

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

Computersimulation von Reichweiten- und Schaden-
verteilungen von 0,5 bis 8 keV Heliumionen in
kristallinem und amorphem Niob

Computer Simulation of Range and Damage Distribu-
tions of 0.5 to 8 keV Helium Ions in Crystalline
and Amorphous Niobium

G.Maderlechner

IPP 9/20

März 1976

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

März 1976

ABSTRACT

The binary collision cascade simulation program MARLOWE is used to study the influence of the crystal lattice, electronic energy loss and crystal temperature on the range and damage distributions of 0.5 to 8 keV He ions penetrating into a Nb target.

If the ions enter the crystal parallel to the $\langle 100 \rangle$ close-packed direction, the penetration depth profiles show temperature dependent channeling and dechanneling effects. At room temperature an impact parameter-independent electronic energy loss gives a sharp peak at the maximum range, whereas an impact-parameter-dependent energy loss gives a depth distribution with a long tail and a threefold larger maximum depth.

Even for ion incidence well away from any close-packed direction, the range profiles have a tail in contrast to the depth profiles obtained in amorphous Nb. This tail has also been found in an experimental implantation profile.

The range distributions in amorphous Nb agree generally with Lindhard's transport theory if surface effects are taken into account.

The damage distributions are nearly independent of the electronic energy loss models. The number of vacancies per incident ion increases linearly with the mean nuclear energy loss of the ion in amorphous as well as in crystalline Nb.

ZUSAMMENFASSUNG

Der Einfluß des Kristallgitters, des elektronischen Energieverlustes und der Kristalltemperatur auf die Eindringtiefen- und Schadenverteilungen von 0.5 bis 8 keV He-Ionen in einem Nb-Target wird mit dem Simulationsprogramm MARLOWE untersucht, das die Bahnen der Ionen und Kaskadenatome in der Zweierstoßnäherung berechnet.

Wenn die Ionen parallel zur dichtgepackten $\langle 100 \rangle$ Gitterrichtung in den Kristall eindringen, zeigen die Eindringtiefenprofile temperaturabhängige Channeling- und Dechanneling-Effekte. Bei Raumtemperatur ergibt sich für stoßparameterunabhängigen elektronischen Energieverlust ein scharfer Peak am Ende der Eindringtiefenverteilung, während ein stoßparameterabhängiger Energieverlust zu einer allmählich abfallenden Tiefenverteilung mit etwa dreifacher maximaler Eindringtiefe führt.

Sogar bei Einschußrichtungen außerhalb dichtgepackter Gitterrichtungen unterscheiden sich die Eindringtiefenprofile noch durch einen Schwanz von denen in amorphem Niob. Einen Hinweis auf diesen Schwanz findet man auch in experimentellen Implantationsprofilen.

Die Reichweitenverteilungen in amorphem Nb stimmen nahezu mit der Lindhardschen Transporttheorie überein, wenn der Einfluß der Oberfläche berücksichtigt wird.

Die Schadenverteilungen hängen kaum vom Energieverlustmodell ab. Die mittlere Anzahl der von einem Ion erzeugten Leerstellen wächst linear mit dem mittleren nuklearen Energieverlust des Ions in amorphem wie in kristallinem Nb.

COMPUTERSIMULATION VON REICHWEITEN- UND SCHADENVERTEILUNGEN VON
0.5 BIS 8 KEV HELIUM-IONEN IN KRISTALLINEM UND AMORPHEM NIOB.

| | |
|--|----|
| 1. EINLEITUNG | 1 |
| 2. DAS EINDRINGEN VON IONEN IN FESTKÖRPERN | 4 |
| 2.1 Das Modell | 4 |
| 2.2 Interatomares Potential | 6 |
| 2.3 Elektronischer Energieverlust | 9 |
| 2.4 Der Kristall | 14 |
| 2.5 Ionenstrahl und Ionenbahnen | 16 |
| 2.6 Kaskade | 19 |
| 3. ERGEBNISSE | 21 |
| 3.1 Übersicht über die Eingabedaten | 21 |
| 3.2 Reichweiteverteilungen | 22 |
| 3.2.1 Konstruktion und Normierung | 22 |
| 3.2.2 Einfluß des Kristallgitters | 23 |
| 3.2.3 Einfluß des Modells für den elektronischen Energieverlust | 24 |
| 3.2.4 Energieabhängigkeit | 26 |
| 3.2.5 Temperaturabhängigkeit | 27 |
| 3.3 Schadenverteilungen | 28 |
| 3.3.1 Einfluß des Verlagerungsmodells | 29 |
| 3.3.2 Einfluß des Energieverlustmodells und des Kristallgitters | 31 |
| 3.3.3 Energieabhängigkeit | 31 |
| 3.3.4 Temperaturabhängigkeit | 33 |
| 3.4 Rückstreuung und Zerstäubung | 33 |
| 4. DISKUSSION | 35 |
| 4.1 Vergleich mit der analytischen Theorie | 35 |
| 4.2 Einkristalline Effekte | 37 |
| 4.2.1 Channeling | 37 |
| 4.2.2 Einfluß des Energieverlustmodells | 39 |
| 4.2.3 Temperaturabhängigkeit | 40 |
| 4.2.4 Vergleich mit Lindhards Channeling-Theorie | 41 |
| 4.2.5 Leerstellenverteilungen | 42 |
| 4.3 Vergleich mit Experimenten | 44 |
| 5. ZUSAMMENFASSENDE DISKUSSION | 45 |
| 6. ANHANG | 47 |
| LITERATURANGABEN | 50 |
| ABBILDUNGEN | 55 |

1. EINLEITUNG

Untersuchungen über Streuung und Abbremsung energiereicher geladener Teilchen in Materie sind schon im Zusammenhang mit der Entdeckung der natürlichen Radioaktivität durchgeführt worden und haben entscheidend zur Entwicklung des modernen Atommodells beigetragen. Bei diesen ersten Experimenten wurde vor allem die Streuung von α -Teilchen (5-8 MeV) an dünnen Metallfolien untersucht (Geiger und Marsden 1909), deren Ergebnisse dann Rutherford (1911) durch die Atomkernhypothese erklären konnte. Die Streuwinkelverteilung der α -Teilchen ließ sich in diesem Modell mit der Einzelstreuung eines Ions im Coulombpotential eines Atomkerns der Folie beschreiben. Wesentlich war dabei, daß die Rückstreuung so selten vorkam, daß das Ion höchstens einmal eine große Ablenkung erfuhr. Niels Bohr (1913) zeigte weiterhin, daß die Abbremsung der schnellen Ionen beim Durchgang durch Materie vor allem durch die Stöße mit den Elektronen verursacht wird.

Für den weiteren Ausbau der Theorie war es wesentlich, daß diese beiden Vorgänge, die Streuung an den Kernen und der Energieverlust an den Elektronen für energiereiche Ionen in Festkörpern weitgehend unabhängig voneinander berechnet werden können. Die Ablenkung des Ions bei der Streuung an den Elektronen kann wegen der geringen Elektronenmasse gegenüber der Ablenkung durch Kernstöße vernachlässigt werden. Ebenso ist der Energieverlust durch Stöße mit Gitteratomen für leichte Ionen^{+) bis in den keV-Bereich herab im Mittel wesentlich kleiner als der Energieverlust an Elektronen.}

Diese ersten klassischen Berechnungen von Streuung und Energieverlust wurden mit dem Aufbau der Quantenmechanik verbessert. (Thomas 1927, Fermi 1928, Bethe 1930, Bloch 1933). N. Bohr gab 1948 die erste zusammenfassende Arbeit (Bohr 1948) über die Abbremsung energiereicher Ionen in Materie. Diese Arbeiten wurden vor allem von Lindhard und Mitarbeitern (1954, 1961,

^{+) Leichte Ionen sind Ionen mit Massenzahlen $A_1 \leq 4$}

1963 a, 1963 b, 1968) besonders für schwere Ionen und niedrige Geschwindigkeiten weitergeführt. Bei schweren Ionen muß man die abschirmende Wirkung der Elektronen auf das Coulombpotential der Atomkerne berücksichtigen und kann den Energieverlust durch Kernstöße nicht mehr gegenüber dem elektronischen Energieverlust vernachlässigen.

Das Eindringen von Ionen in amorphe Festkörper wurde von Lindhard et al. (1963a) als ein Transportproblem (Boltzmannsche Stoßgleichung) formuliert, in dem das Ion durch viele zufällige Zweierstöße mit den Targetatomen gestreut und abgebremst wird. Sie geben für die mittlere Reichweite schwerer Ionen eine universelle Funktion an. Die erste für leichte Ionen in niedrigerem Energiebereich gültige Näherungslösung für die Eindringtiefe stammt von Schiøtt (1966). Weissmann und Sigmund (1973) berechneten darüber hinaus auch noch die Tiefenverteilungen der Strahlenschäden im Targetmaterial.

Mit der Entwicklung leistungsfähiger Rechenanlagen wurde es auch möglich, die Bahnen von Ionen als eine Folge von Zweierstößen mit den Gitteratomen kristalliner Festkörper zu simulieren. M.T. Robinson (1961, 1963) entdeckte mit einer Computersimulation, daß die Bahnen von Cu-Atomen in einem fcc Cu-Kristall stark von der Orientierung des Kristalls zur Einschußrichtung abhängen und konnte damit eine schon von Stark (1912) ausgesprochene Vermutung bestätigen. Bei Einschuß in dichtgepackte Gitterrichtungen wird ein großer Teil der Ionen durch eine Folge korrelierter Kleinwinkelstöße mit den Gitteratomen auf nahezu geradlinigen Bahnen tief in den Kristall geführt. Dieser als Gitterführungseffekt oder im Englischen als channeling bezeichnete Vorgang wurde bald danach für Energien über ca. 50 keV auch experimentell bestätigt (Piercy et al. 1963, Nelson et al. 1963, Lutz und Sizmann 1963).

Von Lehmann und Leibfried (1963) sowie Lindhard (1965) und Erginsoy (1965) wurden auch analytische Theorien zum Gitterführungseffekt entwickelt.

Bisher sind nur wenige experimentelle und theoretische Arbeiten über die Reichweite niederenergetischer leichter Ionen in amorphen und kristallinen Festkörpern durchgeführt worden. Heute ist die Kenntnis von Reichweiten und Strahlenschädenverteilungen leichter Ionen in Festkörpern wichtig für Probleme, wie Strahlenschädigung von Solarzellen im interplanetaren Raum, Herstellung von Gastargets, z.B. für Neutronengeneratoren, (Booth et al. 1972) und die Wechselwirkung leichter Ionen eines Fusionsplasmas mit der Reaktorwand (Behrisch et al. 1974).

AUFGABENSTELLUNG

Die Aufgabenstellung dieser Arbeit bestand darin, den Einfluß der kristallinen Struktur eines Metalls auf die Eindringtiefeverteilung von niederenergetischen (0.5- 8 keV) leichten Ionen zu studieren. Die Tiefenverteilung der durch Verlagerung von Gitteratomen erzeugten Leerstellen sollte ebenfalls untersucht werden. Als Methode sollte eine Computersimulation mit dem schon bewährten Programm "MARLOWE" von M.T. Robinson et al. (1974) verwendet werden. Als Targetmaterial wurde Niob und als Beschußteilchen wurden Heliumionen gewählt, da hierfür schon Messungen vorlagen (Behrisch et al. 1975). Die Simulationsrechnungen sollten auch den Einfluß der Wahl des elektronischen Energieverlustes auf die Tiefenverteilungen untersuchen. Zwei extreme Ansätze wurden verwendet, ein stoßparameterunabhängiger Energieverlust in Anlehnung an die Lindhardsche Theorie (Lindhard und Scharff 1961) und ein stoßparameterabhängiger Energieverlust in Abwandlung eines Ansatzes von Firsov (1959). Es sollte außerdem untersucht werden, ob und wie die Temperatur des Kristalls die Tiefenverteilungen beeinflusst. Die für amorph simuliertes Niob berechneten Reichweiteverteilungen sollten mit den Ergebnissen der Transporttheorie (Schjøtt 1966, Littmark 1975) verglichen werden.

2. DAS EINDRINGEN VON IONEN IN FESTKÖRPERN

2.1 Das Modell

Die dem in dieser Arbeit verwendeten Simulationsprogramm "MARLOWE" (Robinson 1974) zugrundeliegenden wesentlichen Annahmen - Streuung nur durch Kernstöße, Energieverlust an Elektronen kontinuierlich und separierbar von elastischer Energieübertragung - über die Wechselwirkung schneller Ionen mit Festkörpern, wurden bereits in der Einleitung erwähnt.

Das Programm MARLOWE kann sowohl eine kristalline Struktur mit thermischen Gitterschwingungen als auch eine amorphe Struktur des Festkörpers simulieren.

Die Ionen⁺ werden gleichmäßig verteilt mit vorgegebener Energie und Einschußrichtung in die Festkörperoberfläche eingeschossen. Ihre Bahnen im Festkörper werden dann durch einzelne Zweierstöße mit den Gitteratomen bestimmt. Wie Bohr (1948) gezeigt hat, genügt es, im hier untersuchten Energiebereich die Stöße klassisch zu berechnen. Bei jedem der elastisch berechneten Stöße des Ions mit den Gitteratomen wird ein elektronischer Energieverlust abgezogen, der vom Stoßparameter abhängen kann. Zur Berechnung der Stöße zwischen dem Ion und dem als ruhend angenommenen Gitteratom wird ein abgeschirmtes Coulombpotential angenommen. Die Ionen werden solange verfolgt, bis ihre kinetische Energie kleiner als eine Abschneideenergie E_c (in dieser Arbeit wurde $E_c = 5$ eV und $E_c = 25$ eV verwendet) ist.

Erhalten Targetatome bei einem Stoß vom Ion eine Energieübertragung größer als eine Verlagerungsenergie E_d (hier wurde im allgemeinen $E_d = 25$ eV gewählt (s.2.6)), so werden sie von ihren Gitterplätzen losgelöst und vom Programm als sog. primäres Rückstoßatom oder "pka" (primary knocked on atom) weiterverfolgt wie die eingeschossenen Ionen. Auf diese

Weise kann ein primäres Rückstoßatom, dessen Energie wesentlich größer als die Verlagerungsenergie E_d ist, eine Kaskade von weiteren Stößen mit Gitteratomen auslösen. Mit jedem erzeugten Zwischengitteratom entsteht auch eine Leerstelle (Frenkeldefekt). Größere Kaskaden sind allerdings im hier behandelten Fall niederenergetischer leichter Ionen ($E \leq 8$ keV) selten, da die maximale elastische Energieübertragung auf ein Gitteratom klein ist (15,8 % der Ionenenergie). Die Energie wird daher durch die angestoßenen Gitteratome nicht sehr weit transportiert und ist weitgehend am Ort des Stoßes lokalisiert.

Wenn das Ion und sämtliche Kaskadenatome abgebremst sind, werden die Positionen des Ions sowie der erzeugten Leerstellen und Zwischengitteratome gespeichert. Eine Reichweiten- und Schadenverteilung erhält man nach Einschub einer genügend großen Anzahl von Ionen. Der Festkörper befindet sich jedoch bei diesen Rechnungen für jeden Einschub im gleichen ungestörten Ausgangszustand.

Ionen, die die Oberfläche verlassen, werden als rückgestreut angesehen und können nach Energie und Richtung analysiert werden. Die losgelösten Gitteratome, die den Festkörper durch die Oberfläche verlassen, werden als zerstäubt betrachtet und können ebenso analysiert werden. In dieser Arbeit ist die Anzahl der rückgestreuten Ionen und insbesondere der zerstäubten Gitteratome so gering, daß die Statistik für eine detaillierte Auswertung zu schlecht ist. Für totale Rückstreukoeffizienten reicht die Genauigkeit jedoch aus.

+) Im folgenden wird das in den Kristall eingeschossene Teilchen immer als "Ion" bezeichnet. Ladungsaustauscheffekte werden nicht berücksichtigt. Bei kleinen Geschwindigkeiten neutralisiert sich das Ion im Festkörper.

2.2 Interatomares Potential

Für die elastische Streuung der Ionen und losgelösten Gitteratome (hier kurz Projektile genannt) an den Festkörperatomen wird in MARLOWE ein abgeschirmtes Coulombpotential verwendet:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1a)^{+)}$$

bzw. mit $x = r / a$

$$V(r) = E_a \frac{\phi(x)}{x} \quad (1b)$$

Hierbei sind:

r = Abstand der Kerne der stoßenden Teilchen

Z_1, Z_2 = Kernladungszahlen des Projektils und des Targetatoms

e = Elementarladung

a = Abschirmlänge

$$E_a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a}$$

Die Abschirmfunktion $\phi(x)$ beschreibt die abschirmende Wirkung der Elektronenhüllen des Projektils und Targetatoms auf das Coulombpotential der Kerne. Die Form der Abschirmfunktion $\phi(x)$ hängt vom vorkommenden Energie- und Stoßparameterbereich ab (Torrens 1972, Robinson 1972, Sigmund 1972).

⁺) Hier und im folgenden wird das cgs-System verwendet, außerdem $1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$
und $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-12} \text{ dyncm}$

Firsov (1957) and Lindhard (1968) haben die Wechselwirkung zweier Atome mit statistischer Elektronenverteilung nach dem Thomas-Fermi-Atommodell für den Fall untersucht, daß die Relativgeschwindigkeit v der Stoßpartner klein gegen die Orbitalgeschwindigkeit der Elektronen ist, d.h.:

$$v < v_1 = Z_1^{2/3} v_0, \quad v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \frac{c}{137} \quad (2a)$$

mit $\hbar = \text{Plancksches Wirkungsquantum} / 2\pi$ und $c = \text{Lichtgeschwindigkeit}$. Das entspricht Energien E von

$$E < E_1 = 25 Z_1^{4/3} A_1 \text{ [keV]} \quad (2b)$$

mit $A_1 = \text{Atomgewicht des Projektilatoms}$.

Beide lösen das Zweiatom-Problem mit dem Ansatz der universellen TF-Abschirmfunktion $\varphi(x)$ eines Einzelatoms. Ihre Ergebnisse unterscheiden sich nur durch die Modifikation der Ein-Atom-Thomas-Fermi-Abschirmkonstanten

$$a_{TF} = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_B}{Z^{1/3}} \quad (3)$$

wobei Z die Kernladungszahl des Atoms und $a_B = \hbar^2 / me^2 = 0.5292 \text{ \AA}$ der Bohrsche Wasserstoffradius ist.

Firsov ermittelt in einem Variationsverfahren obere und untere Fehlergrenzen für das TF-Potential und erhält die beste Approximation mit dem Abschirmradius

$$a_F = \frac{0,8853 a_B}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (3a)$$

+) Thomas-Fermi Abschirmfunktion (Thomas 1927, Fermi 1928)

wobei der Faktor 0,8853 der Wert der TF-Konstanten $\left(\frac{9\pi^2}{128}\right)^{1/3}$ ist.

Lindhard verwendet als Abschirmlänge in Anlehnung an Bohr (1948) ohne Angabe von Fehlergrenzen für das Potential

$$a_L = \frac{0,8853 a_B}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (3b)$$

Das Potential nach Firsov ist stärker abgeschirmt als das von Lindhard angegebene, da $a_F < a_L$ für alle Z_1, Z_2 . Die größte Abweichung liegt mit 10,9 % für $Z_1 = Z_2$ noch im Rahmen der Fehlergrenzen des ganzen TF-Modells.

Für die Rechnungen dieser Arbeit wird für He-Beschuß von Nb die Abschirmlänge nach Firsov a_F gewählt (Tab.1). Die TF-Funktion wird in MARLOWE in der Molièreschen Näherung (Molière 1947) verwendet,

$$\phi(x) = 0,35 e^{-0,3x} + 0,55 e^{-1,2x} + 0,10 e^{-6x}, \quad (4)$$

die für $x \leq 6$ weniger als 0,2% von $\varphi(x)$ abweicht (Abb.1). Der exponentielle Abfall von $\phi(x)$ für $x \gg 6$ beschreibt die Wechselwirkung der Atome für große Abstände jedoch realistischer als $\varphi(x)$, das für große x nur mit x^{-3} abnimmt (Robinson 1972).

Die Abschirmlänge für das Nb-Nb-Potential kann man, wie auch für andere Metalle, durch Anpassung des Molière-Potentials an ein Born-Mayer-Potential im Abstand der nächsten Nachbaratome bestimmen. Das Born-Mayer-Potential läßt sich aus den elastischen Daten berechnen. Eine Zusammenfassung der verschiedenen Abschirmlängen bringt Tabelle 1.

Tabelle 1

| Projektil-Targetatom | Z_1 | Z_2 | $a_F (\overset{\circ}{\text{A}})$ | $a_L (\overset{\circ}{\text{A}})$ | $a (\overset{\circ}{\text{A}})$ angepaßt | E_a (eV) |
|----------------------|-------|-------|-----------------------------------|-----------------------------------|---|-------------------|
| He - Nb | 2 | 41 | 0.1189 | 0,1276 | - | $9,92 \cdot 10^3$ |
| Nb - Nb | 41 | 41 | 0.086 | 0,096 | 0,075 | $3,23 \cdot 10^5$ |

2.3 Elektronischer Energieverlust

Der Energieverlust des Ions durch Stöße mit den Elektronen kann, wie schon erwähnt, in guter Näherung von den Kernstößen separiert werden (Bohr 1948, Lindhard 1963, Sigmund 1972). Der elektronische Energieverlust wirkt sich wie eine kontinuierliche Abbremsung des Ions entlang seiner Bahn aus, die durch eine mittlere elektronische Bremskraft, den sogenannten differentiellen elektronischen Energieverlust dE/dx , beschrieben wird. dE/dx hängt von der Geschwindigkeit des Ions ab.

Für hohe Ionengeschwindigkeiten $v \gg v_0$ (s.Gl. 2a) wird der elektronische Energieverlust durch Einzel- und Kollektivanregung des Elektronengases sowie durch lokale Anregung und Ionisation der einzelnen Gitteratome verursacht. Der für diesen Energiebereich von Bohr (1913) zuerst klassisch und von Bethe (1930) und Bloch (1933) quantenmechanisch berechnete elektronische Energieverlust hat die Form $dE/dx \sim (\ln E)/E$, was experimentell besonders an leichten Ionen gut bestätigt ist.

Für niedrige Geschwindigkeiten $v \ll v_0$ und $v < v_F$ (Fermigeschwindigkeit) ist der elektronische Energieverlust zuerst von Fermi und Teller (1947) berechnet worden. Sie zeigen mit einem Fermigasmodell, daß der elektronische Energieverlust geladener Teilchen proportional zur Geschwindigkeit bzw. \sqrt{E} ist.

$$\frac{dE}{dx} = k \sqrt{E} \quad \text{für } E < E_1 \quad (5)$$

Lindhard (1954) und Lindhard und Winter (1964) finden für den Energieverlust von Ionen in einem freien Elektronengas mit einer Störungsrechnung ebenfalls Geschwindigkeitsproportionalität für $v < v_0$. Der am häufigsten verwendete Wert der Proportionalitätskonstanten k in der Lindhardschen Theorie ist (Lindhard und Scharff 1961, jedoch ohne Ableitung).

$$k_L = 1,216 Z_1^{1/6} \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{N}{A_1^{1/2}} \left[\frac{veV}{\text{Å}} \right] \quad (6)$$

wobei N die Atomzahldichte (Atome/Å³) des Targets ist.

Die Berechnungen des elektronischen Energieverlustes nach der Firsov-Theorie (Firsov 1959) geht davon aus, daß sich der elektronische Energieverlust aus der Überlappung der Elektronenverteilungen beider stoßender Atome in Abhängigkeit vom Stoßparameter darstellen läßt. Der elektronische Energieverlust pro Atomstoß ergibt sich danach als proportional zur Relativgeschwindigkeit der Atome. Das ist eine Folge der verwendeten Impulsnäherung. Die Mittelung über eine große Anzahl von Stößen des Ions mit den Atomen eines amorphen Festkörpers der Atomanzahldichte N ergibt einen mittleren differentiellen Energieverlust, der ebenfalls proportional zur Ionengeschwindigkeit ist (Gl. 5). Die Konstante hat hierbei den Wert

$$k_F = 0,336 \frac{Z_1 + Z_2}{A_1^{1/2}} N \left[\frac{veV}{\text{Å}} \right] \quad (7)$$

Firsovs Ableitung gilt jedoch nur für $1/4 < Z_1/Z_2 < 4$.

Für leichte Ionen in schweren Targets ist k_F beträchtlich größer als k_L (s. Tabelle 2). Bei gleichen Atomen ist

$k_F \lesssim k_L$. Für leichte Ionen mit Energien unter 10 keV liegen

nur wenige Messungen vor. Arkhipov und Gott (1969) finden für 0,5 - 30 keV Protonen in dünnen Metallfolien Geschwindigkeitsproportionalität für dE/dx mit etwas größeren k -Werten als k_L . Für Heliumionen in Niob gibt es Messungen von Lin et al. (1973), allerdings nur für $E \geq 400$ keV (Abb.2). Daraus ergibt sich ein experimentelles $k = 1,85 k_L$. Aus der semiempirischen Korrelation der Energieverluste von Northcliffe und Schilling (1970) findet man einen um den Faktor 1,5 größeren Wert als nach Lindhard. Wir wählen (s.Abb.2) $k = 1,62 k_L$, wobei wir annehmen, daß der elektronische Energieverlust auch bei niedrigeren Energien höher ist als nach der Lindhard-Formel (6). Für den elektronischen Energieverlust der losgelösten Gitteratome wählen wir den Wert $k = k_F$, der mit dem semiempirischen Wert nach Northcliffe und Schilling gut übereinstimmt.

Da in MARLOWE nur die Kernstöße aber nicht die Stöße an den einzelnen Elektronen simuliert werden, muß der elektronische Energieverlust gesondert von der kinetischen Energie des Ions abgezogen werden. Man könnte den elektronischen Energieverlust des Ions jeweils für die Weglänge zwischen zwei Stößen ausrechnen und vor dem nächsten Stoß abziehen. In MARLOWE wird jedoch der elektronische Energieverlust für jeden Kernstoß isoliert berechnet und beim Stoß zusätzlich abgezogen unabhängig von den vorhergehenden und nachfolgenden Stößen (außer bei "simultanen" Stößen, s.Anhang). Für den elektronischen Energieverlust pro Stoß werden zwei Ansätze gemacht.

a) Stoßparameterunabhängiger elektronischer Energieverlust
 $\tilde{Q}_e(E)$ pro Stoß,

mit einem vom Stoßvorgang unabhängigen nur von der momentanen Ionenenergie E abhängigen elektronischen Energieverlust

$\tilde{Q}_e(E)$ pro Stoß

$$\tilde{Q}_e(E) = k \sqrt{E} \bar{\Lambda}, \quad (8)$$

wobei $k\sqrt{E}$ der mittlere differentielle Energieverlust aus Gl.(5) ist. Der mittlere Abstand zwischen zwei Stößen, $\bar{\Lambda}$, sorgt für die richtige Normierung. Es gilt in amorphem Material

$$\frac{dE}{dx} = N \int \tilde{Q}_e d\sigma = \tilde{Q}_e N \int d\sigma = \tilde{Q}_e \frac{1}{\bar{\Lambda}} = k\sqrt{E} \quad (8a)^{+)}$$

Damit kann die Abbremsung in einem homogenen Elektronengas simuliert werden. Für hohe Energien ist $\bar{\Lambda}$ durch den mittleren Abstand der Targetatome, d.h. allein durch die Dichte des Targets bestimmt. Bei niedrigen Ionen-Energien wird $\bar{\Lambda}$ energieabhängig. Mit abnehmender Energie wird $\bar{\Lambda}$ kleiner, da der kleinste Stoßabstand zunimmt (Abb.4). Dadurch nimmt \tilde{Q}_e stärker als proportional von \sqrt{E} ab. In dieser Arbeit wird die Energieabhängigkeit von $\bar{\Lambda}$ jedoch nicht berücksichtigt, sondern $\tilde{Q}_e \sim \sqrt{E}$ für alle E angenommen, was im Rahmen der TF-Näherung liegt.

b) Stoßparameterabhängiger Energieverlust $Q_e(s,E)$.

Der von Firsov (1959) angegebene stoßparameterabhängige elektronische Energieverlust $Q_e(s,E)$ wird in drei Punkten modifiziert. Es wird der folgende Ansatz gemacht (s.Abb.3) (Robinson und Oen 1975):

$$Q_e(s,E) = \frac{0,045}{\pi a^2} \frac{k\sqrt{E}}{N} \exp(-0,3R(s,E)/a) \quad (9)$$

Hierbei ist a die verwendete Abschirmkonstante.

1) Anstelle des Stoßparameters s wird der kleinste Stoßabstand R(s,E) verwendet. Bei kleinen Energien ergibt sich somit eine Kompensation der durch die bei Firsov verwendete Impulsnäherung entstehenden Überschätzung des elektronischen Energieverlustes, d.h. Q_e ist für kleine Energien nicht mehr proportional zu \sqrt{E} .

+) $d\sigma$ ist der differentielle Streuquerschnitt

2) Während Firsov eine Abnahme des Energieverlustes $Q_e(s, E)$ mit s^{-5} angibt, entsprechend dem asymptotischen x^{-3} -Verhalten der TF-Abschirmfunktion, verwendet MARLOWE eine exponentielle Stoßparameterabhängigkeit (Gl.9), die aus der verwendeten Molière-Näherung der TF-Funktion folgt.

3) Der k-Wert wird nicht nach Firsov Gl.(7) berechnet, sondern es wird wie oben beschrieben $k = 1,62 k_L$ gesetzt. Der diesem Ansatz entsprechende mittlere differentielle elektronische Energieverlust kann für ein amorphes Target berechnet werden (Abb.2):

$$\frac{dE}{dx} = N \int_0^{s_{\max}} Q_e(s, E) 2\pi s ds \quad (10)$$

wobei s_{\max} der in MARLOWE benutzte maximale Stoßparameter (vgl.Anhang) ist. Für hohe Energien erhält man wegen $R(s, E) \approx s$ aus Gl.(10)

$$\frac{dE}{dx} = k \sqrt{E} (1 - c) \quad (11)$$

wobei $c = (1 + 0,3 s_{\max}/a) \exp(-0,3 s_{\max}/a)$ im untersuchten Fall He in Niob kleiner als 2 % ist. Für niedrigere Energien (E unter 2 keV), wo für viele Stöße $R(s, E) > s$ ist (s.Abb.4), gilt Gl.(11) nicht mehr und $\frac{dE}{dx}$ nimmt stärker als linear ab (s.Abb.2).

Neben dem differentiellen Energieverlust dE/dx wird häufig auch der elektronische Bremsquerschnitt pro Atom

$$S_e = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \quad (12)$$

verwendet. Aus Gl.(5) ergibt sich somit

$$S_e = K \sqrt{E} \tag{13}$$

In der Tabelle 2 sind die K-Werte aufgeführt, die sich aus den erwähnten Theorien und Messungen ergeben, sowie die in dieser Arbeit verwendeten.

Tabelle 2

| Projektil-Target | Lindhard | Firsov | Northcliffe Schilling | Lin et al. | MARLOWE |
|------------------|----------|--------|--------------------------|------------|---------|
| He - Nb | 1,13 | 7,22 | 1,65 | 1,85 | 1,83 |
| Nb - Nb | 3,40 | 2,83 | 2,96 | | 2,82 |

Tabelle der K-Werte in $\sqrt{\text{eV}} \frac{\text{O}^2}{\text{A}}$

2.4 Kristall

Die meisten Festkörper besitzen, mindestens in kleinen Bezirken, eine kristalline Struktur. In dieser Arbeit wird mit MARLOWE ein kubisch raumzentrierter Niob-Einkristall simuliert. Hierzu wird nur die geometrische Anordnung der Atome im Kristallgitter beschrieben, ohne die Bindungskräfte der Gitteratome zu berücksichtigen. Der Kristall wird unter Ausnutzung der Translationssymmetrie des Raumgitters aus einer (nicht unbedingt primitiven) Einheitszelle aufgebaut. Wegen des verwendeten Zweierstoßmodells genügt es, jeweils nur einen kleinen Bereich des Kristalls am momentanen Ort des Ions im Computer zu speichern, um seinen nächsten Stoßpartner zu finden. Dieser Bereich ist eine Gruppe von Nachbaratomen mit einem eigenen Koordinatensystem, dessen Ursprung auf einem Punkt des Raumgitters (Referenzgitterpunkt) liegt, der dem Ion am nächsten

liegt. Diese Gruppe wird entlang der Ionenbahn mitgeführt. Sie besteht in dieser Arbeit aus 14 Atomen, den 8 nächsten und 6 übernächsten Nachbaratomen des Ursprungs (Abb.5). Diese Konstruktion beschreibt einen idealen Einkristall, solange die Einheitszelle beim Übergang von einem Raumgitterpunkt zum nächsten parallel verschoben wird.

Durch zufällige isotrop verteilte Drehungen der Einheitszelle vor jedem neuen Suchvorgang wird die Richtungskorrelation der Stöße zerstört. Auf diese Weise ist es möglich, mit MARLOWE ein amorphes Target mit gleicher Dichte wie der Kristall zu simulieren. Dabei bleibt die Nahordnung erhalten.

Mit MARLOWE lassen sich außerdem unkorrelierte thermische Gitterschwingungen berücksichtigen. Die Gitteratome der Einheitszelle werden dabei statistisch von ihren Gitterplätzen ausgelenkt, aber während des Stoßes als ruhend betrachtet. Die Auslenkungen werden nach dem Debye-Waller Modell (Debye 1914, Waller 1923) berechnet. Bei einer Temperatur T und Debyetemperatur Θ_D des Kristalls ist das mittlere Amplitudenquadrat $\overline{r^2}$ der Auslenkungen r der Gitteratome der Masse M_2 in einer Dimension gegeben durch

$$\overline{r^2} = \frac{3\hbar^2}{M_2 k_B \Theta_D} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{x} \phi_D(x) \right).$$

k_B = Boltzmannkonstante, $x = \Theta_D/T$ und $\phi_D(x) = \int_0^x \frac{t dt}{e^t - 1}$ ist

die Debyefunktion. Zur Berechnung des Integrals werden in MARLOWE die schon von Debye (1914) angegebenen Reihenentwicklungen verwendet.

2.5 Ionenstrahl und Ionenbahnen

Durch Angabe eines Normalenvektors und Oberflächenpunktes wird im Kristall eine beliebig orientierbare Oberfläche eingeführt, die mit einem "Ionenstrahl bestrahlt" werden kann. Hierzu wird jeweils ein Ion im Abstand einer Gitterkonstanten a_0 vor der Oberfläche erzeugt. Zur Simulation einer homogenen Bestrahlung werden die Positionen des Ions gleichverteilt aus einer Suchfläche gewählt. Die Auswahl kann entweder statistisch mit Zufallszahlen oder nicht statistisch über ein Raster erfolgen. Die Ergebnisse sind von der Auswahlmethode unabhängig. Die statistische Auswahl wird jedoch bevorzugt, weil dann durch Wiederholungen mit anderen Startwerten des Zufallzahlengenerators statistisch unabhängige Resultate gewonnen werden können.

Die allgemeinste Suchfläche ist die Projektion einer primitiven Einheitszelle auf die Oberfläche. Für Bestrahlung einer (100) Oberfläche in $\langle 100 \rangle$ -Richtung ist die Suchfläche in Abb.6 gezeigt. Diese hier rechteckige Fläche kann wegen der Symmetrie des senkrechten Einschusses, wie in Abb.6 gezeigt, weiter verkleinert werden. Durch statistische isotrope Auswahl der Ioneneinschussrichtung innerhalb eines Kegels mit halbem Öffnungswinkel α wird die Divergenz α des Ionenstrahls simuliert.

Da jedes im Kristall verfolgte Ion wohldefinierte Anfangsbedingungen besitzt und die Position des jeweiligen Targetatoms nach dem Suchvorgang ebenfalls festliegt, ist jeder Zweierstoß und damit die Bahn eindeutig bestimmt. Aus den Bewegungsgleichungen folgt für den Streuwinkel im Schwerpunktsystem (Leibfried 1965)

$$\Theta = \pi - 2s \int_R^{\infty} \frac{dr}{r^2 g(r)} \quad (15)$$

und für das Zeitintegral

$$\tau = \sqrt{R^2 - s^2} - \int_R^{\infty} \left(\frac{1}{g(r)} - \frac{1}{\sqrt{1 - s^2/r^2}} \right) dr, \quad (16)$$

wobei $g(r) = \sqrt{1 - \frac{s^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r}}$ ist.

Hier ist s der Stoßparameter, r der variable Abstand der Stoßpartner, $V(r)$ das interatomare Potential, E_r die relative kinetische Energie des Ions und $R = R(s, E)$ der kleinste Stoßabstand, der durch $g(R) = 0$ definiert ist. Die relative kinetische Energie im Schwerpunktsystem ist

$$E_r = \frac{\mu}{1 + \mu} E \quad (17)$$

wobei E die kinetische Energie des Ions im Laborsystem vor dem Stoß und

$$\mu = \frac{M_2}{M_1} \quad (18)$$

das Verhältnis der Masse des Targetatoms zu der Masse des Ions ist. Die beiden Integrale (15) und (16) werden in MARLOWE bei jedem Stoß numerisch integriert.

Zur eindeutigen Beschreibung der Streuung des Ions an Gitteratomen wird der Streuwinkel ϑ im Laborsystem und der Schnittpunkt S_1 der Asymptoten an die Ionenbahn vor und nach dem Stoß benötigt (s. Abb. 7). Der Laborstreuwinkel ϑ ergibt sich aus

$$\tan \vartheta = \frac{\mu f \sin \Theta}{1 + \mu f \cos \Theta} \quad (19)$$

Der Faktor $f = \sqrt{1 - Q_e/E_r}$ (20)

berücksichtigt den elektronischen Energieverlust Q_e pro Stoß. Der Schnittpunkt S_1 der Asymptoten hat wegen der Schwerpunktbewegung $\tau/(1 + \mu)$ während des Stoßes den Abstand x_1 von S_0 .

$$x_1 = \frac{(1+f)\tau + (\mu f - 1)s \tan \Theta/2}{(1+\mu)f} \quad (21)$$

(S_0 ist der Punkt auf der einlaufenden Asymptote, der gerade den Abstand s vom Targetatom hat. $S_1 \approx S_0$ für schwere Targetatome und leichte Projektilatome). Dem vor dem Stoß ruhenden Targetatom wird vom Ion die kinetische Energie

$$T = T_m \left(f \sin^2 \frac{\Theta}{2} + \frac{1}{4} (1-f)^2 \right) \quad (22)$$

übertragen, T_m ist die maximale elastische Energieübertragung

$$T_m = \frac{4}{1+\mu} E_r = \frac{4\mu}{(1+\mu)^2} E \quad (23)$$

Wenn $T > E_d$ ist, wird das Gitteratom ebenfalls weiterverfolgt wie das Ion. Die Asymptote seiner Bahn (Abb.7) ist durch den Targetstreuwinkel φ im Laborsystem

$$\tan \varphi = \frac{f \sin \Theta}{1 - f \cos \Theta} \quad (24)$$

und den Startpunkt S_2 des Gitteratoms mit

$$x_2 = s \tan \frac{\Theta}{2} - x_1 \quad (25)$$

bestimmt.

2.6 Kaskade

Für die Entstehung von Leerstellen und Zwischengitteratomen werden 2 verschiedene Modelle verwendet.

1) Kinchin-Pease Modell

Die auf ein Gitteratom übertragene Energie T muß einen Schwellwert E_d überschreiten, damit es seinen Gitterplatz verlassen kann. Im Verlagerungsmodell von Kinchin und Pease (1955) wird für E_d einfach eine scharfe isotrope Schwelle gewählt und angenommen, daß die ausgelösten Gitteratome stabile Frenkel-paare bilden. Die Wahrscheinlichkeit für die Verlagerung eines Gitteratoms ist Null für Energien $T < E_d$ und gleich 1 für $T \geq E_d$. Das ausgelöste Gitteratom verliert beim Verlassen des Gitterplatzes keine Energie (Bindungsenergie ist Null).

Im Kinchin-Pease Modell wird $E_c = E_d$ gesetzt, so daß Ersetzungsstöße vorkommen, bei denen das stoßende Atom den Gitterplatz des ausgelösten Gitteratoms einnimmt, wenn es nach dem Stoß nur noch eine Energie $E < E_d$ hat. Das ist bei Stößen langsamer Atome gleicher Masse (hier bei den Kaskadenatomen) der Fall. Ein Ersetzungsstoß erzeugt kein Frenkel-paar, sondern vergrößert den Abstand des Zwischengitteratoms von der Leerstelle. Für die Verlagerungsenergie wurde nach Seitz (1949) $E_d = 25$ eV gewählt (Robinson 1974).

2) Rekombinationsmodell

Jedes Zwischengitteratom, dessen Abstand von einer Leerstelle kleiner als ein vorgegebener Rekombinationsradius r_v ist, rekombiniert mit dieser. Paare mit dem jeweils kleinsten r_v rekombinieren zuerst. Die Anzahl der verbleibenden Leerstellen und Zwischengitteratome wird in Abhängigkeit von r_v berechnet. Hiermit ist es möglich, durch Vergleich mit Experimenten einen effektiven Ausheilradius r_v anzugeben. In diesem Verlagerungs-

modell mit spontaner Ausheilung hat E_d nicht die Bedeutung einer Verlagerungsschwelle für bleibende Verlagerungen, sondern ist nur eine untere Energiegrenze ($E_d = 5$ eV), die ein zu starkes Anwachsen der Kaskade (zu große Rechenzeiten, zu großer Speicherbedarf) verhindert. Dieses Modell berücksichtigt, daß einerseits Gitteratome in bestimmten Richtungen leichter vom Gitterplatz gestoßen werden können als nach dem Kinchin-Pease Modell und andererseits die meisten Positionen in der Umgebung der entstandenen Leerstelle instabil sind.

3. ERGEBNISSE

3.1 Übersicht der Eingabedaten

Für die Simulationsrechnungen für ^4He in Nb wurden in MARLOWE die in Tabelle 3 angegebenen physikalischen Konstanten und Parameter verwendet.

Tabelle 3

| | | | |
|---------------------------------|-------|--|-----------------------|
| Gitterkonstante | | $a_0 = 3,30 \text{ \AA}$ | |
| Dichte | | $\rho = 8,58 \text{ g cm}^{-3}$, $N = 0,0556 \text{ \AA}^{-3}$ | |
| Debyetemperatur | | $\Theta_D = \begin{cases} 238 \text{ K für } T > 10 \text{ K} \\ 275 \text{ K für } T \leq 10 \text{ K} \end{cases}$ (Leupold et al. 1964) | |
| Divergenz des Ionenstrahls | | $\alpha = 0,5^\circ$ | |
| Abschirmkonstante | He-Nb | $a = 0,119 \text{ \AA}$ | |
| | Nb-Nb | $a = 0,075 \text{ \AA}$ | |
| Abbremskonstante | He-Nb | $k = 1,83 \sqrt{eV} \text{ \AA}^2$ | |
| | Nb-Nb | $k = 2,82 \sqrt{eV} \text{ \AA}^2$ | |
| Maximaler Stoßparameter | | $s_{\max} = 0,71 a_0 = 2,34 \text{ \AA}$ | } (s.S. 47 ff) |
| Max. Abstand f. simultane Stöße | | $d_{\max} = 0,15 a_0 = 0,50 \text{ \AA}$ | |
| Grenzabstand | | $\xi_{\text{lim}} = 0,03 a_0 = 0,10 \text{ \AA}$ | |
| | | Kinchin-Pease-Modell | Rekombinations-Modell |
| Abschneideenergie | | $E_c = 25 \text{ eV}$ | $E_c = 5 \text{ eV}$ |
| Verlagerungsenergie | | $E_d = 25 \text{ eV}$ | $E_d = 5 \text{ eV}$ |

Die bestrahlte Kristalloberfläche ist stets eine (100) Oberfläche.

Einschußrichtungen im Einkristall:

gerichtet $\langle 100 \rangle$: senkrecht auf (100) Oberfläche.

außerhalb dichtgepackter Gitterrichtungen $\langle rd \rangle$: 12° gegen $\langle 100 \rangle$ geneigt
und $3,5^\circ$ gegen $\langle 110 \rangle$ gedreht.

Einschußrichtung in amorphes Niob: senkrecht auf Oberfläche,
Anzahl der eingeschossenen Ionen pro Verteilung 400 - 1600.
Fehler der Mittelwerte: 8 - 4 %.

Berechnet werden Eindringtiefen- und Leerstellentiefen-Ver-
teilungen für 0,5, 1, 4 und 8 keV bei $T = 300$ K jeweils
mit $Q_e(s, E)$ und $\tilde{Q}_e(E)$ Ansatz des elektronischen Energiever-
lustes.

3.2 Reichweiteverteilungen

3.2.1 Konstruktion und Normierung

Die mit MARLOWE berechneten Verteilungen der Eindringtiefen
von He-Ionen in Niob für die in 3.1 angegebenen Parameter
sind für Einschußenergien von 0,5, 1,4 und 8 keV in Abb.8a bis
d gezeigt. Als Kristalltemperatur ist hier stets $T = 300$ K
gewählt. Die oberen Abbildungen sind jeweils mit dem stoß-
parameterabhängigen elektronischen Energieverlust $Q_e(s, E)$
berechnet worden und die unteren mit dem stoßparameterunab-
hängigen elektronischen Energieverlust $\tilde{Q}_e(E)$. In jeder
Abbildung sind drei Tiefenverteilungen dargestellt. Die für
Einschuß in $\langle 100 \rangle$ -Richtung und random-Richtung in den Ein-
kristall gewonnenen Verteilungen sind mit $\langle 100 \rangle$ bzw. $\langle rd \rangle$
bezeichnet. Die für amorph simuliertes Niob berechneten Ver-
teilungen sind mit "amorph" bezeichnet. Die ausgezogenen
Linien sind Glättungskurven an die aus der Simulation erhaltenen
Histogramme. Zur besseren Übersicht wurden die Histogramme nicht
eingezeichnet, sondern jeweils nur die Histogramm-Punkte über
den Kanalmitten eingetragen.

Die Tiefenverteilungen sind so normiert, daß die Ordinate $p(x)$
die Wahrscheinlichkeitsdichte angibt, daß ein eingeschossenes
Ion in einer Tiefe zwischen x und $x + dx$ zur Ruhe kommt.

Ein Teil der Ionen kommt nicht im Kristall zur Ruhe, sondern verläßt den Kristall, wenn dessen Bahnen die Oberfläche schneiden. Diese Ionen werden als rückgestreut betrachtet und ihre Anzahl wird durch den Teilchenreflexionskoeffizienten

$$R_N = \frac{\text{Anzahl der zurückgestreuten Ionen}}{\text{Anzahl der eingeschossenen Ionen}} \quad (26)$$

beschrieben. Hiermit lautet die Normierung der Tiefenverteilung $p(x)$

$$\int_0^{\infty} p(x) dx = 1 - R_N \quad (27)$$

Für einen Vergleich mit experimentell bestimmten Tiefenverteilungen läßt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x)$ in die Konzentrationsverteilung $c(x)$ umrechnen. Solange Sättigungseffekte vernachlässigt werden dürfen, d.h. solange die Dosis D hinreichend klein gehalten wird, gilt die Umrechnung

$$c(x) [\text{atom}\%] = 1,8 \cdot 10^{-13} D [\text{Ionen/cm}^2] \cdot p(x) [1/\text{\AA}] \quad (28)$$

3.2.2 Einfluß des Kristallgitters

Die Tiefenverteilungen der He-Ionen im Einkristall sind, insbesondere bei $\langle 100 \rangle$ -Einschuß, sehr stark vom verwendeten Modell des elektronischen Energieverlustes abhängig. Es lassen sich jedoch folgende hiervon unabhängige Merkmale der Tiefenprofile feststellen:

- a) Die Ionen dringen für gerichteten Einschuß in $\langle 100 \rangle$ -Richtung wesentlich tiefer in den Kristall ein als für $\langle rd \rangle$ -Einschuß. Dies entspricht dem bei höheren Energien bekannten Gitterführungseffekt, wie ihn Robinson (1961) ebenfalls durch Computersimulation

entdeckt hat. Für $\langle 100 \rangle$ -Einschuß ist die maximale Eindringtiefe für $Q_e(s,E)$ um den Faktor 15 bis 8 (mit der Energie E abnehmend) größer und für $\tilde{Q}_e(E)$ um den Faktor 4 bis 2 (mit E abnehmend) größer als die Tiefe des Peaks der $\langle rd \rangle$ Verteilung. Die geführten Ionen bilden bei den $\langle 100 \rangle$ -Verteilungen für $Q_e(s,E)$ einen flachen Schwanz und für $\tilde{Q}_e(E)$ ein scharfes Maximum. Die nicht geführten Ionen bei $\langle 100 \rangle$ -Einschuß bilden einen breiten Peak unterhalb der $\langle rd \rangle$ -Verteilung, der mit zunehmender Energie immer flacher wird.

b) Die Verteilungen für random-Einschuß (s.3.1), kurz $\langle rd \rangle$ -Verteilungen, unterscheiden sich von den Tiefenverteilungen im amorphen Niob. Sie haben eine größere mittlere Eindringtiefe und eine größere Breite sowie einen Schwanz zu größeren Tiefen. Für den stoßparameterunabhängigen elektronischen Energieverlust findet man bei $\langle rd \rangle$ -Einschuß dieselbe maximale Eindringtiefe wie für $\langle 100 \rangle$ -Einschuß und bei 0,5 und 1 keV sogar einen kleinen Peak am Ende der Verteilungen. Die kristalline Struktur spielt also auch für $\langle rd \rangle$ -Einschuß für die Tiefenprofile eine Rolle.

c) Die für amorph simuliertes Niob berechneten Verteilungen sollten sich mit den Ergebnissen der Transporttheorie vergleichen lassen (siehe Abschnitt 4.1). Andererseits dienen die amorphen Verteilungen zur Abschätzung des Einflusses der Kristallstruktur auf die Tiefenverteilungen.

2.2.3 Einfluß des Modells für den elektronischen Energieverlust

Für den stoßparameterabhängigen elektronischen Energieverlust $Q_e(s,E)$ sind die Mittelwerte und Breiten der Eindringtiefenverteilungen generell größer und vorkommende Peaks liegen tiefer als für den stoßparameterunabhängigen elektronischen Energieverlust $\tilde{Q}_e(E)$. Die maximalen Eindringtiefen für

$Q_e(s,E)$ sind in allen gezeigten Fällen ebenfalls größer als für $\tilde{Q}_e(E)$. Außerdem ist der Abfall der Tiefenprofile für $\tilde{Q}_e(E)$ grundsätzlich steiler als für $Q_e(s,E)$.

Die stärkste Abhängigkeit der Tiefenverteilungen vom Modell des elektronischen Energieverlustes beobachten wir bei Einschuss in $\langle 100 \rangle$ -Richtung. Die $\langle 100 \rangle$ -Verteilungen für $Q_e(s,E)$ sind flach und breit und haben einen flachen tief in den Kristall reichenden Schwanz (aus geführten Ionen) und besitzen keine scharf bestimmte maximale Eindringtiefe. Dagegen haben die $\langle 100 \rangle$ -Verteilungen für $\tilde{Q}_e(E)$ einen schmalen hohen Peak (aus geführten Ionen) am Ende der Verteilung. Sie haben zwei Maxima bei Energien $\lesssim 1$ keV. Der steile Abfall der Verteilung definiert eine scharfe maximale Eindringtiefe. Die maximalen Eindringtiefen bei $Q_e(s,E)$ sind zwischen 0,5 und 8 keV etwa um den Faktor 3 größer als bei $\tilde{Q}_e(E)$.

Die $\langle rd \rangle$ Verteilungen zeigen auch noch eine deutliche Abhängigkeit vom Q_e -Modell. Während die $\langle rd \rangle$ Peaks bei $Q_e(s,E)$ in der gleichen Tiefe wie die amorphen Peaks auftreten, liegen bei $\tilde{Q}_e(E)$ die $\langle rd \rangle$ Peaks tiefer als die amorphen Peaks. Die $\langle rd \rangle$ Verteilungen für $\tilde{Q}_e(E)$ schneiden daher wegen ihres steileren Abfalls und kleinerer Mittelwerte die $\langle rd \rangle$ Verteilungen für $Q_e(s,E)$ in einem Bereich zwischen Peaktiefe und maximaler Eindringtiefe.

Die amorphen Verteilungen haben für beide Q_e -Modelle eine gaußfunktionsähnliche Form. Für $Q_e(s,E)$ sind Mittelwerte und Breiten größer sowie Peakhöhen kleiner als für \tilde{Q}_e . Hier liegen die Peaks für $Q_e(s,E)$ tiefer als für $Q_e(E)$. Bei den niedrigeren Energien sind die wahrscheinlichsten Eindringtiefen X_W nahezu unabhängig vom Q_e -Modell.

3.2.4 Energieabhängigkeit

Die Mittelwerte \bar{x} und Breiten $\overline{\Delta x}$ sowie die Peaktiefen x_w und maximalen Eindringtiefen x_{\max} nehmen für alle untersuchten Verteilungen monoton mit der Einschußenergie E zu (siehe Abb.9). Während die Form der amorphen Verteilungen kaum von E abhängt (gaußähnliche Form), ändert sich die Form der einkristallinen Verteilungen charakteristisch mit der Einschußenergie E .

Die $\langle 100 \rangle$ -Verteilungen haben in gewissen Energiebereichen zwei Maxima, und zwar bei $Q_e(s,E)$ für $E \gtrsim 8$ keV und bei $\tilde{Q}_e(E)$ für $E \lesssim 1$ keV. Für $Q_e(s,E)$ sind die Maxima flach und nur schwach ausgeprägt. Bei $\tilde{Q}_e(E)$ liegt das erste Maximum, welches den random-gestreuten Ionen entspricht, in größeren Tiefen als der Peak der $\langle rd \rangle$ Verteilung; das Verhältnis beider Tiefen nimmt mit der Energie zu. Das zweite Maximum ist der schon erwähnte schmale Peak am Ende der Tiefenverteilungen bei \tilde{Q}_e . Das Verhältnis der Tiefe dieses zweiten Peaks zu der des ersten Peaks der $\langle 100 \rangle$ -Verteilung nimmt mit der Energie ab. Über 1 keV verschwindet das erste Maximum während die Höhe des zweiten Peaks zunimmt und bei 8 keV sogar die Höhe des amorphen Peaks übertrifft.

Für $E \lesssim 0,5$ keV haben die $\langle rd \rangle$ -Verteilungen sogar zwei Maxima. Der zweite Peak ist jedoch nur schwach ausgeprägt und tritt nur beim \tilde{Q}_e Modell auf (Abb.8a).

Bei den amorphen Verteilungen ist bemerkenswert, daß in dem untersuchten Energiebereich das Verhältnis der Breite zum Mittelwert $\overline{\Delta x} / \bar{x}$ nahezu unabhängig von der Energie E ist, und zwar $\overline{\Delta x} / \bar{x} \approx 0,5$.

Die Größen \bar{x} , $\overline{\Delta x}$, x_w der mit MARLOWE berechneten Eindringtiefenverteilungen sind in Abb.9 für amorphes Nb und in Abb.10 für kristallines Nb als Funktion der Einschußenergie dargestellt.

3.2.5. Temperaturabhängigkeit

Der Einfluß der Kristalltemperatur auf die Eindringtiefenverteilungen der He-Ionen ist für gerichteten Einschub in $\langle 100 \rangle$ -Richtung sehr stark, für Einschub in $\langle rd \rangle$ -Richtung noch deutlich und erwartungsgemäß in amorphem Niob gar nicht mehr feststellbar. In Abb.11 sind die Tiefenverteilungen in Abhängigkeit von der Temperatur T für eine feste Einschubenergie $E = 1 \text{ keV}$ und stoßparameterabhängigen Energieverlust dargestellt. Die hieraus erkennbare Temperaturabhängigkeit ist für alle untersuchten Energien und für beide Energieverlustmodelle qualitativ ähnlich. Bei tiefen Temperaturen haben alle Verteilungen (neben dem schon bei 300 K besprochenen breiten ersten Maximum) einen scharfen steil abfallenden Peak in großer Tiefe. Vor diesem Peak liegt ein ausgeprägtes Minimum. Mit zunehmender Temperatur nimmt die Höhe des Peaks ab und das Minimum wird verwaschen. Das erste breite Maximum wächst mit steigender Temperatur an und nähert sich der Oberfläche bis die Verteilung bei etwa 10 000 K der amorphen entspricht. Im Übergangsbereich $T \gtrsim 300 \text{ K}$ äußert sich die Temperaturerhöhung in einer Abnahme der Intensität bei großen Tiefen.

Es ist bemerkenswert, daß man durch Simulation von thermischen Gitterschwingungen, die Temperaturen T über dem Schmelzpunkt von Niob entsprechen, nahezu die Tiefenverteilungen von amorphem Niob reproduzieren kann.

Die Abhängigkeit der mittleren Eindringtiefe \bar{x} und maximalen Eindringtiefe x_{max} von der Temperatur ist in Abb.12 dargestellt. Die stärkste Abnahme von x_{max} und \bar{x} ergibt sich im Temperaturbereich von 200 K bis 2000 K. Bei $T = 10 \text{ 000 K}$ erreicht \bar{x} die mittlere Eindringtiefe von amorphem Niob. Die totale Weglänge \bar{l} ändert sich weniger mit der Temperatur als die mittlere Eindringtiefe \bar{x} .

3.3 Schadenverteilungen

Zur Beschreibung der Strahlenschädigung eines Metalls durch Ionenbeschuß liefert das Simulationsmodell zwei Informationen:

- a) Die mittlere Anzahl von Frenkelpaaren, d.h. Leerstellen mit Zwischengitteratomen, die von einem Ion im Kristall erzeugt werden,
- b) Die Tiefenverteilungen dieser Frenkelpaare im Kristall.

Die Rechnungen ergaben, daß die Tiefenverteilungen der Leerstellen und Zwischengitteratome im Kinchin-Pease-Modell kaum voneinander abweichen. Im Rekombinationsmodell ergeben sich kleine Abweichungen nur an der Oberfläche. Im folgenden beschränken wir uns daher nur auf die Tiefenverteilungen von Leerstellen.

Die Tiefenverteilungen $p_V(x)$ der Leerstellen sind folgendermaßen normiert

$$\int_0^{\infty} p_V(x) dx = N_V \quad (29)$$

N_V gibt die mittlere Anzahl der von einem Ion erzeugten Leerstellen an. Damit ist $p_V(x)dx$ die Wahrscheinlichkeit, daß in der Tiefe zwischen x und $x + dx$ eine Leerstelle pro eingeschossenem Ion erzeugt wird. Für hinreichend kleine Bestrahlungsdosen D [Ionen/cm²] (keine Sättigungseffekte) kann man die Leerstellenkonzentration $c(x)$ in atom % nach der Formel

$$c(x) = 1,8 \cdot 10^{-13} D p_V(x) \quad (30)$$

berechnen. Wie bereits erwähnt, gibt $c(x)$ die spontan erzeugten Leerstellen an, die thermische Ausheilung ist also nicht berücksichtigt.

3.3.1 Einfluß des Verlagerungsmodells

Die mittlere Anzahl N_V der von einem He-Ion mit der Energie E im Kristall erzeugten Leerstellen wurde zuerst von Kinchin und Pease (1955) für amorphes Material und Harte-Kugel-Stöße abgeschätzt:

$$N_V = \frac{E}{2 E_d}$$

wobei E_d die Schwellenenergie für bleibende Verlagerungen ist. Wenn man zusätzlich den Energieverlust an die Elektronen sowie die abgeschirmten Coulombpotentiale für die Stöße zwischen den Atomen berücksichtigt, ergibt sich

$$N_V = \kappa \frac{E_D}{2 E_d} \quad (31)$$

Hierbei ist E_D der Anteil von E , der auf die Gitteratome übertragen wird, und κ die Verlagerungseffektivität, die vom Potential und der Kristallstruktur abhängt. Im allgemeinen gilt $\kappa = 0,8$ (Robinson 1965, 1972, Sigmund 1969). Aus der Simulationsrechnung dieser Arbeit ergibt sich mit $E_d = 25$ eV die in Abb. 13 gezeigte Abhängigkeit der mittleren Anzahl N_V der Leerstellen pro Ion von der Energie der eingeschossenen He-Ionen. Zum Vergleich mit Gleichung (31) wurde die Anzahl N_V der Leerstellen als Funktion von E_D in Abb. 14 aufgetragen. Die Abweichung von der Proportionalität läßt sich berücksichtigen, indem man E_D durch ein $E_D^* = E_D - E_S$ ersetzt, wobei

$$E_S = \frac{(1 + \mu)^2}{4 \mu} E_d \quad (32)$$

die Schwellenenergie eines He-Ions zur Erzeugung eines Frenkeldefektes im Niob ist, d.h. mit $\mu = 23.2$ ergibt sich $E_S \approx 6.3 E_d \approx 160$ eV (Abb. 14).

Die Steigung der Geraden ist $\kappa \approx 0,75 - 0,78$ für $\langle rd \rangle$ -Einschußrichtung und amorphes Niob und $\kappa \approx 0,72 - 0,73$ für $\langle 100 \rangle$ -Einschußrichtung.

Bei großen Energien $E \gg E_s$ ist der Einfluß von E_s auf die Anzahl der Leerstellen vernachlässigbar und es gilt $E_D^* \approx E_D$. Vernachlässigt man E_s auch bei kleinen Energien, nimmt also Proportionalität von N_v und E_D an, so äußert sich das in einer scheinbaren Abnahme der Verlagerungseffektivität κ mit abnehmender Energie.

Verwendet man das Rekombinationsmodell (Kap.2.6) zur Simulation des Verlagerungsprozesses, ist die Anzahl N_v der pro Ion erzeugten Leerstellen stark vom Rekombinationsradius r_v abhängig. Es wurde $E_d = 5$ eV gewählt (s. S. 20).

N_v nimmt mit zunehmendem r_v nahezu exponentiell ab

$$N_v = e^{-r_v/L} \quad (33)$$

wobei L mit der Energie des Ions zunimmt. L ist ein Maß für die räumliche Ausdehnung der Kaskaden, die vom Ion ausgelöst werden. L ist vergleichbar mit der mittleren Reichweite der primären Rückstoßatome. Bei einem Rekombinationsradius $r_v \approx 2,5$ Gitterkonstanten erhält man die gleiche Anzahl N_v von Leerstellen wie im Kinchin-Pease-Modell. Da dieser Wert im untersuchten Energiebereich unabhängig von der Energie ist, sind die beiden Verlagerungsmodelle äquivalent.

Die Gleichwertigkeit der beiden Verlagerungsmodelle zeigt sich auch beim Vergleich der Tiefenprofile der Leerstellen. Ihre Form hängt kaum vom Rekombinationsradius ab. Die Ursache liegt in der geringen Ausdehnung der Kaskaden wegen der kleinen übertragbaren Energie T (Gl.22) niederenergetischer leichter Ionen (s.Kap.2.1).

3.3.2 Einfluß des Energieverlustmodells und des Kristallgitters

Die Leerstellentiefenverteilungen $p_v(x)$ (s. Abb. 15a und b) hängen, abgesehen von der Normierung (Gl. 29) kaum vom verwendeten Energieverlustmodell ab. Der Einfluß des Kristallgitters ist zwar noch deutlich, aber nicht mehr so drastisch wie bei den Eindringtiefenverteilungen. Für $\langle 100 \rangle$ und $\langle rd \rangle$ Einschubrichtung haben die Leerstellenprofile im allgemeinen ähnliche Formen wie die Reichweiteverteilungen der He-Ionen. Die Maxima liegen jedoch näher an der Oberfläche und die Schwänze der Verteilungen sind kürzer. Ein zweites Maximum in großer Tiefe wird nicht beobachtet. Die maximale Leerstellenkonzentration ist bei $\langle rd \rangle$ -Einschub stets kleiner als bei amorphem Niob. Bei $\langle 100 \rangle$ -Einschub liegt das Maximum von $p_v(x)$ für $E \lesssim 4$ keV an der Oberfläche. Daher ist $p_v(0)$, d.h. die Strahlenschädigung an der Oberfläche, bei kleinen Energien auch bei gerichtetem Einschub so groß wie im $\langle rd \rangle$ oder amorphen Fall. Bei höheren Energien sind die Verteilungen für $\langle 100 \rangle$ -Einschub sehr breit ohne ausgeprägtes Maximum.

Bei $\langle rd \rangle$ -Einschub und für kleine Energien ($\lesssim 1$ keV) fällt $p_v(x)$ steil zur Oberfläche hin ab.

Die mittlere Anzahl N_v der von einem He-Ion erzeugten Leerstellen ist in Abb. 13 für die $\langle 100 \rangle$, $\langle rd \rangle$ und amorphen Verteilungen angegeben. Während für $\langle rd \rangle$ Einschub etwa ebenso viele Leerstellen wie im amorphen Fall erzeugt werden, nimmt diese Zahl für $\langle 100 \rangle$ mit zunehmender Energie relativ dazu ab. Im \tilde{Q}_e -Modell ist N_v stets kleiner als für $Q_e(s, E)$.

3.3.3 Energieabhängigkeit

Die qualitative Form der $\langle 100 \rangle$, $\langle rd \rangle$ bzw. amorphen Verteilungen zeigt nur eine geringe Abhängigkeit von der Einschubenergie (Abb. 15 a, b). Für kleine Energien ($E \lesssim 1$ keV) liegen die Maxima der $\langle 100 \rangle$ Verteilungen an der Oberfläche, während die $\langle rd \rangle$

Verteilungen einen steilen Abfall zu Null aufweisen. Die Anzahl N_V der von einem He-Ion im Mittel erzeugten Leerstellen ist als Funktion der Energie in Abb.13 dargestellt. N_V wächst mit der Energie E der He-Ionen monoton an, aber geringer als linear. Die Energieabhängigkeit der mittleren Anzahl N_V der Leerstellen pro Ion ist in 3.3.1 schon beschrieben.

Bemerkenswert ist, daß die maximale Leerstellendichte p_V im ganzen untersuchten Energiebereich bei $\langle rd \rangle$ Einschuß und im amorphen Fall etwa konstant bleibt ($\approx 4 \times 10^{-2}/\text{\AA}$). Für $\langle 100 \rangle$ Einschuß nimmt die maximale Leerstellendichte mit wachsender Energie jedoch von $2 \times 10^{-2}/\text{\AA}$ bei 0,5 keV auf $0,7 \times 10^{-2}/\text{\AA}$ bei 8 keV ab. Die Energieabhängigkeit der Mittelwerte \bar{x}_D und der Standardabweichungen $\Delta \bar{x}_D$ der Leerstellenverteilungen ist der Tabelle 4 zu entnehmen.

Tabelle 4 Mittelwerte \bar{x}_D und Standardabweichungen $\Delta \bar{x}_D$ der Leerstellentiefenverteilungen in \AA .

| | 0,5 keV | | 1 keV | | 4 keV | | 8 keV | |
|-----------------------|-------------|--------------------|-------------|--------------------|-------------|--------------------|-------------|--------------------|
| | \bar{x}_D | $\Delta \bar{x}_D$ |
| Q_e amorph | 25 | 35 | 50 | 40 | 150 | 160 | 270 | 235 |
| random | 40 | 20 | 55 | 45 | 250 | 185 | 390 | 330 |
| $\langle 100 \rangle$ | 45 | 30 | 120 | 110 | 410 | 460 | 650 | 680 |
| \tilde{Q}_e amorph | 25 | 35 | 45 | 40 | 150 | 170 | 240 | 190 |
| random | 40 | 15 | 55 | 30 | 240 | 200 | 360 | 240 |
| $\langle 100 \rangle$ | 45 | 20 | 100 | 100 | 290 | 350 | 450 | 500 |

3.3.4 Temperaturabhängigkeit

Der Einfluß der thermischen Gitterschwingungen auf die Leerstellentiefenverteilungen ist wesentlich geringer als bei den Eindringtiefeverteilungen. Sogar für $\langle 100 \rangle$ -Einschuß hängt die Form der Leerstellenverteilung kaum von der Temperatur ab. In Tab. 5 sind die Mittelwerte \bar{x}_D und die Breiten $\overline{\Delta x}_D$ sowie N_V für verschiedene Temperaturen für die Einschußenergie $E = 1$ keV und $\Omega_e(s, E)$ angegeben. N_V wächst um den Faktor 3 bei Temperaturerhöhung von $T = 0$ K auf $T = 10000$ K.

Tabelle 5 Temperaturabhängigkeit der Mittelwerte \bar{x}_D und Standardabweichungen $\overline{\Delta x}_D$ in Å für die Leerstellentiefenverteilungen von 1 keV He in Nb $\langle 100 \rangle$. N_V ist die mittlere Anzahl der erzeugten Leerstellen pro Ion. Simulation mit Energieverlustmodell $\Omega_e(s, E)$.

| | OK | 300 K | 1000 K | 3000 K | 10 000 K |
|-------------------------|-----|-------|--------|--------|----------|
| \bar{x}_D | 136 | 157 | 137 | 84 | 61 |
| $\overline{\Delta x}_D$ | 137 | 140 | 103 | 54 | 44 |
| N_V | 1,2 | 2,1 | 2,9 | 3,4 | 3,6 |

3.4 Rückstreuung und Zerstäubung

Bei jeder Simulationsrechnung ist sowohl die Anzahl der He-Ionen als auch die Anzahl der Niobatome, die den Kristall durch die Oberfläche verlassen, ausgedruckt worden. Die daraus berechneten Reflexionskoeffizienten R_N (Gl.25) und Zerstäubungs-

ausbeuten S

$$S = \frac{\text{Anzahl der abgetragenen Nb-Atome}}{\text{Anzahl der eingeschossenen He-Ionen}} \quad (34)$$

sind für die untersuchten Fälle in Tabelle 6 in Abhängigkeit von der Einschußenergie aufgetragen.

Die Reflexionskoeffizienten R_N stimmen für amorphes Niob mit den Rechnungen von M.T.Robinson (1975) und J.E.Robinson (1974) nahezu überein. Wegen des um den Faktor 1.6 größeren elektronischen Energieverlusten sind die Werte jedoch geringfügig kleiner. Bei $\tilde{Q}_e(E)$ ergeben sich kleinere R_N als bei $Q_e(s,E)$. Bemerkenswert ist die mit zunehmender Energie viel stärkere Abnahme des Reflexionskoeffizienten R_N für den Einkristall gegenüber amorphem Material. Für $\langle 100 \rangle$ - bzw. $\langle rd \rangle$ -Einschuß ist R_N bei 0,5 keV um den Faktor 2 kleiner, dagegen bei 8 keV um den Faktor 12 bzw. 1.6 kleiner als für amorphes Niob. Eine Extrapolation ergibt, daß R_N für Energien unterhalb von etwa 200 eV kaum noch von der kristallinen Struktur abhängt.

Tabelle 6 Reflexionskoeffizienten R_N und Zerstäubungsausbeuten S

| | 0.5 keV | | 1 keV | | 4 keV | | 8 keV | | |
|---------------|---------------------------------|------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|
| | R_N | S | R_N | S | R_N | S | R_N | S | |
| Q_e | amorph | 0,43 | 0,016 | 0,37 | 0,022 | 0,24 | 0,025 | 0,16 | 0,028 |
| | $\langle \text{random} \rangle$ | 0,16 | 0,005 | 0,23 | 0,008 | 0,17 | 0,04 | 0,12 | 0,015 |
| | $\langle 100 \rangle$ | 0,23 | 0,017 | 0,11 | 0,014 | 0,04 | 0,007 | 0,01 | 0,000 |
| \tilde{Q}_e | amorph | 0,41 | 0,016 | 0,30 | 0,018 | 0,20 | 0,014 | 0,17 | 0,022 |
| | $\langle \text{random} \rangle$ | 0,17 | 0,002 | 0,16 | 0,009 | 0,11 | 0,020 | 0,09 | 0,006 |
| | $\langle 100 \rangle$ | 0,18 | 0,005 | 0,11 | 0,010 | 0,04 | 0,009 | 0,0 | 0,005 |

Die in Tabelle 6 angegebenen Zerstäubungsausbeuten S aus dieser Arbeit sind wegen der zu geringen Anzahl der insgesamt abgetragenen Atome sehr ungenau. Weiterhin wurde die Oberflächenbindungsenergie gleich der Verlagerungsenergie E_d (25 eV) gesetzt. Die Energieabhängigkeit und der Einfluß der Kristallstruktur auf die Zerstäubungsausbeute sollten jedoch qualitativ richtig wiedergegeben werden.

4. DISKUSSION

4.1 Vergleich mit der Transporttheorie (amorphes Niob)

Zur Prüfung der Zuverlässigkeit der Ergebnisse dieser Arbeit werden zunächst die Reichweiteverteilungen für amorph simuliertes Niob mit den Ergebnissen anderer Arbeiten verglichen. Für amorphe Festkörper sind die Eindringtiefeverteilungen leichter Ionen im keV Bereich zuerst von Schiøtt (1966), danach von Weissmann und Sigmund (1973) und von Littmark (1975) berechnet worden. In diesen Arbeiten wird der elektronische Energieverlust als kontinuierliche Abbremsung in der Transportgleichung (Lindhard et.al.1963) berücksichtigt. Die Ionen starten von einer Ebene im Innern eines unendlich ausgedehnten Festkörpers und können diese Ebene im Gegensatz zu einer wirklichen Oberfläche mehrmals durchqueren. Für den Vergleich wurde deshalb mit MARLOWE ebenfalls ein unendlicher Festkörper simuliert. Die so erhaltenen Eindringtiefenverteilungen sind für Einschußenergien von 4,8 und 20 keV in Abb.16 als Histogramm eingezeichnet. Die gezeigten Verteilungen nach der Transporttheorie (Littmark 1975) sind aus den ersten zwei bzw. drei Momenten mit der Edgeworthentwicklung konstruiert. Für den Vergleich war es wichtig, daß der gleiche elektronische Energieverlust ($k = 1,62 k_L$) und die gleiche Abschirmkonstante ($a_F = 0,119 \text{ \AA}$) verwendet wurde. Innerhalb der statistischen Fehler ist die Übereinstimmung sehr gut. In der Simulation wurde der stoßparameterunabhängige Energieverlust $\tilde{Q}_e(E)$ gewählt.

Der Einfluß des Energieverlustmodells auf die Eindringtiefenverteilung ist im amorphen Fall gering, da bei Energien < 1 keV die nukleare Streuung der He-Ionen an den Targetatomen dominiert (diffusionsartige Bewegung) und für Energien $\gtrsim 1$ keV der mittlere differentielle elektronische Energieverlust in beiden Modellen nahezu gleich ist (Abb.2).

Die mit einer wirklichen Oberfläche simulierten Eindringtiefenverteilungen (Abb. 8 a - d) weichen jedoch in der Nähe der Oberfläche von den analytisch berechneten ab (Abb.16,17)

Ohne Berücksichtigung der echten Oberfläche wird ein mit abnehmender Energie ansteigender Teil der He-Ionen von außen durch die Oberfläche gestreut. Dadurch wird die Konzentration der He-Ionen im Festkörper in Oberflächennähe überschätzt.

Beim Vergleich der Mittelwerte \bar{x} und Standardabweichungen $\overline{\Delta x}$ der Eindringtiefenverteilungen ist zu beachten, daß in der analytischen Theorie \bar{x} und $\overline{\Delta x}$ aus der ganzen Verteilung ($-\infty$ bis $+\infty$) berechnet werden. Die Mittelwerte \bar{x} der simulierten Verteilungen sind stets größer und die Breiten $\overline{\Delta x}$ kleiner als nach der Transporttheorie (Abb.9).

Die in Gaußscher Näherung (2 Momente) berechneten Tiefen $x_w = \bar{x}$ der Maxima der analytischen Verteilungen sind nahezu gleich den simulierten wahrscheinlichsten Eindringtiefen x_w für das $\tilde{Q}_e(E)$ Modell. Die Vernachlässigung der Oberfläche wirkt sich also kaum auf die Lage des Maximums der Eindringtiefenverteilungen aus für $E \gtrsim 0,5$ keV und $\tilde{Q}_e(E)$. Der Oberflächeneinfluß ist im $Q_e(s,E)$ Modell stärker, weil die Ionen in der Nähe der Oberfläche mehr niederenergetische Stöße machen.

Neu sind die Ergebnisse dieser Arbeit für das einkristalline Modell sowie deren Abhängigkeit vom Ansatz des elektronischen Energieverlustes. Hierzu werden keine zusätzlichen Annahmen gemacht oder Parameter in das Modell eingeführt. Der Übergang vom amorphen zu einkristallinen Zustand erfolgt lediglich dadurch, daß die statistischen Drehungen des Kristalls vor jedem Stoß abgeschaltet werden.

4.2 Einkristalline Effekte

4.2.1 Channeling

Bei Einschluß in einen Einkristall parallel zu einer dichtgepackten Gitterrichtung (vgl. Abb.8 a-d für $\langle 100 \rangle$ -Richtung) dringen die Ionen tiefer ein als bei amorphem Material.

Diese erhöhten Eindringtiefen sind jedoch erheblich größer als man nach der für höhere Energien entwickelten Channeling-Theorie (Lindhard 1965) erwarten würde.

Eine Analyse der Ionenbahnen (am Beispiel von 1 keV He in Niob bei $T = 0$ K, siehe Abb.11) ergab, daß die meisten der tief eingedrungenen He-Ionen sich ausschließlich innerhalb des Einschlußkanals bewegen. Er wird in diesem Fall von den 4 dichtgepackten $\langle 100 \rangle$ Gitterreihen (B,C,F und E in Abb.6) begrenzt. Diese Art der "Gitterführung innerhalb eines Kanals" wird von Lindhard (1965) "proper axial channeling" genannt und später von Appleton u.a. (1972) mit dem kürzeren Ausdruck "Hyperchanneling" bezeichnet. Diese Form des Channelings war es, die bei der Entdeckung des Channelingeffektes (Robinson 1963) vorwiegend gefunden wurde und dem Phänomen den Namen gab. Bei dem normalen axialen Channelingeffekt können die Ionen dagegen von einem Kanal zu einem benachbarten Kanal beliebig überwechseln. In den bisher durchgeführten Experimenten (Nelson 1963 u.a.) hat Hyperchanneling nur eine untergeordnete Rolle gespielt. Bei hohen Energien wird es nur mit extrem gut kollimierten Ionenstrahlen beobachtet (Appleton et.al. 1972, Barrett et. al. 1975)

Die erhebliche Vergrößerung der Eindringtiefen durch Hyperchanneling hat mehrere Ursachen:

- 1) Die Streuung des Ions an den Gitteratomen wird stark reduziert. Dadurch bewegt sich das Ion nahezu geradlinig und die mittlere Eindringtiefe \bar{x} erreicht fast die mittlere totale Reichweite \bar{r} . Dieser Effekt ist besonders bei leichten Ionen kleiner Energie wesentlich. Er nimmt wie der Streuquerschnitt (für Stöße mit den Targetatomen) mit zunehmender Energie ab (vgl. Abb.8 a-d).

2) Der nukleare Energieverlust wird ebenfalls stark verkleinert. Bei leichten Ionen ($E \gtrsim 1$ keV) tritt der nukleare Energieverlust schon im amorphen Material gegenüber dem elektronischen Energieverlust zurück. Daher vergrößert sich die totale Weglänge der Ionen durch Channeling infolge der Abnahme des nuklearen Energieverlustes nur sehr wenig. Das wurde bei diesen Simulationsrechnungen bei Verwendung des stoßparameterunabhängigen Energieverlustes $\tilde{Q}_e(E)$ auch bestätigt.

3. Der mittlere differentielle elektronische Energieverlust dE/dx ist im stoßparameterabhängigen Energieverlustmodell $Q_e(s,E)$ nach Gl.9 und 10 auf "geführten" Bahnen kleiner als auf "random" Bahnen. Im hier untersuchten Energiebereich werden dadurch die Bahnlängen um etwa den Faktor 3 vergrößert (Abb.10) verglichen mit dem stoßparameterunabhängigen Ansatz des elektronischen Energieverlustes $\tilde{Q}_e(E)$.

Die Vergrößerung der Eindringtiefen bei Einschub in dichtgepackte Gitterrichtungen wird für leichte Ionen hoher Energien vor allem durch den unter 3) und für schwere Ionen hoher Energie vor allem durch den unter 2) genannten Effekt verursacht.

Bei Einschub in den Einkristall in $\langle rd \rangle$ -Richtung dringt ein geringer Teil der He-Ionen fast ohne nukleare Streuung ein und erreicht für \tilde{Q}_e die maximale Eindringtiefe wie bei $\langle 100 \rangle$ -Einschub (s.Abb.8 a-d). Da in diesem Fall Hyperchanneling ausgeschlossen ist, ergibt sich für $Q_e(s,E)$ eine ähnliche $\langle rd \rangle$ -Verteilung, die jedoch einen flacheren aber etwas längeren Schwanz hat. Aus den Ergebnissen ist zu entnehmen, daß man bei beliebigem nicht orientierten Einschub in einen Einkristall mit einem Anteil gechannelter Ionen rechnen muß - auch bei Einschub in polykristallines Material, da die einzelnen Kristallite größer als die Reichweite der niederenergetischen Ionen sind.

4.2.2 Einfluß des Energieverlustmodells

Aus den erwähnten Punkten folgt, daß die maximalen Eindringtiefen der He-Ionen bei Einschub in $\langle 100 \rangle$ -Richtung nur vom elektronischen Energieverlust abhängen. Das wird von den Ergebnissen der Simulation bestätigt.

Im stoßparameterunabhängigen Energieverlustmodell $\tilde{Q}_e(E)$ ist die maximale Eindringtiefe x_{\max} für die in Abb. 8 a-d gezeigten Eindringtiefeverteilungen tatsächlich nahezu gleich der totalen Reichweite

$$R_{e,\max} = \frac{2}{k} (\sqrt{E} - \sqrt{E_c}), \quad (34)$$

die sich allein auf Grund des mittleren elektronischen Energieverlustes im amorphen Niob aus (8) ergibt, (s. Abb. 10). Der Einfluß der Abschneideenergie $E_d = 25$ eV ist bei 8 keV etwa 6 und bei 0,5 keV etwa 22 Prozent von $R_{e,\max}$. Der scharfe Peak (Abb. 8 a-d), den die geführten Ionen bilden, ist ebenfalls eine Folge der stark reduzierten nuklearen Streuung (für \tilde{Q}_e).

Im stoßparameterabhängigen Energieverlustmodell $Q_e(s,E)$ ergibt sich keine so scharfe maximale Eindringtiefe (Abb. 8 a-d), weil die geführten Ionen in der Nähe der Kanalmitte einen kleineren elektronischen Energieverlust erleiden als in der Nähe der Gitterketten (straggling des elektronischen Energieverlustes). Die Vergrößerung der maximalen Eindringtiefe um etwa den Faktor 3 (Abb. 10) entspricht der in Abb. 3 gezeigten Abnahme des Energieverlustes $Q_e(s,E)$ in der Kanalmitte ($s = a_0/2$) gegenüber \tilde{Q}_e um den Faktor 1/3. Der mittlere elektronische Energieverlust der geführten Teilchen ist auch für $Q_e(s,E)$ nahezu geschwindigkeitsproportional. Erst bei Energien $E \lesssim 100$ eV beginnt der nichtproportionale Bereich, weil dann $R(s,E) \gg s$ für $s \approx a_0/2$ (s. Abb. 4a).

4.2.3 Temperaturabhängigkeit

Durch Stöße mit thermisch ausgelenkten Gitteratomen können die Ionen aus ihren geführten Bahnen so stark abgelenkt werden, daß sie auf random Bahnen weiterlaufen (thermisches Dechanneling).

Die starke Temperaturabhängigkeit der Eindringtiefenverteilungen für $Q_e(s,E)$ hängt mit dem Hyperchanneling zusammen. Während die Temperaturabhängigkeit bei normalem Channeling nur durch die thermischen Auslenkungen einer isolierten Gitterkette verursacht wird, wirkt sich bei Hyperchanneling die thermische Auslenkung aller vier benachbarten Gitterketten ($\langle 100 \rangle$ -Einschuß) stark auf den Ort des Potentialminimums aus. Schon bei mittleren thermischen Auslenkungen $\sqrt{u^2}$ kleiner als die Abschirmlänge a (z.B. $\sqrt{u^2} = 0,093 \text{ \AA}$ bei $T = 300 \text{ K}$) verschwindet der Peak der geführten Teilchen (s.Abb.11).

Im stoßparameterunabhängigen Energieverlustmodell $\tilde{Q}_e(E)$ ist der Peak um die maximale Eindringtiefe von der Temperatur weniger kritisch abhängig. Bei $T = 300 \text{ K}$ beobachtet man noch einen scharfen Peak (Abb. 8 a-d), der erst bei Temperaturen über 1000 K verschwindet. Obwohl auch im $\tilde{Q}_e(E)$ Modell Hyperchanneling vorkommt, äußert sich dieser Effekt wegen der gleich starken Abbremsung aller geführten Ionen nicht in der Eindringtiefenverteilung.

An dieser Stelle seien noch weitere wichtige Ursachen von Dechanneling genannt: Divergenz des Ionenstrahls, Streuung an den Elektronen, Oberflächenverunreinigung, Streuung an Zwischengitteratomen und Gitterfehlern. In dieser Arbeit wurde zwar stets eine Strahldivergenz von $0,5 \text{ Grad}$ verwendet, aber kein merklicher Einfluß auf die Eindringtiefenverteilungen beobachtet.

Die Streuung an Elektronen wurde nicht in der Simulation berücksichtigt. Eine Abschätzung (Van Vliet 1971) ergibt aber, daß in unserem Energiebereich die Streuung der He-Ionen an den

Elektronen vernachlässigt werden kann. Für Energien > 10 keV ist der Einfluß der elektronischen Streuung kleiner als der Einfluß einer Strahldivergenz von $0,5^\circ$. Bei Energien unter 10 keV überwiegt der Temperatureinfluß schon bei $T = 0$ K die Streuung an Elektronen.

Eine Oberflächenverunreinigung wurde in dieser Arbeit nicht simuliert. Diese kann bei Experimenten wesentlich zum Dechanneling beitragen.

4.2.4 Ein Vergleich mit Lindhards Channeling-Theorie

In der Lindhard Theorie (1965) werden die Bahnen geführter Ionen durch Streuung an kontinuierlichen Kettenpotentialen beschrieben. Danach bewegt sich ein Ion der Energie E auf einer geführten Bahn, wenn seine transversale Energie E_\perp der Bedingung

$$E_\perp < U(\rho_c) = E \psi_c^2 \quad (35)$$

genügt, wobei ρ_c der kleinste Abstand von den Gitteratomketten und ψ_c der größte Winkel ist, den die geführten Ionen mit der Richtung der Gitterkette bilden.

Für axiales Channeling gibt Lindhard für den kritischen Winkel ψ_2 bei niedrigen Energien folgende Formel an

$$\psi_2 = \left(\frac{3a^2 Z_1 Z_2 e^2}{E d^3} \right)^{1/4} \quad \text{für} \quad E < \frac{2 Z_1 Z_2 e^2 d}{a^2} \quad (36)$$

wobei a die Abschirmlänge nach (3b) und d der Abstand der Kettenatome ist.

Für Hyperchanneling ist der kritische Winkel (Lindhard 1965, Van Vliet 1971)

$$\psi_h \approx \left(\frac{E_h}{E} \right)^{1/2} \quad (37)$$

E_h ist die Höhe der Potentialschwelle (5-10 eV) zum Nachbar-kanal. Im allgemeinen ist ψ_h etwa um eine Größenordnung kleiner als ψ_2 (Barrett et. al. 1975).

Überraschend ist, daß der kritische Abstand β_c und der kritische Winkel ψ_2 nach der Lindhard Theorie im hier untersuchten Fall in der richtigen Größenordnung liegen. Zu diesem Vergleich wurden β_c und ψ_h aus dem Anteil der geführten Ionen im statischen Gitter für 1 keV Einschußenergie berechnet. Diese Übereinstimmung läßt sich dahingehend deuten, daß Hyperchanneling bei niedrigen Energien für leichte Ionen der vorwiegende Channelingprozeß ist, d.h. Lindhards Annahme von kontinuierlichen Kettenpotentialen ist in diesem Falle (unterer keV Bereich) noch vernünftig. Ein besonderes Problem entsteht dadurch, daß die Ionenenergie E nach relativ kurzen Eindringtiefen (wenigen Stößen) stark abnimmt. Die Zunahme der transversalen Energie durch Vielfachstreuung an den thermisch ausgelenkten Gitteratomen wird so zum Teil durch die Abnahme der momentanen Ionenenergie E kompensiert. Der kritische Winkel wird mit zunehmender Tiefe durch elektronischen Energieverlust (Stabilisierung) vergrößert und gleichzeitig verkleinert durch Vielfachstreuung. Ein detaillierter Vergleich mit der analytischen Theorie ist im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt worden.

4.2.5 Leerstellenverteilungen

Da bei den Stößen des He-Ions mit Gitteratomen, die zu einer Verlagerung des Gitteratoms führen, der elektronische Energieverlust klein gegenüber der an das Gitteratom abgegebenen Energie ist, hängen die Leerstellenverteilungen nur wenig vom Energieverlustmodell ab (Abb.15). Der elektronische Energieverlust der verlagerten Niobatome ist vernachlässigbar klein.

Bei niedrigen Energien entstehen die Leerstellen vor allem durch Stöße mit den Oberflächenatomen. Daher ist die Strahlenschädigung bei $\langle 100 \rangle$ -Einschußrichtung an der Oberfläche kaum kleiner als für $\langle rd \rangle$ -Einschuß bzw. in amorphem Niob (Abb.15a).

Mit zunehmender Energie nimmt die Wahrscheinlichkeit für starke Stöße an Oberflächenatomen ab. Bei $\langle 100 \rangle$ -Einschuß werden die meisten Leerstellen bei 20°C durch thermisches Dechanneling verursacht. Das bei den $\langle 100 \rangle$ -Eindringtiefenverteilungen erhaltene Maximum bei großer Tiefe findet sich nicht bei den Leerstellenverteilungen, da geführte Ionen fast keine Leerstellen erzeugen.

Die maximale Leerstellenkonzentration ist für $\langle rd \rangle$ -Einschuß und für amorphes Niob nahezu unabhängig von der Energie, da die Anzahl N_V der Leerstellen (Abb.13) ähnlich mit der Energie zunimmt wie die Breite $\overline{\Delta x_D}$ (Tabelle 4) der Leerstellenverteilung.

Die in der Simulation gefundene lineare Abhängigkeit der Anzahl N_V der Leerstellen von der auf die Gitteratome übertragenen Energie E_D pro Ion (Abb.14) zeigt, daß die in Gl. (31) mit E_D^* definierte Verlagerungseffektivität κ unabhängig von der Energie ist und nur wenig kleiner ist als der von Robinson (1972) für höherenergetische Kaskaden gefundenen Wert ≈ 0.8 .

Ein ebenfalls durchgeführter Vergleich der Leerstellenverteilungen mit den Ergebnissen der Transporttheorie (vgl. Kap.4.1) ergab gute Übereinstimmung der Mittelwerte $\overline{x_D}$ und Standardabweichungen $\overline{\Delta x_D}$ (Littmark et. al. 1975).

Die aus den Momenten mit Hilfe der Edgeworthentwicklung über Gaußverteilungen konstruierten Tiefenverteilungen der deponierten Energie weichen an der Oberfläche stark von den durch MARLOWE berechneten Leerstellenverteilungen ab. Der Grund hierfür liegt weniger an der Vernachlässigung der Oberfläche als vielmehr an dem Sprung, den die deponierte Energie (bzw. die Leerstellenverteilung) an der Oberfläche machen muß und der bei der Näherung durch eine Gaußverteilung unterdrückt wird. Dieser Sprung wurde in der Simulation beobachtet, aber bei der Konstruktion der Tiefenverteilungen in der Transporttheorie bisher nicht berücksichtigt.

4.3 Vergleich mit Experimenten

Ein experimentell bestimmtes Tiefenprofil (Behrisch et al. 1975) von ^3He -Ionen, die bei 4 keV mit einer Dosis von $5 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ in $\langle\text{rd}\rangle$ -Richtung in einem Niobeinkristall implantiert wurden, wird in Abb.18 mit den simulierten Eindringtiefenverteilungen dieser Arbeit verglichen. Die mittleren Eindringtiefen von ^3He und ^4He stimmen in diesem Energiebereich innerhalb weniger Prozente überein, wie analytische Rechnungen zeigten (Littmark, private Mitteilung).

Das gemessene Implantationsprofil stimmt bis auf einen kleinen Schwanz überraschend gut mit den theoretischen Eindringtiefenverteilungen für amorphes Niob überein. Die Tiefenauflösung der Messung reicht nicht aus, um zwischen den beiden Energieverlustmodellen $Q_e(s,E)$ und $\tilde{Q}_e(E)$ zu unterscheiden. Die für gleichen elektronischen Energieverlust ($k = 1,62$, Tabelle 2) und gleichen Abschirmradius $a = a_F$ berechnete Eindringtiefenverteilung (Littmark, private Mitteilung) nach der Transporttheorie stimmt gut mit den simulierten Tiefenverteilungen überein (siehe Kap.4.1).

Der über die amorphen Tiefenverteilungen hinausreichende Schwanz ist jedoch schwächer als bei der im idealen Einkristall simulierten Verteilung für $\langle\text{rd}\rangle$ -Einschuß (Abb.18) ausgeprägt. Bei Einschuß in $\langle 100 \rangle$ -Richtung wird eine um etwa 20 % größere maximale Eindringtiefe gemessen (Eckstein, Roth, Behrisch, 1975). Daraus folgt, daß der beobachtete Schwanz ein Gittereffekt ist und durch einen zusätzlichen Streuprozess abgeschwächt wird. Die Streuung an verlagerten Zwischengitteratomen und Leerstellen sowie implantierten He-Atomen kann schon bei einer Dosis von $5 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ erheblich sein. Mit MARLOWE ergibt sich für diese Dosis eine extrapolierte Leerstellenkonzentration von 270 atom %. Der größte Teil dieser spontan erzeugten Frenkel-paare heilt jedoch thermisch aus, eine genaue Rechnung ist schwierig. Die in Metallen im allgemeinen gute Ausheilung ($T = 300 \text{ K}$) kann jedoch durch implantierte He-Ionen reduziert

werden. Auf diese Weise könnte die erhöhte Streuung der He-Ionen an Punktdefekten nach Einschuss großer Dosen und die allmähliche Verformung des Eindringtiefenprofils von der simulierten Form zur gemessenen Form zustande kommen. Eine Bestimmung des elektronischen Energieverlustes (und Untersuchung der Modelle) ist mit dieser Messung noch nicht möglich.

5. ZUSAMMENFASSENDE DISKUSSION

Ausgehend vom Simulationsprogramm MARLOWE wurde versucht, Aussagen über das Eindringen von He-Ionen im Energiebereich von 0,5-8 keV in Niob im einkristallinen, polykristallinen ^{+) und amorphen Zustand zu erhalten. Für alle drei Fälle ergeben sich unterschiedliche Eindringtiefenverteilungen, die wesentlich vom elektronischen Energieverlust abhängen. Da dieser für niedrige Energien experimentell nicht bekannt ist, wurden zwei verschiedene theoretische Ansätze verwendet, ein stoßparameterabhängiger, Q_e , und ein stoßparameterunabhängiger Energieverlust, \tilde{Q}_e , pro Kernstoß. Beide ergeben für Energien $E > 1$ keV, im amorphen Niob über viele Stöße gemittelt, den gleichen geschwindigkeitsproportionalen differentiellen elektronischen Energieverlust. Dieser wurde an experimentelle Werte um 400 keV von He in Niob angepaßt. Die stärkste Abhängigkeit der Eindringtiefenverteilungen vom Energieverlustmodell wurde für Einschuss in dichtgepackte Gitterrichtungen festgestellt. Im Q_e -Modell werden die Eindringtiefen durch Hyperchanneling um einen Faktor von etwa 4 gegenüber dem amorphen Zustand vergrößert. Für \tilde{Q}_e liegt dieser Faktor nur bei etwa 2.}

^{+) Polykristallines Material wurde durch Einschuss außerhalb einer dichtgepackten Gitterrichtung in einen Einkristall simuliert.}

Die Temperaturabhängigkeit der Eindringtiefenprofile ist für Q_e stärker als für \tilde{Q}_e . Bei 0 K haben die Tiefenverteilungen bei Q_e einen Peak, der breiter ist und um den Faktor 3 tiefer liegt als bei \tilde{Q}_e . Bei 300 K ist der Peak für Q_e zu einem Schwanz abgeschwächt aber für \tilde{Q}_e noch sehr stark ausgeprägt. Letzterer verschwindet erst über 1000 K. Die Ergebnisse dieser Rechnungen zeigen so deutliche Unterschiede der beiden Energieverlustmodelle, daß es interessant wäre, diese experimentell zu testen. Die für amorphes Niob simulierten Tiefenverteilungen stimmen gut mit den nach der Transporttheorie berechneten überein.

Die Eindringtiefenverteilungen für random-Einschußrichtung zeigen, daß ein Teil der Ionen in den Kristall tiefer eindringt als in amorphes Material. Im realen Gitter können diese Effekte schwächer sein als im idealen Gitter.

Die ebenfalls untersuchten Leerstellenverteilungen hängen wenig vom Energieverlustmodell ab. Die maximale Leerstellenkonzentration ist im amorphen und polykristallinen Fall in diesem Energiebereich nahezu konstant, während sie für Einschuß in dichtgepackte Gitterrichtungen mit zunehmender Energie abnimmt. Ein gemessenes Implantationsprofil in einem Niob-Einkristall für random-Einschußrichtung hat mehr Ähnlichkeit mit dem simulierten Tiefenprofil in amorphem Niob als im Einkristall. Wegen der im Experiment verwendeten hohen Dosis und starker sekundärer Prozesse wie thermische Ausheilung, Diffusion und Stabilisierung von Defekten durch Heliumatome, ist die Interpretation der Profile nicht so einfach. Zur Beobachtung der signifikanten Kristallgittereffekte müßten die Experimente mit wesentlich geringeren Dosen und bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt werden.

6. ANHANG

Suchvorgang und simultane Stöße

Das Projektil P befinde sich am Ort P_1 und bewege sich in Richtung des Einheitsvektors \vec{e}_1 . Um den zu P_1 gehörenden Referenzgitterpunkt R_1 , (d.h. den nächstgelegene Raumgitterpunkt) wird die begleitende Einheitszelle erzeugt (Abb.5). Für jedes Gitteratom T, dessen Ort T'_0 und Gitterplatz T_0 aus dieser Einheitszelle bekannt ist, werden die Größen

$$\rho = \vec{e}_1 \cdot \vec{r} \quad \text{mit} \quad \vec{r} = \begin{cases} \vec{P_1 T_0} & \text{(Suche nach Gitterplatz)} \\ \vec{P_1 T'_0} & \text{(Suche nach Targetatom)} \end{cases} \quad (\text{A1})$$

$$s = \sqrt{r^2 - \rho^2}$$

berechnet (Abb. A1). Ein Gitteratom T ist ein möglicher Stoßpartner, wenn es folgende Kriterien erfüllt

$$\rho > 0 \quad \text{und} \quad \rho > \xi_{\min} \\ s < s_{\max} \quad (\text{A2})$$

Die erste Bedingung soll aufeinanderfolgende Stöße mit demselben Targetatom verhindern, wobei $\xi_{\min} = \text{Max} (\vec{e}_1 \cdot \vec{P_1 R_1}, \xi_{\lim})$ ist und ξ_{\lim} einen kleinen positiven Wert hat. Bei thermischen Gitterschwingungen der Targetatome können solche Mehrfachstöße am sichersten vermieden werden, wenn statt T'_0 der Gitterplatz T_0 für das Suchkriterium verwendet wird. Die zweite Bedingung verhindert, daß zu viele Stöße mit nur sehr kleinen Energieübertragungen berechnet werden müssen. Der maximale Stoßparameter s_{\max} ist jedoch so groß zu wählen, daß in jeder Situation mindestens ein Stoßpartner gefunden wird.

Wenn nur ein Targetatom T das Suchkriterium erfüllt hat, wird der Stoß von P mit T berechnet (Kap.2.5 und Abb.7). Das Projektil P wird in Richtung \vec{e}_1 von seinem bisherigen Ort um den Betrag $(\rho - x_1)$ nach P_2 bewegt. P_2 ist der Schnittpunkt S_1 der Asymptoten an die Ionenbahn (vgl. Abb.7). S_1 wird nur zur Konstruktion der auslaufenden Asymptote benötigt. Der kleinste Stoßabstand $R(x,E)$ ist also nicht $\overline{S_1 S_2}$, sondern der kleinste Abstand der Stoßpartner.

Die neue Bewegungsrichtung des Projektils ist

$$\vec{e}_2 = \left(\cos \vartheta + \frac{\rho}{s} \sin \vartheta \right) \vec{e}_1 - \frac{\sin \vartheta}{s} \vec{r} \quad (\text{A3})$$

wobei ϑ der Laborstreuwinkel und s der Stoßparameter zu T'_0 ist.

Wenn das Targetatom T verlagert wurde, ergibt die Stoßrechnung aus x_2 (25) seine neue Position P'_2 , und aus dem Targetstreuwinkel φ seine Bewegungsrichtung

$$\vec{e}'_2 = \left(\cos \vartheta - \frac{\rho}{s} \sin \vartheta \right) \vec{e}_1 + \frac{\sin \vartheta}{s} \vec{r} \quad (\text{A4})$$

Danach wird der nächste Suchvorgang durchgeführt, wobei der Gitterplatz T_0 als neuer Referenzgitterpunkt R_2 dient.

In einem Kristall kommt es häufig vor, besonders bei Gitterführung des Ions und Ersetzungsstößen von Gitteratomen, daß gleichzeitig mehrere Targetatome das Suchkriterium erfüllen, weil sie nahezu symmetrisch um das Projektil angeordnet sind (s. Abb. A3). Die reine Zweierstoßrechnung ergibt in diesem Fall zu starke Winkelablenkungen und zu großen Energieverlust des Projektils. In MARLOWE wird mit dem folgenden Verfahren - den "simultanen Stößen" - versucht, diese Fehler zu korrigieren.

T_1 sei das dem Projektil am nächsten gelegene Targetatom mit β_1 und S_1 . Für die übrigen möglichen Targetatome T_i berechnet das Programm die Größen (s. Abb. A2)

$$\begin{aligned} \Delta\beta_{1i} &= \beta_i - \beta_1 \\ d_{1i}^2 &= S_1^2 + (\Delta\beta_{1i})^2 ; d_{i1}^2 = S_i^2 + (\Delta\beta_{i1})^2 \end{aligned} \quad (A5)$$

An der Berechnung des simultanen Stoßes nehmen alle T_i teil, die das folgende Kriterium erfüllen:

$$\Delta\beta_{i1} < d_{sim} \quad , \quad d_{1i} < s_{max} \quad , \quad d_{i1} < s_{max} \quad (A6)$$

Durch den Parameter d_{sim} wird in Verbindung mit s_{max} eine maximale zulässige Abweichung von den symmetrischen Stoßkonfigurationen festgelegt. Nach einem simultanen Stoß ist die Bewegungsrichtung \vec{e}_1 des Projektils P die normierte vektorielle Summe der Einzelablenkungen von P an den T_i , und der Energieverlust von P ist die Summe der einzelnen Energieverluste.

In Abb. A3 ist ein simultaner Stoß für zwei symmetrisch angeordnete Targetatome verglichen mit 2 aufeinanderfolgenden Stößen.

LITERATURANGABEN

- B.R.Appleton, J.H.Barrett, T.S.Noggle, C.D.Moak 1972,
Radiation Effects 13, 171 (1972).
- E.P.Arkhypov und Yu.V.Gott 1969, Zh. Eksp.Teor. Fis. 56, 1146
(1969), (engl. Übers.: Sov.Phys. JETP 29, 615 (1969)).
- J.H.Barrett, B.R.Appleton, T.S.Noggle, C.D.Moak, J.A.Biggerstaff
1975, in Atomic Collisions in Solids, ed.S.Datz
et al., Vol.2, (Plenum, New York, 1975), p.645.
- R.Behrisch und B.B.Kadomtsev 1974, Proc.Int.Conf.Plasma Phys.
and Controlled Nuclear Fusion, Tokyo (1974) IAEA,
Vienna 1975.
- R.Behrisch, J.Böttiger, W.Eckstein, U.Littmark, J.Roth,
B.M.U.Scherzer 1975, Appl.Phys.Lett, 27, 199 (1975).
- H.A.Bethe 1930, Ann.d.Physik 5, 325 (1930).
- F.Bloch 1933, Ann.d.Physik 16, 285 (1933).
- N.Bohr 1913, Phil.Mag.25, 10 (1913).
- N.Bohr 1948, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 18, No.8 (1948).
- R. Boot und H.H. Barshall 1972, Nucl.Instr.Meth.99, 1 (1972)
- P.Debye 1914, Ann.d.Physik 43, 49 (1914).
- W.Eckstein, J.Roth, R.Behrisch 1975, wird veröffentlicht.
- C.Erginsoy 1965, Phys.Rev. Lett. 15, 360 (1965).
- E.Fermi 1928, Z.f.Physik 48, 73 (1928).
- E.Fermi und E.Teller 1947, Phys.Rev.72, 399 (1947).
- O.B.Firsov 1957, Zh.Eksp.Teor.Fys. 33, 696 (1957),
(engl.Übers.: Sov.Phys.JETP 6, 534 (1958)).

- O.B.Firsov 1959, Zh.Eksp.Teor.Fys.36, 1517 (1959),
(engl.Übers.:Sov.Phys. JETP 36, 1076 (1959)).
- H.Geiger und E.Marsden 1909, Proc.Roy.Soc. 82, 495 (1909).
- G.H.Kinchin und R.S.Pease 1955, Rep.Progr.Phys.18, 1 (1955).
- C.Lehmann und G.Leibfried 1963, J.Appl.Phys. 34, 2821 (1963).
- G.Leibfried 1965, Bestrahlungseffekte in Festkörpern,
(B.G.Teubner, Stuttgart, 1965), S.30-64.
- H.A.Leupold und H.A.Boorse 1964, Phys. Rev. 134, A 1322 (1964).
- W.K.Lin, M.G.Olson, D.Powers 1973, Phys.Rev. 38, 1881 (1973).
- J.Lindhard 1954, Mat.Fys. Medd.Dan.Vid. Selsk. 28, No.8 (1954).
- J.Lindhard und M.Scharff 1961, Phys.Rev. 124, 128 (1961).
- J.Lindhard, V.Nielsen, M.Scharff, P.V.Thomsen 1963 a,
Mat.Fys. Medd.Dan.Vid.Selsk. 33, No. 10 (1963).
- J.Lindhard, M.Scharff, H.E.Schiøtt 1963 b, Mat.Fys.Medd.Dan.
Vid.Selsk. 33, No.14 (1963).
- J.Lindhard und A.Winter 1964, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 34,
No. 4 (1964).
- J.Lindhard 1965, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 34, No.14 (1965).
- J.Lindhard, V.Nielsen, M.Scharff 1968, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.
Selsk. 36, No.10 (1968).
- U.Littmark 1975, wird veröffentlicht.
- U.Littmark, G.Maderlechner, R.Behrisch, B.M.U.Scherzer 1975,
Proc.VI. Intern.Conf. on Atomic Collisions in
Solids, Amsterdam 1975
Nucl.Instr.Meth. 132, 661 (1976).

- H.Lutz und R.Sizmann 1963, Phys.Lett.5, 113 (1963).
- G.Molière 1947, Z.Naturforsch. 2a, 133 (1947).
- R.S.Nelson & M.W.Thompson 1963, Phil.Mag.8, 1677 (1963).
- L.C.Northcliffe und R.F.Schilling 1970, Nucl.Data A7, 233 (1970).
- G.R.Piercy, F.Brown, J.A.Davies, M.McCargo 1963, Phys.Rev. Lett. 10, 399 (1963).
- J.E.Robinson 1974, Radiation Effects 23, 29 (1974).
- M.T.Robinson, D.K.Holmes, O.S.Oen 1961, Proc.of the Conf. "Le bombardment ionique", ed.J.J.Trillat. (C.N.R.S., Paris, 1962), p.105.
- M.T.Robinson und O.S.Oen 1963, Phys.Rev.132, 2385 (1963).
- M.T.Robinson 1965, Phil.Mag.12, 741 (1965).
- M.T.Robinson 1972, in "Radiation Induced Voids in Metals", ed.J.W.Corbett und L.C.Ianniello (U.S.GPO Washington, D.C., 1972), p.397.
- M.T.Robinson und I.M.Torrens 1974, Phys.Rev. B9, 5008 (1974).
- M.T.Robinson und O.S.Oen 1975, Proc.VI.Int.Conf. on Atomic Collisions in Solids, Amsterdam 1975.
- E.Rutherford 1911, Phil.Mag.21, 669 (1911).
- H.E.Schiøtt 1966, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk 35, No.9 (1966).
- F.Seitz 1949, Disc.Faraday Soc. 5, 271 (1949).
- P.Sigmund 1969, Radiation Effects 1, 15, (1969).
- P.Sigmund 1972, Rev.Roum.Phys. 17, 823 (1972).
- J.Stark und G.Wendt 1912, Ann.d.Physik 38, 921 (1912).

L.H.Thomas 1927, Proc.Cambr.Phil.Soc. 23, 542 (1927).

I.M.Torrens 1972, Interatomic Potentials, (Academic, New York, 1972).

D. van Vliet 1971, Radiation Effects 10, 137 (1971).

J.Waller 1923, Z.f.Physik, 17, 398 (1923).

R.Weissmann und P.Sigmund 1973, Radiation Effects 19, 7, (1973).

J.F.Ziegler und W.K.Chu 1974, Atomic and Nuclear Data Tables 13, 463 (1974).

Herrn Professor Dr.Pfirsch und Herrn Dr.Vernickel danke ich für ihr wohlwollendes Interesse. Besonders danke ich Herrn Dr. M.T.Robinson vom Oak Ridge National Laboratory, U.S.A., für die wertvollen Informationen und Ratschläge über das Computerprogramm MARLOWE anlässlich seines Gastaufenthaltes am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr.Behrisch und Herrn Dr.Scherzer für ihre verständnisvolle und geduldige Unterstützung dieser Arbeit und ihre wissenschaftlichen Anregungen. Herrn Dr.Littmark von der Universität Kopenhagen danke ich für zahlreiche Diskussionen während seines Gastaufenthalts am MPI für Plasmaphysik.

ABBILDUNGEN

Abbildungen Nr.1 - 18

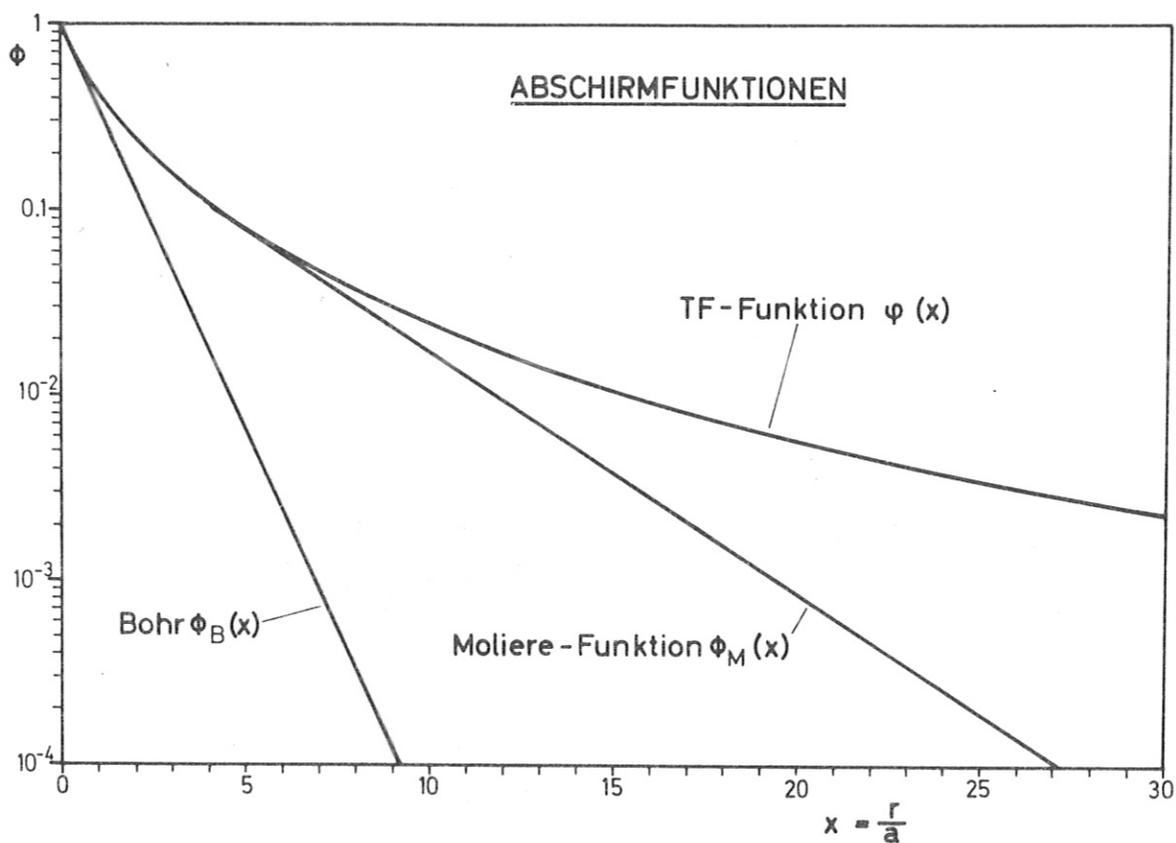


Abb.1 Vergleich verschiedener Abschirmfunktionen $\phi(x)$ für das abstoßende Coulombpotential (1), a ist die Abschirmkonstante.

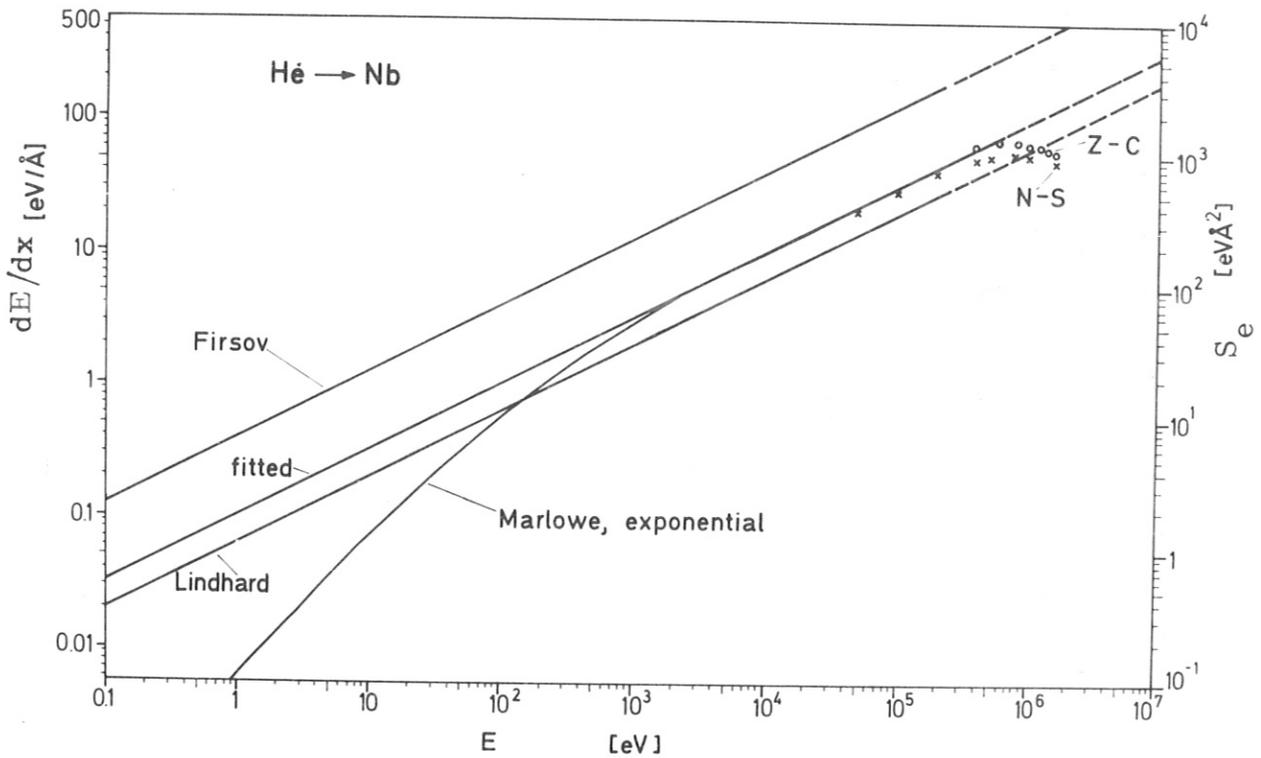


Abb.2 Mittlerer differentieller elektronischer Energieverlust dE/dx und mittlerer elektronischer Bremsquerschnitt S_e von He in amorphem Niob als Funktion der Energie E . "Firsov" mit $k = k_F$ nach (7), "Lindhard" mit $k = k_L$ nach (6) und "fitted" mit $k = 1,6 k_L$ sind $\sim \sqrt{E}$ nach (8a). "MARLOWE" nach (10) mit $k = 1,6 k_L$. N-S: semiempirische Werte von Northcliffe und Schilling (1970), Z-C: experimentelle Werte von Ziegler und Chu (1974).

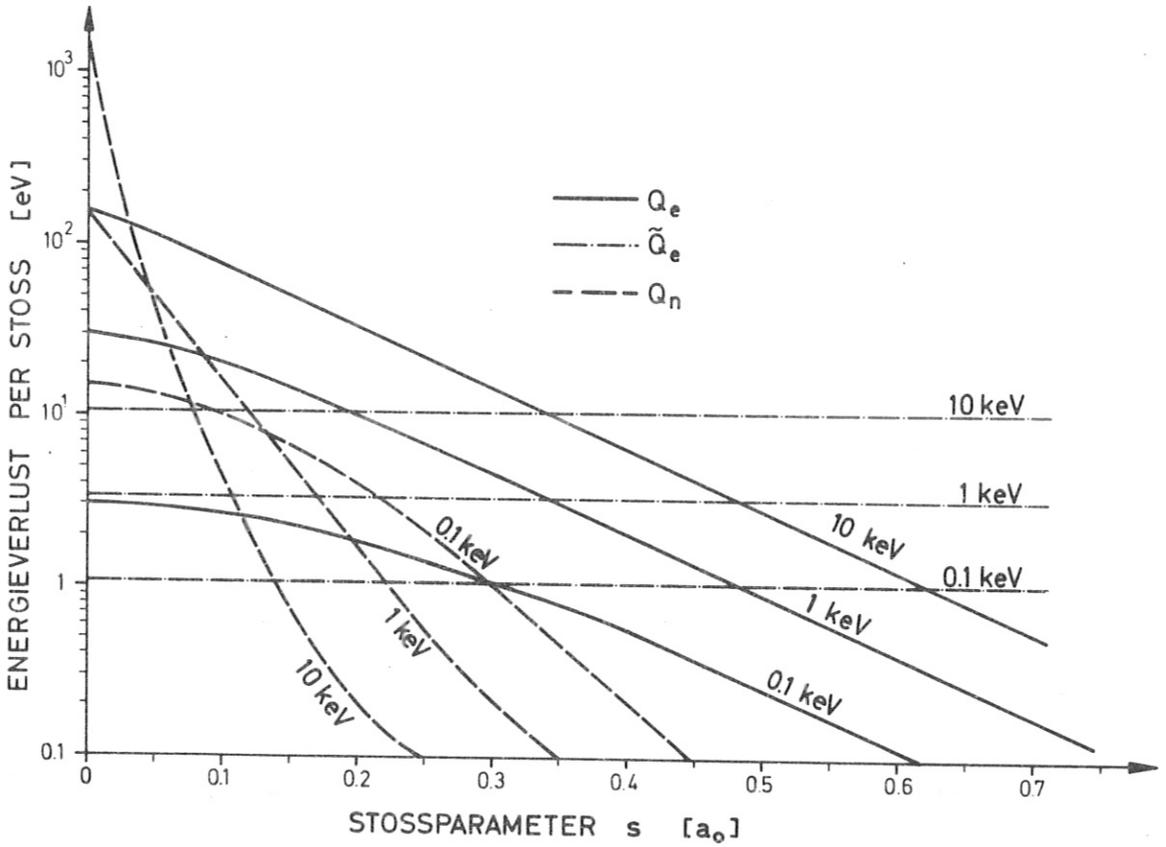
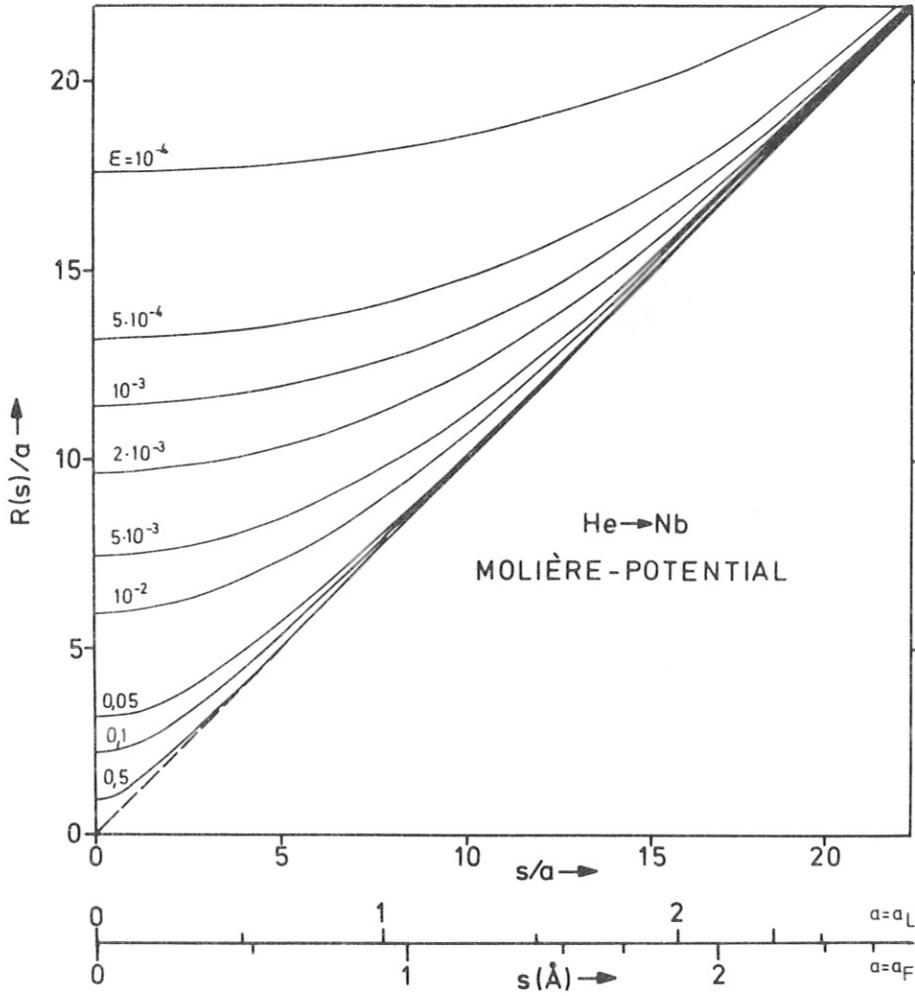


Abb. 3 Elektronische Energieverluste Q_e und \tilde{Q}_e und nuklearer Energieverlust Q_n eines He-Ions der Energie E für einen Stoß mit einem Nb-Atom in Abhängigkeit vom Stoßparameter in Gittereinheiten $a_0 = 3,3 \text{ \AA}$.

a)



b)

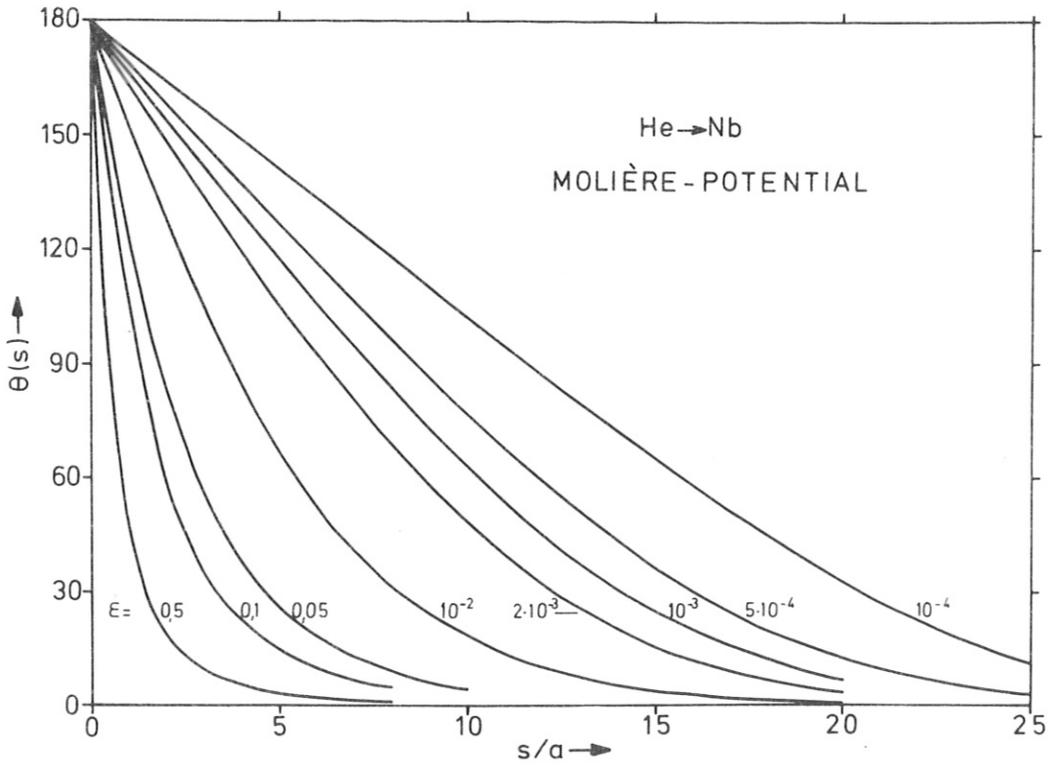


Abb.4a) Der kleinste Stoßabstand $R(s,E)$ als Funktion des Stoßparameters s für verschiedene Energien E . $R(s,E)$ und s sind in Einheiten der Abschirmlänge a angegeben. $E = 10,36 \varepsilon$ [keV].
 b) Streuwinkel θ im Schwerpunktsystem als Funktion des Stoßparameters s für verschiedene Energien $E = 10,36 \varepsilon$ [keV].

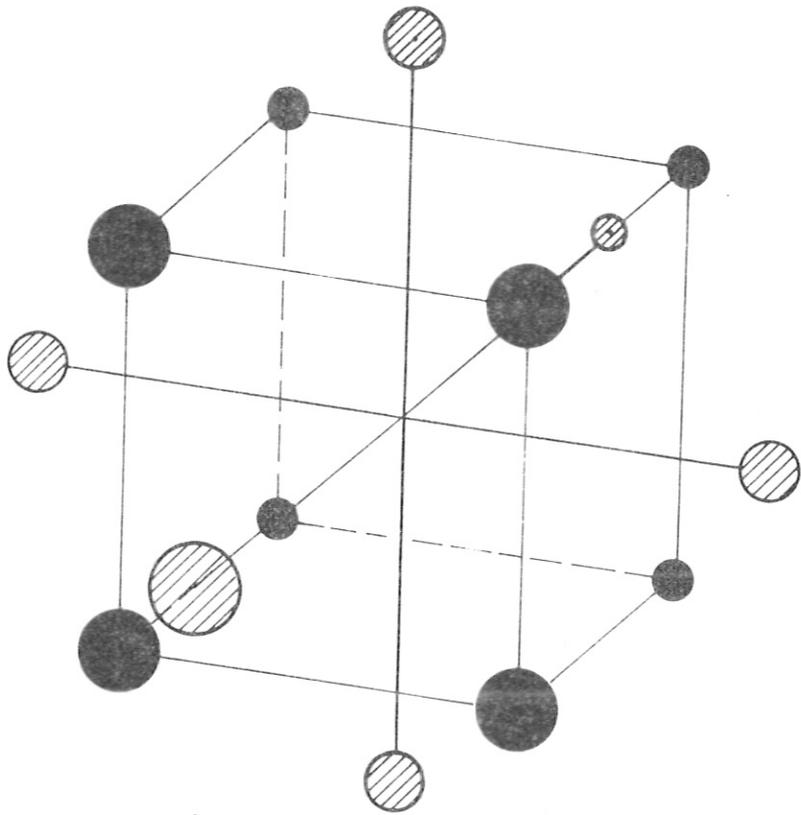


Abb.5 Nachbaratome des Suchvorganges im bcc Kristall

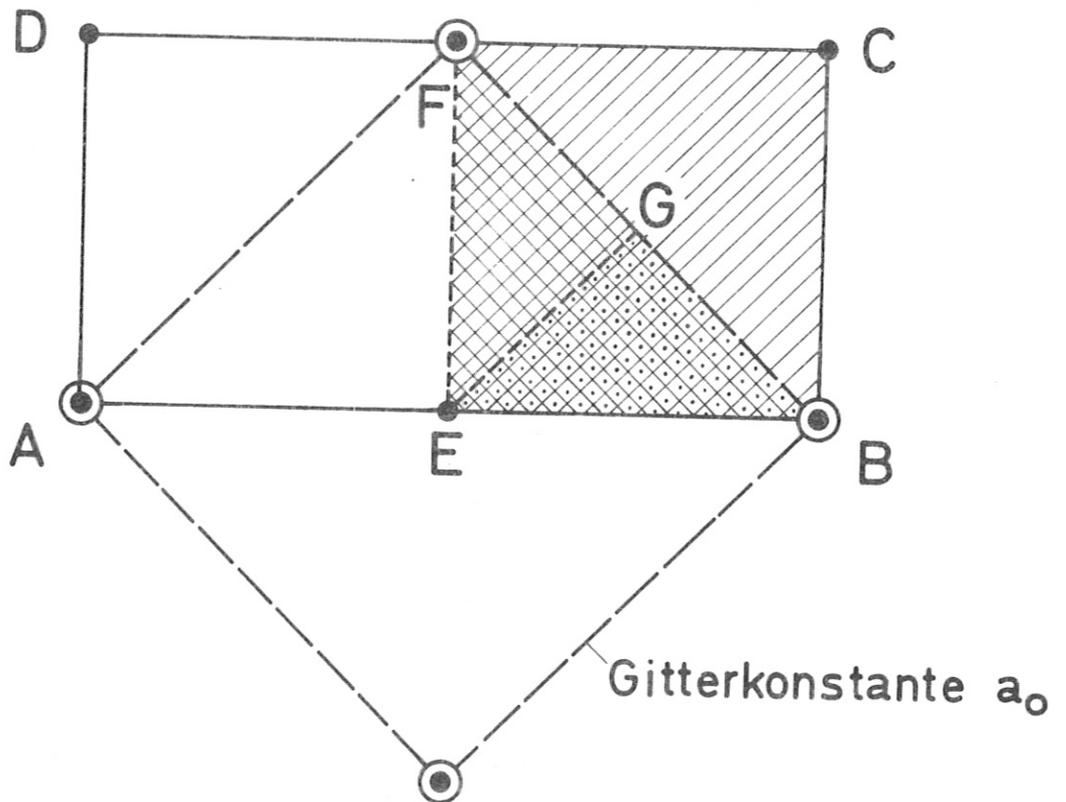


Abb.6 Suchflächen auf der (100) Oberfläche eines bcc Kristalls

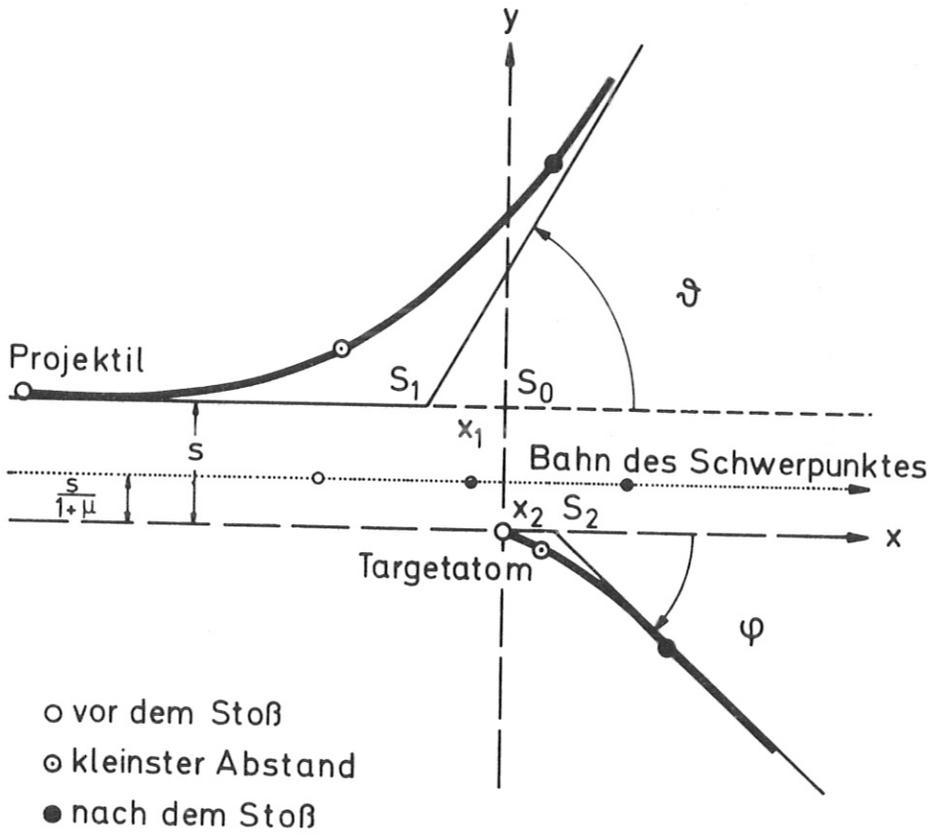
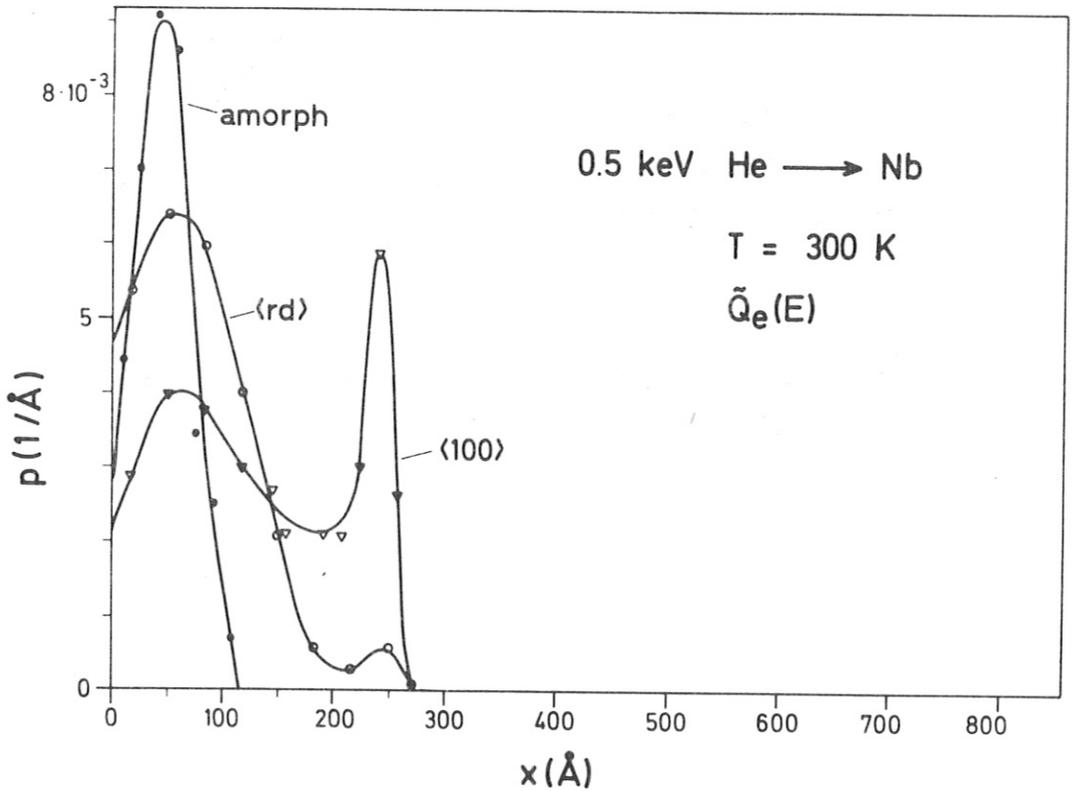
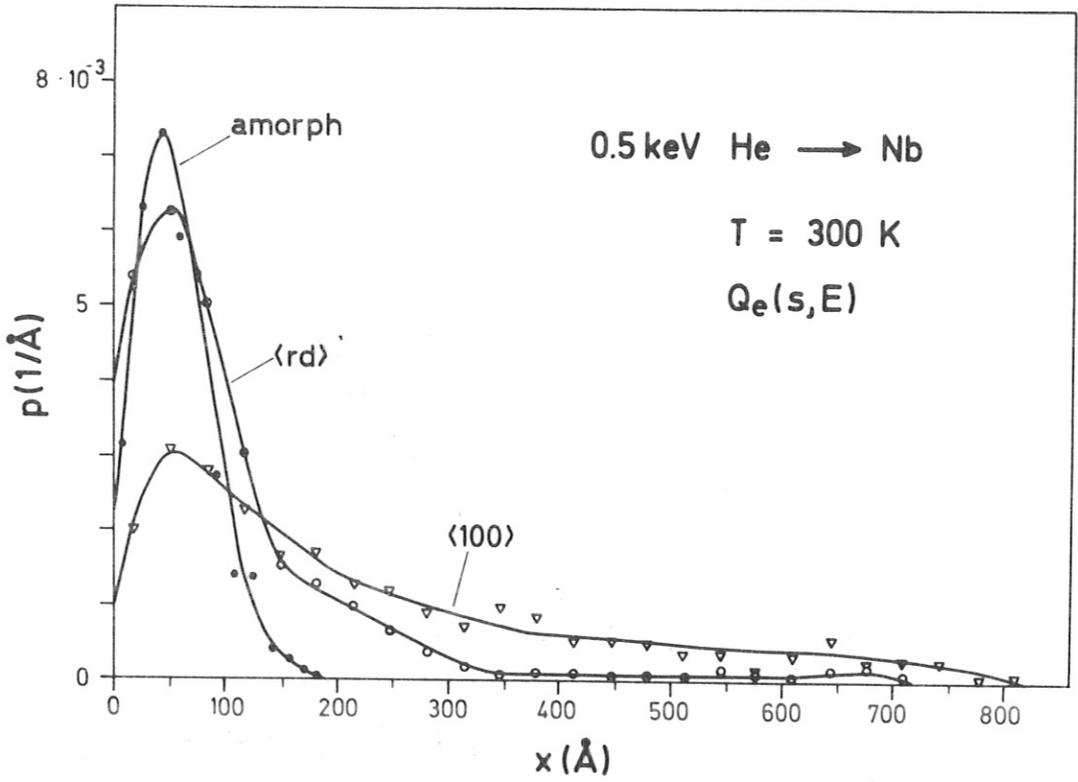
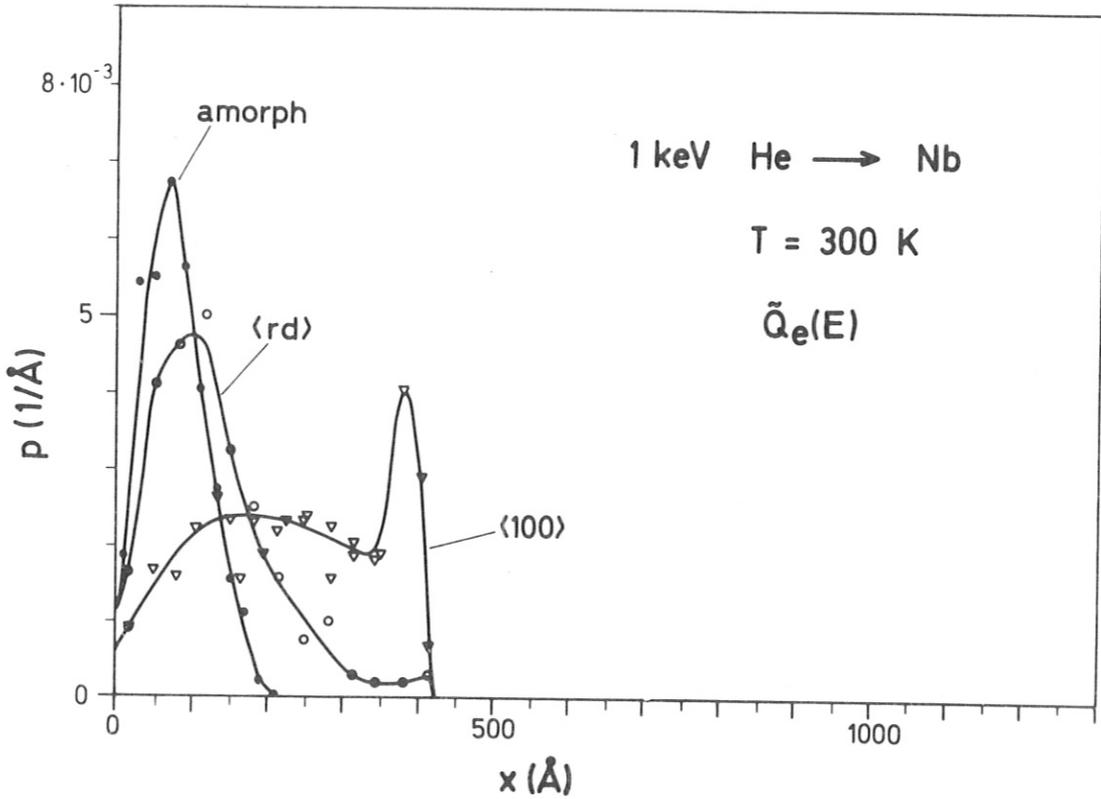
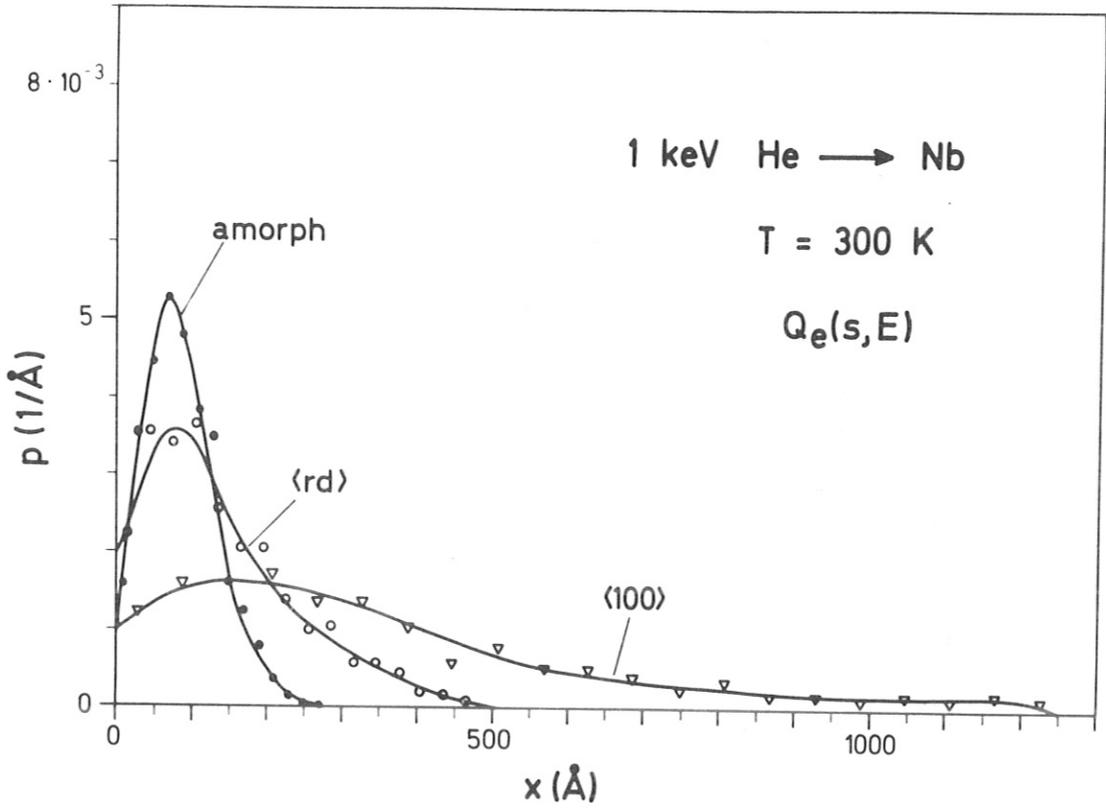


Abb.7 Elastischer Stoß im Laborsystem. Bahnen zweier Teilchen im abstoßenden Potential.



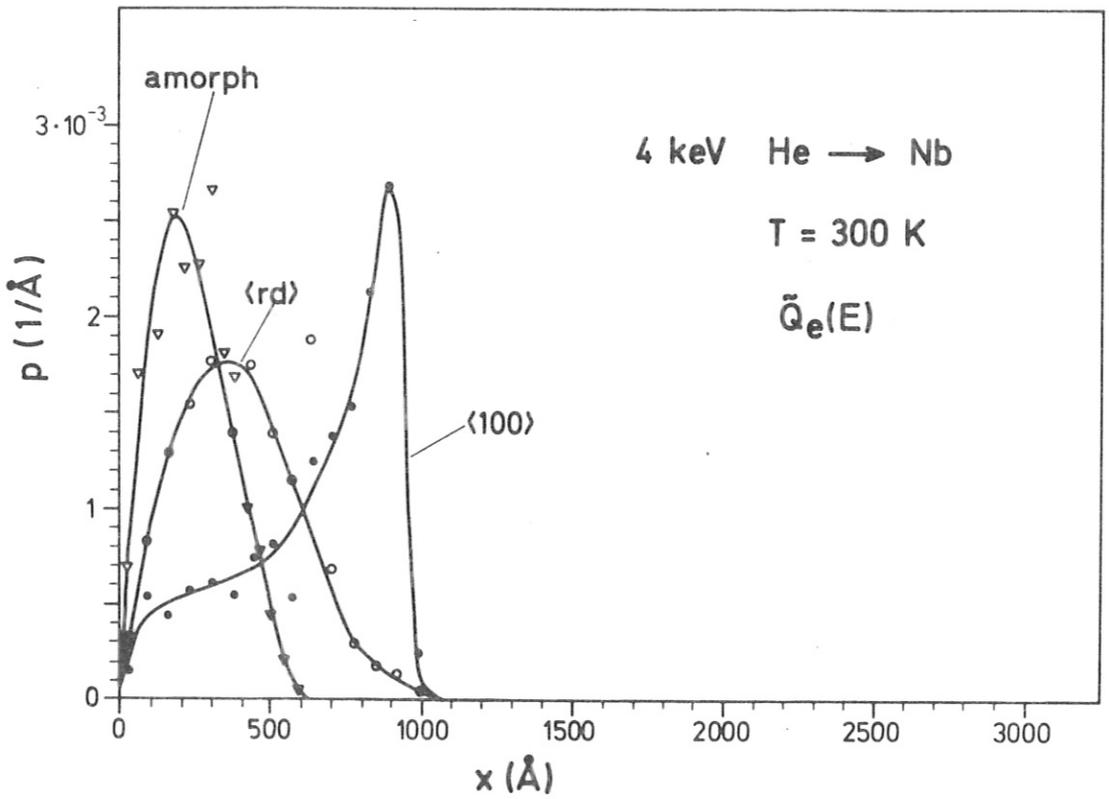
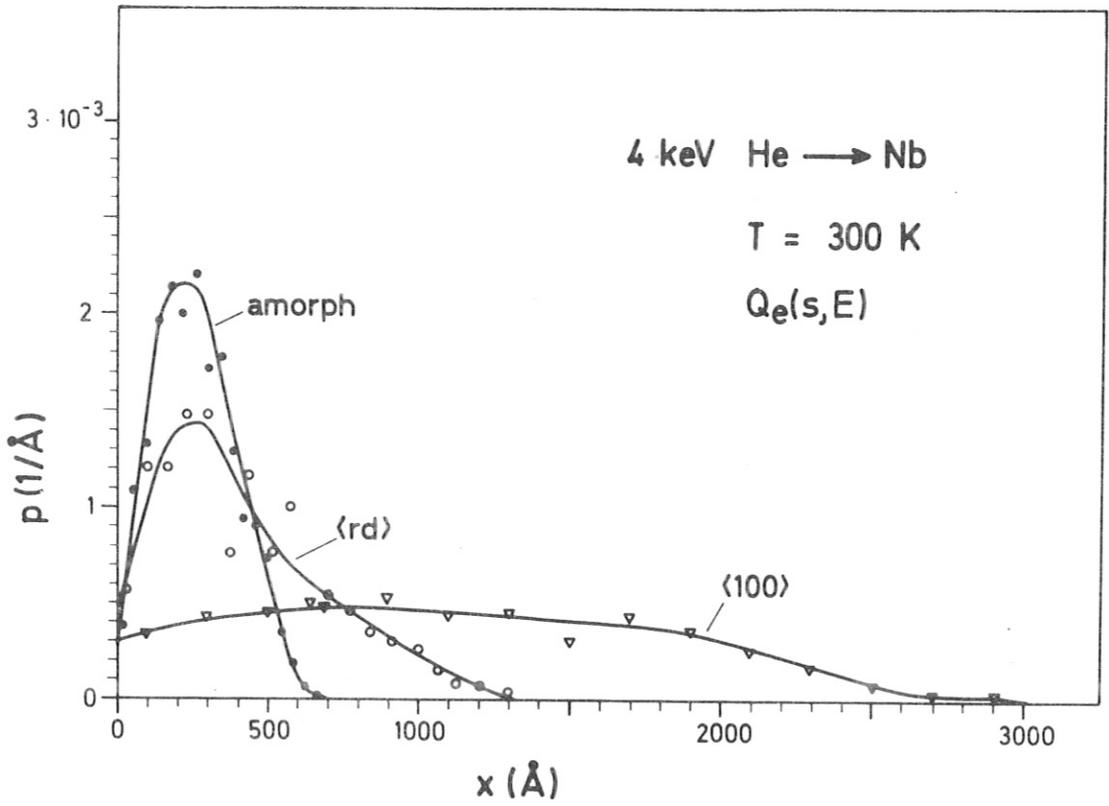
a)

Abb. 8 Eindringtiefenverteilungen von He in kristallinem und amorphem Niob. $\langle 100 \rangle$: Einschub in $\langle 100 \rangle$ -Richtung, $\langle rd \rangle$: Einschub in random Richtung, d.h. außerhalb dichtgepackter Gitterrichtungen (12° zur $\langle 100 \rangle$ Achse gekippt und um 3.5° gedreht), amorph: Einschub in amorphes Niob senkrecht zur Oberfläche.

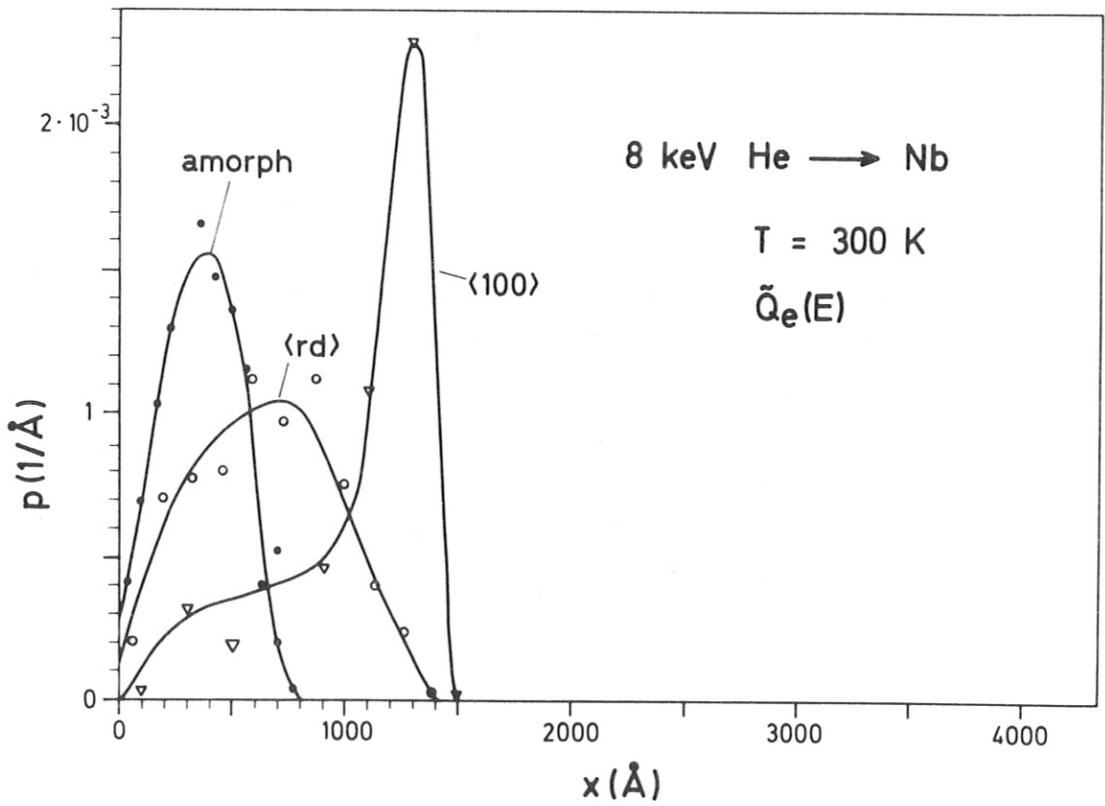
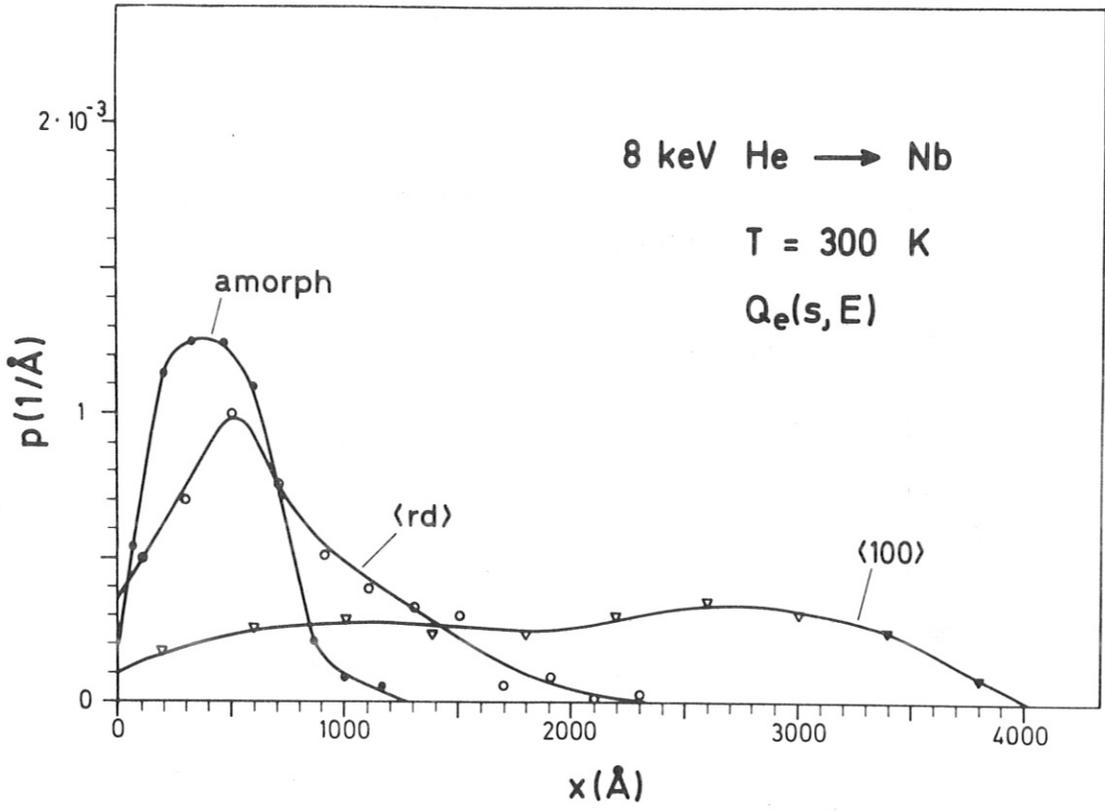


8b)

Oben: Stoßparameterabhängiger Energieverlust $Q_e(s,E)$ pro Stoß. Unten: Stoßparameterunabhängiger Energieverlust $\tilde{Q}_e(E)$ pro Stoß. a) $E = 0,5$ keV, b) $E = 1$ keV, c) $E = 4$ keV, d) $E = 8$ keV. $p(x)$ ist nach (26) normiert.



8c)



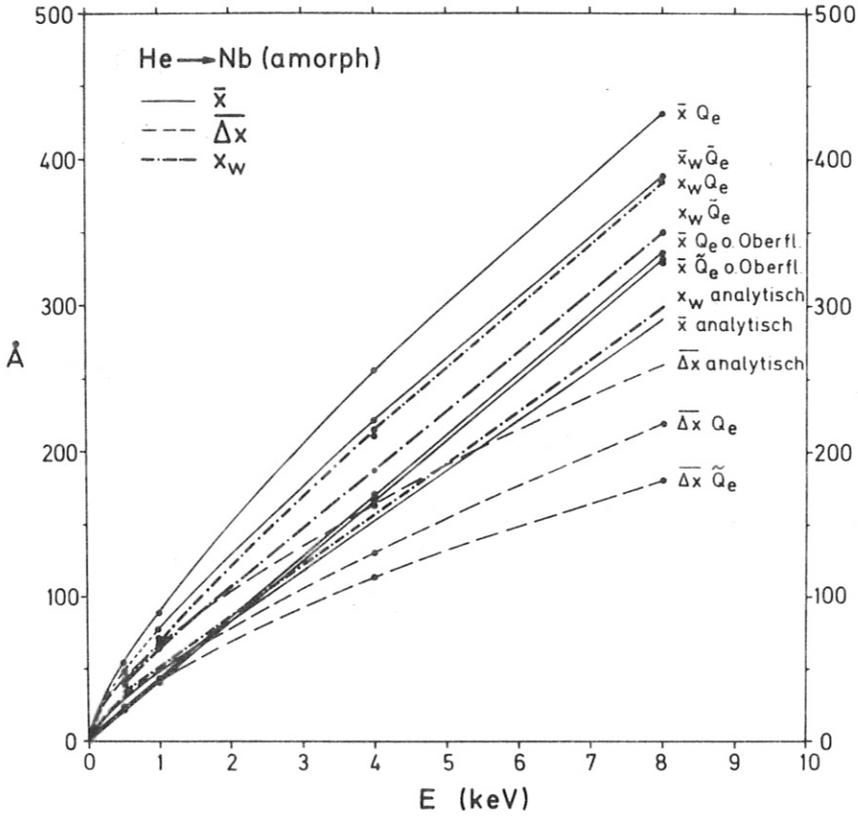


Abb. 9

Mittlere Eindringtiefe \bar{x} , wahrscheinlichste Eindringtiefe x_w , Standardabweichung Δx für Eindringtiefenverteilungen von He in amorphem Nb bei elektronischem Energieverlustmodell $Q_e(s, E)$ und $\tilde{Q}_e(E)$. Vergleich mit \bar{x} und Δx aus analytischer Theorie und \bar{x} und Δx für Simulation ohne Oberfläche. In allen Fällen $a = a_F$ und $k = 1,6 k_L$.

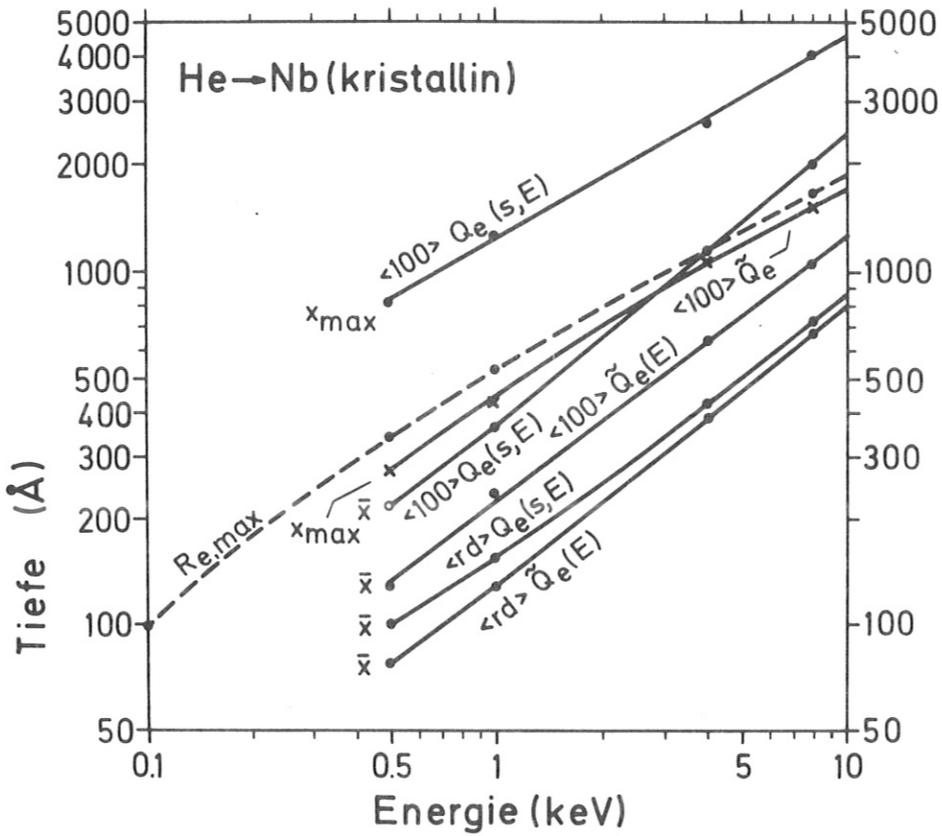


Abb. 10

Mittlere Eindringtiefe \bar{x} und maximale Eindringtiefe x_{max} für $\langle 100 \rangle$ und $\langle rd \rangle$ Einschub in kristallines Niob. $R_{e,max} = \frac{2}{k} \sqrt{E}$ ist die maximale Reichweite nur durch elektronischen Energieverlust \tilde{Q}_e . $k = 1,6 k_L$.

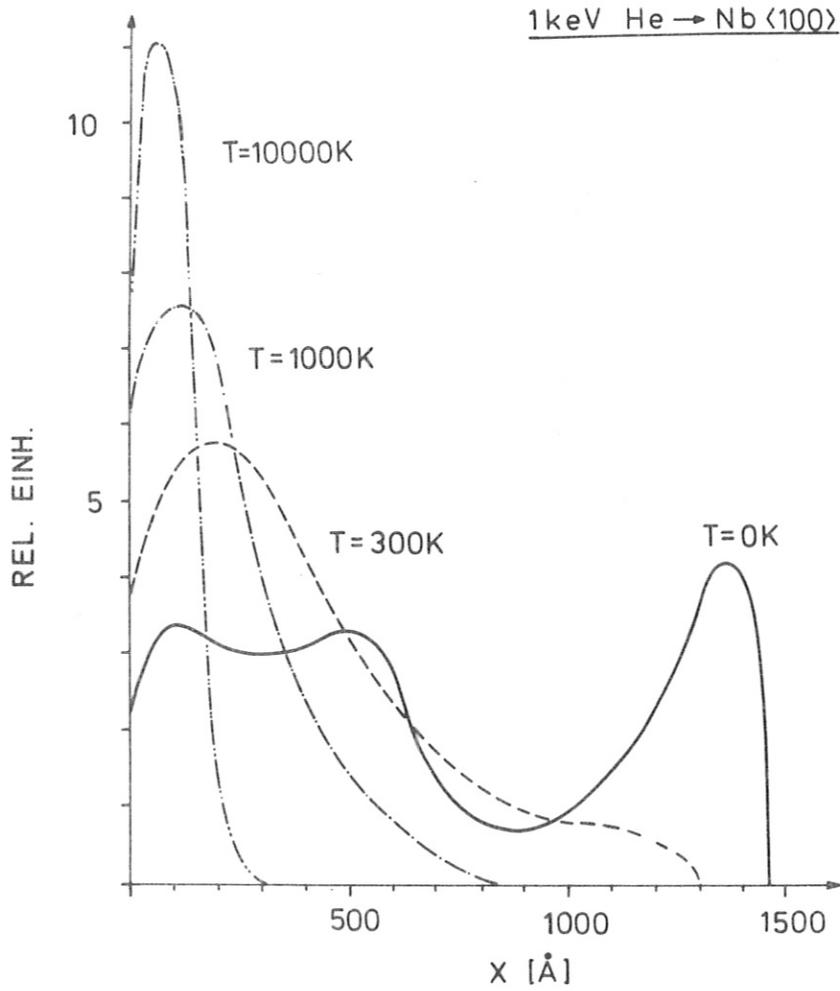


Abb.11

Temperaturabhängigkeit der Tiefenverteilung von 1 keV He bei $\langle 100 \rangle$ Einschuss für stoßparameterabhängigen elektronischen Energieverlust $Q_e(s, E)$.

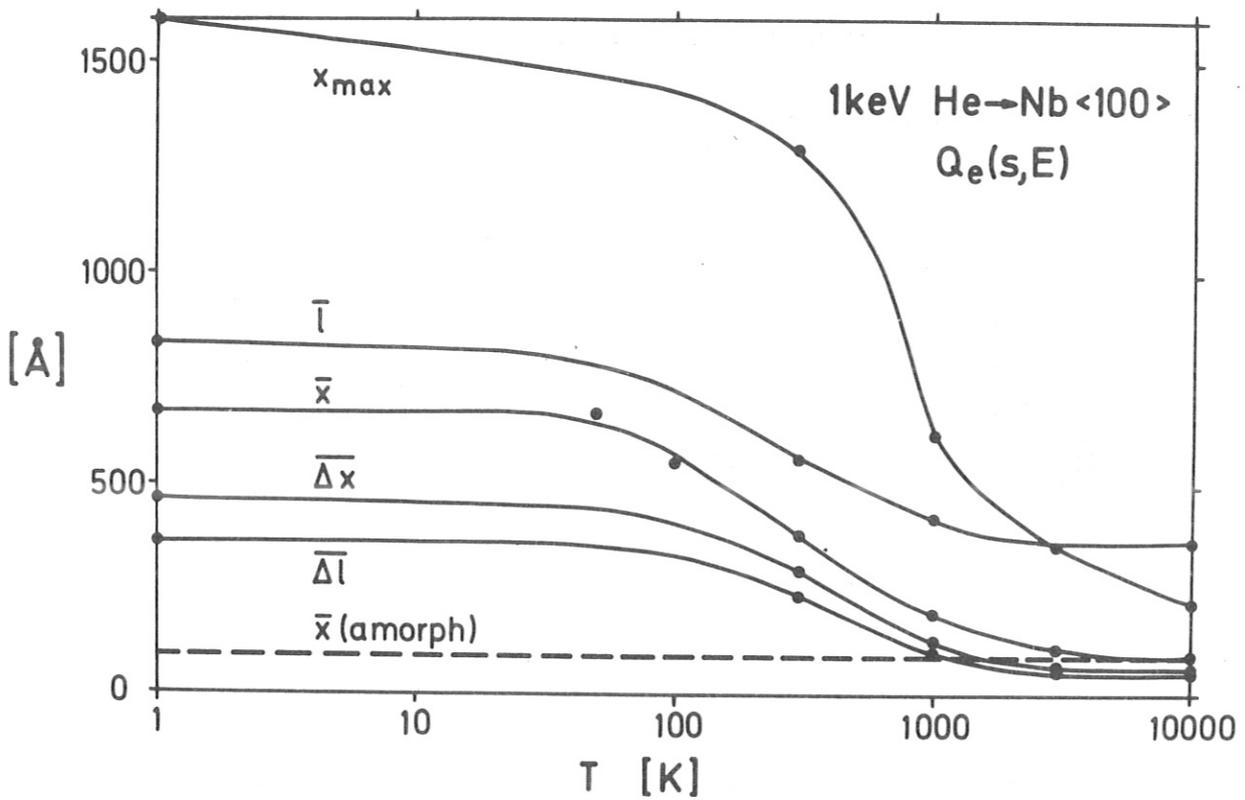


Abb.12

Maximale Eindringtiefe x_{\max} , mittlere Weglänge \bar{l} , mittlere Eindringtiefe \bar{x} , Standardabweichungen $\overline{\Delta x}$ und $\overline{\Delta l}$ der Eindringtiefen- und Weglängenverteilungen als Funktion der Kristalltemperatur. 1 keV He in Nb für <100> Einschubrichtung und stoßparameterabhängigen elektronischen Energieverlust $Q_e(s,E)$.

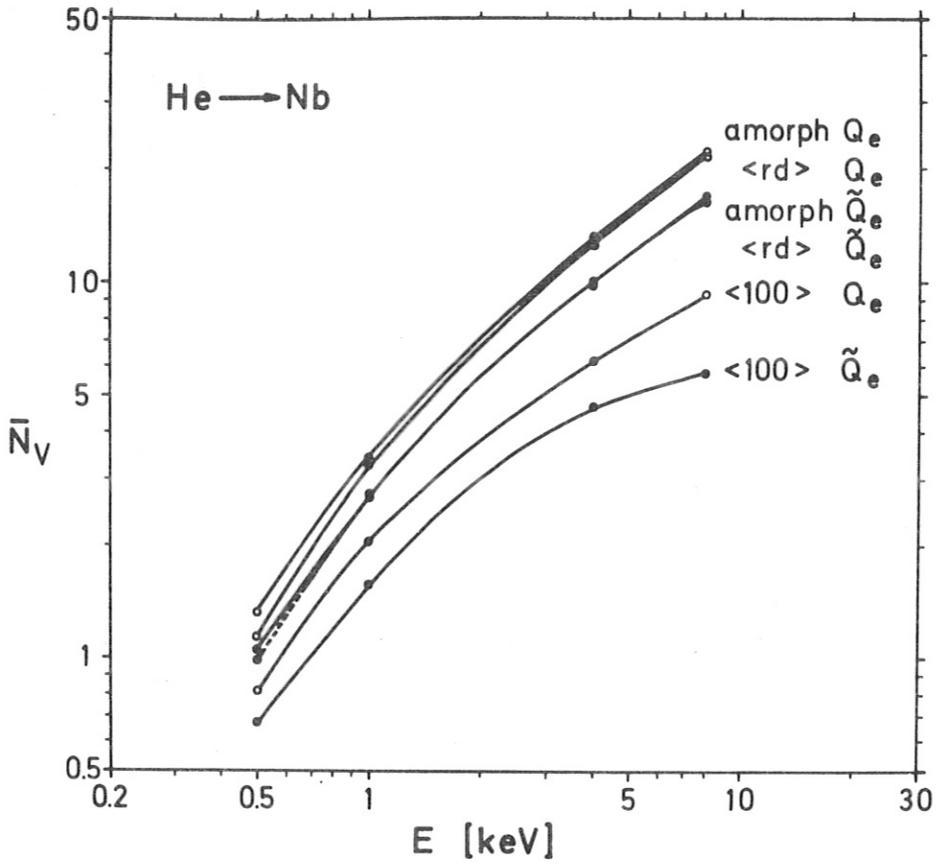


Abb.13

Mittlere Anzahl N_V der Leerstellen pro Ion in kristallinem und amorphem Niob als Funktion der Energie. $\langle 100 \rangle$, $\langle rd \rangle$ und amorph haben gleich Bedeutung wie in Abb.8.

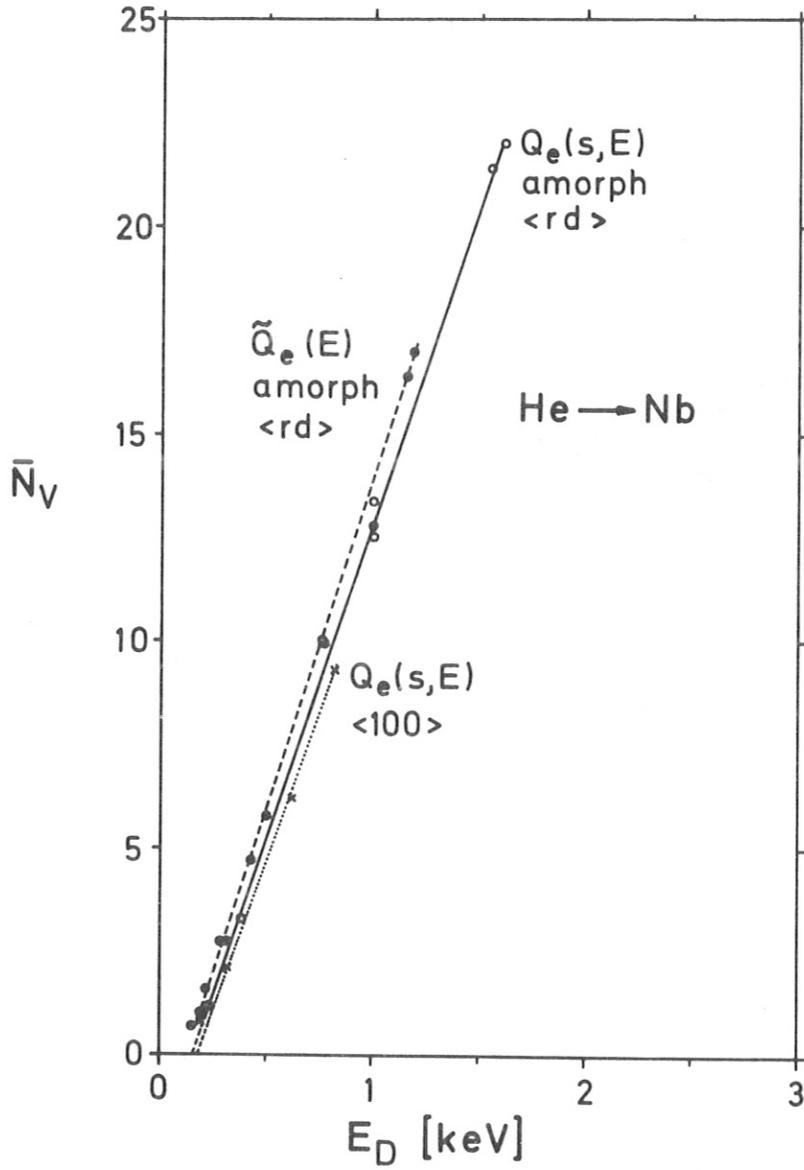


Abb.14

Mittlere Anzahl N_V der Leerstellen pro Ion in amorphem und kristallinem Niob als Funktion der Schadenenergie E_D (mittlerer nuklearer Energieverlust pro Ion).

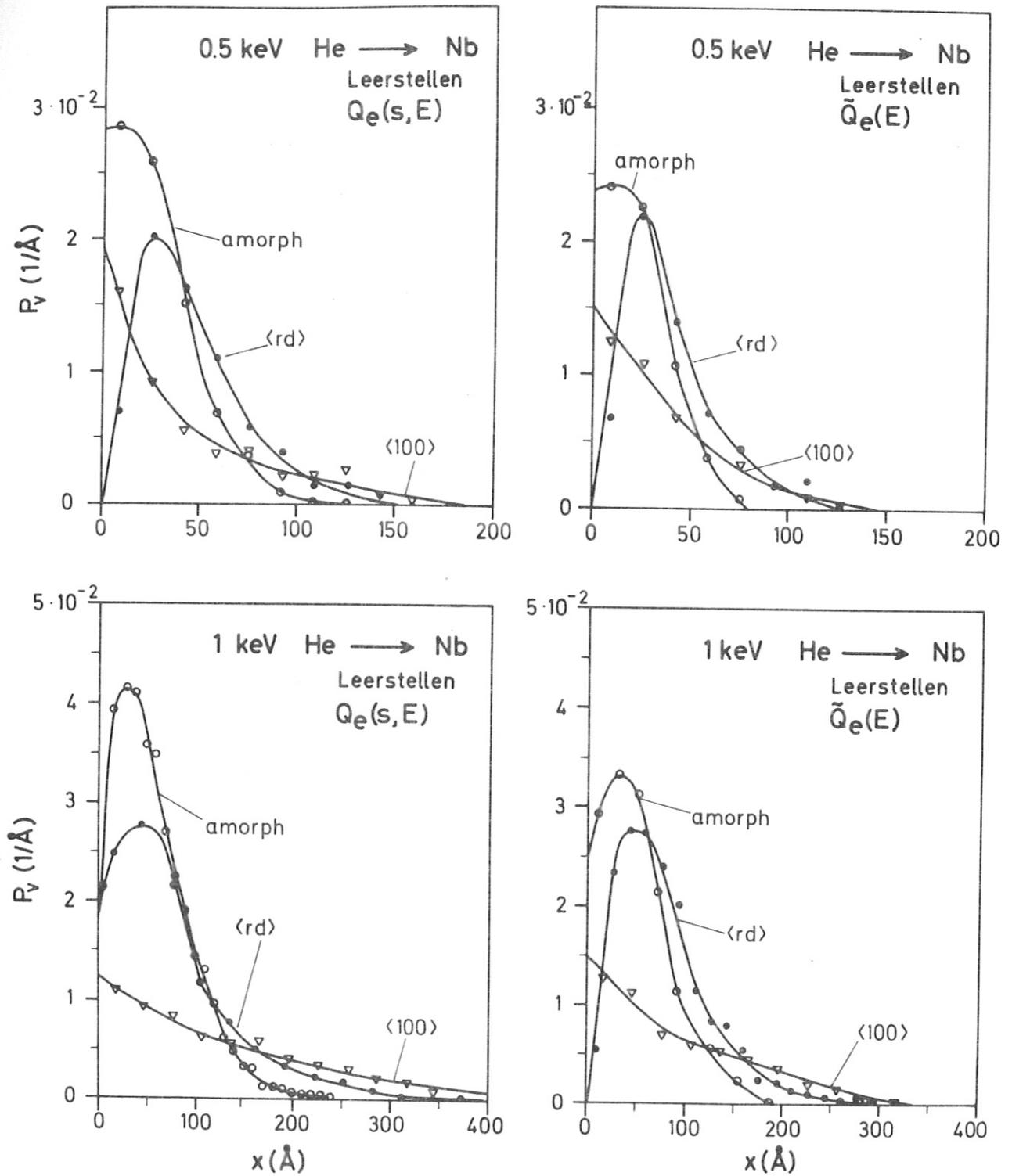
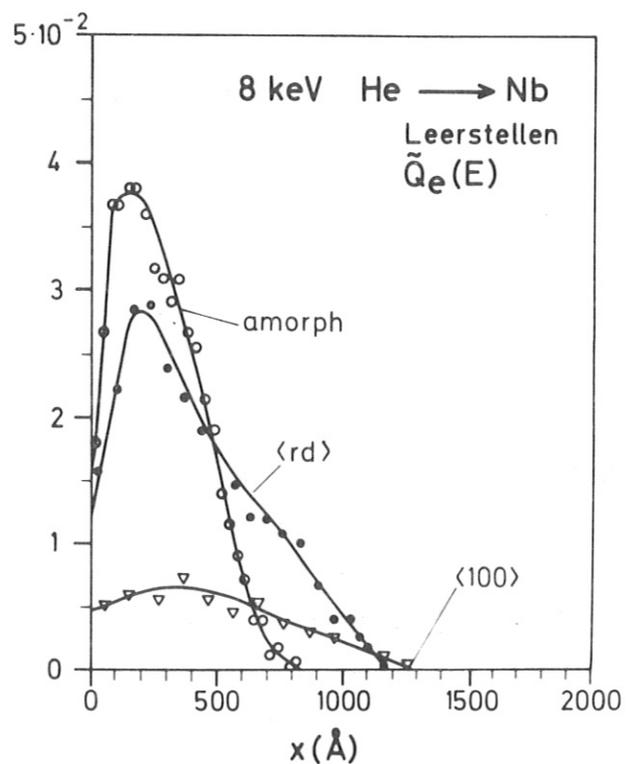
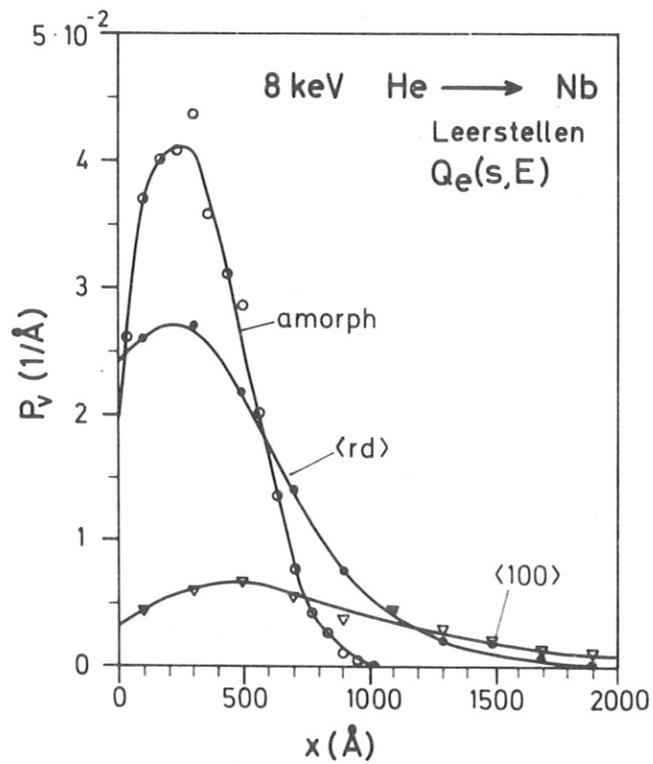
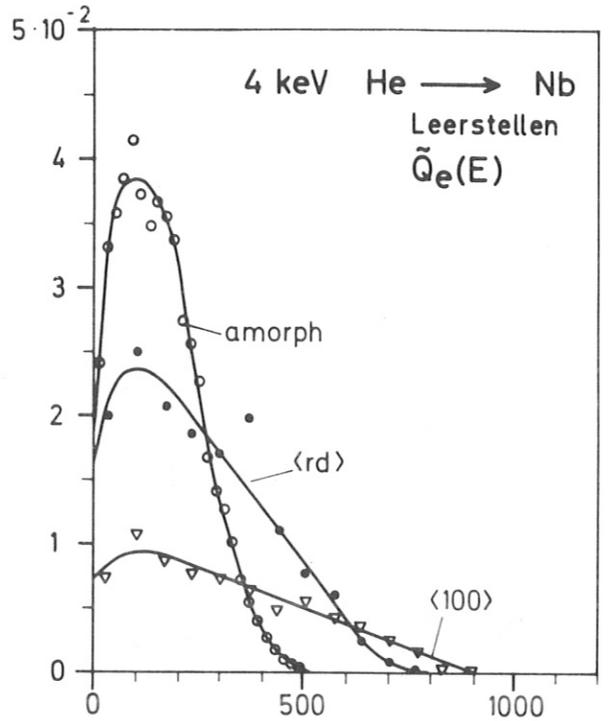
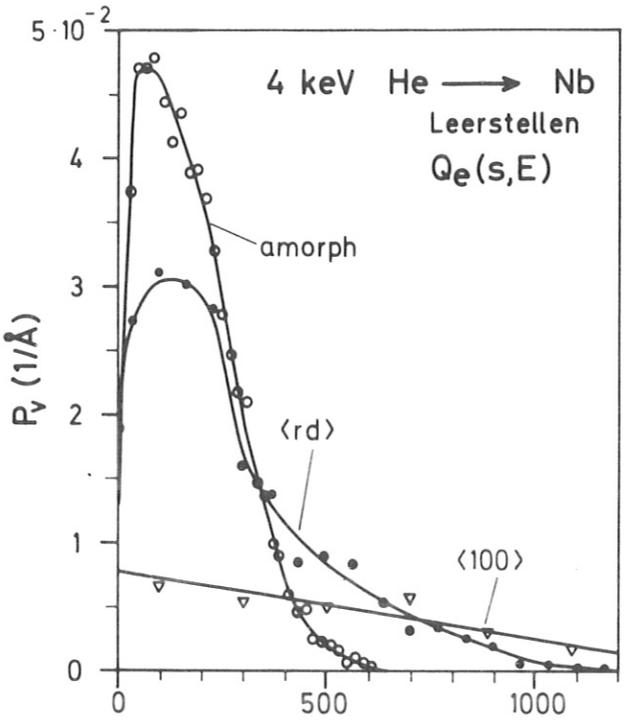


Abb.15

(a)

Leerstellentiefenverteilungen in kristallinem und amorphem Niob. Links: stoßparameterabhängiger elektronischer Energieverlust Q_e verwendet. Rechts: stoßparameterunabhängiger elektronischer Energieverlust \tilde{Q}_e verwendet. $\langle 100 \rangle$, $\langle rd \rangle$ und amorph haben gleiche Bedeutung wie in Abb.8. Normierung von $p_v(x)$ nach (27). Verlagerungsmodell nach Kinchin und Pease, Verlagerungsenergie $E_d = 25$ eV, $T = 300$ K.



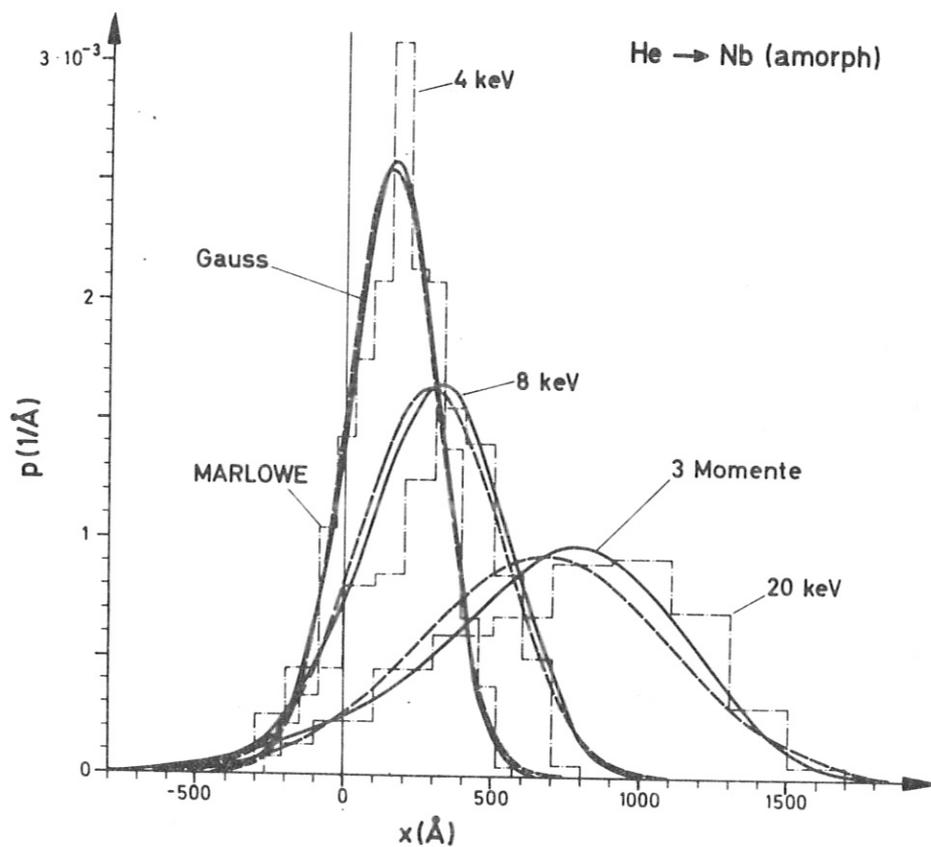


Abb.16

Eindringtiefenverteilungen von 4,8 und 20 keV He in amorphem Niob. Histogramme "MARLOWE" wurden ohne Oberfläche und mit $\tilde{Q}_e(E)$ berechnet. Die durchgezogenen Kurven sind mit 3 Momenten und die gestrichelten mit 2 Momenten konstruiert worden (Littmark 1975).

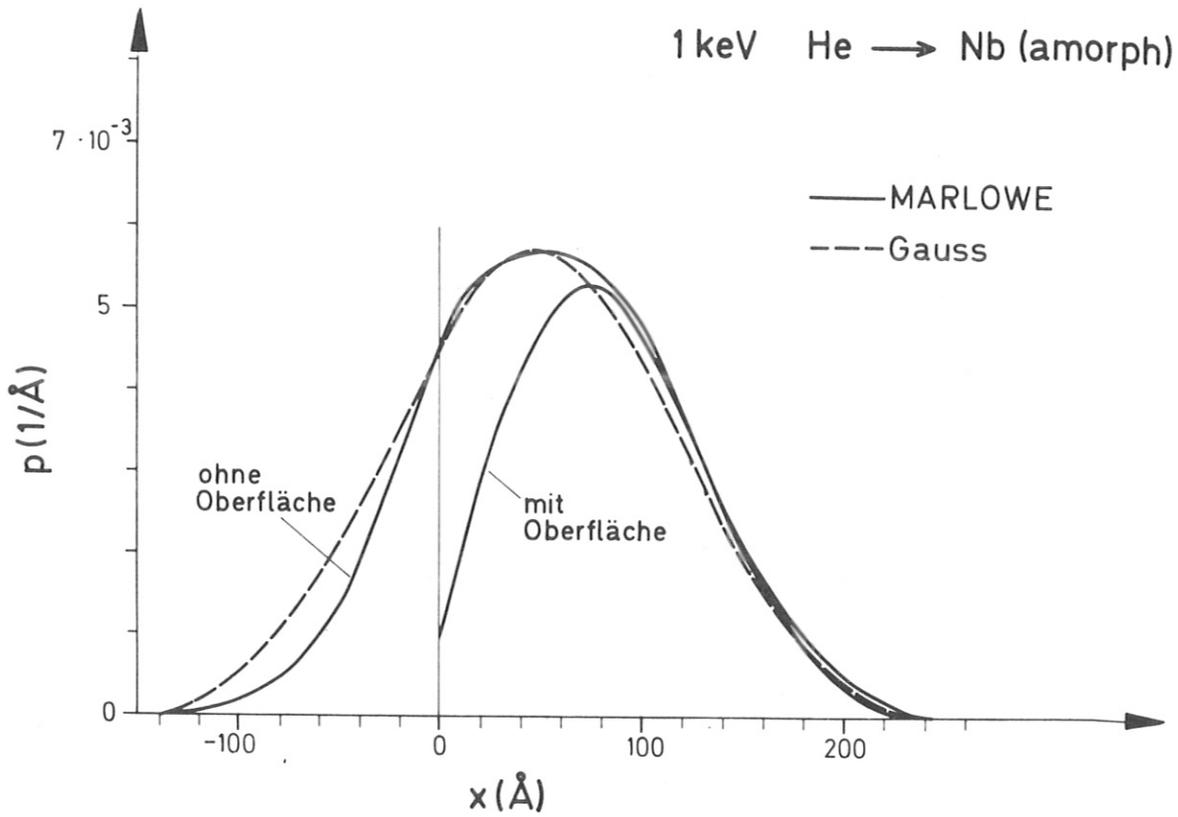


Abb.17 Vergleich der mit und ohne Oberfläche in amorphem Niob simulierten Eindringtiefenverteilungen mit der aus 2 Momenten konstruierten Eindringtiefenverteilung nach der Transporttheorie (gestrichelt) für 1 keV He. Stoßparameterunabhängiger Energieverlust \tilde{Q}_e mit $k = 1,6 k_L$, sowie Abschirmkonstante $a_F(3a)$.

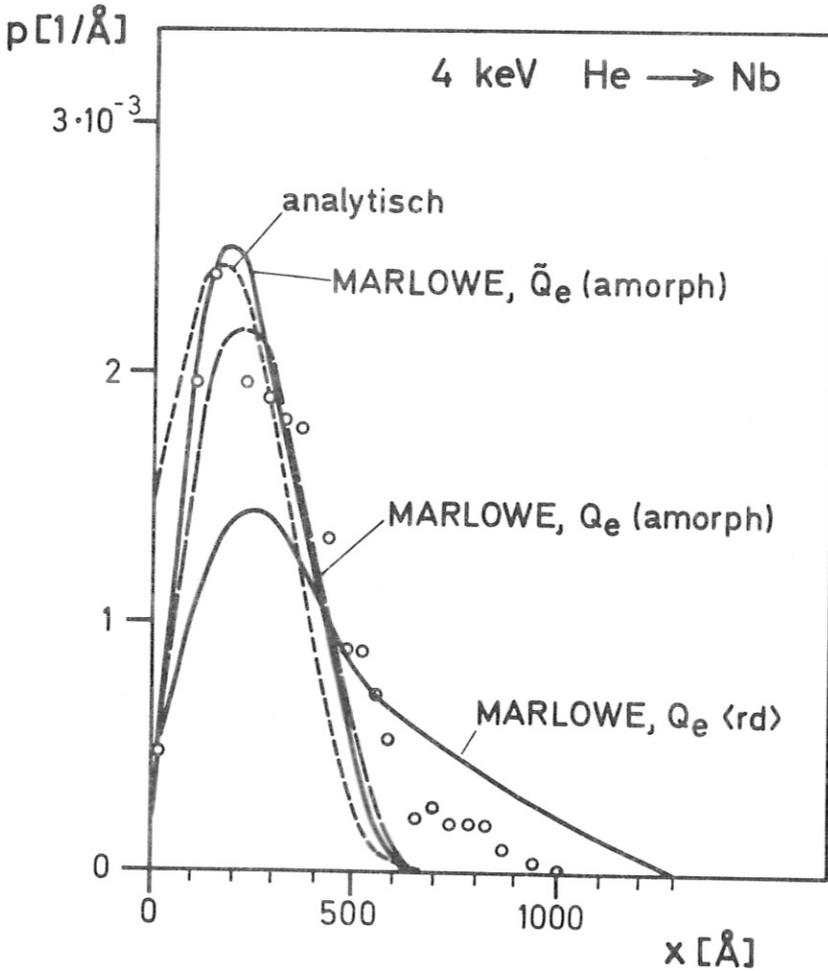


Abb.18

Vergleich theoretischer Eindringtiefenverteilungen für 4 keV in amorphem und kristallinen Niob mit Meßpunkten eines 4 keV He-Implantationsprofils in einkristallinem Niob für random Einschubrichtung (Behrisch et al. 1975). Die "MARLOWE" Tiefenverteilungen sind für amorphes Niob (mit beiden Energieverlustmodellen) und für den Einkristall und random Einschubrichtung (nur mit $Q_e(s,E)$) berechnet worden. Die analytisch berechnete Verteilung wurde aus 3 Momenten konstruiert. Hierbei wurde ebenfalls $k = 1,6 k_L$ und $a = a_F$ verwendet.

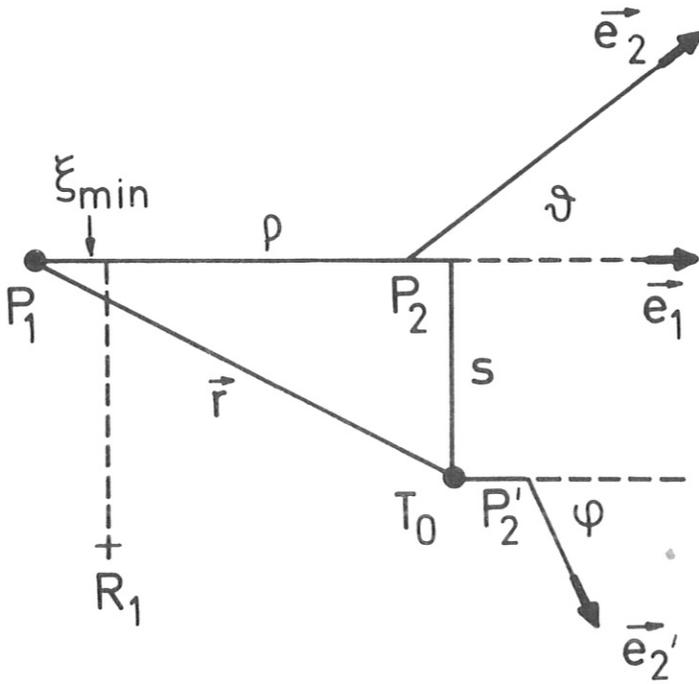


Abb. A1 Wichtige Größen des Suchvorganges.

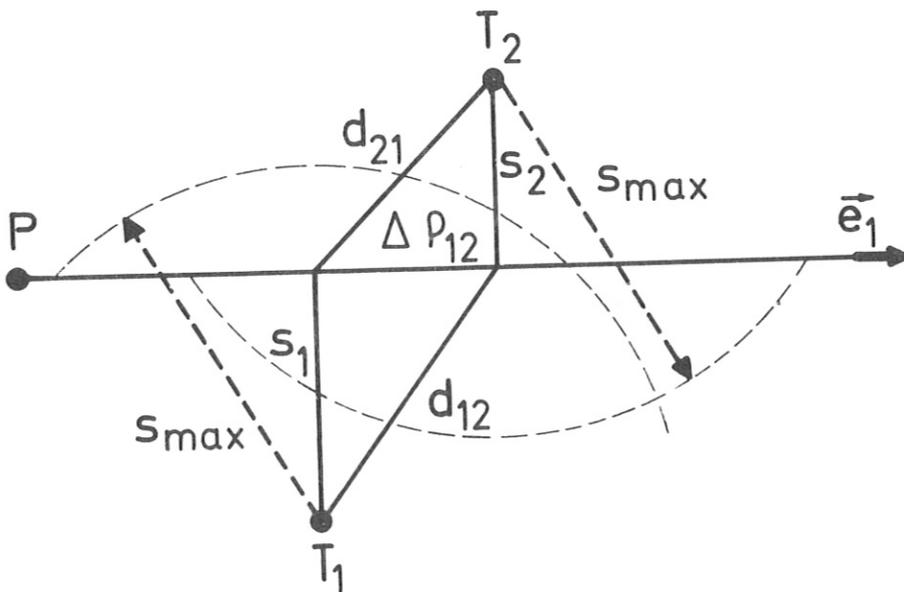


Abb. A2 Zum Kriterium für simultane Stöße.

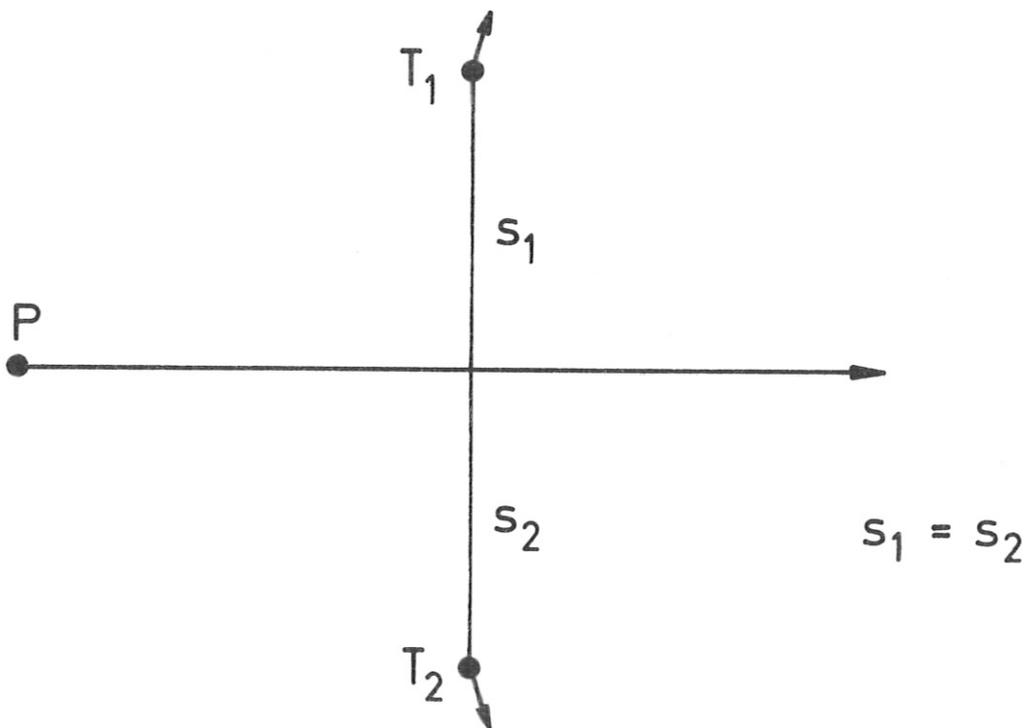
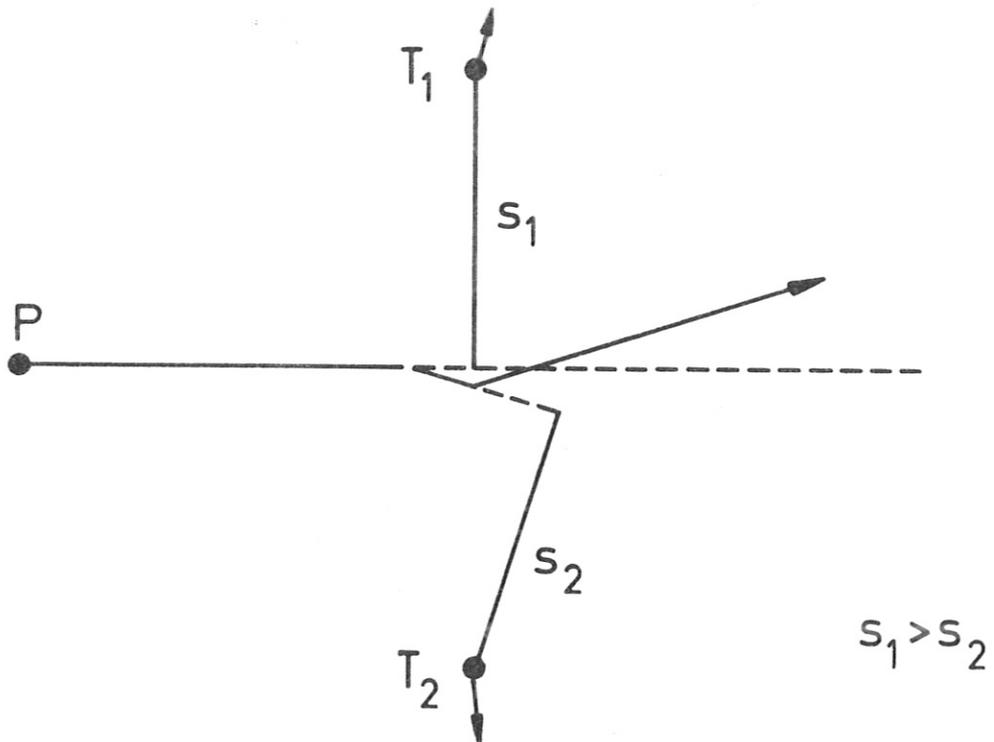


Abb. A3 (oben) Zwei aufeinander folgende Einzelstöße.
(Unten) Ein simultaner Stoß.