

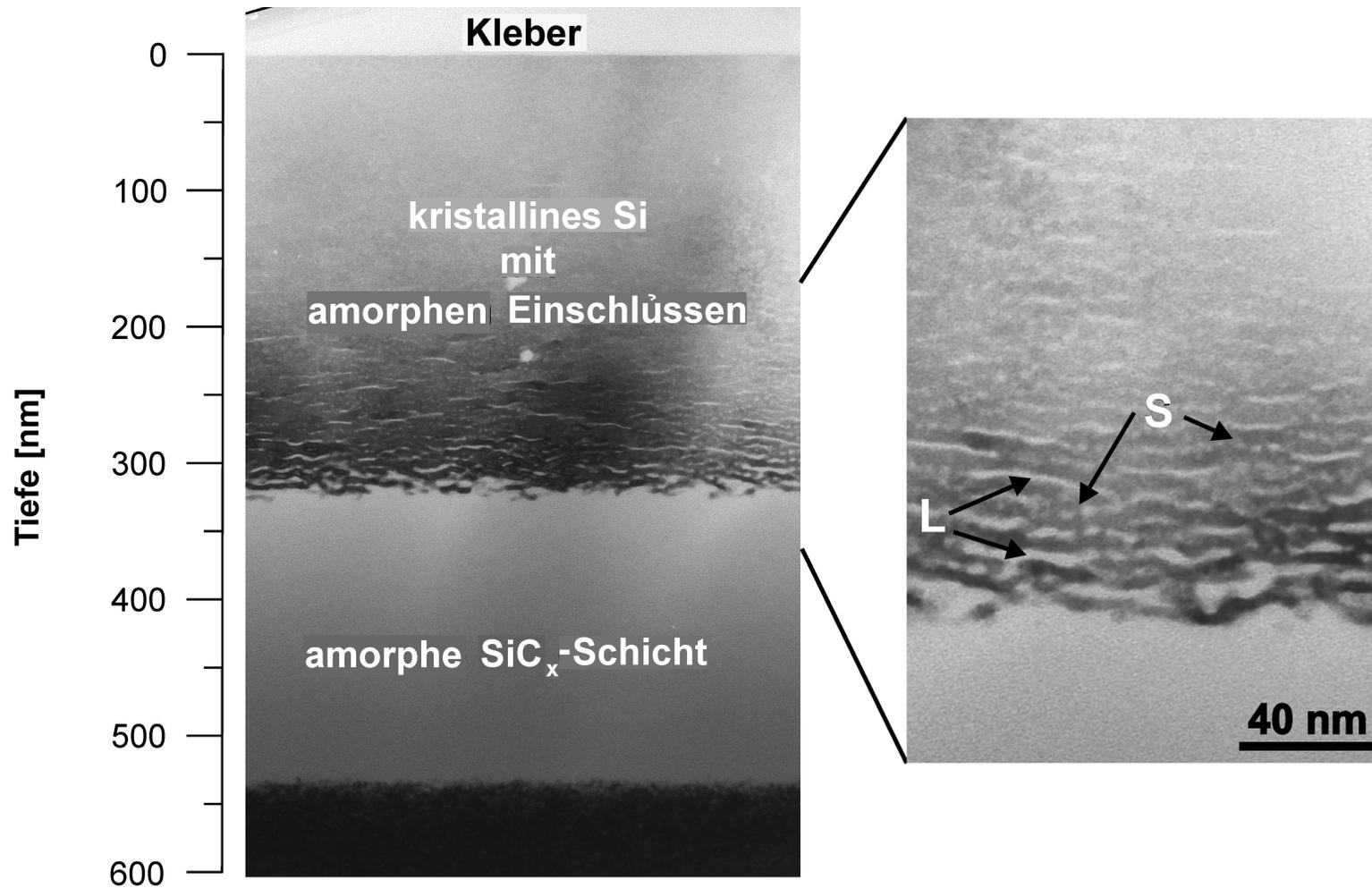
**Kinetik des Selbstorganisationsvorgangs bei der  
Bildung von  $SiC_x$ -Ausscheidungs-Arrays in  
 $C^+$ -Ionen-implantiertem Silizium**

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

# Überblick

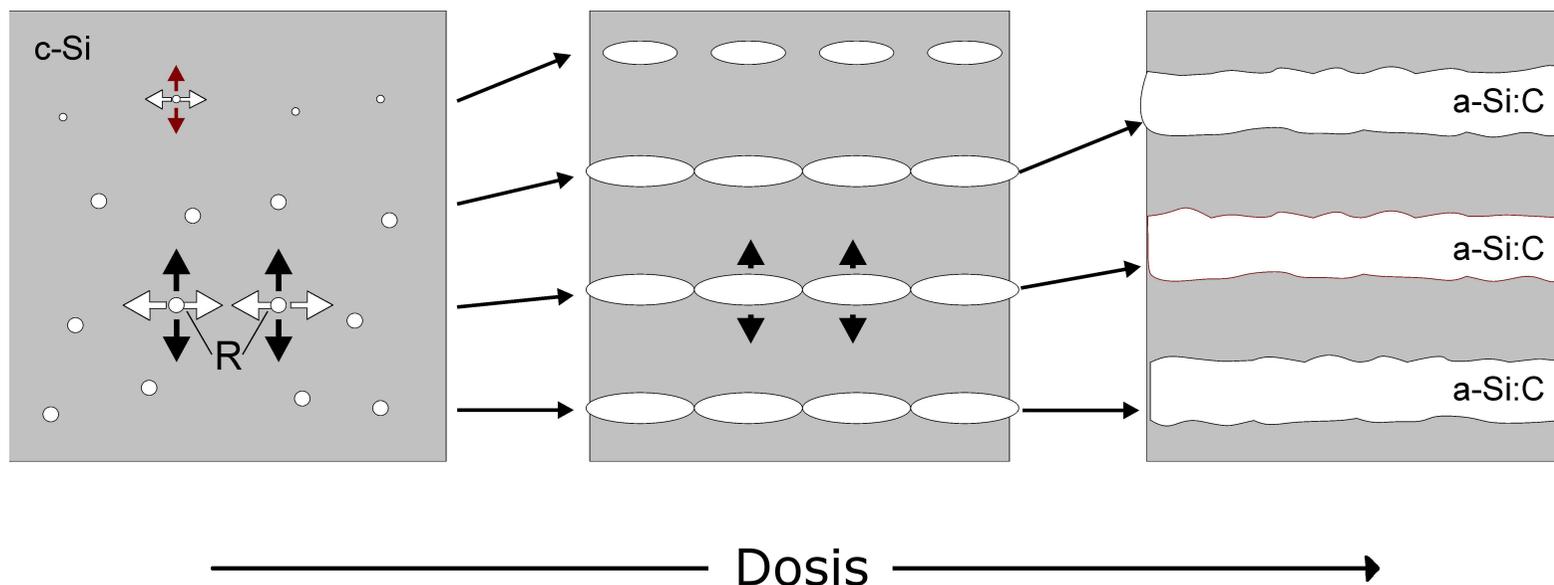
- selbstorganisierte  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsprozesses
- Umsetzung des Modells in eine Monte-Carlo-Simulation
- Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Befunden
- Zusammenfassung

# Cross-Section TEM-Aufnahme selbstorganisierter amorpher Lamellen



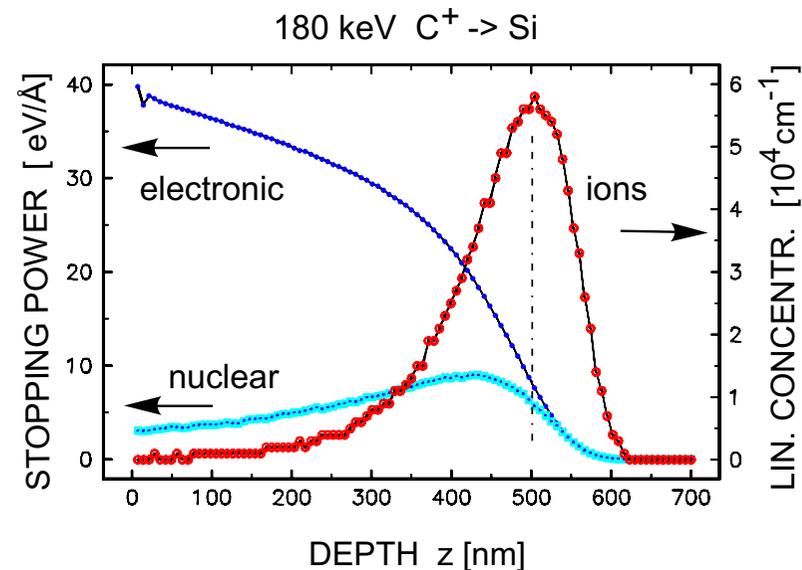
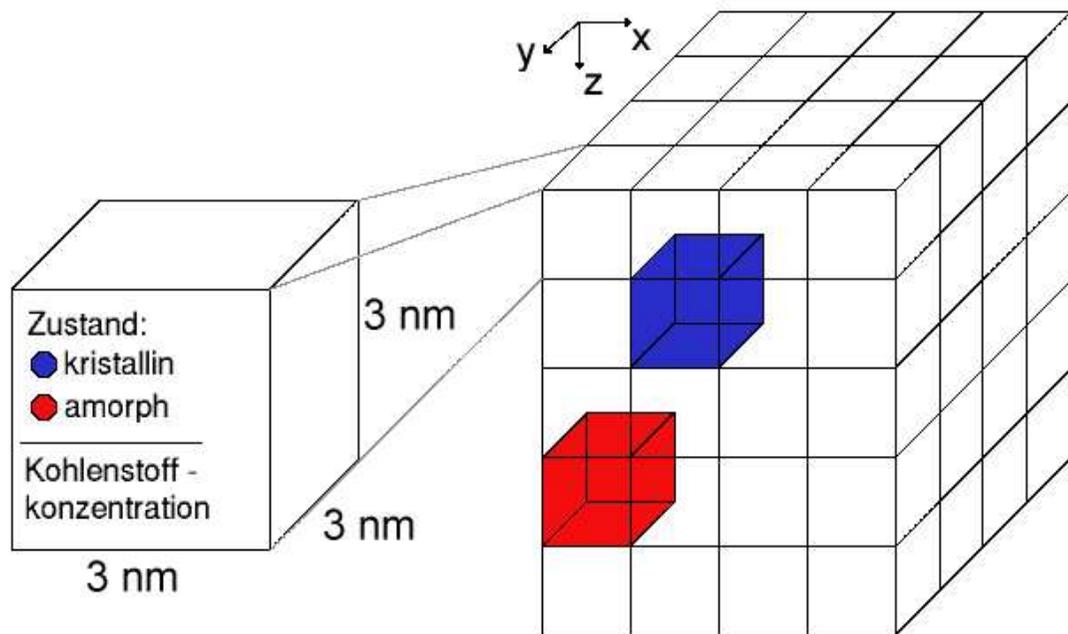
Hellfeld-TEM-Abbildung,  $180\text{keV } C^+ \rightarrow Si(100)$ ,  $150^\circ\text{C}$ ,  $4.3 \times 10^{17}\text{cm}^{-2}$

# 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

# Simulation



	Version 1	Version 2
Anzahl Zellen ( $x, y, z$ )	$64 \times 64 \times 100$	$64 \times 64 \times 233$
nukleares Bremskraftprofil	linear genähert	exakt (TRIM)
Implantationsprofil	linear genähert	exakt (TRIM)
Treffer pro implantierten Teilchen	1	exakt (TRIM)
Anzahl der implantierten Teilchen	freier Parameter	$\equiv$ Dosis

## Amorphisierung und Rekristallisationswahrscheinlichkeit

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

**ballistisch**      **kohlenstoffinduziert**      **spannungsinduziert**

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

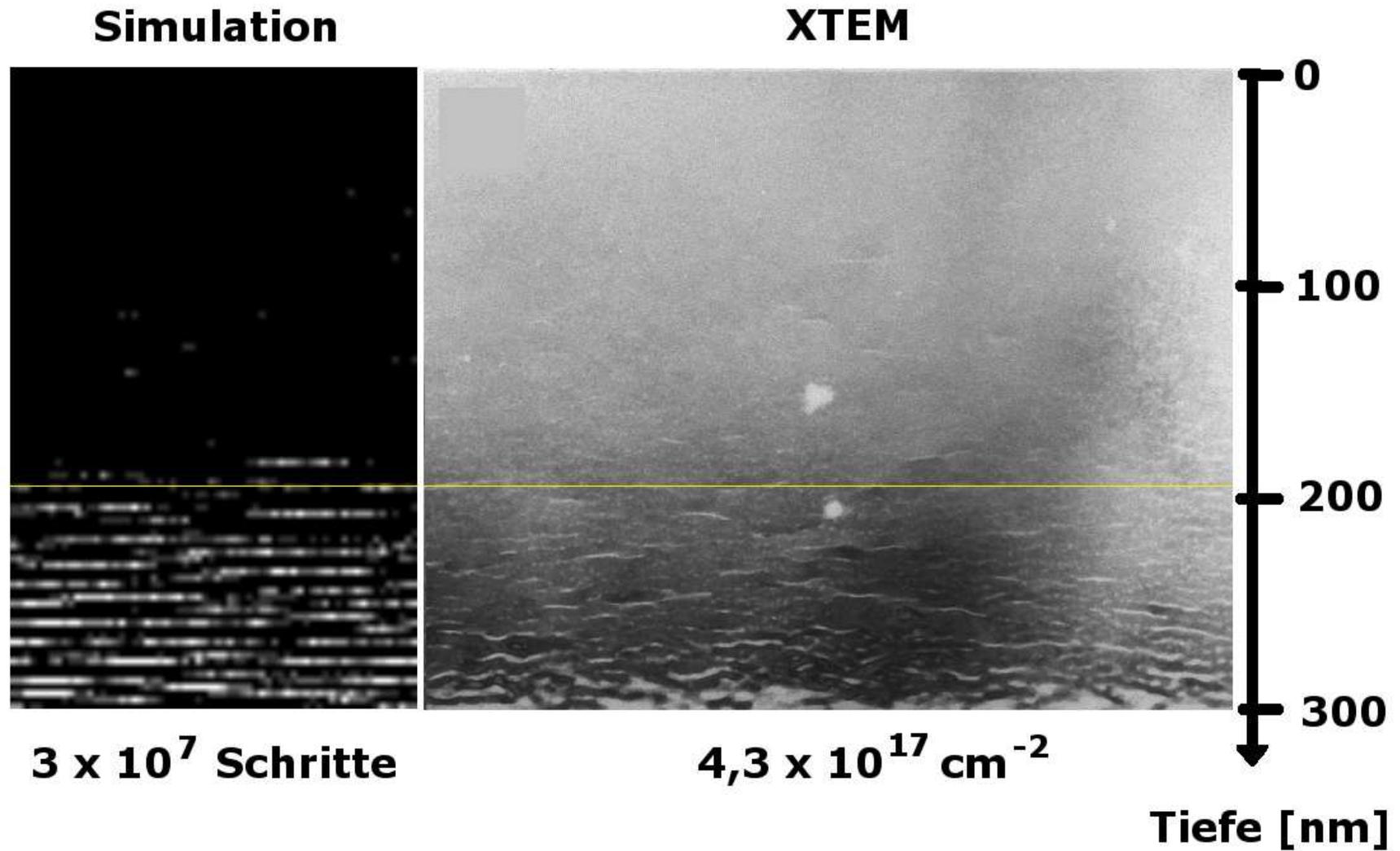
$$\delta(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{wenn Gebiet bei } \vec{r} \text{ amorph} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

# Simulationsalgorithmus



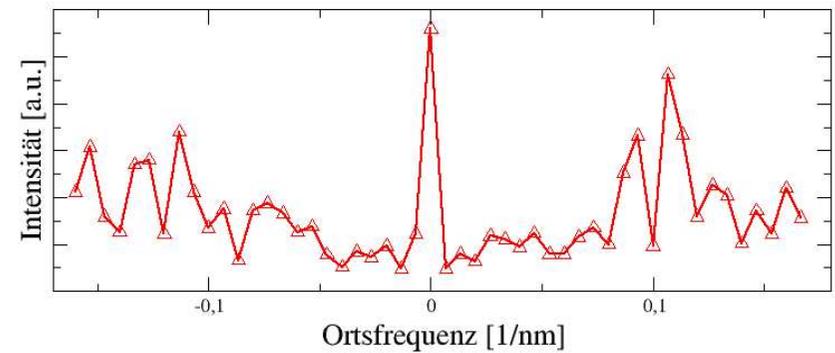
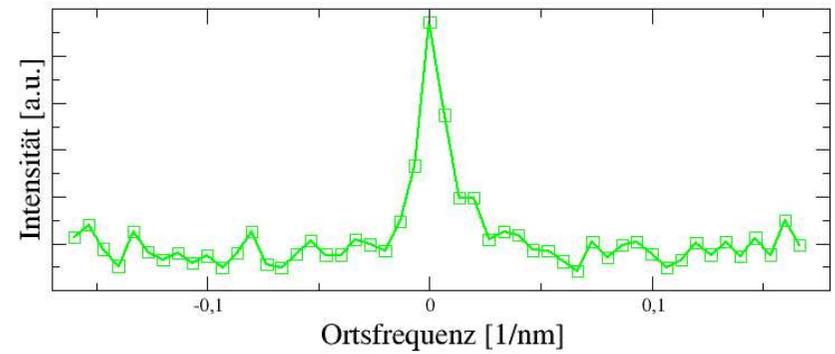
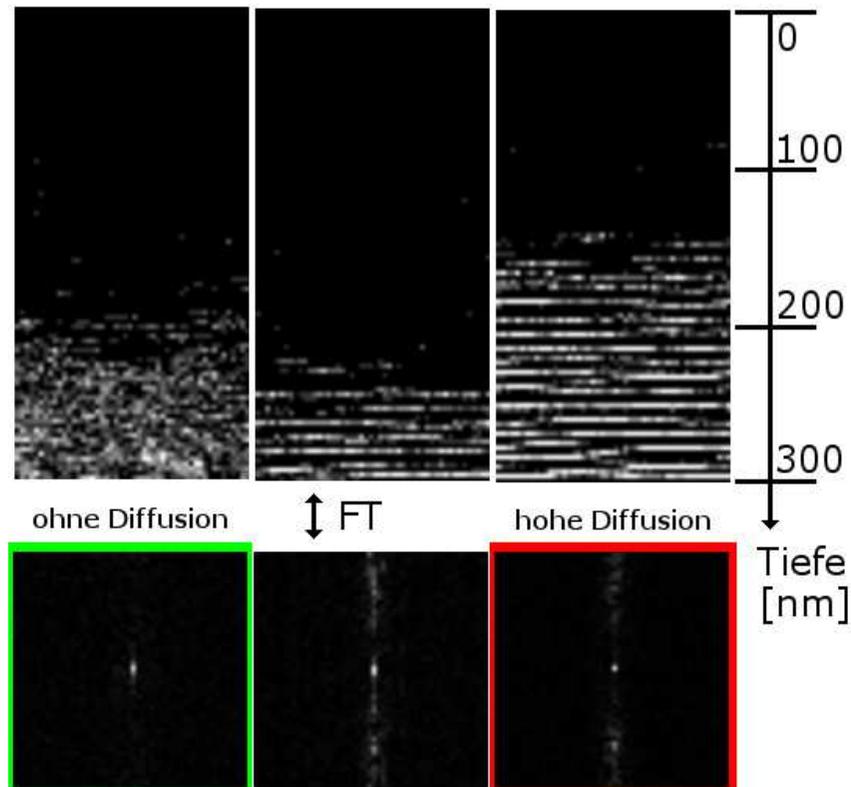
# Ergebnisse - Programm, Version 1

## Lamellare Strukturen



# Ergebnisse - Programm, Version 1

Einfluss der Diffusion



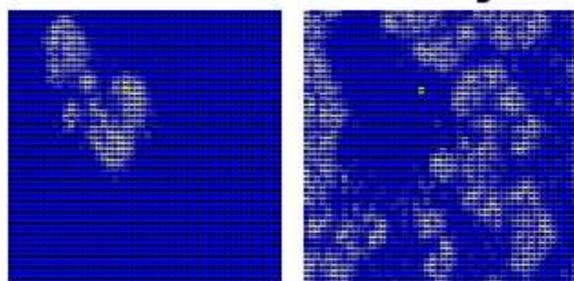
# Ergebnisse - Programm, Version 1

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

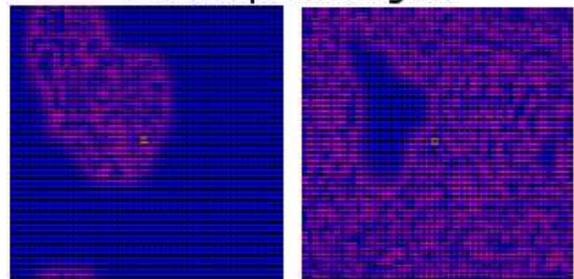
Amorph / Kristallin Darstellung



Kohlenstoffverteilung



Druckspannungen



z

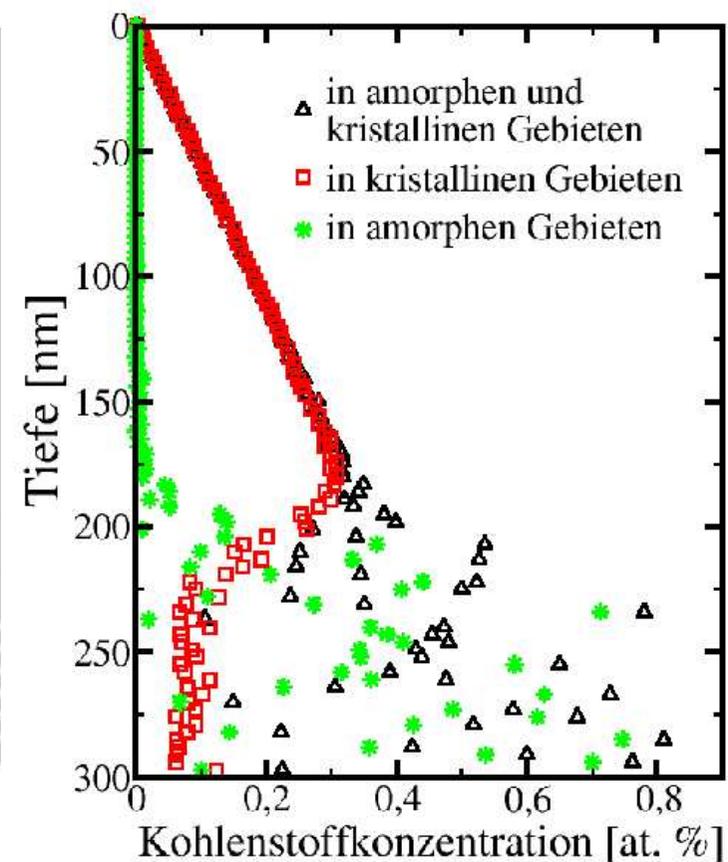
z+1

Amorph / Kristallin Darstellung



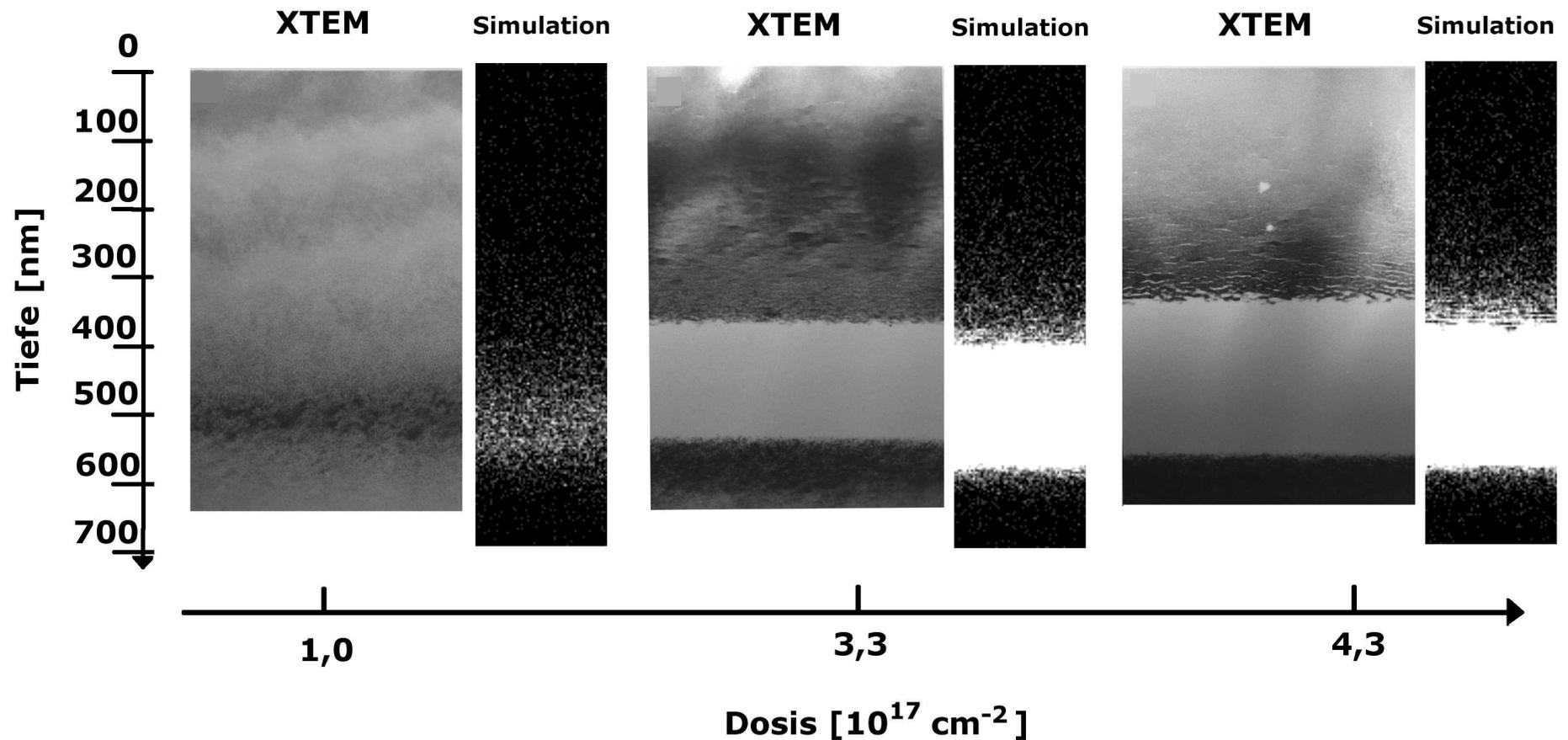
□ amorphe Gebiete  
■ kristalline Gebiete

Kohlenstoffkonzentration



## Ergebnisse - Programm, Version 2

- Verteilung amorpher Bereiche im gesamten Implantationsbereich reproduzierbar
- Kinetik des Selbstorganisationsprozesses nachvollziehbar



## Zusammenfassung

- selbstorganisierte Anordnung nanometrischer Ausscheidungen bei Ionenimplantation

$$C \rightarrow Si \quad T_i : 150 - 350 \text{ }^\circ\text{C} \quad D \leq 8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$$

- Amorphisierung  $\rightarrow$  Dichteunterschied  $\rightarrow$  Spannungen  $\rightarrow$  Selbstorganisation
- Modell: Wahrscheinlichkeiten für Amorphisierung/Rekristallisation abhängig von:
  - nuklearer Bremskraft
  - Implantationsprofil
  - Spannungen
- lamellare Anordnung nachvollziehbar durch Simulation
- Entwicklung der Morphologie der a/c-Grenzfläche reproduzierbar