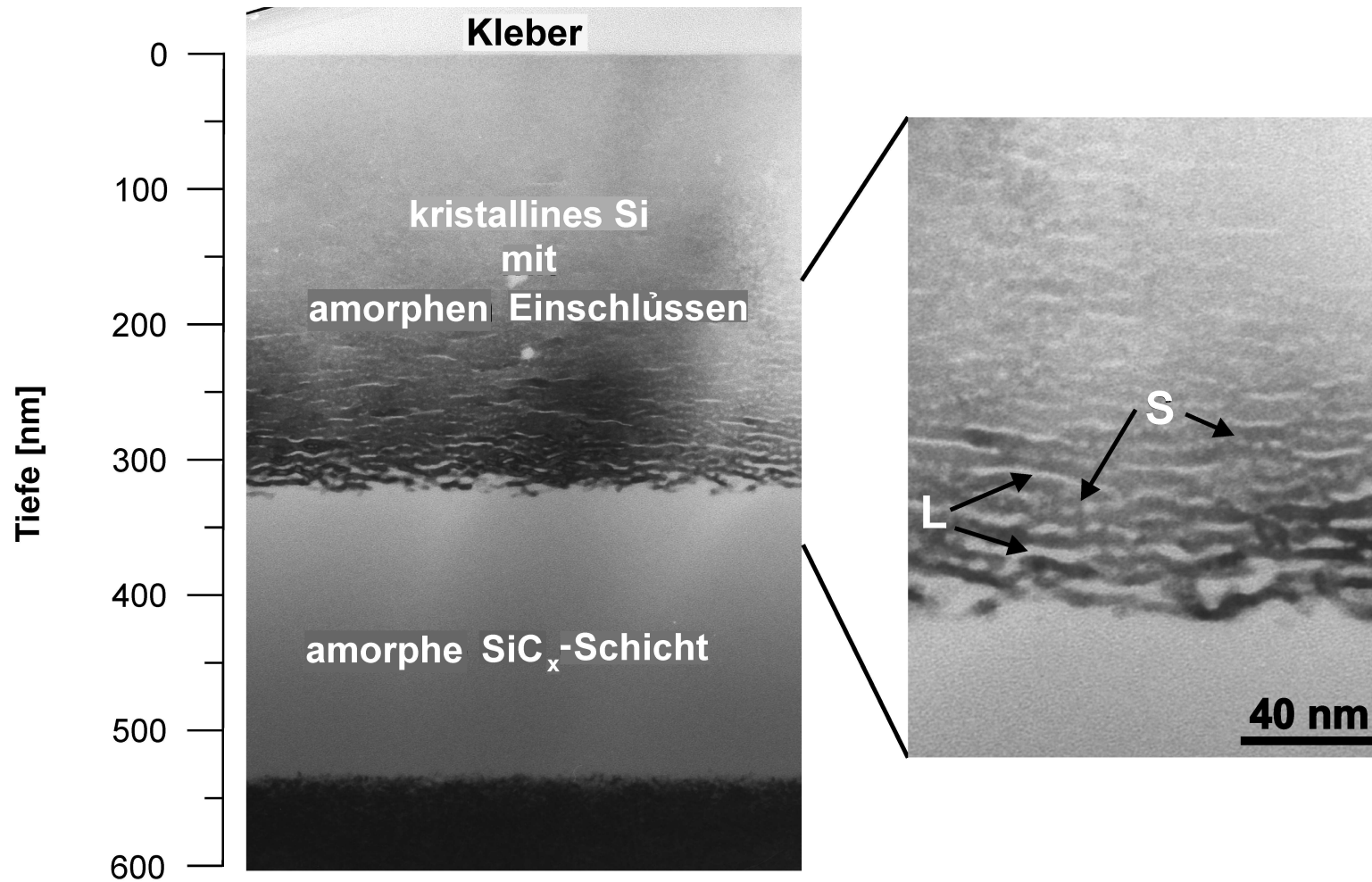


**Monte-Carlo-Simulation der Selbstorganisation
amorpher nanometrischer SiC_x -Ausscheidungen in
Silizium während C^+ -Ionen-Implantation**

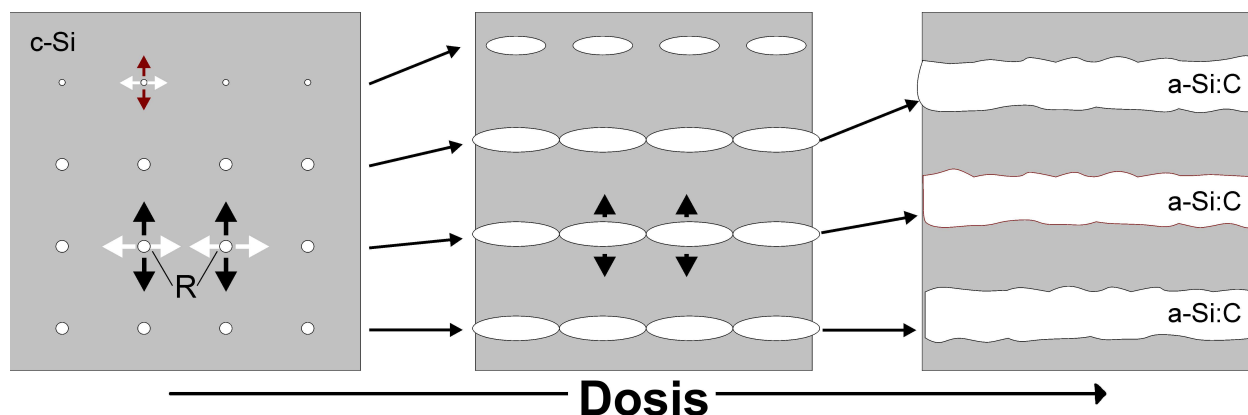
F. Zirkelbach, M. Häberlen, J. K. N. Lindner und B. Stritzker

Cross-Section TEM-Aufnahme selbstorganisierter amorpher Lamellen



Hellfeld-TEM-Abbildung, $180\text{keV } C^+ \rightarrow Si(100)$, 150°C , $4.3 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$

Modell



- Löslichkeit von Kohlenstoff in c -Silizium überschritten
→ Nukleation sphärischer SiC_x -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen $c - Si$ und $3C - SiC$
→ Ausscheidungen sind amorph
- 20 – 30% geringere Dichte von amorphen zu kristallinen SiC
→ Druckspannungen auf Umgebung
- nahe der Oberfläche
→ Relaxation der Druckspannung in z -Richtung
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten
→ Diffusion von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen
→ bevorzugte Amorphisierung zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

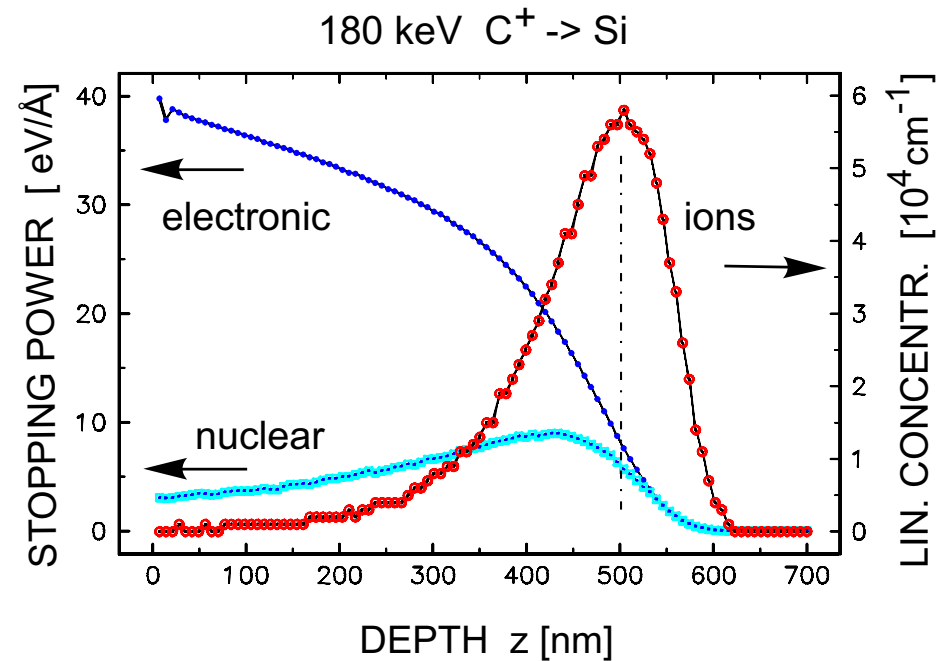
Annahmen/Näherungen

- nukleare Bremskraft und Konzentrationsprofil linear genähert
- Wahrscheinlichkeit der Amorphisierung \propto nukleare Bremskraft
- lokale Amorphisierungswahrscheinlichkeit \propto

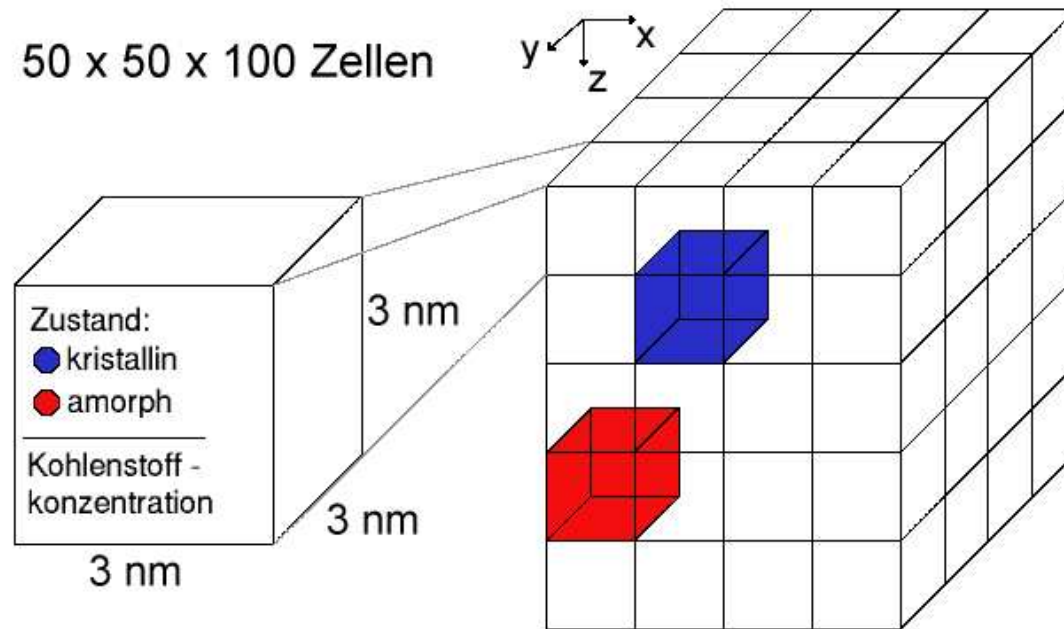
$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{mittlerer nuklearer Bremskraft} & \equiv \text{ballistische Amorphisierung,} & b_{ap} \\ \text{lokale Kohlenstoffkonzentration} & \equiv \text{kohlenstoffinduzierte Amorphisierung,} & a_{cp} \\ \text{Druckspannungen} & \equiv \text{spannungsinduzierte Amorphisierung,} & a_{ap} \end{array} \right.$$

$$p_{c \rightarrow a} = b_{ap} + a_{cp} \times c_{Kohlenstoff}^{lokal} + \sum_{\text{amorphe Nachbarn}} \frac{a_{ap} \times c_{Kohlenstoff}}{\text{Abstand}^2}$$

$$p_{a \rightarrow c} = 1 - p_{c \rightarrow a}$$



Simulation



Dreiteilung des Simulationsalgorithmus:

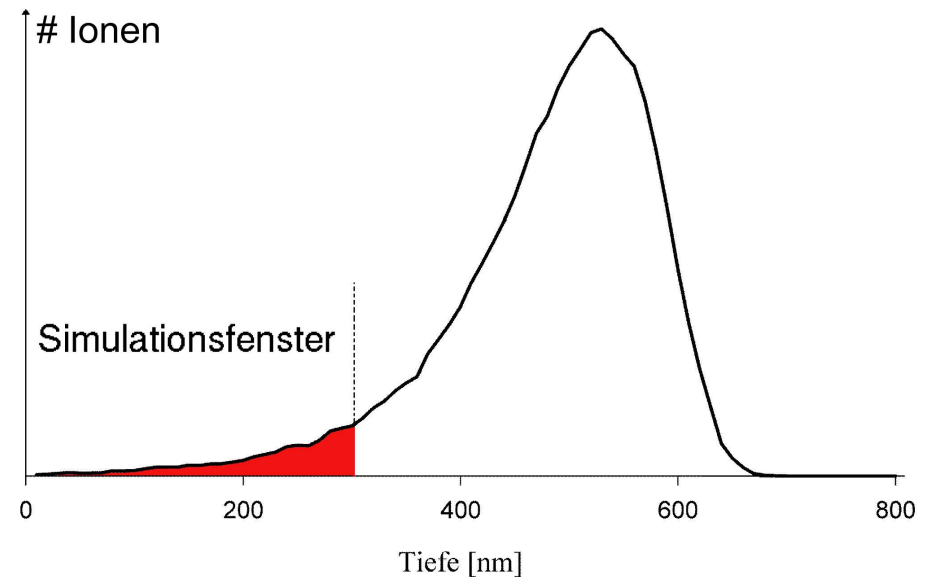
1. Amorphisierung/Rekristallisation
2. Einbau des implantierten Kohlenstoffions ins Silizium-Target
3. Diffusionsprozess

1) Amorphisierung/Rekristallisation

- gewichtete Wahl der Koordinaten für Stoßprozess entsprechend nuklearer Bremskraft
- Berechnung der lokalen Amorphisierungs- bzw. Rekristallisationswahrscheinlichkeit $p_{c \rightarrow a}$ und $p_{a \rightarrow c}$
- Auswürfeln der entscheidenden Zufallszahl

2) Einbau des implantierten Kohlenstoffions

- gesamter Kohlenstoff $< \text{steps} \times C_{ratio}$
- gewichtete Wahl der Koordinaten für Kohlenstoffhöhung



3) Diffusion

Diffusion findet alle d_v Schritte statt.

- Diffusion im Kristallinen:

$$\Delta c = \frac{\text{Differenz}}{2} \times dr_{cc}$$

- Diffusion von kristallinen in amorphe Gebiete:

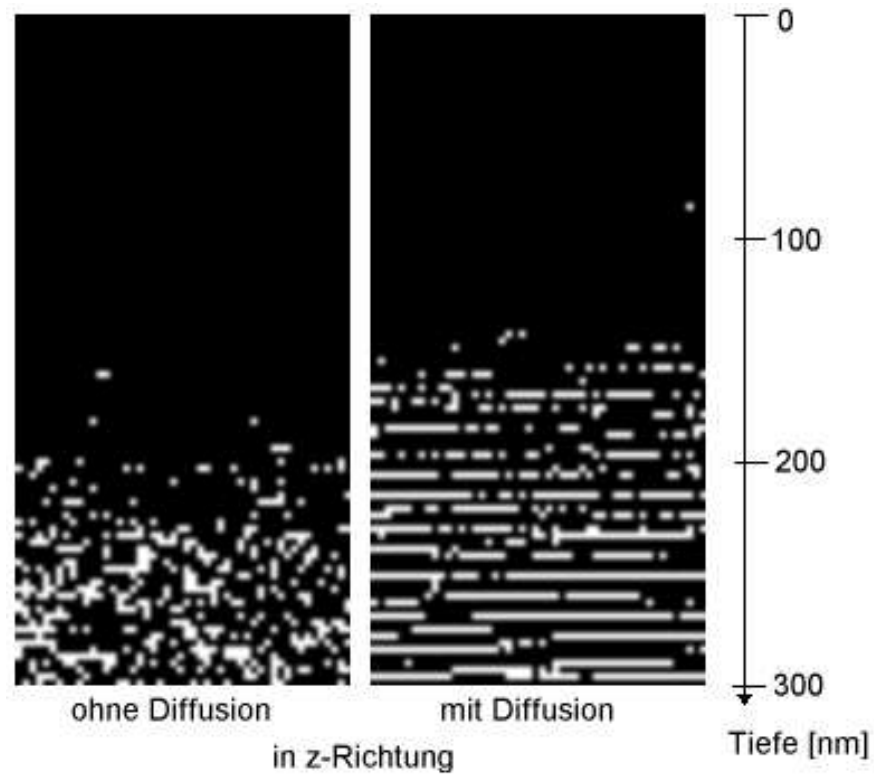
$$\Delta c = c_C(\text{Nachbar}) \times dr_{ac}$$

Varierte Parameter

- Schrittzahl
- Amorphisierung beschreibende Parameter
- Diffusionsgeschwindigkeit und Diffusionsrate
- Diffusion in z -Richtung
- rein kristalline Diffusion

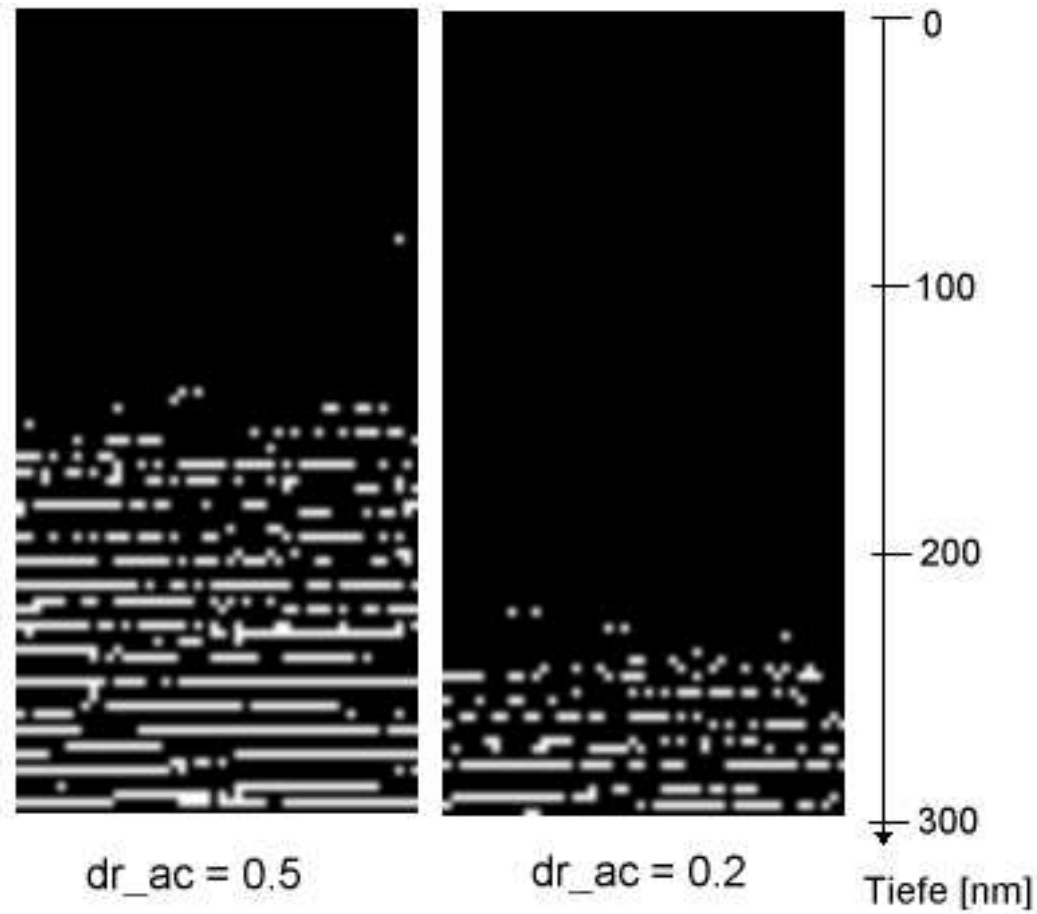
Ergebnisse

- **Lamellare Strukturen**
- Notwendig für Bildung der lamellaren Ausscheidungen:
 - hohe Schrittzahl und niedrige Amorphisierungswahrscheinlichkeiten
 - Diffusion von Kohlenstoff von kristallinen in amorphe Gebiete, insbesondere in z -Richtung



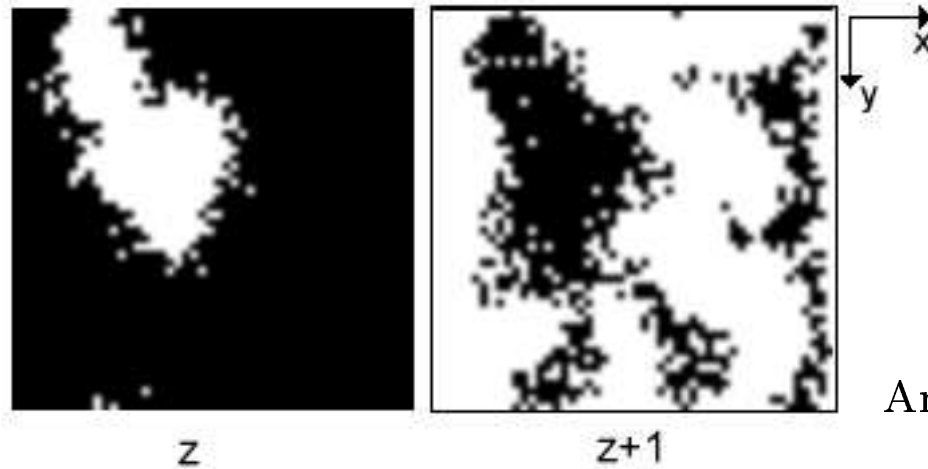
Ergebnisse

Höhere Diffusionsrate \rightarrow größerer Tiefenbereich

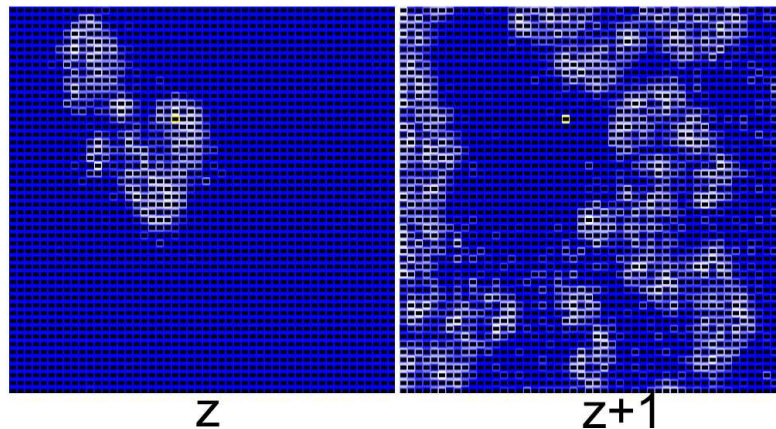


Ergebnisse

Bildung komplementär angeordneter, amorpher kohlenstoffreicher Ausscheidungen in aufeinander folgenden Ebenen.

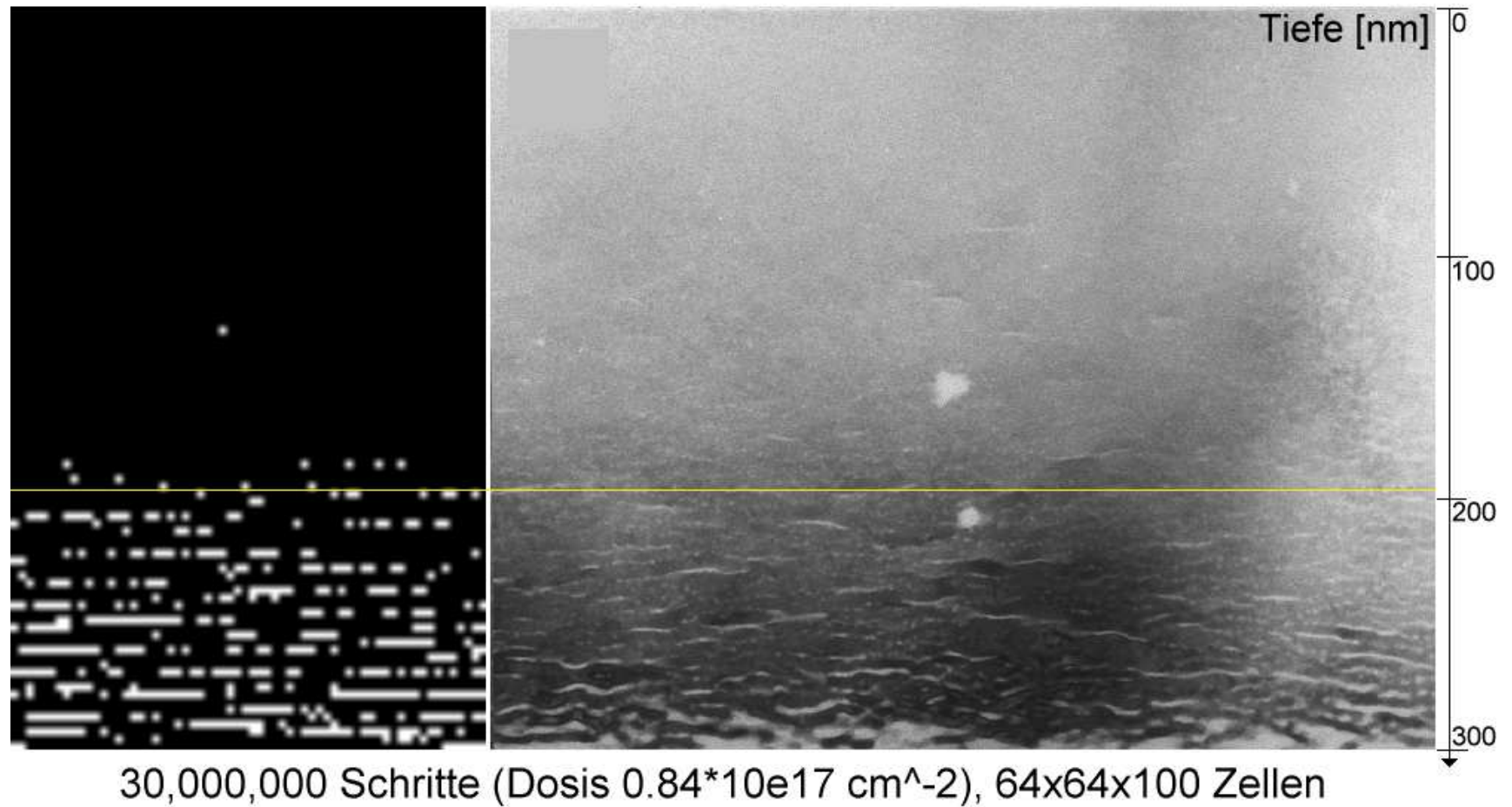


Amorph/Kristalline Darstellung



Kohlenstoffverteilung

Vergleich mit TEM-Aufnahme



Zusammenfassung

- Einfaches Modell zur Erzeugung selbstorganisierter amorpher Ausscheidungen
- lamellare Strukturen durch Simulation nachvollziehbar

Ausblick

- Zusammenhang zwischen Simulations- und Implantationsparametern
- objektivere Methode zur Messung der lamellaren Struktur (Fouriertransformierte des Realbildes)
- Vergleiche mit TEM-Aufnahmen, insbesondere der Dosisentwicklung