

4. Ionen-Festkörper-Wechselwirkung

Bestrahlt man einen Festkörper mit Ionen so kann dies prinzipiell zu Gitterschäden, Bindungsbruch, elektronischen und thermischen Anregungen, Materialeintrag oder einer Kombination dieser Phänomene führen. Ein Überblick über die möglichen Elementarprozesse ist in Abb. 22 gegeben.

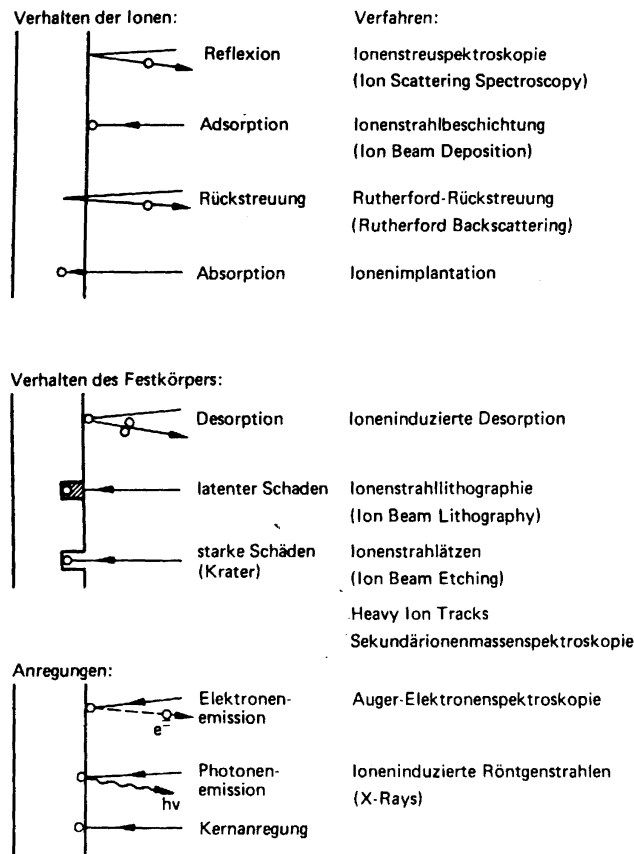


Abb. 22: Ion-Festkörper-Wechselwirkungen und einige Anwendungen [1]

Wesentliche Parameter die dafür verantwortlich sind, welcher Prozess an welchem Ort im Festkörper dominiert und über welche Wechselwirkung er abläuft, sind die Energie und die Masse der Ionen. Während bei hohen Energien besonders unelastische Stöße mit den Elektronen der Festkörperatome stattfinden, kommt es bei kleineren Energien bzw. größerer Masse, oder wenn die anfangs schnellen Ionen hinreichend abgebremst wurden, zu elastischen Wechselwirkungen mit den Atomkernen des Festkörpers.

Abb. 23 veranschaulicht die beiden Effekte. Die in den unelastischen Bremsprozessen verbrauchte Energie dient größtenteils der Anregung und Ionisation und wird letztlich in Phononen umgewandelt, was zu einer Aufheizung des Festkörpers führt. Die makroskopisch messbare Aufheizung des gesamten bestrahlten Körpers ist hierbei nicht zu verwechseln mit der mikroskopischen Aufheizung entlang der Ionenspur (thermal spike).

Der gesamte Energieverlust dE , den das Ion pro Wegstrecke dr im Festkörper erleidet, setzt sich somit aus einem elektronischen Anteil (ES: electronic stopping) und einem Anteil aus den Wechselwirkungen mit den Kernen bzw. Atomen zusammen (NS : nuclear stopping). Der differentielle Energieverlust ist demnach gegeben durch:

$$\left(\frac{dE}{dr}\right)_{total} = \left(\frac{dE}{dr}\right)_{NS} + \left(\frac{dE}{dr}\right)_{ES} \quad \text{Gln. 19}$$

Gln. 19 gilt für die meisten Experimente mit „herkömmlichen“ Ionenquellen in guter Näherung. Bei Verwendung von Ionen mit höheren Energien ab ca. 1 MeV sind weitere Verlusteffekte durch Bremsstrahlung, Kernreaktionen und Cherenkovstrahlung zu berücksichtigen.

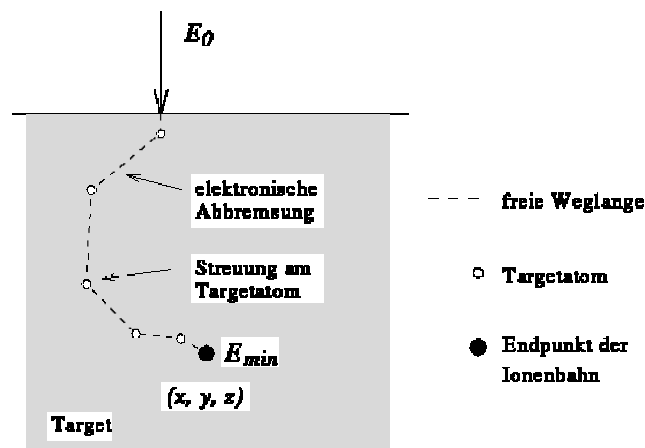


Abb. 23: Schematische Darstellung der Ion-Festkörper-Wechselwirkung

4.1 Der elastische Streuvorgang

Die Bahn des Ions im Festkörper kann als Kaskade aufeinanderfolgender Stöße mit den einzelnen Festkörperatomen beschrieben werden. Einem ruhenden Targetatom mit Masse M_2 und Ordnungszahl Z_2 nähert sich ein einfallendes Ion mit Masse M_1 , Ordnungszahl Z_1 und Energie E :

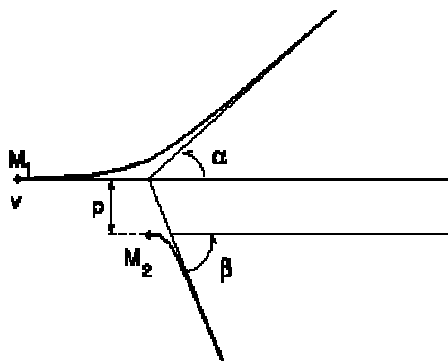


Abb. 24: Stoß im Laborsystem; das Targetatom ruht vor dem Stoß

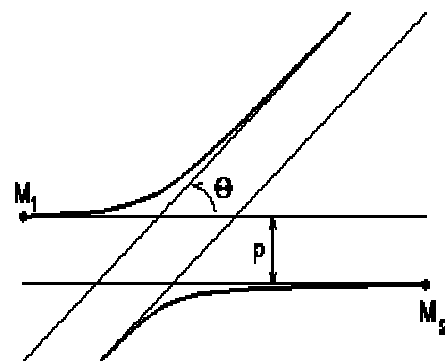


Abb. 25: Stoß im Schwerpunktsystem

Der Abstand der Massenmittelpunkte normal zur Einfallrichtung ist der Stoßparameter p (Abb. 24). Als Grundlage wird ein Zentralpotenzial $V(r)$ angenommen, wobei r den momentanen Abstand von Ion und Atom beschreibt. Zur Vereinfachung des Problems transformiert man ins Schwerpunktsystem (Abb. 25). Der Schwerpunkt bewege sich mit der Geschwindigkeit v_s . Der Gesamtimpuls in diesem System ist null. Bewegt sich das Ion anfangs mit der Geschwindigkeit v so ergibt sich mit der Schwerpunktsenergie E_c :

$$M_1 \cdot v = (M_1 + M_2) \cdot v_s \quad \text{Gln. 20}$$

mit

$$M = \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2} \quad \text{Gln. 21}$$

$$E_c = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \quad \text{Gln. 22}$$

Im Schwerpunktsystem ergibt sich damit für den Streuwinkel θ :

$$\theta = \pi - 2 \cdot \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{p \cdot dr}{r^2 \sqrt{1 - V(r)/(E_c - p^2/r^2)}} \quad \text{Gln. 23}$$

r_{\min} ist der minimale Abstand der Teilchen. Er kann aus der Nullstelle von:

$$1 - \frac{V(r_{\min})}{E_c} - \frac{p^2}{r_{\min}^2} \quad \text{Gln. 24}$$

berechnet werden. Nach Rücktransformation ins Laborsystem ergibt sich der Energieübertrag vom Ion an das Festkörperatom gemäß:

$$\Delta E = 4 \cdot E \cdot \frac{M_1 \cdot M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{Gln. 25}$$

Als unbekannte Größe bleibt das interatomare Potenzial $V(r)$.

Ein geeigneter Ansatz für dieses Potenzial besteht darin, die Wechselwirkung mit Hilfe eines Coulombpotenzials zu beschreiben, allerdings unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die Kerne durch Elektronen abgeschirmt sind und daher effektiv ein kleineres Potenzial herrscht.

Man berücksichtigt dies durch Einführung einer Abschirmfunktion, so dass insgesamt gilt:

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \phi(r) \quad \text{Gln. 26}$$

Es wurden schon viele geeigneten Ansätze für die Abschirmfunktion publiziert. Beste Übereinstimmung mit den Experimenten liefert dabei das von Ziegler und Biersack postulierte Universalpotenzial [7].

Das Universalpotenzial basiert dabei auf dem Hartree-Fock-Verfahren zur Ermittlung der über alle Raumrichtungen gemittelten Elektronenverteilung im Festkörper. Eine etwaige Veränderung des Ions durch weitere Ionisation wird vernachlässigt und es wird vorausgesetzt, dass sich die Ladungswolken von Ion und Atom verzerrungsfrei durchdringen. Mit Hilfe dieser Vereinfachungen ist es möglich für jede Art von Ion-Target-Kombinationen Potenziale $V(r)$ anzugeben. Unter Einführung der sogenannten Abschirmlänge a_i :

$$a_i = \frac{0.8854 \cdot a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad \text{Gln. 27}$$

wobei a_0 der Bohr'sche Atomradius ist, lässt sich schreiben :

$$\phi(r_a) = \sum_{i=1}^4 a_i \cdot e^{-b_i \cdot r_a} \quad \sum_{i=1}^4 a_i = 1 \quad \text{Gln. 28}$$

Eine weitere Verfeinerung, die eine Standardabweichung zwischen Experiment und theoretischer Vorhersage von nur ca. 5% für schwerere Kerne liefert, ist nach Hobler et al. [8] gegeben durch :

$$\phi(r_a) = 0.1818 \cdot e^{-3.2 \cdot r_a} + 0.5099 \cdot e^{-0.9423 \cdot r_a} + 0.2802 \cdot e^{-0.4028 \cdot r_a} + 0.02817 \cdot e^{-0.2016 \cdot r_a} \quad \text{Gln. 29}$$

Mit diesem Potenzial lässt sich allerdings das Streuintegral (Gln. 23) nicht mehr analytisch lösen und es muss deshalb numerisch ausgewertet werden.

4.2 Elektronisches Abbremsen

Die analytische Behandlung der zugrundeliegenden Prozesse ist sehr komplex. Mögliche Elektron-Elektron-Kollisionen, Anregung oder Ionisierung der Targetatome durch

Targetelektronen, sowie Anregungen und Weiterionisation des Ions sind nur einige der Prozesse, die eine theoretische Betrachtung maßgeblich erschweren bzw. verhindern. Alle entwickelten Modelle stellen daher eine Kombination aus physikalischer Überlegung und Anpassungen an die riesigen, in diversen Experimenten gesammelten Datenmengen dar.

Definitionsgemäß ist die elektronische Abbremsung S_e der Energieverlust pro Weg, den das Ion durch Wechselwirkungsprozesse der oben beschriebenen Art erleidet:

$$S_e = -\frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dx} \quad \text{Gln. 30}$$

N : Targetatomdichte

Für niederenergetische Ionen ($v_{\text{ion}} \ll 25 \text{ keV/amu}$), verläuft die elektronische Abbremsung nahezu proportional zur Geschwindigkeit des Ions und man kann den Prozess im Sinne einer Wechselwirkung des Ions mit einem Elektronengas beschreiben. Das Verhalten von hochenergetischen Teilchen lässt sich über die Bethe-Bloch-Gleichung approximieren.

Besonders schwierig gestaltet sich die Beschreibung der elektronischen Abbremsung für Ionen im mittleren Geschwindigkeitsbereich:

$$v_F < v_{\text{ion}} < 3v_F \quad \text{Gln. 31}$$

v_F, v_{ion} : Fermigeschwindigkeit des Festkörpers, Geschwindigkeit des Ions

In diesem Geschwindigkeitsbereich kann ein Modell nach Brandt und Kitagawa [9] zur Beschreibung herangezogen werden, welches über Fitparameter an die Ergebnisse der Experimente angepasst werden kann.

$$S_e = S_{ep} \cdot (\gamma \cdot Z_1)^2 \quad \text{Gln. 32}$$

$$\frac{1}{S_{ep}} = \frac{1}{a \cdot E^b + c \cdot E^d} + \frac{1}{(e/E^f) \cdot \ln(g/E + h \cdot E)} \quad \text{Gln. 33}$$

(γZ_1) : effektive Ladung des Ions

S_{ep} : Protonen-Stopping-Power

a bis h : vom verwendeten Target abhängige Parameter. Tabelliert z.B. in [7]

Abb. 26 zeigt den Verlauf der effektiven Ladung für einige Elemente.

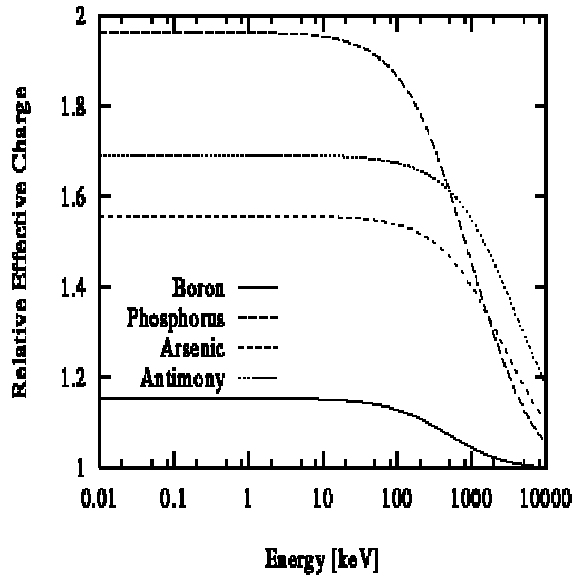


Abb. 26: Verlauf der effektiven Ladung für einige Ionen

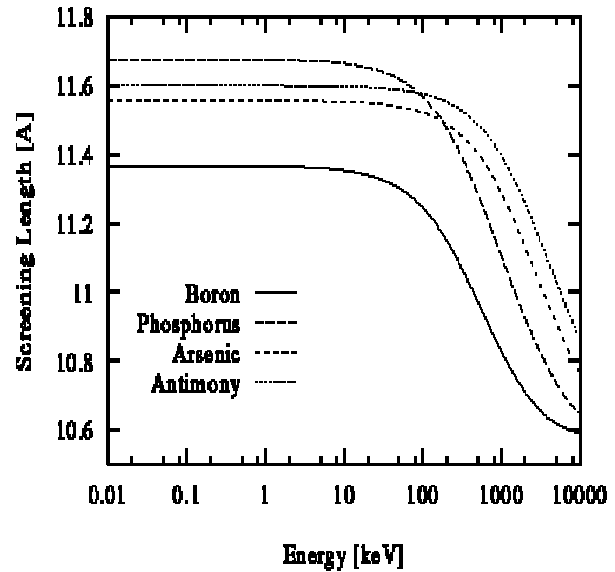


Abb. 27: Abschirmlängen nach Gln. 35 für einige Ionen

Als beste Näherung für den Ladungskorrekturfaktor γ gilt nach Ziegler und Biersack:

$$\gamma = q + \frac{(1-q)^2 \cdot v_0^2}{2 \cdot v_F^2} \cdot \ln \left(1 + \left(\frac{2 \cdot \Lambda \cdot v_F}{a_0 \cdot v_0} \right)^2 \right) \quad \text{Gln. 34}$$

q : (Aktuelle Anz. der e^- des Ions) / (Anzahl der e^- in neutralen Zustand)

v_0 : Bohrgeschwindigkeit ($2.18774 \cdot 10^6$ m/s)

Λ : Abschirmlänge des Ions

und für die Abschirmlänge :

$$\Lambda = \frac{2 \cdot a_0 \cdot (1-q)^{2/3}}{Z_1^{1/2} \cdot (1-(1-q)/7)} \quad \text{Gln. 35}$$

4.3 Effekte im kristallinen Festkörper - Channeling

Aufgrund ausgeprägter Symmetrien im Kristallgitter kann es zum sogenannten „Channeling“ kommen. Das Ion kann sich dabei in Kanälen leichter fortbewegen (Abb. 28). Die elektronische Abbremsung für Ionen, die sich entlang solcher Kanäle fortbewegen, ist geringer als für Ionen mit anderer Flugrichtung [10]. Inwieweit Channelingeffekte tatsächlich auftreten, hängt natürlich von der Targetausrichtung relativ zum Ioneneinfallswinkel, der

Temperatur und dem Kristallisationsgrad des Targets ab. Der Channelingeffekt kann ebenfalls in die theoretischen Modelle zum Electronic-Stopping eingearbeitet werden [11].

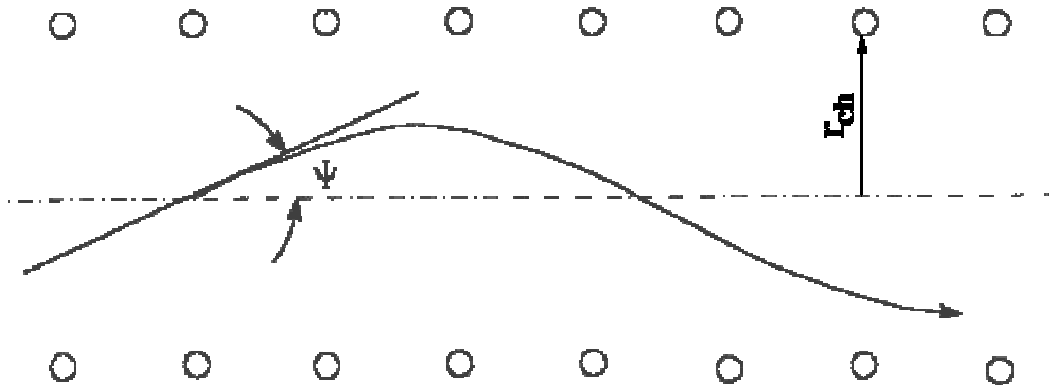


Abb. 28: Channeling

Es existiert ein kritischer Ioneneinfallswinkel ψ_{krit} . Für größere Winkel tritt kein Channeling auf. Zerlegt man die Gesamtenergie des ankommenden Ions in einen Teil E_{\parallel} parallel zum Kanal und einen Teil E_{\perp} senkrecht dazu, so bleibt das Ion im Kanal, wenn der normale Anteil kleiner ist als das abstoßende Potenzial des periodischen Gitters. In Tabelle 3 sind einige Werte des kritischen Winkels für Channeling von Bor, Phosphor und Antimon in Silizium angegeben.

Ion	Energie [keV]	<100>	<110>	<111>
B	10	4.76	6.97	5.30
	100	2.67	3.47	2.98
	300	2.03	2.98	2.26
P	10	5.79	7.51	6.45
	100	3.26	4.22	3.63
	300	2.47	3.21	2.76
Sb	10	6.95	9.01	7.74
	100	3.91	5.07	4.35
	300	2.97	3.84	3.31

Tab. 3: Kritische Winkel für Channeling von Bor, Phosphor und Antimon in Silizium [12, 13]