

# Vorstellung der Diplomarbeit

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

Frank Zirkelbach

`frank.zirkelbach@physik.uni-augsburg.de`

Institut für Physik  
Lehrstuhl für Experimentalphysik IV  
Universität Augsburg

10. November 2005

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
    - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
    - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Einführung

## Ionenimplantation

### Funktionsweise

- Ionisation des Atoms/Moleküls
- Beschleunigung im elektrischen Feld ( $10^2 \text{ eV} - \text{GeV}$ )
- Bestrahlung eines Festkörpers

⇒ Modifikation oberflächennaher Schichten

### Anwendung

Dotierung von Halbleiterkristallen

# Einführung

## Ionenimplantation

### Funktionsweise

- Ionisation des Atoms/Moleküls
- Beschleunigung im elektrischen Feld ( $10^2 \text{ eV} - \text{GeV}$ )
- Bestrahlung eines Festkörpers

⇒ Modifikation oberflächennaher Schichten

### Anwendung

Dotierung von Halbleiterkristallen

# Einführung

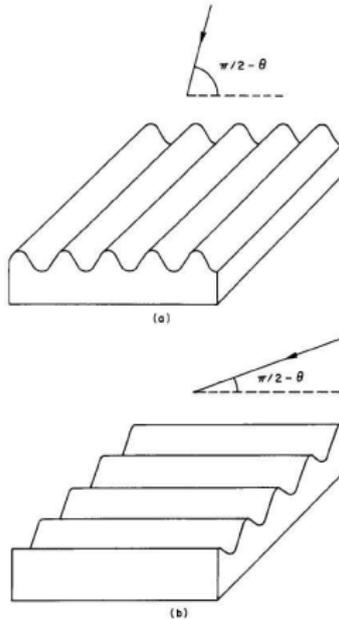
## Ionimplantation

### Vorteile

- exakte Kontrollierbarkeit der implantierten Menge
- Reproduzierbarkeit
- Homogenität
- Schnelligkeit
- frei wählbare Implantationstemperatur
- unabhängig von der chemischen Löslichkeitsgrenze

# Einführung

## Selbstorganisation

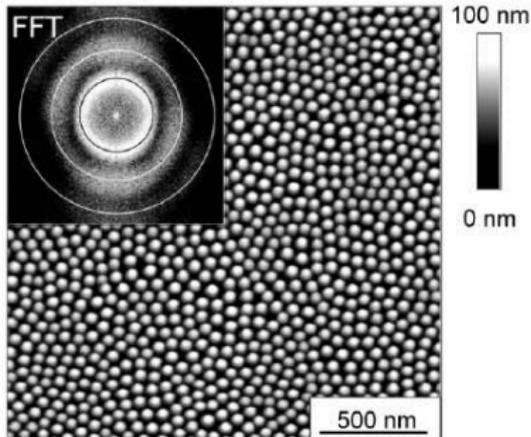


- 1 Riffelformation auf der Targetoberfläche
- 2 selbstorganisierte Nanostrukturen durch Sputtererosion
- 3 separierte Phasen bei der Bestrahlung binärer Legierungen
- 4 periodische Rissbildung bei der Bestrahlung mit schnellen und schweren Ionen

R. M. Bradley, J. M. E. Harper.  
J. Vac. Sci. Technol. A 6 (1988) 2390.

# Einführung

## Selbstorganisation



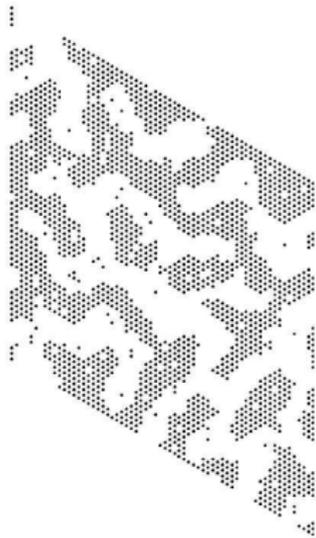
1000 eV  $Ar^+ \rightarrow InAs$ ,  
 rotierendes Target,  
 $T = 285\text{ K}$ ,  $\dot{D} = 270\ \mu\text{A cm}^{-2}$ ,  
 $t = 60\text{ min.}$ ,  $\alpha = 30^\circ$ .

B. Ziberi, F. Frost, M. Tartz, H. Neumann,  
 B. Rauschenbach.  
 Thin Solid Films 459 (2004) 106.

- 1 Riffelformation auf der Targetoberfläche
- 2 selbstorganisierte Nanostrukturen durch Sputtererosion
- 3 separierte Phasen bei der Bestrahlung binärer Legierungen
- 4 periodische Rissbildung bei der Bestrahlung mit schnellen und schweren Ionen

# Einführung

## Selbstorganisation

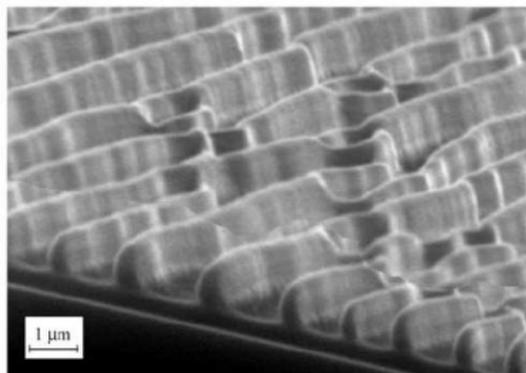


R. A. Enrique, P. Bellon.  
Phys. Rev. B 60 (1999) 14649.

- 1 Riffelformation auf der Targetoberfläche
- 2 selbstorganisierte Nanostrukturen durch Sputtererosion
- 3 separierte Phasen bei der Bestrahlung binärer Legierungen
- 4 periodische Rissbildung bei der Bestrahlung mit schnellen und schweren Ionen

# Einführung

## Selbstorganisation



$230 \text{ MeV Kr}^+ \rightarrow \text{NiO/SiO}_2$ ,  
 $D = 1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\theta = 75^\circ$ .

W. Bolse, A. Schattat, A. Feyh.  
Appl. Phys. A 77 (2003) 11.

- 1 Riffelformation auf der Targetoberfläche
- 2 selbstorganisierte Nanostrukturen durch Sputtererosion
- 3 separierte Phasen bei der Bestrahlung binärer Legierungen
- 4 periodische Rissbildung bei der Bestrahlung mit schnellen und schweren Ionen

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Grundlagen

## Abbremsung der Ionen

### nuklearer Bremsquerschnitt

elastischer Stoß mit Atomkernen des Targets

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

### elektronischer Bremsquerschnitt

inelastischer Stoß mit Elektronen des Targets

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

### Bremskraft

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

# Grundlagen

## Abbremsung der Ionen

### nuklearer Bremsquerschnitt

elastischer Stoß mit Atomkernen des Targets

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

### elektronischer Bremsquerschnitt

inelastischer Stoß mit Elektronen des Targets

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

### Bremskraft

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

# Grundlagen

## Abbremsung der Ionen

### nuklearer Bremsquerschnitt

elastischer Stoß mit Atomkernen des Targets

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

### elektronischer Bremsquerschnitt

inelastischer Stoß mit Elektronen des Targets

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

### Bremskraft

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

# Grundlagen

## Abbremsung der Ionen

### nuklearer Bremsquerschnitt

elastischer Stoß mit Atomkernen des Targets

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

### elektronischer Bremsquerschnitt

inelastischer Stoß mit Elektronen des Targets

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

### Bremskraft

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

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

#### Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

#### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

### Monte-Carlo-Methode

Abbildung von Zufallszahlen auf physikalische Größen

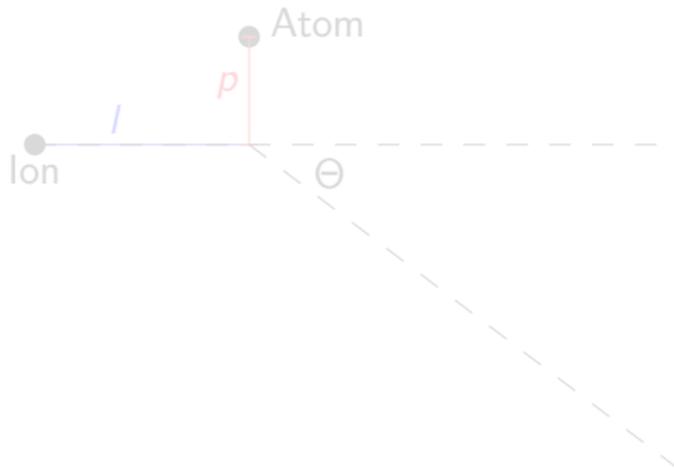
### Das Prinzip von TRIM

- Verfolgung einer Vielzahl von Teilchenbahnen
- Start mit gegebener Energie, Position und Richtung
- Geradlinige Bewegung innerhalb freier Weglänge
- Energieverlust durch Stöße
- Terminiert wenn  $E_{Ion} < E_k$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen

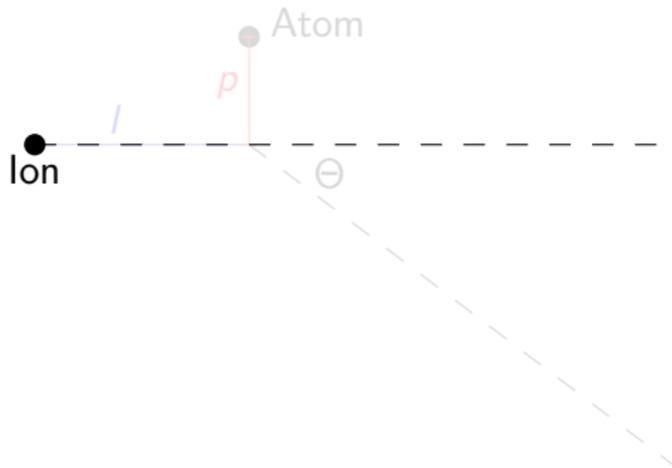


- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen

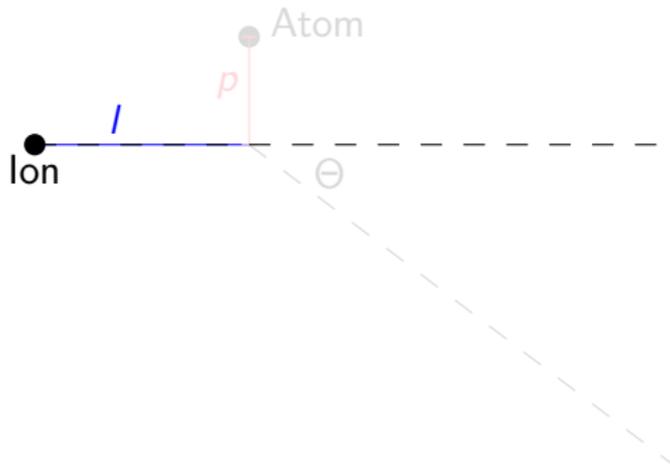


- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen

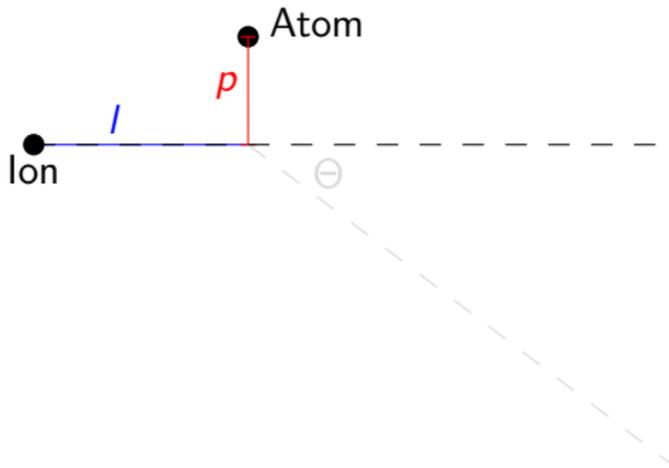


- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen

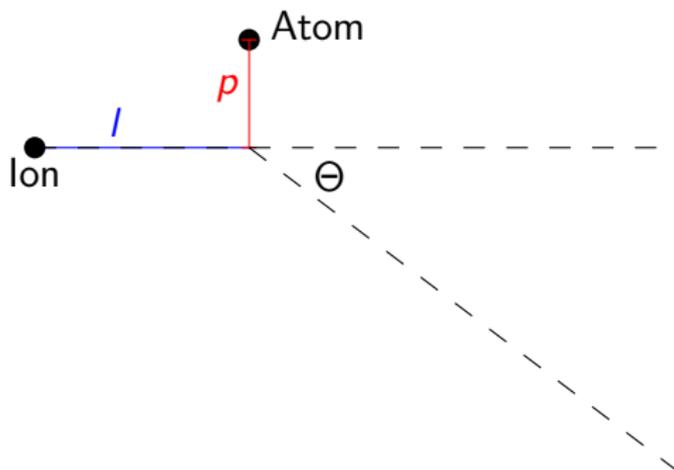


- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen

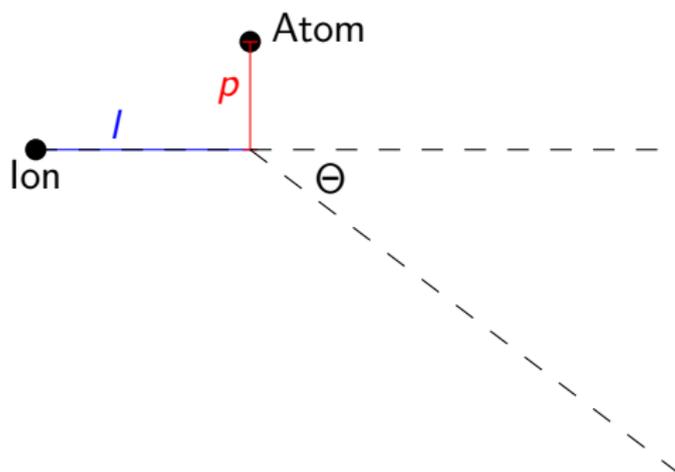


- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Grundlagen

## Die Monte-Carlo-Simulation TRIM

Abbildung der Zufallszahlen auf die physikalischen Größen



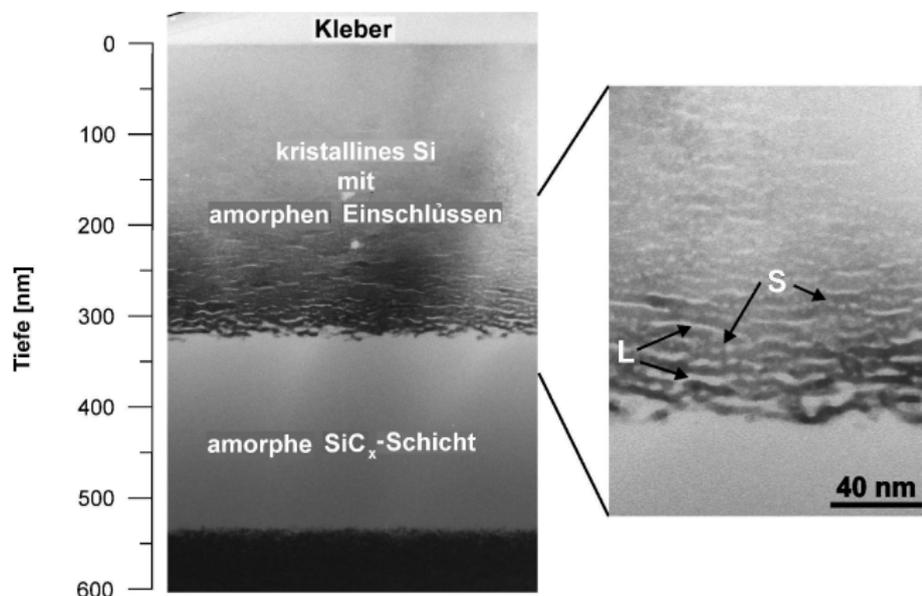
- mittlere freie Weglänge  $l$
- Stoßparameter  $p$   
 $\Rightarrow \Theta, \Delta E$
- Azimutwinkel  $\Phi$

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Experimentelle Befunde

## Lage und Ausdehnung amorpher Phasen

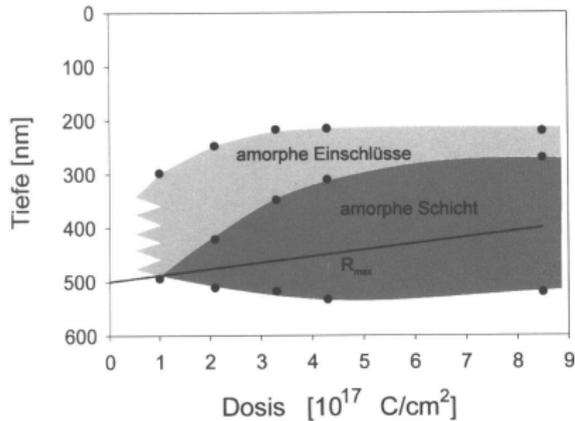


Hellfeld-XTEM-Abbildung: 180 keV C<sup>+</sup> → (100)Si, T = 150 °C,

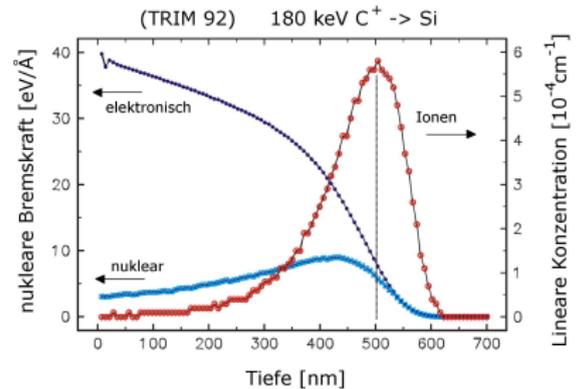
$$D = 4.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$$

# Experimentelle Befunde

## Lage und Ausdehnung amorpher Phasen



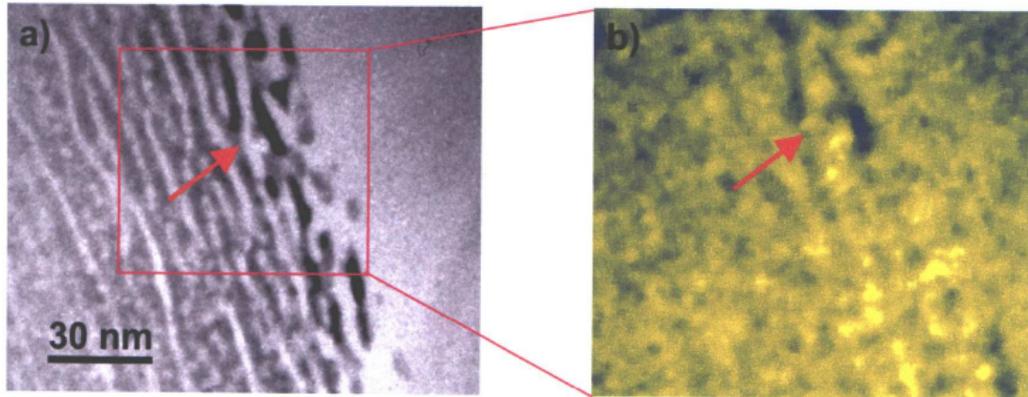
Amorphe Phasen in Abhängigkeit der Dosis  
bei  $T = 150 \text{ }^\circ\text{C}$



TRIM 92: Nukleares/Elektronisches  
Bremskraft- und Implantationsprofil für  
 $180 \text{ keV } \text{C}^+ \rightarrow \text{Si}$

# Experimentelle Befunde

## Kohlenstoffsegregation

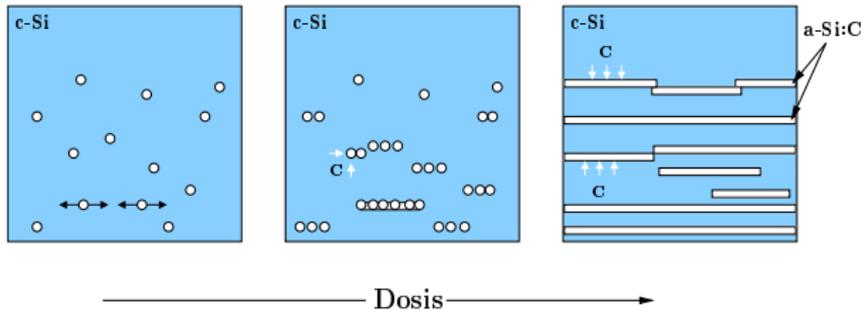


Hellfeld-XTEM- und Kohlenstoffverteilungsaufnahme.  $D = 4.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ,  
 $T = 200 \text{ }^\circ\text{C}$ .

# Überblick

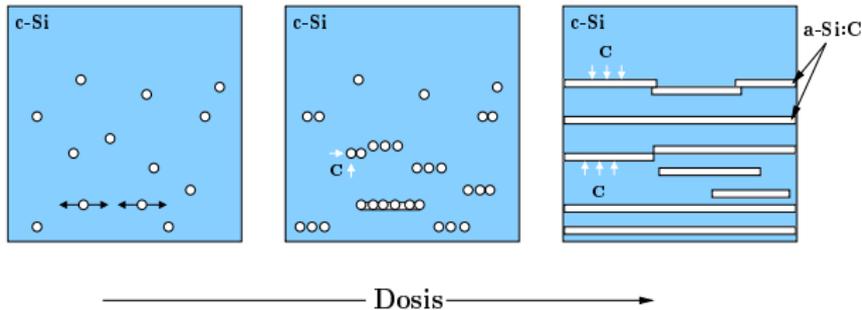
- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Modell



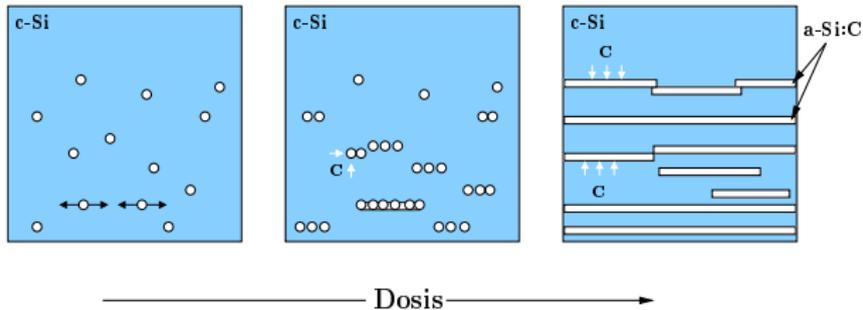
- Überschreitung der Sättigungsgrenze von  $C$  in  $c-Si$   
→ kohlenstoffinduzierte Nukleation sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ Ausscheidungen sind amorph
- 20 – 30 % geringere  $Si$ -Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ laterale Druckspannungen auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten  
→ Diffusion von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen  
→ spannungsunterstützte Amorphisierung zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Modell



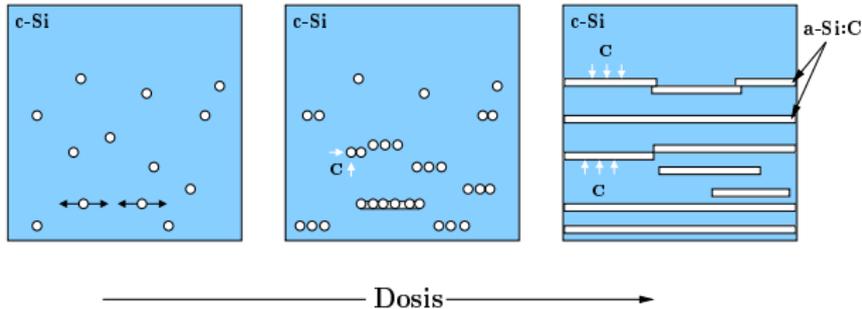
- **Überschreitung der Sättigungsgrenze von C in c-Si**  
→ **kohlenstoffinduzierte Nukleation** sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ Ausscheidungen sind **amorph**
- 20 – 30 % geringere Si-Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ **laterale Druckspannungen** auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten  
→ **Diffusion** von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen  
→ **spannungsunterstützte Amorphisierung** zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Modell



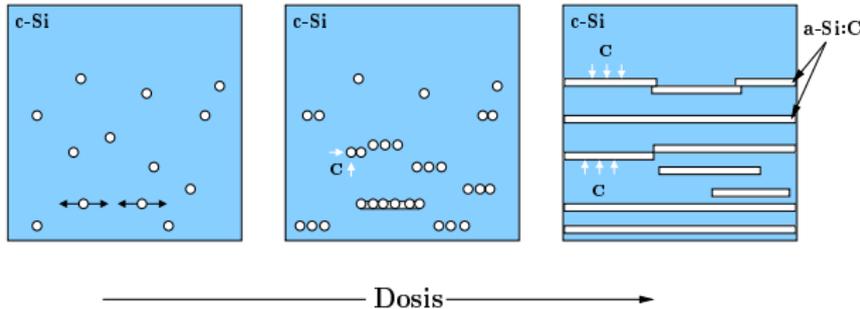
- Überschreitung der Sättigungsgrenze von  $C$  in  $c-Si$   
→ **kohlenstoffinduzierte Nukleation** sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- **hohe Grenzflächenenergie** zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ **Ausscheidungen sind amorph**
- 20 – 30 % geringere  $Si$ -Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ **laterale Druckspannungen** auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten  
→ **Diffusion** von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen  
→ **spannungsunterstützte Amorphisierung** zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Modell



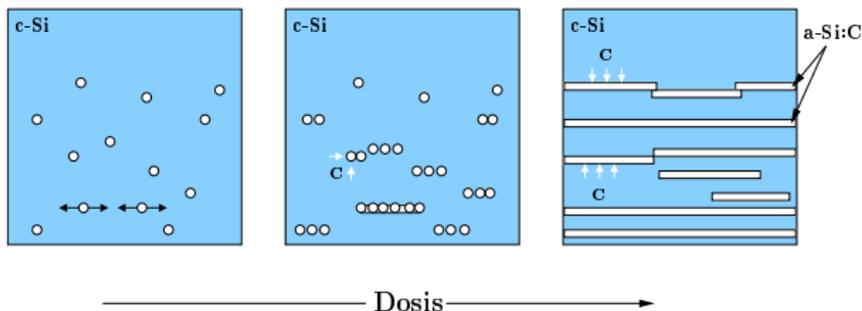
- Überschreitung der Sättigungsgrenze von  $C$  in  $c-Si$   
→ **kohlenstoffinduzierte Nukleation** sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ Ausscheidungen sind **amorph**
- 20 – 30 % geringere  $Si$ -Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ **laterale Druckspannungen** auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten  
→ **Diffusion** von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen  
→ **spannungsunterstützte Amorphisierung** zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Modell



- Überschreitung der Sättigungsgrenze von  $C$  in  $c-Si$   
→ **kohlenstoffinduzierte Nukleation** sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ Ausscheidungen sind **amorph**
- 20 – 30 % geringere  $Si$ -Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ **laterale Druckspannungen** auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- **Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten**  
→ **Diffusion** von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- Druckspannungen  
→ **spannungsunterstützte Amorphisierung** zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Modell



- Überschreitung der Sättigungsgrenze von  $C$  in  $c-Si$   
→ **kohlenstoffinduzierte Nukleation** sphärischer  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- hohe Grenzflächenenergie zwischen  $3C-SiC$  und  $c-Si$   
→ Ausscheidungen sind **amorph**
- 20 – 30 % geringere  $Si$ -Dichte des amorphen  $SiC_x$  im Vergleich zu  $c-Si$   
→ **laterale Druckspannungen** auf Umgebung (Relaxation in vertikaler Richtung)
- Abbau der Kohlenstoffübersättigung in kristallinen Gebieten  
→ **Diffusion** von Kohlenstoff in amorphe Gebiete
- **Druckspannungen**  
→ **spannungsunterstützte Amorphisierung** zwischen zwei amorphen Ausscheidungen

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - **Simulation**
  - Simulation bis 300 nm Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Simulation

Name

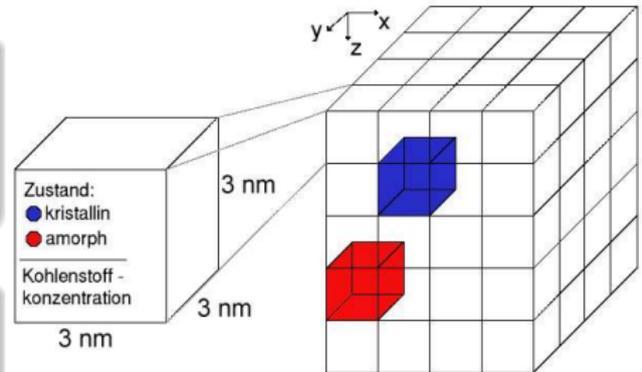
**Nano Lamellar Selbstorganisationsprozess**

Grober Ablauf

- Amorphisierung/Rekristallisation
- Kohlenstoffeinbau
- Diffusion/Sputtern

Versionen

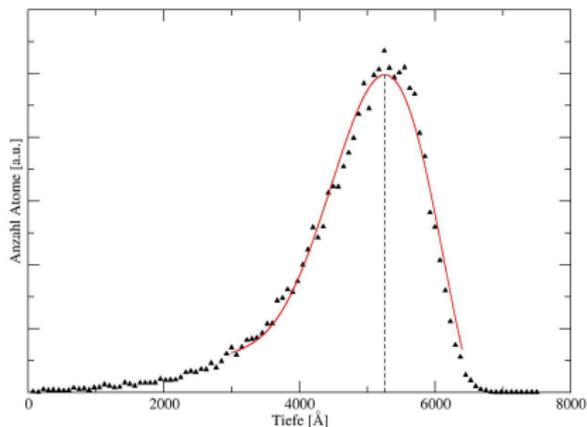
- Version 1 - Simulation bis 300 nm Tiefe
- Version 2 - Simulation über den gesamten Implantationsbereich



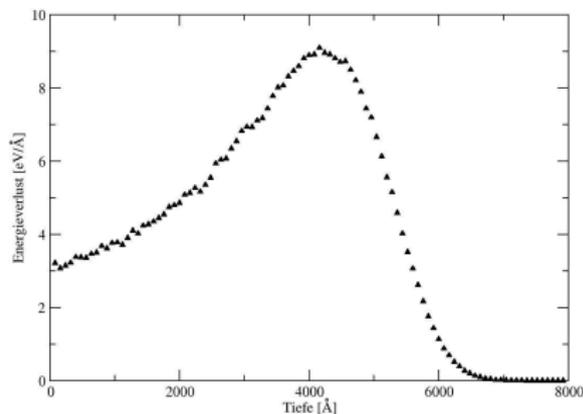
Unterteilung des Targets

# Simulation

## Statistik von Stoßprozessen



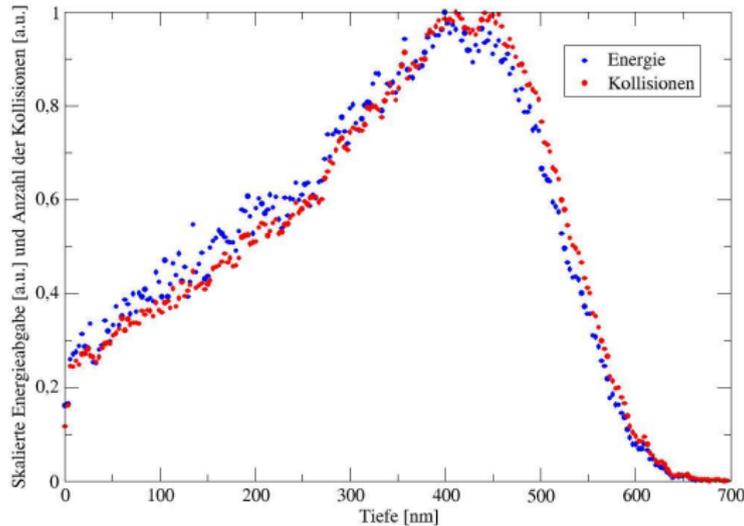
SRIM 2003.26, Implantationsprofil,  
 $180 \text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ .



SRIM 2003.26, nukleare Bremskraft,  
 $180 \text{ keV } C^+ \rightarrow Si$ .

# Simulation

## Statistik von Stoßprozessen



⇒ Durchschnittliche Anzahl der Stöße der Ionen und Energieabgabe

⇒ Mittlere Würfel-Trefferzahl eines Ions

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Amorphisierungswahrscheinlichkeit

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

- ballistische Amorphisierung
- kohlenstoffinduzierte Amorphisierung
- spannungsunterstützte Amorphisierung

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Amorphisierungswahrscheinlichkeit

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

- ballistische Amorphisierung
- kohlenstoffinduzierte Amorphisierung
- spannungsunterstützte Amorphisierung

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Amorphisierungswahrscheinlichkeit

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

- ballistische Amorphisierung
- kohlenstoffinduzierte Amorphisierung
- spannungsunterstützte Amorphisierung

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Amorphisierungswahrscheinlichkeit

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

- ballistische Amorphisierung
- kohlenstoffinduzierte Amorphisierung
- spannungsunterstützte Amorphisierung

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Rekristallisationswahrscheinlichkeit

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

mit

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

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Rekristallisationswahrscheinlichkeit

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

mit

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

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Rekristallisationswahrscheinlichkeit

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

mit

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

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Stoßkoordinaten

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend nuklearer Bremskraft

### Ablauf

- Auswürfeln der Stoßkoordinaten
- Berechnung von  $p_{c \rightarrow a}$  bzw.  $p_{a \rightarrow c}$
- Zufallszahl  $\rightarrow$  Amorphisierung/Rekristallisation
- Wiederholung für mittlere Anzahl der Treffer des Ions

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Stoßkoordinaten

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend nuklearer Bremskraft

### Ablauf

- Auswürfeln der Stoßkoordinaten
- Berechnung von  $p_{c \rightarrow a}$  bzw.  $p_{a \rightarrow c}$
- Zufallszahl  $\rightarrow$  Amorphisierung/Rekristallisation
- Wiederholung für mittlere Anzahl der Treffer des Ions

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Stoßkoordinaten

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend nuklearer Bremskraft

### Ablauf

- Auswürfeln der Stoßkoordinaten
- Berechnung von  $p_{c \rightarrow a}$  bzw.  $p_{a \rightarrow c}$
- Zufallszahl  $\rightarrow$  Amorphisierung/Rekristallisation
- Wiederholung für mittlere Anzahl der Treffer des Ions

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Stoßkoordinaten

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend nuklearer Bremskraft

### Ablauf

- Auswürfeln der Stoßkoordinaten
- Berechnung von  $p_{c \rightarrow a}$  bzw.  $p_{a \rightarrow c}$
- Zufallszahl  $\rightarrow$  Amorphisierung/Rekristallisation
- Wiederholung für mittlere Anzahl der Treffer des Ions

# Simulation

## Algorithmus - Amorphisierung/Rekristallisation

### Stoßkoordinaten

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend nuklearer Bremskraft

### Ablauf

- Auswürfeln der Stoßkoordinaten
- Berechnung von  $p_{c \rightarrow a}$  bzw.  $p_{a \rightarrow c}$
- Zufallszahl  $\rightarrow$  Amorphisierung/Rekristallisation
- Wiederholung für mittlere Anzahl der Treffer des Ions

# Simulation

## Algorithmus - Kohlenstoffeinbau

### Koordinaten für Kohlenstoffeinbau

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend Implantationsprofil

### Ablauf

- Auswürfeln der Koordinaten für Kohlenstoffeinbau
- Lokale Erhöhung der Anzahl der Kohlenstoffatome

# Simulation

## Algorithmus - Kohlenstoffeinbau

### Koordinaten für Kohlenstoffeinbau

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend Implantationsprofil

### Ablauf

- Auswürfeln der Koordinaten für Kohlenstoffeinbau
- Lokale Erhöhung der Anzahl der Kohlenstoffatome

# Simulation

## Algorithmus - Kohlenstoffeinbau

### Koordinaten für Kohlenstoffeinbau

- $x, y$  gleichverteilt
- $z$  entsprechend Implantationsprofil

### Ablauf

- Auswürfeln der Koordinaten für Kohlenstoffeinbau
- Lokale Erhöhung der Anzahl der Kohlenstoffatome

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Simulation

## Algorithmus - Diffusion/Sputtern

### Ablauf der Diffusion alle $d_v$ Schritte

- Gehe alle Zellen durch
- Wenn Zelle amorph
  - Gehe alle Nachbarzellen durch
  - Wenn Nachbarzelle kristallin
    - ⇒ Transferiere den Anteil  $d_r$  des Kohlenstoffs

### Sputterablauf alle $S$ Schritte

- Kopiere Inhalt von Ebene  $i$  nach Ebene  $i - 1$   
 $i = 2, 3, \dots, Z - 1, Z$
- Setze Status jedes Volumens in Ebene  $Z$  kristallin
- Setze den Kohlenstoff jedes Volumens in Ebene  $Z$  auf Null

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - **Simulation bis 300 nm Tiefe**
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Ergebnisse

## Simulation, Version 1

### Eigenschaften

- Tiefenbereich 0 – 300 nm
- Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil
- Ein Würfel-Treffer pro Ion
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft
- Kein Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 1

### Eigenschaften

- **Tiefenbereich 0 – 300 nm**
- Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil
- Ein Würfel-Treffer pro Ion
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft
- Kein Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 1

### Eigenschaften

- Tiefenbereich 0 – 300 nm
- **Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil**
- Ein Würfel-Treffer pro Ion
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft
- Kein Sputtervorgang

# Ergebnisse

Simulation, Version 1

## Eigenschaften

- Tiefenbereich 0 – 300 nm
- Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil
- **Ein Würfel-Treffer pro Ion**
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft
- Kein Sputtervorgang

# Ergebnisse

Simulation, Version 1

## Eigenschaften

- Tiefenbereich 0 – 300 nm
- Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil
- Ein Würfel-Treffer pro Ion
- **Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft**
- Kein Sputtervorgang

# Ergebnisse

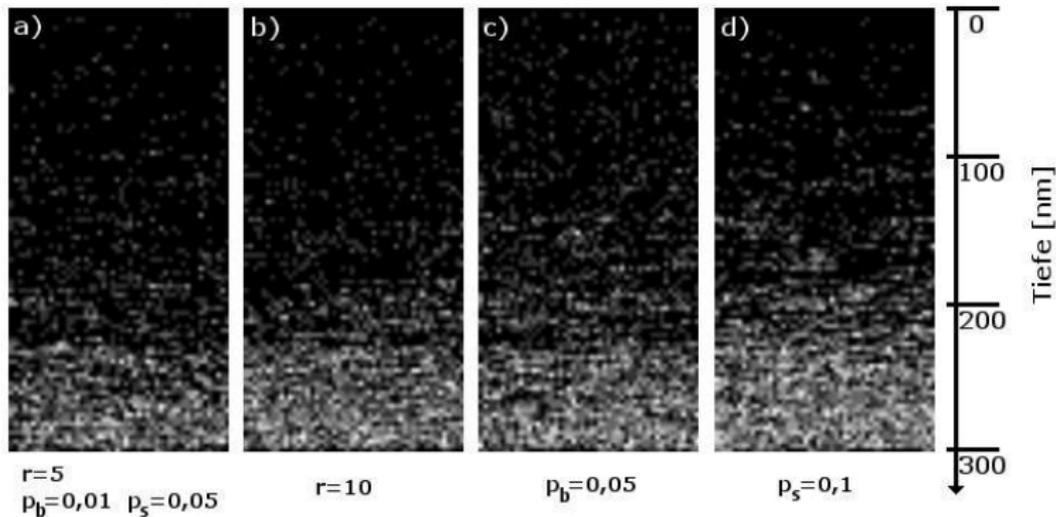
Simulation, Version 1

## Eigenschaften

- Tiefenbereich 0 – 300 nm
- Linear genähertes Implantations- und Bremskraftprofil
- Ein Würfel-Treffer pro Ion
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit unabhängig von direkter Nachbarschaft
- **Kein Sputtervorgang**

# Ergebnisse

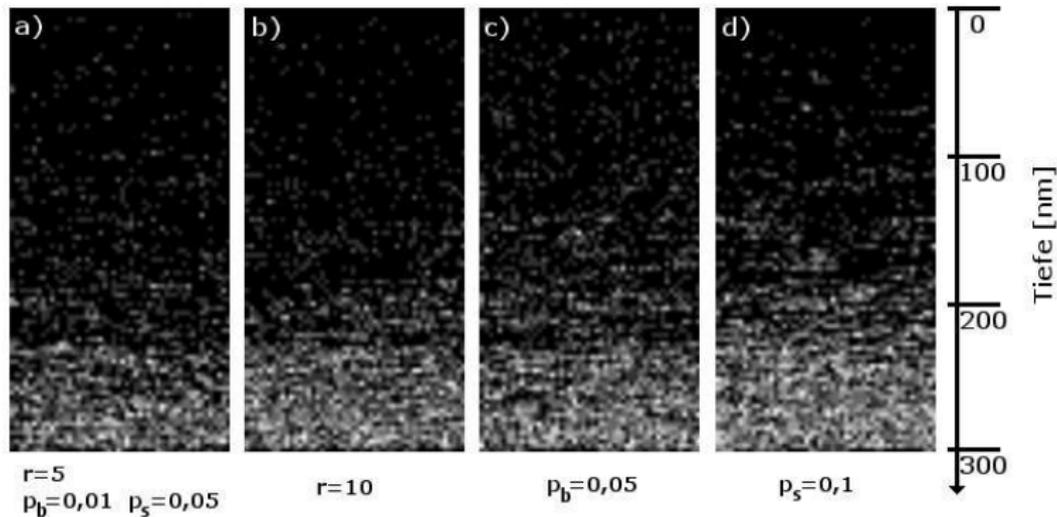
Erste Simulationen,  $s = 3 \times 10^5$ ,  $p_c = 0$



- ⇒ Abbruchradius  $r = 5$
- ⇒ große Anzahl an Durchläufen  $\rightarrow 2$  bzw.  $3 \times 10^7$
- ⇒ kleinere Simulationsparameter  $p_b$ ,  $p_c$  und  $p_s$

# Ergebnisse

Erste Simulationen,  $s = 3 \times 10^5$ ,  $p_c = 0$



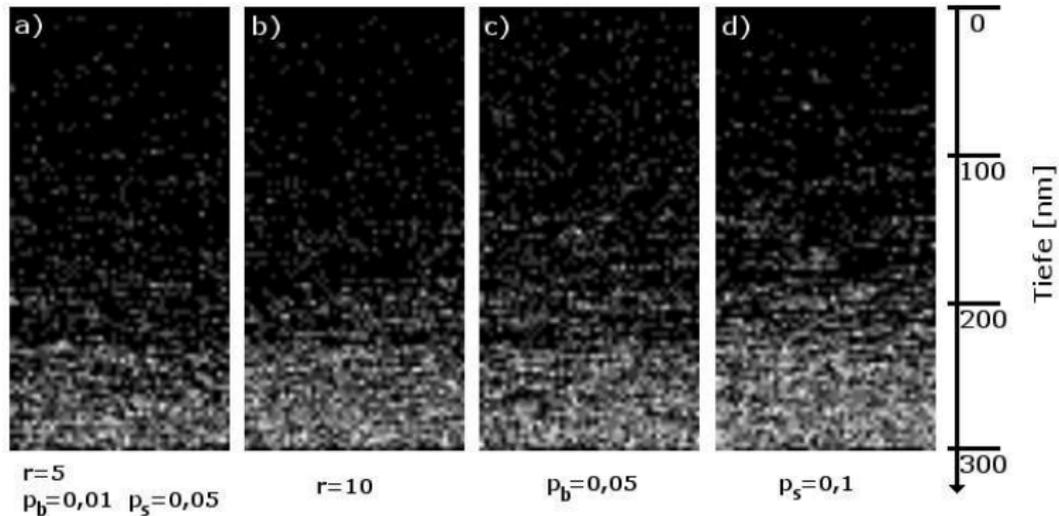
⇒ Abbruchradius  $r = 5$

⇒ große Anzahl an Durchläufen  $\rightarrow 2$  bzw.  $3 \times 10^7$

⇒ kleinere Simulationsparameter  $p_b$ ,  $p_c$  und  $p_s$

# Ergebnisse

Erste Simulationen,  $s = 3 \times 10^5$ ,  $p_c = 0$

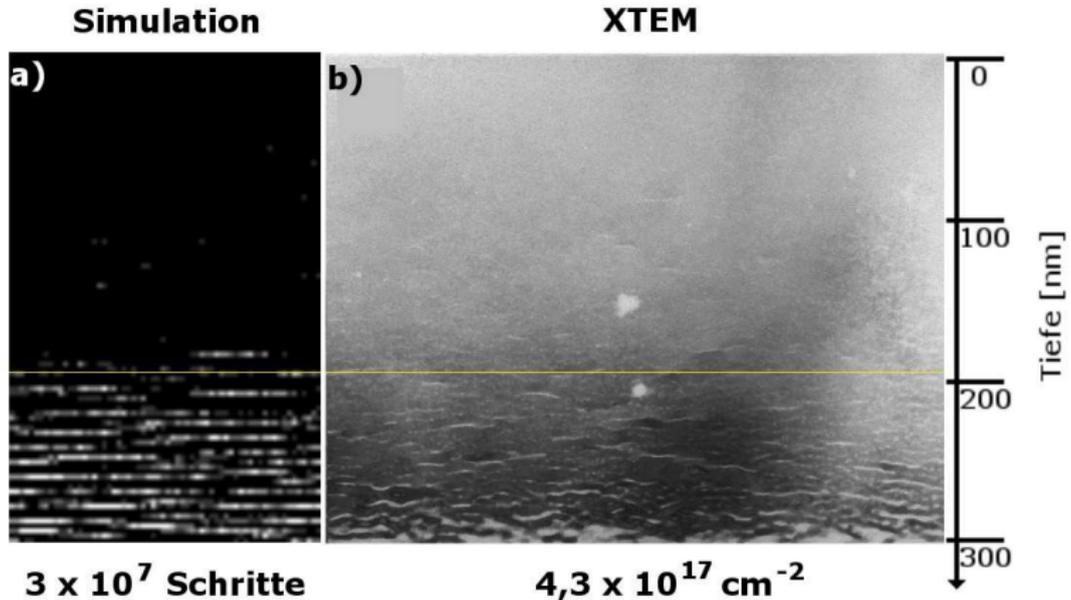


- ⇒ Abbruchradius  $r = 5$
- ⇒ große Anzahl an Durchläufen  $\rightarrow 2$  bzw.  $3 \times 10^7$
- ⇒ kleinere Simulationsparameter  $p_b$ ,  $p_c$  und  $p_s$

# Ergebnisse

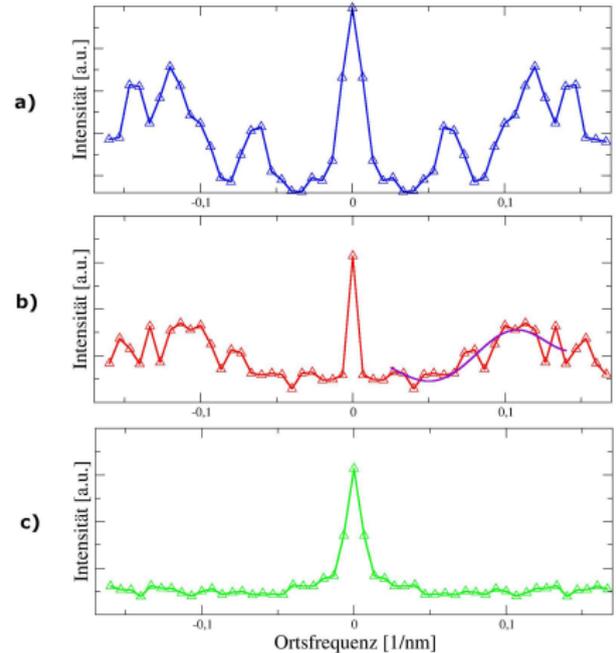
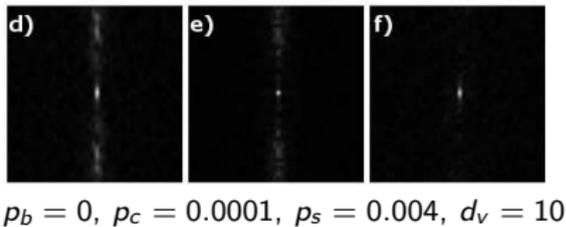
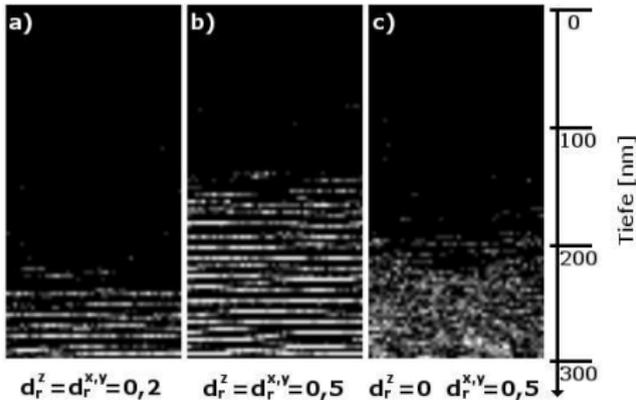
Vergleich mit TEM-Aufnahme,  $p_b = 0$ ,  $p_c = 0.0001$ ,  $p_s = 0.003$ ,  $d_v = 10$ ,  $d_r = 0.5$

## Lamellare Strukturen



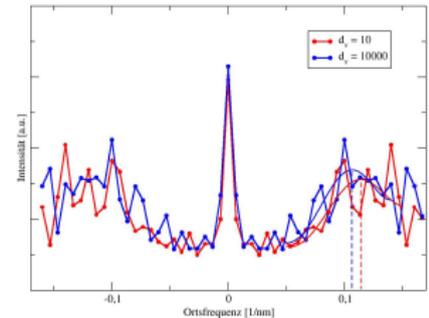
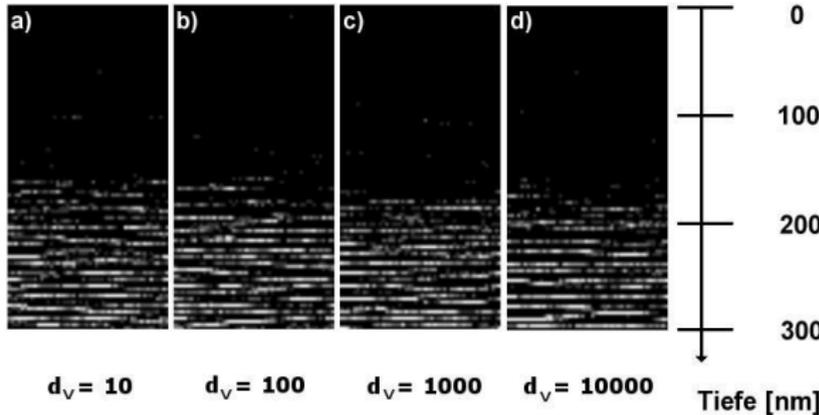
# Ergebnisse

Einfluss der Diffusionsrate  $d_r$



# Ergebnisse

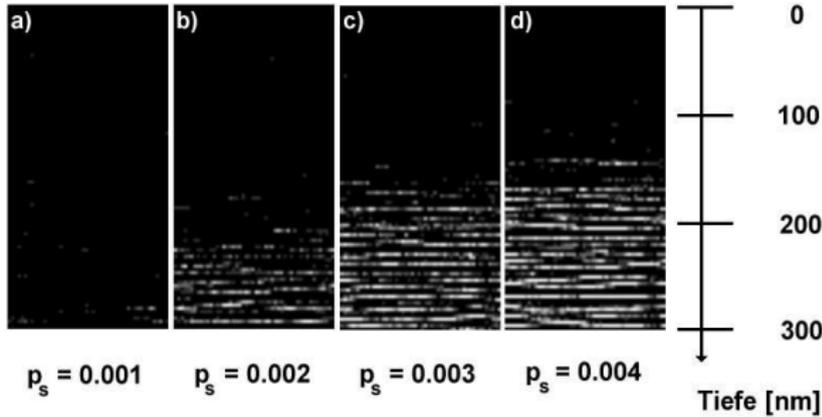
Einfluss der Diffusionsgeschwindigkeit  $d_v$



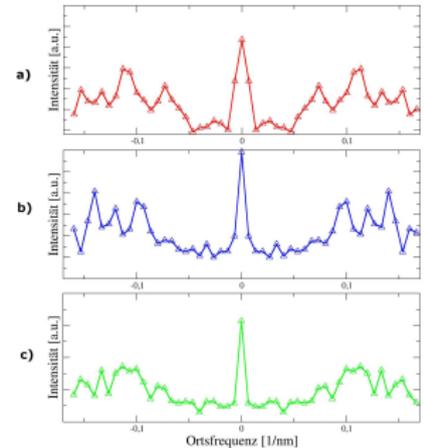
$$p_b = 0, p_c = 0.0001, p_s = 0.003, d_r = 0.5$$

# Ergebnisse

## Einfluss der Druckspannung



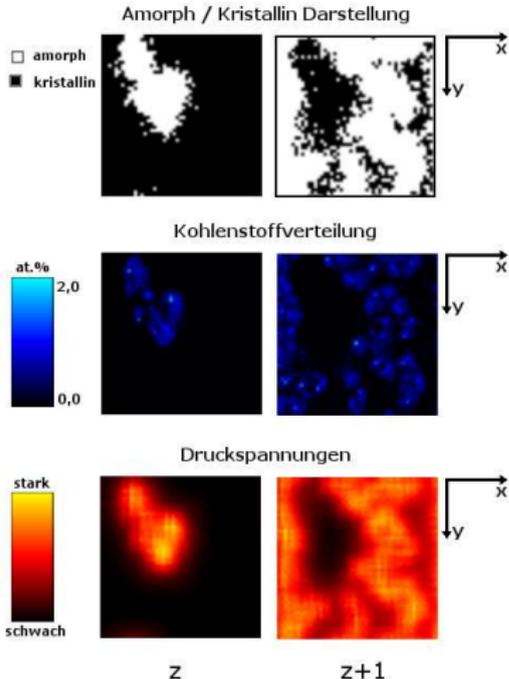
$p_b = 0$ ,  $p_c = 0.0001$ ,  $d_v = 10$ ,  $d_r = 0.5$



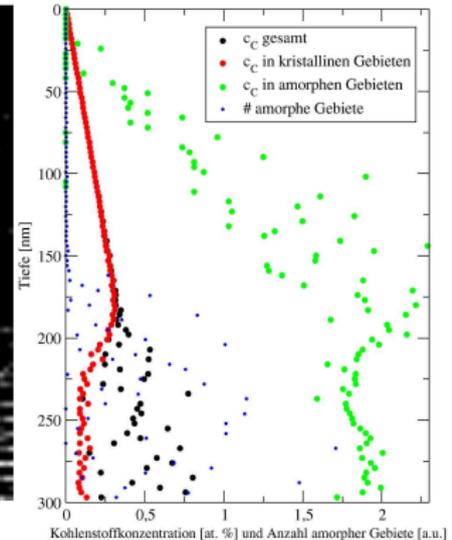
- a)  $p_s = 0.002$
- b)  $p_s = 0.003$
- c)  $p_s = 0.004$

# Ergebnisse

## Kohlenstoffverteilung



□ amorph  
■ kristallin



# Ergebnisse

## Zusammenfassung, Version 1

- Modell/Simulation reproduziert die Bildung geordneter Lamellenstrukturen
- Bildungsprozess nachvollziehbar durch die Simulation
- hohe Anzahl an Simulationsdurchläufen, kleine Amorphisierungswahrscheinlichkeiten
- Diffusion essentiell, insbesondere die Diffusion in z-Richtung
- hoher Beitrag durch kohlenstoffinduzierte Amorphisierung
- Kohlenstoffverteilung im Einklang mit EFTEM-Aufnahme

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 nm Tiefe
  - **Simulation über den gesamten Implantationsbereich**
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Ergebnisse

## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil
- mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft
- Tiefenbereich 0 – 700 nm
- Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- **exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil**
- mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft
- Tiefenbereich 0 – 700 nm
- Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil
- **mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM**
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft
- Tiefenbereich 0 – 700 nm
- Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil
- mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM
- **Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft**
- Tiefenbereich 0 – 700 nm
- Sputtervorgang

# Ergebnisse

## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil
- mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft
- **Tiefenbereich 0 – 700 nm**
- Sputtervorgang

# Ergebnisse

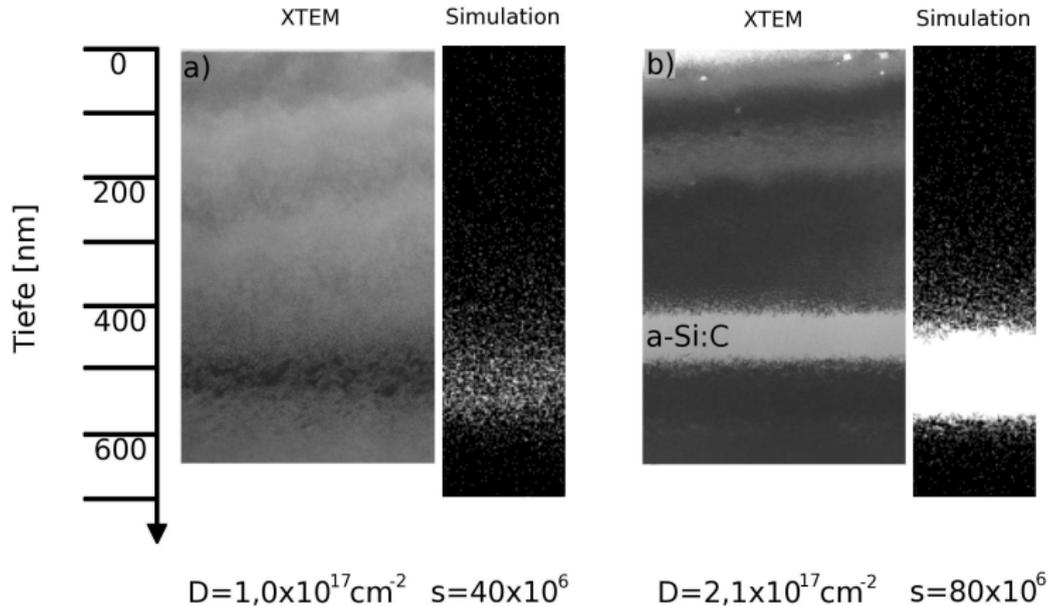
## Simulation, Version 2

### Eigenschaften

- exaktes TRIM Implantations- und Bremskraftprofil
- mittlere Anzahl Würfel-Treffer pro Ion aus TRIM
- Rekristallisationswahrscheinlichkeit abhängig von direkter Nachbarschaft
- Tiefenbereich 0 – 700 nm
- **Sputtervorgang**

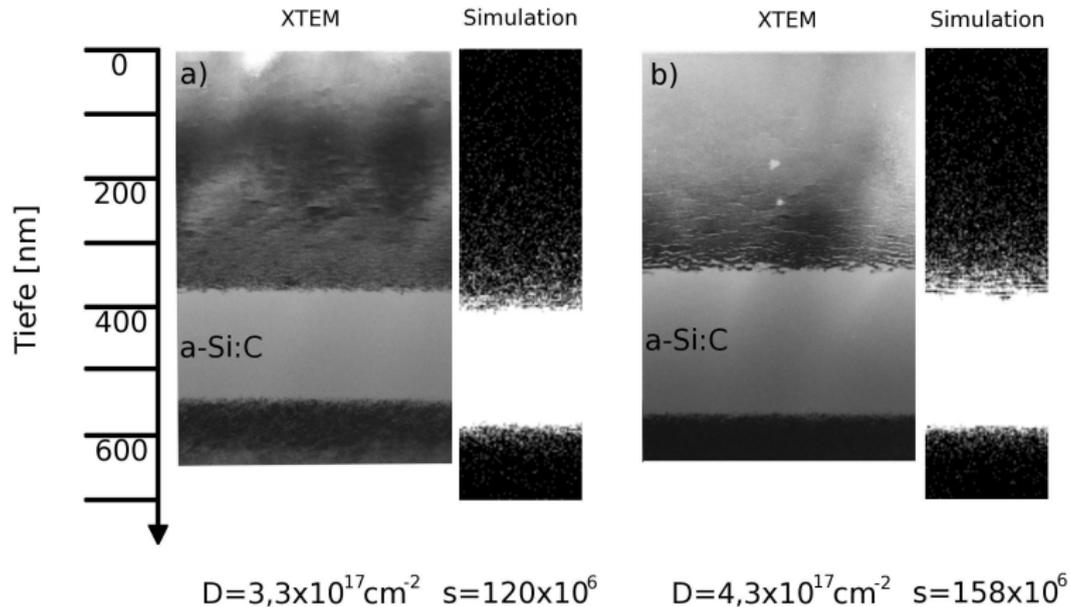
# Ergebnisse

## amorphe Phasen in Abhängigkeit der Dosis



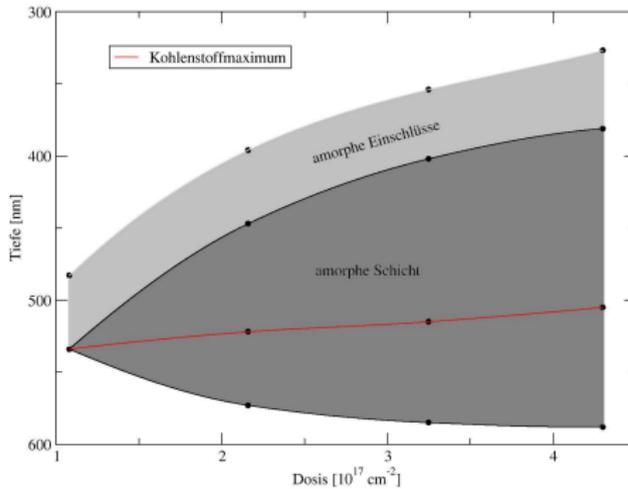
# Ergebnisse

## amorphe Phasen in Abhängigkeit der Dosis

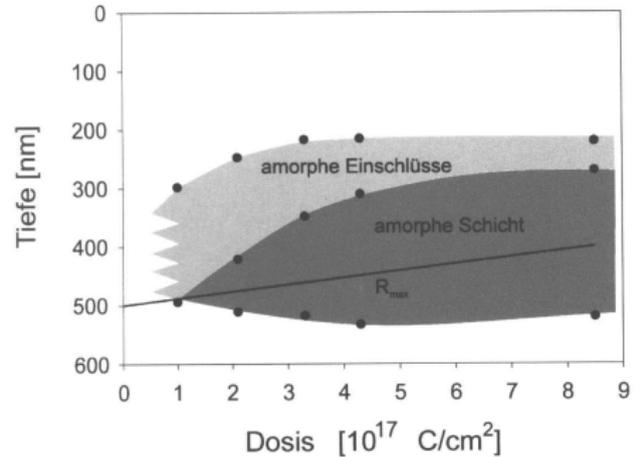


# Ergebnisse

## amorphe Phasen in Abhängigkeit der Dosis



Simulation



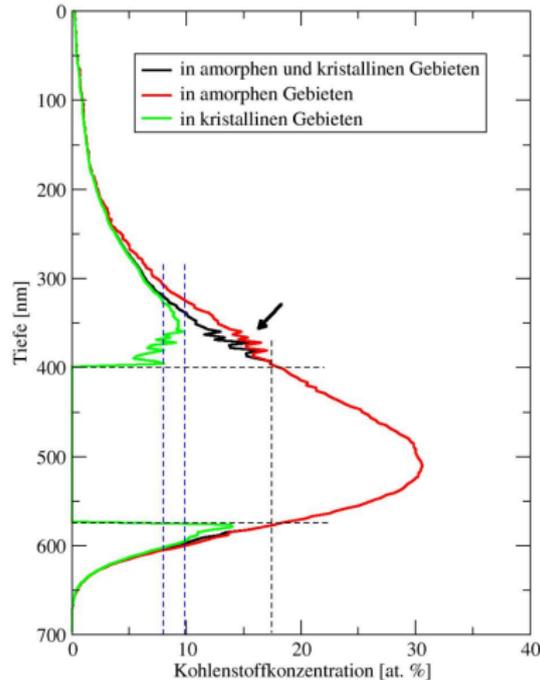
Experiment

# Ergebnisse

## Kohlenstoffverteilung



- amorphe Gebiete
- kristalline Gebiete



# Ergebnisse

## Kohlenstoffverteilung an den Grenzflächen zur amorphen Schicht

### Experiment

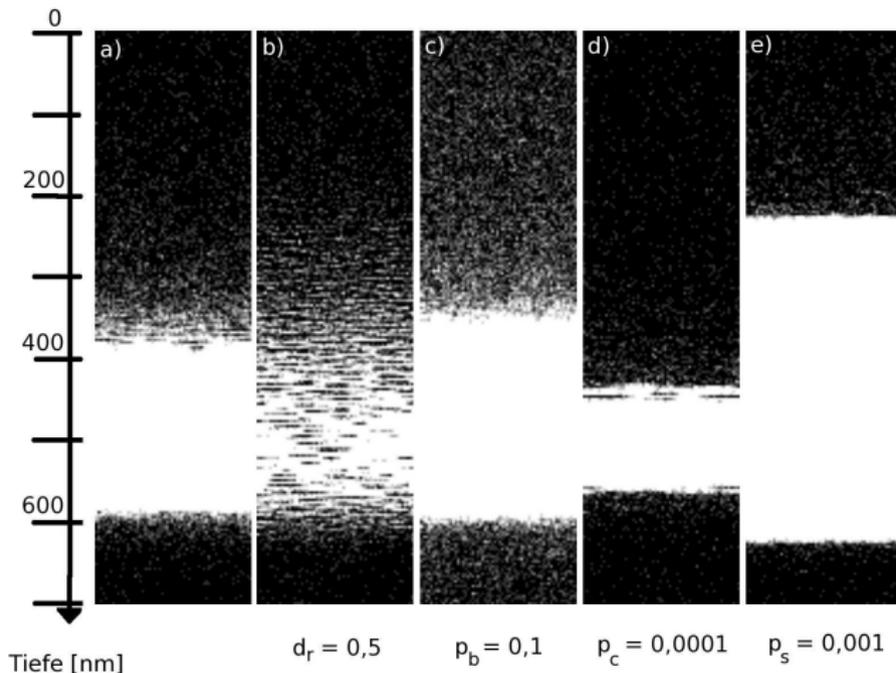
Dosis	C-Konzentration an vorderer Grenzfläche	C-Konzentration an hinterer Grenzfläche
$2,1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	16 at.%	13 at.%
$3,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	13 at.%	14 at.%
$3,4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$	14 at.%	12 at.%

### Simulation

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.%

# Ergebnisse

## Variation der Simulationsparameter



$$\begin{aligned} p_b &= 0.01 \\ p_c &= 0.001 \\ p_s &= 0.0001 \\ d_r &= 0.05 \\ d_v &= 10^6 \\ s &= 158 \times 10^6 \end{aligned}$$

# Ergebnisse

## Zusammenfassung, Version 2

- Modell/Simulation reproduziert die dosisabhängige Bildung der amorphen Phasen
- Gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation (bis auf 30 nm-Shift)
- Entwicklung der Grenzflächen und lamellaren Ausscheidungen reproduzierbar
- Übereinstimmung der Kohlenstoffkonzentration an den Grenzflächen
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur genauen Struktur der Ausscheidungen
- Variation der Simulationparameter  
⇒ Bildungsprozess der amorphen Phasen nachvollziehbar

# Überblick

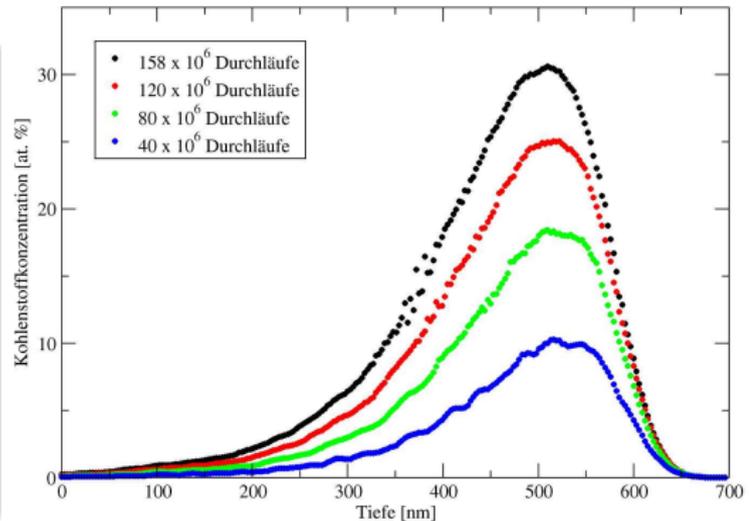
- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 nm Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Ergebnisse

Herstellung breiter lamellarer Bereiche durch einen zweiten Implantationsschritt

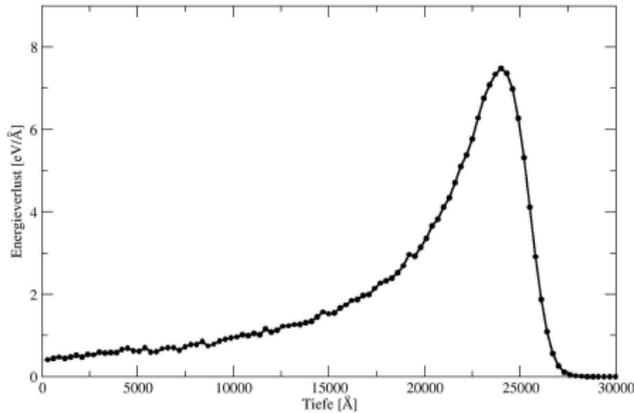
## Idee

- Grundlage: 180 keV  $C^+$ -implantiertes Si-Target
- Target durchgehend kristallin (Implantation bei höherer Temperatur)
- Bestrahlung mit 2 MeV  $C^+$ -Ionen bei  $T = 150^\circ C$

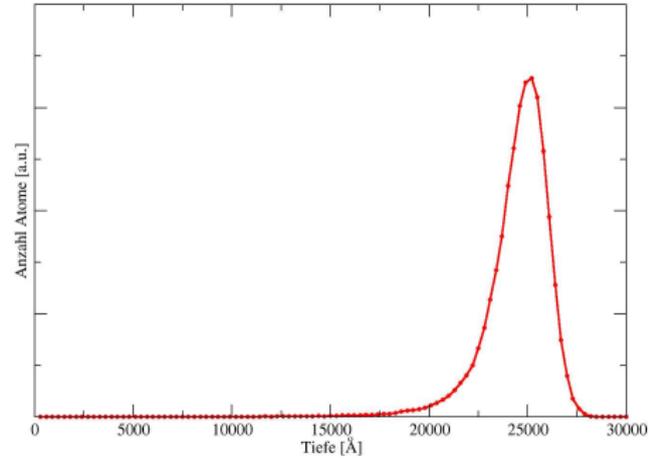


# Ergebnisse

## Nukleares Bremskraft- und Implantationsprofil von $2\text{ MeV } C^+ \rightarrow Si$



Nukleare Bremskraft 2 MeV  
 $C^+ \rightarrow Si$

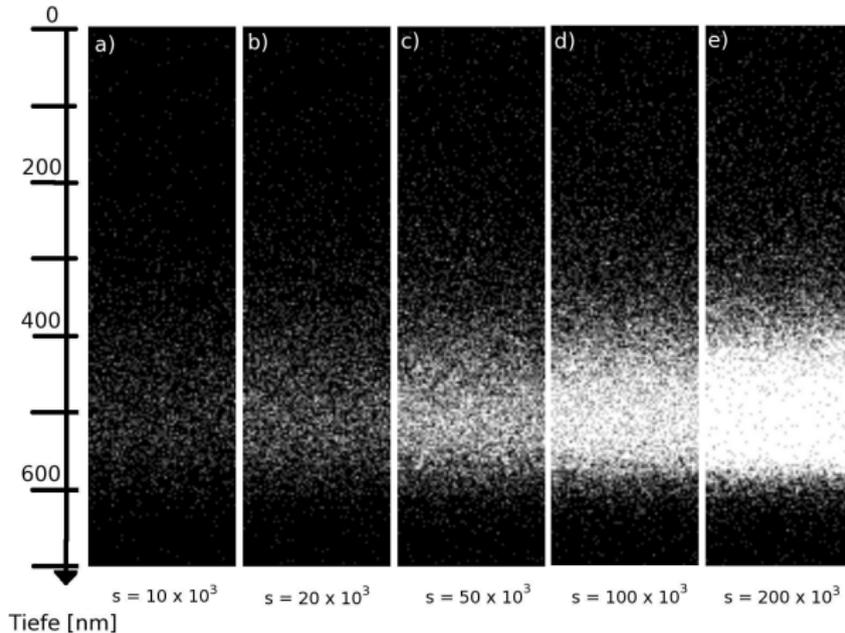


Implantationsprofil 2 MeV  $C^+ \rightarrow Si$

# Ergebnisse

Ergebnisse des zweiten Implantationsschrittes mit 2 MeV C<sup>+</sup>-Ionen

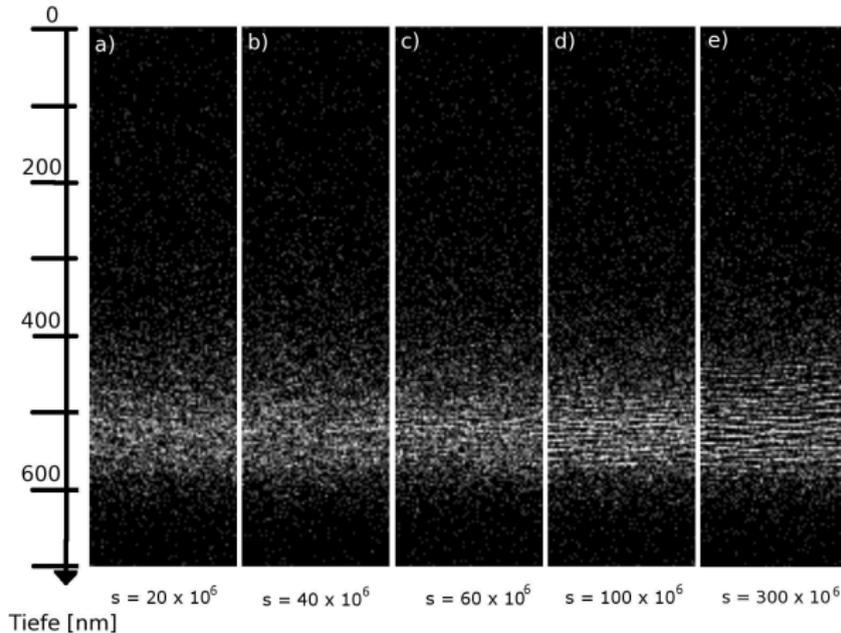
Grundlage:  $4.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  180 keV C<sup>+</sup>-Implantation



# Ergebnisse

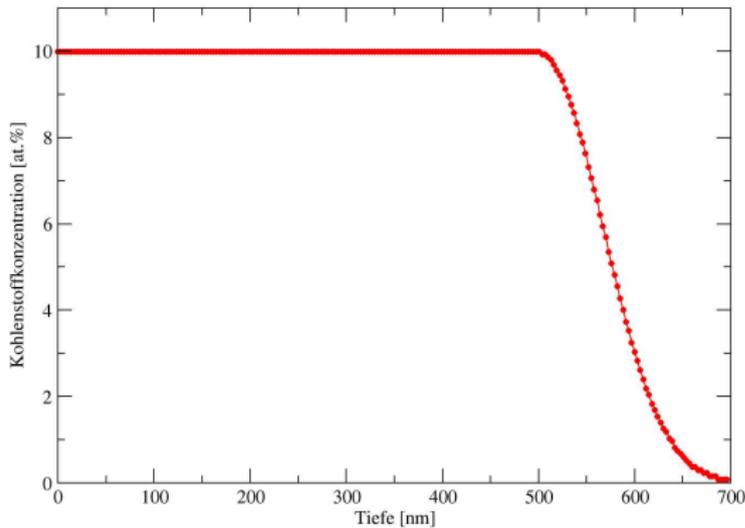
Ergebnisse des zweiten Implantationsschrittes mit 2 MeV C<sup>+</sup>-Ionen

Grundlage:  $1.1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  180 keV C<sup>+</sup>-Implantation



# Ergebnisse

## Herstellung noch breiterer lamellarer Bereiche durch Mehrfachimplantation

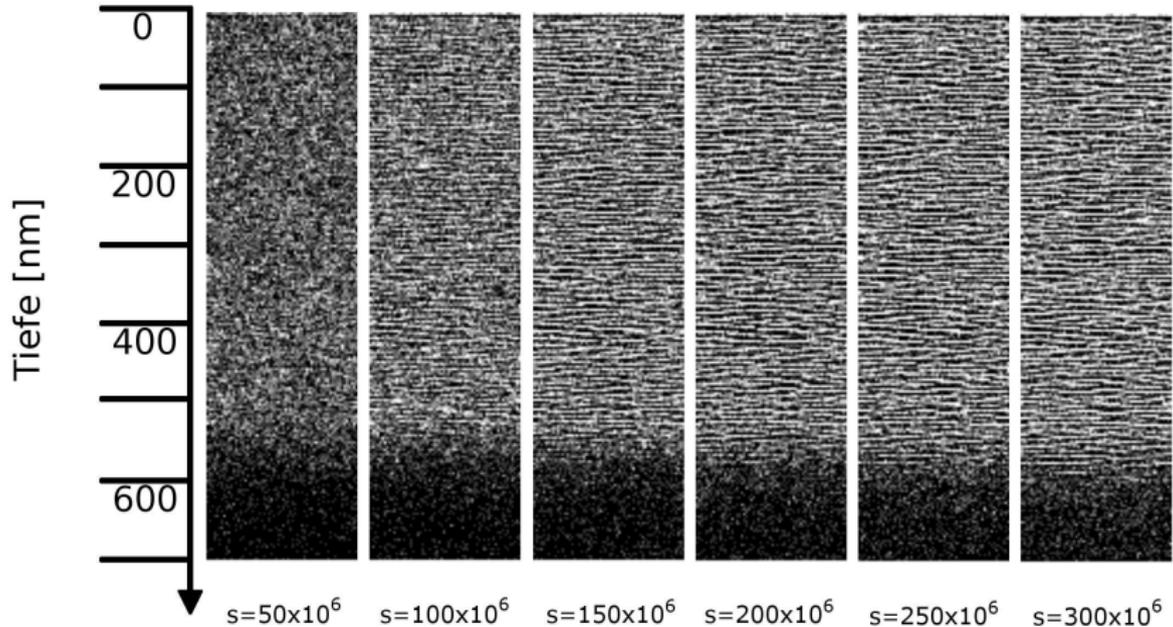


### Idee

- breite, konstante, kastenförmige Verteilung des Kohlenstoffs
- Mehrfachimplantation, Energien zwischen 180 und 10 keV
- Konzentrationsmaximum: 10 at.-%
- Bestrahlung mit 2 MeV C<sup>+</sup>-Ionen

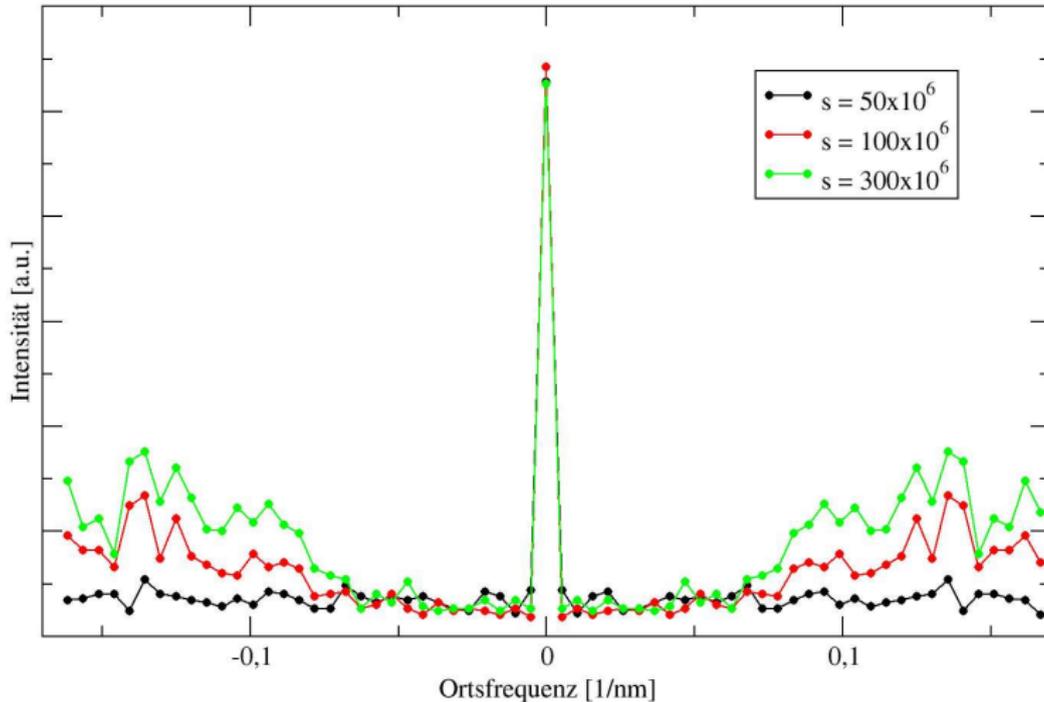
# Ergebnisse

## Ergebniss der 2 MeV C<sup>+</sup>-Bestrahlung



# Ergebnisse

## Ergebnis der 2 MeV C<sup>+</sup>-Bestrahlung



# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Zusammenfassung

- Experimentell beobachtete selbstorganisierte Anordnung amorpher  $SiC_x$ -Ausscheidungen
- Modell zur Beschreibung des Selbstorganisationsvorganges
- Implementierung in einen Monte-Carlo-Simulationscode
- Ergebnisse der Simulation reproduzieren die experimentellen Befunde
- Detaillierte Untersuchungen zur Kohlenstoffkonzentration und zur Struktur der Ausscheidungen möglich
- Vorhersage zur Herstellung großer Bereiche lamellar geordneter Strukturen

# Überblick

- 1 Einführung und Grundlagen
  - Einführung
  - Ion-Festkörper-Wechselwirkung
  - Die Monte-Carlo-Simulation TRIM
- 2 Experimentelle Befunde und Modell
  - Experimentelle Befunde
  - Modell
- 3 Simulation und Ergebnisse
  - Simulation
  - Simulation bis 300 *nm* Tiefe
  - Simulation über den gesamten Implantationsbereich
  - Herstellung breiter Bereiche mit lamellarer Struktur
- 4 Zusammenfassung und Ausblick
  - Zusammenfassung
  - Ausblick

# Ausblick

- Simulation: Variation der Ionensorte/Temperatur
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter vom Materialsystem
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter von der Temperatur
- Experimentell: Überprüfung der Vorhersage

# Ausblick

- Simulation: Variation der Ionensorte/Temperatur
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter vom Materialsystem
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter von der Temperatur
- Experimentell: Überprüfung der Vorhersage

# Ausblick

- Simulation: Variation der Ionensorte/Temperatur
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter vom Materialsystem
  - Abhängigkeit der Simulationsparameter von der Temperatur
- Experimentell: Überprüfung der Vorhersage

# Danksagung

- Prof. Dr. Bernd Stritzker
- PD Volker Eyert
- PD Jörg Lindner
- Dipl. Phys. Maik Häberlen
- Dipl. Phys. Ralf Utermann
- EP4 + Diplomanden