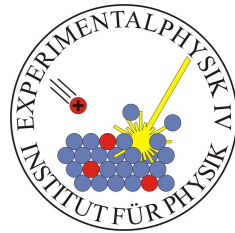
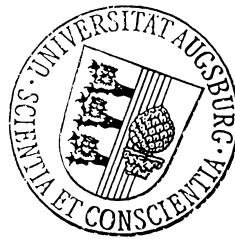


# Monte-Carlo-Simulation von selbstorganisierten nanometrischen $SiC_x$ -Ausscheidungen in $C^+$ -implantierten Silizium

Diplomarbeit  
von  
Frank Zirkelbach



Lehrstuhl für Experimentalphysik IV  
Prof. Dr. Bernd Stritzker  
Institut für Physik  
Universität Augsburg

Oktober 2005

Erstkorrektor: Prof. Dr. Bernd Stritzker  
Zweitkorrektor: Priv.-Doz. Dr. habil. Volker Eyert

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>i</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>vi</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Monte-Carlo-Simulation . . . . .	3
2.1.1 Erzeugung gleichverteilter Pseudozufallszahlen . . . . .	3
2.1.2 Transformation auf spezielle Zufallsverteilungen . . . . .	4
2.2 Ion-Festkörper-Wechselwirkung . . . . .	6
2.2.1 Abbremsung von Ionen . . . . .	6
2.2.2 Implantationsprofil . . . . .	11
2.2.3 Die Monte-Carlo-Simulation <i>TRIM</i> . . . . .	11
2.2.4 Strahlenschäden und Amorphisierung . . . . .	12
<b>3 Experimentelle Befunde</b>	<b>15</b>
3.1 Lage und Ausdehnung amorpher Phasen . . . . .	15
3.2 Temperaturabhängigkeit . . . . .	16
3.3 Kohlenstoffsegregation . . . . .	17
<b>4 Modell</b>	<b>20</b>
<b>5 Simulation</b>	<b>23</b>
5.1 Annahmen der Simulation . . . . .	23
5.1.1 Unterteilung des Targets . . . . .	23
5.1.2 Amorphisierung und Rekristallisation . . . . .	24
5.1.3 Diffusion . . . . .	25
5.1.4 Sputtern . . . . .	26
5.2 Statistik von Stoßprozessen . . . . .	26
5.2.1 Implantationsprofil und nukleare Bremskraft . . . . .	26
5.2.2 Durchschnittliche Anzahl der Stöße der Ionen und Energieabgabe . . . . .	28
5.3 Simulationsalgorithmus . . . . .	29
5.3.1 Amorphisierung und Rekristallisation . . . . .	30
5.3.2 Einbau des implantierten Kohlenstoffs ins Target . . . . .	31

5.3.3	Diffusion und Sputtern . . . . .	32
5.4	Simulierte Tiefenbereiche . . . . .	33
5.5	Test der Zufallszahlen . . . . .	34
<b>6</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>36</b>
6.1	Simulation bis 300 nm Tiefe . . . . .	36
6.1.1	Erste Simulationsdurchläufe . . . . .	36
6.1.2	Vergleich von Simulationsergebnis und experimentell beobachteter Struktur . . . . .	38
6.1.3	Notwendigkeit der Diffusion . . . . .	40
6.1.4	Einfluss der Druckspannungen . . . . .	44
6.1.5	Verteilung des Kohlenstoffs im Target . . . . .	46
6.1.6	Zusammenfassung . . . . .	49
6.2	Simulation über den gesamten Implantationsbereich . . . . .	50
6.2.1	Dosisabhängigkeit der Bildung amorpher Bereiche . . . . .	50
6.2.2	Kohlenstoffverteilung . . . . .	54
6.2.3	Position und Ausdehnung der amorphen Phase . . . . .	57
6.2.4	Variation der Simulationsparameter . . . . .	59
6.2.5	Zusammenfassung . . . . .	61
6.3	Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen durch Mehrfachimplantation . . . . .	62
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>70</b>
<b>A</b>	<b>Funktionen der Programme</b>	<b>73</b>
A.1	Server . . . . .	73
A.2	Client . . . . .	73
A.3	Benutzeroberfläche . . . . .	74
A.4	Standalone Version . . . . .	74
A.5	APIs . . . . .	74
A.6	Andere Hilfsmittel . . . . .	75
<b>B</b>	<b>Publikationsliste</b>	<b>76</b>
B.1	Eigene Publikationen . . . . .	76
B.2	Konferenzbeiträge . . . . .	76
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>77</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>80</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x)$ im Intervall $[a, b]$ mit Maximum $p_m$ .	5
2.2	Elastischer Stoß zweier Körper im Laborsystem. . . . .	7
2.3	Elastischer Stoß zweier Körper im Schwerpunktsystem. . . . .	8
2.4	Zusammenhang der Geschwindigkeit des Targetatoms nach dem Stoß im Schwerpunktsystem (blau) und im Laborsystem (rot). . . . .	9
3.1	Hellfeld-TEM-Abbildung einer bei $150^\circ\text{C}$ mit $180\text{ keV } C^+$ implantierten $Si$ -Probe mit einer Dosis von $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ . (L: amorphe Lamellen, S: sphärische amorphe Ausscheidungen) [10] . . . . .	16
3.2	Mittels TEM bestimmte Position und Ausdehnung amorpher Phasen in bei $150^\circ\text{C}$ implantierten Proben in Abhängigkeit von der implantierten Dosis. [10]	17
3.3	Hellfeld-TEM-Abbildung der Schichtstruktur der bei $150^\circ\text{C}$ implantierter Proben mit Dosen von: a) 1, 0, b) 2, 1, c) 3, 3 und d) $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ . [10] . . . . .	18
3.4	Schematischer Aufbau des implantierten Schichtsystems für $180\text{ keV } C^+$ -Implantationen in (100) $Si$ mit einer Dosis von $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ in Abhängigkeit von der Temperatur. [10] . . . . .	19
3.5	a) Hellfeld- und b) Elementverteilungsaufnahme der vorderen Grenzschicht einer mit $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ bei $200^\circ\text{C}$ implantierten Probe. Amorphe Bereiche in der Hellfeldaufnahme erscheinen hell, hohe Kohlenstoffkonzentrationen in der Elementverteilungsaufnahme sind gelb, niedrige blau. [10] . . . . .	19
4.1	Schematische Abbildung des Modells zur Erklärung der Selbstorganisation amorpher $SiC_x$ -Ausscheidungen und ihre Entwicklung zu geordneten Lamellen aufgrund vorhandener Druckspannungen mit zunehmender Dosis in $C^+$ -implantierten Silizium. Schwarze Pfeile entsprechen den Druckspannungen, weisse Pfeile deuten Kohlenstoffdiffusion an. . . . .	20
5.1	Unterteilung des Targets in Würfel mit $3\text{ nm}$ Kantenlänge. Jedes Volumen ist entweder amorph (rot) oder kristallin (blau) und protokolliert die lokale Kohlenstoffkonzentration. . . . .	24
5.2	Von <i>TRIM 92</i> ermittelte Reichweitenverteilung und tiefenabhängige Bremskräfte für $180\text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ . . . . .	27
5.3	Durch <i>SRIM 2003.26</i> berechnetes Implantationsprofil für $180\text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ . . . . .	27
5.4	Auf das Maximum 1 skalierte tiefenabhängige Energieabgabe (blau) und Anzahl der Kollisionen (rot). . . . .	28
5.5	Durch <i>SRIM 2003.26</i> berechneter nuklearer Energieverlust für $180\text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ . . . . .	29
5.6	<i>NLSOP</i> Ablaufschema Teil 1: Amorphisierung und Rekristallisation. . . . .	30

5.7	<i>NLSOP</i> Ablaufschema Teil 2: Einbau des Kohlenstoffs. . . . .	31
5.8	<i>NLSOP</i> Ablaufschema Teil 2: Diffusion (gelb) und Sputtervorgang (rot). . . . .	32
5.9	Häufigkeit ganzzahliger Zufallszahlen unterschiedlicher Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Für jede Verteilung wurden 10 Millionen Zufallszahlen ausgewürfelt. . . . .	35
6.1	Cross-Section verschiedener Simulationsergebnisse. Simulationsparameter (wenn nicht anderst angegeben): $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,05$ , $p_s = 0,05$ , $r = 5$ , $d_v = 100$ , $d_r = 0,5$ , $s = 3 \times 10^5$ . Variierte Parameter: b) $r = 10$ , c) $p_b = 0,05$ , d) $p_s = 0,1$ . . . . .	37
6.2	Vergleich von a) Simulationsergebnis und b) experimentellen Ergebnis einer bei $150^\circ\text{C}$ mit $180\text{keV } C^+$ implantierten <i>Si</i> -Probe mit einer Dosis von $4,3 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$ . Simulationsparameter: $s = 3 \times 10^7$ , $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $p_s = 0,003$ , $d_v = 10$ , $d_r = 0,5$ . . . . .	38
6.3	Vergleich der Fouriertransformationen der Ortsverteilungen aus Abbildung 6.2. a) Simulation, b) Experiment. . . . .	39
6.4	Vergleich der Linescans der fouriertransformierten TEM-Aufnahme und der Cross-Section der Simulation aus Abbildung 6.3. . . . .	40
6.5	Vergleich von Simulationen mit unterschiedlicher Diffusionsrate $d_r$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $p_s = 0,004$ , $d_v = 10$ , $s = 20 \times 10^6$ . Variierte Diffusion: a) $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,2$ , b) $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,5$ , c) $d_r^z = 0$ , $d_r^{x,y} = 0,5$ . Die Abbildung zeigt die Querschnitte a) - c) und deren Fouriertransformierte d) - f). . . . .	41
6.6	Linescan über die Orstfrequenz $f_x = 0$ der Fouriertransformierten aus 6.5 mit a) $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,5$ , b) $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,2$ und c) $d_r^z = 0$ , $d_r^{x,y} = 0,5$ . . . . .	42
6.7	Simulationsergebnisse für a) $d_v = 10$ , b) $d_v = 100$ , c) $d_v = 1000$ , d) $d_v = 10000$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $p_s = 0,003$ , $d_r = 0,5$ , $s = 2 \times 10^7$ . . . . .	43
6.8	Linescan der fouriertransformierten Cross-Sections von Simulationen mit $d_v = 10$ und $d_v = 10000$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $p_s = 0,003$ , $d_r = 0,5$ , $s = 2 \times 10^7$ . . . . .	44
6.9	Simulationsergebnisse für verschiedene $p_s$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $d_r = 0,5$ , $d_v = 10$ , $s = 2 \times 10^7$ . Variierter Parameter: a) $p_s = 0,001$ , b) $p_s = 0,002$ , c) $p_s = 0,003$ , d) $p_s = 0,004$ . . . . .	45
6.10	Linescan der fouriertransformierten Cross-Sections aus Abbildung 6.9 von Simulationen mit a) $p_s = 0,002$ , b) $p_s = 0,003$ und c) $p_s = 0,004$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $d_r = 0,5$ , $d_v = 10$ , $s = 2 \times 10^7$ . . . . .	46
6.11	Amorph/Kristalline Struktur, Kohlenstoffverteilung und Druckspannungen in zwei aufeinander folgenden Ebenen $z = 97$ und $z = 98$ . Simulationsparameter: $p_b = 0$ , $p_c = 0,0001$ , $p_s = 0,004$ , $d_v = 10$ , $d_r = 0,5$ , $s = 2 \times 10^7$ . . . . .	47
6.12	Querschnittsansicht und Tiefenprofil des Kohlenstoffs in einem Target mit lamellaren Strukturen. Abgebildet ist der Kohlenstoff in amorphen und kristallinen Gebieten (schwarz), in kristallinen Gebieten (rot) und in amorphen Gebieten (grün). Desweiteren ist die skalierte Anzahl der amorphen Gebiete (blau) abgebildet. Simulationsparameter wie in 6.2. . . . .	48
6.13	Vergleich der experimentellen und simulierten Dosisentwicklung bei a) $1,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$ bzw. $s = 40 \times 10^6$ und b) $2,1 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$ bzw. $s = 80 \times 10^6$ . Simulationsparameter: $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,001$ , $p_s = 0,0001$ , $d_r = 0,05$ , $d_v = 1 \times 10^6$ . . . . .	51

6.14	Vergleich der experimentellen und simulierten Dosisentwicklung bei a) $3,3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ bzw. $s = 120 \times 10^6$ und b) $4,3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ bzw. $s \approx 158 \times 10^6$ . Simulationsparameter: $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,001$ , $p_s = 0,0001$ , $d_r = 0,05$ , $d_v = 1 \times 10^6$ . . . . .	52
6.15	Kohlenstofftiefenprofile der Simulation für $40 \times 10^6$ , $80 \times 10^6$ , $120 \times 10^6$ und $158 \times 10^6$ Durchläufen mit $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,001$ , $p_s = 0,0001$ , $d_v = 1 \times 10^6$ , $d_r = 0,05$ . . . . .	54
6.16	a) Querschnittsaufnahme und b) Tiefenprofil des Kohlenstoffs der Simulation aus Abschnitt 6.2.1. In a) sind helle Gebiete amorph, dunkle Gebiete kristallin. In b) ist der Kohlenstoff in kristallinen Gebieten grün, in amorphen Gebieten rot und der gesamte Kohlenstoff schwarz dargestellt. . . . .	55
6.17	Amorph/Kristalline Struktur in zwei aufeinander folgenden $x - y$ -Schnitten in der Ebene $z = 127$ und $z = 128$ im Tiefenbereich der lamellaren Strukturen der Simulation mit $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,001$ , $p_s = 0,0001$ , $d_r = 0,5$ , $d_v = 10^6$ und $s = 158 \times 10^6$ (Abbildung 6.19 b)). . . . .	57
6.18	Position und Ausdehnung amorpher Phasen (graue Flächen) und Kohlenstoffkonzentrationsmaximum (rot) in Abhängigkeit der Dosis in der Simulation aus Abbildung 6.13/6.14. . . . .	58
6.19	Variation der Simulationsparameter. Ausgangssituation in a): $p_b = 0,01$ , $p_c = 0,001$ , $p_s = 0,0001$ , $d_r = 0,05$ , $d_v = 1 \times 10^6$ , $s \approx 159 \times 10^6$ . Variation des Parameters b) $d_r$ , c) $p_b$ , d) $p_c$ und e) $p_s$ . . . . .	59
6.20	Durch <i>SRIM 2003.26</i> ermittelte nukleare Bremskraft von $2 \text{ MeV } C^+$ in Silizium. 62	
6.21	Durch <i>SRIM 2003.26</i> ermitteltes Implantationsprofil von $2 \text{ MeV } C^+$ in Silizium. 63	
6.22	Entwicklung der Verteilung amorpher Gebiete mit zunehmender Dosis im zweiten Implantationsschritt mit $2 \text{ MeV } C^+$ -Ionen in $180 \text{ keV } C^+$ implantiertes Silizium mit der Dosis $4,3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	64
6.23	Entwicklung amorpher Ausscheidungen mit steigender Dosis des zweiten Implantationsschritt mit $2 \text{ MeV } C^+$ -Ionen in $180 \text{ keV } C^+$ implantiertes Silizium mit der Dosis $1,1 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ . Die maximale Anzahl der Durchläufe von $300 \times 10^6$ entspricht einer implantierten Dosis von $8,13 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	65
6.24	Ideale plateauförmige Kohlenstoffverteilung mit Abfall entsprechend des $180 \text{ keV } C^+$ -Implantationsprofils ab einer Tiefe von $500 \text{ nm}$ , erzeugt durch das Programm <i>nlsop_create_cbox</i> und experimentell realisiert durch mehrfaches Implantieren mit Ionenenergien von 10 bis $180 \text{ keV}$ . . . . .	66
6.25	Entwicklung amorpher Ausscheidungen über den weiten Bereich des Kohlenstoffplateaus aus Abbildung 6.24 mit zunehmender Dosis des $\text{MeV}$ -Implantationsschritt. Die maximale Anzahl der Durchläufe in f) von $300 \times 10^6$ entspricht einer implantierten Dosis von $8,13 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	67
6.26	Linescans der fouriertransformierten $64 \times 64$ Pixel großen Ausschnitte der Querschnittsaufnahmen aus Abbildung 6.25 a), b) und f). . . . .	68

# Tabellenverzeichnis

6.1	Experimentell bestimmte Kohlenstoffkonzentration an den Grenzflächen der amorphen Schicht in Abhängigkeit der Dosis aus [10]. . . . .	57
6.2	Durch die Simulation ermittelte Kohlenstoffkonzentration an den Grenzflächen der amorphen Schicht in Abhängigkeit der Anzahl der Durchläufe. . . . .	57

# Kapitel 1

## Einleitung

Bei der Ionenimplantation werden Atome oder Moleküle ionisiert, in einem elektrischen Feld beschleunigt und in einen Festkörper geschossen. Dabei sind beliebige Ion-Target-Kombinationen möglich. Die Beschleunigungsenergie kann zwischen einigen hundert Elektronenvolt und einigen Gigaelektronenvolt liegen. Neben der Energie bestimmt die Masse der Ionen und die Masse der Atome des Festkörpers die Eindringtiefe der Ionen.

Die Ionenimplantation ermöglicht so die Modifikation oberflächennaher Schichten des Festkörpers. In der Halbleiterindustrie ist sie schon lange ein bewährtes Mittel zur Dotierung von Halbleiterkristallen. Die Ionenimplantation ist prinzipiell unabhängig von chemischen Löslichkeitsgrenzen und kann bei frei wählbarer Implantationstemperatur ausgeführt werden. Zu ihren wichtigsten Vorzügen zählen die exakte Kontrollierbarkeit der implantierten Menge durch einfache Stromintegration, Reproduzierbarkeit, Homogenität und Schnelligkeit.

Die Bestrahlung von Materialien mit energetischen Teilchen hat eine sehr hohe Energie-dissipation im Material zur Folge, welche die zu Grunde liegende kristalline Struktur eines Festkörpers weit aus dem Gleichgewichtszustand bringen kann. Entlang der Teilchenbahn können Defekte oder sogar amorphe Gebiete entstehen. Da sehr viele solcher Teilchen in den Festkörper geschossen werden, erwartet man eine statistische Verteilung solcher Defekte. Ebenso sind Ausscheidungen, die sich in Folge der Implantation bilden, in der Regel statistisch angeordnet und besitzen eine breit gestreute Größenverteilung. Eine eher unerwartete Antwort des Systems auf die äußere Stimulation ist die Selbstorganisation der Struktur der bestrahlten Oberfläche beziehungsweise des bestrahlten Oberflächenvolumens. Erstaunlicherweise wurden schon eine ganze Reihe solcher Selbstorganisationsphänomene beobachtet. Ein Beispiel für solch einen Selbstorganisationsvorgang ist die Entstehung von Riffeln auf der Oberfläche des Targets, die sich abhängig vom Einfallswinkel der Ionen, senkrecht beziehungsweise parallel zur Projektion des Ionenstrahls auf die Oberfläche, orientieren. Diese Beobachtung kann durch die Bradley-Harper-Theorie beschrieben werden [1]. Desweiteren können Selbstorganisationsphänomene bei der Bestrahlung von binären Legierungen beobachtet werden. Die thermisch aktivierte, kurzreichweitige Diffusion und der durch die Bestrahlung aktivierte Austausch von Atomen führt ab einem bestimmten Wert für die Austauschreichweite zur Bildung separierter stabiler Phasen [2, 3]. Ein weiteres aktuell untersuchtes Beispiel ist die periodische Rissbildung senkrecht zur projizierten Einfallsrichtung des Ionenstrahls bei der Bestrahlung dünner *NiO*-Schichten mit schnellen und schweren Ionen [4]. Bei fortgeführter Implantation bilden sich  $100\text{ nm}$  dicke und  $1\ \mu\text{m}$  hohe *NiO*-Lamellen aus, die einen Abstand von  $1 - 3\ \mu\text{m}$  und die selbe Orientierung wie die Risse besitzen. Dieser Effekt wird auf das kurzzeitige



Schmelzen des Materials in der Umgebung der Teilchenbahn des Ions zurückgeführt.

In der vorliegenden Arbeit soll ein anderer, kürzlich beobachteter Selbstorganisationsvorgang erstmals mittels Computersimulation untersucht werden. Bei Untersuchungen [5] von Hochdosis-Kohlenstoff-Ionenimplantationen in Silizium als Methode zur Herstellung vergrabener epitaktischer *SiC*-Schichten [6] fand man bei Temperaturen kleiner  $400\text{ }^\circ\text{C}$  die Ausbildung einer amorphen Schicht, begleitet von lamellaren beziehungsweise sphärischen amorphen Einschlüssen an der vorderen Grenzfläche. Diese wenige *nm* großen Einschlüsse sind regelmäßig angeordnet. Die Annahme, dass es sich bei diesen amorphen Einschlüssen um eine kohlenstoffreiche Phase handelt, wird durch analytische Transmissionselektronenmikroskopie gestützt [7, 8]. Die Einschlüsse werden daher als amorphe *SiC<sub>x</sub>*-Ausscheidungen bezeichnet. Mit zunehmender Dosis wird die Anordnung der Ausscheidungen schärfer. Es handelt sich folglich um einen Selbstorganisationsprozess. Ein Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges ist in [8, 9] vorgestellt. In [7, 10] wurden erstmals ausführliche experimentelle Untersuchungen zum Bildungs- und Ausheilverhalten dieser nanometrischen amorphen Einschlüsse durchgeführt.

Außer bei der Kohlenstoffimplantation in Silizium findet man ähnliche Selbstorganisationsvorgänge auch in anderen Materialsystemen, wie zum Beispiel bei Hochdosis-Sauerstoffimplantationen in Silizium [11] und der Bestrahlung von Saphir mit  $\text{Ar}^+$ -Ionen [12] sowie von *SiC* mit  $\text{Si}^+$ -Ionen [13]. Allen Systemen gemeinsam ist eine drastische Dichtereduktion des Substratmaterials bei der Amorphisierung, was im Rahmen der vorliegenden Modellvorstellung auch wesentlich zur Selbstorganisation beiträgt. Ist dies der Fall, so ist die Selbstorganisation ein Phänomen, das für eine Vielzahl von Substratmaterialien zu erwarten wäre.

Die folgende Arbeit beschreibt die Umsetzung des Modells aus [8, 9] in einen Monte-Carlo-Simulationscode, mit dessen Hilfe der Selbstorganisationsvorgang genauer untersucht und verstanden werden soll. Die Simulation bietet hierbei entscheidende Vorteile. Mittels eines Computerexperimentes können aus dem Modell resultierende Vorhersagen konkret berechnet und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen werden. Durch Variation von Modellparametern können die Einflüsse der zur Amorphisierung beitragenden Mechanismen in ihrer Stärke verändert und deren Auswirkung auf die sich einstellende Ordnung beobachtet werden. Desweiteren ist es sehr einfach möglich, an präzise Informationen über die Struktur und Zusammensetzung des Targets während der Implantation zu gelangen, was durch experimentelle Messungen nur unter großem Aufwand oder überhaupt nicht möglich ist. Monte-Carlo-Rechnungen bieten gegenüber molekulardynamischen Berechnungen den Vorteil, dass sie weniger rechenzeitintensiv sind. Weiterhin bieten sie den Vorteil, dass die physikalischen Vorgänge, im Sinne eines Gedankenexperimentes, weitgehend ohne einschränkende Annahmen behandelt werden können.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut. In Kapitel 2 werden die nötigen Grundlagen der Ion-Festkörper-Wechselwirkung zusammengefasst und eine kurze Einführung in das Konzept der Monte-Carlo-Simulation gegeben. In Kapitel 3 werden einige der experimentellen Befunde aus [10] zur Bildung amorpher Ausscheidungen zusammengefasst. Danach wird in Kapitel 4 das Modell konkret formuliert. In Kapitel 5 wird die Implementierung des vorgestellten Modells behandelt. Im zentralen Kapitel 6 werden die Ergebnisse der Simulation vorgestellt und diskutiert. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick in Kapitel 7.

# Kapitel 2

## Grundlagen

### 2.1 Monte-Carlo-Simulation

Monte-Carlo-Simulationen sind numerische Computerexperimente zur Untersuchung von interessierenden Sachverhalten. Gegenüber anderen Rechenmethoden basieren diese Computerexperimente auf stochastischen Modellen. Dabei werden vom Computer generierte Zufallszahlen auf physikalische Größen abgebildet. Die Zufälligkeit mikroskopischer Ereignisse spielt, wie im realen System des Experimentes, die wesentliche Rolle. Der Rechner wird zum virtuellen Labor, in dem ein bestimmtes System untersucht wird. Eine solche Computersimulation kann als numerisches Experiment betrachtet werden. Makroskopische observable Größen sind, ebenso wie im Experiment, von statistischen Fluktuationen beeinflusst. Die Reproduzierbarkeit von Ergebnissen hat demnach statistischen Charakter.

Der Vorteil der Monte-Carlo-Methode ist das relativ einfache Erzielen von Ergebnissen für Problemstellungen, die ohne Näherungen analytisch nicht lösbar oder sehr aufwändig sind. Ein Beispiel hierfür ist das Ising-Modell in drei Dimensionen, für das bis jetzt keine analytische Lösung gefunden wurde. Die Idee besteht darin, für die Berechnung der Zustandssumme nicht den gesamten Raum der Konfigurationen, sondern nur statistisch ausgewählte Punkte zu berücksichtigen. Um die Genauigkeit der simulierten Eigenschaften des Systems in einer bestimmten Sollzeit zu verbessern, ist es nötig, die Zustände mit der Wahrscheinlichkeit entsprechend ihres Beitrages zur Zustandssumme auszusuchen. Dieser Ansatz wird als "importance sampling" bezeichnet. Für das Ising-Modell wird der Metropolis-Algorithmus verwendet, der die Dynamik des Systems in Form eines "update algorithm" für die Mikrozustände vorschreibt.

Die Monte-Carlo-Simulation benötigt Zufallszahlen, welche auf physikalische Größen abgebildet werden. Erstaunlicherweise funktioniert diese Art der Simulation auch mit, vom Computer erzeugten, deterministischen Pseudozufallszahlen. Den Ausgangspunkt bilden dabei sogenannte Standard-Pseudozufallszahlen, die auf einem vorgegebenen Intervall gleichverteilt sind. Hiervon ausgehend können beliebige Verteilungen durch Transformationen und Verwerfungsmethoden erzeugt werden.

#### 2.1.1 Erzeugung gleichverteilter Pseudozufallszahlen

Die häufigste Methode zur Erzeugung von Zufallszahlen ist die lineare Kongruenzmethode [14, 15], welche eine Sequenz von ganzen Zahlen  $I_j$  aus dem Intervall  $I = [0, m - 1]$  generiert.

Dabei gilt folgende Vorschrift:

$$I_{j+1} = (aI_j + c) \bmod m \quad (2.1)$$

$m$  : Modulus,  $a$  : Multiplikator,  $c$  : Inkrement,  $I_0$  : Startwert

Die Zufallszahlen können sich mit einer Periode, die offensichtlich nicht größer als  $m$  ist, wiederholen. Die Qualität der Zufallszahlen hängt dabei sehr stark von der Wahl der Konstanten  $a, c, m$  und  $I_0$  ab. Leider gibt es keine einfache mathematische Methode zur Ermittlung optimaler Konstanten. Nach Park und Miller [16] erfüllt man mit

$$a = 7^5 = 16807, \quad m = 2^{31} - 1 = 2147483647, \quad c = 0 \quad (2.2)$$

einen minimalen Standard, was die Qualität der Zufallszahlen angeht. Diese Wahl der Konstanten wird in allen gängigen Zufallszahlengeneratoren der Standardbibliotheken verwendet.

### 2.1.2 Transformation auf spezielle Zufallsverteilungen

Die mit (2.1) und (2.2) erzeugten Pseudozufallszahlen  $I_j$  sind gleichverteilt im Intervall  $[0, m - 1]$ . Durch Division der Zufallszahlen mit dem Modulus  $m$  erhält man gleichverteilte Zufallszahlen  $x_j$  im Intervall  $[0, 1[$ , so dass die Wahrscheinlichkeit eine Zahl zwischen  $x$  und  $x + dx$  zu erhalten durch

$$p(x)dx = \begin{cases} dx & 0 \leq x < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3)$$

gegeben ist. Außerdem ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung normiert.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = \int_0^1 p(x)dx = 1 \quad (2.4)$$

Diese dienen als Basis für beliebige Verteilungen. Die in dieser Arbeit benötigten Transformationen sollen im Folgenden diskutiert werden.

#### Zufallszahlen mit gleichverteilter Wahrscheinlichkeit

Gleichverteilte Zufallszahlen  $z_j$  in einem Intervall  $[0, M[$  erhält man denkbar einfach durch skalieren der  $x_j$  mit  $M$ .

$$z_j = Mx_j = M \frac{I_j}{m} \quad (2.5)$$

#### Zufallszahlen mit linear steigender Wahrscheinlichkeit

Zufallszahlen deren Wahrscheinlichkeit mit ihrem Wert im Intervall  $[0, Z[$  linear ansteigen

$$\rho(z)dz = \begin{cases} (az + b)dz & 0 \leq z < Z \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.6)$$

realisiert man durch folgende Transformation:

$$\begin{aligned} \rho(z)dz &= p(x)dx \\ \frac{dx}{dz} &= \rho(z) \\ x &= \int_{-\infty}^z \rho(z')dz' = \int_0^z (az' + b)dz' = \frac{1}{2}az^2 + bz \end{aligned} \quad (2.7)$$

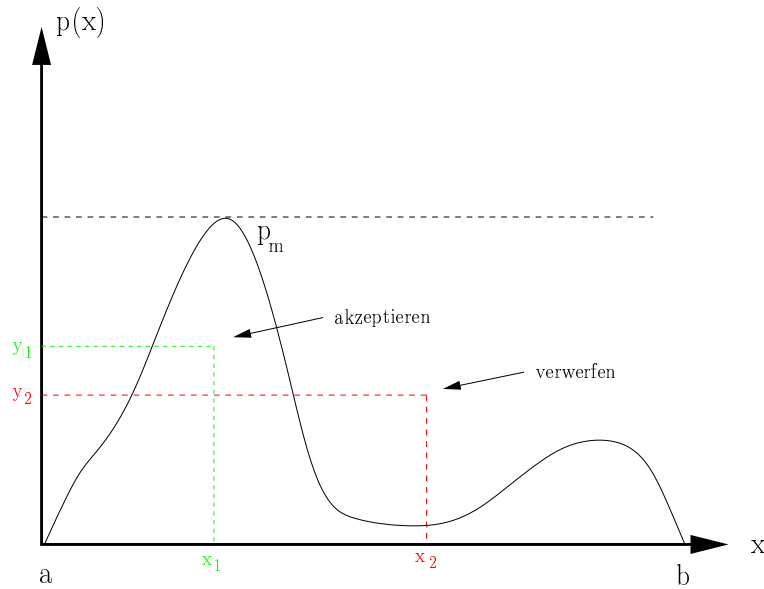


Abbildung 2.1: Beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(x)$  im Intervall  $[a, b]$  mit Maximum  $p_m$ .

Durch Auflösen von (2.7) nach  $z$  und Ausschluss der negativen Lösung erhält man:

$$z = \frac{-b + \sqrt{b^2 + 2ax}}{a} \quad (2.8)$$

So erhält man Zufallszahlen  $z_j$  im Intervall  $[0, 1[$  durch  $x_j \in [0, b + \frac{a}{2}[$ . Sollen die Zufallszahlen im Intervall  $[0, Z[$  liegen, müssen sie durch

$$z_j = Z \frac{-b + \sqrt{b^2 + 2a(b + \frac{a}{2})\frac{I_j}{m}}}{a} \quad (2.9)$$

berechnet werden.

### Verwerfungsmethode zur Erzeugung beliebiger Verteilungen

Mit Hilfe der Verwerfungsmethode können Zufallszahlen mit beliebiger Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(x)$  generiert werden. Sie basiert auf einer einfachen geometrischen Überlegung (Abbildung 2.1). Die Verteilung  $p(x)$  sei im Intervall  $[a, b]$  mit  $p(x) \geq 0 \forall x \in [a, b]$  gegeben. Das Maximum von  $p(x)$  sei  $p_m$ . Die Erzeugung der Zufallszahlen funktioniert nun wie folgt:

1. Auswürfeln zweier gleichverteilter Zufallszahlen  $x \in [a, b]$  und  $y \in [0, p_m]$ .
2. Ist  $y \leq p(x)$ , so ist  $x$  die nächste Zufallszahl, ansonsten zurück zu 1.

Diese Methode ist zwar sehr einfach, jedoch wird sie um so ineffizienter, je größer die Fläche der Vergleichsfunktion (hier:  $f(x) = p_m$ ) im Vergleich zu  $p(x)$  zwischen  $a$  und  $b$  wird. Deshalb macht es Sinn, die Funktion  $f(x)$  ähnlich der Funktion  $p(x)$  mit  $f(x) \geq p(x); x \in [a, b]$  zu wählen. Das unbestimmte Integral  $F(x) = \int f(x)dx$  muss dabei bekannt und invertierbar sein.

Dann kann wie in (2.7) die Transformation durchgeführt werden. Die Werte für  $x$  werden nun nach der Transformationsmethode im Intervall  $[a, b]$  gewählt, die Werte für  $y$  müssen gleichverteilt im Intervall  $[0, f(x)]$  sein.

## 2.2 Ion-Festkörper-Wechselwirkung

Zur theoretischen Beschreibung der Ionenimplantation muss die Wechselwirkung der Ionen mit dem Target betrachtet werden. Durch Stöße mit den Kernen und Elektronen des Targets werden die Ionen im Festkörper abgelenkt und abgebremst. Es stellt sich ein entsprechendes Implantationsprofil ein. Weitere Folgen sind die durch Bestrahlung im Kristallgitter entstehenden Schäden. Im Folgenden wird darauf genauer eingegangen.

### 2.2.1 Abbremsung von Ionen

Die in den Festkörper implantierten Ionen stoßen mit den Atomkernen und Elektronen des Targets. Dieser Streuprozess ist mit einem Energieverlust und einer Richtungsänderung des Ions verbunden. Das Ion führt weitere Stöße aus bis dessen Energie zu klein für weitere Stoßprozesse ist.

#### Bremsquerschnitt

Um die Abbremsung der Ionen durch elektronische und nukleare Streuung zu beschreiben, definiert man den sogenannten Bremsquerschnitt:

$$S_{e,n} = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial E}{\partial x} \right)_{e,n} . \quad (2.10)$$

Dieser ist proportional zur Bremskraft  $\frac{\partial E}{\partial x}$ , welche angibt wieviel Energie  $E$  des Ions pro zurückgelegter Weglänge  $x$  abgegeben wird.  $N$  ist die atomare Dichte des Festkörpers. Zerlegt man nun die Energieverlustrate in einen nuklearen und einen elektronischen Anteil so erhält man für den Energieverlust pro Weglänge:

$$-\frac{\partial E}{\partial x} = N \left( S_e(E) + S_n(E) \right) . \quad (2.11)$$

Durch Kehrwertbildung und Integration über die Energie erhält man die mittlere Reichweite  $R$  des Ions. Ist dessen Anfangsenergie  $E_0$ , so gilt:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_e(E) + S_n(E)} . \quad (2.12)$$

Um die Reichweite des Ions berechnen zu können, müssen noch der nukleare ( $S_n$ ) und elektronische ( $S_e$ ) Bremsquerschnitt bestimmt werden.

#### Nukleare Bremskraft

Zur Beschreibung der nuklearen Bremskraft muss der Energieübertrag zwischen einem bewegten und einem stationären geladenen Teilchen betrachtet werden. Dieser hängt ab von Geschwindigkeit und Richtung des bewegten Teilchens sowie von Masse und Ladung beider Teilchen und damit einem interatomaren Potential. Die letztendlichen Geschwindigkeiten und

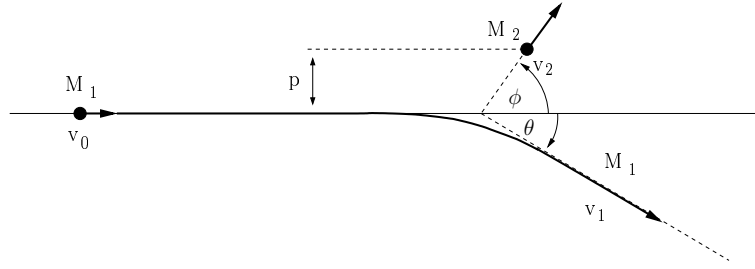


Abbildung 2.2: Elastischer Stoß zweier Körper im Laborsystem.

Trajektorien können mit Hilfe der Energie- und Impulserhaltung für einfache Potentiale analytisch gelöst werden. Es werden nur elastische Stöße betrachtet, inelastische Stöße mit den Atomkernen können vernachlässigt werden. Da die nukleare Bremskraft sehr wichtig für die weitere Arbeit ist, wird auf ihre Herleitung etwas genauer eingegangen.

Zunächst soll die klassische elastische Streuung zweier Körper behandelt werden. Dabei ist das ruhende Teilchen der Atomkern, das einfallende Teilchen das implantierte Ion (Abbildung 2.2). Aus der Energieerhaltung folgt:

$$\frac{1}{2}M_1v_0^2 = \frac{1}{2}M_1v_1^2 + \frac{1}{2}M_2v_2^2 \quad (2.13)$$

Dabei ist  $v_0$  die anfängliche Geschwindigkeit des Ions der Masse  $M_1$ ,  $v_1$  die Geschwindigkeit des Ions nach dem Stoß und  $v_2$  die Geschwindigkeit des gestoßenen Atomkerns mit Masse  $M_2$ . Aus der Impulserhaltung folgt,

$$\text{Longitudinal: } M_1v_0 = M_1v_1\cos(\theta) + M_2v_2\cos(\phi) \quad (2.14)$$

$$\text{Lateral: } 0 = M_1v_1\sin(\theta) + M_2v_2\sin(\phi) \quad (2.15)$$

wobei  $\theta$  der Winkel der Ablenkung des Ions und  $\phi$  der Winkel der Ablenkung des Atomkerns ist.

Durch Transformation ins Schwerpunktsystem kann die Relativbewegung des Ions und des Atomkerns auf ein Einzelnes im Zentralfeld bewegtes Teilchen reduziert werden. Im Schwerpunktsystem gilt (Abbildung 2.3):

$$\vec{v}_c = \frac{M_1}{M_1 + M_2}\vec{v}_0 \quad , \quad (2.16)$$

wobei  $\vec{v}_c$  die Schwerpunktgeschwindigkeit ist. Mit der Definition der reduzierten Masse  $M_c$

$$\frac{1}{M_c} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad , \quad (2.17)$$

also

$$M_c = \frac{M_1M_2}{M_1 + M_2} \quad , \quad (2.18)$$

erhält man für die Schwerpunktbewegung aus (2.16) den Ausdruck

$$\vec{v}_c = \frac{M_c}{M_2}\vec{v}_0 \quad . \quad (2.19)$$

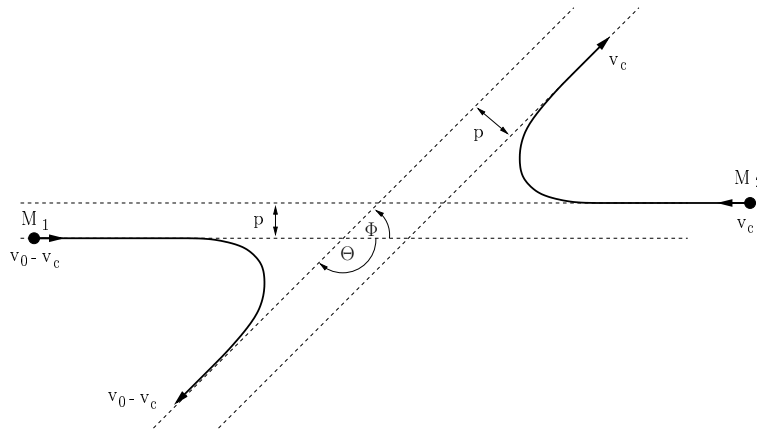


Abbildung 2.3: Elastischer Stoß zweier Körper im Schwerpunktsystem.

Daraus lässt sich ableiten, dass die Teilchengeschwindigkeiten umgekehrt proportional zu ihren Massen sind.

$$\frac{v_0 - v_c}{v_c} = \frac{M_2}{M_1} \quad (2.20)$$

Für die Geschwindigkeiten des Ions und des Atomkerns im Schwerpunktsystem vor dem Stoß gilt weiterhin:

$$\vec{v}_{Ion} = \vec{v}_0 - \vec{v}_c = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \vec{v}_0 \quad , \quad (2.21)$$

$$\vec{v}_{Atom} = 0 - \vec{v}_c = -\frac{M_1}{M_1 + M_2} \vec{v}_0 \quad . \quad (2.22)$$

Der Gesamtimpuls  $M_1 \vec{v}_{Ion} + M_2 \vec{v}_{Atom}$  verschwindet. Die Impulse der Teilchen sind vor und nach dem Stoß entgegengesetzt gleich groß. Zusammen mit der Energieerhaltung folgt daraus, dass die Beträge der Geschwindigkeiten durch den Stoß nicht verändert werden. Die kinetische Energie beider Teilchen bleibt im Schwerpunktsystem einzeln erhalten.

Abbildung 2.4 zeigt die daraus abgeleitete Beziehung zwischen der Geschwindigkeit des Atoms nach dem Stoß im Labor- und im Schwerpunktsystem. Die Transformation ist durch

$$\vec{v}_2 = \vec{v}_{Atom} + \vec{v}_c \quad (2.23)$$

gegeben. Der Zusammenhang zwischen Ablenkwinkel im Labor- und Schwerpunktsystem sowie der Ausdruck für  $v_2$ , sind leicht zu erkennen.

$$\Phi = 2\phi \quad (2.24)$$

$$v_2 = 2v_c \cos(\phi) \quad (2.25)$$

Für die auf das Targetatom übertragene Energie gilt:

$$T = \frac{1}{2} M_2 v_2^2 \quad . \quad (2.26)$$

Aus (2.25) und (2.19) erhält man:

$$T = \frac{1}{2} M_2 \left( \frac{2v_0 M_c \cos(\phi)}{M_2} \right)^2 = \frac{2}{M_2} \left( v_0 M_c \cos(\phi) \right)^2 \quad . \quad (2.27)$$

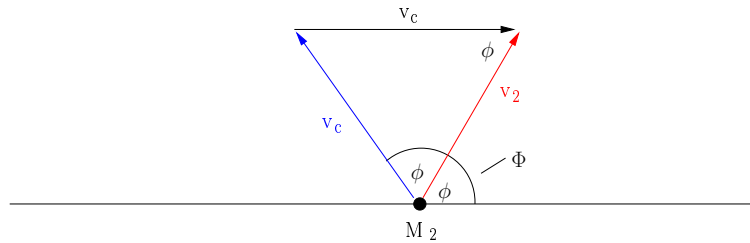


Abbildung 2.4: Zusammenhang der Geschwindigkeit des Targetatoms nach dem Stoß im Schwerpunktsystem (blau) und im Laborsystem (rot).

Die anfängliche Energie des Systems  $E$  ist festgelegt durch  $E = \frac{1}{2}M_1v_0^2$ . Aus Abbildung 2.3 erkennt man, dass  $\Phi = \pi - \Theta$  ist. Durch Einsetzen von (2.18) für die reduzierte Masse in (2.27) bekommt man folgenden Ausdruck für den Energieübertrag:

$$T = \frac{2}{M_2}v_0^2 \frac{M_1^2 M_2^2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) = E \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) . \quad (2.28)$$

Die maximal übertragene Energie erhält man für den zentralen Stoß mit  $\Theta = \pi$ , also für  $\Phi = 2\phi = 0$ :

$$T_{max} = E \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} . \quad (2.29)$$

Bis jetzt ist der Energieverlust des Ions in einem elastischen Streuvorgang abhängig vom Winkel bekannt. Mit der Wahrscheinlichkeit für den Streuvorgang zu jedem Winkel kann der durchschnittliche Energieübertrag, die Bremskraft, berechnet werden.

Unter der Annahme, dass Kräfte nur entlang der Verbindungslinie zwischen Ion und Targetatom wirken, kann das Zweikörperproblem auf die Wechselwirkung eines Teilchens mit der reduzierten Masse  $M_c$  und der Geschwindigkeit  $v_c$  in einem statischen Zentralfeld um den Ursprung des Schwerpunktsystems reduziert werden. Die Bewegung im Zentralfeld kann mit Hilfe der Lagrange-Gleichung gelöst werden.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad \text{mit} \quad L = \frac{M_c}{2}(r^2 \dot{r}^2 + r^2 \dot{\Theta}^2) - V(r) . \quad (2.30)$$

Wegen  $\frac{\partial L}{\partial \Theta} = 0$  ist  $\Theta$  zyklisch. Daraus folgt die Drehimpulserhaltung.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\Theta}} = \frac{d}{dt}(M_c r^2 \dot{\Theta}) = 0 \quad \Rightarrow \quad l := M_c r^2 \dot{\Theta} = const. \quad (2.31)$$

Für den Drehimpuls (im Unendlichen) gilt:

$$l = M_c v_c p . \quad (2.32)$$

Löst man die Gleichung für die Energie  $E$  des Systems

$$E = \frac{M_c}{2}(r^2 \dot{r}^2 + r^2 \dot{\Theta}^2) + V(r) \quad (2.33)$$

nach  $\dot{r}$  auf,

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{M_c}(E - V(r)) - \frac{l^2}{M_c^2 r^2}} \quad (2.34)$$



und diese Gleichung wiederum nach  $dt$ ,

$$dt = \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{M_c}(E - V(r)) - \frac{l^2}{M_c^2 r^2}}} \quad (2.35)$$

kann man aus (2.31) durch Integration vom Unendlichen bis zum minimalen Abstand des Teilchens  $r_0$  vom Streuzentrum den Winkel  $\Theta$  darstellen, abhängig vom Potential, dem Stoßparameter und der Energie des Teilchens.

$$\frac{\Theta}{2} = \frac{l}{M_c r^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{M_c}(E - V(r)) - \frac{l^2}{M_c^2 r^2}}} \quad (2.36)$$

Durch Einsetzen von (2.32) und vereinfachen erhält man:

$$\Theta = 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{p dr}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}}} \frac{1}{r^2} \quad (2.37)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung kann der Streuwinkel über die Schwerpunktenenergie  $E$ , dem Potential  $V(r)$  und dem Stoßparameter  $p$  bestimmt werden.

Die Wahrscheinlichkeit für die Streuung in Richtung  $\Theta$  erhält man durch die Überlegung, wieviel Teilchen  $dN$  eines homogenen Einheitsstrahls  $n$  durch die Kreisringfläche  $2\pi p dp$  gehen und wegen Erhaltung der Teilchenzahl zwischen  $\Theta$  und  $\Theta + d\Theta$  gestreut werden.

$$dN = 2\pi p dp n \quad (2.38)$$

$$d\sigma = \frac{dN}{n} = 2\pi p dp \quad (2.39)$$

Die Wahrscheinlichkeit  $d\sigma$  bezeichnet man als differentiellen Wirkungsquerschnitt.  $\Theta$  ist eine Funktion von  $p$  (2.37), die invertierbar ist. Die Funktion  $p(\Theta)$  wiederum ist differenzierbar, so dass man zusammen mit der Raumwinkeldefinition  $d\Omega = 2\pi \sin(\Theta) d\Theta$  folgenden Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt erhält.

$$d\sigma(\Theta) = 2\pi p \frac{dp}{d\Theta} d\Theta = \frac{p(\Theta)}{\sin\Theta} \left| \frac{dp}{d\Theta} \right| d\Omega \quad (2.40)$$

Der durchschnittliche Energieübertrag kann nun durch Integration aller möglicher Energieüberträge  $T(\Theta)$ , gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit für eine Streuung unter dem Winkel  $\Theta$ , berechnet werden.

$$S_n(E) = \int_0^{T_{max}} T d\sigma \quad (2.41)$$

Zuletzt muss noch ein geeignetes interatomares Potential  $V(r)$  zur Beschreibung der Wechselwirkung der Ionen mit dem Festkörper gefunden werden. Für das interatomare Potential  $V(r)$  wird oft ein abgeschirmtes Coulomb-Potential verwendet [17].

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right)$$

Dabei ist  $\Phi$  eine geeignete Abschirmfunktion und  $a$  der sogenannte Abschirmparameter in der Größenordnung des Bohrradius. Die Abschirmfunktion beachtet die Abschirmung des

Coulombpotentials der Kerne des Ions und des Targetatoms durch die Elektronen. Die besten Übereinstimmungen mit dem Experiment erhält man durch Verwendung des sogenannten "universal potential" [17], das von Ziegler et al. mit verbesserten Methoden, unter anderem dem Anpassen von Daten zahlreicher Ion-Target-Kombinationen an die Abschirmfunktion, eingeführt wurde. Diese ist in guter Näherung für alle Ion-Target-Kombinationen gültig. Desweiteren schlägt Biersack in [17] eine analytische Näherungsformel zur einfachen Berechnung des Ablenkwinkels  $\Theta$  aus dem Stoßparameter  $p$  vor.

### Elektronische Bremskraft

Der elektronische Energieverlust der Ionen an den Elektronen des Targets kommt hauptsächlich durch inelastische Streuung zustande. Dies führt zur Anregung beziehungsweise Ionisation der Targetatome. Die elektronische Bremskraft ist abhängig von der Energie der Ionen. Verschiedene Theorien beschreiben die Abbremsung unterschiedlich schneller Ionen. Da in dieser Arbeit nur niedrige Projektilenergien (kleiner  $0,1 \text{ MeV}/amu$ ) behandelt werden, sollen Theorien für den Hochenergiebereich hier nicht diskutiert werden. Für hohe, nichtrelativistische Energien (kleiner  $10 \text{ MeV}/amu$ ) müsste die Bethe-Bloch-Gleichung [19] zur Beschreibung des elektronischen Energieverlustes herangezogen werden. Zusätzliche relativistische Effekte führen zu einem Anstieg der Bremskraft bei noch höheren Energien.

Für niedrige Teilchengeschwindigkeiten kann die elektronische Abbremsung mit Hilfe der LSS-Theorie [18] beschrieben werden. Die Bremskraft ist proportional zur Geschwindigkeit, also proportional zur Wurzel aus der Energie des Ions.

$$S_e(E) = k_L \sqrt{E} \quad (2.42)$$

Die Proportionalitätskonstante  $k_L$  ist ein geschwindigkeitsunabhängiger Ausdruck und beinhaltet die Abhängigkeit der Bremskraft von der Kernladungszahl des Ions und des Targetatoms. Schaleneffekte und damit verbundene Oszillationen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl können durch einen weiteren Faktor  $k_F$ , den LSS-Korrekturfaktor, der durch experimentelle Ergebnisse angepasst wurde, berücksichtigt werden.

### 2.2.2 Implantationsprofil

Mit den im letzten Abschnitt bestimmten Bremsquerschnitten  $S_n$  und  $S_e$  kann nun mittels (2.12) die mittlere Reichweite  $R$  der Ionen angegeben werden. Diese ist allerdings ungleich der mittleren Tiefe, in der das Ion zur Ruhe kommt, da das implantierte Ion seine Richtung nach jedem Stoß verändern wird. Die so erhaltene projizierte Reichweite  $R_p$  und deren Standardabweichung  $\Delta R_p$  können durch Lösung von Integro-Differentialgleichungen [20] berechnet werden.

Weiterhin wird in [20] vorgeschlagen, das Konzentrationsprofil durch eine Gaußverteilung anzunähern.

$$N(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad D : \text{Dosis} \quad (2.43)$$

### 2.2.3 Die Monte-Carlo-Simulation *TRIM*

Mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation *TRIM* [17, 21] (kurz für **TR**ansport of **I**ons in **M**atter) können die tiefenabhängigen Bremskräfte und die Reichweitenverteilung simuliert werden. Da

in dieser Arbeit von *TRIM* simulierte nukleare Bremskraftprofile, Reichweitenverteilungen und Informationen aus den protokollierten Kollisionen verwendet werden, soll hier grob auf den Ablauf des Programms eingegangen werden.

Das Programm folgt den Bahnen einer großen Anzahl von Teilchen, die in das Target implantiert werden. Jedes Ion startet mit einer gegebenen Energie, Position und Richtung. Die Teilchen vollziehen Richtungsänderungen aufgrund von Kernstößen mit den Atomen des Targets. Zwischen zwei Kollisionen bewegt sich das Ion geradlinig innerhalb einer freien Weglänge. Durch die nukleare und elektronische Bremskraft verliert das Teilchen Energie. Die Verfolgung der Teilchenbahn terminiert, wenn die Energie unter einen bestimmten Wert abgefallen oder das Teilchen das Target verlassen hat. Das Target wird als amorph angenommen, weshalb kristalline Richtungseigenschaften, wie zum Beispiel das sogenannte Channeling, ignoriert werden. Der nukleare und elektronische Energieverlust werden unabhängig voneinander behandelt. Das Teilchen verliert neben dem kontinuierlichen Energieverlust durch die elektronische Bremskraft einen diskreten Betrag der Energie durch Kernstöße.

Das einfallende Teilchen startet mit der Anfangsenergie  $E = E_0$  an der Oberfläche des Targets. Drei Zufallszahlen  $R_1$ ,  $R_2$  und  $R_3$  werden auf die physikalischen Größen freie Weglänge  $l$ , Stoßparameter  $p$  und den Azimutwinkel  $\Phi$  abgebildet.

Es gibt Ansätze die freie Weglänge zufällig zu bestimmen. Für niedrige Ionenenergien (kleiner  $0,1 \text{ MeV}/amu$ ) reicht es jedoch den amorphen Festkörper durch eine feste freie Weglänge  $l$  zu modellieren. Diese ist gegeben durch den mittleren Abstand der Targetatome.

$$l = N^{-\frac{1}{3}} \quad (2.44)$$

Für größere Energien muss der Möglichkeit größerer freier Weglängen Rechnung getragen werden, so dass eine entsprechende Abbildung von  $R_1$  auf  $l$  nötig ist [17].

Danach wird der Stoßparameter durch

$$p = p_{max} R_2 \quad (2.45)$$

bestimmt. Dabei gilt für das Maximum  $p_{max}$  des Stoßparameters:  $\pi p_{max}^2 l = N^{-1}$ .

Der Azimutwinkel  $\Phi$  ist statistisch isotrop verteilt.

$$\Phi = 2\pi R_3 \quad (2.46)$$

Mit Hilfe der von Biersack entwickelten "magic formula" [17] kann aus dem Stoßparameter  $p$  analytisch der Streuwinkel  $\Theta$  errechnet werden. Mit Hilfe des Ablenkwinkels wird dann durch (2.28) der Energieübertrag  $\Delta E$  bestimmt. Der elektronische Energieverlust ergibt sich aus dem Produkt der freien Weglänge  $l$  mit dem Ausdruck für die elektronische Bremskraft  $S_e(E)$  aus (2.42) und der atomaren Dichte  $N$ . Durch die freie Weglänge und den Ablenk- und Azimutwinkel ist der Ort des nächsten Stoßprozesses festgelegt. Die Koordinaten und der Energieübertrag jedes Stoßes werden protokolliert, womit die nukleare und elektronische Bremskraft bestimmt ist. Die Koordinaten der Ionen, die unter einen bestimmten Energiebetrag abgefallen sind, werden ebenfalls durch das Programm festgehalten. Damit ist das Implantationsprofil gegeben.

## 2.2.4 Strahlenschäden und Amorphisierung

Durch die Bestrahlung des Targets werden Defekte im Kristallgitter hervorgerufen. Ein eingeschossenes Ion überträgt seine Energie in Einzelstößen auf die Targetatome, die ihrerseits

weitere Targetatome anstoßen und so eine Stoßkaskade bilden. Eine Kollisionskaskade endet, sobald die Energie der in ihr enthaltenen Teilchen unter die Verlagerungsenergie  $E_d$  gesunken ist. So entstehen Leerstellen und Zwischengitteratome, sogenannte Frenkeldefekte, und komplexere Gitterdefekte, sogenannte Cluster. Mit steigender Dosis beginnen gestörte Gebiete zu überlappen, was zu einer Ausbildung einer amorphen Schicht führen kann. Die Anzahl und Verteilung der Strahlenschäden hängt dabei von Energie und Masse der implantierten Ionen sowie der Masse der Targetatome, der Art der Bindungen im Festkörper und der Targettemperatur ab. Die Anzahl der in einem primären Stoß durch ein Ion der Energie  $E$  verlagerten Atome, kann nach Kinchin und Pease [22] für  $keV$ -Ionen zu

$$N_{p,d} = \frac{E}{2E_d} \quad (2.47)$$

abgeschätzt werden.

Gleichzeitig heilen Defekte aus, indem verlagerte Gitteratome an ihre Gitterplätze zurückkehren. Bei der thermischen Defektausheilung wird dies durch die thermisch erhöhte Mobilität der Defekte ermöglicht. Andererseits kann der Ionenstrahl selbst zur Defektausheilung beitragen. Dieser kann an amorph/kristallinen Grenzflächen Rekristallisation begünstigen [23] oder auch zur Bildung von Kristallisationskeimen in amorphen Gebieten führen [24]. Man spricht von ionenstrahlinduzierter Defektausheilung beziehungsweise Rekristallisation (IBIC, kurz für: Ion Beam Induced Crystallization).

Im Folgenden sollen einige Strahlenschädigungsmodelle zur Abschätzung der Amorphisierungsdosis vorgestellt werden.

### Modell der kritischen Energiedichte

Bei niedrigen Implantationstemperaturen, typischerweise kleiner  $85\text{ K}$ , kommt es beim Erreichen einer kritischen Energiedichte  $e_c$  von etwa  $6 \times 10^{23} \text{ eV/cm}^3$  für die in nuklearen Stößen deponierte Energie in Silizium zur Amorphisierung [25]. In diesem Fall ergibt sich die Amorphisierungsdosis  $D_0$  aus der nuklearen Bremskraft  $S_n$  zu:

$$D_0 = \frac{e_c}{S_n} \quad . \quad (2.48)$$

Bei hohen Temperaturen finden Ausheilvorgänge statt, was eine Erhöhung der Amorphisierungsdosis um mehrere Größenordnungen zur Folge hat.

### Amorphisierungsmodell nach Morehead und Crowder

Das Amorphisierungsmodell nach Morehead und Crowder [26] geht von einer erhöhten Konzentration an Leerstellen im Zentrum und einer erhöhten Konzentration an Zwischengitteratomen im Randbereich einer Stoßkaskade aus. Während der Abklingzeit der Stoßkaskade ( $\sim 10^{-9} \text{ s}$ ) können Leerstellen durch thermische Diffusion aus dem Zentrum der Stoßkaskade herauswandern und mit Zwischengitteratomen rekombinieren. Dies hat eine Verkleinerung des zentralen, amorph werdenden Volumens zur Folge. Der Vorgang ist abhängig von der Implantationstemperatur, welche die Diffusionslänge der Leerstellen bestimmt und der nuklearen Bremskraft, die das direkte Schädigungsvolumen festlegt. Die Amorphisierungsdosis lautet somit

$$D(T) = D_0 \left[ 1 - C \exp\left(-\frac{E_{diff}}{2k_B T}\right) \right] \quad , \quad (2.49)$$

wobei  $D_0 = \frac{E_d n}{S_n}$  die Amorphisierungsdosis für  $T \rightarrow 0 K$ ,  $C = \text{const. } S_n^{-\frac{1}{2}}$ ,  $E_{diff}$  die Aktivierungsenergie für Leerstellendiffusion,  $E_d$  die Atomverlagerungsenergie und  $n$  die atomare Dichte ist.

### Das Überlappungsmodell

Nach dem Überlappungsmodell nach Gibbons [27] hinterlässt jedes Ion ein zylinderförmiges, defektreiches Volumen mit der Grundfläche  $A_i$ . Amorphisierung tritt ein, wenn  $m$  Ionen den selben Bereich geschädigt haben, also nach  $m - 1$ -facher Überlappung. Der Überlappungsparameter  $m$  ist im wesentlichen abhängig von der Ionenmasse. Das Verhältnis des amorphen Flächenanteils  $A_a$  zur gesamt bestrahlten Fläche  $A_0$  nach einer Dosis  $D$  ergibt sich zu:

$$\frac{A_a}{A_0} = 1 - \left[ \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(A_i D)^k}{k!} \exp(-A_i D) \right] . \quad (2.50)$$

Dennis und Hale [28] erreichten nach diesem Modell für Argon- und Kryptonionen in Silizium die beste Übereinstimmung mit experimentell bestimmten Schädigungsdaten für  $m = 2$  und  $m = 3$ . Dies deutet darauf hin, dass selbst bei schweren Ionen ausschließlich direkte Amorphisierung ( $m = 1$ ) unwahrscheinlich ist. Bei niedrigen Dosen zeigt sich aufgrund der direkten Amorphisierung ein linearer Zusammenhang zwischen dem amorphen Flächenanteil und der Dosis. Der lineare Verlauf geht mit steigender Dosis mit der Bildung amorpher Gebiete durch Überlappung in einen maximal quadratischen Anstieg über. Der Verlauf sättigt schließlich aufgrund der Abnahme ungeschädigter und kristallin geschädigter Flächenanteile.

### Strahlenschädigungsmodell nach Hecking

Da das Überlappungsmodell keine temperaturabhängigen Ausheilmechanismen berücksichtigt und somit lediglich für tiefe Temperaturen geeignet ist, wurde von Hecking [29, 30] ein neues Defekterzeugungs- und Defektwechselwirkungsmodell entwickelt, das auf dem Spike-Konzept [31, 32] aufbaut. Als Spike bezeichnet man das räumlich begrenzte Gebiet sehr hoher Energiedichte einer dichten Stoßkaskade, in dem die kollektiv angeregten Atome einen quasi-flüssigen Zustand bilden. Die thermische Relaxation dieses Spikes kann als Wärmediffusionsprozess beschrieben werden. Erreicht die Kristallisationsfront den Kaskadenkern bevor die Kristallisationstemperatur unterschritten wird, kann der Spike vollständig rekristallisieren. Dies ist bei hohen Targettemperaturen der Fall. Bei kleinen Temperaturen und einer darauffolgenden schnellen Wärmediffusion kann wegen unvollständiger Rekristallisation ein amorpher Kaskadenkern zurückbleiben. Die Wahrscheinlichkeit für die Bildung amorpher Volumina steigt somit mit fallender Temperatur. Neben der Implantationstemperatur hängt der Defektzustand entscheidend von der Kaskadengeometrie und dem Schädigungszustand der Kaskadenumgebung ab. Ein hoher Schädigungsgrad einer Kaskadenumgebung erschwert die epitaktische Rekristallisation, was zur sogenannten "stimulierten Amorphisierung" führt. Neben dem Übergang in den amorphen Zustand beschreibt das Modell die Erzeugung und Wechselwirkung von Kristalldefekten bei Dosen unterhalb der Amorphisierungsschwelle anhand von Reaktionswahrscheinlichkeiten, die durch Vergleich mit experimentellen Daten gewonnen wurden.

## Kapitel 3

# Experimentelle Befunde

Gegenstand dieser Arbeit ist die Umsetzung eines Modells, welches den Selbstorganisationsvorgang bei der Bildung von lamellaren und sphärischen  $SiC_x$ -Ausscheidungen an der vorderen Grenzfläche zur durchgehend amorphen  $SiC_x$ -Schicht bei Hochdosis-Kohlenstoff-Implantation in Silizium erklären soll. Neben der Kohlenstoffimplantation in Silizium wurden solche Ausscheidungen auch bei der Hochdosis-Sauerstoffimplantation in Silizium und der Bestrahlung von Saphir mit  $Ar^+$ -Ionen sowie von  $SiC$  mit  $Si^+$ -Ionen [11, 12, 13] gefunden. Allen Systemen gemeinsam ist eine drastische Dichtereduktion des Targetmaterials beim Phasenübergang - im Falle der Bildung von amorphen  $SiC$  von 20 bis 30% -, worauf im nächsten Kapitel genauer eingegangen wird.

Die Entstehung solcher Ausscheidungen beobachtet man nur unter bestimmten Implantationsbedingungen. Im Folgenden sollen einige der experimentellen Ergebnisse bezüglich der Bildung der geordneten Ausscheidungen aus [10] zusammengefasst werden.

Es wurden Implantationen von  $C^+$ -Ionen der Energie  $180\text{ keV}$  unter einem Winkel von  $7^\circ$  und einer Dosisrate von  $\dot{D} = 10\ \mu\text{Acm}^{-2}$  in einem Temperaturbereich von 150 bis  $250\text{ }^\circ\text{C}$  in  $(100)Si$  für verschiedene Dosen zwischen  $1,0$  und  $8,5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  durchgeführt und untersucht.

### 3.1 Lage und Ausdehnung amorpher Phasen

Abbildung 3.1 zeigt eine Cross-Section TEM-Aufnahme (Querschnittsaufnahme) einer mit  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$   $180\text{ keV } C^+$ -implantierten Probe. Die hellen Gebiete sind amorph, dunkle Gebiete kristallin. In einer Tiefe von ungefähr  $300\text{ nm}$  beginnt die durchgehend amorphe Schicht. An der vorderen Grenzfläche sind die lamellaren und sphärischen  $SiC_x$ -Ausscheidungen zu erkennen. Diese erstrecken sich über einen Tiefenbereich von ca.  $100\text{ nm}$ . Die Lamellen sind parallel zur Targetoberfläche ausgerichtet. Die Höhe der Ausscheidungen beträgt ungefähr  $3\text{ nm}$ . Im rechten Teil von Abbildung 3.1 sieht man einen vergrößerten Ausschnitt der vorderen Grenzfläche. Man erkennt die regelmäßige Anordnung der lamellaren Ausscheidungen ( $L$ ) in Abständen, die ungefähr der Höhe der Ausscheidungen selbst entsprechen.

Die Lage und Ausdehnung der Lamellen sowie der durchgehend amorphen Schicht ist abhängig von der implantierten Dosis. Abbildung 3.2 zeigt die in [10] mittels TEM bestimmte Position und Ausdehnung amorpher Phasen unter denselben Implantationsbedingungen abhängig von der Dosis. In Abbildung 3.3 sind die dazugehörigen Hellfeld-TEM-Abbildungen zu den ersten vier Dosen abgebildet. Die mit  $R_{max}$  gekennzeichnete Linie in Abbildung 3.2 gibt die Position des Kohlenstoffkonzentrationsmaximums an, welches für kleine Dosen mit-

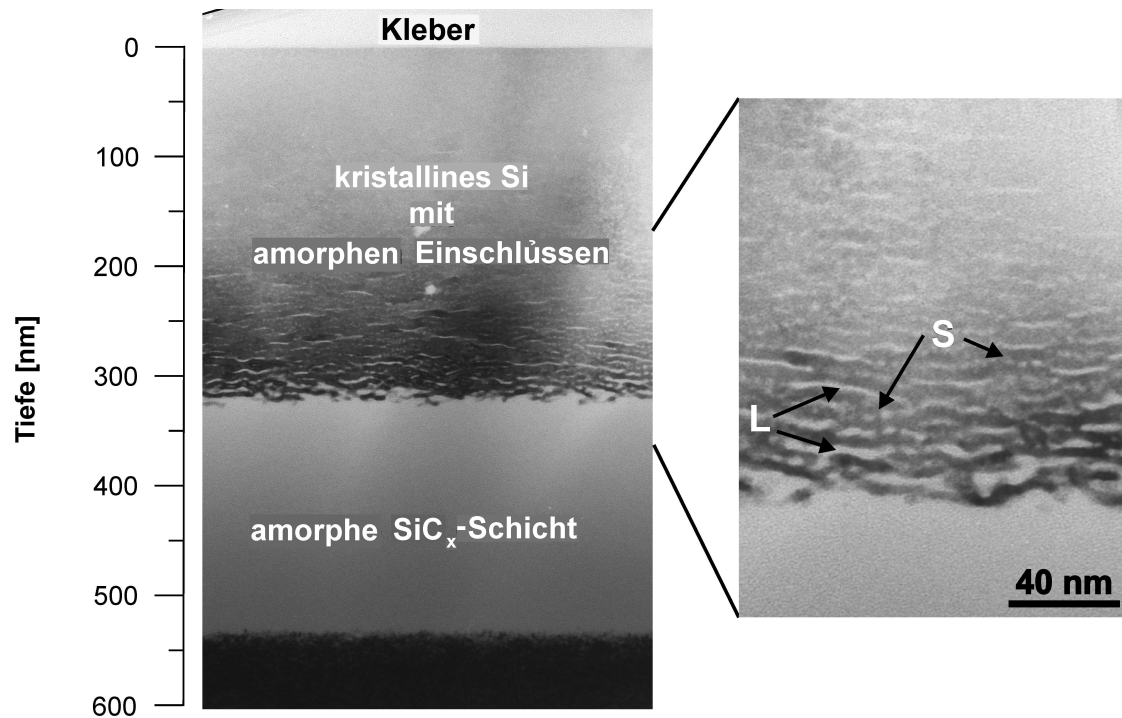


Abbildung 3.1: Hellfeld-TEM-Abbildung einer bei  $150\text{ }^\circ\text{C}$  mit  $180\text{ keV C}^+$  implantierten Si-Probe mit einer Dosis von  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ . (L: amorphe Lamellen, S: sphärische amorphe Ausscheidungen) [10]

tels *TRIM* und für hohe Dosen durch RBS- und TEM-Messungen bestimmt wurde. Für die kleinste Dosis von  $1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  wird keine durchgehend amorphe Schicht beobachtet. Stattdessen kann man zahlreiche  $3\text{ nm}$  große, teilweise zusammenwachsende amorphe Einschlüsse erkennen. Für Dosen oberhalb  $1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  entstehen durchgehend amorphe Schichten. Gut zu erkennen ist, dass sich die mit steigender Dosis anwachsende durchgehende Schicht um das Kohlenstoffverteilungsmaximum erstreckt. Wie man in Abbildung 3.3 gut erkennen kann, bilden sich die lamellaren Ausscheidungen an der vorderen Grenzfläche zur durchgehend amorphen Schicht erst ab einer Dosis von  $3,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  und werden mit steigender Dosis schärfer.

### 3.2 Temperaturabhängigkeit

Die Position und Ausdehnung der amorphen Phasen ist außerdem abhängig von der Implantationstemperatur. Für die Bildung durchgehend amorpher Schichten und lamellarer Ausscheidungen an der Grenzfläche muss die Implantationstemperatur hoch genug sein, um eine komplette Amorphisierung der Targetoberfläche zu vermeiden, und gleichzeitig niedrig genug, um die Kristallisation amorpher Ausscheidungen zu kubischen  $3\text{C} - \text{SiC}$ -Präzipitaten zu verhindern. Für Kohlenstoff in Silizium sind Temperaturen zwischen  $150$  und  $400\text{ }^\circ\text{C}$  geeignet. Abbildung 3.4 zeigt die Position und Ausdehnung der strukturell verschiedenen Bereiche für  $180\text{ keV C}^+$ -implantierte Proben mit einer Dosis von  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  abhängig von der

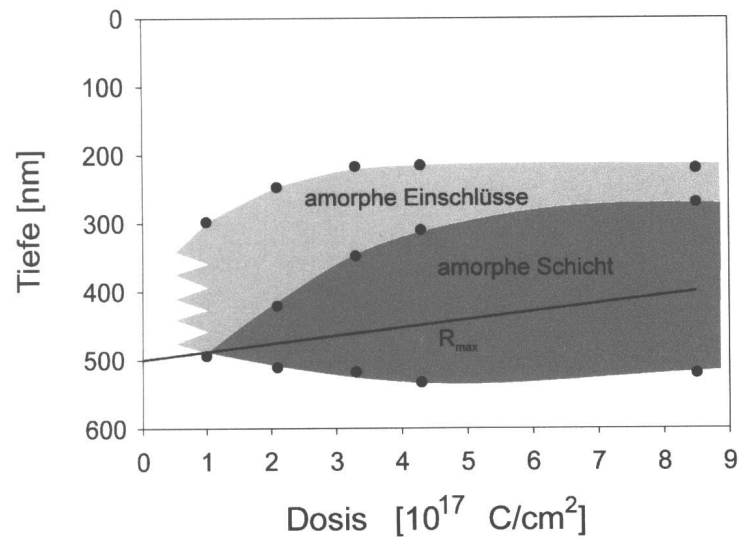


Abbildung 3.2: Mittels TEM bestimmte Position und Ausdehnung amorpher Phasen in bei 150 °C implantierten Proben in Abhängigkeit von der implantierten Dosis. [10]

Implantationstemperatur. Die Dicke der durchgehenden Schicht nimmt mit steigender Temperatur ab. Dies deutet auf eine erleichterte Rekristallisation bereits amorphisierten Siliziums, beziehungsweise erschwerte Amorphisierung kristallinen Siliziums, bei höheren Temperaturen hin. Auffällig ist weiterhin die Ausdehnung der amorphen Schicht um das Kohlenstoffverteilungsmaximum. Die Kohlenstoffkonzentrationen an der vorderen Grenzfläche für 150 °C beträgt 15 at.%, bei 200 °C 20 at.% und bei 250 °C 25 at.%. Dies weist auf einen Beitrag des Kohlenstoffs zur Amorphisierung hin, der für höhere Temperaturen aufgrund der erschwerten Amorphisierung ansteigen muss, um Amorphisierung zu begünstigen.

### 3.3 Kohlenstoffsegregation

In Abbildung 3.5 wird eine Hellfeldaufnahme mit einer zugehörigen, durch energiegefilterte Transmissionselektronenmikroskopie (EFTEM) gewonnenen Elementverteilungsaufnahme, einer bei 200 °C und sonst gleichen Bedingungen implantierten Probe, gegenübergestellt. Die lamellaren amorphen Bereiche weisen eine erhöhte Kohlenstoffkonzentration im Gegensatz zu den kristallinen Bereichen auf. Der direkte Nachweis dafür, dass die amorphen Lamellen eine kohlenstoffreiche Phase darstellen, ist aufgrund ihrer geringen Größe und der niedrigen Ordnungszahl des Kohlenstoffs besonders schwierig. Der bisher einzige direkte Nachweis ergibt sich aus EFTEM, wie in Abbildung 3.5 gezeigt.



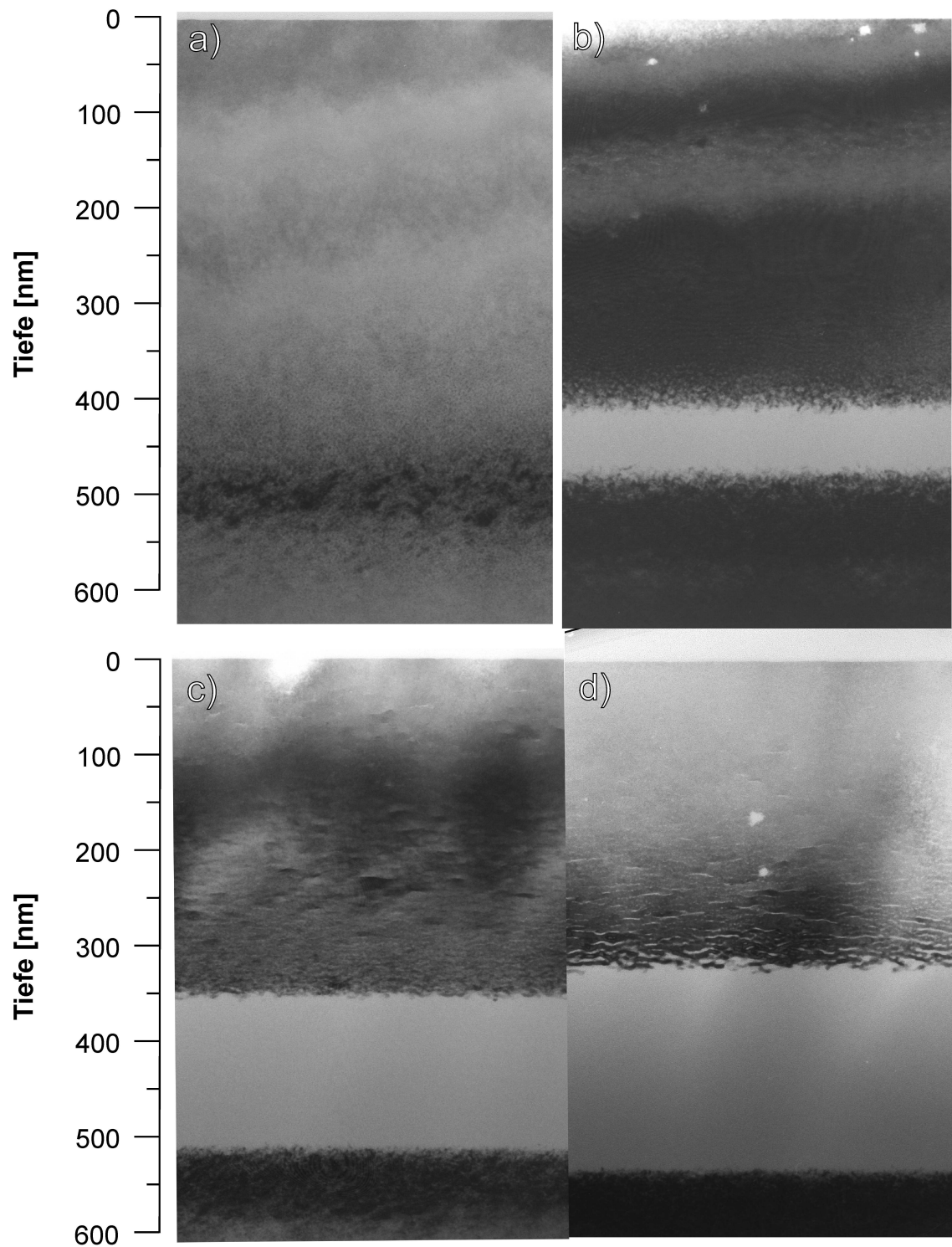


Abbildung 3.3: Hellfeld-TEM-Abbildung der Schichtstruktur der bei 150 °C implantierter Proben mit Dosen von: a) 1,0, b) 2,1, c) 3,3 und d)  $4,3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ . [10]

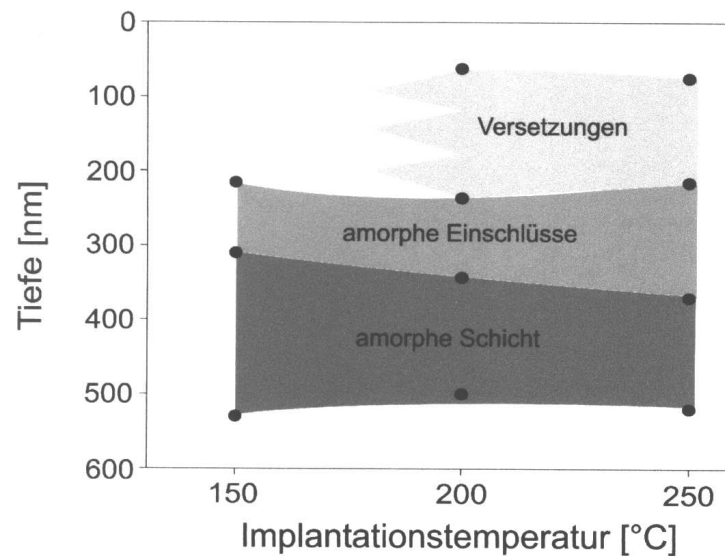


Abbildung 3.4: Schematischer Aufbau des implantierten Schichtsystems für  $180\text{ keV } C^+$ -Implantationen in  $(100)Si$  mit einer Dosis von  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  in Abhängigkeit von der Temperatur. [10]

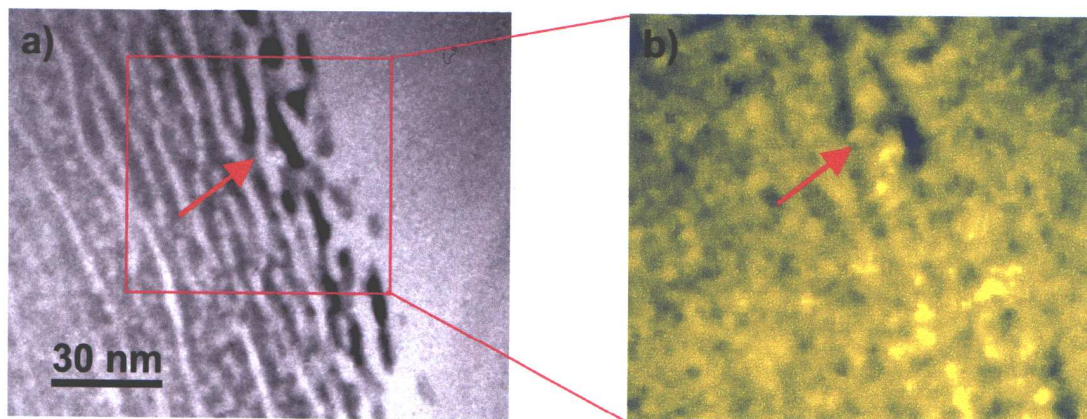


Abbildung 3.5: a) Hellfeld- und b) Elementverteilungsaufnahme der vorderen Grenzschicht einer mit  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  bei  $200\text{ °C}$  implantierten Probe. Amorphe Bereiche in der Hellfeldaufnahme erscheinen hell, hohe Kohlenstoffkonzentrationen in der Elementverteilungsaufnahme sind gelb, niedrige blau. [10]

# Kapitel 4

## Modell

Im Folgenden soll auf das Modell zur Bildung dieser geordneten amorphen Ausscheidungen eingegangen werden. Es wurde erstmals in [33] vorgestellt. Die Idee des Modells ist schematisch in Abbildung 4.1 gezeigt.

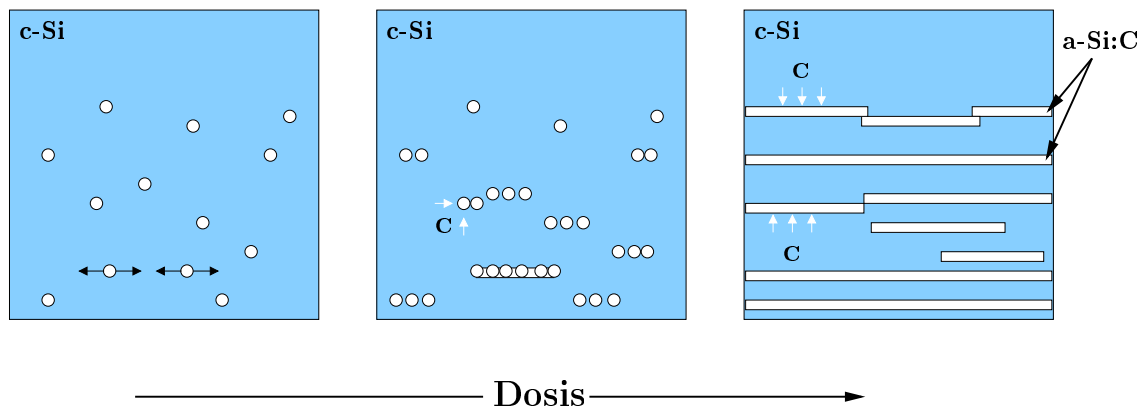


Abbildung 4.1: Schematische Abbildung des Modells zur Erklärung der Selbstorganisation amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen und ihre Entwicklung zu geordneten Lamellen aufgrund vorhandener Druckspannungen mit zunehmender Dosis in  $C^+$ -implantierten Silizium. Schwarze Pfeile entsprechen den Druckspannungen, weisse Pfeile deuten Kohlenstoffdiffusion an.

Aufgrund der niedrigen nuklearen Bremskraft der leichten Kohlenstoffionen im Silizium ist unter den weiter oben genannten Bedingungen keine Amorphisierung von reinem Silizium zu erwarten [34]. Tatsächlich wurde in [35] gezeigt, dass reines amorphes Silizium bei Temperaturen über  $130^\circ\text{C}$  unter den gegebenen Bedingungen ionenstrahlinduziert epitaktisch rekristallisiert, während rein thermische Rekristallisation von amorphen Silizium ( $a-Si$ ) erst oberhalb  $550^\circ\text{C}$  erfolgt [36]. Zufällig amorphisierte Gebiete werden demnach mit hoher Wahrscheinlichkeit sehr schnell rekristallisieren. Die rein zufällige Amorphisierung, für die immer eine geringe Wahrscheinlichkeit besteht, bezeichnet man als ballistische Amorphisierung.

Aus dem vorherigen Kapitel ist bekannt, dass die Implantation unter den oben genannten Bedingungen bei sehr hohen Dosen zur Bildung von amorphen Phasen führt. Die Amorphisierung bei den gegebenen Temperaturen oberhalb  $130^\circ\text{C}$  muss also dem Vorhandensein von Kohlenstoff zugeschrieben werden, der die amorphe Phase stabilisiert [37]. Energiegefilterte

Transmissionselektronenmikroskopie [7, 10, 39] hat gezeigt, dass die amorphe Phase in der Tat kohlenstoffreicher als deren kristalline Umgebung ist. Weiterhin bestätigten Temperexperimente [40], dass die amorphen Gebiete selbst bei 800 °C, weit über der Rekristallisationstemperatur von 550 °C für reines  $a-Si$ , stabil sind. Bei bis zu fünfstündigen Tempervorgängen bei 900 °C entstehen aus den Lamellen geordnete Ketten von abwechselnd amorphen  $SiC_x$ - und kristallinen  $3C-SiC$ -Ausscheidungen, was nochmal die kohlenstoffreiche Natur der amorphen Phase, gleichzeitig aber auch eine inhomogene Verteilung des Kohlenstoffs in den Lamellen, zeigt. Mit zunehmender Dosis wird also eine Sättigungsgrenze von Kohlenstoff in kristallinem Silizium überschritten, was zur Nukleation sphärischer amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen führt. Dieser, zur Amorphisierung beitragende Mechanismus, wird im Folgenden als kohlenstoffinduzierte Amorphisierung bezeichnet. Es wäre auch denkbar, dass der Kohlenstoff kristalline  $3C-SiC$ -Ausscheidungen bildet, wie es bei höheren Targettemperaturen beobachtet wird [34]. Die Tatsache, dass bei niedrigen Temperaturen die  $SiC_x$ -Ausscheidungen in amorpher Form vorliegen, lässt sich durch den Unterschied in der Gitterkonstante von kristallinem Silizium ( $a = 5,43 \text{ \AA}$ ) und kubischem  $3C-SiC$  ( $a = 4,36 \text{ \AA}$ ) erklären. Aufgrund des Unterschiedes von fast 20 % in der Gitterkonstante besitzen kubische  $3C-SiC$ -Präzipitate in der kristallinen Siliziummatrix eine hohe Grenzflächenenergie, die in [38] zu  $2 - 8 \times 10^{-4} \text{ Jcm}^{-2}$  abgeschätzt wird. Man kann daher einen energetischen Vorteil erwarten, wenn eine der beiden Substanzen in amorpher Form vorliegt.

Amorphes  $SiC$  ( $a-SiC$ ) hat eine 20 bis 30 % geringere Dichte im Vergleich zu kubischem Siliziumkarbid ( $3C-SiC$ ) [41, 42]. Eine entsprechende geringere Dichte wird für unterstöchiometrisches amorphes  $SiC_x$  im Vergleich zu kristallinem Silizium angenommen. Die amorphen Gebiete sind demnach bestrebt sich auszudehnen und üben Druckspannungen auf die kristalline Umgebung aus. Diese sind in Abbildung 4.1 durch die schwarzen Pfeile dargestellt. Da sich die Ausscheidungen relativ nah an der Oberfläche des Targets befinden, kann der vertikale Anteil der Spannungen durch Expansion des Targets [43] relaxieren. Dies gilt nicht für die horizontale Komponente. Es verbleiben laterale Druckspannungen parallel zur Oberfläche. Diese begünstigen Amorphisierung in der Nachbarschaft der Ausscheidung, da im Falle einer Stoßkaskade die versetzten Atome aufgrund der vorhandenen Spannungen nur erschwert auf ihre regulären Gitterplätze zurückkehren können. Dieser Amorphisierungsbeitrag wird im Folgenden als spannungsunterstützte Amorphisierung bezeichnet. Er führt dazu, dass die sphärischen  $SiC_x$ -Ausscheidungen lateral durch  $a-Si$  verbunden werden. Da die Lamellen aus einzelnen sphärischen  $a-SiC_x$ -Ausscheidungen hervorgehen, ist zu erwarten, dass die Kohlenstoffkonzentration lateral eine Modulation entlang der Lamellen aufweist. Die Modulation sollte allerdings schwach sein, wie aus folgenden Überlegungen zur Diffusion folgt.

Die amorphen Gebiete dienen als Senke für Kohlenstoff, der von der kristallinen Umgebung in die amorphe Ausscheidung diffundieren kann, um so die Übersättigung mit Kohlenstoff in den kristallinen Gebieten zu reduzieren. Die Löslichkeit von Kohlenstoff in kristallinem Silizium ( $c-Si$ ) bei Raumtemperatur ist nahezu Null [46]. Die amorphen Gebiete reichern sich mit Kohlenstoff an und erhöhen wiederum die lateralen Spannungen auf die Umgebung. Mit zunehmender Dosis bilden sich so durchgehende kohlenstoffreiche amorphe Lamellen. Der Kohlenstoff diffundiert von den kristallinen in angrenzende amorphe Gebiete. Kristalline Gebiete, die auf diese Weise Kohlenstoff an ihre amorphe Nachbarschaft abgegeben haben, werden bei fortgesetzter Bestrahlung mit geringerer Wahrscheinlichkeit amorphisiert. So entstehen abwechselnd amorphe und kristalline Lamellen. Da in experimentellen Ergebnissen von Implantationen bei weitaus höheren Temperaturen [44, 45], bei denen sich keine amorphe Phase bildet, keine Verbreiterung des Kohlenstoffprofils durch Diffusion beobachtet wird, wird eine

langreichweitige Diffusion innerhalb kristalliner Gebiete ausgeschlossen.

# Kapitel 5

## Simulation

Im Folgenden soll die Implementation der Monte-Carlo-Simulation nach dem vorangegangenen Modell diskutiert werden. Die Simulation trägt den Namen *NLSOP*, was für die Schlagwörter **N**ano, **L**amellar und **S**elbstorganisationsprozess steht. Die Simulation ist in der Programmiersprache *C* [47] geschrieben. Der Simulationscode wurde auf Computern der *IA32*-Prozessorarchitektur mit dem *GNU C Compiler* auf einem Linux Betriebssystem übersetzt und betrieben.

Ziel der Simulation ist die Validierung des Modells anhand der experimentellen Ergebnisse, wie sie in Abbildung 3.1 vorliegen. Es wurden zwei Versionen der Simulation erstellt, die unterschiedliche Tiefenbereiche abdecken. Die erste Version beschreibt den Bereich von der Oberfläche des Targets bis zum Beginn der durchgehend amorphen *SiC<sub>x</sub>*-Schicht, also den Tiefenbereich von 0 bis 300 nm. Nachdem eine Beschreibung der Bildung lamellarer amorpher Ausscheidungen mit dieser Version sehr gut funktioniert hat, wurde eine zweite Version entwickelt, die den gesamten Implantationsbereich betrachtet. Auf weitere Unterschiede in den zwei Versionen wird in einem gesonderten Abschnitt genauer eingegangen.

Die Simulation kann grob in drei Abschnitte unterteilt werden. Im ersten Schritt werden die Kollisionen eines Ions im Target und die daraus resultierende Amorphisierung beziehungsweise Rekristallisation eines Gebietes simuliert. Nachdem das Ion seine Energie durch Stöße im Target abgegeben hat kommt es zur Ruhe. Der Einbau des Kohlenstoffs im Target wird im zweiten Schritt ausgeführt. Als letztes wird die Diffusion von Kohlenstoff von kristallinen in amorphe Gebiete und der Sputtervorgang realisiert.

Im Folgenden werden der Simulationsalgorithmus und die dazu benötigten Annahmen besprochen. Ein weiterer Abschnitt beschäftigt sich mit der Extraktion von, für die Simulation notwendigen, Informationen aus *TRIM*-Ergebnissen. Das Kapitel schließt mit dem Test der verwendeten Zufallszahlen.

### 5.1 Annahmen der Simulation

#### 5.1.1 Unterteilung des Targets

Wie in Abbildung 5.1 zu sehen ist, wird das Target in Würfel mit der Seitenlänge  $a = 3\text{ nm}$  zerlegt. Die Anzahl der Würfel in  $x$ ,  $y$  und  $z$  Richtung ist frei einstellbar. Ein solches Volumen kann durch den Ortsvektor  $\vec{r}(k, l, m)$ , wobei  $k$ ,  $l$  und  $m$  ganze Zahlen sind, adressiert werden. Jeder Würfel hat entweder den Zustand amorph (rot), oder ist kristallin (blau). Die lokale Anzahl der implantierten Kohlenstoffatome wird ebenfalls protokolliert.

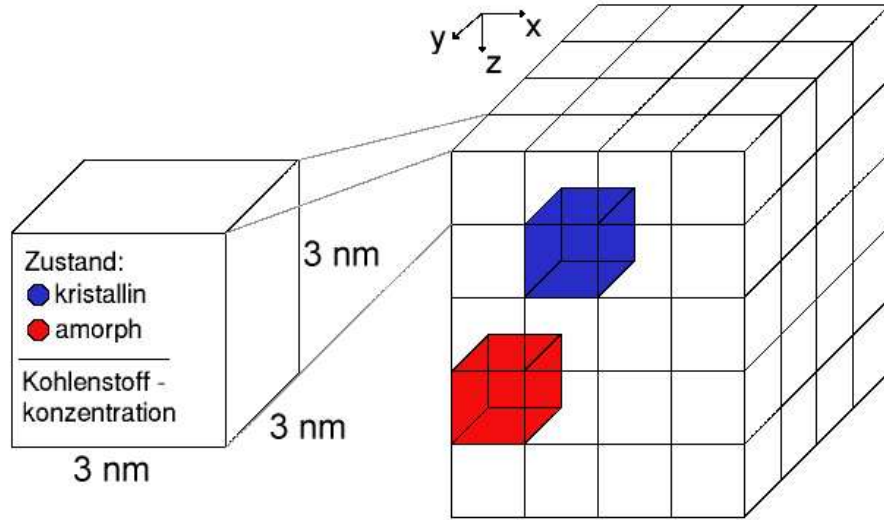


Abbildung 5.1: Unterteilung des Targets in Würfel mit  $3\text{ nm}$  Kantenlänge. Jedes Volumen ist entweder amorph (rot) oder kristallin (blau) und protokolliert die lokale Kohlenstoffkonzentration.

Die Ausdehnung des Targets in  $x, y$ -Richtung ist im Gegensatz zur Tiefe sehr groß und kann als unendlich ausgedehnt angenommen werden. Um die Anzahl der Würfel in diese Richtungen in der Simulation, aus Gründen der Rechenzeit, möglichst klein halten zu können, werden periodische Randbedingungen in der  $x, y$ -Ebene verwendet.

In Version 1 der Simulation wurden  $x = y = 50$  beziehungsweise  $x = y = 64$  und  $z = 100$  gesetzt. In Version 2 sind  $x = y = 64$  und  $z = 233$ .

Zum besseren Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentell erhaltenen TEM-Aufnahmen können Querschnitte (Cross-Sections) der amorph/kristallinen Struktur als Bitmap ausgegeben werden. Kristalline Würfel sind schwarz und amorphe Würfel weiß dargestellt. Für die  $x - z$ - beziehungsweise  $y - z$ -Querschnitte besteht die Möglichkeit über mehrere Querschnitte zu mitteln. Die selbe Mittelung über den amorph/kristallinen Zustand ist bei den TEM-Aufnahmen, der auf eine Dicke von 100 bis  $300\text{ nm}$  präparierten Proben der Fall.

### 5.1.2 Amorphisierung und Rekristallisation

Nach dem in Kapitel 4 vorgestellten Modell gibt es drei statistisch unabhängige zur Amorphisierung beitragende Mechanismen. Eine lokale Wahrscheinlichkeit für die Amorphisierung  $p_{c \rightarrow a}$  eines beliebigen kristallinen Volumens am Ort  $\vec{r}$  setzt sich aus den drei Einzelwahrscheinlichkeiten für die ballistische, kohlenstoffinduzierte und spannungsunterstützte Amorphisierung zusammen. Sie wird wie folgt berechnet:

$$p_{c \rightarrow a}(\vec{r}) = p_b + p_{cCC}(\vec{r}) + \sum_{\text{amorphe Nachbarn}} \frac{p_s c_C(\vec{r}')}{(\vec{r} - \vec{r}')^2} \quad (5.1)$$

Der Beitrag der ballistischen Amorphisierung besteht nur aus der Konstanten  $p_b$ . Die Wahrscheinlichkeit für die ballistische Amorphisierung in einem Stoß ist unabhängig vom

Ort und somit eine Konstante. Sie hat die Einheit 1. Die höhere Wahrscheinlichkeit, im Maximum der nuklearen Bremskraft zu amorphisieren, kommt durch die höhere Anzahl an Stößen in diesem Tiefenbereich zustande. Wieso dieser Beitrag in dieser Art sinnvoll ist, wird in Abschnitt 5.2.2 geklärt.

Die Wahrscheinlichkeit für die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung wird proportional zur lokalen Kohlenstoffkonzentration  $c_C$  angenommen.  $p_c$  ist die dazugehörige Proportionalitätskonstante und hat demnach die Einheit  $[p_c] = m^3$ .

Der Beitrag der Druckspannungen setzt sich aus den einzelnen Beiträgen amorpher Gebiete in der selben Ebene zusammen, da nur diese unrelaxierte Spannungen ausüben. Dabei ist der Wahrscheinlichkeitsbeitrag eines amorphen Volumens bei  $\vec{r}'$  auf das Volumen am Ort  $\vec{r}$  wieder proportional zur lokalen Kohlenstoffkonzentration in  $\vec{r}'$ . Dies ist offensichtlich, denn je mehr Kohlenstoff in einem amorphen Volumen vorhanden ist, desto größer ist die ausgehende Spannung auf die Umgebung. Gleichzeitig ist der Beitrag indirekt proportional zum Abstandsquadrat  $(\vec{r} - \vec{r}')^2$ , da der Druck quadratisch mit der Entfernung abfällt.  $p_s$  ist eine Proportionalitätskonstante und hat somit die Einheit  $[p_s] = m^5$ .

Die Rekristallisationswahrscheinlichkeit amorpher Gebiete  $p_{a \rightarrow c}$  sollte sich genau entgegengesetzt zu  $p_{c \rightarrow a}$  verhalten und wird deshalb als

$$p_{a \rightarrow c}(\vec{r}) = 1 - p_{c \rightarrow a}(\vec{r}) \quad (5.2)$$

angenommen. Jedoch muss die direkte Nachbarschaft des Volumens berücksichtigt werden. Da es sich bei den betrachteten Temperaturen allein um ionenstrahlinduzierte, epitaktische Rekristallisation handelt und einschränkend hier nur der Temperaturbereich bis 250 °C behandelt wird, in dem keine merkliche ionenstrahlinduzierte Nukleation innerhalb amorpher Bereiche auftritt [33], sollte für die Rekristallisation die Strukturinformation einer kristallinen Nachbarschaft notwendig sein. Mit einer zunehmenden Anzahl von amorphen Nachbarn sollte die Rekristallisationswahrscheinlichkeit also sukzessive abnehmen und ganz verschwinden, wenn kein einziger kristalliner Nachbar vorhanden ist. Mit der im Abschnitt 5.1.1 beschriebenen Unterteilung hat ein Volumen genau sechs Grenzflächen, von denen die Rekristallisationsfront ausgehen kann. Damit kann man (5.2) neu schreiben und man erhält:

$$p_{a \rightarrow c}(\vec{r}) = (1 - p_{c \rightarrow a}(\vec{r})) \left( 1 - \frac{\sum \text{direkte Nachbarn } \delta(\vec{r}')}{6} \right), \quad (5.3)$$

mit

$$\delta(\vec{r}') = \begin{cases} 1 & \text{wenn Gebiet bei } \vec{r}' \text{ amorph} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.4)$$

Die Proportionalitätskonstanten  $p_b$ ,  $p_c$  und  $p_s$  sind bisher experimentell nicht zugänglich und werden daher als frei wählbare Simulationsparameter angenommen. Es stellt sich also die Frage, ob ein Satz von Parametern existiert, der es erlaubt, experimentell gefundene Verteilungen, wie sie in Abbildung 3.1 gezeigt werden, durch die Simulation zu reproduzieren. Durch Variation der gefundenen Parameter können dann die unterschiedlichen Einflüsse der verschiedenen Amorphisierungsmechanismen untersucht und der Selbstorganisationsprozess verstanden werden.

### 5.1.3 Diffusion

Weiterhin sieht das Modell die Möglichkeit der Diffusion von Kohlenstoff aus kristallinen in umliegende amorphe Volumina vor. In Zeitintervallen  $T_{Diff}$  wird ein Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs eines kristallinen Volumens in das benachbarte amorphe Volumen transferiert. Da von



einem konstanten Strahlstrom ausgegangen wird, kann die Zeit  $T_{Diff}$  auf eine Anzahl von implantierten Ionen  $d_v$  abgebildet werden. Die Diffusion des Kohlenstoffs von kristallinen in amorphe Gebiete wird also durch die zwei Parameter  $d_r$  und  $d_v$  gesteuert. Die Parameter sind ebenfalls frei wählbar. Aus Gründen der Rechenzeit sollte die Diffusionsroutine nicht nach jedem implantierten Ion ausgeführt werden. Diffusion innerhalb kristalliner Gebiete sowie Diffusion innerhalb amorpher Gebiete wird ausgeschlossen. Von einer möglichen Kohlenstoff-übersättigung im Amorphen wird nicht ausgegangen, da der Kohlenstoff in  $a - Si$  gut löslich ist. Da die Löslichkeit von Kohlenstoff in  $c - Si$  nahezu Null ist, wird der Kohlenstoff immer bestrebt sein von dem kristallinen Bereich in die amorphen Gebiete zu diffundieren.

#### 5.1.4 Sputtern

Es wird von einer, über der Oberfläche gleichmäßig verteilten und während des Implantationsvorganges konstanten Sputterraten ausgegangen. Aufgrund der Unterteilung des Targets in Würfel mit der Seitenlänge  $3\text{ nm}$  muss diese Sputterraten in Einheiten einer Dosis, welche  $3\text{ nm}$  sputtert, angegeben werden. Jedesmal, nachdem das Programm diese Dosis durchlaufen hat, wird die Sputterroutinen aufgerufen, welche die oberste Targetebene abträgt.

## 5.2 Statistik von Stoßprozessen

Für die Simulation benötigt man die Statistik der Stoßprozesse des Kohlenstoffs im Siliziumtarget unter den gegebenen Implantationsbedingungen. Dabei sind insbesondere die nukleare Bremskraft für den Amorphisierungs- beziehungsweise Rekristallisationsschritt und das Implantationsprofil für den Einbau des Kohlenstoffs ins Siliziumtarget von Interesse. *NLSOP* benutzt die Ergebnisse des *TRIM*-Programms, welches die Wechelswirkung der Ionen mit dem Target simuliert und somit ein geeignetes Bremskraft- und Implantationsprofil sowie eine genaue Buchführung über die Stoßkaskaden bereitstellt. Durch die Abbildung von Zufallszahlen auf die so erhaltenen Verteilungen können die eigentlichen physikalischen Abläufe sehr schnell und einfach behandelt werden. Im Folgenden wird auf die Ermittlung einiger für *NLSOP* wichtiger Statistiken eingegangen.

### 5.2.1 Implantationsprofil und nukleare Bremskraft

Abbildung 5.2 zeigt die von *TRIM 92* ermittelte nukleare Bremskraft sowie das Kohlenstoffkonzentrationsprofil für die in dieser Arbeit verwendeten Parameter. Die gestrichelte Linie markiert das Ionenprofilmaximum bei  $500\text{ nm}$ . Sputtereffekte und Abweichungen aufgrund der kontinuierlich veränderten Targetzusammensetzung während der Hochdosisimplantation werden von *TRIM* allerdings nicht berücksichtigt. Die Profile werden von *TRIM* selbst in separate Dateien geschrieben. Tauscht man die Kommata (Trennung von Ganzzahl und Kommastelle) durch Punkte aus, so kann *NLSOP* diese Dateien auslesen und die Profile extrahieren.

In Abbildung 5.3 ist das für diese Simulation verwendete, von einer neueren *TRIM*-Version (*SRIM 2003.26*) berechnete Implantationsprofil abgebildet. Dieses Profil verwendet *NLSOP* zum Einbau des Kohlenstoffs. Das Implantationsmaximum liegt hier bei ungefähr  $530\text{ nm}$ . Auffällig ist eine Verschiebung des Maximums um  $30\text{ nm}$  zu dem Maximum aus Abbildung 5.2. Dies ist auf einen Unterschied in der Berechnung der elektronischen Bremskraft in den zwei *TRIM*-Versionen zurückzuführen.

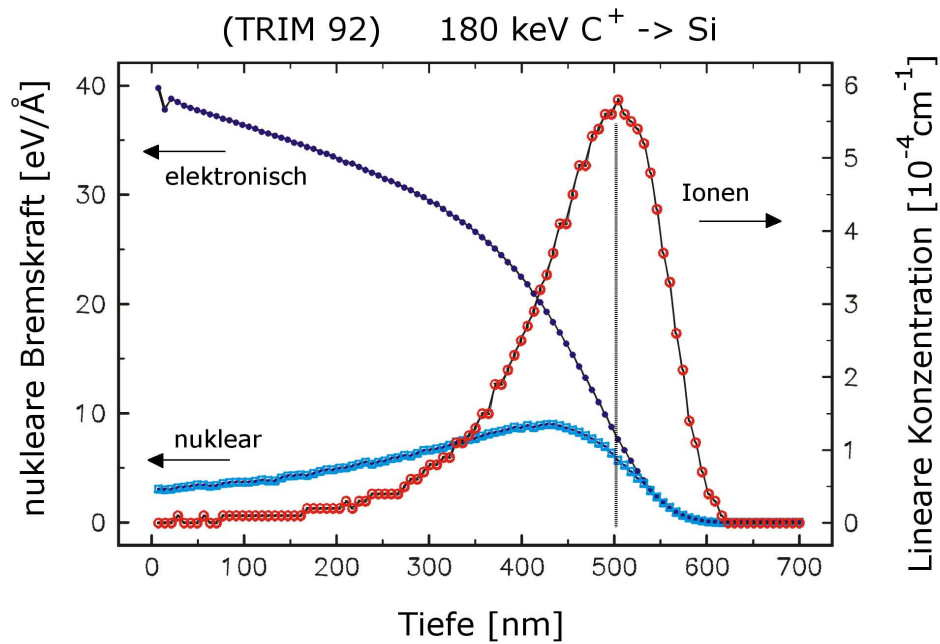


Abbildung 5.2: Von *TRIM 92* ermittelte Reichweitenverteilung und tiefenabhängige Bremskräfte für  $180 \text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ .

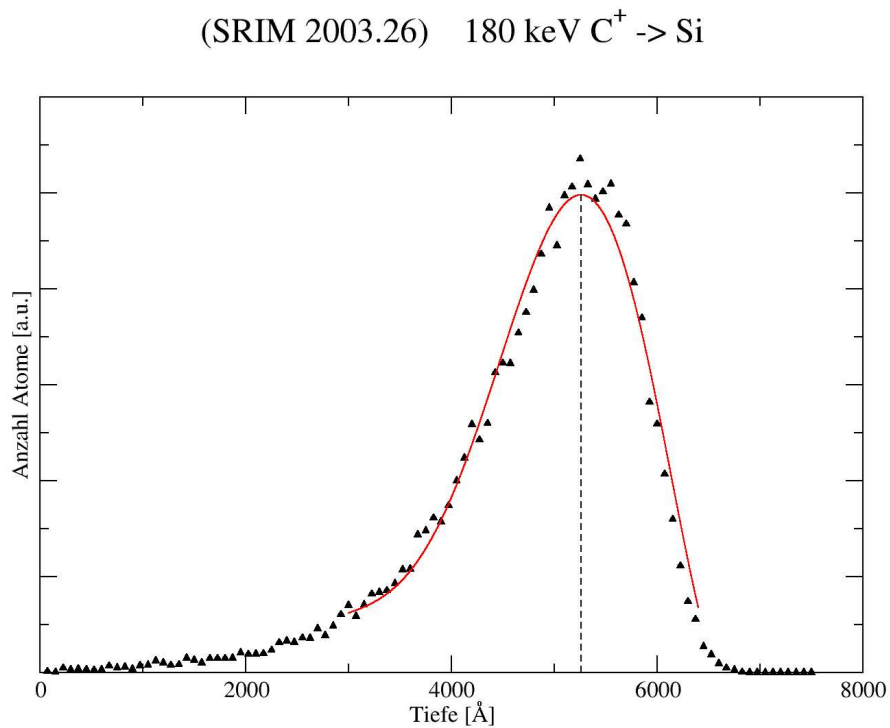


Abbildung 5.3: Durch *SRIM 2003.26* berechnetes Implantationsprofil für  $180 \text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ .

### 5.2.2 Durchschnittliche Anzahl der Stöße der Ionen und Energieabgabe

Weiterhin bietet *TRIM* die Möglichkeit eine Datei Namens *COLLISION.TXT* anzulegen, in der sämtliche Stoßkaskaden protokolliert sind. Zu jedem Stoß sind Koordinaten und Energieübertrag angegeben. Mit dem Programm *parse\_trim\_collision* (Anhang A.6) kann diese Datei ausgewertet werden. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse sollen im Folgenden diskutiert werden. Für diese Statistik wurden die Stoßkaskaden von 8300 implantierten Ionen verwendet.

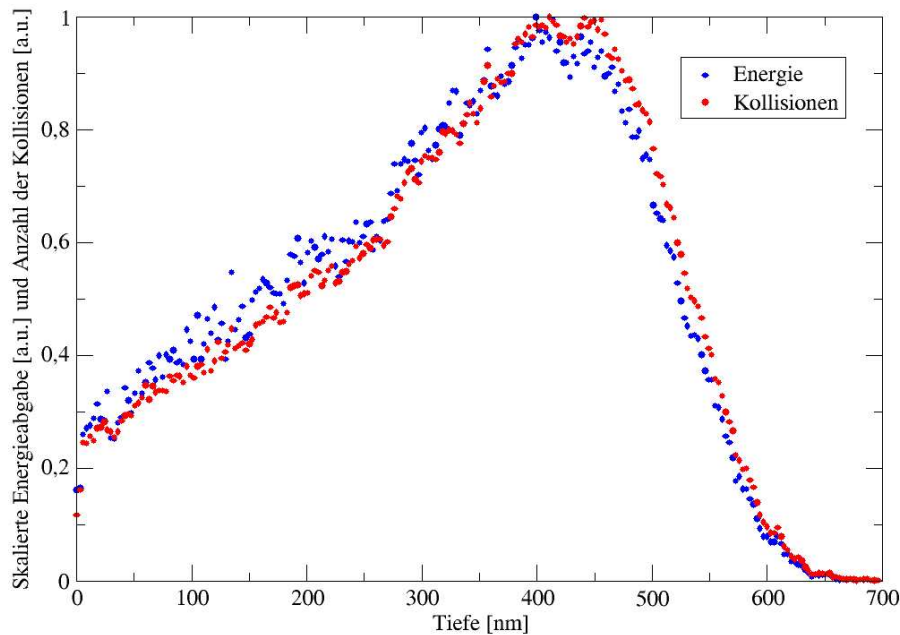


Abbildung 5.4: Auf das Maximum 1 skalierte tiefenabhängige Energieabgabe (blau) und Anzahl der Kollisionen (rot).

Abbildung 5.4 zeigt die nukleare Energieabgabe und die Anzahl der Stöße von Ionen und Recoils in Abhängigkeit von der Tiefe. Beide Graphen wurden auf das selbe Maximum skaliert. Man erkennt, dass diese nahezu identisch sind. Die durchschnittliche Energieabgabe pro Stoß ist also ungefähr konstant und unabhängig von der Tiefe. Dies ist der Grund für die Wahl eines konstanten Beitrags der ballistischen Amorphisierung in Abschnitt 5.1.2. Jeder Stoß überträgt durchschnittlich einen konstanten Energiebetrag im Falle einer Kollision und trägt somit einen konstanten Anteil zur Amorphisierungswahrscheinlichkeit bei.

Desweiteren ist nun die Wahrscheinlichkeit für eine Kollision in einer bestimmten Tiefe bekannt. Sie ist proportional zur Anzahl der Kollisionen in dieser Tiefe. Durch die höhere Anzahl der Stöße im Maximum der nuklearen Bremskraft steigt die Wahrscheinlichkeit für ein Ion in diesem Tiefenbereich zu amorphisieren.

Zum Vergleich zeigt Abbildung 5.5 die von *SRIM 2003.26* selbst berechnete nukleare Bremskraft. Wie zu erwarten entspricht sie ungefähr dem Verlauf der in Abbildung 5.4 gezeigten Energieabgabe. Daher wird dieses Profil für *NLSOP* zur Verteilung der Kollisionen im Target verwendet.

Ein implantiertes Ion und dadurch entstandene Recoils verursachen durchschnittlich eine Anzahl von 1088 Kollisionen, bis alle Teilchen bis auf Energien unterhalb der Verlagerungs-

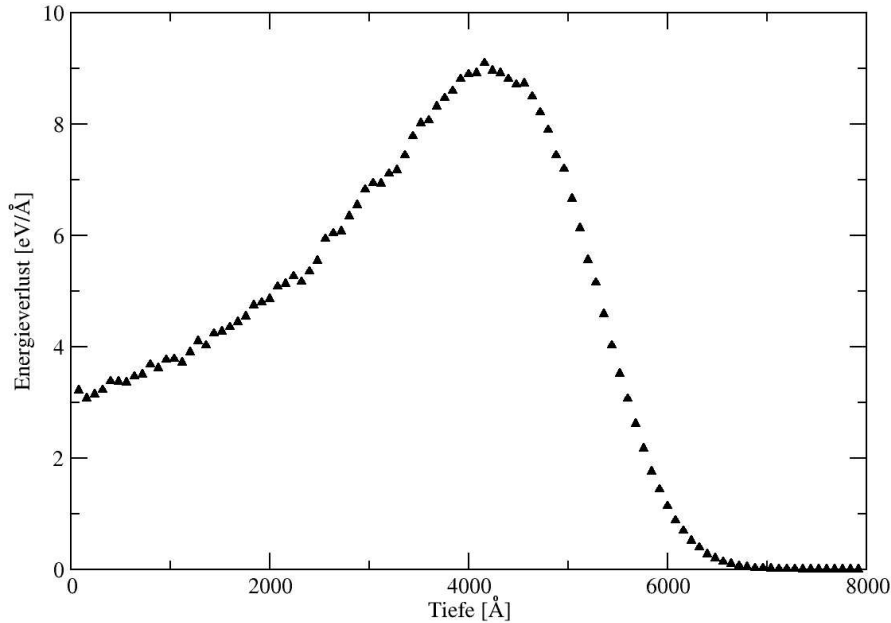


Abbildung 5.5: Durch *SRIM 2003.26* berechneter nuklearer Energieverlust für  $180 \text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ .

energie für *Si* Atome von  $15 \text{ eV}$  [17] abgesunken sind. Die Zahl der getroffenen Würfel, also Volumina in denen ein Ion mindestens eine Kollision verursacht, ist sehr viel geringer. Das Auswertungsprogramm *parse\_trim\_collision* zählt durchschnittlich 75 getroffene Volumina pro implantiertem Ion. Genauer gesagt zählt das Programm die Anzahl der Ebenen mit  $3 \text{ nm}$  Höhe in denen Kollisionen verursacht werden. Teilchenbahnen parallel zur Targetoberfläche verfälschen diese Zahl. Außerdem werden mehrmalige Durchläufe der Ebenen nicht mitgezählt. Man sollte weiterhin beachten, dass Volumina in denen selbst nur eine Kollision stattfindet mitgezählt werden, was allerdings nur sehr unwahrscheinlich zur Amorphisierung führen wird. Daher wird eine Trefferzahl von  $h = 100$  für die Simulation angenommen.

### 5.3 Simulationsalgorithmus

Die Simulation kann in die drei Abschnitte Amorphisierung/Rekristallisation, Fremdatomeinbau und Diffusion/Sputtern gegliedert werden. Die beschriebenen Prozeduren werden sequentiell abgearbeitet und beliebig oft durchlaufen. Es wird mit einem komplett kristallinen und kohlenstofffreien Target gestartet.

Wenn, wie in Version 2 der Simulation, pro Durchlauf die Anzahl der simulierten Stoßkaskaden gleich der Anzahl der getroffenen Volumina ist, entspricht ein Durchlauf genau einem implantierten Ion. Im Folgenden sei die Anzahl der Würfel in  $x$ ,  $y$  und  $z$  Richtung  $X$ ,  $Y$  und  $Z$ . Eine Anzahl von  $N$  Durchläufen ist damit äquivalent zur Dosis  $D$ , die wie folgt gegeben ist:

$$D = \frac{N}{XY(3 \text{ nm})^2}. \quad (5.5)$$

5.3.1 Amorphisierung und Rekristallisation

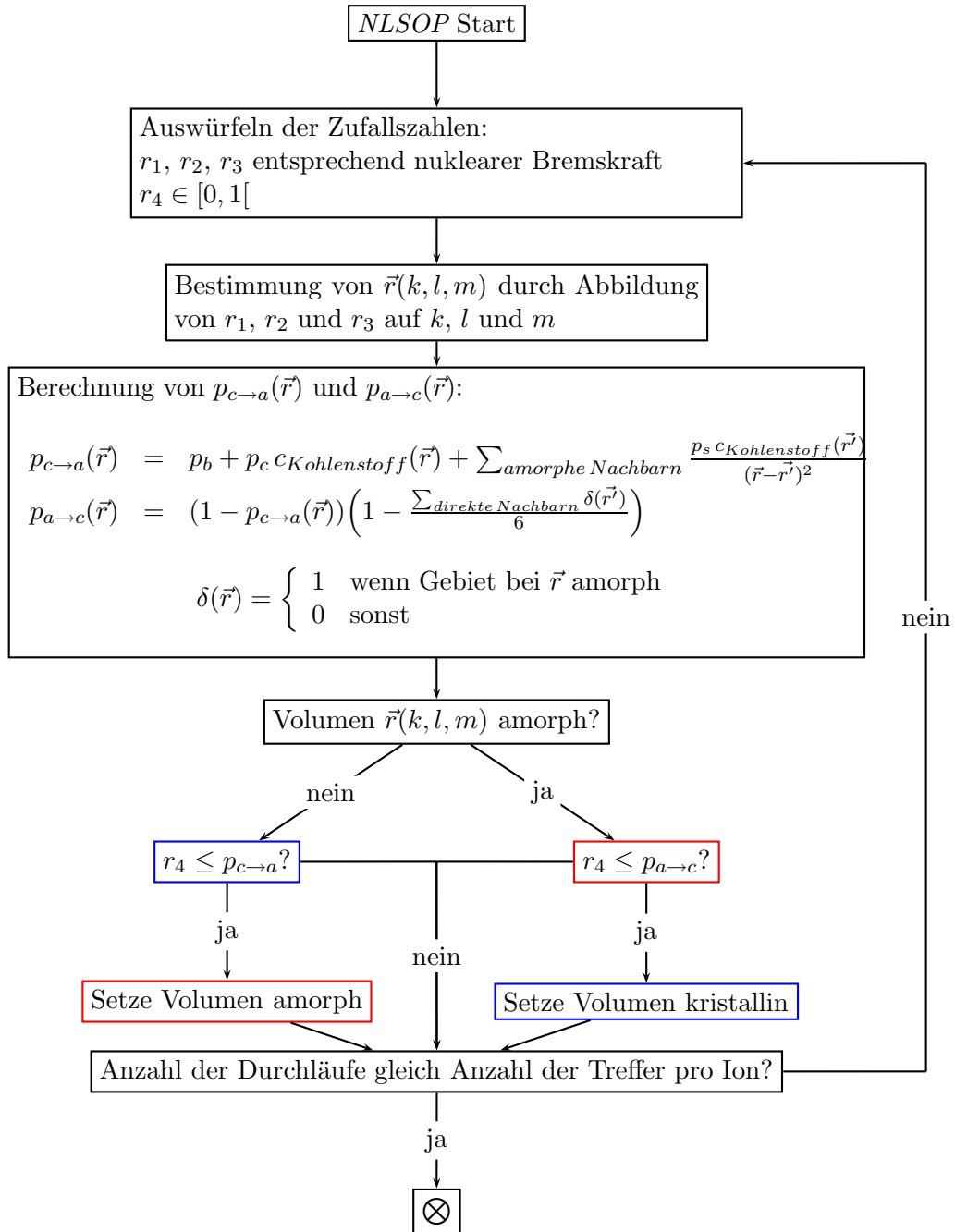


Abbildung 5.6: NLSOP Ablaufschema Teil 1: Amorphisierung und Rekristallisation.

Im ersten Schritt sollen die Kollisionen und die daraus resultierende Amorphisierung beziehungsweise Rekristallisation simuliert werden. Das zugehörige Ablaufschema ist in Abbildung 5.6 gezeigt. Zunächst muss das gestoßene Volumen ausgewählt werden. Die Stöße sind bezüg-

lich der  $x$  und  $y$  Richtung statistisch isotrop verteilt. Es werden zwei gleichverteilte Zufallszahlen  $r_1 \in [0, X[$  und  $r_2 \in [0, Y[$  nach (2.5) ausgewürfelt. Diese werden auf die ganzen Zahlen  $k$  und  $l$  abgebildet und bestimmen die Lage des getroffenen Volumens in der  $x, y$ -Ebene. Eine weitere, mit Hilfe der Verwerfungsmethode aus Abschnitt 2.1.2 erzeugte Zufallszahl  $r_3 \in [0, Z[$  entsprechend der nuklearen Bremskraft, abgebildet auf die ganze Zahl  $m$ , legt die Tiefe des getroffenen Volumens fest. Somit hat man den Ortsvektor  $\vec{r}(k, l, m)$  für den Amorphisierungs- oder Rekristallisationsvorgang bestimmt. Nun kann die Amorphisierungs- beziehungsweise Rekristallisationswahrscheinlichkeit nach (5.1) beziehungsweise (5.3) berechnet werden. Eine weitere Zufallszahl  $r_4 \in [0, 1[$  entscheidet dann über einen eventuellen Statuswechsel des Volumens. Es gibt folgende Möglichkeiten:

1. Volumen  $\vec{r}(k, l, m)$  ist kristallin.  
Wenn  $r_4$  kleiner gleich  $p_{c \rightarrow a}$  ist, wechselt der Status zu amorph. Ansonsten bleibt der Status unverändert.
2. Volumen  $\vec{r}(k, l, m)$  ist amorph.  
Wenn  $r_4$  kleiner gleich  $p_{a \rightarrow c}$  ist, wechselt der Status zu kristallin. Ansonsten bleibt der Status unverändert.

Der gesamte Amorphisierungs- und Rekristallisationsschritt wird für die Anzahl der getroffenen Volumina pro implantierten Ion  $h$  wiederholt.

### 5.3.2 Einbau des implantierten Kohlenstoffs ins Target

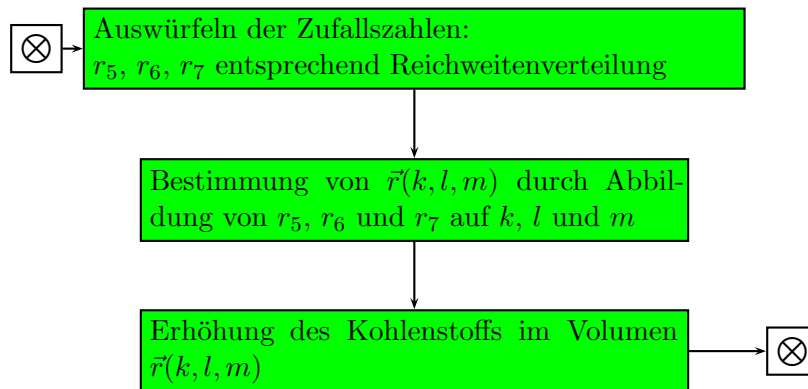


Abbildung 5.7: NLSOP Ablaufschema Teil 2: Einbau des Kohlenstoffs.

Nachdem das Ion die Stoßprozesse beendet hat, kommt es im Target zur Ruhe. Die Wahl des Volumens, in das das Ion eingebaut wird, ist analog zur Wahl der Ermittlung des zu stoßenden Volumens. Lediglich die Implantationstiefe wird durch eine Zufallszahl bestimmt, deren Wahrscheinlichkeitsverteilung dem Konzentrationsprofil entspricht. Zur Erzeugung der entsprechenden Zufallszahl wird wieder die in 2.1.2 beschriebene Verwerfungsmethode benutzt. In dem ausgewählten Würfel  $\vec{r}(k, l, m)$  wird der Zähler für den Kohlenstoff um eins erhöht.

5.3.3 Diffusion und Sputtern

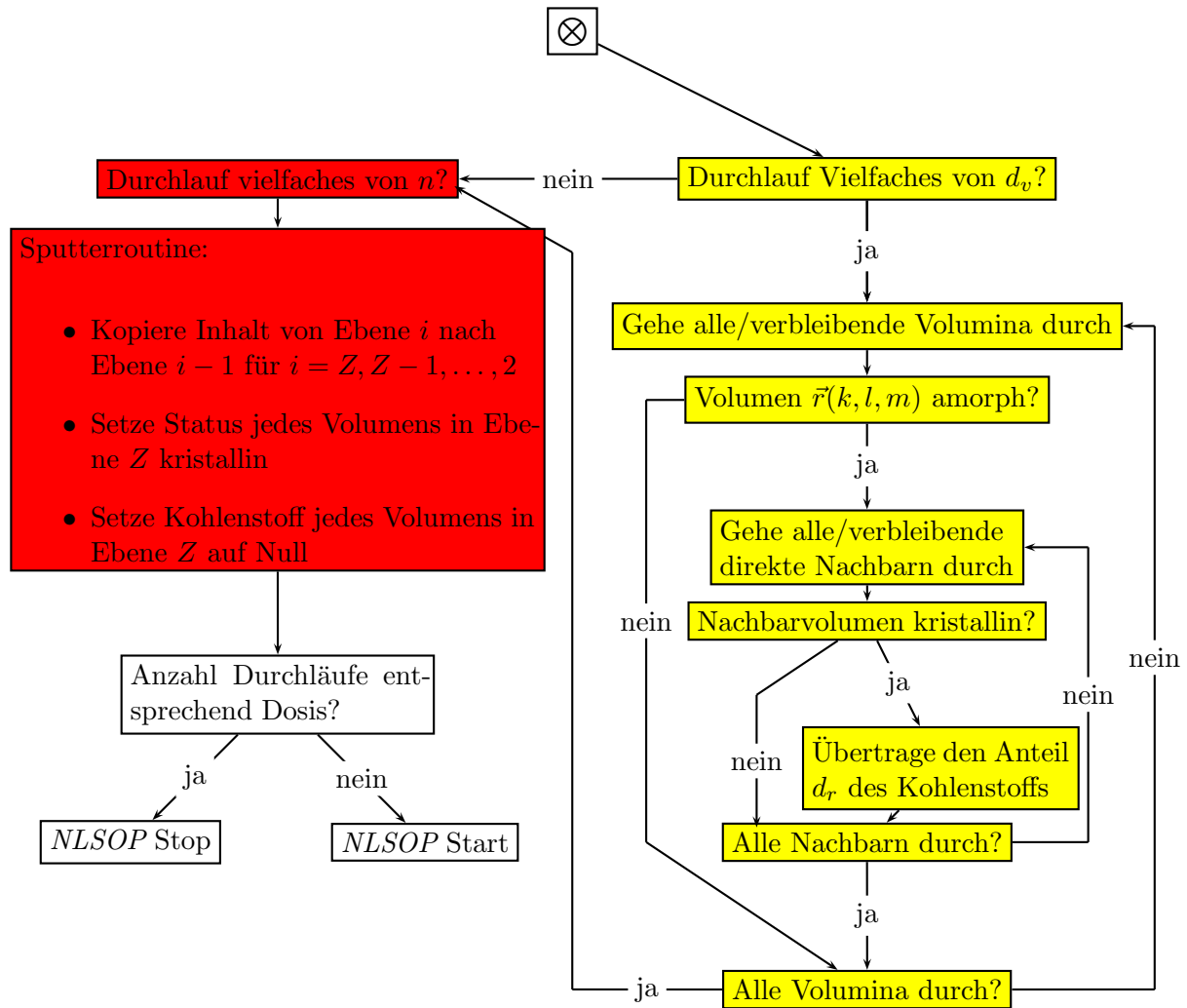


Abbildung 5.8: NLSOP Ablaufschema Teil 2: Diffusion (gelb) und Sputtervorgang (rot).

Im Folgenden wird auf die Realisierung der Diffusion eingegangen. Die Simulation geht der Reihe nach alle Volumina durch. Im Falle eines amorphen Volumens werden aus direkt anliegenden kristallinen Volumina ein Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs abgezogen und zu dem amorphen Volumen addiert. Da nur ganze Atome übertragen werden können, wird der Betrag auf die nächst kleinere ganze Zahl abgerundet. Dieser Diffusionsvorgang wird alle  $d_v$  Schritte ausgeführt.

Hier sei angemerkt, dass die Simulation prinzipiell auch Diffusion von Kohlenstoff innerhalb kristalliner Volumina behandeln kann. Die erste Idee war, dass Kohlenstoff in kristalline Gebiete diffundieren kann, die bereits einen großen Anteil ihres Kohlenstoffs an einen amorphen Nachbarn abgegeben haben. Da jedoch das Konzentrationsprofil durch Diffusionsprozesse nicht verändert wird [45], wurde die rein kristalline Diffusion in  $z$ -Richtung ausgeschlossen.

Eine Vorzugsrichtung der Diffusion ist unphysikalisch, weshalb die gesamte Diffusion innerhalb kristalliner Gebiete in den folgenden Simulationen ausgeschlossen wurde. Als Relikt bleibt die Option die Diffusion auch vom Kristallinen ins Amorphe in  $z$ -Richtung auszuschalten. Setzt sich die Diffusionsrate aus einem Beitrag  $d_r^{x,y}$  für Diffusion in der Ebene und einem Beitrag  $d_r^z$  für Diffusion in  $z$ -Richtung zusammen, so kann durch diese Option  $d_r^z = 0$  gesetzt werden.

Die Sputterroutine wird nach der Dosis, die einem Abtrag von einer Ebene von Zellen ( $3\text{ nm}$ ) entspricht, ausgeführt und bewirkt, dass diese oberste Ebene entfernt wird. Der Zusammenhang zwischen Sputterrate  $S$  und Anzahl der Simulationsdurchläufe  $n$  ist demnach wie folgt gegeben:

$$S = \frac{(3\text{ nm})^3 XY}{n} \quad . \quad (5.6)$$

Nach  $n$  Simulationsdurchläufen wird eine kohlenstofffreie, kristalline Ebene von unten her eingeschoben. Der Inhalt der Ebene  $i$  wird auf die Ebene  $i - 1$  (für  $i = Z, Z - 1, \dots, 2$ ) überschrieben. Die Information der obersten Ebene  $i = 1$  geht dabei verloren. Diese entspricht der abgetragenen Ebene. Die Ebene  $i = Z$  erhält kristallinen Status und die Kohlenstoffkonzentration Null.

Dies macht allerdings nur Sinn, wenn das Implantationsprofil und die nukleare Bremskraft für die Ebenen tiefer  $Z$  auf Null abgefallen sind, um kristalline, kohlenstofffreie Ebenen zu garantieren. Daher wird das Sputtern nur in Simulationen über große Tiefenbereiche berücksichtigt.

Die Sputterrate kann durch *TRIM* beziehungsweise Messungen des Kohlenstoffprofils bestimmt werden. Bei den gegebenen Bedingungen werden ungefähr  $50\text{ nm}$  des Targets bei einer Dosis von  $4,3 \times 10^{-17}\text{ cm}^{-2}$  abgetragen [33].

## 5.4 Simulierte Tiefenbereiche

Wie bereits erwähnt wurden zwei verschiedene Versionen des Programms entwickelt. Sie simulieren zwei unterschiedlich große Tiefenbereiche, welche im Folgenden Simulationsfenster genannt werden.

Da in erster Linie der Selbstorganisationsprozess der lamellaren Ausscheidungen an der vorderen Grenzfläche der amorphen  $\text{SiC}_x$ -Schicht simuliert werden soll, behandelt die erste Version den Tiefenbereich von der Oberfläche bis zum Beginn der durchgehend amorphen Schicht. Dies entspricht einer Tiefe von ungefähr  $300\text{ nm}$  und somit einer Anzahl von  $Z = 100$  Würfeln in  $z$ -Richtung.

Wie in Abbildung 5.2 gut zu erkennen ist, kann in diesem Tiefenbereich sowohl die Reichweitenverteilung, als auch die nukleare Bremskraft durch eine von der Tiefe linear abhängige Funktion genähert werden. Daher ergeben sich Änderungen zu den im vorigen Abschnitt erklärten Methoden zur Wahl des Volumens, in dem ein Stoßprozess beziehungsweise eine Konzentrationserhöhung stattfindet.

Die Zufallszahl  $z$ , die auf die Tiefenkoordinate  $m$  abgebildet wird, muss der Verteilung  $p(z)dz = (sz + s_0)dz$  genügen. Dabei beschreiben  $s$  und  $s_0$  die linear genäherte nukleare Bremskraft. Die Transformation wird wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben durchgeführt. Dasselbe betrifft die Wahl der Tiefenkoordinate für den Einbau des Kohlenstoffatoms. Anstatt der Wahrscheinlichkeitsverteilung der nuklearen Bremskraft entsprechend, wird eine Verteilung entsprechend dem linear genäherten Implantationsprofil verwendet. Außerdem wird nicht nach jedem Durchlauf ein Ion im Simulationsbereich zur Ruhe kommen. Da das Maximum



der Reichweitenverteilung sehr viel tiefer liegt, werden die meisten Ionen außerhalb des Simulationsfensters liegen bleiben. Daher wird immer nur dann ein Ion eingebaut, wenn der im Simulationsbereich vorhandene Kohlenstoff  $n_c$  kleiner als die Anzahl der Durchläufe  $n$  multipliziert mit dem Verhältnis der Fläche der Kohlenstoffverteilungskurve  $c_C(z)$  bis  $300\text{ nm}$  zur Fläche der gesamten Kohlenstoffverteilungskurve ist.

$$n_c < n \frac{\int_0^{300\text{nm}} c_C(z) dz}{\int_0^{\infty} c_C(z) dz} \quad (5.7)$$

Da sowohl die Reichweitenverteilung, als auch die nukleare Bremskraft in Ebenen grösser  $Z$  ungleich Null ist, kann Sputtern nicht beachtet werden. Der Diffusionsprozess ist uneingeschränkt möglich. In der ersten Version wurde der Einfluss der amorph/kristallinen Struktur direkter Nachbarn auf die Rekristallisation nach (5.3) noch nicht beachtet. Die Rekristallisationswahrscheinlichkeit ergibt sich hier aus (5.2). Die Rechenzeit einer Simulation mit  $3 \times 10^7$  Durchläufen, einem  $64 \times 64 \times 100$  großem Target, einem Treffer pro Durchlauf und Diffusion alle 100 Schritte, beträgt auf einem  $900\text{ Mhz Pentium 3}$  ungefähr 3 Stunden.

In der zweiten Version wird die gesamte Implantationstiefe simuliert. Das Simulationsfenster geht von  $0 - 700\text{ nm}$ . Dies entspricht einer Anzahl  $Z = 233$  von Würfeln in  $z$ -Richtung.

Die Tiefenkoordinaten für den Stoßprozess und die Kohlenstoffinkorporation werden, wie in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, nach der Verwerfungsmethode entsprechend dem nuklearen Bremskraftprofil und der Reichweitenverteilung gewonnen.

Da sowohl der nukleare Energieverlust als auch die Kohlenstoffkonzentration in Ebenen grösser  $Z$  auf Null abgesunken ist, kann die Sputteroutine ausgeführt werden. Der Diffusionsprozess ist ebenfalls uneingeschränkt möglich. Auf dem selben Rechner benötigt eine Simulation für ein Target der oben genannten Ausdehnung, einer Anzahl von 100 Treffern pro Ion und  $160 \times 10^6$  Schritten mit Diffusion alle  $10^6$  Schritte ungefähr 3 Tage.

## 5.5 Test der Zufallszahlen

Die Simulation kann auf zwei verschiedene Arten die benötigten Zufallszahlen beziehen. Die erste Möglichkeit ist das Lesen der Zufallszahlen aus einer speziellen, vom Betriebssystem bereitgestellten Zeichendatei `/dev/urandom`. Das Betriebssystem generiert aus dem Rauschen einiger Treiber, zum Beispiel den Treibern für Tastatur, Maus und Festplatte einen sogenannten "Vorrat an Entropie". Eine Zufallszahl wird durch Anwendung des *SHA*-Algorithmus [48] (kurz für **S**ecure **H**ash **A**lgorithm) auf den Inhalt des Entropievorrates erzeugt. Eine zweite Möglichkeit ist die Verwendung des Zufallszahlengenerators der Standardbibliothek der Programmiersprache *C*. Dieser generiert die Zufallszahlensequenz nach der im Abschnitt 2.1.1 vorgestellten linearen Kongruenzmethode. Das zuletzt genannte Verfahren ist damit unabhängig vom Betriebssystem.

Für vernünftige Ergebnisse muss die Qualität der Zufallszahlen gesichert sein. Es gibt viele statistische Tests um eine Zahlenfolge auf ihre Verteilung beziehungsweise Zufälligkeit zu überprüfen. Die am häufigsten verwendeten Testverfahren sind der  $\chi^2$ -Test und der Kolmogorov-Smirnov-Test [14].

Im Folgenden soll nur kontrolliert werden, dass für gleichverteilte Zufallszahlen keine lokalen Anhäufungen von Zahlen existieren. Desweiteren werden die Methoden zur Erzeugung spezieller Wahrscheinlichkeitsverteilungen durch Vergleich der Häufigkeit auftretender Zufallszahlen mit dem gewünschten Verlauf überprüft.

Dazu werden für die unterschiedlichen Verteilungen jeweils 10 Millionen Zufallszahlen zwischen 0 und 232 erzeugt und auf die nächst kleinere ganze Zahl abgerundet. Ein einfaches Scriptprogramm (*random\_parse.sh*, Anhang A.6) zählt die Häufigkeit der einzelnen Zufallszahlen in der Zufallszahlensequenz.

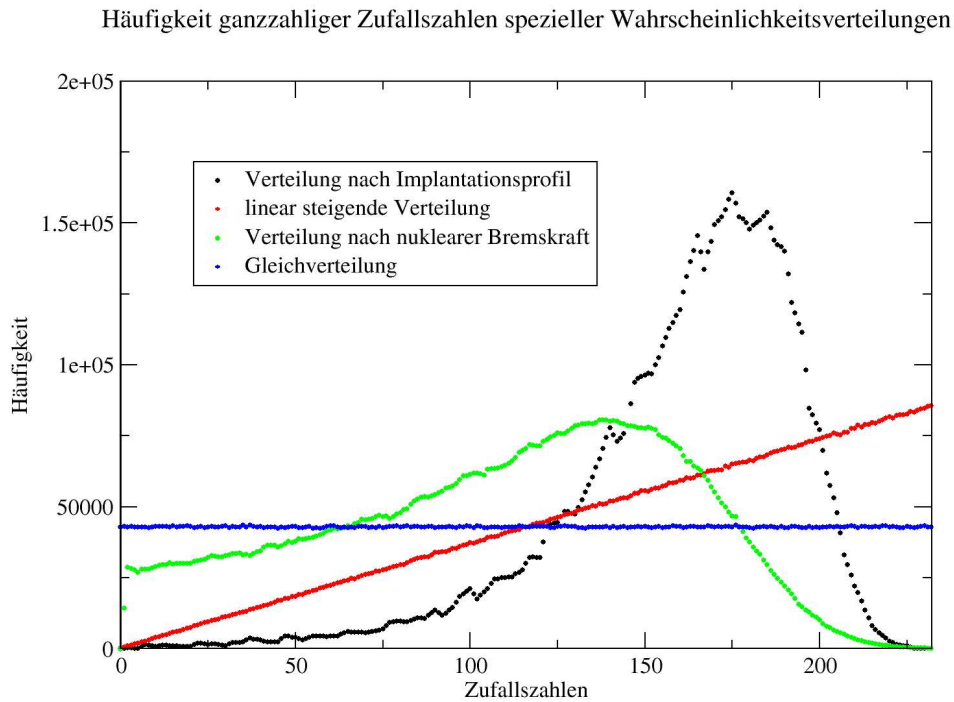


Abbildung 5.9: Häufigkeit ganzzahliger Zufallszahlen unterschiedlicher Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Für jede Verteilung wurden 10 Millionen Zufallszahlen ausgewürfelt.

Abbildung 5.9 zeigt die Häufigkeit von Zufallszahlen zwischen 0 und 232, abgerundet auf die nächst kleinere ganze Zahl, für unterschiedliche Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Die blauen Punkte zeigen die Gleichverteilung nach (2.5). Man erkennt keine lokalen Anhäufungen. Die roten Punkte zeigen die Häufigkeit der Zufallszahlen bei Verwendung einer linear steigenden Wahrscheinlichkeitsverteilung wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben. Dabei wurde  $a = 1$ ,  $b = 0$  und  $Z = 233$  gewählt. Wie erwartet zeigen die Punkte einen linearen Verlauf. Die Häufigkeiten, der mit der Verwerfungsmethode erzeugten Zufallszahlen entsprechend der nuklearen Bremskraft (grün) und dem Implantationsprofil (schwarz), stimmen sehr gut mit den Profilen in Abbildung 5.2 überein.

# Kapitel 6

## Ergebnisse

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Simulation vorgestellt. Dabei werden Simulationsergebnisse mit experimentellen Ergebnissen aus [10] verglichen.

Durch Variation der Simulationsparameter wird darüber hinaus der in Kapitel 4 vorgestellte Bildungsmechanismus der amorphen  $SiC_x$ -Phasen in  $Si$  untersucht. Hierbei wird vor allem der Einfluss einzelner Simulationsparameter, wie Diffusion und Stärke der Druckspannungen, auf den Selbstorganisationsprozess betrachtet.

Unter der Annahme der Richtigkeit des Modells und seiner Umsetzung können sehr leicht Aussagen über die Struktur und Zusammensetzung an jedem beliebigen Ort des Targets während des Ordnungsprozesses gemacht werden. Diese Information ist experimentell schwer zugänglich.

Zunächst werden die Ergebnisse der Simulationen bis 300 nm Tiefe vorgestellt. Im Anschluss werden die Simulationen über den gesamten Implantationsbereich diskutiert.

### 6.1 Simulation bis 300 nm Tiefe

Erste Simulationen werden mit *NLSOP* Version 1 in einem begrenzten Tiefenbereich durchgeführt um festzustellen, ob mit dem Modell und der verwendeten Monte-Carlo-Implementierung überhaupt geordnete Lamellenstrukturen reproduziert werden können und welche Prozesse dabei entscheidend sind. Dafür ist eine genaue Kenntnis der Dosis nicht wichtig. Desweiteren kommt es hier nicht auf die exakte Tiefenposition der Ausscheidungen an, weshalb Sputtereffekte vernachlässigt werden können.

In jedem Durchlauf wird nur ein Stoßprozess, der zur Amorphisierung beziehungsweise Rekristallisation eines Targetvolumens führen kann, betrachtet. Diffusion des Kohlenstoffs von kristallinen in amorphe Gebiete findet statt. Sputtereffekte können wegen fehlender Information über Kohlenstoffgehalt und die amorph/kristalline Struktur in tieferen Ebenen nicht beachtet werden.

#### 6.1.1 Erste Simulationsdurchläufe

In ersten Simulationen wird untersucht, über welche Entfernung die von den amorphen Nachbarzellen ausgehenden Spannungen berücksichtigt werden müssen. Ist ein Einfluss der weiter entfernten Zellen vernachlässigbar, so lässt sich ein Abbruchradius für die Behandlung der Spannungen definieren. Ein Abbruchkriterium ist zum einem wegen der Behandlung eines in

$x - y$ -Richtung unendlich ausgedehnten Festkörpers, realisiert durch periodische Randbedingungen, und zum anderen wegen schnellerer Berechnung der Druckspannungen nötig.

Eine Erhöhung des Abbruchradius von  $r = 5$  auf  $r = 10$  Volumina, was einer Länge von 15 beziehungsweise 30 nm entspricht, zeigt eine größere Menge an amorphen Gebieten. Die lamellare Ordnung der Ausscheidungen steigt jedoch nicht an. Dies ist in Abbildung 6.1 a) und b) zu erkennen. Aus diesem Grund wurde der Abbruchradius für alle weiteren Simulationen auf  $r = 5$  Volumen gesetzt.

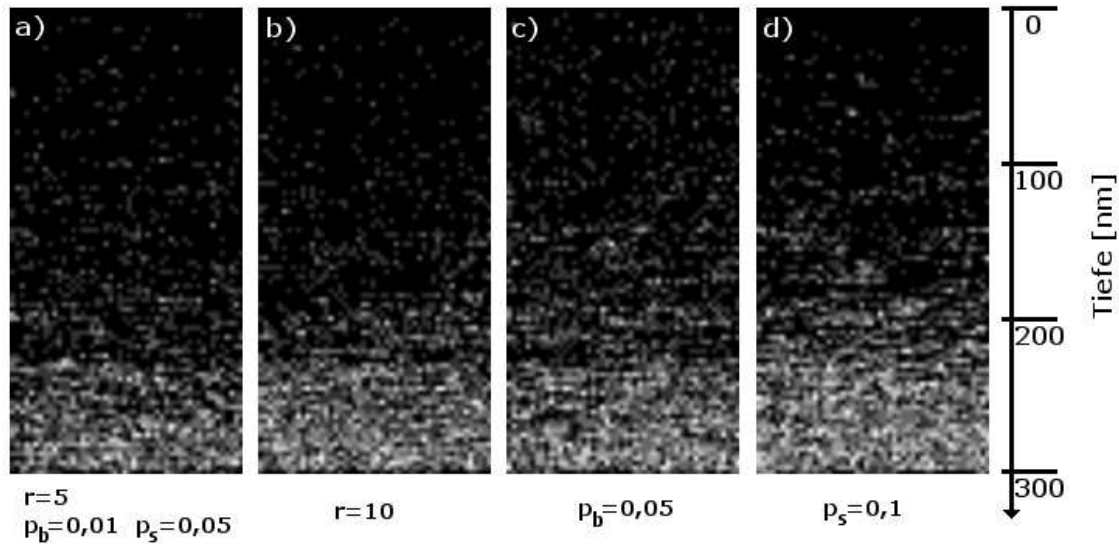


Abbildung 6.1: Cross-Section verschiedener Simulationsergebnisse. Simulationsparameter (wenn nicht anders angegeben):  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,05$ ,  $p_s = 0,05$ ,  $r = 5$ ,  $d_v = 100$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $s = 3 \times 10^5$ . Variierte Parameter: b)  $r = 10$ , c)  $p_b = 0,05$ , d)  $p_s = 0,1$ .

Die Simulationen wurden zunächst mit sehr geringen Schrittzahlen (zwischen 2 und  $4 \times 10^5$  Schritten) durchgeführt. Voraussetzung für die Entstehung amorpher Gebiete bei dieser geringen Schrittzahl sind hohe Werte für die zur Amorphisierung beitragenden Simulationsparameter  $p_b$ ,  $p_c$  und  $p_s$  (Größenordnungsbereich  $10^{-2}$ ). Die Erhöhung der Parameter für die ballistische Amorphisierung (Abbildung 6.1 c)) und selbst die der spannungsunterstützten Amorphisierung (Abbildung 6.1 d)) äußern sich in einer größeren Menge an amorphen Gebieten. Eine klare Lamellenbildung ist unter diesen Bedingungen nicht zu erkennen.

Macht man die Parameter jedoch sehr viel kleiner und erhöht im Gegenzug die Schrittzahl, so erwartet man, dass zufällig amorphisierte Zellen ohne amorphe Nachbarn mit aller Wahrscheinlichkeit im Falle eines Stoßes rekristallisieren werden. Ein amorphes Volumen, das lateral selbst eine amorphe Nachbarschaft hat, wird sich selbst und die amorphen Nachbarn stabilisieren. Dies führt zu einer Stabilisierung und geförderten Ausbildung lamellarer amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen. Für den Selbstorganisationsprozess sind daher eine höhere Schrittzahl und kleinere Werte der erwähnten, zur Amorphisierung beitragenden Simulationsparameter gefordert. Das System erreicht so nicht bereits nach einer kurzen Schrittfolge seine Endkonfiguration, die stark von der Statistik der einzelnen Amorphisierungsprozesse geprägt ist. Anstelle dessen stellt sich im System sukzessive eine Ordnung ein, die unter den gegebenen Regeln möglichst stabil ist.

Die Notwendigkeit der niedrigen Amorphisierungsparameter, welche eine frühe komplette Amorphisierung des Targets verhindern, steht im Einklang mit den Beobachtungen aus [34]. Aufgrund der niedrigen nuklearen Bremskraft der leichten Kohlenstoffionen erwartet man bei den hohen Targettemperaturen keine Amorphisierung. Die Ursache des stattfindenden Amorphisierungsprozesses liegt an der erhöhten Kohlenstoffkonzentration mit steigender Dosis. Es handelt sich um kohlenstoffinduzierte Amorphisierung.

### 6.1.2 Vergleich von Simulationsergebnis und experimentell beobachteter Struktur

Im Folgenden wurde für Simulationen mit  $X, Y = 50$  beziehungsweise  $X, Y = 64$  die Anzahl der Durchläufe auf 20 beziehungsweise  $30 \times 10^6$  gesetzt. Sieht man über die Tatsache hinweg, dass bei einem Durchlauf nicht die für ein Ion durchschnittliche Anzahl der Stöße ausgeführt wird, kann eine Äquivalenzdosis angegeben werden. Betrachtet man einen Durchlauf als ein implantiertes Ion, so ergibt das nach (5.5) eine Dosis von 0,89 beziehungsweise  $0,81 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ .

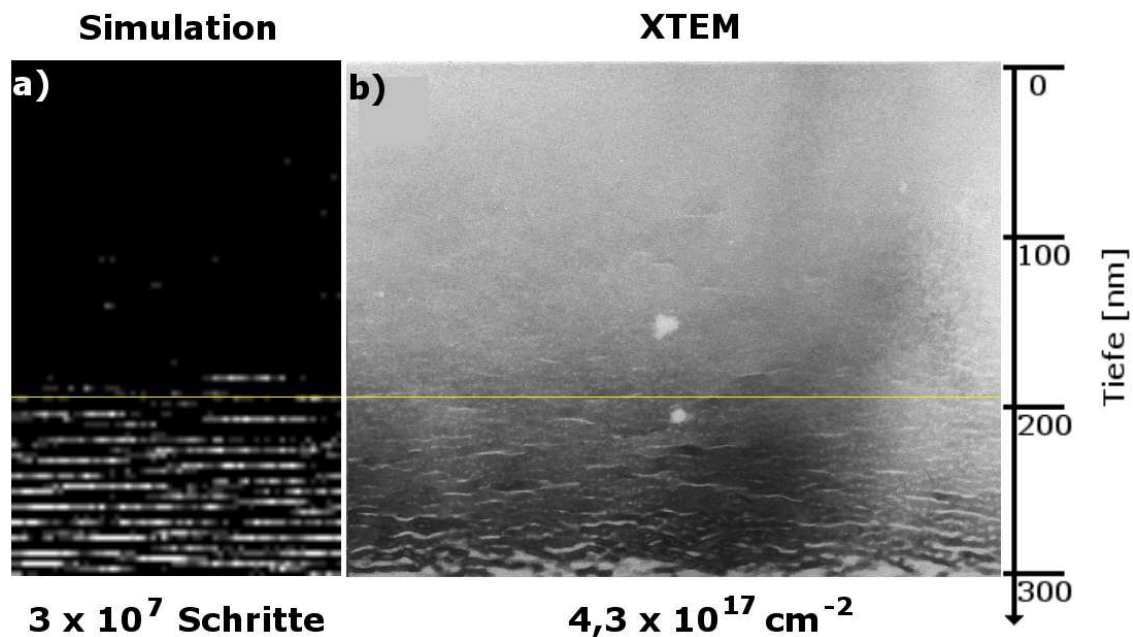


Abbildung 6.2: Vergleich von a) Simulationsergebnis und b) experimentellen Ergebnis einer bei  $150^\circ\text{C}$  mit  $180\text{keV } C^+$  implantierten *Si*-Probe mit einer Dosis von  $4,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ . Simulationsparameter:  $s = 3 \times 10^7$ ,  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $p_s = 0,003$ ,  $d_v = 10$ ,  $d_r = 0,5$ .

Zunächst wird nach einem Satz von Parametern gesucht, der die experimentellen Ergebnisse reproduziert. Davon ausgehend können dann einzelne Parameter variiert und ihre Auswirkungen studiert werden.

Tatsächlich können Parameter eingestellt werden, die die experimentell gefundene Ordnung zufriedenstellend reproduzieren. Abbildung 6.2 zeigt den Vergleich zwischen Simulati-

onsergebnis und dem experimentellen Befund aus Abbildung 3.1. Wie man erkennt, ist die Simulation in der Lage lamellare Strukturen zu erzeugen. Diese sind im Tiefenbereich von 200 bis 300 nm zu erkennen. Dies entspricht etwa dem Tiefenbereich, in dem auch mit Cross-Section TEM lamellare Ausscheidungen für eine Dosis von  $4,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  bei 180 keV  $C^+$ -Implantation gefunden werden. Durch einfaches Abzählen der Lamellen in diesem Tiefenbereich am Rand der TEM-Aufnahme beziehungsweise des Simulationsergebnisses erkennt man, dass auch die Anzahl der Lamellen pro Tiefenintervall recht gut reproduziert wird. Desweiteren stimmen sogar die durchschnittlichen Längen der Lamellen in Experiment und Simulation überein.

Eine objektive Methode der Messung der "Lamellarigkeit" stellt die Fouriertransformation dar. Hierzu wurde das Programm *dft* (kurz für **d**iscrete **f**ourier **t**ransform) geschrieben. Dieses schneidet die untersten  $50 \times 50$  beziehungsweise  $64 \times 64$  Bildpunkte der Querschnittsansicht aus und wendet darauf eine 2d-Fouriertransformation an. Dabei wird die Intensität des fouriertransformierten Bildes skaliert, um Bildpunkte außerhalb der Ortsfrequenz Null besser erkennen zu können.

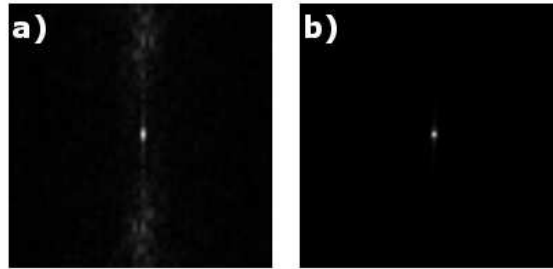


Abbildung 6.3: Vergleich der Fouriertransformationen der Ortsverteilungen aus Abbildung 6.2. a) Simulation, b) Experiment.

Abbildung 6.3 zeigt die Fouriertransformationen der Ortsverteilungen aus Abbildung 6.2. Die horizontalen Lamellen führen in der Fouriertransformierten erwartungsgemäß zu vertikalen Streifen.

Durch einen Linescan einer gewissen Breite (hier:  $\Delta f_x = \pm \frac{3}{64 \times 3 \text{ nm}}$ ) für die Ortsfrequenz  $f_x = 0$  erhält man Information über die Periodizität der Lamellen in  $z$ -Richtung. Durch die Intensitätsskalierung lassen sich Linescans gut miteinander vergleichen, da deren Intensitätsverlauf in der selben Größenordnung liegt. Abbildung 6.4 zeigt den Vergleich der Linescans der fouriertransformierten TEM-Aufnahme und der Cross-Section der Simulation aus Abbildung 6.3. Für den Vergleich mit der TEM-Aufnahme wurde der linke Teil der Aufnahme abgeschnitten und auf 100 Bildpunkte in der Höhe skaliert. Im Gegensatz zur Simulation hat die TEM-Aufnahme eine sehr hohe mittlere Helligkeit und wenig Kontrast, was ein großes Maximum bei der Ortsfrequenz Null zur Folge hat. Daher sind Maxima anderer Frequenzen schlecht zu erkennen. Im Folgenden wird deshalb die Fouriertransformation vor allem zum Vergleich zwischen Simulationsergebnissen verwendet.

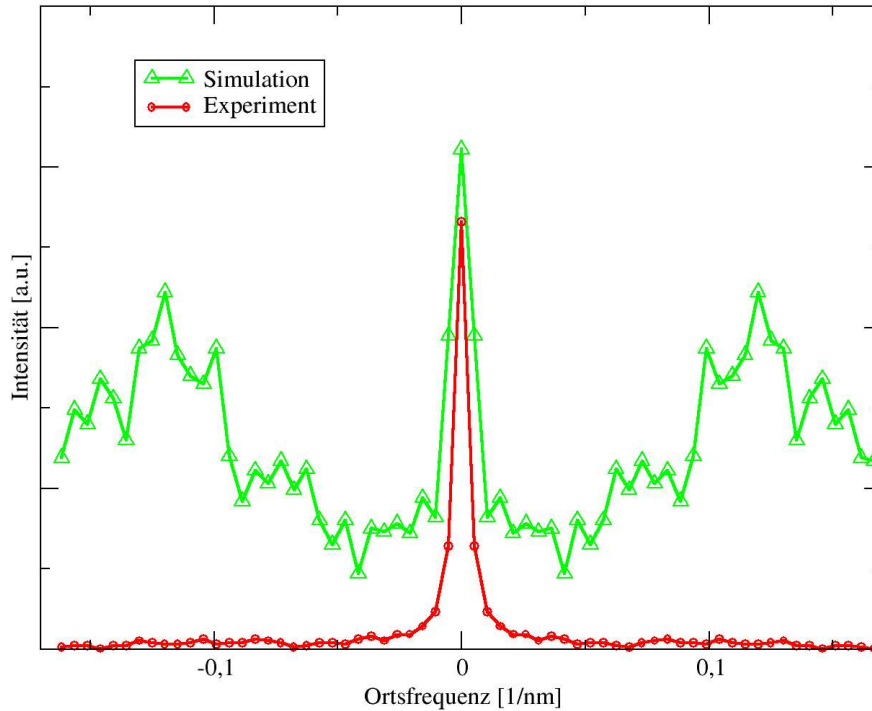


Abbildung 6.4: Vergleich der Linescans der fouriertransformierten TEM-Aufnahme und der Cross-Section der Simulation aus Abbildung 6.3.

### 6.1.3 Notwendigkeit der Diffusion

Im Folgenden werden die Diffusionsparameter variiert um deren Auswirkungen auf die Ausscheidungsanordnung sichtbar zu machen. Da die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung den wahrscheinlich wichtigsten Beitrag zur Amorphisierung liefert, liegt es auf der Hand, dass die Kohlenstoffdiffusion erheblichen Einfluss auf den Selbstorganisationsvorgang hat.

Abbildung 6.5 zeigt den Vergleich von Ergebnissen mit unterschiedlicher Diffusionsrate  $d_r$ . Zusätzlich kann die Diffusion in  $z$ -Richtung unterdrückt werden ( $d_r^z = 0$ ). Unter der Querschnittsansicht ist die jeweilige Fouriertransformierte abgebildet. Die beiden Querschnitte in Abbildung 6.5 b) und c) entsprechen identischen Simulationdurchläufen, wobei in Abbildung 6.5 c) die Diffusion in  $z$ -Richtung unterdrückt wurde. Lamellare Strukturen beobachtet man nur im Falle mit Diffusion in  $z$ -Richtung. Diese bewirkt, dass amorphe Volumina den kristallinen Gebieten in benachbarten Ebenen den Kohlenstoff entziehen. Die Amorphisierungswahrscheinlichkeit in diesen Volumina steigt durch den Gewinn von Kohlenstoff an, und wegen (5.3) werden sie stabiler gegenüber Rekristallisation. Die Wahrscheinlichkeit für die Amorphisierung kristalliner Zellen in der selben Ebene steigt aufgrund der wachsenden Druckspannungen an. Da diese spannungsunterstützt amorphisierten Gebiete fortan ebenfalls Senken für diffundierenden Kohlenstoff bilden, ist damit eine immer kleiner werdende Amorphisierungswahrscheinlichkeit in den kohlenstoffarmen Nachbarebenen verbunden. Dieser Prozess fördert ganz offensichtlich die Ausbildung lamellarer Strukturen. Das Ergebnis zeigt die Notwendigkeit der lokalen Diffusion von Kohlenstoff von kristallinen in amorphe Gebiete, insbesondere der Diffusion in  $z$ -Richtung.

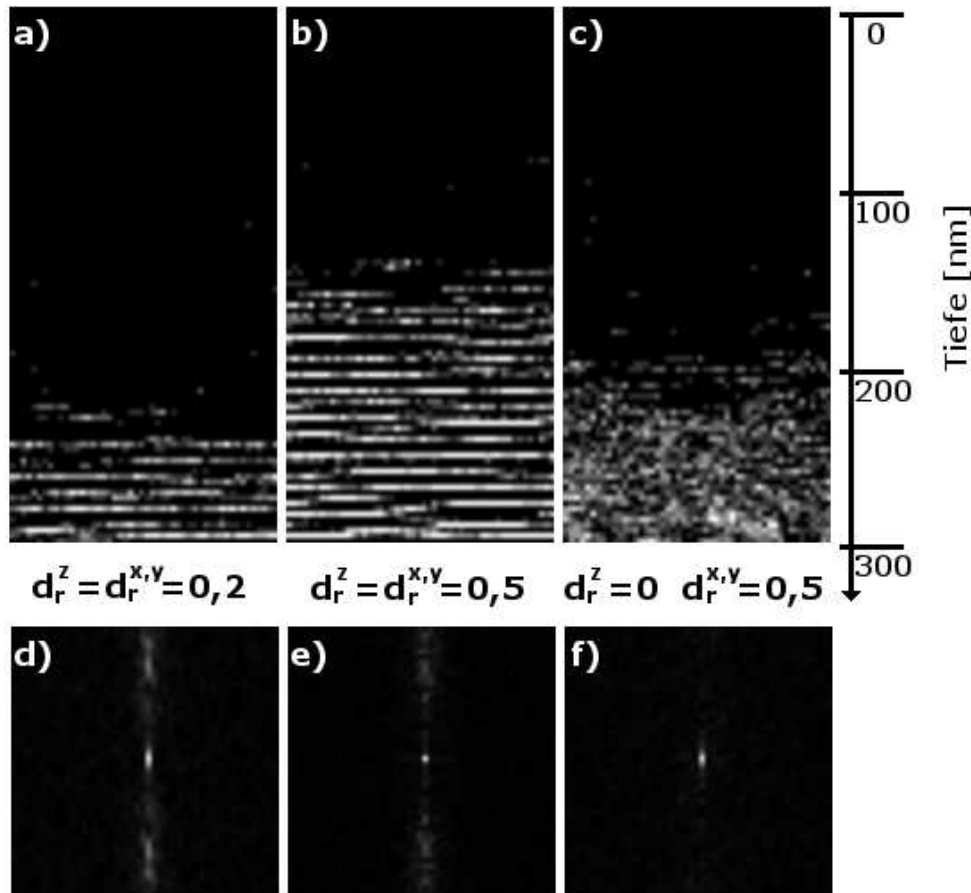


Abbildung 6.5: Vergleich von Simulationen mit unterschiedlicher Diffusionsrate  $d_r$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $p_s = 0,004$ ,  $d_v = 10$ ,  $s = 20 \times 10^6$ . Variierte Diffusion: a)  $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,2$ , b)  $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,5$ , c)  $d_r^z = 0$ ,  $d_r^{x,y} = 0,5$ . Die Abbildung zeigt die Querschnitte a) - c) und deren Fouriertransformierte d) - f).

Weiterhin erkennt man einen Zusammenhang zwischen der Diffusionsrate  $d_r$  und dem Tiefenintervall, in dem sich lamellare Strukturen gebildet haben. Die Erhöhung der Diffusionsrate von  $d_r = 0,2$  auf  $d_r = 0,5$  hat eine Vergrößerung des Tiefenintervalls von ungefähr 60 auf 150 nm zur Folge. Bei hoher Diffusionsrate diffundiert der Kohlenstoff schneller in amorphe Volumina. Dies stabilisiert die amorphe Ausscheidung. Geringe Diffusionsraten verhindern ein schnelles Anhäufen von Kohlenstoff in den amorphen Volumina. Die amorphen Ausscheidungen sind nicht sehr stabil und werden mit hoher Wahrscheinlichkeit rekristallisieren. Dies äußert sich auch in einer kleineren Anzahl an amorphen Gebieten insgesamt, für die kleinere Rate  $d_r = 0,2$ . Stabile amorphe Ausscheidungen treten erst ab einer Tiefe von ungefähr 240 nm auf. Hier ist die mittlere Kohlenstoffkonzentration hoch genug, um bei der hier herrschenden nuklearen Bremskraft etwas Amorphes zu erhalten.

Abbildung 6.6 zeigt die Linescans der fouriertransformierten Cross-Sections aus Abbildung 6.5. Abbildung 6.6 c) gehört zur Simulation ohne Diffusion in  $z$ -Richtung. Der Linescan zeigt kein Maximum außer bei der Ortsfrequenz Null. Dies steht im Einklang mit dem in Abbildung



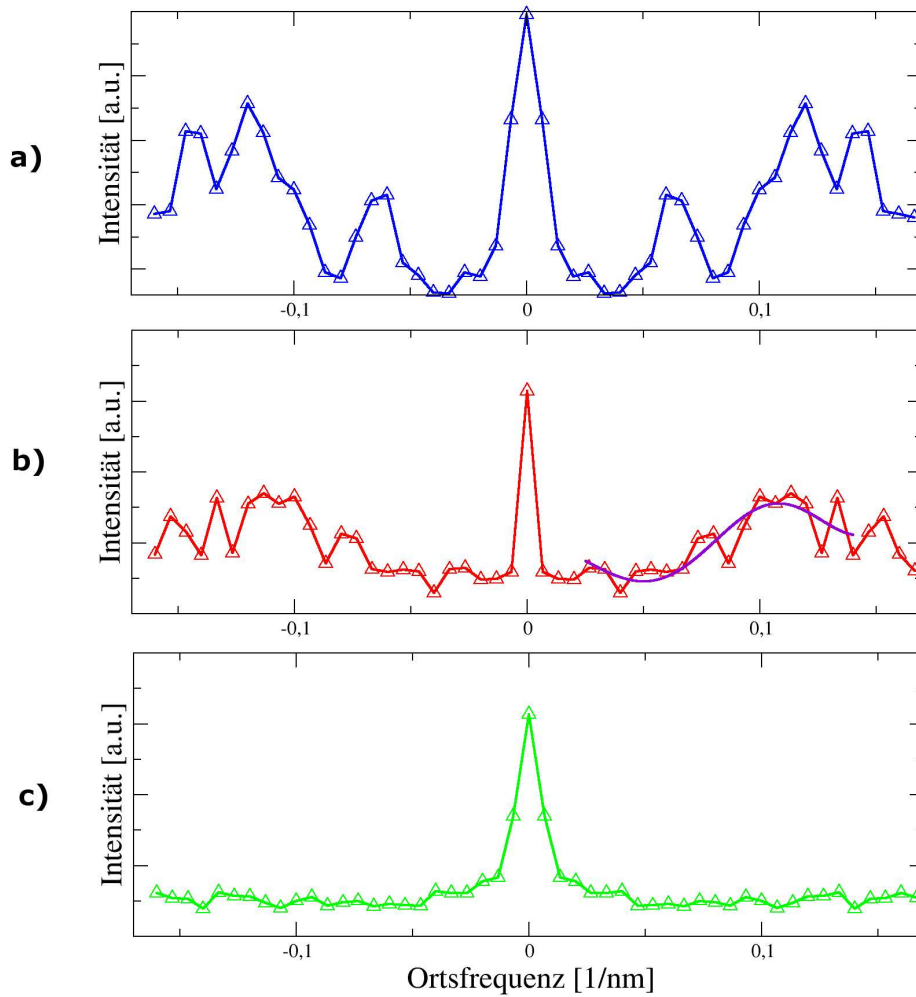


Abbildung 6.6: Linescan über die Ortsfrequenz  $f_x = 0$  der Fouriertransformierten aus 6.5 mit a)  $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,5$ , b)  $d_r^z = d_r^{x,y} = 0,2$  und c)  $d_r^z = 0$ ,  $d_r^{x,y} = 0,5$ .

6.5 c) gezeigtem Querschnitt. Es haben sich keine lamellaren Ausscheidungen gebildet. Bei den in Abbildung 6.6 a) und b) gezeigten Spektren ist die Diffusion stark und man erhält deutlich lamellare Ausscheidungen. Dies äußert sich auch am Linescan in den lokalen Maxima in der Intensität bei Ortsfrequenzen ungleich Null. Ein Maximum ist zum Beispiel für die Ortsfrequenz  $f_z \approx 0,11 \text{ nm}^{-1}$  in Abbildung 6.5 b) zu erkennen. Diese Frequenz entspricht einer Perizität der Lamellen von  $f_z^{-1} \approx 9,1 \text{ nm}$ . Dies entspricht einer Anzahl von ungefähr 17 Lamellen in einem Tiefenbereich von  $150 \text{ nm}$ . Eine ähnlich große Zahl erhält man tatsächlich durch Abzählen der Lamellen am linken Rand der Cross-Section aus Abbildung 6.5 b). Die Fouriertransformierte stellt also ein geeignetes Mittel zur objektiven Messung der "Lamellarigkeit" dar. Auffällig ist das Vorkommen von zwei ausgeprägten Maxima in Abbildung 6.6 a). Die Lamellenstrukturen in Abbildung 6.5 a) setzen sich demnach wesentlich aus Überlagerungen von Ortswellen dieser zwei Frequenzen zusammen. Tatsächlich findet man Lamellen

hauptsächlich in den zwei entsprechenden Abständen vor.

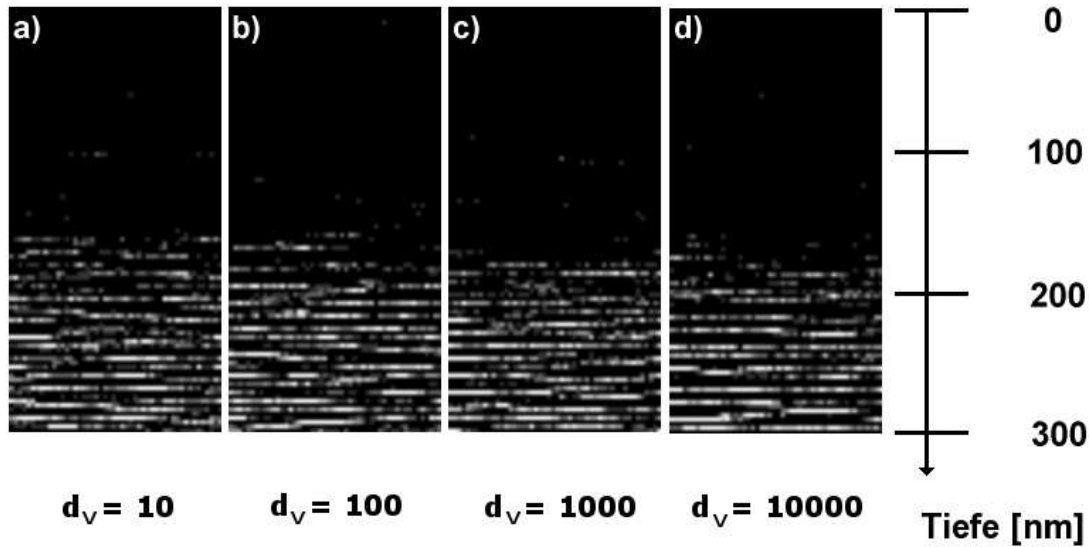


Abbildung 6.7: Simulationsergebnisse für a)  $d_v = 10$ , b)  $d_v = 100$ , c)  $d_v = 1000$ , d)  $d_v = 10000$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $p_s = 0,003$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $s = 2 \times 10^7$ .

Neben der Diffusionsrate  $d_r$  beschreibt der Simulationsparameter  $d_v$  den Diffusionsprozess. Er gibt an, wie oft der Diffusionsschritt ausgeführt wird (alle  $d_v$  Schritte) und hat den Zweck, die Rechenzeit des Programms durch Reduzierung des besonders zeitaufwändigen Diffusionsschrittes kurz zu halten. In Abbildung 6.7 sind Simulationsergebnisse für verschiedene  $d_v$  abgebildet. Erstaunlicherweise scheint dieser Parameter keinen allzu großen Einfluss auf das Ergebnis zu haben. Das liegt daran, dass selbst die Anzahl von  $10^4$  Schritten im Vergleich zur Anzahl der Würfel im Target von  $50 \times 50 \times 100 = 25 \times 10^4$  sehr viel kleiner ist. Damit ist es sehr wahrscheinlich, dass vor einem erneuten Treffer ein Volumen per Diffusionsprozess mit den Nachbarn Kohlenstoff austauscht. Die Diffusion als essentieller Mechanismus für den Selbstorganisationsprozess findet somit statt.

Man erkennt eine minimale Abnahme des lamellaren Tiefenbereichs von ungefähr  $10 \text{ nm}$  mit zunehmenden  $d_r$ . Außerdem kann man eine kleine Zunahme der Periodenlänge der Lamellen mit zunehmendem  $d_v$  erahnen. Dies erkennt man am besten beim Vergleich der zwei Extrema  $d_v = 10$  und  $d_v = 10000$ . Dies liegt wiederum an der schnelleren Diffusion, die eine aggressivere Anhäufung von Kohlenstoff selbst in Tiefen geringerer Kohlenstoffkonzentration bewirkt.

In Abbildung 6.8 sind die Linescans der fouriertransformierten Cross-Sections a) und d) aus Abbildung 6.7 zu sehen. Die Zunahme der Periodenlänge macht sich hier durch die Verschiebung des Intensitätsmaximums zu einer geringeren Frequenz bemerkbar. Während der Linescan für  $d_v = 10000$  (blau) schon für Frequenzen unter  $0,1 \text{ nm}^{-1}$  Peaks hoher Intensität zeigt, erkennt man diese für  $d_v = 10$  (rot) erst bei höheren Frequenzen. Die durch Regression bestimmten Intensitätsmaxima liegen bei  $f_z \approx 0,106 \text{ nm}^{-1}$  (blau) und  $f_z \approx 0,114 \text{ nm}^{-1}$  (rot). Diese entsprechen ungefähr den Wellenlängen  $9,4 \text{ nm}$  und  $8,8 \text{ nm}$ .

Dieses Ergebnis einer unterschiedlich groben Verteilung der Lamellen unterstreicht ebenfalls die Bedeutung einer effizienten Diffusion für die Anordnung des Kohlenstoffs in wohlse-

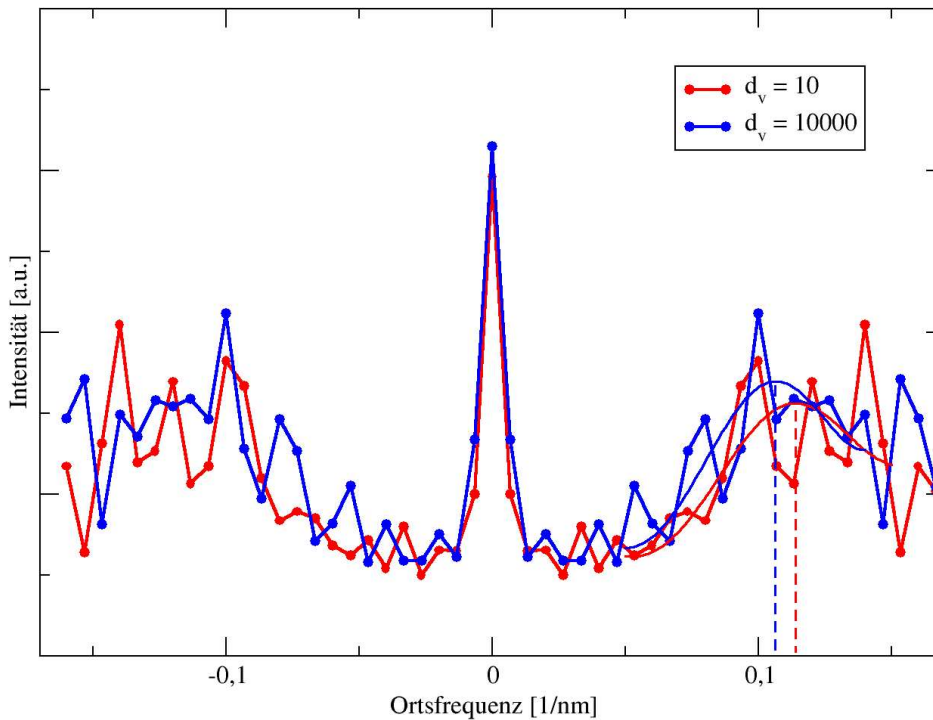


Abbildung 6.8: Linescan der fouriertransformierten Cross-Sections von Simulationen mit  $d_v = 10$  und  $d_v = 10000$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $p_s = 0,003$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $s = 2 \times 10^7$ .

parierte Lamellen. Physikalisch gesehen entspricht ein großes  $d_v$  einer Barriere für den Einbau von Kohlenstoff in eine Lamelle. Entsprechend dieser Interpretation würde ständig der Transport von Kohlenstoff stattfinden, aber der Einbau des Kohlenstoffs fände nur nach einer gewissen Zeit statt.

#### 6.1.4 Einfluss der Druckspannungen

Im Folgenden soll der Einfluss der Druckspannungen auf den Selbstorganisationsprozess diskutiert werden. In Abbildung 6.9 sind Simulationsergebnisse mit variierten Druckspannungsparametern  $p_s$  zu sehen. Mit Verkleinerung des Wertes für die Stärke des Einflusses von Spannungen auf die Amorphisierungswahrscheinlichkeit wird auch der Tiefenbereich, in dem sich lamellare Ausscheidungen bilden, kleiner. Gleichzeitig wird auch der laterale Durchmesser der amorphen Lamellen kleiner. Diese Beobachtungen illustrieren den Mechanismus der spannungsunterstützten Amorphisierung. Da kleinere  $p_s$  eine kleinere Amorphisierungswahrscheinlichkeit der kristallinen Nachbarschaft zur Folge haben, entstehen weniger amorphe Gebiete. Die Druckspannungen fallen quadratisch mit der Entfernung ab. Ein zufällig amorphisiertes Gebiet, das nicht direkt an eine Ausscheidung angrenzt, wird daher viel wahrscheinlicher rekristallisieren als eins in der direkten Nachbarschaft zu einer weiteren amorphen Zelle. Da für kleine  $p_s$  zwar einzelne amorphe Zellen gebildet werden, aber keine ganzen Lamellen entstehen, ist zu schlussfolgern, dass selbst ein neu entstandenes amorphes Gebiet direkt

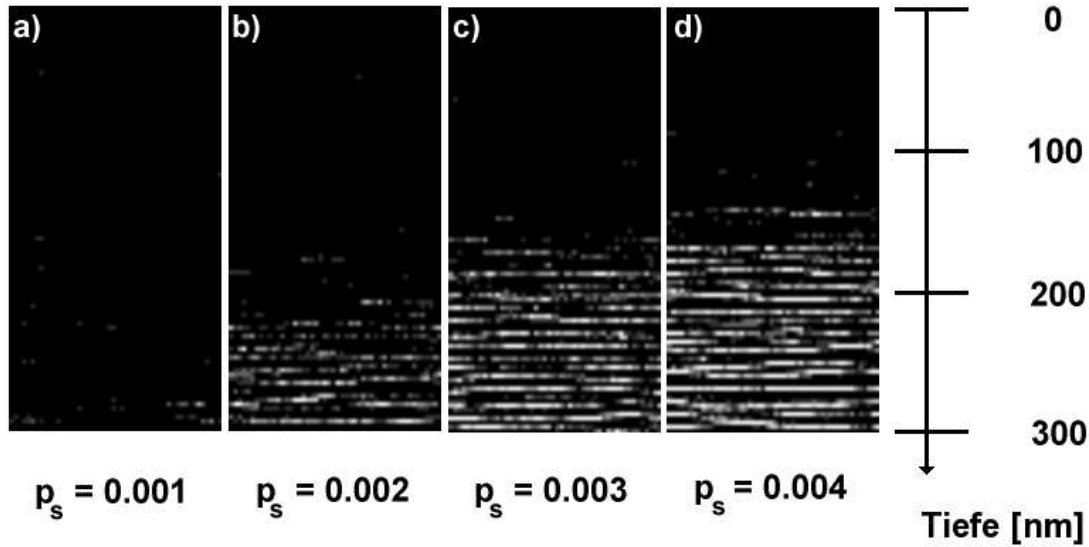


Abbildung 6.9: Simulationsergebnisse für verschiedene  $p_s$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $d_v = 10$ ,  $s = 2 \times 10^7$ . Variierter Parameter: a)  $p_s = 0,001$ , b)  $p_s = 0,002$ , c)  $p_s = 0,003$ , d)  $p_s = 0,004$ .

neben einer Ausscheidung nicht mehr durch die Druckspannungen allein stabilisiert werden kann. Es wird nur amorph bleiben, wenn vor dem nächsten Stoß genug Kohlenstoff durch den Diffusionsprozess gewonnen wird und eine Stabilisierung aufgrund der kohlenstoffinduzierten Amorphisierungswahrscheinlichkeit ausreicht.

In Abbildung 6.10 sind die Linescans der fouriertransformierten Cross-Sections mit  $p_s = 0,002$ ,  $p_s = 0,003$  und  $p_s = 0,004$  aus Abbildung 6.9 b,c,d) zu sehen. Zunächst fällt das schärfere Maximum bei der Ortsfrequenz Null für höhere Werte von  $p_s$  auf. Dies hängt mit dem fouriertransformierten Tiefenbereich zusammen. In Abbildung 6.9 b) existieren Lamellen nur etwa in der unteren Hälfte des Bereichs. Daher hat in Abbildung 6.10 a) die nächst höhere Frequenz ungleich Null einen hohen Beitrag. In c) und d) sind Lamellen im gesamten zu transformierenden Bereich zu erkennen, weshalb dieser Frequenzbeitrag hier nur einen geringen Beitrag ausmacht.

In Abbildung 6.10 a) erkennt man zwei deutliche Intensitätspeaks für Frequenzen ungleich Null, die sich mit steigendem  $p_s$  bei höheren Frequenzen wiederfinden (Abbildung 6.10 b)). Dieses Ergebnis erkennt man auch sehr gut an den zugehörigen Querschnitten, in denen die Abstände der Lamellen abnehmen. Bei fortgesetzter Erhöhung des Spannungseinflusses auf  $p_s = 0,004$  gehen die zwei Intensitätspeaks in ein Intensitätsmaximum über, wie man in Abbildung 6.10 c) erkennen kann. Dieser Übergang deutet sich auch schon beim Vergleich der Linescans für  $p_s = 0,002$  und  $p_s = 0,003$  an. Während die Lamellenstruktur in Abbildung 6.9 b) und c) hauptsächlich zwei Abstände der Lamellen aufweist, gehen diese mit Erhöhung des Spannungseinflusses  $p_s$  in einen einheitlichen Abstand über. Das gleiche Verhalten zeigte sich bei Variation von  $d_r$  in Abschnitt 6.1.3. Dies deutet an, dass Maßnahmen, die einer Bildung von Lamellen entgegenwirken, zunächst die perfekte einheitliche Struktur auflösen, die durch eine Überlagerung unterschiedlicher Strukturen abgelöst wird, bis letzten Endes die komplette Struktur verloren geht.

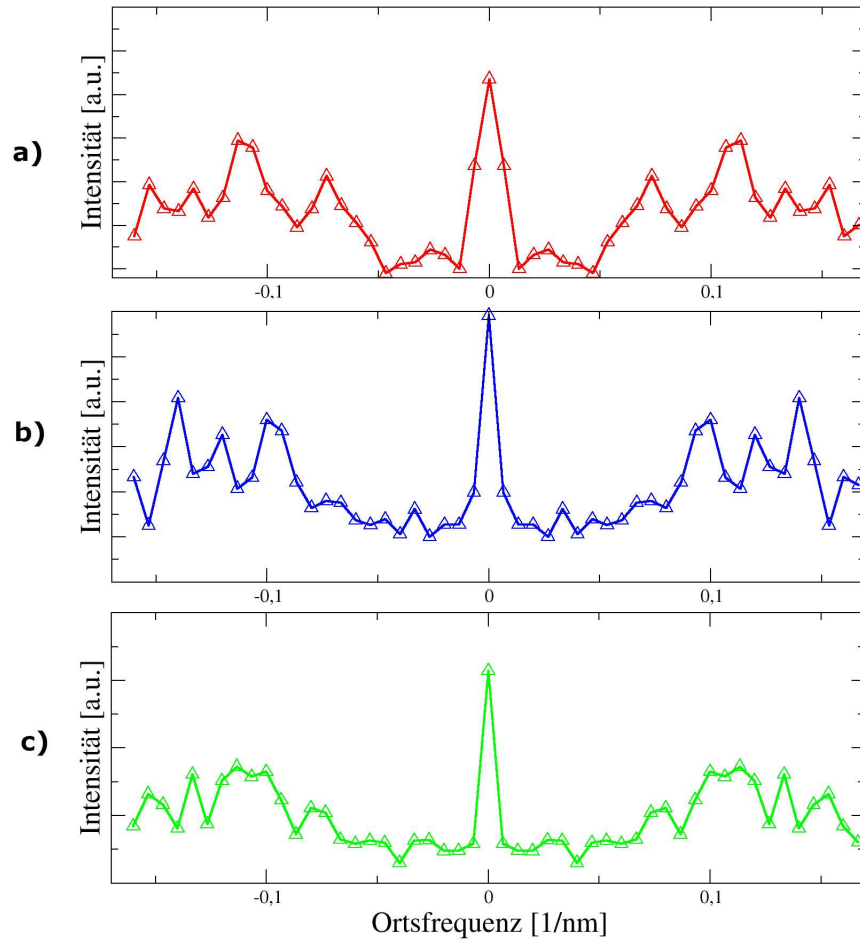


Abbildung 6.10: Linescan der fouriertransformierten Cross-Sections aus Abbildung 6.9 von Simulationen mit a)  $p_s = 0,002$ , b)  $p_s = 0,003$  und c)  $p_s = 0,004$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $d_v = 10$ ,  $s = 2 \times 10^7$ .

### 6.1.5 Verteilung des Kohlenstoffs im Target

In Abbildung 6.11 ist ein Querschnitt zweier Ebenen  $z$  und  $z+1$  des Targets abgebildet, so dass man die laterale Ausdehnung amorpher Lamellen und ihrer Nachbarebene erkennen kann. Neben der Verteilung amorpher und kristalliner Volumina sind die Kohlenstoffverteilung und das Spannungsfeld der amorphen Ausscheidungen auf die kristalline  $Si$ -Matrix visualisiert. Man erkennt, dass die amorphen und kristallinen Gebiete in aufeinander folgenden Ebenen nahezu komplementär angeordnet sind. Dies ist eine Folge der weiter oben erwähnten Kohlenstoffdiffusion. Die amorphen Gebiete entziehen den anliegenden Ebenen den Kohlenstoff, womit dort die Amorphisierungswahrscheinlichkeit sinkt. Die Tatsache, dass sich der Kohlenstoff in den amorphen Gebieten befindet, kann man durch Vergleich mit der Kohlenstoffverteilung erkennen. Auch das Gebiet hoher Druckspannungen stimmt annähernd mit den amorphen Gebieten überein. Es fällt aber auf, dass die Ausdehnung der amorphen Gebiete etwas größer als das Gebiet mit hoher Kohlenstoffkonzentration ist, und dass die Druckspannungen auch noch im

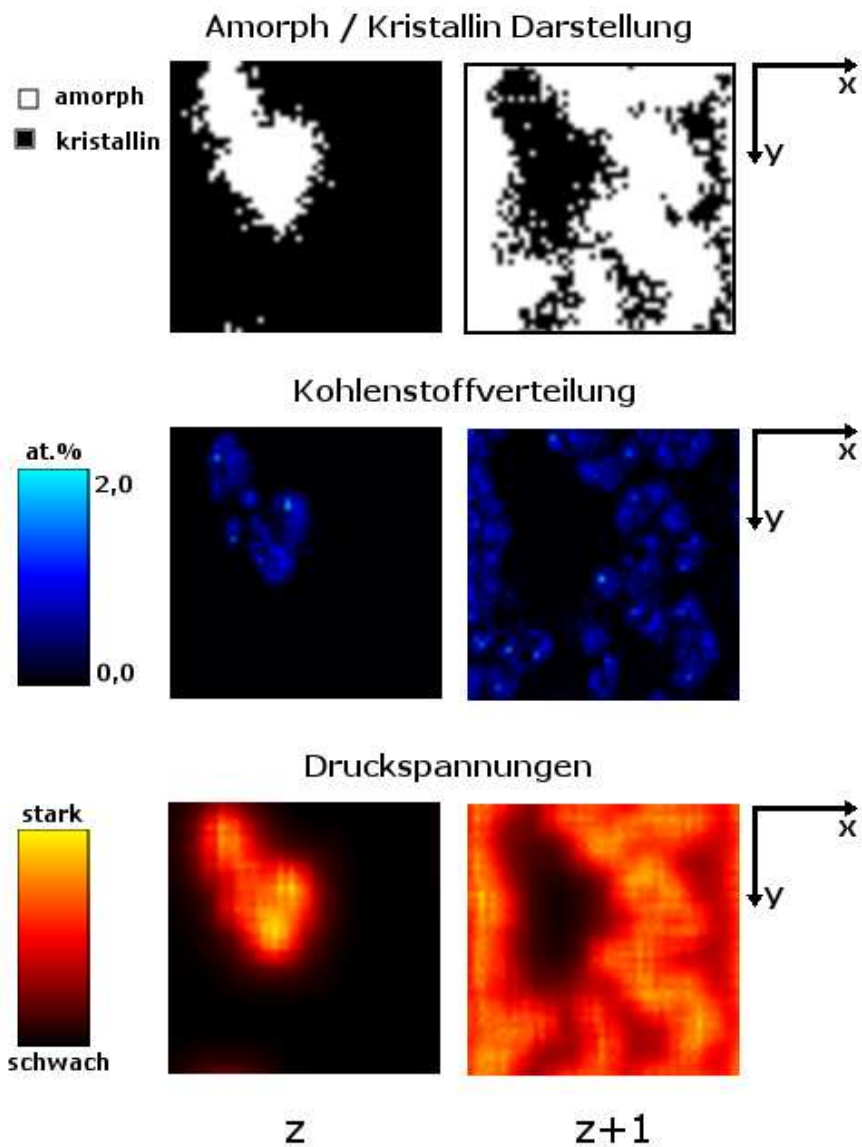


Abbildung 6.11: Amorph/Kristalline Struktur, Kohlenstoffverteilung und Druckspannungen in zwei aufeinander folgenden Ebenen  $z = 97$  und  $z = 98$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0,0001$ ,  $p_s = 0,004$ ,  $d_v = 10$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $s = 2 \times 10^7$ .

Randgebiet der kristallinen Volumina existieren. Das amorphe Randgebiet ist aufgrund der Druckspannungen trotz des niedrigen Kohlenstoffgehalts amorph. In den kristallinen Gebieten der amorph/kristallinen Grenzfläche reicht auch das Spannungsfeld nicht mehr aus, um den amorphen Zustand zu stabilisieren.

Die komplementäre Anordnung der amorph/kristallinen Gebiete in aufeinander folgenden Ebenen wird nochmals in Abbildung 6.12 deutlich. Abgebildet ist die Querschnittsansicht und ein zugehöriges Kohlenstofftiefenprofil der Simulation aus Abschnitt 6.1.2. Bis zu einer Tiefe von  $160 \text{ nm}$  ist fast der komplette Kohlenstoff in kristallinen Volumina, da in diesem

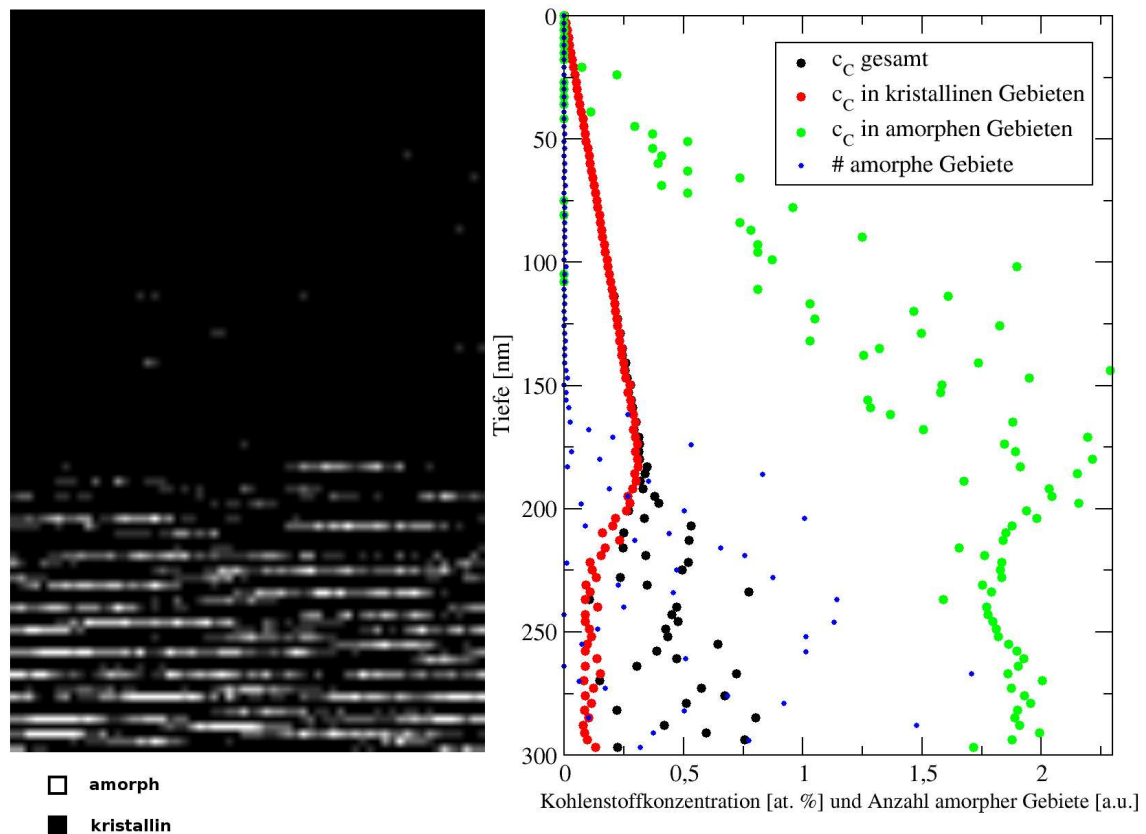


Abbildung 6.12: Querschnittsansicht und Tiefenprofil des Kohlenstoffs in einem Target mit lamellaren Strukturen. Abgebildet ist der Kohlenstoff in amorphen und kristallinen Gebieten (schwarz), in kristallinen Gebieten (rot) und in amorphen Gebieten (grün). Desweiteren ist die skalierte Anzahl der amorphen Gebiete (blau) abgebildet. Simulationsparameter wie in 6.2.

Tiefenbereich kaum amorphe Zellen existieren. Die wenigen amorphen Zellen, die in diesem Tiefenbereich existieren, haben durch den Diffusionsprozess Kohlenstoff gewonnen, der zwar keinen großen Einfluss auf die Konzentration in kristallinen Gebieten, jedoch aufgrund des relativ kleinen amorphen Volumenanteils eine hohe Konzentrationen in den amorphen Gebieten zur Folge hat. Der lineare Anstieg der Kohlenstoffkonzentration in den kristallinen und den gesamten Gebieten im nicht lamellaren Bereich ist eine Folge des linear genäheren Implantationsprofils. Ein linearer Anstieg lässt sich auch für die Konzentration in den amorphen Gebieten erkennen. Dies ist offensichtlich, da proportional zur Tiefe der Kohlenstoff zunimmt, der dann in amorphe Zellen diffundieren kann. Da für jedes amorphe Volumen bis zu sechs Nachbarn, sofern sie kristallin sind, als Kohlenstoffdonator zur Verfügung stehen, ist die Steigung der Konzentration im Amorphen weitaus höher als die im Kristallinen. Weiterhin fällt auf, dass die Fluktuation um diesen linearen Verlauf kurz vor Beginn der lamellaren Ausscheidungen zunimmt. Dies lässt sich durch die zunehmende Existenz von amorphen Ausscheidungen, die meist nur noch von einer kristallinen Ebene voneinander getrennt sind, er-

klären. Diese Ausscheidungen konkurrieren um den zur Verfügung stehenden Kohlenstoff aus dieser kristallinen Ebene. Mit Beginn der amorphen Lamellen sinkt der Kohlenstoffgehalt in den kristallinen Gebieten, da viel amorphe Umgebung, in die der Kohlenstoff diffundiert, vorhanden ist. Die Schwankungen der Kohlenstoffkonzentration in der Gesamtheit der Gebiete hängt mit der komplementären Anordnung der amorphen Gebiete in aufeinander folgenden Ebenen zusammen. Man erkennt, dass abwechselnd Ebenen mit großen und kleinen amorphen Anteil vorliegen. Die Konzentration in den amorphen Gebieten sättigt im lamellaren Bereich. Das liegt an der schnell ansteigenden Anzahl an amorphen Gebieten, wie man in Abbildung 6.12 an den blauen Punkten gut erkennen kann. Diese kompensiert gerade die Zunahme des Kohlenstoffs, so dass die Konzentration in amorphen Gebieten ungefähr konstant bleibt.

### 6.1.6 Zusammenfassung

Der selbstorganisierte Bildungsprozess der lamellaren Ausscheidungen wird aus den Ergebnissen der ersten Version nachvollziehbar gemacht. Mit Hilfe des Modells und der verwendeten Implementierung können geordnete Lamellenstrukturen reproduziert werden. Hierfür wichtig ist eine hohe Anzahl von Simulationsdurchläufen und vergleichsweise niedrige Amorphisierungswahrscheinlichkeiten. Die Kohlenstoffdiffusion von amorphen in kristalline Volumina ist essentiell für den Selbstorganisationsprozess. Die lamellaren Strukturen reagieren sensibel auf Veränderungen bei der Diffusion. Schließt man Diffusion in  $z$ -Richtung aus findet keine Lamellenbildung statt. Der Kohlenstoff spielt demnach eine wichtige Rolle beim Amorphisierungsprozess. Untersuchungen der Kohlenstoffverteilung im Target bestätigen die aus energiegefilterten TEM-Aufnahmen gewonnene Erkenntnis, dass die amorphen Gebiete hohe Kohlenstoffkonzentrationen aufweisen. Daraus, und aus den verwendeten Parametern  $p_b = 0$  und  $p_c = 0,0001$  zur Reproduzierung der experimentell gefundenen Lamellenstruktur, geht klar hervor, dass die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung gegenüber der ballistischen Amorphisierung einen weitaus größeren Beitrag zur Amorphisierung ausmacht.



## 6.2 Simulation über den gesamten Implantationsbereich

Im Folgenden werden die Ergebnisse behandelt, die mit der zweiten Version des Programms berechnet wurden. Hier wird über den gesamten Implantationsbereich von 0 bis 700 nm simuliert. In diesem Bereich befindet sich auch die experimentell gefundene durchgehend amorphe  $\text{SiC}_x$ -Schicht. Nun stellt sich die Frage, ob Simulationsparameter existieren, die sowohl die Lamellenbildung als auch die durchgehend amorphe Schicht reproduzieren. Dabei soll die Ausdehnung und Lage der Schicht abhängig von der Dosis mit dem Experiment übereinstimmen.

Da nukleare Bremskraft und Implantationsprofil in einer Tiefe von 700 nm auf Null abgefallen sind, kann der Sputtervorgang problemlos berücksichtigt werden. Jeder Simulationdurchlauf entspricht tatsächlich einem implantierten Ion, da die mittlere Anzahl von Stößen, die ein Ion im Target ausübt, ausgeführt wird. Stoßkoordinaten werden entsprechend der nuklearen Bremskraft gewählt, der Einbau des Kohlenstoffs erfolgt gemäß des Implantationsprofils. Die Sputterroutine wird gestartet, sobald die implantierte Dosis der Dosis entspricht, die 3 nm Abtrag zur Folge hat.

Zunächst wird ein Parametersatz vorgestellt, der die oberen Bedingungen annähernd erfüllt. Dieser Satz von Parametern wurde durch systematische Variation einzelner Parameter und Feststellung seiner Auswirkung auf das Simulationsergebnis entwickelt. Ein Brute-Force-Ansatz, also das Berechnen aller möglichen Kombinationen von Simulationsparametern ist aus Gründen der hohen Anzahl von freien Parametern und einer vergleichsweise niedrigen Rechenleistung nicht sinnvoll. Es ist deshalb nicht ausgeschlossen, dass ein anderer Satz von Parametern existiert, der die experimentell gefundenen Ergebnisse noch exakter reproduziert. Nach dem Vergleich mit dem Experiment und weitergehenden Untersuchungen des optimierten Simulationsergebnisses zur Kohlenstoffkonzentration und Ausdehnung und Lage der durchgehend amorphen Schicht, wird schließlich der Einfluss einzelner Parameter auf das Ergebnis vorgestellt. Zuletzt werden Vorhersagen zur Herstellung weiter Bereiche lamellarer, selbstorganisierter Strukturen durch Mehrfachimplantationen angestellt.

### 6.2.1 Dosisabhängigkeit der Bildung amorpher Bereiche

Die Abbildungen 6.13 und 6.14 zeigen den Vergleich der experimentell bestimmten und der simulierten Dosisabhängigkeit der Verteilung amorpher Gebiete. Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.

In der in Abbildung 6.13 a) dargestellten XTEM-Aufnahme erscheint der Bereich höchster Gitterschädigung dunkel. Die dunklen Kontraste sind nach [10] auf Verspannungen von Defekten zurückzuführen. Zusätzlich hierzu zeigen detaillierte TEM-Untersuchungen [10], dass hier etwa 3 nm große amorphe Einschlüsse auftreten, die teilweise zusammenwachsen. In den TEM-Aufnahmen für höhere Dosen wurden die Proben so im Mikroskop orientiert, dass die kristallinen Bereiche in Bragg-Orientierung stehen und aufgrund des Beugungscontrastes im wesentlichen dunkel erscheinen, amorphe Schichten dagegen sehr hell. Für diese Dosen sind die XTEM-Aufnahmen direkt mit den Simulationsergebnissen visuell vergleichbar.

Nach einer Dosis von  $1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  hat sich noch keine durchgehend amorphe Schicht gebildet. Bis auf eine geringe Differenz in der Tiefenposition des Bandes amorpher Ausscheidungen wird das experimentelle Ergebnis von der Simulation sehr gut reproduziert. Die etwas größere Ausdehnung der amorphen Gebiete in der Simulation liegt in diesem Fall am Unterschied der implantierten Dosis ( $1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ) und der äquivalenten simulierten Dosis ( $\approx 1,1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ). Die Tatsache, dass sich bei dieser geringen Dosis weder im Experiment

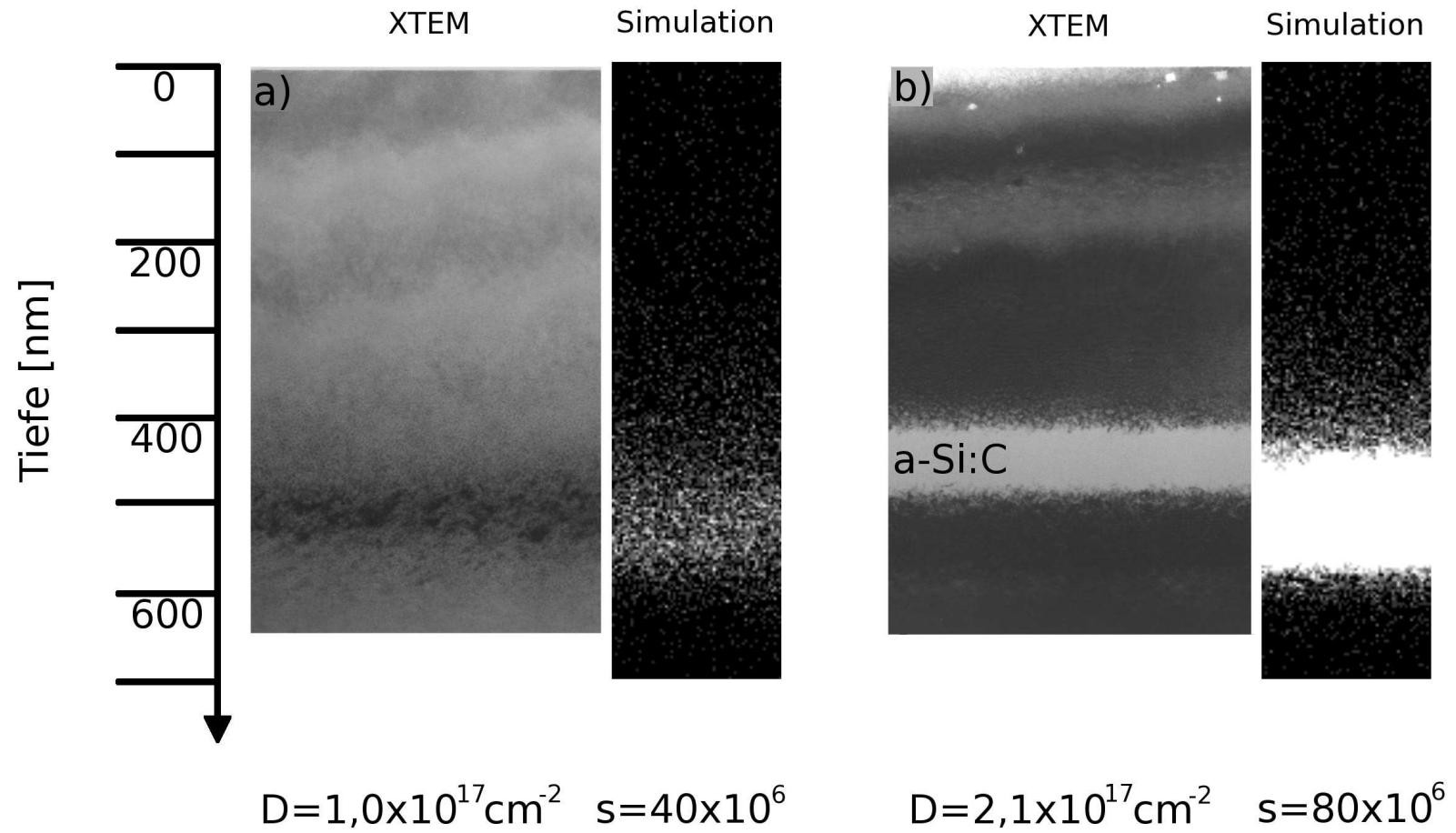


Abbildung 6.13: Vergleich der experimentellen und simulierten Dosisentwicklung bei a)  $1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  bzw.  $s = 40 \times 10^6$  und b)  $2,1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  bzw.  $s = 80 \times 10^6$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_r = 0,05$ ,  $d_v = 1 \times 10^6$ .

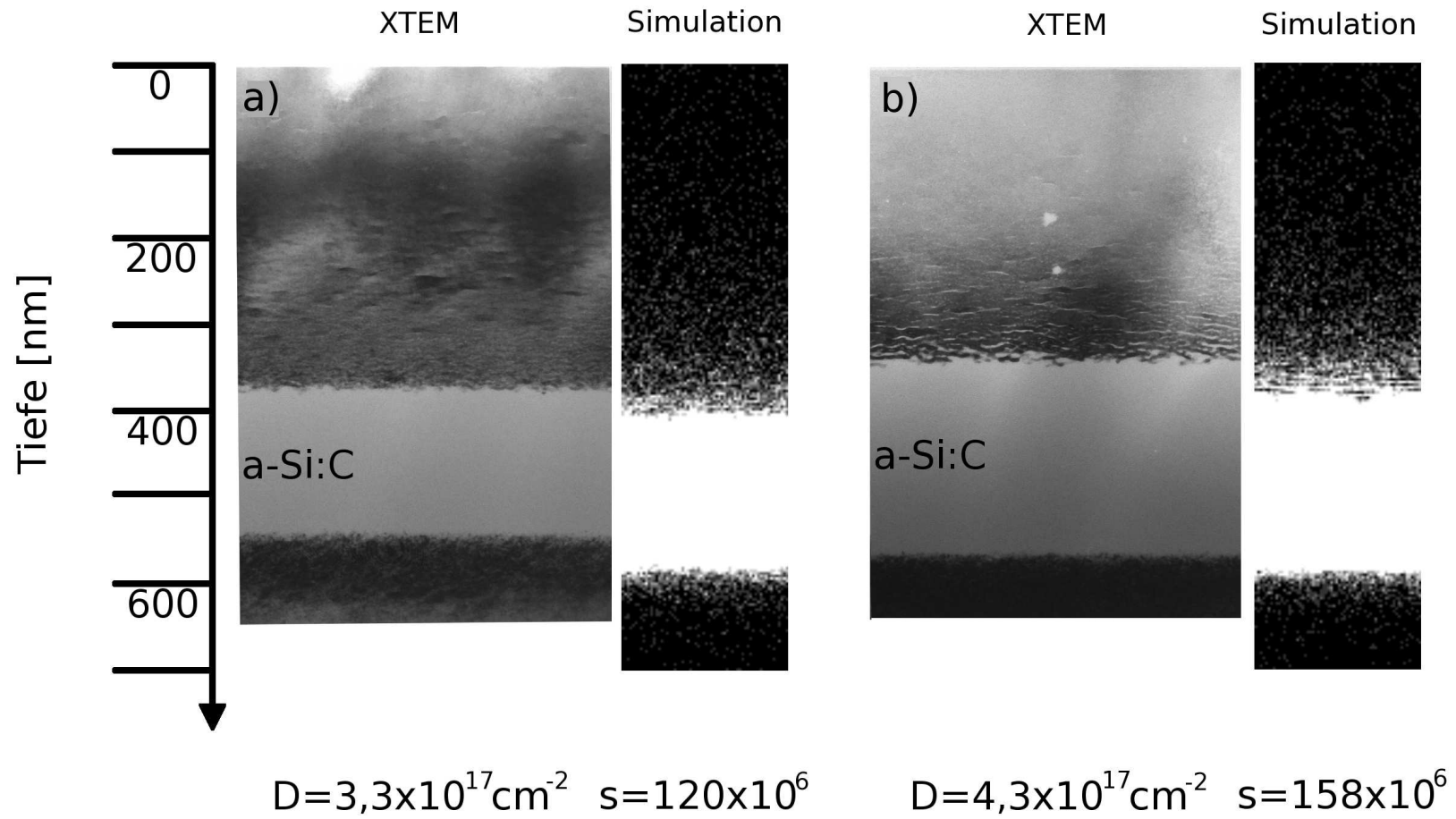


Abbildung 6.14: Vergleich der experimentellen und simulierten Dosisentwicklung bei a)  $3,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  bzw.  $s = 120 \times 10^6$  und b)  $4,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  bzw.  $s \approx 158 \times 10^6$ . Simulationsparameter:  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_r = 0,05$ ,  $d_v = 1 \times 10^6$ .

noch in der Simulation eine durchgehend amorphe Schicht gebildet hat, spricht dafür, dass die vorliegenden Amorphisierungsmechanismen nicht für die Bildung einer durchgehenden Schicht ausreichen. Die meisten amorphen Einschlüsse haben sich nahe dem Maximum des Kohlenstoffprofils bei  $500\text{ nm}$  und nicht nahe dem Maximum der nuklearen Bremskraft bei  $400\text{ nm}$  gebildet. Dies spricht dafür, dass die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung eine wichtige Rolle im Amorphisierungsprozess übernimmt.

Bei einer Dosis von  $2,1 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  (Abbildung 6.13 b)) hat sich sowohl in Simulation als auch im Experiment eine durchgehend amorphe  $\text{SiC}_x$ -Schicht gebildet. Allerdings ist die durchgehend amorphe Schicht im Experiment viel dünner und liegt in erster Näherung in der oberen Hälfte des Tiefenbereichs, in dem die Simulation eine geschlossene amorphe Schicht ergibt. In der unteren Hälfte dieses Bereichs zeigt die XTEM-Aufnahme wieder besonders dunkle Kontraste, so dass hier wohl eine besonders hohe Dichte von Kristalldefekten und möglicherweise wieder einzelne amorphe Ausscheidungen vorliegen, aber keine durchgehend amorphe Schicht. Beide Bereiche zusammen sind etwa so dick wie die simulierte amorphe Schicht. Die Tiefenpositionen unterscheiden sich um  $30\text{ nm}$ . Vor allem an der vorderen Grenzfläche der amorphen Schicht zeigt die Simulation in Übereinstimmung mit dem Experiment individuelle amorphe Volumina ohne Lamellencharakter.

Bei einer Dosis von  $3,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  (Abbildung 6.14 a)) ist die Schichtdicke im Experiment auf  $180\text{ nm}$  angewachsen. Dasselbe gilt für die Simulation. Wieder fällt die Differenz in der Tiefenposition von ungefähr  $40\text{ nm}$  zwischen Simulation und Experiment auf. Außerdem erkennt man die Bildung lamellarer Ausscheidungen an der vorderen Grenzfläche. Diese lamellaren Strukturen erkennt man ebenfalls im Experiment.

In Abbildung 6.14 b) ist die Schichtdicke nach einer Dosis von  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  auf grob  $200\text{ nm}$  angewachsen. Die lamellare Struktur wird deutlicher und der Tiefenbereich, in dem sie vorkommt, größer. Außerdem werden die amorph/kristallinen Grenzflächen schärfer. Dieses Ergebnis stimmt sehr gut mit der Simulation überein. Zum einen wächst die Schichtdicke im gleichem Maße an. Weiterhin werden die lamellaren Strukturen besser erkennbar und ihre Ausdehnung in  $z$ -Richtung steigt an. Vergleicht man die untere amorph/kristalline Grenzfläche mit dem Simulationsergebnis der vorangegangenen Dosis, so erkennt man auch die Entwicklung zur schärferen Grenzfläche mit zunehmender Dosis.

Aufgrund der wichtigen Rolle der kohlenstoffinduzierten Amorphisierung kann die Differenz der Tiefenposition der amorphen Ausscheidungen, beziehungsweise der durchgehend amorphen Schicht, erklärt werden. Die Ursache liegt an dem um  $30\text{ nm}$  verschobenen Maximum im Kohlenstoffprofil der verwendeten *SRIM 2003.26* Version zur *TRIM 92* Version, welche besser zu den experimentellen Ergebnissen passt. Der Tiefenshift der Ausscheidungen in der Simulation entspricht ziemlich genau der Differenz der Kohlenstoffmaxima der zwei *TRIM* Versionen.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass trotz einiger Unterschiede, was die Ausdehnung der amorphen Schicht bei der Dosis  $2,1 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  und den Tiefenshift für alle Dosen angeht, die Simulation das Experiment recht gut beschreibt. Man erhält die amorphen Ausscheidungen, die für niedrige Dosen noch keine durchgehende Schicht bilden. Bei Erhöhung der Dosis bildet sich eine durchgehende Schicht ohne Vorhandensein von lamellaren Strukturen. Diese bilden sich erst nach weiterer Erhöhung der Dosis. Gleichzeitig dehnt sich die durchgehende Schicht aus. Nach Implantation der kompletten Dosis wird die amorph/kristalline Grenzfläche schärfer, die lamellaren Strukturen deutlicher und der Tiefenbereich, in dem sie auftreten, größer.

## 6.2.2 Kohlenstoffverteilung

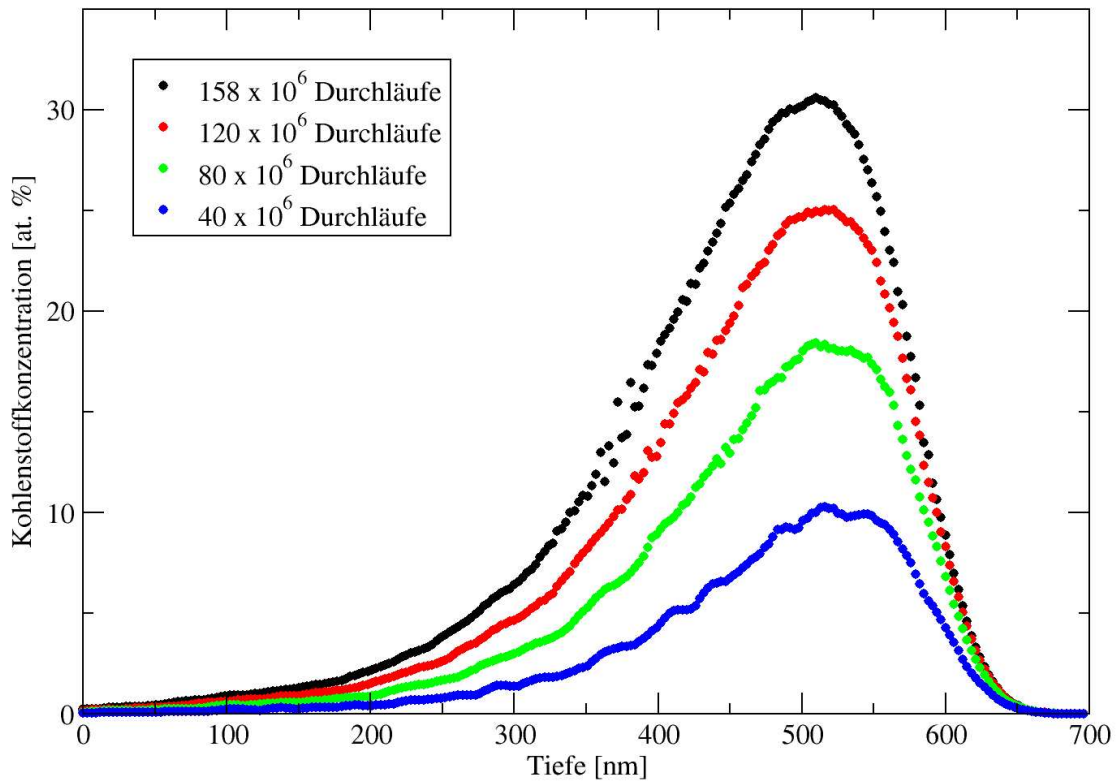


Abbildung 6.15: Kohlenstofftiefenprofile der Simulation für  $40 \times 10^6$ ,  $80 \times 10^6$ ,  $120 \times 10^6$  und  $158 \times 10^6$  Durchläufen mit  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_v = 1 \times 10^6$ ,  $d_r = 0,05$ .

Im Folgenden sollen die Kohlenstofftiefenprofile betrachtet werden. Abbildung 6.15 zeigt die aus den Simulationsergebnissen gewonnenen Kohlenstoffverteilungen in Abhängigkeit von der Tiefe für verschiedene Dosen. Auffällig ist die Verschiebung des Kohlenstoffmaximums mit steigender Dosis. Diese ist durch das Absputtern der Oberfläche zu erklären.

In Abbildung 6.16 ist die Querschnittsaufnahme aus Abschnitt 6.2.1 mit dem zugehörigen Implantationsprofil abgebildet. Die Kohlenstoffkonzentration steigt entsprechend dem Implantationsprofil an. Zwischen 0 und  $250\text{ nm}$  entspricht die Konzentration in den amorphen Gebieten genau der Konzentration in den kristallinen Gebieten. Die Tatsache, dass stabile Ausscheidungen ihrer kristallinen Umgebung Kohlenstoff entzogen hätten und somit das Konzentrationsprofil in den amorphen und kristallinen Gebieten im Gegensatz zum Gesamtprofil verändert hätten, spricht dafür, dass die Ausscheidungen in diesem Tiefenbereich rein ballistisch amorphisierte Gebiete sind, die sehr wahrscheinlich mit fortgeführter Bestrahlung rekristallisieren, noch bevor sie sich durch Kohlenstoffdiffusion gegenüber Rekristallisation stabilisieren können.

Ab einer Tiefe von  $250\text{ nm}$  steigt die Konzentration in den amorphen Gebieten stärker an als das Gesamtprofil, im Gegensatz zur Konzentration in den kristallinen Gebieten, die weniger stark ansteigt. In diesem Tiefenbereich existieren Ausscheidungen, die nicht unmittelbar rekristallisieren und so Kohlenstoff durch den Diffusionsprozess gewinnen können, der

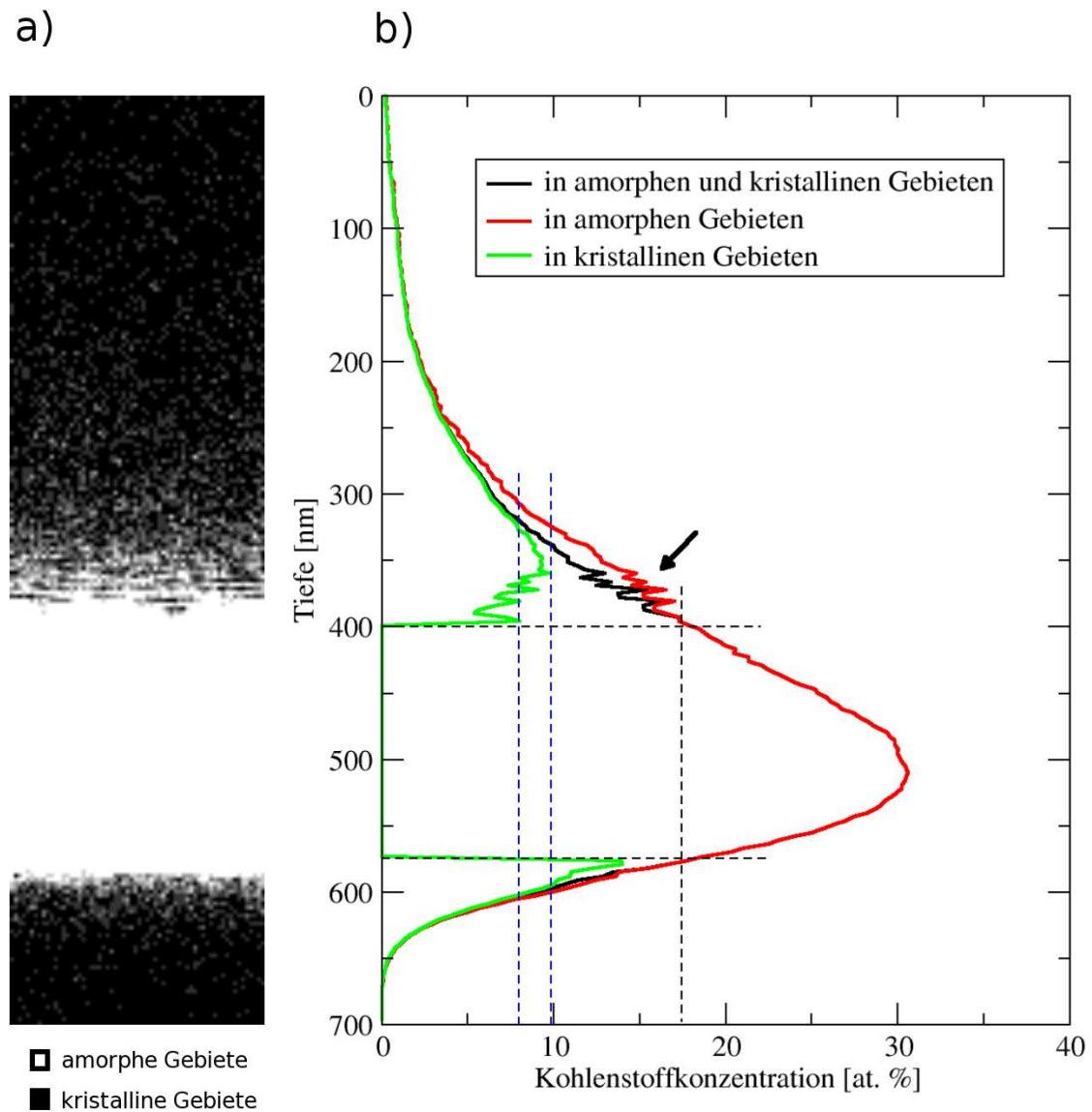


Abbildung 6.16: a) Querschnittsaufnahme und b) Tiefenprofil des Kohlenstoffs der Simulation aus Abschnitt 6.2.1. In a) sind helle Gebiete amorph, dunkle Gebiete kristallin. In b) ist der Kohlenstoff in kristallinen Gebieten grün, in amorphen Gebieten rot und der gesamte Kohlenstoff schwarz dargestellt.

zur weiteren Stabilisierung führt. Ab einer Tiefe von  $350\text{ nm}$  haben sich lamellare amorphe Ausscheidungen gebildet. In allen drei Kohlenstofftiefenprofilen sind Schwankungen in diesem Bereich zu erkennen (siehe Pfeil), wobei die Konzentration in den amorphen Gebieten immer oberhalb und die der kristallinen Gebiete immer unterhalb der Gesamtkonzentration liegt. Die Ursache für die Schwankungen in der Gesamtkonzentration ist die komplementä-

re Anordnung der amorphen und kristallinen Gebiete in aufeinander folgenden Ebenen. Es wechseln sich Ebenen mit hohem und niedrigem amorphen Anteil ab. Die amorphen Gebiete entziehen benachbarten Ebenen den Kohlenstoff. Demnach ergeben sich Konzentrationsmaxima in Ebenen mit hohem amorphen Anteil und Minima für Ebenen mit hohem kristallinen Anteil. Wie in Abschnitt 6.1.5 ist diese Anordnung also eine Folge der Diffusion. Gleichzeitig steigt in den Ebenen mit viel amorphem Anteil die Kohlenstoffkonzentration auch in den amorphen und kristallinen Gebieten. Dies deutet darauf hin, dass die amorphen Ausscheidungen in den Ebenen mit großem amorphen Anteil schon länger stabil existieren und demnach mehr Kohlenstoff durch den Diffusionsprozess gewonnen haben als die Ausscheidungen in den anliegenden Ebenen. Umgekehrt wurden Ebenen mit wenig kristallinem Anteil folglich weniger Kohlenstoff entzogen als Ebenen mit vielen kristallinen Gebieten. Weiterhin erkennt man an den schwarz gestrichelten Linien in Abbildung 6.16 b), dass in den, der durchgehend amorphen Schicht am nächsten gelegenen amorphen Lamellen, eine annähernd gleich hohe Konzentration an Kohlenstoff, wie an der vorderen und hinteren Grenzfläche zur durchgehend amorphen Schicht, vorhanden ist. Diese charakteristische Konzentration von ungefähr  $17 \text{ at.}\%$  wird einerseits für die Bildung einer durchgehenden Schicht und andererseits für die Bildung stabiler Lamellen, im Gegensatz zu einzelnen stabilen Ausscheidungen, benötigt. Die Maxima der Kohlenstoffkonzentration in den kristallinen Gebieten an der vorderen Grenzfläche sind in Abbildung 6.16 durch die blauen gestrichelten Linien markiert. Man kann eine Sättigungsgrenze zwischen  $8,0$  und  $9,8 \text{ at.}\%$  für Kohlenstoff in kristallinen Silizium unter den gegebenen Implantationsbedingungen an der vorderen Grenzfläche ablesen.

In einer Tiefe von  $400 \text{ nm}$  sinkt die Kohlenstoffkonzentration in den kristallinen Gebieten schlagartig auf Null ab. Der gesamte Kohlenstoff befindet sich in den amorphen Gebieten. Es existieren keine kristallinen Gebiete mehr. Hier beginnt die durchgehend amorphe Schicht. Die Konzentration in den amorphen Gebieten entspricht genau der Gesamtkonzentration.

Nachdem die Kohlenstoffkonzentration ihr Maximum bei  $500 \text{ nm}$  erreicht hat, fällt sie steil ab. In einer Tiefe von ungefähr  $570 \text{ nm}$  steigt der Kohlenstoff wieder schlagartig in den kristallinen Gebieten an. Dies entspricht dem Ende der durchgehend amorphen Schicht. Auffällig ist, dass hier das Maximum der Kohlenstoffkonzentration in kristallinen Gebieten sehr viel höher ist, als das an der vorderen Grenzfläche. Die Konzentrationen in kristallinen und amorphen Gebieten gehen ab einer Tiefe von ungefähr  $600 \text{ nm}$  wieder in die Gesamtkonzentration über. Die Ausscheidungen sind wie die Ausscheidungen bis zu einer Tiefe von  $250 \text{ nm}$  instabil gegenüber Rekristallisation.

Die Tabellen 6.1 und 6.2 fassen die Kohlenstoffkonzentration an der vorderen und hinteren Grenzfläche der durchgehend amorphen Schicht für Experiment und Simulation in Abhängigkeit von der Dosis zusammen. Experimentell wird dies durch die Kombination der Messung des Kohlenstofftiefenprofils mittels Rutherford-Rückstreu-Spektroskopie und der Bestimmung der Tiefe der Grenzflächen mittels Transmissionselektronenmikroskopie realisiert. In der Simulation erfolgt die Auswertung über die Kohlenstofftiefenprofile in amorphen und kristallinen Gebieten. Die Grenzflächen der durchgehend amorphen Schicht befinden sich in Tiefen, in der die Konzentration im Kristallinen auf Null abgefallen beziehungsweise gerade noch Null ist. Durch Ablesen der Konzentrationen im Amorphen in diesen Tiefen erhält man die gewünschten Grenzflächenkonzentrationen.

Die Werte für Simulation und Experiment liegen in der selben Größenordnung und betragen  $12$  bis  $18 \text{ at.}\%$ . Desweiteren stimmen, wie im Experiment, die Konzentrationen an vorderer und hinterer Grenzfläche bis auf einen Fehler von maximal  $3 \text{ at.}\%$  gut überein. Dies ist ein erneuter Hinweis, dass die tiefenabhängige nukleare Bremskraft, die an der hinteren Grenzfläche

sehr viel geringer als an der vorderen ist, eine untergeordnete Rolle im Amorphisierungsprozess einnimmt, und das Überschreiten einer Schwellkonzentration mit dem Amorphisierungsprozess verbunden ist. Die Kohlenstoffkonzentration ist der dominierende Faktor für die Bildung der durchgehend amorphen  $SiC_x$ -Schicht.

Dosis	C-Konzentration an vorderer Grenzfläche	C-Konzentration an hinterer Grenzfläche
$2,1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	16 at.%	13 at.%
$3,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	13 at.%	14 at.%
$3,4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	14 at.%	12 at.%

Tabelle 6.1: Experimentell bestimmte Kohlenstoffkonzentration an den Grenzflächen der amorphen Schicht in Abhängigkeit der Dosis aus [10].

Durchläufe	äquivalente Dosis	C-Konzentration an vorderer Grenzfläche	C-Konzentration an hinterer Grenzfläche
$80 \times 10^6$	$2,16 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	15,21 at.%	16,62 at.%
$120 \times 10^6$	$3,25 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	15,80 at.%	17,67 at.%
$159 \times 10^6$	$4,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	17,28 at.%	17,73 at.%

Tabelle 6.2: Durch die Simulation ermittelte Kohlenstoffkonzentration an den Grenzflächen der amorphen Schicht in Abhängigkeit der Anzahl der Durchläufe.

### 6.2.3 Position und Ausdehnung der amorphen Phase

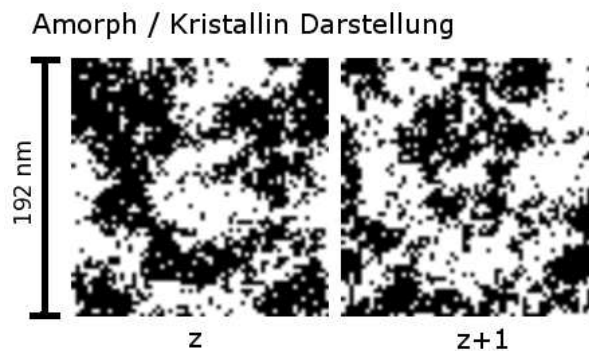


Abbildung 6.17: Amorph/Kristalline Struktur in zwei aufeinander folgenden  $x - y$ -Schnitten in der Ebene  $z = 127$  und  $z = 128$  im Tiefenbereich der lamellaren Strukturen der Simulation mit  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_r = 0,5$ ,  $d_v = 10^6$  und  $s = 158 \times 10^6$  (Abbildung 6.19 b)).

Abbildung 6.17 zeigt die amorph/kristalline Struktur in zwei aufeinander folgenden Ebenen  $z$  und  $z+1$  in einem Tiefenbereich mit lamellaren Strukturen. Sie bestätigt die Vermutung



der nahezu komplementären Anordnung amorpher und kristalliner Gebiete in aufeinander folgenden Ebene in diesem Tiefenbereich. Dies hebt erneut die Wichtigkeit der Diffusion für den Selbstorganisationsprozess der lamellaren Strukturen hervor.

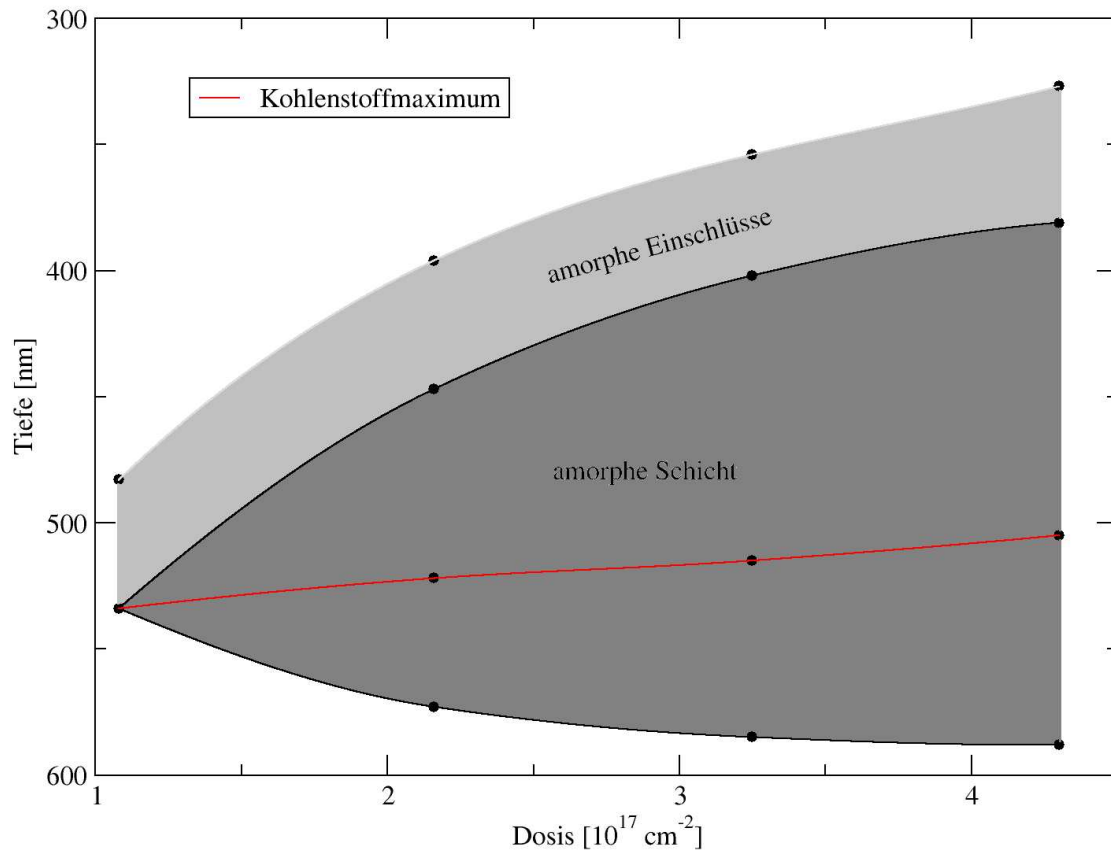


Abbildung 6.18: Position und Ausdehnung amorpher Phasen (graue Flächen) und Kohlenstoffkonzentrationsmaximum (rot) in Abhängigkeit der Dosis in der Simulation aus Abbildung 6.13/6.14.

Abbildung 6.18 zeigt die aus der Simulation ermittelte Position und Ausdehnung der amorphen Phasen. Zusätzlich ist der Verlauf des Kohlenstoffmaximums eingezeichnet. Die amorphe Schicht erstreckt sich um das Kohlenstoffverteilungsmaximum. Die Ausdehnung der durchgehend amorphen Schicht stimmt gut mit den in [10] experimentell bestimmten Werten in Abbildung 3.2 überein. Aufgrund des verschobenen Kohlenstoffmaximums in dem verwendeten Implantationsprofil der *SRIM 2003.26* Version, sind die Lage der amorphen Schicht und das Kohlenstoffmaximum um ungefähr  $30\text{ nm}$  tiefer vorzufinden. Desweiteren ist der Bereich amorpher Einschlüsse in Abbildung 6.18 abgebildet. Diese existieren, wenn auch nur sehr wenige, in der Simulation schon kurz unterhalb der Oberfläche des Targets. Mit optischen und elektronenmikroskopischen Messungen aus [49] wurde die Sensitivität einer TEM-Messung auf amorphe Ausscheidungen bestimmt. Demnach muss mindestens 23 % amorpher Anteil vorhanden sein, um amorphe Ausscheidungen im TEM detektieren zu können. Um einen Vergleich mit den experimentell bestimmten Daten aus Abbildung 3.3 anstellen zu können, bestimmt

*NLSOP* nach diesem Wert den Beginn der amorphen Ausscheidungen. In der Simulation liegt dieser konstant für jede Dosis ungefähr  $50\text{ nm}$  über dem Beginn der durchgehend amorphen Schicht. Dieser Abstand wird experimentell zwar für eine Dosis von  $8,5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  gemessen, jedoch nimmt der Abstand zur Schicht mit abnehmender Dosis zu, wie in Abbildung 3.3 zu sehen ist. Nach Angaben des Authors aus [10] war es jedoch sehr schwer den Beginn der amorphen Ausscheidungen aus den TEM-Aufnahmen zu ermitteln. Daher muss gerade für kleine Dosen ein großer Fehler angenommen werden.

#### 6.2.4 Variation der Simulationsparameter

Im Folgenden sollen Ergebnisse mit variierten Simulationsparametern vorgestellt und interpretiert werden. Dabei wird von dem Satz der Parameter aus Abschnitt 6.2.1 ausgegangen und einzelne Parameter variiert. So werden die Einflüsse einzelner Parameter auf das Ergebnis sichtbar. Abbildung 6.19 a) zeigt zum Vergleich die Simulation mit dem Ausgangsparametersatz  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_v = 1 \times 10^6$ ,  $d_r = 0,05$  und  $s \approx 159 \times 10^6$ .

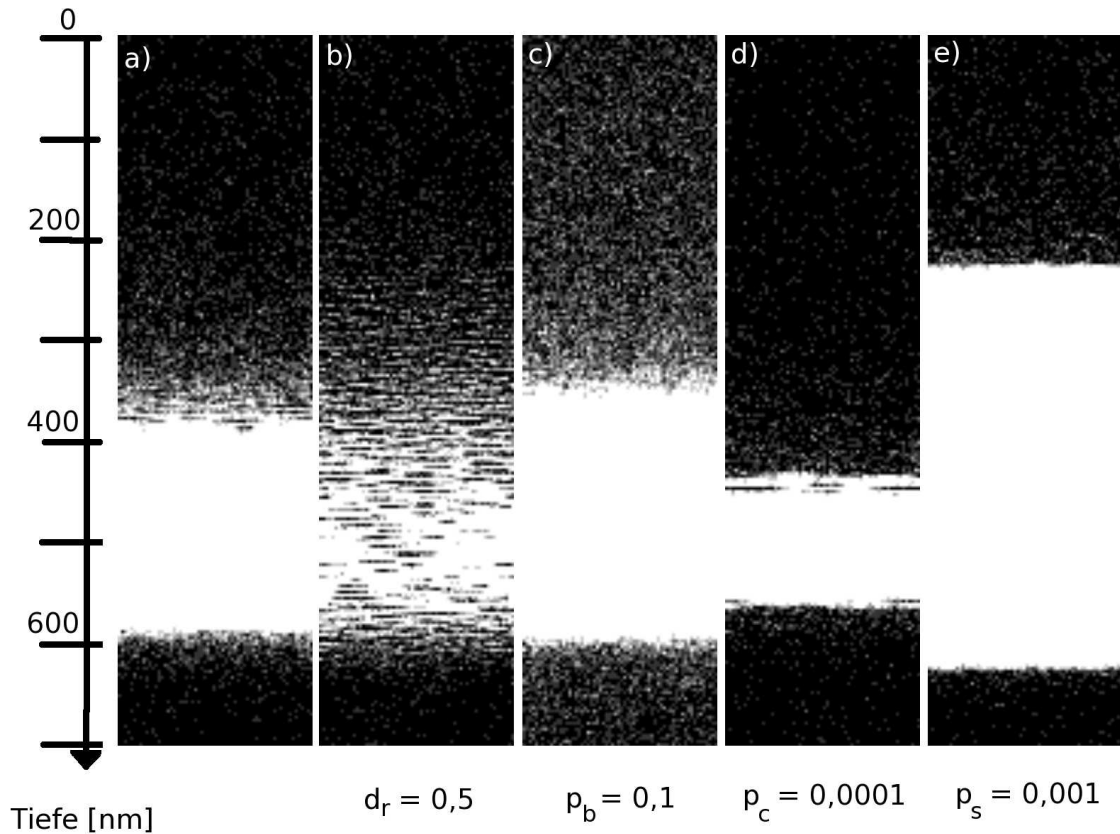


Abbildung 6.19: Variation der Simulationsparameter. Ausgangssituation in a):  $p_b = 0,01$ ,  $p_c = 0,001$ ,  $p_s = 0,0001$ ,  $d_r = 0,05$ ,  $d_v = 1 \times 10^6$ ,  $s \approx 159 \times 10^6$ . Variation des Parameters b)  $d_r$ , c)  $p_b$ , d)  $p_c$  und e)  $p_s$ .

In Abbildung 6.19 b) wurde die Diffusion durch einen größeren Wert des Parameters  $d_r$  er-

hört. Es bildet sich keine durchgehend amorphe Schicht. Man erkennt fast nur noch amorphe Lamellen. Die hohe Diffusionsrate des Kohlenstoffs bewirkt, dass selbst im Implantationsmaximum zufällig amorph gewordene Gebiete ihren kristallinen Nachbarebenen zu schnell den Kohlenstoff entziehen. Dieser Prozess ist notwendig für die Bildung der Lamellen, jedoch verhindert er in diesem Fall die Bildung einer durchgehend amorphen  $SiC_x$ -Schicht. Die Amorphisierungswahrscheinlichkeit in den kohlenstoffarmen kristallinen Gebieten ist daher zu klein. Die Diffusion ist somit ein sensibler Faktor bei der Bildung der durchgehend amorphen Schicht sowie der Bildung der Lamellen.

Der Versuch, die Bildung der durchgehend amorphen Schicht in geringeren Tiefen zu erzeugen ist in 6.19 c) abgebildet. Dazu wurde der Einfluss der ballistischen Amorphisierung  $p_b$  erhöht. Da das nukleare Bremskraftmaximum vor dem Maximum der Kohlenstoffkonzentration liegt (Abbildungen 5.5/5.3), sollte sich eine stärkere Amorphisierung im oberen Fall des Implantationsprofils ergeben. Dies ist auch tatsächlich feststellbar. Jedoch steigt auch die Anzahl amorpher Gebiete insgesamt an. Dies ist verständlich, da die Amorphisierungswahrscheinlichkeit unabhängig von Lage oder Zustand steigt. Die durchgehende Schicht nimmt nach oben hin auf Kosten der lamellaren Ausscheidungen zu. Die allgemein höhere Wahrscheinlichkeit der Amorphisierung begünstigt eine komplette Amorphisierung im lamellaren Bereich. Da gleichzeitig die Rekristallisationswahrscheinlichkeit sinkt, haben die ballistisch amorphisierten Gebiete eine höhere Chance, sich durch implantierten beziehungsweise diffundierten Kohlenstoff zu stabilisieren. Die hintere Grenzfläche der durchgehenden Schicht bleibt ungefähr in der selben Tiefe, da hier das Kohlenstoffprofil sehr schnell abfällt. Das Entgegenwirken durch den erhöhten Einfluss der ballistischen Amorphisierung ist sehr gering.

Im Hinblick auf die zu große amorphe Schicht in Abbildung 6.13 b) bei einer Dosis von  $2,1 \times 10^{17} cm^{-2}$  wurde in 6.19 d) der Einfluss der kohlenstoffinduzierten Amorphisierung auf  $p_c = 0,0001$  reduziert. Hierdurch sollte sich eine insgesamt dünnere Schicht ergeben, die im Mittel näher an der Oberfläche liegt. Wie erwartet nimmt die Ausdehnung der amorphen Schicht ab. Mit knapp  $120 nm$  ist sie jedoch zu klein im Vergleich mit dem experimentellen Ergebnis für eine Dosis von  $4,3 \times 10^{17} cm^{-2}$ . Sie erstreckt sich weiterhin um das Kohlenstoffmaximum. Lamellare Strukturen sind außer an den kristallinen Einschlüssen nahe der vorderen Grenzfläche der durchgehenden Schicht nicht zu erkennen. An diesem Ergebnis erkennt man wieder sehr gut, dass die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung den wichtigsten Amorphisierungsmechanismus darstellt.

Der Einfluss der spannungsunterstützten Amorphisierung ist in Abbildung 6.19 e) zu sehen. Hier wurde der Parameter  $p_s$  erhöht. Erstaunlicherweise bewirkt dies eine schnelle und fast komplette Amorphisierung selbst solcher Bereiche im Target, in denen nur wenig Kohlenstoff vorhanden ist. Die amorphe Phase erstreckt sich wieder um das Kohlenstoffmaximum. Die Konzentrationen am vorderen und hinteren Interface betragen beide ungefähr  $1,8 at. \%$ . Da in den Beitrag für die spannungsunterstützte Amorphisierung auch die Kohlenstoffkonzentration eingeht, ist dies nicht weiter verwunderlich. Ballistisch entstandene zusammenhängende amorphe Gebiete üben in Abbildung 6.19 e) mit einem um den Faktor 10 erhöhten Parameter  $p_s$  extrem hohe Druckspannungen aufeinander aus, dass Rekristallisation selbst bei geringem Kohlenstoffanteil sehr unwahrscheinlich ist. Der Diffusionsprozess verliert somit an Bedeutung. Dies führt letztendlich zur kompletten Amorphisierung des Bereichs, der mindestens  $1,8 at. \%$  Kohlenstoff enthält. Lamellare Strukturen werden nicht gebildet.

Damit scheint die Parameterwahl aus Abbildung 6.19 a) ideal zu sein. Zur Findung optimaler Simulationsparameter wurde mit einem sinnvoll erscheinenden, jedoch mehr oder weniger zufällig gewählten Satz von Parametern gestartet. Durch Variation einzelner Parameter

konnten deren Einflüsse auf die Amorphisierung des Targets verstanden und entsprechende Anpassungen der Parameter vorgenommen werden. Demnach ist nicht ausgeschlossen, dass ein anderer Satz von Parametern existiert, der die experimentell bestimmten Ergebnisse besser reproduziert. Es könnte sein, dass die Wahl der Parameter aus Abbildung 6.19 a), nur einem lokalen Optimum in dem höherdimensionalen Optimierungsproblem entspricht. Die experimentell bestimmten Ergebnisse werden durch die Simulation jedoch erstaunlich gut reproduziert. Durch die Wahl der Parameter wird das Zusammenspiel der Amorphisierungs- und Diffusionsmechanismen nachvollziehbar und plausibel erscheinende Erklärungen können daraus abgeleitet werden. Es wird davon ausgegangen, dass der vorliegende Satz an Parametern aus Abbildung 6.19 a) optimal ist.

### 6.2.5 Zusammenfassung

Die zweite Version der Simulation beschreibt den Tiefenbereich von 0 bis 700 nm, in dem sich unterhalb der lamellaren Ausscheidungen die durchgehend amorphe  $SiC_x$ -Schicht befindet. Die Simulation ist in der Lage die experimentell bestimmte dosisabhängige Bildung der amorphen Phasen zu reproduzieren. Ein entsprechender Satz an Simulationsparametern wurde ermittelt. Bis auf eine Verschiebung der Tiefenposition der amorphen Schicht, die durch das verwendete Implantationsprofil der *SRIM 2003.26* Version erklärt werden kann, stimmen Simulation und Ergebnis des Experimentes sehr gut überein. Im Rahmen der Messgenauigkeit werden auch ähnliche Tiefen für den Beginn der amorphen Einschlüsse in Simulation und experimentellen Befund erkannt. Lamellare Strukturen entstehen und werden mit zunehmender Dosis schärfer. In diesem Bereich erkennt man in aufeinander folgenden Ebenen, wie in Version 1 der Simulation, eine nahezu komplementäre Anordnung der amorphen und kristallinen Ausscheidungen. Ursache hierfür ist der Diffusionsprozess. Dies wird durch Untersuchungen der Kohlenstoffkonzentration im gesamten Target belegt, die speziell in diesem Bereich Schwankungen aufweist. Weiterhin kann daraus eine Schwellkonzentration für Kohlenstoff in kristallinen Silizium unter den gegebenen Implantationsbedingungen abgelesen werden. Die in dieser Version berücksichtigten Sputtereffekte führen zu einer Verschiebung des Kohlenstoffkonzentrationsmaximums. Die Kohlenstoffkonzentrationen an der vorderen und hinteren Grenzfläche (15 bis 18 at.%) stimmen wie im Experiment bis auf 3 at.% überein und liegen in der gleichen Größenordnung wie die experimentell bestimmten Grenzflächenkonzentrationen. Dies zeigt erneut die wichtige Rolle der kohlenstoffinduzierten Amorphisierung im Amorphisierungsprozess auf. Essentiell für die Bildung lamellarer Strukturen ist die Diffusion, die, wenn sie zu schnell abläuft, die Bildung einer durchgehend amorphen Schicht verhindert und nur Lamellen entstehen lässt. Zu hohe Werte für den Parameter der Druckspannungen führen dagegen zu einer kompletten Amorphisierung des kohlenstoffhaltigen Bereichs im Target.

### 6.3 Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen durch Mehrfachimplantation

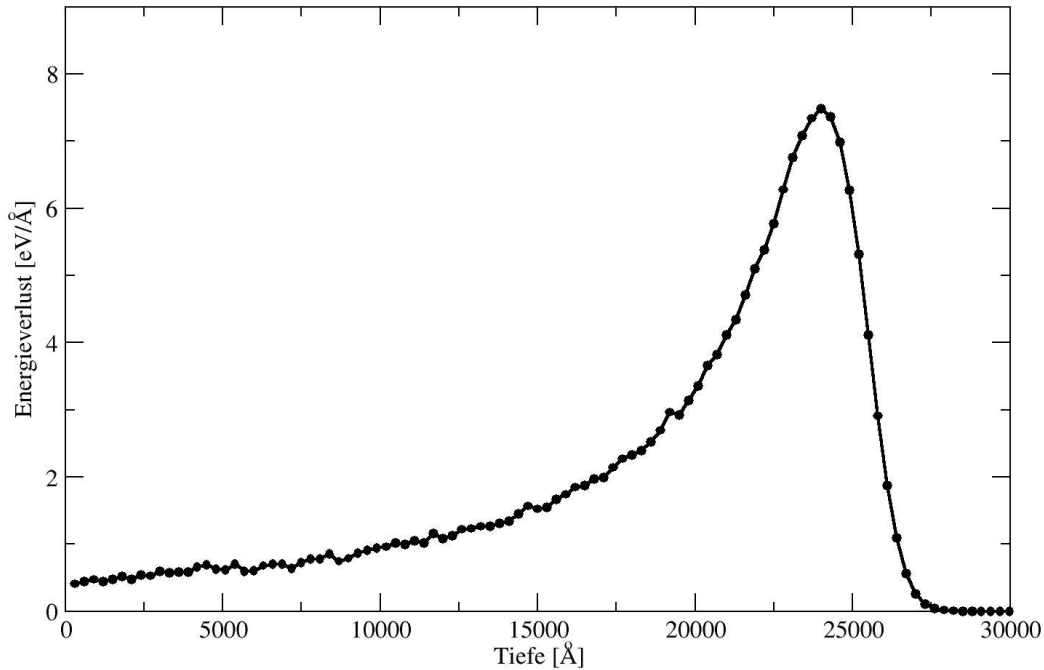


Abbildung 6.20: Durch *SRIM 2003.26* ermittelte nukleare Bremskraft von  $2\text{ MeV } C^+$  in Silizium.

Im Folgenden soll geprüft werden, ob ein zweiter Implantationsschritt einen geeigneten Mechanismus zur Erzeugung breiter lamellarer Bereiche darstellt. Die Idee ist folgende. Als Grundlage dient ein Siliziumtarget, das wie bisher mit  $180\text{ keV } C^+$ -Ionen beschossen wird. Ein Abbildung 6.15 entsprechendes Implantationsprofil stellt sich ein. Allerdings soll das Target durchgehend kristallin sein. Dies lässt sich experimentell durch Erhöhung der Targettemperatur erreichen. Nach [33] reicht für eine maximale Dosis von  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  eine Temperatur von  $500\text{ °C}$  aus, um Amorphisierung zu verhindern.

Das kristalline Target wird dann mit  $2\text{ MeV } C^+$ -Ionen bei der gewohnten Implantationstemperatur von  $150\text{ °C}$  bestrahlt. Abbildung 6.20 zeigt das durch *SRIM 2003.26* ermittelte nukleare Bremskraftprofil. Die nukleare Bremskraft ist in dem Tiefenbereich zwischen 0 und  $700\text{ nm}$  wesentlich flacher als die der  $180\text{ keV}$ -Implantation und nahezu konstant in dem bisher betrachteten Bereich um das Kohlenstoffkonzentrationsmaximum der  $180\text{ keV}$ -Implantation. Stöße im Bereich hoher Kohlenstoffkonzentration sind demnach annähernd gleichverteilt bezüglich der Tiefe. Aufgrund der hohen Energie kommt kaum noch weiterer Kohlenstoff im relevanten Tiefenbereich um  $500\text{ nm}$  herum zur Ruhe, wie man aus dem zugehörigen durch *SRIM 2003.26* ermittelten Implantationsprofil in Abbildung 6.21 erkennen kann.

Bei geeigneter Wahl der Ausgangskonzentration ist zu erwarten, dass nicht der komplette kohlenstoffhaltige Bereich amorph wird. Die durch die erste Implantation eingestellte Konzentration sollte idealerweise so hoch sein, dass bei der  $2\text{ MeV}$ -Ionenbestrahlung die kohlenstoff-

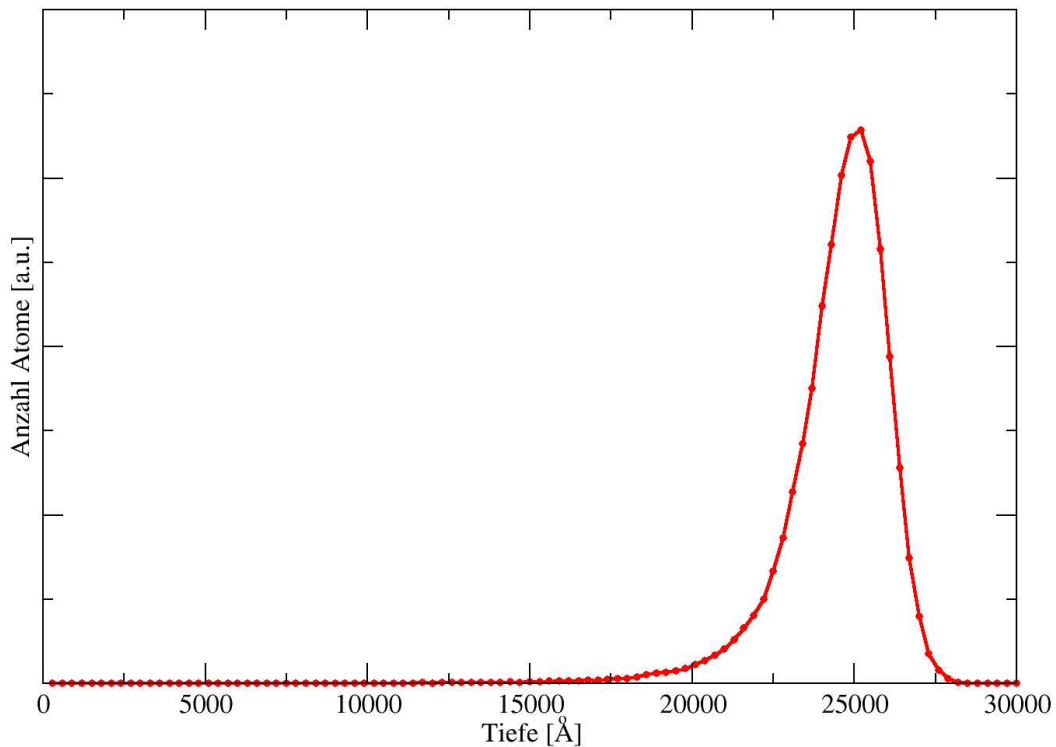


Abbildung 6.21: Durch *SRIM 2003.26* ermitteltes Implantationsprofil von  $2\text{ MeV } C^+$  in Silizium.

induzierte Amorphisierung zusammen mit dem Spannungsbeitrag amorpher Nachbarn gerade hoch genug ist, um die Stabilität der amorphen Phase zu gewährleisten. Dies sollte zur Bildung amorpher Lamellen führen. Wird genügend lange implantiert, trägt die Diffusion des Kohlenstoffs zur Stabilisierung der amorphen Ausscheidungen bei.

Für die Simulation werden dazu die Werte für die Gewichtung der Amorphisierungsbeiträge aus Abbildung 6.13/6.14 übernommen, da das gleiche Materialsystem beschrieben wird. Außerdem wird das  $180\text{ keV}$ -Bremskraft- und Implantationsprofil durch die Profile in Abbildung 6.20 und 6.21 ersetzt. Aufgrund der höheren Energie verursachen die Ionen durchschnittlich weniger Kollisionen in dem betrachteten Tiefenbereich von 0 bis  $700\text{ nm}$ . Nach Auswertung der *SRIM*-Datei trifft ein Ion durchschnittlich ungefähr 20 Zellen des Simulationsfensters. Die Sputterroutine wird nicht ausgeführt, was allerdings keine große Auswirkung auf das Ergebnis hat. Einerseits ist die nukleare Bremskraft für  $\text{MeV}$ -Ionen deutlich kleiner als für die Ionen der Implantation im  $\text{keV}$  Bereich, was eine wesentlich kleinere Sputterraten zur Folge haben sollte. Andererseits kann das nukleare Bremskraftprofil im Bereich, der durch Sputtern verursachten Tiefenverschiebung von einigen  $\text{nm}$ , als nahezu konstant angesehen werden. Unter der Annahme, dass die Implantation mit der selben Dosisrate stattfindet, werden außerdem die Diffusionsparameter beibehalten. Für die Erzeugung einer Ausgangskonfiguration kann das Programm *nlsop\_make\_cryst* (Anhang A.6) in einem beliebigen gespeicherten Simulationsergebnis den Status jedes Würfels auf kristallin abändern. Die Kohlenstoffkonzentration wird nicht verändert. Man muss ein Ergebnis verwenden, das mit einer Dosis die der gewünschten

Ausgangskonfiguration entspricht implantiert wurde, jedoch kaum amorphe Ausscheidungen, die durch den Diffusionsprozess das Implantationsprofil abgeändert hätten, aufweisen.

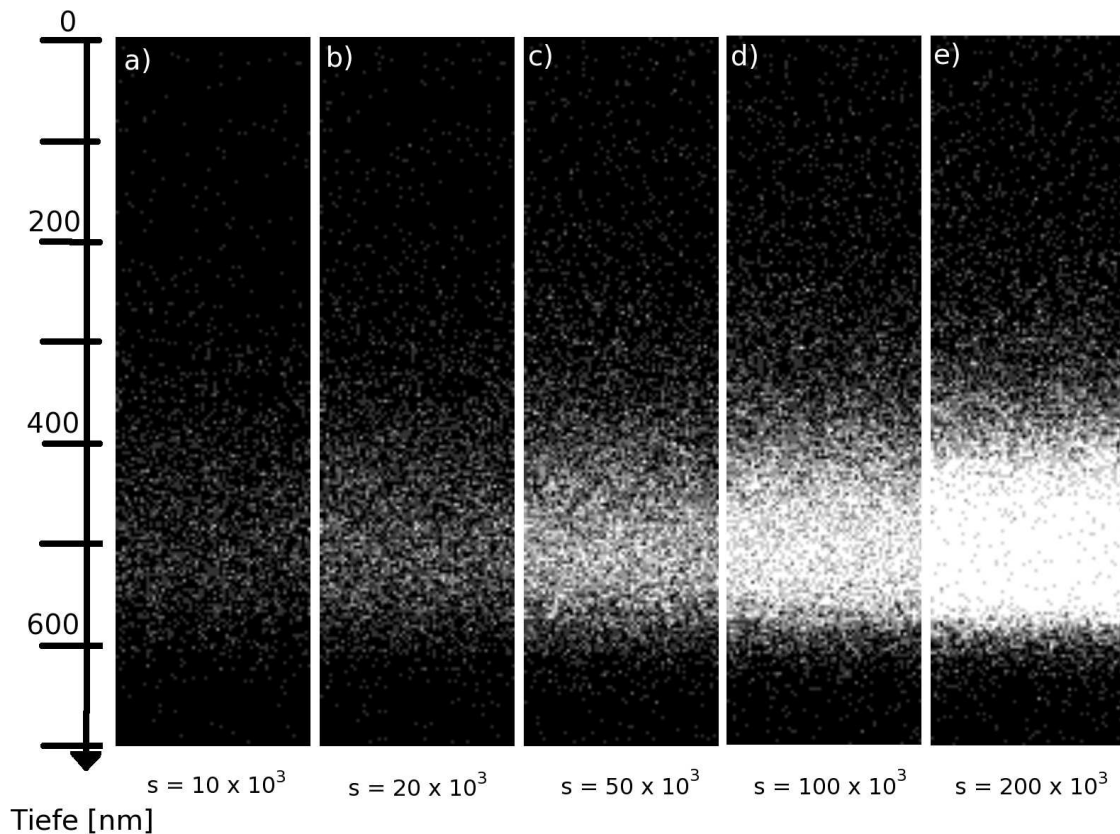


Abbildung 6.22: Entwicklung der Verteilung amorpher Gebiete mit zunehmender Dosis im zweiten Implantationsschritt mit  $2\text{ MeV } C^+$ -Ionen in  $180\text{ keV } C^+$  implantiertes Silizium mit der Dosis  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ .

Abbildung 6.22 zeigt die Entwicklung der Verteilung amorpher Gebiete mit zunehmender Dosis während des zweiten Implantationsschrittes mit  $2\text{ MeV } C^+$ -Ionen. Für die Ausgangsverteilung wurde ein erster Implantationsschritt mit der Dosis  $4,3 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  gewählt. Wie Abbildung 6.22 e) zeigt, reicht schon eine Dosis von  $5,4 \times 10^{14}\text{ cm}^{-2}$  im zweiten Implantationsschritt für eine komplette Amorphisierung des kohlenstoffhaltigen Bereichs. Diese Ausgangskonzentration ist also nicht geeignet für die Herstellung breiter lamellarer Ausscheidungen. Es ist zu viel Kohlenstoff vorhanden. Der kohlenstoffhaltige Bereich amorphisiert schon vor dem ersten Diffusionsschritt, der notwendig für die Selbstorganisation der lamellaren Ausscheidungen ist.

In Abbildung 6.16 erkennt man, dass die Kohlenstoffkonzentration im Bereich lamellarer Ausscheidungen zwischen  $10$  und  $17\text{ at.}\%$  liegt. Durch Vergleich mit den Kohlenstoffkonzentrationsmaxima für verschiedene Dosen in Abbildung 6.15 bietet sich die Verwendung einer mit  $1,1 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  implantierten Probe an, die dem Profil mit  $40 \times 10^6$  Durchläufen entspricht. Für die Erzeugung einer solchen Ausgangskonfiguration reicht es die Targettemperatur auf  $200^\circ\text{C}$  zu erhöhen [33]. Das Ergebnis des  $\text{MeV}$ -Implantationsschrittes ist in Abbildung 6.23

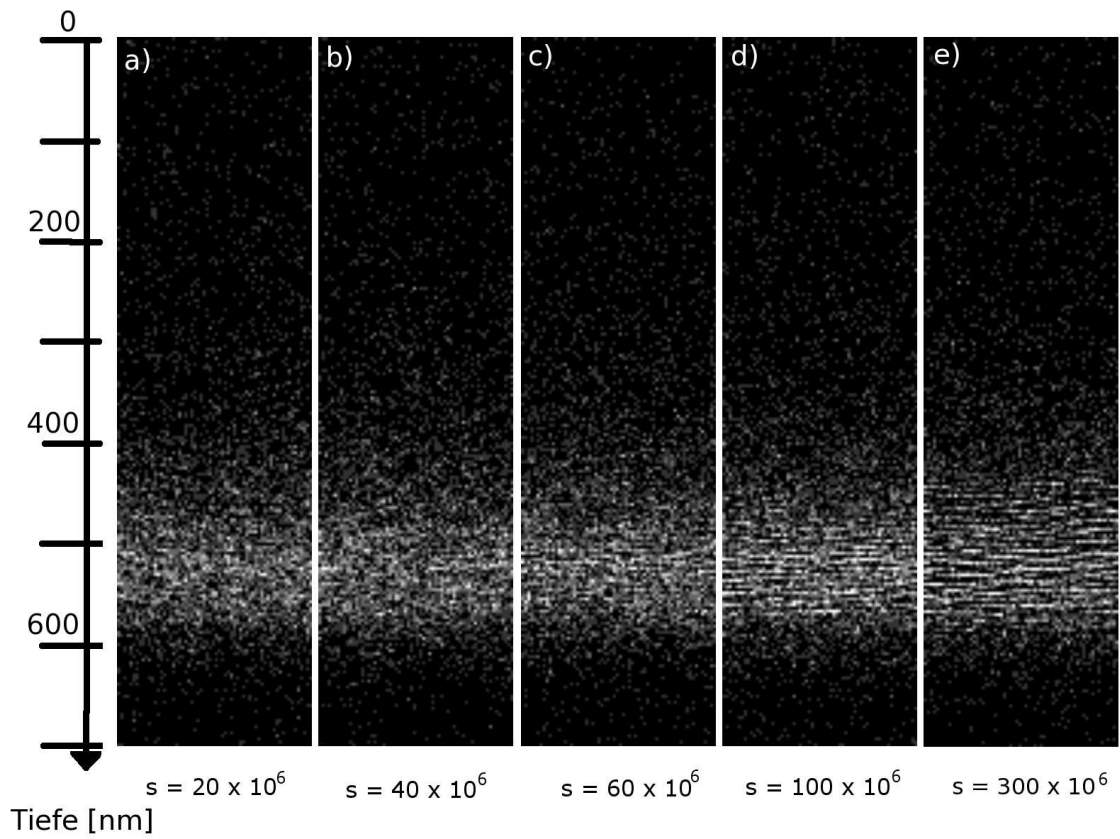


Abbildung 6.23: Entwicklung amorpher Ausscheidungen mit steigender Dosis des zweiten Implantationsschrittes mit  $2\text{ MeV } C^+$ -Ionen in  $180\text{ keV } C^+$  implantiertes Silizium mit der Dosis  $1,1 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ . Die maximale Anzahl der Durchläufe von  $300 \times 10^6$  entspricht einer implantierten Dosis von  $8,13 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$ .

dargestellt. Nach  $20 \times 10^6$  Schritten (Abbildung 6.23 a)), was einer Dosis von  $0,54 \times 10^{17}\text{ cm}^{-2}$  entspricht, sind zufällig verteilte amorphe Ausscheidungen zu erkennen. Es hat sich keine durchgehende Schicht gebildet. Die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung reicht allein nicht aus, um den kompletten kohlenstoffhaltigen Bereich zu amorphisieren. Lamellen sind noch nicht zu erkennen. Aufgrund der spannungsunterstützten Amorphisierung werden bei steigender Dosis bevorzugt laterale Nachbarn amorpher Gebiete amorphisiert beziehungsweise gegen Rekristallisation stabilisiert. Die Diffusion führt zu einer wirksamen Umverteilung von Kohlenstoff, bevor das Target komplett amorphisiert ist. Diese fördert den Selbstorganisationsprozess, da der diffundierte Kohlenstoff den kohlenstoffinduzierten Anteil der Amorphisierungswahrscheinlichkeit und die Spannungen auf die Nachbarn erhöht. Gleichzeitig sinkt die Amorphisierungswahrscheinlichkeit in den anliegenden kristallinen Ebenen. In den Abbildungen 6.23 b) bis e) erkennt man sehr schön die Entwicklung der Lamellen, die mit zunehmender Dosis immer schärfer werden. Man kann davon ausgehen, dass bei fortgeführter Implantation die lamellare Struktur noch schärfer wird. Weiterhin fällt auf, dass sich mit steigender Dosis die Lamellenstruktur in das Gebiet niedriger Kohlenstoffkonzentration ausdehnt. Nach einer großen Anzahl von Diffusionsdurchgängen können sich auch hier lamellare Ausscheidungen



selbstorganisieren. Da kaum Kohlenstoff der  $2\text{ MeV}$ -Implantation in dem betrachteten Tiefenbereich zur Ruhe kommt, erwartet man keine Bildung einer durchgehenden Schicht auf Kosten des lamellaren Bereichs.

Die Herstellung breiter Bereiche von amorphen lamellaren Auscheidungen durch einen zweiten Implantationsschritt ist laut Simulationsergebnis demnach möglich. Als Ausgangskonfiguration muss eine Probe verwendet werden, die einen Kohlenstoffgehalt von ungefähr  $10\text{ at.}\%$  im Implantationsmaximum hat.

Für die Herstellung noch größerer lamellarer Schichten ist eine möglichst breite, konstante und kastenförmige Verteilung des Kohlenstoffs ideal. Ein solches Profil erzeugt man durch mehrfache Implantationsdurchläufe, indem man mit einer Ionenenergie von  $180\text{ keV}$  beginnt und diese Schritt für Schritt bis auf  $10\text{ keV}$  reduziert. Dadurch kann ein annähernd plateau-förmiger Verlauf der Kohlenstoffkonzentration erzeugt werden, der bei ungefähr  $500\text{ nm}$  im wesentlichen dem Abfall des  $180\text{ keV}$ -Profils entspricht.

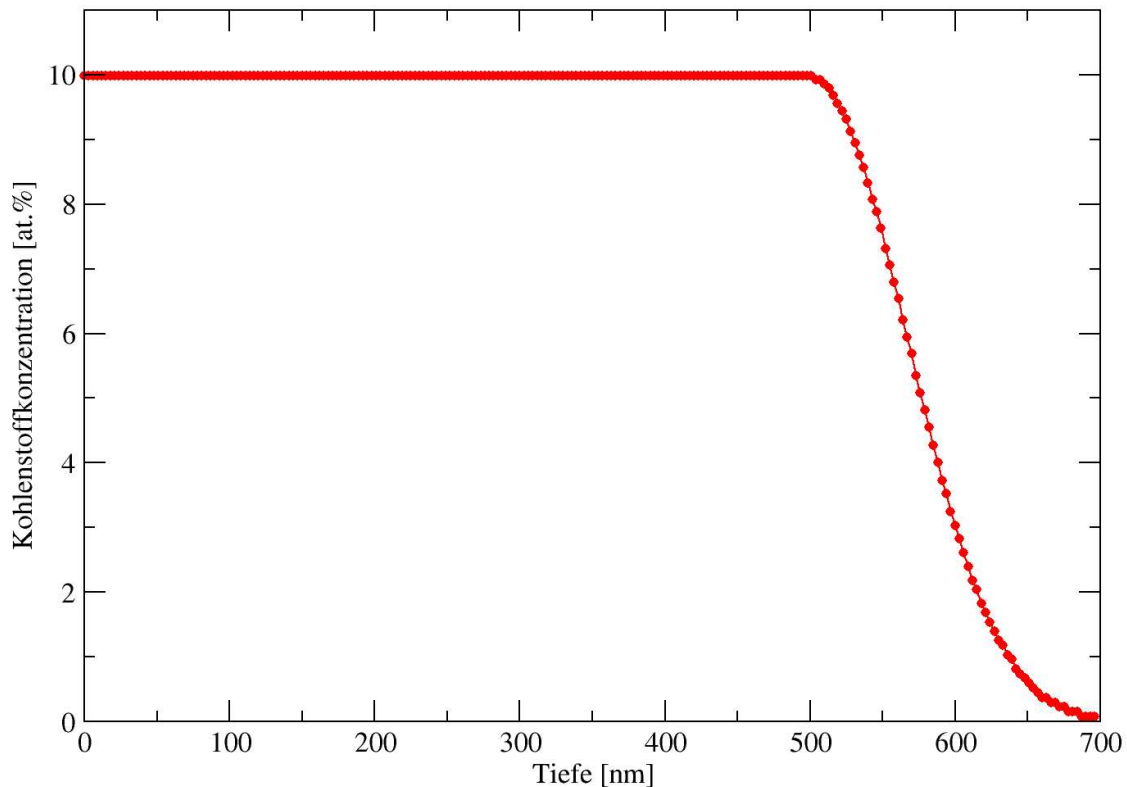


Abbildung 6.24: Ideale plateauförmige Kohlenstoffverteilung mit Abfall entsprechend des  $180\text{ keV } C^+$ -Implantationsprofils ab einer Tiefe von  $500\text{ nm}$ , erzeugt durch das Programm *nlsop\_create\_cbox* und experimentell realisiert durch mehrfaches Implantieren mit Ionenenergien von  $10$  bis  $180\text{ keV}$ .

Ein solches Profil kann für die Simulation mit dem Programm *nlsop\_create\_cbox* erzeugt werden. Wählt man eine maximale Konzentration von  $10\text{ at.}\%$ , so erhält man das Implantationsprofil in Abbildung 6.24.

Die Entwicklung der amorphen Lamellen unter Bestrahlung des Targets mit der in Ab-

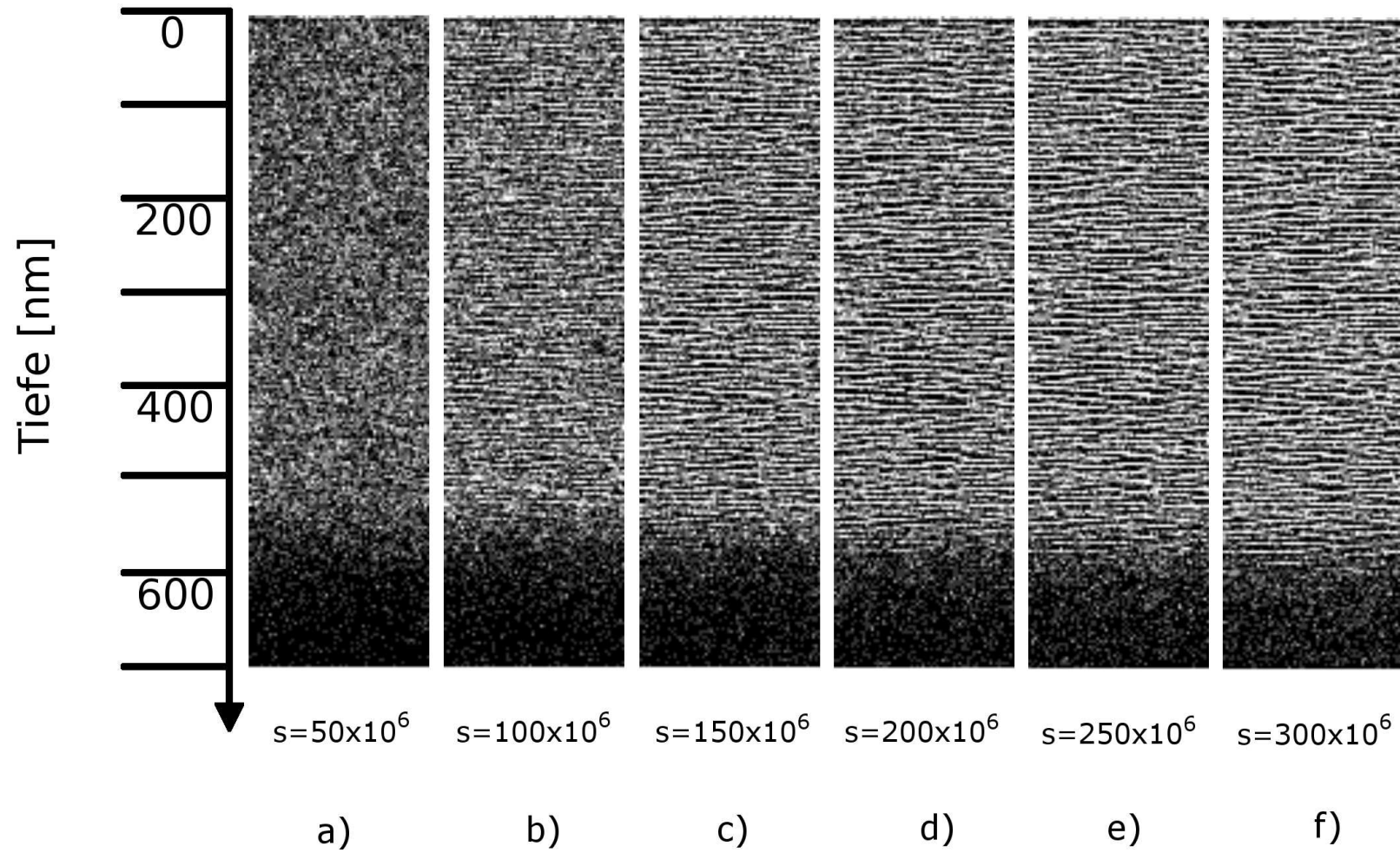


Abbildung 6.25: Entwicklung amorpher Ausscheidungen über den weiten Bereich des Kohlenstoffplateaus aus Abbildung 6.24 mit zunehmender Dosis des  $MeV$ -Implantationsschrittes. Die maximale Anzahl der Durchläufe in f) von  $300 \times 10^6$  entspricht einer implantierten Dosis von  $8,13 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ .

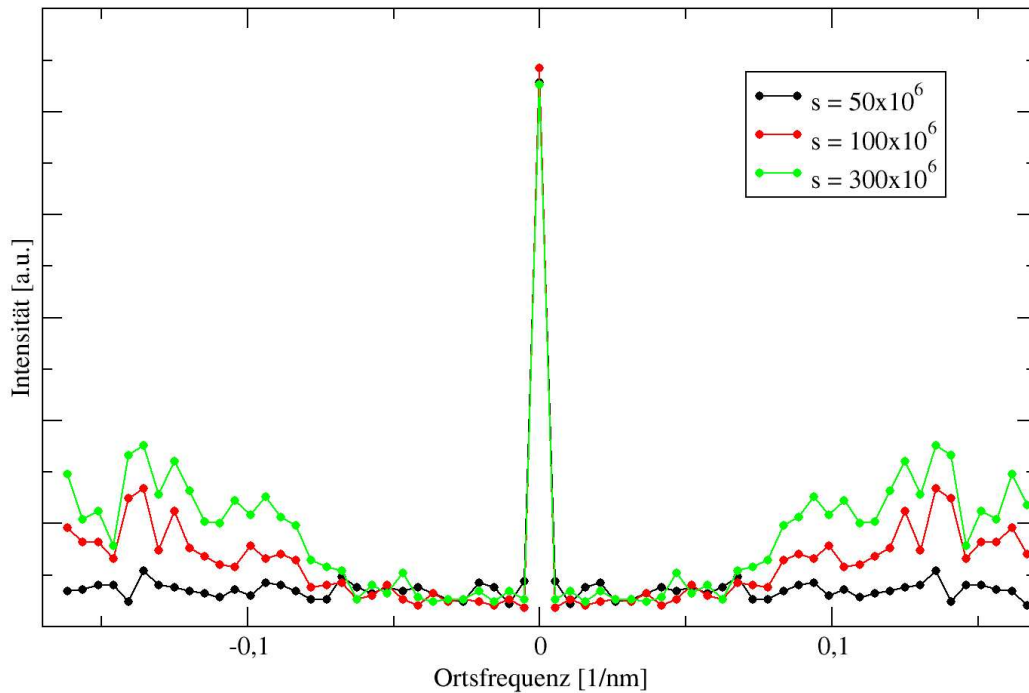


Abbildung 6.26: Linescans der fouriertransformierten  $64 \times 64$  Pixel großen Ausschnitte der Querschnittsaufnahmen aus Abbildung 6.25 a), b) und f).

bildung 6.24 gegebenen Kohlenstoffverteilung mit  $2 \text{ MeV } C^+$ -Ionen ist in Abbildung 6.25 zu sehen. Nach  $50 \times 10^6$  Durchläufen (Abbildung 6.25 a)), was einer Dosis von  $1,36 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  entspricht, sind zufällig verteilte Ausscheidungen in dem Bereich des Kohlenstoffplateaus entstanden. Wie erwartet hat sich keine durchgehend amorphe Schicht gebildet. Wie im oberen Fall reicht die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung nicht aus, um den kohlenstoffhaltigen Bereich komplett zu amorphisieren. Die Gebiete sind noch sehr instabil gegenüber Rekristallisation. Durch die Druckspannungen werden laterale Nachbarn amorpher Gebiete mit höherer Wahrscheinlichkeit amorphisieren. Mit steigender Dosis und somit fortgeführter Diffusion beginnen sich so lamellare Ausscheidungen zu stabilisieren. Die Organisation und Stabilisierung der lamellaren Ausscheidungen erkennt man bereits bei der doppelten Dosis in Abbildung 6.25 b). In den Lamellen befindliche amorphe Gebiete werden aufgrund der hohen Druckspannungen nur noch sehr unwahrscheinlich rekristallisieren. Dagegen werden alleinstehende amorphe Gebiete in kristalliner Umgebung früher oder später ausheilen. Der Kohlenstoff diffundiert in die anliegende amorphe Nachbarschaft, so dass die Wahrscheinlichkeit der Amorphisierung in der kristallinen Ebene sinkt. Daher beobachtet man mit steigender Dosis die deutlichere Abgrenzung der amorphen und kristallinen Lamellen (Abbildung 6.25 b) - f)). Die Ausscheidungen werden schärfer.

Dies erkennt man auch in Abbildung 6.26. Die Abbildung zeigt die Linescans von den fouriertransformierten  $64 \times 64$  Zellen großen Ausschnitten der Querschnittsaufnahmen a), b) und f) aus Abbildung 6.25. Für die erste Anzahl an Durchläufen ( $s = 50 \times 10^6$ ) erkennt man kein Maximum in der Intensität ungleich der Ortsfrequenz Null. Mit steigender Ordnung des lamellaren Charakters erkennt man einen deutlichen Anstieg der Intensität für Frequenzen

im Bereich  $f_z = 0,13 \text{ nm}^{-1}$ . Die Intensitäten steigen nur langsam mit der Dosis an, was man auch schon aus den Abbildungen 6.25 c) bis f) erahnen kann. Die Schärfe der Ausscheidungen, die bereits in Abbildung 6.25 c) sehr hoch ist, ändert sich kaum noch. Weiterhin ist keine Frequenzverschiebung des Maximums zu erkennen, was auf einen konstanten Abstand der Lamellen - unabhängig von der Dosis - hinweist. Auffällig ist auch die Ausdehnung der amorphen Ausscheidungen in das Gebiet der stark abfallenden Kohlenstoffkonzentration mit steigender Dosis. Das Ende des lamellaren Bereichs wächst von 550 auf ungefähr 600 nm an. Aufgrund der niedrigen Kohlenstoffkonzentration in diesem Bereich ist klar, dass ein Ordnungsprozess hin zu kohlenstoffhaltigen Ausscheidungen längere Zeit benötigt.

Die Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Nanostruktur ist entsprechend des Simulationsergebnisses möglich. Aufgrund neuer Untersuchungen [50] ist anzunehmen, dass solche Nanostrukturen Ausgangspunkt für Materialien mit starker Photolumineszenz darstellen.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Monte-Carlo-Simulationsverfahren entwickelt, das es erstmals erlaubt, die selbstorganisierte Anordnung amorpher, nanometrischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen mittels Computersimulation zu analysieren, die in vorangegangenen Arbeiten [5, 7, 10] nach Hochdosis-Kohlenstoff-Ionenimplantation in Silizium beobachtet wurde und die in ähnlicher Form auch für andere Ion-Target-Kombinationen gefunden wurde. Diese  $SiC_x$ -Ausscheidungen haben die Form dünner Lamellen oder kleiner Kugeln von nur etwa  $3\text{ nm}$  Dicke. Sie ordnen sich während der Implantation in regelmäßigen Abständen von wenigen  $\text{nm}$  an. Ein genaues Verständnis des Zustandekommens dieser Ordnung ist wichtig, weil dies einen Weg eröffnet, mittels Ionenimplantation unter Ausnutzung von Selbstorganisation nanostrukturierte Oberflächenbereiche mit regelmäßigen Strukturen zu schaffen.

Die Simulation basiert auf einem Modell [8, 9], das eine Reihe von miteinander verknüpften Mechanismen zur Erklärung der Entstehung dieser lamellaren Strukturen verwendet. Jeder dieser Mechanismen kommt bei jedem implantierten Ion wieder zum Tragen. Die Mechanismen sind dabei sowohl von der in diesem Zeitpunkt vorliegenden Struktur selbst als auch von der Abbremsstatistik des Ions abhängig. Daher bietet es sich an, die Entwicklung der Struktur durch eine Monte-Carlo-Simulation zu verfolgen. Sie erlaubt es, sowohl die Dosisabhängigkeit der Ausscheidungsanordnung zu ermitteln, als auch experimentell schwer zugängliche Details, wie zum Beispiel die lokale Kohlenstoffkonzentration in den Ausscheidungen und auch die Verteilung von Spannungen zu bestimmen. Darüberhinaus können die Einflüsse der Mechanismen unabhängig voneinander variiert und eine Auswirkung auf die sich einstellende Ordnung beobachtet werden. Für die technische Herstellung weiter nanostrukturierter Bereiche können Vorhersagen angestellt werden, unter welchen Voraussetzungen solch ein Ordnungsprozess in einem ausgedehnten Bereich möglich ist.

Nach den experimentellen Befunden aus [10] werden die  $SiC_x$ -Ausscheidungen bei Targettemperaturen zwischen  $150$  und  $400\text{ °C}$  beobachtet. Unter diesen Bedingungen ist aufgrund der niedrigen nuklearen Bremskraft der leichten Kohlenstoffionen im Silizium keine Amorphisierung zu erwarten [34]. Tatsächlich ist bekannt, dass reines kristallines Silizium unter diesen Voraussetzungen ionenstrahlinduziert epitaktisch rekristallisiert [35]. Die Amorphisierung wird dem Kohlenstoff zugeschrieben. Um bei diesen Temperaturen amorphe Ausscheidungen zu erhalten, muss eine hohe Dosis implantiert werden. Man spricht von kohlenstoffinduzierter Amorphisierung. Es sind Dosen von einigen  $10^{17}\text{ cm}^{-2}$  notwendig.

Der wichtigen Rolle des Kohlenstoffs bei der Bildung amorpher Phasen wird in dem in [8, 9] vorgestellten Modell Rechnung getragen. Bei Überschreitung einer Sättigungsgrenze von

Kohlenstoff in kristallinem Silizium entstehen sphärische amorphe Ausscheidungen. Aufgrund der Dichtereduktion im entspannten amorphen Zustand übt dieses amorphe Gebiet Druckspannungen auf die laterale kristalline Umgebung aus. Dies begünstigt die Amorphisierung in den verspannten Gebieten. Dies entspricht einer spannungsunterstützten Amorphisierung. Kohlenstoff diffundiert vom Kristallinen in die amorphen Ausscheidungen um die Kohlenstoffübersättigung der kristallinen *Si*-Phase zu reduzieren. Die Stabilität gegen Rekristallisation steigt in den amorphen Volumen und deren lateralen Umgebungen. Gleichzeitig sinkt diese Wahrscheinlichkeit in den kristallinen Gebieten. Es entstehen kohlenstoffreiche lamellare amorphe *SiC<sub>x</sub>*-Ausscheidungen.

Zwei Implementierungen der Monte-Carlo-Simulation entsprechend des vorgestellten Modells mit unterschiedlichen Simulationszwecken wurden entwickelt. In einer ersten Version wird genau der Tiefenbereich in dem angeordnete kleine *SiC<sub>x</sub>*-Ausscheidungen gebildet werden simuliert, um zu sehen, ob nach dem Modell überhaupt Selbstorganisation möglich ist. Nukleare Bremskraft und Implantationsprofil werden in dieser Version linear genähert. Die zweite Version umfasst den kompletten Implantationsbereich einschließlich der durchgehend amorphen Schicht, die sich typischerweise unterhalb der Lamellenschicht bildet. Hiermit wird festgestellt, ob das Modell weiterhin in der Lage ist, sowohl die Bildung der lamellaren *SiC<sub>x</sub>*-Ausscheidungen als auch der durchgehend amorphen Schicht in Abhängigkeit der Dosis zu erklären. Hierzu wird ein exaktes Bremskraft- und Implantationsprofil verwendet. Simulationsparameter ermöglichen in beiden Versionen die Steuerung des Amorphisierungsprozesses. Die drei zur Amorphisierung beitragenden Mechanismen ballistische Amorphisierung, kohlenstoffinduzierte Amorphisierung und spannungsunterstützte Amorphisierung können durch Parameter gewichtet werden. Die Diffusion wird durch zwei weitere Parameter beschrieben. Hier liegt der Vorteil der Simulation gegenüber dem Experiment. In der Simulation sind diese Parameter unabhängig voneinander einstellbar, so dass der Einfluss eines jeden Mechanismus oder Prozesses auf den Selbstorganisationsvorgang frei untersucht werden kann. Bei der Implementierung wurde darauf geachtet, dass ein Durchlauf exakt einem implantierten Ion entspricht, sodass mögliche Artefakte aufgrund einer Projektion eines Programmdurchlaufs auf eine höhere Teildosis ausgeschlossen werden. Nach Beenden einer Simulation können die Kohlenstoffkonzentration, die Spannungsfelder und der genaue amorph/kristalline Zustand leicht dargestellt werden.

Die Ergebnisse der ersten Version zeigen, dass eine selbstorganisierte Bildung lamellarer amorpher *SiC<sub>x</sub>*-Ausscheidungen mit Hilfe dieses Modells reproduziert werden kann. Das in [8, 9] vorgeschlagene Modell wird somit von den Simulationsergebnissen unterstützt. Dabei fällt auf, dass die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung eine weitaus größere Rolle als die rein ballistische Amorphisierung einnimmt. Die aus EFTEM gewonnene Aussage, dass die amorphen Gebiete eine sehr hohe Kohlenstoffkonzentration haben, wird durch die Simulation wiedergegeben. Mit Hilfe der Simulation können noch weitere Aussagen über die Verteilung des Kohlenstoffs getroffen werden. Eine genaue Lage des Kohlenstoffs in den amorphen und kristallinen Gebieten kann angegeben werden. Dadurch wird der Selbstorganisationsprozess nachvollziehbar. Amorphe und kristalline Gebiete sind in aufeinander folgenden Ebenen komplementär angeordnet. Da sich große und kleine amorphe Gebiete abwechseln und die amorphen Gebiete aufgrund der Diffusion sehr kohlenstoffreich sind, schwankt die Kohlenstoffkonzentration im Bereich der lamellaren Ausscheidungen.

Mit der zweiten Version wird der gesamte durch den Ionenbeschuss modifizierte Tiefenbereich abgedeckt. Man findet einen Satz von Simulationsparametern, der die experimentell beobachtete Dosisabhängigkeit der Verteilung amorpher Bereiche gut reproduziert. Man er-

kennt die Bildung einer durchgehend amorphen Schicht ausgehend von einzelnen amorphen Ausscheidungen. Mit Erhöhung der Dosis wächst die Dicke dieser Schicht an. Gleichzeitig entstehen selbstorganisierte lamellare Ausscheidungen an der vorderen Grenzfläche der Schicht. Die Grenzflächen und die Lamellen werden bei fortgesetzter Implantation schärfer und strukturierter. Auch hier ist die kohlenstoffinduzierte Amorphisierung der wichtigste Mechanismus der zur Amorphisierung beiträgt. Auf eine Veränderung der die Diffusion und die spannungsunterstützte Amorphisierung beschreibenden Parameter reagiert das System sensibel. Diffusion ist einerseits notwendig für die lamellare Ordnung der amorphen Ausscheidungen, eine leicht aggressivere Diffusion führt andererseits jedoch zu einer kompletten lamellaren Amorphisierung des Targets, so dass sich keine durchgehende Schicht bildet. Zu hohe Werte für den Parameter der Druckspannungen verursachen eine nahezu komplette Amorphisierung des kohlenstoffhaltigen Bereichs. Wie in der ersten Version des Programms fällt auf, dass die amorphen und kristallinen Volumina in aufeinanderfolgenden Ebenen im Tiefenbereich der lamellaren Ausscheidungen komplementär zueinander angeordnet sind. Dies ist begleitet von Schwankungen der Kohlenstoffkonzentration im lamellaren Tiefenbereich.

Auf diese Ergebnisse aufbauend werden Vorhersagen möglich, wie sich der Selbstorganisationsprozess ausnutzen lässt, um eine mehrere hundert *nm* dicke Schicht mit einer regelmäßigen Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Lamellen herzustellen.

Eine experimentelle Überprüfung dieser Vorhersagen ist zukünftigen Arbeiten vorbehalten. Desweiteren sollte mit Hilfe weiterer Implantationen bei anderen Temperaturen oder mit anderen Ionensorten die Abhängigkeit der Simulationsparameter von dem verwendeten Materialsystem und der Temperatur untersucht werden. Dadurch wäre es dann möglich, nanostrukturierte Oberflächenbereiche auch mit anderen chemischen Zusammensetzungen in Silizium zu erzeugen.

# Anhang A

## Funktionen der Programme

*NLSOP* besteht aus einer Mehrzahl von Programmen. Diese sollen im Folgenden vorgestellt werden. Der vollständige Quellcode der *NLSOP* Version 2 steht im Internet <sup>1</sup> zum Download bereit.

### A.1 Server

`nlsop_server.c`

Es ist ein *Server*-Programm, bei dem sich *Client* und *Benutzeroberfläche* anmelden. Dieses verteilt die zu rechnenden Simulationen auf freie *Client*-Rechner oder hält Simulationsaufträge in einer Warteschlange. Es nimmt fertige Rechenergebnisse entgegen und speichert sie lokal ab. Es hält Statusinformationen über die laufenden Rechnungen und die Warteschlange zur Abfrage bereit. Weiterhin nimmt es Simulationsaufträge entgegen. Die Interaktion mit *Client* und *Benutzeroberfläche* erfolgt durch das Netzwerk über eine *TCP/IP*-Verbindung.

### A.2 Client

`nlsop_client.c`

Das *Client*-Programm beinhaltet den eigentlichen Simulationscode. Es meldet sich beim *Server* an und nimmt Rechenaufgaben entgegen. Nach einer einstellbaren Anzahl von Durchläufen übergibt es Zwischenergebnisse beziehungsweise das Endergebnis an den *Server*-Prozess. Nach Beendigung einer Simulation geht es in den Ruhezustand und wartet auf neue Rechenaufträge.

---

<sup>1</sup><http://www.physik.uni-augsburg.de/~zirkelfr/download/nlsop/nlsop.tar.bz2>



### A.3 Benutzeroberfläche

`nlsop_gui.c`

Die *Benutzeroberfläche* dient zur Übergabe von Simulationsaufträgen an den *Server*. Weiterhin dient es zur Statusabfrage von laufenden Rechnungen, der Warteschlange und der angemeldeten *Client*-Rechner.

### A.4 Standalone Version

`nlsop.c`

Die *Standalone Version* ist ein eigenständiges Programm, das unter anderem auch den Simulationscode beinhaltet. Zusätzlich stellt sie eine Benutzeroberfläche zur Verfügung, die die Untersuchung des fertig simulierten Ergebnisses ermöglicht. Man kann Querschnittsaufnahmen des Targets, die zum Vergleich mit TEM-Aufnahmen benutzt werden können, sowie Druckspannungen und den Kohlenstoffgehalt visualisieren und als Bitmap abspeichern. Außerdem kann man Kohlenstoffprofile erzeugen und die Tiefe des Beginns der amorphen Ausscheidungen beziehungsweise der vorderen und hinteren Grenzfläche einer vorhandenen durchgehenden Schicht bestimmen.

### A.5 APIs

Einige Funktionalität wurde in externen Programmierschnittstellen ausgelagert. Diese sind im Folgenden vorgestellt.

- `network.c, network.h`  
Hilfsmittel zur Verbindung der Programmteile über das Netzwerk.
- `input.c, input.h`  
Funktionen für die Benutzereingabe.
- `list.c, list.h`  
Hilfsmittel zur Benutzung von verlinkten Listen.
- `display.c, display.h`  
Funktionen zur Visualisierung auf Konsolenebene.
- `event.c, event.h`  
Hilfsmittel zum Eventmanagement.
- `bmp.c, bmp.h`  
Funktionen für die Erstellung und Bearbeitung von Bitmap Dateien.

- `fourier.c`, `fourier.h`  
Funktionen für die diskrete Fouriertransformation.
- `dfbapi.c`, `dfbapi.h`  
Helfer für die Visualisierung der Endergebnisse.
- `random.c`, `randomi.h`  
Funktionen zur Erzeugung spezieller Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

## A.6 Andere Hilfsmittel

Im Folgenden sind weitere Programme vorgestellt, deren Funktionalität aus diversen Gründen nicht in die Hauptprogramme eingeflossen ist.

- `nlsop_make_cryst.c`  
Erstellt ein Duplikat eines gespeicherten Ergebnisses wobei alle Zustände der Volumen auf "Kristallin" gesetzt werden.
- `nlsop_create_cbox.c`  
Erzeugt ein kristallines Target mit einem plateauartigen Verlauf des Kohlenstoffprofils, das in einer Tiefe von  $500\text{ nm}$  dem Abfall des Kohlenstoffprofils der  $180\text{ keV}$ -Implantation entspricht.
- `parse_trim_collision.c`  
Werkzeug zur Auswertung der Datei in der *TRIM* detaillierte Daten der Kollisionsereignisse protokolliert.
- `dft.c`, `dft.h`  
Erstellt die zweidimensionale Fouriertransformation einer Bitmap.
- `linescan.c`  
Erstellt den Linescan über eine fouriertransformierte Bitmap.
- `random_parse.sh`  
Simples Shell-Script zur Auswertung und Überprüfung der Zufallszahlen.

## Anhang B

# Publikationsliste

### B.1 Eigene Publikationen

1. F. Zirkelbach, M. Häberlen, J. K. N. Lindner, B. Stritzker.  
*Modelling of a selforganization process leading to periodic arrays of nanometric amorphous precipitates by ion irradiation.*  
Comp. Mater. Sci. 33 (2005) 310.
2. F. Zirkelbach, M. Häberlen, J. K. N. Lindner, B. Stritzker.  
*Monte-Carlo-Simulation study of the selforganization of nanometric amorphous precipitates in regular arrays during ion irradiation.*  
Accepted for publication in IBMM 2004 proceedings issue of NIMB.

### B.2 Konferenzbeiträge

1. F. Zirkelbach, M. Häberlen, J. K. N. Lindner und B. Stritzker.  
*Monte-Carlo-Simulation der Selbstorganisation amorpher nanometrischer  $\text{SiC}_x$ -Ausscheidungen in Silizium während  $\text{C}^+$ -Ionen-Implantation*  
AKF-Frühjahrstagung der DPG, Regensburg, 2/2004, DS 1.4
2. F. Zirkelbach, M. Häberlen, J. K. N. Lindner und B. Stritzker.  
*Kinetik des Selbstorganisationsvorganges bei der Bildung von  $\text{SiC}_x$ -Ausscheidungs-Arrays in  $\text{C}^+$ -Ionen-implantiertem Silizium.*  
69. Jahrestagung der DPG, Berlin, 2/2005, DS 8.6

# Literaturverzeichnis

- [1] R. M. Bradley, J. M. E. Harper. *J. Vac. Sci. Technol.* A6 (1988) 2390.
- [2] R. A. Enrique, P. Bellon. *Phys. Rev. Lett.* 60 (1999) 14649.
- [3] R. A. Enrique, P. Bellon. *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 2885.
- [4] W. Bolse, B. Schattat, A. Feyh. *Appl. Phys. A* 77 (2003) 11.
- [5] J. K. N. Lindner, K. Volz, U. Preckwinkel, B. Götz, A. Frohnwieser, B. Rauschenbach, B. Stritzker. *Mat. Chem. and Phys.* 46 (1996) 147.
- [6] J. K. N. Lindner in: *Silicon Carbide, Recent Major Advances*, ed. by W. J. Choyke, H. Matsunami, G. Pensl. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2004, pp 251.
- [7] M. Schmidt. Diplomarbeit. Universität Augsburg. 1999.
- [8] J. K. N. Lindner, M. Häberlen, M. Schmidt, W. Attenberger, B. Stritzker. *Nucl. Instr. and Meth. B* 186 (2002) 206.
- [9] J. K. N. Lindner. Habilitationsschrift. Universität Augsburg. 1999.
- [10] Maik Häberlen. Diplomarbeit. Universität Augsburg. 2002.
- [11] A. H. van Ommen. *Nucl. Instr. and Meth. B* 39 (1989) 194.
- [12] E. D. Specht, D. A. Walko, S. J. Zinkle. *Nucl. Instr. and Meth. B* 84 (2000) 390.
- [13] M. Ishimaru, R. M. Dickerson, K. E. Sickafus, *Nucl. Instr. and Meth. B* 166-167 (2000) 390.
- [14] D. E. Knuth. *The art of computer programming Vol. 2.* Addison-Wesley, 1981.
- [15] W. H. Press. *Numerical recipes. The art of scientific computing.* Cambridge Univ. Pr. 1986.
- [16] S. K. Park, K. W. Miller. *Communications of the ACM* 31 (1988) 1192.
- [17] J. F. Ziegler, J. B. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Matter, Vol. 1.* Pergamon Press, New York, 1985.
- [18] J. Lindhard, M. Scharff. *Phys. Rev.* 124 (1961) 128.
- [19] F. Bloch. *Ann. der Physik*, 16 (1933) 287.

- [20] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiott. Kgl. Danske. Videnskab. Selskab., Mat.-Fys. Medd. 33 (1963) Nr. 14.
- [21] J. P. Biersack, L. Haggmark. Nucl. Instr. and Meth. B 174 (1980) 257
- [22] G. H. Kinchin, R. S. Pease. Rep. Progr. Phys. 18 (1955) 1.
- [23] K. A. Jackson. J. Mater. Res. 3 (1988) 1218.
- [24] C. Spinella, F. Priolo, R. A. Puglisi, S. Lombardo, S. U. Campisano. Nucl. Instr. and Meth. B 120 (1996) 198.
- [25] F. L. Vook in: Radiation Damage and Defects in Semiconductors, ed. by J. E. Whitehouse. Inst. of Phys., London 1972, pp 60.
- [26] F. F. Morehead, B. L. Crowder. Rad. Eff. 6 (1970) 27.
- [27] J. F. Gibbons. Proc. IEEE, Vol. 60, No. 9 (1972) 1062.
- [28] J. R. Dennis, E. B. Hale. J. Appl. Phys. 49 (3) (1978) 1119.
- [29] N. Hecking. Diplomarbeit. Universität Dortmund. 1978.
- [30] N. Hecking, K. F. Heidemann, E. te Kaat. Nucl. Instr. and Meth. B 15 (1986) 760.
- [31] H. M. Naguib, R. Kelly. Rad. Eff. 25 (1975) 1.
- [32] G. Carter, D. G. Armour, S. E. Donnely, R. Webb. Rad. Eff. 36 (1978) 1.
- [33] J. K. N. Lindner. Nucl. Instr. and Meth. B 178 (2001) 44.
- [34] J. K. N. Lindner. Appl. Phys. A 77 (2003) 27.
- [35] J. Linnross, R. G. Elliman, W. L. Brown. J. Matter. Res. 3 (1988) 1208.
- [36] L. Csepregi, E. F. Kennedy, T. J. Gallagher, J. W. Mayer, T. W. Sigmon. J. Appl. Phys. 48 (1977) 4234.
- [37] E. F. Kennedy, L. Csepregi, J. W. Mayer. J. Appl. Phys. 48 (1977) 4241.
- [38] W. J. Taylor, T. Y. Tan, U. Gösele. Appl. Phys. Lett. 62 (1993) 3336.
- [39] M. Häberlen, J. K. N. Lindner, B. Stritzker. to be published.
- [40] M. Häberlen, J. K. N. Lindner. B. Stritzker. Nucl. Instr. and Meth. B 206 (2003) 916.
- [41] L. L. Horton, J. Bentley, L. Romana, A. Perez, C. J. McHargue, J. C. McCallum. nucl. Instr. and Meth. B 65 (1992) 345.
- [42] W. Skorupa, V. Heera, Y. Picaud, H. Weishart in: F. Priolo, J. K. N. Lindner, A. Nylandsted Larsen, J. M. Poate (Eds.). New Trends in Ion Beam Processing of Materials. Europ. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 65 Part 1. Elsevier Amsterdam (1977) 114.
- [43] J. K. N. Lindner, S. Kubsky, A. Schertel. Mater. Sci. and Eng. B 102 (2003) 70.

- [44] J. K. N. Lindner, W. Reiber, B. Stritzker. *Mater. Sci. Forum* 264-268 (1998) 215.
- [45] J. K. N. Lindner, M. Häberlen, G. Thorwarth, B. Stritzker. *accept. for publ. in Nucl. Instr. and Meth. B* (2005).
- [46] A. R. Bean, R. C. Newman. *J. Phys. Chem. Solids* 32 (1971) 1211.
- [47] B. W. Kernighan, D. M. Ritchie. *The C programming language* 2. ed. Prentice Hall software series, 1988.
- [48] A. Menzes, P. van Oorschot, S. Vanstone. *Handbook of Applied Cryptography*. CRC Press, Inc., 1997.
- [49] J. K. N. Lindner, N. Hecking, E. Te Kaat. *Nucl. Instr. and Meth. B.* 26 (1987) 551.
- [50] Dihu Chen, Z. M. Liao, L. Wang, H. Z. Wang, Fuli Zhao, W. Y. Cheung, S. P. Wong. *Opt. Mater.* 23 (2003) 65.

# Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei allen bedanken, die in irgend einer Form zum Gelingen dieser Diplomarbeit beigetragen haben. Insbesondere gilt meinem Dank

- *Herrn Prof. Dr. Bernd Stritzker* für die Möglichkeit diese Arbeit an seinem Lehrstuhl durchführen zu können,
- *Herrn Priv.-Doz. Dr. habil. Volker Eyert* für die Bereitschaft sich dieser Arbeit als Zweitkorrektor anzunehmen,
- *Herrn Priv.-Doz. Dr. habil. Jörg K. N. Lindner* für die engagierte Betreuung und Unterstützung sowie die Durchsicht dieser Arbeit,
- *Herrn Dipl.-Phys. Maik Häberlen* für die Betreuung, die Durchsicht des Skriptes und vor allem den Anstoß zu diesem Thema, und
- *Herrn Dipl.-Phys. Ralf Utermann* für einen temporären Zugang zum Rechner-Cluster des Physik Institutes.

Allen weiteren Mitarbeitern des Lehrstuhls, insbesondere dem Diplomandenzimmer, danke ich recht herzlich für die freundschaftliche Arbeitsatmosphäre.

Den größten Dank gilt meinen Eltern Wilfriede und Karl Zirkelbach, denen ich zu verdanken habe, dass ich mein Studium ohne größere Sorgen und Probleme durchführen konnte.