

Kapitel 4: Theoretische Betrachtungen

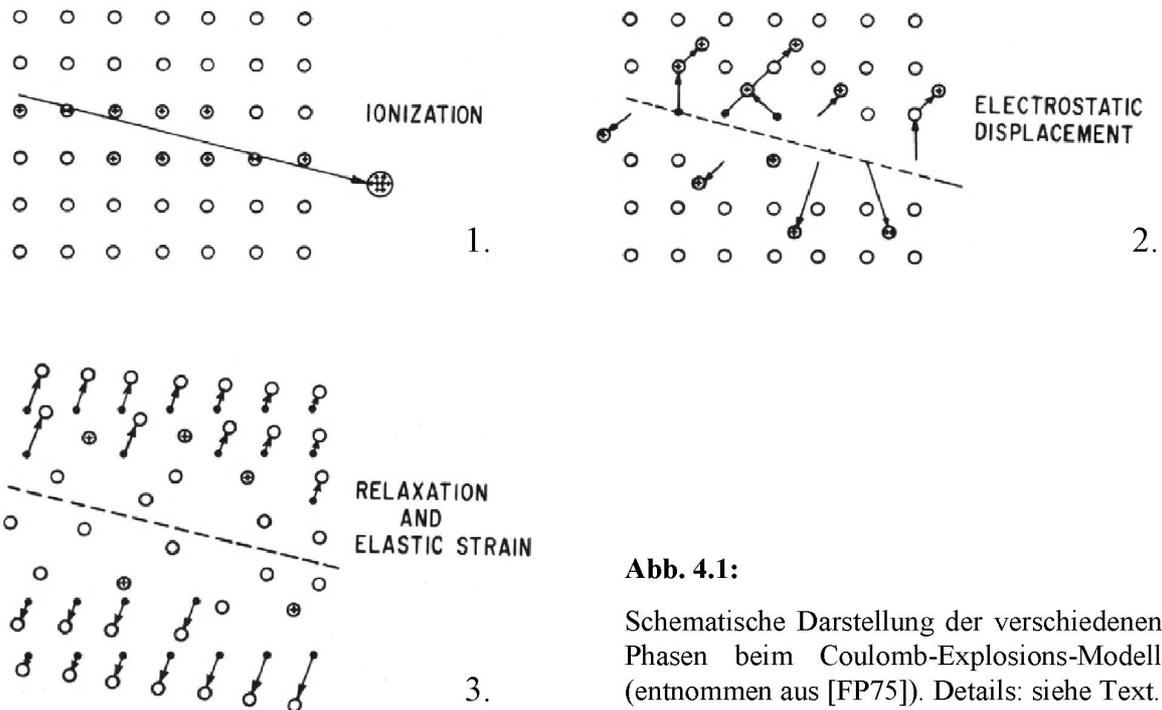
4.1. Modellierung der Spurgrößen

Nachdem wir uns im vorangegangenen Kapitel den RKM-Messungen der Radien und Höhen der Ionenhügel gewidmet und Informationen über deren Eigenschaften gewonnen haben, sollen in diesem Kapitel theoretische Überlegungen eine Vorstellung von den zu erwartenden Spurgrößen vermitteln. Die so gewonnenen Erkenntnisse können dann direkt mit den Beobachtungen verglichen werden.

4.1.1. Ionenspuren in bisher existierenden Modellen

Einer der ersten theoretischen Ansätze war das sogenannte Coulomb-Explosions-Modell ([V54], [FP65]), in welchem man sich den Spurbildungsprozeß in drei Abschnitte gegliedert denken kann (siehe Abb. 4.1). Zunächst erzeugt das Ion beim Durchqueren des Festkörpers entlang seiner Bahn eine schmale Zone ionisierter Gitteratome. Dabei werden die freigesetzten Elektronen soweit von den Atomrümpfen entfernt (vgl. 4.1.2.) und ionisieren dabei sogar selbst weitere Atome, daß es zwischen den zurückgebliebenen geladenen Rümpfen zu einer sehr starken Coulomb-Abstoßung kommt und sie quasi "explosionsartig" auseinander gedrückt werden. Anschließend kommt es nur teilweise zu einer Relaxation der entstandenen mechanischen Spannungen, und eine latente Spur bleibt zurück. Diese Art der Beschreibung ist aber nur für solche Materialien sinnvoll, bei denen die Rekombinationszeit zwischen den Rümpfen der Targetatome und Elektronen länger ist als die Wechselwirkungszeit der ionisierten Targetatome (10^{-16} - 10^{-13} s) untereinander. Deswegen wurde auch lange angenommen, daß in Metallen keine latenten Ionenspuren entstehen können, die aber mittlerweile in vielen Fällen nachgewiesen wurden (z.B. [T95]). Dennoch ist diese Art der Betrachtung bis heute sehr erfolgreich bei der Erklärung sehr verschiedener Phänomene die bei der Ionenbestrahlung auftreten (z.B. [CD97], [KH86]).

Ungefähr genauso alt ist die Idee, daß die latenten Spuren dadurch entstehen, daß das Projektilion lokal eine Temperaturerhöhung erzeugt, welche zu einem Aufschmelzen des Festkörpers führt. Dieses sogenannte Thermal-Spike-Modell wurde genauso wie das Coulomb-Explosions-Modell stetig erweitert und verbessert.

**Abb. 4.1:**

Schematische Darstellung der verschiedenen Phasen beim Coulomb-Explosions-Modell (entnommen aus [FP75]). Details: siehe Text.

In seiner wohl umfassendsten Form wurde es von M. Toulemonde et al. formuliert [TW96]. Zunächst überträgt das Ion seine Energie auf die Elektronen des Festkörpers, wodurch es lokal zu einer Aufheizung des Elektronengases kommt. Anschließend übertragen die Elektronen ihre kinetische Energie an die Atome des Gitters und heizen dieses auf. Da sich das Gitter und die Elektronen zu Beginn in einem extremen Ungleichgewicht befinden, wird die Temperatursausbreitung durch zwei gekoppelte, nichtlineare Differentialgleichungen beschrieben, welche sich nicht analytisch, sondern nur numerisch lösen lassen. Als Lösung erhält man zeitlich aufgelöste Temperaturverläufe. Wird zu einer beliebigen Zeit in einem Bereich um die Ionenbahn die Schmelztemperatur überschritten, so wird das Material dort aufgeschmolzen, wodurch eine latente Spur entsteht. Der einzige freie Parameter dabei ist die Kopplungsstärke zwischen Atomgitter und Elektronen (d.h. allerdings, daß immer noch mindestens eine Messung nötig ist, bevor für ein bestimmtes Material Vorhersagen möglich sind). Allerdings ist es nicht ganz unproblematisch, daß bei dieser Art der Beschreibung thermodynamische Größen benutzt werden, da die Beschreibung der Elektronen als Gas mit einer Temperatur zumindest zweifelhaft ist. Dennoch ist das Modell recht erfolgreich bei qualitativen und oft auch quantitativen Vorhersagen (siehe z.B. [MB94], [TP96]).

Coulomb-Explosion und Thermal-Spike werden häufig als konkurrierende Modellvorstellungen verstanden. Im Grunde stellen sie jedoch nur zwei unterschiedliche Methoden der vereinfachten Betrachtung derselben Vorgänge dar. In beiden Modellen wird die Energie des Projektils zunächst auf die Elektronen übertragen und anschließend an das

atomare Gitter transferiert. Abhängig von den Materialeigenschaften (insbesondere z.B. die Leitfähigkeit) ist lediglich die eine oder andere Form der Betrachtung die geeignetere Vereinfachung. Beide Betrachtungsweisen können dabei nicht die wirklichen mikroskopischen Vorgänge beschreiben. Ein gutes Beispiel dafür ist die Entstehung der Farbzentren in vielen ionischen Kristallen, welche nicht allein durch eine Umordnung des Atomgitters erklärt werden können. Die extrem schnelle Weiterentwicklung von Computern könnte die noch immer weite Kluft zwischen theoretischer Vorhersage und Messung in der Zukunft beseitigen. Schon heute werden viele Phänomene mittels molekulardynamischer Rechnungen gut beschrieben. Dabei werden in kleinen diskreten Zeitschritten die Bewegungen und Wechselwirkungen einer großen Anzahl von Atomen auf mikroskopischer Ebene numerisch simuliert, was erst durch die rasch fortschreitende Entwicklung der Computer ermöglicht wurde. Der Rechenaufwand bei dieser Methode ist allerdings stark von der Reichweite der Wechselwirkung zwischen den Atomen abhängig, da mit zunehmender Reichweite das Verhalten eines einzelnen Atoms von immer mehr benachbarten Atomen abhängt. Ein weiterer Nachteil ist, daß es bei dieser Methode zumeist keine Rolle spielt, wie die Energie von den Elektronen auf die Atome übertragen wird, sondern meist als instantan in das Gitter eingebracht betrachtet wird. Dieser Nachteil wird jedoch in naher Zukunft vermutlich überwunden, indem die Übertragung der Energie auf die Gitteratome sozusagen aus der Thermal-Spike-Betrachtungsweise übernommen wird [B02]. Derzeit liefert die Molekulardynamik nur für sehr einfache Systeme, wie z.B. bei der Bestrahlung gefrorenen Argons mit Argon-Ionen, zuverlässige quantitative Ergebnisse. Ein wesentlicher Vorteil ist aber, daß es die Molekulardynamik erlaubt, Erkenntnisse über die mikroskopischen Vorgänge zu gewinnen. Falls man sich mit dieser Art der Simulation näher beschäftigen möchte, so seien die folgenden Referenzen zur weiteren Lektüre empfohlen: [L93], [U97], [UK94], [PK98] (siehe auch weitere Literaturangabe auf der Zusatz-CD).

Insgesamt läßt sich feststellen, daß insbesondere für Oberflächen, aber auch allgemein für das Innere von Festkörpern, keine umfassenden Modelle existieren, welche die Bildung von latenten Spuren bei Bestrahlung mit schnellen Schwerionen erklären. Im folgenden werden wir deshalb selbst einen einfachen Modellansatz verfolgen.

4.1.2. Ein einfacher Modellansatz

Deponierung der Dosis

Unabhängig vom genauen Entstehungsweg der Ionenhügel ist offensichtlich, daß zu Beginn stets der Energietransfer vom Ion an den Festkörper steht. In allen uns interessierenden Fällen erfahren die Ionen praktisch ausschließlich einen elektronischen Energieverlust. Ausgangspunkt ist deswegen die Verteilung der von einem einzelnen Ion deponierten Energie. Die nachfolgenden Betrachtungen zur Dosisapplizierung sind im wesentlichen gewonnen aus [KL90], [KK93], [S90] und [WH86].

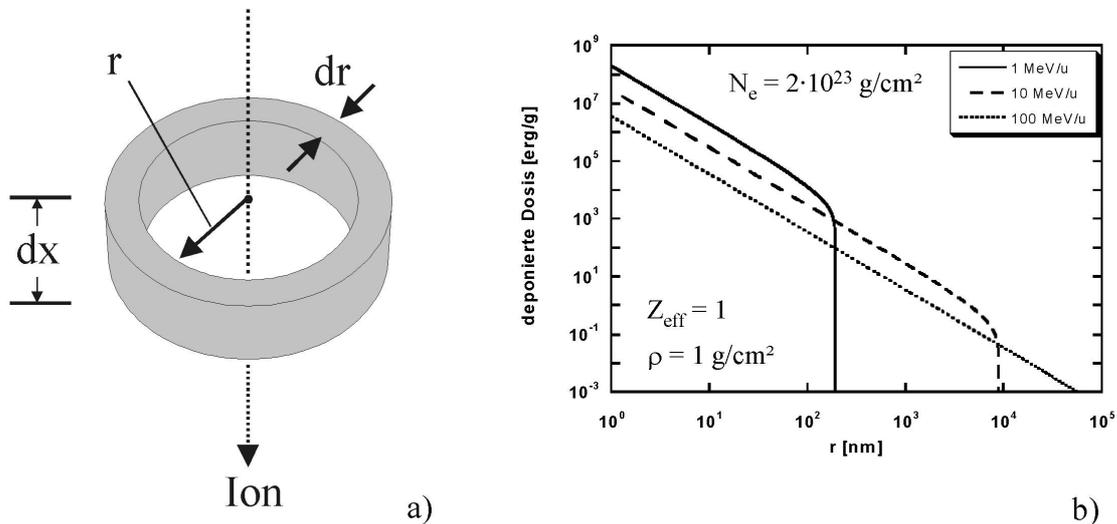


Abb. 4.2:

a) Darstellung einer sogenannten Isodosisschale, wie sie bei der Herleitung der Dosisverteilung bei Ionenbestrahlung betrachtet wird (siehe Text). b) Berechnete Dosisverteilungen für drei einfache Beispiele.

In einfacher Näherung kann die Dosis in einer zylindrischen Schale der Dicke dr im Abstand r rund um die Ionenbahn gemäß folgender Formel beschrieben werden (Vgl. Abb. 4.2 a):

$$D = \frac{N_e}{\beta^2} \cdot Z_{\text{eff}}^2 \cdot \frac{e^4}{m_e \cdot c^2} \cdot \frac{1}{\alpha \cdot r^2} \cdot \left(1 - \frac{r}{R_{\text{max}}}\right)^{1/\alpha}$$

Dabei ist

- N_e Elektronendichte pro Volumeneinheit im bestrahlten Material. Zu dieser hat man nicht immer einen einfachen Zugang. Dies ist aber auch nicht nötig, da man die gesamte eingebrachte Energie kennt. Man kann das Ergebnis also so normieren, daß sich insgesamt gerade der bekannte Energieverlust ergibt (man könnte also umgekehrt hier das N_e bestimmen).
- $\beta = v/c$ relative Geschwindigkeit des Projektils.

v - Projektilgeschwindigkeit

c - Lichtgeschwindigkeit

- Z_{eff} effektive Ladung des Ions beim Durchqueren des Festkörpers, beschrieben durch

$$Z_{\text{eff}} = Z \cdot \left(1 - e^{-\frac{v}{v_0} \cdot Z^{-2/3}} \right).$$

Z - Ordnungszahl des Projektils

v_0 - Bohrgeschwindigkeit ($v_0 = 2,1847 \cdot 10^8$ cm/s)

v - Geschwindigkeit des Projektils.

- e Elementarladung: $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C.
- m_e Elektronenmasse: $m_e = 0,511$ MeV/ c^2 .
- c Lichtgeschwindigkeit: $c = 299\,792\,458$ m/s.

- α gegeben durch die relative Projektilgeschwindigkeit:

$$\alpha = \begin{cases} 1,079, & \text{falls } \beta \leq 0.03 \\ 1,667, & \text{falls } \beta > 0.03 \end{cases}$$

- r Abstand zur Ionenbahn.
- R_{\max} maximale Reichweite der Elektronen. Die Reichweite von Elektronen der Energie T in Materie kann beschrieben werden durch

$$R(T) = C \cdot T^\alpha, \text{ wobei } C = \frac{5.2 \cdot 10^{-4}}{\rho}.$$

T - kinetische Energie der Elektronen [eV]

ρ - Dichte [g/cm³]

R - Reichweite [nm]

$$\alpha = \begin{cases} 1.079, & \text{falls } T \leq 1 \text{ keV} \\ 1.667, & \text{falls } T > 1 \text{ keV} \end{cases}$$

$$\alpha = \begin{cases} 1.079, & \text{falls } T \leq 1 \text{ keV} \\ 1.667, & \text{falls } T > 1 \text{ keV} \end{cases}$$

Die maximale Reichweite der Elektronen nach Wechselwirkung mit Ionen ergibt sich dann durch den kinetisch maximal möglichen Energieübertrag auf die Elektronen T_{\max} :

$$T_{\max} = 2 \cdot m_e \cdot v^2.$$

v - Projektilgeschwindigkeit

m_e - Elektronenmasse

Die maximale Reichweite der Elektronen ist also gerade

$$R_{max} = R(T_{max}).$$

- v Projektilgeschwindigkeit.

In der angegebenen einfachsten Form der Dosisverteilung erkennt man bereits die oft zitierte Abnahme der applizierten Dosis mit ungefähr $1/r^2$. Einige repräsentative Berechnungen für einfache Beispiele sind in Abb. 4.2 b dargestellt. Daß diese Gleichung jedoch nicht exakt ist, erkennt man schon daran, daß die angegebene Formel für $r \rightarrow 0$ divergiert und daher für unrealistisch kleine Radien beliebig groß werden kann. Dies läßt sich nur dadurch umgehen, indem man etwas willkürlich einen minimalen Radius festlegt, unterhalb dessen die eingebrachte Dosis als konstant betrachtet wird.

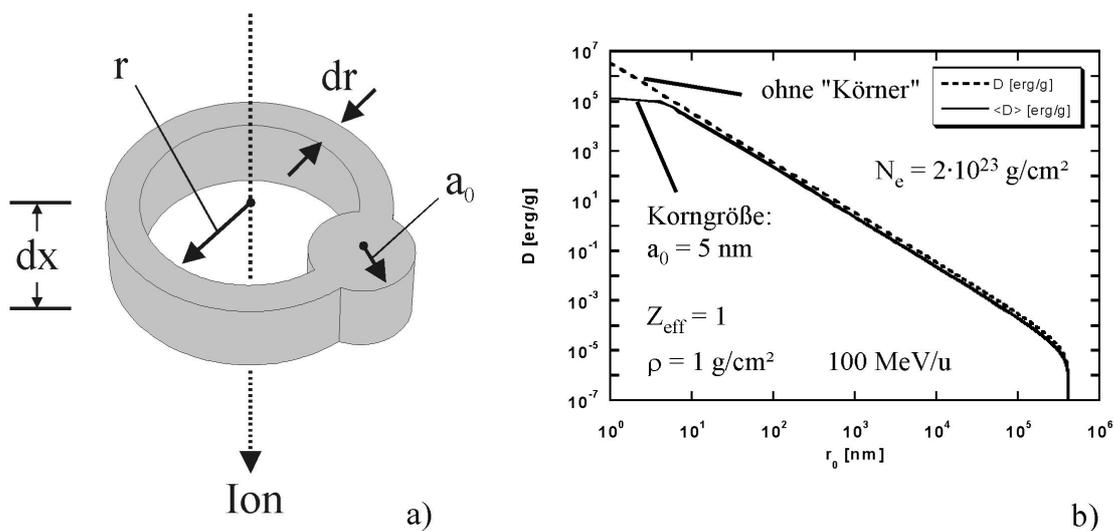


Abb. 4.3:

a) Isodosisschale mit einem sogenannten "Korn" der Größe a_0 (kleinste Einheit eines Festkörpers, der gerade noch mit Veränderung bei Ionenbestrahlung reagieren kann). **b)** Unterschied der berechneten Dosisverteilungen mit und ohne "Körner", repräsentativ für ein einfaches Beispiel.

Eine Verbesserung ist erreichbar, indem man den Übergang zu sogenannten "Körnern" vollzieht. Dabei wird unter einem Korn die kleinste zylindrische Einheit ($h = dx$, $r = a_0$) des bestrahlten Materials verstanden, welche gerade noch oder noch nicht mit Veränderung auf

das Einbringen von Energie reagieren kann (siehe Abb. 4.3 a). Nach einigen Rechnungen gelangt man so für die mittlere Korndosis $\langle D \rangle$ in der Entfernung r_0 von der Ionenbahn zu

$$\langle D \rangle = \frac{N_e}{\beta^2} \cdot Z_{\text{eff}}^2 \cdot \frac{e^4}{m_e \cdot c^2} \cdot \frac{I}{\alpha \cdot \pi \cdot a_0^2} \cdot \left[\int_{R_C}^{a_0 - r_0} \left(1 - \frac{r}{R_{\text{max}}} \right)^{1/\alpha} \frac{d\sigma_1}{r^2} + \int_{a_0 - r_0}^{a_0 + r_0} \left(1 - \frac{r}{R_{\text{max}}} \right)^{1/\alpha} \frac{d\sigma_2}{r^2} \right],$$

wobei

$$d\sigma_1 = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr, \text{ für } R_C < r \leq |a_0 - r_0|,$$

$$d\sigma_2 = 2 \cdot \varphi \cdot r \cdot dr, \text{ für } |a_0 - r_0| < r \leq a_0 + r_0, \text{ und}$$

$$\varphi = \arccos\left(\frac{r^2 + r_0^2 - a_0}{2 \cdot r \cdot r_0}\right), \text{ (für } r_0 + r > a_0).$$

Aber auch hier muß immer noch ein "Cut-off"-Radius R_C gewählt werden, unterhalb dessen man die Dosis als konstant betrachtet. Dies geschieht dann allerdings derart, daß die insgesamt deponierte Energie gerade dem bekannten Energieverlust entspricht. Die Veränderungen in der berechneten Verteilung der Dosis durch die Einführung der Körner im Vergleich zur einfacheren Formel auf S. 4-4 wird in Abb. 4.3 b verdeutlicht. Im Diagramm erkennt man, daß größtenteils die mit der einfacheren Formel berechnete Kurve reproduziert wird. Lediglich für die radiale Entfernung r_0 zwischen R_C (hier 1 nm) und a_0 (hier 5 nm) ist die Kurve auf einen quasikonstanten Wert abgeflacht. Deswegen kann man in guter Näherung die erste Gleichung verwenden und lediglich darin einen willkürlichen Abbruch bei $r = a_0$ machen und die Dosis für $r < a_0$ konstant auf $D(a_0)$ setzen. Anschließend muß man dann natürlich die gesamte Kurve noch so normieren, daß sich insgesamt gerade der Energieverlust ergibt. Allerdings ist die Wahl einer Korngröße nicht unkritisch, wie das Beispiel der berechneten Dosisverteilungen bei der Bestrahlung von CaF_2 mit 11,4 MeV/u Uran-Ionen für zwei verschiedene Korngrößen in Abb. 4.4 zeigt. Beide Kurven wurden so normiert, daß sich gerade der mit dem Programm SRIM [Z02] berechnete Energieverlust von 34 keV/nm ergibt. Zur Verdeutlichung der genauen Vorgehensweise ist auf der Zusatz-CD eine beispielhafte, schrittweise Berechnung dieser Verteilung für einige einfache Fälle als PDF-Datei beigelegt. Ferner findet man auf der CD ein Programm, um eben solche Berechnungen für beliebige Fälle numerisch durchführen zu können (siehe Anhang).

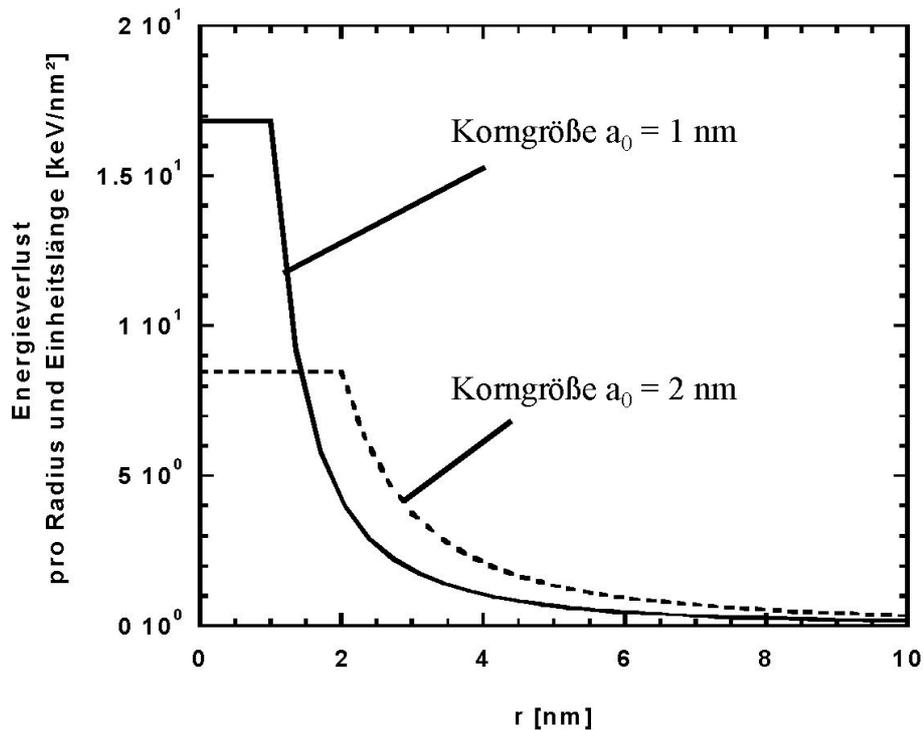


Abb. 4.4:

Lokaler Energieverlust als Funktion der Entfernung von der Ionenbahn für CaF_2 bei der Bestrahlung mit Uran (11,4 MeV/u). Die Auswahl der Korngröße beeinflusst das Ergebnis der berechneten Dosisverteilung erheblich (vgl auch Text).

Es soll angemerkt werden, daß erstaunlicherweise (wenn auch rechnerisch nicht überraschend), bei Annahme gleicher Korngrößen, für gleiche Energieverluste bei LiF und CaF_2 praktisch identische Kurven herauskommen. Unterschiede in der Form der Dosisverteilungen für gleiche Energieverluste gibt es dann nämlich fast nur noch ganz weit in den Außenbereichen (d.h. für sehr große Radien) durch unterschiedliche maximale Sekundärelektronenreichweiten. Physikalisch relevante Ergebnisse erhält man nur durch eine geeignete Auswahl vernünftiger Korngrößen. Als kleinste Einheit, welche bei der Bestrahlung gerade noch mit Veränderungen reagieren kann, soll deswegen im weiteren stets eine Elementarzelle des bestrahlten Materials angenommen werden. Dies ist zwar plausibel, jedoch nicht zwingend notwendig, weswegen man die so erlangten Ergebnisse nicht als absolut betrachten sollte, sondern nur relativ zueinander (es zeigt sich nämlich, daß sich bei willkürlicher Annahme anderer Korngrößen nur die Absolutwerte verändern, nicht aber die Form der Kurven beeinflusst wird).

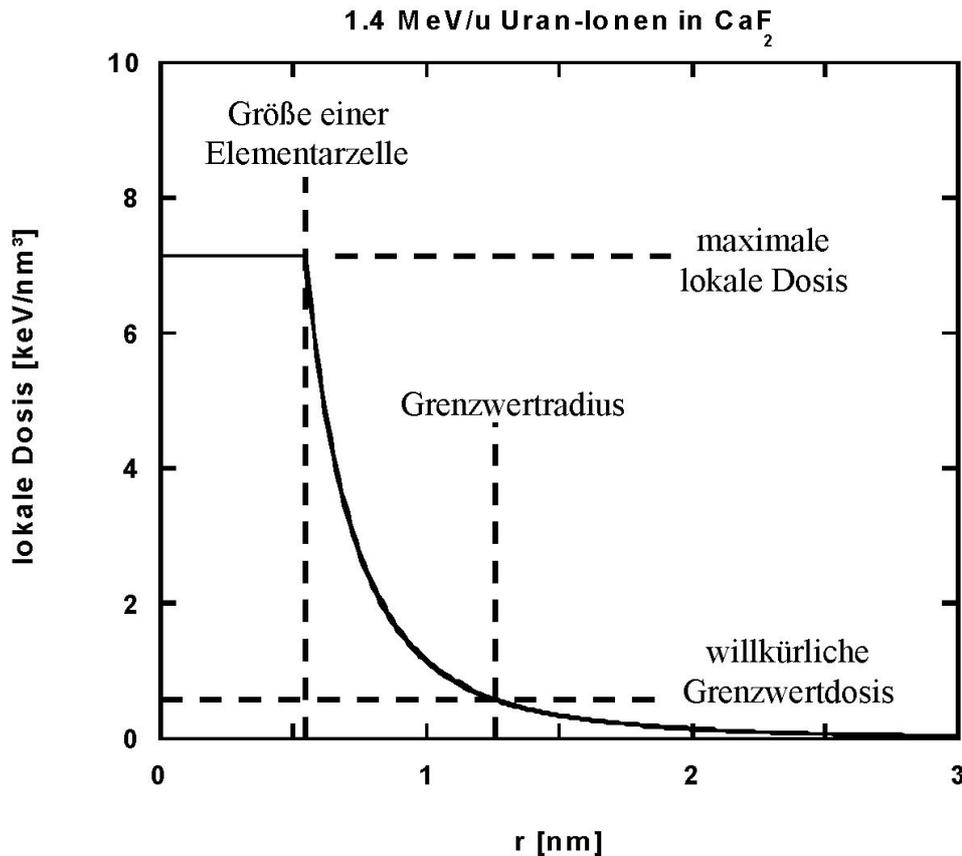


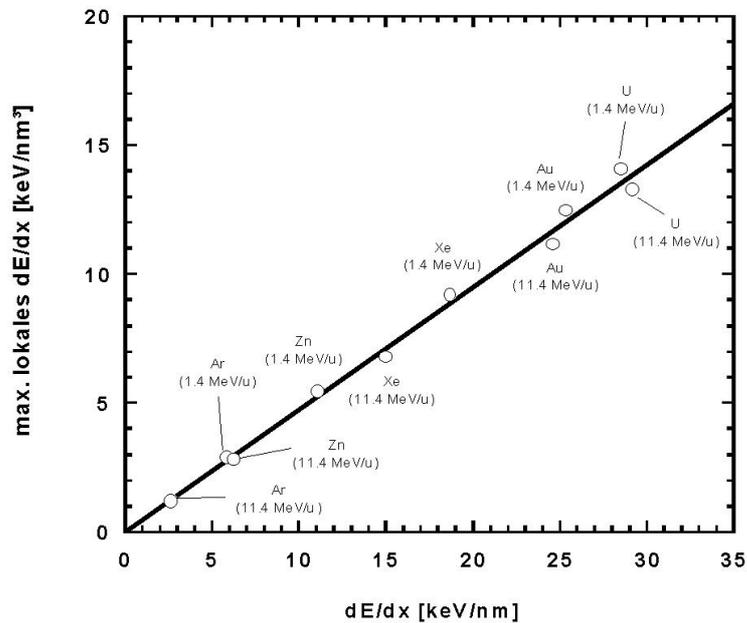
Abb. 4.5:

Lokale Energiedichte in Abhängigkeit von der Entfernung r von der Ionenbahn bei Bestrahlung von LiF mit 1,4 MeV/u Uran-Ionen (als "Korn" wurde die Größe einer Elementarzelle gewählt). Um einen Radius angeben zu können, muß eine Grenzwertdosis festgelegt werden (Details: siehe Text).

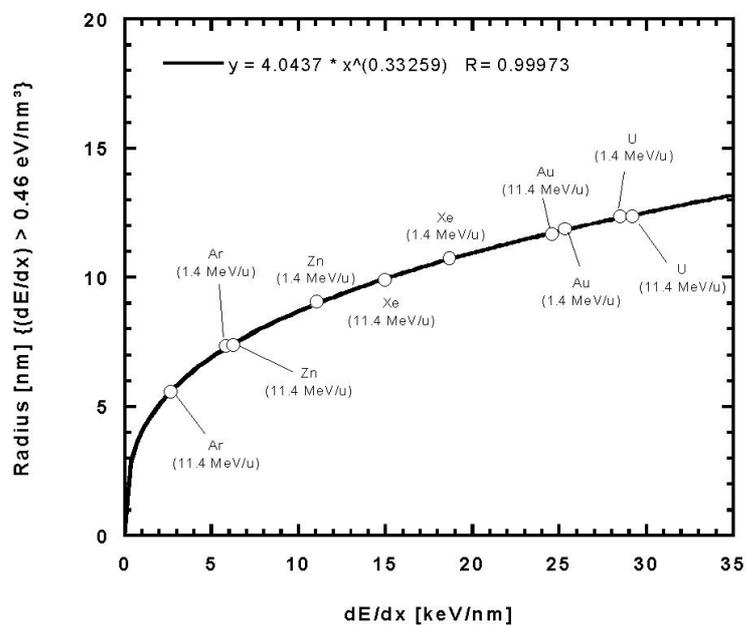
Als wesentlich für die Frage, ob in einer bestimmten Entfernung von der Ionenbahn noch Materialveränderungen hervorgerufen werden können oder nicht mehr möglich sind, ist die Tatsache, ob dem Material in dieser Entfernung noch ausreichend Energie pro Volumeneinheit dafür zur Verfügung gestellt wird. Die angegebenen Dosisverteilungen beziehen sich auf sogenannte Isodosisschalen (vgl. Abb. 4.2 und 4.3), d.h. die eingebrachten Energien werden in der jeweiligen gesamten Schale der Breite dr im Abstand r von der Ionenbahn berechnet. Bekannt ist also bisher lediglich der lokale Energieverlust pro Radius und pro Einheitslänge $(dE/dx)/dr$. Benötigt wird aber der Energieverlust pro Volumen, d.h. pro Einheitsfläche und pro Einheitslänge $(dE/dx)/da$ (wobei die Größe da ein differentielles Flächenelement in der betrachteten Isodosisschale ist). Die Verteilungen müssen also noch modifiziert werden gemäß

$$\frac{(dE/dx)}{da} = \frac{(dE/dx)}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot r} \cdot \frac{(dE/dx)}{dr}$$

LiF



a)

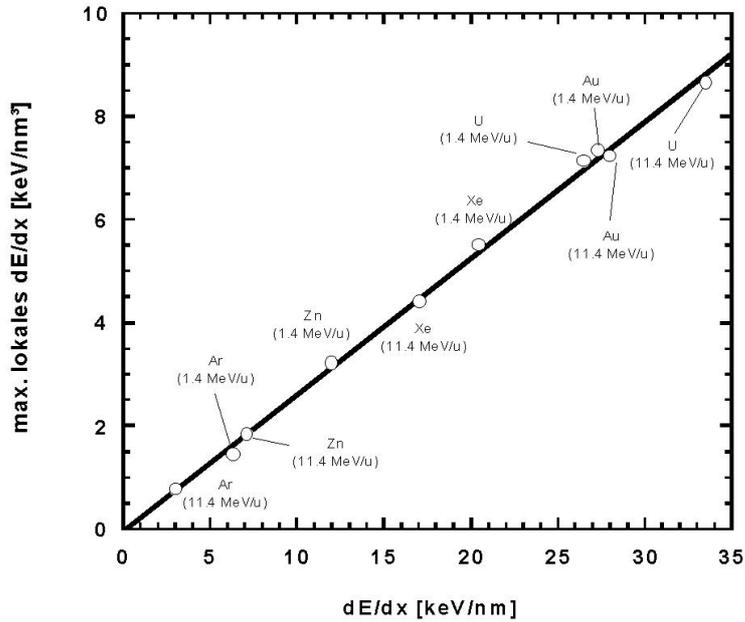


b)

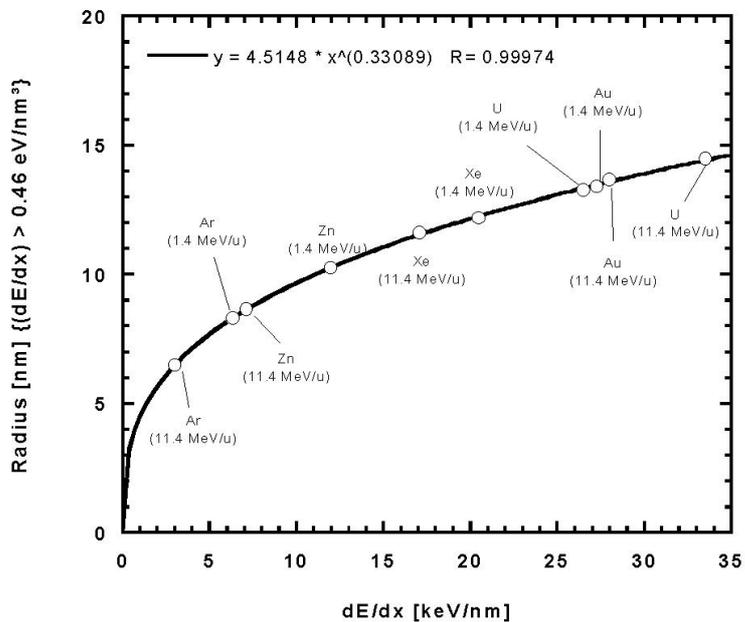
Abb. 4.6:

a) Berechnete maximale lokale Energiedichte als Funktion des absoluten Energieverlustes an der Oberfläche von LiF für einige typische bei der GSI verwendete Ionen. b) Radius, innerhalb dessen der lokale Energieverlust oberhalb eines vermuteten (willkürlichen) Grenzwertes liegt, als Funktion des Energieverlustes auf LiF.

CaF₂



a)



b)

Abb. 4.7:

a) Berechnete maximale lokale Energiedichte als Funktion des absoluten Energieverlusts an der Oberfläche von CaF₂ für einige typische bei der GSI verwendete Ionen. b) Radius, innerhalb dessen der lokale Energieverlust oberhalb eines vermuteten (willkürlichen) Grenzwertes liegt, als Funktion des Energieverlustes auf CaF₂.

Damit ist man nun endgültig in der Lage, lokal eingebrachte Energiedichten ([keV/nm³]) in Abhängigkeit von der Entfernung r von der Ionenbahn zu berechnen. Ein Beispiel für eine Energiedichteverteilung bei Bestrahlung von LiF mit Uran-Ionen der Energie 1,4 MeV/u ist in Abb. 4.5 zu sehen.

Das Auftragen der maximalen lokalen Energiedichte und des Radius, innerhalb dessen der lokale Energieverlust oberhalb eines vermuteten (willkürlichen) Grenzwertes liegt, als Funktion des absoluten Energieverlustes an der Oberfläche für einige typische bei der GSI verwendete Ionen zeigt bereits Gemeinsamkeiten mit den beobachteten Ionenspurrhöhen und Radien (siehe Abb. 4.6 und Abb. 4.7). So wächst die maximale lokale Dosis im Bereich der Ionenbahn linear mit dem Energieverlust an der Oberfläche an, gerade so, wie man auch ein lineares Ansteigen der Hügelhöhen mit dem Energieverlust beobachtet. Zusätzlich steigt der Radius, innerhalb dessen ein willkürlicher Grenzenergieverlust überschritten wird, unabhängig von der genauen Größe dieser Grenzenergie und vom betrachteten Material, mit einem Potenzgesetz an, und zwar gemäß

$$r = \left(k \cdot dE/dx \right)^{0,33 \pm 0,01}.$$

Dies erinnert stark an das Verhalten der beobachteten Hügelradien in Abhängigkeit vom Energieverlust (siehe S. 3-25). Dennoch kann dieses Ergebnis nicht unmittelbar auf die Realität übertragen werden, da es sich bei der Dosisverteilung eigentlich nur um eine Art Startbedingung bei der Hügelentstehung handelt und der Grenzenergieverlust und somit auch die Konstante k , nicht eindeutig bestimmbar ist.

Einfacher thermodynamischer Ansatz

Im vorangegangenen Abschnitt ist es gelungen, Spurrhöhen und Spurradien zumindest qualitativ mit der Verteilung der Dosis um die Ionenbahn in Verbindung zu bringen. Jetzt betrachten wir die Vorgänge nach dem Einbringen der Energie. Begonnen werden soll mit einem denkbar einfachen Ansatz. Basierend auf der Beobachtung, daß sich auf der Oberfläche von Kristallen allein durch Wärme kleine Kristallite bilden können (siehe Abschnitt 3.3.2.), möchte ich davon ausgehen, daß sich alle Vorgänge allein durch Temperaturveränderungen beschreiben lassen.

Bei der Bestrahlung mit einem Schwerion werde die gesamte Energie quasi punktuell (d.h. in einem kleinen Bereich) deponiert (siehe Abb. 4.8). Die in der Oberflächenschicht dx deponierte Energie ist:

$$dE = \left(\frac{dE}{dx} \right) dx .$$

Das Volumen dV ist gegeben durch $dV = \pi \cdot r^2 dx$, und die Energie sei gleichmäßig in diesem verteilt, d.h. für die Energiedichte ε gilt:

$$\varepsilon = \frac{dE}{dV} = \left(\frac{\left(\frac{dE}{dx} \right) dx}{\pi \cdot r^2 dx} \right) = \frac{\left(\frac{dE}{dx} \right)}{\pi \cdot r^2} = konst .$$

Die gesamte Energie liege in Form von Wärme vor und breite sich gleichmäßig mit der Zeit aus. Mit anderen Worten: das Volumen, indem sich die eingebrachte Energie befindet, werde kontinuierlich größer, wobei die Energiedichte jeweils über das gesamte Volumen dV homogen verteilt bleiben soll.

Zu jedem Zeitpunkt ist die gesamte enthaltene Wärmemenge gegeben durch:

$$Q = \left(\frac{dE}{dx} \right) \cdot dx + m \cdot c \cdot T_0$$

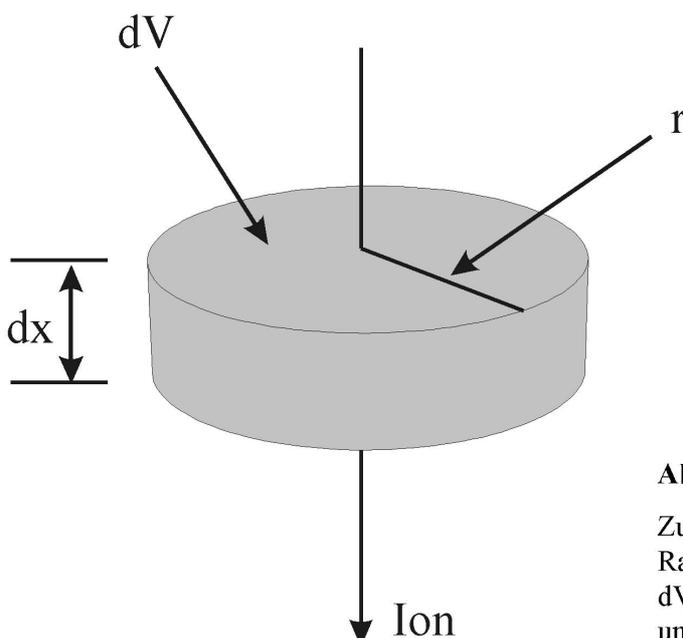


Abb. 4.8:

Zur Berechnung der Abhängigkeit zwischen Radius und Energieverlust wird das Volumen dV in der Oberflächenschicht der Dicke dx um die Ionenbahn betrachtet (vgl. Text).

Dabei ist T_0 die Bestrahlungstemperatur (in [K], hier immer Zimmertemperatur). Der rechte Summand stellt die enthaltene Wärmemenge vor dem Einschlag des Ions dar, der linke Summand gerade die insgesamt deponierte Energie. Die Masse m ist gegeben durch das betrachtete Volumen dV und die Dichte ρ des Materials:

$$m = dV \cdot \rho = \pi \cdot r^2 \cdot dx \cdot \rho$$

Ferner weiß man von den rein wärmebehandelten Proben, bei welcher Grenzwärme Q_{grenz} gerade noch Veränderungen zu beobachten sind:

$$Q_{\text{grenz}} = m \cdot c \cdot T_{\text{grenz}}; \quad [T_{\text{grenz}}] = [\text{K}]$$

Es folgt für die maximale Ausdehnung r , bei der die Energiedichte gerade noch etwas größer als die geforderte Grenzwärme Q_{grenz} ist und somit gerade noch Spurbildung stattfindet:

$$Q_{\text{grenz}} = m \cdot c \cdot T_{\text{grenz}} = \left(\frac{dE}{dx} \right) \cdot dx + m \cdot c \cdot T_0.$$

Also:

$$\left(\frac{dE}{dx} \right) \cdot dx = m \cdot c \cdot (T_{\text{grenz}} - T_0),$$

$$\text{wobei } T_g := T_{\text{grenz}} - T_0.$$

$$\Rightarrow \left(\frac{dE}{dx} \right) \cdot dx = \pi \cdot r^2 \cdot \rho \cdot dx \cdot c \cdot T_g$$

D.h. für den beobachteten Spurradius in Abhängigkeit vom Energieverlust erwartet man folgendes Verhalten:

$$r = \sqrt{\frac{1}{\pi \cdot \rho \cdot c \cdot T_g} \cdot \left(\frac{dE}{dx} \right)}$$

$$T_g := T_{\text{grenz}} - T_0$$

Dabei ist insbesondere zu beachten, daß die spezifische Wärmekapazität c im allgemeinen nicht konstant ist, sondern selbst von der Temperatur abhängt. Bei der vorliegenden Betrachtung ist c allerdings eine Konstante, nämlich gerade der Wert der Wärmekapazität, welcher bei der Temperatur T_{grenz} angenommen wird.

Ferner zeigte sich in Abschnitt 3.3.1. (insbesondere für CaF_2), daß T_{grenz} in etwa gerade der halben Schmelztemperatur (in Kelvin gemessen) entspricht. Das korrespondiert gut mit dem Sachverhalt, daß auf Kristallen ab der halben Schmelztemperatur Kristallite auftreten. Im folgenden wird deshalb davon ausgegangen, daß allgemein gilt:

$$T_{\text{grenz}} = 0.5 T_{\text{Schmelz}}.$$

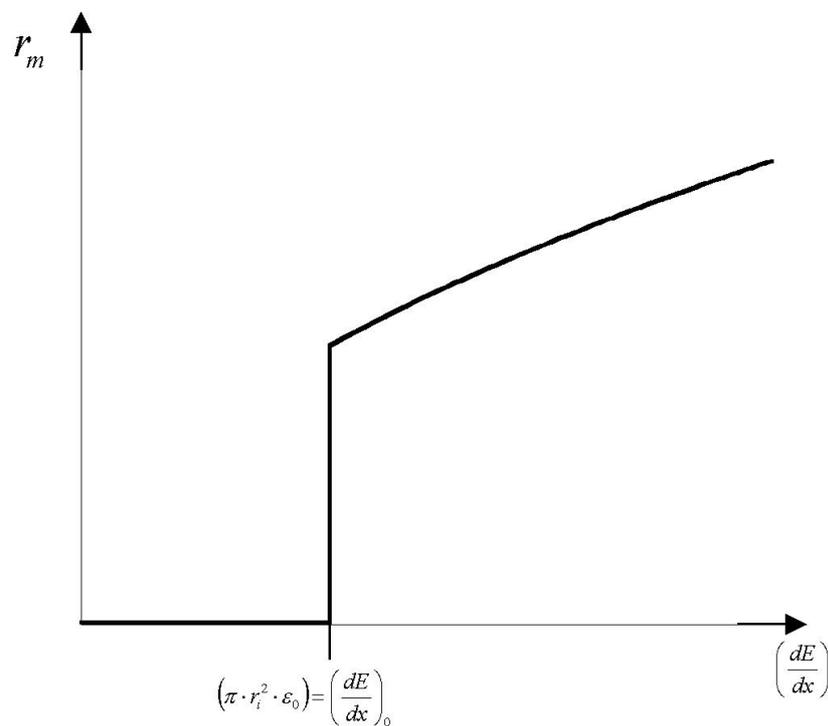
Auch bei dieser Betrachtungsweise wird das Auftreten eines Schwellenwertes im Energieverlust für die Spurbildung unmittelbar verständlich. Spurbildung tritt nämlich überhaupt nur dann auf, wenn die Grenztemperatur T_g auch tatsächlich einmal überschritten wird. Berücksichtigt man nämlich, daß die Energie nicht punktuell, sondern schon zu Beginn in einem gewissen Volumen verteilt wird, d.h. daß die eingebrachte Energie sozusagen instantan bis zu einem bestimmten Radius r_i eingebracht wurde und nicht nur in unmittelbarer Nähe der Ionentrajektorie, so kann es vorkommen, daß die nötige Grenztemperatur nie überschritten wird. Sollte sich rein rechnerisch mit obiger Formel ein Spurradius $r < r_i$ ergeben, so kommt es in der Realität gar nicht zu einer Spurbildung, da die Energie niemals auf ein solch kleines Gebiet beschränkt war. Anders ausgedrückt muß gelten:

$$\varepsilon_i = \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)}{\pi \cdot r_i^2} \geq \varepsilon_0.$$

$$\Rightarrow r_m = \sqrt{\frac{1}{\pi \varepsilon_0} \cdot \left(\frac{dE}{dx}\right)}, \text{ falls } \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)}{\pi \cdot r_i^2} \geq \varepsilon_0 \text{ (sonst 0)}$$

Schematisch dargestellt findet man diesen Sachverhalt in Abb. 4.9.

Die Annahme, daß sich die Energie im jeweiligen Zylinder stets gleichverteilt, ist sicher sehr grob. Durch Einsetzen einiger repräsentativer Werte läßt sich aber feststellen, daß die gemessenen Größenordnungen schon recht gut wiedergegeben werden.

**Abb. 4.9:**

Bei der Ionenbestrahlung wird die eingebrachte Energie instantan innerhalb eines bestimmten Radius eingebracht. Zur Spurbildung kommt es nur, falls dabei die Schwellenenergie $\left(\frac{dE}{dx}\right)_0$ überschritten wird (siehe Text).

In der Realität wird die gesamte Energie sicher nicht in der hier angenommenen Weise deponiert und verteilt sich dann auch nicht gleichförmig in immer größer werdenden Zylindern. Die Art und Weise, wie die Energie ins Material eingebracht wird, wird vom ersten Teil ("Deponierung der Dosis") sicher qualitativ sauberer beschrieben. Hier fällt es jedoch schwer, die Wahl eines geeigneten Grenzwertes zu treffen. Außerdem handelt es sich hierbei sicher auch noch nicht um einen Endzustand. Nach dem Einbringen der Energie kommt es sicher noch zu einem "Ausschmieren" der Verteilungen, und gleichzeitig wird bekanntermaßen auch noch Energie durch Absputtern fortgetragen.

Deshalb möchte ich quasi semi-empirisch jetzt die beiden Ansätze miteinander verknüpfen. Dazu gehe ich davon aus, daß der Verlauf (also die Kurvenform) besser durch die erste Beschreibung bestimmt wird, während der zweite Ansatz die Größe der Konstanten besser bestimmt. Die Ergebnisse waren:

$$\text{Erster Teil: } r = \left(k \cdot \frac{dE}{dx} \right)^{0.33}.$$

$$\text{Zweiter Teil: } r = \left(\frac{1}{\pi \cdot \rho \cdot c \cdot T_g} \cdot \frac{dE}{dx} \right)^{0.5}.$$

Aus dem ersten und zweiten Teil gemeinsam kann also empirisch geschlossen werden, daß gilt:

$$r = \left(\frac{1}{\pi \cdot \rho \cdot c \cdot T_g} \cdot \frac{dE}{dx} \right)^{0.33}, \text{ wobei}$$

$$T_g = 0.5 T_{\text{Schmelz}} [\text{K}] - T_0 [\text{K}],$$

T_{Schmelz} - Schmelztemperatur des bestrahlten Materials in [K],

ρ - Dichte des bestrahlten Materials in [g/cm³],

c - Wärmekapazität des bestrahlten Materials bei halber Schmelztemperatur in [keV/(g·K)],

T_0 - Temperatur während der Bestrahlung in [K],

dE/dx - Energieverlust an der Oberfläche in [keV/nm]

4.1.3. Vergleich zwischen Theorie und Experiment

Die in 4.1.2 gewonnenen Vorhersagen für die Spurradien wollen wir jetzt mit Messungen vergleichen. Für LiF ergeben sich folgende Zahlen:

$$\rho = 2.635 \text{ g/cm}^3 = 2.635 \cdot 10^{-21} \text{ g/nm}^3,$$

$$c = 1.01 \cdot 10^{19} \text{ eV/(g K)} = 1.01 \cdot 10^{16} \text{ keV/(g K)} \text{ und}$$

$$T_g = 260 \text{ K (Bestrahlungstemperatur etwa } 25 \text{ }^\circ\text{C)}.$$

$$\text{Also insgesamt: } r = \left(46,0 \cdot \frac{dE}{dx} \right)^{0.33}.$$

Und für CaF_2 :

$$\rho = 3.1815 \text{ g/cm}^3 = 3.1815 \cdot 10^{-21} \text{ g/nm}^3,$$

$$c = 5.69 \cdot 10^{18} \text{ eV/(g K)} = 5.69 \cdot 10^{15} \text{ keV/(g K)} \text{ und}$$

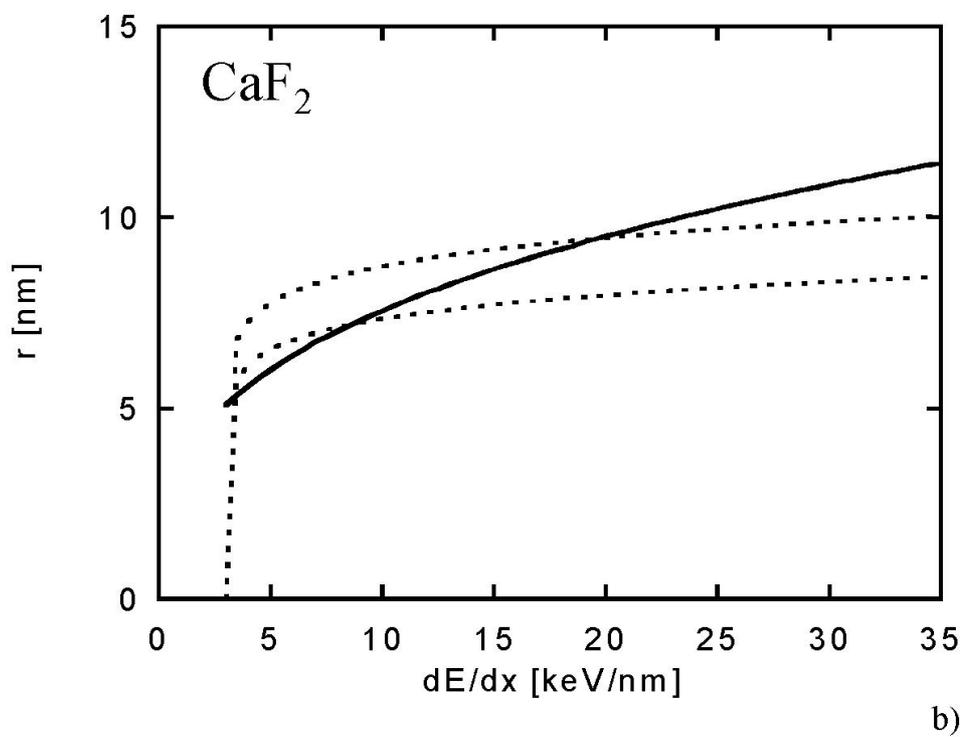
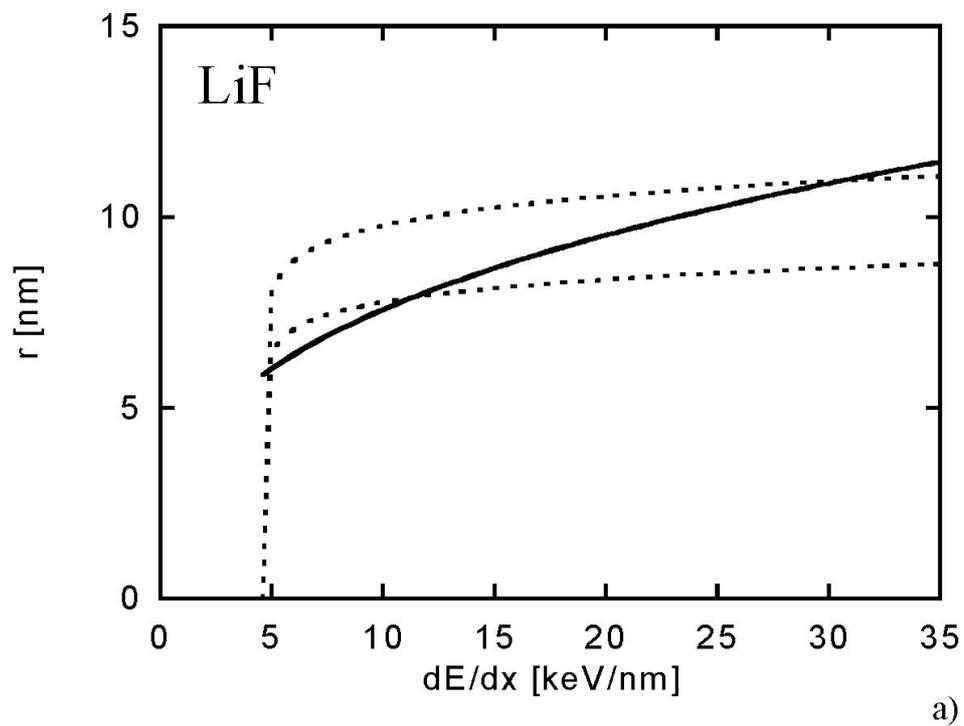
$$T_g = 382 \text{ K}.$$

Insgesamt:

$$r = \left(46,0 \cdot \frac{dE}{dx}\right)^{0,33}.$$

In Abb. 4.10 sind die entsprechenden Kurven für LiF und CaF_2 zusammen mit den in Kapitel 3 aus Messungen bestimmten Bereichen dargestellt. Trotz der einfachen Betrachtungsweise sind die Übereinstimmungen zwischen gemessenen und berechneten Radien sehr gut. Somit ist es möglich, zumindest die Radien der Ionenspuren auf LiF und CaF_2 zu berechnen.

Nimmt man an, daß die Formel auf S. 4-18 allgemein gültig ist, so kann man, wie für einige Beispiele in Abb. 4.11 gezeigt, die Radien von Ionenspuren auf beliebigen Materialien vorhersagen. Abschließen wollen wir deshalb dieses Kapitel mit dem Vergleich berechneter Radien auf den Oberflächen weiterer Materialien und den entsprechenden gemessenen Werten nach Bestrahlung mit schweren Ionen, welche der Literatur entnommen worden sind ([EN02], [AA96], [LN01], Abb. 4.11). Die Messungen an LaF_3 (a) wurden ebenfalls in unserer Gruppe von A.S. El-Said durchgeführt, weswegen gleichartige Korrekturen, wie zuvor bei den Messungen dieser Arbeit, durchgeführt werden konnten. Auch hier erkennt man eine recht gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Messungen. Die gemessenen Radien von Ionenspuren auf Glimmer wurden aus Lateralkraftbildern (nach dem Abspalten einer kleinen Oberflächenschicht von wenigen μm) gewonnen. Da diese Spuren nach dem Spalten keinerlei topographische Strukturen aufweisen, kann davon ausgegangen werden, daß die Ergebnisse weitestgehend von der endlichen Größe des Sensors unbeeinflusst bleiben. Erstaunlicherweise wird auch in diesem Fall die Größenordnung der zu erwartenden Ionenspuren recht gut vorausgesagt, obwohl die Tatsachen, welche zur Formulierung des einfachen Modells dieser Arbeit führten (wie z.B. die Bildung von Kristalliten bei bloßer Erwärmung), eigentlich nur für ionische Kristalle gelten dürften. Als letztes Beispiel sind in Abb. 4.11 c auch noch Radien von Spuren auf Graphit dargestellt. Hier nimmt die Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung noch weiter ab, allerdings ist auch in der Theorie der Trend zu sehr kleinen Strukturen (gemessen: $r \approx 1 \text{ nm}$) auch hier korrekt berechnet.

**Abb. 4.10:**

Vergleich zwischen gemessenen (gestrichelte Linien) und berechneten (durchgezogene Linien) Radien für a) LiF und b) CaF_2 .

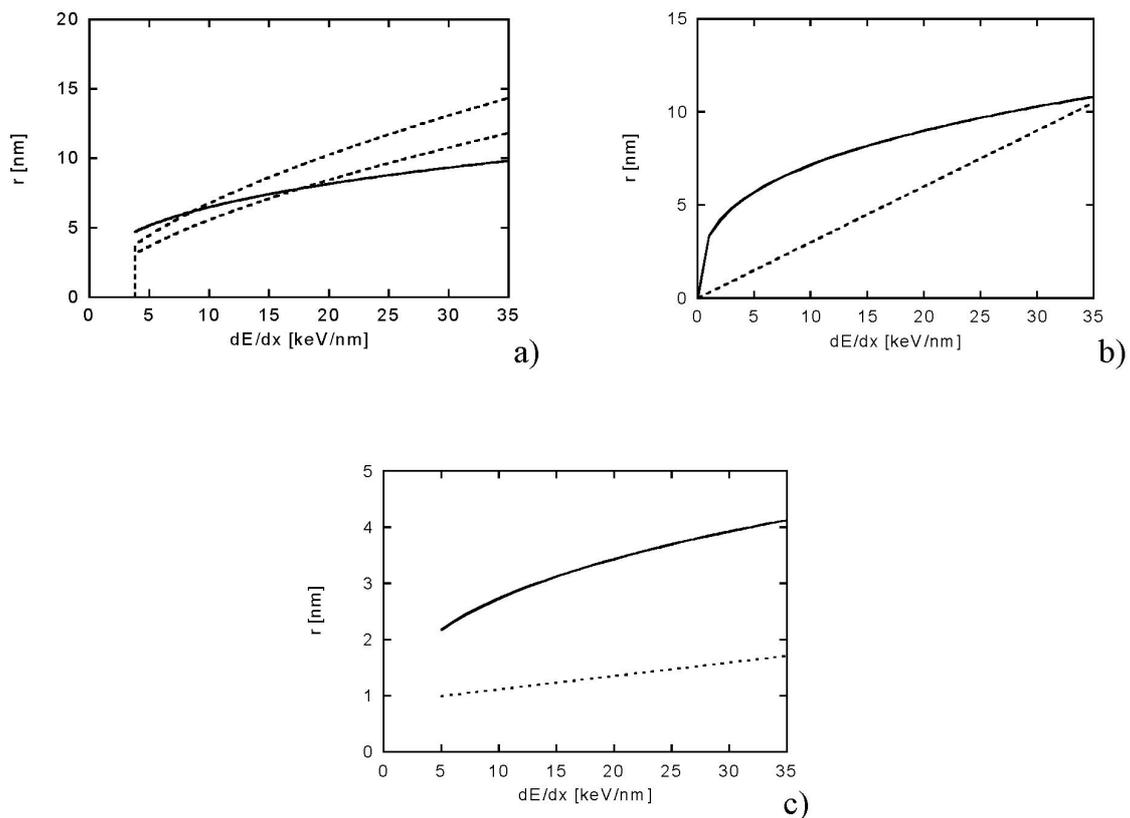


Abb. 4.11:

Anwendung des einfachen Spurbildungsmodells auf weitere Beispiele. Die gestrichelten Linien repräsentieren die gemessenen Daten, die durchgezogenen die theoretisch berechneten Werte. **a)** LaF_3 , die Messungen stammen aus unserer Gruppe [EN02] und sind auf dieselbe Weise wie die LiF- und CaF_2 -Daten in dieser Arbeit korrigiert worden. **b)** Glimmer [AA96]. **c)** Graphit [LN01].

Abschließen wollen wir dieses Kapitel mit Abb. 4.12, welche berechnete Ionenspurradien als Funktion des Energieverlusts auch für einige weitere Ionenkristalle enthält, zu denen derzeit noch keine entsprechenden experimentellen Kurven veröffentlicht sind.

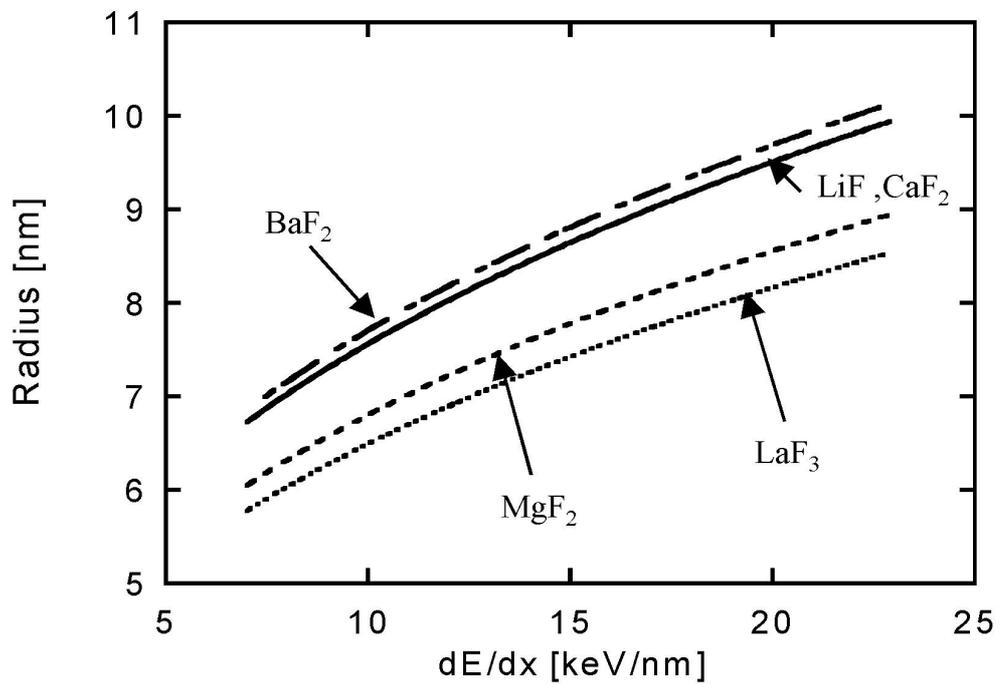


Abb. 4.12:

Berechnete Radien von Ionenspuren als Funktion des Energieverlusts an der Oberfläche für einige ionische Kristalle.