

## Kapitel 5: Zusammenfassung und Ausblick

Seit mehreren Jahrzehnten sind zahlreiche Untersuchungen über das Verhalten ionischer Kristalle bei Bestrahlung mit Röntgenstrahlen, Elektronen und Neutronen durchgeführt worden. In den letzten anderthalb Jahrzehnten kamen auch entsprechende Arbeiten unter Verwendung von Ionenstrahlen hinzu. Bis heute ist es dabei nicht gelungen, ein umfassendes Bild von den dabei auftretenden Spurbildungsprozessen zu zeichnen. Insbesondere zeigt es sich, daß die Bestrahlung mit schnellen Schwerionen zu neuen Effekten führt, welche sich nicht durch Auffassen der Ionenbestrahlung als bloße klassische Bestrahlung mit sehr hohen Dosen verstehen lassen. Das Hauptanliegen dieser Arbeit ist es, zum Verständnis ioneninduzierter Defekte beizutragen. Dabei richtet sich unser Augenmerk insbesondere auf die Oberfläche der Kristalle, da über deren Verhalten zuvor nur sehr wenige Daten verfügbar waren. Als gute Modellsysteme (welche aber durchaus auch von praktischem Interesse sind) wählten wir in der vorliegenden Dissertation LiF und CaF<sub>2</sub>. Da beide Materialien Isolatoren sind, bietet sich eine Oberflächenanalyse mittels Rasterkraftmikroskopie an. Da die Genauigkeit dieser Methode jedoch sehr empfindlich von der Gestalt der Sensorspitze (insbesondere vom Krümmungsradius am vordersten Ende) beeinflußt wird, war es zunächst notwendig, auftretende Abbildungsfehler quantitativ in den Griff zu bekommen. Zu diesem Zweck wurde das Programm RKMGeometrie (siehe Kapitel 2 und Zusatz-CD) entwickelt, welches es erlaubt, Bildverfälschungen zu beseitigen, und, falls dies prinzipiell unmöglich ist, zumindest zu erkennen und zu analysieren. In einem zweiten Schritt wurde das zuvor vom Autor bereits entwickelte Modell (indem sowohl Spitze als auch Ionenhügel als Kugelabschnitte aufgefaßt werden) mittels der so gewonnenen Erkenntnisse verallgemeinert, wodurch eine adäquate Korrektur der Meßdaten ermöglicht wird (siehe 3.2.2). Weitere Messungen an thermisch und optisch ausgebleichten Proben lassen den Schluß zu, daß das Ausheilverhalten ähnlich wie bei SAXS-Messungen ist. Die mit dieser Methode bestimmten Radien werden mit der Bildung von Metallkolloiden in Verbindung gebracht, wobei jedoch der endgültige Beweis für deren Existenz noch aussteht. Andererseits zeigt der direkte Größenvergleich zwischen RKM-Radien und SAXS-Radien wenig Gemeinsamkeiten (die mit SAXS gemessenen Radien sind etwa eine Größenordnung kleiner). Betrachtet man zusätzlich das thermische Verhalten unbestrahlter Proben, auf denen sich (nachweislich) Metall-Cluster bilden, so legt dies die Vermutung nahe, daß auch bei Ionenbestrahlung kleine Metallkolloide gebildet werden, jedoch in diesem Fall nur in den Einwirkungsbereichen der Ionen. Das

würde bedeuten, daß SAXS und RKM Kolloide beobachten, nur daß deren Entstehung an der Oberfläche und im Inneren des Festkörpers auf unterschiedliche Weise geschieht. Im Inneren kommt es vermutlich nach der Bestrahlung zu einer Aggregation der durch die Bestrahlung entstandenen F-Zentren, also den entsprechenden Metallatomen. Hingegen entstehen an der Oberfläche allein durch lokale thermische Erwärmung (evtl. durch Ausgasen von Fluormolekülen und ebenfalls einer gewissen Aggregation) direkt etwas größere Metall-Kristallite. Dementsprechend wäre es verständlich, daß sowohl mit SAXS als auch mit RKM gemessene Radien gleichartiges Ausheilverhalten zeigen, auch wenn deren Größe sich unterscheidet, da beide vermutlich dieselbe Natur haben.

Diese (noch nicht endgültig bewiesenen) Annahmen ermöglichen es, eine einfache theoretische Modellierung der Spurgrößen vorzunehmen. Ausgangspunkt sind dabei die berechneten Dosisverteilungen, deren genaue Gestalt jedoch von der gewählten Korngröße (kleinste Einheit des Festkörpers, welche bei Bestrahlung gerade noch mit Veränderung reagieren kann) abhängt. Plausiblerweise wählten wir als Korn die Elementarzelle des jeweiligen Kristalls, was jedoch für die weiteren Betrachtungen keine Rolle spielt, und gelangten so zu einem qualitativen Zusammenhang zwischen dem Energieverlust eines Ions an der Oberfläche und den zu erwartenden Spurradien. Ein zweiter Ansatz geht davon aus, daß die Spuren allein durch eine lokale Erwärmung (ähnlich wie bei der globalen Erwärmung der unbestrahlten Proben, siehe dazu 4.1.2) entstehen. Diese Betrachtungsweise erlaubt eine quantitative Bestimmung der Radien, allerdings bei einer stark vereinfachten Temperaturverteilung. Die Synthese aus beiden Ansätzen führt zu einer (in Anbetracht der eher mit großen Fehlern behafteten Messung) guten Beschreibung der Abhängigkeit zwischen Energieverlust und Radius.

Ein direkter Vergleich zwischen Messungen an unterschiedlichen Materialien und der gefundenen Formel läßt den Schluß zu, daß diese, zumindest für ionische Kristalle die Radien gut vorhersagen kann. Bei nicht-ionischen Kristallen wird immerhin das tendenzielle Verhalten vorhergesagt (so berechnet man z.B. für Graphit wesentlich kleinere Spuren, als für die Ionenkristalle). Da diese Modellierung ursprünglich davon ausgeht, daß es sich bei den Ionenhügeln um Metallkolloid-Kristallite handelt, kann die Übereinstimmung mit den Messungen bei den Ionenkristallen als weiterer Hinweis darauf verstanden werden, daß diese Annahme vermutlich richtig ist. Auch die Kraftmodulations-, Lateralkraft- und Semi-Kontakt-Messungen deuten auf eine veränderte Oberflächensammensetzung hin, was zumindest ebenfalls in Übereinstimmung mit der Kristallit-Annahme ist.

Ein nächster Schritt könnte jetzt z.B. sein zu versuchen, Ionenspuren auf möglichst vielen verschiedenen ionischen Kristallen nachzuweisen und mit den erwarteten Radien zu vergleichen. Dabei würde es ausreichen, wenn man jeweils einige Messungen in dem Bereich des Energieverlusts durchführen würde, in dem Messungen und Theorie am besten übereingestimmt haben (also etwa zwischen 10 keV/nm und 20 keV/nm). Als überprüfbare Vorhersagen wurden deshalb in Abb. 4.12 die berechneten Ionenspurradien für einige verschiedene Kristalle gezeigt. Auf theoretischer Seite wäre es wünschenswert, die (etwas grobe) Gleichverteilung der Wärme bei der zweiten Modellierung durch realistischere Verteilungen zu ersetzen. Wie wir gesehen hatten, ist es qualitativ möglich zu verstehen, wie es zu Schwellenwerten im Energieverlust kommt, so daß genauere Verteilungen (im "Wärmebild") es dann ermöglichen sollten, diese Schwellenwerte vorherzusagen und gleichzeitig vollkommen unabhängig von der semi-empirischen Synthese zwischen den beiden Ansätzen zu werden. Ferner wäre es eine sinnvolle Ergänzung, wenn Messungen wärmebehandelter Proben (bestrahlt und unbestrahlt) unter Schutzgas und/oder im Vakuum durchgeführt würden. Dadurch ließen sich z.B. Oxidationsreaktionen und andere Wechselwirkungen mit der Umgebung als Ursache der Spurbildung ausschließen und noch konkreter die Parallelen zwischen Ionenhügeln und Kristalliten überprüfen.

Allgemein werden nach unserer Auffassung Molekulardynamik-Modelle die Theorie Ionen-induzierter Prozesse in Festkörpern wesentlich beeinflussen oder sogar bestimmen. Da diese jedoch bis heute noch nicht vollkommen entwickelt sind, sondern bisher lediglich eher einfache Systeme (wie z.B. die Bestrahlung von festem Argon mit Argon-Ionen) beschreiben können (ein wesentliches Problem ist die große Reichweite der freigesetzten Elektronen im Festkörper und die damit zusammenhängende große Anzahl zu berücksichtigender Atome bei der Modellierung), wäre es sicher auch ein guter Ansatz, künftig Messungen an solch einfachen Systemen durchzuführen.

