

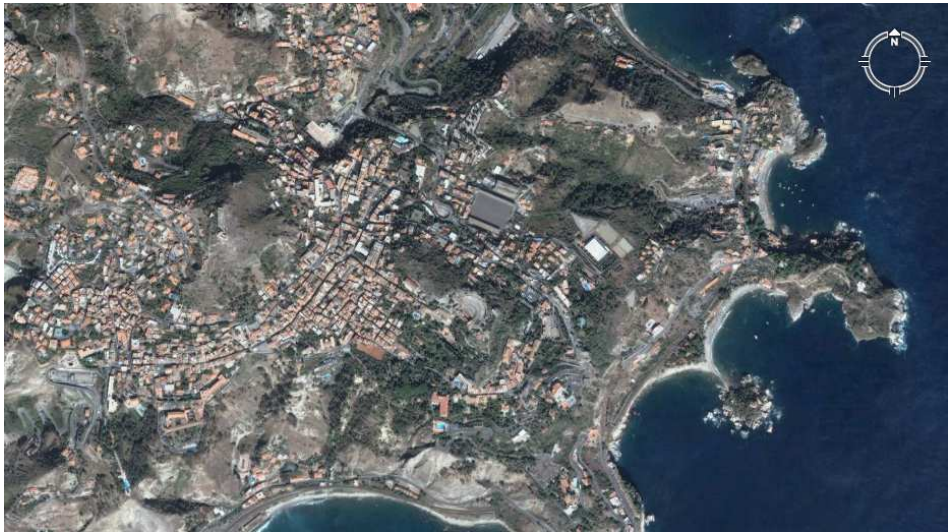
# **IBMM 2006**

**Taormina, Sizilien**

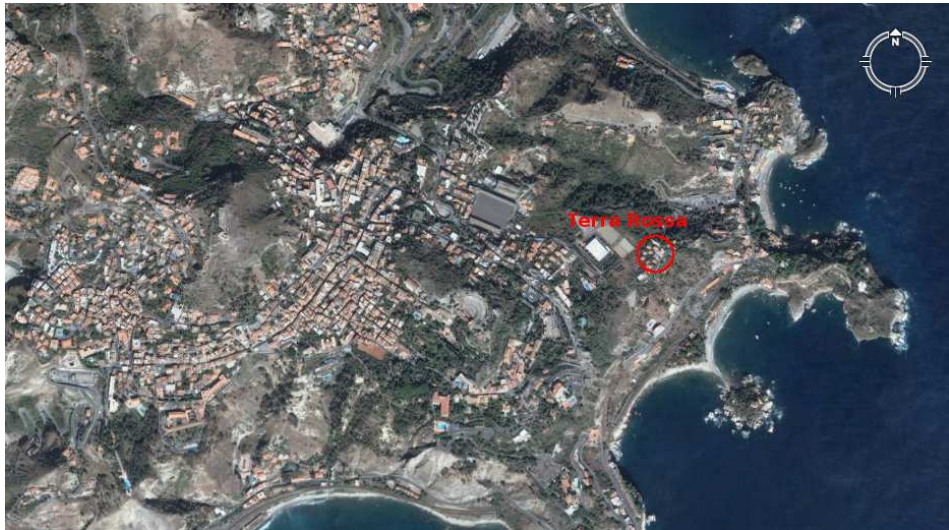
**18. - 22.09 2006**



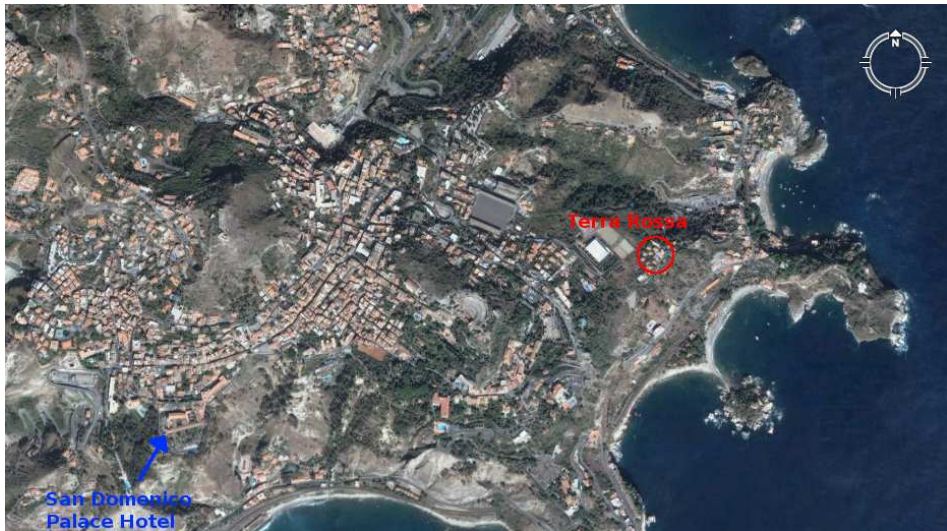
# Taormina Map



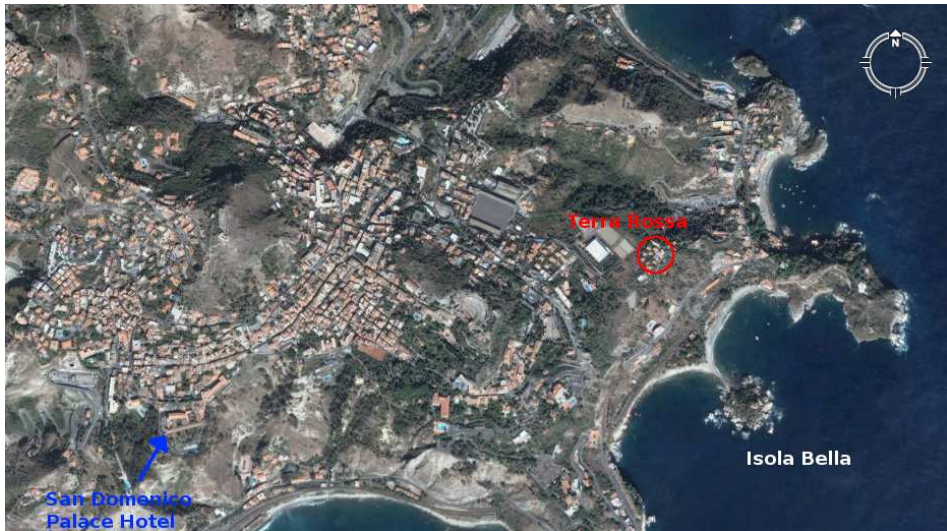
# Taormina Map



# Taormina Map



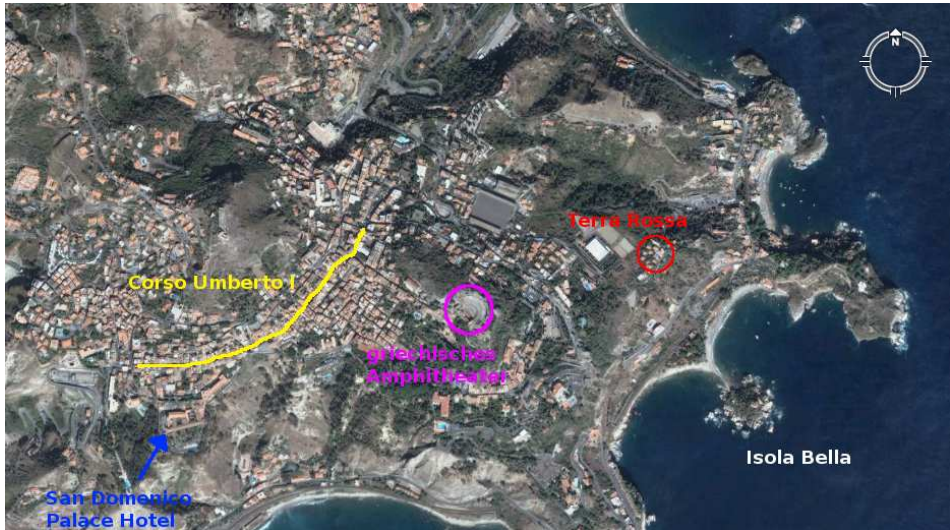
# Taormina Map



# Taormina Map



# Taormina Map



# Taormina Map





# Taormina Map





## Ion Beam Modification of Materials

Modifizierung  
Synthese  
Charakterisierung  
von Materialien durch Ionen-  
strahlen

Focus:

- ▶ Ionen-Festkörper Wechselwirkung
- ▶ Veränderung der Materialeigenschaften bei/nach Ionenbestrahlung

## Die Sessions

- ▶ New trends in ion beam processing
- ▶ Nanocrystals
- ▶ Metallic nanocrystals
- ▶ Single ion implantation
- ▶ Magnetic materials
- ▶ Focused ion beam processing
- ▶ High energy ions irradiation
- ▶ Biomaterials
- ▶ Semiconductors
- ▶ Cluster ion beams
- ▶ Carbon nanotubes and fullerenes
- ▶ Nanofabrication and metals
- ▶ Blistering



## Die Sessions

- ▶ Cluster ion beams
- ▶ Ion-solid interactions
- ▶ Ion beam modification of metals
- ▶ Plasma immersion ion implantation
- ▶ Novel applications of ion beam processing
- ▶ Ion beam modification of semiconductors
- ▶ Ion beam modification of insulators and related materials

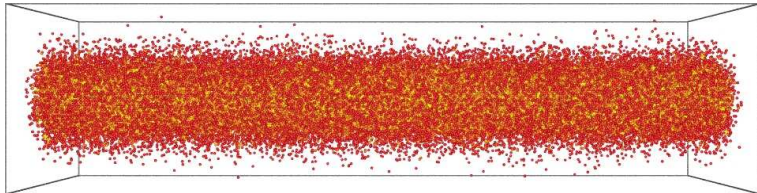


# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00000000x10<sup>2</sup> MCS

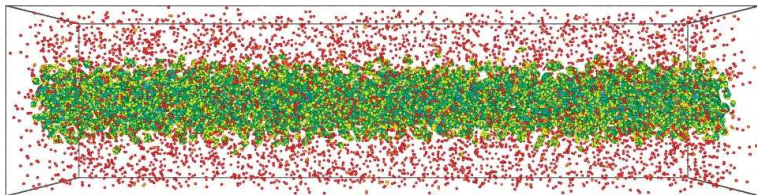
Implantationsprofil

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00000010x10<sup>2</sup> MCS

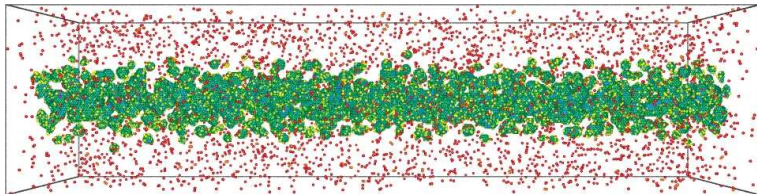
Drahtformation

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00000100x10<sup>2</sup> MCS

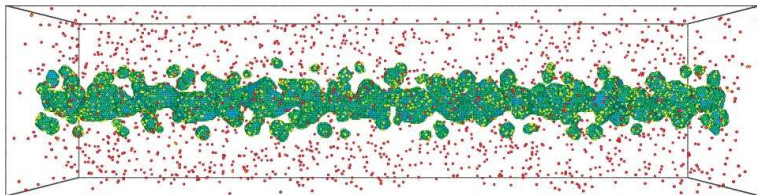
Drahtformation

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



0000500x10<sup>2</sup> MCS

Drahtformation

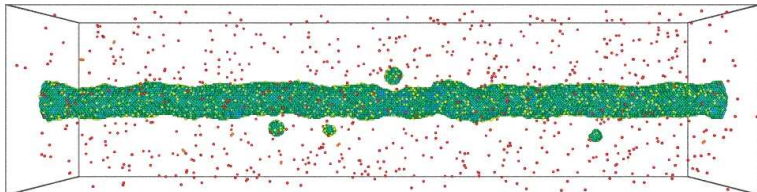


# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00002000x10<sup>2</sup> MCS

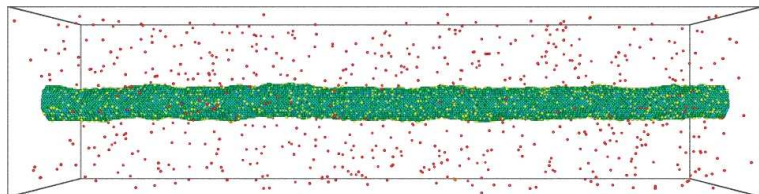
Drahtformation

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00004000x10<sup>2</sup> MCS

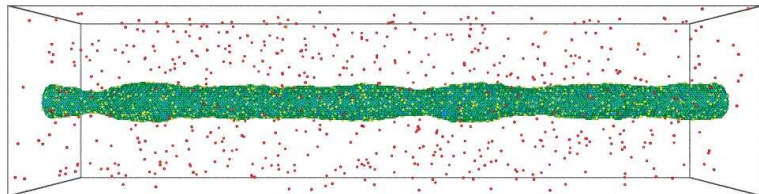
Drahtformation

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00060000x10<sup>2</sup> MCS

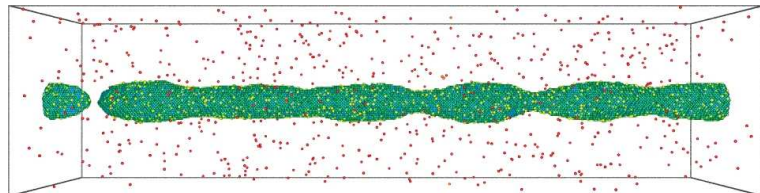
Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00070000x10<sup>2</sup> MCS

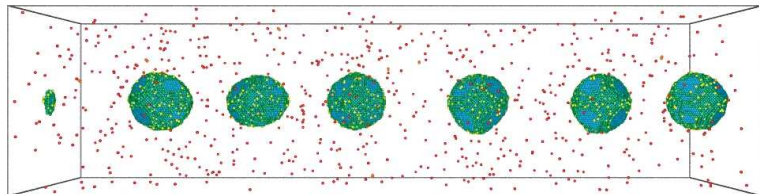
Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00115000x10<sup>2</sup> MCS

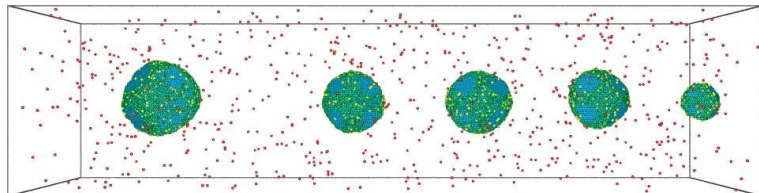
Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



00900000x10<sup>2</sup> MCS

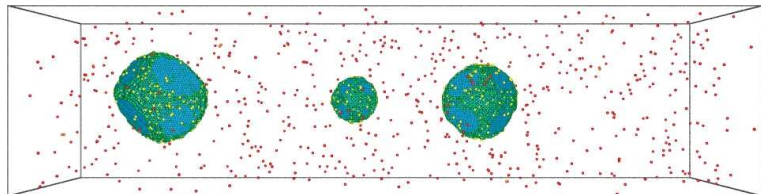
Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



01600000x10<sup>2</sup> MCS

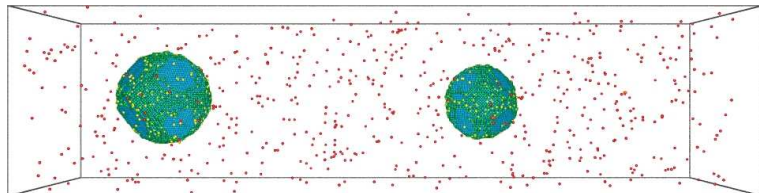
Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



03000000x10<sup>2</sup> MCS

Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

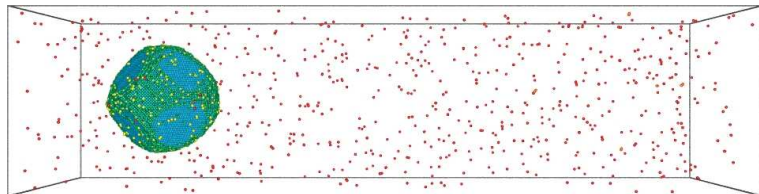


# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Simulation zur Nanowiresynthese und Zerfall

- ▶ An FIB angepasste TRIM Simulation  
→ realistisches 3D Implantationsprofil
- ▶ kinetische Monte Carlo Simulation zur Phasenseparation  
→ Formation von NWs entlang der Implantationsspur  
→ Zerfall der NWs zu einer Kette aus Nanopartikeln



05000000x10<sup>2</sup> MCS

Zerfall zu einer Kette aus Nanopartikeln

# Modeling of FIB-based synthesis of nanowire structures

Lars Röntzsch, Karl-Heinz Heinig

Unterschiedlich starke treibende Kräfte

Relaxationsvorgänge zum thermodynamischen Gleichgewicht

- ▶ Gewinn an freier Energie
  - durch Phasenseparation
  - durch Reduktion von Oberflächenkrümmungen
- ▶ Rayleigh Instabilität /  
Minimierung der freien Energie der Grenzfläche

⇒ Drahtformation und Zerfall zeitlich getrennt voneinander

Anwendungen

- ▶ Oberflächen-Plasmon-Polariton Wellenleiter
- ▶ Bevorzugter Zerfall an Kreuzungen/Ecken/Enden (T/X-Junctions)
  - Ein-Elektron-Transistor

# Ion and electron beam modification of carbon nanotubes

A. V. Krasheninnikov

Zusammenfassung des Fortschrittes im Gebiet  
Ionenstrahl-induzierter Phänomene in Kohlenstoff-Nanostrukturen

Veränderung

- ▶ mechanischer
- ▶ elektrischer
- ▶ magnetischer

Eigenschaften von NTs durch

- ▶ Ionenbestrahlung
- ▶ Einfluß eines Elektronenstrahls

Simulation der Kollisionen energetischer Teilchen mit  
Kohlenstoff-Nanostrukturen

- ▶ MD Simulationen mit empirischen Potentialen
- ▶ Dichtefunktionaltheorie Rechnungen

Vergleich mit experimentellen Daten

# Ion and electron beam modification of carbon nanotubes

A. V. Krasheninnikov

## Einfluss durch Ionenbestrahlung

einzelne SWNT: exzellente mechanische Eigenschaften

→ neue Generation von Materialien aus SNWTs

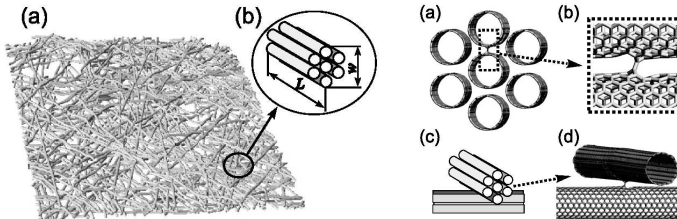
**schwache Wechselwirkung zwischen NT-Bündeln**

→ sehr viel schlechter Festigkeiten als bei SWNT

**Bestrahlung mit energetischen Teilchen**

→ intertube covalent bonds

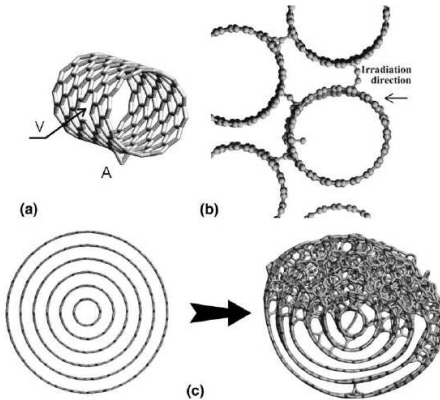
→ Erhöhung der Festigkeit um 1-2 Größenordnungen



# Ion and electron beam modification of carbon nanotubes

A. V. Krasheninnikov

## Einfluss durch Ionenbestrahlung



a) Leerstelle und zweifach koordinierter Kohlenstoff

b) NT-Bündel nach Aufprall eines 500 eV Ar Ions

c) MWNT vor und nach 300 eV Ar Bestrahlung,  $D = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$

# Ion and electron beam modification of carbon nanotubes

A. V. Krasheninnikov

Einfluss eines hochenergetischen Elektronenstrahls

## Ziel

NTs als Pipeline für den Transport von Atomen

## Theoretische Untersuchungen

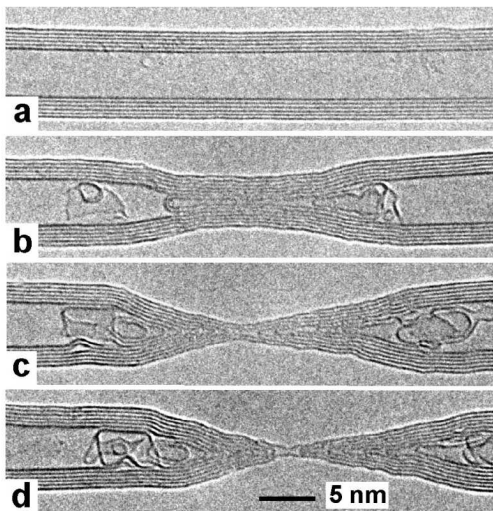
Mobilität/Diffusion von Atomen im zylindrischen Hohlraum der NTs sehr viel höher als in kompakten kristallinen oder amorphen Bulkmaterial

## Untersuchung

Injektion von Kohlenstoffatomen in den Hohlraum der NTs durch Bestrahlung mit hochenergetischen Elektronen (im TEM)

# Ion and electron beam modification of carbon nanotubes

A. V. Krasheninnikov



- ▶ Schwellwert für Versetzungen und Erzeugung von defekten abhängig vom NT-Radius (Spannung auf Grund der Krümmung)
- ▶ NTs schrumpfen durch Verlust der Atome
- ▶ Diffusion der Atome im Hohlraum in axialer Richtung → NTs scheinen Ideal als Pipelines auf atomarer Skala

**Fazit:**

**Die Teilnahme an der Konferenz hat sich gelohnt! ;)**

