

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФАКУЛТЕТ ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

Марко П. Глогињић

ИСПИТИВАЊЕ УТИЦАЈА ИМПЛАНТАЦИЈЕ
ЈОНА ВИСОКИХ ЕНЕРГИЈА У МОДУ
КАНАЛИСАЊА НА СТРУКТУРУ 6H-SiC
МОНОКРИСТАЛА

докторска дисертација

Београд, 2022

UNIVERSITY OF BELGRADE
FACULTY OF PHYSICAL CHEMISTRY

Marko P. Gloginjić

INVESTIGATION OF THE HIGH ENERGY ION
CHANNELLING IMPLANTATION INFLUENCE
ON THE 6H-SiC SINGLE CRYSTAL STRUCTURE

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2022

Ментори:

др Никола Цвјетићанин, редовни професор
Универзитет у Београду–Факултет за физичку хемију

др Марко Ерић, научни сарадник
Универзитет у Београду–Институт за нуклеарне науке „Винча“
Институт од националног значаја за републику Србију

Комисија:

др Љиљана Дамјановић-Василић, редовни професор
Универзитет у Београду–Факултет за физичку хемију

др Марко Даковић, ванредни професор
Универзитет у Београду–Факултет за физичку хемију

др Срђан Петровић, научни саветник
Универзитет у Београду–Институт за нуклеарне науке „Винча“
Институт од националног значаја за републику Србију

Датум одбране: _____

Захвалница

Захваљујем се ментору др Марку Ерићу и руководиоцу групе у оквиру које је израђена ова докторска дисертација, др Срђану Петровићу, из Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, Института од националног значаја за Републику Србију, на сарадњи и указаном поверењу. Велику захвалност дугујем и ментору професору др Николи Цвјетићанину и члановима Комисије професорки др Љиљани Дамјановић-Василић и професору др Марку Даковићу, са Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, за помоћ, подршку и савете приликом израде ове докторске дисертације. Професору др Михалису Кокорису, професору др Ефтимиосу Лиарокапису и Аикатарини Флеси из Националног техничког универзитета у Атини, Грчка, се захваљујем на сарадњи и прилици за израду дела експеримената у оквиру ове докторске дисертације током боравка у Атини. Др Стјепку Фазинићу и др Марку Карлушићу из Института Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска, захваљујем се на прилици за израду експеримената који су помогли остваривању циљева ове докторске дисертације. Такође се захваљујем породици, пријатељима и девојци на указаном стрпљењу и подршци.

САЖЕТАК

Јонска имплантација представља једну од метода модификације површинских и дубинских слојева материјала (до неколико микрометара), која омогућава добру контролу дубине и дебљине модификованих слојева. Током процеса јонске имплантације долази до промене кристалне структуре материјала који се модификује. У случају монокристала аморфизација је умањена када се правац кристалографске осе кристала добро поклапа са правцем јонског снопа, и тада се јавља ефекат каналисања јона, што истовремено омогућава и веће дубине продирања јона.

Силицијум карбид (SiC) је полупроводнички материјал који поседује низ изузетних физичких и хемијских својстава која омогућавају широк опсег његових примена, од производње високонапонских полупроводничких компоненти великих снага, за употребу у екстремним условима (нпр. свемир), па све до његове употребе као заштитног материјала код нуклеарних реактора. У циљу испитивања утицаја високоенергетске јонске имплантације у моду каналисања, у монокристал бН-SiC имплантирани су јони угљеника (C^{3+}) и силицијума (Si^{3+}) енергије 4 MeV. Имплантирани флуенси су били у распону од $4,17 \times 10^{14}$ јона $\cdot cm^{-2}$ до $2,02 \times 10^{16}$ јона $\cdot cm^{-2}$.

За квантитативну и квалитативну анализу аморфизације монокристала бН-SiC коришћене су методе: спектрометрија еластичног повратног расејања у моду каналисања (EBS/C), микро-раманска (μR) спектроскопија и скенирајућа електронска микроскопија (SEM). Коришћењем квантитативне анализе методом EBS/C, фитовањем одговарајућих спектра помоћу рачунарског програма Channeling SIMulation (CSIM), који је развијен у Лаботорији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“, добијени су профили аморфизације бН-SiC кристала по дубини. Анализом μR спектра снимљених дуж попречног пресека имплантираног дела кристала, утврђен је тип и дубинска расподела аморфизације кристалне структуре бН-SiC. Такође, ови резултати су проверени помоћу SEM микроскопије. Профили аморфизације по дубинама добијени различитим методама показују веома добро међусобно слагање.

Кључне речи: силицијум карбид, јонска имплантација, каналисање јона

Научна област: физичка хемија

Ужа научна област: физичка хемија материјала

УДК број:

ABSTRACT

Ion implantation is a method for modification of surface and deeper layers of materials, (up to several micrometers), which enables a good control of depth and thickness of modified layers. During the ion implantation process, the crystal structure of a material is damaged. In the case of a monocrystal the damage is reduced for a good alignment of an ion beam and a crystallographic axis of the crystal, when the ion channeling effect occurs, which, at the same time, enables greater depths of ion's penetration.

Silicon carbide (SiC) is a semiconductor material with exceptional physical and chemical properties for a wide range of applications, from the production of high-voltage and high power semiconductor components, usage in extreme conditions (e.g. space), up to application as a shielding material in nuclear reactors. In order to investigate the influence of high-energy ion channeling implantation, carbon (C^{3+}) and silicon (Si^{3+}) ions of 4 MeV energy were implanted in the 6H-SiC single crystal. Implanted fluences were in the range from 4.17×10^{14} ions \cdot cm⁻² to 2.02×10^{16} ions \cdot cm⁻².

Ion elastic backscattering channeling spectrometry (EBS/C), micro-Raman (μ R) spectroscopy, and scanning electron microscopy (SEM) were used for quantitative and qualitative analysis of the damage of 6H-SiC single crystals. Quantified damage depth profiles of 6H-SiC crystals were obtained by fitting the EBS/C spectrum using the Channeling SIMulation program code (CSIM), developed in Laboratory of Physics, Vinča Institute of Nuclear Sciences. By monitoring the characteristic bands in the μ R spectra recorded along the cross section of the implanted part of the crystal, the type and depth distribution of damage to the crystal structure 6H-SiC was determined. These results were also verified using SEM. Depth damage profiles obtained by different methods show very good agreement with each other.

Keywords: silicon carbide, ion implantation, ion channeling

Scientific field: physical chemistry

Scientific subfield: physical chemistry of materials

UDC number:

Садржај

1. УВОД.....	1
2. ТЕОРИЈСКИ ДЕО	3
2.1. Интеракција јона са материјалима	3
2.1.1. Интеракциони потенцијал.....	4
2.1.2. Енергијски губици и заустављање имплантираних јона.....	6
2.2. Каналисање јона.....	8
2.2.1. Ефекат каналисања јона	9
2.2.2. Енергијски губици и заустављање каналисаних јона.....	11
2.2.3. Процес деканалисања јона	11
2.3. Силицијум карбид.....	12
2.3.1. Карактеристике и примена 6H-SiC.....	14
2.4. Аморфизација као последица јонске имплантације	15
2.4.1. Аморфизација 6H-SiC.....	17
2.5. Методе карактеризације	20
2.5.1. Спектрометрија елстичног повратног расејања јона.....	21
2.5.1.1. Основни принципи спектрометрије елстичног повратног расејања.....	21
2.5.1.1.1. Кинематика расејања јона	21
2.5.1.1.2. Попречни пресеци за расејање јона.....	23
2.5.1.2. Спектрометрија елстичног повратног расејања у моду каналисања – EBS/C	26
2.5.1.3. Симулација EBS/C спектра	26
2.5.2. Раманска спектроскопија кристала	27
2.5.2.1. Раманска спектроскопија 6H-SiC	29
2.5.3. Скенирајућа електронска микроскопија.....	31
3. ЦИЉЕВИ РАДА.....	33
4. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА ПОСТАВКА.....	34
5. РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА	37
5.1. SRIM симулација имплантације јона	37
5.2. Имплантација јона у моду каналисања.....	39
5.3. Спектрометрија еластичног повратног расејања у моду каналисања.....	41
5.4. CSIM рачунарски програм	46
5.4.1. Процедура фитовања EBS/C спектра	50
5.5. Одређивање профила аморфизације	50
5.5.1. Модел индуковане тоталне аморфизације.....	59
5.5.2. Имплантација јона при случајној оријентацији кристала	62
5.6. Одређивање профила аморфизације итеративним поступком	64

5.7. Скенирајућа електронска микроскопија.....	69
5.8. Микро-раманска спектроскопија.....	70
5.8.1. Ширина ласерског снопа.....	71
5.8.2. Рамански спектри имплантираних узорака	73
5.8.3. Поређење EBS/C и раманских профила.....	81
5.8.4. Каналисање и случајна оријентација	83
5.8.5. Модел конфинације фонона.....	84
5.8.6. Проблем ширине ласерског снопа.....	87
6. ЗАКЉУЧЦИ	91
7. РЕФЕРЕНЦЕ	93
8. БИОГРАФИЈА АУТОРА	104
9. ПРИЛОЗИ	105

1. УВОД

Силицијум карбид (SiC) један је од најстаријих и најпознатијих полупроводничких материјала. Упркос тој чињеници, и даље представља атрактиван материјал и предмет је различитих истраживања захваљујући својим јединственим карактеристикама. SiC се одликује изразитом чврстоћом, високом тачком топљења, хемијском инертношћу, ниским коефицијентом термалног ширења и високом топлотном проводношћу. Стога се намеће као материјал са могућношћу широке примене, од производње високофреквентних, високотемпературских електронских уређаја великих снага [1], до примена у окружењима са екстремним условима попут оних у нуклеарним реакторима [2, 3] и свемиру [4].

Електронске компоненте на бази силицијума преовлађују у данашњој полупроводничкој индустрији. Међутим, за рад у режиму високих снага, силицијум као материјал је непогодан услед низа ограничавајућих фактора, као што су ниски радни напон и температура, релативно узан енергетски процеп (1,1 eV) и ниска дозвољена концентрација допаната [1, 5]. SiC се показао као погодан алтернативни материјал [6]. Поседује знатно шири енергетски процеп у односу на силицијум, што га чини погодним материјалом за ултра високе напоне [1], што за последицу има умањење димензија полупроводничких компоненти намењених раду са високим напонима. Такође, SiC подржава већу концентрацију допаната него силицијум, омогућавајући при том већи степен контроле електричних својстава, па самим тим и већи степен слободе приликом пројектовања и израде полупроводничких компоненти. Све ово чини SiC интересантним материјалом из перспективе полупроводничке индустрије, што га одржава у фокусу истраживања.

У процесу производње полупроводничких компоненти често се користи метода имплантације јона. Услед постојања тренда минијатуризације компоненти, јавља се потреба за плитким, танким полупроводничким слојевима на прецизно дефинисаним дубинама (формирање p и n региона). Показано је да је јонском имплантацијом употребом добро фокусираног снопа могуће добити слојеве са резолуцијом од 5 nm [7]. Такође, једна од великих предности методе допирања путем јонске имплантације огледа се у чињеници да није ограничена врстом допаната. Међутим, пратећи ефекат јонске имплантације је аморфизација (нарушавање) кристалне структуре [8]. Аморфизацијом је у дисертацији ословљено свако нарушавање монокристалне структуре попут рандомизације атома кристалне решетке, генерисања шупљина, стварања поликристалних домена, бубрење (енгл. *swelling*), итд. У којој мери ће структура бити аморфизована зависи од више фактора, међу којима су врста јона и имплантирани флуенс. Аморфизација полупроводника утиче на њихова електрична својства, те је познавање дебљине и дубине аморфизованог слоја, као и степена и типа аморфизације, од значаја за савремену полупроводничку индустрију.

Испитивање аморфизације SiC-а као последице изложености екстремним условима је битан сегмент примене SiC-а као нуклеарног материјала, јер су у циљу повећања ефикасности рада нуклеарних реактора потребни нови материјали који ће омогућити рад на вишим температурама и при томе поседовати високу радијациону отпорност. Захваљујући повишеној радијационој отпорности, одличној топлотној проводљивости и ниском ефикасном пресеку за захват неутрона, SiC има могућност широке примене у савременој нуклеарној индустрији. Интензивно се испитује као материјал за фузионе [9, 10] и фисионе реакторе [11]. Утицај јонизујућег зрачења на материјале намењене за производњу нуклеарних реактора или за облогу нуклеарног горива представља посебан изазов на путу до њихове комерцијализације. У ранијим студијама, имплантације јона конституената кристала (енгл. *self-ions*) коришћене су за симулирање аморфизације материјала коју би изазвало излагање неутронском зрачењу [12]. Узевши у обзир чињеницу да су експерименти имплантације јона мање захтевни од озрачивања неутронима и да се еквивалента доза аморфизације постиже за неупоредиво краће

време експозиције, јавља се потреба за опсежнијим истраживањима структурних дефеката у SiC насталих као последице јонске имплантације.

У овој докторској дисертацији главни циљеви истраживања су усмерени на испитивање утицаја имплантације јона силицијума и угљеника енергије 4 MeV на процес аморфизације монокристала 6H-SiC. Оријентација јонског снопа током имплантације поклапала се са правцем [0001] аксијалне осе канала 6H-SiC кристала, односно, имплантација је била извршена у моду каналисања. Аморфизација кристала је испитана коришћењем следећих аналитичких метода: спектрометрије еластичног повратног расејања у моду каналисања (EBS/C), микро-раманске (μR) спектроскопије и скенирајуће електронске микроскопије (SEM). Додатно, EBS/C спектри су моделирани рачунарским програмом CSIM развијеним у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, Института од националног значаја за републику Србију.

2. ТЕОРИЈСКИ ДЕО

2.1. Интеракција јона са материјалима

Савремена технолошка достигнућа у великој мери зависе од карактеристика примењених материјала, те се стога јавља потреба за прецизном модификацијом њихових физичких и хемијских својстава. Код великог броја примена од посебног значаја је површински регион материјала. Једна од често примењиваних метода модификације овог региона јесте помоћу јонских снопова. Овом методом може се постићи модификација хемијских, механичких, електричних, оптичких, магнетних, суперпроводних и триболошких карактеристика површинског региона, без утицаја на целокупну запремину материјала (енгл. *bulk*).

Интеракција јона са материјалима одвија се помоћу акцелератора у којима се јони (пројектили) убрзавају применом електричног поља и фокусирају системом електромагнетних сочива. Приликом проласка јона кроз материјал, услед електромагнетне интеракције са атомима и електронима мете, долази до успоравања јона и дисипације енергије. Током процеса заустављања јони ослобађају велику количину енергије у кратком временском интервалу (10^{-17} – 10^{-15} s) локализовану у малој запремини (10^{-17} – 10^{-16} cm³) [13]. Дисипација енергије јона у материјалу одвија се кроз неколико видова интеракције: расејање јона еластичним сударом са језгрима атома мете; измештање атома мете из својих позиција у оквиру кристалне решетке уз формирање дефеката; јонизација и ексцитација атома мете; нуклеарне реакције при којима настају карактеристични емисиони продукти [14]. Процес модификације јонским сноповима није ограничен термодинамичким својствима материјала, због чега је могућа имплантација јона широког опсега од водоника до уранијума. Поред тога, концентрација имплантираних јона може бити значајно већа него при допирању конвенционалним методама, и не зависи од равнотежне растворљивости имплантираног елемента у имплантираном материјалу. Енергија имплантираних јона се креће у опсегу од неколико keV до неколико стотина MeV (циклотрони), што резултује дубинама продирања јона у распону од неколико десетина нанометара до неколико десетина микрометара [13, 15].

Јони широког опсега енергија се користе у различите сврхе истраживања и модификације материјала. За депозицију танких филмова на површинском слоју материјала користе се јони енергија од неколико десетина eV до око 1 keV [16-18]. У процесу уклањања површинских слојева кристала (спатеринг, енгл. *sputtering*) најчешће се користе јони племенитих гасова енергије од 1 keV до неколико десетина keV [19-22]. Модификација блископовршинског дела материјала најчешће се извршава при енергији јона од неколико десетина до неколико стотина keV [23-25]. Јони ових енергија данас се често примењују у полупроводничкој индустрији при производњи електронских и оптичких компоненти [26, 27]. У циљу модификације већих дубина материјала користе се јони енергије неколико MeV [28-30]. Поред модификације, јони MeV-ских енергија користе се за квантификовану карактеризацију материјала (спектрометрије еластичног повратног расејања (EBS), анализа нуклеарних реакција (NRA), анализа гама зрака индукованих јонима (PIGE), анализа X зрака индукована јонима (PIXE)), будући да емисиони продукти јон-атомских интеракција носе информације о маси, броју и расподели атома унутар анализираног материјала [31].

Јонска имплантација представља изузетно користан алат у савременим истраживањима и развоју полупроводничких материјала са прилагођеним електричним, магнетним и оптичким својствима [32-34]. Такође, јонска имплантација представља основну технологију за производњу интегрисаних кола у полупроводничкој индустрији захваљујући којој је могуће функционисање савременог живота у дигиталном добу [35]. Додатно, тренд минијатуризације полупроводничких компоненти захтева постизање плитких, танких полупроводничких слојева на прецизно дефинисаним дубинама [15]. Дубинска расподела имплантираних јона директно

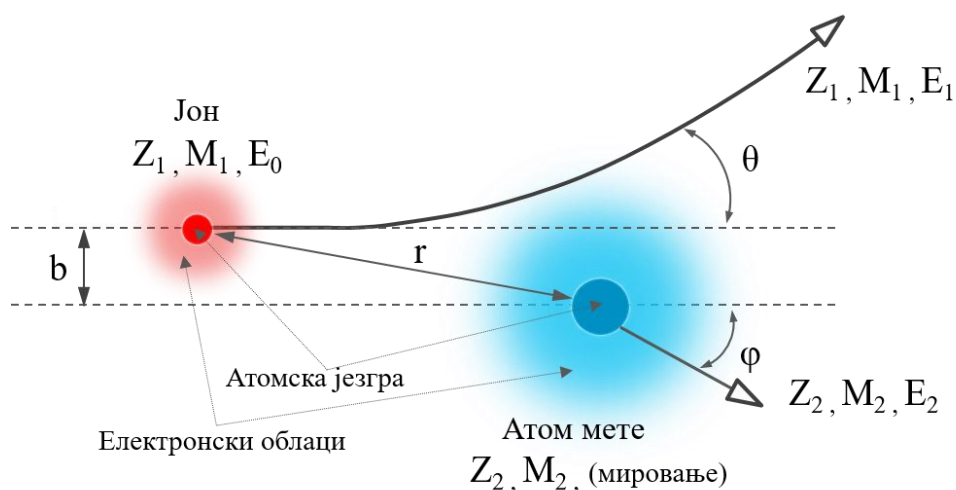
је повезана са њиховом енергијом, масама јона и атома конституената материјала мете. Варијацијом енергије јона и дозе може се контролисати профил концентрације допаната. Дубинска резолуција имплантације зависи и од квалитета фокусирања јонског снопа [7]. Микро и нано 2D локализација имплантираних јона постиже се коришћењем микро- и нано-шаблона (маски) који дозвољавају јонску имплантацију само на одређеним позицијама материјала [36].

Јонска имплантација користи се и за симулирање оштећења материјала који се употребљавају у нуклеарној индустрији (нуклеарни реактори и постројења за одлагање нуклеарног отпада) изазваних енергетским честицама [37, 38]. У машинској индустрији јонска имплантација се користи за побољшање карактеристика површине материјала попут тврдоће [39], корозивних [40] и адхезионих својстава [41], отпорности на хабање [42] и еластичности материјала [43]. Јонска имплантација се може користити за веома прецизно сечење тврдих и ломљивих материјала без стварања нових ивица са лошим квалитетом површине [44, 45]. У медицини, јонски снопови користе се као протонска терапија при лечењу карцинома [46], за побољшање биокompatбилности медицинских материјала (импланта) [47] као и за побољшање антибактеријских својстава површина [48].

Каналисање јона представља специфичан случај јонске имплантације са материјалом монокристалне структуре када се правац јонског снопа поклапа са неком од кристалографских оса канала кристала. У овом специфичном случају, при имплантацији постижу се веће дубине продирања јона и смањење промене уређености кристалне структуре [49]. Додатно, латерална расподела јона имплантираних при случајној оријентацији кристала увек је шири од расподеле јона имплантираних у моду каналисања при истој енергији [50]. Ефекат каналисања јона користи се и за испитивање квалитета кристалне решетке, односно одређивање степена уређења кристала [51, 52].

2.1.1. Интеракциони потенцијал

Јон-атомски потенцијал интеракције је сложена функција великог броја параметара. Апроксимација бинарних еластичних судара је добра претпоставка која поједностављује проблем. У том случају, језгро јона интерагује са језгром атома мете при чему су језгра заклоњена (екранирана) облацима електрона (слика 1). Такође, утицај релативне брзине јона и атома мете на интеракциони потенцијал се занемарује.



Слика 1. Интеракција имплантираног јона масе M_1 , атомског броја Z_1 и енергије E_0 са атомом мете масе M_2 и атомског броја Z_2 при ударном параметру судара b . Након интеракције јон поседује енергију E_1 док атом мете из мировања добија енергију E_2 .

Начин на који се потенцијална енергија при судару бинарних система атома мења са растојањем битан је за одређивање брзине којом јон губи енергију пролазећи кроз материјал, те стога и за разматрање последичне промене степена уређености [53]. Када је најближе растојање сударног пара (r) веће од равнотежног растојања атома кристалне решетке (r_0 , типично око 0,25 nm), при малим брзинама јона, долази до делимичног преклапања спољашњих орбитала и тежње ка формирању везе између атома. Када је најближе растојање сударног пара мање од вредности Боровог радијуса за атом водоника ($a_0 = 0,053$ nm), при великим брзинама јона, интеракција се може описати Кулоновим (С. А. de Coulomb) потенцијалом. Међутим, од највећег интереса за већину јон-материјал интеракција је режим средњих брзина јона када је најближе растојање сударног пара $a_0 < r < r_0$. Допринос потенцијалној енергији у овом режиму потиче од електростатичког одбијања позитивно наелектрисаних језгара и повећања енергије потребне за одржање електрона у околини атома, услед преклапања атомских орбитала, без нарушавања Паулијевог принципа искључења.

Јон-атом интеракције (потенцијал) у режиму $a_0 < r < r_0$ могу се изразити преко Томас–Фермијевог (L. Thomas, E. Fermi) статистичког модела атома као [54]:

$$U(r) = \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \varphi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2.1.)$$

где су Z_1 и Z_2 атомски бројеви јона и атома мете, респективно, e је елементарно наелектрисање, r је растојање између језгара и ϵ_0 диелектрична константа вакуума. Величина $\varphi(r/a)$ представља Томас–Фермијеву функцију екранирања где a означава карактеристичну дужину екранирања дату у облику:

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128Z_2} \right)^{1/3} \left(\frac{\hbar^2}{m_e e^2} \right) = 0,8853 a_0 Z_2^{-1/3} \quad (2.2.)$$

где је $\hbar = h/2\pi$, h је универзална Планкова константа а m_e маса електрона. Како дата функција екранирања у себи садржи податке везане само за атом мете редног броја Z_2 , при интеракцији између јона и атома погодније је користити дужину екранирања предложену од стране Линдхарда (J. Lindhard) [55]:

$$a = 0,8853 a_0 \left[Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right]^{-1/2} \quad (2.3.)$$

Томас–Фермијева функција екранирања апроксимира електронску густину атома и даје добро слагање са електронском густином добијеном прецизнијим квантно-механичким Хартри–Фоковим методом у областима малих растојања [55]. Аналитичко решење Томас–Фермијеве функције екранирања не постоји, већ се добија нумеричким решењем Томас–Фермијеве диференцијалне једначине. Аналитичку апроксимацију функције екранирања која се врло добро поклапа са резултатима добијеним Хартри–Фоковим методом за широк опсег јон-атомских растојања дао је Молијер (G. Moliere) [56]:

$$\varphi\left(\frac{r}{a}\right) = 0,1e^{-\frac{6r}{a}} + 0,35e^{-\frac{0,3r}{a}} + 0,55e^{-\frac{1,2r}{a}} \quad (2.4.)$$

Поред Молијерове функције екранирања често се користи и универзална апроксимација функције екранирања коју су предложили Зиглер, Биршак и Литмарк (J. Ziegler, J. Biersack, U. Littmark) [57]:

$$\varphi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^4 \gamma_i \exp\left(-\frac{\delta_i r}{a_u}\right) \quad (2.5.)$$

где су $[\gamma_1; \gamma_2; \gamma_3; \gamma_4] = [0,1818; 0,5099; 0,2082; 0,02817]$ и $[\delta_1; \delta_2; \delta_3; \delta_4] = [3,2; 0,9423; 0,4028; 0,2016]$ док је дужина екранирања представљена као:

$$a_u = a_0 \left(\frac{9\pi^2}{128Z_2} \right)^{1/3} (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})^{-1} \quad (2.6.)$$

2.1.2. Енергијски губици и заустављање имплантираних јона

Током проласка кроз мету јони губе енергију кроз низ еластичних (са атомским језгрима) и нееластичних судара (са електронима). Након серије узастопних судара јони бивају заустављени на одређеној дубини – домет јона (R). Домет је одређен брзином губитка енергије јона (dE/dx , зауставна моћ) и дат је формулом [53]:

$$R = \int_{E_0}^0 \frac{1}{dE/dx} dE \quad (2.7.)$$

где је E_0 почетна енергија јона. Зауставна моћ је губитак енергије по јединици дужине услед интеракција јона са атомима средине, и зависи од почетне енергије јона и атомских бројева јона и атома мете.

Енергијски губитак јона (зауставна моћ) је збир електронског ($(dE/dx)_e$) и нуклеарног ($(dE/dx)_n$) енергијског губитка:

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e \quad (2.8.)$$

Процес нуклеарног заустављања јона резултује преносом енергије на атом мете, због чега се може описати неким од модела јон-атомског потенцијала интеракције. У односу на нуклеарно, електронско заустављање јона знатно је сложенији процес. Ово је последица чињенице да се код електронског заустављања, поред судара са слободним (проводним) електронима, енергија јона губи и на побуђивање везаних електрона на више енергетске нивое [58]. Поред зауставне моћи, за описивање енергијских губитака користи се и зауставни попречни пресек (S) који се дефинише као зауставна моћ по јединици атомске густине (N).

При ниским енергијама доминирају нуклеарни губици, док при високим енергијама доминирају електронски губици. На слици 2 илустрован је релативни однос електронских и нуклеарних губитака. Ознака ε са слике односи се на нотацију редукованих енергија, при чему је вредност редуковане енергије дата као [59]:

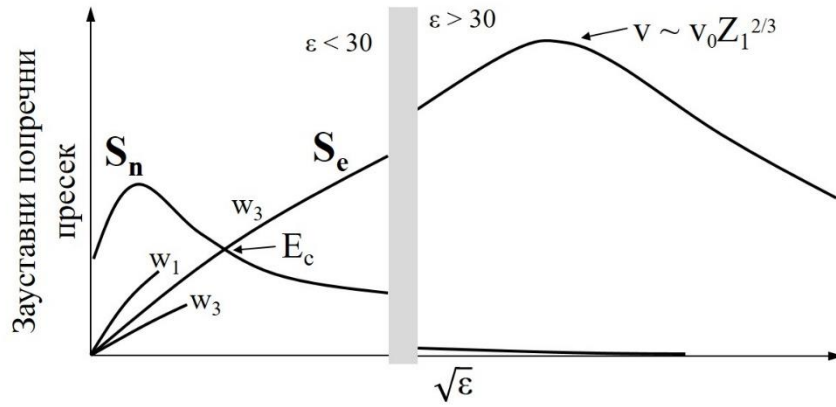
$$\varepsilon = \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} \right) \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (2.9.)$$

При нискоенергијском режиму ($\varepsilon < 30$) нуклеарни губици се са високом тачношћу могу описати једначином предложеном од стране Зиглера и сарадника, тзв. ZBL зауставни попречни пресек [31]:

$$S_n(\varepsilon) = \frac{0,5 \ln(1 + 1,1383\varepsilon)}{(\varepsilon + 0,01321\varepsilon^{0,21226} + 0,19593\varepsilon^{0,5})} \quad (2.10.)$$

док се при високим енергијама ($\varepsilon > 30$) може описати као:

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\ln(\varepsilon)}{2\varepsilon} \quad (2.11.)$$



Слика 2. Илустрација односа нуклеарног и електронског зауставног попречног пресека јона при различитим вредностима редуковане енергије јона.

Електронски губици доминирају изнад критичне енергије E_c (слика 2). У овом енергијском опсегу електронски зауставни попречни пресек достиже максимум, након чега опада са даљим повећањем енергије, тзв. Бете–Блохов регион (Н. Bethe, F. Bloch). Област енергија у којем зауставни попречни пресек расте са порастом енергије јона одговара вредностима брзине јона (v) које су мање од брзине кретања електрона код Боровог (N. Bohr) модела атома (v_0). У овом случају језгро јона није у потпуности огољено и тежи да се неутралише процесом захвата електрона из средине кроз коју пролази. У овој области зауставни попречни пресек је пропорционалан брзини јона, и према Линхард и Шарфовой (M. Scharff) теорији [60] у нотацији редуковане енергије за $v < v_0 Z_1^{2/3}$ случај се може описати једначином [31]:

$$S_e(\varepsilon) = w_i \varepsilon^{1/2} = \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} \left(1 + \frac{M_2}{M_1}\right)^{3/2}}{12,6 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/4} M_2^{1/2}} \varepsilon^{1/2} \quad (2.12.)$$

где је w_i фактор пропорционалности. За разлику од нуклеарног зауставног попречног пресека, где са једном кривом можемо представити све могуће пројектил-атом мета комбинације, електронски зауставни попречни пресек описује фамилију линија за сваку посебну комбинацију пројектила и атома мете (различит фактор w_i из једначине 2.12, слика 2). Ово важи само у случају коришћења нотације редуковане енергије. У практичном случају, криве и код нуклеарних губитаке зависе од избора пројектила и мете. При брзинама јона које су веће од $v_0 Z_1^{2/3}$ долази до потпуног огољења јона, те је његова интеракција са средином чисто кулоновска и може се описати Бетеовом формулом [61]:

$$S_e(v) = - \frac{4\pi Z_1^2 e^4 Z_2}{m_e v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{I} \quad (2.13.)$$

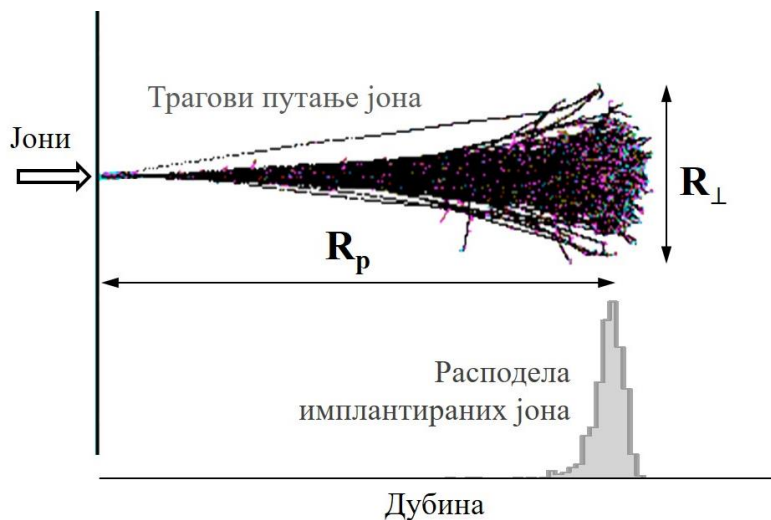
где је I просечна ексцитациона енергија електрона мете и грубо се апроксимира вредношћу $10Z_2$ (у јединицама eV) [31]. Како је $v^2 = 2E/M_1$ следи да су у овом региону електронски губици пропорционални $\ln(E)/E$ односно $\ln(\varepsilon)/\varepsilon$ (ε је велики број, па се $\ln(\varepsilon)/\varepsilon$ може апроксимирати са $1/\varepsilon$).

Претходна разматрања везана су за случај када је мета моноатомски материјал. Уколико се мета састоји од више, нпр. два атома X и Y са релативним моларним фракцијама i и j , респективно, (облика $X_i Y_j$) тада се за рачунање тоталног зауставног попречног пресека користи правило адитивности:

$$S_{X_i Y_j} = iS_X + jS_Y \quad (2.14.)$$

где су S_X и S_Y зауставни попречни пресеци елемената X и Y, респективно. Једначина представља Брагово правило (W. H. Bragg) које је базирано на претпоставци да је интеракција између јона и одређеног атома мете независна од његове околине [62]. Експериментално је потврђено благо одступање од овог правила услед чега је развијен САВ корекциони модел (енгл. *core and bonds model*) [63].

Губитак енергије при узастопним сударима јона са атомима и електронима подложен је статистичким флукуацијама. Услед тога јони са идентичном почетном енергијом неће изгубити тачно исту количину енергије ΔE прелазећи дистанцу Δx . Овај ефекат назива се размазивање енергије [64]. Последица ефекта размазивања енергије јесте размазивање домета јона, односно постојање расподеле концентрације јона по дубини. Стога, без обзира на могућности фокусирања јонског снопа, размазивање представља физичку унутрашњу границу просторне резолуције која може бити постигнута. За вредност домета јона најчешће се узима пројектовани домет јона (R_p) који представља средњи домет јона паралелан правцу његове путање (слика 3). Често се говори и о латералном домету јона (R_\perp) који се дефинише као отклон јона нормално на његов правац путање.



Слика 3. Илустрација расподеле домета и трагови путање имплантираних јона. Слика је креирана користећи резултате симулација јонске имплантације помоћу програмског пакета SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter).

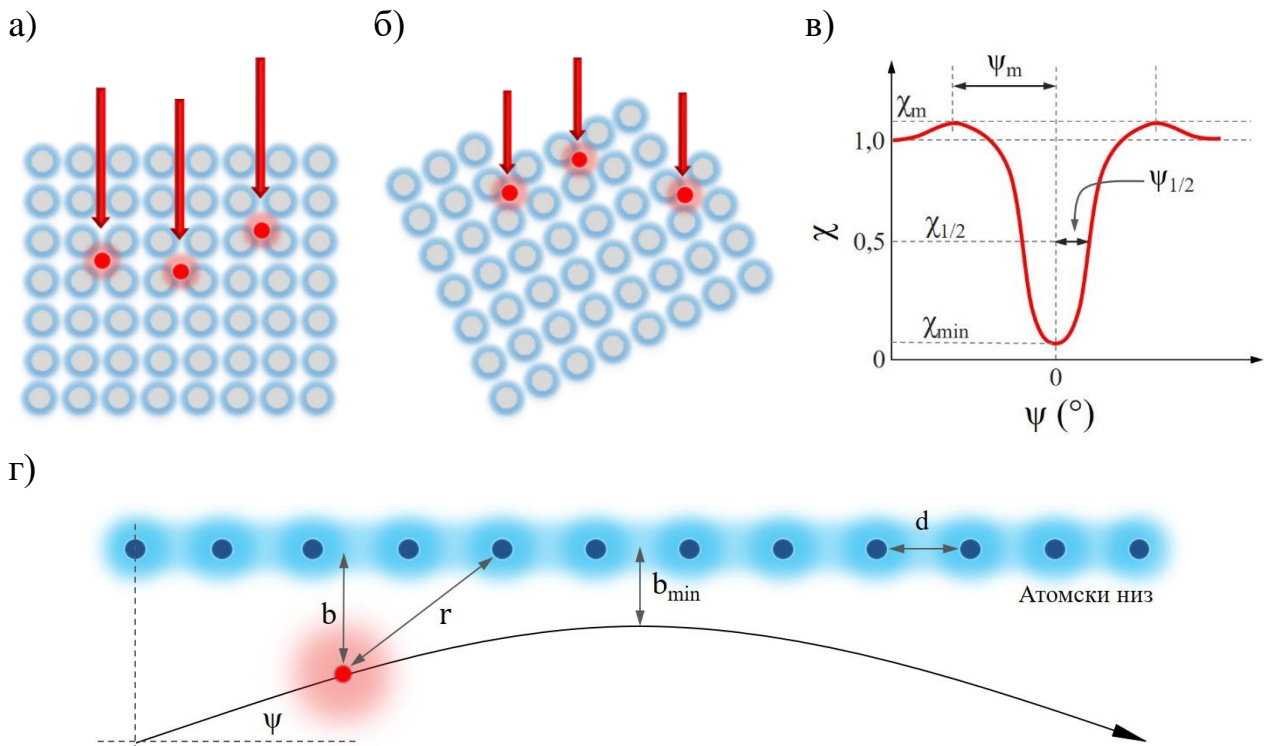
2.2. Каналисање јона

Прве претпоставке о каналисању јона изложене су 1912. године од стране Штарка (J. Stark). Штаркова идеја била је подстакнута Браговом претпоставком из 1910. године који је у почетку фон Лаеове (M. von Laue) дифрактограме интерпретирао као каналисање (нем. *canalisierung*) честица X зрака кроз канале кристалне решетке [65]. Штарк је претпоставио да се нешто слично може десити и при интеракцији протона са кристалом. На експерименталну потврду Штаркове претпоставке чекало се 50 година. Основе теорије каналисања формулисале су 1962. и 1963. године. Робинсон (M. T. Robinson) и Оен (O. S. Oen) спровели су рачунарске симулације успоравања атома бакра у различитим монокристалима [66]. Закључили су да је зависност домета атома од оријентације последица фокусирања јона у канале формиране релативно густо збијеним атомским редовима. Ова сазнања представљала су темељ на основу кога је у наредном периоду даље развијана теорија каналисања.

2.2.1. Ефекат каналисања јона

Сви процеси који су последица интеракције јона и атома мете имају попречне пресеке који зависе од ударног параметра датог судара – растојање јона од најближег атома мете (b). Уколико је мета хомогени и изотропни материјал, расподела ударног параметра биће независна од међусобне оријентације снопа јона и мете. Међутим, уколико је мета монокристал ситуација постаје сложенија [59]. У том случају, расподела ударних параметара, као и приноси физичких процеса који се дешавају при интеракцији, показују изразиту зависност од релативне оријентације упадног снопа и мете (анизотропних кристала). Када се правац путање јонског снопа поклапа са правцем неке од оса канала кристала, промене у приносу физичких процеса су најизраженије. Овај ефекат назива се каналисање јона.

На слици 4а и б илустрована је зависност релативне оријентације упадног снопа јона и мете монокристала. Ако се правац јонског снопа поклапа или је веома близак правцу осе канала кристала, јони ће се са умањеном вероватноћом повратно расејати само при малом углу пролазећи кроз први атомски слој кристала. Крећући се кроз канал кристала јони у том случају подлежу серији расејања на атомским низовима који формирају канал (слика 4г), при малим угловима. Услед тога долази до усмеравања јона дуж осе канала.



Слика 4. Зависност релативне оријентације упадног снопа и мете монокристала; а) случај каналисања када се правац упадног снопа поклапа са правцем кристалографске осе кристала; б) случајно оријентисани монокристал; в) зависност нормализованог приноса расејања јона у функцији угла између правца јонског снопа и осе канала; г) расејање јона на једнодимензионом атомском низу.

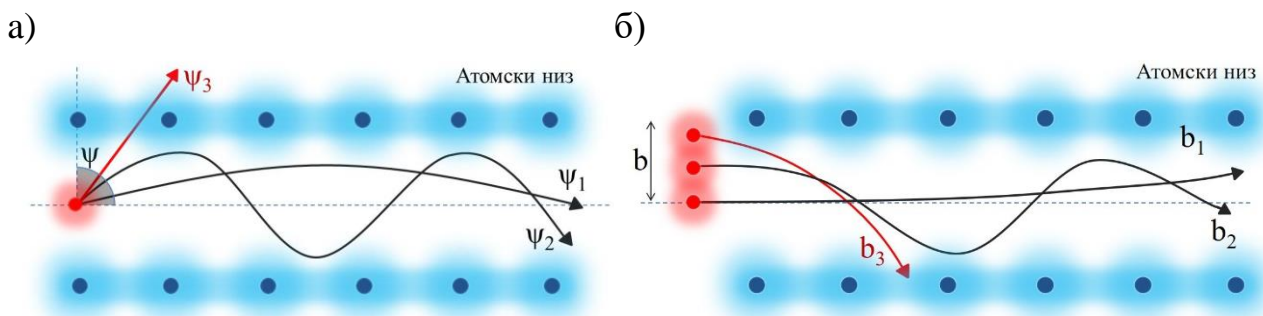
На слици 4в приказана је зависност нормализованог приноса χ повратно расејаних јона на атомима мете ($\chi = 1$ за случајно оријентисани кристал) од угла ψ између јонског снопа и осе канала, код аксијалног и планарног каналисања. Аксијално каналисање подразумева каналисање јона кроз канале образоване од атомских низова у правцу кристалографских оса кристала, док се планарно каналисање односи на каналисање јона у простору између кристалних равни. Опсег угла ψ приказан на слици креће се од неколико стотих делова степена до неколико степени. Када се правац снопа јона поклопи са правцем кристалографске осе

крисала ($\psi = 0$, случај са слике 4а) добијени принос је минималан, χ_{min} . Типична вредност за χ_{min} је 0,1 код планарног каналисања и 0,01 код аксијалног каналисања [54]. Отклањањем јонског снопа од правца кристалографске осе кристала, вредност χ расте и достиже максималну вредност χ_m која у неким случајевима може бити већа од један. Вредност χ_m у уској области углова је већа од јединице као последица геометријске конфигурације расејања. Наиме, упадни јони су тада подвргнути расејању под великим углом на атомима кристалне решетке у већој мери него при условима случајне оријентације. При још већим померајима χ се изједначава са јединицом – случајна оријентација (слика 4б). Вредности $\psi_{1/2}$ и $\chi_{1/2}$ означавају полуширину и полувисину профила зависности, респективно, док ψ_m означава угао при коме је $\chi = \chi_m$. Према Линхардовој теорији, јон ће бити каналисан само у случају када је угао који заклапа са симетријском осом канала мањи од критичног угла, ψ_c [59]:

$$\psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{Ed}} \quad (2.15.)$$

где је d растојање између атома у атомском низу, а E енергија јона. Када је угао већи од ψ_c , јон се приближава атомском низу у тој мери да више не може остати каналисан, услед чега га напушта. Ако је кристал довољно танак, јони могу бити трансмитовани кроз решетку и уместо мерења приноса повратно расејаних јона мери се расподела трансмитованог снопа. При оваквим мерењима добијају се звездасти шаблони које формирају трансмитовани каналисани јони, а чији облик зависи од типа кристалне решетке и кристалографске оријентације [67].

Како је већ објашњено, упадни јон ће бити каналисан ако у кристал улази под довољно малим углом у односу на атомске низове који формирају канал. Размотримо случај са слике 5а где су приказане путање јона при различитим улазним угловима са истим ударним параметром (оса канала). У случају малих углова, каналисани јон се ређе налази у близини атомских низова, од којих се такође одбија при малим угловима и враћа назад у канал. Са порастом упадног угла, јон се чешће приближава атомском низу од којег се одбија под већим угловима резултирајући осцилаторном путањом. У случају када је упадни угао већи од критичног (црвена линија) долази до процеса деканалисања јона – напуштање канала. Као последица, јони са малим упадним угловима прелазе дужи пут у каналу пре него што буду деканалисани. Процес каналисања јона аналоган је простирању електромагнетних таласа кроз оптички кабл.



Слика 5. Зависност путање јона у каналу кристала од а) упадног угла и б) ударног параметра јона.

На слици 5б илустрована је зависност путање каналисаног јона од његовог ударног параметра. За мање ударне параметре јона (ближи центру канала) путања је мање осцилаторна. Ови јони достижу веће дубине у кристалу пре него што буду деканалисани него јони са већим ударним параметрима. Разлог за ово лежи у чињеници да се ови јони ређе приближавају атомским низовима, па је стога нарушавање њихове путање умањено. Обрнуто важи за јоне са великим ударним параметром. У реалном случају јоне није могуће усмерити само на простор између атома у решетки. Стога ће један део снопа проћи између атомских низова док ће други

део проћи близу атома. Може се закључити да „добро“ каналисани јони у кристал улазе при малим угловима у односу на осу канала на позицијама које су блиске центру канала. За „лоше“ каналисане јоне важи супротно.

2.2.2. Енергијски губици и заустављање каналисаних јона

Код каналисаних јона зауставна моћ не зависи само од енергије јона и врсте материјала, већ и од кристалографске оријентације. Наиме, расподела ударних параметара зависи од релативне оријентације снопа јона и мете – „лоше“ каналисани јони ће врло брзо бити деканалисани, па због тога имати и мањи утицај на ефекат каналисања. Како каналисани јони не интерагују са језгром при ударном параметру мањем од амплитуде термалних вибрација атома мете, нуклеарни губици каналисаних јона су умањени. Такође, каналисани јони „виде“ умањену ефективну електронску густину унутар канала кристала резултирајући умањеним електронским губицима. Последица редукције укупне зауставне моћи при процесу каналисања је појава увећаних домета јона у односу на случајно оријентисани кристал.

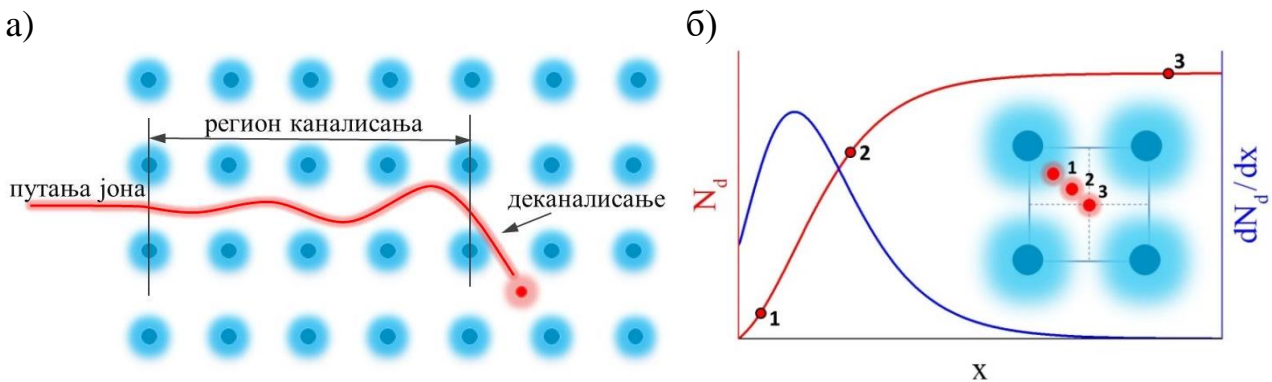
Однос зауставне моћи при каналисању и случајној оријентацији при истој енергији јона зависи од трансверзалне компоненте енергије каналисаног јона (E_{\perp}) и дат је фактором [54]:

$$\alpha(E_{\perp}) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{ch} / \left(\frac{dE}{dx}\right)_{rand} \quad (2.16.)$$

где ch означава каналисање, а $rand$ случајну оријентацију. За каналисане јоне $\alpha(E_{\perp})$ је мањи од 1, док је за јоне који поседују знатну трансверзалну компоненту кинетичке енергије (када је угао већи од критичног) $\alpha(E_{\perp})$ једнако 1 – случајно оријентисани кристал.

2.2.3. Процес деканалисања јона

Интеракција каналисаних јона са електронима кристалне решетке доводи до увећања њихове трансверзалне компоненте кинетичке енергије, иако укупна енергија јона опада. Ово доводи до постепеног увећања угла који јон заклапа са осом канала. Кад овај угао постане већи од критичног угла за каналисање јон се сматра деканалисаним, те се овај процес назива деканалисање јона (слика 6а). Додатно, напуштање канала услед интеракције са нечистоћама или језгрима атома кристала у даљем тексту биће третирано као расејање.



Слика 6. а) Илустрација процеса каналисања и путања каналисаног јона. б) Расподела броја деканалисаних јона N_d (црвена крива) и промена броја деканалисаних јона dN_d/dx (плава крива) по дубини канала кристала x . Позицијама уласка јона 1, 2 и 3 у канал кристала одговарају тачке 1, 2 и 3 у расподели броја деканалисаних јона по дубини.

Теоријска разматрања механизма деканалисања базирана на аналитичком опису каналисања јона у кристалима предложена су од стране Линхарда [59]. У свом приступу Линхард се користио формализмом статистичке механике укључујући апроксимацију континуалног интеракционог потенцијала. Према Линхардовој аналитичкој апроксимацији,

процес деканалисања јона представља експоненцијалну функцију дубине канала кристала. Истраживања која су уследила показала су одступања експерименталних података од Линхардовога приступа [68, 69]. Сигмоидална функција деканалисања Гомперц (В. Gompertz) типа предложена је од стране Кокориса (М. Kokkoris) и сарадника [70]:

$$N_d = N_0 \frac{e^{-\exp(-k(x-x_c))} - e^{-\exp(kx_c)}}{1 - e^{-\exp(kx_c)}} \quad (2.17.)$$

где је N_d број деканалисаних јона, N_0 почетни број јона, x дубина кристала, k брзина деканалисања и x_c домет деканалисања. Кокорис и сарадници су показали да ова функција прецизно описује деканалисање протона дуж (110) осе кристала силицијума. Параметри функције x_c и k , представљају превојну тачку и нагиб у превојној тачки функције деканалисања, респективно. На слици 6б приказана је промена броја деканалисаних јона N_d по дубини канала кристала у функцији од дубине канала кристала. Максимум ове асиметричне зависности одговара вредности x_c . Брзина деканалисања по јединици дубине канала кристала може се изразити као:

$$-\frac{1}{N_c} \frac{dN_c}{dx} = \frac{ke^{-k(x-x_c)}}{e^{\exp(-k(x-x_c))} - 1} \quad (2.18.)$$

где је $N_c = N_0 - N_d$ број каналисаних јона. Ова функција је позитивно растућа са хоризонталном асимптотом која је једнака параметру k . Параметар k заправо представља карактеристичну брзину деканалисања која одговара јонима на дубини деканалисања (x_c) и који су се у почетку налазили у близини центра канала. Расподела броја деканалисаних јона као и вероватноћа деканалисања по јединици дубине кристала могу се објаснити помоћу ударних параметара. Јони при малим почетним ударним параметрима се деканалишу много брже од оних са великим ударним параметрима. Стога, при малим почетним ударним параметром јони заузимају почетни део, док јони који су се налазили близу осе канала заузимају крајње делове расподеле деканалисаних јона (слика 6б). Слично разматрање важи и за зависност од упадног угла. При малим упадним угловима јони ће заузимати крајњи део расподеле, док ће јони са већим упадним угловима доприносити почетном делу расподеле.

Петровић и сарадници су теоретски истраживали применљивост функције деканалисања Гомперц типа на процесу каналисања протона енергија 1–10 MeV у кристалним каналима (100), (110) и (111) силицијума [71]. Поред потврде о применљивости Гомперцове функције деканалисања, показано је да је параметар x_c линерана, а k сума експоненцијалних функција почетне енергије јонског снопа, и могу се приказати у облику:

$$x_c(E_0) = i E_0 + j \quad (2.19.)$$

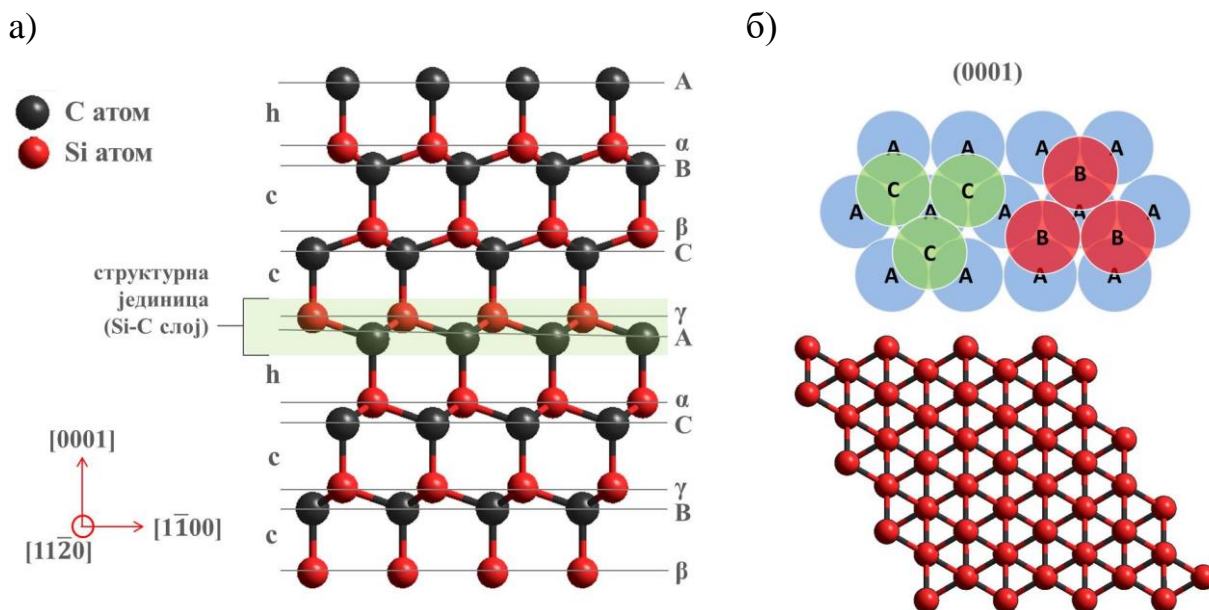
$$k(E_0) = q_1 \exp\left(-\frac{E_0}{p_1}\right) + q_2 \exp\left(-\frac{E_0}{p_2}\right) \quad (2.20.)$$

где су i, j, q_1, q_2, p_1, p_2 параметри који зависе од геометрије испитиваног канала силицијума.

2.3. Силицијум карбид

Силицијум карбид (SiC) представља полупроводнички материјал који спада у категорију неоксидних керамичких материјала. SiC је открио Берцелијус (J. J. Berzelius) 1824. године када је током својих експеримената претпоставио да се у једном од синтетисаних узорка налази једињење које у себи садржи хемијске везе између силицијума и угљеника [72]. SiC је први пут пронађен у природи 1905. године од стране Моисана (H. Moissan) [73] по коме је минерал добио име – моисанит. SiC високог квалитета који се може употребити у полупроводничке сврхе први пут је синтетисан 1955. године [74].

Основни период кристалне решетке SiC чини слој густо пакованих, sp^3 повезаних атома силицијума и угљеника. Атоми су распоређени тако да је сваки атом силицијума окружен тетраедрално са атомима угљеника и обрнуто. Услед могућности различитог начина паковања SiC слојева дуж правца нормалног на слој, јавља се специјални једнодимензионални полиморфизам који се најчешће назива политипизам. До данас је пронађено више од 200 различитих политипова [75]. Различити политипови једног материјала поседују широк спектар различитих физикохемијских карактеристика. То је један од разлога зашто је SiC од суштинског интереса за научнике. Политипови се могу поделити на кубичне (C), ромбичне (R) и хексагоналне (H). Постоји само један кубични политип, β -SiC или $3C$ -SiC, са дијамантском кристалном решетком. Ознака $3C$ у називу политипа говори да је јединична ћелија сачињена слагањем 3 слоја SiC пакована тако да формирају кубичну кристалну решетку (C). Слична номенклатура примењује се и код осталих политипова. Сви не-кубични политипови познати су под називом α -SiC. Поседују сложене структуре настале комбиновањем SiC слојева који се међусобно налазе у кубичним (c) и хексагоналним (h) конфигурацијама. Један од најзаступљенијих α -SiC политипова јесте $6H$ -SiC чија је структура приказана на слици 7. Кристал $6H$ -SiC се добија понављањем секвенце $A\alpha B\beta C\gamma A\alpha C\gamma B\beta$ (јединична ћелија) дуж $[0001]$ правца кристала, где римска слова означавају позиције C атома док грчка слова означавају позиције Si атома [76]. Како су у сваком SiC слоју позиције атома C фиксиране у односу на позиције Si, структурна секвенца се обично означава скраћено са ABCACB. Додатно, у односу на међусобну конфигурацију слојева, понављајућа секвенца $6H$ -SiC се може означавати и као hсhсс.



Слика 7. Структура $6H$ -SiC: а) слагање атомских слојева и нееквивалентна места решетке (h – хексагонално и k – кубично место у решетки) гледано из правца $[11\bar{2}0]$, б) кристална решетка $6H$ -SiC приказана у равни (0001).

SiC је веома редак у природи али се у малим количинама може пронаћи у облику руде моисанита и остацима одређених типова метеора, због чега се углавном синтетише [77]. Традиционално се производи путем Ејчесеновог (E.G. Acheson) поступка који подразумева реакцију између кварца (SiO_2) и кокса (C) на врло високим температурама (вишим од $2500\text{ }^\circ\text{C}$). Поликристални SiC добијен Ејчесеновим процесом јавља се у виду различитих политипова и разликује се у чистоћи. Раст већих монокристала високе чистоће одређеног политипа кључан је за употребу у полупроводничкој индустрији. Стандардна техника која се тренутно користи за раст великих кристала SiC је сублимација [78].

2.3.1. Карактеристике и примена 6H-SiC

Силицијум карбид је један од најстаријих и најпознатијих полупроводничких материјала. Упркос тој чињеници, његове јединствене карактеристике чине га и данас атрактивним за истраживање. Поседује изузетна физичкохемијска својства, међу којима су висока чврстоћа, мала специфична тежина, висока тачка топљења, хемијска инертност, низак коефицијент термалног ширења и висока топлотна проводност. У табели 1 дат је преглед неких физичкохемијских својстава 6H-SiC заједно са својствима силицијума и дијаманта, ради поређења (где је примењиво, вредности су приказане на собној температури). Захваљујући изузетним својствима, 6H-SiC је препознат као материјал са могућношћу широке примене у коју спада производња високофреквентних високотемпературских електронских уређаја великих снага (енгл. *power devices* – PD) [1], производња абразива [79], примена у окружењима са екстремним условима попут оних у нуклеарним реакторима [38] и у свемиру [4].

Табела 1. Преглед одабраних физичких својстава силицијума, силицијум карбида и дијаманта.

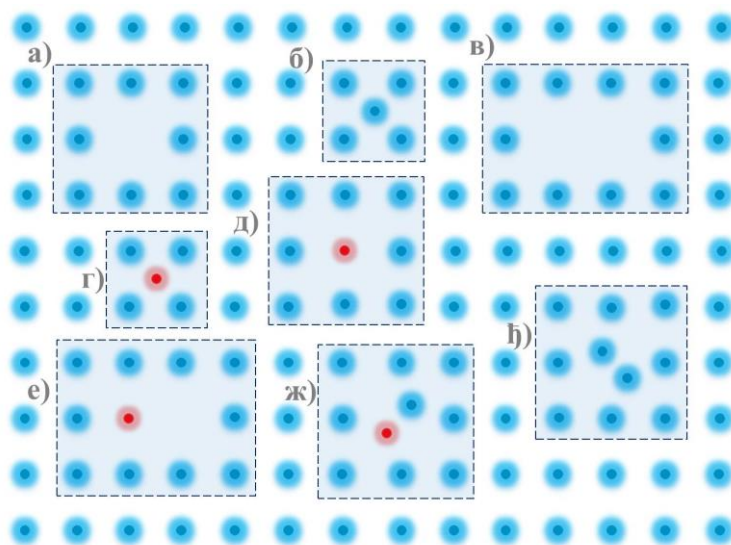
Карактеристике	Si	6H-SiC	C (дијамант)	Референце
Константа решетке [Å]	5,43	$a = 3,0805;$ $c = 15,1151$	3,56	[80, 81]
Густина [$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$]	2,33	3,21	3,5	[80, 82]
Јангов модул [GPa]	127	350–650	1220	[80, 83, 84]
Тачка топљења [°C]	1410	2800	4500	[85-87]
Топлотна проводност [$\text{W}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]	1,5	4,9	22	[88]
Коеф. термалног ширења [K^{-1}]	$2,6\times 10^{-6}$	$3,0\times 10^{-6}$	$1,1\times 10^{-6}$	[83, 89, 90]
Ширина забрањене зоне [eV]	1,12	3,03	5,45	[88]
Релативна диелектрична константа	11,8	9,7	5,5	[88]
Напон пробоја [$\text{MV}\cdot\text{cm}^{-1}$]	0,3	2,5	10,0	[88]
Сатурациона брзина електрона [$\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$]	1×10^7	2×10^7	$2,7\times 10^7$	[88]
Максимална радна температура [°C]	150	760	1100	[88]

У данашњој полупроводничкој индустрији силицијум има доминантну улогу. Међутим, за производњу електронских компоненти намењених за радни режим при високим напонима или великим струјама, силицијум није погодан услед низа ограничавајућих карактеристика. Ту спадају низак напон пробоја и ниска максимална радна температура, релативно мала ширина забрањене зоне и ниске дозвољене концентрације допаната у режиму рада високих снага (power devices - PD). Све ово има за последицу да силицијумске електронске компоненте у режиму рада високих снага поседују незанемарљиву струју цурења (нежељена струја у стању када компонента не проводи). Услед тога долази до значајних енергетских губитака који се манифестују кроз дисипацију топлоте. Ради побољшања ефикасности PD компоненти, предложено је неколико алтернативних материјала попут дијаманта, GaN и SiC [6]. Од ових материјала SiC се показао као најпогоднији јер је знатно јефтинији од дијаманта, а истовремено подржава веће радне снаге у односу на компоненте базиране на GaN. SiC има забрањену зону готово три пута ширу од силицијума и самим тим подржава веома високе напоне. Ово за последицу има могућност смањења димензија компонената и до десет пута. SiC подржава за два реда величине већу концентрацију допаната у односу на силицијум. Како се процесом допирања полупроводника модулишу његова електрична својства, SiC омогућава већи степен слободе у процесу пројектовања и израде полупроводничких компонената. На собној температури, топлотна проводљивост SiC-а је изузетно висока, већа чак и од бакра [80]. Такође, максимална радна температура SiC компоненти је знатно већа у односу на силицијумске компоненте.

У циљу повећања ефикасности рада нуклеарних реактора потребни су нови материјали који ће омогућити рад на вишим температурама и при томе поседовати високу радијациону отпорност. Услед повишене радијационе отпорности, одличне топлотне проводљивости и ниског ефикасног пресека за захват неутрона отварају се могућности широке примене SiC-a у савременој нуклеарној индустрији. SiC се интензивно испитује као материјал како за фузионе тако и за фиционе нуклеарне реакторе [2]. Слично, за научно истраживање планетарних тела и свемира генерално, захтеви су слични као и за материјале који улазе у састав нуклеарних реактора. Истраживање Кима (Н. К. Kim) и сарадника показује да би нано-транзистори произведени на плочицама од силицијум-карбида могли да обезбеде електронику отпорну на зрачење за примену у будућим свемирским летелицама [91]. Додатни захтев може бити тежина материјала. Употребом SiC инструмената могуће је редуковати цену, смањити тежину и самим тим добити компактније уређаје који могу наћи примену и у мањим истраживачким пробама [4].

2.4. Аморфизација као последица јонске имплантације

Током процеса јонске имплантације, било циљано или као нуспроизвод процеса допирања (у случају полупроводника) долази до настанка дефеката унутар мете [8, 92, 93, 95, 96]. Наиме, имплантирани јони се крећу кроз кристалну решетку и губе енергију у низу судара са атомима мете. Трансфер кинетичке енергије са јона на језгра мете одвија се путем еластичних судара доводећи до серије атомских помераја и настанка различитих дефеката. Остатак енергије јона предаје се путем нееластичних судара са електронима мете након чега долази до стварања каскаде електрон-електрон трансфера енергије. Највећи део енергије електрони мете предају кристалној решетки електрон-фононским купловањем [97].



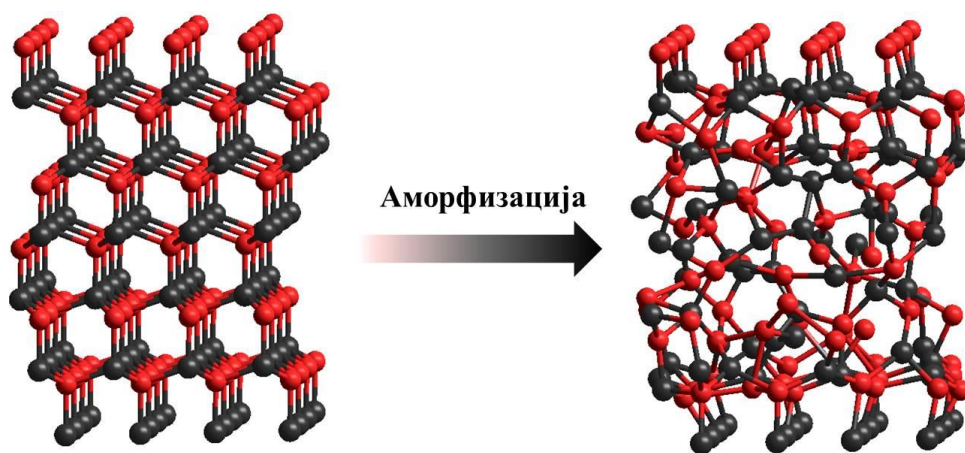
Слика 8. Различити типови дефеката настали као последица процеса имплантације јона:
а) ваканција, б) интерстиција, в) диваканција, г) интерстиција-нечистоћа, д) супституција-нечистоћа, е) интерстицијалност, е) нечистоћа-ваканција пар, ж) интерстицијалност-нечистоћа.

На слици 8 приказан је шематски приказ различитих типова дефеката који могу настати приликом процеса имплантације. Размотримо случај имплантације јона атомског броја Z_1 и енергије E у моноатомску мету изграђену од атома атомског броја Z_2 . Настајање различитих дефеката може се објаснити Кинчин-Писовим (Kinchin-Pease) моделом [98]. При судару јона са атомом мете могуће је неколико исхода што зависи од количине енергије јона предате сударном пару. Уколико су након судара енергије јона (E_1) и атома (E_2) веће од енергије потребне за измештање атома из свог места у кристалној решетки (енгл. *atomic displacement*

$energy, E_{disp}$) доћи ће до настанка дефеката типа ваканције. Енергија E_{disp} је већа од везивне енергије решетке (минимум енергије потребне за уклањање атома из места у решетки) јер подразумева померање измештеног атома довољно далеко од ваканције како не би дошло до реверзног процеса. Јон и избијени атом наставиће кретање и ући ће у интеракцију са новим атомима мете. Уколико је пак $E_2 < E_{disp}$, енергија E_2 биће ослобођена у виду фонона и неће доћи до стварања ваканције. Међутим, уколико је $E_2 > E_{disp}$ и $E_1 < E_{disp}$, јон ће избити атом Z_2 и остати заробљен на његовом месту у решетки (супституција). Енергија јона E_1 биће ослобођена у виду фонона. У специјалном случају када је $Z_1 = Z_2$, овај судар се назива судар замене (енгл. *replacement collision*). Последњи случај, када је $E_2 < E_{disp}$ и $E_1 < E_{disp}$, односи се на стварања интерстицијалних дефеката. Често се у процесу имплантације користе јони који се разликују од конституената кристала, па се за интерстиције и супституције додаје термин нечистоћа (енгл. *impurity*). При процесу допирања нечистоће се називају и допанти.

Поред наведених типова дефеката који се називају и тачкасти дефекти долази до формирања сложенијих конфигурација као што су диваканције, нечистоћа-ваканција пар и нечистоћа-интерстиција пар (слика 8). Уколико се два атома нађу у несупституционим местима конфигуришући око атомске позиције у решетки, такав тип дефекта назива се интерстицијалност (енгл. *interstitialcy*) [99].

Процес трансформације кристалне решетке из стања веће у стање мање уређености назива се аморфизација. Постепеном акумулацијом дефеката током процеса имплантације јона долази до настанка аморфних зона које се затим преклапају и прелазе у аморфни слој. Аморфне структуре се разликују од кристалних по томе што немају уређење дугог домета ни периодичност (слика 9). Аморфни слој се може описати као континуална мрежа насумично распоређених атома. Како свака промена структуре узрокује промену у физичкохемијским својствима, важно је разумети одзив материјала на процес интеракције са јонима.



Слика 9. Илустрација структуре а) кристалног и б) аморфног слоја 6H-SiC.

Присуство аморфне фазе у кристалима доводи до промене њихових својстава попут: топлотне проводности [100], апсорптивности светлости [101], чврстоће [102], електричних својстава [32] и индекса преламања светлости [33]. Аморфизација може бити пожељна (намерно индукована) или непожељна. У полупроводничкој индустрији, увођењем аморфних слојева постиже се боље конфинирање носилаца наелектрисања ближе површини полупроводника, што омогућава увећање брзине интегрисаних кола, док смањење димензија побољшава њихову минијатуризацију [32, 103, 104]. Међутим, у већем броју случајева пожељно је избећи аморфизацију полупроводника, и то најчешће при процесу њиховог допирања [8]. Аморфни слојеви се у полупроводницима могу створити на више начина као што су: метода притиском индуковане аморфизације [105], депозиција материјала [106], метода брзог хлађења (енгл. *quenching*) [107], итд.

За изражавање степена аморфизације структуре често се користи број помераја по атому (енгл. *displacements per atom* – dpa), јединица изложености материјала јонском зрачењу. Вредност dpa је дефинисана као просечан број помераја по атому у мети (средњи број помераја атома са свог места у решетки) који настаје датим флуенсом зрачења. Израчунавање dpa по дубини узорка је сложен проблем који се углавном решава применом Монте Карло софтвера за моделовање [108].

2.4.1. Аморфизација 6H-SiC

Бројни експерименти и теоријски прорачуни осмишљени су у циљу бољег разумевања механизма интеракције јона са материјалима који доводи до прелаза кристалне у аморфну фазу. Џентилс (A. Gentils) и сарадници испитивали су утицај енергије јона на аморфизацију изазвану имплантацијом јона злата енергија 4 MeV и 20 MeV у 6H-SiC [109]. На основу резултата закључено је да јони виших енергија производе мању количину дефеката у површинском региону (до око 1 μm) за исти имплантирани флуенс, што је последица различитих нуклеарних и електронских доприноса енергијском губитку јона. Наиме, нуклеарни енергијски губици доминирају при ниским енергијама јона (заустановном делу путање), док електронски губици доминирају при вишим енергијама. Последице, аморфизација кристала проузрокована процесом имплантације јона је најизраженија у заустановном делу путање јона, када нуклеарни губици енергије долазе до изражаја. Сходно томе, јони енергије 4 MeV продиру плиће (јонски домет око 0,5 μm) и губе своју енергију кроз нуклеарне сударе раније него јони енергије 20 MeV (јонски домет око 3 μm). Слично је запажено у студији имплантације 6H-SiC кристала јонима волфрама енергије 36 MeV и јонима јода енергије 900 keV [110]. При интеракцији јона јода са SiC кристалом долази до аморфизације површинског слоја, док у случају имплантације јона волфрама површински слој остаје непромењен, док се аморфизација јавља на кристалним дубинама које одговарају домету јона ($\sim 4 \mu\text{m}$), када нуклеарни енергијски губици постану већи од електронских.

Количина аморфизације индукована имплантацијом јона зависи од дозе односно флуенса имплантираних јона. Чабен (N. Chaabane) и сарадници су имплантирали јоне угљеника енергије 4 MeV у 6H-SiC при флуенсима 1×10^{15} и 1×10^{16} јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ при случајној оријентацији кристала [94]. Након имплантације нижим флуенсом, модификовани слој се састојао од зоне са мањим степеном аморфизације који се протеже од површине узорка до дубине од 1,5 μm , након чега следи зона са вишим нивоом аморфизације (до 3 μm дубине). Аморфизација кристалне решетке приписана је кластерима дефеката мањих димензија, чија се концентрација мења са дубином корелисано са дубинском расподелом нуклеарних енергијских губитака. При већем флуенсу од 1×10^{16} јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ дошло је до стварања аморфног слоја у близини пројектованог домета јона. Наиме, повећањем флуенса јона долази до постепеног пораста степена аморфизације, резултирајући потпуно аморфизованим материјалом. Показано је да акумулација дефеката са порастом флуенса има сигмоидалну зависност [109]. Флуенс након кога долази до потпуне аморфизације узорка назива се критичним флуенсом. До сличних закључака дошли су Ли (J. Li) и сарадници испитујући процес аморфизације и тестирајући тврдоћу 6H-SiC кристала имплантираног јонима ксенона енергије 7 MeV у широком опсегу флуенаса ($7,4 \times 10^{12}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ до $2,5 \times 10^{15}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$) [111]. При ниским флуенсима (до $2,5 \times 10^{13}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$) у оквиру кристалне структуре примећени су тачкасти дефекти и њихови кластери, док аморфна фаза није запажена. У датом опсегу флуенаса, са повећањем флуенса долази до пораста тврдоће материјала услед присуства мале количине тачкастих дефеката (ефекат очвршћавања). У наредном опсегу флуенаса, закључно са флуенсом од $7,4 \times 10^{13}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$, на сликама трансмисионе електронске микроскопије (ТЕМ) запажена је појава аморфних острва. У овом опсегу имплантираних флуенаса тврдоћа се не мења. Тврдоћа је константна јер се у овом тренутку постиже равнотежа између ефекта очвршћавања и раскидања ковалентних веза. У трећем опсегу имплантираних флуенаса, са даљим повећањем флуенса долази до раста аморфних острва, и при вредности критичног

флуенса од $2,5 \times 10^{15}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$, прелази у континуални аморфни слој. У овој области са порастом флуенса тврдоћа материјала се смањује услед доминантног разарања хемијских веза.

Избор јона као и степен његовог наелектрисања такође могу утицати на процес аморфизације. Чен (X. Chen) и сарадници су симулирали утицај неутронског зрачења на структуру 6H-SiC имплантирајући јоне угљеника и силицијума енергије 3 MeV [38]. На основу раманских спектра снимљених на узорцима имплантираним флуенсима у опсегу од $1,5 \times 10^{14}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ до 8×10^{15} јона $\cdot \text{cm}^{-2}$, закључено је да тежи јони (силицијум) доводе до већег степена аморфизације кристалне решетке од лакших јона (угљеник). Такође, лакши јони истих енергија и при истим вредностима дра стварају веће напрезање кристалне решетке у односу на теже јоне, што је последица већих дубина продирања и различитог типа и количине унетих дефеката. Специфично понашање примећено је код инертних гасова. Инертни гасови лако дифундују у суседне ваканције и формирају мехурове гаса [112]. Жанг (L. Zhang) и сарадници испитивали су утицај степена наелектрисања јона имплантирајући јоне ксенона Xe^{18+} и Xe^{26+} енергије 600 keV у 6H-SiC [113]. Приметили су да у случају јона већег степена наелектрисања долази до већег степена аморфизације узорка. Овај ефекат се објашњава вишом зауставном моћи коју јони већег степена наелектрисања поседују, те самим тим и интензивнијим преносом енергије на кристалну решетку.

Поред основних параметара јона, услови при којима се изводи имплантација, попут температуре, утичу на структуру материјала. Миранда (P. Miranda) и сарадници су имплантирали јоне гвожђа енергије 150 keV у 6H-SiC с циљем добијања магнетног полупроводника [34]. Утврђено је да је могуће избећи аморфизацију 6H-SiC имплантацијом изнад критичне температуре која износи 250 °C, када велики део јона гвожђа бива инкорпориран на регуларним местима кристалне решетке (са веома малим одступањем). Такође, излагањем аморфизованих узорака повишеним температурама могуће је постићи рекристализацију која изазива редистрибуцију јона гвожђа. Мохлала (T. M. Mohlala) и сарадници испитивали су процес имплантације јона еуропијума енергије 360 keV у 6H-SiC при повишеној температури [114]. Утврђено је да при имплантацији на температури од 600 °C (изнад критичне) не долази до аморфизације 6H-SiC-а, који очувава кристалну структуру са малим уделом дефеката.

Ванг (X. Wang) и сарадници су испитивали утицај дуалне имплантације 6H-SiC јонима силицијума енергије 18 MeV и јонима хелијума енергије 2,2 MeV [115]. Испитани су случајеви редне и упоредне дуалне имплантације. Показано је да редна имплантација даје виши ниво аморфизације кристалне структуре него упоредна. Предложено је могуће објашњење да приликом упоредне имплантације јони хелијума попуњавају новонастале ваканције кристалне решетке и спречавају њихову покретљивост (стабилизују ваканције). Стога, јавља се другачији реаранжман атома. Међутим, ово правило не важи за све материјале. Томе (L. Thomé) и сарадници су спровodeћи редну и упоредну дуалну имплантацију различитих материјала јонима јода енергије 900 keV и јонима волфрама енергије 36 MeV, приметили различито понашање површинског региона код различитих материјала [116]. Код редне имплантације прво су имплантирани јони јода, а након тога јони волфрама. Резултати су показали да при упоредној имплантацији, 6H-SiC показује знатно нижи степен аморфизације него при редној. Посебно велика разлика примећена је код MgO. Супротно, ZrO₂ није показао значајну разлику. Разлог за смањење степена аморфизације у случају упоредне имплантације може се потражити у комбинационом ефекту нуклеарних и електронских губитака. Услед велике разлике енергија јона, у површинском делу узорака при успоравању јона јода доминираће нуклеарни губици енергије, док ће код јона волфрама преовлађивати електронски губици. Стога, код 6H-SiC електронски губици јона волфрама током упоредне имплантације могу имати снажан утицај на умањење количине дефеката насталих као последица нуклеарних губитака јона јода. Електронски губици преко електрон-фонон купловања могу довести до рекристализације

путем рекомбинације локалних дефеката, односно побољшане покретљивости дефеката и атома.

Оријентација јонског снопа у односу на кристал такође утиче на степен његове аморфизације. Имплантацијом јона у канале кристала остварује се већа дубина продирања јона услед смањења ефективне густине електронског гаса коју јон „види“, те и смањење енергијског губитка јона [49]. Такође, у случају каналисања јона умањују се степен промене уређености кристалне решетке услед усмерених јонских путања. Морван (E. Morvan) и сарадници су упоређивали количину дефеката унету током имплантације јона алуминијума енергије 1,5 MeV у кристал 6H-SiC [117]. При флуенсу јона од 5×10^{14} јона \cdot cm⁻², имплантација јона у моду каналисања дала је мање аморфизоване кристалне структуре од имплантације при случајној оријентацији кристала за фактор 2,5 пута. До сличних закључака дошли су Жук (J. Žuk) и сарадници када су у својој студији имплантирали јоне алуминијума енергије 450 keV при случајној оријентацији кристала 6H-SiC и у моду каналисања [118]. Након имплантације испитане су структурне промене и извршено је њихово поређење. Резултати су показали да су јони алуминијума имплантирани у моду каналисања продирали дубље и потврђено је умањење промене уређености кристалне структуре у случају каналисања.

За добијање дубинских профила аморфизације материјала често је коришћена раманска спектроскопија. Микро-раманску (μ R) анализу 6H-SiC кристала имплантираног јонима злата енергије 20 MeV спровели су Линец (F. Linez) и сарадници [119]. Имплантацијом јона злата у 6H-SiC симулирана су радијациона оштећења материјала услед утицаја фисионих продуката у циљу нуклеарних примена 6H-SiC-а. μ R мапирањем попречног пресека кристала са веома малим кораком од 0,1 μ m, те праћењем еволуције интензитета спектра на таласном броју 829 cm⁻¹ као и интегалног интензитета у 190–1900 cm⁻¹ области спектра, примећено је постојање неколико различитих зона са различитим степеном аморфизације у имплантираној области. Прва зона, посматрано од површине узорка, простире се до дубине 1,4 μ m и показује низак степен аморфизације кристала који се објашњава прекидом трансляционе симетрије и појавом локалне аморфизације. Друга зона се простире до 2,6 μ m и представља област наглашеног пораста аморфне компоненте 6H-SiC-а. Трећа зона одликује се највећим нарушавањем кристалне решетке са максимумом на дубини од 3,4 μ m, и простире се до 5 μ m, након чега је узорак непромењени монокристал. Убрзо након овог експеримента Ванг и сарадници су имплантирали јоне угљеника енергије 20 MeV у кристал 6H-SiC и спровели μ R спектроскопско мапирање попречног пресека кристала са кораком од 0,5 μ m пратећи промену интензитета, полуширине и позиције траке на 787 cm⁻¹ [120]. Као и у претходном експерименту Линеца и сарадника, јони су имплантирани при случајној оријентацији кристала. Међутим, у експерименту Ванга и сарадника идентификовано је постојање само две модификоване зоне са карактеристикама сличним другој и трећој зони које су приметили Линец и сарадници. Одсуство прве зоне објашњено је чињеницом да Линец и сарадници нису узели у обзир да се интензитет раманског спектра на површини узорка мења како све већи део ласерског снопа стиже на узорак. У наведеним случајевима за добијање профила аморфизације коришћена је директна еволуција интензитета или полуширина раманских трака ради добијања профила аморфизације, без фитовања спектра и дубље анализе раманских трака првог и другог реда.

Анализом узорка 6H-SiC спектрометрије еластичног повратног расејања у моду каналисања (EBS/C) испитивани су профили дефеката по дубини у површинској области узорка користећи јоне хелијума (до дубине од око 1,5 μ m, сходно коришћеном домету јона) [94, 109, 110]. Дубински профили дефеката добијени су фитовањем искључиво експерименталних EBS/C спектра помоћу програма на бази Монте Карло симулација. Резултати су показали релативно добра слагања са другим техникама карактеризације. Међутим, дате анализе обухватају само блископовршински регион материјала. Неретко, површински регион материјала се анализира користећи итеративни поступак анализе EBS/C

спектра у коме се апроксимира занемарена разлика у енергијским губицима између EBS/C и EBS [92]. Код итеративног поступка, профил аморфизације одређује се раздвајањем аморфне од деканалисане фазе EBS/C спектра.

Главни недостатак употребе EBS/C спектра за добијање дубинских профила акумулираних дефеката јесте непостојање поузданог рачунарског програма за њихово фитовање. Разлог за то може се потражити у непрецизном одређивању зауставне моћи јона као и непознавање тачне функције деканалисања. Нови рачунарски програм за фитовање EBS/C спектра, CSIM (*Channeling SIMulation* [121]), развијен у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, Института од националног значаја за Републику Србију, успешно се показао у симулацији повратно расејаних спектра каналисаних протона у кристалу дијаманта [121], као и у одређивању профила аморфизације кристала дијаманта имплантираног јонима угљеника енергије 4 MeV [122].

Заустављање имплантираних јона у аморфним материјалима често се симулира помоћу програмског пакета SRIM базираним на Монте Карло симулацијама јон-атом бинарних судара [123]. Међутим, у раду Ванга и сарадника, код имплантације јона угљеника енергије 20 MeV у 6H-SiC примећено је да у SRIM симулацији јони продиру дубље у поређењу са резултатима μR анализе (разлика око 20%). Потврда веродостојности Вангових резултата огледа се у њиховом веома добром слагању са резултатима SEM микроскопије. Нешто слично примећено је и у случају имплантације јона азота енергије 4 MeV у кристал силицијума, када је узорак анализиран методом нуклеарних реакција (NRA) и направљено поређење са SRIM симулацијом (одступање од 8%) [124]. Одступања се могу објаснити непрецизним зауставним моћима конституената кристала коришћеним у симулацији. Сходно томе, јасно је да избор коришћених вредности зауставне моћи може имати велики утицај на тумачење спектра повратног расејања.

Прецизније испитивање утицаја јонске имплантације на процес аморфизације 6H-SiC кристала остварује се имплантирањем конститутивних елемената кристала, угљеника или силицијума, чиме се избегава утицај нечистоћа и хемијских веза формираних између њих и атома кристалне решетке. Као што је већ наведено раније у тексту, у литератури је могуће пронаћи публикације које се односе на имплантацију високоенергијских јона угљеника и силицијума у 6H-SiC, али према досадашњим сазнањима аутора, све су везане за имплантацију у случајној оријентацији кристала.

2.5. Методе карактеризације

Спектрометрија Ратерфордског и еластичног повратног расејања у моду каналисања и скенирајућа електронска микроскопија често се користе за испитивање утицаја имплантације јона на структуру материјала [34, 92, 111]. Специфичност принципа на коме се заснива метода анализе повратног расејања омогућава добијање профила аморфизације у блископовршинском региону (неколико микрометара) без претходне припреме узорка. Како се за анализу користе лаки јони веома ниских флуенаса, метода је готово недеструктивна, има добру резолуцију, осетљивост и квантитативна је. Микро-раманска спектроскопија даје информације о структури кристалне решетке на микронском и субмикронском нивоу. У случају SiC-а, μR спектроскопија коришћена је за одређивање политипа [75], аморфизације кристалне решетке [75, 111, 113, 119, 125] величине кристалита у структури [126], допирања кристала [127], напрезања [120], као и електронских својстава кристала [75]. μR анализа обично не захтева припрему узорка и веома је брза. Код μR и SEM метода за анализу дубинског профила аморфизације неопходно је преломити кристал, како би се могао испитивати његов попречни пресек, те се стога обе методе сматрају деструктивним за дубинску анализу профила аморфизације.

2.5.1. Спектрометрија елстичног повратног расејања јона

Анализа јонским сноповима (енгл. *Ion Beam Analysis* – ИВА) представља скуп аналитичких метода које се користе за проучавање састава и структуре испитиваних узорака користећи снап убрзаних јона енергије реда MeV. Анализа се заснива на интеракцији убрзаних наелектрисаних честица пројектила и испитиваног материјала мете, како на атомском, тако и на нуклеарном нивоу. Услед интеракције долази до емисије различитих честица или зрачења чија је енергија карактеристична за елементе који сачињавају узорак. ИВА методе међусобно се разликују на основу тога који емисиони производи се анализирају (расејани јони, X зрачење, гама зрачење). Неке од метода су спектрометрија елстичног повратног расејања (EBS), анализа нуклеарних реакција (NRA), анализа гама зрака индукованих јонима (PIGE) и анализа X зрака индукованих јонима (PIXE). Наведене методе су веома осетљиве, омогућавају квантитативну анализу, релативно су недеструктивне и брзе [31]. Пре анализе најчешће није потребна припрема узорака.

Спектрометрија елстичног повратног расејања јона представља једну од најкоришћенијих ИВА метода. Емисиони производи анализе јонским снопом у случају EBS-а су повратно расејани јони на атомским језгрима материјала мете. Расејани јони трпе велике промене у енергији и правцу. Ако узорак није танак (што је углавном случај) могуће је детектовати само јоне расејане при угловима већим од 90° у односу на правац упадног снопа (повратно расејани јони). За EBS анализу обично се користи снап добро колимираних моноенергијских лаких јона (јони тежи од елемената испитиваног материјала не могу бити повратно расејани) енергије од неколико стотина keV до неколико MeV [14]. Као пројектили обично се користе ^1H и ^4He јони, док се повратно расејани јони најчешће детектују под угловима од 150° до 170° [128]. На основу енергије повратно расејаних јона добијају се информације о атомској маси и дубинској расподели конституената материјала и нечистоћа.

EBS омогућава квантитативну анализу састава материјала без употребе референтних стандарда са резолуцијом до неколико pm [129]. Метода је посебно осетљива за детекцију тешких елемената са границом детекције реда ppm [130]. Недостатак EBS-а је ниска осетљивост на лаке елементе, што често захтева употребу и других ИВА метода.

2.5.1.1. Основни принципи спектрометрије елстичног повратног расејања

2.5.1.1.1. Кинематика расејања јона

Када се јон повратно расеје на атому мете под углом θ , однос енергије јона непосредно пре расејања (E_0) и непосредно након расејања (E_1) дат је једначином [129]:

$$\frac{E_1}{E_0} = K = \left[\frac{\pm \left(1 - (M_p/M_m)^2 \sin^2 \theta \right)^{1/2} + (M_p/M_m) \cos \theta}{1 + (M_p/M_m)} \right]^2 \quad (2.21.)$$

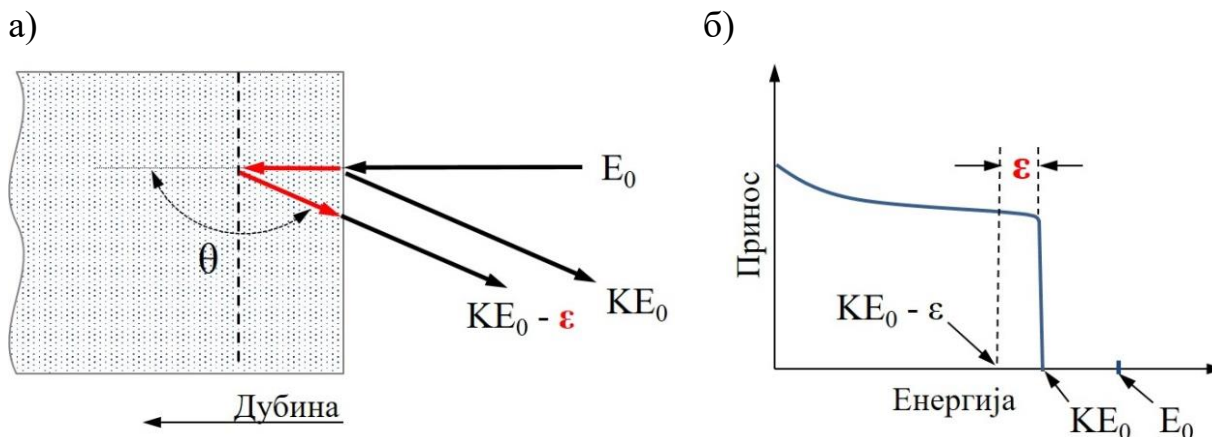
Овај однос назива се кинематички фактор (K) и показује да енергија јона након расејања зависи само од масе пројектила (M_p), масе атома мете (M_m) и угла расејања. У једначини 2.21. знак плус се користи за случај када је $M_p \leq M_m$, док у супротном ($M_p > M_m$) постоје два решења уз услов да је максимални угао расејања θ_{max} [131]:

$$\theta_{max} = \arcsin \frac{M_m}{M_p} \quad (2.22.)$$

Друго решење за случај $M_p > M_m$ се добија из разлога што различити ударни параметри b резултирају истим углом расејања (нпр. $\theta = 0$ се може добити за $b = 0$, чеони судар [знак $-$] и $b \approx \infty$ [знак $+$]). Основна идеја EBS спектроскопије почива на једначини за кинематички фактор

K . Наиме, како су у поставци EBS анализе параметри E_0 , θ и M_p дефинисани, мерењем енергије расејаних јона лако се може одредити маса атома мете.

Када се расејање јона дешава на већим дубинама, јони пре и након процеса повратног расејања на путу кроз материјал губе енергију (за вредност енергије ε) услед интеракције са електронима (доминантна интеракција у енергијском опсегу јона који се користе у EBS спектрометрији) атома мете. Рачунање енергијских губитака јона при проласку кроз материјал детаљно је описано у поглављу 2.1.2. На слици 10 илустрован је процес добијања EBS спектра из мете сачињене од моноизотопског елемента. Са слике се јасно може видети зависност енергије расејаних јона измерене на детектору од дубине мете на којој се догодило расејање.



Слика 10. а) Схематски приказ процеса еластичног повратног расејања на кристалу који се састоји од моноизотопског елемента и б) резултујући спектар повратног еластичног расејања.

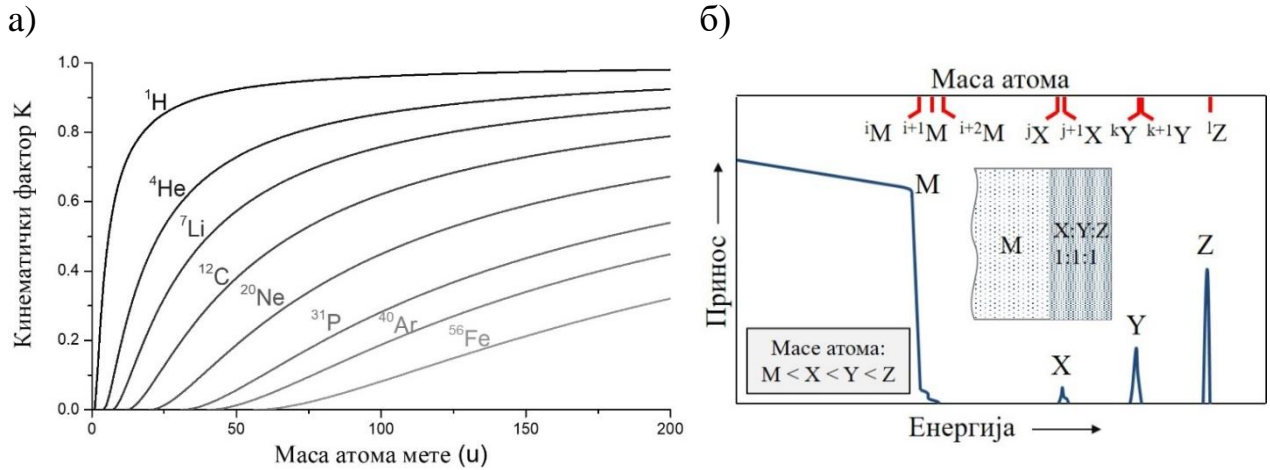
Уколико је у мети присутно више различитих елемената, што је готово увек случај, као последица различитих вредности K јавиће се разлика енергија (ΔE) у положајима њихових сигнала KE_0 . Ова карактеристика EBS-а даје овој методи својства атомске масене спектрометрије. Резолуција раздвајања атомских маса зависиће од разлике кинематичких фактора, односно од масе коришћеног анализирајућег јона. Масена резолуција се може дефинисати једначином [132]:

$$\delta M_m = \frac{\delta E}{E_0} \left(\frac{\partial K}{\partial M_m} \right)^{-1} \quad (2.23.)$$

где је δE резолуција EBS система. На слици 11а дата је зависност вредности кинематичког фактора различитих типова јона од масе атома мете. Најбоља резолуција маса се постиже када је нагиб функције зависности кинематичког фактора од масе атома мете највећи. Стога, највећу масену резолуцију при детекцији лаких елемената у мети имају анализирајући јони лаких елемената, попут водоника и хелијума. За бољу масену резолуцију приликом детекције тежих елемената потребно је изабрати пројектиле веће масе, међутим исти оштећују материјал више и при томе имају умањену анализирајућу дубину. Повећањем E_0 и приближавањем положаја детектора вредности угла θ од 180° додатно се побољшава масена резолуција.

На слици 11б приказана је илустрација EBS спектра у случају када је на супстрат масе M нанет монослој сачињен од три елемента једнаких концентрација. У датом примеру не долази до преклапања сигнала елемената, што представља идеалан случај. Утицај K фактора на енергијску резолуцију раздвајања може се јасно видети у случају изотопске анализе. Боља изотопска резолуција постиже се за елементе мањих маса, што је илустровано на слици 11б. Када се сигнали различитих елемената преклапају, тумачење EBS спектра није једноставно. Резултујући спектар представља суму сигнала свих присутних елемената у узорку. У том

случају се за тумачење спектра најчешће користе рачунарске симулације, међу којима је један од најпопуларнијих рачунарских програма SIMNRA [133].



Слика 11. а) Зависност кинематичког фактора од масе атома мете за различите јоне пројектила при углу расејања 160° и б) илустрација EBS спектра узорка који се састоји од супстрата масе M на који је нанет монослој сачињен од X , Y и Z елемената једнаких концентрација. Јон пројектил има масу значајно мању од масе M .

2.5.1.1.2. Попречни пресеци за расејање јона

Специфичан случај спектрометрије еластичног повратног расејања (у зависности од начина апроксимације попречног пресека расејања) јесте спектрометрија Ратерфордово повратног расејања (енгл. *Rutherford Backscattering Spectrometry* – RBS). RBS прати Ратерфордов третман примењен у експериментима расејања алфа честица Гајгера и Марсдена (Н. Geiger, Е. Marsden). Ратерфорд је апроксимирао попречни пресек расејања користећи Кулонову интеракцију два тачкаста наелектрисања. Ова апроксимација не важи у случају када су језгра на веома блиској удаљености. Ратерфордов диференцијални попречни пресек ($d\sigma/d\Omega$) дефинише се као [134, 135]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_p Z_m e^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{4}{\sin^4\theta} \frac{\left(\left[1 - \left(\frac{M_p}{M_m} \sin\theta \right)^2 \right]^{1/2} + \cos\theta \right)^2}{\left(1 - \left[\left(\frac{M_p}{M_m} \sin\theta \right)^2 \right]^{1/2} \right)^2} \quad (2.24.)$$

На основу дате једначине види се да је Ратерфордов диференцијални попречни пресек директно пропорционалан квадратима наелектрисања језгара пројектила и мете, а обрнуто пропорционалан квадрату енергије пројектила. За $M_p \ll M_m$ једначина се може развити у степени ред и апроксимирати само првим чланом развоја:

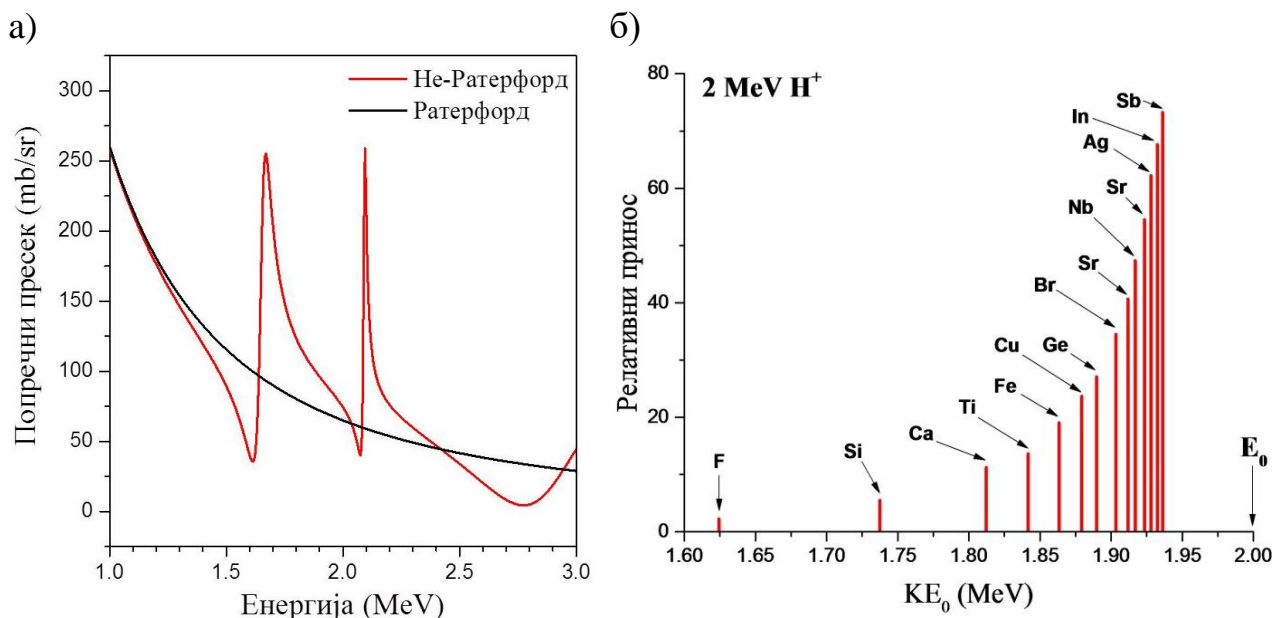
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \left(\frac{Z_p Z_m e^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \left[\sin^{-4} \frac{\theta}{2} - 2 \left(\frac{M_p}{M_m} \right)^2 + \dots \right] \quad (2.25.)$$

Код EBS експеримената типичан просторни угао детектора, Ω , најчешће SSB детектора (енгл. *Silicon Surface Barrier*), веома је мали и износи око 10^{-2} srad, због чега је угао расејања, θ , добро дефинисан. Стога је по конвенцији уведен средњи диференцијални попречни пресек расејања који се уобичајено користи у EBS-у:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (2.26.)$$

При ниским енергијама стварни попречни пресеци одступају од Ратерфордовога за све парове пројектила и мете. Разлог за овакво понашање лежи у делимичном екранирању наелектрисања језгра електронским облацима који окружују оба језгра. Екранирање се може узети у обзир неким од корекционих фактора попут Лекујеовог (J. L'Esuyer) корекционог фактора [136].

Са порастом енергије јона квантно-механички ефекти долазе до изражаја и апроксимација Ратерфордовога попречног пресека престаје да важи. У том случају растојање најближег прилаза између јона и циљаних језгара се своди на димензије реда величине самог језгра. То за последицу има појаву утицаја сила кратког домета на процес расејања, због чега се јављају знатна одступања од Ратерфордовога попречног пресека. Вредност попречног пресека за расејање тада интензивније зависи од енергије (појава резонантних пикова на тачно дефинисаним енергијама), угла и комбинације пројектил-мета. Како EBS разматра само расејање као последицу еластичног судара, у случајевима одступања од Ратерфордовога попречног пресека користи се назив спектрометрија еластичног повратног расејања (EBS) [137]. На слици 12а приказана је разлика између Ратерфордовога и еластичног попречног пресека за расејања протона на атомима силицијума.



Слика 12. а) Попречни пресек за расејање протона на језгрима ^{28}Si : црвена линија – не-Ратерфордов (еластични) и црна линија – Ратерфордов попречни пресек (подаци за попречни пресек преузети са IBANDL (*Ion Beam Analysis Nuclear Data Library*) базе [138-140]); б) релативни принос расејања јона H^+ енергије 2 MeV на мети различитих хемијских елемената за $\theta = 160^\circ$ у односу на мету сачињену од елемента угљеника.

На примеру са слике 11б могу се запазити разлике у приносима за различите елементе истих концентрација (X, Y, Z). Ова разлика последица је попречних пресека различитих елемената. На слици 12б приказан је релативни принос различитих елемената добијених у интеракцији са јонима H^+ енергије 2 MeV у односу на принос елемента угљеника. Релативни принос језгара са високим и ниским вредностима Z_2 се разликује за скоро два реда величине, што EBS чини идеалном методом за детекцију присуства тешких елемената у матрицама лаких елемената.

Када се стехиометрија мења са дубином, варијација састава може се одредити из EBS спектра. Суштина дубинског профилисања помоћу EBS-а јесте повезивање одзива сигнала EBS спектра на енергији E_2 , Y , који потиче од слоја дебљине τ , са бројем атома по јединици површине $N\tau$, на дубини x као [64]:

$$Y(E_2) = \frac{\sigma(E)\Omega Q N \tau}{\cos \theta_1} \quad (2.27.)$$

где је Q укупни број инцидентних јона на узорку, N је атомска густина елемента у узорку, θ_1 је угао који упадни сноп јона заклапа са нормалом на површину мете, E_2 је енергија честице која је стигла до детектора ($KE_0 - \varepsilon$) и E је енергија јона непосредно пре расејања. Ширина енергијског интервала јона непосредно након повратног расејања на слоју узорка дебљине τ , δ' , услед процеса енергијског губитка није иста у дубини и на површини узорка. Како је експериментално доступна одређена енергијска ширина канала анализатора δ , претходна једначина се може прилагодити узимајући у обзир релацију која повезује δ и δ' [64]:

$$\delta' = S_f(E) N \tau = \delta \frac{S(KE)}{S(E_2)} \quad (2.28.)$$

где је $S_f(E)$ фактор зауставног попречног пресека расејања и дефинише се као:

$$S_f(E) = \frac{K}{\cos \theta_1} S_{in}(E) + \frac{1}{\cos \theta_2} S_{out}(E) \quad (2.29.)$$

S_{in} и S_{out} представљају зауставне попречне пресеке јона пре и након расејања, респективно, а θ_2 је угао који јон након расејања заклапа са нормалом на површину кристала. Узимајући у обзир једначину 2.28, једначина 2.27. се може прилагодити као:

$$Y(E_2) = \sigma(E)\Omega Q \frac{\delta}{S_f(E)\cos \theta_1} \frac{S(KE)}{S(E_2)} \quad (2.30.)$$

Енергија детектованих јона E_2 је повезана са дубином на којој је дошло до расејања, помоћу израза за губитак енергије на путу од површине кристала до момента расејања [64]:

$$\frac{x}{\cos \theta_1} = - \int_{E_0}^E \frac{dE}{(dE/dx)} \quad (2.31.)$$

и од момента непосредно након расејања до изласка јона из кристала као [64]:

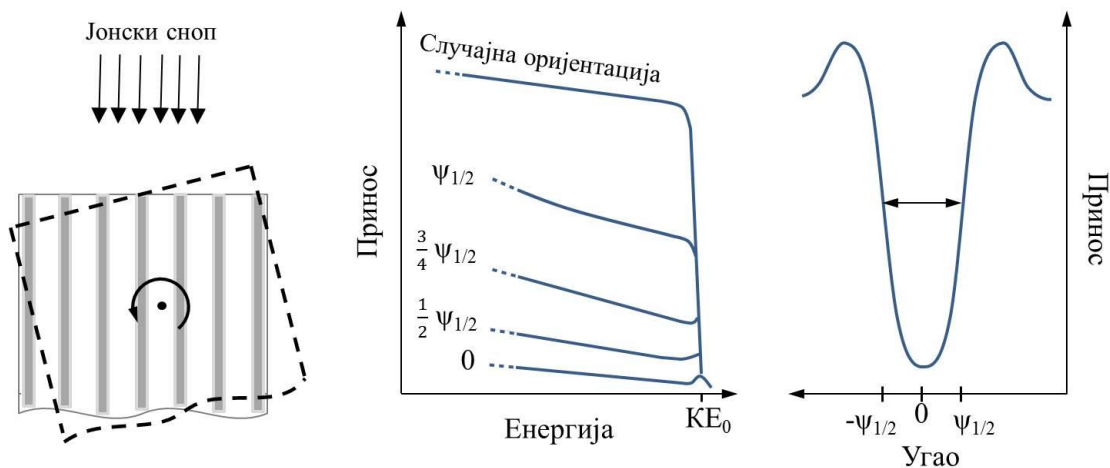
$$\frac{x}{\cos \theta_2} = - \int_{KE}^{E_2} \frac{dE}{(dE/dx)} \quad (2.32.)$$

Фактори који највише утичу на дубинску резолуцију EBS-а су добро дефинисана енергија снопа (монохроматичност), резолуција детектора као и вредност фактора $S_f(E)$. Побољшање дубинске резолуције може се постићи оптимизирајући експерименталне услове у циљу добијања што веће вредности фактора $S_f(E)$. То се остварује коришћењем јона нижих енергија, повећањем угла θ_1 и θ_2 , као и коришћењем јона веће масе. Међутим, јони већих маса имају лошију енергијску резолуцију детектора, осим у случајевима када су детектори електростатички или магнетни анализатори, који су гломазнији од најчешће коришћених силицијумских детектора. Енергијска резолуција силицијумских детектора износи 15–25 keV, што одговара дубинској резолуцији од око 10 nm [129]. Коришћењем масено-спектрометријског детекционог система може се постићи енергијска резолуција од неколико keV-а и дубинска резолуција величине монослоја [141]. Битно је нагласити да се са повећањем дубине пенетрације јона у материјалу монохроматичност снопа губи услед ефекта енергијског размазивања, због чега се деградира дубинска резолуција.

2.5.1.2. Спектрометрија елстичног повратног расејања у моду каналисања – EBS/C

Иако је каналисање непожељно код класичног EBS-а, може послужити као јединствена метода за проучавање структуре кристалне решетке [14]. Када је јонски сноп паралелан са једном од главних кристалографских оса монокристала, принос повратног расејања на монокристалу је знатно умањен у односу на онај при случајној оријентацији кристалне решетке. Овај ефекат пружа могућност одређивања степена савршености кристалне решетке. EBS/C се широко користи за проучавање кристалографских дефеката чије постојање утиче на примену материјала, као што је то случај код нуклеарних реактора [142] и у индустрији полупроводника [95].

Ако су атоми кристалне решетке измештени у интерстицијални простор (препрека у каналу) долази до снажне интеракције са каналисаним јонима, а последично и до повећања приноса на EBS/C спектру. Ово повећање приноса даље се користи у квантификацији њиховог удела. Различити структурни дефекти доводе до промене у приносу расејања, а у којој мери зависиће од типа дефекта. Показано је да вероватноћа деканалисања зависи од типа дефекта и пропорционална је $E^{1/2}$ код дислокација, E^0 код грешака при слагању слојева и E^{-1} код тачкастих дефеката [143, 144]. Стога се каналисање јона може користити за структурну карактеризацију, укључујући дубинско профилисање аморфизације структуре као и карактеризацију нечистоћа у решетки. Такође, за разлику од EBS методе, EBS/C се може користити за детекцију лаких елемената у кристалној матрици тежих елемената због умањеног одзива матрице, и сходно томе, умањеног преклапања сигнала (слика 13).



Слика 13. Спектрометрија елстичног повратног расејања у моду каналисања – илустрација експеримента и EBS спектра површине монокристала добијених при различитим вредностима углова поравнања снопа са симетријском осом канала.

Осетљивост каналисања јона мења се са променом угла снопа у односу на канал кристала, што је илустровано на слици 13. Стога је поступак поравнања снопа јона са осом канала први корак у експерименту.

2.5.1.3. Симулација EBS/C спектра

Поређењем EBS/C спектра могуће је добити процену о релативном квалитету кристалне структуре узорка. Најчешће се EBS спектром узорка апроксимира потпуно аморфизована структура, јер је у том случају каналисање минимално [145]. Што је принос на спектру каналисања EBS/C ближи приносу EBS спектра, структура је више аморфизована. Поредећи висине сигнала EBS и EBS/C спектра које одговарају енергији јона који су стигли са површине узорка могуће је проценити степен аморфизације кристалних слојева блиских површини [146, 147].

Подаци о дубинском профилу аморфизације из EBS/C спектра добијају се индиректно користећи два различита приступа. Први приступ заснован је на итеративној процедури, која раздваја принос који потиче од расејаних јона који су претходно деканалисани, од приноса који је последица расејања каналисаних јона на измештеним атомима кристалне решетке [92, 148]. Проблем код итеративне процедуре јавља се при конверзији енергија детектованих јона са дубином узорка. Без обзира на ово ограничење, поступак је погодан за одређивање профила дефеката који се налазе на малим дубинама узорка ($<1 \mu\text{m}$), док се за веће дубине не може примењивати [148].

Други приступ заснован је на рачунарским симулацијама намењеним фитовању EBS/C спектра (најчешће RBS/C), из којих се потом добијају информације о дубинском профилу аморфизације кристалне решетке. Најчешће се користе рачунарски програми базирани на Монте Карло симулацијама попут: McChassy [149], FLUX [150], CASSIS [151], IMSIL [152] и BISIC [153]. Монте Карло симулациони програми се заснивају на моделовању индивидуалних интеракција између честица и дају резултате симулација који су углавном супериорни у односу на друге симулационе програме. Главни недостатак ових рачунарских програма је велико рачунарско време прорачуна једног EBS/C спектра, које може износити и до неколико сати [148]. Такође, постоје и рачунарски програми засновани на аналитичком приступу, попут DICADA-е [154]. DICADA програм даје кориснику могућност добијања дубинске расподеле одређених типова дефеката, као што су тачкасти дефекти, дислокације или присуство аморфне фазе [155]. Симулације засноване на аналитичком приступу прате процедуру дефинисану априори. У овом случају не моделују се интеракције индивидуалних честица. Мета је подељена на слојеве и симулација се заснива на израчунавању концентрација елемената за сваки слој посебно.

У сврху издвајања профила аморфизације кристала из EBS/C спектра развијен је CSIM рачунарски програм заснован на феноменолошком приступу. Према сазнању аутора ово је први рачунарски програм опште намене за симулацију аморфне фазе (не разматра тип дефекта, већ квантификује степен аморфизације). Феноменолошки рачунарски програми су знатно бржи од Монте Карло програма.

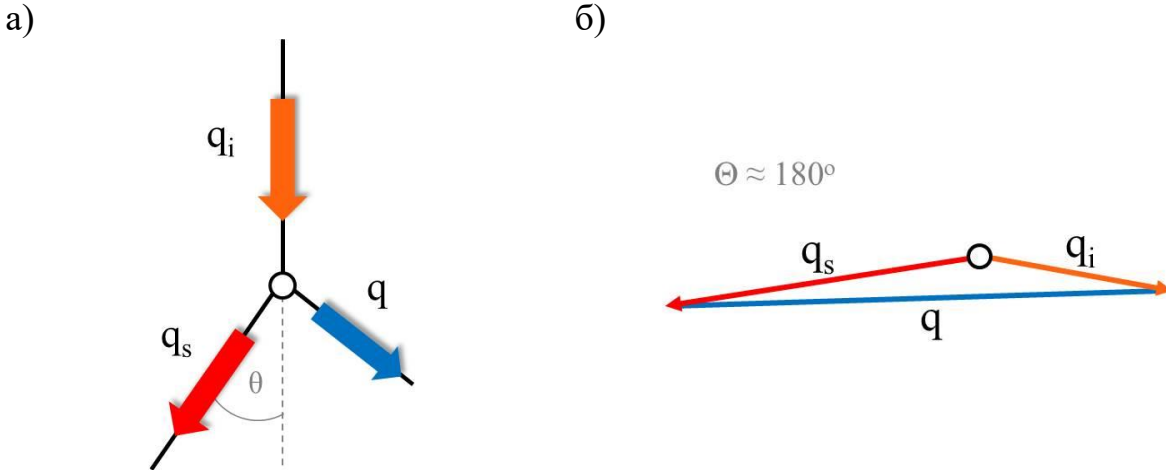
2.5.2. Раманска спектроскопија кристала

Раманска спектроскопија представља недеструктивну спектроскопску технику анализе материјала [156]. Заснива се на расејању електромагнетног зрачења, најчешће из видљивог дела спектра, на испитиваном материјалу. Као резултат анализе добија се спектар који је карактеристичан за испитивано једињење (материјал) и може се користити за идентификацију истог. Такође, рамански спектри носе информације везане за кристалну структуру узорка. У већини случајева раманска анализа не захтева припрему узорака, што је један од важнијих захтева при избору технике за карактеризацију материјала. Такође, анализа је релативно брза и погодна је за испитивање узорака у чврстом, течном и гасовитом стању.

Монохроматска светлост угаоне фреквенције ω_i и таласног вектора q_i нееластично се расејава на кристалу, стварајући или уништавајући при томе фононе угаоне фреквенције ω и таласног вектора q . У случају идеалног монокристала, овим фононима се могу приписати својства таласа. Након нееластичног расејања монохроматска светлост ће имати угаону фреквенцију ω_s и таласни вектор q_s [157]. Приликом раманског расејања упадне светлости важе закони о одржању енергије и одржању угаоног момента (последично и одржању таласног вектора q , јер је $|q| = \omega\eta c^{-1}$, где је η индекс преламања средине, а c брзина светлости). Очување енергије услед стварања или анихилације фонона кристалне решетке доводи до повећања или смањења фреквенције расејане светлости. Такође у процесу нееластичног расејања таласни вектор мора бити очуван, те разлика која се јавља између упадног (q_i) и расејаног (q_s) фотона одговара фонону који учествује у процесу [158]:

$$\vec{q} = \vec{q}_i - \vec{q}_s \quad (2.33.)$$

Ова тврдња односи се на процесе расејања првог реда који представљају доминантан облик раманског расејања и укључује само један квант ексцитације. Дијаграм очувања таласног вектора процеса расејања првог реда приказан је на слици 14. Неретко материјали показују и расејање вишег реда, које доводи до стварања или анихилације два или више кванта [159]. У случају процеса расејања вишег реда разлика фреквенција упадне и расејане светлости ће одговарати суми фреквенција фонона који учествују у процесу. Укупни таласни вектор пропорционалан је резултујућој суми таласних вектора фонона.



Слика 14. Илустрација дијаграма таласних вектора процеса нееластичног расејања за а) угао мањи од 90° и б) $\sim 180^\circ$; таласни вектор упадног q_i , расејаног q_s и резултујућег q фотона.

Вредност интензитета таласног вектора q одређен је геометријом експерименталне поставке. Типични експерименти раманског расејања спроводе се у геометрији повратног расејања (угао расејања θ износи 180°). У том случају интензитет таласног вектора је максималан и израчунава се као [159]:

$$|q_{180^\circ}| = (\eta_{\omega_i}\omega_i + \eta_{\omega_s}\omega_s) \left(\frac{1}{c}\right) \quad (2.34.)$$

Таласни вектор фонона може имати било коју вредност која лежи у Брилуеновој зони. Максимална вредност таласног вектора фонона који се пружа до границе Брилуенове зоне је π/d_r (d_r је константа решетке) и типично је реда величине 10^8 cm^{-1} [158]. У случају упадне светлости таласне дужине од 500 nm , таласни вектор светлости биће реда 10^5 cm^{-1} , за три реда величине мањи од вредности таласног вектора који би се пружао до границе Брилуенове зоне. Стога се само фонони који се налазе у центру Брилуенове зоне јављају у раманском расејању првог реда, што представља раманско изборно правило ($q \approx 0$). Последице, само се фонони из оптичке гране дисперзионе релације уочавају раманском спектроскопијом. Карактеристике првог реда у раманском спектру се појављују као дискретан сет уских трака. За процесе вишег реда укупни таласни вектор једнак је суми таласних вектора фонона који учествују у процесу расејања. Стога резултујући таласни вектор има широк опсег дозвољених вредности у Брилуеновој зони. Услед тога фонони из целе Брилуенове зоне могу учествовати у процесима расејања вишег реда. Спектралне карактеристике вишег реда се јављају у виду широких трака.

Нарушавањем транслационе симетрије кристала, као што је то случај код аморфних материјала, долази до престанка важења изборног правила $q \approx 0$ [160]. Услед тога сви фонони до ивица Брилуенове зоне постају рамански активни. Губитком транслационе симетрије фононе више не можемо сматрати таласима. Међутим, термин фонон је задржан и означава

локалне вибрационе модове аморфних материјала. Услед аморфизације материјала долази до ширења раманских трака и резултујући спектар подсећа на густину фононских стања дисперзионе релације одговарајућег кристала.

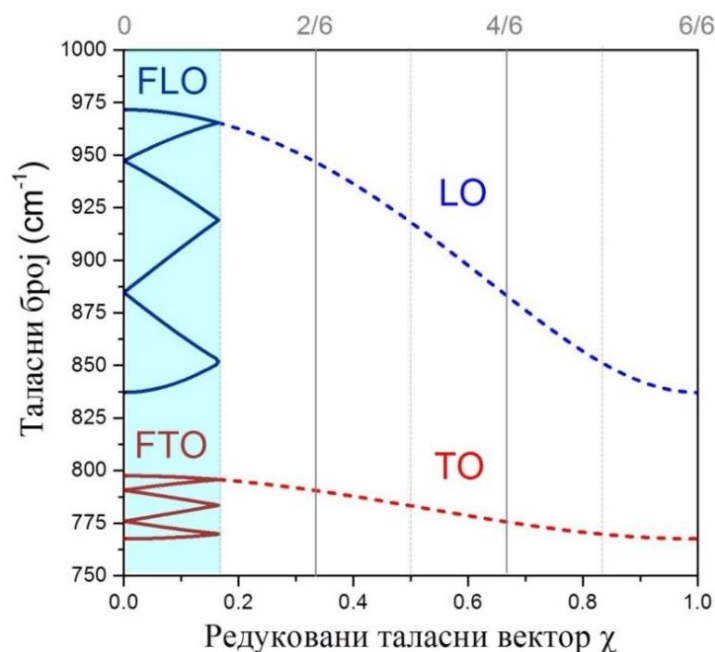
Основни параметри у спектру су позиција, интензитет и полуширина спектралних трака. Позиција раманске траке у спектру (фреквенција) зависи од маса и позиција атома, константе силе и дужине хемијске везе, па ће промена ових параметара утицати на промену позиције раманских трака [161]. Напрезање структуре може довести до померања раманских трака ка вишим или ка нижим фреквенцијама, у зависности од тога да ли се ради о истежућем или сабијајућем напрезању. Нарушавање кристалне структуре такође доводи до промене фреквенције раманске траке, обично ка нижим таласним бројевима, услед прекида транслационе симетрије кристала. Присуство хемијских нечистоћа у чворовима кристалне решетке такође резултује променом фреквенције раманске траке.

Раманску полуширину траке одређује неколико параметара [162]. Природно ширење раманских трака последица је Хајзенберговог принципа неодређености (око 10^{-8} cm^{-1}). Такође, постојање различитих изотопа једног елемента доводи до формирања више трака на блиским позицијама у спектру, и у случају недовољне спектралне резолуције инструмента јавља се преклапање трака, што се манифестује у виду једне шире траке. Поред теоријског аспекта, и инструментални параметри попут спектралне резолуције имају утицај на полуширину раманске траке. Код дисперзивних система спектрална резолуција је одређена густином линија дифракционе решетке, величином улазног прореза, бројем пиксела CCD (енгл. *Charge-Coupled Device*) детектора и растојањем између решетке и детектора. Међутим, за већину материјала главни фактор ширења раманских трака јесу неидеална или аморфизована кристална решетка.

Параметри који утичу на интензитет раманских трака могу се поделити у две групе [162]. Прву групу чине параметри који нису повезани са узорком, попут интензитета и таласне дужине коришћеног анализирајућег ласера, анализиране запремине, ефикасности детектора и геометрије при којој се мери рамански ефекат. Другу групу чине параметри повезани са самим узорком, односно са ефикасношћу раманског расејања. Рамански интензитет је пропорционалан квадрату амплитуде раманског тензора поларизабилности и веома је осетљив на уређење кристалне решетке. Нарушавањем уређености кристалне решетке интензитет раманских трака првог реда се смањује. То се дешава због промене тензора поларизабилности као последице раскидања хемијских веза и промене вредности константе силе.

2.5.2.1. Раманска спектроскопија 6H-SiC

Периодична структура сачињена од слојева два или више различита материјала назива се супер-решетка. Дебљина слојева зависи од примењене методе синтезе датог материјала и типично је за ред величине већа од константе кристалне решетке. Међутим, постоје и једињења чија је кристална решетка самоорганизована у виду супер-решетке. То је случај код 6H-SiC који поседује аксијалну супер-периодичност. Типично својство структура са супер-решеткама јесте ефект савијања Брилуенове зоне (енгл. *folded* – F). Фонони из проширене Брилуенове зоне таласног вектора q ($q = 2\pi/d_r$) сада се мапирају у оквиру савијене Брилуенове зоне са новим таласним вектором [163]. Узмимо за пример супер-решетку која се састоји од два материјала са константама решетке d_1 и d_2 и периодом супер-решетке $d_r = d_1 + d_2$ [164]. Јединичне ћелије са већом константом решетке имају мање Брилуенове зоне. Стога ће таласни вектор ивица прве Брилуенове зоне супер-решетке, у нашем случају 6H-SiC, бити знатно мањи у односу на таласни вектор велике Брилуенове зоне базичног 3C поли типа SiC. Последице, јавља се савијање Брилуенове зоне. Услед савијања долази до формирања одређеног броја мини-гранула у дијаграму дисперзионе релације (слика 15).



Слика 15. Савијање оптичких грана дисперзионе релације (ТО – трансверзална оптичка грана и LO – лонгитудинална оптичка грана) прве Брилуенове зоне 3C-SiC (од $\chi = 0$ до $\chi = 1$) и добијање нових грана (FTO и FLO) политипа 6H-SiC (од $\chi = 0$ до $\chi = 0,167$).

Проширена Брилуенова зона 6H-SiC (Брилуенове зоне 3C-SiC) се протеже до вредности таласног вектора $6\pi/d_r$. Како је вредност максималног таласног вектора у савијеној Брилуеновој зони π/d_r , савијена Брилуенова зона добијена је из проширене зоне њеним петоструким савијањем. Савијање Брилуенове зоне доноси нове модове у центар зоне ($q = 0$). Као последица тога јављају се нове линије у раманском спектру. Дефинишући редуковани таласни вектор као $\chi = q/q_{max}$ за проширену зону, показано је да су $\chi = 0; 0,33; 0,67$ и $1,0$ тачке са $q = 0$ таласним векторима у савијеној Брилуеновој зони. 6H-SiC политип припада C_{6v}^4 просторној групи и има 12 атома по јединичној ћелији (N_i). Укупан број фононских модова износи $3N_i$, од чега $3N_i - 3$ оптичких и 3 акустичних. Према теорији група, за 6H-SiC могући модови су $5A_1 + 6B_1 + 5E_1 + 6E_2$ [165]. Ипак, само неки од њих се запажају у раманским спектрима. Раман-активни модови имају A_1, E_1 и E_2 симетрију док је B_1 мод неактиван за ову просторну групу.

Карактеристичне траке које су запажене у спектру 6H-SiC наведене су у табели 2. У даљем тексту коришћена номенклатура трака дата је у облику: симетријски тип-F-гранаредуковани вектор (на пример E_2 -FTO(2/6)) или коришћењем позиције траке у спектру. На пример, E_2 -FTO(2/6) што представља најинтензивнију траку у спектру на 789 cm^{-1} . Ознака F говори да су у питању модови настали савијањем Брилуенове зоне.

Постојање великог броја политипова може представљати проблем приликом рада и стога је битно јасно их разликовати. Како интензитет профила раманских трака зависи у великој мери од начина паковања структурних слојева, може се применити за одређивање политипа испитиваног SiC-а. Показано је да рамански интензитет за различите политипове има максималну вредност FTA и FTO модова при различитим вредностима редукованог таласног вектора, на основу чега је могуће одредити који политип је у питању [166]. Код 6H-SiC, FTA и FTO модови при вредности редукованог таласног вектора 0,33 (2/6) показују максимални интензитет. Такође, појава дублета може помоћи у одређивању политипа SiC-а јер дублети представљају меру интерпланарних интеракција, те се стога јављају мале енергијске разлике између политипова [167].

Табела 2. $q = 0$ фононски модови за 6H-SiC (раманске траке првог реда). Б.З. је скраћеница за Брилуенову зону.

ν [cm^{-1}]	Порекло		
	Симетријски мод	Грана Б.З.	χ
145 [75, 168], 146 [125]	E ₂	ТА	2/6
149 [168], 150 [75, 125]	E ₂	ТА	2/6
235 [125], 236 [75, 168]	E ₁	ТА	4/6
240 [125], 241 [75, 168]	E ₁	ТА	4/6
262 [168], 266 [75, 125]	E ₂	ТА	6/6
504 [75, 168], 505 [125]	A ₁	LA	4/6
508 [168], 513 [125], 514 [75]	A ₁	LA	4/6
767 [75, 125], 769 [168]	E ₂	ТО	6/6
788 [168], 789 [75, 125]	E ₂	ТО	2/6
797 [75, 125, 168]	E ₁	ТО	0
888 [125], 889 [75, 168]	A ₁	LO	4/6
964 [168], 965 [75], 967 [125]	A ₁	LO	0

Рамански спектар 6H-SiC на вишим вредностима таласних бројева, регион од 1400 cm^{-1} до 1800 cm^{-1} , поседује комбинационе траке и овертонове. У литератури се могу пронаћи асигнације трака у саставу континуума као и објашњење за њихово порекло, што је дато у табели 3.

Табела 3. Траке овертонова и комбинационе траке раманског спектра 6H-SiC. Б.З. је скраћеница за Брилуенову зону.

ν [cm^{-1}]	Порекло
1476 [169], 1472 [127], 1477 [170]	Овертон из К тачке Б.З.
1516 [169], 1513 [127], 1514 [170]	Овертон из L тачке Б.З.
1532 [169], 1526 [127], 1530 [170]	Овертон из U тачке Б.З.
1542 [169], 1537 [127], 1543 [170]	Овертон из М тачке Б.З.
1582 [127], 1580 [170]	Комбинациона трака
1614 [169], 1617 [127], 1618 [170]	Комбинациона трака
1626 [169],	Комбинациона трака
1651 [169], 1655 [127], 1651 [170]	Комбинациона трака
1686 [169], 1688 [127], 1683 [170]	Овертон из М тачке Б.З.
1714 [169], 1712 [127], 1712 [170]	Овертон из М тачке Б.З.
1930 [169], 1931 [127], 1928 [170]	Овертон из Г тачке Б.З.

2.5.3. Скенирајућа електронска микроскопија

Скенирајући електронски микроскоп један је од најпримењиванијих инструмената који се користе за анализу карактеристика морфологије микроструктура. Формирање SEM слике заснива се на прикупљању емисионих продуката произведених приликом интеракције електронског снопа и узорка [171]. У интеракцији електронског снопа са атомима узорка долази до емисије секундарних и Ожеових (енгл. P. V. Auger) електрона, карактеристичног и континуалног X зрачења као и повратно расејаних електрона. Сваки од емисионих продуката интеракције носи одређене информације о узорку. Сигнал који се најчешће користи за добијање SEM слика јесте сигнал секундарне емисије електрона. Како су секундарни електрони нискоенергетски (неколико eV), из материјала могу изаћи само из подручја унутар неколико нанометара од површине материјала. Стога, секундарни електрони дају топографске информације са добром резолуцијом (визуализација површинске текстуре и храпавости). Због

њихове ниске енергије до детектора стижу применом преднапона. Топографска слика зависи од броја секундарних електрона који стижу до детектора. Секундарни електрони који на свом путу ка детектору имају препреку генеришу сенку или тамнији део слике. Супротно, подручја која имају несметан пут електрона ка детектору формирају светлији део слике.

Да би се добиле SEM слике, узорак мора бити електрично проводљив на површини, као и електрично уземљен како не би долазило до акумулација наелектрисања. На непроводне материјале обично се се наноси ултратанки слој електропроводног материјала попут злата, платине, хрома или графита. Резолуција SEM микроскопа има вредност око 10 nm [172] а увећања могу бити и до 100000× [173].

3. ЦИЉЕВИ РАДА

Основни циљ истраживања које се спроводи у оквиру ове докторске дисертације огледа се у испитивању утицаја имплантације јона енергије 4 MeV у моду каналисања на структурне промене и степен уређености бН-SiC монокристала. У ту сврху дефинисани су следећи циљеви које је потребно испунити:

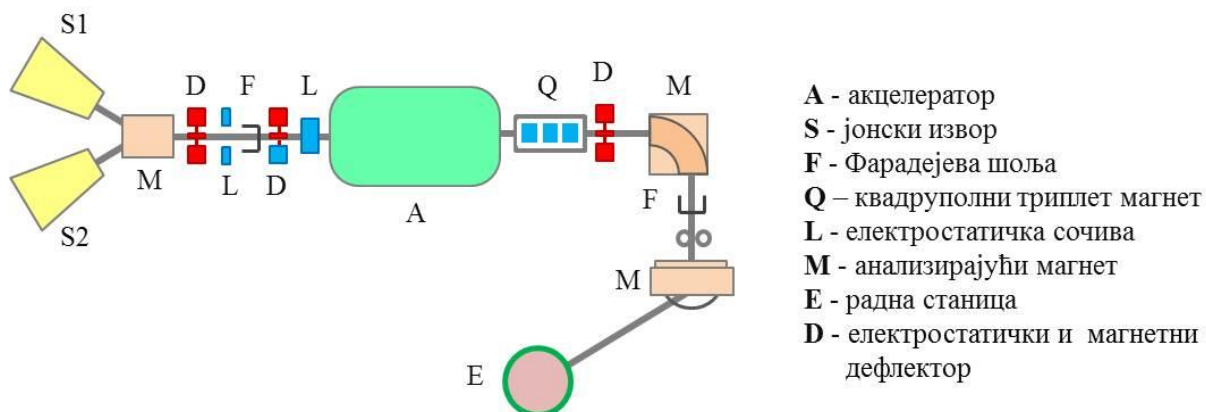
1. *Имплантација јона угљеника и силицијума енергије 4 MeV у моду каналисања у монокристал бН-SiC при [0001] аксијалном правцу.* Имплантацију јона потребно је извршити при неколико различитих флуенаса како би се поред утицаја јона испитао и утицај флуенса имплантираних јона. Додатно, потребно је урадити имплантацију јона и за случајну оријентацију кристала при истим условима. На овај начин ће се проценити разлика у дубини и расподели аморфизације у односу на случај оријентације кристала када се спроводи каналисање.
2. *Карактеризација имплантираних узорака методом EBS/C.* EBS/C методом потребно је испитати дубинску расподелу аморфизације (профил аморфизације) монокристала бН-SiC. Анализу EBS/C спектра потом треба извршити коришћењем унапређене верзије CSIM рачунарског програма. У циљу сагледавања погодности примене CSIM програма тестираће се примена често коришћеног итеративног поступка за анализу снимљених EBS/C спектра.
3. *Карактеризација имплантираних узорака методама SEM и μR .* На попречном пресеку имплантиране зоне кристала потребно је направити SEM фотографију и урадити μR анализу. μR анализу је потребно извршити мапирањем имплантиране зоне у равни нормалној на (0001) раван кристала у циљу добијања профила еволуције карактеристика спектра по дубини. Поредити са SEM резултатима, проверити које карактеристике раманског спектра најбоље описују дубинске профиле аморфизације кристала. Такође, тумачећи промене у раманским спектрима, доћи до закључка о механизму по коме се одвија смањење уређености кристалне решетке током процеса јонске имплантације.
4. *Извршити укритање резултата профила аморфизације добијених помоћу EBS/C, SEM и μR и проверити њихово слагање.* Ово је крајњи и најважнији резултат ове докторске дисертације. Добијени резултати ће уједно потврдити валидност употребе унапређене верзије CSIM рачунарског програма за анализу EBS/C спектра.

4. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА ПОСТАВКА

Експерименти који су довели до резултата представљених у оквиру ове докторске дисертације спроведени су у три фазе:

1. Имплантација јона угљеника и силицијума у моду каналисања у монокристал 6H-SiC (комерцијални, *Cree, Inc.*);
2. Анализа имплантираних узорака помоћу јонских снопова методом еластичног повратног расејања у моду каналисања;
3. Анализа имплантираних узорака методом микро-раманске спектроскопије и скенирајуће електронске микроскопије.

Имплантација јона у моду аксијалног каналисања у монокристал SiC (кристални правац [0001]) извршена је на акцелераторској инсталацији Института Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска. Систем за убрзавање, усмеравање и вођење јонског снопа од извора јона до имплантационе коморе приказан је на слици 16. Као извор јона коришћен је монокатодни SNICS (енгл. *Source of Negative Ions by Cesium Sputtering*) помоћу кога се добијају негативни јони који се усмеравају ка акцелератору (слика 16 – S2). Добијени јони се убрзавају коришћењем 1 MeV HVEE Tandemron акцелератора (тандем линеарни акцелератор, слика 16 – А) чији рад се заснива на Кокрофт–Волтоновом (J. D. Cockcroft, E. T. S. Walton) високонапонском извору. Коришћени колимациони систем се састојао од две апертуре дијаметра 1 mm на удаљености од 25 cm. У комори за имплантацију јона (слика 16 – радна станица E) узорак се поставља на носач гониометра који поседује 5 степени слободe и угаону тачност од 0.01°.



Слика 16. Експериментална линија на Институту Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска.

Пре процеса имплантације извршено је тражење канала кристала, односно поравнавање јонског снопа паралелно кристалографској оси кристала користећи протоне енергије 1 MeV. Позиција кристалних канала одређена је мапирањем повратног расејања протона при промени два степена слободe носача гониометра, азимуталног угла (ротација) и угла нагиба (тилт) кристала. Зависност угла нагиба од азимуталног угла приказује се као дводимензионална блокирајућа шема на којој минимум приноса расејања протона означава центар канала. У датом случају, након оријентационог мапирања, извршено је прецизније мапирање регије око канала у опсегу од $3^\circ \times 3^\circ$, и добијена је блокирајућа шема резолуције $32\text{px} \times 32\text{px}$.

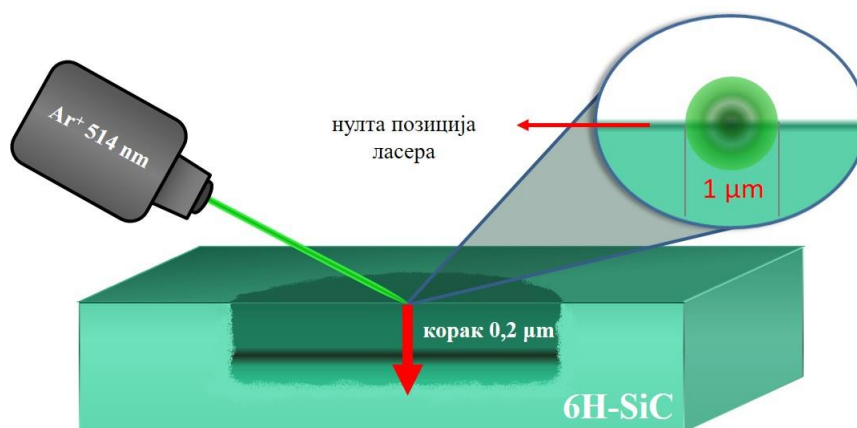
У узорак 6H-SiC оријентације (0001) и дебљине 330 μm имплантирани су јони угљеника (C^{3+}) и силицијума (Si^{3+}) енергије 4 MeV у моду аксијалног каналисања дуж [0001] правца. Површина имплантираног дела кристала SiC износила је $1 \times 1 \text{ mm}^2$. Струја снопа на узорку није прелазила 9 nA како би се избегло прегревавање мете. Имплантација је извршена употребом неколико различитих флуенаса чије су вредности приказане у табели 4.

Табела 4. Карактеристике имплантације узорка.

Ознака мете	Врста јона	Енергија јона [MeV]	Мод имплантације	Флуенс [$\times 10^{15}$ честица \cdot cm $^{-2}$]
M-N	/	/	Неимплантиран	/
M(C-m)2	C $^{3+}$	4	Каналисање	6,74
M(C-h)3	C $^{3+}$	4	Каналисање	20,2
M(C-l)4	C $^{3+}$	4	Каналисање	1,35
M(Si-h)5	Si $^{3+}$	4	Каналисање	9,17
M(Si-m)6	Si $^{3+}$	4	Каналисање	4,17
M(Si-m)7	Si $^{3+}$	4	Случајна оријент.	4,17
M(Si-l)8	Si $^{3+}$	4	Каналисање	0,833
M(Si-l)9	Si $^{3+}$	4	Каналисање	0,417

*Ознака M(A-d)b: A – имплантирани јон; d – ознака за дозу, l – најнижи (енгл. *lowest*), ll – низак (енгл. *low*), m – средњи (енгл. *medium*), h – највиши (енгл. *highest*); b – редни број узорка.

Након имплантације 6H-SiC извршена је EBS/C анализа узорка коришћењем протона енергије 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV. Анализа је спроведена у истој комори као и имплантација. Струја на узорку није прелазила 8 nA. EBS/C спектри снимљени су коришћењем SSB детектора (енгл. *Surface Barrier Detector*) који је постављен под углом од 160° у односу на правац упадног јонског снопа. Добијени спектар представља зависност броја повратно расејаних јона од енергије детектованих јона. Сви спектри нормирани су у односу на укупан број детектованих повратно расејаних јона.



Слика 17. Илустрација мапирања имплантиране регије 6H-SiC кристала μ R спектроскопијом.

Даља карактеризација узорка вршена је методама μ R спектроскопије и SEM микроскопије у Националном техничком институту у Атени (NTUA). Спектри раманског расејања снимљени су коришћењем Jobin-Yvon T64000 троструког спектрометра опремљеним CCD камером хлађеном течним азотом. За побуђивање спектра коришћен је Ar $^{+}$ гасни лазер таласне дужине 514,5 nm чија снага није прелазила 0,6 mW како би се избегло оштећење узорка које зрачење дате таласне дужине може узроковати. Упадни лазерски сноп фокусиран је на узорак употребом објектива са увећањем 100 \times . За посматрање узорка и фокусирање снопа коришћен је рефлексиони оптички микроскоп са вертикалним илуминатором (Olympus BHU-UMA). Узорак је посматран при микроскопској конфигурацији тамног поља. Након фокусирања лазерски сноп је имао пречник око 1 μ m. Прикупљање спектра вршило се на попречном пресеку кристала који је пресечен дуж геометријског центра озраченог дела узорка (слика 17). Мапирање узорка спроведено је по дубини дуж линије нормално на површину узорка са кораком од 0,2 μ m. Пре експеримента мапирања узорка инструмент је калибрисан

коришћењем кристала силицијума као стандарда и траке на 520,7 nm. На крају, део узорака је карактеризован помоћу SEM микроскопије користећи инструмент NanoSEM 230.

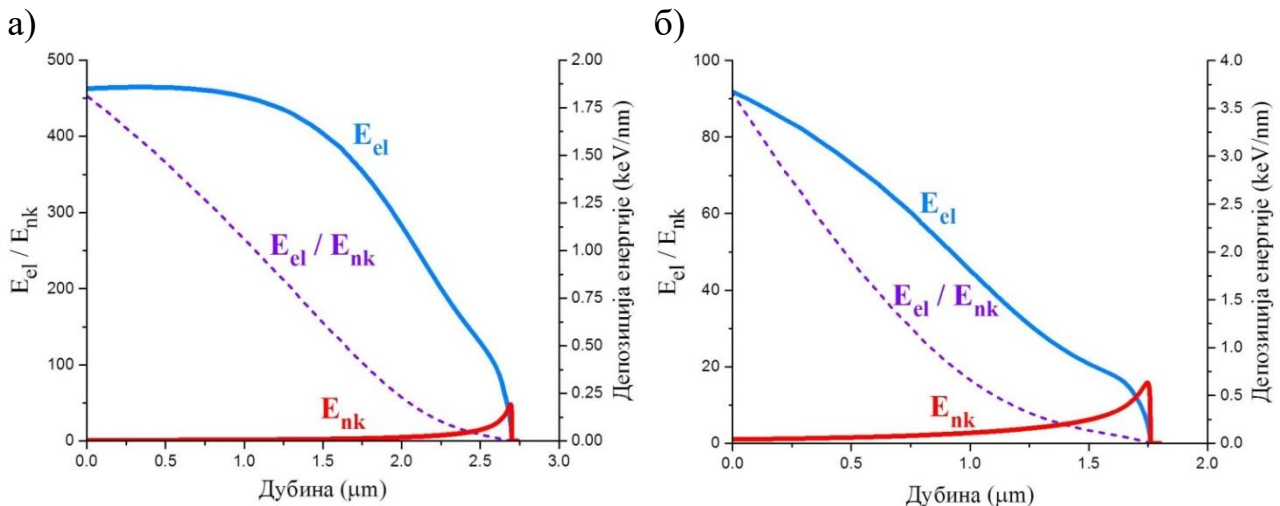
Резултати су обрађени коришћењем неколико софтверских пакета: EBS/C спектри обрађивани су коришћењем OriginLab при манипулацији података и креирање слика и CSIM програмског пакета којим су сирови подаци фитовани и добијани профили аморфизације; за анализу раманских спектра коришћени су OriginLab за манипулацију података и креирање слика као и програмски пакет Crystal помоћу кога су фитовани спектри; за добијање дубинског профила SEM слика коришћен је MatLab програмски пакет; илустративне слике креиране су коришћењем програмских пакета PhotoShop и Microsoft Power Point. Профили аморфизације структуре који се добијају имплантацијом при случајној оријентацији кристала симулирани су коришћењем програмског пакета SRIM бирањем TRIM (*The Transport of Ions in Matter*) опције калкулација при *Detailed Calculation with full Damage Cascades* рачунању аморфизације структуре.

5. РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА

На самом почетку поглавља приказани су резултати симулације процеса имплантације јона угљеника и силицијума у SiC при случајној оријентацији кристала. Ови резултати су битни за боље разумевање експериментално добијених резултата и њихово поређење. Након тога следи дискусија о процесу експерименталног добијања жељене оријентације кристала која је коришћена за имплантацију јона. Утицај имплантираних јона угљеника и силицијума у моду каналисања на структуру 6H-SiC испитан је коришћењем неколико експерименталних метода: EBS/C, SEM и μR . Резултати истраживања добијени помоћу датих метода и дискусија о добијеним резултатима су приказани у овом поглављу.

5.1. SRIM симулација имплантације јона

Симулација процеса имплантације јона при случајној оријентацији кристала извршена је коришћењем SRIM рачунарског програма. Коришћена густина кристала мете SiC приказана је у табели 1, док су остали параметри потребни за рачунање (енергија и врста јона) исти као у експерименталном делу. На слици 18 приказана је зависност вредности електронских и нуклеарних енергијских губитака (E_{el} и E_{nk}) јона угљеника (слика 18а) и силицијума (слика 18б) енергије 4 MeV имплантираних у кристал SiC од дубине узорка. Додатно, приказана је и промена њиховог односа (E_{el}/E_{nk}). Услед веће масе јона силицијума, енергија се брже предаје кристалној решетки, што за последицу има заустављање јона на мањим дубинама. Ако упоредимо вредности E_{el} на почетку путање јона видећемо да су код силицијума ($3,6 \text{ keV}\cdot\text{nm}^{-1}$) два пута веће у односу на угљеник ($1,8 \text{ keV}\cdot\text{nm}^{-1}$). Слично важи и за E_{nk} с тим што је разлика већа, десет пута ($0,005 \text{ keV}\cdot\text{nm}^{-1}$ код угљеника и $0,050 \text{ keV}\cdot\text{nm}^{-1}$ код силицијума). У оба случаја, а посебно при процесу имплантације јона угљеника, електронски енергијски губици чине доминантан механизам успоравања јона дуж већег дела њихове путање. За јоне угљеника однос E_{el}/E_{nk} је већи од 100 све до дубине од $1,75 \mu\text{m}$ (у површинском делу узорка однос је већи од 400). Код силицијума овај однос је знатно нижи и увек мањи од 100, због знатно израженијих нуклеарних губитака.

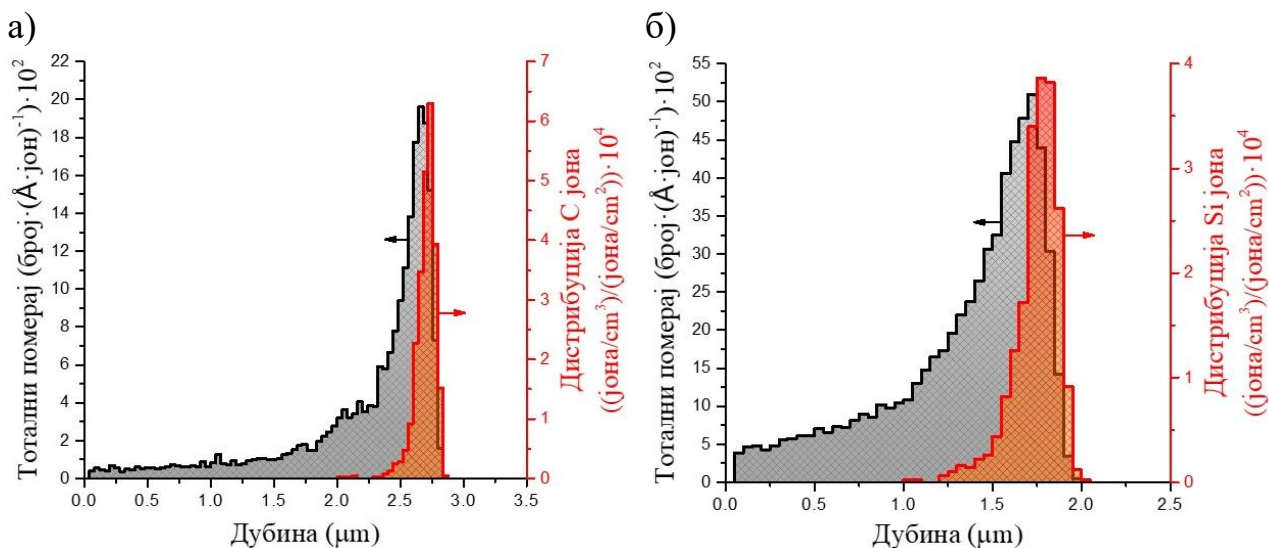


Слика 18. Промена вредности електронских (E_{el}) и нуклеарних (E_{nk}) енергијских губитака јона као и њихов однос (E_{el}/E_{nk}) са дубином SiC за случај имплантације јонима а) угљеника и б) силицијума енергије 4 MeV.

Преносом довољне количине кинетичке енергије током процеса расејања на језгрима мете (енергија помераја, енгл. *displacement energy* – E_{disp}), долази до измештања атома из њихових позиција у кристалној решетки и последично до њене аморфизације. Супротно, услед изразитог процеса електрон-фононског купловања код керамичких материјала (SiC), пренос

енергије са јона на електроне мете може довести до процеса динамичке рекристализације [174]. На основи закључака из истраживања Наколса (L. Nuckols) и сарадника, резултати са слике 18 показују да електронски губици ни у једном сегменту путање нису довољни за супресију аморфизације настале као последица нуклеарних губитка [97]. Наиме, према Наколасу, за рекристализацију кристалне решетке SiC минимална гранична вредност електронских губитака износи $1,86 \text{ keV} \cdot \text{nm}^{-1}$ за јоне угљеника (гранични E_{el}/E_{nk} износи 404) односно $5,02 \text{ keV} \cdot \text{nm}^{-1}$ за јоне силицијума (гранични E_{el}/E_{nk} износи 403). Међутим, вредности са слике 18а за јоне угљеника су јако блиске граничним за узак површински регион (до око 250 nm).

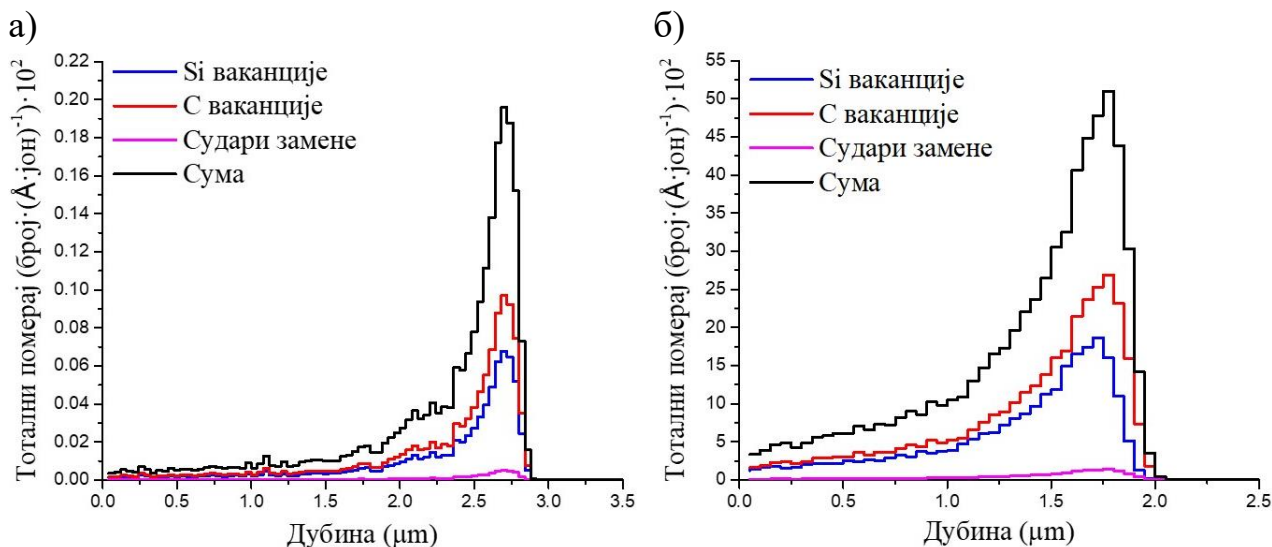
На слици 19 приказани су графици расподеле имплантираних јона као и профил „аморфизације“ кристалне решетке SiC-а проузроковане процесом имплантације јона угљеника (слика 19а) и силицијума (слика 19б), симулирани SRIM програмом. Под SRIM профилем аморфизације подразумева се укупни број помераја атома мете изазван процесом имплантације јона. Узимањем у обзир и флуенса, може се израчунати број помераја атома мете по имплантираном јону (dpa) [175]. Са графика се може уочити да се максимум профила расподеле јона налази на $2,74 \mu\text{m}$ за јоне угљеника односно на $1,77 \mu\text{m}$ за јоне силицијума. Полуширина профила расподеле угљеника износи 150 nm, док та вредност код силицијума износи 200 nm. Профили аморфизације у односу на профиле расподеле јона показују већу асиметричност и ширину. Такође, максимуми профила аморфизације су незнатно померени ка мањим дубинама, $2,69 \mu\text{m}$ за случај имплантације угљеника и $1,67 \mu\text{m}$ за случај имплантације силицијума. Поред тога што јони силицијума имају мањи домет, они показују и већи степен аморфизације SiC-а на мањим дубинама, ближе површини кристала. Ово је последица израженијих нуклеарних губитака током имплантације јона силицијума, што за последицу има пораст учестаности директних судара јона са атомима мете.



Слика 19. Дубинска расподела имплантираних јона и броја помераја атома кристалне решетке у случају имплантације јонима а) угљеника и б) силицијума енергије 4 MeV.

Аморфизација симулирана коришћењем SRIM програма подразумева збир два доприноса, ваканције јона угљеника и силицијума као и судара замене. Судари замене подразумевају процес када се покретни јон судара са идентичним атомом решетке, преноси количину енергије већу од енергије потребне за избијање тог атома из његове позиције у решетки, али нема довољно енергије да и сам напусти то место. Такође, симулирана аморфизација може се приписати збиру интерстицијалних дефеката и броја атома који су напустили запремину кристалне решетке услед процеса ерозије површине (енгл. *sputtering*). Битно је нагласити да у симулацију нису узети у обзир ефекти рекомбинације дефеката. Доприноси сваког процеса за случај имплантације јона угљеника и силицијума енергије 4 MeV

у структури SiC-а приказани су на слици 20. Са слике се може уочити да у оба случаја имплантације настаје већи број ваканција угљеника. Разлог за овакво понашање може се потражити у вредностима енергије помераја атома која према литературним подацима за угљеник износи 20 eV, док за атоме силицијума износи 35 eV у кристалу SiC [97].

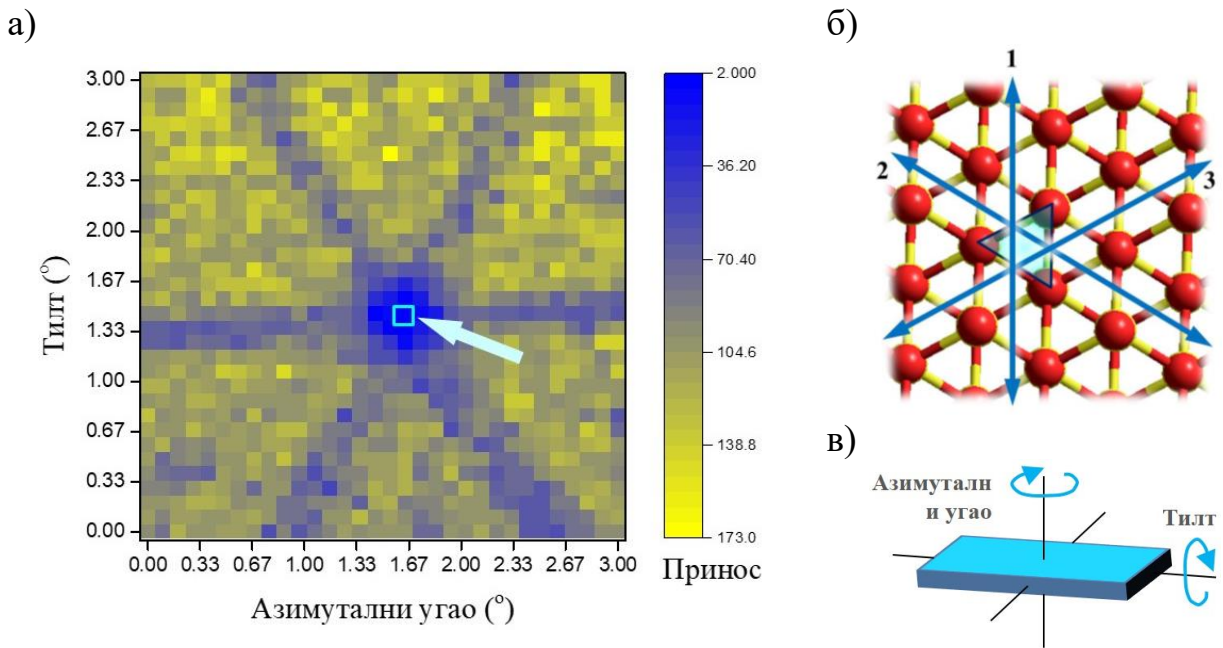


Слика 20. Различити доприноси SRIM профилу аморфизације SiC-а у случају имплантације јонима а) угљеника и б) силицијума енергије 4 MeV.

5.2. Имплантација јона у моду каналисања

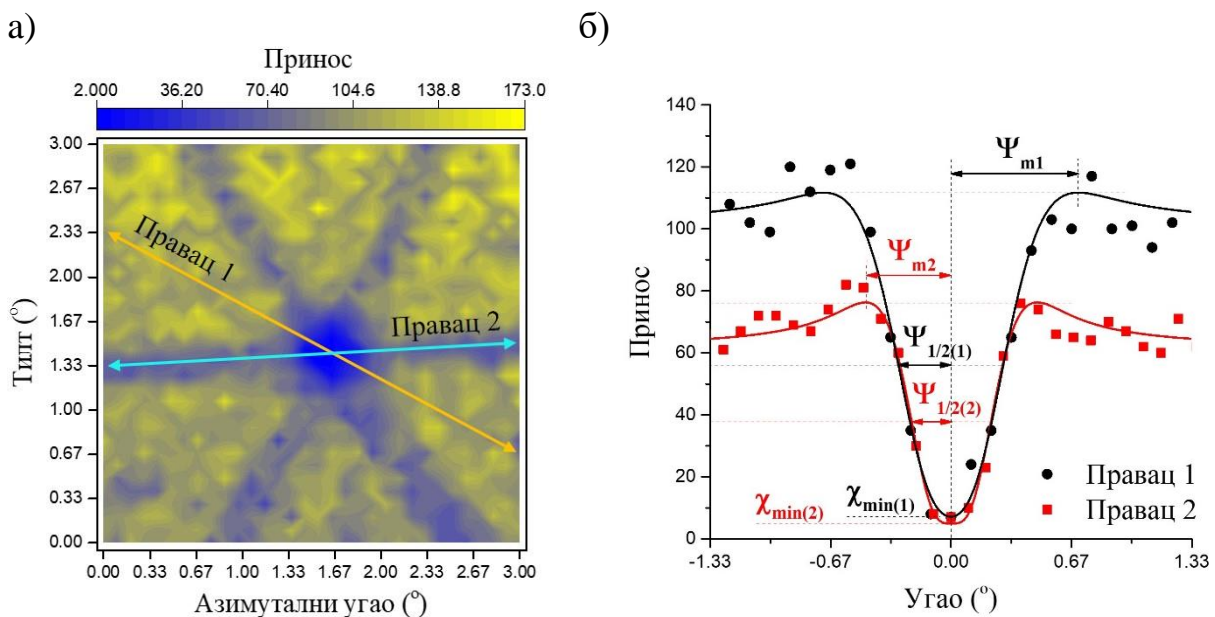
Пре процеса имплантације јона угљеника и силицијума и снимања спектра повратно расејаних протона у моду каналисања, било је потребно пронаћи одговарајући кристални канал при којем ће јонска имплантација и EBS/C анализа бити извршене ([0001] правац у нашем случају). Тражење канала кристала извршено је снимањем блокирајуће мапе која представља 2D расподелу приноса повратног расејања јона при различитим међусобним оријентацијама јонског снопа и кристала. Блокирајућа мапа омогућава увид у позиције планарних и аксијалних канала кристала. На слици 21а приказана је блокирајућа мапа кристала 6H-SiC добијена детекцијом повратно расејаних протона енергије 1 MeV при промени азимуталног угла у зависности од нагиба (тилта) кристала (слика 21в).

Добијена блокирајућа мапа величине $3^\circ \times 3^\circ$ има резолуцију од $32\text{px} \times 32\text{px}$. Сваки пиксел представља принос повратно расејаних протона за исто укупно наелектрисање које падне на кристал, измерен за одређену оријентацију мете (азимутални угао и нагиб) у односу на јонски (протонски) снап. Интензитет повратно расејаних протона дат је различитим бојама. Плава боја означава правце при којима је принос повратно расејаних јона низак, док жута означава правце при којима је принос повратно расејаних протона висок (скала промене боје у зависности од приноса дата је на слици 21а). На слици 21б приказан је модел кристалне решетке 6H-SiC у равни (0001). Са слике 21б може се запазити да су аксијални кристални канали у датом симетријском правцу троугаоног облика (наглашено на слици). На слици 21б истакнути су правци при којима ће принос повратног расејања бити редукован, плаве стрелице 1, 2 и 3, које дефинишу кристалографске равни 6H-SiC. Блокирајућа мапа са слике 21а има звездаст облик сачињен од три плаве линије које указују на кристалографске равни кристала. У њиховом међусобном пресеку налази се минимум приноса расејања, односно [0001] канал кристала 6H-SiC-а. Стога, сет параметара азимуталног угла и нагиба из центра плаве области блокирајуће мапе (означени пиксел са слике 21а) изабран је за правац [0001] канала при којем је извршена јонска имплантација и EBS/C. Слична блокирајућа мапа за (0001) раван 6H-SiC кристала добијена је мерењем β^- зрачења (емисионо каналисање) имплантираних радиоактивних изотопа прелазних метала [176].



Слика 21. а) Блокирајућа мапа кристала 6H-SiC у близини [0001] канала; б) кристал 6H-SiC у равни (0001) уз означени облик канала и симетријске правце значајне за добијање блокирајуће мапе; в) начин ротације кристала.

Зависности приноса повратно расејаних јона, χ , у односу на оријентацију кристала, ψ , за два арбитарно изабрана правца са блокирајуће шеме (правац 1 и правац 2, слика 22а) приказане су на слици 22б. Правац 1 подразумева правац који одступа од симетријских линија блокирајуће мапе док се правац 2 поклапа са једном од симетријских линија блокирајуће мапе. Параметри профила са слике 22 приказани су у табели 5. У оба случаја, опсег углова за који је принос испод вредности $\chi_{1/2}$ је мањи од $0,28^\circ$. Минимуми приноса имају вредности мању од 7,8% максималне. Додатно, профил правца 1 показује знатну редукцију приноса у односу на правац 2 за 42%.



Слика 22. а) Блокирајућа мапа кристала 6H-SiC за оријентације кристала блиске [0001] симетријском правцу у контурном облику са приказаним разматраним правцима (1 и 2) и б) зависности приноса повратно расејаних јона за правце 1 и 2.

Табела 5. Параметри профила са слике 22б, специфична ширина профила (Ψ_m), полуширина профила ($\Psi_{1/2}$) и минимални принос профила (χ_{\min}).

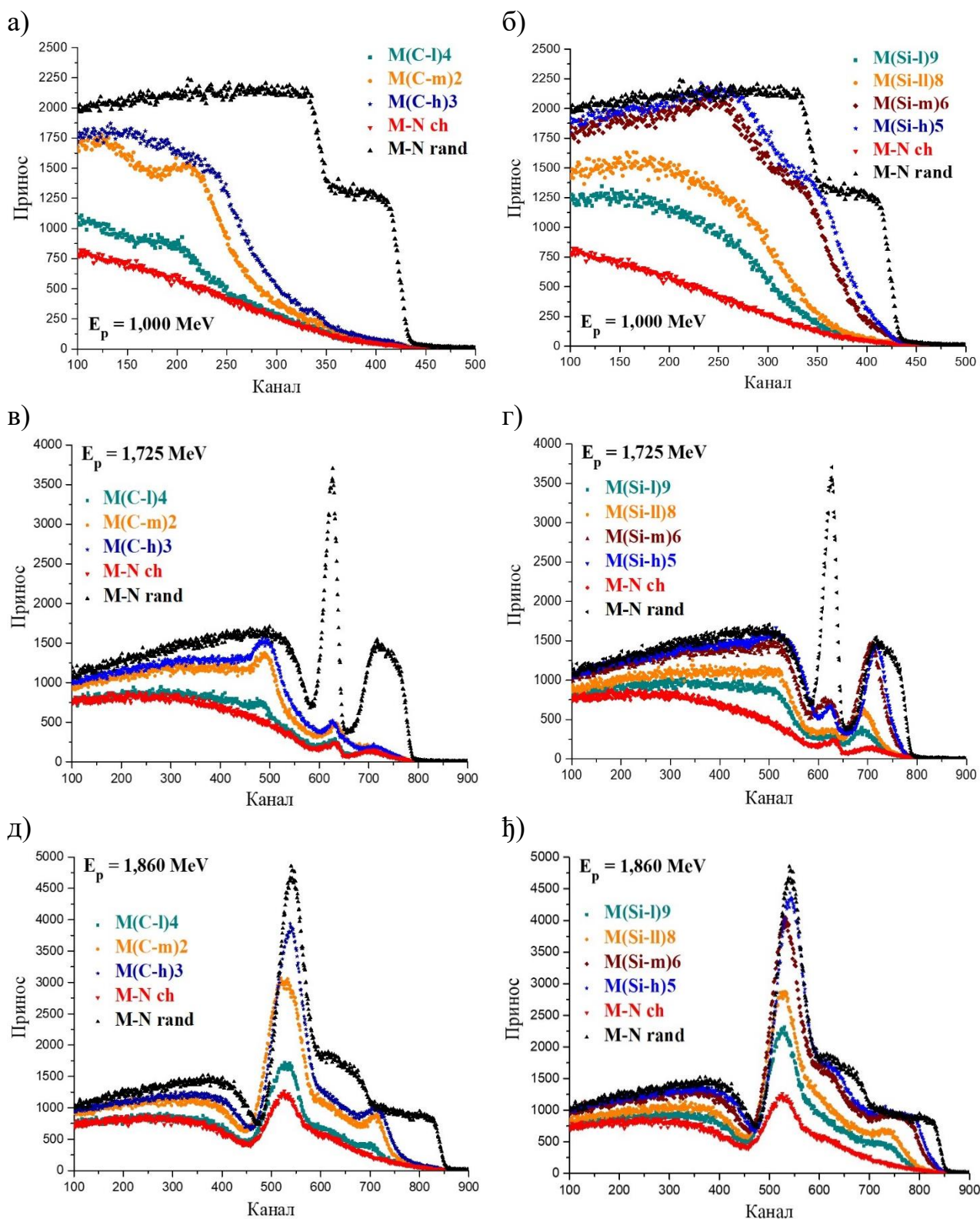
Правец	Ψ_m [°]	$\Psi_{1/2}$ [°]	χ_{\min}
1	0,70	0,28	0,066
2	0,48	0,20	0,078

5.3. Спектрометрија еластичног повратног расејања у моду каналисања

На слици 23а–ђ приказани су EBS/C спектри имплантираних узорака 6H-SiC снимљених протонима различитих енергија коришћених у анализи. Додатно, на сликама се налазе и EBS и EBS/C спектри неимплантираног узорка. Спектри су приказани у изворном облику у којем се добијају након аквизиције података са детектора, сходно томе апсциса је изражена каналима детектора. У сваком од канала детектора сакупљају се повратно расејани јони одређеног опсега енергије. Стога, један од првих корака у обради EBS и EBS/C спектра јесте енергијска калибрација њихових апсциса, односно повезивање канала детектора са енергијама детектованих повратно расејаних јона.

На слици 23а приказани су спектри узорака имплантираних јонима угљеника ($M(C-m)2 - 6,74 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$, $M(C-h)3 - 20,2 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$, $M(C-l)4 - 1,35 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$), а на слици 23б спектри узорака имплантираних јонима силицијума ($M(Si-h)5 - 9,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$, $M(Si-m)6 - 4,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$, $M(Si-l)8 - 8,33 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$, $M(Si-l)9 - 4,17 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$) добијени помоћу протона енергије 1 MeV. У оба случаја може се запазити јасан тренд повећања приноса процеса повратног расејања са порастом имплантираног флуенса јона. Додатно, са повећањем флуенса приноси спектра са приближавају вредности која се запажа код EBS спектра неимплантираног узорка (M-N rand). Полазећи од EBS/C спектра неимплантираног узорка (M-N ch) који поседује низак принос процеса повратног расејања, може се закључити да је коришћени монокристал високог квалитета и да је канал [0001] оријентације успешно пронађен. Повећањем флуенса имплантираних јона долази до увећања броја дефеката у кристалној решетки, односно до пораста степена њене аморфизације, што за последицу има умањење удела каналисаних јона. Последишно, пораст броја деканалисаних јона доводи до већег расејања на атомима кристалне решетке и већег одзива у спектру. Уколико је кристална решетка потпуно аморфизована, EBS/C спектар се изједначава са EBS спектром неимплантираног узорка. Стога, при анализи аморфизације, EBS спектром неимплантираног узорка (M-N rand) симулира се потпуно аморфизована структура.

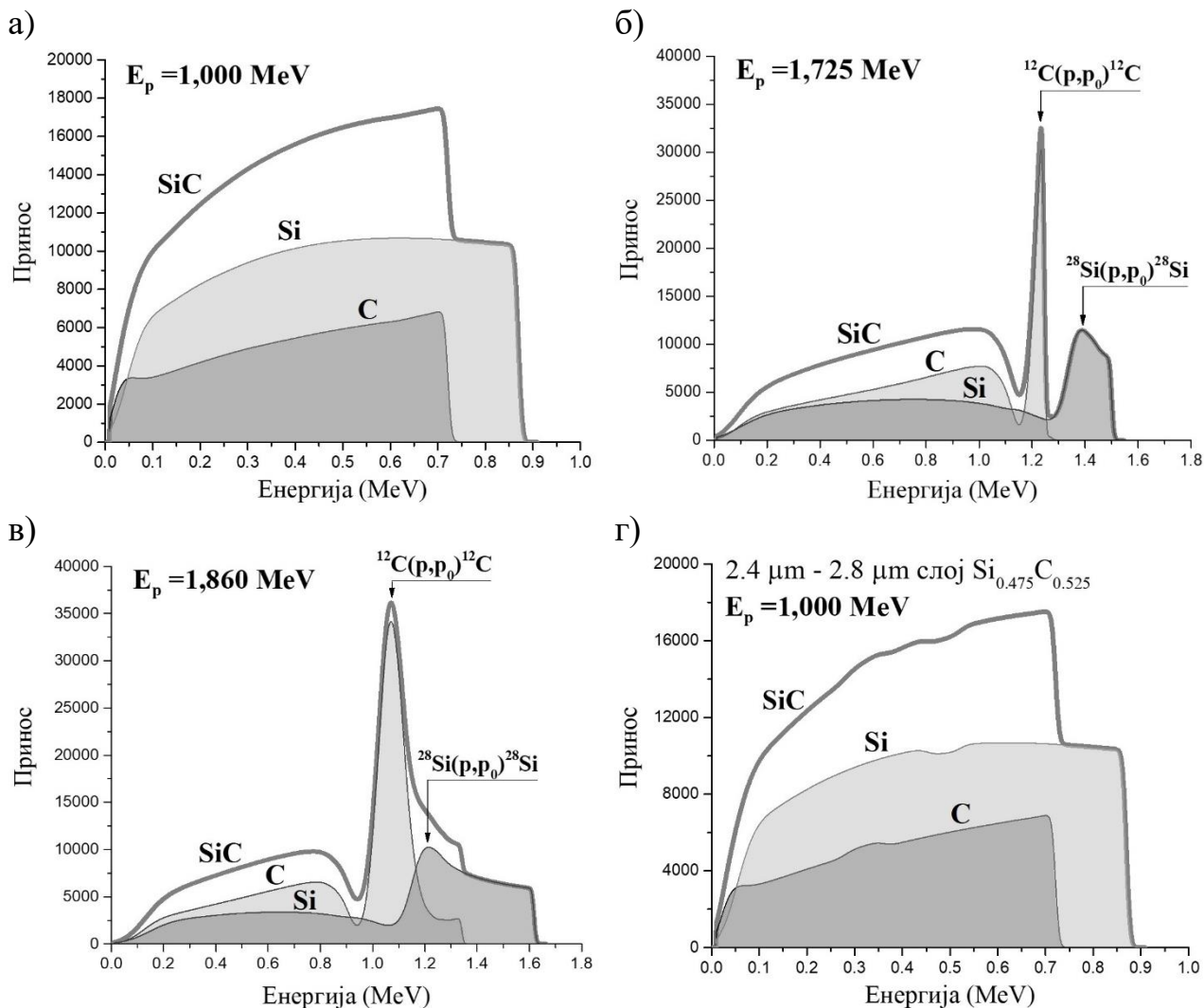
На основу претходних разматрања, упоређивањем резултата са слике 23а и б квалитативно се може закључити да јони угљеника чак и при вишим флуенсима доводе до нижег степена аморфизације кристалне решетке у односу на јоне силицијума. Ако упоредимо узорке 6H-SiC имплантиране јонима угљеника флуенса $1,35 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ ($M(C-m)2$) и јонима силицијума флуенса $4,17 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ ($M(Si-l)8$), може се видети да при три пута нижем флуенсу јони силицијума доводе до знатно веће аморфизације кристала. Разлог за овакво понашање може се потражити у чињеници да је јон силицијума више од два пута веће масе од јона угљеника, односно у израженијим нуклеарним енергијским губицима. Слична квалитативна разматрања везана за степен аморфизације аналогно се могу применити и на спектре са слике 23в–ђ.



Слика 23. EBS и EBS/C спектри имплантираних и неимплантираних узорака 6H-SiC.

Један од најчешће коришћених програмских пакета за екстракцију информација садржаних у RBS и EBS спектрима, као и за симулацију истих, јесте SIMNRA. Да бисмо извршили асигнацију карактеристика добијених EBS и EBS/C спектра, помоћу програмског пакета SIMNRA симулирано је добијање EBS спектра SiC коришћењем снопа протона енергије 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV при углу од 160° и резолуцији детектора од 15 keV (параметри који су коришћени у експериментима). За енергијску калибрацију узето је 1 keV по каналу детектора. Резултати су приказани на слици 24а-в. На слици 24а приказан је

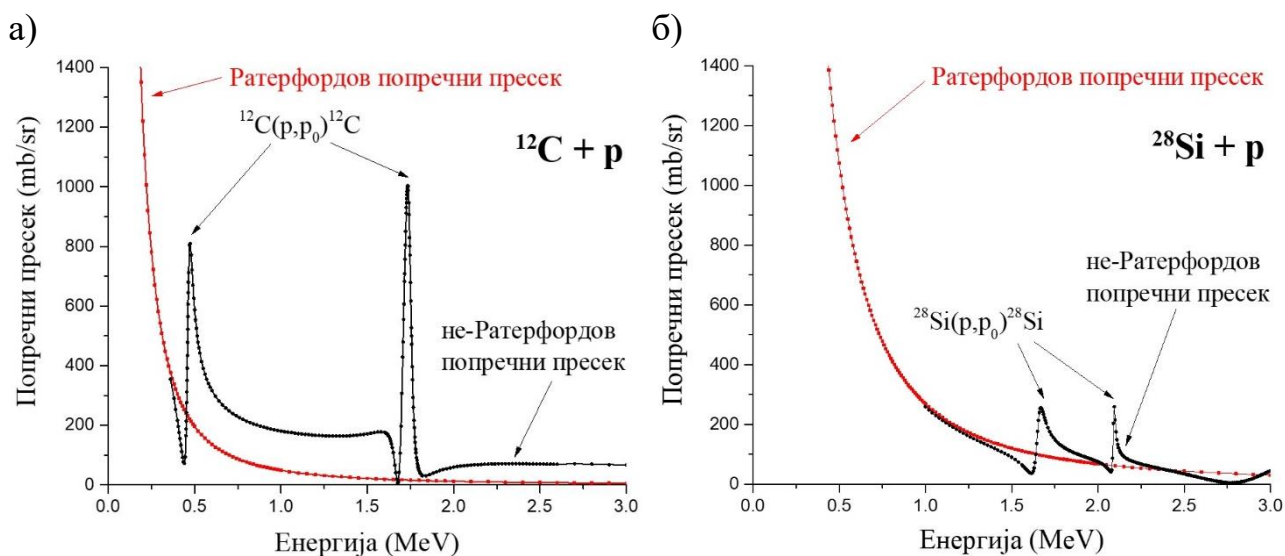
EBS спектар SiC као збир појединачних доприноса спектра угљеника и силицијума. На основу вредности кинематичког фактора за дате елементе, почетак спектра (што одговара површини узорка) силицијума налази на вишим енергијама у спектру, односно протони повратно расејани на атомима силицијума имају више енергије од протона расејаних на атомима угљеника. Поред тога, са слике 24а може се уочити да спектар угљеника има мањи принос, што је последица разлике у вредностима попречног пресека расејања јона.



Слика 24. Симулирани EBS спектри SiC добијени коришћењем SIMNRA програмског пакета. Неимплантирани спектри SiC снимљени помоћу протона енергије а) 1,000 MeV, б) 1,725 MeV и в) 1,860 MeV; г) EBS спектар SiC са стехиометријом $\text{Si}_{0.475}\text{C}_{0.525}$ на дубини 2,4 μm до 2,8 μm .

На симулираним спектрима са слике 24б и в добијеним за више енергије анализирајућег протонског снопа запажају се пикови који су последица нуклеарних реакција на резонантним енергијама. На слици 25 приказана је зависност Ратерфордовога и не-Ратерфордовога попречног пресека за расејање протона на атомима угљеника и силицијума. Са слике 25 се може видети да при енергијама од 0,500 MeV и 1,667 MeV нуклеарна реакција између протона и језгра угљеника, $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$, има резонанцу, док је у случају нуклеарне реакције између протона и језгра силицијума, $^{28}\text{Si}(p,p_0)^{28}\text{Si}$, резонантно расејање при енергији протона од 1,731 MeV. На симулираним спектрима са слике 24б и в јасно се издваја пик који доминира и приписује се $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$ резонанци на енергији од 1,667 MeV. Резонантни пик који потиче од $^{28}\text{Si}(p,p_0)^{28}\text{Si}$ нуклеарне реакције на 1,731 MeV се може уочити, али је знатно нижег интензитета, док се

резонантни пик $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$ нуклеарне реакције на 0,500 MeV не запажа у спектру у облику јасно уочљивог пика.



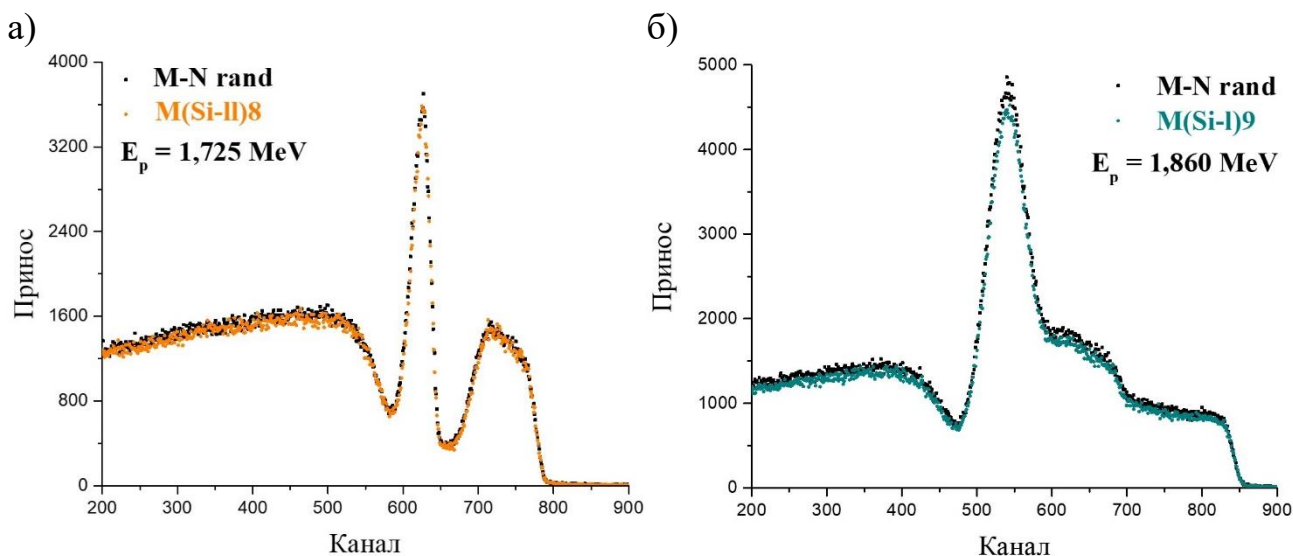
Слика 25. Зависност Ратерфордовога и не-Ратерфордовога попречног пресека за расејање протона на атомима угљеника и силицијума од енергије протона.

Дубина кристала повезана је са енергијом, односно бројем канала детектора повратно расејаних јона. Почети спектра (више енергије у спектру) сваког од елемената везани су за стање на површини испитиваног материјала, док се идући ка нижим бројевима канала детектора (ниже енергије) дубина повећава. На основу датог разматрања и спектра са слике 23 може се закључити да површински регион кристала показује знатно мањи пораст приноса повратног расејања у односу на веће дубине. Ово је посебно изражено у случају имплантације јонима угљеника на слици 23а. То указује да је кристал знатно мање аморфизован у површинском региону. У случају најнижег флуенса угљеника, спектар указује да је кристал у површинском региону практично непромењен, на шта поклапање са спектром неимплантираног кристала (црвена линија) указује. Са порастом флуенса степен аморфизације кристалне решетке на мањим дубинама расте, што је најуочљивије на слици 23б.

Као што је већ објашњено, за симулирање радијационог оштећења кристала најчешће се користе јони атома конституената кристала. Стога, очекивало би се да ће додатни принос у EBS/C спектрима као последица имплантације јона, бити збир интерстиција насталих померањем атома кристалне решетке и интерстиција самих имплантираних јона. Утицај уноса јона процесом имплантације на EBS спектар симулиран је помоћу SIMNRA програма и приказан на слици 24г. У региону између 2,4 μm и 2,8 μm додато је 5% више атома угљеника у односу на атоме силицијума ($\text{Si}_{0,475}\text{C}_{0,525}$). Са слике се види да се при датом процентуалном увећању атома угљеника у EBS спектру не увиђају драстичне промене. Будући да највећи имплантирани флуенс у нашем случају (табела 4) резултира концентрацијом имплантираних јона која је мања од 0,5% атомске концентрације кристала SiC у имплантираној области (десет пута мање него у симулираном случају), додатни принос расејања протона током EBS који потиче од имплантираних јона угљеника и силицијума се може занемарити. Као последица тога, додатни принос расејања забележен у EBS/C спектрима може се у потпуности приписати расејању само на помереним атомима кристалне решетке (интерстицијума).

За два узорка имплантирана јонима силицијума (M(Si-II)8 и M(Si-I)9) снимљени су EBS спектри. Спектар за узорак M(Si-II)8 снимљен је коришћењем протона 1,725 MeV док су за узорак M(Si-I)9 коришћени протони енергије 1,860 MeV. Упоредни приказ датих спектра са EBS спектрима неимплантираних узорка приказан је на слици 26. Процес имплантације при флуенсима $8,33 \times 10^{14}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ (узорак M(Si-II)8) и $4,17 \times 10^{14}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ (узорак M(Si-I)9) не

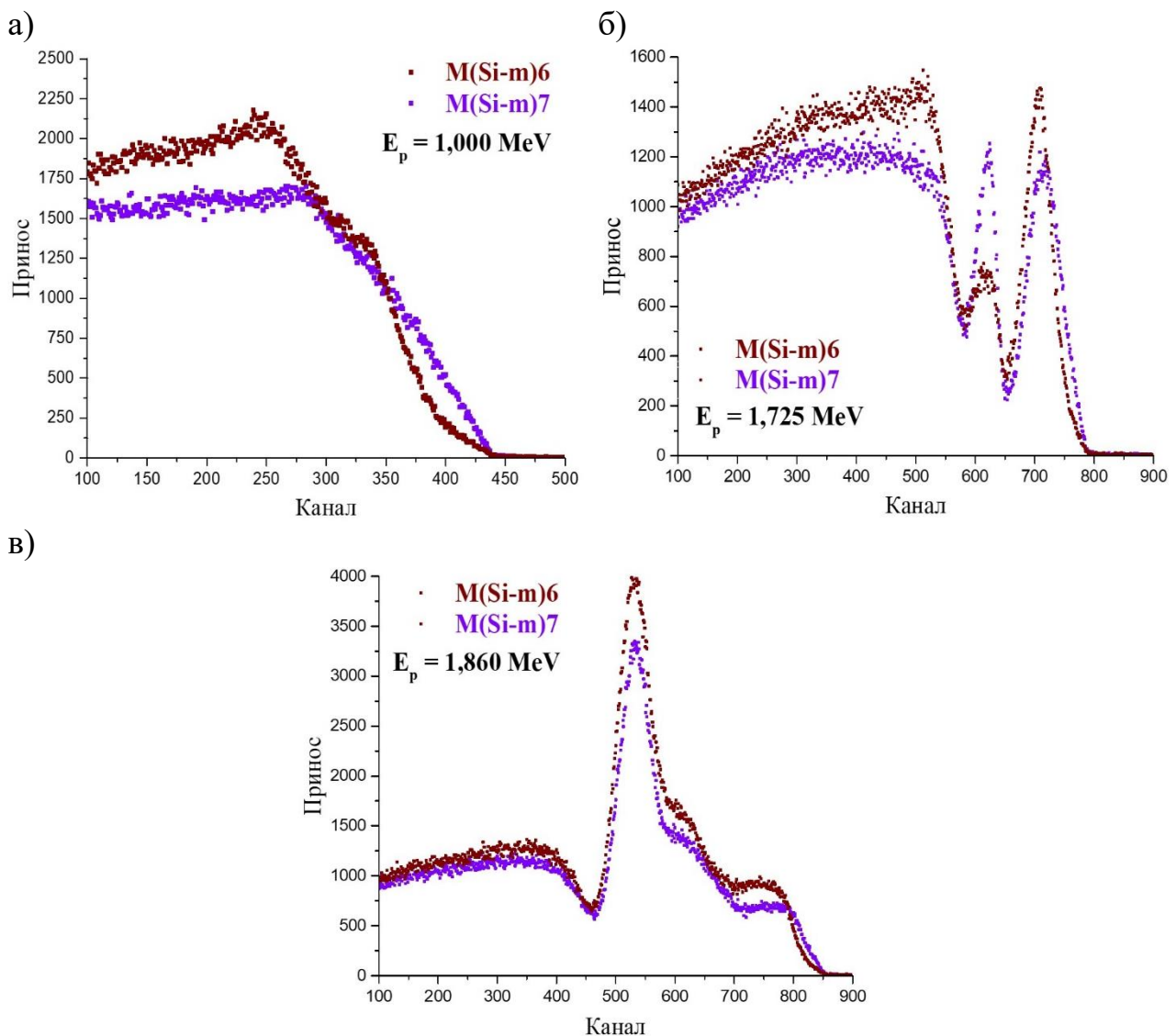
доводи да видљивих промена у спектрима. Супротно, EBS/C спектри за исте узорке (слика 23г и њ) показују драстичну промену у односу на EBS/C спектар неимплантираног узорка. То указује на осетљивост и погодност методе за испитивање аморфизације структуре.



Слика 26. Поређење EBS спектра за узорке а) M(Si-II)8 и б) M(Si-I)9 са EBS спектрима неимплантираних узорака при различитим енергијама протона.

На слици 27а–в приказани су EBS/C спектри имплантираних узорака истим флуенсом $4,17 \times 10^{14}$ јона cm^{-2} , али при различитим оријентацијама кристала, при случајној оријентацији (M(Si-m)7) и у моду каналисања (M(Si-m)6). У случају јонске имплантације у моду каналисања, очекује се различита дубинска расподела аморфизације у односу на имплантацију при случајној оријентацији кристала. Анализирајући јон са различитим вредностима енергије стиже до аморфизованих делова решетке за ова два случаја јонске имплантације, што за последицу има различите вредности попречних пресека за расејање. Као последица тога, необрађени EBS/C спектри имплантираних узорака при различитој оријентацији кристала бивају неадекватни за квалитативну анализу разлика у датим процесима имплантације. Ипак, у блископовршинском слоју разлика енергијских губитака се може занемарити. Поредићи разлике на спектрима узорака M(Si-m)6 и M(Si-m)7 са слике 27а–в уочава се да узорак M(Si-m)7 имплантиран при случајној оријентацији кристала у површинском региону поседује знатно већи принос. С тим у вези, можемо тврдити да површински регион кристала 6H-SiC након имплантације при случајној оријентацији кристала поседује већи степен аморфизације у односу на имплантацију у моду каналисања.

Међусобним поређењем EBS/C спектра имплантираних узорака са EBS/C и EBS спектрима неимплантираних узорака могуће је направити квалитативну процену који од узорака има већи степен аморфизације. Такође, за блископовршински регион (неколико стотина nm) могуће је проценити и квантитативно о којој мери аморфизације је реч. Међутим, за добијање профила аморфизације дуж целе имплантиране дубине (у овом случају неколико μm) потребно је софтверски обрадити спектре. У ту сврху коришћен је CSIM рачунарски програм који се користи за симулацију аморфне фазе на основу EBS/C спектра.



Слика 27. EBS/C спектри узорка (M(Si-m)6) и (M(Si-m)7) који су имплантирани истим флуенсом $4,17 \times 10^{14}$ јона cm^{-2} али при различитим оријентацијама кристала, снимљени протонима енергије а) 1,000 MeV, б) 1,725 MeV и в) 1,860 MeV.

5.4. CSIM рачунарски програм

EBS/C спектри имплантираних узорка 6H-SiC фитовани су коришћењем CSIM рачунарског програма заснованог на феноменолошком приступу који је развијен у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, Института од националног значаја за Републику Србију [121]. Поред EBS/C спектра, CSIM има могућност симулирања и RBS/EBS спектра. Рачунарски програм је написан употребом C++ објектно оријентисаног програмског језика. У оквиру израде ове докторске дисертације уведена су значајна побољшања рачунарског програма. Као резултат тога успешно су фитовани EBS/C спектри монокристала 6H-SiC имплантирани јонима угљеника и силицијума.

CSIM рачунарски програм дели мету-кристал на рачунајуће слојеве чија се дебљина може подешавати. Дебљина компјутационог слоја утиче на тачност добијених резултата и на рачунарско време. Смањењем дебљине слоја повећава се тачност, али се продужава рачунарско време, и обрнуто. Као улазне параметре мете програм узима информације о броју, врсти и стехиометрији атома присутних уз мануелно подешавање вредности густине мете. У овом случају коришћена је вредност густине од $3,21 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Јонски снап дефинисане енергије

улази у мету при случајној оријентацији или при моду каналисања (опционо) и прате се повратно расејани јони на детектору који је постављен под тачно дефинисаним углом (изабран је угао од 160°).

При симулацији EBS и RBS спектра јонски сноп улази у уочен слој мете и рачуна се вероватноћа повратног расејања линеарном интерполацијом попречног пресека расејања. Попречни пресек расејања преузима се из базе података IBANDL (експериментални подаци као и они процењени помоћу SigmaCalc 2.0 попречних пресека расејања) за одређени угао повратног расејања у изабраном опсегу енергија. Алтернативно, уколико подаци у бази нису доступни, користи се Ратерфордова формула за попречни пресек (једначина 2.26.). Пролазећи кроз разматрани компјутациони слој, јонски сноп губи део енергије који се израчунава помоћу емпиријских података о зауставној моћи Зиглера и Биршака [58]. Размазивање енергије јонског снопа узима се у обзир као збир нестатичког ширења енергије снопа изазваног губитком енергије у компјутационом слоју и статистичког, који се израчунава помоћу Јангове (Q. Yang) формуле, и последица је различитих енергија јона у снопу [177]. У наредни слој мете пролази део снопа који није повратно расејан и цео поступак се на тај начин итеративно понавља. Повратно расејани део снопа из датог слоја се враћа назад пролазећи кроз претходно пређене слојеве и на исти начин се прати на путу ка детектору, добијајући коначне вредности за енергијске губитке и размазивање енергије на излазу из последњег слоја мете. Коначном размазивању енергије јона додаје се корекција и за резолуцију детектора. Поступак се понавља све док енергија јона не падне испод граничне вредности или уколико расејани део снопа нема довољно енергије да напусти мету. Повратно расејани део јонског снопа из сваког компјутационог слоја представља се у Гаусовом облику, где је средња вредност Гаусове функције енергија повратно расејаног дела јонског снопа, док је стандардна девијација енергијско ширење снопа услед пропагације кроз материјал. Резултујући спектар представља суму повратно расејаног јонског снопа из свих компјутационих слојева мете.

У случају EBS/C и RBS/C поступак симулирања спектра је аналоган уз одређене корекције које је неопходно унети. CSIM рачунарски програм почива на две главне физички вероватне претпоставке. Прва је могућност засебног праћења каналисаног и деканалисаног дела јонског снопа који пролазе кроз кристал, а друга је сигмоидална природа процеса деканалисања. Приликом уласка каналисаног снопа у компјутациони слој, слично као и при случајној оријентацији, рачунају се енергијски губици и размазивање енергије са разликом да су њихове вредности помножене корекционим коефицијентом α_0 (раније дефинисан као однос зауставних моћи при каналисању и случајној оријентацији снопа). Повратно расејање јона, пореклом од нечистоћа и аморфизације кристалне решетке, приликом каналисања се занемарује, јер се полази од претпоставке идеалне кристалне решетке и одсуства нечистоћа. Део јонског снопа бива деканалисан. Процент деканалисаних јона у датом компјутационом слоју израчунава се коришћењем Гомперцове сигмоидалне функције са параметрима фитовања k_0 и x_{c0} (k_0 је брзина деканалисања а x_{c0} домет деканалисања) [70]. Деканалисани јони надаље се третирају као при случајној оријентацији кристала. Избор сигмоидалног типа функције за опис процеса деканалисања последица је природе процеса деканалисања. Наиме, каналисани јони даље од центра осе канала кристала се знатно брже деканалишу од оних који су ближе осе. Као последица тога, процес деканалисања могао би се описати кроз два одвојена процеса, један за слабо и други за снажно каналисане јоне. Из тог разлога, пожељно је да функција деканалисања има тачку преггиба, стога је и изабрана сигмоидална функција.

Програм прати пропагацију деканалисаних јона у кристалу примењујући на њима исти рачунски процес као и код случајне оријентације кристала, све док део тих јона не дође до детектора и сабере се у резултујући спектар. Након тога програм се враћа на каналисани део снопа који пролази у следећи слој и поступак се итеративно понавља до момента када јони више немају енергију да напусте мету. Због компликованијег процеса рачунања, рачунарско време је за ред величине веће у случају каналисања. Параметри фитовања α_0 , k_0 и x_{c0} могу се

мануелно уносити у програм или могу бити процењени коришћењем процеса χ^2 минимизације користећи MINUIT алгоритам развијен у CERN-у [178].

Међутим, уколико је структура кристалне решетке нарушена (одређени степен аморфизације), долази до појаве додатног расејања јона на аморфној фази и последично до повећања приноса у спектру. Разматрање додатног приноса расејања као последице аморфне фазе коришћењем CSIM рачунарског програма омогућено је увођењем дубинског профила аморфизације који представља зависност параметра фитовања A од дубине узорка. Параметар A представља однос кристалне и аморфне фазе и има вредност од 0 (што означава савршен кристал) до 1 (које означава потпуно аморфизован кристал). У ранијој студији Ерића и сарадника, индукована аморфизација разматрана је као независна од параметара деканалисања [121]. За фитовање спектра коришћени су параметри минимизације добијени за неимплантирани кристал, док се профил аморфизације уводио независно. Током симулације део каналсаног снопа пропорционалан разлици вредности коефицијента A у уоченом и претходном компјутационом слоју се деканалише на улазу у уочени компјутациони слој.

Главно побољшање CSIM програмског пакета, које је било један од циљева током израде докторске дисертације, у односу на ранију верзију коришћену у студији Ерића и сарадника огледа се у новим претпоставкама рачунања параметара фитовања. У најновијој верзији програма уведена је зависност параметара деканалисања од количине индуковане аморфизације за сваки компјутациони слој. При израчунавању енергијских губитака каналсаног дела снопа, параметар α_0 је замењен параметром α који је повезан са α_0 на следећи начин:

$$\alpha = \alpha_0 + (1 - \alpha_0) \cdot A \quad (5.1.)$$

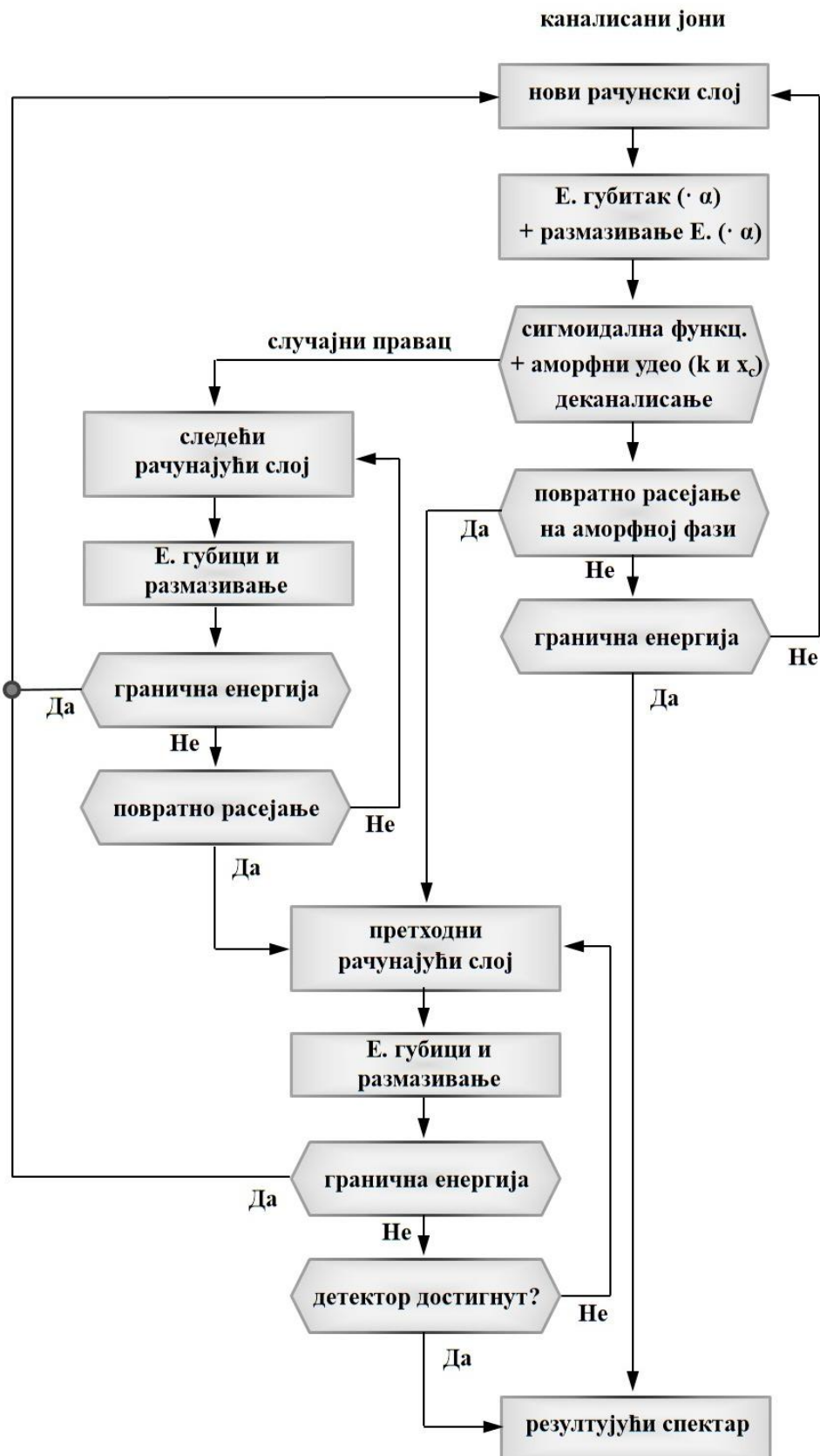
Уколико у слоју није присутна аморфна фаза ($A = 0$), неаморфизован кристал, α ће бити једнако α_0 , док ће у случају потпуне аморфизације ($A = 1$) α бити једнако 1, што је заправо аналогно проласку јона кроз потпуно аморфизован кристал, или како смо раније напоменули одговара случајно оријентисаном кристалу.

Брзина деканалисања k и домет деканалисања x_c , такође су повезани са вредностима за неимплантирани кристал k_0 и x_{c0} , и израчунавају се према следећим једначинама:

$$x_c = x_{c0} \cdot (1 - A) \quad (5.2.)$$

$$k = \frac{k_0}{(1 - A)} \quad (5.3.)$$

На основу приказаних зависности види се да коефицијент x_c има тренд линеарне, док коефицијент k има тренд експоненцијалне зависности са променом удела аморфне фазе. У случају када је удео аморфне фазе у кристалу једнак нули, домет деканалисања и брзина деканалисања имају вредности као у случају идеалног кристала без дефеката. Када је кристал потпуно аморфизован, домет деканалисања је 0, док је брзина деканалисања бесконачна (тренутни процес деканалисања), што је физички оправдана чињеница. Потребно је нагласити да параметри k и x_c зависе од степена колимисаности јонског снопа. Како сноп приликом продирања кроз кристал увек има тенденцију да се погоршава (шири), тако се и параметри каналсања k и x_c „погоршавају“. Стога је уведена претпоставка да се параметри каналсања не могу „поправљати“ приликом пропагације кроз кристал у случају када следећи компјутациони слој има мањи удео аморфизације у односу на претходни. Као последица, параметри k и x_c задржавају вредности које добију у компјутационом слоју са највишим степеном аморфизације и за све компјутационе слојеве након њега. На слици 28 приказан је CSIM рачунски алгоритам.



Слика 28. CSIM рачунски алгоритам.

5.4.1. Процедура фитовања EBS/C спектра

Први корак у процедури фитовања EBS и EBS/C спектра јесте конверзија вредности скале броја канала (C_h) детектора у скалу енергије (E), то јест енергијска калибрација. Процедура се врши над EBS спектрима неимплантираних узорака. Претпостављена је линеарна зависност:

$$E = p_1 C_h + p_2 \quad (5.4.)$$

где p_1 и p_2 представљају константе за дати сет спектра. У програм се уносе потребни параметри везани за мету (састав кристала, стехиometriја, атомска густина, број слојева, испитивана дубина), јонски сноп (енергија, енергијска ширина), детектор (угао, испитивани опсег енергија, резолуција) као и коришћени попречни пресеци. Мењањем вредности параметара p_1 и p_2 добијају се различите вредности скале енергија. Спектри са новодобијеним скалама енергија уносе се у програм где се врши њихово фитовање. Овај поступак се понавља све док се не добије добро поклапање симулираног спектра са експерименталним. За фитовање EBS/C спектра, након завршене енергијске калибрације, користи се χ^2 процедура минимизације. Као резултат фитовања χ^2 минимизације добијају се параметари каналисања за случај неимплантираног кристала, α_0 , k_0 и x_{c0} . Добијена енергијска калибрација користи се и код спектра имплантираних узорака снимљених при истом сету параметара (при истим условима и енергијама протона). За спектре неимплантираних узорака ово је крај процедуре фитовања.

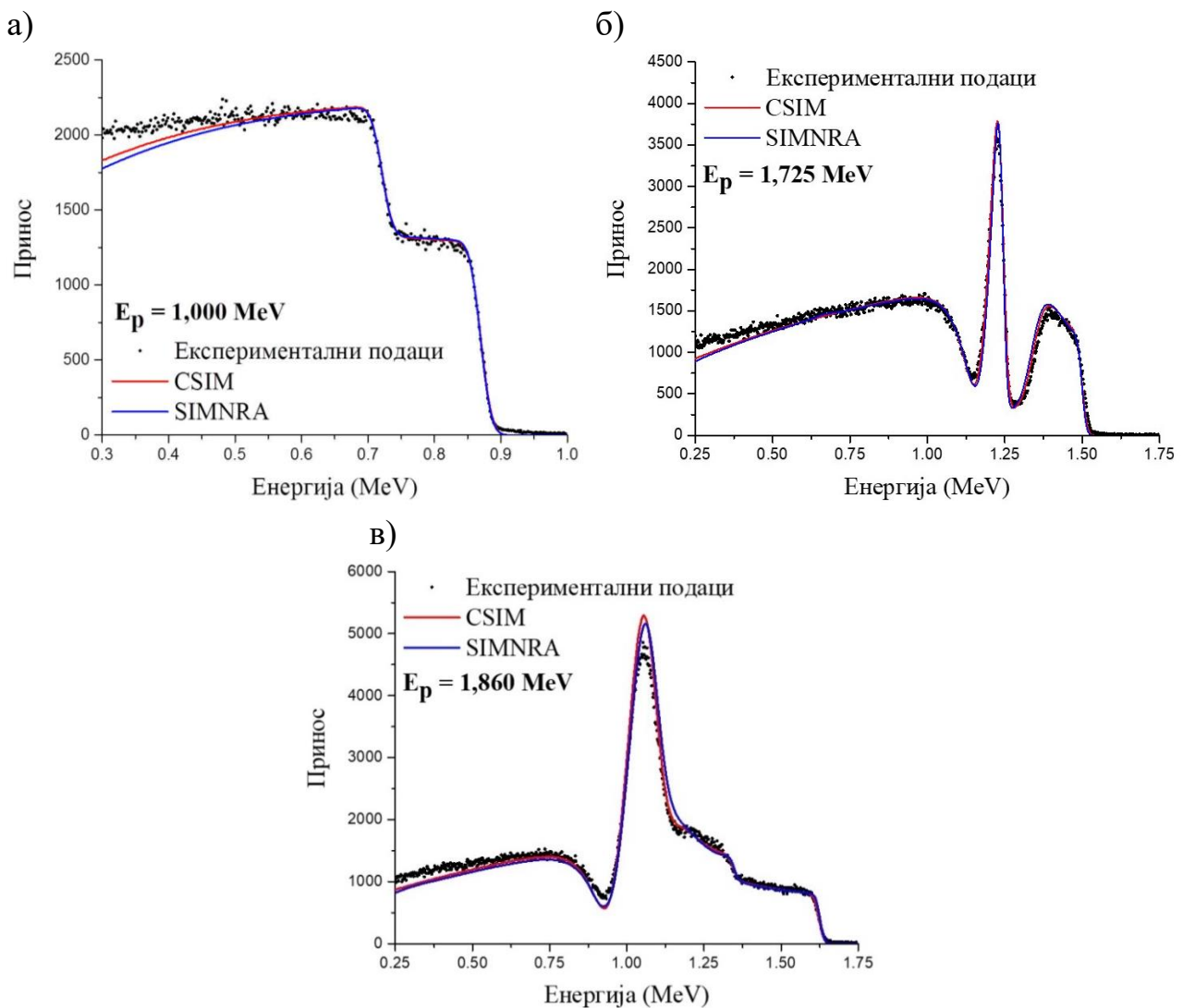
У случају аморфизованих кристала, након конверзије енергијске скале, спектри и претходно добијени параметри (α_0 , k_0 и x_{c0}) заједно са осталим улазним информацијама уносе се у програм. Претпостави се дубински профил аморфизације (A) након чега програм симулира EBS/C спектар који садржи додатни принос који потиче од аморфне фазе. Мењањем профила аморфизације израчунавају се нови сетови параметара α , k и x_c и тежи се добијању симулираног спектра који је што приближнији експерименталном. Када се постигне одговарајућа тачност симулираног спектра, процедура се завршава.

5.5. Одређивање профила аморфизације

Непосредно пре тумачења EBS/C спектра, извршено је фитовање EBS спектра неимплантираних узорака добијених помоћу протона енергија 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV. Одабиром SigmaCalc 2.0 диференцијалних еластичних попречних пресека (библиотека IBANDL [138-140]) за расејање на атомима угљеника и силицијума при углу од 160° извршено је фитовање. Процесом фитовања извршена је конверзија скале броја канала у скалу енергије и калибрациони параметри приказани су у табели 6. Такође, спектри су фитовани и помоћу програма SIMNRA коришћењем истог сета улазних параметара. Резултати фитовања приказани су на слици 29. Симулирани спектри за различите енергије протона добијени помоћу CSIM и SIMNRA рачунарских програма веома добро репродукују експерименталне податке. Разлика између кривих добијених различитим програмима је мала, што је потврда поузданости CSIM програма.

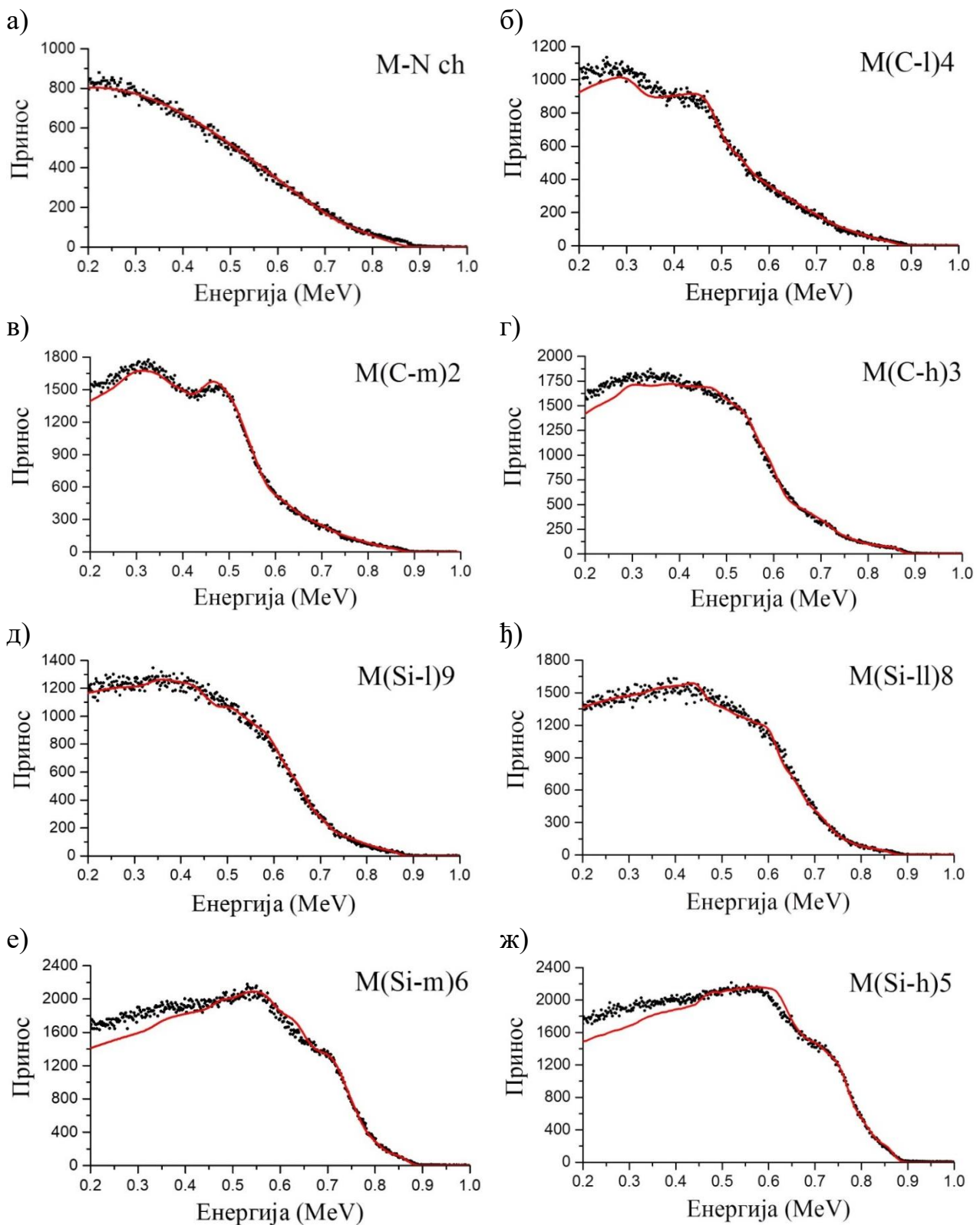
Табела 6. Калибрационе вредности нагиба (p_1) и одсечка (p_2) линеарне зависности броја канала од енергије јонског снопа.

Енергија [MeV]	p_1 [MeV]	p_2 [MeV]
1,000	0,00183	0,095
1,725	0,00185	0,065
1,860	0,00189	0,032

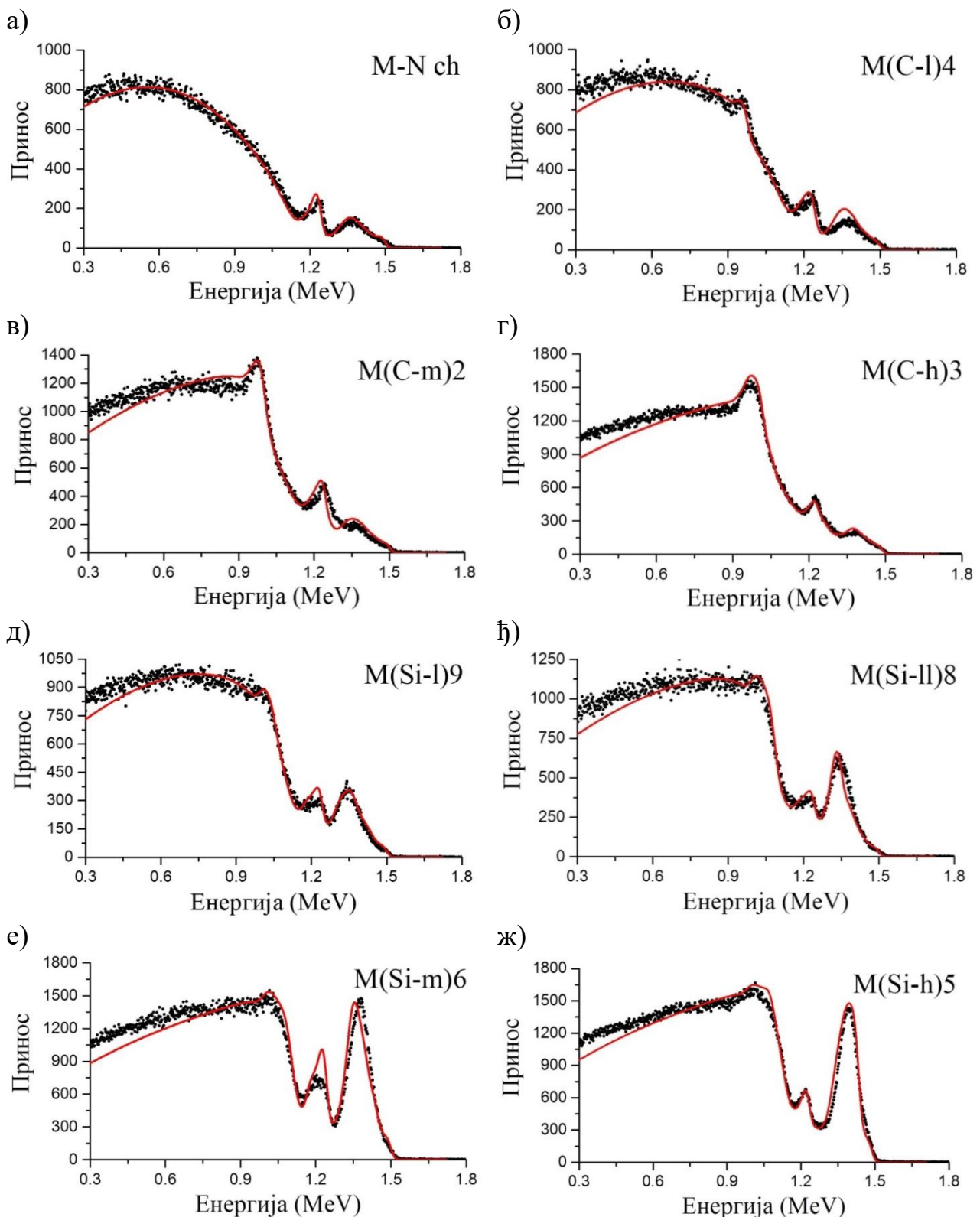


Слика 29. Фитовани EBS спектри неимплантираних узорака добијени помоћу протона енергија а) 1,000 MeV, б) 1,725 MeV и в) 1,860 MeV коришћењем CSIM (црвени спектар) и SIMNRA (плави спектар) рачунарских програма.

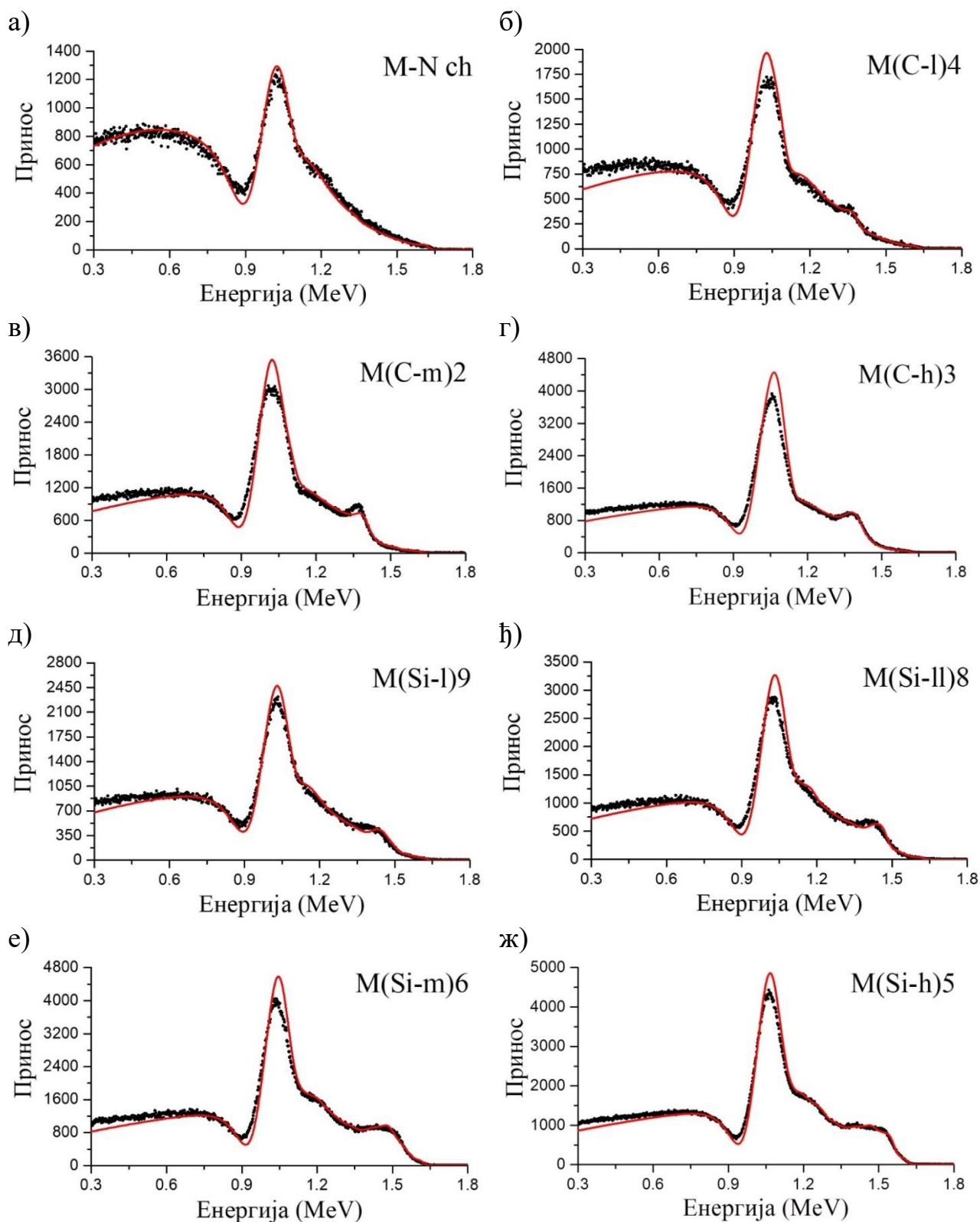
Мала одступања од експерименталних података при коришћењу оба рачунарска програма јављају се у региону ниских енергија у спектру и у околини резонантних пикова. Одступање фитоване криве од експерименталне при ниским енергијама објашњава се појавом вишеструког расејања јона [179]. Вишеструко расејање подразумева да се јон расеје више пута на језгрима мете пре него што напусти мету и буде детектован. Наиме, при ниским енергијама јона, енергијски нуклеарни губици долазе до изражаја и с тим у вези процес расејања постаје фреквентнији. Услед тога, вероватноћа вишеструких судара расте. Додатно, вишеструко расејани јони пређу и дужи пут, губе више енергије због чега се детектују на нижим енергијама. Коришћени рачунарски програми не узимају у обзир вишеструко расејање. Мање одступање фитованих кривих од експерименталних у околини резонантних пикова јављају се као последица одсуства идеалног моноенергијског снопа. Енергија јонског снопа током експеримента показује мање флукуације (неколико keV) док CSIM програм дефинише енергију снопа као константну. Вредности диференцијалних попречних пресека расејања показују изразиту зависност од енергије у околини резонантних пикова (слика 25), те се стога јавља одступање у виду промене интензитета. Промене су посебно изражене у околини веома интензивног $^{12}\text{C}(p_0,p)^{12}\text{C}$ резонантног пика за спектре добијене протонима енергије 1,860 MeV. Такође, енергија снопа током експеримента показује мање флукуације, док CSIM програм дефинише енергију снопа као константну.



Слика 30. EBS/C спектри протона енергија 1,000 MeV за а) неимплантирани узорак 6H-SiC као и имплантиране узорке коришћењем јона угљеника флуенса: б) $1,35 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-l)4), в) $6,74 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-m)2), г) $20,2 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-h)3); и јона силицијума флуенса: д) $4,17 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-l)9), њ) $8,33 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-ll)8), е) $4,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-m)6) и ж) $9,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-h)5). Црне тачке представљају експерименталне податке а црвене линије CSIM резултате.



Слика 31. EBS/C спектри протона енергија 1,725 MeV за а) неимплантирани узорак 6H-SiC као и имплантиране узорке коришћењем јона угљеника флуенса: б) $1,35 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-l)4), в) $6,74 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-m)2), г) $20,2 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-h)3); и јона силицијума флуенса: д) $4,17 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-l)9), ж) $8,33 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-ll)8), е) $4,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-m)6) и ж) $9,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-h)5). Црне тачке представљају експерименталне податке а црвене линије CSIM резултате.



Слика 32. EBS/C спектри протона енергија 1,860 MeV за а) неимплантирани узорак 6H-SiC као и имплантиране узорке коришћењем јона угљеника флуенса: б) $1,35 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-l)4), в) $6,74 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-m)2), г) $20,2 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(C-h)3); и јона силицијума флуенса: д) $4,17 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-l)9), ж) $8,33 \times 10^{14}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-ll)8), е) $4,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-m)6) и ж) $9,17 \times 10^{15}$ јона \cdot cm $^{-2}$ (M(Si-h)5). Црне тачке представљају експерименталне податке а црвене линије CSIM резултате.

На сликама 30–32 приказани су EBS/C спектри имплантираних и неимплантираних узорака 6H-SiC добијени помоћу протона енергија 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV, као и криве добијене фитовањем помоћу CSIM програма. Као референтне вредности за калибрацију скале енергије коришћени су параметри добијени помоћу EBS спектра (табела 6) уз фино подешавање енергије снопа које се огледало у промени вредности енергије снопа од 0,001 MeV до 0,006 MeV.

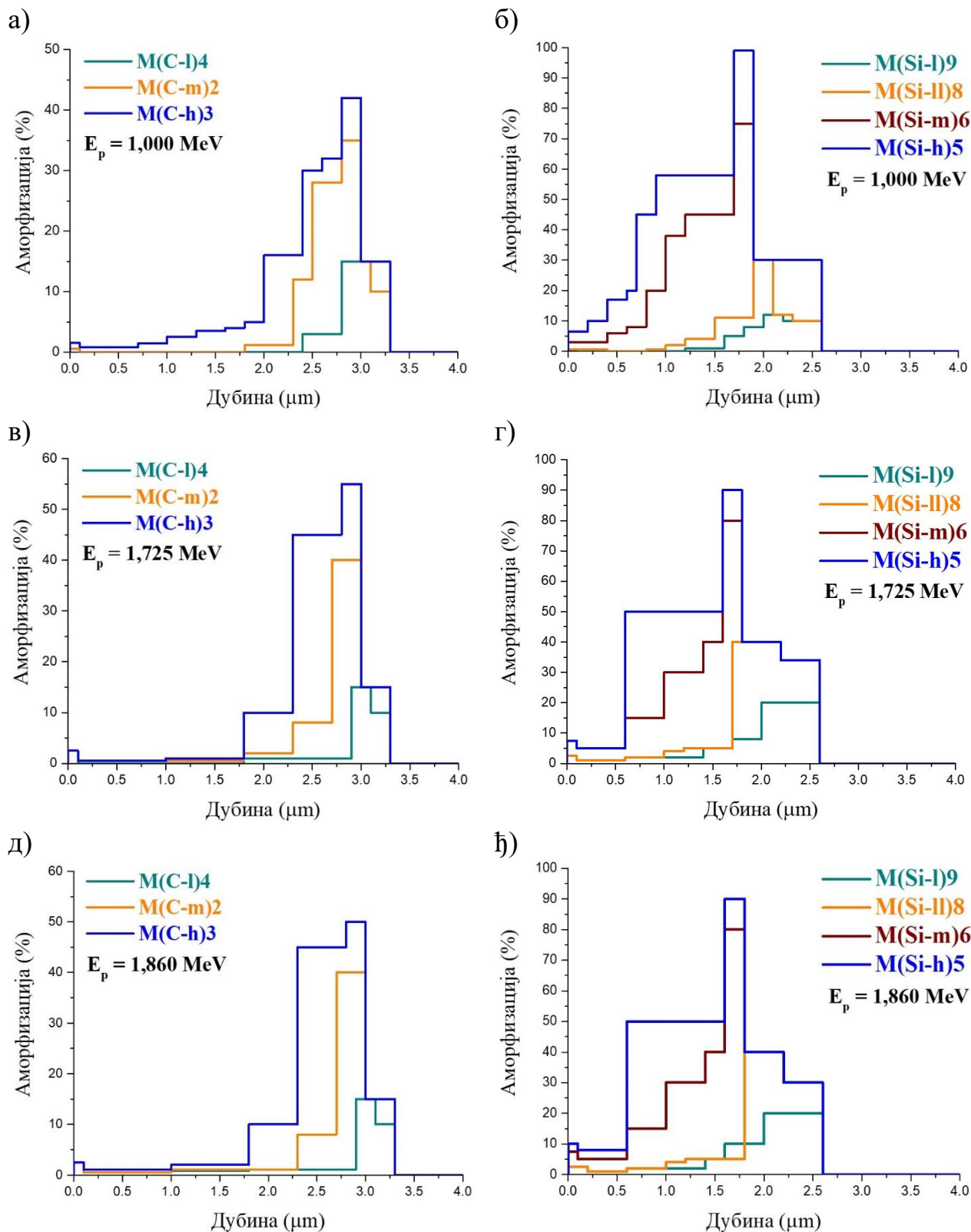
Параметри каналисања добијени након χ^2 процедуре минимизације EBS/C спектра неимплантираних узорака за различите енергије протона приказани су у табели 7. Из табеле 7 може се закључити да вредност параметра k опада са порастом енергије, док вредност параметра x_c расте. Ово је у складу са раније добијеним резултатима и физичком интерпретацијом параметара. Наиме, главни механизам успоравања каналисаних јона одвија се кроз интеракцију са електронима канала мете. Сходно томе, са порастом енергије јонског снопа очекује се успоравање процеса деканалисања (смањење k), јер се „исти“ број интеракција јона са електронима дешава кроз већу дужину канала кристала, те је процес деканалисања успорен. Слично објашњење важи и за x_c које представља домет деканалисања јона. Јони већих енергија имају већи домет, па с тим у вези расте и опсег деканалисања. У ранијим студијама каналисања јона показано је да параметар α показује слабију зависност од енергије снопа [121, 122]. Сличан тренд запажен је и у овом истраживању. При промени енергије са 1,725 MeV на 1,860 MeV (промена за 0,135 MeV) α опада за око 9%. Ерић и сарадници показали су да промена енергије протона од 1,800 MeV до 1,900 MeV (промена за 0,100 MeV) при снимању EBS/C спектра (100) дијаманта доводи до промене вредности α за 4,5% [121]. Такође, у другој студији Ерића и сарадника где су испитивани EBS/C спектри дијаманта, показано је да α има нешто већу вредност (0,900) на 1,750 MeV него на 1,200 MeV (0,880) или 1,900 MeV ($\alpha = 0,865$) [122]. Разлог за овакво понашање јавља се као последица експерименталних услова, посебно колимације јонског снопа који показује снажну зависност од α . Приликом фитовања имплантираних узорака, због мањих осцилација енергије снопа, дозвољено је фино подешавање параметара фитовања до максимално $\pm 5\%$ вредности добијених процедуром минимизације неимплантираних спектра.

Табела 7. Параметри добијени χ^2 процедуром минимизације EBS/C спектра неимплантираног узорка добијени различитим енергијама јона протона.

Енергија [MeV]	α	k [μm^{-1}]	x_c [μm]
1,000	0,84	0,32	3,54
1,725	0,89	0,28	4,38
1,860	0,82	0,24	5,67

Криве фитовања помоћу CSIM програма за EBS/C спектре добијени протонима енергије 1 MeV приказују добро слагање са експерименталним подацима за већину узорака. Већа одступања се могу приметити за узорке имплантиране највишим флуенсима угљеника (M(C-h)3) и силицијума (M(Si-m)6 и M(Si-h)5). Генерално, неслагања при ниским енергијама могу се објаснити повећањем вероватноће процеса вишеструких расејања јона и веће несигурности вредности енергије. Због тога у разматраним случајевима, при процесу минимизације и фитовања, део спектра са енергијом испод 0,3 MeV није узет у разматрање. Међутим, симулирана крива EBS спектра добијеног протонима енергије 1 MeV за неимплантиран узорак, показује знатно одступање при нешто вишим енергијама (до 0,5 MeV). Ово се може објаснити одступањем криве фитовања EBS спектра која се добија за неимплантирани узорак (слика 29). Наиме, са порастом аморфизације долази до приближавања приноса спектра EBS/C приносу спектра EBS. Стога се вредност фитоване EBS/C криве приближава вредности EBS спектра добијене за неимплантирани узорак којом се симулира потпуно аморфизована структура. Са слике 29 се може видети да у случају оба рачунарска програма, CSIM и SIMNRA, принос расејања при ниским енергијама показује

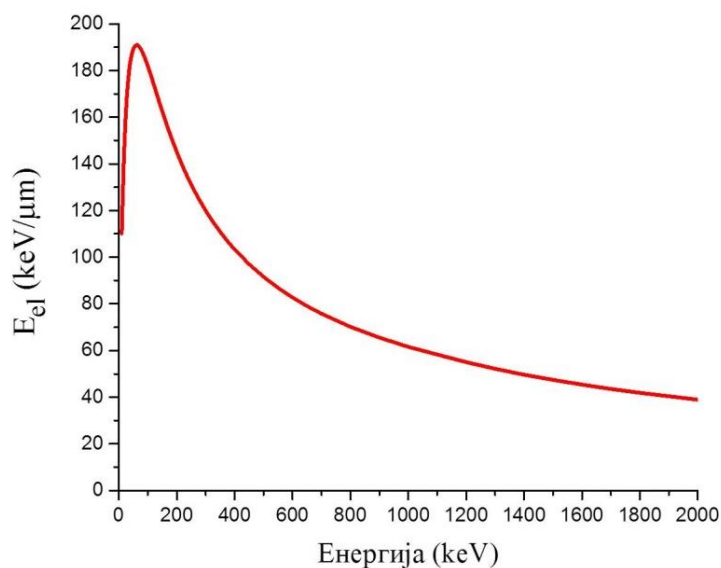
одступање у датој области. У случају EBS/C спектра добијених протонима енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV добијена су добра поклапања експерименталних резултата и симулиране криве. Мања одступања у виду интензитета и позиција локалних минимума и максимума могу се објаснити тиме да приликом анализе, енергија снопа није била идеално константна.



Слика 33. Профили аморфизације добијени фитовањем EBS/C спектра протона енергије 1 MeV (а и б), 1,725 MeV (в и г) и 1,860 MeV (д и љ) узорака који су имплантирани различитим флуенсима јона угљеника (а, в, д) и силицијума (б, г, љ) енергије 4 MeV.

На слици 33 приказани су профили аморфизације добијени фитовањем EBS/C спектра са слика 30–32. Одлично слагање профила добијено је за енергије протона 1,725 MeV и 1,860 MeV док профили добијени фитовањем EBS/C спектра протона енергије 1,000 MeV показују знатнија одступања. Код спектра протона 1,725 MeV и 1,860 MeV профили аморфизације као последица имплантације јонима угљеника (слика 33а и в) у региону до 1,6 μm показује малу количину аморфизације (до неколико %). Мали пораст аморфизације на самој површини узорка од 2,5% везује се за површинске ефекте имплантације. Наиме, одређени део јона бива повратно расејан на самој површини кристала током процеса имплантације на атомима површинског слоја и притом аморфизује површински слој. Овај ефекат генерално показује зависност од енергије јонског снопа [122]. Након дубине од 1,6 μm количина аморфне фазе расте зависно од примењеног флуенса јона. При најнижем флуенсу количина аморфизације је и даље ниска (око 2%) све до 2,9 μm када почиње регион са максималном количином аморфизације и простире се до 3,1 μm . Након тога количина аморфизације опада за 33% и простире се до 3,3 μm након чега се налази неаморфизована кристална фаза. Са порастом флуенса, зона са највећим процентом аморфизације бива померена за 0,1 μm ка површини, док количина аморфизације у региону 1,6–2,8 μm расте. Померање зоне са максимумом аморфизације и повећање аморфизације на нижим дубинама може се приписати динамичком ефекту. То јест, како са порастом флуенса долази до пораста аморфне фазе, последично ће доћи и до слабљења процеса каналисања јона, што ће утицати на смањење домета имплантираних јона.

EBS/C профили узорака имплантираних јонима силицијума и угљеника добијени протонима енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV показују слично понашање. Међутим, за разлику од угљеника, при нижим флуенсима присутност аморфне фазе је израженија. Ово је последица веће масе атома силицијума у односу на атом угљеника (за више од два пута) и последично већим нуклеарним губицима јона. Такође, зоне аморфизације су знатно шире. Регион са максимумом аморфизације за најнижи флуенс се простире од 2,0 μm до 2,6 μm , и након те дубине није детектована аморфизација. Са порастом флуенса имплантираних јона силицијума запажа се интензивнији динамички ефекат него код имплантације јона угљеника. Регион максимума аморфизације помера се ближе површини кристала (1,6–1,8 μm). Код два највиша флуенса, већ од 0,5 μm уочава се врло изражена аморфизација кристалне решетке (~50%), као и њено додатно повећање у региону испод 0,5 μm .



Слика 34. Вредност електронског заустављања у функцији од енергије протона код SiC.

Међусобна одступања профила добијених протонима енергија 1,725 MeV и 1,860 MeV су мала. Благо померање делова профила аморфизације примећено у случају узорака

имплантираних јонима силицијума за 1,725 MeV (слика 33г) и 1,860 MeV (слика 33ђ), $\sim 0,15$ μm (у опсегу 1,4–1,8 μm), може се приписати несигурности одговарајуће корелације енергија спектра – дубина кристала. Наиме, у овом опсегу енергија (MeV), електронско заустављање јона је доминантно и показује мање изражену зависност од енергије анализирајуће честице (мали нагиб), смањујући осетљивост одређивања дубине. Разлика између ова два профила усредсређена на опсегу дубине кристала 1,4–1,8 μm , одговара опсегу енергије EBS спектра 1,0–1,1 MeV и 1,45–1,50 MeV за атоме кристалне решетке угљеника и силицијума, респективно. Из зависности електронских енергијских губитака од енергије протона за SiC (слика 34) може се видети да је нагиб у овој енергијској области заиста мање изражен.

Профили добијени фитовањем EBS/C спектра протона енергије 1,000 MeV показују знатно одступање за чије порекло постоји више разлога. Један од разлога огледа се у одсуству резонантних пикова. Резонантни пикови који настају при процесу еластичног расејања делују као посебни енергијски маркери. Стрми максимуми и минимума у експерименталном приносу могу се користити за недвосмислену проверу квалитета CSIM програма. Такође, постојање наглашених минимума и максимума у спектру ограничава број могућих сетова вредности параметара (α , k , x_c) ка којима χ^2 процедура минимизације може конвергирати. У случајевима спектра добијених коришћењем протона енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV χ^2 процедура минимизације конвергирала је ка јединственим решењима због постојања резонантних пикова нуклеарних реакција $^{12}\text{C}(p,p0)^{12}\text{C}$ и $^{28}\text{Si}(p,p0)^{28}\text{Si}$ на енергијама од 1,667 MeV и 1,731 MeV, респективно. Међутим у случају EBS/C спектра добијених протонима енергије 1 MeV могуће је постојање само 0,500 MeV резонантног пика $^{12}\text{C}(p,p0)^{12}\text{C}$ реакције. Али, овај пик се не запажа у спектру у облику јасно истакнуте карактеристике. EBS/C криве су глатке без постојања локалних минимума и максимума. Математички гледано, могуће је добити више различитих сетова параметара каналисања који ће једнако добро фитовати EBS/C спектар. Стога, коришћење спектра добијених протонима 1,725 MeV и 1,860 MeV даје поузданије резултате. Потенцијално решење проблема могло би се добити фиксирањем параметра α , док преостала два параметра могу варирати у току процеса минимизације. Тада би вредност α била процењена на основу вредности α за случајеве са резонантним пиковима. Међутим, како се у датом случају вредност α мења за 9% са променом енергије са 1,725 MeV на 1,860 MeV, процена вредности α била би веома груба.

Додатни извор несигурности испитивања профила аморфизације протонима енергије 1,000 MeV огледа се у томе да се промене кристалне решетке изазване имплантацијом јона јављају као доприноси на ниским енергијама у спектру. У случају имплантације јонима угљеника (слика 30б и в), јављају се изражене промене у EBS/C спектрима у виду локалних максимума на око 0,30 MeV и 0,47 MeV. Ове промене показују регион максималне аморфизације кристалне решетке, а раздвојени су за угљеник и силицијум као последица различитих кинематичких фактора. Због тога долази до преклапања приноса који потичу од вишеструког расејања и од аморфизације. Код EBS/C спектра протона енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV промене се очекују у региону виших енергија у складу са физиком самог процеса. Стога, ефекат преклапања приноса који потичу од аморфизације кристалне решетке са оним који потичу од вишеструког расејања нема утицаја.

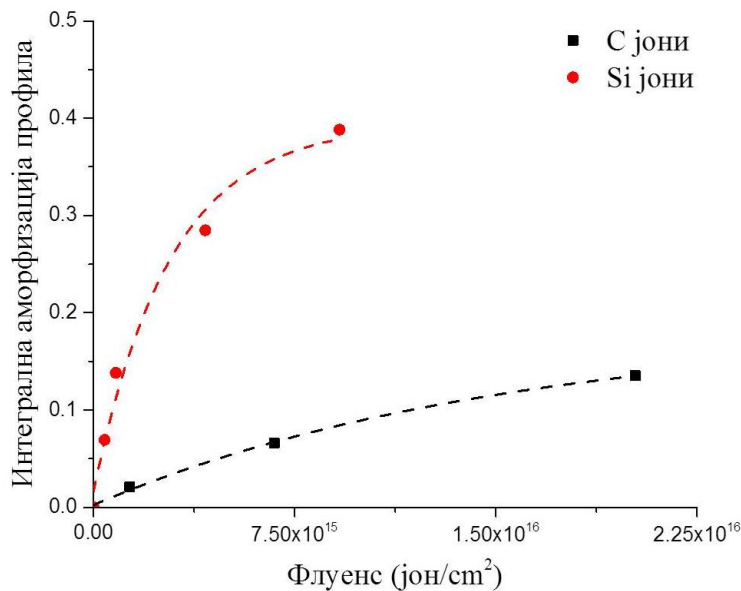
На основу приказаних разматрања може се закључити да EBS/C спектри са израженим пиковима дају поузданије профиле аморфизације. Такође, потребно је водити рачуна да је енергија јонског снопа којим се снима EBS/C спектар довољна да се приноси од аморфизације не нађу на ниским енергијама, где су осцилације енергије углавном велике и где се јавља знатнији принос процеса вишеструког расејања. У току даљих дискусија и поређења, користиће са профили добијени из EBS/C спектра протона енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV.

5.5.1. Модел индуковане тоталне аморфизације

Како би прецизније сагледали утицај флуенса јона на количину индуковане аморфизације у кристалу 6H-SiC, разматрана је зависност интегралног интензитета EBS/C профила аморфизације од флуенса. Интегрална аморфизација може се изразити једначином:

$$a = \frac{1}{l_{max}} \int_0^{l_{max}} Adl \quad (5.5)$$

где је a интегрална аморфизација, l дубина на којој је профил има вредност аморфизације A и l_{max} максимална дубина на којој профил има вредност већу од нуле. Зависност интегралне аморфизације од примењеног флуенса приказана је на слици 35. Са слике 35 се јасно уочава да количина индуковане аморфизације много брже расте у случају имплантације јонима силицијума. Промена је посебно изражена при нижим флуенсима. Са порастом флуенса јавља се постепено смањење количине индуковане аморфизације што наговештава сатурацију у одређеном тренутку.



Слика 35. Промена интегралне аморфизације са променом флуенса јона. Коришћени су усредњени профили (1,725 MeV и 1,860 MeV).

Да бисмо упоредили вредности интегралне аморфизације за случајеве имплантације јонима угљеника и силицијума у датом опсегу коришћених флуенаса, симулирана је крива која описује промену интегралне аморфизације са променом флуенса:

$$a = -a_1 \exp\left(-\frac{f}{f_1}\right) + a_2 \quad (5.6.)$$

где је f флуенс а a_1 , f_1 и a_2 коефицијенти чије су вредности приказане у табели 8. На основу тренда промене криве са порастом флуенса претпоставља се појава сатурационе вредности интегралне аморфизације. Правећи аналогију промене dr са променом флуенса, која показује сигмоидалну зависност и показује достизање сатурације при великим флуенсима јона, овакво понашање је очекивано [109]. Стога, претпоставља се постојање критичне вредности након које аморфизација остаје константна. У једначини 5.5. параметар a_2 представља дату сатурациону вредност.

Табела 8. Коэффициенти експоненцијалне функције из једначине 5.5.

Јон	a_1	f_1	a_2
C	0,1800	$1,51 \times 10^{16}$	0,1823
Si	0,3771	$2,85 \times 10^{15}$	0,3936

На основу симулираних кривих могуће је проценити вредности интегралне аморфизације за дати опсег флуенаса коришћених у експериментима. Вредности интегралне аморфизације при имплантацији јонима угљеника у односу на јоне силицијума, за флуенс од $9,17 \times 10^{15}$ јона·см⁻² (највиши флуенс коришћен у случају силицијума) указују да јони угљеника индукују за 78% мање аморфизације материјала. При нижим флуенсима, ова разлика је већа. Вредности одступања за флуенасе коришћене у експерименту у опсегу $0,417 \times 10^{15}$ – $9,17 \times 10^{15}$ јона·см⁻² приказане су у табели 9.

Табела 9. Разлике вредности интегралне аморфизације при имплантацији јонима угљеника у односу на јоне силицијума за различите флуенсе.

Флуенс [јона·см ⁻²]	Разлика вредности интегралне аморфизације [%]
$0,417 \times 10^{15}$	89%
$0,833 \times 10^{15}$	89%
$1,35 \times 10^{15}$	89%
$4,17 \times 10^{15}$	85%
$6,74 \times 10^{15}$	81%
$9,17 \times 10^{15}$	78%

У циљу процене количине аморфизације 6H-SiC настале при каналсању различитих јона енергије 4 MeV у опсегу флуенаса до $2,25 \times 10^{16}$ јона·см⁻² предложен је модел индуковане тоталне аморфизације. У датом моделу занемарује се утицај наелектрисања јона па је стога једина варијабла маса јона (m). Претпостављено је да се сви јони покорављају зависности из једначине 5.5. и апроксимирани су коэффицијенти a_1 , f_1 и a_2 . Поредиши коэффицијенте f_1 за јоне силицијума и угљеника закључено је да вредност њиховог односа $f_1(\text{C})/f_1(\text{Si})$ износи 5,2982 и да се за само 2,7% разликује од односа реципрочних вредности квадрата маса силицијума и угљеника:

$$\frac{1/m(\text{C})^2}{1/m(\text{Si})^2} = 5,4444 \quad (5.7.)$$

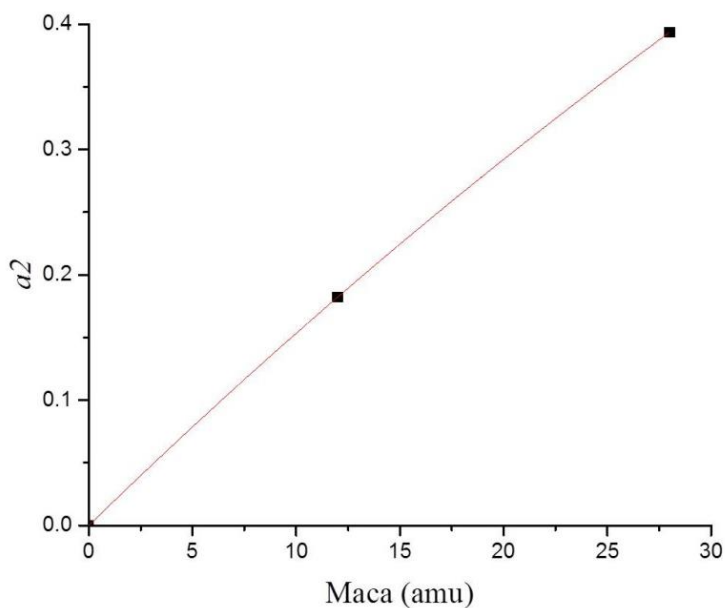
Из једначине 5.6. следи да се коэффицијент f_1 може апроксимирати користећи следећу једначину:

$$f_1 = k_1 m^{-2} \quad (5.8.)$$

Коефицијент k_1 је добијен помоћу вредности $f_1(\text{C})$ и $f_1(\text{Si})$ износи $-2,17 \times 10^{18}$ и $-2,23 \times 10^{18}$, респективно. За симулирање кривих зависности у датом моделу користи се средња вредност добијена за случајеве силицијума и угљеника која износи $-2,20 \times 10^{18}$.

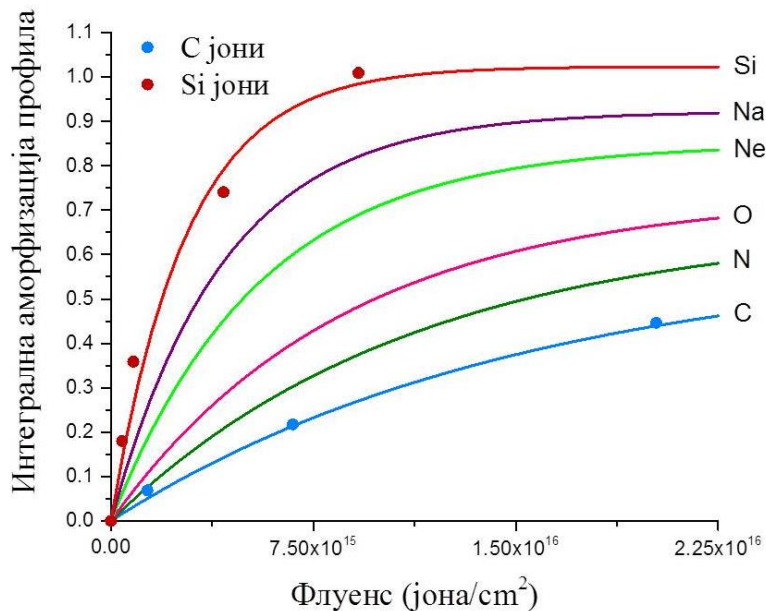
Коефицијент a_2 процењен је на основу чињенице да лимес интегралне аморфизације са смањењем масе јоне тежи ка нултој вредности. Узевши у обзир ову чињеницу и вредности $a_2(\text{Si})$ и $a_2(\text{C})$, симулирана је зависност коэффицијента a_2 од масе јона (слика 36). За фитовање вредности a_2 у функцији масе јона коришћена је следећа зависност, из које се могу проценити a_2 за различите масе јона:

$$a_2 = 1,60871 - 1,60871 \exp(-0,0100m) \quad (5.9.)$$



Слика 36. Зависност вредности параметра a_2 од масе јона.

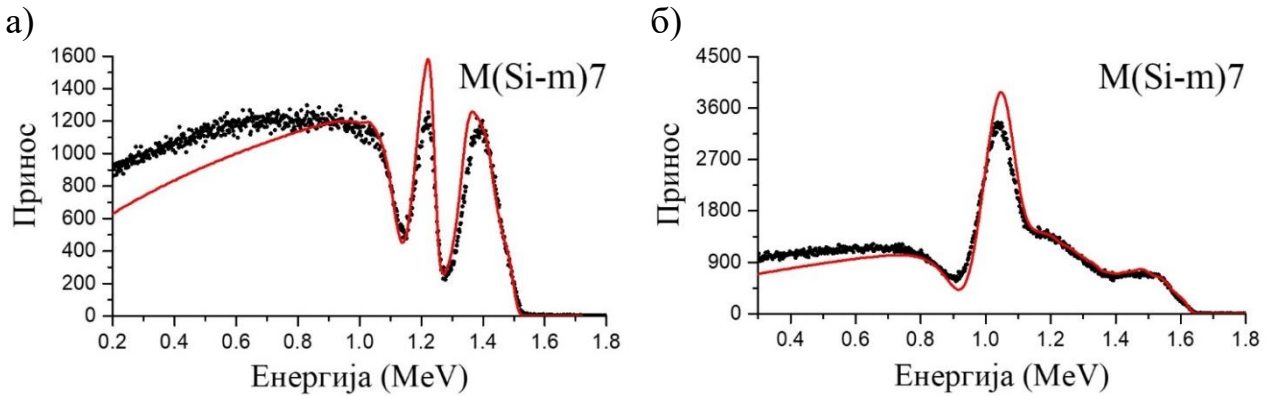
Како су у оба случаја са слике 35 коефицијенти a_1 сличних вредности као a_0 али супротног знака (одступања код угљеника 1,26% и код силицијума 4,03%), a_1 ће бити апроксимирана као негативна вредност константе a_2 . Узевши у обзир све раније наведене претпоставке, симулиране су криве зависности интегралне аморфизације за неке од елемената у опсегу маса од 12–28 аму. Резултати су приказани на слици 37.



Слика 37. Симулиране криве модела интегралне аморфизације за различите јоне енергије 4 MeV имплантиране у бН-SiC у моду канала сања.

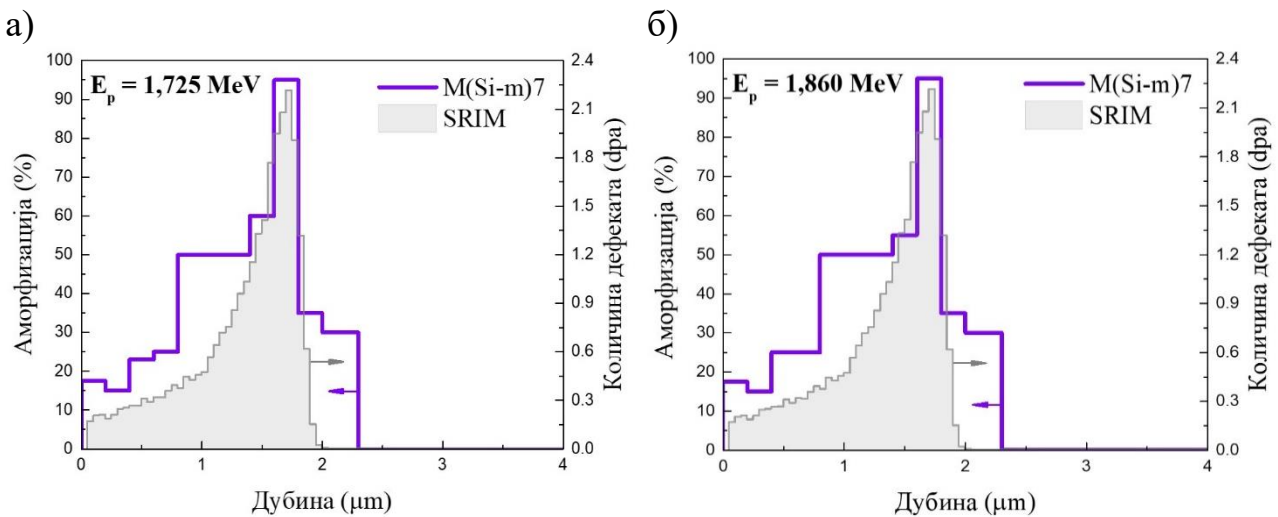
5.5.2. Имплантација јона при случајној оријентацији кристала

У циљу упоређивања аморфизације кристалне решетке индуковане јонском имплантацијом у моду каналисања и у случајној оријентацији кристала извршена је имплантација јона силицијума флуенса $4,17 \times 10^{15}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ (узорак M(Si-m)7). На слици 38 приказани су спектри фитовани CSIM програмским пакетом узорка M(Si-m)7 снимљени коришћењем протона енергије 1,725 MeV (слика 38а) и 1,860 MeV (слика 38б).



Слика 38. EBS/C спектри узорка имплантираног јонима силицијума флуенса $4,17 \times 10^{15}$ јона $\cdot \text{cm}^{-2}$ снимљени коришћењем протона енергије а) 1,725 MeV и б) 1,860 MeV. Црне тачке представљају експерименталне податке а црвене линије CSIM резултате.

Као резултат фитовања EBS/C спектра са слике 38 добијени су профили аморфизације приказани на слици 39. Профили показују одлично међусобно слагање, имају исту количину интегралне аморфизације са минималним разликама у виду расподеле аморфизације по дубини. CSIM профили аморфизације приказани су упоредо са профилима аморфизације симулираним помоћу SRIM-а (са слике 196).

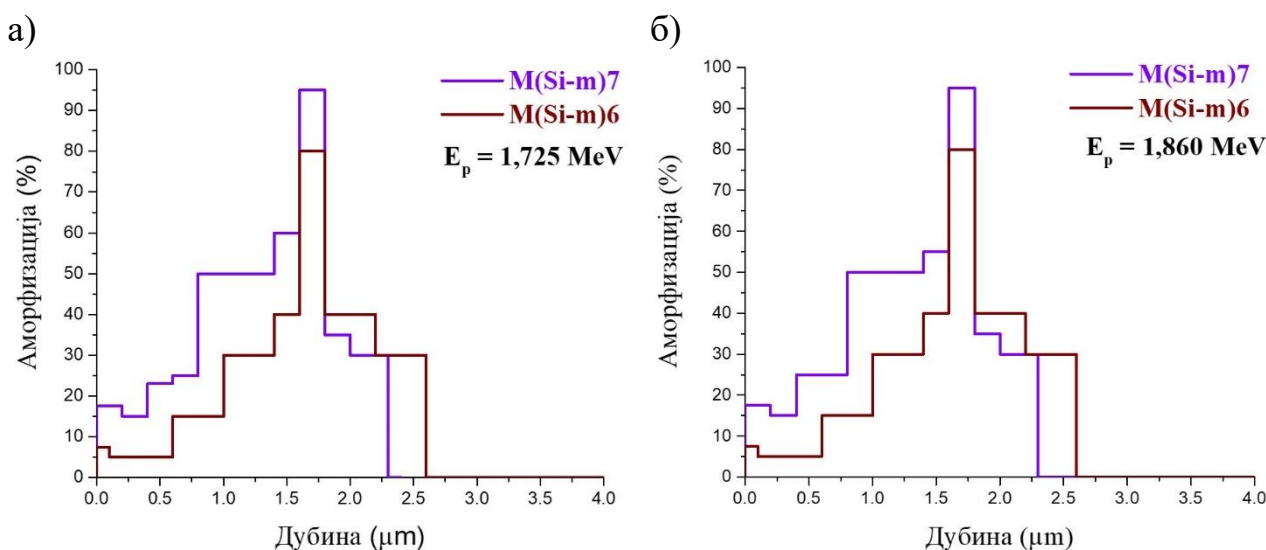


Слика 39. Поређење профила аморфизације за узорак M(Si-m)7 добијен помоћу CSIM програма са SRIM профилем.

Из датих профила запажа се веома добро слагање у погледу дубине на којој се налази максимална количина аморфизације, $1,7 \mu\text{m}$. Како CSIM програм разматра апсолутну вредност аморфизације (0%–100%), а SRIM број помераја по имплантираном атому, скале интензитета профила не могу се директно поредити, већ се једино може говорити о релативним интензитетима који су повезани са одређеном дубином кристала. У опсегу дубина до фазе са највећом количином аморфизације SRIM профил показује добро слагање са CSIM профилем. CSIM профил поседује за око 5% више аморфизације у блископовршинском слоју (неколико

стотина nm), ако посматрамо релативно у односу на вредност за зону са највећом количином аморфизације. Такође, слично одступање се запажа и у опсегу 0,8–1,2 μm , за око 10%. Након дубине са максималном количином аморфизације CSIM профил не показује нагли пад интензитета аморфизације као у случају SRIM профила, већ се домет аморфизације протеже 0,3 μm дубље. Могући разлог за дата одступања може се пронаћи у чињеници да SRIM програм симулира настајање ваканција искључиво без утицаја рекомбинационог ефекта који може бити веома битан, док CSIM програм екстрахује информације из спектра реалних узорака у којем су сви видови промене степена уређености кристала присутни. Такође, SRIM не узима у обзир структуру кристалне решетке, већ је апроксимира као потпуно аморфну структуру дуж читаве испитиване области. У SRIM симулацијама (Монте Карло приступ), на пут јона насумично се постављају атоми мете. Одступање CSIM профила се може повезати и са квалитетом каналисаног анализирајућег снопа након региона са максималним степеном аморфизације.

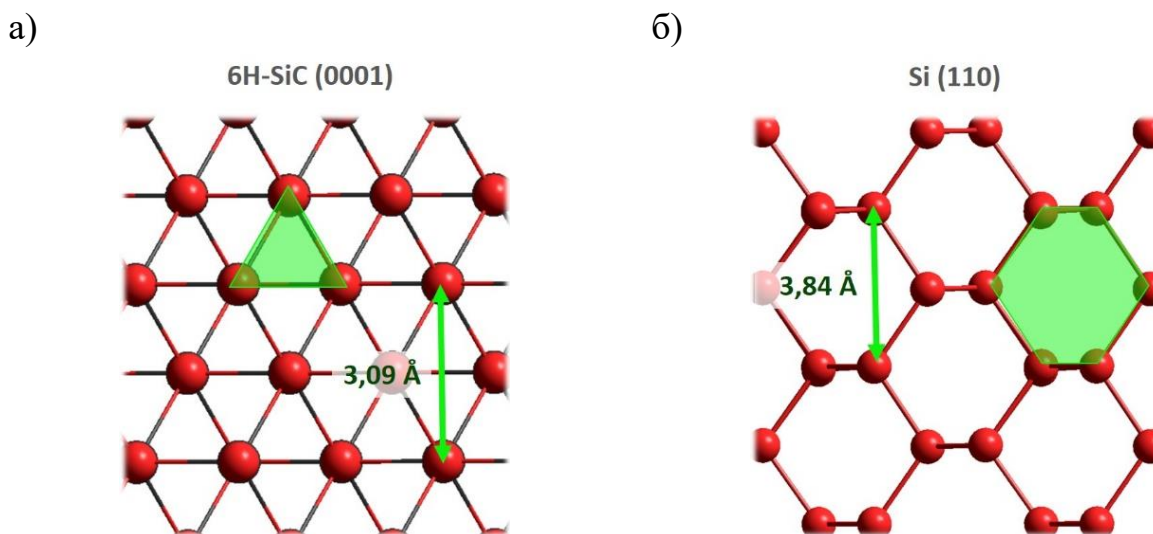
Профили аморфизације M(Si-m)7 упоређени су са профилима добијеним анализом EBS/C спектра узорака имплантираних јонима силицијума истог флуенса али у моду каналисања (узорак M(Si-m)6) и приказани су на слици 40. Узорак M(Si-m)6 показује знатно нижи степен аморфизације у региону од површине до зоне са највећим степеном аморфизације (1,7 μm). У зони након максимума аморфизације, профил узорака M(Si-m)6 показује већи степен аморфизације и већу дубину до које се јавља аморфизација за 13% (за 0,3 μm у оба случаја са слике 40а и б). Овај померај максималне дубине имплантације указује на то да процесом каналисања можемо остварити веће дубине продирања. Такође, узорак M(Si-m)6 снимљен помоћу протона енергије 1,725 MeV показује за 21,3% мању интегралну аморфизацију у односу на M(Si-m)7 узорак (случајна оријентација), док спектри снимљени помоћу протона енергије 1,860 MeV показују мању интегралну аморфизацију за 20,8%. Дато поређење потврђује почетне претпоставке, да се процесом каналисања индукује мања аморфизација кристалне решетке, као и да имплантирани јони продиру дубље у структуру. Поклапање позиција дубина на којој се налази зона са највећим степеном аморфизације потврђује постојање динамичког ефекта.



Слика 40. Профили аморфизације 6H-SiC узорака имплантираних јонима силицијума истог флуенса, али при различитим оријентацијама кристала (M(Si-m)6 каналисање, M(Si-m)7 случајна оријентација) добијени анализом EBS/C спектра протона енергије а) 1,725 MeV и б) 1,860 MeV коришћењем CSIM програма.

Повећање домета јона од 13% у датом случају може се објаснити величином аксијалних канала 6H-SiC у [0001] правцу. Копсалис (I. Kopsalis) и сарадници су показали да, при имплантацији јона кисеоника ($^{16}\text{O}^{2+}$) енергије 5 MeV у монокристал силицијума ([110] правац), разлика у дометима јона при случајној оријентацији кристала и у моду каналисања износи око

1 μm (око 20% већи домет у моду каналисања него при случајној оријентацији) [49]. Поред више енергије и мање масе јона у односу на случај са слике 40, разлика у домету јона у великој мери зависиће од геометрије канала кристала. У случају веће површине канала очекују се већи домети јона. Разлог за то лежи у мањој електронској густини код већих канала и самим тим слабије израженим електронским енергијским губицима (слабије заустављање јона). У циљу поређења величине канала кристала нацртане су њихове кристалне решетке у одговарајућим правцима (слика 41). Величина канала апроксимира се геометријском фигуром коју образују језгра атома из „зида“ канала (чворови канала). У случају [0001] правца код 6H-SiC то је троугао, а код Si [110] то је хексагон. Подаци о димензијама структурних мотива приказаних на слици 41 преузети су из референце [180]. Процењено је да површина канала 6H-SiC (0001) износи $1,38 \text{ \AA}^2$, док је површина Si (110) хексагона $10,36 \text{ \AA}^2$. Односно, површина канала код Si (110) је 7,5 пута већа од површине канала 6H-SiC (0001). Узимајући у обзир разлику у маси и енергији јона, разлика у дометима јона из наведених случајева је оправдана.



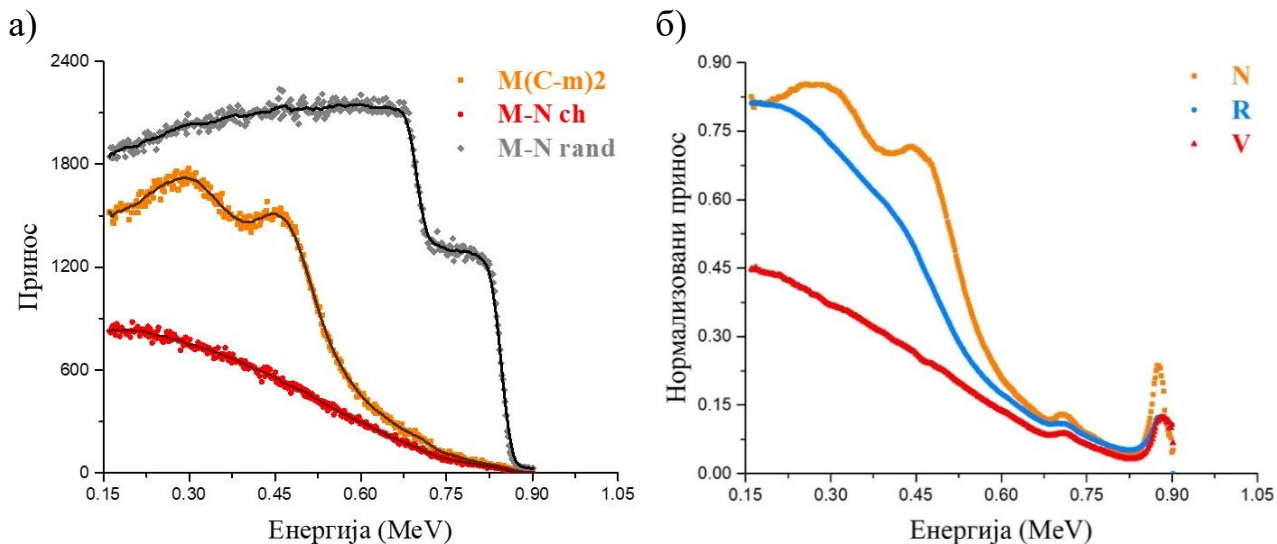
Слика 41. Илустрација облика и величине канала а) 6H-SiC (0001) и поређење са б) Si (110).

Такође, као последица различитих електронских густина канала, из односа моћи заустављања јона за правац каналисања и случајну оријентацију (параметар α), могу се извести закључци о природи каналисања. Наиме, уколико је вредност α нижа, то је домет каналисања већи. Раније је показано да вредност параметра α за протоне (опсег енергије 1,8–2,4 MeV) за каналисање у [110] канале кристала силицијума износи 0,65 [70]. У случају (0001) 6H-SiC добијена вредност за α налази се у 0,82–0,89 опсегу.

5.6. Одређивање профила аморфизације итеративним поступком

Раније је објашњено (поглавље 2.5.1.3.) да итеративни поступак није погодан за одређивање количине аморфизације кристалне решетке на дубинама већим од око 1 μm [148]. Наиме, због различитог начина губитка енергије при случајној оријентацији и при процесу каналисања, разлика у релацијама дубина-енергија може се занемарити само у површинском региону. Међутим, у случају резултата ове студије показано је да је разлика домета јона при каналисању и случајној оријентацији код узорка $\text{M}(\text{Si}-\text{m})_6$ и $\text{M}(\text{Si}-\text{m})_7$ једнака 0,3 μm . Разлог за ове блиске вредности може се потражити у величини аксијалних канала у правцу [0001], како је већ објашњено у поглављу 5.5.2. У овом специфичном случају, апроксимирана је занемарена разлика и спроведен је итеративни поступак рачунања аморфизације суб-решетки силицијума и угљеника 6H-SiC до дубине максималног домета.

Итеративни поступак добијања релативног доприноса аморфизације, пореклом од суб-решетки силицијума и угљеника, заснива се на раздвајању удела повратно расејаних јона који потичу од аморфизације структуре и приноса јона добијених процесом деканалисања. Наиме, за сваки узорак који се третира итеративним поступком потребан је сет од три спектра: EBS спектар неимплантираног узорка, EBS/C спектар неимплантираног узорка и EBS/C спектар имплантираног узорка. На слици 42а приказан је један такав сет за узорак M(Si-m)6.



Слика 42. а) EBS спектар неимплантираног узорка (M-N rand), EBS/C спектар неимплантираног узорка (M-N ch) и EBS/C спектар имплантираног узорка (M(C-m)2); б) нормализоване криве EBS/C спектра неимплантираног (M-N ch) и имплантираног (M(C-m)2) узорка у односу на EBS спектар (M-N rand) – V (црвена крива) и N (наранџаста крива), респективно, као и израчуната компонента расејања пореклом од процеса деканалисања – R (плава крива).

Компонента повратног расејања пореклом од процеса деканалисања израчунава се на следећи начин, према поступку описаном од стране Жанга (Y. Zhang) и сарадника [181]:

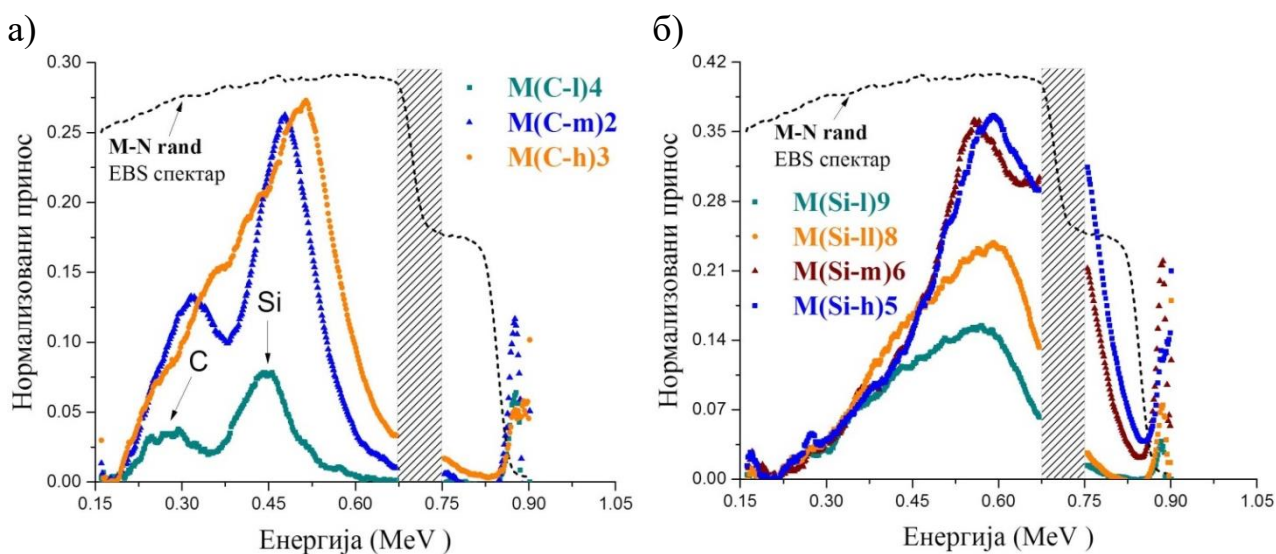
$$R(i) = V(i) + \left(1 - V(i) \left(1 - \exp \left(-\sigma_{pp} \sum_{i+1}^n \frac{N(i+1) - R(i+1)}{1 - R(i+1)} \right) \right) \right) \quad (5.10.)$$

где су $V(i)$ вредности нормализованог EBS/C спектра неимплантираног узорка, а $N(i)$ вредности нормализованог EBS/C спектра имплантираног узорка у односу на EBS спектар неимплантираног узорка. Параметар n означава укупан број тачака i у спектру. Ознака σ_{pp} представља параметар који је повезан са попречним пресеком деканалисања дуж одређеног канала кристала. Параметар σ_{pp} може се одредити мењањем његове вредности све док се добијена крива $R(i)$ не поклопи се кривом $N(i)$ у опсегу где није присутна аморфна фаза, односно где нема додатног приноса у спектру [181]. Тада је задовољен услов $N(i) - R(i) = 0$. Како током итеративног поступка и даље обраде спектра долази до великих осцилација између две суседне тачке због шума у спектру, на све спектре примењена је процедура углачавања (енгл. *smooth*) методом суседног усредњавања (енгл. *adjacent-averaging*) са 20 тачака по кораку. Спектар узорка M(Si-m)6 као и EBS и EBS/C спектре неимплантираних узорка приказане су на слици 42а (пуне линије).

Након издвајања компоненте деканалисања $R(i)$ из спектра, фаза која се приписује аморфизацији приликом имплантације јона добија се одузимањем $R(i)$ од $N(i)$. Међутим, у спектру неимплантираног узорка (слика 42а, M-N rand), први „степеник“ садржи само принос од јона силицијума, док други „степеник“ садржи и додатни принос од атома угљеника. У делу

који садржи само доприносе од атома силицијума мора се унети корекција приноса аморфизације [181].

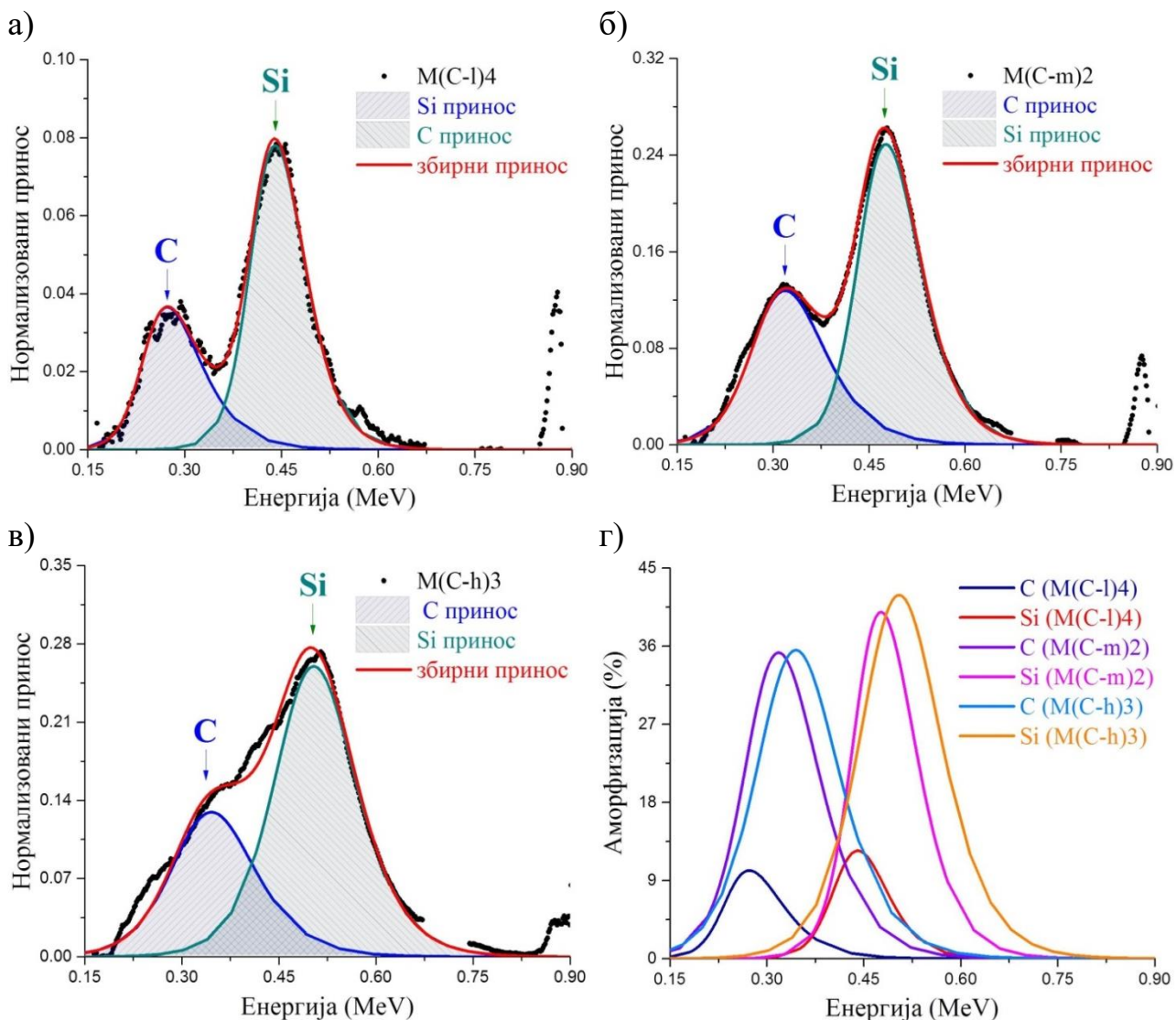
На слици 43а приказани су резултати нормализованог приноса аморфизације за случај имплантације јонима угљеника са корекцијом вредности приноса из првог „степеника“. Допринос у првом „степеннику“ није значајан у односу на други, па би се у првој апроксимацији могао занемарити. За даље разматрање, вредност корекционог фактора за први „степеник“ проналази се из односа првог и другог „степеника“. Локална промена приноса који се налази у области 0,67–0,74 MeV настаје као резултат нагле промене интензитета EBS спектра (одзив од атома угљеника са површине) због чега се овај део изоставља у даљој дискусији. Добијене криве нормализованог приноса са слике 43а за узорке M(C-l)4 и M(C-m)2 јављају се у виду два делимично преклопљена пика са максимумима на енергијама 0,27 MeV и 0,44 MeV. Са даљим порастом флуенса долази до потпуног преклапања датих пикова без јасних назнака о вредностима максимума (узорак M(C-h)3).



Слика 43. Нормализовани приноси аморфизације за различите узорке имплантиране јонима а) угљеника и б) силицијума са корекцијом вредности приноса првог „степеника“ који даје само допринос атома силицијума. На графицима а) и б) EBS спектар M-N rand приказан је због позиције „степеника“ (интензитет прилагођен ради поређења са EBS/C).

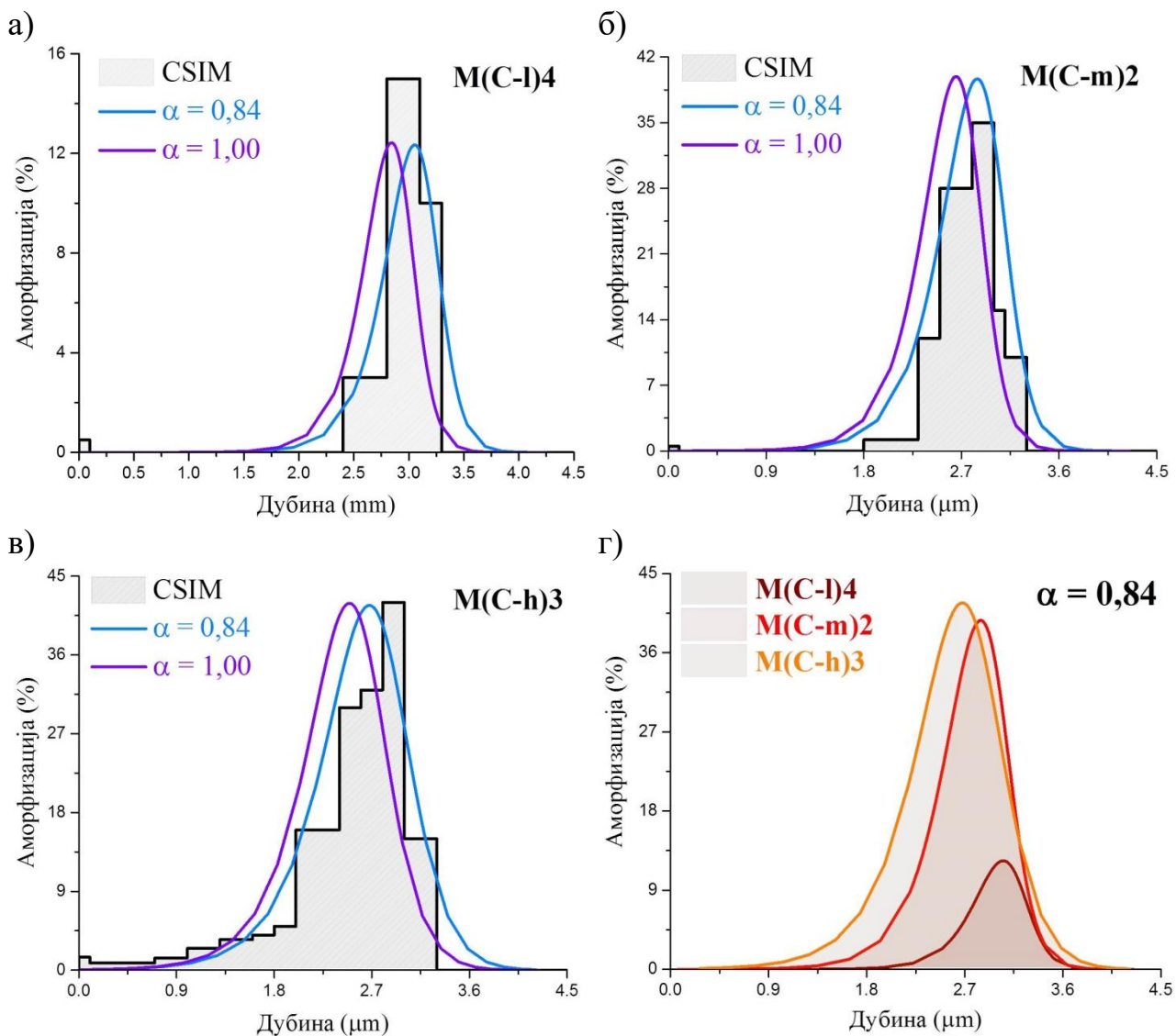
На слици 43б приказани су резултати итеративног поступка за узорке имплантиране јонима силицијума. Са порастом флуенса долази до значајнијег пораста приноса такође и у региону првог „степеника“. За разлику од случаја са угљеником, чак и при нижим флуенсима не запажају се јасно раздвојени пикови који воде порекло од аморфизације суб-решетки угљеника и силицијума. Према резултатима CSIM анализе у случају имплантације јонима силицијума, зона индуковане аморфизације је знатно шири у односу на случај имплантације атомима угљеника (слика 33). Услед тога, долази до знатно већег преклапања пикова због чега је тешко проценити тачан допринос сваке од суб-решетки.

Како се код узорка импалнитираних јонима угљеника доприноси за две вредности флуенса јављају у облику два пика, извршено је фитовање и њихово раздвајање. За највиши флуенс урађено је грубо фитовање пратећи тренд промене параметара пикова нижих флуенаса. За фитовање је коришћена Asym2Sig асиметрична функција доступна у Origin програмском пакету. Разлог за употребу ове функције лежи у асиметричној расподели имплантираних јона по дубини (слика 33). Резултати су приказани на слици 44а–в. Са порастом флуенса, количина аморфизације угљеничне и силицијумске подрешетке расте и максимуми добијених профила померају се ка већим вредностима енергије (мањим дубинама). Поред тога, са порастом флуенса зона аморфизације шири се ка мањим дубинама, што потврђује динамички ефекат.



Слика 44. Раздвајање доприноса суб-решетки угљеника и силицијума фитовањем помоћу два асиметрична Asym2Sig пика за узорке а) M(C-l)4, б) M(C-m)2 и в) M(C-h)3; г) упоредни резултати раздвојених доприноса угљеничне и силицијумске подрешетке анализираних узорака.

Профили нормализованих приноса аморфизације за угљеничну и силицијумску подрешетку имају различите вредности амплитуда. Разлог за овакво понашање може се потражити у различитим вредностима зауставних попречних пресека расејања за атоме угљеника и силицијума. Да би се добиле вредности аморфизације за сваку подрешетку неопходно је додатно обрадити издвојене профиле. Наиме, добијени профили раздвојених доприноса за угљеник и силицијум нормирани су односом приноса елементарних подспектра (раздвојени спектри за угљеник и силицијум) добијених помоћу SIMNRA, раније приказаних на слици 24а. Упоредни резултати доприноса аморфизације угљеничне и силицијумске подрешетке за све узорке имплантиране јонима угљеника након нормирања приказани су на слици 44г. Очекивано је да након нормирања амплитуде доприноса аморфизације угљеничне и силицијумске подрешетке буду сличне. Међутим, амплитуде добијених профила показују разлику од 12%–17% у зависности од испитаног узорка. Како се профил доприноса аморфизације угљеничне подрешетке делимично преклапа са облашћу где се јављају доприноси вишеструког расејања јона, оваква одступања могу бити оправдана. Стога, за поређење са профилима добијеним помоћу CSIM програма биће коришћени профили доприноса силицијумске подрешетке.



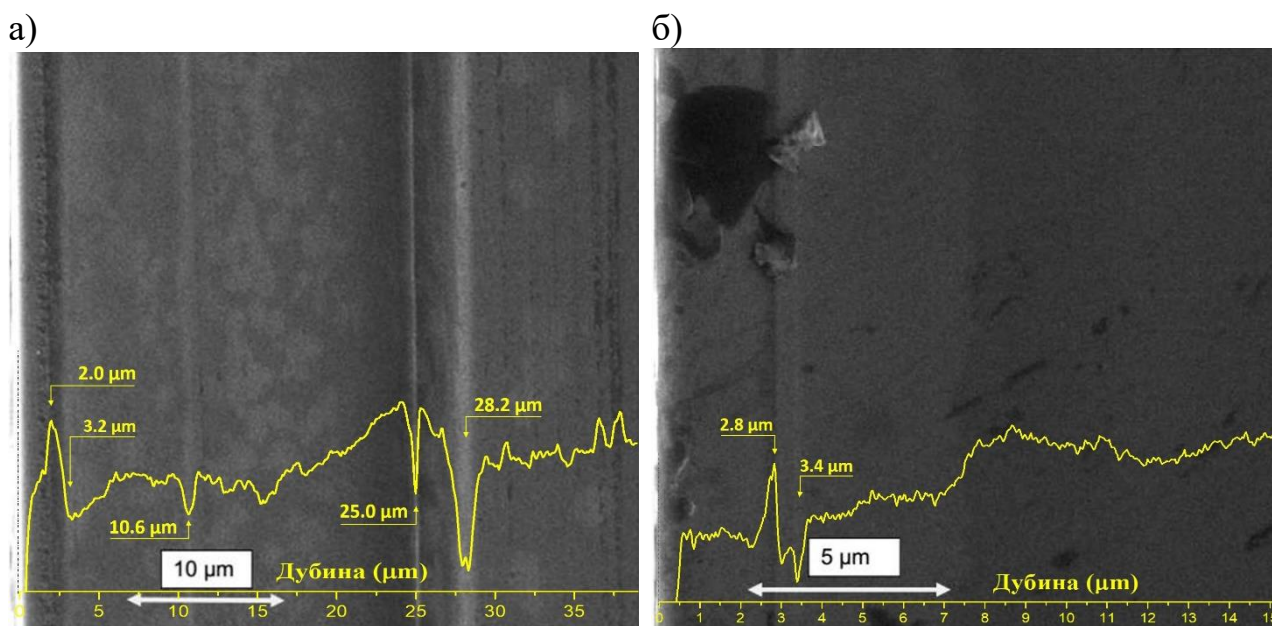
Слика 45. Поређење дубинских профила аморфизације добијених итеративним поступком за случај када је $\alpha = 1,00$ и $\alpha = 0,84$ са CSIM профилима за узорке а) M(C-l)4, б) M(C-m)2, и в) M(C-h)3; г) упоредни приказ резултата профила аморфизације за све испитиване узорке итеративном процедуром.

Како бисмо упоредили профиле аморфизације добијене помоћу итеративног поступка и CSIM програма, неопходно је извршити конверзију скале енергије у скалу дубине профила са слике 44г. Конверзија је уређена коришћењем вредности зауставних попречних пресека протона у силицијум карбиду преузетих из SRIM библиотека података. У првој апроксимацији (полазна претпоставка) енегијски губици су исти за случај каналсања и случајну оријентацију, односно када је вредност $\alpha = 1,00$. Додатно, конверзија је извршена и за случај када је $\alpha = 0,84$ што представља раније добијену вредност као резултат процедуре χ^2 минимизације EBS/C спектра протона енергије 1 MeV. Дата корекција довешће како до помераја профила на скали дубина тако и до промене његове амплитуде (последича зависности попречног пресека расејања од енергије/дубине). На слици 45а–г приказани су резултати након конверзије скале енергија-дубина силицијумских профила са слике 44г. Додатно, на сликама су приказани и одговарајући CSIM профили добијени из EBS/C спектра протона 1 MeV (истих спектра који су коришћени у итеративном поступку). Профили добијени помоћу итеративног поступка коришћењем различитих вредности α показују померај максимума за око 0,2 μm (око 7%) док је разлика у амплитудама мања од 1%. Коришћењем вредности параметра $\alpha = 0,84$ добијена су боља слагања са CSIM профилима у погледу позиције

максимума као и количине аморфизације који се разликују за мање од 5%. Ово је потврда успешне примене итеративног поступка за разматрани специфичан случај EBS/C спектра 6H-SiC за [0001] правац.

5.7. Скенирајућа електронска микроскопија

SEM слике попречних пресека узорака 6H-SiC (нормално на правац имплантације јона) имплантираних најнижим флуенсима јона угљеника и силицијума приказане су на слици 46а и б (узорци M(C-1)4 и M(Si-1)9), респективно. На датим сликама запажају се модификоване зоне, паралелне површини кристала и хомогене дуж имплантираних дубина, које су последица интеракције кристала са јонима и типичне за процес имплантације јона [120]. Ово је јасан показатељ униформности процеса имплантације јона по дубини узорка. У циљу прецизнијег одређивања граница модификованих зона, коришћењем програмског пакета MatLab, добијена је зависност интензитета слике од дубине узорка. Наиме, овај поступак обраде подразумева неколико корака. Први корак огледа се у пребацивању оригиналних SEM слика у Grayscale режим фотографије, те конверзије истих у матрични облик. У другом кораку врши се скалирање дубине у односу на јединицу дужине приказану на SEM слици дефинисану од стране инструмента. На крају се врши усредњавање интензитета слике по дубини и као такав се додаје одговарајућим SEM сликама. Битно је напоменути да је део узорка са неравнинама насталим приликом сечења, као што је то случај на слици 46б у горњем левом углу (затамњени део), изостављен током усредњавања.



Слика 46. SEM слике попречних пресека имплантираних узорака 6H-SiC: а) M(C-1)4 и б) M(Si-1)9; крива жуте боје – интензитет SEM слике усредњен је по дубини.

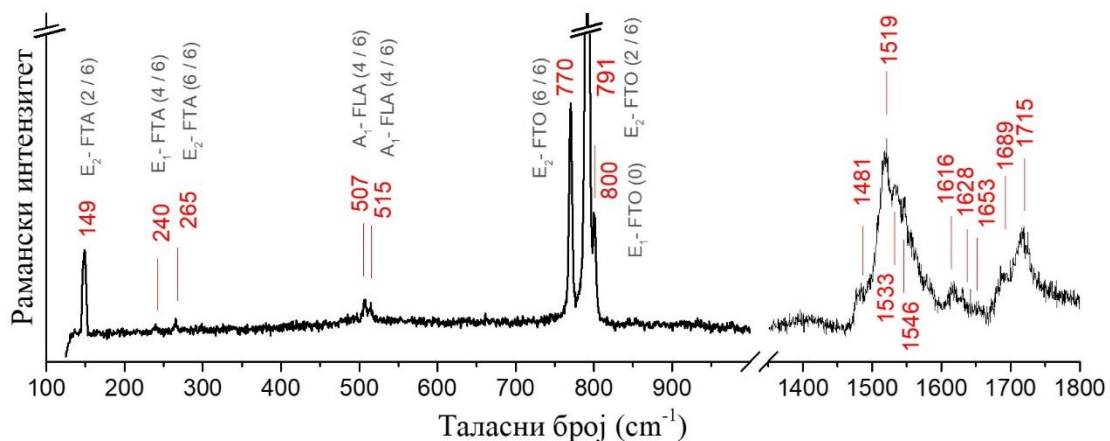
На SEM слици узорка M(Si-1)9 имплантираног јонима силицијума (слика 46а) примећују се четири модификована региона. Први регион се простире између 1 μm и 3 μm са максималном променом на дубини од 2 μm. Промене структуре кристала у овој области последица је модификације настале имплантацијом јона силицијума енергије 4 MeV. Максимуми промена интензитета другог, трећег и четвртог модификованог региона налазе се на дубинама од 10,6 μm, 25,0 μm и 28,2 μm. Промене у овим регионима кристала нису везане за имплантацију јона силицијума, већ су настале током спровођења EBS/C мерења и одговарају домету протона енергија 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV коришћених у анализи. Узимајући у обзир да се ради о каналисању јона, коришћењем SRIM калкулација процењено је да се на датим дубинама заиста очекују заустављени протони ових енергија. На

слици 46б, за узорак M(C-1)4 имплантиран јонима угљеника, која је снимљена са већом резолуцијом, примећује се само прва зона која се протеже између 2,8 μm и 3,4 μm и која одговара модификацији насталој као последица интеракције јона угљеника са кристалом. Због веће резолуције није могуће приметити трећу и четврту зону, док се друга зона не разликује јасно при датом увећању.

За разлику од случаја са слике 46а где су у кристал 6H-SiC-а имплантирани јони силицијума, границе модификоване зоне настале као последице имплантације јона угљеника на слици 46б су знатно јасније. На слици 46б запажа се да промена интензитета прве модификоване зоне на ивици удаљенијој од површине узорка има већи нагиб, односно боље је дефинисана. Ово се слаже са закључцима добијеним на основу EBS/C резултата и SRIM калкулација, где профили аморфизације имају стрмији пад на тој страни профила.

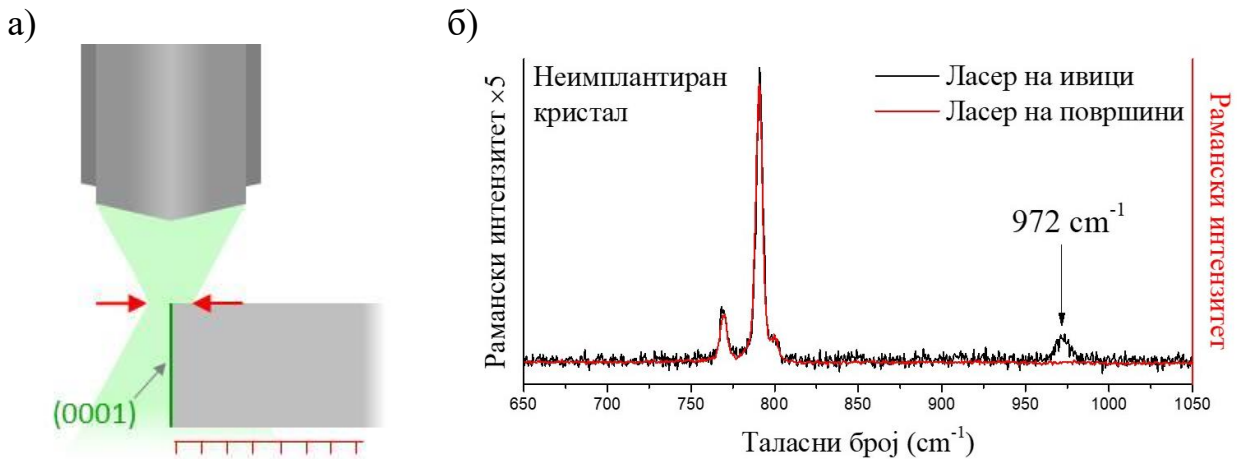
5.8. Микро-раманска спектроскопија

На слици 47 приказан је спектар неимплантираног узорка кристала 6H-SiC. У региону раманског спектра првог реда јављају се траке на 149 cm^{-1} , 240 cm^{-1} , 265 cm^{-1} , 507 cm^{-1} , 515 cm^{-1} , 770 cm^{-1} , 791 cm^{-1} и 800 cm^{-1} које одговарају E_2 -FTA(2/6), E_1 -FTA(4/6), E_2 -FTA(6/6), A_1 -FLA(4/6), A_1 -FLA(4/6), E_2 -FTO(6/6), E_2 -FTO(2/6) и E_1 -FTO(0) 6H-SiC кристалним вибрационим модовима, респективно. У дуготаласном региону спектра (1400–1800 cm^{-1}) запажају се траке које се приписују овертоновима (траке на 1481 cm^{-1} , 1519 cm^{-1} , 1533 cm^{-1} , 1546 cm^{-1} , 1689 cm^{-1} , 1715 cm^{-1}) и комбинационим тракама (траке на 1616 cm^{-1} , 1628 cm^{-1} , 1653 cm^{-1}) (табела 3).



Слика 47. Рамански спектар неимплантираног узорка 6H-SiC монокристала.

Појава/одсуство одређених раманских трака 6H-SiC често је повезана са геометријом расејања раманског зрачења, односно са оријентацијом кристала [182]. Такође, интензиван позадински сигнал рамански дозвољених трака омета идентификацију слабијих сигнала који се јављају као последица дефеката кристалне структуре. Показано је да при геометријској конфигурацији повратног расејања светлости, позадински сигнал дозвољених модова слаби (бољи однос сигнал-шум), те је ово ефикасан начин за детектовање раманских модова који потичу од дефеката мање густине [183]. Рамански спектри приказани на сликама 47–62 снимљени су при геометрији повратног расејања у правцу у коме је ласерски сноп паралелан (0001) равани кристала (попречни пресек кристала, слика 48а). При датој геометрији, појављује се вибрациона трака на 800 cm^{-1} (слика 47), која је забрањена у конфигурацији повратног расејања са (0001) равни. Појава траке на 800 cm^{-1} у спектру при (0001) конфигурацији (ласерски сноп нормалан на (0001) раван) објашњава се у литератури присуством дефеката услед грешака при слагању кристалних слојева, SF (енгл. *stacking fault*) траке [184]. Међутим, показано је присуство траке на 800 cm^{-1} при конфигурацији коришћеној у експерименту, чак и при нултој SF концентрацији [185].



Слика 48. а) Схематски приказ геометрије раманског експеримента и б) рамански спектри неимплантираног узорка 6H-SiC на различитим позицијама кристала: делимично на ивици и далеко од ивице (цео ласерски сноп на површини).

Слично, одсуство траке на 972 cm^{-1} , која се приписује $A_1\text{-FLO}(0)$ вибрационом моду, последица је геометрије експеримента раманског расејања. Снимањем спектра у конфигурацији повратног расејања, при геометрији кад је ласерски сноп паралелан на (0001) раван 6H-SiC кристала, Бауер (M. Bauer) и сарадници показали су да долази до изражене редуције интензитета траке (972 cm^{-1}) у односу на конфигурацију повратног расејања са (0001) равни [186]. У овом случају, интензитет траке на 972 cm^{-1} знатно је нижи од интензитета трака на 240 cm^{-1} и 265 cm^{-1} . То је разлог зашто траку није могуће видети у спектру са слике 47. Присуство $A_1\text{-FLO}(0)$ траке могуће је уочити када је позиција ласера делимично на ивици монокристала 6H-SiC (ивица обрађена од стране произвођача кристала), што је илустровано на слици 48б (црна линија). Ово се може објаснити делимичним прикупљањем раманског расејања са (0001) равни кристала (слика 48а).

Раније (у поглављу 2.3.) је објашњено да се SiC може наћи у више од 200 различитих политипова. Потврду да се у овом случају ради о 6H политипу SiC можемо добити директно из раманског спектра. Теоријски је показано да је за одређени политип SiC интензитет раманских трака FTA и FTO вибрационих модела максималан када је вредност њиховог редукованог таласног вектора једнака хексагоналности политипа [75]. Хексагоналност политипа се дефинише као проценат хексагоналног слагања слојева у политиповима (хексагоналност има вредност од 0 (за 0%) до 1 (за 100%) хексагоналног слагања). Веза између хексагоналности политипа и максималног интензитета раманских FTA и FTO трака за дату вредност редукованог таласног вектора савијеног мода потврђен је експериментално за велики број политипова [75]. Код 6H политипа SiC максимум интензитета FTA и FTO модела јавља се при вредности редукованог таласног вектора 0,33, односно $2/6$ [75]. Са слике 47 јасно се види да FTA($2/6$) и FTO($2/6$) модели (траке на 149 cm^{-1} и 791 cm^{-1}) имају највећи интензитет при вредности таласног вектора 0,33 ($2/6$) чиме је потврђен политип узорака.

Процесом имплантације јона долази до креирања дефеката у кристалу, а последично и до промена у раманским спектрима. Пратећи те промене можемо добити информације о уређењу кристалне структуре као последице процеса имплантације јона. У оквиру истраживања представљеног у овој докторској дисертацији мапирана је имплантирана регија снимањем раманских спектра узорака по дубини имплантиране регије са кораком од $0,2\text{ }\mu\text{m}$.

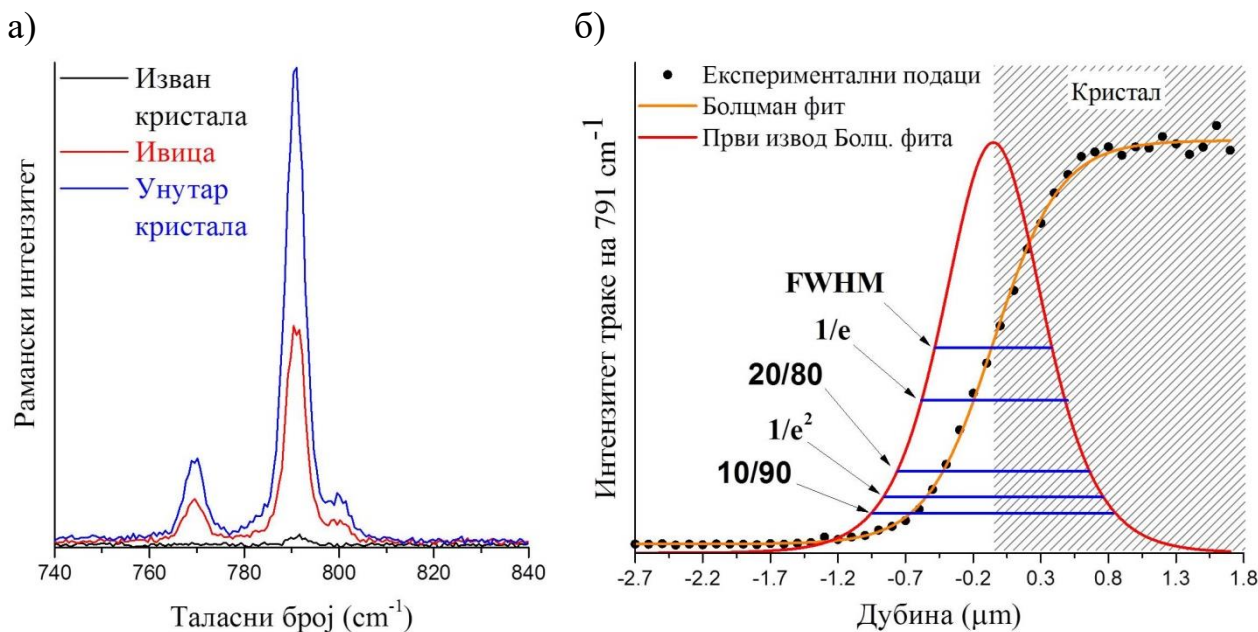
5.8.1. Ширина ласерског снопа

Мапирањем имплантиране регије 6H-SiC по дубини кристала може се пратити промена параметара раманских спектра са дубином, и на тај начин испитивати утицај имплантације јона. За постизање што боље резолуције битно је познавати вредност ширине снопа

коришћеног ласера. Уколико је ширина ласера мања, резолуција ће бити већа јер ће резултујући спектар садржати информације добијене са мање површине кристала. Ширина ласера (d_L) теоретски се може израчунати коришћењем једначине која у обзир узима таласну дужину ласера (λ) и нумеричку апертуру (NA) [187]:

$$d_L = \frac{\lambda}{\pi NA} \quad (5.11.)$$

У експериментима коришћен је ласер таласне дужине 514 nm. Рамански сигнал прикупљен кроз објектив са увећањем од 100×, нумеричке апертуре 0,9, те израчуната теоријска вредност ширине ласера износи 0,18 μm . Међутим, на ширину снопа ласера додатно утичу фокусна дужина као и квалитет самог снопа, па се у реалним случајевима ширина снопа мора измерити. Уколико рамански инструмент нема додаток за профилисање ласерског снопа, ширину је могуће проценити мерењем интензитета ласерског снопа при његовом проласку преко ивице кристала, било праћењем трансмитованог (техника ивице ножа [188]) или рефлектованог зрачења [187]. У оба случаја добија се зависност Болцмановог типа, где се након њеног диференцирања добија профил снопа ласера.



Слика 49. а) Рамански спектри 6H-SiC снимљени на површини кристала, ивици и непосредно изван кристала; б) промена површине траке на 791 cm^{-1} са променом позиције ласера. Наранџаста крива представља фит експерименталних података док црвена представља њен први извод.

Како би се измерила ширина ласера, мапирана имплантирана регија 6H-SiC почевши од површине кристала (фокусирајући сноп најбоље могуће) те прелазећи преко ивице, све док се ласерски сноп не нађе изван кристала. Коришћењем дифракционе решетке од 1800 прореза по mm, снимљена је спектрална област од 430 cm^{-1} до 1060 cm^{-1} . Еволуција промене укупног интензитета спектралне области показала је типичну Болцманову зависност. Међутим, еволуција површине испод траке на 791 cm^{-1} са дубином узорка (слика 49а) даје зависност са мањим осцилацијама суседних вредности у односу на еволуцију укупног интензитета спектралне области 430 cm^{-1} до 1060 cm^{-1} . Трака на 791 cm^{-1} је фитована коришћењем Лоренцове функције. На слици 49б приказана је промена интегралног интензитета (површине) траке на 791 cm^{-1} са променом растојања ласера од ивице кристала. Зависност је фитована Болцмановом функцијом која је потом диференцирана. Диференцирањем је добијен профил Гаусовог облика.

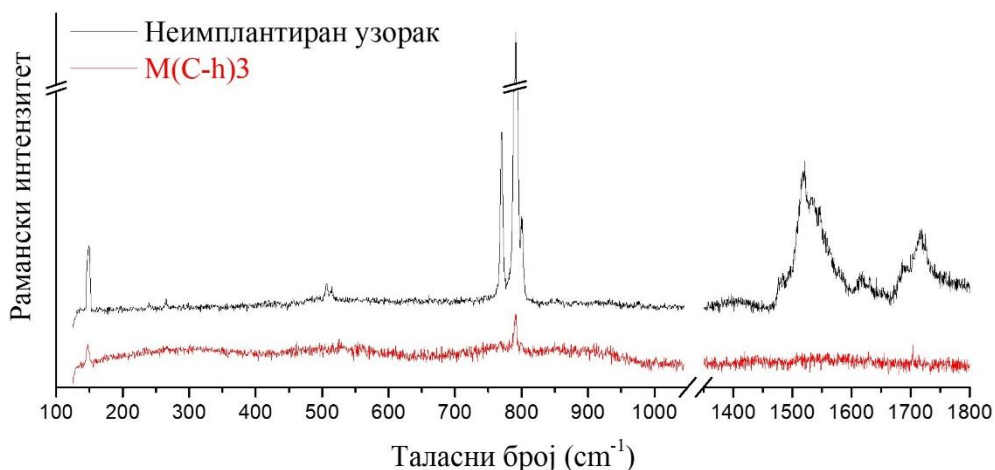
Ширина профила снопа ласера помоћу експериментално добијеног профила тумачи се на више начина. Неке од дефиниција за ширину ласера разматрају се као вредност ширине на 50% висине профила (FWHM), $1/e$ (36,78%) и $1/e^2$ (13,53%) вредности висине, као и ширина ласера мерена између тачака на 10% и 90% (10/90) или 20% и 80% (20/80) од максималне вредности висине профила [189, 190]. У табели 10 приказане су вредности за различито дефинисане ширине ласера и крећу се између 0,88 μm и 1,78 μm .

Табела 10. Ширине снопа ласера добијене на основу различитих дефиниција за ширину.

Дефиниција	Ширина снопа [μm]
FWHM	0,88
$1/e$	1,05
$1/e^2$	1,61
10/90	1,78
20/80	1,41

5.8.2. Рамански спектри имплантираних узорка

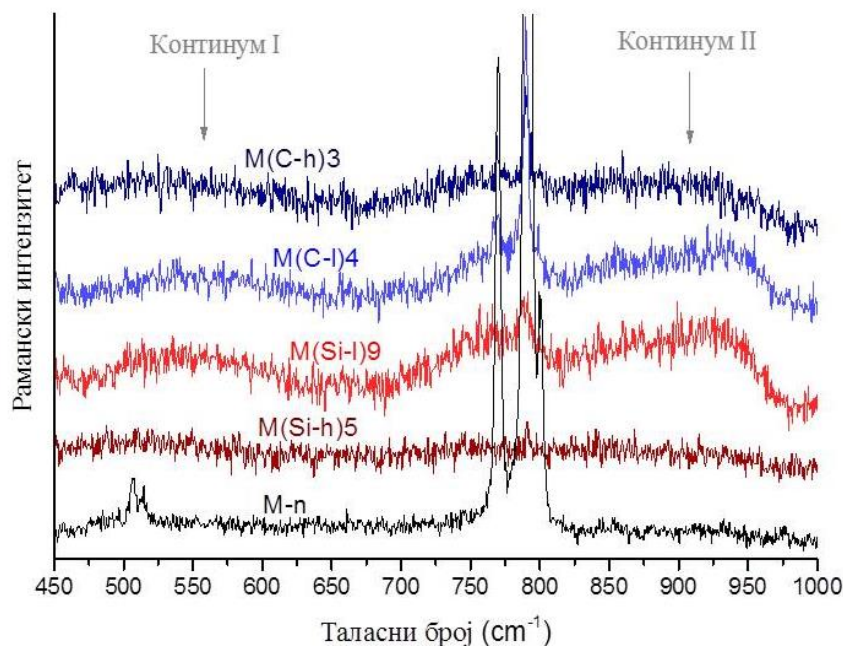
Промене у раманским спектрима настале услед процеса имплантације јона јављају се у виду смањења интензитета и пораста полуширине раманских трака као и појаве нових трака [110, 119, 120]. Пратећи еволуцију карактеристика раманских трака са дубином кристала, испитано је на који начин процес имплантације јона у моду каналисања утичу на кристалну структуру. Додатно, еволуције карактеристика раманских трака са дубином упоређене су са профилима добијеним помоћу EBS/C анализе ради провере међусобног слагања резултата. У циљу праћења насталих промена, испитане су промене које се дешавају у опсегу таласних бројева од 100 cm^{-1} до 1900 cm^{-1} . На слици 50 приказан је спектар узорка M(C-h)3 (узорак имплантиран највишим флуенсом угљеника и генерално највишим флуенсом од свих испитиваних узорка) у зони највећег степена аморфизације, као и спектар неимплантираног узорка.



Слика 50. Рамански спектар M(C-h)3 узорка снимљен у зони највећег степена аморфизације кристала и спектар неимплантираног кристала 6H-SiC.

На слици 50 може се уочити неколико карактеристика спектра које се знатно мењају услед процеса имплантације јона. Трака на 149 cm^{-1} уочава се и при веома аморфизованом кристалу узорка M(C-h)3. Траке на 770 cm^{-1} и 800 cm^{-1} нису јасно видљиве, док је најинтензивнија трака у спектру, 791 cm^{-1} , присутна. За разлику од траке на 149 cm^{-1} , трака на 791 cm^{-1} показује велику осетљивост на промену степена аморфизације кристалне решетке услед процеса имплантације, јер се њен интензитет мења многоструко. Промена интензитета

траке на 791 cm^{-1} је за око десет пута већа, па је њена осетљивост чини погоднијом за анализу. Такође, показано је да трака на 791 cm^{-1} повезана са степеном уређености кристалне решетке [191]. Остале траке, које су у спектру неимплантираног узорка ниског интензитета, не могу се разликовати услед пораста интензитета трака другог реда. При већњем степену аморфизације кристалне структуре, долази до тоталног гашења интензитета трака овертонова и комбинационих трака (у региону преко 1400 cm^{-1}) које су код неимплантираних узорка веома интензивне. За детаљну анализу карактеристика спектра фокус је стављен на регион $450\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$, у коме се јављају најизраженије промене као последица процеса имплантације са посебним освртом на 791 cm^{-1} траку.

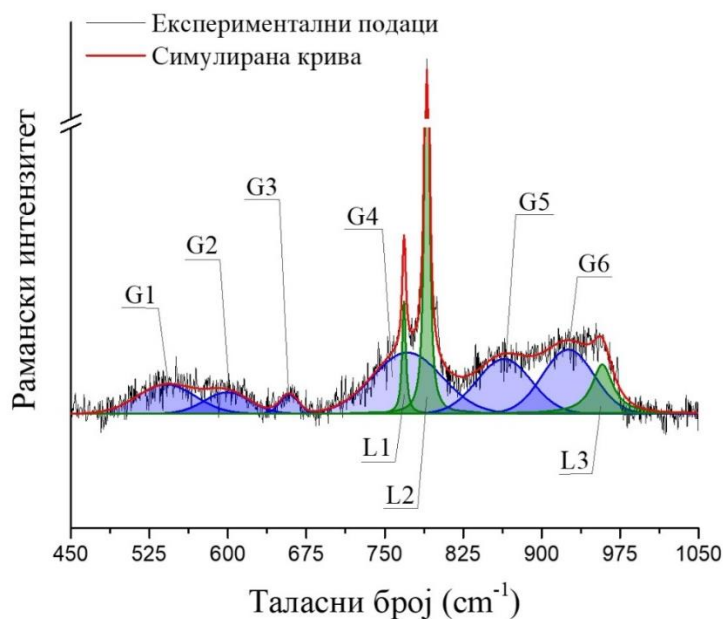


Слика 51. Рамански спектри неимплантираног узорка M-n и узорка M(C-m)2, M(C-h)3, M(Si-h)5 и M(Si-l)9 снимљених на дубини са највећим степеном аморфизације кристалне структуре 6H-SiC у области таласних бројева $450\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$.

Рамански спектри зона са највећим степеном аморфизације кристала неколико различитих узорка у области таласних дужина $450\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$ (уз додатак спектра неимплантираног узорка) приказани су на слици 51. Поред интензивне редукције интензитета трака на 770 cm^{-1} , 791 cm^{-1} и 800 cm^{-1} , као последица имплантације јона долази и до појаве континуума са леве и десне стране области FTO вибрационих трака ($770\text{--}800\text{ cm}^{-1}$). Континуум са стране мањих таласних бројева (Континуум I) састоји се од траке на $\sim 535\text{ cm}^{-1}$, која је карактеристика Si-Si вибрације, као и трака на $\sim 600\text{ cm}^{-1}$ и $\sim 660\text{ cm}^{-1}$ које су последица слабо неуређене структуре 6H-SiC [94]. Континуум са стране већих таласних бројева (Континуум II) састоји се од трака на $\sim 870\text{ cm}^{-1}$, чије се порекло везује за изразито неуређену структуру 6H-SiC и на $\sim 933\text{ cm}^{-1}$, која се приписује аморфном SiC [94]. Додатно, долази до појаве кристалне $A_1\text{-FLO}(0)$ траке на $\sim 960\text{ cm}^{-1}$ [75], чија се појава са великом вероватноћом приписује релаксацији изборног правила ($q = 0$) као последица деградације кристалне структуре услед процеса јонске имплантације. Разлике код трака другог реда у погледу коришћеног јона нису у великој мери изражене. У области Континуума I, разлике настале имплантацијом различитим јонима нису приметне, док се у области Континуума II јављају мање промене у региону $900\text{--}970\text{ cm}^{-1}$ у виду пораста интензитета. Наиме, са порастом флуенса овај опсег спектра прати тренд пораста интензитета (M(Si-l)9) до одређене вредности флуенса, након кога се дешава тотално гашење (M(Si-h)5).

Подаци о карактеристикама раманских трака добијени су процесом фитовања коришћењем Лоренцових профила за симулацију кристалних трака првог реда и Гаусових

профила за широке траке (индуковане неуређеношћу кристалне структуре), као што је то приказано на слици 52. Трака G4 са слике 52 представља допринос позадинског сигнала у региону FTO трака, док је порекло свих осталих трака објашњено раније (Континууми I и II). Разматрајући добијене резултате, испитан је утицај процеса имплантације јона у зависности од коришћеног јона, флуенса и дубине.

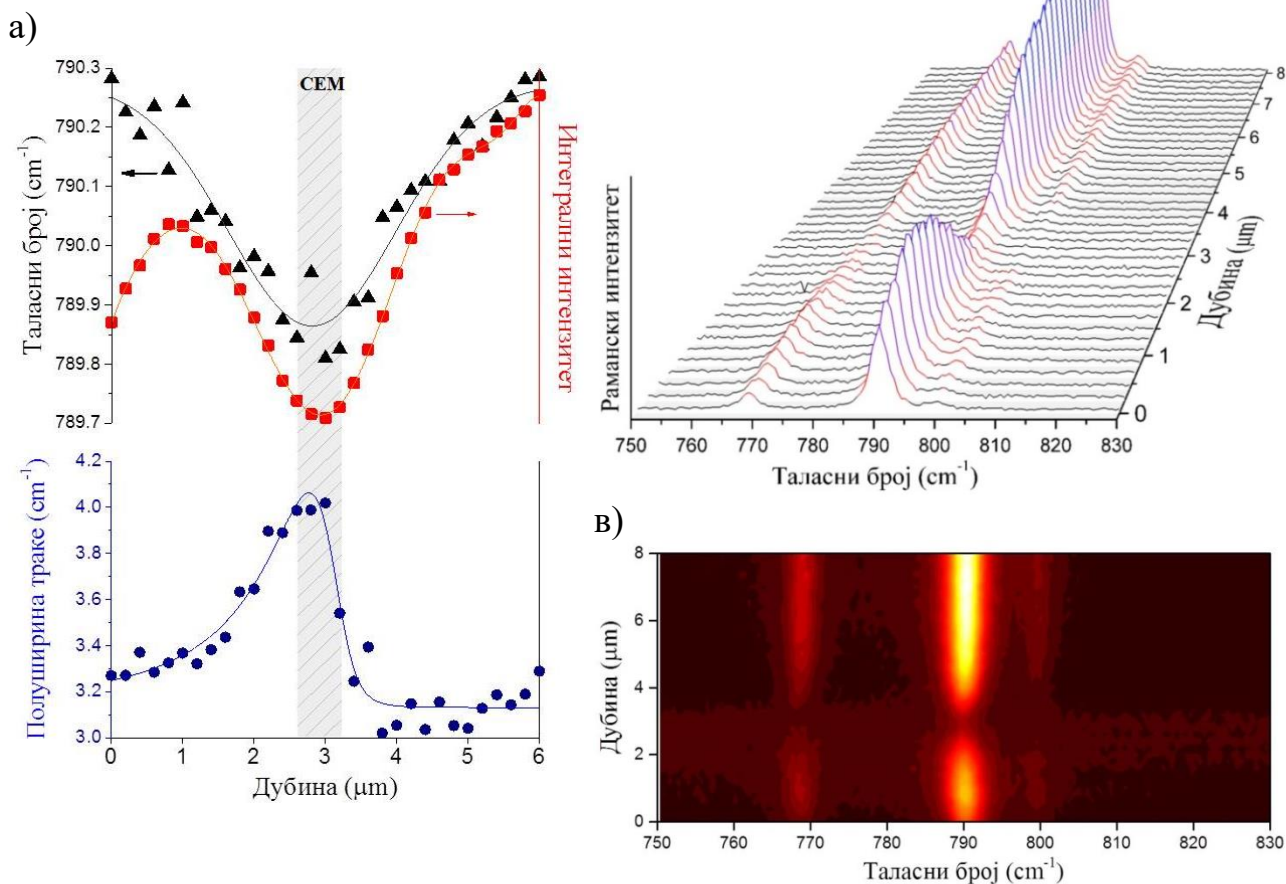


Слика 52. Приказ начина фитовања раманског спектра са три траке профила Лоренцовог типа (L1 – 770 cm^{-1} , L2 – 791 cm^{-1} , L3 – $\sim 960\text{ cm}^{-1}$) и шест трака профила Гаусовог типа (G1 – $\sim 535\text{ cm}^{-1}$, G2 – $\sim 600\text{ cm}^{-1}$, G3 – $\sim 660\text{ cm}^{-1}$, G4 – $\sim 775\text{ cm}^{-1}$, G5 – $\sim 866\text{ cm}^{-1}$, G6 – $\sim 930\text{ cm}^{-1}$).

На слици 53а приказане су промена позиције, полуширине и интегралног интензитета најистакнутије раманске траке на 791 cm^{-1} са дужином у случају узорка имплантираног јонима угљеника најнижег флуенса (M(C-1)4). Осенчена зона на графику са слике 53а представља дужину на којој се јављају промене кристалне структуре уочене са SEM слике (слика 46б) и означава зону са највећим степеном аморфизације. Додатно, квалитативни приказ релативне промене интензитета трака у уској области таласних бројева $750\text{--}830\text{ cm}^{-1}$ (у којој доминира трака на 791 cm^{-1}) са дужином приказана је на слици 53б и в.

Са слике 53а уочава се да раманска трака на 791 cm^{-1} незнатно мења позицију са дужином, са максималним померајем од $0,5\text{ cm}^{-1}$ на дубини од $3,0\text{ }\mu\text{m}$. Иако се позиција локалног минимума веома добро поклапа са SEM резултатима, због мале вредности помераја позиције траке резултати нису погодни за интерпретирање профила аморфизоване зоне. За разлику од слабе промене позиције траке, долази до значајне редукације њеног интензитета. Профил интегралног интензитета са дужином показује еволуцију сличну профилу промене позиције траке, с разликом да је одступање суседних вредности експерименталних тачака мање. Локални минимум профила еволуције интегралног интензитета са дужином се поклапа са позицијом максималног помераја траке, као и са SEM резултатима. Разлика између профила интегралног интензитета и позиције траке у површинском делу узорка инструменталног је карактера. Наиме, како је нулта позиција мапирања раманских спектра ивица кристала, тада ће само половина профила ласерског снопа бити на узорку. Са померањем ласерског снопа од површине узорка ка већим дубинама, интензитет траке на 791 cm^{-1} ће расти, што се уочава на слици 53а. Ради прецизније обраде површинског дела дубинског профила интензитета траке на 791 cm^{-1} потребно је направити корекцију. Међутим, услед релативно велике ширине ласерског снопа у односу на испитивану област узорка, дубински профил интегралног интензитета је знатно шири од оног добијеног помоћу EBS/C анализе.

б)

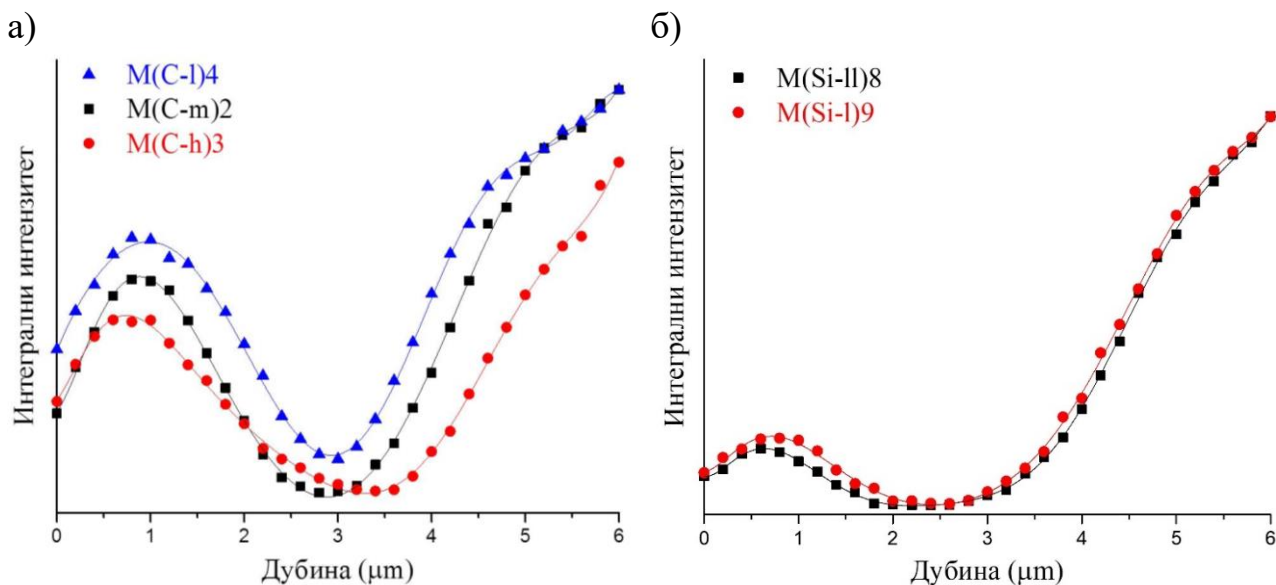


Слика 53. а) Промена позиције, полуширине и интегралног интензитета раманске траке на 791 cm^{-1} са дужином за узорак М(С-1)4, б) рамански спектри М(С-1)4 узорка снимљени до дубине од $8\text{ }\mu\text{m}$ од површине са кораком од $0,2\text{ }\mu\text{m}$ при уском опсегу таласних бројева – регион FTO раманских трака, в) 2D пројекција интензитета раманског спектра са графика под б).

Полуширина раманске траке на 791 cm^{-1} значајно се мења са променом дубине, до 24% у односу на полуширину неимплантираног узорка. Полуширина има вредност око $3,3\text{ cm}^{-1}$ у површинском делу и достиже максималну вредност од $4,0\text{ cm}^{-1}$ на дубини од $2,8\text{ }\mu\text{m}$ до $3,0\text{ }\mu\text{m}$, након чега брзо достиже вредност од $3,0\text{ cm}^{-1}$ која је карактеристична за неимплантиран узорак. Локални максимум профила еволуције полуширине траке са дужином поклапа се са вредношћу дубине на којој је примећен највећи степен аморфизације према SEM анализи. За разлику од профила еволуције помераја и интегралног интензитета траке, профил еволуције полуширине са дужином има облик профила који је добијен SRIM и EBS/C анализом. Такође, има стрмији пад на већим дубинама у сагласношћу са SEM сликом (слика 46б), детаљније објашњено у поглављу 5.7.

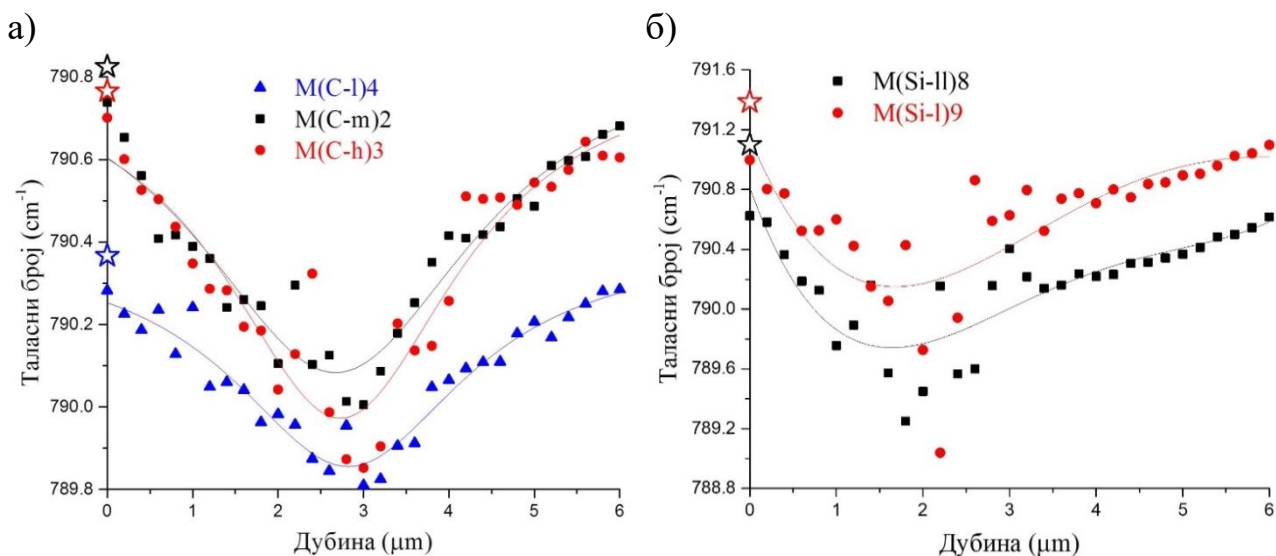
На сликама 54–56 приказани су упоредни резултати еволуције интензитета, позиције и полуширине траке на 791 cm^{-1} за све испитиване узоке, респективно. Узорци М(Si-m)6, М(Si-m)7 и М(Si-h)5 нису приказани јер услед високог степена аморфизације изазваног имплантацијом јона долази до тоталне редукције траке на 791 cm^{-1} , коју је немогуће издвојити од позадине раманских спектра (слика 51, одсуство раманских трака код узорка М(Si-h)5). На слици 54а и б приказане су промене интегралних интензитета трака на 791 cm^{-1} (нормирани на раманске вредности неимплантираног дела узорка снимљеног далеко од имплантиране зоне – $8\text{ }\mu\text{m}$). Профили еволуције интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} показују јасан тренд

смањења интензитета као и постепеног ширења профила са повећањем имплантираног флуенса независно од типа имплантираног јона. У односу на дубинске профиле интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} узорка имплантираних јонима угљеника, профили добијени имплантацијом јонима силицијума не показују добро поклапање локалног минимума са подацима добијеним помоћу SEM анализе. Наиме, ови профили показују јако широку област локалног минимума интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} ($2\text{--}3\text{ }\mu\text{m}$), док је процењена дубина максимума аморфизације на око $2\text{ }\mu\text{m}$. Евидентно је да уз дату количину аморфизације кристалне решетке која је индукована јонима силицијума и ширину ласерског снопа, ови профили интегралног интензитета нису погодни за интерпретацију дубинских профила аморфизације 6H-SiC кристала.



Слика 54. Промена интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} са дужином за различите узорке имплантиране јонима а) угљеника и б) силицијума.

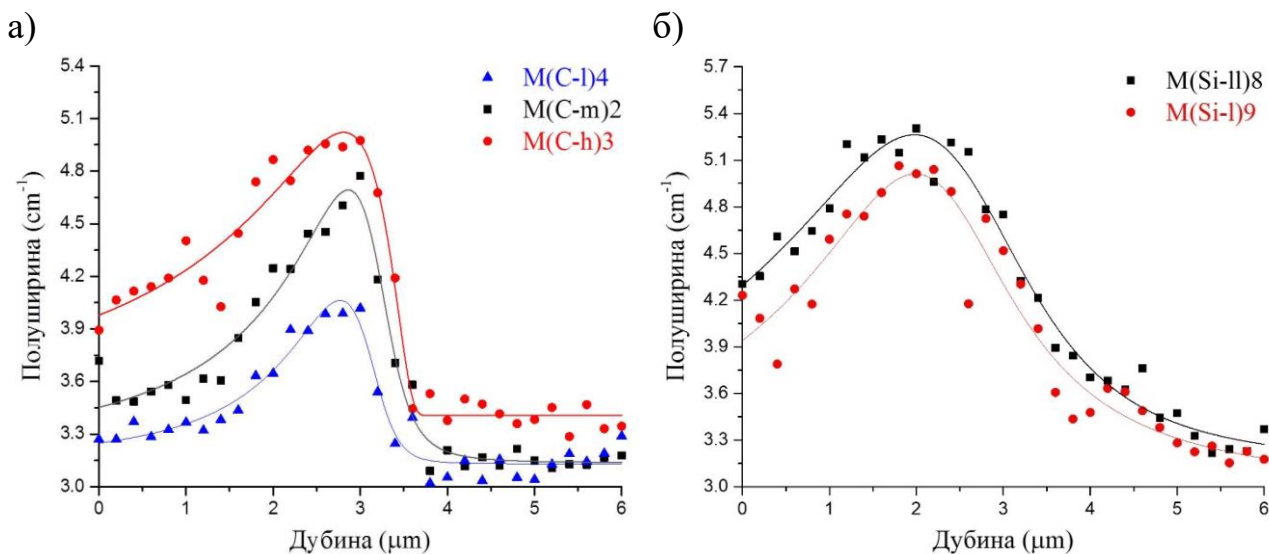
Сви испитивани узорци показују слично понашање у погледу промене позиције траке на 791 cm^{-1} попут претходно дискутованог узорка M(C-l)4. У случају узорка имплантираних јонима угљеника, код узорка M(C-m)2 позиција траке се мења за $0,8\text{ cm}^{-1}$, док се код узорка M(C-h)3 мења за $0,9\text{ cm}^{-1}$ (слика 55a).



Слика 55. Промена позиције раманске траке на 791 cm^{-1} са дужином за различите узорке имплантиране јонима а) угљеника и б) силицијума.

Профили еволуције полуширине траке са дубином слични су дубинским профилима интегралног интензитета са поклапањем локалних минимума на 3 μm . Код узорка имплантираних јонима силицијума, услед знатно веће индуковане аморфизације кристалне структуре, јављају се велике осцилације суседних експерименталних тачака профила у области дубине са највећим степеном аморфизације. На основу података са слике 55б процењено је да се код узорка M(Si-I)9 позиција траке мења за $\sim 1,5 \text{ cm}^{-1}$, док се код узорка M(Si-II)8 мења за $\sim 1,6 \text{ cm}^{-1}$. У односу на профил еволуције интегралног интензитета, профил еволуције полуширине има минимум на $\sim 2 \mu\text{m}$, што је у сагласности са SEM резултатима.

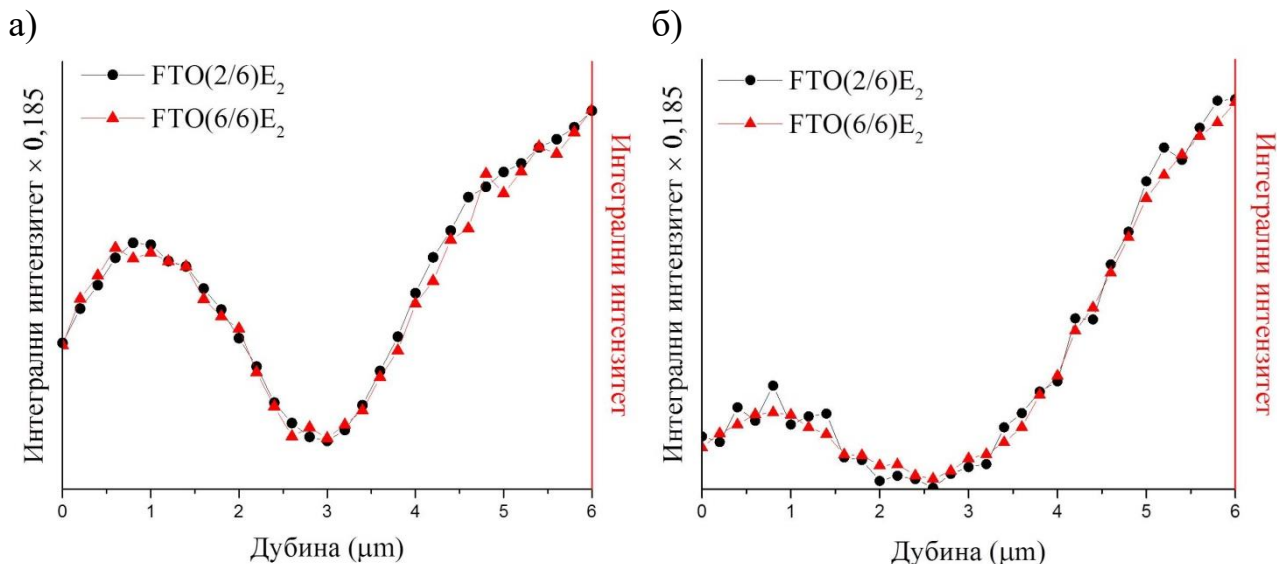
Параметар траке на 791 cm^{-1} чија еволуција са дубином показује најбоље слагање са резултатима SEM и EBS/C анализа јесте полуширина траке. На слици 56 приказани су резултати еволуције полуширине траке. У оба случаја, било да се ради о узорцима имплантираним јонима угљеника или силицијума, јављају се јасни трендови који се веома добро слажу са резултатима SEM анализе за узорке M(C-I)4 и M(Si-I)9. Локални максимуми профила налазе се на 2,8 μm у случају узорка имплантираних угљеником, док се код узорка имплантираних силицијумом јављају на 2,0 μm . Такође, дубински профили полуширина траке на 791 cm^{-1} ка већим дубинама у кристалу имају стрмији пад ка вредностима типичним за неимплантирани кристал 6H-SiC, у складу са резултатима EBS/C анализе. Код узорка имплантираног највећим флуенсом јона угљеника, M(C-h)3, полуширина траке на 791 cm^{-1} овај пад профила спорије достиже вредност карактеристичну за неимплантирани кристал 6H-SiC. Разлог за овакво понашање може се потражити у комбинацији неколико утицаја: количини индуковане аморфизације кристала, повећању ширине аморфизоване зоне и коначне ширине ласерског снопа. Слично се дешава и код узорка имплантираних јонима силицијума. Узорци имплантирани јонима силицијума показују мање стрме прелазе са стране профила на већим дубинама, што се оправдава SEM сликом за узорак M(Si-I)9.



Слика 56. Промена полуширине раманске траке на 791 cm^{-1} са дубином за различите узорке имплантиране јонима а) угљеника и б) силицијума.

Разматрајући само промену позиције, интегралног интензитета и полуширине траке на 791 cm^{-1} не можемо добити јасну слику о квалитативном начину промене кристалне структуре као последице процеса јонске имплантације. Један од параметара који се може користити за процену начина на који се мења кристална структура услед процеса јонске имплантације јесте однос интегралних интензитета трака на 770 cm^{-1} и 791 cm^{-1} . Однос интегралних интензитета ових раманских трака је карактеристика 6H-SiC кристалне структуре и користи се за утврђивање присутности кристалне фазе [75]. На слици 57 приказана је еволуција са дубином интензитета 770 cm^{-1} и 791 cm^{-1} трака за два узорка имплантирана различитим јонима и најмањим флуенсом. Слични резултати се добијају и код осталих узорка, с разликом да са

повећањем флуенса трака на 770 cm^{-1} постаје слабо изражена у односу на позадински шум спектра, те је и велика несигурност њеног фитовања. На основу резултата са слике 57 може се видети да је однос датих трака константан током читаве дубине узорка. Ово указује на чињеницу да након процеса јонске имплантације долази до делимичног очувања 6H-SiC кристалне структуре (очување sp^3 веза – сваки атом угљеника окружен са четири атома силицијума) у облику очувања уређења кратког домета.

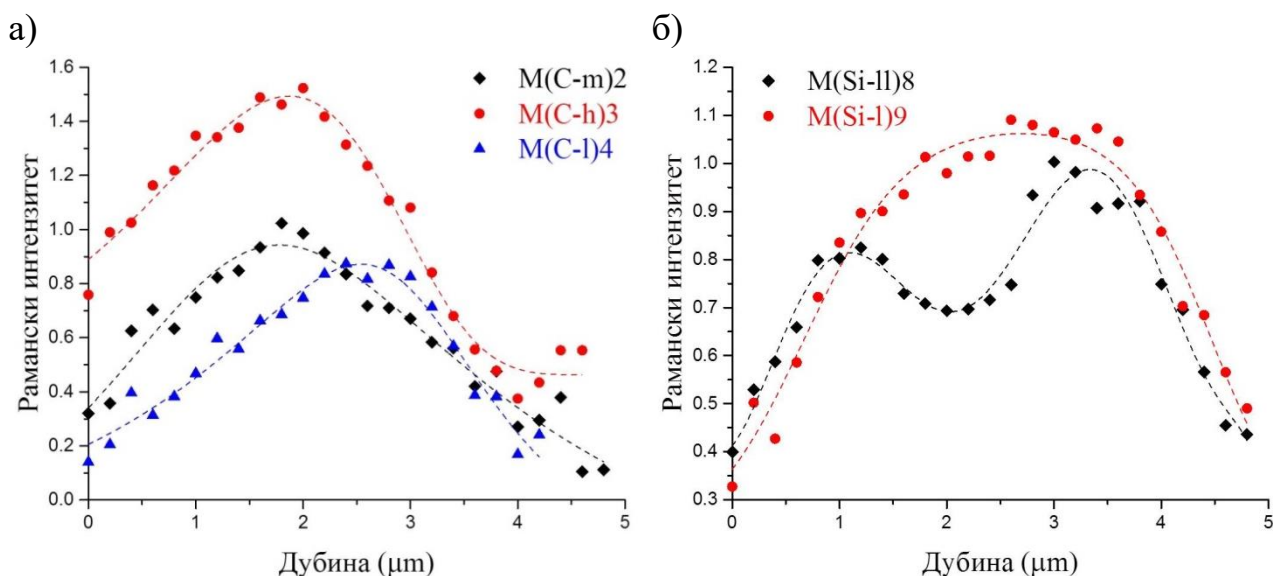


Слика 57. Промена раманског интензитета трака на 770 cm^{-1} и 791 cm^{-1} са дубином за узорке а) $\text{M}(\text{C-l})4$ и $\text{M}(\text{Si-l})9$.

Нумеричким калкулацијама показано је да FTO вибрациони мод не мења фреквенцију (енергију) и полуширину спектралне траке (енергијску неодређеност FTO фонона) услед хомогеног смањења уређења кристалне структуре, чак ни при веома малим димензијама кристалних домена [191]. Хомогено смањење уређења кристалне структуре подразумева процес приликом кога не долази до акумулације структурних дефеката на одређеним местима у кристалу. Како је на основу добијених резултата евидентан мали померај траке на 791 cm^{-1} и значајна промена њене полуширине (слике 55а и 56а), аморфизација је у овом случају хетерогеног типа и можемо говорити о постојању кристалних домена у оквиру аморфне фазе. Додатно, мали померај раманске траке на 791 cm^{-1} може бити последица напрезања кристалних домена [192].

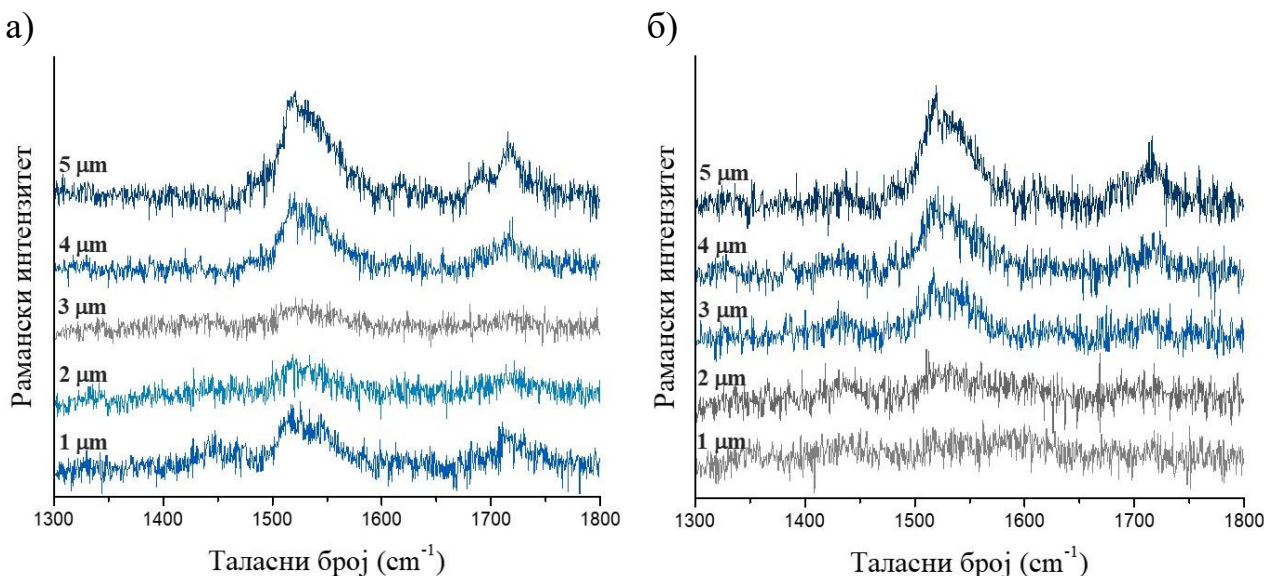
На слици 58 приказане су еволуције са дубином суме интегралних интензитета широких трака, ($\sim 535\text{ cm}^{-1}$, $\sim 600\text{ cm}^{-1}$, $\sim 660\text{ cm}^{-1}$, $\sim 775\text{ cm}^{-1}$, $\sim 870\text{ cm}^{-1}$, $\sim 933\text{ cm}^{-1}$; G1–G6 – слика 52) из $450\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$ области таласних бројева (нормирани на суму интегралног интензитета спектра на дубини далеко од имплантиране зоне) чије се порекло везује за појаву неуређености кристалне структуре. Појава широких трака у великој мери зависи од имплантираног флуенса. Наиме, примећено је да са порастом флуенса долази до пораста интегралног интензитета ових широких трака. Ово важи до одређене вредности имплантираног флуенса након чега долази до њиховог постепеног гашења. На слици 58а, узорци имплантирани угљеником, види се пораст суме интегралног интензитета широких трака са порастом флуенса. Међутим, локални максимуми ових профила се не поклапају са дубином на којој се налази максимална количина аморфизације, што указује да су кристални домени и аморфна фаза случајно распоређени унутар кристала. Код узорака имплантираних јонима силицијума са порастом флуенса долази до смањења суме интегралног интензитета широких трака (слика 58б). И у овом случају профили и позиције локалних максимума нису у сагласности са SEM и EBS/C резултатима. Међутим, дубина на којој долази до највећег

смањења интегралног интензитета суме широких трака код узорка M(Si-II)8 поклапа се са дубином на којој се налази највећи степен аморфизације (~2 μm).



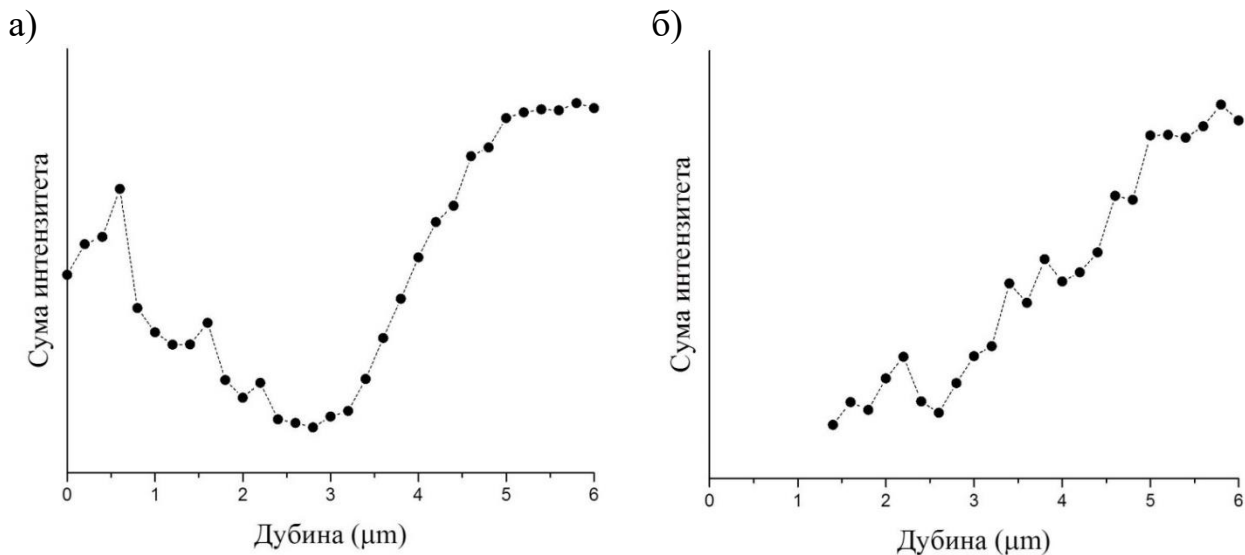
Слика 58. Еволуција суме интегралног интензитета широких трака на $\sim 535\text{ cm}^{-1}$, $\sim 600\text{ cm}^{-1}$, $\sim 660\text{ cm}^{-1}$, $\sim 775\text{ cm}^{-1}$, $\sim 870\text{ cm}^{-1}$, $\sim 933\text{ cm}^{-1}$ за узорке имплантиране различитим флуенсима јона а) угљеника и б) силицијума.

Рамански спектри у области $1400\text{--}1800\text{ cm}^{-1}$ таласних бројева за узорке M(C-l)4 и M(Si-l)9 приказани су на слици 59 за неколико различитих дубина. Спектар у овој области сачињавају комбинационе траке и овертонови чије је порекло објашњено у табели 3. У оба случаја са порастом количине аморфизације кристалне структуре долази до смањења интензитета високофреквентних раманских трака. Додатно, не запажа се промена њихових релативних интензитета. Међутим, на дубинама кристала са високим степеном аморфизације долази до знатне редукције интензитета и до стапања са шумом спектра, што је посебно изражено у случају узорка M(Si-l)9. Последишно, чак и при најнижој вредности имплантираног флуенса јона силицијума, ова област раманског спектра није погодна за праћење промене аморфизације са дубином узорка.



Слика 59. Рамански спектри узорка а) M(C-l)4 и б) M(Si-l)9 за спектралну област $1400\text{--}1800\text{ cm}^{-1}$ при различитим дубинама кристала.

Промена суме интензитета трака другог реда из спектралне области $1500\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$ са дубином приказана је на слици 60а и б. Са слике 60а, случај имплантације јонима угљеника, запажа се јасан тренд промене суме интензитета са променом дубине узорка чији се локални минимум (максимум аморфизације) налази на око $2,8\text{ }\mu\text{m}$. Резултат се одлично слаже са раније добијеним подацима тумачењем параметара раманских трака првог реда. За разлику од јона угљеника, јони силицијума изазивају већу редукацију интензитета и при нижем флуенсу дуж целе имплантиране области. Одсуство података о интензитету у површинском региону кристала са слике 60б последица је мерне несигурности услед веома ниског интензитета трака.



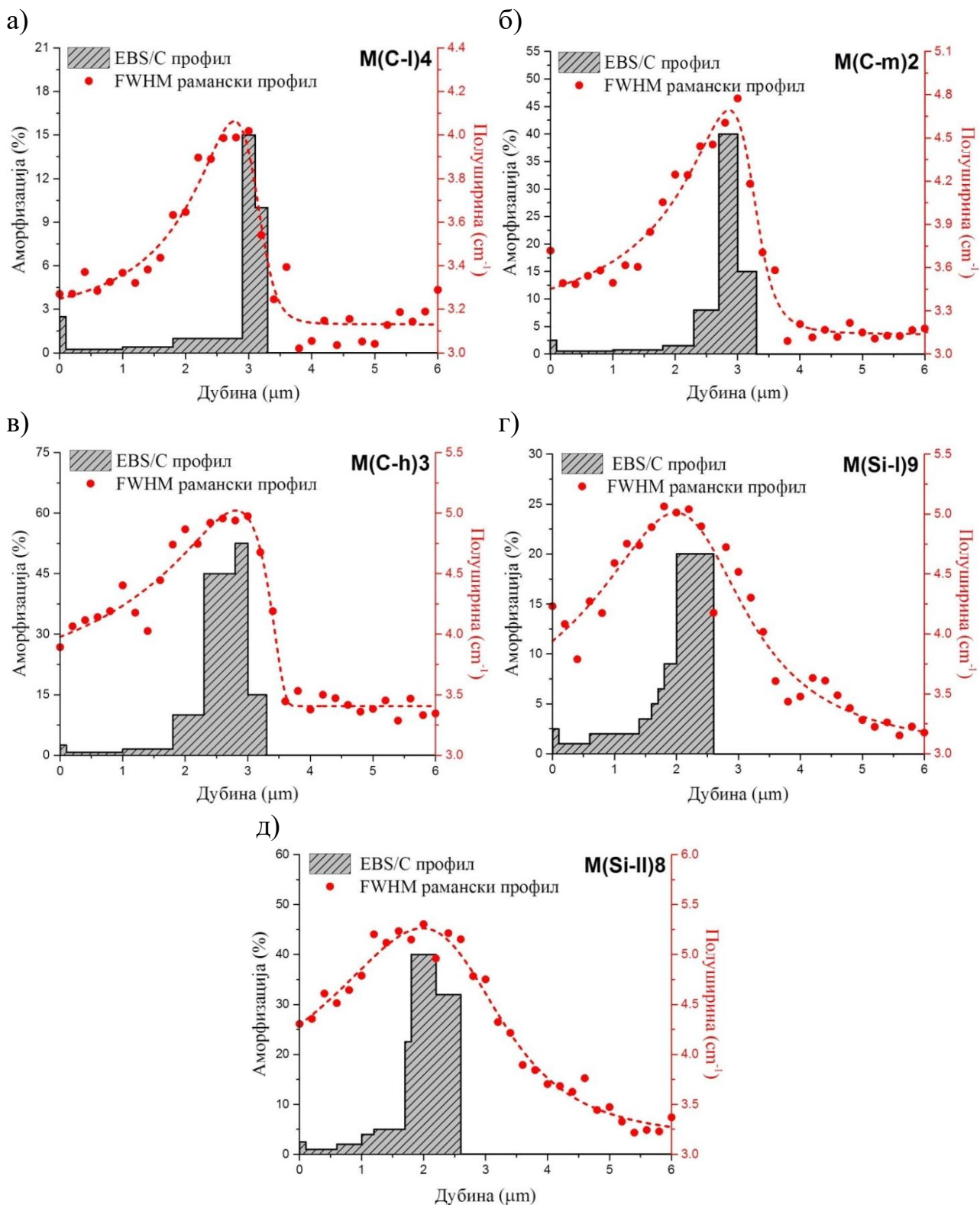
Слика 60. Промена суме интензитета трака другог реда из спектралне области $1500\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$ са променом дубине за а) M(C-1)4 и б) M(Si-1)9 узорак.

Промена интензитета трака другог реда у области $1400\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$ може нам пружити информацију о типу дефеката кристалне структуре индукованих јонском имплантацијом. Наиме, Миро (S. Miro) и сарадници испитивали су утицај имплантације (случајна оријентација кристала) тешких јона, јода енергије 900 keV и волфрама енергије 36 MeV , на структуру 6H-SiC [110]. Микро-рамански спектри аморфизованих региона показали су појаву широке траке великог интензитета на 1420 cm^{-1} , чије се порекло везује за појаву C-C хомонуклеарних sp^2/sp^3 веза насталих деградацијом кристалне структуре 6H-SiC . Са порастом степена аморфизације интензитет трака је растао. Слично је запажен пораст интензитета трака на $\sim 535\text{ cm}^{-1}$ (слика 52), који се везује за појаву Si-Si хомонуклеарних веза и неуређене SiC структуре. У нашем случају са слике 59 не примећује се пораст интензитета трака у $1400\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$ региону таласних бројева, док у $400\text{--}600\text{ cm}^{-1}$ региону долази до пораста интензитета чак и при најнижим флуенсима. Ово упућује на механизам деградације кристалне структуре 6H-SiC фаворизовањем измештања лакших атома угљеника са својих места у кристалној решетки. Дати закључак може се оправдати чињеницом да је енергија помераја атома угљеника за 50% већа од енергије помераја атома силицијума у кристалној решетки SiC [97].

5.8.3. Поређење EBS/C и раманских профила

Као најбољи параметар раманских спектра 6H-SiC , који може послужити за добијање дубинских профила аморфизације помоћу μR спектроскопије, показала се полуширина траке на 791 cm^{-1} (поглавље 5.8.2.). Стога, поређење профила аморфизације добијених EBS/C анализом извршено је са дубинским профилима полуширине траке на 791 cm^{-1} . На слици 61 приказан је упоредни приказ профила аморфизације добијен методама μR спектроскопије и EBS/C анализе. Резултати показују одлична слагања код свих испитиваних узорака. Мања одступања у виду поклапања центара локалних максимума у случају узорака M(C-1)4 и M(Si-1)9 могу се приписати коначној ширини ласерског снопа (додатно узрокује и већу ширину

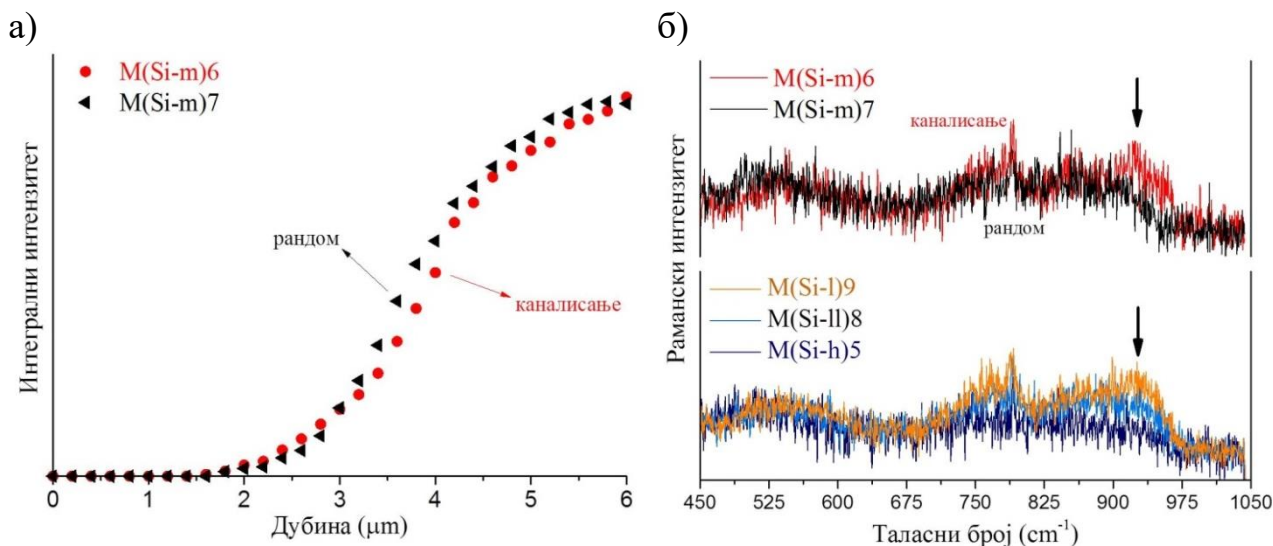
раманских профила). Максимални нивои аморфизације код узорака M(C-I)4 и M(Si-I)9, су знатно нижи него у другим случајевима, па ће ласерским снопом обухваћена област мање аморфизованог кристала имати већи утицај на рамански спектар. Такође, утицај протона високих енергија на структуру кристала, коришћених приликом EBS/C анализе (пре спровођења μR анализе), мора бити узета у обзир.



Слика 61. Поређење EBS/C профила и профила полуширине раманске траке на 791 cm^{-1} за узорке а) M(C-I)4, б) M(C-m)2, в) M(C-h)3, г) M(Si-I)9 и д) M(Si-II)8.

5.8.4. Каналисање и случајна оријентација

Показано је да имплантација јона у моду каналисања доводи до повећања домета јона као и до смањења количине индуковане аморфизације у односу на имплантацију при случајној оријентацији [49]. На слици 62а приказана је еволуција интензитета траке на 791 cm^{-1} за два узорка имплантирана истим флуенсима јона силицијума, али при различитој оријентацији кристала (случајна оријентација – узорак M(Si-m)7, каналисање – узорак M(Si-m)6). Код ових узорака површински регион је изражено аморфизован и јавља се редукција интензитета свих трака првог реда у раманском спектру, па последично и одсуство информација у површинском делу узорка. Са повећањем дубине, након имплантиране зоне интензитет траке на 791 cm^{-1} постепено расте. Одсуство раманских трака у површинском региону доводи до непрецизности при одређивању нулте тачке ласера и сходно томе до непоузданости зависности интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} од дубине кристала. Међутим, како се у овом случају узорци M(Si-m)6 и M(Si-m)7 налазе на истом комаду кристала и деле заједничку ивицу, програмираном путањом ласерског снопа направљено је поређење интегралног интензитета траке на 791 cm^{-1} раманског спектра полазећи од исте (процењене) нулте позиције. Стога, са слике 62 можемо анализирати релативну промену интензитета ова два узорка, док се скала дубина може разликовати од реалне (за сврху поређења ефеката оријентације кристала није неопходна прецизност дубине).



Слика 62. а) Еволуција интензитета траке на 791 cm^{-1} за узорке M(Si-m)7 (случајна оријентација), M(Si-m)6 (каналисање); б) рамански спектри различитих узорка са дубине високог степена аморфизације.

Са слике 62а види се да интегрални интензитет траке на 791 cm^{-1} има различиту дубинску расподелу за различите оријентације кристала, с тим да у случају јонске имплантације у каналишућем моду има померај ка већим дубинама, а што је у складу са очекиваним већим продором јона. Разлике добијених профила нису велике, што је последица релативно мале величине канала бН-SiC кристала, па се домет јона при каналишућој имплантацији не разликује пуно од оне при случајној оријентацији (на основу EBS/C, $\sim 0,3\text{ }\mu\text{m}$).

Разлика у раманским спектрима узорака M(Si-m)6 и M(Si-m)7 снимљених у изразито аморфизованој зони кристала јављају се и у спектралној области око 930 cm^{-1} . Са слике 62б (горе) може се јасно уочити разлика интензитета у датој области, где спектар узорка имплантиран каналисањем има већи интензитет у датој области таласних бројева. Слично је примећено и код осталих спектра узорака имплантираних јонима силицијума (спектри из области високог степена аморфизације) приказаних на слици 62б (доле). Са порастом флуенса долази до редукције интензитета зоне око 930 cm^{-1} . Аналогно, може се извести закључак да

јонска имплантација у моду каналисања доводи до мањег степена аморфизације кристалне решетке.

5.8.5. Модел конфинације фонона

Процес имплантације јона у моду каналисања, користећи јоне угљеника и силицијума енергије 4 MeV, доводи до деградације 6H-SiC кристалне решетке уз делимично очување базичне Si-C тетрадарне структуре. Степен деградације зависи од дубине имплантиране зоне и показује карактеристичан дубински профил. Деградација кристалне решетке доводи до прекида трансляционе симетрије кристала и последично до конфинације фонона. Овај ефекат манифестује се померајем позиције и ширењем раманских трака и изразито је приметан када је величина кристалних домена испод 20 nm [193]. Развијени су модели који описују утицај величине кристала на ширење и промену позиција раманских трака. Модел конфинираних фонона или РСМ (енгл. *Phonon Confinement Model*), предложен од стране Рихтера (Н. Richter) и сарадника [194], описује рамански спектар користећи момент кристала, фреквенцију фонона, дисперзионе релације фонона као и степен конфинираности. Стога, познајући дате РСМ параметре зависности, на основу величине помераја и полуширине траке, могуће је проценити величину кристалних домена. Према РСМ моделу интензитет раманског спектра може се проценити користећи једначину [126]:

$$I(\nu) \propto \int_{\chi=0}^{\chi=1} \exp\left(-\frac{k_{BZ}^2(\chi - \chi_0)^2 L_0^2}{16\pi^2} \frac{d\chi}{(\nu - \nu(\chi))^2 + \left(\frac{\Gamma_0}{2}\right)^2}\right) \quad (5.12.)$$

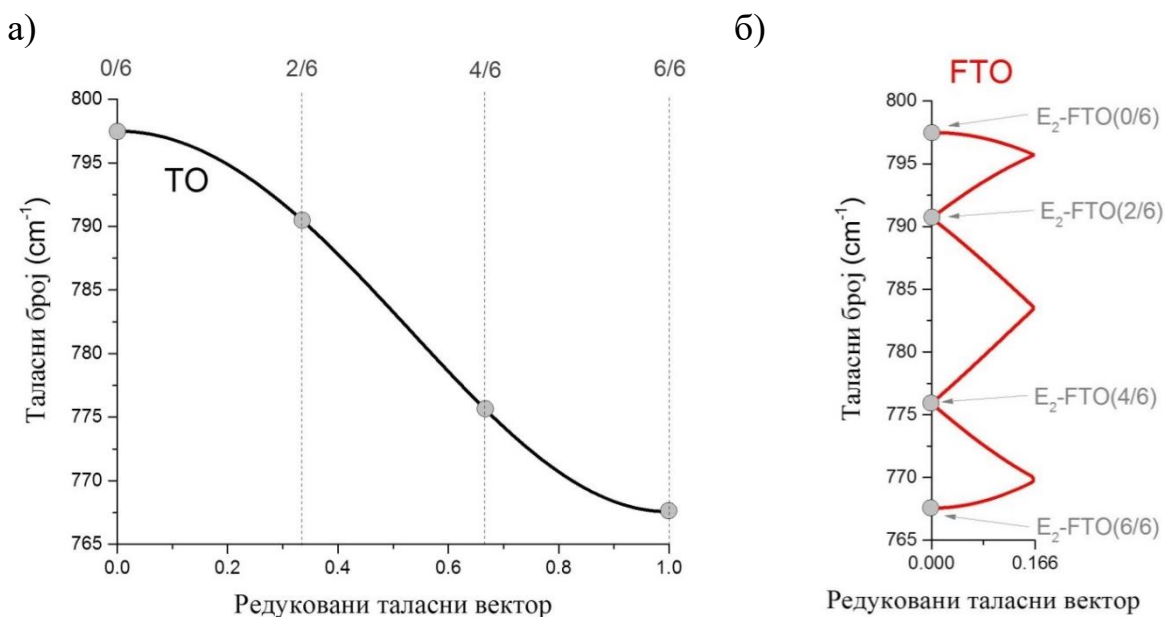
где је L_0 кохерентна дужина која представља просечну дужину региона хомогеног дела материјала (величина кристалита), χ је таласни вектор изражен у јединицама π/a (редуковани таласни вектор), χ_0 представља вредност таласног вектора при максимуму Гаусове функције којом се апроксимира раманска трака (једначина 5.12.), Γ_0 је полуширина раманских трака уређене кристалне структуре, k_{BZ} је вредност таласног вектора на ивици Брилуенове зоне и ν је фреквенција фонона. Како бисмо израчунали интензитет помоћу једначине 5.12. потребно је познавати једначину дисперзионе криве за дати вибрациони мод. Дисперзиона крива за ТО вибрациони мод 6H-SiC може се моделовати користећи Парајантал и Полаков (Р. Parayanthal, F. N. Pollak) приступ [195]:

$$\nu^2(\chi) = A + \sqrt{A^2 - B(1 - \cos(\pi\chi))} \quad (5.13.)$$

где су A и B константе и према Хавелу (М. Havel) и сарадницима имају вредности $A = 3,18 \times 10^5$ и $B = 1,38 \times 10^{10}$ [196]. Графички приказ ТО гране Брилуенове зоне приказан је на слици 63а. Међутим, како у случају 6H-SiC долази до њеног савијања у тачкама $\chi = 2/6, 4/6$ и $6/6$, потребно је узети у обзир појаву додатних ТО модова. Ким (S. Kim) и сарадници вршили су фитовање експерименталних података дисперзионих кривих у циљу добијања дисперзионе зависности за жељени оптички мод [197]. На сличан начин добијене су зависности грана ТО модова. Користећи једначину 5.13. конструисана је савијена Брилуенова зона (слика 63б) и одређена је зависност за све њене нове гране полиномалног типа:

$$\nu(\chi) = P_0 + P_1\chi + P_2\chi^2 \quad (5.14.)$$

чији су параметри приказани у табели 11. Интензитет раманског спектра израчунат је као сума доприноса свих грана насталих савијањем Брилуенове зоне.

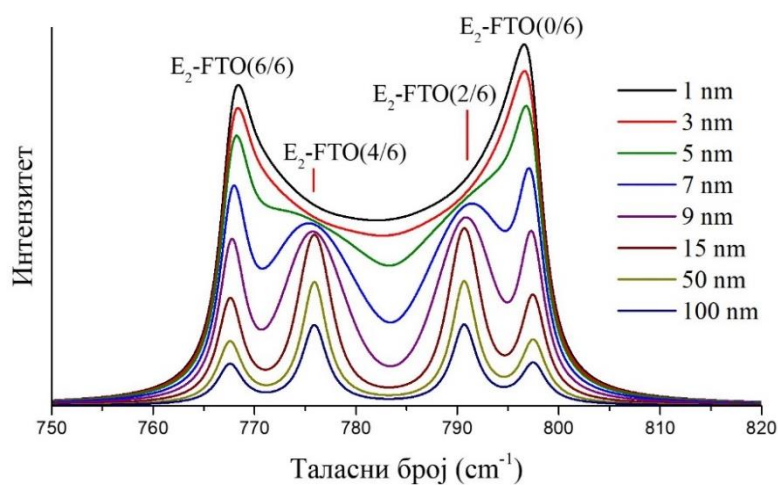


Слика 63. а) ТО грана Брилуенове зоне 3C-SiC и б) FTO гране 6C-SiC настале савијањем Брилуенове зоне 3C-SiC.

Табела 11. Параметри једначине 5.14. FTO дисперзионих грана.

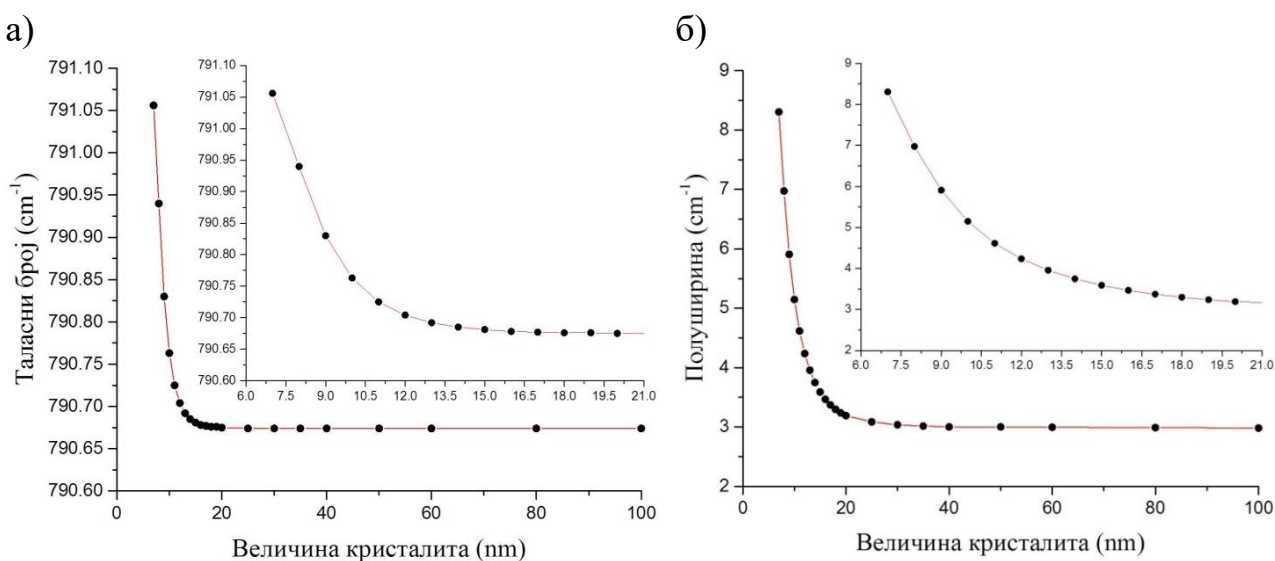
Интервал [cm^{-1}]	P_0 [cm^{-1}]	P_1 [cm^{-1}]	P_2 [cm^{-1}]
767,6–769,8	767,6	-0,29312	82,7514
769,8–775,9	775,9	-43,6205	44,6022
775,9–783,5	775,9	44,3972	10,7987
783,5–790,7	790,7	-39,4256	-25,3238
790,7–795,7	790,7	39,1138	-51,8924
795,7–797,5	797,5	-0,1715	-65,1491

На слици 64 приказани су резултујући спектри за различите величине кристалних домена L_0 . На слици се запажа постојање четири пика која се теоријски могу јавити као последица савијања Брилуенове зоне. Релативни интензитет пикова разликује се због одсуства симетријских правила раманског расејања. Експериментално, трака $E_2\text{-FTO}(4/6)$ не јавља се у спектру, али је њено присуство могуће услед присуства велике концентрације грешака у слагању слојева [185].



Слика 64. Симулирани рамански спектри за FTO модове 6H-SiC при различитим величинама кристалних домена коришћењем РСМ модела.

Како бисмо проценили величине кристалних домена у зонама са највећим степеном аморфизације, фитовани су симулирани спектри коришћењем четири Лоренцова пика. На слици 65а и б приказане су промене полуширине и позиције траке са величином кристалних домена. Са слике 65а може се видети да утицај величине кристалита на позиције траке има тек испод 10 nm. Показано је да код силицијум карбида померај траке снажно зависи од χ_0 фактора, док полуширина и асиметрија траке зависе од величине кристалних домена [196]. Параметар χ_0 је такође и функција неуређености кристалне структуре, па би требало да се разматра као независна променљива. Међутим, експериментално је показано да је померај положаја траке веома мали ($<1,5 \text{ cm}^{-1}$), што указује на то да χ_0 има вредност која је блиска нули, те с тим у вези има и слабу зависност од степена уређења кристалне структуре. Ипак, израчунати и експериментални резултати помераја траке (иако веома мали) показују промене позиције траке у различитим смеровима (плави и црвени померај). Ово неслагање може се објаснити напрезањем структуре индиковане процесом имплантације јона.



Слика 65. Симулиране промене а) позиције и б) полуширине траке на 791 cm^{-1} са величином кристалних домена коришћењем РСМ модела. Уметнути графици на сликама представљају увећање области од интереса истих графика.

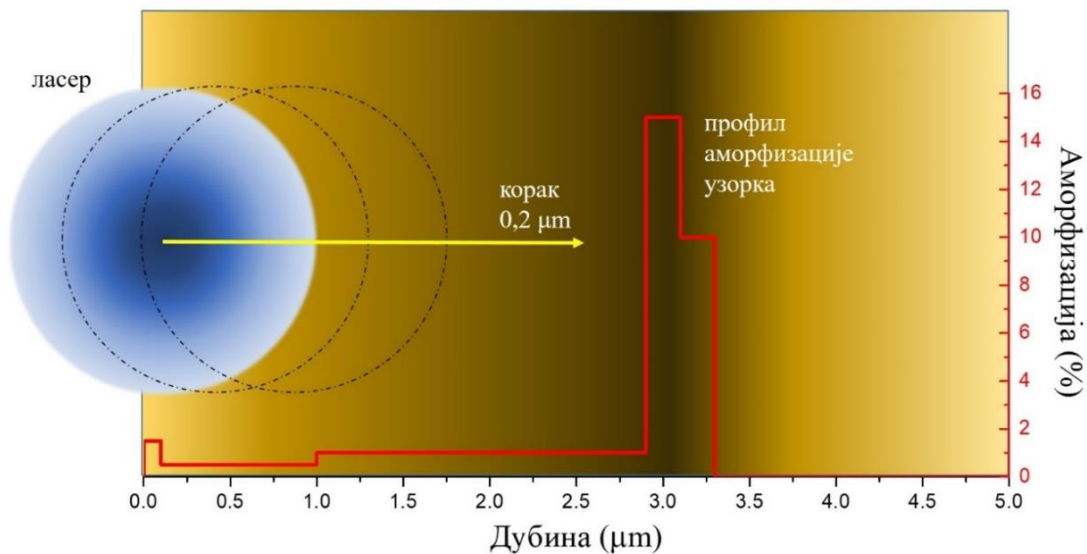
Са слике 65б види се да за разлику од промене позиције траке, полуширина траке показује значајнију промену за величине кристалита које су мање од око 20 nm. На основу дате зависности процењене су величине кристалита на дубини са највећим степеном аморфизације кристала за све узорке испитане раманском спектроскопијом и резултати су приказани у табели 12. Процењене величине кристалита имплантираних узорака на дубинама са највећим степеном аморфизације крећу се у опсегу 9–13 nm у зависности од коришћеног флуенса и јона.

Табела 12. Вредности величине кристалита на најаморфизованијим дубинама кристала.

Узорак	Максимална ширина траке [cm^{-1}]	Димензија кристалита [nm]
M(C-1)3	5,02	10,24
M(C-m)2	4,69	10,86
M(C-h)4	4,06	12,65
M(Si-1)9	5,01	10,22
M(Si-11)8	5,26	9,85

5.8.6. Проблем ширине ласерског снопа

Одступање ширина дубинских профила аморфизације добијених μR мапирањем кристала и коришћењем EBS/C последица је ширине ласерског снопа коришћеног при μR анализи. Наиме, резултујући рамански спектар на датој дубини обухвата допринос око $\pm 0,5 \mu\text{m}$ радијално од центра ласера (при дефиницији ширине снопа ласера као $1/e$). Последице, рамански спектар није у потпуности одраз стања дате дубине. За добијања реалних профила аморфизације неопходно је укључити овај утицај и извршити конволуцију добијених μR профила аморфизације. У циљу превазилажења датог проблема предложена је симулациона процедура која се заснива на фитовању профила еволуције интегралног интензитета раманске траке на 791 cm^{-1} . Симулациона процедура извршена је коришћењем MatLab програмског пакета.



Слика 66. Илустрација поступка симулације μR профила аморфизације.

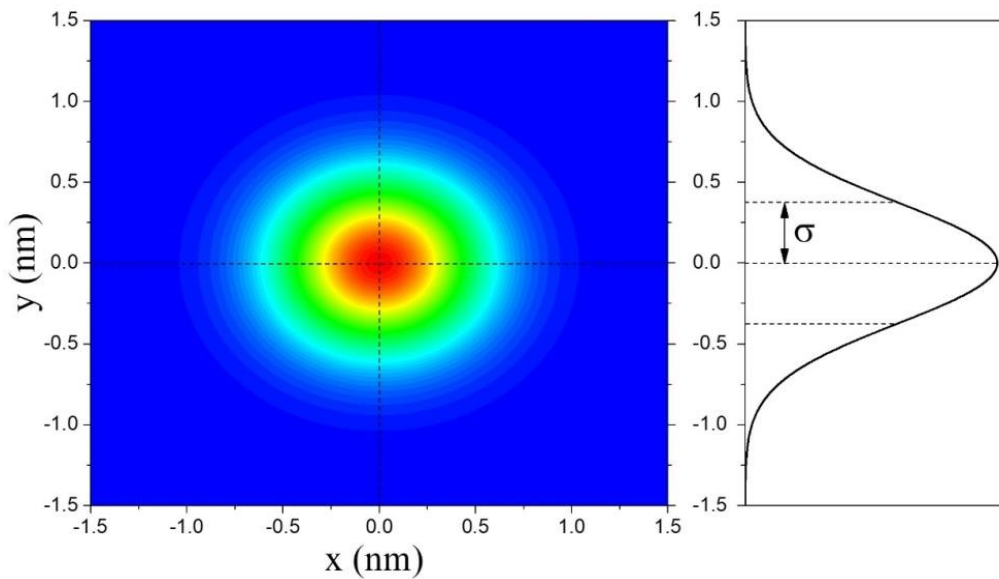
Основна идеја за рачунање реалних профила аморфизације проистекла је из експерименталне процедуре μR мапирања (слика 66). Наиме, кристал је подељен у компјутационе слојеве контролисане дебљине. Као улазни сет података потребно је претпоставити профил аморфизације кристала. Ширина слоја је потребно да буде довољно мала тако да одговара целобројном умношку сваког дела профила са константним степеном аморфизације. Даље смањење ширине слоја од горе споменутог не доводи до побољшања добијених резултата, већ само до повећања рачунарског времена. Преко симулираног кристала са дефинисаном расподелом аморфизације по дубини и дефинисаним кораком помера се ласерски сноп. Интензитет ласера је апроксимиран 2D Гаусовом функцијом расподеле која представља производ две 1D Гаусове функције [198] (по једна за сваки правац) и дат је једначином:

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\left(\frac{x^2+x_0^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2+y_0^2}{2\sigma_y^2}\right)} \quad (5.15.)$$

где је σ стандардна девијација, а x и y координате профила ласера. Највећи допринос интензитету раманског спектра долазиће од позиција ласера које су ближе центру његовог профила с обзиром да је ту интензитет ласера највећи. Вредност стандардне девијације процењена је на основу μR података. Експериментално добијена полуширина снопа ласера (Гаусовог облика) коришћеног у експериментима приказана је у табели 10 и износи $0,88 \mu\text{m}$. Вредност стандардне девијације израчунава се на следећи начин [198]:

$$\text{FWHM}(G(x, y)) = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \quad (5.16.)$$

и износи $0,37 \mu\text{m}$. Профил ласера за дату вредност стандардне девијације приказан је на слици 67. У зони кристала у којој се врши мерење, сваки од компјутационих слојева са одређеним степеном аморфизације који је обасјан ласерским снопом даје свој допринос. Допринос за сваки компјутациони слој зависиће од количине аморфизације и од вредности интензитета ласера у тачки преклапања ласера и датог слоја. Сумирањем свих доприноса обухваћених профилем ласера добија се вредност симулираног интензитета за дату дубину. Итеративним поступком, са померајем позиције ласера од $0,2 \mu\text{m}$ дуж имплантиране области, добија се комплетан симулирани профил интензитета раманског расејања. Процедура фитовања сачињава прилагођавање профила аморфизације и понављање поступка све док се не добије добро поклапање симулиране и експерименталне криве.



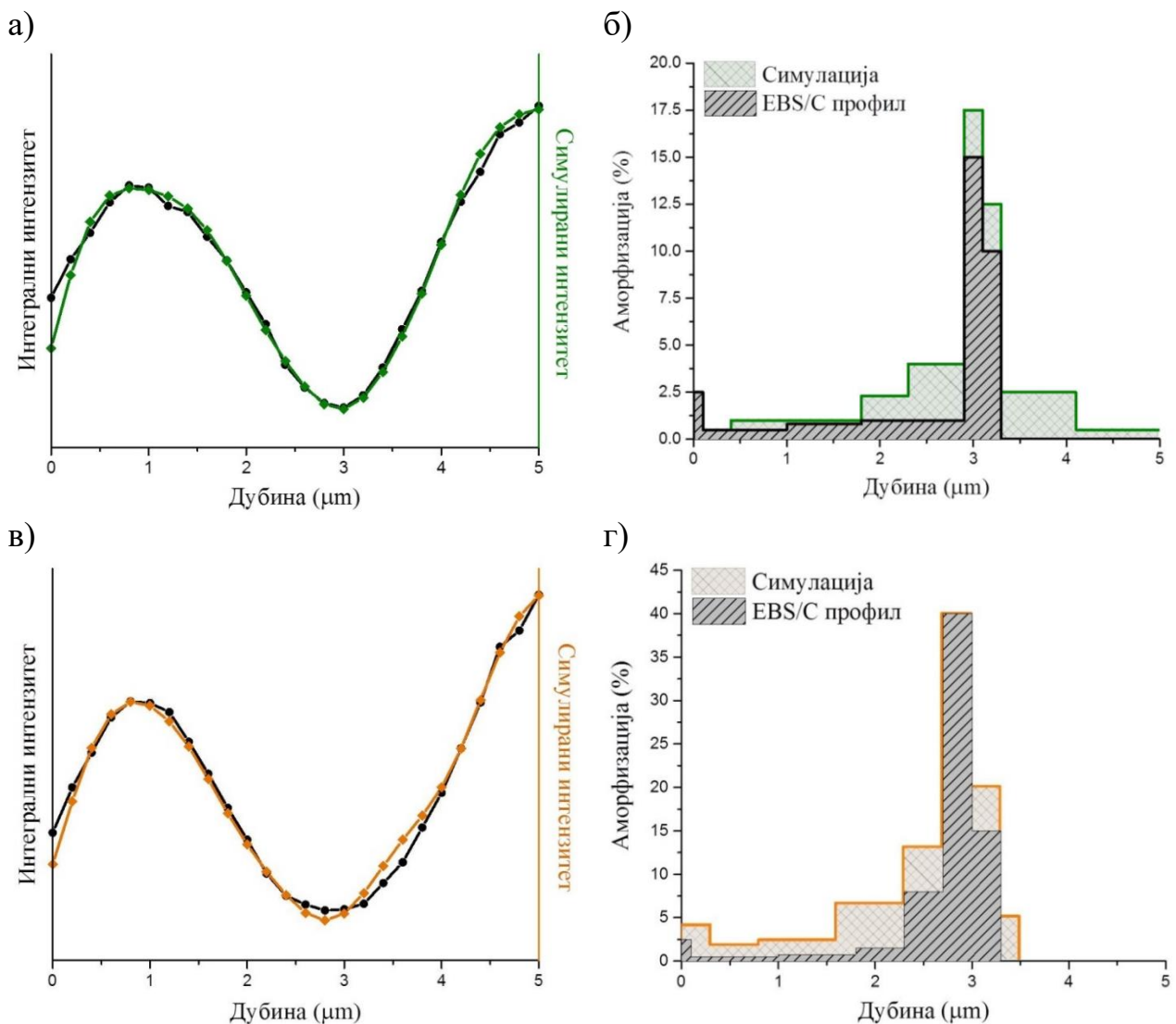
Слика 67. 2D профил интензитета ласерског снопа Гаусовог типа коришћеног у симулационој процедури.

Интензитет расејане раманске светлости није линеарно пропорционалан количини аморфизације кристалне решетке, због чега потребно унети корекциони фактор. Утицај аморфизације на интензитет раманског расејања може се описати формулом која се користи за израчунавање интензитета расејане светлости и гласи [49]:

$$I \sim 1 - e^{-\left(\frac{4\pi\eta}{\lambda}\right)^2} \quad (5.17.)$$

где је η средњи квадрат грубости/храпавости површине, а λ ласерска дужина. Показано је да је параметар η пропорционалан величини кристалита унутар кристала, L_k . Величина кристалних домена може се апроксимирати помоћу вредности помераја атома (SRIM) у облику $L_k \approx C/D^\beta$, где је C константа а D вредност помераја атома за дату дубину. У датом моделу, уместо вредности D коришћени су профили аморфизације (A , као из CSIM програма), док је константа C израчуната помоћу вредности за L_0 добијене преко PCM модела за дубину са највећом количином аморфизације. Показано је да коефицијент $\beta = 0,5$ даје добар опис раманских карактеристика [49] па модификована једначина гласи:

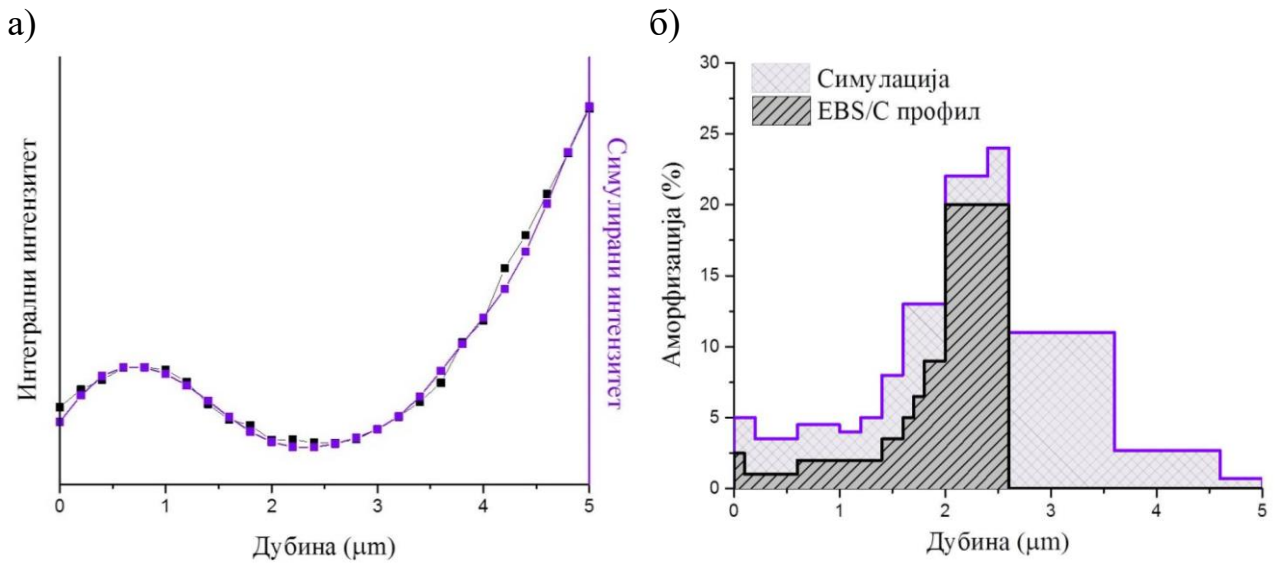
$$I \sim 1 - e^{-\left(\frac{4\pi C}{\lambda A^{0,5}}\right)^2} \quad (5.18.)$$



Слика 68. Фитована и експериментална крива за узорак а) $M(C-l)4$ и в) $M(C-m)2$, као и поређење добијених симулационих профила и EBS/C профила аморфизације за узорак б) $M(C-l)4$ и г) $M(C-m)2$.

Резултати симулације за узорке $M(C-l)4$ и $M(C-m)2$ приказани су на слици 68. На слици 68а и в су приказана најбоља поклапања симулираних и експерименталних раманских спектра за профиле аморфизације приказане на слици 68б и г, респективно. На слици 68б и г приказани су и спектри добијени помоћу CSIM програма ради поређења. Добијени профили показују добро слагање са профилима добијеним помоћу CSIM програма. Мања одступања од неколико процената могу се приписати самој EBS/C методи. Наиме, EBS/C анализа извршена је пре μR анализе, услед чега се у раманским спектрима може очекивати мањи утицај лаквих протона коришћених у анализи на кристалну решетку силицијум карбида (домет 10–26 μm у зависности од енергије протона).

Остали узорци ($M(Si-l)9$, $M(Si-ll)8$ и $M(C-h)3$) показују знатно већа одступања у односу на профиле добијене EBS/C анализом. Највећа одступања јављају се на дубинама непосредно након максималног домета јона, као што је то приказано на примеру узорка $M(Si-l)9$ са слике 69. Дата одступања не могу се приписати само последици EBS/C анализе, већ се у обзир морају узети и други фактори попут квалитета испитиване површине добијене сечењем кристала. Наиме, пре извођења μR анализе није извршено полирање површина попречних пресека узорка који су мапирани. Стога се утицај површине може значајно одразити на интензитет раманског спектра у виду привидно већег степена аморфизације кристала од реалног.



Слика 69. а) Фитована и експериментална крива; б) поређење добијених симулационих профила и EBS/C профила аморфизације за узорак M(Si-1)9.

6. ЗАКЉУЧЦИ

У оквиру ове докторске дисертације изложени су резултати експерименталног рада на истраживању утицаја имплантације јона угљеника и силицијума енергије 4 MeV у моду каналисања на структурне промене монокристала 6H-SiC. Након успешно изведене имплантације јона у аксијалном [0001] правцу, узорци су анализирани методама EBS и EBS/C, SEM и μ R.

Спектри добијени EBS и EBS/C методама даље су анализирани CSIM рачунарским програмом који је током израде докторске дисертације побољшан у виду начина рачунања параметара каналисања јона. Након датог унапређења CSIM програма, он је успешно примењен на проблематику дисертације која обрађује имплантацију јона у моду каналисања за мету која се састоји од истородних атома и јона који су коришћени за имплантацију. Са порастом флуенса имплантираних јона угљеника и силицијума приноси EBS/C спектра показују постепено приближавање приносу који одговара случајној оријентацији имплантираног узорка односно односу одговарајућем EBS спектру. Ово је посебно изражено у случају имплантације јонима силицијума, што указује на знатно већи степен аморфизације мете коју узрокује имплантација силицијумом у односу на јоне угљеника. Тумачењем EBS/C спектра имплантираних узорака добијених коришћењем протона енергије 1,000 MeV, 1,725 MeV и 1,860 MeV помоћу CSIM рачунарског програма добијени су профили аморфизације по дубини мете који су показали добро међусобно слагање. Максимуми аморфизације за најниже флуенсе се простиру од 2,0 μ m до 2,6 μ m у случају имплантације јона силицијума и 2,9 μ m до 3,1 μ m у случају имплантације јона угљеника. С порастом флуенса, зона са највишим степеном аморфизације се шири и помера према површини до достизања вредности које су карактеристичне за имплантацију при случајној оријентацији кристала. Додатно, показано је боље слагање између профила EBS/C спектра снимљених коришћењем протона енергије 1,725 MeV и 1,860 MeV. Разлог за то је постојање резонантних пикова у EBS/C спектрима који су погодни енергијски маркери.

У циљу прецизнијег сагледавања утицаја флуенса јона на количину индиковане аморфизације у кристалу 6H-SiC, испитана је зависност интегралног интензитета EBS/C профила аморфизације у функцији коришћеног флуенса. Зависност интегралне аморфизације у функцији примењеног флуенса показује експоненцијални облик са бржим трендом раста у случају имплантације јонима силицијума. Са порастом флуенса долази до постепеног смањења количине индиковане аморфизације што наговештава сатурацију. На основу добијених резултата, у циљу процене количине аморфизације 6H-SiC настале при каналисању различитих јона енергије 4 MeV у опсегу флуенаса до $2,25 \times 10^{16}$ јона \cdot cm⁻², предложен је модел индиковане тоталне аморфизације. Користећи предложени модел могуће је проценити вредности интегралне аморфизације за јоне маса приближних угљенику и силицијуму у наведеном опсегу флуенаса коришћених у експериментима.

Разлике између позиција максимума профила аморфизације, добијених за узорке који су имплантирани при истој вредности флуенса и енергија јона, а различитој оријентацији кристала (у моду каналисања и при случајној оријентацији), је мала и износи око 0,3 μ m. Због тога је предложена употреба аналитичке методе – итеративног поступака, у циљу анализе EBS/C спектра за дубине веће од оних за које се уобичајено користи (за дубине кристала до око 1 μ m). Анализом EBS/C спектра, добијених коришћењем протона енергије 1,000 MeV, помоћу итеративног поступка добијени су резултати који су показали добро слагање профила аморфизације добијених помоћу CSIM програма са одговарајућим експерименталним EBS/C спектрима. Увођењем корекционог фактора за губитак енергије, добијеног као резултат χ^2 процедуре минимизације, слагање профила аморфизације је побољшано, како у погледу позиције максимума аморфизације, тако и у погледу степена аморфизације.

Употребом SEM метода уочене су позиције модификованих зона мете насталих као последица процеса имплантације јона. Модификоване зоне су паралелне површини кристала и хомогене дуж имплантираних дубина. SEM слика узорка M(C-1)4 имплантираног јонима угљеника показује постојање модификоване зоне која се протеже између 2,8 μm и 3,4 μm . На SEM слици узорка M(Si-1)9 имплантираног јонима силицијума модификована зона је нешто ширира и налази се на дубини између 1 μm и 3 μm са максималном променом на дубини од 2 μm . Дати резултати показују одлично слагање позиција максимума профила аморфизације по дубини мете са одговарајућим позицијама максимума аморфизације добијеним анализом EBS/C спектра помоћу CSIM рачунарског програма.

Резултати μR анализе показали су да је раманска трака на 791 cm^{-1} веома осетљива на промену степена аморфизације кристалне решетке. Параметар траке на 791 cm^{-1} , чија еволуција најбоље описује профил аморфизације по дубини узорка, јесте полуширина траке. Слагање добијеног профила аморфизације помоћу μR методе са резултатима SEM и EBS/C анализа је одлично. Детаљнијом анализом раманских спектра дошло се до закључка да након процеса јонске имплантације угљеника и силицијума у 6H-SiC долази до делимичног очувања 6H-SiC кристалне структуре у облику уређења кратког домета, где су кристални домени и аморфна фаза случајно распоређени. Приликом деградације кристалне структуре долази до фаворизованог измештања лакших атома угљеника са својих места у кристалној решетки. Такође, имплантација јона у моду каналисања доводи до повећања домета јона, има различиту дубинску расподелу аморфизације и доводи до мањег степена аморфизације кристалне решетке у односу на имплантацију при случајној оријентацији кристала. Користећи модел конфинације фонона процењене су величине кристалита имплантираних узорка на дубинама са највећим степеном аморфизације. Величине кристалита крећу се у опсегу 9–13 nm у зависности од коришћеног флуенса и врсте јона. У циљу добијања тачнијих профила аморфизације неопходно је укључити утицај ширине ласера и извршити конволуцију добијених μR профила аморфизације. Предложена је процедура која се заснива на фитовању профила еволуције интегралног интензитета раманске траке на 791 cm^{-1} . Добијена су добра поклапања за узорке имплантиране јонима угљеника ниских флуенса.

Упоредни резултати EBS/C, SEM и μR анализа у погледу добијених профила аморфизације показују међусобну конзистентност. Ово указује на оправданост примене CSIM програма за тумачење EBS/C спектра у случајевима када мета садржи атомска језгра идентична јонима којима се врши имплантација. Додатно, потврђена је исправност теоријских претпоставки које су коришћене за израчунавање параметара каналисања у унапређеној верзији CSIM програма. Уз резултате μR анализе који квалитативно описују начин уноса дефеката у структуру 6H-SiC, добијена је детаљна слика начина на који јони угљеника и силицијума енергије 4 MeV у моду каналисања при правцу [0001] утичу на структуру монокристала 6H-SiC.

Планови за даљи рад на изложеној проблематици везани су за додатна побољшања CSIM програма и будуће експерименте који укључује имплантацију јона у моду каналисања у монокристале који не садрже атомска језгра јона који су коришћени за имплантацију. Ово истраживање довешће до проширења исправности примене CSIM рачунарског програма за све додатне комбинације јона и мета који нису анализирани у овој дисертацији.

7. РЕФЕРЕНЦЕ

- [1] T. Kimoto, Material science and device physics in SiC technology for high-voltage power devices, *Japanese Journal of Applied Physics*, 54 (2015) 040103/1-040103/27.
- [2] P. Yvon, F. Carré, Structural materials challenges for advanced reactor systems, *Journal of Nuclear Materials*, 385 (2009) 217-222.
- [3] S.J. Zinkle, J.T. Busby, Structural materials for fission & fusion energy, *Materials Today*, 12 (2009) 12-19.
- [4] C.J. Cochrane, J. Blacksberg, M.A. Anders, P.M. Lenahan, Vectorized magnetometer for space applications using electrical readout of atomic scale defects in silicon carbide, *Scientific Reports*, 6 (2016) 37077/1-37077/12.
- [5] C. Buttay, C. Raynaud, H. Morel, G. Civrac, M.-L. Locatelli, F. Morel, Thermal stability of silicon carbide power diodes, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 59 (2012) 761-769.
- [6] V.R. Drndarević, A new generation of high-power semiconductor devices, *Tehnika*, 63 (2014) 999-1006.
- [7] S. Dhara, Formation, dynamics, and characterization of nanostructures by ion beam irradiation, *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 32 (2007) 1-50.
- [8] W. Wesch, E. Wendler, C. Schnohr, Damage evolution and amorphization in semiconductors under ion irradiation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 277 (2012) 58-69.
- [9] T. Koyanagi, Y. Katoh, T. Nozawa, L.L. Snead, S. Kondo, C.H. Henager Jr, M. Ferraris, T. Hinoki, Q. Huang, Recent progress in the development of SiC composites for nuclear fusion applications, *Journal of Nuclear Materials*, 511 (2018) 544-555.
- [10] M. Li, X. Zhou, H. Yang, S. Du, Q. Huang, The critical issues of SiC materials for future nuclear systems, *Scripta Materialia*, 143 (2018) 149-153.
- [11] S. Agarwal, G. Duscher, Y. Zhao, M. Crespillo, Y. Katoh, W.J. Weber, Multiscale characterization of irradiation behaviour of ion-irradiated SiC/SiC composites, *Acta Materialia*, 161 (2018) 207-220.
- [12] O. Ogorodnikova, V. Gann, Simulation of neutron-induced damage in tungsten by irradiation with energetic self-ions, *Journal of Nuclear Materials*, 460 (2015) 60-71.
- [13] D.K. Avasthi, G.K. Mehta, Ion Matter Interaction, in: *Swift Heavy Ions for Materials Engineering and Nanostructuring*, Springer, Dodrecht, The Netherlands, 2011, pp. 47-66.
- [14] L.C. Feldman, J.W. Mayer, S.T. Picraux, *Materials analysis by ion channeling: submicron crystallography*, Academic Press, New York, NY, USA, 1982.
- [15] J. O'Connell, V. Skuratov, A. Sohatsky, J. Neethling, 1.2 MeV/amu Xe ion induced damage recovery in SiC, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 326 (2014) 337-340.
- [16] L. Lunin, O. Devitskii, I. Sysoev, A. Pashchenko, I. Kas'yanov, D. Nikulin, V. Irkha, Ion-beam deposition of thin AlN films on Al₂O₃ substrate, *Technical Physics Letters*, 45 (2019) 1237-1240.
- [17] M.C. Marchi, S.A. Bilmes, C. Ribeiro, E. Ochoa, M. Kleinke, F. Alvarez, A comprehensive study of the influence of the stoichiometry on the physical properties of TiO_x films prepared by ion beam deposition, *Journal of Applied Physics*, 108 (2010) 064912/1-064912/8.
- [18] K. Boyd, D. Marton, S. Todorov, A. Al-Bayati, J. Kulik, R. Zuhr, J. Rabalais, Formation of C-N thin films by ion beam deposition, *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 13 (1995) 2110-2122.
- [19] S.B. Donald, J.A. Stanford, R.T. Gollott, D.J. Roberts, A.J. Nelson, W. McLean, Variation in plutonium dioxide sputter yields for 1-5 keV Ar⁺ ions, *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 38 (2020) 053202/1-053202/6.

- [20] V. Venugopal, S.K. Garg, T. Basu, O.P. Sinha, D. Kanjilal, S. Bhattacharyya, T. Som, Nanostructures on GaAs surfaces due to 60 keV Ar⁺-ion beam sputtering, *Applied Surface Science*, 258 (2012) 4144-4147.
- [21] J. Muñoz-García, L. Vázquez, R. Cuerno, J.A. Sánchez-García, M. Castro, R. Gago, Self-organized surface nanopatterning by ion beam sputtering, in: *Toward Functional Nanomaterials*, Springer, 2009, pp. 323-398.
- [22] U.B. Singh, D. Agarwal, S. Khan, A. Tripathi, A. Kumar, R. Choudhury, B. Panigrahi, D. Avasthi, Creation of self-organized gold nanostructures by keV ion beam irradiation, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 166 (2011) 553-557.
- [23] S. Singh, R. Singhal, Structural and optical investigations of 120 keV Ag ion implanted ZnO thin films, *Thin Solid Films*, 653 (2018) 377-383.
- [24] B. Pandey, S. Ghosh, P. Srivastava, P. Kumar, D. Kanjilal, S. Zhou, H. Schmidt, Room temperature transparent ferromagnetism in 200 keV Ni²⁺ ion implanted pulsed laser deposition grown ZnO/sapphire film, *Journal of Applied Physics*, 107 (2010) 023901/1-023901/5.
- [25] P. Ruterana, M.-P. Chauvat, K. Lorenz, Rare earth ion implantation and optical activation in nitride semiconductors for multicolor emission, *Semiconductor Science and Technology*, 30 (2015) 044004/1-044004/8.
- [26] S. Rubanov, A. Suvorova, Ion implantation in diamond using 30 keV Ga⁺ focused ion beam, *Diamond and Related Materials*, 20 (2011) 1160-1164.
- [27] L.A. Larson, J.M. Williams, M.I. Current, Ion implantation for semiconductor doping and materials modification, *Reviews Of Accelerator Science And Technology*, 4 (2011) 11-40.
- [28] F. Bosia, N. Argiolas, M. Bazzan, P. Olivero, F. Picollo, A. Sordini, M. Vannoni, E. Vittone, Modification of the structure of diamond with MeV ion implantation, *Diamond and Related Materials*, 20 (2011) 774-778.
- [29] W. AL-Khoury, M. Naddaf, M. Ahmad, MeV-Fe ions implantation of GaAs–Induced morphological and structural modification of porous GaAs, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 492 (2021) 1-6.
- [30] A. Macková, P. Malinsky, A. Jágerová, Z. Sofer, D. Sedmidubský, K. Klímová, R. Böttger, S. Akhmadaliev, Damage accumulation and structural modification in a- and c-plane GaN implanted with 400-keV and 5-MeV Au⁺ ions, *Surface and Interface Analysis*, 50 (2018) 1099-1105.
- [31] M. Nastasi, J.W. Mayer, Y. Wang, *Ion beam analysis: fundamentals and applications*, CRC Press, Boca Raton, FL, USA, 2014.
- [32] H. Shimizu, A. Shima, Y. Shimamoto, N. Iwamuro, Ohmic contact on n- and p-type ion-implanted 4H-SiC with low-temperature metallization process for SiC MOSFETs, *Japanese Journal of Applied Physics*, 56 (2017) 04CR15/1-04CR15/6.
- [33] S. Lagomarsino, S. Calusi, M. Massi, N. Gelli, S. Sciortino, F. Taccetti, L. Giuntini, A. Sordini, M. Vannoni, F. Bosia, Refractive index variation in a free-standing diamond thin film induced by irradiation with fully transmitted high-energy protons, *Scientific Reports*, 7 (2017) 385/1-385/8.
- [34] P. Miranda, U. Wahl, N. Catarino, K. Lorenz, J. Correia, E. Alves, Damage formation and recovery in Fe implanted 6H-SiC, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 286 (2012) 89-92.
- [35] S. Felch, M. Current, M. Taylor, Ion implantation for semiconductor devices: The largest use of industrial accelerators, in: *Proceedings of the North American Particle Accelerator Conference - PAC2013*, Pasadena, CA, USA, 29 September-4 October 2013, pp. 740-744.
- [36] L.G. Villanueva, C. Martin-Olmos, O. Vazquez-Mena, J. Montserrat, P. Langlet, J. Bausells, J. Brugger, Localized ion implantation through micro/nanostencil masks, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 10 (2010) 940-946.

- [37] M. Roldán, P. Galán, F.J. Sánchez, I. García-Cortés, D. Jiménez-Rey, P. Fernández, Ion Beam Experiments to Emulate Nuclear Fusion Environment on Structural Materials at CMAM, in: *Ion Beam Techniques and Applications*, IntechOpen, London, UK, 2019.
- [38] X. Chen, W. Zhou, Q. Feng, J. Zheng, X. Liu, B. Tang, J. Li, J. Xue, S. Peng, Irradiation effects in 6H-SiC induced by neutron and heavy ions: Raman spectroscopy and high-resolution XRD analysis, *Journal of Nuclear Materials*, 478 (2016) 215-221.
- [39] P. Dayal, D. Bhattacharyya, W. Mook, E. Fu, Y.-Q. Wang, D. Carr, O. Anderoglu, N. Mara, A. Misra, R. Harrison, Effect of double ion implantation and irradiation by Ar and He ions on nano-indentation hardness of metallic alloys, *Journal of Nuclear Materials*, 438 (2013) 108-115.
- [40] V. Muthukumar, V. Selladurai, S. Nandhakumar, M. Senthilkumar, Experimental investigation on corrosion and hardness of ion implanted AISI 316L stainless steel, *Materials & Design*, 31 (2010) 2813-2817.
- [41] J. Onate, F. Alonso, A. Garcia, Improvement of tribological properties by ion implantation, *Thin Solid Films*, 317 (1998) 471-476.
- [42] S. Johns, T. Bell, M. Samandi, G. Collins, Wear resistance of plasma immersion ion implanted Ti6Al4V, *Surface and Coatings Technology*, 85 (1996) 7-14.
- [43] A. Battiato, M. Lorusso, E. Bernardi, F. Picollo, F. Bosia, D. Ugues, A. Zelferino, A. Damin, J. Baima, N. Pugno, Softening the ultra-stiff: Controlled variation of Young's modulus in single-crystal diamond by ion implantation, *Acta Materialia*, 116 (2016) 95-103.
- [44] J. Wang, R. Chen, X. Zhang, F. Fang, Study on machinability of silicon irradiated by swift ions, *Precision Engineering*, 51 (2018) 577-581.
- [45] S. To, H. Wang, E. Jelenković, Enhancement of the machinability of silicon by hydrogen ion implantation for ultra-precision micro-cutting, *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 74 (2013) 50-55.
- [46] W.D. Newhauser, R. Zhang, The physics of proton therapy, *Physics in Medicine & Biology*, 60 (2015) R155-R209.
- [47] S. Mändl, B. Rauschenbach, Improving the biocompatibility of medical implants with plasma immersion ion implantation, *Surface and Coatings Technology*, 156 (2002) 276-283.
- [48] A. Shypylenko, A. Pshyk, B. Grześkowiak, K. Medjanik, B. Peplinska, K. Oyoshi, A. Pogrebnjak, S. Jurga, E. Coy, Effect of ion implantation on the physical and mechanical properties of Ti-Si-N multifunctional coatings for biomedical applications, *Materials & Design*, 110 (2016) 821-829.
- [49] I. Kopsalis, V. Paneta, M. Kokkoris, E. Liarokapis, M. Erich, S. Petrović, S. Fazinić, T. Tadić, Probing high-energy ion-implanted silicon by micro-Raman spectroscopy, *Journal of Raman Spectroscopy*, 45 (2014) 650-656.
- [50] V. Raineri, V. Privitera, S. Campisano, Channeling effects in ion implantation in silicon, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 130 (1994) 399-413.
- [51] K. Pağowska, M. Kozubal, A. Taube, M. Guzewicz, K. Gołaszewska-Malec, R. Kruszka, R. Jakiela, A. Piotrowska, Comparison of defect structure in Si and Ge ion implanted GaN epilayers by RBS/channeling, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 444 (2019) 74-79.
- [52] P. Józwik, N. Sathisha, L. Nowickia, J. Jagielskia, A. Turosa, L. Kovaric, B. Areyc, S. Shutthanandanc, W. Jiange, J. Dyczewskid, Analysis of crystal lattice deformation by ion channeling, in: *Proceedings of the IX International Conference ION 2012*, Kazimierz Dolny, Poland, 25-28 June 2012, pp. 828-830.
- [53] M. Nastasi, N. Michael, J. Mayer, J.K. Hirvonen, M. James, *Ion-solid interactions: fundamentals and applications*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1996.

- [54] D.S. Gemmell, Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals, *Reviews of Modern Physics*, 46 (1974) 129-227.
- [55] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Approximation method in classical scattering by screened Coulomb fields, *Matematisk-Fysiske Meddelelser Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*, 36 (1968) 1-32.
- [56] G. Moliere, Theorie der streuung schneller geladener teilchen i. einzelstreuung am abgeschirmten coulomb-feld, *Zeitschrift für Naturforschung A*, 2 (1947) 133-145.
- [57] J.P. Biersack, J.F. Ziegler, The Stopping and Range of Ions in Solids, in: *Ion Implantation Techniques: Proceedings of International Conference on Ion Implantation: Equipment and Techniques*, Berchtesgaden, Fed. Rep. of Germany, 13-15 September 1982, pp. 122-156.
- [58] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, The stopping and range of ions in matter, in: *Treatise on heavy-ion science*, Springer, New York, NY, USA, 1985, pp. 93-129.
- [59] J. Lindhard, Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, *Matematisk-Fysiske Meddelelser Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*, 34 (1965) 1-64.
- [60] H. Sugiyama, Modification of Lindhard-Scharff-Schi øtt Formula for Electronic Stopping Power, *Journal of the Physical Society of Japan*, 50 (1981) 929-932.
- [61] H. Bethe, Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie, *Annalen der Physik*, 397 (1930) 325-400.
- [62] W.H. Bragg, R. Kleeman, XXXIX. On the α particles of radium, and their loss of range in passing through various atoms and molecules, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 10 (1905) 318-340.
- [63] J. Ziegler, J. Manoyan, The stopping of ions in compounds, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 35 (1988) 215-228.
- [64] W.-K. Chu, J.W. Mayer, M.A. Nicolet, *Backscattering spectrometry*, Academic Press, New York, NY, USA, 1978.
- [65] W. Bragg, XXXIX. The consequence of the corpuscular hypothesis of the γ and X rays, and the range of β rays, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 20 (1910) 385-416.
- [66] M.T. Robinson, O.S. Oen, Computer studies of the slowing down of energetic atoms in crystals, *Physical Review*, 132 (1963) 2385-2398.
- [67] N. Nešković, S. Petrović, M. Ćosić, *Rainbows in Channeling of Charged Particles in Crystals and Nanotubes*, Springer, Cham, Switzerland, 2017.
- [68] J.H. Barrett, Monte Carlo channeling calculations, *Physical Review B*, 3 (1971) 1527-1547.
- [69] H. Krause, J. Barrett, S. Datz, P. Dittner, N. Jones, J.G. del Campo, C. Vane, Angular distribution of ions axially channeled in a very thin crystal: Experimental and theoretical results, *Physical Review A*, 49 (1994) 283-299.
- [70] M. Kokkoris, G. Perdikakis, S. Kossionides, S. Petrovic, E. Simoen, On the dechanneling of protons in Si [110], *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 34 (2003) 257-263.
- [71] S. Petrović, M. Erić, M. Kokkoris, N. Nešković, Gompertz type dechanneling functions for protons in $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$, $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ and $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ Si crystal channels, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 256 (2007) 177-181.
- [72] J.J. Berzelius, Untersuchungen über die Flussspathsäure und deren merkwürdigsten Verbindungen, *Annalen der Physik*, 77 (1824) 169-230.
- [73] W. Wesch, Silicon carbide: synthesis and processing, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 116 (1996) 305-321.

- [74] R. Han, X. Xu, X. Hu, N. Yu, J. Wang, Y. Tian, W. Huang, Development of bulk SiC single crystal grown by physical vapor transport method, *Optical Materials*, 23 (2003) 415-420.
- [75] S. Nakashima, H. Harima, Raman investigation of SiC polytypes, *Physica Status Solidi (a)*, 162 (1997) 39-64.
- [76] G.C. Capitani, S. Di Pierro, G. Tempesta, The 6 H-SiC structure model: Further refinement from SCXRD data from a terrestrial moissanite, *American Mineralogist*, 92 (2007) 403-407.
- [77] H. Abderrazak, E. Hmida, Silicon carbide: synthesis and properties, in: *Properties and Applications of Silicon Carbide*, IntechOpen, Rijeka, Croatia, 2011, pp. 361-388.
- [78] T. Kimoto, J.A. Cooper, *Fundamentals of silicon carbide technology: growth, characterization, devices and applications*, John Wiley & Sons, Singapore, Singapore, 2014.
- [79] Y. Şahin, Abrasive wear behaviour of SiC/2014 aluminium composite, *Tribology International*, 43 (2010) 939-943.
- [80] R.F. Davis, Silicon Carbide, in: *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, Elsevier, Oxford, UK, 2017, pp. 1-10.
- [81] T. Hom, W. Kiszenik, B. Post, Accurate lattice constants from multiple reflection measurements. II. Lattice constants of germanium silicon, and diamond, *Journal of Applied Crystallography*, 8 (1975) 457-458.
- [82] W. Dulinski, G. Thomson, D. Kania, H. Kagan, A. Howard, R. Wagner, S. Zhao, P. Weilhammer, W. Trischuk, J. Straver, Diamond detectors for future particle physics experiments, in: *Proceedings of the 27th International Conference on High-energy Physics - ICHEP 94*, Glasgow, UK, 20-27 July 1994, pp. 1-4.
- [83] K.E. Spear, J.P. Dismukes, *Synthetic diamond: Emerging CVD science and technology*, John Wiley & Sons, New York, NY, USA, 1994.
- [84] L. Gan, B. Ben-Nissan, A. Ben-David, Modelling and finite element analysis of ultra-microhardness indentation of thin films, *Thin Solid Films*, 290 (1996) 362-366.
- [85] A.A. Tseng, Y.-T. Chen, K.-J. Ma, Fabrication of high-aspect-ratio microstructures using excimer laser, *Optics and Lasers in Engineering*, 41 (2004) 827-847.
- [86] B.I. Kharisov, O.V. Kharissova, *Carbon Allotropes: Metal-Complex Chemistry, Properties and Applications*, Springer, Cham, Switzerland, 2019.
- [87] J. Shor, A. Kurtz, I. Grimberg, B. Weiss, R. Osgood, Dopant-selective etch stops in 6H and 3C SiC, *Journal of Applied Physics*, 81 (1997) 1546-1551.
- [88] O. Deblecker, Z. De Grève, C. Versèle, Comparative Study of Optimally Designed DC-DC Converters with SiC and Si Power Devices, in: *Advanced Silicon Carbide Devices and Processing*, IntechOpen, Rijeka, Croatia, 2015, pp. 143-173.
- [89] M. Stockmeier, S.A. Sakwe, P. Hens, P.J. Wellmann, R. Hock, A. Magerl, Thermal Expansion Coefficients of 6H Silicon Carbide, *Materials Science Forum*, 600 (2009) 517-520.
- [90] H. Watanabe, N. Yamada, M. Okaji, Linear thermal expansion coefficient of silicon from 293 to 1000 K, *International Journal of Thermophysics*, 25 (2004) 221-236.
- [91] H.K. Kim, Vacuum transistors for space travel, *Nature Electronics*, 2 (2019) 374-375.
- [92] X. Zhang, Q. Li, M. Wang, Z. Zhang, S. Akhmadaliev, S. Zhou, Y. Wu, B. Guo, Defects in hydrogen implanted SiC, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 436 (2018) 107-111.
- [93] W. Jiang, Y. Zhang, V. Shutthanandan, S. Thevuthasan, W.J. Weber, Temperature response of C 13 atoms in amorphized 6 H-Si C, *Applied Physics Letters*, 89 (2006) 261902/1-261902/3.
- [94] N. Chaabane, A. Debelle, G. Sattonnay, P. Trocellier, Y. Serruys, L. Thomé, Y. Zhang, W.J. Weber, C. Meis, L. Gosmain, Investigation of irradiation effects induced by self-ion in 6H-SiC

combining RBS/C, Raman and XRD, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 286 (2012) 108-113.

[95] J. Williams, Ion implantation of semiconductors, *Materials Science and Engineering: A*, 253 (1998) 8-15.

[96] W. Bolse, J. Conrad, T. Rödle, T. Weber, Ion-beam-induced amorphization of 6H-SiC, *Surface and Coatings Technology*, 74 (1995) 927-931.

[97] L. Nuckols, M.L. Crespillo, C. Xu, E. Zarkadoula, Y. Zhang, W.J. Weber, Coupled effects of electronic and nuclear energy deposition on damage accumulation in ion-irradiated SiC, *Acta Materialia*, 199 (2020) 96-106.

[98] G. Kinchin, R. Pease, The displacement of atoms in solids by radiation, *Reports on Progress in Physics*, 18 (1955) 1-51.

[99] P. Pichler, *Intrinsic point defects, impurities, and their diffusion in silicon*, Springer-Verlag Wien, New York, NY, USA, 2004.

[100] E.A. Scott, K. Hattar, J.L. Braun, C.M. Rost, J.T. Gaskins, T. Bai, Y. Wang, C. Ganski, M. Goorsky, P.E. Hopkins, Orders of magnitude reduction in the thermal conductivity of polycrystalline diamond through carbon, nitrogen, and oxygen ion implantation, *Carbon*, 157 (2020) 97-105.

[101] A. Jagerová, P. Malinský, M. Cutroneo, P. Nekvindová, J. Cajzl, A. Michalcová, A. Macková, Non-polar ZnO facet implanted with Au ions and subsequently modified using energetic O ion irradiation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 462 (2020) 16-23.

[102] M.N. Tawfeeq, R.J. Klassen, Effect of ion implantation on the grain boundary strength of heat treated Inconel X750, *Journal of Nuclear Materials*, 516 (2019) 255-263.

[103] Y. Son, B. Frost, Y. Zhao, R.L. Peterson, Monolithic integration of high-voltage thin-film electronics on low-voltage integrated circuits using a solution process, *Nature Electronics*, 2 (2019) 540-548.

[104] F. Xiong, T. Tombrello, MeV ion beam processing of III-V compound semiconductors, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 40 (1989) 526-532.

[105] N. Ovsyuk, S. Lyapin, Raman spectra of Si nanocrystals under high pressure: Metallization and solid state amorphization, *Applied Physics Letters*, 116 (2020) 062103/1-062103/3.

[106] P. Alpuim, V. Chu, J.P. Conde, Amorphous and microcrystalline silicon films grown at low temperatures by radio-frequency and hot-wire chemical vapor deposition, *Journal of Applied Physics*, 86 (1999) 3812-3821.

[107] L. Pelaz, L.A. Marqués, J. Barbolla, Ion-beam-induced amorphization and recrystallization in silicon, *Journal of Applied Physics*, 96 (2004) 5947-5976.

[108] M. Bratchenko, V. Bryk, S. Dyuldy, A. Kalchenko, N. Lazarev, V. Voyevodin, Comments on DPA calculation methods for ion beam driven simulation irradiations, *Вопросы атомной науки и техники*, 84 (2013) 11-16.

[109] A. Gentils, F. Linez, A. Canizarès, P. Simon, L. Thomé, M.-F. Barthe, Influence of ion energy on damage induced by Au-ion implantation in silicon carbide single crystals, *Journal of Materials Science*, 46 (2011) 6390-6395.

[110] S. Miro, G. Velisa, L. Thomé, P. Trocellier, Y. Serruys, A. Debelle, F. Garrido, Monitoring by Raman spectroscopy of the damage induced in the wake of energetic ions, *Journal of Raman Spectroscopy*, 45 (2014) 481-486.

[111] J. Li, H. Huang, G. Lei, Q. Huang, R. Liu, D. Li, L. Yan, Evolution of amorphization and nanohardness in SiC under Xe ion irradiation, *Journal of Nuclear Materials*, 454 (2014) 173-177.

- [112] Y. Yang, C. Zhang, C. Su, Z. Ding, Y. Song, Dose dependence of nano-hardness of 6H-SiC crystal under irradiation with inert gas ions, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 422 (2018) 50-53.
- [113] L. Zhang, C. Zhang, L. Han, C. Xu, J. Li, Y. Yang, Y. Song, J. Gou, J. Li, Y. Ma, Surface damage on 6H-SiC by highly-charged Xe^{q+} ions irradiation, *Journal of Nuclear Materials*, 455 (2014) 704-709.
- [114] T.M. Mohlala, T.T. Hlatshwayo, M. Mlambo, E. Njoroge, S. Motloung, J.B. Malherbe, Migration behaviour of Europium implanted into single crystalline 6H-SiC, *Vacuum*, 141 (2017) 130-134.
- [115] X. Wang, Y. Zhang, S. Liu, C. Wang, Z. Zhao, Optical and structural properties of 6H-SiC irradiated by Si³⁺/He⁺ coimplantation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 289 (2012) 47-51.
- [116] L. Thomé, A. Debelle, F. Garrido, P. Trocellier, Y. Serruys, G. Velisa, S. Miro, Combined effects of nuclear and electronic energy losses in solids irradiated with a dual-ion beam, *Applied Physics Letters*, 102 (2013) 141906/1-141906/4.
- [117] E. Morvan, N. Mestres, F. Campos, J. Pascual, A. Hallen, M. Linnarsson, A.Y. Kuznetsov, Damage reduction in channeled ion implanted 6H-SiC, *Materials Science Forum*, 338 (2000) 893-896.
- [118] J. Žuk, J. Romanek, W. Skorupa, Micro-Raman depth profile investigations of beveled Al⁺-ion implanted 6H-SiC samples, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 267 (2009) 1251-1254.
- [119] F. Linez, A. Canizares, A. Gentils, G. Guimbretiere, P. Simon, M.F. Barthe, Determination of the disorder profile in an ion-implanted silicon carbide single crystal by Raman spectroscopy, *Journal of Raman Spectroscopy*, 43 (2012) 939-944.
- [120] X. Wang, Y. Zhang, S. Liu, Z. Zhao, Depth profiling by Raman spectroscopy of high-energy ion irradiated silicon carbide, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 319 (2014) 55-61.
- [121] M. Erich, M. Kokkoris, S. Fazinić, S. Petrović, EBS/C proton spectra from a virgin diamond crystal, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 381 (2016) 96-102.
- [122] M. Erich, M. Kokkoris, S. Fazinić, S. Petrović, Channeling implantation of high energy carbon ions in a diamond crystal: Determination of the induced crystal amorphization, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 416 (2018) 89-93.
- [123] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack, SRIM—The stopping and range of ions in matter (2010), *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 268 (2010) 1818-1823.
- [124] M. Erić, S. Petrović, M. Kokkoris, A. Lagoyannis, V. Paneta, S. Harissopulos, I. Telečki, Depth profiling of high energy nitrogen ions implanted in the <1 0 0>, <1 1 0> and randomly oriented silicon crystals, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 274 (2012) 87-92.
- [125] S. Sorieul, J. Costantini, L. Gosmain, L. Thomé, J. Grob, Raman spectroscopy study of heavy-ion-irradiated α -SiC, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18 (2006) 5235-5251.
- [126] M. Havel, D. Baron, L. Mazerolles, P. Colomban, Phonon confinement in SiC nanocrystals: comparison of the size determination using transmission electron microscopy and Raman spectroscopy, *Applied Spectroscopy*, 61 (2007) 855-859.
- [127] S. Lin, Z. Chen, L. Li, C. Yang, Effect of impurities on the Raman scattering of 6H-SiC crystals, *Materials Research*, 15 (2012) 833-836.

- [128] A.L. Giudice, A. Re, Ion Beam Analysis (PIXE/RBS), in: The Encyclopedia of Archaeological Sciences, John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2018, pp. 1-4.
- [129] R.E. Galindo, R. Gago, D. Duday, C. Palacio, Towards nanometric resolution in multilayer depth profiling: a comparative study of RBS, SIMS, XPS and GDOES, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 396 (2010) 2725-2740.
- [130] S. Robson, A. Jakob, D. Holmes, S. Lim, B. Johnson, D. Jamieson, High-resolution Rutherford backscattering spectrometry with an optimised solid-state detector, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 487 (2020) 1-7.
- [131] M. Mayer, SIMNRA user's guide, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching, Germany, 1997.
- [132] K. Kimura, Rutherford Backscattering Spectroscopy, in: *Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation*, John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2006.
- [133] M. Mayer, SIMNRA, a simulation program for the analysis of NRA, RBS and ERDA, in: *Proceedings of the Fifteenth International Conference Application of Accelerators in Research and Industry*, Denton, TX, USA, 4-7 November 1999, pp. 541-544.
- [134] C.G. Darwin, LVIII. Collision of α particles with light atoms, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 27 (1914) 499-506.
- [135] M. Mayer, Rutherford backscattering spectrometry (RBS), in: *Workshop on Nuclear Data for Science and Technology: Materials Analysis*, Trieste, Italy, 19-30 May 2003, pp. 59-80.
- [136] J. L'ecuyer, J. Davies, N. Matsunami, How accurate are absolute Rutherford backscattering yields, *Nuclear Instruments and Methods*, 160 (1979) 337-346.
- [137] C. Jeynes, Elastic Backscattering of Ions for Compositional Analysis, in: *Characterization of Materials*, John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 2012, pp. 1-21.
- [138] M. Healy, A. Gurbich, New data on the proton elastic scattering cross-section for silicon, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 161 (2000) 136-140.
- [139] A. Gurbich, Evaluation of non-Rutherford proton elastic scattering cross section for silicon, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 145 (1998) 578-583.
- [140] A. Gurbich, SigmaCalc recent development and present status of the evaluated cross-sections for IBA, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 371 (2016) 27-32.
- [141] K. Kimura, M.-h. Mannami, RBS with monolayer resolution, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 113 (1996) 270-274.
- [142] G.S. Was, Challenges to the use of ion irradiation for emulating reactor irradiation, *Journal of Materials Research*, 30 (2015) 1158-1182.
- [143] Y. Quéré, Dechanneling of fast particles by lattice defects, *Journal of Nuclear Materials*, 53 (1974) 262-267.
- [144] M. Swanson, L. Howe, N. Matsunami, A. Quenneville, Dechanneling by lattice defects, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 9 (1985) 184-196.
- [145] A. Buravlyov, A. Vyatkin, V. Egorov, V. Kireiko, A. Zuev, Some properties of amorphous silicon produced by helium ion implantation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 55 (1991) 642-646.
- [146] M.V. Yakushev, V.A. Volkov, N.N. Mursakulov, C.E. Sabzaliyeva, R.W. Martin, RBS-channeling study of radiation damage in Ar⁺ implanted CuInSe₂ crystals, *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 34 (2016) 051203/1-051203/6.

- [147] S. Zhou, K. Potzger, H. Reuther, K. Kuepper, W. Skorupa, M. Helm, J. Fassbender, Absence of ferromagnetism in V-implanted ZnO single crystals, *Journal of Applied Physics*, 101 (2007) 09H109/1-09H109/3.
- [148] Y. Zhang, A. Debelle, A. Boule, P. Kluth, F. Tuomisto, Advanced techniques for characterization of ion beam modified materials, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 19 (2015) 19-28.
- [149] L. Nowicki, A. Turos, R. Ratajczak, A. Stonert, F. Garrido, Modern analysis of ion channeling data by Monte Carlo simulations, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 240 (2005) 277-282.
- [150] P. Smulders, D. Boerma, Computer simulation of channeling in single crystals, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 29 (1987) 471-489.
- [151] A. Kling, CASSIS—A new Monte-Carlo computer program for channeling simulation of RBS, NRA and PIXE, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 102 (1995) 141-144.
- [152] G. Hobler, Monte Carlo simulation of two-dimensional implanted dopant distributions at mask edges, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 96 (1995) 155-162.
- [153] E. Albertazzi, M. Bianconi, G. Lulli, R. Nipoti, M. Cantiano, Different methods for the determination of damage profiles in Si from RBS-channeling spectra: a comparison, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 118 (1996) 128-132.
- [154] K. Gärtner, Axial dechanneling in compound crystals with point defects and defect analysis by RBS, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 132 (1997) 147-158.
- [155] L.-L. Wang, E. Schmidt, X.-J. Cui, N.-Q. Liu, W. Wesch, E. Wendler, Damage formation and recovery in Nd: CNGG crystal by carbon ion implantation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 462 (2020) 119-125.
- [156] K. Nakamoto, Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, in: *Handbook of vibrational spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2006.
- [157] W. Hayes, Scattering of light by solids, *Contemporary Physics*, 16 (1975) 69-91.
- [158] R. Loudon, The Raman effect in crystals, *Advances in Physics*, 13 (1964) 423-482.
- [159] W.H. Weber, R. Merlin, Raman scattering in materials science, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, NY, USA, 2000.
- [160] M. Kitajima, Defects in crystals studied by Raman scattering, *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, 22 (1997) 275-349.
- [161] T. Jawhari, Micro-Raman spectroscopy of the solid state: applications to semiconductors and thin films, *Analysis*, 28 (2000) 15-21.
- [162] P. Vandenabeele, *Practical Raman spectroscopy: an introduction*, John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2013.
- [163] G. Abstreiter, H. Brugger, T. Wolf, R. Zachai, C. Zeller, Optical and Electronic Properties of Si/SiGe Superlattices, in: *Proceedings of the International Winter School, Mauterndorf, Austria*, 24–28 February 1986, pp. 130-139.
- [164] C. Hamaguchi, *Basic semiconductor physics*, Springer, Cham, Switzerland, 2010.
- [165] A. Arora, A. Pandey, A. Patel, S. Dalal, B.S. Yadav, A. Goyal, R. Raman, O. Thakur, R. Tyagi, Polytype switching identification in 4H-SiC single crystal grown by PVT, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 31 (2020) 16343–16351.

- [166] S. Nakashima, M. Hangyo, Raman intensity profiles and the stacking structure in SiC polytypes, *Solid State Communications*, 80 (1991) 21-24.
- [167] C. Hodges, Theory of phonon dispersion curves in silicon carbide polytypes, *Physical Review*, 187 (1969) 994-999.
- [168] P.J. Colwell, M.V. Klein, Raman scattering from electronic excitations in n-type silicon carbide, *Physical Review B*, 6 (1972) 498-515.
- [169] J. Burton, L. Sun, F. Long, Z. Feng, I. Ferguson, First-and second-order Raman scattering from semi-insulating 4 H- SiC, *Physical Review B*, 59 (1999) 7282-7284.
- [170] X.-B. Li, Z.-Z. Chen, E.-W. Shi, Effect of doping on the Raman scattering of 6H-SiC crystals, *Physica B: Condensed Matter*, 405 (2010) 2423-2426.
- [171] W. Zhou, R. Apkarian, Z.L. Wang, D. Joy, Fundamentals of scanning electron microscopy (SEM), in: *Scanning microscopy for nanotechnology*, Springer, New York, NY, USA, 2006, pp. 1-40.
- [172] N. Raval, R. Maheshwari, D. Kalyane, S.R. Youngren-Ortiz, M.B. Chougule, R.K. Tekade, Importance of Physicochemical Characterization of Nanoparticles in Pharmaceutical Product Development, in: *Basic Fundamentals of Drug Delivery*, Academic Press, London, UK, 2019, pp. 369-400.
- [173] B. Nie, X. Liu, L. Yang, J. Meng, X. Li, Pore structure characterization of different rank coals using gas adsorption and scanning electron microscopy, *Fuel*, 158 (2015) 908-917.
- [174] A. Benyagoub, A. Audren, Mechanism of the swift heavy ion induced epitaxial recrystallization in predamaged silicon carbide, *Journal of Applied Physics*, 106 (2009) 083516/1-083516/8.
- [175] A. Devi, R. Menon, P. Maheshwari, S. Neogy, P. Mukherjee, P. Nabhiraj, P. Pujari, D. Srivastava, G. Dey, Positron Annihilation Study of Zr-2.5 wt.% Nb alloy Irradiated by Ar⁹⁺ heavy ions, in: *11th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC-11)*, Goa, India, 9-14 November 2014, pp. 012018/1-012018/5.
- [176] A. Costa, U. Wahl, J. Correia, E. David-Bosne, L. Amorim, V. Augustyns, D. Silva, M. da Silva, L. Pereira, Lattice sites of ion-implanted Mn, Fe and Ni in 6H-SiC, *Semiconductor Science and Technology*, 33 (2017) 015021/1-015021/10.
- [177] Q. Yang, D. O'Connor, Z. Wang, Empirical formulae for energy loss straggling of ions in matter, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 61 (1991) 149-155.
- [178] F. James, M. Roos, Minuit-a system for function minimization and analysis of the parameter errors and correlations, *Computer Physics Communications*, 10 (1975) 343-367.
- [179] P. Bauer, E. Steinbauer, J. Biersack, The width of an RBS spectrum: influence of plural and multiple scattering, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 64 (1992) 711-715.
- [180] L. Li, Growth Mode and Characterization of Si/SiC Heterostructure of Large Lattice-Mismatch, in: *Heterojunctions and Nanostructures*, IntechOpen, London, UK, 2018.
- [181] Y. Zhang, J. Lian, Z. Zhu, W.D. Bennett, L.V. Saraf, J.L. Rausch, C.A. Hendricks, R. Ewing, W.J. Weber, Response of strontium titanate to ion and electron irradiation, *Journal of Nuclear Materials*, 389 (2009) 303-310.
- [182] X. Qin, X. Li, X. Chen, X. Yang, F. Zhang, X. Xu, X. Hu, Y. Peng, P. Yu, Raman scattering study on phonon anisotropic properties of SiC, *Journal of Alloys and Compounds*, 776 (2019) 1048-1055.
- [183] S. Nakashima, H. Harima, Characterization of defects in SiC crystals by Raman scattering, in: *Silicon Carbide*, Springer, Cham, Switzerland, 2004, pp. 585-605.

- [184] B. Groth, R. Haber, A. Mann, Raman Micro-Spectroscopy of Polytype and Structural Changes in 6H-Silicon Carbide due to Machining, *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 12 (2015) 795-804.
- [185] S. Nakashima, Y. Nakatake, H. Harima, M. Katsuno, N. Ohtani, Detection of stacking faults in 6H-SiC by Raman scattering, *Applied Physics Letters*, 77 (2000) 3612-3614.
- [186] M. Bauer, A.M. Gigler, A.J. Huber, R. Hillenbrand, R.W. Stark, Temperature-depending Raman line-shift of silicon carbide, *Journal of Raman Spectroscopy*, 40 (2009) 1867-1874.
- [187] M. Gan, V. Tomar, An in situ platform for the investigation of Raman shift in micro-scale silicon structures as a function of mechanical stress and temperature increase, *Review of Scientific Instruments*, 85 (2014) 013902/1-013902/10.
- [188] M.A. de Araújo, R. Silva, E. de Lima, D.P. Pereira, P.C. de Oliveira, Measurement of Gaussian laser beam radius using the knife-edge technique: improvement on data analysis, *Applied Optics*, 48 (2009) 393-396.
- [189] A.E. Siegman, E.L. Ginzton, How to (maybe) measure laser beam quality, in: *Proceedings of Diode Pumped Solid State Lasers: Applications and Issues*, Washington, D.C., USA, 1 January 1998, 1998, pp. 184-199.
- [190] Y. Qin, T. Nakajima, H. Zen, X. Wang, T. Kii, H. Ohgaki, Characterization of non-Gaussian mid-infrared free-electron laser beams by the knife-edge method, *Infrared Physics & Technology*, 66 (2014) 146-151.
- [191] S. Nakashima, H. Ohta, M. Hangyo, B. Palosz, Phonon Raman scattering in disordered silicon carbides, *Philosophical Magazine B*, 70 (1994) 971-985.
- [192] E. Martín, J. Jiménez, M. Chafai, MicroRaman study of crystallographic defects in SiC crystals, *Solid-State Electronics*, 42 (1998) 2309-2314.
- [193] İ. Doğan, M.C. van de Sanden, Direct characterization of nanocrystal size distribution using Raman spectroscopy, *Journal of Applied Physics*, 114 (2013) 134310/1-134310/8.
- [194] H. Richter, Z. Wang, L. Ley, The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon, *Solid State Communications*, 39 (1981) 625-629.
- [195] P. Parayanthal, F.H. Pollak, Raman scattering in alloy semiconductors: "spatial correlation" model, *Physical Review Letters*, 52 (1984) 1822-1825.
- [196] M. Havel, D. Baron, P. Colomban, 'Smart' Raman/Rayleigh imaging of nanosized SiC materials using the spatial correlation model, *Journal of Materials Science*, 39 (2004) 6183-6190.
- [197] S. Kim, J.E. Spanier, I.P. Herman, Optical transmission, photoluminescence, and Raman scattering of porous SiC prepared from p-type 6H SiC, *Japanese Journal of Applied Physics*, 39 (2000) 5875-5878.
- [198] N. Hagen, M. Kupinski, E.L. Dereniak, Gaussian profile estimation in one dimension, *Applied Optics*, 46 (2007) 5374-5383.

8. БИОГРАФИЈА АУТОРА

Марко Петар Глогињић је рођен 22. јуна 1993. године у Ужицу. Основну школу „Прва основна школа краља Петра II“ завршио је у Стапарима. Након тога уписао је средњу Медицинску школу у Ужицу. Основно и средње образовање завршио је као носилац награде „Вук Стефановић Караџић“. Факултет за физичку хемију Универзитета у Београду уписао је 2012. године. Дипломирао је 2016. године са просечном оценом 9,43 одбранивши дипломски рад под називом „Транспорт атома водоника дуж моноатомских биметалних наножица“ одбранио је са оценом 10,00. Мастер студије је уписао 2016. године на истом факултету, и завршио их 2017. године са просечном оценом 10,00. Мастер рад под називом „Испитивање утицаја убрзаних јона водоника на структуру и функционалне групе графен оксида“ одбранио је са оценом 10,00. У току студирања активно се бавио промоцијом науке кроз учешће на различитим фестивалима и другим манифестацијама. Докторске студије је уписао на Факултету за физичку хемију Универзитета у Београду 2017. године. Истовремено је ступио у радни однос у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“ Универзитета у Београду, Института од националног значаја за републику Србију. Истраживања у оквиру своје докторске дисертације спровео у групи која испитује физичке и хемијске аспекте интеракције јонских снопова са материјалима. У току израде докторске дисертације, усавршавао се у Националном техничком институту у Атини, Одсек за физику, Атина, Грчка и у Обједињеном институту за нуклеарна истраживања, Лабораторија за нуклеарне реакције „Фљоров“, Дубна, Русија, где је проширивао знање и стицао вештине у оквиру своје научне области.

Научни радови и саопштења проистекли из дисертације:

1. **Marko Gloginjić**, Marko Erich, Michael Kokkoris, Efthymios Liarokapis, Stjepko Fazinić, Marko Karlušić, Kristina Tomić Luketić, Srdjan Petrović, The quantitative 6H-SiC crystal damage depth profiling, *Journal of Nuclear Materials*, 555 (2021) 153143/1-153143/9. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153143>
2. Aikaterini Flessa, Eleni Ntemou, Michael Kokkoris, Efthymios Liarokapis, **Marko Gloginjić**, Srdjan Petrović, Marko Erich, Stjepko Fazinić, Marko Karlušić, Kristina Tomić, Raman mapping of 4-MeV C and Si channeling implantation of 6H-SiC, *Journal of Raman Spectroscopy*, 50 (2019) 1186-1196. <https://doi.org/10.1002/jrs.5629>
3. **Marko P. Gloginjić**, Marko V. Erich, Željko V. Mravik, Branislav Vrban, Štefan Čerba, Jakub Lüley, Vendula Filová, Karel Katovský, Ondřej Štastný, Jiří Burian, Srdjan M. Petrović, Comparative study of the MeV ion channeling implantation induced damage in 6H-SiC by the iterative procedure and phenomenological CSIM computer code, *Nuclear Technology & Radiation Protection*, 37.2 (2022) (accepted for publication).
4. **Marko Gloginjić**, Srdjan Petrović, Marko Erich, Aikaterini Flessa, Eleni Ntemou, Michael Kokkoris, Efthymios Liarokapis, Stjepko Fazinić, Marko Karlušić, Kristina Tomić, Investigation of the 4 MeV C and Si ion channeling implantation influence on the structure of 6H-SiC monocrystal, Eighteenth Young Researchers' Conference Materials Sciences and Engineering, 4-6 December 2019, Belgrade, Serbia, p. 63.

9. ПРИЛОЗИ

Изјава о ауторству

Потписани _____ Марко П. Глогињић _____

број индекса _____ 0316/2017 _____

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

_____ Испитивање утицаја имплантације јона високих енергија у моду каналисања _____

_____ на структуру 6H-SiC монокристала _____

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, _____

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Марко П. Глогињић
Број индекса 0316/2017
Студијски програм Докторске академске студије физичке хемије
Наслов рада Испитивање утицаја имплантације јона високих енергија
у моду каналисања на структуру 6H-SiC монокристала
Ментор др Никола Цвјетићанин, редовни професор
др Марко Ерић, научни сарадник

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, _____

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Испитивање утицаја имплантације јона високих енергија у моду каналисања

на структуру 6H-SiC монокристала

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио.

1. Ауторство
2. Ауторство – некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, _____

1. **Ауторство** – Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. **Ауторство – некомерцијално – без прераде.** Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. **Ауторство – без прераде.** Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.