten ist jeweils eine Ausschnittvergrößerung des Bereichs kleiner Magnetfelder gezeigt. Die aus den Anpassungen gewonnenen Modellparameter sind in Tabelle 9.1, Seite 109, aufgelistet.



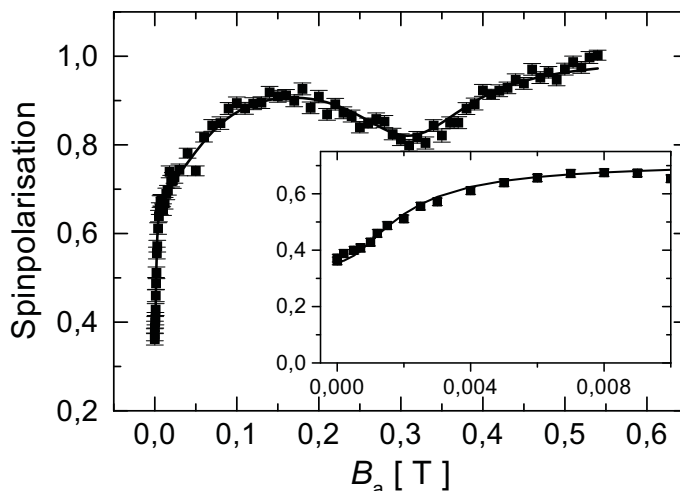


Abbildung 9.2: Ergebnisse der LFQ-Untersuchung an der bordotierten Probe Si:B bei  $T = 10$  K aus SCHMIDL (1997). Die experimentellen Ergebnisse sind durch Quadrate dargestellt und die durchgezogene Linie stellt die Anpassung der Quenching-Kurve an die Meßdaten dar. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T.

Die an der phosphordotierten Probe Si:P bei  $T = 10$  K und für  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$  gewonnenen experimentellen Ergebnisse sind zusammen mit der daran angepaßten Quenching-Kurve in Abbildung 9.1 dargestellt. Die Anpassung stimmt im gesamten Magnetfeldbereich, insbesondere auch bei kleinen Magnetfeldern, wie die Ausschnittvergrößerung in Abbildung 9.1 zeigt, sehr gut mit den experimentellen Daten überein. Es ergibt sich für die Probe Si:P bei  $T = 10$  K eine Bildungswahrscheinlichkeit von  $(16,3 \pm 1,6)$  % für  $\mu^d$ ,  $(48,0 \pm 2,4)$  % für  $\text{Mu}_T$  sowie  $(35,6 \pm 2,1)$  % für  $\text{Mu}_{BC}$ . Um eine die experimentellen Daten gut wiedergebende Anpassung einer Quenching-Kurve zu ermöglichen, mußten für diese Probe bereits bei  $T = 10$  K Spinaustauschprozesse berücksichtigt werden. Für die Spezies  $\text{Mu}_T$  ergab sich eine Spinaustauschrate von  $(0,9 \pm 0,4) \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ , für die Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  ergab sich  $(3,0 \pm 1,4) \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ . Diese im Rahmen der vorliegenden Arbeit bei  $T = 10$  K bestimmten Parameter stimmen gut mit den bereits früher aus Messungen im Temperaturbereich zwischen 16 K und 30 K an dieser Probe bestimmten Werten überein (SCHMIDL 1997). Lediglich die in SCHMIDL (1997) bestimmte Spinaustauschrate von  $(0,1 \pm 0,1) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  für die Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  liegt im Vergleich zu der hier bestimmten Rate deutlich tiefer.

Die bordotierte Probe Si:B wurde von SCHMIDL (1997) sehr ausführlich untersucht und daher im Rahmen dieser Arbeit nicht weitergehend vermessen. Die bei  $T = 10$  K gewonnenen Ergebnisse sind für die spätere Diskussion der im Rahmen der vorliegenden Arbeit gewonnenen Ergebnisse von Bedeutung und sollen daher hier kurz vorgestellt werden. Die bei  $T = 10$  K von SCHMIDL (1997) gewonnenen experimentellen Daten sowie die daran angepaßte Quenching-Kurve sind in Abbildung 9.2 dargestellt. Bei 10 K konnte keinerlei Beteiligung dynamischer Prozesse beobachtet werden. Die Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $\mu^d$  wurde in SCHMIDL (1997) zu 0,6 %, für  $\text{Mu}_T$  zu 56,2 % und für  $\text{Mu}_{BC}$  zu 43,2 %

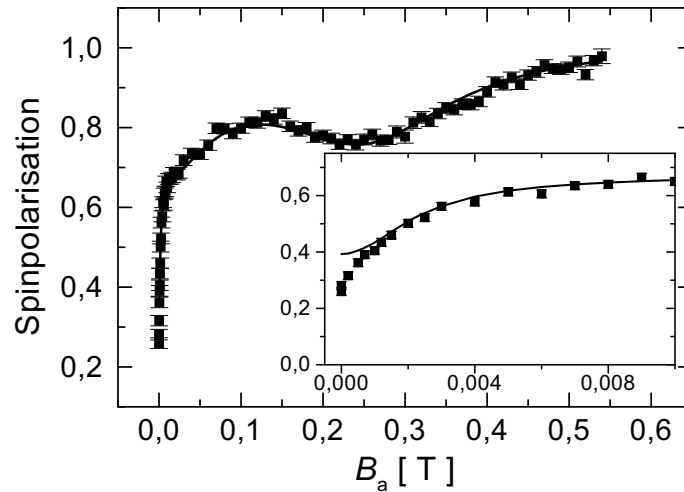


Abbildung 9.3: Ergebnisse der LFQ-Untersuchung an der undotierten Probe Si(i) bei  $T = 10$  K. Die experimentellen Ergebnisse sind durch Quadrate dargestellt und die durchgezogene Linie stellt die Anpassung der Quenching-Kurve an die Meßdaten dar. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T.

bestimmt. Die Anpassung der Quenching-Kurve stimmt im gesamten Magnetfeldbereich sehr gut mit den experimentellen Daten überein, siehe Abbildung 9.2. Abgesehen davon, daß in der Probe Si:B keine dynamischen Prozesse gefunden wurden, sind die Ergebnisse ähnlich zu den an der phosphordotierten Probe Si:P erhaltenen Resultaten.

Die an der undotierten Probe Si(i) bei  $T = 10$  K und für  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  gewonnenen LFQ-Daten sind zusammen mit der daran angepaßten Quenching-Kurve in Abbildung 9.3 dargestellt. Bei Betrachtung der Ausschnittvergrößerung des Bereichs kleiner Magnetfelder ist eine deutliche Diskrepanz zwischen den experimentellen Daten und der daran angepaßten Quenching-Kurve sichtbar. Oberhalb von ca. 0,003 T stimmt die angepaßte theoretische Quenching-Kurve allerdings recht gut mit den experimentellen Daten überein. Genau dieses Verhalten wurde bereits von SCHMIDL (1997) beobachtet, wobei die gleiche Probe unter identischen Bedingungen untersucht wurde. Die Bildungswahrscheinlichkeiten der Spezies ergeben sich anhand der hier in Abbildung 9.3 dargestellten Anpassung zu  $(3,0 \pm 0,5) \%$  für  $\mu^d$ ,  $(52,6 \pm 3,6) \%$  für  $\mu_T$  sowie  $(47,0 \pm 2,7) \%$  für  $\mu_{BC}$ . Für dynamische Prozesse findet man bei  $T = 10$  K in der undotierten Probe Si(i) keinerlei Hinweise. Die aus der Anpassung bestimmten Bildungswahrscheinlichkeiten der Myonspezies sind in sehr guter Übereinstimmung mit den in SCHMIDL (1997) bestimmten Werten.

Es ist klar, daß die Ergebnisse dieser Anpassung zunächst unter starkem Vorbehalt stehen, denn die LFQ-Daten bei sehr niedrigen Magnetfeldern werden durch sie nur sehr unvollkommen beschrieben. Es zeigt sich, daß es nicht möglich ist, die Daten im Rahmen eines Modells anzupassen, welches ausschließlich die bekannten Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\mu_T$  und  $\mu_{BC}$  berücksichtigt. Um sicherzustellen, daß man sich bei der Anpassung, welche die oben angegebenen Parameter liefert, nicht in einem Nebenminimum des Parameter-raums des angegebenen Modells befindet, wurden unterschiedlichste Kombinationen als

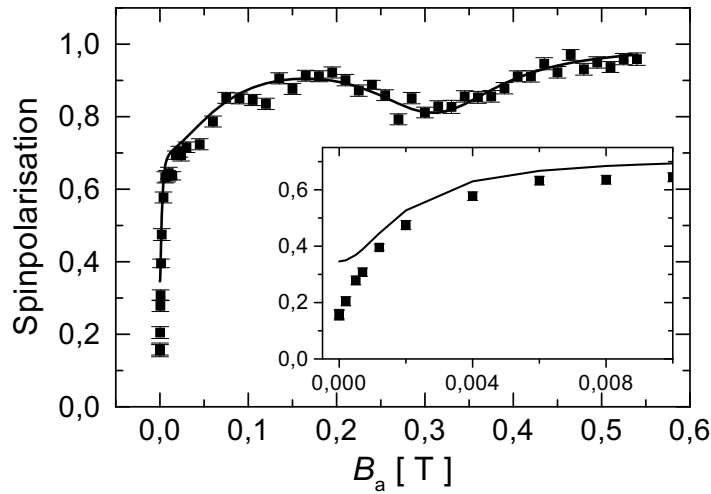


Abbildung 9.4: Ergebnisse der LFQ-Untersuchung an der undotierten Probe 47079/6 bei  $T = 10$  K. Die experimentellen Ergebnisse sind durch Quadrate dargestellt und die durchgezogene Linie stellt die Anpassung der Quenching-Kurve des konventionellen Modells an die Meßdaten dar. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T.

Startbedingung der Anpassung verwendet. Die oben angegebenen Parameter sowie die daraus abgeleiteten Aussagen beruhen auf der Anpassung, welche das absolute Minimum der quadratischen Abweichung zwischen experimentellen Daten und daran angepaßter Quenching-Kurve darstellt.

Um, wie bereits besprochen, Dotierungs- oder Orientierungsabhängigkeiten sauber voneinander trennen zu können, wurden Messungen an einer weiteren undotierten Probe 47079/6 ebenfalls bei 10 K, jedoch bei einer Orientierung des angelegten Magnetfelds  $\vec{B}_a$  parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung, durchgeführt. Die an dieser Probe gewonnenen LFQ-Daten sind zusammen mit der daran angepaßten theoretischen Quenching-Kurve in Abbildung 9.4 dargestellt. Auch hier ist bei Betrachtung der Ausschnittvergrößerung bei kleinen Magnetfeldern eine deutliche Diskrepanz zwischen angepaßter Quenching-Kurve und experimentellen Resultaten beobachtbar, und zwar qualitativ gleich wie bei der Probe Si(i) ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ). Mit dieser Messung ist somit gezeigt, daß das Auftreten bzw. Nichtauftreten der Abweichung zwischen der theoretischen Quenching-Kurve und den experimentellen Daten bei sehr kleinen Magnetfeldern durch die Dotierung der Proben bestimmt wird. Obwohl die Messungen an dotierten sowie undotierten Proben mit der gleichen kristallographischen Orientierung des angelegten Magnetfelds  $\vec{B}_a \parallel \langle 111 \rangle$  durchgeführt wurden, liefern diese im Hinblick auf das Verhalten der LFQ-Kurven bei kleinen Magnetfeldern unterschiedliche Resultate. Die Anpassparameter der in Abbildung 9.4 gezeigten Kurve sind die Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Spezies, diese wurden zu  $(0 \pm 1)$  % für  $\mu^d$ ,  $(54 \pm 6)$  % für  $\text{Mu}_T$  sowie  $(46 \pm 6)$  % für  $\text{Mu}_{BC}$  bestimmt. Diese sind in guter Übereinstimmung mit den an der undotierten Probe Si(i) ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ) bestimmten Werten und sind außerdem konsistent mit den mittels TF $\mu$ SR-Untersuchungen an undotierten Proben bestimmten Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies

(PATTERSON 1988). Die Ergebnisse dieser Anpassung stehen natürlich wieder unter dem im vorigen Abschnitt genannten Vorbehalt.

Die Diskrepanz zwischen angepaßter Quenching-Kurve und experimentellen Daten ist nur geringfügig von der Orientierung der Probe bzgl. des Magnetfelds abhängig, denn beide untersuchten undotierten Proben zeigen trotz unterschiedlicher Orientierung ein sehr ähnliches Verhalten. Es ist daher sehr unwahrscheinlich, daß diese Abweichung durch die Wechselwirkung von Myonium mit dem Kernspin von  $^{29}\text{Si}$  verursacht wird, da dieser Effekt stark orientierungsabhängig sein sollte (ESTLE 1984a, b). Die beobachtete Abweichung bei kleinen Magnetfeldern werden jedoch sofort verständlich, sofern man die Existenz einer weiteren bisher unbekanntem paramagnetischen Myonspezies annimmt, welche zusätzlich zu den Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  vorhanden ist. Damit der bereits bei sehr kleinen Magnetfeldern beobachtete Quenching-Effekt (Wiederanstieg der zeitlich gemittelten Myonspinpolarisation) möglich wird, muß sich die neue paramagnetische Myonspezies durch sehr kleine Hyperfeinkopplungsparameter im Bereich zwischen 10 MHz und einigen 10 MHz auszeichnen. Diese hypothetische Myonspezies wird in den dotierten Proben (Si:P und Si:B) offenbar nicht gebildet, denn in diesen Proben ist keinerlei Anomalie bei kleinen Magnetfeldern beobachtbar.

Die obigen Bemerkungen zeigen, daß wir uns auf die Suche nach einer paramagnetischen Myonspezies mit sehr kleinen Hyperfeinkopplungsparametern begeben sollten. In der Literatur wurde kürzlich über eine Wasserstoffspezies mit schwacher Hyperfeinwechselwirkung berichtet (BECH NIELSEN 1997a, JOHANNESSEN 1997). Diese Wasserstoffspezies wurde in protonenbestrahltem Silizium mittels EPR identifiziert und als VH bezeichnet. Die Spezies VH wurde von den Autoren einem in einer Silizium-Leerstelle eingefangenen Wasserstoff zugeschrieben. Die Hyperfeinparameter der Spezies VH sind mit  $A_x^{\text{VH}} = -3,3$  MHz,  $A_y^{\text{VH}} = -4,6$  MHz sowie  $A_z^{\text{VH}} = 8,5$  MHz gegeben, siehe Tabelle 3.1, Seite 31, wobei die  $z$ -Achse des Koordinatensystems mit der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse einen Winkel von 8 Grad einschließt. In Tabelle 3.1 sind ebenfalls die Hyperfeinparameter der zu VH analogen Myonspezies sowie der Spezies  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  angegeben.

Wir stellen hier nun die Hypothese auf, die wir im folgenden zu untermauern versuchen, daß es sich bei der von uns vermuteten Myonspezies um das Myon-Analogon der Wasserstoffspezies VH handelt. Um die Hyperfeinparameter von VH auf die einer analogen Myonspezies umzurechnen, müssen diese mit dem Verhältnis der magnetischen Momente von Myon zu Proton skaliert werden. Das Verhältnis der magnetischen Momente entspricht etwa dem Verhältnis der Vakuumhyperfeinparameter von Wasserstoff zu Myonium. Nach Skalierung ergeben sich für die zu VH analoge Myonspezies, welche wir mit  $\text{Mu}_V$  bezeichnen, die Hyperfeinparameter  $A_x = -10,4$  MHz,  $A_y = -14,5$  MHz und  $A_z = 26,7$  MHz. Diese skalierten Hyperfeinparameter liegen in der für die gesuchte Myonspezies erwarteten Größenordnung. Um zu quantitativen Aussagen zu kommen, muß die zu VH analoge Myonspezies in das bisher existierende Modell zur Berechnung der Quenching-Kurven integriert werden. Die hierzu notwendigen Vorbereitungen wurden bereits in Kapitel 5 getroffen. Zur Vereinfachung wurde statt des nur näherungsweise axialsymmetrischen, von der Wasserstoffspezies VH auf die analoge Myonspezies skalierten Hyperfeintensors, ein vollständig axialsymmetrischer Hyperfeintensor verwendet, indem die entsprechenden Komponenten  $A_x = -10,4$  MHz und  $A_y = -14,5$  MHz durch ihren Mittelwert

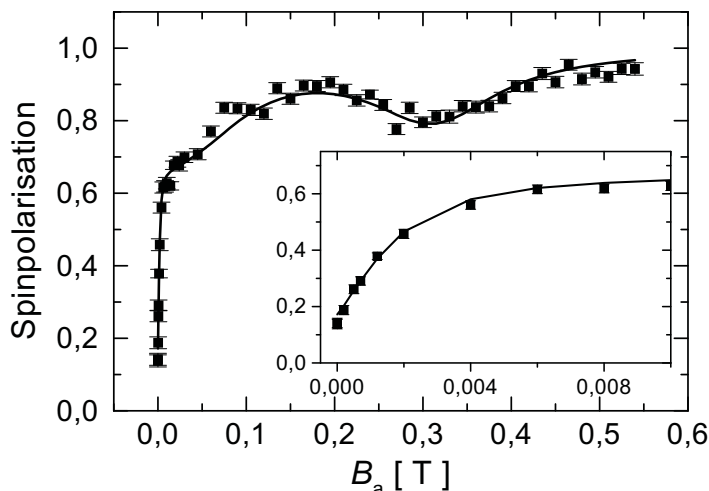


Abbildung 9.5: Ergebnisse der LFQ-Untersuchung an der undotierten Probe 47079/6 bei  $T = 10$  K. Die experimentellen Ergebnisse sind durch Quadrate dargestellt und die durchgezogene Linie stellt die Anpassung der Quenching-Kurve des um die Spezies  $\text{Mu}_V$  erweiterten Modells an die Meßdaten dar. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T.

$A_x^{\text{Mu}_V} = A_y^{\text{Mu}_V} = -12,45$  MHz ersetzt wurden. Die  $z$ -Komponente  $A_z^{\text{Mu}_V} = 26,7$  MHz bleibt unverändert. Des weiteren wurde die Abweichung von 8 Grad zwischen der  $z$ -Achse des Hyperfeintensors von VH und der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung vernachlässigt, d. h. die  $z$ -Achse des Hyperfeintensors der hypothetischen zu VH analogen Myonspezies, die wir nun mit  $\text{Mu}_V$  bezeichnen, sei parallel zur  $\langle 110 \rangle$ -Kristallachse. Die paramagnetische Myonspezies  $\text{Mu}_V$ , welche durch den oben definierten Hyperfeintensor charakterisiert ist, wurde in das existierende Modell zur Berechnung der Quenching-Kurven integriert, wobei alle möglichen dynamischen Prozesse, wie Spinaustausch des Elektrons sowie Umwandlung von  $\text{Mu}_V$  in die anderen Myonspezies bzw. Bildung von  $\text{Mu}_V$  aus den anderen Spezies berücksichtigt wurden.

Dieses um die neue, oben definierte, hypothetische Myonspezies  $\text{Mu}_V$  erweiterte Modell wurde zur Berechnung theoretischer Quenching-Kurven herangezogen und dieses dann an die experimentellen Daten angepaßt. Das Ergebnis einer erfolgreichen Anpassung dieses um  $\text{Mu}_V$  erweiterten Modells an die bereits in Abbildung 9.4 gezeigten experimentellen Daten ist in Abbildung 9.5 dargestellt. Die Anpassung des um  $\text{Mu}_V$  erweiterten Modells zeigt insbesondere im Bereich kleiner Magnetfelder eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten als das konventionelle Modell, welches nur die Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  beinhaltet.

Die Parameter der Anpassung an die an der Probe 47079/6 gewonnenen experimentellen Daten sind die Bildungswahrscheinlichkeiten der einzelnen Myonspezies sowie die Raten der vorhandenen dynamischen Prozesse. Die Bildungswahrscheinlichkeiten wurden zu  $(1 \pm 2)$  % für  $\mu^d$ ,  $(48 \pm 6)$  % für  $\text{Mu}_T$ ,  $(49 \pm 6)$  % für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  sowie  $(3 \pm 5)$  % für  $\text{Mu}_V$  bestimmt. Außerdem war eine gute und mit  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Messungen konsistente Anpassung

Probe	Si:P	Si:B	Si(i)		47079/6	
$\mu^d$ [%]	$16,3 \pm 1,6$	0,6	$3,0 \pm 0,5$	$0 \pm 2$	$0 \pm 1$	$1 \pm 2$
$Mu_T$ [%]	$48,0 \pm 2,4$	56,2	$52,6 \pm 3,6$	$50 \pm 7$	$54 \pm 6$	$48 \pm 6$
$Mu_{BC}$ [%]	$35,6 \pm 2,1$	43,2	$47,0 \pm 2,7$	$49 \pm 5$	$46 \pm 6$	$49 \pm 6$
$Mu_V$ [%]	-	-	-	$2 \pm 4$	-	$3 \pm 5$
$\nu_{Mu_T}$ [ $10^6 \text{ s}^{-1}$ ]	$0,9 \pm 0,4$	-	-	-	-	-
$\nu_{Mu_{BC}}$ [ $10^6 \text{ s}^{-1}$ ]	$3,0 \pm 1,4$	-	-	-	-	-
$\Delta_{Mu_T \rightarrow Mu_V}$ [ $10^6 \text{ s}^{-1}$ ]	-	-	-	$0,8 \pm 0,4$	-	$1,0 \pm 0,4$
Abbildung	9.1	9.2	9.3	-	9.4	9.5

Tabelle 9.1: Aus den Anpassungen erhaltene Modellparameter für die verschiedenen jeweils bei  $T = 10 \text{ K}$  untersuchten Proben. (Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies in %, Spinaustauschraten  $\nu_{Mu_T}, \nu_{Mu_{BC}}$  für  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  sowie Umwandlungsrate von  $Mu_T$  nach  $Mu_V$  in  $10^6 \text{ s}^{-1}$ .) Die zugehörigen Abbildungen mit Anpassung und experimentellen Daten sind in der letzten Zeile aufgeführt. Für die Probe Si(i) und 47079/6 wurden jeweils Anpassungen mit und ohne Hinzunahme der Spezies  $Mu_V$  durchgeführt.

nur unter Hinzunahme einer Umwandlung der Spezies  $Mu_T$  in die Spezies  $Mu_V$  mit einer Übergangsrate von  $(1,0 \pm 0,4) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  möglich, wie im folgenden näher erläutert wird.

Um eine erfolgreiche Anpassung einer Quenching-Kurve an die experimentellen Daten zu erhalten, wurden unterschiedlichste Kombinationen von Anpassparametern untersucht. Bei Betrachtung von Abbildung 5.4, Seite 64, wird klar, daß sich die Quenching-Kurven der Spezies  $Mu_T$  und  $Mu_V$  hauptsächlich im Bereich kleiner Magnetfelder unterscheiden, wohingegen die beiden Kurven bei höheren Magnetfeldern sehr ähnlich verlaufen. Als erste Möglichkeit liegt somit nahe, die Spezies  $Mu_V$  als statische, nicht mit den Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  und  $Mu_{BC}$  wechselwirkende Spezies aufzunehmen. Dieses Vorgehen liefert eine deutliche Bildungswahrscheinlichkeit (ca. 40 %) der Spezies  $Mu_V$ , jedoch gleichzeitig eine verschwindende Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $Mu_T$ , was jedoch in Widerspruch zu den TF $\mu$ SR-Ergebnissen an undotierten Siliziumproben steht, welche eine Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $Mu_T$  von  $(61,0 \pm 7,6) \%$  liefern (PATTERSON 1988). Daher liegt die Spezies  $Mu_V$  in dieser Probe wohl nicht einzig und allein statisch vor, sondern nimmt vermutlich auch an dynamischen Prozessen teil. Dazu wurden Spinaustauschprozesse der Spezies  $Mu_V$  sowie Übergänge von der Spezies  $\mu^d$ ,  $Mu_T$  oder  $Mu_{BC}$  nach  $Mu_V$  sowie umgekehrt untersucht. Bei Hinzunahme von Spinaustauschprozessen ergibt sich ebenso wie

bei statischem  $\text{Mu}_V$  eine zu geringe Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $\text{Mu}_T$ . Die Anpassungen, welche Übergänge von  $\mu^d$  bzw.  $\text{Mu}_{BC}$  nach  $\text{Mu}_T$  und umgekehrt beinhalten, führen lediglich in Nebenminima des Parameterraums mit zum Teil geringerer Güte als die Anpassung des ursprünglichen Modells ohne die Spezies  $\text{Mu}_V$ . Diese Anpassungen sind daher unbefriedigend, was sich mit der deutlich unterschiedlichen Kurvenform der beteiligten Zustände erklären läßt. Eine vernünftige Anpassung, welche mit den bisherigen  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Resultaten kompatibel ist, läßt sich nur durch Hinzunahme der Umwandlung der Spezies  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  mit den oben angegebenen Parametern erzielen. Dies läßt sich dadurch erklären, daß sich die Quenching-Kurven von  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_V$  lediglich im Bereich kleiner Magnetfelder, in welchem die Anomalie beobachtet wurde, unterscheiden und sonst nahezu identisch sind. Diese Anpassung, deren Parameter auch oben angegeben sind, besitzt die gleiche Güte wie die oben erwähnte Anpassung mit statischem  $\text{Mu}_V$ , welche jedoch wegen ihrer Inkompatibilität mit den Ergebnissen aus  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen verworfen wurde.

Es muß noch betont werden, daß sich aus dieser Anpassung ergibt, daß die Myonspezies  $\text{Mu}_V$  hauptsächlich aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  gebildet wird, und nur zu einem fast vernachlässigbaren Anteil direkt nach der Thermalisierung des Myons. Dies wird später bei der Deutung der Befunde noch eine Rolle spielen. Die Einbeziehung der Spezies  $\text{Mu}_V$  in die Anpassung ändert praktisch nichts an den Bildungswahrscheinlichkeiten der bisher bekannten Myonspezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$ . Dies bedeutet, daß die diesbezüglichen Ergebnisse früherer Auswertungen von LFQ-Untersuchungen von der Existenz der neuen Myonspezies unberührt bleiben.

An der Probe Si(i) wurden Anpassungen von Quenching-Kurven des um die Spezies  $\text{Mu}_V$  erweiterten Modells an die bei 10 K gewonnenen experimentellen Daten durchgeführt. Dabei wurde das oben erwähnte Vorgehen bei der Anpassung der unterschiedlichsten Möglichkeiten angewandt. Dies führte zum qualitativ gleichen Ergebnis im Vergleich zur Probe 47079/6. Es konnte, wie bei der Probe 47079/6, eine Anpassung erzielt werden, welche die experimentellen Daten im gesamten Magnetfeldbereich sehr gut beschreibt. Die Bildungswahrscheinlichkeiten wurden für die Probe Si(i) zu  $(0 \pm 2) \%$  für  $\mu^d$ ,  $(50 \pm 7) \%$  für  $\text{Mu}_T$ ,  $(49 \pm 5) \%$  für  $\text{Mu}_{BC}$  sowie  $(2 \pm 4) \%$  für  $\text{Mu}_V$  bestimmt. Des Weiteren wurde ein Übergang von der Spezies  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  mit einer Rate von  $(0,8 \pm 0,4) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  gefunden. Dies ist in guter Übereinstimmung mit den an der Probe 47079/6 bestimmten Werten.

Die Ergebnisse der Anpassungen sind für alle untersuchten Proben in Tabelle 9.1 zusammengestellt. Hier ist auch ein Verweis auf die jeweiligen Abbildungen enthalten.

Bei  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen wurden bisher nie irgendwelche Hinweise auf die Existenz einer Spezies  $\text{Mu}_V$  gefunden, auch nicht bei Messungen an undotierten Proben, welche in LFQ-Messungen sehr deutlich die  $\text{Mu}_V$ -Signatur zeigen. Dieser Befund wird sofort verständlich, wenn man berücksichtigt, daß die oben diskutierten Anpassungen an die LFQ-Daten ergaben, daß  $\text{Mu}_V$  zumindest überwiegend nicht sofort nach der Myonimplantation, sondern verspätet aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  mit einer im Vergleich zu den Spinpräzessionsfrequenzen relativ kleinen Rate von etwa  $10^6 \text{ s}^{-1}$  gebildet wird. Die Myonspinpräzession des Ensembles der gebildeten Spezies  $\text{Mu}_V$  ist somit weitgehend außer

Phase, und es wird allenfalls ein sehr kleines Präzessionssignal der Spezies  $\text{Mu}_V$  erwartet. Andererseits ist die Übergangsrate von  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  noch so klein, daß das Signal der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  noch sehr gut sichtbar sein sollte, wobei die Relaxationsrate  $\lambda$  des  $\text{Mu}_T$ -Präzessionssignals  $\lambda \approx 10^6 \text{ s}^{-1}$  betragen sollte, sofern nur die genannten Übergänge zur Relaxation beitragen, andernfalls muß  $\lambda > 10^6 \text{ s}^{-1}$  gelten. In der Tat bestimmt man bei  $T = 50 \text{ K}$  in undotierten Proben eine Relaxationsrate von  $\lambda \approx (3-4) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  (PATTERSON 1988), also einen Wert, welcher mit der aus den LFQ-Untersuchungen bestimmten Übergangsrate kompatibel ist. Ebenfalls kompatibel sind die aus den LFQ-Untersuchungen einerseits und aus  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen (PATTERSON 1988) andererseits bestimmten Bildungswahrscheinlichkeiten der Spezies  $\mu^d$ ,  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$ .

Mit den oben diskutierten Anpassungen haben wir bisher nur gezeigt, daß durch die Hinzunahme der weiteren paramagnetischen Spezies  $\text{Mu}_V$ , welche durch den oben angegebenen Hyperfeintensor charakterisiert ist, die bei den undotierten Proben für sehr kleine Magnetfelder beobachteten Anomalien in den LFQ-Daten erklärbar sind. Es wurde allerdings nicht gezeigt, daß der Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_V$  die angegebenen Komponenten besitzt. Die LFQ-Methode ist zur Bestimmung von Hyperfeinparametern nämlich denkbar ungeeignet. Dies liegt daran, daß zum einen eine LFQ-Kurve durch die Überlagerung der verschiedenen Einzelbeiträge aller Myonspezies, welche in der Probe gebildet werden können, zustande kommt. Insbesondere werden aber die LFQ-Kurven durch dynamische Prozesse beeinflusst, und es ist in gewissem Rahmen durchaus möglich, trotz eines fehlerhaft angesetzten Hyperfeintensors, eine gute Anpassung an die LFQ-Daten zu erzielen, wenn man nur die Bildungswahrscheinlichkeiten und die Raten der dynamischen Prozesse geeignet abändert. Die LFQ-Methode ist also eine sehr gute Methode zur Bestimmung von Bildungswahrscheinlichkeiten und insbesondere zur Untersuchung dynamischer Prozesse, sie kann in der Regel jedoch nur ganz grobe Werte für die Hyperfeinparameter liefern. Eine quantitative Auswertung von LFQ-Daten setzt also die Kenntnis der Hyperfeinparameter der verschiedenen Myonspezies voraus.

Aus den LFQ-Messungen können wir also bisher entnehmen, daß es sehr starke Indizien für die Existenz einer neuen Myonspezies mit sehr kleinen Hyperfeinparametern gibt, und daß es sich bei dieser Spezies sehr wohl um das Myon-Analogon des Wasserstoffzentrums VH (Wasserstoff in einer Leerstelle) handeln könnte, wie die erfolgreiche Anpassung des um  $\text{Mu}_V$  erweiterten Modells an die LFQ-Daten beweist. Setzen wir für  $\text{Mu}_V$  die reskalierten Hyperfeinparameter von VH voraus, so ergibt sich ferner, daß  $\text{Mu}_V$  aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  mit einer Rate von etwa  $10^6 \text{ s}^{-1}$  gebildet wird.

Für eine Bestätigung der Analogie von  $\text{Mu}_V$  und VH fehlt noch eine unabhängige Bestimmung des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$ . Prädestiniert für die Bestimmung von Hyperfeintensoren sind an und für sich  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Messungen. Aus der Magnetfeld- und Orientierungsabhängigkeit der in  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimenten beobachteten Präzessionsfrequenzen lassen sich sowohl die Hyperfeinparameter als auch die Symmetrie des Hyperfeintensors bestimmen. In unserem Fall tritt jedoch die Schwierigkeit auf, daß in bisherigen  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Messungen keinerlei Hinweise auf die Spezies  $\text{Mu}_V$  gefunden wurden und entsprechend dem oben beschriebenen Szenario der verspäteten Bildung von  $\text{Mu}_V$  auch allenfalls ein sehr kleines Präzessionssignal erwartet wird. Um überhaupt ein Signal der Spezies  $\text{Mu}_V$  beobachten zu können, erfordert es daher eine besonders hohe Statistik und damit verbunden eine sehr



lange Meßzeit. Bei  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen werden sehr viele Messungen in Abhängigkeit der Stärke sowie Orientierung des Magnetfeldes benötigt. Nullfeld- $\mu\text{SR}$ -( $\text{ZF}\mu\text{SR}$ )-Experimente haben dagegen den Vorteil, daß sich die Hyperfeinparameter direkt aus den beobachteten Präzessionsfrequenzen bestimmen lassen. Die Bestimmung der Symmetrie des Hyperfeintensors ist jedoch mittels  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Experimenten aufgrund der geringeren Anzahl von Meßpunkten (keine Magnetfeldabhängigkeit, lediglich Orientierungsabhängigkeit) schwieriger. Aus der Orientierungsabhängigkeit der Amplitude der Präzessionsfrequenzen lassen sich dennoch Aussagen über die dem Hyperfeintensor zugrundeliegende Symmetrie machen. Da die Kenntnis des Hyperfeintensors der neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  aber von außerordentlicher Bedeutung ist, wurden große Anstrengungen unternommen, die zur Spezies  $\text{Mu}_V$  gehörigen Präzessionssignale in  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen zu finden. Die entsprechenden Ergebnisse werden im folgenden Kapitel dargestellt.

Anschließend werden die bis dorthin gewonnenen Ergebnisse diskutiert und interpretiert, insbesondere, wie man verstehen kann, warum die neue Spezies  $\text{Mu}_V$  nur in undotierten, nicht aber in den dotierten Proben  $\text{Si:P}$  und  $\text{Si:B}$  beobachtet wird. Weiterhin muß die verspätete Bildung von  $\text{Mu}_V$  verstanden werden sowie die Tatsache der Bildung von  $\text{Mu}_V$  überhaupt, d. h. entsprechend unserer vorläufigen Interpretation, die sich im folgenden auch als korrekt herausstellen wird, muß Myonium in einer Leerstelle eingefangen werden, obwohl doch Leerstellen im thermodynamischen Gleichgewicht im betrachteten Temperaturbereich in Silizium nur in vernachlässigbar kleiner Konzentration vorliegen.

Abschließend werden noch Ergebnisse von Experimenten an Proben dargestellt, in denen durch Elektronenbestrahlung gezielt Leerstellen erzeugt wurden.

## 9.2 $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen an undotierten Proben

Um den Hyperfeintensor der Myonspezies  $\text{Mu}_V$  bestimmen zu können, wurden  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen durchgeführt. Da aus den  $\text{LFQ}$ -Messungen gefolgert wurde, daß die Spezies  $\text{Mu}_V$  hauptsächlich aus dem Vorläufer  $\text{Mu}_T$  gebildet wird und nur mit geringer Wahrscheinlichkeit direkt nach der Thermalisierung des Myons, wird erwartet, daß die Beobachtung der Spezies  $\text{Mu}_V$  mittels  $\text{ZF}\mu\text{SR}$  sehr schwierig ist. Zur Detektion eines Präzessionssignals in  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Experimenten muß die Phasenkohärenz des Myonspinensembles erhalten bleiben. Diese geht jedoch durch dynamische Prozesse zum Teil oder gar vollständig verloren, so daß entweder ein recht schwaches oder unter Umständen sogar gar kein Präzessionssignal der gebildeten Spezies  $\text{Mu}_V$  beobachtet werden kann. Weil die Hyperfeinparameter für die Interpretation der Spezies  $\text{Mu}_V$  aber eine wichtige Rolle spielen, wurden die  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen trotz der erwarteten Schwierigkeiten durchgeführt. Hierbei kommt uns zustatten, daß aus den  $\text{LFQ}$ -Untersuchungen genau bekannt ist unter welchen Bedingungen die neue Spezies  $\text{Mu}_V$  überhaupt gebildet wird. Wir können uns also auf Messungen an den undotierten Proben beschränken.

Probe	Orientierung in Strahlrichtung	Frequenzen [MHz]		
		$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_3$
42772/02	$\langle 100 \rangle$	$7,77 \pm 0,04$	—	$18,84 \pm 0,25$
	$\langle 110 \rangle$	$7,88 \pm 0,07$	$12,00 \pm 0,08$	$19,97 \pm 0,04$
	$\langle 111 \rangle$	$7,66 \pm 0,11$	—	—
42772/02-E1	$\langle 100 \rangle$	$7,85 \pm 0,21$	—	$18,50 \pm 0,06$
42772/02	$\langle 100 \rangle$	$7,60 \pm 0,02$	—	$19,16 \pm 0,34$
Si(i)-4	$\langle 100 \rangle$	$7,79 \pm 0,03$	—	—
47079/6	$\langle 111 \rangle$	—	—	—

Tabelle 9.2: In ZF $\mu$ SR-Experimenten bei  $T = 5$  K an undotierten Siliziumproben beobachtete Präzessionsfrequenzen der Spezies  $\text{Mu}_V$  in Abhängigkeit der Probenorientierung. Die Proben 42772/02 mit Orientierung  $\langle 100 \rangle$  stammen von unterschiedlichen Stellen eines Kristalls.

### 9.2.1 ZF $\mu$ SR-Experimente

Die ZF $\mu$ SR-Untersuchungen wurden mit dem in Kapitel 2.2 beschriebenen Zusatzzähler durchgeführt. Aufgrund des erwarteten schwachen Präzessionssignals der Spezies  $\text{Mu}_V$  wurden Hochstatistikmessungen durchgeführt. Dabei wurden im Vorwärts- sowie Rückwärtsdetektor jeweils ca. 180 Millionen Ereignisse registriert, dies entspricht ca. 30 Millionen Ereignissen im Zusatzzähler. Eine solche Messung dauerte ca. 48 Stunden. Insgesamt wurden sieben derartige Messungen bei  $T = 5$  K durchgeführt, womit aufgrund der begrenzten zur Verfügung stehenden Strahlzeit die Grenze der Machbarkeit erreicht war.

Für eine anisotrope Myonspezies sind die Amplituden der Präzessionssignale (Asymmetrien) von der Orientierung der Probe abhängig. Unter Orientierung der Probe versteht man in der ZF $\mu$ SR die Lage der Kristallachse bezüglich der Richtung der Anfangspolarisation des Myonspins, d. h. bezüglich der Strahlrichtung. Es wurden Proben mit unterschiedlicher Orientierung aus ein und demselben Kristall präpariert und unter identischen Bedingungen gemessen. Die Idee dahinter ist, eventuell die Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors anhand der Orientierungsabhängigkeit der Amplituden der beobachteten Präzessionssignale von  $\text{Mu}_V$  bestimmen zu können.

Die Ergebnisse der ZF $\mu$ SR-Untersuchungen sind wie folgt: In allen untersuchten Proben wurden die Präzessionsfrequenzen der Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  beobachtet. Die Präzessionsfrequenzen der Spezies  $\text{Mu}_T$  liegen zu hoch, um mit der im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten Zeitaufösung beobachtbar zu sein. Die zusätzlich in den unterschiedlichen Proben beobachteten Präzessionsfrequenzen, welche der Spezies  $\text{Mu}_V$  zugeordnet werden, sind in Tabelle 9.2 zusammengestellt.

Probe	Orientierung in Strahlrichtung	Frequenz [MHz]	Asymmetrie [ $10^{-3}$ ]	Relaxation [ $10^6 \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	$\langle 100 \rangle$	$7,77 \pm 0,04$	$0,51 \pm 0,39$	$1,14 \pm 0,38$
		$18,84 \pm 0,25$	$2,47 \pm 1,60$	$3,83 \pm 1,83$
	$\langle 110 \rangle$	$7,88 \pm 0,07$	$0,44 \pm 0,20$	$0,43 \pm 0,31$
		$12,00 \pm 0,08$	$0,83 \pm 0,45$	$0,68 \pm 0,51$
		$19,97 \pm 0,04$	$0,33 \pm 0,21$	$0,67 \pm 0,24$
$\langle 111 \rangle$	$7,66 \pm 0,11$	$2,57 \pm 1,20$	$1,33 \pm 0,57$	
42772/02-E1	$\langle 100 \rangle$	$7,85 \pm 0,21$	$1,37 \pm 0,77$	$1,53 \pm 0,43$
		$18,50 \pm 0,06$	$2,20 \pm 1,11$	$1,04 \pm 0,30$
42772/02	$\langle 100 \rangle$	$7,60 \pm 0,02$	$0,72 \pm 0,43$	$0,86 \pm 0,14$
		$19,16 \pm 0,34$	$0,31 \pm 0,17$	$1,77 \pm 0,62$
Si(i)-4	$\langle 100 \rangle$	$7,79 \pm 0,03$	$0,80 \pm 0,51$	$1,62 \pm 0,72$

Tabelle 9.3: In ZF $\mu$ SR-Experimenten bei  $T = 5 \text{ K}$  beobachtete Präzessionsfrequenzen der Spezies  $Mu_V$  sowie zugehörige Asymmetrien und Relaxationsraten. Die Proben 42772/02 mit Orientierung  $\langle 100 \rangle$  stammen von unterschiedlichen Stellen eines Kristalls.

Je nach Orientierung der Probe wurden maximal drei unterschiedliche Präzessionsfrequenzen beobachtet, welche der Spezies  $Mu_V$  zuordenbar sind. In Tabelle 9.3 sind neben den beobachteten Präzessionsfrequenzen der Spezies  $Mu_V$  auch noch die zugehörigen Relaxationsraten und Asymmetrien angegeben. Die aus dem Experiment bestimmten, geringen Asymmetrien der Präzessionssignale von  $Mu_V$  zeigen deutlich, daß es sich um sehr schwache Signale handelt, welche selbst bei der hohen gemessenen Statistik am Rande der Nachweisgrenze liegen. Im Fourierspektrum sind diese Präzessionssignale nicht nachweisbar, die Bestimmung der Präzessionsfrequenzen gelang erst durch direkte Anpassung einer Theoriefunktion an das gemessene Zeithistogramm, siehe Kapitel 4.

### 9.2.2 Auswertung der ZF $\mu$ SR-Experimente

Aus Tabelle 9.2 ist zu entnehmen, daß maximal drei unterschiedliche der Spezies  $Mu_V$  zurechenbare Frequenzen im Nullfeld beobachtet werden konnten. Für eine Spezies mit allgemeinem Hyperfeintensor würde man jedoch sechs unterschiedliche Frequenzen erwarten, siehe Kapitel 4. Die Beobachtung von lediglich drei unterschiedlichen Frequenzen ist ein starkes Indiz dafür, daß ein Eigenwert des Hyperfeintensors zweifach entartet oder nahezu entartet ist, d.h.  $A_x = A_y \neq A_z$ , der Hyperfeintensor also axialsymmetrisch ist. Die beiden unterschiedlichen Hyperfeinparameter lassen sich dann aus den beobachteten Präzessionsfrequenzen im Nullfeld bestimmen.

Im Nullfeld sind die drei Präzessionsfrequenzen im Falle zweier unterschiedlicher Hyperfeinparameter  $A_x$  und  $A_z$  durch folgende Gleichungen bestimmt

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \frac{1}{2}(A_z + A_x) , \\ \nu_2 &= A_x , \\ \nu_3 &= \frac{1}{2}(A_z - A_x) ,\end{aligned}\tag{9.1}$$

siehe Kapitel 4, Gleichungen (4.28), Seite 48.

Nur in einer einzigen Probe, der Probe 42772/02 mit Orientierung  $\langle 110 \rangle$ , wurden alle drei unterschiedlichen Präzessionsfrequenzen gleichzeitig beobachtet. Die an dieser Probe gemessenen Frequenzen werden daher zur Bestimmung der Hyperfeinparameter der Spezies  $\text{Mu}_V$  herangezogen. Die so bestimmten Hyperfeinparameter reproduzieren außerdem sehr gut die in anderen Orientierungen und an unterschiedlichen Proben beobachteten Frequenzen. Die Hyperfeinparameter von  $\text{Mu}_V$  sind durch

$$A_x = (-12,0 \pm 0,1) \text{ MHz} ,\tag{9.2}$$

$$A_z = (27,9 \pm 0,1) \text{ MHz} ,\tag{9.3}$$

gegeben. Anhand der vorgestellten ZF $\mu$ SR-Untersuchungen läßt sich das relative, jedoch nicht das Vorzeichen der einzelnen Komponenten des Hyperfeintensors bestimmen. Daher wurde die Wahl des Vorzeichens der Hyperfeinparameter in Analogie zur Wasserstoffspezies VH vorgenommen, siehe Tabelle 3.1, Seite 31.

Somit sind nun die Hyperfeinparameter der neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  unter der Voraussetzung axialer Symmetrie des Hyperfeintensors bestimmt. Es blieb bisher jedoch noch außer acht, in welche Richtung die Hauptachse ( $z$ -Achse) des Hyperfeintensors gerichtet ist. Die Amplituden der Präzessionssignale sind sowohl von der Hauptachsenrichtung des Hyperfeintensors als auch der Probenorientierung bzgl. des Myonspins zum Zeitpunkt der Implantation abhängig. Aus der Beobachtbarkeit bzw. Nichtbeobachtbarkeit der Präzessionssignale kann eventuell die Lage der Hauptachse der Spezies  $\text{Mu}_V$  bestimmt werden. Es wird davon ausgegangen, daß die Hauptachse des Hyperfeintensors entweder in die  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ - oder  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung zeigt. Die aus der Theorie zur ZF $\mu$ SR, Kapitel 4, bestimmten Amplituden der Präzessionssignale von  $\text{Mu}_V$  sind für diese drei in Betracht gezogenen Richtungen für die Hauptachse des Hyperfeintensors in Tabelle 9.4, in Abhängigkeit von der Probenorientierung bzgl. der Myonspinrichtung bei Implantation, angegeben. Dabei ist die Gesamtamplitude auf Eins normiert. Diese Amplituden wurden unter der Voraussetzung berechnet, daß die Spezies  $\text{Mu}_V$  statisch ist, d. h., keinen dynamischen Prozessen unterliegt. Die folgende Bestimmung der Hauptachsen des Hyperfeintensors basiert auf diesen Rechnungen, was aber, wie später diskutiert wird, keinerlei Einschränkung der Allgemeinheit der Aussage bedeutet.

Proben- orientierung in Strahlrichtung	Frequenzen [MHz]	Amplituden für verschiedene Hauptachsenrichtungen des Hyperfeintensors		
		$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
$\langle 100 \rangle$	7,5	0,33	0,33	0,33
	12,0	0,17	0,17	0,17
	19,9	0,0	0,33	0,33
$\langle 110 \rangle$	7,5	0,33	0,33	0,25
	12,0	0,17	0,17	0,17
	19,9	0,17	0,25	0,0
$\langle 111 \rangle$	7,5	0,33	0,25	0,33
	12,0	0,17	0,17	0,125
	19,9	0,33	0,0	0,33

Tabelle 9.4: Berechnete Amplituden der Präzessionsfrequenzen von  $\text{Mu}_V$  im Nullfeld, in Abhängigkeit der Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors und der Probenorientierung bzgl. der Myonspinrichtung.

Durch Vergleich der beobachteten Frequenzen aus Tabelle 9.2 mit den zugehörigen berechneten Amplituden aus Tabelle 9.4 kann sowohl die  $\langle 100 \rangle$ - als auch  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung als Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$  ausgeschlossen werden. Da an der  $\langle 100 \rangle$ -orientierten Probe 42772/02 die zwischen 18,50 MHz und 19,16 MHz liegende Präzessionsfrequenz beobachtet wird, die Theorie zur ZF $\mu$ SR für diese Frequenz aber bei Wahl der  $z$ -Achse des Hyperfeintensors in  $\langle 100 \rangle$ -Richtung eine Amplitude von exakt Null liefert, ist diese Lage der Hauptachse auszuschließen. Die Hauptachsenrichtung  $\langle 111 \rangle$  ist zu verwerfen, weil an der  $\langle 110 \rangle$ -orientierten Probe 42772/02 ein Präzessionssignal von 19,97 MHz beobachtet wurde, welches aufgrund der theoretisch bestimmten, für diese Wahl der Hauptachsenorientierung exakt verschwindenden Amplitude nicht beobachtbar sein dürfte. Damit bleibt als einzige Möglichkeit für die Lage der Hauptachse ( $z$ -Achse) des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$  die  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung übrig. Diese Lage der Hauptachse der Spezies  $\text{Mu}_V$  ist in Übereinstimmung mit den Beobachtungen an sämtlichen im Nullfeld untersuchten Proben. Ob jedoch eine leichte Verkippung der Hauptachse aus der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung vorliegt, kann anhand von Experimenten bei lediglich drei verschiedenen Kristallorientierungen nicht geklärt werden. Dazu wären Experimente mit quasikontinuierlich veränderlichem Winkel zwischen Myonspinrichtung und Probenorientierung notwendig. Die Geometrie des von uns verwendeten Kryostaten läßt dies jedoch nicht zu. Desweiteren müßte bei diesen Untersuchungen für jeden Winkel eine Meßzeit von ca. 50 Stunden einkalkuliert werden.

Bei der obigen Argumentation zur Bestimmung der Hauptachsen des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$  wurde „statisches“ Verhalten von  $\text{Mu}_V$  vorausgesetzt, d. h., es wurde angenommen, daß sich  $\text{Mu}_V$  unmittelbar nach der Implantation der Myonen bildet und ab dann keinen weiteren dynamischen Prozessen unterworfen ist. Tatsächlich müssen wir aber von der verzögerten Bildung von  $\text{Mu}_V$  aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  ausgehen. Die Argumentation bezüglich der Lage der Hauptachsen des Hyperfeintensors bleibt aber von dieser Komplikation völlig unberührt, da derartige dynamische Prozesse nur eine Verringerung der Amplitude von Präzessionssignalen der Spezies  $\text{Mu}_V$  in Folge von Dephasierung bewirken können. Verschwindet also die Amplitude eines Präzessionssignals von  $\text{Mu}_V$  bereits bei Annahme von statischem Verhalten, so ändert sich an diesem Verschwinden durch Auftreten von dynamischen Prozessen überhaupt nichts. In der gesamten obigen Argumentation wurde aber einzig und allein das Verschwinden von Präzessionssignalen unter bestimmten Bedingungen zur Bestimmung der Lage der Hauptachsen des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$  herangezogen.

Aus den hier beschriebenen Nullfeldmessungen konnten nun sowohl die Hyperfeinparameter der Spezies  $\text{Mu}_V$  als auch die prinzipielle Orientierung der Hauptachse des Hyperfeintensors bestimmt werden. Der Hyperfeintensor ist axialsymmetrisch bzgl. der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung und besitzt die folgende Darstellung

$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_V} = \begin{pmatrix} (-12, 0 \pm 0, 1) & 0 & 0 \\ 0 & (-12, 0 \pm 0, 1) & 0 \\ 0 & 0 & (27, 9 \pm 0, 1) \end{pmatrix} \text{ MHz.} \quad (9.4)$$

Mit der Kenntnis der Lage der Hauptachse des Hyperfeintensors lassen sich nun entsprechend Kapitel 4.2 die Amplituden der Präzessionssignale für eine 100 %-ige Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $\text{Mu}_V$  berechnen. Dies ist notwendig, um aus den experimentell bestimmten Asymmetrien der Spezies  $\text{Mu}_V$ , siehe Tabelle 9.3, die zugehörigen Bildungswahrscheinlichkeiten berechnen zu können. Die Bildungswahrscheinlichkeiten der Spezies  $\text{Mu}_V$  liegen demnach anhand der ZF $\mu$ SR-Untersuchungen bei  $(3 - 5)\% \pm 2\%$ . Aus den LFQ-Untersuchungen ist bekannt, daß sich die Spezies  $\text{Mu}_V$  mit einer Übergangsrate von ca.  $10^6 \text{ s}^{-1}$  hauptsächlich aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  bildet, welche eine Bildungswahrscheinlichkeit von ca. 50 % besitzt. Aus diesen Daten läßt sich abschätzen, daß in ZF $\mu$ SR-Untersuchungen ein Signal der Spezies  $\text{Mu}_V$  beobachtbar sein sollte, welches auf statische Verhältnisse umgerechnet (d. h. prompte Bildung von  $\text{Mu}_V$  und keine weiteren dynamischen Prozesse) etwa 1 % der implantierten Myonen entspricht. Diese Abschätzung ist, obwohl sie etwas geringer als die gemessene Größe ausfällt, immer noch mit dieser vereinbar, insbesondere, da die LFQ-Untersuchungen auch mit der prompten Bildung eines kleinen Anteils von  $\text{Mu}_V$  (einige %) verträglich sind und das Signal dieses Anteils nicht durch Dephasierungseffekt abgeschwächt wird.

Mit der Bestimmung des Hyperfeintensors aus ZF $\mu$ SR-Untersuchungen ist nun auch die Übergangsrate der Spezies  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  abgesichert. Dies liegt in der Tatsache begründet, daß der zur Auswertung der LFQ-Kurven verwendete hypothetische Hyperfeintensor der Spezies  $\text{Mu}_V$  mit dem anhand der ZF $\mu$ SR-Untersuchungen bestimmten sehr gut übereinstimmt.

### 9.3 Ist $\text{Mu}_V$ ein Myonium-Leerstellen-Komplex?

Die bisher besprochene Auswertung der LFQ- und ZF $\mu$ SR-Daten hat zu den folgenden Ergebnissen geführt. Es existiert eine in der Literatur bisher noch nicht beschriebene Myonspezies  $\text{Mu}_V$  in kristallinem Silizium. Diese wird aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$  mit einer Rate von etwa  $10^6 \text{ s}^{-1}$  gebildet. Die ZF $\mu$ SR-Untersuchungen liefern für die Spezies  $\text{Mu}_V$  den in Gleichung (9.4) angegebenen Hyperfeintensor. Dieser entspricht nahezu dem der Wasserstoffspezies VH, welche an protonenbestrahltem Silizium mittels EPR nachgewiesen wurde (BECH NIELSEN 1997a, JOHANNESSEN 1997). Die Hyperfeinparameter einer Wasserstoffspezies lassen sich durch Multiplikation mit dem Verhältnis der magnetischen Momente des Myons zum Protonen für eine analoge Myonspezies umskalieren. Der Hyperfeintensor der zu VH analogen Myonspezies ist gegeben durch

$$\mathbf{A}_{\text{VH,skaliert}} = \begin{pmatrix} -10,4 & 0 & 0 \\ 0 & -14,5 & 0 \\ 0 & 0 & 26,7 \end{pmatrix} \text{ MHz}, \quad (9.5)$$

wobei die  $z$ -Achse mit der  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung einen Winkel von 8 Grad einschließt, vergleiche Tabelle 3.1, Seite 31. Die Hyperfeinparameter von  $\text{Mu}_V$  und VH (skaliert) stimmen also recht gut überein. Auch eine leichte Verkippung der  $z$ -Achse des Hyperfeintensors von  $\text{Mu}_V$  gegen die  $\langle 110 \rangle$ -Achse, wie sie für VH bestimmt wurde, läßt sich nicht ausschließen, wie bereits in Kapitel 9.2.1 diskutiert. Gewisse Abweichungen zwischen  $A_{\text{Mu}_V}$  und  $A_{\text{VH,skaliert}}$  könnten in den Nullpunktsschwingungen begründet liegen, welche im Falle von Myonium viel ausgeprägter sind als beim Wasserstoff. Bei einer Abweichung des Hyperfeintensors von der Axialsymmetrie würden sechs unterschiedliche Präzessionsfrequenzen existieren. Sofern die Abweichung von der Axialsymmetrie sehr gering ist, lägen jeweils zwei Frequenzen sehr nahe beieinander und wären somit nicht auflösbar. Dann wären, wie bei Axialsymmetrie, lediglich drei Präzessionsfrequenzen sichtbar. Eine geringe Abweichung des Hyperfeintensors der Spezies  $\text{Mu}_V$  von der Axialsymmetrie kann somit nicht ausgeschlossen werden. Aus der Korrespondenz der Hyperfeintensoren von VH und  $\text{Mu}_V$  kann man schließen, daß es sich um analoge Spezies handelt. In Analogie zur Interpretation von VH als Wasserstoff in einer Silizium-Leerstelle wird daher die Myonspezies  $\text{Mu}_V$  als Myonium in einer Silizium-Leerstelle gedeutet. Die Möglichkeit der Bildung eines Myonium-Leerstellen-Komplexes in Silizium wurde bereits von SEEGER (1977) diskutiert.

Die Lage der Symmetrieachsen der Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_V$  und VH ist durchaus mit der Interpretation von  $\text{Mu}_V$  bzw. VH als Myonium bzw. Wasserstoff in einer Leerstelle verträglich. Bei der Bildung einer Leerstelle im Siliziumgitter kann man sich vorstellen, daß zunächst vier „dangling bonds“ entstehen, von denen einer durch Anlagerung von Wasserstoff bzw. Myonium abgesättigt wird. Zwei der drei verbleibenden „dangling-bonds“ können sich nun zu einer neuen Bindung vereinigen, und es verbleibt noch ein „dangling bond“, in dem das ungepaarte paramagnetische Elektron weitgehend lokalisiert ist. Für das neue Arrangement der drei verbleibenden „dangling bonds“ gibt es drei äquivalente Möglichkeiten. Die beschriebene Konfiguration des Wasserstoff- bzw. Myonium-Leerstellen-Komplexes ist in Abbildung 3.2, Seite 34 dargestellt. Die Verbindungslinie

zwischen der mittleren Myon- bzw. Wasserstoffposition (Schwerpunkt der Aufenthaltswahrscheinlichkeit) und dem Schwerpunkt der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des auf die verbleibenden „dangling bonds“ lokalisierten ungepaarten Elektrons liegt in etwa parallel zu einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung, wodurch die ungefähre Axialsymmetrie des Hyperfeintensors um die  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung plausibel wird.

Wenn wir nun davon ausgehen, daß es sich bei  $\text{Mu}_V$  tatsächlich um ein Myon in einer Leerstelle, d. h. um einen Myonium–Leerstellen-Komplex handelt, muß man als nächstes fragen, warum sich ein derartiger Komplex überhaupt bildet. Leerstellen im thermodynamischen Gleichgewicht können auf gar keinen Fall für die Bildung des Komplexes verantwortlich gemacht werden, denn bei einer Temperatur von 10 K bzw. 5 K, bei welcher die Messungen stattfanden, sind thermische Leerstellen nur in praktisch verschwindender Konzentration vorhanden (WATKINS 1991). Leerstellen werden allerdings auch beim Abbremsvorgang der implantierten Myonen erzeugt. Beim Abbremsen eines Myons, welches mit einer Energie von 4 MeV in die Probe implantiert wird, werden durchschnittlich etwa 10 Leerstellen gebildet. Diese Leerstellen entstehen aber nicht mit gleicher Wahrscheinlichkeit entlang der durchschnittlichen Abbremsstrecke von etwa  $750 \mu\text{m}$ , sondern überwiegend am Ende. Rechnungen von FABIAN (1997) mit TRIM85 zeigen, daß der Abstand des Myons zur letzten selbsterzeugten Leerstelle ca. 12 nm beträgt. Ein ähnlicher Wert für diesen Abstand ergibt sich auch, wenn man als Ausgangspunkt der Überlegungen nimmt, daß ein Myon mit einer geringeren Energie als etwa 1 keV keine atomaren Verlagerungen mehr bewirken, d.h. keine Leerstellen mehr erzeugen kann; die maximal auf die Siliziumatome übertragbaren Energien liegen bei Myonen mit geringerer Energie unterhalb der für atomare Verlagerungen nötigen Schwelle. Einem bei PATTERSON (1988) angegebenen Diagramm entnimmt man dann, daß ein positiv geladenes Teilchen der Energie 1 keV eine Reichweite von der Größenordnung 20 nm besitzt. Es ergibt sich somit ein mittlerer Abstand des thermalisierten Myons von seiner letzten selbsterzeugten Leerstelle in der Größenordnung von etwa 20 nm. Um einen Myonium–Leerstellen-Komplex ( $\text{Mu}_V$ ) bilden zu können, müssen Myonen zu einer der letzten selbsterzeugten Leerstellen diffundieren. Aus den LFQ-Daten wurde in der Tat abgeleitet, daß sich die Spezies  $\text{Mu}_T$  in die Spezies  $\text{Mu}_V$  mit einer Rate von etwa  $10^6 \text{ s}^{-1}$  umwandelt. Diese Umwandlung wird nun als Einfang der schnell diffundierenden Spezies  $\text{Mu}_T$  in eine der letzten selbsterzeugten Leerstellen interpretiert. Die reziproke Umwandlungsrate ist durch die mittlere Diffusionszeit von  $\text{Mu}_T$  zu einer selbsterzeugten Leerstelle bestimmt. Die Zuordnung von  $\text{Mu}_V$  zu einem Myonium–Leerstellen-Komplex kann nur dann richtig sein, wenn die Umwandlungsrate von  $\text{Mu}_T$  in  $\text{Mu}_V$  mit der Diffusionskonstante von  $\text{Mu}_T$  kompatibel ist.

Um eine grobe Abschätzung für die Einfangrate von  $\text{Mu}_T$  in einer der selbsterzeugten Leerstellen zu erhalten, wird zunächst das verwandte in einiger Hinsicht aber doch deutlich verschiedene Problem des Einfangs von  $\text{Mu}_T$  an räumlich homogen verteilten Leerstellen betrachtet. Um die beiden Probleme wenigstens hinsichtlich der allernächsten Umgebung des gestoppten Myons vergleichbar zu machen, wird die effektive Leerstellenkonzentration  $c_{\text{eff}}$  im Referenzproblem des Einfangs an einer räumlich homogenen Leerstellenverteilung so gewählt, daß der mittlere Abstand des Myons von einer Leerstelle in der homogenen Referenzverteilung in etwa dem Abstand  $\bar{r}_V$  des Myons von seiner letzten selbsterzeugten Leerstelle im eigentlich interessierenden Problem entspricht. Dies bedeutet, daß  $c_{\text{eff}} = (4\pi\bar{r}_V^3/3)^{-1}$  gesetzt wird. Diese effektive Konzentration setzt man nun in den Ausdruck



für die Einfangrate  $\Gamma_t$  an statistisch räumlich homogen verteilten Leerstellen ein. Man erhält so

$$\Gamma_t = 4\pi D R c_{\text{eff}}, \quad (9.6)$$

wobei  $R$  der Einfangradius ist, von dem wir annehmen, daß er in der Größenordnung des Gitterabstandes liegt.  $D$  ist die Diffusionskonstante von  $\text{Mu}_T$  für die wir annehmen, daß sie in der Größenordnung der von DÖRING und Mitarbeitern (1984) für siliziumdotiertes Germanium ( $\approx 10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$ ) bestimmten liegt. Die Leerstellenverteilung im eigentlich interessierenden Problem weicht allerdings deutlich von der homogenen und isotropen Verteilung im Referenzproblem ab, denn die selbsterzeugten Leerstellen sind in der Umgebung der Abbremsspur des Myons zu finden. Vom gestoppten Myon aus gesehen liegen die Leerstellen in einem zur Probenoberfläche hin orientierten Raumwinkelbereich. Hinsichtlich der nächstbenachbarten Leerstelle gibt es zwar kaum Unterschiede zwischen den beiden „Einfangproblemen“, die weiter entfernten Leerstellen in der Abbremsspur werden aber vom Myonstopport unter mit wachsender Entfernung immer kleinerem Raumwinkel gesehen. Die für das interessierende Einfangproblem relevanten Leerstellen liegen andererseits unterhalb einer Entfernung die der Diffusionslänge  $l = \sqrt{6 D t}$  entspricht die innerhalb der mittleren Lebensdauer erreichbar ist. Weiterhin sollten die weiter entfernten Leerstellen mit geringerem statistischen Gewicht in die Einfangrate eingehen. Der beschriebene Unterschied zwischen Referenzproblem und dem eigentlichen Problem soll durch die Einführung eines Korrekturfaktors  $\kappa$  ( $< 1$ ) in Gleichung (9.6) erfaßt werden. Dieser ist ein Maß für den Prozentsatz des effektiven Raumwinkelbereichs, in dem sich die selbsterzeugten Leerstellen befinden. Die Einfangrate an den während des Abbremsvorgangs des Myons erzeugten Leerstellen ist somit gegeben durch

$$\Gamma_t = 4\pi D R c_{\text{eff}} \kappa. \quad (9.7)$$

Mit  $\bar{r}_V = 20 \text{ nm}$  ergibt sich  $c_{\text{eff}} \approx 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Setzt man  $\Gamma_t$  mit der Umwandlungsrate  $\text{Mu}_T \rightarrow \text{Mu}_V$  von  $\approx 10^6 \text{ s}^{-1}$  gleich, so ergibt sich aus Gleichung (9.7) mit der in siliziumdotiertem Germanium bestimmten Diffusionskonstante von  $D = 10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$  (DÖRING 1984) ein Korrekturfaktor  $\kappa$  von ca. 1/20. Dieser Faktor ist klein genug um die Interpretation des Prozesses der Umwandlung der Spezies  $\text{Mu}_T$  in die Spezies  $\text{Mu}_V$  als Einfang des  $\text{Mu}_T$  an Leerstellen möglich erscheinen zu lassen.

Zu klären bleibt nun noch, warum  $\text{Mu}_V$  lediglich in den undotierten Proben beobachtet wird, nicht aber in den beiden dotierten Proben Si:P und Si:B. Dies wird auf die Existenz eines Konkurrenzprozesses zurückgeführt, welcher die Bildung eines Myonium-Leerstellen-Komplexes in den dotierten Proben verhindert. Zusätzlich könnte der Ladungszustand der Leerstellen eine Rolle spielen. Bei den tiefen Meßtemperaturen dürften in den phosphordotierten Proben die Leerstellen negativ geladen und in den bordotierten Proben positiv geladen vorliegen (WATKINS 1986, 1975, 1964), während sie in einer intrinsischen Probe neutral sind. Beim Einfang von  $\text{Mu}_T$  in einer Leerstelle könnte in den

dotierten Proben geladenes  $\text{Mu}_V$ , welches möglicherweise diamagnetisch ist, anstelle des paramagnetischen neutralen  $\text{Mu}_V$  entstehen. Der oben erwähnte Konkurrenzprozeß könnte ein Einfang von  $\text{Mu}_T$  an Dotieratomen sein.

In der Literatur ist bekannt, daß  $\text{Mu}_T$  mit Dotieratomen einen diamagnetischen Myonium–Dotieratom-Komplex eingeht, welcher z. B. in  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Experimenten zum Verschwinden des  $\text{Mu}_T$ -Signals in dotierten Proben führt (PATTERSON 1988). Dieser Einfang des Myoniums  $\text{Mu}_T$  an Dotieratomen ist sehr wahrscheinlich der konkurrierende Prozeß zum Einfang des  $\text{Mu}_T$  in den selbsterzeugten Leerstellen. In den dotierten Proben liegt die Dotieratomkonzentration bei ca.  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , wobei die Dotieratome homogen verteilt sind. Gleichung (9.6) liefert somit unter Zugrundelegung des oben verwendeten Diffusionskoeffizienten von  $\text{Mu}_T$  eine Einfangrate von  $(5 - 10) \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ . Die Bildung des diamagnetischen Myonium–Dotieratom-Komplexes ist somit deutlich gegenüber der Bildung des Myonium–Leerstellen-Komplexes bevorzugt. Der Myonium–Leerstellen-Komplex  $\text{Mu}_V$  wird in den dotierten Proben somit vermutlich nicht gebildet. In den undotierten Proben überwiegt hingegen die Einfangrate an Leerstellen gegenüber der Einfangrate an Dotieratomen (Dotieratomkonzentration von  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ). Die Bildung des Myonium–Leerstellen-Komplexes  $\text{Mu}_V$  ist daher deutlich bevorzugt.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß alle bisher diskutierten experimentellen Ergebnisse dafür sprechen, daß es sich bei der neuen Spezies  $\text{Mu}_V$  um einen Myonium–Leerstellen-Komplex handelt, zumindest ist dies mit allen Messungen verträglich. Die Argumente hierfür waren die eindeutige Korrespondenz der Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_V$  und  $\text{VH}$ , die Tatsache, daß die aus LFQ-Daten bestimmte Umwandlungsrate von  $\text{Mu}_T$  in  $\text{Mu}_V$  mit den Vorstellungen eines diffusionskontrollierten Einfangs von  $\text{Mu}_T$  in beim Abbremsen des Myons erzeugten Leerstellen verträglich ist, sowie die Unbeobachtbarkeit von  $\text{Mu}_V$  in den dotierten Proben Si:P und Si:B.

## 9.4 Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben

Bisher existiert lediglich eine indirekte Korrelation der Spezies  $\text{Mu}_V$  zu Siliziumleerstellen. Man kann hoffen, daß es möglich ist, durch Variation der Leerstellenkonzentration im Silizium eine Korrelation zwischen der Bildungswahrscheinlichkeit der Myonspezies  $\text{Mu}_V$  und der Konzentration der Siliziumleerstellen herstellen zu können. Die Leerstellenkonzentration kann dazu entweder verringert oder erhöht werden.

Mittels Elektronenbestrahlung wurden in Silizium daher gezielt Leerstellen erzeugt, um die Beteiligung von Leerstellen am Zustandekommen der Spezies  $\text{Mu}_V$  direkt zu untersuchen. Die Bestrahlung der Proben erfolgte bei  $T = 77 \text{ K}$  mit Elektronen der Energie  $2,5 \text{ MeV}$  am Dynamitron des Instituts für Strahlenphysik der Universität Stuttgart. Aufgrund der Geometrie des dortigen Probenhalters mußten die von uns standardmäßig verwendeten Proben in kleinere Stücke zerlegt werden, siehe auch Kapitel 6. Eine mittels  $\mu\text{SR}$  untersuchte Probe besteht somit aus 4 kleineren Plättchen, und die gesamte damit erzielte Probengröße beträgt  $16 \times 13 \times 2 \text{ mm}^3$ . Nach der Bestrahlung wurden die Proben einige

Wochen bei  $T = 77$  K gelagert, bevor sie am PSI mittels  $\mu\text{SR}$  untersucht werden konnten. Damit die mittels Elektronenbestrahlung erzeugten Leerstellen nicht durch Erwärmung der Probe ausheilen, mußten die Proben bei  $T = 77$  K in den Kryostaten eingebaut werden. Die Proben wurden bisher lediglich bei Raumtemperatur eingebaut. Daher war für den Einbau bei 77 K ein speziell konstruierter Probenhalter notwendig. Dieser mit einem Kupferkühlfinger ausgestattete Probenhalter wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelt und ist in Anhang A schematisch dargestellt.

Es wurden zwei unterschiedliche Siliziumproben mit Elektronen bestrahlt, eine undotierte sowie eine mit  $1,0 \cdot 10^{16}$  Phosphoratomen pro  $\text{cm}^{-3}$  dotierte Probe. Die Bestrahlungsdosen sind in Tabelle 6.2 zusammen mit den wesentlichen Probeneigenschaften aufgelistet. Die Produktionsrate für Einzelleerstellen liegt in Silizium bei ca.  $0,01 \text{ cm}^{-1}$  (WATKINS 1975). Die Bestrahlungsdosis der phosphordotierten Probe 39762/05-E1 wurde so gewählt, daß die Konzentration der bestrahlungsinduzierten Leerstellen ungefähr der Dotieratomkonzentration entspricht. Bei nahezu gleicher Dotieratom- und Leerstellenkonzentration sollte der zur  $\text{Mu}_V$ -Bildung konkurrierende Effekt des Einfangs von Myonium an Dotieratomen gleich wahrscheinlich sein wie der Einfang in Leerstellen, d.h. der  $\text{Mu}_V$ -Bildung. Damit erwartet man auch in dieser dotierten Probe die Beobachtbarkeit des zur Spezies  $\text{Mu}_V$  gehörigen Signals. Das charakteristische Signal der Spezies  $\text{Mu}_V$  ist allerdings nur beobachtbar, sofern sich die Spezies im neutralen Ladungszustand befindet. Falls die Spezies  $\text{Mu}_V$  in der phosphordotierten Probe jedoch geladen vorliegt (z.B. als  $\text{Mu}_V^-$ ), ist diese diamagnetisch und wäre dann als  $\mu^d$  beobachtbar.

Die undotierte Probe wurde zum Einen mit derselben Dosis wie die dotierte Probe und zum Anderen mit einer etwas geringeren Dosis bestrahlt, siehe Tabelle 6.2. In der undotierten Probe wird mit zunehmender Bestrahlungsdosis eine Erhöhung der Bildungsrate der Spezies  $\text{Mu}_V$  erwartet.

### 9.4.1 Experimentelle Ergebnisse

Zur Untersuchung der Spezies  $\text{Mu}_V$  in elektronenbestrahlten Proben wurde die LFQ-Methode herangezogen. Eine Untersuchung mittels  $\text{ZF}\mu\text{SR}$  wäre denkbar, jedoch viel zeitaufwendiger. Wegen der geringeren Größe der bestrahlten Proben ist selbst bei verstärktem  $\text{Mu}_V$ -Signal mit einer deutlich erhöhten Meßzeit zu rechnen. Daher wurde lediglich die bestrahlte undotierte Probe 42772/02-E1 auch mittels  $\text{ZF}\mu\text{SR}$  untersucht, siehe Kapitel 9.2.1, Tabelle 9.2. Auf die Ergebnisse dieser Messung wird im weiteren Verlauf dieses Kapitels näher eingegangen.

Bevor wir uns den experimentellen Ergebnissen zuwenden, soll der Einfluß der Elektronenbestrahlung auf die LFQ-Kurven zunächst theoretisch untersucht werden. Hierbei verwenden wir wieder die Modellvorstellung, daß  $\text{Mu}_V$  durch Einfang von  $\text{Mu}_T$  in einer Leerstelle gebildet wird. Weiterhin nutzen wir aus, daß wir den Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_V$  kennen und außerdem für die undotierte Probe die Einfangrate von  $\text{Mu}_T$  in eine beim Abbremsen des Myons erzeugten Leerstelle aus der Anpassung des Modells an die LFQ-Daten zu ca.  $1 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  bestimmt haben.

In den undotierten Proben ergab sich eine Einfangrate des Myons in den beim Abbremsen des Myons erzeugten Leerstellen von  $10^6 \text{ s}^{-1}$ . In den bestrahlten Proben werden Leerstellen in einer Konzentration von ca.  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , siehe Tabelle 6.2, erzeugt, die homogen über die Probe verteilt sind. Somit kann Gleichung (9.6) zur Berechnung der Einfangrate herangezogen werden, siehe Kapitel 9.3. Unter Zugrundelegung dieser Daten ergibt sich eine Einfangrate von ca.  $100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ . Es wird daher eine um den Faktor 100 erhöhte Übergangsrate von  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  in der bestrahlten undotierten Probe erwartet, d. h.  $\Gamma_{t,\text{bestr}} = 100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ .

Zur Berechnung der Quenching-Kurven müssen neben den Raten der dynamischen Prozesse auch die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Spezies bekannt sein. Diese könnten aus den früheren LFQ-Untersuchungen übernommen werden, wenn man sicher sein kann, daß erstens die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Myonspezies in den Siliziumproben durch die Bestrahlung nicht verändert werden (hiervon können wir, wie im folgenden dargestellt wird, ausgehen) und zweitens, daß alle Myonen auch tatsächlich in den Siliziumproben gestoppt werden. Für die bisherigen Untersuchungen an den unbestrahlten Proben ist letztere Voraussetzung weitgehend erfüllt, sie gilt jedoch nicht für die Messungen an den bestrahlten Proben. Dabei ist zu beachten, daß die Untersuchungen der bestrahlten Proben nicht an "Originalproben" der Größe  $25 \times 25 \times 2,5 \text{ mm}^3$  sondern an deutlich kleineren Proben ( $16 \times 13 \times 2 \text{ mm}^3$ ) durchgeführt wurden, welche sich zusätzlich in einem speziell konstruierten Probenhalter befanden, wobei die Probe von Kupfer umgeben ist, siehe Anhang A, so daß ein hoher Anteil der Myonen im Kupfer und nicht in der Probe gestoppt wird. Die im umgebenden Kupfer gestoppten Myonen bilden ausschließlich  $\mu^d$  und kein Myonium, weshalb bei Messungen in diesem Probenhalter ein deutlich überhöhtes  $\mu^d$ -Signal erwartet wird.

Um zu einem korrekten Vergleich zwischen elektronenbestrahlter und unbestrahlter Probe zu kommen, müssen daher sowohl die LFQ-Messungen an der bestrahlten als auch die Referenzmessungen an der unbestrahlten Probe mit identischem Probenhalter durchgeführt werden, wobei die Probe jeweils von Kupfer umgeben ist. Im folgenden werden wir dann immer von Messungen im Kupferprobenhalter sprechen. Weiterhin werden auch für die Referenzmessungen Proben mit den gleichen Abmessungen der bestrahlten Proben verwendet. Die so erhaltenen Ergebnisse werden weiter unten beschrieben.

Um den Effekt der Elektronenbestrahlung auf die in einem Kupferprobenhalter meßbaren LFQ-Kurven theoretisch abzuschätzen, kann man TF $\mu$ SR-Messungen in diesem Kupferprobenhalter heranziehen. Aus den TF $\mu$ SR-Messungen bei einem Magnetfeld von 4 mT und einer Temperatur von 5 K an der elektronenbestrahlten Siliziumprobe 42772/02-E1 im Kupferprobenhalter wurden Bildungswahrscheinlichkeiten von 40 % für  $\mu^d$ , 32,7 % für  $\text{Mu}_T$  und 31,8 % für  $\text{Mu}_{BC}$  bestimmt. Zum Vergleich ergaben TF $\mu$ SR-Messungen ebenfalls bei einem Magnetfeld von 4 mT und einer Temperatur von 5 K an der unbestrahlten Probe 42772/02-E3 im Standardprobenhalter, in welchem die Probe nicht von Kupfer umgeben ist, die Bildungswahrscheinlichkeiten 8,6 % für  $\mu^d$ , 45,9 % für  $\text{Mu}_T$  und 46,1 % für  $\text{Mu}_{BC}$ . Das Verhältnis der Bildungswahrscheinlichkeiten für  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$ , die beide mit Sicherheit nur in den Siliziumproben gebildet werden, wird durch die Elektronenbestrahlung ganz offensichtlich nicht beeinflußt. Dies spricht dafür, daß auch die Absolutwerte der Bildungswahrscheinlichkeiten von  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  in der Siliziumprobe durch die Elektro-

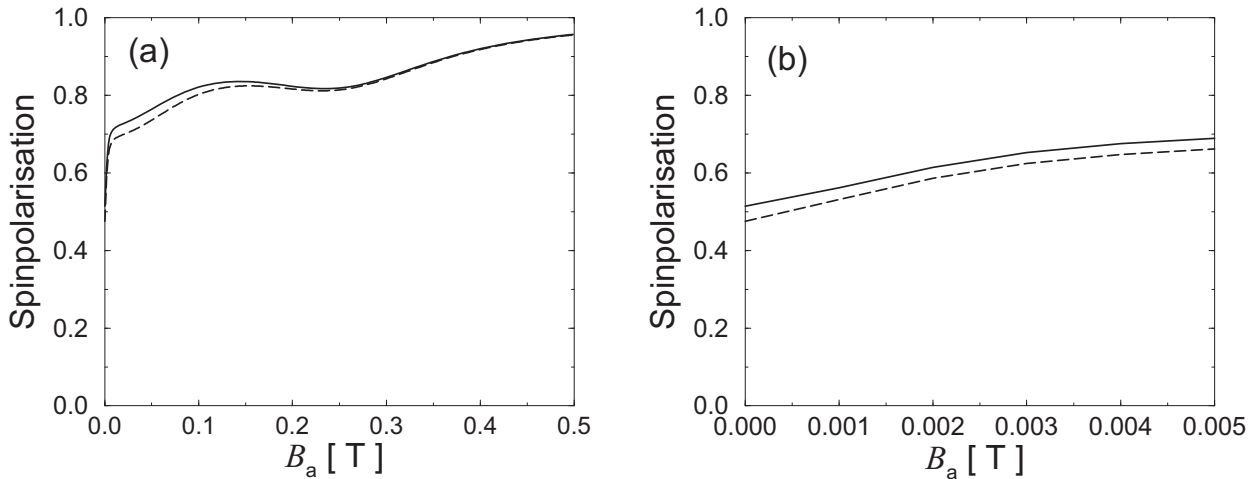


Abbildung 9.6: Erwartete Quenching-Kurven für elektronenbestrahlte (gestrichelte Linie) bzw. unbestrahlte (durchgezogene Linie) undotierte Siliziumproben (a) im Magnetfeldbereich bis 0,5 T (b) Ausschnittvergrößerung des Magnetfeldbereichs bis 0,005 T. Zur Berechnung dieser theoretischen Quenching-Kurven wurden als Bildungswahrscheinlichkeiten 40 %  $\mu^d$ , 30 %  $\text{Mu}_T$  sowie 30 %  $\text{Mu}_{BC}$  vorausgesetzt. In der unbestrahlten Probe findet der Übergang von  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  mit einer Übergangsrate von  $10^6 \text{ s}^{-1}$  statt, wohingegen in der elektronenbestrahlten Probe eine Übergangsrate von  $100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  erwartet wird, siehe hierzu auch den Text.

nenbestrahlung kaum geändert werden. Der erhöhte  $\mu^d$ -Anteil und der damit, verglichen mit den Messungen im Standardprobenhalter, niedrigere  $\text{Mu}_T$ - und  $\text{Mu}_{BC}$ -Anteil, welcher bei der im Kupferprobenhalter untersuchten elektronenbestrahlten Probe gefunden wurde, dürfte also allein den im Probenhalter gestoppten Myonen zuzuschreiben sein.

Zur Berechnung von LFQ-Kurven, welche unter Verwendung des Kupferprobenhalters gewonnen werden, gehen wir also von den Bildungswahrscheinlichkeiten von ca. 40 % für  $\mu^d$ , 30 % für  $\text{Mu}_T$  und 30 % für  $\text{Mu}_{BC}$  aus, und zwar sowohl für die elektronenbestrahlte als auch für die unbestrahlte Probe. Der Effekt der Elektronenbestrahlung wird für die undotierte Siliziumprobe dadurch simuliert, daß für die Übergangsrate von  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  einmal  $\Gamma_{t,\text{unbestr}} = 1 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  (unbestrahlte Probe), das andere Mal  $\Gamma_{t,\text{bestr}} = 100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  (elektronenbestrahlte Probe) gesetzt wird. Die beiden Quenching-Kurven, welche sich daraus ergeben, sind in Abbildung 9.6 dargestellt. Die Unterschiede zwischen den beiden Quenching-Kurven sind recht gering. Im Experiment sind die Meßpunkte zwar mit Fehlern behaftet, dennoch sollte die Tendenz eines Absinkens der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe im Magnetfeldbereich bis ca. 0,2 T auflösbar sein.

Die Vorhersage für die phosphordotierte Probe 39762/05 ist schwieriger. In  $\text{TF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen ist an der unbestrahlten Probe 39762/05-E2 keinerlei  $\text{Mu}_T$ -Signal beobachtbar. Dies liegt im Einfang des  $\text{Mu}_T$  an Dotieratomen begründet, wobei die sich bildenden Myonium-Dotieratom-Komplexe diamagnetisch sind. An einer im Standardprobenhalter untersuchten Probe in Originalgröße ergeben sich bei einem Magnetfeld von 4 mT und einer Temperatur von 5 K die Bildungswahrscheinlichkeiten von 11,4 % für

$\mu^d$  sowie 45,5 % für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ . In LFQ-Experimenten ist an dotierten Proben aber durchaus ein  $\text{Mu}_{\text{T}}$ -Anteil beobachtbar, welcher in etwa dem mittels TF $\mu$ SR unbeobachtbaren Anteil entspricht, also knapp 45 % (siehe z.B. die Probe Si:P). Im Kupferprobenhalter erwartet man wieder eine deutliche Überhöhung des  $\mu^d$ -Anteils, welcher anhand obiger TF $\mu$ SR-Untersuchungen auf 40 % geschätzt wird. Damit wären die Bildungswahrscheinlichkeiten in der dotierten Probe vergleichbar zur undotierten Probe. Des Weiteren wird in der bestrahlten Probe ein Übergang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\text{Mu}_{\text{V}}$  erwartet. Die Rate dieses Übergangs dürfte wie bei der intrinsischen Probe (42772/02) in etwa  $100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  betragen und damit vergleichbar zur Einfangrate von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  an den Dotieratomen sein (d. h. dem Konkurrenzeffekt  $\text{Mu}_{\text{T}} \rightarrow \mu^d$ ). Der Einfang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  an Dotieratomen wird aufgrund der vergleichbaren Konzentration von Leerstellen und Dotieratomen eine zum Einfang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  an Leerstellen ähnliche Übergangsrate aufweisen. Die Übergangsrate von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\mu^d$  liegt somit vermutlich bei ca.  $100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ . Der Übergang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\mu^d$  ist in der LFQ allerdings erst ab einigen  $1000 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  beobachtbar (SCHMIDL 1997). Daher ist Einfang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  an Dotieratomen in der dotierten Probe in den LFQ-Kurven nicht sichtbar.

Das Auftreten des Übergangs von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\text{Mu}_{\text{V}}$  wird sich in einem Absinken der zu beobachtenden LFQ-Kurve an der elektronenbestrahlten Probe im Bereich bis ca. 0,2 T im Vergleich zur an der unbestrahlten Probe gewonnenen LFQ-Kurve bemerkbar machen. Die Änderung der LFQ-Kurve durch Elektronenbestrahlung ist somit vergleichbar zu der in Abbildung 9.6 für die undotierten Proben dargestellten Änderungen oder sogar geringer. Die soeben angestellte Abschätzung setzt allerdings voraus, daß sich beim Einfang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  in einer Leerstelle auch bei den dotierten Proben die elektrisch neutrale Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{V}}$  bildet. Wie bereits weiter oben dargestellt, kann man nicht ausschließen, daß sich in der phosphordotierten Probe anstelle von neutralem  $\text{Mu}_{\text{V}}$  eine negativ geladene Spezies  $\text{Mu}_{\text{V}}^-$  bildet. In der Literatur ist bekannt, daß die Leerstellen in phosphordotiertem Silizium negativ geladen sind (WATKINS 1986, 1975, 1964). Eine negativ geladene Spezies  $\text{Mu}_{\text{V}}^-$  ist daher durchaus denkbar und wäre diamagnetisch, d. h., durch Einführen von Leerstellen würde sich in diesem Fall die Rate für den Übergang von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\mu^d$  erhöhen ( $\mu^d$  wäre dann einmal  $\text{Mu}_{\text{V}}^-$ , andererseits ein Myonium-Phosphor-Komplex). Die Übergangsrate von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\mu^d$  läge dann bei einigen  $100 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ , jedoch immer noch deutlich unterhalb von  $1000 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ . Daher würde sich dieser Übergang in der zu beobachtenden LFQ-Kurve nicht bemerkbar machen, siehe SCHMIDL (1997). Im Falle einer geladenen Spezies  $\text{Mu}_{\text{V}}^-$  in der dotierten Probe würde man somit unter diesen Voraussetzungen keinerlei Veränderung der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe im Vergleich zur unbestrahlten Probe erwarten.

Damit kommen wir nun zu den experimentellen Ergebnissen. Die elektronenbestrahlten Proben 42772/02-E1 sowie 39762/05-E1 wurden nun mittels der LFQ-Methode untersucht. Zu Vergleichszwecken wurden die jeweils zugehörigen unbestrahlten Proben 42772/02-E3 sowie 39762/05-E2 unter identischen Bedingungen untersucht. Die gewonnenen experimentellen Resultate sind in Abbildung 9.7 und 9.8 dargestellt.

An der undotierten Probe 42772/02 ist anhand von Abbildung 9.7 nahezu kein Einfluß der Elektronenbestrahlung auf die LFQ-Ergebnisse sichtbar. Trotz erhöhter Leerstellenkonzentration läßt sich keine Erhöhung der Übergangsrate von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach  $\text{Mu}_{\text{V}}$  nachweisen,

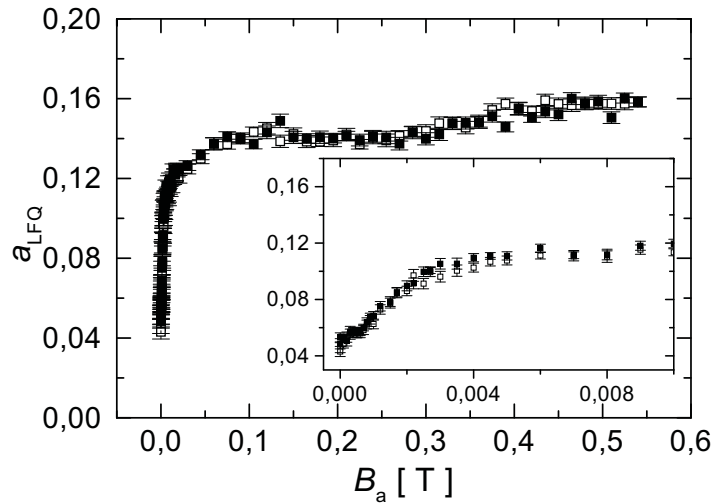


Abbildung 9.7: Ergebnisse der LFQ-Untersuchungen an der elektronenbestrahlten undotierten Probe 42772/02-E1 (ausgefüllte Symbole) im Vergleich zur unbestrahlten Probe 42772/02-E3 (unausgefüllte Symbole) gleicher Größe und Dotierung bei  $T = 5$  K. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ).

welche sich in einem Absinken der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe bemerkbar machen sollte. Es ist eher die gegenläufige Tendenz eines leichten Anstiegs der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe beobachtbar, welche den Erwartungen widerspricht. Auf die Interpretation dieses Resultates gehen wir im folgenden Kapitel ein.

An der phosphordotierten Probe 39762/05 ist anhand von Abbildung 9.8 eine Änderung der LFQ-Ergebnisse aufgrund der Elektronenbestrahlung erkennbar. Im Magnetfeldbereich bis ca. 0,2 T ist eine Verschiebung der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe zu höheren Werten im Vergleich zur unbestrahlten Probe beobachtbar, siehe Abbildung 9.8. Je nach Ladung der Spezies  $\text{Mu}_V$  in der dotierten Probe hätte man dagegen ein Absinken bzw. keinerlei Veränderung der LFQ-Kurve der bestrahlten Probe im Vergleich zur LFQ-Kurve der unbestrahlten Probe erwartet. Die Beobachtung steht somit im Widerspruch zu den Erwartungen. Die Interpretation dieses Resultates wird im folgenden Kapitel beschrieben.

### 9.4.2 Interpretation der Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die an den elektronenbestrahlten Proben gewonnenen Ergebnisse diskutiert werden. Des weiteren soll ein Vergleich zur in der Literatur an elektronenbestrahlten Proben berichteten Ergebnissen (ALBERT 1986, 1985, 1983, WESTHAUSER 1986) vorgenommen werden.

Sowohl an der undotierten als auch an der dotierten bestrahlten Probe wurde eine Erhöhung von  $a_{\text{LFQ}}$  im Vergleich zu den an den unbestrahlten Proben gewonnenen Kurven beobachtet, wobei diese Erhöhung in der undotierten Probe nur sehr schwach ausfällt. Diese Beobachtung an den bestrahlten Proben steht, wie bereits oben erläutert, bei bei-

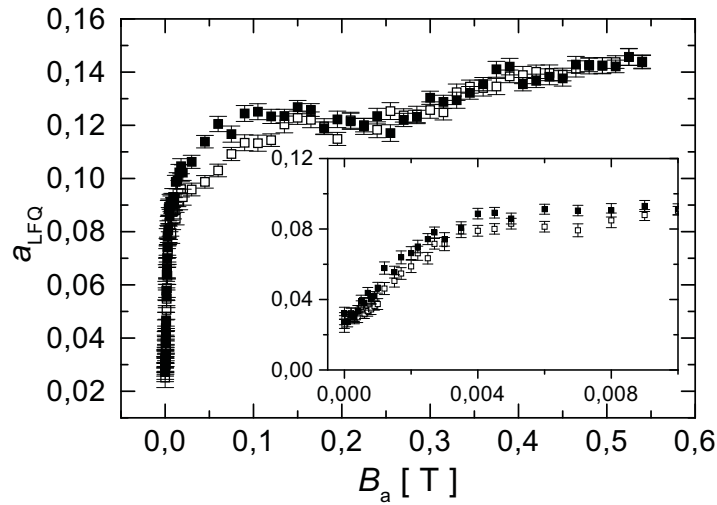


Abbildung 9.8: Ergebnisse der LFQ-Untersuchungen an den elektronenbestrahlten phosphordotierten Probe 39762/05-E1 (ausgefüllte Symbole) im Vergleich zur unbestrahlten Probe 39762/05-E2 (unausgefüllte Symbole) gleicher Größe und Dotierung bei  $T = 5$  K. Ausschnitt: Vergrößerung des Magnetfeldbereichs  $0 < B_a < 0,01$  T ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ).

den Proben im Widerspruch zu den Erwartungen. Aufgrund des hohen Hintergrundes an  $\mu^d$ , welcher durch den Kupferprobenhalter verursacht wird, ist eine Anpassung der LFQ-Kurven sehr schwierig. Daher soll hier eine nur qualitative Interpretation der aufgrund der Bestrahlung beobachteten Veränderungen durchgeführt werden. Um eine quantitative Auswertung der LFQ-Kurven durchführen zu können, wären weitere Messungen mit einer verbesserten Anordnung notwendig.

Die Erhöhung von  $a_{\text{LFQ}}$  beider untersuchter bestrahlten Proben läßt mehrere unterschiedliche Interpretationsmöglichkeiten zu. Zum Einen könnte die Übergangsrate von  $\text{Mu}_T$  nach  $\text{Mu}_V$  leicht verringert sein. Bei der Untersuchungstemperatur von 10 K findet keine Wanderung oder Rekombination der Leerstellen statt, durch die deren Konzentration verringert werden könnte. Aufgrund der durch die Elektronenbestrahlung deutlich höheren Leerstellenkonzentrationen ist diese Möglichkeit bei Festhalten an der Interpretation der Spezies  $\text{Mu}_V$  als Myonium-Leerstellen-Komplex reichlich unplausibel. Zum Anderen könnte durch die Elektronenbestrahlung die Probe so verändert werden, daß sich das Verhalten der Myonspezies wesentlich ändert. Die Bildung von bestrahlungs-induzierten Nukleationszentren wäre z. B. denkbar. Dadurch hervorgerufene Veränderungen des dynamischen Verhaltens der Myonspezies könnten die Änderung der Kurvenform möglicherweise erklären. Die durch die Elektronenbestrahlung hervorgerufene Veränderungen müssten dann in der dotierten Probe in Anbetracht der dort beobachteten stärkeren Änderung auch stärker ausgeprägt sein. Unterschiedliche Ladungszustände der Leerstellen in der undotierten und dotierten Probe würden die Beobachtungen nicht erklären. Bei negativ geladenen Leerstellen in der phosphordotierten Probe würde an Stelle des neutralen  $\text{Mu}_V$  nun das geladene  $\text{Mu}_V^-$  gebildet, welches als  $\mu^d$ -Signal sichtbar sein sollte. Dadurch würde sich allerdings die komplette LFQ-Kurve der bestrahlten Probe im Vergleich zur unbe-



strahlten Probe ohne Änderung der Kurvenform nach oben verschoben. Diese Verschiebung wurde aber nicht beobachtet. Folglich scheidet der Einfluß des Ladungszustandes der Leerstelle als Erklärung aus.

Welche Änderungen des Verhaltens der Myonspezies durch die Elektronenbestrahlung induziert werden können, ist anhand der durchgeführten Messungen nicht bestimmbar. Die LFQ-Kurve der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  liegt für die vorhandene Orientierung der untersuchten Proben ( $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$ ) im Magnetfeldbereich bis ca. 1 mT deutlich über den Kurven der anderen Spezies, siehe Abbildung 5.1. Eine erhöhte Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  könnte die Erhöhung der an den bestrahlten Proben gemessenen Kurven erklären. Unklar bliebe jedoch, aufgrund von welchem Mechanismus die Bildung von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  in bestrahlten Proben begünstigt sein sollte. Zur Aufklärung dieses Mechanismus können eventuell die durchgeführten TF $\mu$ SR-Untersuchungen beitragen.

In den TF $\mu$ SR-Experimenten an der undotierten Probe wurde eine durch die Bestrahlung deutlich erhöhte Relaxationsrate der Spezies  $\text{Mu}_{\text{T}}$  und  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  beobachtet. In der unbestrahlten undotierten Probe 42772/02 liegen die Relaxationsraten bei  $1,2 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  für  $\text{Mu}_{\text{T}}$  sowie bei  $3,5 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ , wohingegen in der bestrahlten Probe Relaxationsraten von  $10,2 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  für  $\text{Mu}_{\text{T}}$  sowie von  $9,0 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  für  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  beobachtet wurden. Diese Erhöhung der Relaxationsrate läßt auf deutlich verstärkte bzw. aufgrund der Bestrahlung neu hinzugekommene dynamische Prozesse schließen. Eine erhöhte Übergangsrate von  $\text{Mu}_{\text{T}}$  nach z.B.  $\mu^{\text{d}}$  würde in TF $\mu$ SR-Untersuchungen eine erhöhte Relaxationsrate der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_{\text{T}}$  erwarten lassen. Welcher dynamische Prozess jedoch der Erhöhung der Relaxationsrate von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  zugrunde liegt, ist bisher unklar.

Aus diesen TF $\mu$ SR-Ergebnissen kann man somit schließen, daß durch die Elektronenbestrahlung nicht nur die Leerstellenkonzentration in der Probe erhöht wird, sondern daß durch die Elektronenbestrahlung auch dynamische Prozesse in der Probe induziert werden.

Damit kommen wir nun zu den in der Literatur berichteten TF $\mu$ SR-Untersuchungen an elektronenbestrahlten Siliziumproben. Diese sollen direkt mit den von uns oben beschriebenen, in TF $\mu$ SR-Untersuchungen gewonnenen Ergebnissen verglichen werden. In der Literatur wurden von der Konstanzer Gruppe TF $\mu$ SR-Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben berichtet (ALBERT 1986, 1985, 1983, WESTHAUSER 1986). Es wurden sowohl dotierte als auch undotierte Proben verwendet. Die Dotieratomkonzentration der dotierten Probe lag bei  $10^{17}$  Boratomen je  $\text{cm}^{-3}$  sowie  $10^{13}$  Phosphoratomen je  $\text{cm}^{-3}$  für die undotierte Probe. Die Elektronenbestrahlung erfolgte mit Elektronen der Energie 3 MeV bei einer Temperatur von 4 K (ALBERT 1983) bzw. 20 K (ALBERT 1985) mit einer Bestrahlungsdosis von jeweils  $10^{18} \text{ e}^-/\text{cm}^2$ . Diese so bestrahlten Proben wurden bei 77 K gelagert und bei 80 K vermessen.

ALBERT (1983) berichtet, daß das  $\text{Mu}_{\text{T}}$ -Signal in der unbestrahlten undotierten Probe deutlich sichtbar ist, jedoch in der bestrahlten undotierten Probe verschwindet. Nach Erwärmung der bestrahlten Probe auf Raumtemperatur und erneuter Abkühlung auf 80 K wurde das  $\text{Mu}_{\text{T}}$ -Signal wieder sichtbar. Bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten TF $\mu$ SR-Untersuchungen an der undotierten Probe, welche mit der in

der Literatur diskutierten undotierten Probe einigermaßen vergleichbar ist, wurde jedoch sowohl in der unbestrahlten als auch in der bestrahlten Probe ein deutliches  $\text{Mu}_T$ -Signal beobachtet. In der bestrahlten Probe ist die Relaxation des  $\text{Mu}_T$ -Signals ( $10,2 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ ) im Vergleich zur unbestrahlten Probe ( $1,2 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ ) deutlich erhöht. Eine sehr hohe Relaxationsrate ( $> 20 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ ) kann dann durchaus zur Unbeobachtbarkeit des  $\text{Mu}_T$ -Signals führen. Dieses Ergebnis ist somit im Einklang mit dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit erhaltenen Resultat. Des weiteren wird berichtet (ALBERT 1986, 1985, 1983), daß das  $\text{Mu}_{BC}$ -Signal in der undotierten unbestrahlten Probe vermutlich aufgrund zu hoher Relaxation unbeobachtbar ist. Jedoch ist in der undotierten bestrahlten Probe ein deutliches  $\text{Mu}_{BC}$ -Signal mit geringer Relaxationsrate beobachtet worden. Dieses Resultat steht im Widerspruch zu den von uns an der undotierten Probe gewonnenen Ergebnissen, welche sowohl für die Spezies  $\text{Mu}_T$  als auch für die Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  in den bestrahlten Proben gegenüber den unbestrahlten Proben deutlich erhöhte Relaxationsraten aufweisen. Diese unterschiedlichen Beobachtungen bezüglich der Relaxationsrate von  $\text{Mu}_{BC}$  in elektronenbestrahlten Proben bedürfen einer weiteren und genaueren Untersuchung.

Nun soll noch kurz auf das mittels  $\text{ZF}\mu\text{SR}$  an der Probe 42772/02-E1 gewonnene, in Tabelle 9.3, Seite 114 dargestellte, Ergebnis eingegangen werden. Die bestrahlte Probe weist eine erhöhte Asymmetrie der im Nullfeld beobachteten Präzessionssignale von  $1,37 \cdot 10^{-3}$  und  $2,20 \cdot 10^{-3}$  im Vergleich zu den unbestrahlten gleich orientierten Proben mit  $0,72 \cdot 10^{-3}$  und  $0,31 \cdot 10^{-3}$  sowie  $0,51 \cdot 10^{-3}$  und  $2,47 \cdot 10^{-3}$  auf. Diese erhöhte Asymmetrie der bestrahlten Probe deutet auf eine erhöhte Bildungswahrscheinlichkeit der Spezies  $\text{Mu}_V$  hin, jedoch ist zu beachten, daß die Probengröße von bestrahlter und unbestrahlter Probe bei den  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen unterschiedlich ist, und die Erhöhung des weiteren nicht signifikant ist, da die Schwankungen in den Asymmetrien der Signale der unbestrahlten Proben bereits sehr groß sind. Diese Ergebnisse sind somit ungeeignet, um eine eindeutige Aussage zur Beteiligung von Leerstellen an der Bildung der Spezies  $\text{Mu}_V$  zu erhalten.

Wir kommen somit zu dem Schluß, daß anhand der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten LFQ- und  $\text{ZF}\mu\text{SR}$ -Untersuchungen an unbestrahlten Proben die Spezies  $\text{Mu}_V$  identifiziert werden konnte und indirekt eine Aussage zur Beteiligung von Leerstellen an der Bildung dieser Spezies  $\text{Mu}_V$  gemacht werden konnte (siehe die Diskussion in Kapitel 9.3). Die Untersuchungen an elektronenbestrahlten Proben liefern weder einen Beweis noch eine Widerlegung dieser Interpretation der Spezies  $\text{Mu}_V$  als Myonium-Leerstellen-Komplex. Die kleinen erwarteten Effekte infolge des Einfangs von  $\text{Mu}_T$  an bestrahlungs-induzierten Leerstellen werden anscheinend durch weitere mit der erhöhten Leerstellenkonzentration verbundene bzw. durch die Bestrahlung induzierten Einflüsse, deren Natur noch unbekannt ist, überdeckt.



# Kapitel 10

## Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden systematische  $\mu$ SR-Untersuchungen an Silizium-Einkristallen mit unterschiedlicher Dotierung und unterschiedlicher Sauerstoffkonzentration durchgeführt. Hierbei konnten zwei neue, bisher unbekannte paramagnetische Myonspezies mit anisotroper Hyperfeinwechselwirkung nachgewiesen und, wie weiter unten näher beschrieben, charakterisiert und zum Teil atomistisch gedeutet werden. Diese neuen Myonspezies, welche mit  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_V$  bezeichnet wurden, treten zu den drei bisher in Silizium bekannten Spezies, nämlich den beiden paramagnetischen Spezies  $\text{Mu}_T$  und  $\text{Mu}_{BC}$  sowie diamagnetischen Spezies  $\mu^d$ , hinzu. Das offenbar hochbewegliche sogenannte normale Myonium  $\text{Mu}_T$  ist auf Tetraeder-Zwischengitterplätzen lokalisiert und durch eine Hyperfeinwechselwirkung von etwa 2000 MHz charakterisiert. Das sogenannte anomale Myonium  $\text{Mu}_{BC}$  ist in eine Si-Si-Bindung am sogenannten „bond centre“-Platz eingebunden. Es besitzt eine anisotrope Hyperfeinwechselwirkung mit axialer Symmetrie um die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung, also um die Richtung einer Si-Si-Bindung. Die Hyperfeinparameter von  $\text{Mu}_{BC}$  sind deutlich kleiner als die von  $\text{Mu}_T$  und durch  $A_x = A_y = -92,6$  MHz und  $A_z = -16,8$  MHz gegeben, wenn die  $z$ -Achse des Koordinatensystems parallel zu einer  $\langle 111 \rangle$ -Richtung gelegt wird. Hinter  $\mu^d$  kann sich eine Vielzahl diamagnetischer Spezies verbergen, z. B. auch ein Komplex von Myonium mit einem Dotieratom.

Die vorliegenden  $\mu$ SR-Untersuchungen wurden am Paul-Scherrer-Institut (PSI), Villigen, Schweiz, durchgeführt. Die Entdeckung von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_V$  war nur dank der hohen Strahlstabilität des Myonstrahls am PSI sowie der Verwendung eines neuen Datenerfassungssystems mit hoher Zuverlässigkeit und außergewöhnlicher Stabilität (SCHMIDL 1997) möglich. Dies gewährleistete insbesondere bei LFQ-Untersuchungen stabile Experimentierbedingungen über Zeiten, welche für einen gesamten Magnetfelddurchlauf notwendig waren. Des weiteren erlaubte die Verwendung eines kompakten Detektorsystems (SCHMIDL 1997) eine verbesserte Reproduzierbarkeit der Geometrie des experimentellen Aufbaus. Damit war eine definierte, immer gleichbleibende Lage der Probe bezogen auf die Detektoren sichergestellt, was für systematische Untersuchungen unerlässlich ist.

Zur Entdeckung der Spezies  $\text{Mu}_X$  führten TF $\mu$ SR-Experimente (Messungen der Myon-Spin-Rotation in einem statischen Magnetfeld  $\vec{B}_a$ , das transversal zur Myonspinrichtung

im Strahl angelegt ist) bei  $T = 5$  K und  $B_a = 4$  mT an einer Vielzahl von einkristallinen Siliziumproben mit verschiedenen kristallographischen Orientierungen entlang des angelegten Magnetfelds. Bei einer Reihe von Proben, allerdings bei weitem nicht bei allen, wurde ein Präzessionssignal gefunden, welches nicht den bisher bekannten Myonspezies  $\text{Mu}_T$ ,  $\text{Mu}_{BC}$  oder  $\mu^d$  zugeordnet werden konnte. Ein derartiges Präzessionssignal trat allerdings nur auf, wenn das statische Magnetfeld parallel zu einer  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung ausgerichtet war. Diese Beobachtung zeigt bereits, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  um eine Spezies mit anisotroper Hyperfeinwechselwirkung handeln muß. Aus den Forderungen, daß das für  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  beobachtete zusätzliche Präzessionssignal reproduziert werden muß, daß für die anderen untersuchten Magnetfeldorientierungen kein aufgelöstes  $\text{Mu}_X$ -Signal beobachtbar sein darf, und daß die Frequenz  $\omega_X(B_a)$  des beobachteten Präzessionssignals von  $\text{Mu}_X$  in der Umgebung von  $B_a = 4$  mT nur schwach von der Magnetfeldstärke abhängt, wurde der Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_X$  mit zunächst noch größeren Fehlergrenzen bestimmt. Dieser wurde durch Anpassung des berechneten  $\omega_X(B_a)$ -Verlaufs an den über einen größeren Bereich ( $2 \text{ mT} < B_a < 6 \text{ mT}$ ) gemessenen weiter verfeinert. Es ergab sich ein bezüglich der  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung axialsymmetrischer Hyperfeintensor, der bei Wahl der  $z$ -Achse des Koordinatensystems parallel zu  $\langle 111 \rangle$  durch

$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_X} = \begin{pmatrix} (-82,6 \pm 3,0) & 0 & 0 \\ 0 & (-82,6 \pm 3,0) & 0 \\ 0 & 0 & (5,3 \pm 3,0) \end{pmatrix} \text{ MHz}$$

gegeben ist. Der  $\text{Mu}_X$  charakterisierende Hyperfeintensor ist dem von  $\text{Mu}_{BC}$  sehr ähnlich, liefert allerdings auch Präzessionssignale, welche sich deutlich von denen zur Spezies  $\text{Mu}_{BC}$  gehörigen unterscheiden. Die Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{BC}$  sind beide axialsymmetrisch um die  $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung, und die Beträge der Hyperfeinparameter sind nicht stark verschieden. Durch die genannten Experimente sind allerdings nur die relativen Vorzeichen von  $A_x$  und  $A_z$  der Spezies  $\text{Mu}_X$  bestimmbar. Die Vorzeichen der einzelnen Komponenten wurden hier ad hoc so festgelegt, daß  $A_x$  für  $\text{Mu}_X$  das gleiche Vorzeichen hat wie für  $\text{Mu}_{BC}$ . (Für  $\text{Mu}_{BC}$  war die Festlegung des Vorzeichens von  $A_x$  in aufwendigen Experimenten möglich (KIEFL 1988).)

Die Ähnlichkeit der Hyperfeintensoren von  $\text{Mu}_X$  und  $\text{Mu}_{BC}$  deutet darauf hin, daß auch bei der Spezies  $\text{Mu}_X$  das Myon auf einem „bond-centre“-Platz lokalisiert ist. Die Unterschiede in den beiden Hyperfeintensoren dürften darauf zurückzuführen sein, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  um anomales Myonium  $\text{Mu}_{BC}$  handelt, welches durch ein in der Nachbarschaft befindliches Dotier- oder Fremdatom gestört ist. Hinweise auf die Natur dieses Störatoms ergaben sich aus der Analyse der Korrelationen zwischen den Probenzusammensetzungen und dem Auftreten bzw. Nicht-Auftreten des charakteristischen  $\text{Mu}_X$ -Signals. Ein  $\text{Mu}_X$ -Signal tritt nur dann und immer dann auf, wenn die Sauerstoffkonzentration in der Probe die Konzentration der Dotieratome deutlich übersteigt. Eine gewisse Mindestkonzentration von Sauerstoff dürfte für die Bildung von  $\text{Mu}_X$  ebenfalls erforderlich sein.

Da Sauerstoff in den untersuchten Proben hauptsächlich interstitiell gelöst ist ( $\text{O}_i$ ), kann man aufgrund der beiden oben genannten Tatsachen vermuten, daß es sich bei  $\text{Mu}_X$  um

einen  $\text{Mu}_{\text{BC}}\text{-O}_i$ -Komplex handelt. Ob dieser Komplex allerdings etwas mit einem der bei Infrarot-Absorptions-Messungen (BECH NIELSEN 1997b) gefundenen  $\text{H-O}_i$ -Komplexen zu tun hat, bei denen Wasserstoff und Sauerstoff beide auf „bond centre“-Plätzen sitzen, und zwar vermutlich auf übernächsten oder drittnächsten Nachbarplätzen, ist derzeit völlig unklar. Auch eine engere Nachbarschaft von  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{O}_i$  ist denkbar und damit ein direkter Bezug zu den im Zusammenhang mit der wasserstoff-induzierten Sauerstoff-Diffusion (NEWMAN91) diskutierten  $\text{H-O}_i$ -Komplexen (ESTREICHER 1990, JONES 1992). Berechnungen der Hyperfeintensoren für die verschiedenen diskutierten  $\text{H-O}_i$ -Komplexe könnten zur Klärung beitragen.

Sowohl Amplitude als auch Dämpfung des für  $\text{Mu}_X$  spezifischen Präzessionssignals zeigen eine Temperaturabhängigkeit, welche im wesentlichen mit derjenigen identisch ist, die auch bei den  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signalen für die entsprechenden Größen gefunden wurde. Dies scheint darauf hinzudeuten, daß die dynamischen Prozesse, in die  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  im  $\text{Mu}_{\text{BC}}\text{-O}_i$ -Komplex verwickelt ist (vorausgesetzt diese Deutung der Spezies  $\text{Mu}_X$  ist korrekt), durch die Anwesenheit des interstitiellen Sauerstoffs kaum beeinflußt werden. Diese Aussage muß allerdings dadurch eingeschränkt werden, daß das Anlegen eines elektrostatischen Felds das spezifische  $\text{Mu}_X$ -Signal beeinflußt, nicht aber die  $\text{Mu}_{\text{BC}}$ -Signale und auch nicht die der Spezies  $\text{Mu}_T$  und  $\mu^d$ . Der Einfluß des elektrostatischen Felds besteht darin, daß die Dämpfung des für  $\text{Mu}_X$  spezifischen Präzessionssignals bei angelegtem elektrostatischen Feld deutlich ansteigt, und zwar unabhängig vom Vorzeichen des Felds. Die zugrunde liegenden Prozesse sind derzeit allerdings noch unverstanden.

Erste Hinweise auf die Spezies  $\text{Mu}_V$  ergaben sich in „Longitudinal Field Quenching“-Untersuchungen (LFQ) an einkristallinen eigenleitenden Siliziumproben (Dotieratomkonzentration  $< 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ). In diesen Experimenten, bei denen eine (gewichtete) zeitlich gemittelte Myonspinpolarisation als Funktion der Stärke eines longitudinal zur Myonspinrichtung im Strahl angelegten statischen Magnetfelds untersucht wird, wurde bei sehr kleinen Magnetfeldern ein Verlauf gefunden, welcher auf die Existenz einer weiteren paramagnetischen Myonspezies mit sehr kleiner Hyperfeinwechselwirkung (im Vergleich zu  $\text{Mu}_T$ ,  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_X$ ) hindeutet. Unter Verwendung eines Hyperfeintensors, der in etwa dem mit dem Verhältnis der magnetischen Momente von Myon und Proton skalierten Hyperfeintensor von VH entspricht und der damit das Myonanalogon von VH beschreiben sollte, konnten in der Tat die LFQ-Kurven angepaßt werden. Dabei ergab sich allerdings, daß  $\text{Mu}_V$  nicht „instantan“ nach der Myonimplantation gebildet wird, sondern mit einer Rate von etwa  $10^6 \text{ s}^{-1}$  verzögert aus der Vorläuferspezies  $\text{Mu}_T$ . Im Gegensatz zu den intrinsischen Siliziumproben wurden in dotierten Siliziumkristallen (Dotieratomkonzentration  $\approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) keinerlei Hinweise auf die Bildung der Spezies  $\text{Mu}_V$  gefunden. Da eine zuverlässige und genaue Bestimmung von Hyperfeintensoren aus LFQ-Daten nicht möglich ist, wurden an intrinsischen Siliziumproben  $\mu\text{SR}$ -Experimente im Nullfeld (d. h. ohne angelegtes Magnetfeld) mit extrem hoher Zählstatistik (Zahl der Ereignisse  $\approx 40$  Millionen) durchgeführt. In diesen Experimenten konnten sehr schwache Präzessionssignale der Spezies  $\text{Mu}_V$  gefunden und daraus der Hyperfeintensor von  $\text{Mu}_V$  bestimmt werden. Es ergab sich der Hyperfeintensor

$$\mathbf{A}_{\text{Mu}_V} = \begin{pmatrix} (-12, 0 \pm 0, 1) & 0 & 0 \\ 0 & (-12, 0 \pm 0, 1) & 0 \\ 0 & 0 & (27, 9 \pm 0, 1) \end{pmatrix} \text{ MHz}$$

mit innerhalb der Fehlergrenzen axialer Symmetrie um die  $\langle 110 \rangle$ -Kristallrichtung ( $z$ -Achse parallel  $\langle 110 \rangle$ ).  $\mathbf{A}_{\text{Mu}_V}$  stimmt sehr gut mit dem skalierten Hyperfeintensor der Wasserstoffspezies VH überein, womit die Interpretation von  $\text{Mu}_V$  als einer in einer Silizium-Leerstelle eingefangenen Myonspezies gestützt wird. Die sehr geringen Amplituden der  $\text{Mu}_V$ -Präzessionssignale im Nullfeld zeigen, daß sich  $\text{Mu}_V$  verzögert aus einer Vorläuferspezies bilden muß. Dies steht auch im Einklang mit den Schlußfolgerungen aus LFQ-Untersuchungen.

Da im thermischen Gleichgewicht bei der Untersuchungstemperatur von 10 K nur eine praktisch verschwindende Leerstellenkonzentration vorliegt, muß man annehmen, daß die Myonen in bei ihrem Abbremsen von ihnen erzeugten Leerstellen eingefangen werden. Wird die verzögerte Bildung von  $\text{Mu}_V$  aus  $\text{Mu}_T$  als diffusionskontrollierter Einfang von  $\text{Mu}_T$  in einer selbsterzeugten Leerstelle interpretiert, so läßt sich eine Diffusionskonstante für die Spezies  $\text{Mu}_T$  von  $D_{\text{Mu}_T} \approx (10^6 - 10^7) \text{ m}^2/\text{s}$  ableiten. Diese Diffusionskonstante ist zwar sehr hoch, aber für die hochbewegliche Spezies  $\text{Mu}_T$  doch vernünftig, wie ein Vergleich mit der in Germanium für  $\text{Mu}_T$  bestimmten Diffusionskonstante (DÖRING 1984) zeigte. Auch die Tatsache, daß in den dotierten Siliziumproben keine Bildung von  $\text{Mu}_V$  beobachtet werden konnte, läßt sich zwanglos verstehen. Es ist bekannt, daß in diesen Proben  $\text{Mu}_T$  an Dotieratomen eingefangen wird und einen diamagnetischen Komplex, d. h.  $\mu^d$  bildet (SCHEUERMANN 1997b). Dieser Prozeß tritt vermutlich als Konkurrenzprozeß zum Einfang von  $\text{Mu}_T$  an selbsterzeugten Leerstellen auf und verhindert die Bildung von  $\text{Mu}_V$ . Ein anderer Ladungszustand der Leerstellen in den dotierten Proben mag die Bildung einer paramagnetischen Spezies ebenfalls unterdrücken.

Um zu versuchen, die Rolle der Leerstellen bei der Bildung von  $\text{Mu}_V$  direkt nachzuweisen, wurden Messungen an elektronenbestrahlten Proben durchgeführt. Die so zusätzlich eingeführten Leerstellen sollten die Bildungsrate von  $\text{Mu}_V$  in den intrinsischen Siliziumproben erhöhen bzw. die Bildung von  $\text{Mu}_V$  in den dotierten Proben überhaupt erst sichtbar machen. Die erwarteten geringen Effekte auf die LFQ-Kurven konnten allerdings nicht bestätigt werden. Stattdessen wurden geringfügige andersartige Veränderungen registriert. Deren Ursache ist zwar noch nicht geklärt; es existiert aber eine Erklärungsmöglichkeit, die alle unsere obigen Schlußfolgerungen unberührt lassen, nämlich, daß  $\text{Mu}_V$  Myonium in einer Leerstelle ist, und daß diese Spezies unter geeigneten Voraussetzungen durch Einfang von  $\text{Mu}_T$  an einer bei der Myonimplantation selbst erzeugten Leerstelle gebildet werden kann.

In den Arbeiten zur  $\mu\text{SR}$  wurde die Wechselwirkung der Myonen mit den von ihnen beim Abbremsen erzeugten Gitterbaufehlern diskutiert (PATTERSON 1988) und als wenig wahrscheinlich angesehen. Bis zum Zeitpunkt der vorliegenden Arbeit wurde auch keine Evidenz hierfür gefunden. Die obige Diskussion zeigt, daß es spezielle Situationen geben kann, unter denen die Myonen mit den von ihnen erzeugten Leerstellen wechselwirken.

# Anhang A

## Kupferprobenhalter

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden von unserer Gruppe erstmals LFQ- und ZF $\mu$ SR-Untersuchungen an zuvor elektronenbestrahlten Siliziumproben durchgeführt. Dazu war ein spezieller Probenhalter erforderlich, welcher in diesem Kapitel genauer beschrieben werden soll. Die bei 77 K elektronenbestrahlten Proben mußten, um eine Ausheilung der bestrahlungsinduzierten Fehlstellen zu verhindern, in flüssigem Stickstoff gelagert werden. Der Einbau der zu untersuchenden Siliziumprobe in den Kryostaten erfolgt bei den von unserer Gruppe bisher angewandten  $\mu$ SR-Methoden bei Raumtemperatur. Um eine starke Erwärmung der Probe während des Einbaus zu verhindern, war die Konstruktion eines speziellen Probenhalter erforderlich. Dieser wurde aus Kupfer hergestellt und beinhaltet ein Reservoir für flüssigen Stickstoff sowie einen Probenaufnahme aus massivem Kupfer, welcher in direktem Kontakt zur Probe steht. In Abbildung A.1 ist der schematische Aufbau dieses Probenhalters zu sehen, welcher auch als Kupferprobenhalter bezeichnet wird.

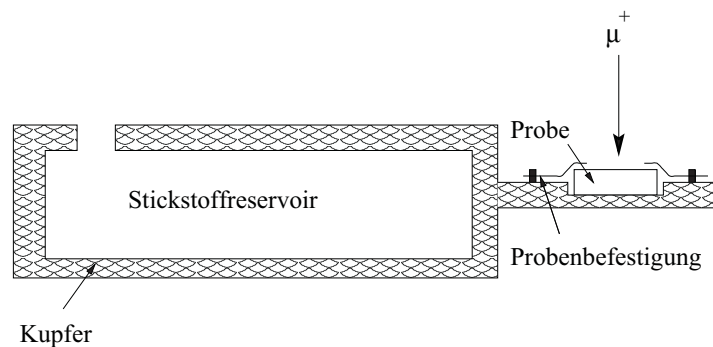


Abbildung A.1: *Kupferprobenhalter zur Untersuchung elektronenbestrahlter Proben. Die Probe wird durch direkten Kontakt zum Kupfer, welches in Kontakt zum Stickstoffreservoir steht, beim Einbau in den Kryostaten auf Temperaturen unterhalb 80 K gehalten.*

Die in flüssigem Stickstoff gelagerten elektronenbestrahlten Proben wurde in dieser Umgebung in den Probenhalter eingebaut und darin zum Experimentierareal transportiert. Vor dem Einbau der Probe wurde der Kryostat auf ca. 5 K abgekühlt. Beim Einbau der Probe in den Kryostaten, wobei die Probe kurzzeitig von Raumtemperatur umgeben war,



wurde die Probentemperatur auf der nicht vom Kupfer bedeckten Oberfläche der Probe gemessen. Die erreichten Temperaturen lagen aufgrund des Kontaktes der Probe zum mittels des Stickstoffreservoirs auf 77 K gehaltenen Kupfer immer unterhalb von 80 K. Nach dem Einbau wurde der Kryostat mitsamt der Probe sofort auf 5 K abgekühlt.

Ein großer Teil der Myonen wird in dem die Probe umgebenden Kupfer gestoppt. Die Myonen bilden in Kupfer  $\mu^d$ , wodurch es bei diesen Untersuchungen zu einem stark überhöhten  $\mu^d$ -Signal kommt.

## Anhang B

# Probenhalter für Untersuchungen im elektrostatischen Feld

Für die Untersuchungen von Siliziumproben in einem transversalen Magnetfeld mit zusätzlich longitudinal angelegtem elektrostatischem Feld, welche von unserer Gruppe bisher nicht durchgeführt wurden, ist ein spezieller Probenhalter notwendig. Zur Erzeugung des elektrostatischen Felds wurde die Aluminiumbeschichtung von selbstklebender aluminisierter Mylarfolie verwendet.

Die Präparation der Probe für diese Untersuchungen ist wie folgt: Zuerst wird die Probe beidseitig mit isolierender Kaptonfolie bedeckt, welche einen Ausschnitt von in etwa der Probengröße enthält, siehe Abbildung B.1. Danach wird die Probe bzw. die zur Isolation verwendete Kaptonfolie mit der aluminisierten selbstklebenden Mylarfolie beklebt. Um ein elektrostatisches Feld erzeugen zu können, muß die Aluminiumschicht der Folie in Kontakt mit der Spannungsquelle stehen. Die Aluminiumschicht befindet sich in der Mitte der Folie zwischen Klebeschicht und Mylar, siehe Abbildung B.2. Zur Kontaktierung der Mylarfolie muß an einer Stelle der selbstklebenden aluminisierten Mylarfolie die isolierende Klebeschicht entfernt werden, siehe Abbildung B.2.

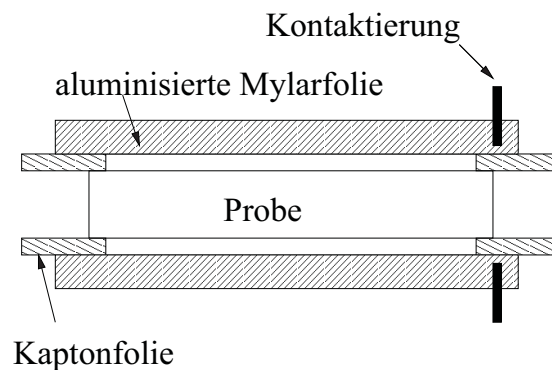


Abbildung B.1: Aufbau des speziell für Untersuchungen im elektrostatischen Feld entwickelten Probenhalters.

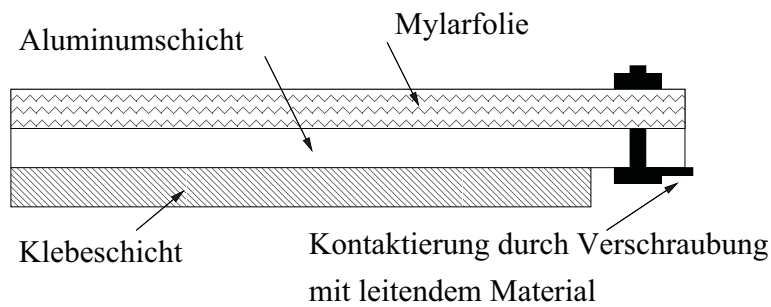


Abbildung B.2: Aufbau und Kontaktierung der verwendeten selbstklebenden aluminisierten Mylarfolie durch Verschraubung der Aluminumschicht mit leitendem Material.

Der Vorteil dieser Methode im Vergleich zu Bedampfung mit einer leitenden Schicht, besteht darin, daß keine Diffusion der leitenden Schicht in das Silizium stattfinden kann, welche die Eigenschaften der Probe stark beeinflussen kann. Des weiteren kann die Probe nach der Untersuchung im elektrostatischen Feld wieder unter identischen Bedingungen wie zuvor untersucht werden, da die „Beschichtung“ der Probe aufgrund der verwendeten Klebefolie jederzeit wieder rückgängig gemacht werden kann. Somit konnte auch sichergestellt werden, daß die Probe durch die Untersuchungen im elektrostatischen Feld in ihren Eigenschaften unverändert bleibt. Die Klebeschicht der Folie hat zum einen den Vorteil, daß sie eine Isolation zwischen Probe und Aluminiumschicht darstellt, sowie einen einigmaßen definierten Abstand zwischen Aluminium und Probe gewährleistet, welcher bei Verwendung von nicht-selbstklebender Folie deutlich ungenauer wäre.

# Anhang C

## Matrix zur Berechnung der Myonspinpolarisation

In Kapitel 5 wurde bei der Berechnung der Myonspinpolarisation eine 15-dimensionale Matrix  $\mathbf{M}$  eingeführt. Damit konnten die gekoppelten Bewegungsgleichungen (5.7), welche das zeitliche Verhalten der Spinpolarisation beschreiben, in kompakter Form dargestellt werden, siehe Gleichung (5.8), Seite 54. Die Komponenten der Matrix  $\mathbf{M}$  lassen sich aus den Gleichungen (5.7) bestimmen. Hier soll der allgemeiner Hyperfeintensor einer beliebigen Myonspezies der Form

$$\mathbf{A}_{\text{allg}} = \begin{pmatrix} A_{xx} & A_{xy} & A_{xz} \\ A_{xy} & A_{yy} & A_{yz} \\ A_{xz} & A_{yz} & A_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

zugrunde gelegt werden. Die Matrizen der einzelnen Myonspezies können daraus durch Einsetzen der zugehörigen Hyperfeinparameter, vergleiche (5.3), und entsprechender Transformation in das Laborsystem, welches durch die Richtung des von außen angelegten Magnetfelds festgelegt ist, siehe Kapitel 5.1, bestimmt werden.

Seien  $\omega_\mu^i$  sowie  $\omega_e^i$  die Komponenten der Präzessionskreisfrequenzen des Myons bzw. Elektrons, welche durch  $\vec{\omega}_\mu = \gamma_\mu \vec{B}_a$ ,  $\vec{\omega}_e = \gamma_e \vec{B}_a$  definiert sind, dann ergibt sich für die Matrix  $\mathbf{M}$  die Form

$\mathbf{M} =$

$$\begin{pmatrix} 0 & \omega_\mu^3 & -\omega_\mu^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -w_{zx} & -w_{zy} & -w_{zz} & w_{yx} & w_{yy} & w_{yz} \\ -\omega_\mu^3 & 0 & \omega_\mu^1 & 0 & 0 & 0 & w_{zx} & w_{zy} & w_{zz} & 0 & 0 & 0 & -w_{xx} & -w_{xy} & -w_{xz} \\ \omega_\mu^2 & -\omega_\mu^1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -w_{yx} & -w_{yy} & -w_{yz} & w_{xx} & w_{xy} & w_{xz} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\omega_e^3 & \omega_e^2 & 0 & -w_{xz} & w_{xy} & 0 & -w_{yz} & w_{yy} & 0 & -w_{zz} & w_{zy} \\ 0 & 0 & 0 & \omega_e^3 & 0 & -\omega_e^1 & w_{xz} & 0 & -w_{xx} & w_{yz} & 0 & -w_{yx} & w_{zz} & 0 & -w_{zx} \\ 0 & 0 & 0 & -\omega_e^2 & \omega_e^1 & 0 & -w_{xy} & w_{xx} & 0 & -w_{yy} & w_{yx} & 0 & -w_{zy} & w_{zx} & 0 \\ 0 & -w_{zx} & w_{yx} & 0 & -w_{xz} & w_{xy} & 0 & -\omega_e^3 & \omega_e^2 & \omega_\mu^3 & 0 & 0 & -\omega_\mu^2 & 0 & 0 \\ 0 & -w_{zy} & w_{yy} & w_{xz} & 0 & -w_{xx} & \omega_e^3 & 0 & -\omega_e^1 & 0 & \omega_\mu^3 & 0 & 0 & -\omega_\mu^2 & 0 \\ 0 & -w_{zz} & w_{yz} & -w_{xy} & w_{xx} & 0 & -\omega_e^2 & \omega_e^1 & 0 & 0 & 0 & \omega_\mu^3 & 0 & 0 & -\omega_\mu^2 \\ w_{zx} & 0 & -w_{xx} & 0 & -w_{yz} & w_{yy} & -\omega_\mu^3 & 0 & 0 & 0 & -\omega_e^3 & \omega_e^2 & \omega_\mu^1 & 0 & 0 \\ w_{zy} & 0 & -w_{xy} & w_{yz} & 0 & -w_{yx} & 0 & -\omega_\mu^3 & 0 & \omega_e^3 & 0 & -\omega_e^1 & 0 & \omega_\mu^1 & 0 \\ w_{zz} & 0 & -w_{xz} & -w_{yy} & w_{yx} & 0 & 0 & 0 & -\omega_\mu^3 & -\omega_e^2 & \omega_e^1 & 0 & 0 & 0 & \omega_\mu^1 \\ -w_{yx} & w_{xx} & 0 & 0 & -w_{zz} & w_{zy} & \omega_\mu^2 & 0 & 0 & -\omega_\mu^1 & 0 & 0 & 0 & -\omega_e^3 & \omega_e^2 \\ -w_{yy} & w_{xy} & 0 & w_{zz} & 0 & -w_{zx} & 0 & \omega_\mu^2 & 0 & 0 & -\omega_\mu^1 & 0 & \omega_e^3 & 0 & -\omega_e^1 \\ -w_{yz} & w_{xz} & 0 & -w_{zy} & w_{zx} & 0 & 0 & 0 & \omega_\mu^2 & 0 & 0 & -\omega_\mu^1 & -\omega_e^2 & \omega_e^1 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei die Größen  $w_{ij}$  durch  $w_{ij} = \frac{1}{2}\omega_{ij} = \pi A_{ij}$  bestimmt sind.

# Anhang D

## Tabellen und Abbildungen

In diesem Abschnitt sind weiterführende Tabellen und Abbildungen zu Kapitel 7 enthalten.

In den Tabellen D.1 bis D.4 sind alle in den Proben 42772/02 und 47079/6 bei  $T = 5$  K beobachteten Präzessionssignale in Abhängigkeit von der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds angegeben. In Tabelle 7.5, Kapitel 7.2, sind dagegen lediglich die Präzessionssignale zwischen 20 MHz und 30 MHz aufgeführt.

Tabelle D.5 enthält die bei  $T = 5$  K und  $B_a = 4$  mT an der Probe 42772/02 beobachteten Präzessionssignale in Abhängigkeit von der Probenorientierung. Die Einträge in Tabelle D.5 sind mit denen in Tabelle 7.6 zu vergleichen. Dort sind die berechneten Frequenzen und Amplituden der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_{\text{X}}$  für diese Stärke des Magnetfelds angegeben.

In Abbildung D.1 sind, analog zu Abbildung 7.7 in Kapitel 7.2, die berechneten Frequenzen und Amplituden der Spezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  und  $\text{Mu}_{\text{X}}$  in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfelds angegeben, wobei hier nun  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  gewählt wurde.

Probenbezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT ]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	2,5	$0,35 \pm 0,01$	$1,82 \pm 0,10$	$0,20 \pm 0,03$
		$25,58 \pm 0,13$	$1,89 \pm 0,34$	$4,03 \pm 0,98$
		$34,45 \pm 0,02$	$3,82 \pm 0,36$	$1,60 \pm 0,17$
		$35,71 \pm 0,03$	$3,43 \pm 0,34$	$1,50 \pm 0,17$
		$37,97 \pm 0,19$	$1,82 \pm 0,51$	$3,55 \pm 1,12$
		$41,43 \pm 0,03$	$1,54 \pm 0,23$	$1,42 \pm 0,29$
		$51,15 \pm 0,04$	$1,58 \pm 0,21$	$1,48 \pm 0,24$

Tabelle D.1: *Experimentelle Ergebnisse aller an den Proben 42772/02 und 47079/6 beobachteten Präzessionssignale bei  $T = 5$  K in Abhängigkeit der Stärke des äußeren Magnetfelds. Fortsetzung in Tabelle D.2 bis D.4. Tabelle 7.5 stellt einen Auszug hieraus dar.*

Proben- bezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT ]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	3,0	0,43 ± 0,01	1,83 ± 0,10	0,21 ± 0,03
		24,82 ± 0,10	1,83 ± 0,29	3,08 ± 0,58
		36,70 ± 0,12	1,80 ± 0,39	3,81 ± 1,02
		41,09 ± 0,03	5,35 ± 0,38	2,41 ± 0,22
		43,00 ± 0,02	2,56 ± 0,24	1,30 ± 0,16
		50,65 ± 0,03	1,71 ± 0,18	1,21 ± 0,17
	4,0	0,54 ± 0,01	1,78 ± 0,10	0,17 ± 0,02
		24,76 ± 0,04	2,11 ± 0,22	1,46 ± 0,21
		34,79 ± 0,05	1,84 ± 0,25	2,08 ± 0,35
		42,61 ± 0,01	1,78 ± 0,15	0,71 ± 0,09
		50,02 ± 0,02	1,76 ± 0,15	0,78 ± 0,10
		54,33 ± 0,02	3,38 ± 0,21	1,37 ± 0,11
	5,0	57,56 ± 0,02	2,77 ± 0,18	1,14 ± 0,10
		0,68 ± 0,01	1,97 ± 0,10	0,20 ± 0,03
		24,70 ± 0,03	1,95 ± 0,18	1,15 ± 0,16
		33,59 ± 0,03	2,28 ± 0,22	1,63 ± 0,21
		43,03 ± 0,01	2,04 ± 0,14	0,54 ± 0,07
		49,59 ± 0,01	1,57 ± 0,12	0,51 ± 0,06
	6,0	67,40 ± 0,02	3,06 ± 0,19	1,14 ± 0,10
		72,33 ± 0,02	3,12 ± 0,21	1,32 ± 0,13
		0,82 ± 0,01	2,08 ± 0,11	0,25 ± 0,03
		24,37 ± 0,01	2,79 ± 0,53	1,36 ± 0,33
		24,73 ± 0,02	2,82 ± 0,48	1,67 ± 0,27
		32,79 ± 0,03	2,19 ± 0,21	1,70 ± 0,19
		43,29 ± 0,01	2,07 ± 0,13	0,39 ± 0,05
		49,33 ± 0,01	1,92 ± 0,12	0,45 ± 0,05
	80,26 ± 0,02	3,58 ± 0,21	1,39 ± 0,11	
	87,34 ± 0,03	2,68 ± 0,19	1,45 ± 0,14	

Tabelle D.2: Fortsetzung von Tabelle D.1.

Proben- bezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
42772/02	7,0	$0,96 \pm 0,01$	$1,92 \pm 0,11$	$0,19 \pm 0,03$
		$24,78 \pm 0,02$	$2,28 \pm 0,19$	$1,13 \pm 0,12$
		$32,24 \pm 0,02$	$2,07 \pm 0,21$	$1,04 \pm 0,15$
		$43,45 \pm 0,01$	$2,02 \pm 0,13$	$0,30 \pm 0,04$
		$49,15 \pm 0,01$	$1,90 \pm 0,13$	$0,34 \pm 0,04$
		$93,05 \pm 0,02$	$3,14 \pm 0,24$	$1,40 \pm 0,16$
		$102,7 \pm 0,02$	$2,32 \pm 0,22$	$1,20 \pm 0,17$
		8,0	$1,09 \pm 0,01$	$1,99 \pm 0,10$
	$24,51 \pm 0,02$		$1,84 \pm 0,26$	$1,84 \pm 0,26$
	$24,84 \pm 0,01$		$2,40 \pm 0,17$	$0,86 \pm 0,08$
	$31,86 \pm 0,02$		$2,11 \pm 0,16$	$1,02 \pm 0,10$
	$43,54 \pm 0,01$		$2,04 \pm 0,11$	$0,22 \pm 0,03$
	$49,07 \pm 0,01$		$1,74 \pm 0,10$	$0,21 \pm 0,03$
	$105,3 \pm 0,02$		$3,36 \pm 0,20$	$1,36 \pm 0,12$
	$117,9 \pm 0,03$		$2,48 \pm 0,20$	$1,28 \pm 0,15$
	12,0	$1,63 \pm 0,01$	$2,21 \pm 0,01$	$0,18 \pm 0,02$
		$24,56 \pm 0,02$	$0,72 \pm 0,32$	$0,83 \pm 0,05$
		$24,96 \pm 0,01$	$2,74 \pm 0,12$	$0,90 \pm 0,01$
		$31,14 \pm 0,01$	$2,11 \pm 0,11$	$0,60 \pm 0,04$
		$43,55 \pm 0,01$	$2,18 \pm 0,08$	$0,15 \pm 0,02$
		$49,07 \pm 0,01$	$2,12 \pm 0,08$	$0,17 \pm 0,02$
		$153,3 \pm 0,02$	$3,26 \pm 0,17$	$1,49 \pm 0,11$
		$181,5 \pm 0,04$	$1,27 \pm 0,16$	$1,20 \pm 0,28$
	20,0	$2,72 \pm 0,01$	$2,84 \pm 0,10$	$0,22 \pm 0,02$
		$24,78 \pm 0,02$	$2,37 \pm 0,14$	$0,64 \pm 0,05$
		$25,27 \pm 0,02$	$0,21 \pm 0,06$	$0,18 \pm 0,06$
		$31,10 \pm 0,02$	$2,28 \pm 0,14$	$0,72 \pm 0,05$
		$42,91 \pm 0,01$	$2,00 \pm 0,01$	$0,04 \pm 0,02$
		$49,70 \pm 0,01$	$1,98 \pm 0,01$	$0,03 \pm 0,02$
		$240,2 \pm 0,03$	$2,77 \pm 0,22$	$1,38 \pm 0,17$

Tabelle D.3: Fortsetzung von Tabelle D.1 und D.2.



Proben- bezeichnung	Stärke des Magnetfelds [ mT ]	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
47079/6	4,0	$0,53 \pm 0,01$	$2,05 \pm 0,01$	$0,31 \pm 0,02$
		$24,67 \pm 0,04$	$1,46 \pm 0,17$	$1,87 \pm 0,31$
		$34,95 \pm 0,05$	$1,78 \pm 0,18$	$2,79 \pm 0,31$
		$42,58 \pm 0,01$	$1,78 \pm 0,11$	$0,77 \pm 0,07$
		$50,02 \pm 0,02$	$1,46 \pm 0,10$	$0,71 \pm 0,08$
		$53,45 \pm 0,04$	$3,10 \pm 0,23$	$2,69 \pm 0,24$
		$56,64 \pm 0,06$	$2,85 \pm 0,25$	$3,14 \pm 0,33$
		6,0	$0,81 \pm 0,01$	$1,83 \pm 0,08$
	$24,31 \pm 0,02$		$1,19 \pm 0,08$	$0,68 \pm 0,37$
	$24,73 \pm 0,02$		$1,28 \pm 0,14$	$1,12 \pm 0,13$
	$32,90 \pm 0,03$		$1,76 \pm 0,14$	$1,64 \pm 0,16$
	$43,28 \pm 0,01$		$1,95 \pm 0,09$	$0,39 \pm 0,04$
	$49,33 \pm 0,01$		$1,37 \pm 0,08$	$0,31 \pm 0,03$
	$79,42 \pm 0,05$		$3,08 \pm 0,23$	$3,32 \pm 0,33$
	$86,54 \pm 0,08$		$2,28 \pm 0,21$	$3,49 \pm 0,41$
	8,0	$1,08 \pm 0,01$	$2,06 \pm 0,08$	$0,26 \pm 0,02$
		$24,42 \pm 0,02$	$0,58 \pm 0,08$	$0,29 \pm 0,10$
		$24,86 \pm 0,01$	$1,47 \pm 0,24$	$3,13 \pm 0,58$
		$32,25 \pm 0,04$	$1,52 \pm 0,18$	$1,99 \pm 0,34$
		$43,53 \pm 0,01$	$1,95 \pm 0,08$	$0,22 \pm 0,03$
		$49,07 \pm 0,01$	$1,72 \pm 0,08$	$0,32 \pm 0,03$
		$104,6 \pm 0,07$	$2,70 \pm 0,24$	$3,63 \pm 0,43$
		$117,3 \pm 0,07$	$1,75 \pm 0,22$	$3,08 \pm 0,50$
	10,0	$1,35 \pm 0,01$	$2,12 \pm 0,08$	$0,26 \pm 0,02$
		$24,64 \pm 0,02$	$0,30 \pm 0,08$	$0,60 \pm 0,05$
		$24,96 \pm 0,01$	$1,80 \pm 0,19$	$0,81 \pm 0,01$
		$31,40 \pm 0,01$	$1,74 \pm 0,10$	$0,72 \pm 0,06$
		$43,60 \pm 0,01$	$2,06 \pm 0,07$	$0,16 \pm 0,02$
		$49,02 \pm 0,01$	$1,67 \pm 0,07$	$0,21 \pm 0,02$
		$129,1 \pm 0,09$	$2,23 \pm 0,30$	$4,11 \pm 0,76$
		$148,6 \pm 0,09$	$1,51 \pm 0,20$	$2,95 \pm 0,58$

Tabelle D.4: Fortsetzung von Tabelle D.1 bis D.3.

Orientierung von $\vec{B}_a$	Frequenz [ MHz ]	Asymmetrie [ $10^{-2}$ ]	Dämpfung [ $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ]
$\langle 100 \rangle$	$0,54 \pm 0,02$	$2,42 \pm 0,06$	$0,19 \pm 0,01$
	$34,66 \pm 0,13$	$3,28 \pm 0,28$	$6,93 \pm 0,54$
	$42,74 \pm 0,04$	$3,97 \pm 0,22$	$4,17 \pm 0,24$
	$53,62 \pm 0,01$	$2,90 \pm 0,13$	$1,26 \pm 0,08$
	$56,75 \pm 0,01$	$2,60 \pm 0,13$	$1,17 \pm 0,08$
$\langle 110 \rangle$	$0,55 \pm 0,03$	$1,78 \pm 0,07$	$0,20 \pm 0,02$
	$24,76 \pm 0,04$	$2,11 \pm 0,22$	$1,46 \pm 0,21$
	$34,89 \pm 0,04$	$1,94 \pm 0,16$	$2,13 \pm 0,23$
	$42,62 \pm 0,10$	$1,81 \pm 0,10$	$0,72 \pm 0,06$
	$49,98 \pm 0,11$	$1,68 \pm 0,11$	$0,68 \pm 0,06$
	$54,38 \pm 0,11$	$2,64 \pm 0,13$	$1,18 \pm 0,08$
	$57,55 \pm 0,12$	$3,08 \pm 0,13$	$1,27 \pm 0,07$
$\langle 112 \rangle$	$0,55 \pm 0,04$	$1,66 \pm 0,07$	$0,21 \pm 0,02$
	$37,44 \pm 0,03$	$1,88 \pm 0,15$	$1,84 \pm 0,18$
	$42,58 \pm 0,02$	$0,96 \pm 0,09$	$0,51 \pm 0,08$
	$45,40 \pm 0,03$	$2,10 \pm 0,16$	$1,83 \pm 0,18$
	$50,03 \pm 0,02$	$0,64 \pm 0,09$	$0,59 \pm 0,12$
	$54,38 \pm 0,01$	$3,50 \pm 0,14$	$1,30 \pm 0,07$
	$57,55 \pm 0,01$	$3,24 \pm 0,15$	$1,55 \pm 0,09$

Tabelle D.5: Experimentelle Ergebnisse der an der Probe 42772/02 bei  $T = 5 \text{ K}$  und  $B_a = 4 \text{ mT}$  bestimmten Präzessionssignale für die Magnetfeldrichtungen  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 100 \rangle$ ,  $\vec{B}_a \parallel \langle 110 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$  und  $\vec{B}_a \parallel \langle 112 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 111 \rangle$ .

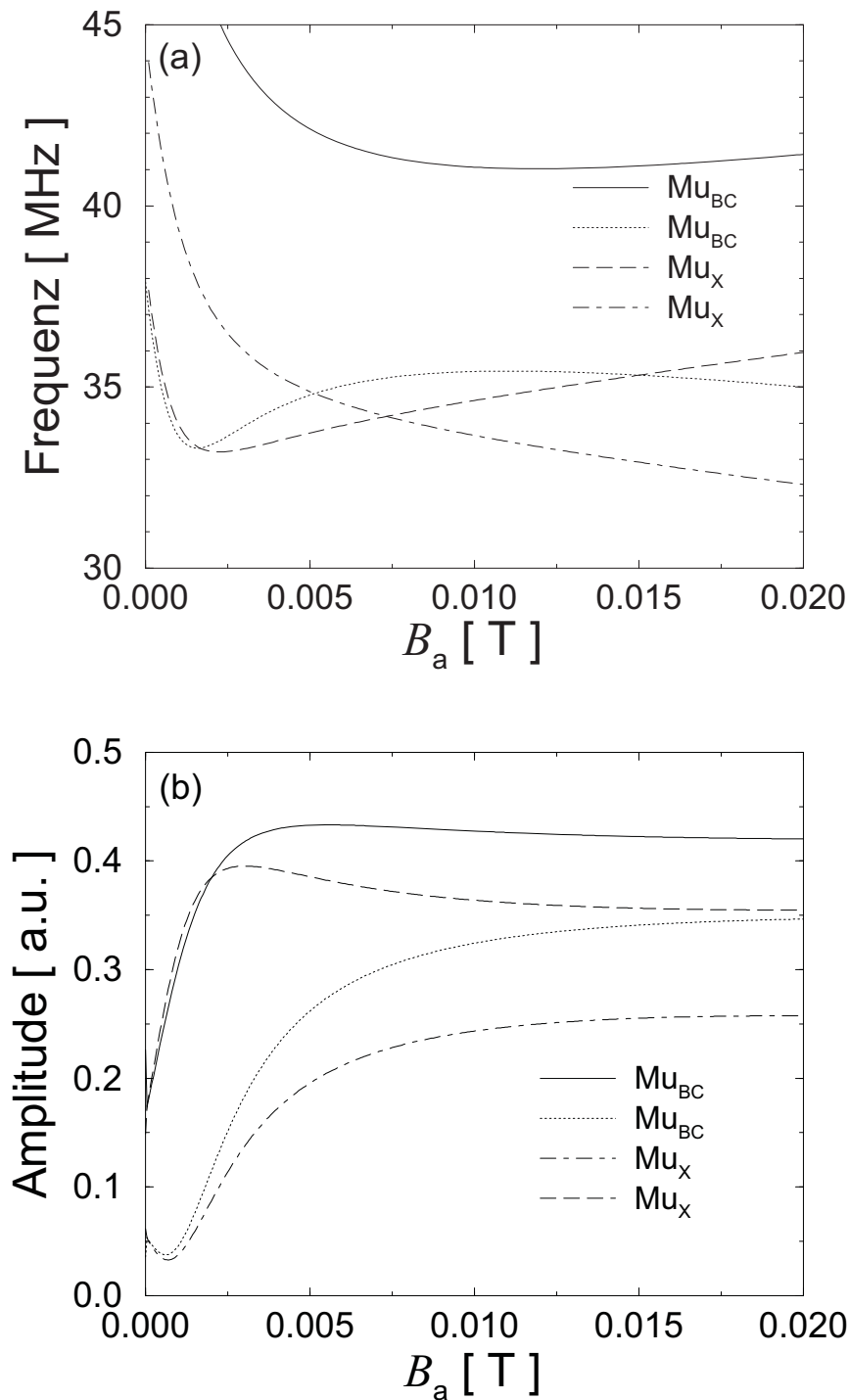


Abbildung D.1: (a) Berechnete Präzessionsfrequenzen der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  (durchgezogene und gepunktete Linie) und  $\text{Mu}_{\text{X}}$  (gestrichelte und gestrichelt-gepunktete Linie) in Abhängigkeit von der Stärke des von außen angelegten Magnetfelds für  $\vec{B}_a \parallel \langle 100 \rangle$  mit Beobachtungsrichtung entlang  $\langle 100 \rangle$ . (b) zugehörige berechnete Amplituden der Präzessionsfrequenzen der Myonspezies  $\text{Mu}_{\text{BC}}$  (durchgezogene und gepunktete Linie) und  $\text{Mu}_{\text{X}}$  (gestrichelte und gestrichelt-gepunktete Linie).

# Literaturverzeichnis

- ALBERT, E., A. MÖSLANG, E. RECKNAGEL, und A. WEIDINGER: *Electron irradiation effects on muonium states in silicon*, Hyp. Int. **15/16** (1983) 525-528.
- ALBERT, E., S. BARTH, A. MÖSLANG, E. RECKNAGEL, A. WEIDINGER, und P. MOSER: *Muonium as a probe for defects in electron irradiated silicon*, Appl. Phys. Lett. **46** (1985) 759-761.
- ALBERT, E.: *Myonium in dotiertem und bestrahltem Silizium*, Dissertation, Universität Konstanz, 1986.
- ANDERSON, C. D., und S. H. NEDDERMEYER: *Cloud chamber observations of cosmic rays at 4000 meters elevation and near sea-level*, Phys. Rev. **50** (1936) 263-271.
- BECH NIELSEN, B., P. JOHANNESSEN, P. STALLINGA, K. BONDE NIELSEN und J. R. BYBERG: *Identification of the silicon vacancy containing a single hydrogen atom by EPR*, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1507-1510.
- BECH NIELSEN, B., K. TANDERUP, M. BUDDE, K. BONDE NIELSEN, J. L. LINDSTRÖM, R. JONES, S. ÖBERG, B. HOURAHINE und P. BRIDDON: *Local vibrational modes of weakly bound O-H complexes in Si*, Mat. Sci. Forum **258-263** (1997) 391-398.
- BIRKE, M., E. M. FORGAN, H. GLÜCKLER, A. HOFER, T. J. JACKSON, F. J. LIT-TERST, H. LUETKENS, E. MORENZONI, CH. NIEDERMEYER, M. PLEINES, T. PROKSCHA, T. M. RISEMAN, A. SCHATZ, G. SCHATZ, und H. P. WEBER: *Low energy  $\mu^+$  beam developments*, PSI Scientific Report 1998, Vol. 1, Villigen, Schweiz, 1999, S. 96.
- BONAPASTA, A. A.: *Theory of H sites in undoped crystalline semiconductors*, Physica. **B 170** (1991) 168-180.
- BREWER, J. H., K. M. CROWE, F. N. GYGAX, R. F. JOHNSON, B. D. PATTERSON, D. G. FLEMING und A. SCHENCK: *Anomalous  $\mu^+$  precession in silicon*, Phys. Rev. Lett. **31** (1973) 143-146.
- BREWER, J. H., K. M. CROWE, F. N. GYGAX, und A. SCHENCK: *Muon Chemistry and muons in solids*, in V. W. HUGHES und C. S. WU (Hrsg.): *Muon physics III*, Academic Press, New York, 1975.

- BREWER, J. H.: *Muon spin rotation / relaxation / resonance*, Encyclopedia of Appl. Phys. **11** (1994) 23-53.
- COX, S. F. J., und M. C. R. SYMONS: *Molecular radical models for the muonium centers in silicon*, Chem. Phys. Lett. **126** (1986) 516-525.
- COX, S. F. J.: *Implanted muon studies in condensed matter science*, J. Phys.. **C 20** (1987) 3187-3319.
- DÖRING, K.-P., K.-P. ARNOLD, M. GLADISCH, N. HAAS, E. E. HALLER, D. HERLACH, W. JACOBS, M. KRAUSE, M. KRAUTH, H. ORTH und A. SEEGER: *Muonium in ultra-pure Si-doped germanium*, Hyp. Int. **17-19** (1984) 629-634.
- EISENSTEIN, B. , R. PREPOST und A. M. SACHS: *Depolarization of positive muons in solids*, Phys. Rev. **142** (1966) 217-227.
- ESTLE, T. L., S. L. RUDAZ, E. HOLZSCHUH, R. F. KIEFL, B. D. PATTERSON, W. KÜNDIG und K. W. BLAZEY: *Low-field anomalous muonium depolarization in isotopically enriched germanium*, Hyp. Int. **17-19** (1984a) 623-628.
- ESTLE, T. L., M. E. WARREN und B. D. PATTERSON: *Model calculations of nuclear hyperfine structure for anomalous muonium and their implications*, Hyp. Int. **17-19** (1984b) 589-594.
- ESTREICHER, S. K., und D. S. MARYNICK: *Kommentar zu SAHOO* (1985), Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 1511.
- ESTREICHER, S. K.: *Interstitial O in Si and its interaction with H*, Phys. Rev. **B 41** (1990) 9886-9891.
- ESTREICHER, S. K.: *Hydrogen-related defects in crystalline semiconductors: a theorist's perspective*, Mat. Sci. Eng. **R14** (1995) 319-412.
- ESTREICHER, S. K., Y. K. PARK und P. A. FEDDERS: *Hydrogen-oxygen interaction in silicon*, in R. JONES (Hrsg.): *Early stages of oxygen precipitation in silicon*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1996, S. 179.
- FABIAN, S., persönliche Mitteilung, (1997).
- FEHER, G., R. PREPOST und A. M. SACHS: *Muonium formation in semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 515-517.
- FERRELL, R. A., und F. CHAOS: *Paschen-Back effect as a means of detecting muonium*, Phys. Rev. **107** (1957) 1322-1323.
- FERRELL, R. A., Y. C. LEE und M. K. PAL: *Magnetic quenching of hyperfine depolarization of positive muons*, Phys. Rev. **118** (1960) 317-319.
- FORD, G. W., und C. J. MULLIN: *Scattering of polarized dirac particles on electrons*, Phys. Rev. **108** (1957) 477-481.

- FULLER, C. S., und R. A. LOGAN: *Effect of heat treatment upon the electrical properties of silicon crystals*, J. Appl. Phys. **28** (1957) 1427-1436.
- GARWIN, R. L., L. M. LEDERMAN und M. WEINRICH: *Observation of the failure of conservation of parity and charge conjugation in meson decays: the magnetic moment of the free muon*, Phys. Rev. **105** (1957) 1415-1417.
- GORELKIN, V. N., V. R. SOLOVIEV, A. M. KONCHAKOV und YU. P. DOBRET-SOV: *The influence of electric field on processes at muon-tracks end in noble gases*, Hyp. Int. **105** (1997) 265-270.
- GORELKINSKII, YU. V., und N. N. NEVINNYI: *EPR of Si-H centers in silicon*, Sov. Tech. Phys. Lett. **13** (1987) 45-46.
- HUGHES, V. W., D. W. MCCOLM, K. ZIOCK und R. PREPOST: *Formation of muonium and observation of its lamor precession*, Phys. Rev. Lett. **5** (1960) 63-65.
- IWANOWSKI, M.: *Positive Myonen in Silizium — Untersuchungen mit Longitudinal Field-Quenching und Hochfrequenz- $\mu$ SR*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1994.
- IVANTER, I. G., und V. P. SMILGA: *Theory of muonium mechanism of depolarisation of  $\mu^+$  mesons in media*, Sov. Phys. JETP **27** (1968) 301-306.
- JAMES, F.: *Minuit: Function minimization and error analysis*, CERN Program Library Long Writeup D506, 1992.
- JOHANNESSEN, P., J. R. BYBERG, B. BECH NIELSEN, P. STALLINGA und K. BONDE NIELSEN: *Identification of VH in silicon by EPR*, Mat. Sci. Forum **258-263** (1997) 515-520.
- JONES, R., S. ÖBERG und A. UMERSKI: *Interaction of hydrogen with impurities in semiconductors*, Mat. Sci. Forum **83-87** (1992) 551-562.
- JONES, R. (Hrsg.): *Early stages of oxygen precipitation in silicon*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1996.
- KIEFL, R. F., M. CELIO, T. L. ESTLE, S. R. KREITZMAN, G. M. LUKE, T. M. RISEMAN und E. J. ANSALDO:  *$^{29}\text{Si}$  Hyperfine structure of anomalous muonium in silicon: proof of the bond-centered model*, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 224-226.
- KREITZMAN, S. R., B. HITTI, R. L. LICHTI, T. L. ESTLE, und K. H. CHOW: *Muon-spin-resonance study of muonium dynamics in Si and its relevance to hydrogen*, Phys. Rev. **B 51** (1995) 13117-13137.
- KUNZE, P.: *Untersuchungen der Ultrastrahlung in der Wilsonkammer*, Zeitschrift für Physik **83** (1933) 1-18.
- LANDOLT-BÖRNSTEIN: *Zahlenwerte und Funktionen, Neue Serie*, Band III 22a, Springer, Berlin, 1976.
- LEE, T. D. und YANG, C. N.: *Question of parity conservation in weak interactions*, Phys. Rev. **104** (1956) 254-258.

- MAJOR, J., A. SEEGER, J. EHMANN und TH. GESSMANN: *Positronium in condensed matter studied with spin-polarised positrons*, in K. P. JUNGSMANN, I. REINHARD, und F. TRÄGER (Hrsg.): *Lecture notes in physics: atomic physics methods in modern research*, Springer, Heidelberg, 1997.
- MAJOR, J., I. D. REID, A. RÖCK, M. SCHEFZIK, R. SCHEUERMANN, J. SCHMIDL, U. ZIMMERMANN, D. HERLACH, und O. KORMANN: *A novel time-differential  $\mu$ SR data-acquisition system*, Physica **B 289-290** (2000) 702-705.
- MEIER, P. F.: *Spin dynamics of transitions between muon states*, Phys. Rev. **A 25** (1982) 1287-1294.
- MEILIKHOV, E. E., E. P. KRASMOPEPOV und D. G. ESHCHENKO: *Muonium in condensed neon: spur formation scenario*, Hyp. Int. **105** (1997) 259-263.
- MURRAY, R., A. R. BROWN und R. C. NEWMAN: *Enhanced thermal donor formation and oxygen diffusion in silicon exposed to a Hydrogen plasma*, Mat. Sci. Eng. **B 4** (1989) 299-302.
- MURRAY, R.: *Hydrogen enhanced oxygen diffusion*, Physica **B 170** (1991) 115-123.
- MYERS, S. M., M. I. BASKES, H. K. BIRNBAUM, J. W. CORBETT, G. G. DELEO, S. K. ESTREICHER, E. E. HALLER, P. JENA, N. M. JOHNSON, R. KIRCHHEIM, S. J. PEARTON, und M. J. STAVOLA: *Hydrogen interactions with defects in crystalline solids*, Rev. Mod. Phys. **64** (1992) 559-617.
- NEWMAN, R. C., J. H. TUCKER, A. R. BROWN, und S. A. MCQUAID: *Hydrogen diffusion and the catalysis of enhanced oxygen diffusion in silicon at temperatures below 500 degree celsius*, J. Appl. Phys. **70** (1991) 3061-3070.
- NOSOV, V. G., und I. V. YAKOLEVA: *Depolarisation of  $\mu^+$  mesons in solids*, Sov. Phys. JETP **16** (1963) 1236-1246.
- ODERMATT, W.: *Spin dynamics of transitions among muon states in semiconductors*, Helv. Phys. Acta **61** (1988) 1087-1129.
- OREAR, J., G. HARRIS, und E. BIERMAN: *Influence of strong magnetic field on depolarization of muons*, Phys. Rev. **107** (1957) 322-323.
- PAJOT, B.: *Some atomic configurations of oxygen*, in F. SHIMURA (Hrsg.): *Oxygen in silicon* (Semiconductors and Semimetals, Vol. 42), Academic Press, Boston, 1994, S. 191-249.
- PANKOVE, J. I., und N. M. JOHNSON (Hrsg.): *Hydrogen in semiconductors*, Academic Press, San Diego, 1991.
- PATTERSON, B. D.: *Muonium states in semiconductors*, Rev. Mod. Phys. **60** (1988) 69-159.
- PEARTON, S. J., J. W. CORBETT, und M. STAVOLA, in H.-J. QUEISSER (Hrsg.): *Hydrogen in crystalline semiconductors*, Springer, Berlin, 1992.

- PSI Users' Guide, Accelerator Facilities*, Paul Scherrer Institut, 1994.
- RAMAMOORTHY, M., und S. T. PANTELIDES: *Coupled-barrier diffusion: The case of oxygen in silicon*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996a) 267-270.
- RAMAMOORTHY, M., und S. T. PANTELIDES: *Oxygen diffusion in silicon: The influence of hydrogen*, in R. JONES (Hrsg.): *Early stages of oxygen precipitation in silicon*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1996b, S. 197.
- REID, I.: *The MINUIT-based  $\mu$ SR fitting programme MINUIT*, PSI  $\mu$ SR Facility, Villigen, Schweiz, 1993.
- SAHOO, N., K. C. MISHRA und T. P. DAS: *Identification of anomalous muonium in semiconductors as a vacancy associated center*, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1506-1509.
- SAHOO, N., K. C. MISHRA und T. P. DAS: *Anwort auf ESTREICHER* (1986), Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 1512.
- SCHEFZIK, M., R. SCHEUERMANN, L. SCHIMMELE, J. SCHMIDL, A. SEEGER, D. HERLACH, O. KORMANN, J. MAJOR, und A. RÖCK: *Evidence for a novel muon species in crystalline silicon*, Solid State Comm. **107** (1998) 395-400.
- SCHEFZIK, M., R. SCHEUERMANN, L. SCHIMMELE, A. SEEGER, D. HERLACH, O. KORMANN, J. MAJOR, und A. RÖCK: *Oxygen-related anisotropic muonium centres in crystalline silicon*, Phil. Mag. **B 79** (1999) 1561-1575.
- SCHEFZIK, M., L. SCHIMMELE, A. SEEGER, D. HERLACH, O. KORMANN, J. MAJOR, und A. RÖCK: *Vacancy-related muon species in crystalline silicon*, Physica **B 289-290** (2000a) 511-515.
- SCHEFZIK, M., L. SCHIMMELE, A. SEEGER, D. HERLACH, O. KORMANN, J. MAJOR, und A. RÖCK: *Oxygen-related muon species in crystalline silicon*, Physica **B 289-290** (2000b) 521-524.
- SCHENCK, A.: *Muon spin rotation spectroscopy*, Adam Hilger, Bristol, 1985.
- SCHEUERMANN, R., L. SCHIMMELE, A. SEEGER, TH. STAMMLER, TH. GRUND, M. HAMPELE, D. HERLACH, M. IWANOWSKI, J. MAJOR, M. NOTTER und TH. PFIZ: *Investigation of muon-state dynamics in silicon by longitudinal field-quenching and radio-frequency  $\mu^+$  spin resonance*, Phil. Mag. **B 72** (1995) 161-181.
- SCHEUERMANN, R.:  *$\mu^+$ SR-Untersuchungen des dynamischen Verhaltens positiver Myonen in Silizium unter besonderer Berücksichtigung der Rolle photogenerierter Ladungsträger*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1997a.
- SCHEUERMANN, R., L. SCHIMMELE, J. SCHMIDL, J. MAJOR, D. HERLACH und C. A. SCOTT: *Radio-frequency muon spin resonance (RF $\mu$ SR) experiments on condensed matter*, Appl. Magn. Reson. **13** (1997b) 195-217.



- SCHMIDL, J.: *Das dynamische Verhalten positiver Myonen in Silizium — Weiterentwicklung der Meßtechnik und Untersuchungen mit „Longitudinal Field Quenching“*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.
- SEEGER, A., H. FÖLL, und W. FRANK: *Self-interstitials, vacancies and their clusters in silicon and germanium*, Int. Phys. Conf. Ser. **31** (1977) 12-29.
- SEEGER, A.: *Positive Muons and Pions in materials research: perspectives and future developments*, in J. CHAPPERT und R. I. GRYNSPAN (Hrsg.): *Muons and pions in materials research*, Elsevier Science, Amsterdam, 1984, S. 251.
- SEGRÉ, E.: *Nuclei and particles*, Benjamin/Cummings, Reading, 1977.
- SENS, J. C., R. A. SWANSON, V. L. TELEGDI und D. D. YOVANOVITCH: *Re-establishment of  $\mu^+$  polarization in depolarizing media by an external magnetic field*, Phys. Rev. **107** (1957) 1465-1467.
- SHIMURA, F. (Hrsg.): *Oxygen in silicon* (Semiconductors and Semimetals, Vol. 42), Academic Press, Boston, 1994.
- STORCHAK, V., S. F. J. COX, S. P. COTTRELL, J. H. BREWER, G. D. MORIS, D. J. ARSENEAU und B. HITTI: *Muonium formation via electron transport in silicon*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 2835-2838.
- SWANSON, R. A.: *Depolarization of positive muons in condensed matter*, Phys. Rev. **112** (1958) 580-586.
- SYMONS, M. C. R.: *Chemical aspect of muon spin rotation*, Hyp. Int. **17-19** (1984) 771-784.
- WATKINS, G. D., und J. W. CORBETT: *Defects in irradiated silicon: Electron paramagnetic resonance and electron-nuclear double resonance of the Si-E center*, Phys. Rev. **134** (1964) A1359-A1377.
- WATKINS, G. D.: *EPR studies of the lattice vacancy and low-temperature damage processes in silicon*, Inst. Phys. Conf. Series **23** (1975) 1-22.
- WATKINS, G. D.: *The lattice vacancy in Silicon*, in S. T. PANTELIDES (Hrsg.): *Deep centers in semiconductors: a state of the art approach*, Gordon & Breach, New York, 1986, S. 147-183.
- WATKINS, G. D.: *Intrinsic point defects in semiconductors*, in W. SCHRÖTER (Hrsg.): *Electronic structure and properties of semiconductors* (Material Science and Technology Vol. 4), VCH, Weinheim, 1991, S. 105-141.
- WEBER, J., und D. I. BOHNE: *Passivation of thermal donors by atomic hydrogen*, in R. JONES (Hrsg.): *Early stages of oxygen precipitation in silicon*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1996, S. 123.
- WESTHAUSER, E., E. ALBERT, M. HAMMA, E. RECKNAGEL, A. WEIDINGER, und P. MOSER: *Mu to  $Mu^*$  transition in electron irradiated silicon*, Hyp. Int. **32** (1986) 589-593.

- 
- WU, C. S., E. AMBLER, R. W. HAYWARD, D. D. HOPPES und R. P. HUDSON:  
*Experimental test of parity conservation in beta decay*, Phys. Rev. **105** (1957) 1413-1415.



## Danksagung

Mein Dank gilt in erster Linie Herrn Prof. Dr. A. Seeger für die Möglichkeit, das interessante Gebiet der  $\mu$ SR kennenzulernen und die vorliegende Arbeit anzufertigen. Für die Übernahme des Hauptberichts danke ich ihm ebenfalls.

Herrn Prof. Dr. D. Schweitzer danke ich für die Übernahme des Mitberichts.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. D.Sc. János Major für die Betreuung, sein stetiges Interesse und die unzähligen lehrreichen und anregenden Diskussionen. Des weiteren danke ich ihm für die Einführung in die zur Durchführung der Experimente notwendige Meß- und Regeltechnik.

Ein ganz besonderer Dank geht ebenfalls an Herrn Dr. Lothar Schimmele für seine ständige Diskussionsbereitschaft, die zahlreichen Ideen, und für die Durchsicht sämtlicher Veröffentlichungen sowie dieser Arbeit.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Dr. Jürgen Schmidl für die ausführliche und geduldige Beantwortung meiner zahlreichen Fragen zur  $\mu$ SR.

Den Herren Dr. Dierk Herlach, Dr. Ivan Reid und Dr. Ulrich Zimmermann danke ich für die Unterstützung während der Strahlzeiten am PSI. Des weiteren danke ich den Servicegruppen des PSI. Insbesondere möchte ich hierbei Herrn B. Zimmermann für die Anfertigung des Zusatzdetektors sowie Frau M. Pulvermüller für die Unterstützung in allen organisatorischen Belangen danken.

Im Zusammenhang mit der Elektronenbestrahlung der Proben war mir Herr Privatdozent Dr. R. Würschum bei der Vorbereitung sowie Durchführung der Bestrahlung eine große Hilfe. Außerdem möchte ich mich bei der Mannschaft des Dynamitrons des Instituts für Strahlenphysik der Universität Stuttgart, insbesondere Herrn L. Raschke vom Max-Planck-Institut für Metallforschung, für die Bestrahlung der Proben bedanken.

Herrn Dr. W. Zulehner von der Firma Wacker Siltronic AG, Burghausen, danke ich für die freundliche Überlassung der zahlreichen Siliziumproben.

Ich danke den Herren P. Keppler und R. Henes für die Unterstützung bei der Orientierung der Proben, der Abteilung Kristallpräparation des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung für die Probenpräparation und Herrn Prof. J. Weber für die Photolumineszenzuntersuchungen der Siliziumproben.

Den Werkstätten des Max-Planck-Instituts für Metallforschung und des Instituts für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart danke ich für deren Unterstützung. Den Herren G. Wiederoder und M. Schäfer gilt mein Dank für die Anfertigung des Kupferprobenhalters.

Die Sekretariate des Max-Planck-Instituts für Metallforschung und des Instituts für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart haben mich unermüdlich in allen formalen Dingen unterstützt. Auch ihnen gilt mein besonderer Dank.

Dem Bundesministerium für Bildung und Forschung danke ich für die finanzielle Unterstützung.

Für die jederzeit freundliche Unterstützung und das angenehme Arbeitsklima danke ich der gesamten  $\mu$ SR-Arbeitsgruppe. Insbesondere erwähnen möchte ich die Herren Dr. Alexander Röck und Dr. Robert Scheuermann, welche jederzeit ein offenes Ohr für meine Fragen hatten. Meinen Zimmerkollegen Frau Dipl.-Phys. Susanne Kohlhammer und Herrn Dr. Riccardo Hertel danke ich für das angenehme Arbeitsklima. Für den UNIX-Support danke ich den Herren Dr. Stephan Buck und Dipl.-Phys. Michael Bachmann.

Ein herzlicher Dank gilt Herrn Joachim Grossmann für sein Verständnis für meine Sorgen und Nöte, insbesondere während der Anfertigung dieser Arbeit.

# Lebenslauf

Name: Monika Schefzik

Geburtstag und -ort: 07. September 1968 in Sindelfingen

Anschrift: Rathausplatz 5  
71063 Sindelfingen

08/1975-05/1979 Grundschohle in Sindelfingen

08/1979-05/1988 Gymnasium in Sindelfingen  
Abschluß: Abitur

10/1988-09/1995 Studium in Tübingen  
Fachrichtung: Physik-Diplom

10/1992-06/1993 Auslandsstudium  
in Cork / Irland  
Fachrichtung: Physik und Mathematik

10/1995-11/1996 Diplomarbeit in Physik  
Institut für Theoretische Physik  
an der Universität Tübingen  
bei Prof. Dr. H. Reinhardt:  
„Restauration der chiralen Symmetrie  
bei endlichen Dichten“  
Abschluß: Diplom-Physikerin

seit 01/1997 Promotion am Max-Planck-Institut  
für Metallforschung, Stuttgart  
und Institut für Theoretische  
und Angewandte Physik  
an der Universität Stuttgart  
bei Prof. Dr. A. Seeger:  
„Zwei neue paramagnetische Myonspezies  
in kristallinem Silizium“

seit 09/1999 Beschäftigung bei Robert Bosch GmbH,  
Geschäftsbereich K1, Schwieberdingen







