

The topological order and its correlation to self-atom transport in amorphous materials: silicon and germanium as model systems

Summary

In the framework of this research project the topological order and dynamic structural evolution during annealing of high purity amorphous silicon and germanium prepared by single and multiple self-ion implants will be investigated by fluctuation electron microscopy (FEM) and electron correlation microscopy (ECM). The temperature dependence of local structural changes determined by ECM will be compared to results of macroscopic self-diffusion experiments that are performed by means of isotopically controlled high purity amorphous silicon and germanium structures. Variance profiles obtained from FEM analyses and ECM data recorded on the amorphous material systems will be simulated by molecular dynamics calculations. The calculations will be based on empirical potentials and optimized to describe not only general structural properties but also experimental data on self-diffusion and epitaxial recrystallization in these amorphous systems obtained in this work and published in the literature. Our approach to combine microscopic and macroscopic studies on the local structure and dynamic evolution of ion-implanted amorphous silicon and germanium with atomistic simulations of the short and medium range order is expected to provide valuable information not only about the intrinsic atomic transport properties of these high purity amorphous materials but also about their local structure and dynamic structural evolution under heat treatments.

Die topologische Ordnung und ihr Zusammenhang zum atomaren Transport der Eigenatome in amorphen Materialien: Silizium und Germanium als Modellsysteme

Zusammenfassung

Im Rahmen des Forschungsprojektes werden die topologische Ordnung und die strukturelle dynamische Entwicklung während einer Temperaturbehandlung von hochreinem amorphen Silizium- und Germaniumstrukturen, die durch Einzel- und Mehrfach-Eigenionen-Implantation amorphisiert wurden, mit Hilfe der Fluktuationselektronenmikroskopie (FEM) und Elektronenkorrelationsmikroskopie (ECM) untersucht. Die mit ECM bestimmte Temperaturabhängigkeit von lokalen Strukturänderungen wird mit Ergebnissen makroskopischer Selbstdiffusionsexperimente verglichen, die mit isotonenmodulierten hochreinen amorphen Silizium- und Germaniumstrukturen durchgeführt werden. Die Varianzprofile aus den FEM-Analysen und die Daten der ECM Untersuchungen an den amorphen Materialsystemen werden mit molekulardynamischen Simulationen verglichen. Die Rechnungen basieren auf empirischen Potentialen, die optimiert werden, um neben den allgemeinen Struktureigenschaften dieser amorphen Systeme auch die im Rahmen des Projekts ermittelten experimentellen Daten zur Selbstdiffusion und in der Literatur veröffentlichte Daten zur epitaktischen Rekristallisation zu beschreiben. Die Verknüpfung von mikroskopischen und makroskopischen Untersuchungen zur lokalen Struktur und dynamischen Entwicklung von ionenimplantiertem amorphen Silizium und Germanium mit atomistischen Simulationen zur Nah- und Mittelbereichsordnung wird nicht nur wertvolle Informationen über die intrinsischen atomaren Transporteigenschaften dieser hochreinen amorphen Materialien liefern, sondern auch über deren lokale Struktur und dynamische strukturelle Entwicklung unter Wärmebehandlung.