



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG
Institut für Festkörperforschung

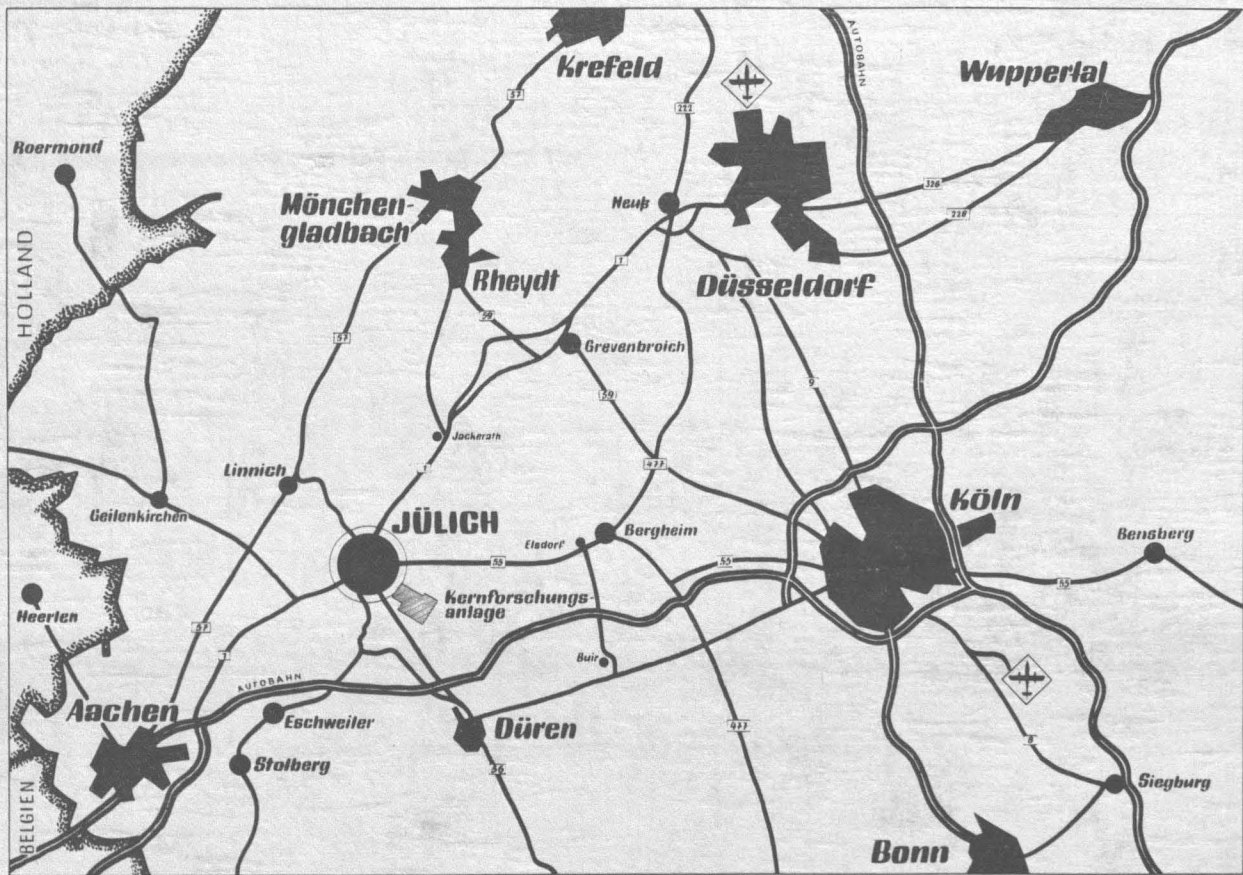
**Bestimmung der Anisotropie
der Schwellenenergie für die Erzeugung
von Frenkeldefekten in Tantal**

von

Peter Jung

Jül - 729 - FF
Februar 1971

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 729
Institut für Festkörperforschung Jül - 729 - FF

Dok.: Tantalum - Frenkel Pairs
Frenkel Pairs - Production
Tantalum - Threshold Energy
Threshold Energy - Anisotropy

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

**Bestimmung der Anisotropie
der Schwellenenergie für die Erzeugung
von Frenkeldefekten in Tantal**

von

Peter Jung

D 82 (Diss. T. H. Aachen)

I n h a l t

	Seite
1. Einleitung	1
2. Elektronenbestrahlung von Metallen	2
2.1 Der Wirkungsquerschnitt	2
2.2 Die Strahlaufweitung und Wegverlängerung	4
2.3 Der Energieverlust	8
2.4 Die Schädigungsfunktion	8
2.5 Die unterschwellige Schädigung	13
3. Bisherige Ergebnisse zur Anisotropie der Schädigung in Metallen	15
3.1 Experimentell	15
3.2 Theoretisch	21
4. Zum Experiment	27
4.1 Die Proben	27
4.2 Der Kryostat	29
5. Die Meßergebnisse	35
5.1 Dosisabhängigkeit der Schädigungsrate	35
5.2 Energieabhängigkeit der Schädigungsrate bei Bestrahlung in (110) - Richtung	37
5.3 Winkelabhängigkeit der Schädigungsrate	37
5.4 Diskussion der Meßfehler	45
6. Anpassung der Meßergebnisse an ein Schwellenenergieprofil	50
6.1 Reduktion auf Dicke Null (Korrektur der Strahlaufweitung)	50
6.2 Die Schwellenenergien	54
6.3 Diskussion	63
7. Zusammenfassung	66
8. Literaturverzeichnis	67

1. Einleitung

Wird ein Kristall mit Elektronen bestrahlt, so übertragen die Elektronen beim Zusammenstoß einen Teil ihrer Energie auf die Gitteratome. Überschreitet diese Energie einen bestimmten Wert T_d (die sogenannte Schwellenenergie für die Defektproduktion oder Verlagerungsenergie), so verläßt das Atom seinen Gitterplatz und hinterläßt eine Leerstelle. Das angestoßene Atom erzeugt - evtl. über einige Ersetzungsstöße - ein Zwischengitteratom in der Nähe der Leerstelle. Das Zwischengitteratom zusammen mit der zugehörigen Leerstelle wird als Frenkelpaar bezeichnet.

Wegen der atomistischen Struktur des Kristalls ist die Schwellenenergie im allgemeinen von der Stoßrichtung des Atoms im Gitter abhängig. Man erwartet deshalb bei einkristallinen Proben eine Abhängigkeit der Defektproduktion von der Bestrahlungsrichtung. Von besonderer Bedeutung sind dabei die Kristallrichtungen höherer Symmetrie (Hauptrichtungen), da man in diesen Richtungen Extremwerte der Schwellenenergie vermutet. Im kubischen System sind dies die (100)-Richtung mit vierfacher, die (111)-Richtung mit dreifacher und die (110)-Richtung mit zweifacher Symmetrie.

Aus Gründen, die in Kapitel 3 erläutert werden, liefern die bisher ausschließlich in diesen Hauptrichtungen durchgeführten Bestrahlungsexperimente aber nicht ausreichend Information um auch nur die Schwellenenergien in den Hauptrichtungen eindeutig festzulegen. In der vorliegenden Arbeit wurde daher erstmals für Metalle durch Drehen von Einkristallproben Schädigungsmessungen in einer größeren Zahl von Kristallrichtungen bei verschiedenen Energien durchgeführt. Aus diesen Messungen konnte dann im wesentlichen der Verlauf der Schwellenenergie für alle Gitterrichtungen bestimmt werden.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: In Kapitel 2 werden die bei Elektronenbestrahlung von Metallen wichtigen Größen eingeführt und erläutert; in Kapitel 3 folgt eine Übersicht der bisherigen Arbeiten über die Anisotropie der Strahlenschädigung. Kapitel 4 erläutert die experimentellen Voraussetzungen dieser Arbeit und in Kapitel 5 sind die Meßergebnisse aufgeführt. Kapitel 6 schließlich bringt eine rechnerische Anpassung von Schwellenenergieprofilen an die Meßergebnisse.

2. Elektronenbestrahlung von Metallen

2.1 Der Wirkungsquerschnitt

Ein Elektron der Energie E kann auf ein Atom maximal die Energie

$$T_m = 2 \cdot \frac{m}{M} \cdot mc^2 \cdot (E' - 1) \quad \text{mit} \quad E' = \left(\frac{E}{mc^2} + 1 \right)^2 \quad (1)$$

übertragen, wobei M die Masse des Atoms und m die des Elektrons bezeichnet. Schließt die Stoßrichtung mit der ursprünglichen Flugrichtung des Elektrons einen Winkel W ein (vergl. Abb. 1), so erhält das gestoßene Atom die Energie:

$$T = T_m \cdot \eta^2 \quad \text{mit} \quad \eta = \cos W \quad (2)$$

W nimmt Werte zwischen 0° und 90° an.

Die Verteilungsfunktion der Stoßwinkel W heißt differentieller Streuquerschnitt. Dieser wurde für Elektronen des hier interessierenden Energiebereichs von N.F.Mott /1/ in einer Reihenentwicklung exakt angegeben. Für leichte ($Z \lesssim 32$) Elemente gilt eine Näherungsformel von McKinley - Feshbach /2/ :

$$d\sigma_{MKF} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{E'}{(E'-1)^2} \cdot \frac{Z}{\eta^3} \cdot \left[1 - \left(1 - \frac{1}{E'}\right) \cdot \eta^2 + \frac{\pi \cdot Z}{137} \cdot \sqrt{1 - \frac{1}{E'}} \cdot \eta \cdot (1 - \eta) \right] d\Omega \quad (3)$$

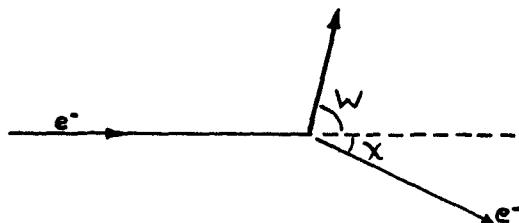
mit dem Raumwinkelelement $d\Omega = 2\pi d\eta = 2\pi \sin W dW$.

Für Elemente mit höherer Ordnungszahl hat O.S.Oen /3/ Korrekturfaktoren $K_0(W, Z)$ angegeben, so daß gilt:

$$\left/ \frac{K_0 d\sigma_{MKF} - d\sigma_{Mott}}{d\sigma_{Mott}} \right/ \lesssim 3 \%$$

Für Tantal wurden die K_0 -Werte aus den Oen'schen Tabellen extrapoliert und sind in Abbildung 2 wiedergegeben.

Abb. 1



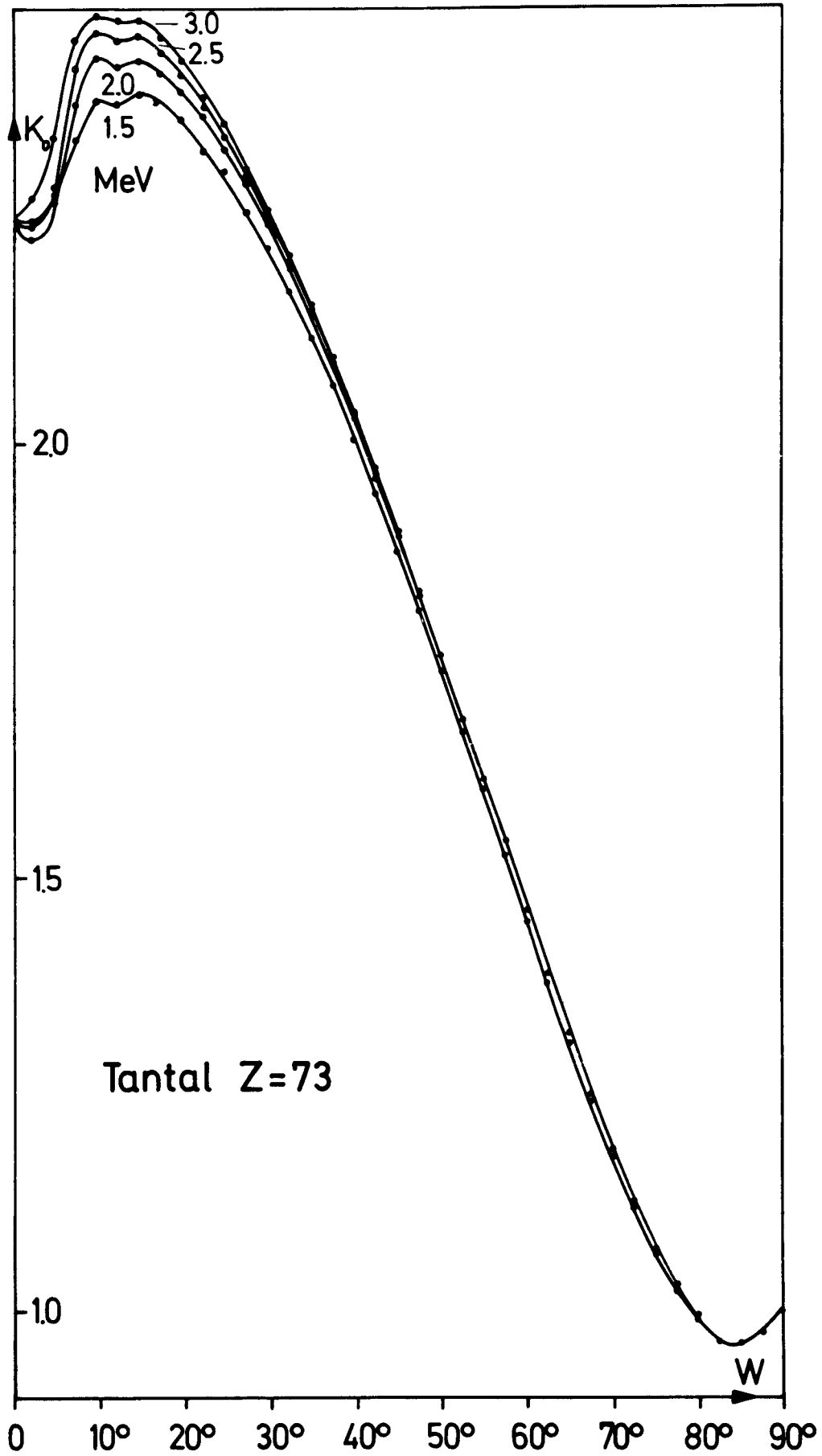


Abb. 2 Oen'sche Korrekturfaktoren für den differentiellen Wirkungsquerschnitt nach McKinley-Feshbach

2.2 Die Strahlaufweitung und Wegverlängerung

Mit der Richtung des einfallenden Elektrons bildet die Flugrichtung des gestoßenen Atoms den Winkel W und die des gestreuten Elektrons den Winkel χ . Es gilt:

$$\chi = \pi - 2W \quad (4)$$

Der Streuquerschnitt bevorzugt gemäß Gleichung (3) Stöße mit kleinem χ (Kleinwinkelstreuung). Erleidet ein Elektron beim Durchgang durch Materie eine große Zahl solcher Stöße, so spricht man von Vielfachstreuung. Dabei addieren sich für jedes Elektron die Winkel χ der Einzelstoßprozesse zu einem Ablenkwinkel α von der Einfallsrichtung. Diese Ablenkung bewirkt, daß ein ursprünglich paralleler Elektronenstrahl aufgeweitet wird.

Eine große Zahl von Arbeiten haben sich mit der Vielfachstreuung befaßt. Ein Überblick findet sich in der Arbeit von J.W. Corbett /4/. Im folgenden wird die Theorie von G. Moliere /5/ verwendet. Sie liefert eine Verteilung der Ablenkwinkel α als Funktion von Kernladung Z , Atomgewicht A , Dichte q und Probendicke d . Die Moliere'sche Winkelverteilung läßt sich für dünne Proben gut durch eine Gaußverteilung annähern:

$$G(\alpha) = \frac{2}{\bar{\alpha} \sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2/\bar{\alpha}^2} \quad (5)$$

Dabei wurde G so normiert, daß das Integral über den Raumwinkel gleich 1 wird. Für die Gaußbreite $\bar{\alpha}$ gilt (vergleiche auch /6/):

$$\bar{\alpha}^2 = 4\pi \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \cdot \frac{Z \cdot (Z+1) \cdot q \cdot d}{M} \cdot \frac{E'}{(E'-1)^2} \quad (B-1.2) \quad (6)$$

B erhält man aus:

$$\frac{e^B}{B} = 7800 \cdot \frac{(Z+1) \cdot \sqrt[3]{Z} \cdot q \cdot d}{A} \cdot \frac{1}{1 + \frac{3.33 \cdot Z^2}{(137)^2} - \frac{1}{E'}} \quad (7)$$

e^B/B entspricht der mittleren Zahl der Stoßprozesse pro Elektron, sie beträgt bei 15 μm Tantal nahezu unabhängig von der Elektronenenergie 175. Eine Theorie von B. Rossi und K. Greisen /7/ liefert etwa um 60 % größere Gaußbreiten /6/, während Rechnungen nach einer Streutheorie von N.F. Mott und H.S.W. Massey /8/ für Tantal um ca. 25 % größere Werte für die Gaußbreiten ergeben (vergl. auch /35/).

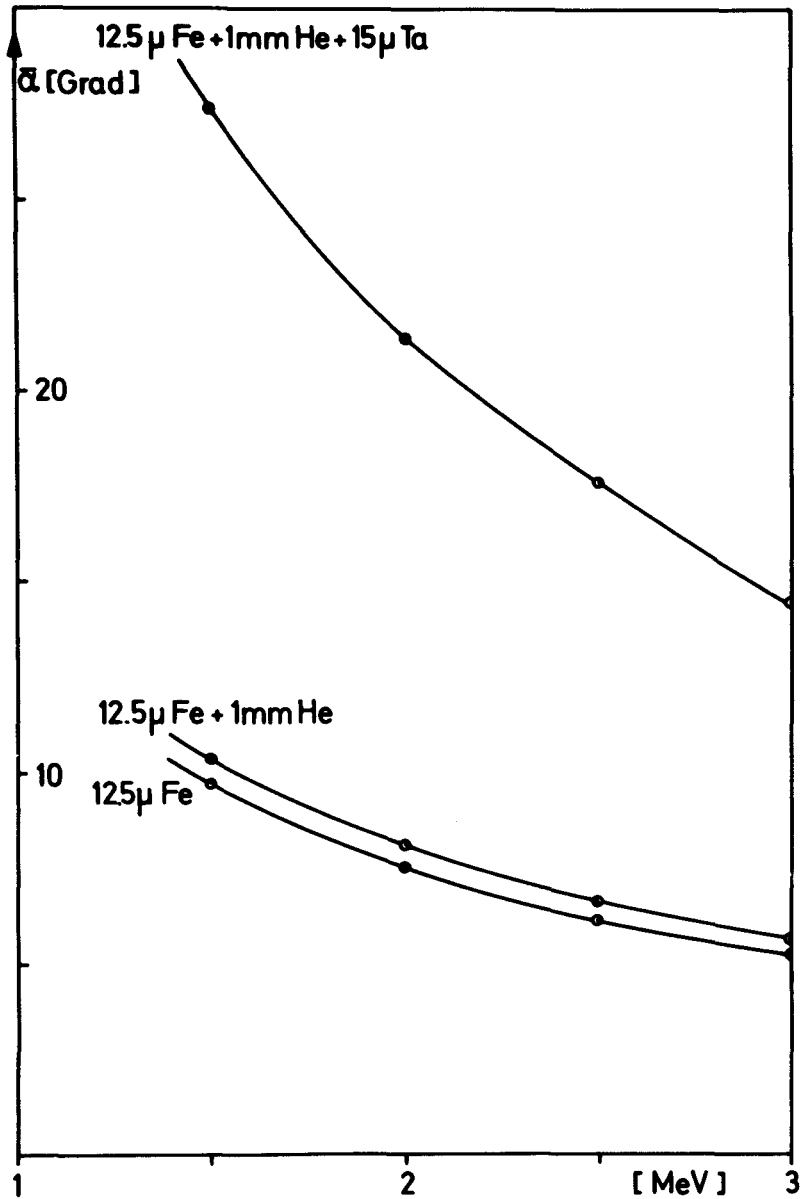


Abb. 3 Aufweitung des Elektronenstrahls in der vorliegenden Meßanordnung

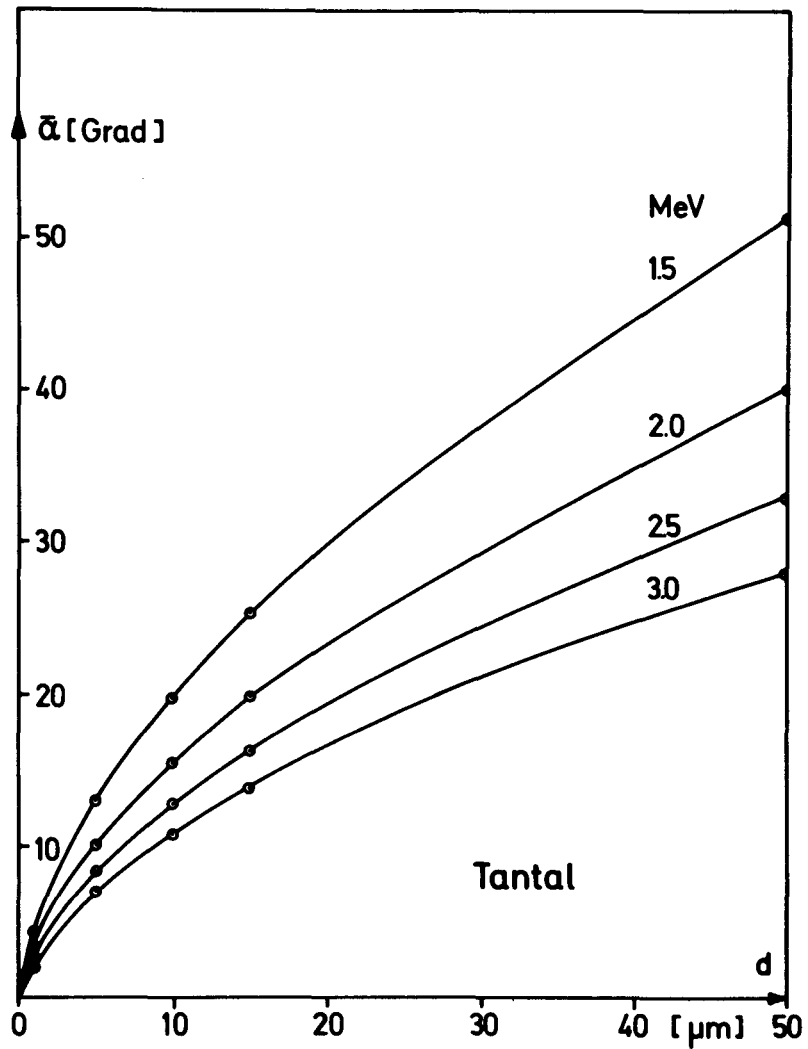


Abb. 4 Strahlaufweitung in Tantal in Abhängigkeit von der Dicke d .

Experimente von A.O.Hanson et al. /9/ mit 15.7 MeV - Elektronen bestätigten die Moliere'sche Theorie. In derselben Arbeit wurde auch gezeigt, daß frühere Messungen von L.A.Kulchitsky et al. mit 2.25 MeV - Elektronen mit der Moliere'schen Theorie übereinstimmen.

In Abbildung 3 ist $\bar{\alpha}$ für die vorliegende Meßanordnung in Abhängigkeit von der Elektronenenergie aufgetragen. Es zeigt sich, daß der Beitrag der Tantalfolie den Beitrag des Fensters (12.5 μm Edelstahl) und des Kühlmittels (1 mm flüssiges Helium), die der Elektronenstrahl vor Auftreffen auf die Tantalfolie durchdringen muß, weit übertrifft. In Abbildung 4 ist die Strahlaufweitung in Tantal in Abhängigkeit von der Dicke aufgetragen. Bei den verwendeten Proben von ca. 15 μm Dicke beträgt die Strahlaufweitung bei 1.5 MeV also ca. 25° und verringert sich bei 3.0 MeV auf ca. 14° .

In Abbildung 5 schließlich ist die Strahlaufweitung in verschiedenen Metallen von 10 μm Dicke bei verschiedenen Energieüberträgen verglichen. Da auch die bisher bekannten Schwellenenergien langsam mit Z ansteigen, ergibt sich, daß im Bereich der Schwellenenergie für alle Metalle etwa dieselbe Strahlaufweitung (ca. 25°) in Kauf genommen werden muß.

Die Vielfachstreuung bewirkt auch eine Vergrößerung der Weglänge s der Elektronen in der Probe. Nach einer Theorie von C.N.Yang /10/ gilt (vergl. auch /6/):

$$\frac{s}{d} = 1 + \frac{\bar{\alpha}^2}{4} \quad (8)$$

s/d ist für Tantal in Abbildung 6 wiedergegeben.

Die für die Messungen nötige Drehung der Probenfolien um einen Winkel τ bewirkt eine Änderung der effektiven Probendicke um Δd . Es gilt:

$$\frac{d + \Delta d}{d} = \frac{1}{\cos \tau}$$

Der Einfluß dieser Dickenänderung auf die Defektproduktion wird für sehr dünne Proben durch die gleichzeitige Reduzierung der Strahlstromdichte um den Faktor $\cos \tau$ völlig kompensiert. Wegen der Abhängigkeit der Strahlaufweitung von der Dicke wird aber beim Drehen der Probe die Strahlaufweitung vergrößert. In erster

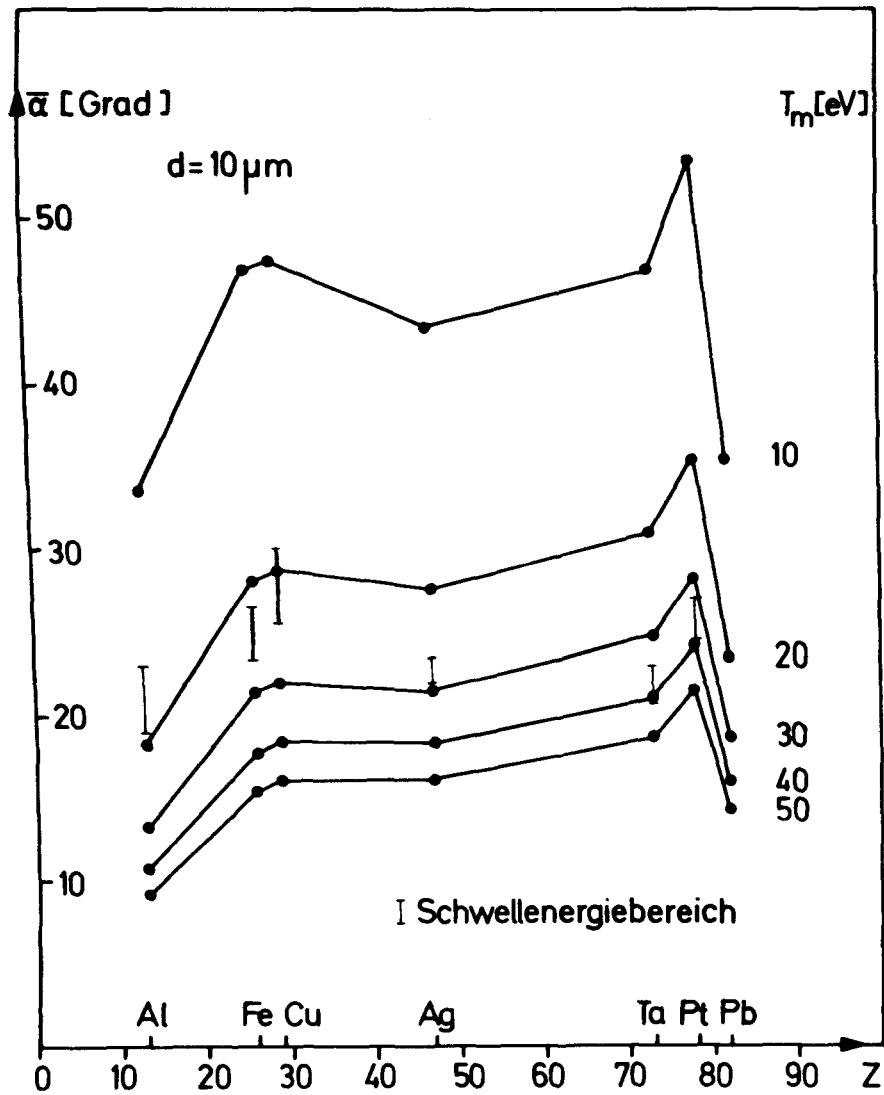


Abb. 5 Strahlaufweitung in Metallen von $10 \mu\text{m}$ Dicke als Funktion der Kernladungszahl Z und der maximal übertragbaren Energie T_m .

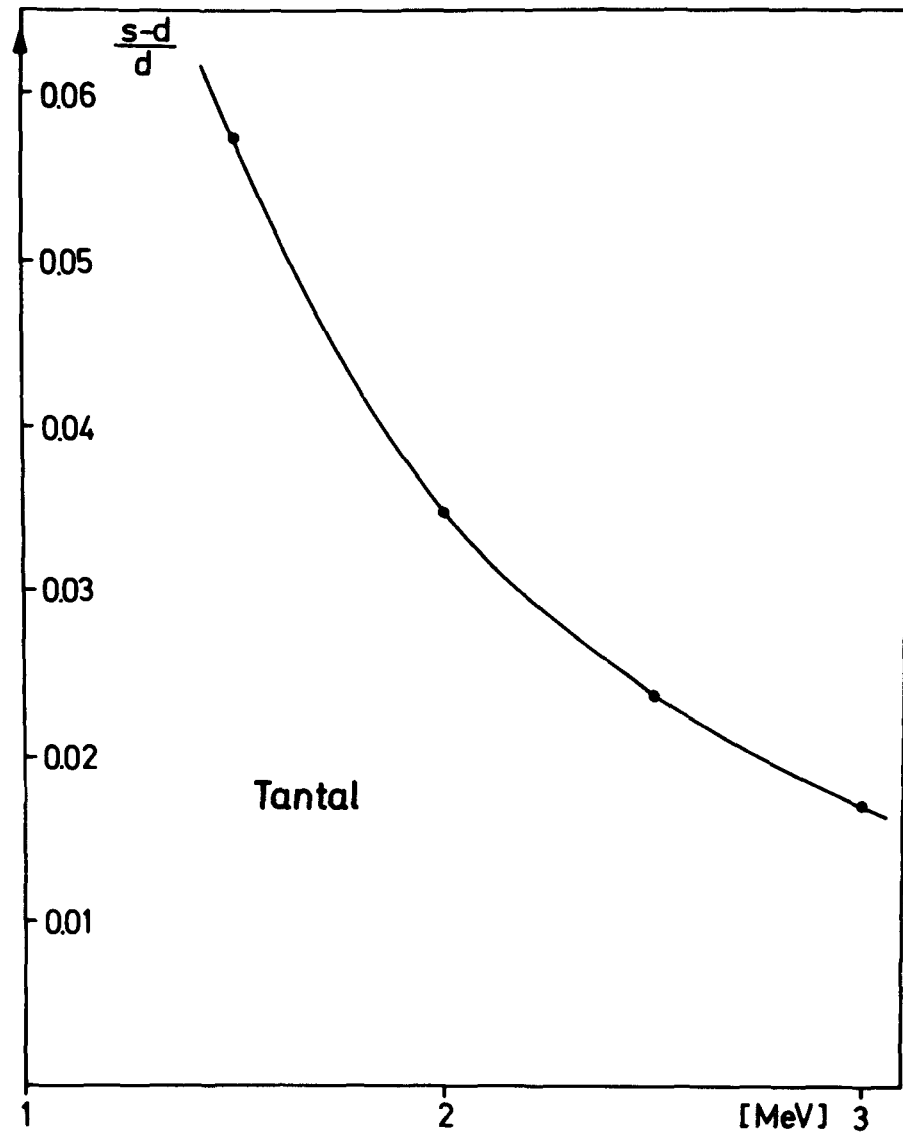


Abb. 6 Wegverlängerung für Elektronen in $15 \mu\text{m}$ Tantal.

Näherung gilt dann:

$$\frac{S}{d}(\tau) = 1 + \frac{(\bar{\alpha}^2)_{\tau=0}}{4 \cdot \cos^2 \tau} \quad (9)$$

Für die verwendeten Proben machte die Wegverlängerung gemäß Gleichung (9) Korrekturen der gemessenen Schädigungsraten von maximal 5 % erforderlich.

2.3 Der Energieverlust

Neben den elastischen Stößen an den Atomkernen erleiden die Bestrahlungselektronen auch inelastische Zusammenstöße mit den Hüllenelektronen. Dabei überwiegt unter 1 MeV der Energieverlust durch Ionisation, bei höheren Energien der Energieverlust durch Bremsstrahlung. Im betrachteten Energiebereich von 1 bis 3 MeV durchläuft der Energieverlust ein flaches Minimum.

Experimentelle Werte finden sich tabelliert bei A.T.Nelms /11/.
 Demnach verlieren Elektronen in 12.5 μm Fe 13.8 keV
 in 1 mm He 22.5 keV
 und in 15 μm Ta 26.1 keV .

Beim Eintritt in die Probe liegt die Elektronenenergie also um ca. 0.04 MeV und in der Probenmitte um ca. 0.05 MeV unter der Beschleunigerenergie. Beim Drehen der Proben wird der Energieverlust in der Probe noch um einen Faktor $1/\cos^2 \tau$ vergrößert. Da diese zusätzliche Änderung aber immer kleiner als 0.01 MeV bleibt, wurde die Energieskala mit dem mittleren Wert 0.05 MeV korrigiert. Das Energiestragging ist bei der verwendeten Proben- dicke zu vernachlässigen.

Auch bei den inelastischen Stößen überwiegen bei weitem jene mit geringem Energieübertrag. Das heißt, der Beitrag energiereicher Sekundärelektronen zur Defektproduktion ist zu vernachlässigen.

Die Einstellgenauigkeit des Beschleunigers liegt bei etwa 0.02 MeV.

2.4 Die Schädigungsfunktion

Der differentielle Wirkungsquerschnitt (Gleichung (3)) beschreibt die Wahrscheinlichkeit der Übertragung einer bestimmten

Energie auf ein Gitteratom als Funktion des Streuwinkel W . Zur Bestimmung der Widerstandserhöhung durch Strahlenschädigung muß noch die sogenannte Schädigungsfunktion $Q(\theta, \phi, T)$ bekannt sein. Sie beschreibt den Widerstandszuwachs, den eine Einheitskonzentration von Atomen erzeugt, wenn sie mit einer Energie T in eine Gitterrichtung (θ, ϕ) gestoßen wird. Dabei wird für (θ, ϕ) ein Kugelkoordinatensystem verwendet mit $-\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq +\frac{\pi}{2}$ und $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Falls (θ_0, ϕ_0) die Richtung der einfallenden Elektronen im Gitter angibt (Abb. 7), läßt sich bei Vernachlässigung der Strahlaufweitung der Widerstandszuwachs pro Elektronendosis schreiben als:

$$\frac{\Delta \rho}{\Delta \Phi}(\theta_0, \phi_0, E) = \int_0^{4\pi} d\sigma_{MKF}(\eta, E) K_0(\eta, E) Q(\theta, \phi, T(\eta, E)) \quad (10)$$

Für $d\sigma_{MKF}$ siehe Gleichung (3) und für η gilt:

$$\eta(\theta, \phi, \theta_0, \phi_0) = \cos W = \cos \theta \cos \theta_0 \cos(\phi - \phi_0) + \sin \theta \sin \theta_0 \quad (11)$$

Für die Ausführung der Integration ist es zweckmäßig, ein Koordinatensystem (θ', ϕ') einzuführen, in welchem die Winkel von der Einfallsrichtung der Elektronen aus gerechnet werden. Dieses Koordinatensystem geht aus (θ, ϕ) durch eine zweifache Drehung hervor (Abb. 8). Zunächst wird das System (θ, ϕ) um die z-Achse um den Winkel ϕ_0 gedreht. Um die dabei erhaltene Achse y' erfolgt nun noch eine Drehung um den Winkel θ_0 . Dann läßt sich (θ, ϕ) folgendermaßen darstellen.

$$\sin \theta = \cos \theta' \cos \phi' \sin \theta_0 + \sin \theta' \cos \theta_0 \quad (12)$$

$$\sin \phi = \frac{\cos \theta' \cos \phi' \sin \theta \cos \theta_0 + \cos \theta' \sin \phi' \cos \theta_0 - \sin \theta' \sin \theta \sin \theta_0}{\sqrt{1 - \sin^2 \theta}} \quad (13)$$

Weiter gilt im gedrehten Koordinatensystem:

$$\eta = \cos \theta' \cdot \cos \phi' \quad (14)$$

und für das Raumwinkelement:

$$d\Omega = \cos \theta' \cdot d\theta' \cdot d\phi' \quad (15)$$

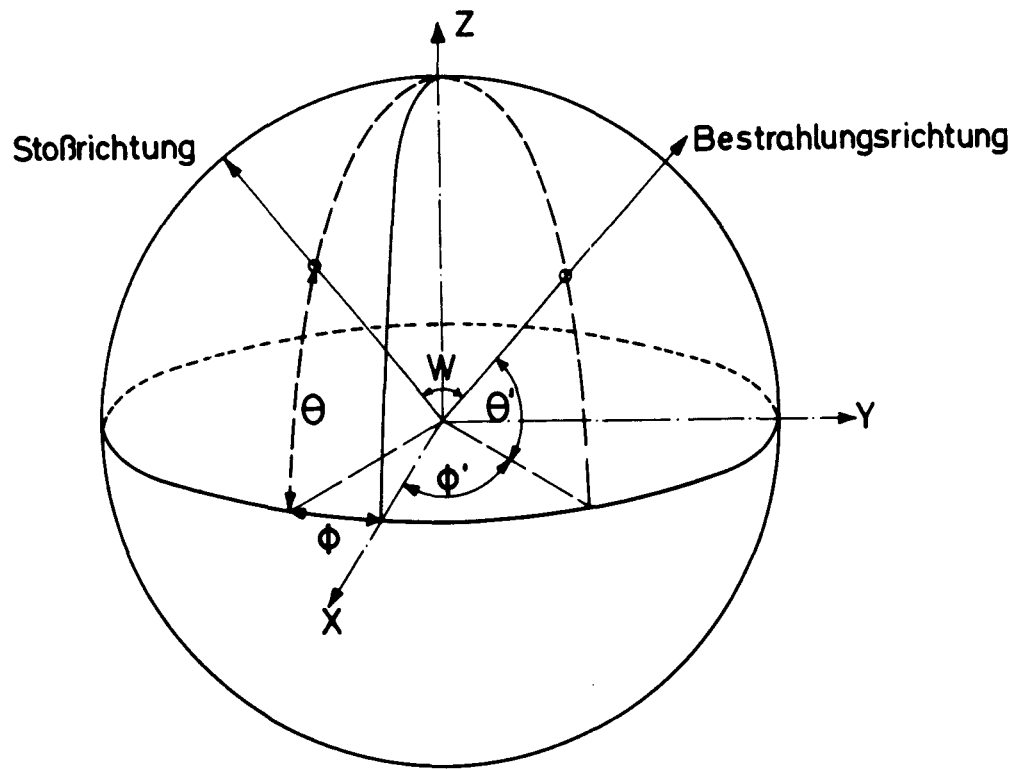


Abb. 7 Koordinaten für Bestrahlungs- und Stoßrichtung

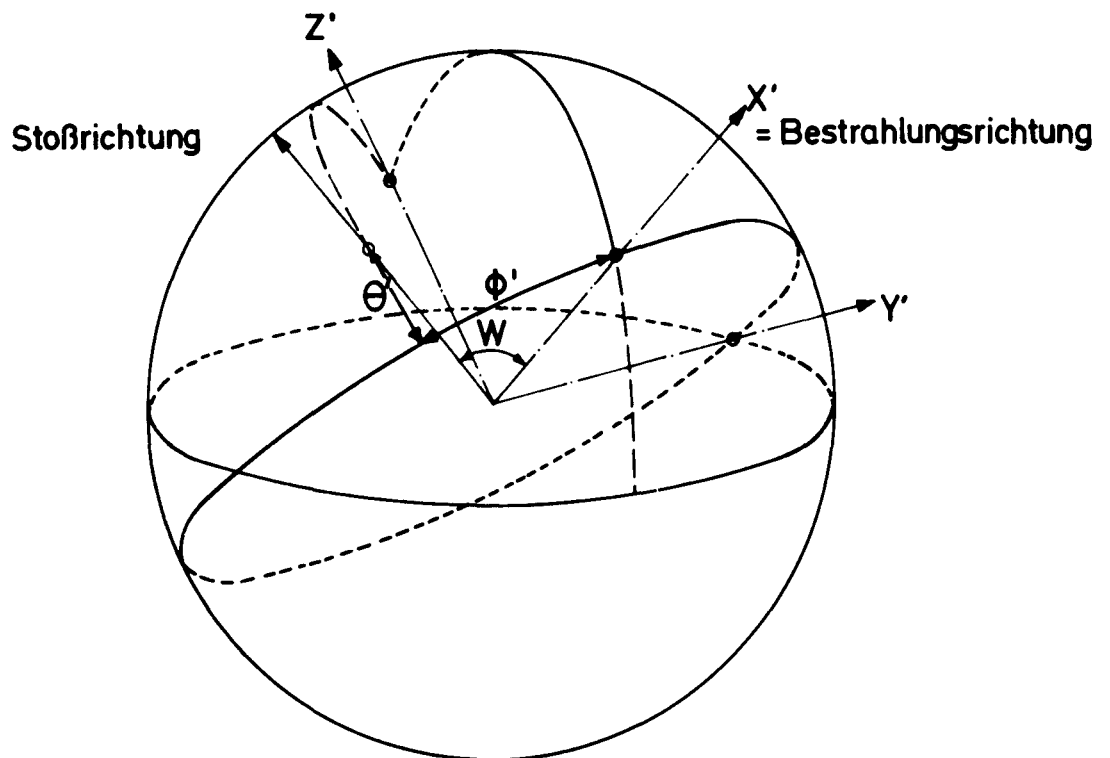


Abb. 8 Gedrehtes Koordinatensystem

Üblicherweise wird die Schädigungsfunktion Q zerlegt:

$$Q(\Theta, \Phi, T) = \rho_F \cdot n(T) \cdot P(\Theta, \Phi, T) \quad (16)$$

Dabei beschreibt P , die sog. Verlagerungswahrscheinlichkeit, die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Atom bei Übertragung einer Energie T in Richtung (Θ, Φ) seinen Gitterplatz verläßt und so mindestens ein stabiles Frenkelpaar bildet. $(n-1)$ ist die Zahl der von diesem Atom bei Zusammenstößen mit anderen Gitteratomen zusätzlich erzeugten Frenkelpaare (Mehrfachverlagerung). ρ_F ist der mittlere Widerstandsbeitrag pro Einheitskonzentration an Frenkelpaaren.

Die Verlagerungswahrscheinlichkeit $P(\Theta, \Phi, T)$ läßt sich in einem idealen, starren Gitter exakt als Stufenfunktion angeben:

$$P(\Theta, \Phi, T) = \begin{cases} 0 & \text{für } T < T_d(\Theta, \Phi) \\ 1 & \text{für } T \geq T_d(\Theta, \Phi) \end{cases} \quad (17)$$

Durch Gitterstörungen und Gitterschwingungen wird diese Stufe aufgeweicht, doch sollte dies nach Abschätzungen von C.H.Sherman et al. /12/ einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Schädigungsrate haben.

Für die Zerlegung von Q gemäß Gleichung (16), ohne die eine einfache Ableitung von $P(\Theta, \Phi, T)$ und damit des Schwellenenergieprofils $T_d(\Theta, \Phi)$ aus dem Verlauf der Schädigungsrate $\frac{\Delta Q}{\Delta \Phi}(\Theta, \Phi, E)$ nicht möglich ist, sind die folgenden Voraussetzungen nötig:

a) ρ_F ist unabhängig von Richtung und Betrag der übertragenen Energie T . Das heißt, der Widerstand pro Frenkelpaar soll unabhängig von dessen Konfiguration und von dessen Lage im Kristallgitter sein. Diese Annahme wird durch Messungen an Aluminium, Kupfer, Eisen, Niob /vergl. 13/ und Platin /14/ gestützt: Es zeigte sich, daß bei der Erholung der einzelnen Unterstufen von Stufe I die Freigabe der pro Frenkelpaar gespeicherten Energie q_F in sehr guter Näherung proportional zur Widerstandserholung verläuft. Da die Bildungsenergie q_F eines Frenkelpaars nur sehr wenig von den Details der Anordnung von Zwischengitteratom und Leerstelle abhängt, legt obige Beobachtung den Schluß nahe, daß auch der elektrische Widerstand der verschiedenen Frenkelpaar-Konfigurationen weitgehend der gleiche ist.

Die Tatsache, daß bei Elektronenbestrahlung von Aluminium-/15/ und Kupfer-Einkristallen /16/ eine starke Abhängigkeit der Er-

holung von der Bestrahlungsrichtung gefunden wurde, steht nicht im Widerspruch zur Konstanz von ρ_F . Sie deutet vielmehr darauf hin, daß je nach Bestrahlungsrichtung die einzelnen eng-benachbarten-Paar Konfigurationen mit unterschiedlicher relativer Häufigkeit populiert werden.

Durch Abspalten der Konstanten ρ_F erhält man aus der Schädigungsrate den sogenannten Verlagerungsquerschnitt σ_V , der angibt, welche Elektronendosis nötig ist, um eine Einheitskonzentration an Frenkelpaaren zu erzeugen:

$$\sigma_V(\theta_0, \phi_0, E) = \frac{1}{\rho_F} \frac{\Delta \rho}{\Delta \Phi}(\theta_0, \phi_0, E) \quad (18)$$

b) $n(T)$ ist unabhängig von der Kristallrichtung (θ, ϕ) . Diese Annahme ist sicher nicht voll gerechtfertigt. Sie kann aber gemacht werden, da für eine merkliche Mehrfachverlagerung mindestens ein Energieübertrag von der Größe $2 T_d$ nötig ist. Hohe Energieüberträge sind aber gemäß dem Streuquerschnitt (vergl. Gleichung (3)) viel weniger wahrscheinlich, so daß eine Richtungsabhängigkeit der Mehrfachverlagerung nur wenig ins Gewicht fallen wird.

Der Beitrag der Mehrfachverlagerungen wurde von C. Lehmann /17/ eingehend behandelt. Allgemein kann das Modell von Kinchin und Pease /18/ für ein "hartes Kugel" - Potential mit

$$n(T) = \begin{cases} 1 & \text{für } T \leq 2T_{d,eff} \\ T/2T_{d,eff} & \text{für } T > 2T_{d,eff} \end{cases} \quad (19)$$

als gute Näherung angesehen werden. Änderungen des Wechselwirkungspotentials (z.B. vorwärtsstreuendes Potential) und des Verlaufs der Verlagerungswahrscheinlichkeit ändern nach Lehmann den Verlauf von $n(T)$ nur geringfügig.

Bei der Anwendung von Gleichung (19) muß berücksichtigt werden, daß $T_{d,eff}$ dem Schwellenwert einer "effektiven" Stufe der Verlagerungswahrscheinlichkeit P entspricht. Nach C. Lehmann entspricht dieser Wert $T_{d,eff}$ in guter Näherung jener Energie, bei welcher die über alle Gitterrichtungen gemittelte Verlagerungswahrscheinlichkeit $P(T)$ den Wert $1/2$ annimmt.

Eine eingehende Untersuchung von J. Wurm et al. /19/ an polykristallinem Aluminium ergab z.B. für $T_{d,eff}$ den Wert 62 eV,

während die minimale Schwelle in Aluminium ca. 19 eV beträgt. Ähnlich ergaben Computerrechnungen von C. Erginsoy et al. /20/ für Eisen einen Wert von $T_{d,eff}$ zwischen 50 und 55 eV, was ebenfalls dem Dreifachen der minimalen Schwelle in Eisen (ca. 18 eV) entspricht. Es zeigt sich also übereinstimmend, daß der Beitrag der Mehrfachverlagerung erst bei Energieüberträgen vom sechsfachen Wert der minimalen Schwellenenergie merklich wird.

2.5 Die unterschwellige Schädigung

Gleichung (10) beschreibt die Schädigung im idealen, ungestörten Kristall. Wie aber z.B. Messungen von Bauer und Sosin /21/ und Überlegungen von K. Kamada et al. /22/ gezeigt haben, können substitutionelle und interstitielle Fremdatome, sowie evtl. auch Versetzungen Abweichungen von dieser idealen Schädigung verursachen. Diese Abweichungen machen sich besonders bei niederen Elektronenenergien bemerkbar und erschweren so die Bestimmung der Schwellenenergie durch Extrapolation des Verlagerungsquerschnitts auf Null.

Der physikalische Mechanismus, über den Fremdatome und Versetzungen zur Schädigung beitragen, ist noch ungeklärt. Eine mögliche Vorstellung ist, daß in der Nähe einer Störung die Gitterkräfte so geändert werden, daß die Verlagerungsenergie verringert wird. Das Abstoppen von langreichweitigen Stoßfolgen an Fremdatomen /vergl. 21/, unter nachfolgender Erzeugung eines Frenkelpaares könnte den Einfluß der Fremdatome auf die Defektproduktion noch wesentlich erhöhen.

Da Tantal häufig interstitiell gelöste, leichte Fremdatome (Kohlenstoff, Stickstoff, Sauerstoff) enthält, soll hier noch erwähnt werden, daß durch indirekte Stöße, d.h. Stöße Elektron → Fremdatom → Tantalatom u.U. auf die Tantalatome (Masse M) eine um einen Faktor $(M+M')^2/4M \cdot M'$ höhere Energie übertragen werden kann als beim direkten Stoß. Dabei ist M' die Masse des leichten Zwischengitteratoms. Für Stickstoff und Sauerstoff beträgt der Faktor ca. 3.5. Wegen der geringen Konzentration an leichten Fremdatomen in den Proben ($\ll 5 \cdot 10^{-5}$) und der Kleinheit des Wirkungsquerschnitts (geringe Kernladung), sollte der Beitrag solcher indirekter Stöße zur Defektproduktion für Energien oberhalb der Schwelle

um mindestens sechs Größenordnungen kleiner sein als der Beitrag der direkten Stöße. So wurde in Germanium, wo der Anteil der unterschwelliger Schädigung ca. 10^{-6} ausmacht /23/, die Umlagerung von gelöstem Wasserstoff als Ursache festgestellt /24/. Dabei konnte auch gezeigt werden, daß sich der Aufbau unterschwellig erzeugter Defekte von dem der oberhalb erzeugten stark unterscheidet /23/ und daß die unterschwellige Schädigung nicht richtungsabhängig ist /24/.

Demgegenüber wird bei Metallen (Kupfer, Gold, vergl. /35/) ein unterschwelliger Anteil von ca. 10^{-3} beobachtet. Um diesen relativ großen Beitrag der leichten Fremdatome und Versetzungen erklären zu können, müssen langreichweitige Stoßfolgen in Betracht gezogen werden (vergleiche auch /25/ und /26/).

3. Bisherige Ergebnisse zur Anisotropie der Schädigung in Metallen

3.1 Experimentell

Am eingehendsten wurde bisher die Richtungsabhängigkeit der Schädigung in Silizium untersucht /27/. Dabei wurde auch erstmals bei Bestrahlung eines Einkristalls durch Drehen des Kristalls die Bestrahlungsrichtung verändert /28/ und damit die Unsicherheit der Absolutbestimmung der Schädigungsrate ausgeschaltet. Eine Interpretation der so gemessenen Energieabhängigkeit der Schädigungsraten in verschiedenen Richtungen durch eine Richtungsabhängigkeit der Schwellenenergie findet sich in /29/ und /30/ und verbessert in /31/. Weitere Messungen an Halbleitern (Germanium /23/, Graphit /32, 33/ und Indiumantimonid /34/) sind bei A.Sosin und W.Bauer /35/ zusammengefaßt.

Hier sollen nur die Messungen an Metallen behandelt werden.

Die einzigen Metalle, bei denen die Anisotropie der Strahlenschädigung bisher experimentell untersucht wurde, sind Kupfer, Gold und Eisen. Alle Messungen wurden nach Elektronenbestrahlung bei tiefen Temperaturen durchgeführt. Die Meßmethode war in allen Fällen dieselbe: Es wurden dünne Einkristallfolien hergestellt, deren Flächennormalen jeweils einer der Hauptrichtungen entsprachen. Diese Proben wurden bei verschiedenen Energien mit einem möglichst parallelen Elektronenstrahl bestrahlt und über den elektrischen Restwiderstand die Schädigungsrate in Abhängigkeit von der Bestrahlungsenergie gemessen.

Messungen an Kupfer-Einkristallen mit (100)-, (110)- und (111)-Orientierung wurden von A.Sosin und K.Garr /16/ durchgeführt; von K.Kamada et al. /22/ nur an Einkristallen mit (110)- und (111)-Orientierung. Kamada et al. erhielten für ihre beiden Proben einen merklichen Unterschied in den Schädigungsraten. Da die Proben allerdings mit ca. 100 μm sehr dick waren und die Orientierungen nicht genau den Hauptrichtungen entsprachen (Abweichungen von fast 10°), soll nicht weiter auf diese Arbeit eingegangen werden. Sosin und Garr ihrerseits verwendeten Proben von 5 bis 20 μm Dicke. Aber sogar da zeigt sich noch ein starker Einfluß der Probendicke auf die Schädigungsrate (vergl. Abb.9: A und B entsprechen Proben verschiedener Dicke). Die Unterschiede in der Schädigung zwischen den einzelnen Proben verschiedener Orien-

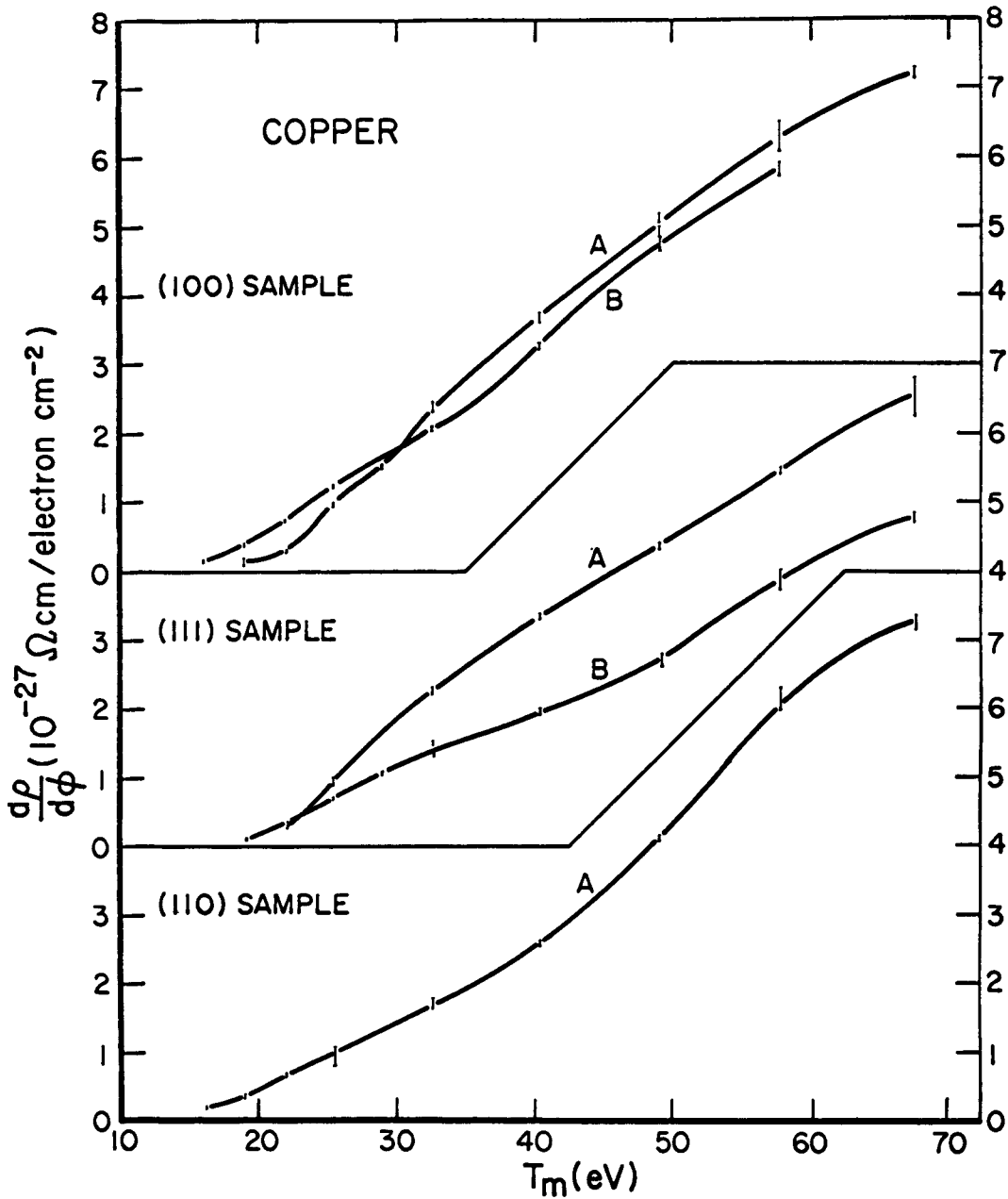


Abb. 9 Schädigungsraten in Kupfer nach Sosin und Garr. (B entspricht Messungen an abgedünnten Proben.)

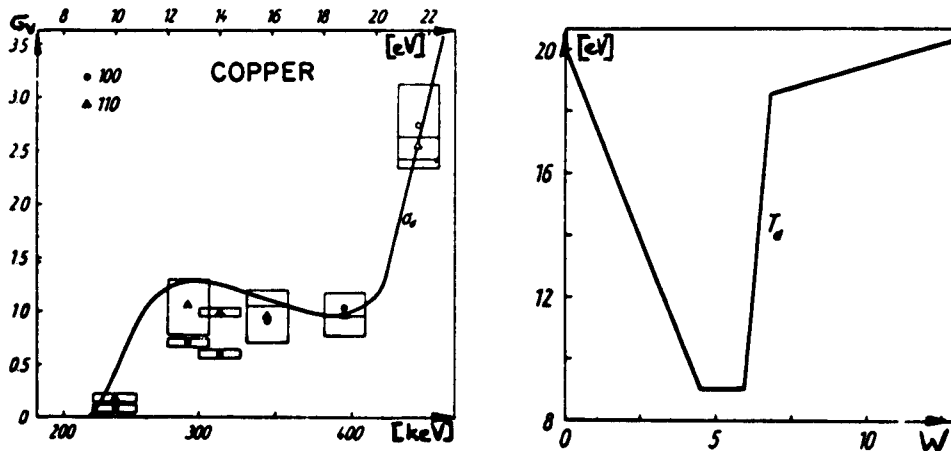


Abb. 10 Verlagerungsquerschnitt bei niederen Energien.

Abb. 11 Schwellenenergieprofil nach G. Duesing.

tierung waren demgegenüber nur wenig ausgeprägt (s. Abb. 9). Dabei entstand eine Unsicherheit in der Bestimmung der Schädigungsraten dadurch, daß die Dicke über die Probenfläche variierte. Bei sehr kleinen Bestrahlungsenergien ergab sich für die (100)- und die (110)-Richtung noch ein ausgeprägtes Plateau (s. Abb.10) in der Energieabhängigkeit der Schädigung. Es wird von Kamada et al. /22/ und von Bauer und Sosin /36/ als unterschwelliger Effekt (Wechselwirkung von Fokussonen mit Gitterstörungen) erklärt, während Wollenberger und Wurm /37/ ein aus Überlegungen von G. Duesing /38/ zur Fokussierung abgeleitetes Schwellenenergieprofil mit Maximum in der (110)-Richtung und einem ausgeprägten Minimum in 5° Abstand von dieser Richtung (Abb.11) dafür verantwortlich machen.

Gold wurde in Richtung der drei Hauptachsen von Bauer und Sosin /35/ bestrahlt. Es ergab sich keine merkliche Richtungsabhängigkeit der Schädigung. Die Tatsache, daß nahe der Schwelle die Schädigung in (110)-Richtung wesentlich über der in den anderen Richtungen lag, wurde damit erklärt, daß fokussierende Stoßfolgen zur Erzeugung unterschwelliger Defekte besonders leicht in der dicht gepackten (110)-Richtung ablaufen.

Eisen (bcc) wurde von J.N.Lomer und M.Pepper /39, 40/ untersucht, wobei $15\mu\text{m}$ dicke (111)- und $25\mu\text{m}$ dicke (100)-Eisen-Einkristalle verwendet wurden. Deren Schädigungsrate konnte ebenso wie bei den oben erwähnten Goldmessungen wegen Unsicherheiten in der Proben- bzw. Bestrahlungsgeometrie nur normiert angegeben werden. Das schränkt einen Vergleich zwischen den einzelnen Bestrahlungsrichtungen erheblich ein, so daß der Versuch einer Anpassung an die Computereperimente von Erginsoy et al. /s.u./ sehr unsicher war. Immerhin zeigten sich erhebliche Unterschiede im Energieverlauf der Schädigung für beide Orientierungen.

Um aus dem Verlauf der Schädigungsrate auf die Richtungsabhängigkeit der Schwellenenergie zu schließen, kann man zunächst versuchen für verschiedene Bestrahlungsrichtungen auf Schädigungsrate Null zu extrapolieren. Diese Extrapolation wird aber durch einen unkontrollierbaren Untergrund unsicher, der von den bisher weitgehend ungeklärten unterschwelligen Prozessen herührt und wesentlich vom Verunreinigungsgehalt der Proben abhängt.

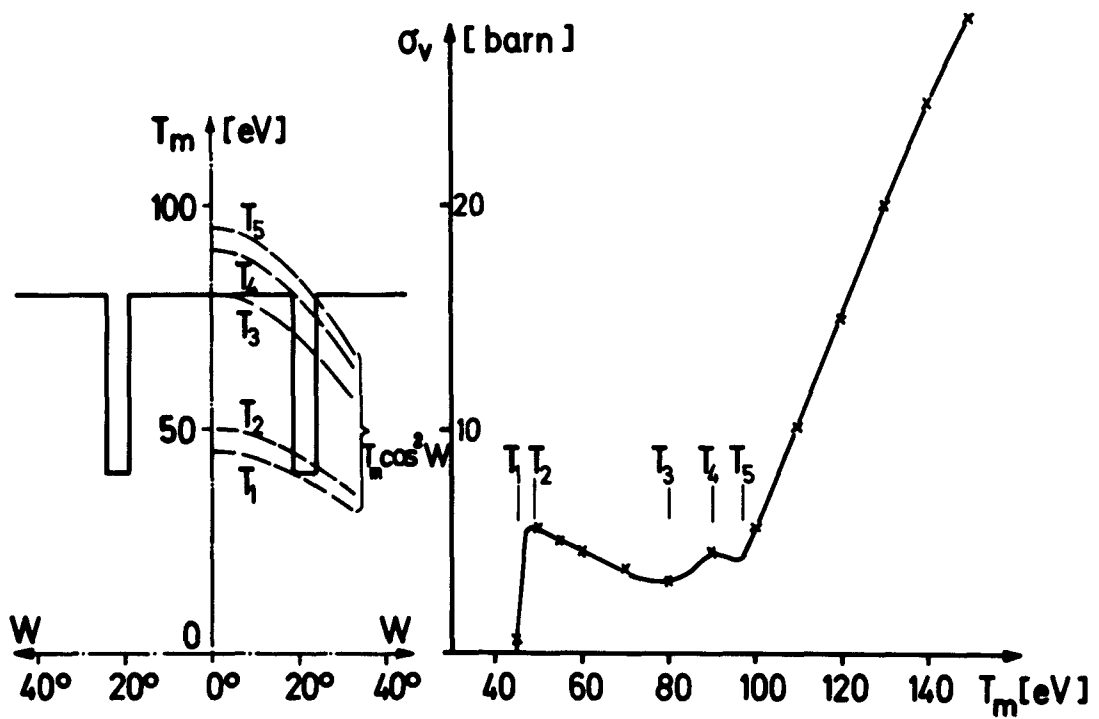
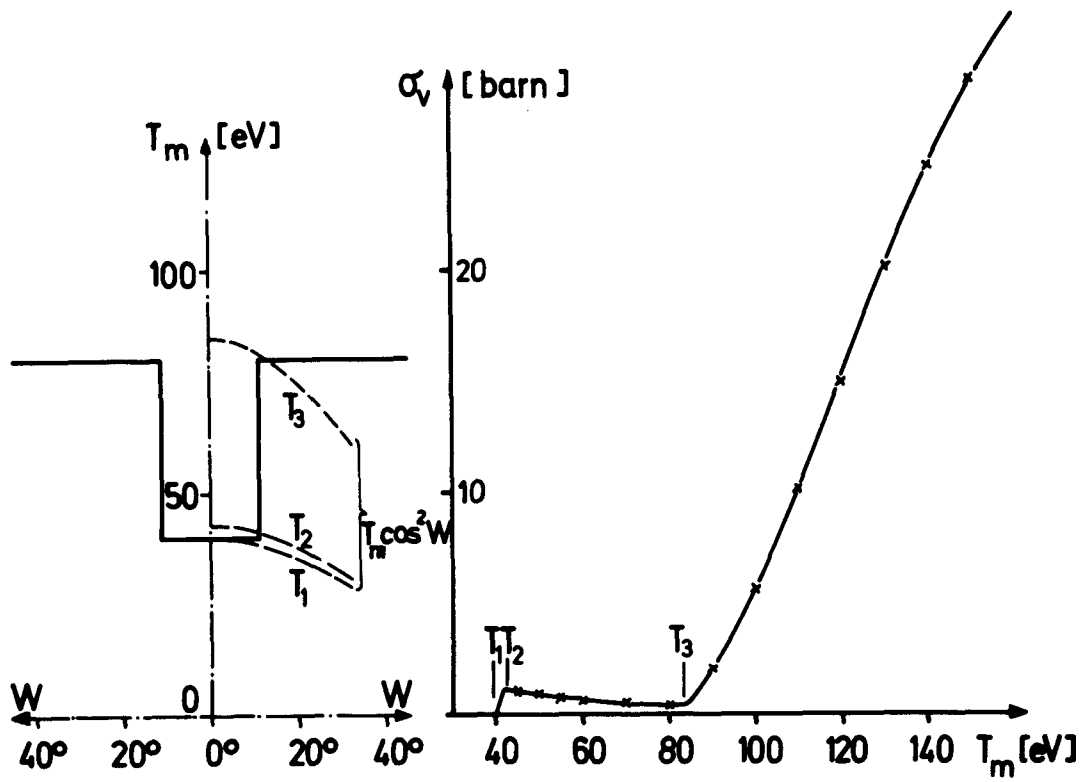


Abb. 12 und 13 Berechnung des Verlagerungsquerschnitts für zwei vereinfachte Schwellenenergie-Profile

Andererseits wird in sehr reinen Proben der geforderten geringen Dicke (um die Strahlaufweitung klein zu halten), eine Size-Effekt-Korrektur nötig. Diese Korrektur berücksichtigt den Einfluß der Streuung von Leitungselektronen an der Probenoberfläche auf den elektrischen Widerstand. In der Nähe der Schwelle ist die Schädigungsrate aber kleiner als die Unsicherheit dieser Korrektur und wegen der geringen Schädigungsraten ändern sich diese Größenverhältnisse auch innerhalb realisierbarer Bestrahlungszeiten nur wenig. Zudem muß berücksichtigt werden, daß man bei der Extrapolation i.a. nicht den Schwellenenergiewert in der bestrahlten Hauptrichtung erhält. Dies soll durch Rechnungen an vereinfachten Schwellenenergieprofilen erläutert werden:

a) Die Schwellenenergie hat in der bestrahlten Hauptrichtung ein Minimum (Abb.12) : Dann steigt die Schädigungsrate für $T_1 < T_m < T_2$ etwa linear an, erreicht bei $T_m = T_2$ ein Maximum und fällt bis T_3 wegen der Abnahme des Wirkungsquerschnitts (etwa wie $1/T_m$) wieder ab. Ab $T_m > T_3$ beginnt sie wieder zu steigen. Falls der "unterschwellige" Untergrund relativ klein bleibt, kann man durch Extrapolation direkt die Schwellenenergie in Bestrahlungsrichtung (T_1) erhalten.

b) Die Schwellenenergie hat in der bestrahlten Hauptrichtung ein Maximum (Abb.13) : Dann steigt die Schädigungsrate für $T_m > T_1$ rasch an und erreicht ebenfalls bei $T_m = T_2$ ein Maximum. Der nachfolgende Rückgang der Schädigungsrate wird zwischen T_3 und T_4 in etwa kompensiert und erst für $T_m > T_5$ erfolgt wieder ein Anstieg. In diesem Fall entspricht der extrapolierte Wert T_1 nicht der Schwellenenergie in Bestrahlungsrichtung (T_3). Allgemein sieht man also, daß die tatsächliche Schwellenenergie T_{d0} in einer untersuchten Kristallrichtung nur dann durch Extrapolation der Schädigungsrate gefunden werden kann, wenn für alle anderen Richtungen gilt:

$$T_d(W) \geq T_{d0} \cos^2 W \quad (20)$$

immer vorausgesetzt, daß die Strahlaufweitung vernachlässigbar bleibt.

Rechnungen dieser Art für realistischere Profile der Schwellenenergie wurden z.B. von H.Wollenberger /37/ und W.E.Gettys /41/ durchgeführt.

Um also mehr Aussagen über die Richtungsabhängigkeit der

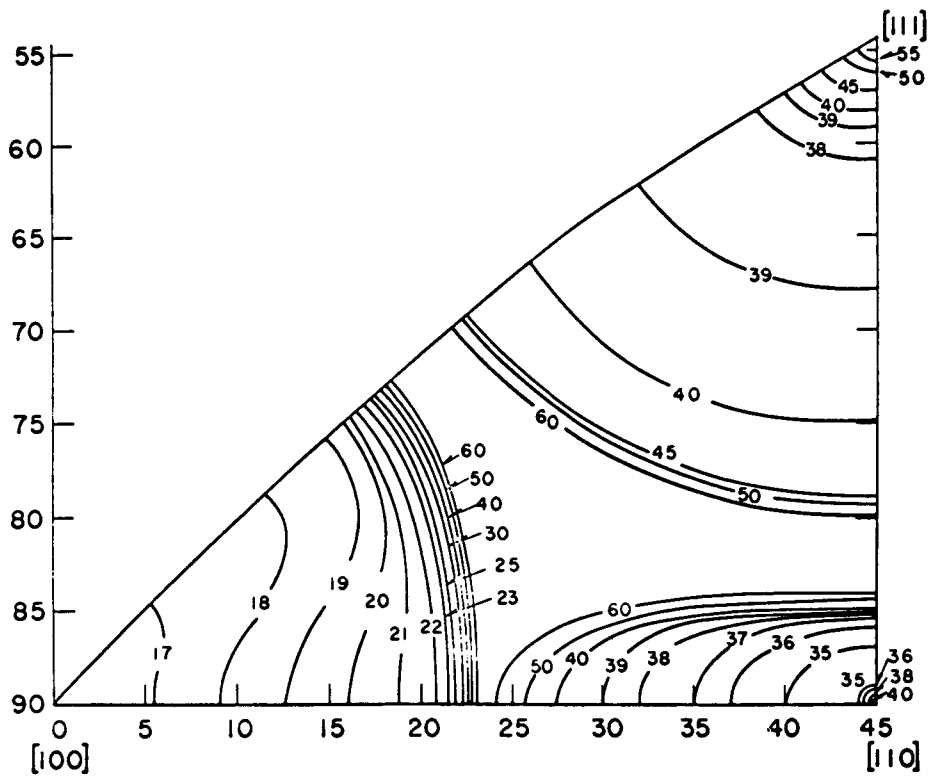


Abb. 14 Schwellenenergieprofil für bcc-Eisen nach C.Erginsoy

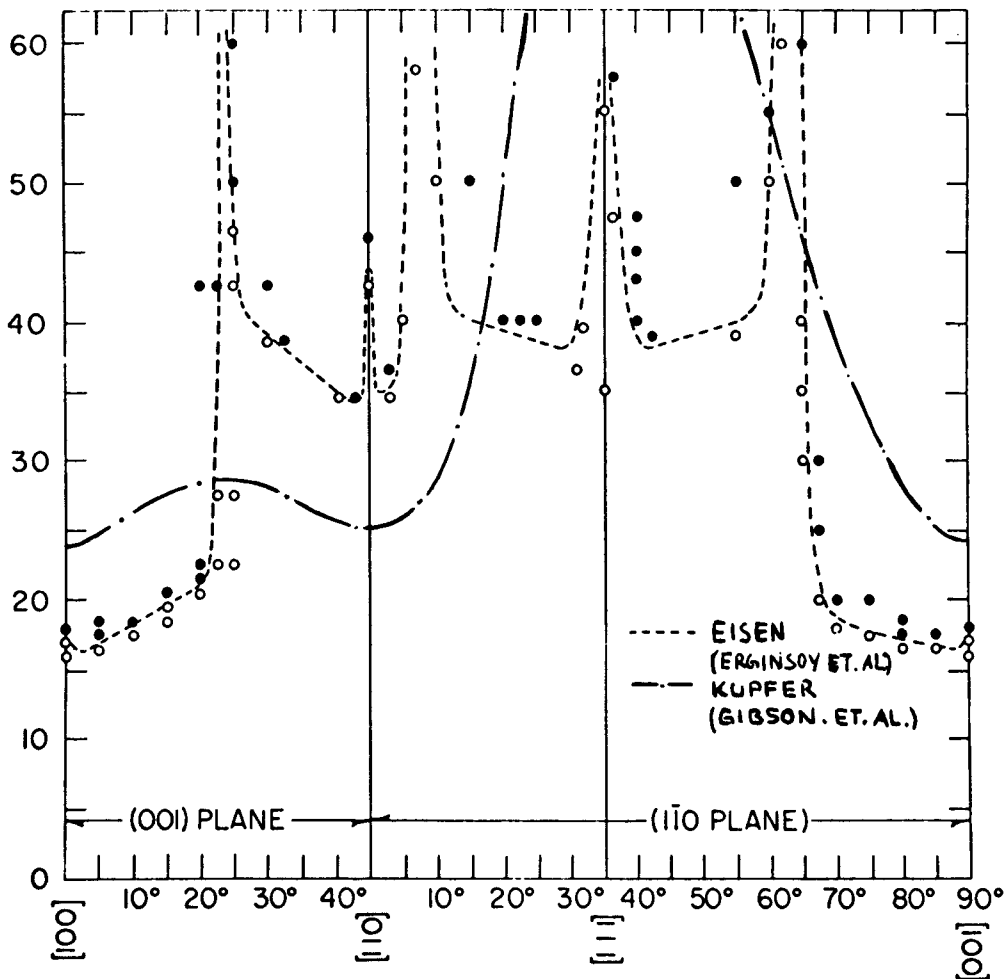


Abb. 15 Verlauf der Schwellenenergie entlang der Grenzen des Orientierungsdreiecks für Eisen und Kupfer

Schwellenenergie zu erhalten, ist man gezwungen auch den Verlauf der Schädigungsrate bei höheren Energien zu verwenden und zu versuchen, ein Schwellenenergieprofil an Messungen bei verschiedenen Bestrahlungsrichtungen anzupassen. Der Vergleich der verschiedenen Richtungen wird aber erheblich dadurch gestört, daß in den bisherigen Messungen für jede Richtung eine eigene Probe verwendet wurde. Dadurch ergibt sich eine Unsicherheit im Geometriefaktor der Proben und in der Strahlstrombestimmung, die es meist nur zuläßt (s.o.: Messungen an Gold und Eisen) normierte Werte für die Schädigungsraten anzugeben, sodaß im allgemeinen nicht einmal eine Angabe der Größenverhältnisse zwischen den einzelnen Richtungen möglich ist.

3.2 Theoretisch

Die theoretischen Untersuchungen zur Anisotropie der Schädigung in Metallen lassen sich in zwei Gruppen unterteilen:

- a) Computereperimente zur Bestimmung des Schwellenenergieprofils
- b) Anschauliche und analytische Untersuchung von Stoßfolgen.

Zu a) Mit Hilfe von Großrechenanlagen lassen sich unter vereinfachenden Annahmen die Stoßprozesse im Gitter simulieren. Zunächst werden dabei die Bindungskräfte zwischen den Metallionen näherungsweise in unabhängige Zweikörperkräfte zerlegt, die aus einem Potentialansatz abgeleitet werden. Dann ermittelt man durch statische Berechnungen, welche Defektkonfigurationen stabil sind. Schließlich gibt man einem Gitteratom Stoßimpulse verschiedener Höhe (entspr. Energie T) und Richtung (θ, ϕ) und verfolgt durch Integration der Bewegungsgleichungen, ob stabile Defektkonfigurationen entstehen. Auf diese Weise bekommt man die Verlagerungswahrscheinlichkeit $P(\theta, \phi, T)$. Die Energie, bei der P von Null auf Eins ansteigt, legt die Schwellenenergie $T_d(\theta, \phi)$ fest.

Solche Untersuchungen wurden bisher von J.B.Gibson /42/ für Kupfer, C.Erginsoy /43/ für Eisen und A.Anderman /44/ für Gold durchgeführt. Im wesentlichen ergaben die Rechnungen von Erginsoy, daß in ziemlich scharf begrenzten Bereichen um die drei Hauptrichtungen die Schwellenenergien jeweils weitgehend konstant waren, während der Zwischenbereich eine wesentlich höhere Schwelle besaß (Abb.14 und 15). Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu Kupfer, wo sich ein glatter Verlauf des Schwellwertprofils ergab (s.Abb.15).

Ein schwacher Punkt dieser Rechnungen ist die Wahl des Potentials. Wie die Untersuchungen von A. Anderman /44/ ergaben, ist sowohl die Stabilität einzelner Defektkonfigurationen als auch der Ablauf der Stoßprozesse stark vom zugrundegelegten Wechselwirkungspotential abhängig (vergl. auch /45/). Potentialansätze, die aus der Druckabhängigkeit der elastischen Konstanten abgeleitet werden /46/, sind zur Beschreibung von Stoßprozessen kaum geeignet, da hier vorwiegend der hochenergetische Anteil ($> 10\text{eV}$) des Potentials ausschlaggebend wird. Andererseits hängt die Stabilität der Defekte empfindlich vom Potentialverlauf bei kleinen Energien, d. h. vom Verlauf in der Umgebung des Gleichgewichtsabstandes ab.

Für den hochenergetischen Teil wird ein abstoßendes Born-Mayer-Potential:

$$V(r) = A e^{-(r/a)} \quad (21)$$

als guter Ansatz betrachtet. Um einen endlichen Kristallbereich stabil zu halten, muß bei alleiniger Verwendung dieses Potentials die abstoßende Wechselwirkung durch äußere Druckkräfte kompensiert werden.

Aus dem oben gesagten folgt, daß eine Festlegung der Potentialparameter (A, a) praktisch nur aus Daten der Strahlenschädigung über Testrechnungen möglich ist. Die entsprechenden Messungen (Kapitel 3.1) ergeben aber nur wenige gesicherte Werte (z.B.: Wert und Richtung der minimalen Schwellenenergie), so daß die daraus abgeleiteten Potentialparameter mit erheblichen Unsicherheiten belastet sind. So ging z.B. C. Erginsoy /43/ für Eisen (bcc) von der nicht gerechtfertigten Annahme aus, daß die minimale Schwelle wie bei fcc-Metallen in der (100)-Richtung liegen sollte.

Weitere unsichere Punkte dieser Computerrechnungen sind die Annahme von Zweikörperkräften und die Vernachlässigung von Gitterschwingungen. Inwieweit diese beiden Annahmen die Rechnungen über den Ablauf der Stoßprozesse bzw. die Stabilität der Defekte beeinflussen, wurde noch nicht abgeschätzt.

Zu b) Die Computer-"Experimente" hatten gezeigt, welche große Bedeutung Stoßfolgen für die Defektproduktion haben. Daher wurden von den Gruppen von M.W. Thompson (vergl. /47/) und G. Leibfried (vergl. /48/) die Voraussetzungen und der

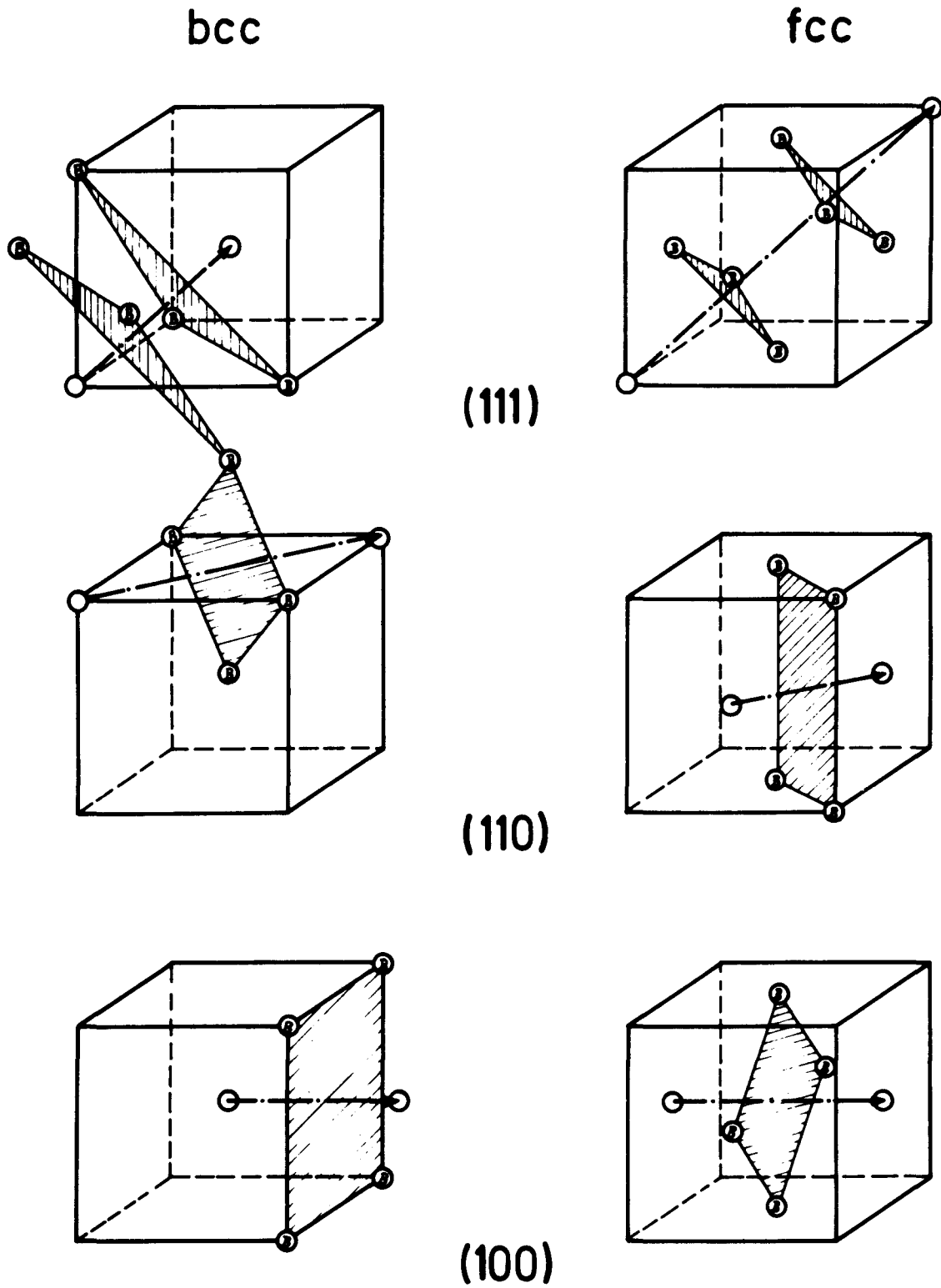


Abb. 16 Lage der Barrieren für Stöße längs der drei Hauptrichtungen im bcc- und fcc- Gitter

Ablauf von fokussierenden Stoßfolgen rechnerisch untersucht, wobei aber ebenfalls die Wahl des Potentials und damit zusammenhängend die Annahme von reinen Zweikörperkräften eine entscheidende Unsicherheit darstellten.

Stark vereinfachte, anschauliche Überlegungen zur Bestimmung der Schwellenenergiewerte in den Hauptrichtungen stellten schließlich A. Sosin /49/ sowie P. und A. Lucasson /50/ und Andersen und Sigmund /51/ an. Dabei wurde angenommen, daß die Verlagerungsprozesse entlang einer Hauptrichtung von Größe und Lage der Atomringe (Barrieren) um diese Hauptrichtung entscheidend beeinflußt werden. So sollten z.B. im fcc-Gitter die Stoßfolgen in (110)-Richtung wegen der geringeren Packung der Barrierenatome (Viererring mit Abstand $L = a_0 \sqrt{3/8}$) leichter ablaufen als in (111)-Richtung (Dreiring mit Abstand $L = a_0 \sqrt{1/6}$); vergleiche Abbildung 16.

Zur Vervollständigung der Angaben von A. Sosin sollen die wichtigsten Größen der Barrieren für die drei Hauptrichtungen im bcc- und fcc-Gitter kurz zusammengefaßt werden. Dabei stellt D den Atomabstand entlang der Stoßrichtung dar, L den Abstand der Barrierenatome (B) von der Stoßrichtung und F_B die Barrierenfläche (Abb. 17).

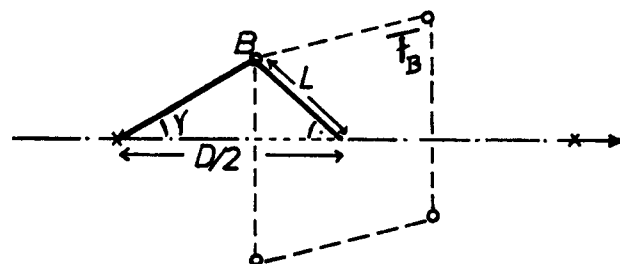


Abb 17

Alle Werte sind auch normiert (N) auf die dichtest gepackte Richtung angegeben. Die Zahl n der Barrierenatome beträgt für die (100)- und (110)-Richtung jeweils vier, während die (111)-Richtung von zwei Barrieren aus je drei Atomen umgeben ist.

Tabelle I: bcc

	D/a_0	N	L/a_0	N	F_B/a_0^2	N	$\gamma = \text{artg}(2 L/D)$
111	$\sqrt{3}/2$	1	$\sqrt{2}/\sqrt{3}$	1	$2x\sqrt{3}/2$	1	$3x55^\circ, 3x70^\circ$
100	1	1.15	$\sqrt{2}/2$	0.86	1	1.15	$4x55^\circ$
110	$\sqrt{2}$	1.63	$2x\frac{1}{2}, 2x\sqrt{2}/2$	0.61-0.86	$\sqrt{2}/2$	0.81	$2x35^\circ, 2x45^\circ$

Tabelle II: fcc

	D/a ₀	N	L/a ₀	N	F _B /a ₀ ²	N	γ = arctg(2 L/D)
110	√2/2	1	√3/√8	1	√2/2	1	4 x 60 °
100	1	1.41	1/2	0.81	1/2	0.71	4 x 45 °
111	√3	2.45	1/√6	0.66	2x√3/8	0.31	3 x 35 °, 3 x 19 °

Qualitativ sieht man, daß für beide Gittertypen die Wirkung der Barrieren mit abnehmender Packungsdichte entlang der Richtungen größer wird.

Dieses Modell wurde von Andersen und Sigmund /51/ noch durch die Annahme erweitert, daß in den dichtest gepackten Hauptrichtungen die für einen Ersetzungsstoß nötige Energie

$$T_r = \frac{1}{2} A e^{-D/2a} \quad (22)$$

(vergleiche Lehmann und Leibfried /52/) die Schwellenenergie bestimmt (vergleiche P. und A. Lucasson /50/):

$$T_d = c_r \cdot T_r \quad (23)$$

In den anderen Richtungen soll die zur Durchstoßung der Barriere nötige Energie

$$T_b = n \cdot A \cdot e^{-L/a} \quad (24)$$

allein ausschlaggebend sein (vergleiche G. Leibfried /53/), so daß gilt:

$$T_d = c_b \cdot T_b \quad (25)$$

Die Proportionalitätskonstanten c_r und c_b wurden für Kupfer (fcc) der Arbeit von Gibson et al. (s.o.) entnommen und über die experimentell bestimmten Schwellenenergien in (110)- und (100)-Richtung die Parameter (A,a) des Born-Mayer-Ansatzes in Gleichung (22) und (24) bestimmt.

Schließlich versuchten Andersen und Sigmund noch eine Extrapolation der Potentialparameter für andere Metalle. Dabei wurde in Anlehnung an ein Thomas-Fermi-Dirac-Potential der Ansatz gemacht:

$$a \approx \text{const} , \quad A \text{ prop. } Z^{1.5 \dots 2} \quad (26)$$

Beim Vergleich mit experimentellen Schwellenenergien für Gold und Silber zeigte sich die beste Übereinstimmung für

$$a \approx 0.219(\text{Å}) \quad A \approx 8.2 \cdot \left(\frac{Z}{29}\right)^{3/2} \text{ [keV]} \quad (27)$$

Damit wurden dann über die Proportionalitätsfaktoren c_r und c_b Schwellenenergien für andere Metalle hergeleitet.

$$\text{z.B. für Tantal: } T_d(111) \approx 61 \text{ eV} \quad T_d(100) \approx 25 \text{ eV} \quad (28)$$

Eine Ableitung dieser Art stellt selbstverständlich eine überstarke Vereinfachung dar: Zunächst durch die Annahme der Proportionalität in den Gleichungen (23) und (25), wobei schon die Tatsache, daß c_r und c_b wesentlich größer als eins sind, zeigt, daß die tatsächlichen Verhältnisse erheblich komplizierter sind. Weiter gehen die bereits erwähnten Unsicherheiten der Computerrechnungen ein, sowie die der experimentellen Schwellenenergiebestimmung. Die Extrapolation auf andere Elemente schließlich, die implizit die Annahme der Konstanz von c_r und c_b innerhalb eines Gittertyps enthält, wird wegen des groben Ansatzes von Gleichung (26) für Metalle mit wesentlich größerer oder kleinerer Ordnungszahl als Kupfer rasch unsicher.

Desungeachtet kann man sagen, daß bei Stößen in dichtgepackte Richtungen, also vor allem entlang der Hauptrichtungen, zur Defekterzeugung Ersetzungsstöße nötig sind; während die direkten Verlagerungen, bei denen das primär angestoßene Atom selbst das Zwischengitteratom bildet, bevorzugt außerhalb der Hauptrichtungen auftreten sollten. Aus dem Verlauf der Schwellenenergie $T_d(\theta, \phi)$, vor allem daraus, ob die Schwellenenergie in den Hauptrichtungen oder außerhalb derselben groß ist, kann man dann schließen, ob direkte Verlagerungen oder Ersetzungsstöße bei der Defekterzeugung vorherrschen.

4. Zum Experiment

4.1 Die Proben

Es lagen 2.5 cm breite, gewalzte Tantalfolien der Firma A.D. Mackay Inc., New York, vor. Sie waren ca. 15 μm dick und hatten eine Reinheit von 99.995 %. Das Restwiderstandsverhältnis betrug bei der Lieferung:

$$\frac{R(273 \text{ }^\circ\text{K}) - R(4.5 \text{ }^\circ\text{K})}{R(4.5 \text{ }^\circ\text{K})} \approx 60$$

bedingt vor allem durch gelöste Gase und Kohlenstoff.

Zur Reinigung (vergleiche /54/) wurden 15 cm lange Stücke der Folie ca. 10 Minuten lang bei 2200 $^\circ\text{C}$ in einer $2 \cdot 10^{-5}$ Torr Sauerstoffatmosphäre geglüht, um den Kohlenstoffgehalt zu verringern. Anschließend wurde die Folie bei 10^{-8} Torr und 2500 $^\circ\text{C}$ einige Minuten entgast. Wegen der starken Aufheizung der UHV-Anlage durch die großflächigen Proben konnten keine niederen Drucke erreicht werden.

Anschließend wurde mit einer Laue-Kamera die Kristallorientierung bestimmt. Es ergaben sich dabei große Bereiche mit (110)-Ebenen in der Folienebene, die z.T. aus einem einzigen Korn oder aus mehreren Körnern mit geringer gegenseitiger Verkipfung bestanden (Abb. 18a). Die Auflösung der Röntgenanlage erlaubte es, die Verkipfung einzelner Körner genau festzustellen. Es wurden nur Folienteile verwendet, bei denen die Winkelabweichungen unter 3 $^\circ$ blieben. Aus diesen Folienteilen wurden dann schmale Streifen geschnitten, deren Längsachsen mit einer vorbestimmten Kristallrichtung übereinstimmten. Vorzüglich wurden die (100)- und die (110)-Richtung als Achsen verwendet (typische Röntgenbilder siehe Abb. 18b und 18c).

Zwei solche Proben mit verschiedenen Kristallrichtungen als Achse wurden dann parallel und möglichst eben auf ein Rähmchen aus Aluminiumoxid geschweißt. Potentialabgriffe aus 50 μm - Tantaldraht wurden angebracht und der Restwiderstand gemessen. Dazu wurde der Dampfdruck des flüssigen Heliums auf 1.4 atm. erhöht, um über den Sprungpunkt von Tantal zu kommen. Der Geometriefaktor wurde aus Messungen am Eispunkt bestimmt, mit $\varrho(273 \text{ }^\circ\text{K}) = 12.22 \mu\Omega \text{ cm}$.

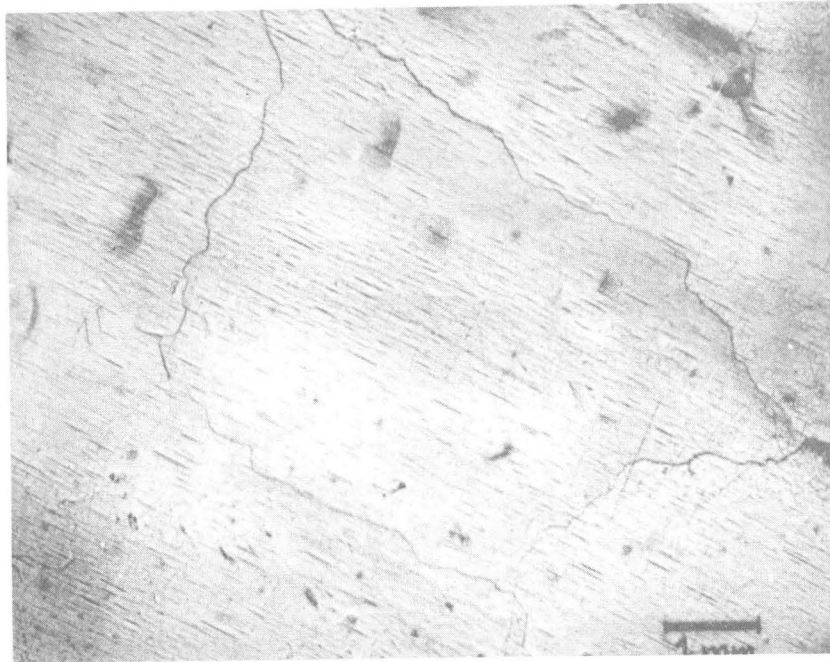


Abb. 18a Mosaikstruktur der Tantalproben

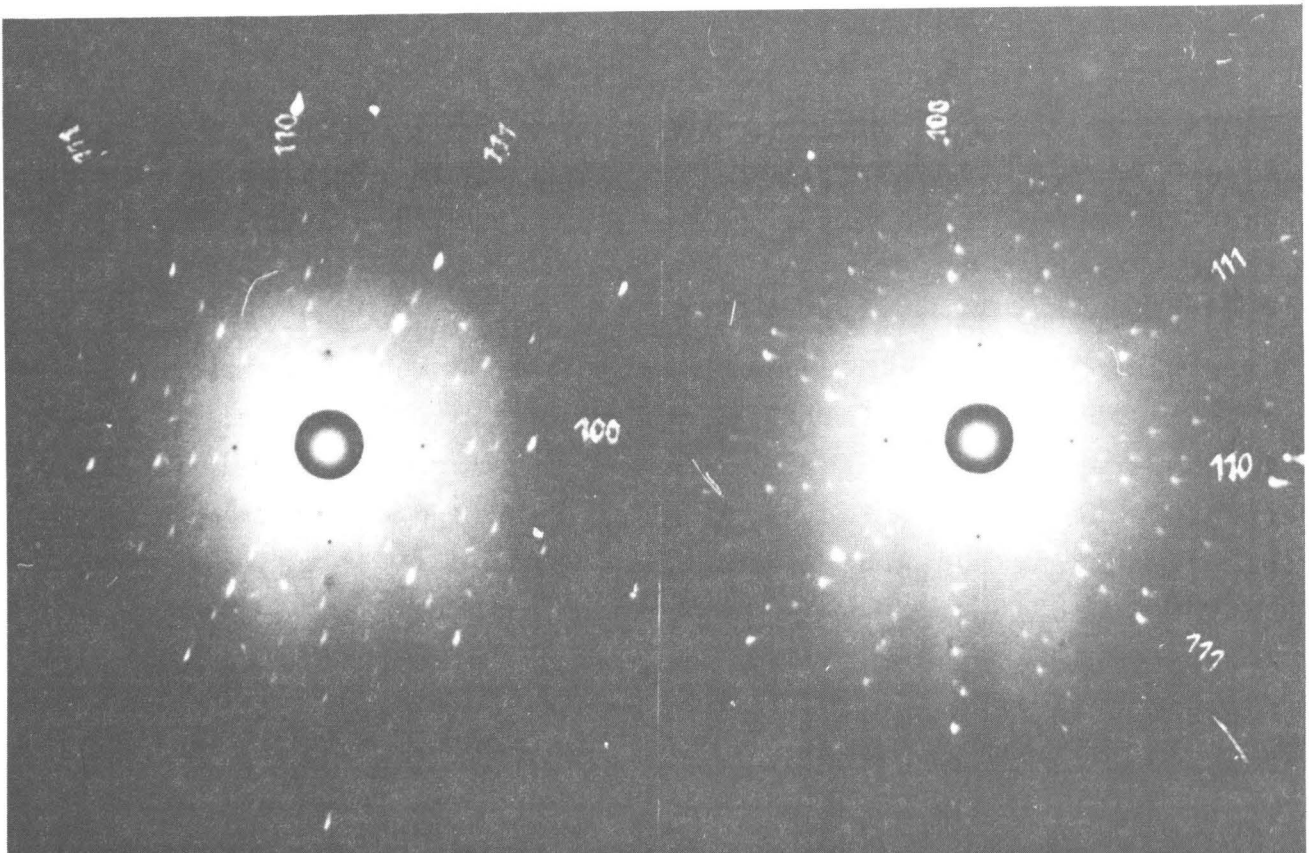


Abb. 18b/c Laue - Aufnahmen der Tantalfolien
(In Abb.18c ist die Verkipfung zweier
Körner gegeneinander sichtbar.)

Als Restwiderstandsverhältnis ergaben sich nun Werte zwischen 250 und 600. Für diese relativ niederen Werte (vergleiche /54/) sind der hohe Entgasungsdruck (s.o.) und die mechanische Beanspruchung beim Schneiden der Probe verantwortlich. Auf den Einfluß von Struktur und Reinheit der Proben auf die Meßergebnisse wird in Kapitel 5.4 eingegangen.

4.2 Der Kryostat

Der Probenhalter wurde in einen Bestrahlungskryostaten eingebracht. Dieser bestand aus einem Vakuummantel, in dem die Bestrahlungskammer mit dem Probenhalter, um eine vertikale Achse drehbar, aufgehängt war (vergleiche Abb. 19). Die Fenster der Probenkammer bestanden aus 12.5 μm Edelstahl, und das Eintrittsfenster war so groß, daß die Probenkammer bis zu 50 ° nach beiden Seiten gedreht werden konnte, ohne daß der Fenster- rand den Strahl begrenzte.

Das Drehen der Probenkammer besorgte ein stark untersetzter Gleichstrommotor, wobei die jeweilige Stellung über ein mitlaufendes Drehpotentiometer gemessen wurde. Ausgehend von der Nullstellung (Probenebene senkrecht zum Strahl) wurde in Winkelschritten von 5 ° bis zu einem Winkel von +45 ° gedreht. Bei jeder dieser Winkelstellungen wurde zehn Minuten (bei niederen Energien z.T. länger) bestrahlt und anschließend die Schädigung durch Messen des Restwiderstandes bestimmt. Bei +45 ° wurde die Drehrichtung umgekehrt und bis -45 ° in gleicher Art weitergemessen, dort wieder die Drehrichtung umgekehrt und ebenso bis zur Ausgangsstellung zurückgemessen. Dieser Zyklus wurde bei jeder Messung mindestens zweimal durchlaufen. Für Reproduzierbarkeitsmessungen wurden die Winkelschritte z.T. größer gewählt.

Die Bestrahlung wurde an der Tieftemperatur-Elektronenbestrahlungsanlage der Kernforschungsanlage Jülich /55/ durchgeführt. Dabei wurde ein elektronenoptisch aufgeweiteter Elektronenstrahl, dessen Energie und Stromdichte räumlich und zeitlich auf ca. 3 % konstant war, mittels einer Viersektorenblende auf eine Strahlblende von 20 x 5 mm justiert, die ihrerseits auf das Eintrittsfenster der Bestrahlungskammer ausgerichtet war. Die zu bestrahlende Fläche der Proben betrug zu-

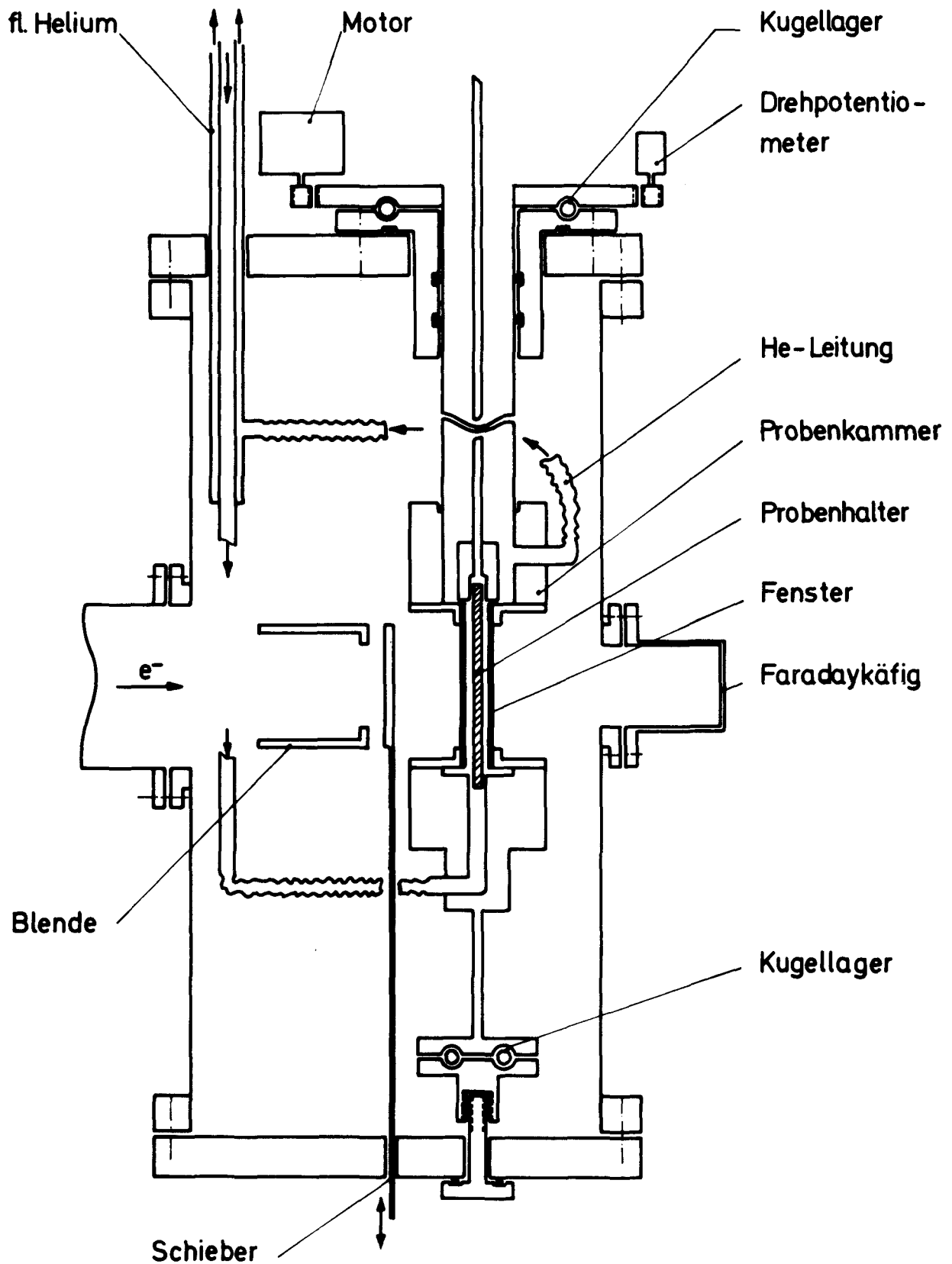


Abb. 19 Skizze des Bestrahlungskryostats mit drehbarer Probenkammer

sammen etwa 12 x 3 mm.

Die Öffnung der Blende konnte durch einen Schieber verdeckt werden. Die bei geschlossenem Schieber zusätzlich aufgefangene Ladung wurde als relatives Maß für den Strahlstrom verwendet. Da diese Messung aber durch Auslösen von Sekundärelektronen verfälscht wurde, konnte sie nur für eine Relativ- nicht für eine Absolutmessung des Strahlstroms verwendet werden, doch zeigte ihre zeitliche Konstanz die Stabilität des Beschleunigers. Hinter dem Eintrittsfenster durchquerte der Strahl ca. 1 mm flüssiges Helium, bevor er auf die Probe traf. Nach weiteren ca. 2 mm Helium verließ er die Bestrahlungskammer durch ein ähnliches Fenster und wurde in einem isolierten Kupferbehälter (Faradaykäfig) absorbiert und als Austrittsstrom gemessen. Die Messung des Austrittsstroms wurde durch die Strahlaufweitung und Absorption innerhalb der Probenkammer beeinflusst. Demzufolge wurde der Austrittsstrom auch beim Drehen der Probenkammer erheblich verändert und konnte ebenfalls nicht zur Absolutbestimmung des Strahlstroms herangezogen werden.

Daher wurden vor jeder Tantalbestrahlung, bei unveränderter Beschleunigereinstellung, Aluminiumdrähte (Reinheit 99.999) von 0.2 und 0.5 mm Durchmesser bestrahlt. Diese Dicken entsprechen bezüglich der Strahlaufweitung etwa den verwendeten Tantalfolien. Die Drähte waren alkalisch geätzt und anschließend bei 500 °C getempert worden. Ihr Geometriefaktor wurde aus dem Widerstand am Eispunkt (mit $\rho(273 \text{ °K}) = 2.5 \mu\Omega\text{cm}$) bestimmt. Das Restwiderstandsverhältnis betrug ca 1000. Aus den Schädigungsraten der Aluminiumdrähte ergab sich über eine genaue Absolutbestimmung der Schädigungsrate in Aluminium (Abb. 20) von J. Wurm /56/ direkt der Strahlstrom am Ort der Proben. Beim Drehen der Probenkammer blieb die Schädigungsrate im Aluminium im Rahmen der Meßgenauigkeit konstant, was beweist, daß die beim Drehen veränderliche Fenster- und Heliumdicke den Strahlstrom am Ort der Proben nicht meßbar beeinflusste.

Zur Kühlung der Proben wurde die Bestrahlungskammer von flüssigem Helium durchflossen. Die Heliumzuleitung im Innern des Kryostaten erfolgte durch flexible Edelstahlschläuche. Der Strahlstrom betrug 10 bis 20 μAcm^{-2} , entsprechend ca. 2.3 bis $4.6 \cdot 10^{17} \text{ El/cm}^2 \cdot \text{h}$. 10 μAcm^{-2} verursachen /54/ eine Erhöhung der Probentemperatur um ca. 0.2 °K, so daß die Bestrah-

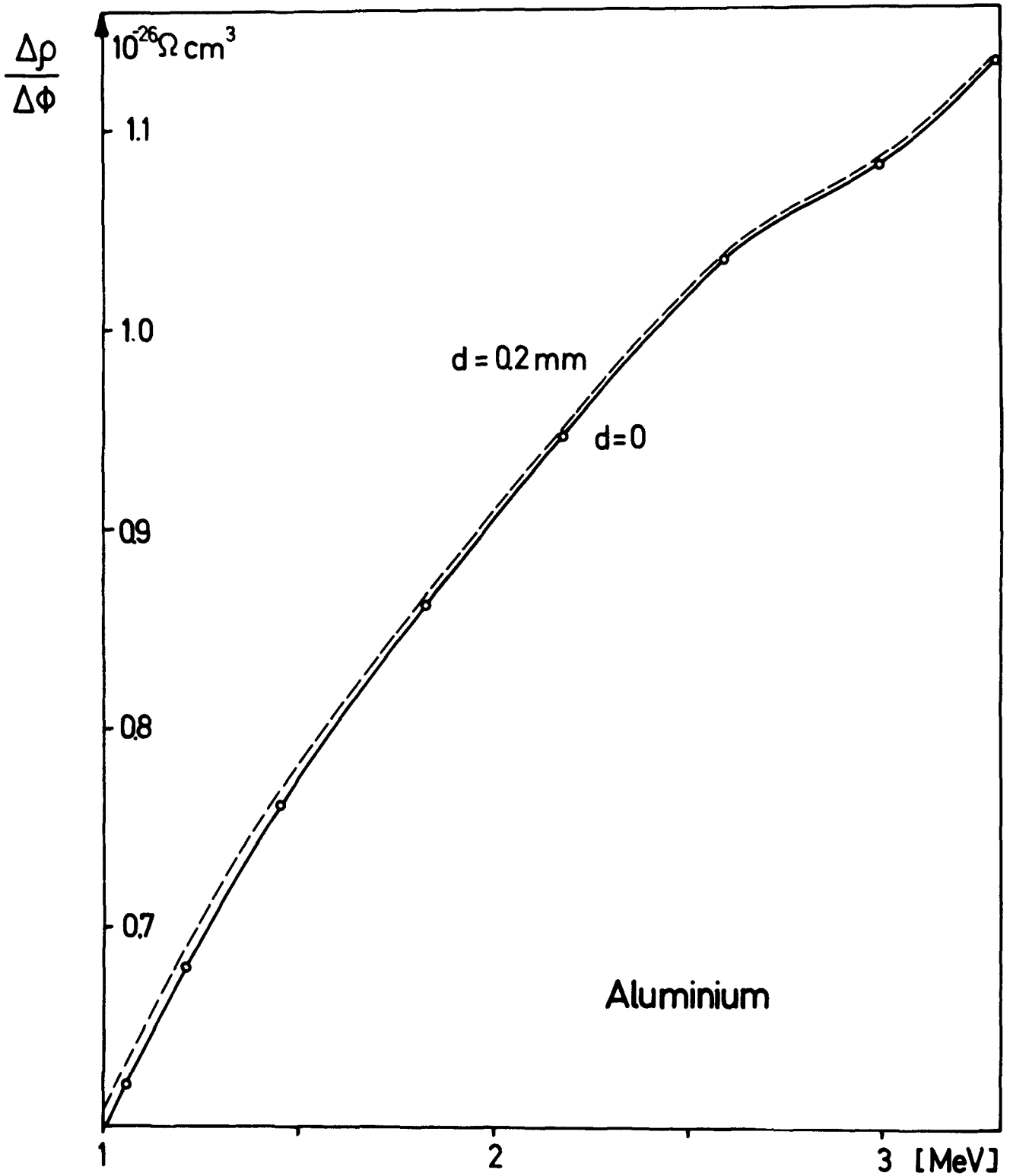


Abb. 20 Schädigungsrate in Aluminium in Abhängigkeit von der Energie nach J.Wurm für zwei Probendurchmesser

lungstemperaturen zwischen 4.7 und 5.0 °K lagen. Eine Abhängigkeit der Schädigungsrate vom Strahlstrom, entsprechend einer unterschiedlichen Erholung durch Temperaturerhöhung, wurde nicht festgestellt.

Mit dieser Meßmethode kann man also die Schädigungsraten an ein und derselben Probe vergleichen und direkt die Verhältnisse der Schädigungsraten bei Bestrahlung in verschiedenen Kristallrichtungen ermitteln.

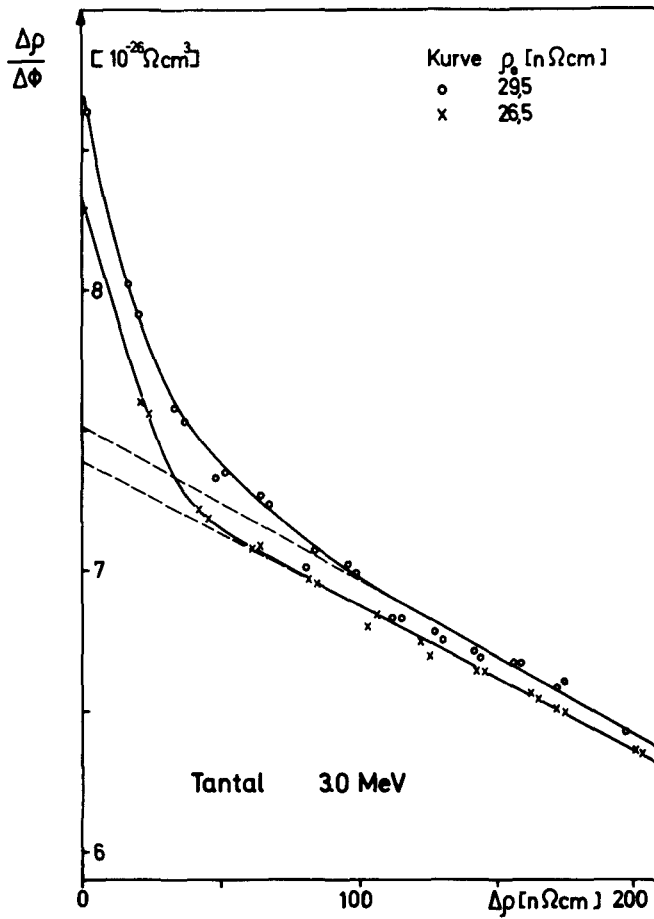


Abb. 21 Schädigungsrate in Tantal für zwei Proben bei 3 MeV als Funktion der Restwiderstandsänderung

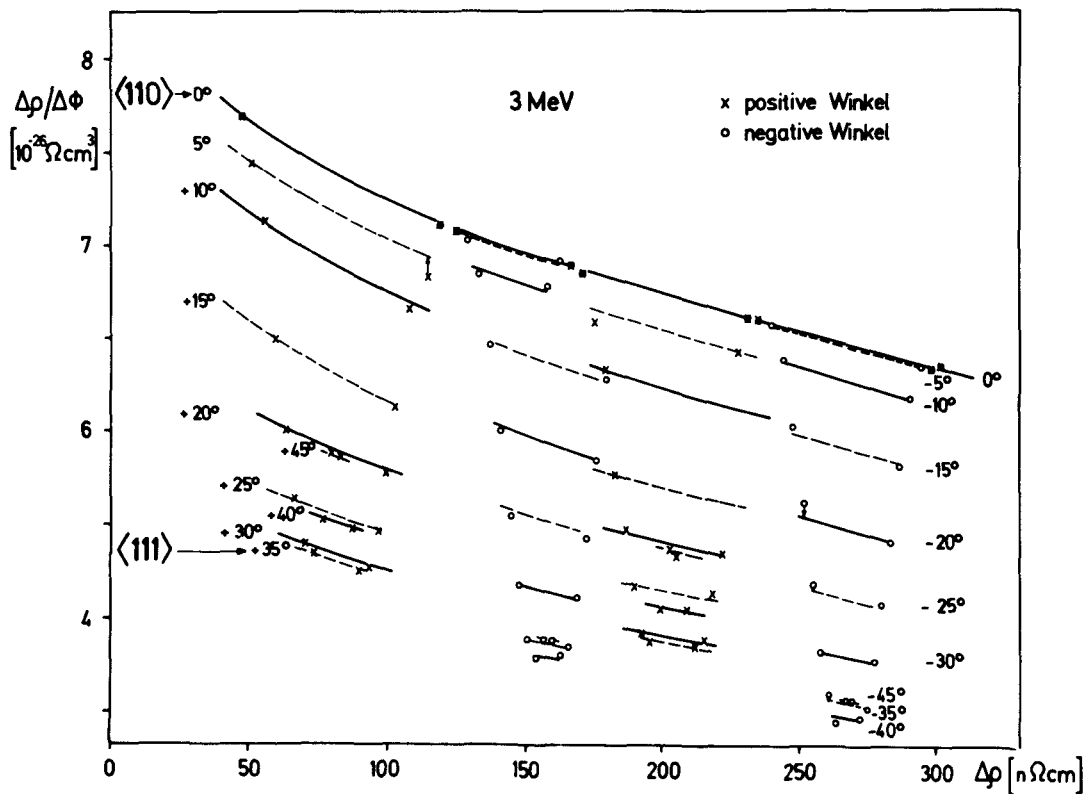


Abb. 22 Schädigungsrate in einer Tantalprobe bei 3 MeV in Abhängigkeit vom Drehwinkel. Als Abszisse ist wieder die Änderung des Restwiderstands aufgetragen

produzierbar. Weiter ist in diesen beiden Bereichen das Verhältnis der Schädigungsraten bei verschiedenen Orientierungen der Einkristallfolien zum Strahl unabhängig vom Defektgehalt (vergleiche Abb. 22). Während also für die Absolutbestimmung der Anfangsschädigungsrate nur Bereich c herangezogen werden sollte, ist für die Bestimmung der Richtungsabhängigkeit auch Bereich b verwendbar. Das ist besonders bei niederen Energien wichtig, da man dort nur bei langer Bestrahlung oder evtl. bei sehr reinen Proben (Size-Effekt-Korrektur!) Bereich c erreicht.

Zu a) Für sehr kleine Dosis ($\Phi \lesssim 10^{16}$ El/cm²) zeigt sich bei allen Energien eine sehr starke Überhöhung der Schädigungsrate, die z.T. noch von gegenläufigen Effekten überlagert sein kann. In Abbildung 23 sind einige dieser Anfangsverläufe nach Abzug der Anteile aus b und c wiedergegeben. Die Ursache dieser Anfangsverläufe ist ungeklärt, ebenso der Einfluß von Verunreinigungen. Möglicherweise handelt es sich um Ionisationseffekte an der Oberfläche (evtl. Beeinflussung einer Oberflächen-Supraleitung). Für die Messungen war dieser Bereich ohne Einfluß, da unabhängig von der Bestrahlungsenergie schon relativ kleine Elektronendosen ausreichen, um ihn zu verlassen.

5.2 Energieabhängigkeit der Schädigungsrate bei Bestrahlung in (110)-Richtung

Da der oben erwähnte lineare Verlauf (Kapitel 5.1 c) der Schädigungsrate das Schädigungsverhalten von Tantal unbeeinflusst vom Verunreinigungsgrad beschreibt, wurde er auf $\Delta\varrho = 0$ extrapoliert und zur Absolutbestimmung der Schädigungsrate verwendet. Diese Werte sind, auf Wegverlängerung (Gleichung (9)) und Energieverlust korrigiert, in Abbildung 24 über der maximal übertragbaren Energie aufgetragen. Eine Diskussion der Meßfehler findet sich in Kapitel 5.4.

5.3 Winkelabhängigkeit der Schädigungsrate

Das in Kapitel 4.2 erläuterte Meßverfahren ergibt für verschiedene Drehwinkel Dosiskurven, wie sie in Abbildung 22 für eine Meßreihe dargestellt sind. Daraus läßt sich das Verhältnis

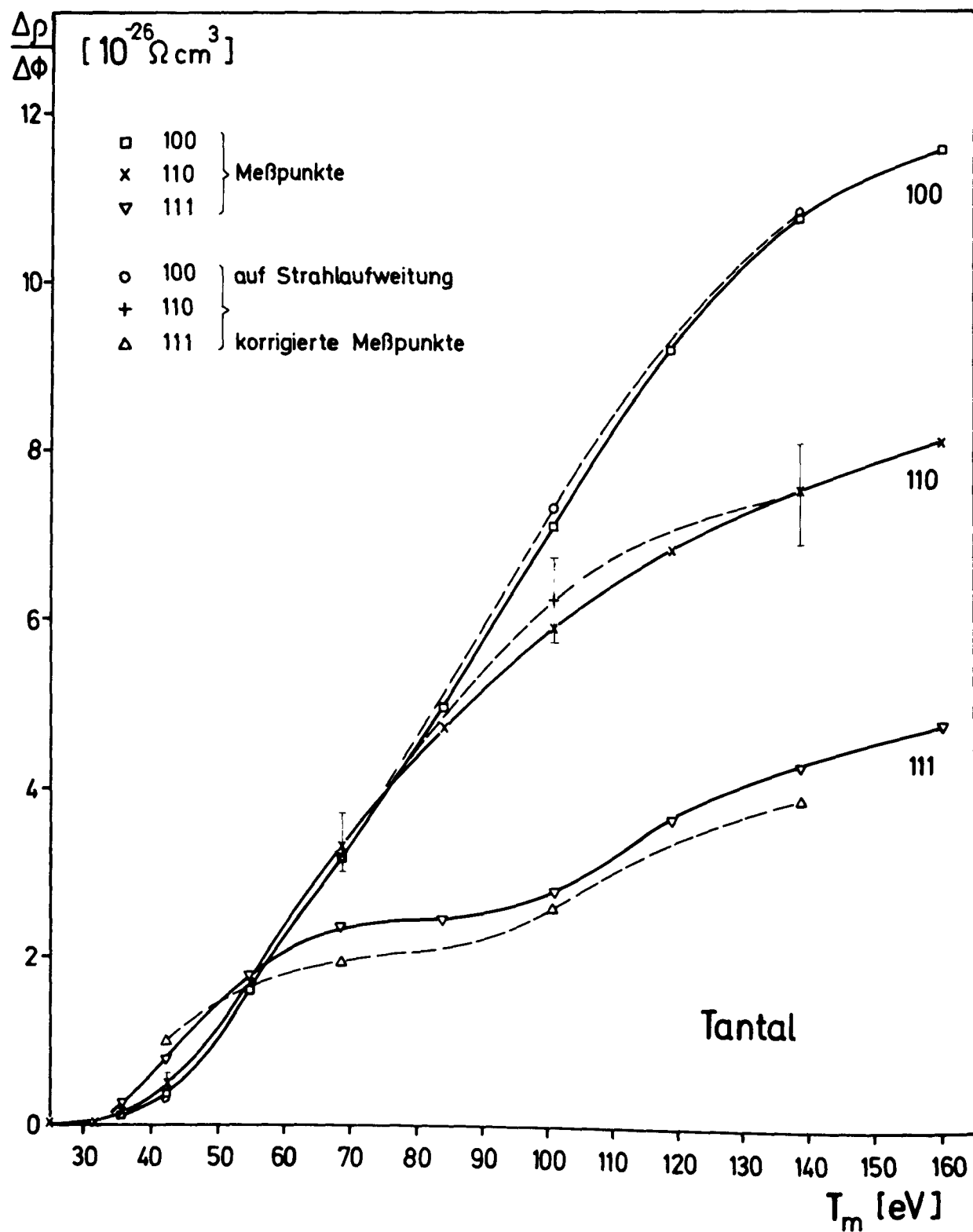


Abb. 24

Absolute Schädigungsrate in Tantal als Funktion der Energie für die drei Hauptrichtungen. Die unterbrochene Linie verbindet die auf Strahlaufweitung korrigierten Meßpunkte.

der Schädigung in einzelnen Kristallrichtungen durch einfache Division erhalten. Als Normierung wurde dabei stets die Schädigungsrate bei (110)-Orientierung verwendet. Eine Darstellung dieser normierten Schädigung über dem Drehwinkel findet sich in Abbildung 25 .

In den Abbildungen 26 bis 33 sind für verschiedene Bestrahlungsenergien die normierten Schädigungsraten für (110)-Proben mit der (100)-Richtung als Drehachse über dem Drehwinkel wiedergegeben, wobei der Symmetriepunkt der Meßergebnisse als Winkelnullpunkt verwendet wurde. Die z.T. vorhandene Verschiebung des Symmetriepunkts gegenüber Winkel 0 (vergleiche Abb. 25) wird in Kapitel 5.4 erläutert. Für Energien über ca. 1.35 MeV zeigt die Schädigungsrate in den Hauptrichtungen mehr oder weniger ausgeprägte Extrema. Die Abbildungen 34 bis 37 geben zusätzliche Meßergebnisse wieder für Drehachsen, die in der (110)-Ebene liegend 25° bzw. 60° von der (100)-Richtung zur (110)-Richtung hin verschoben sind (vergl. Abb. 39).

In Abbildung 38 wurden die Schädigungsraten in (100)- bzw. (111)-Richtung, normiert auf die (110)-Richtung über der Energie aufgetragen. Von kleinen Energien ausgehend sieht man, daß die Anisotropie zwischen ca. 1.2 und ca. 1.45 MeV ($T_m \approx 43$ eV) stark anwächst. Dies deutet darauf hin, daß für Energien die kleiner als 1.45 MeV sind, die unterschwelligeren Effekte bereits einen starken Anteil an der Gesamtschädigung haben und, da sie isotrop sind, die Anisotropie der überschwelligen Effekte zusehens überdecken. Da hier aber auch die übrigen Korrekturen (Strahlaufweitung, Wegverlängerung, Energieverlust) stärker ins Gewicht fallen, können unter- und überschwelliger Anteil nicht exakt getrennt werden. Dieser Teil der Messung blieb daher bei der Auswertung außer Betracht. Über 1.45 MeV wird die Anisotropie zunächst ebenfalls kleiner, bis sich ab etwa 2.0 MeV ($T_m \approx 70$ eV) die Größenverhältnisse von (100) - zu (111) - Richtung umgekehrt haben und die Anisotropie wieder anwächst. Eine anschauliche Interpretation des Verlaufs wird in Kapitel 6.3 gegeben.

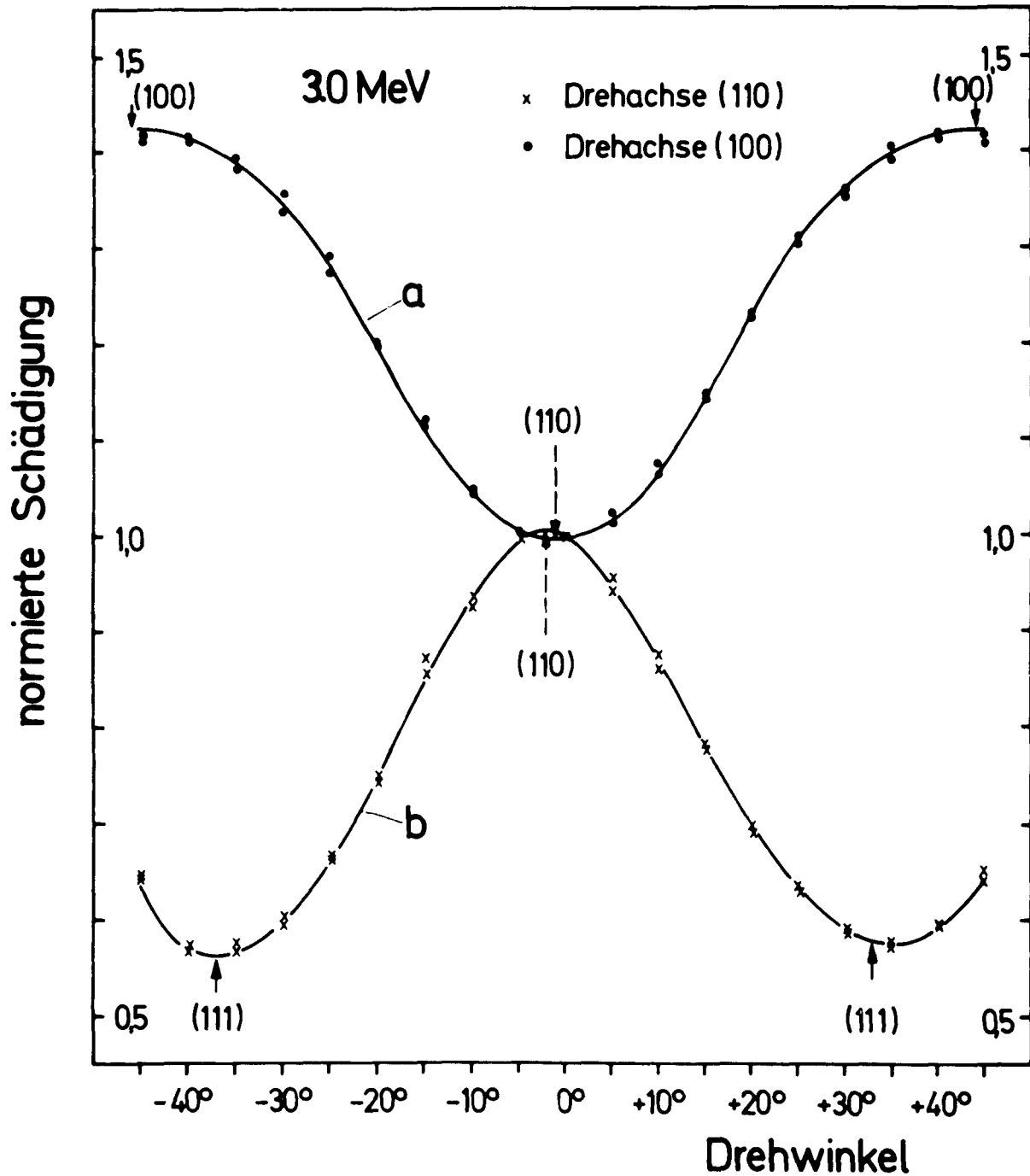


Abb. 25

Auf Drehwinkel Null normierte Schädigungsraten in Tantal für Proben mit unterschiedlicher Drehachse; aufgetragen über dem Drehwinkel

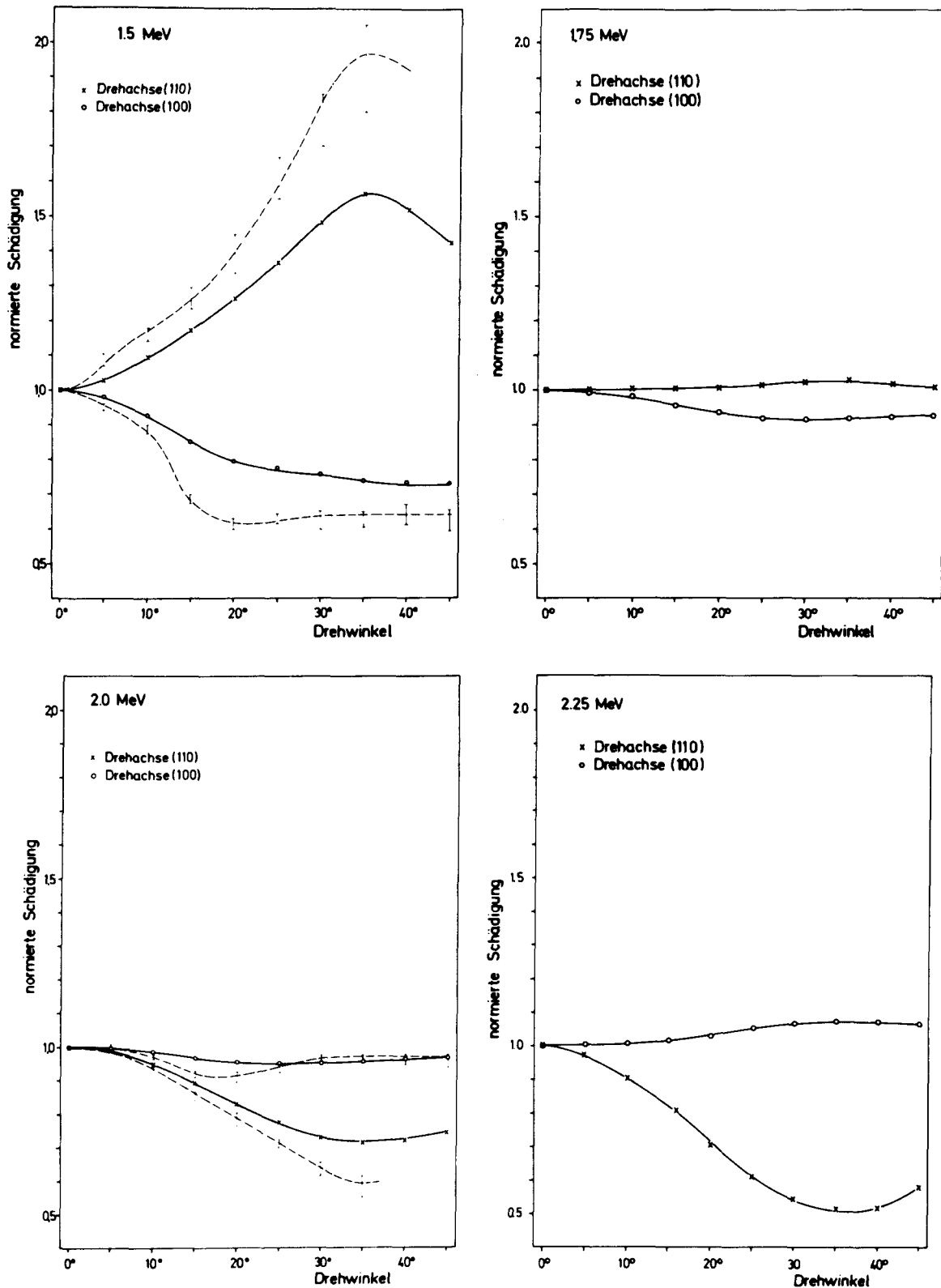


Abb. 26 bis 29 Auf Schädigung in (110)-Richtung normierte Schädigungsraten in Tantal als Funktion des Drehwinkels, bei Drehung um die (110)- bzw. (100)-Achse bei den Bestrahlungsenergien 1.5, 1.75, 2.0, 2.25 MeV. Die unterbrochenen Linien verbinden die auf Strahlaufweitung korrigierten Meßpunkte

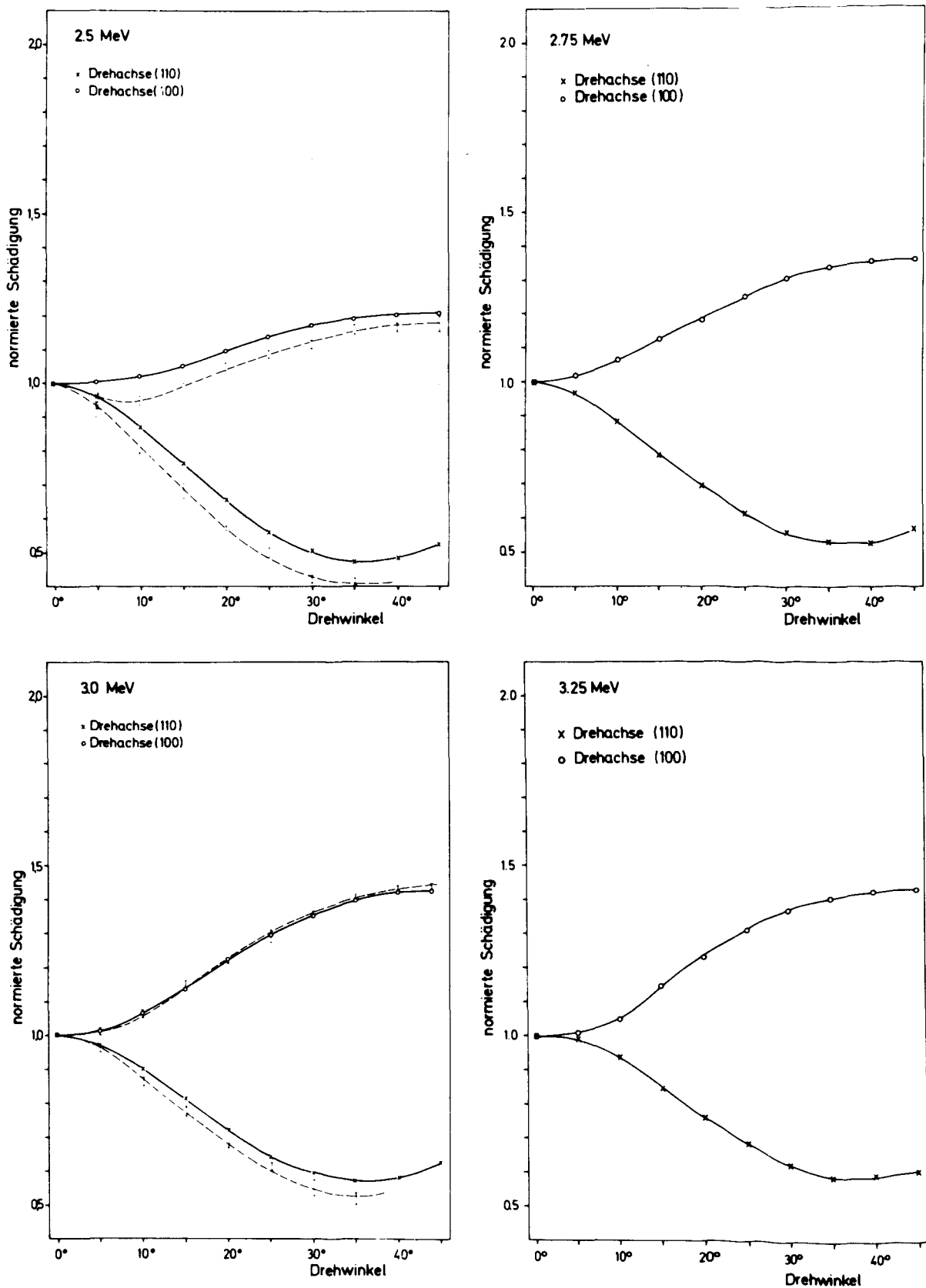


Abb. 30 bis 33 Auf Schädigung in (110)-Richtung normierte Schädigungsraten in Tantal als Funktion des Drehwinkels, bei Drehung um die (110)- bzw. (100)-Achse bei den Bestrahlungsenergien 2.5, 2.75, 3.0, 3.25 MeV. Die unterbrochenen Linien verbinden die auf Strahlaufweitung korrigierten Meßpunkte

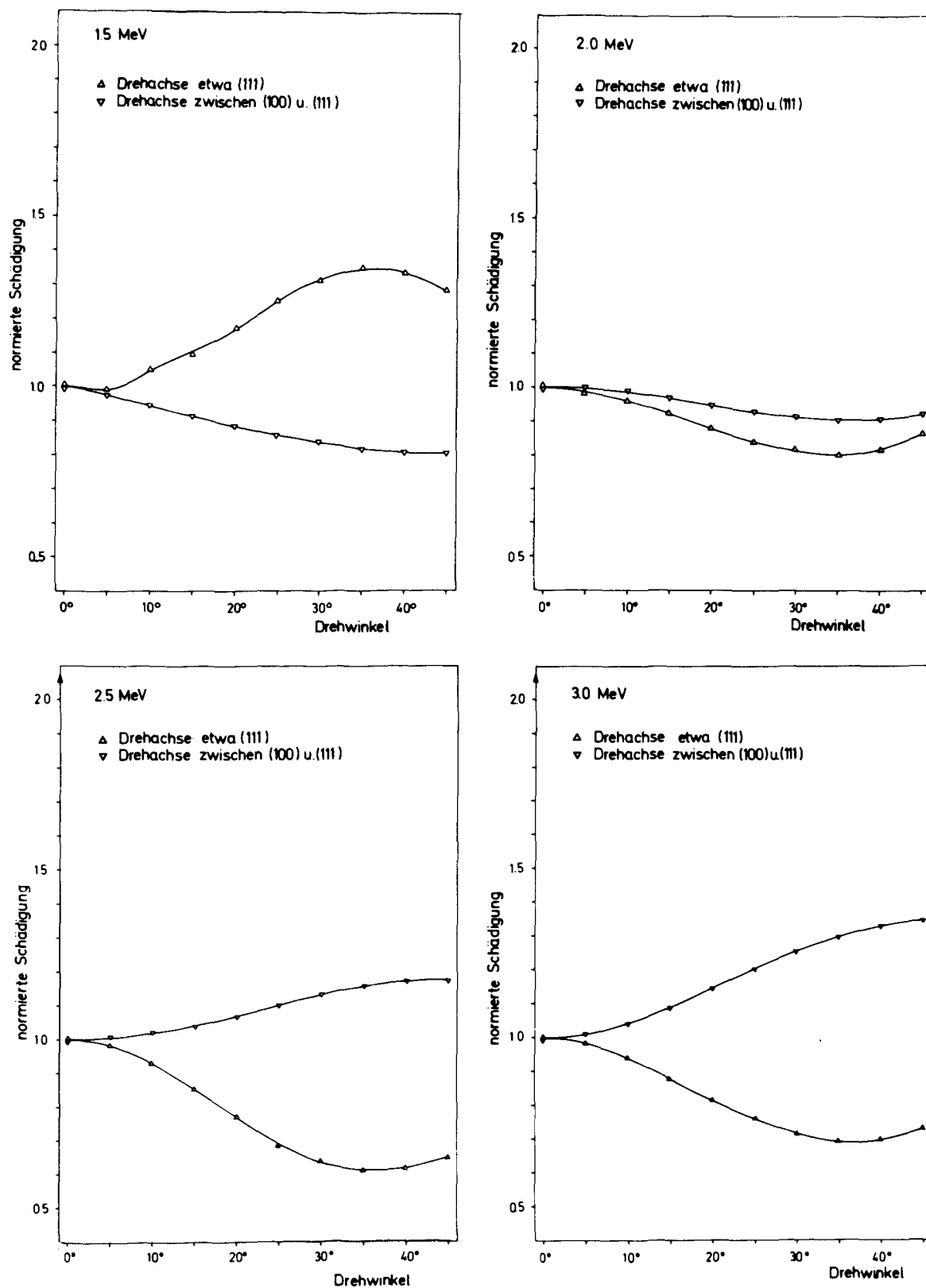


Abb. 34 bis 37 Auf Schädigung in (110)-Richtung normierte Schädigungsraten in Tantal als Funktion des Drehwinkels, bei Drehung um Achsen zwischen der (110)- und (100)-Richtung bei den Bestrahlungsenergien 1.5, 2.0, 2.5, 3.0 MeV

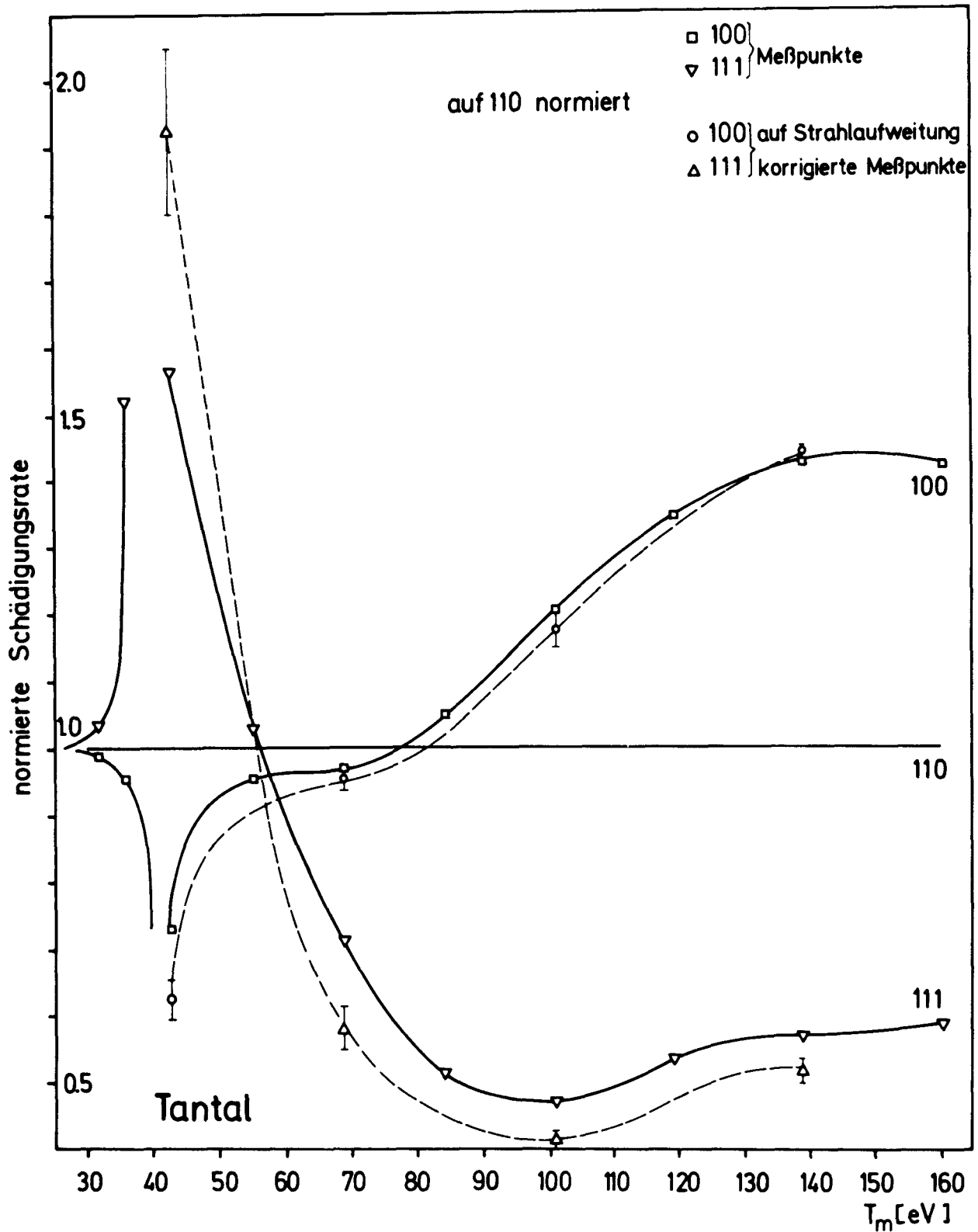


Abb. 38

Auf Schädigung in (110)-Richtung normierte Schädigungsrate in den Hauptrichtungen von Tantal als Funktion der Energie. Die unterbrochenen Linien entsprechen den auf Strahlaufweitung korrigierten Werten.

5.4 Diskussion der Meßfehler

a) Fehler der Widerstandsmessung

Zur Untersuchung der Defektproduktion diente der elektrische Restwiderstand bei ca 4.5 K in Abhängigkeit von der Bestrahlungsdosis als Meßgröße. Der verwendete Kompensator gestattete eine relative Meßgenauigkeit des Widerstandes von $<10^{-5}$; die absolute Genauigkeit wurde durch den Fehler des Geometriefaktors auf ca 0.01% begrenzt.

Bei den unbestrahlten Proben zeigte sich keine Abhängigkeit des Widerstandes von der Meßstromstärke, entsprechend einer vollständigen Unterdrückung der Supraleitung.

Die verwendeten Proben zeigten wegen des relativ hohen Anfangsrestwiderstandes nur einen geringen Beitrag des Size-Effects zum elektrischen Widerstand. Dieser Beitrag nahm zudem bei Bestrahlung rasch ab, so daß sich eine Size-Effect-Korrektur erübrigte.

Da bei einer richtungsabhängigen Schädigungsrate wegen der unvermeidlichen Strahlaufweitung die Schädigung $\Delta\rho$ mit der Probentiefe x variieren kann, soll noch die Wirkung dieses Effekts auf den Meßwert der Schädigungsrate $\Delta\rho_{\text{eff}}$ abgeschätzt werden. Mit dem Ansatz:

$$\Delta R(x) \sim \Delta\rho(x) \quad \text{und} \quad \frac{1}{R + \Delta R} = \frac{1}{d} \int_0^d \frac{dx}{R(x) + \Delta R(x)} \quad (30)$$

erhält man

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\int_0^d \frac{d(x)}{\rho(x)} - \int_0^d \frac{dx}{\rho(x) - \Delta\rho(x)}}{\int_0^d \frac{dx}{\rho(x) + \Delta\rho(x)}} = \frac{\Delta\rho_{\text{eff}}}{\rho_{\text{eff}}} \quad (31)$$

Es sollen noch die Ergebnisse für die beiden wichtigsten Spezialfälle angegeben werden:

α) Der Restwiderstand $\rho(x)$ ist über die Probendicke konstant $\rho(x) = \rho_{\text{eff}} = \rho$. Es gilt dann für $\Delta\rho(x) \ll \rho$:

$$\Delta\rho_{\text{eff}} \approx \frac{1}{d} \int_0^d \Delta\rho(x) dx \quad (32)$$

d.h., es wird eine über die Probendicke gemittelte Schädigungsrate gemessen.

β) Die Schädigungsrate $\Delta\varrho(x)$ ist über die Probendicke konstant $\Delta\varrho(x) = \Delta\varrho$. Dann gilt für

$$\Delta\varrho \ll \varrho(x) \quad : \quad \frac{\Delta\varrho_{\text{eff}}}{\varrho_{\text{eff}}} \sim \Delta\varrho \frac{\int_0^d \frac{dx}{\varrho^2(x)}}{\int_0^d \frac{dx}{\varrho(x)}}$$

Die Integrale sollen für einen linearen Verlauf von $\varrho(x) = \varrho\left(1 + \frac{k}{d}x\right)$ abgeschätzt werden. Mit $\frac{1}{\varrho_{\text{eff}}} = \frac{1}{d} \int_0^d \frac{dx}{\varrho(x)}$ ergibt sich:

$$\Delta\varrho_{\text{eff}} = \Delta\varrho \cdot F \quad \text{mit} \quad F = \frac{k^2}{(1+k) \ln^2(1+k)} \quad (33)$$

Für $F(k)$ seien einige Werte angegeben

k	0	0.1	0.5	1.0	2.0
F	1.000	1.001	1.013	1.041	1.106

Man darf annehmen, daß k immer wesentlich kleiner als eins ist, so daß $F \sim 1$ gilt. Dazu soll noch darauf hingewiesen werden, daß sich k wegen $\Delta\varrho \ll \varrho$ nur langsam ändert. Daher wird bei Verwendung der normierten Schädigungsrate, wo sich der Faktor F wegekürzt, eine weitere Fehlerquelle vermieden.

b) Fehler der Dosimessung

Der Fehler bei der Absolutmessung der Dosis wird vor allem durch den Fehler bei der Absolutbestimmung der Schädigungsrate in Aluminium bestimmt. Dieser wird in /56/ mit ca 10% angegeben. Diese Unsicherheit wirkt sich bei der Bestimmung der Energieabhängigkeit der Schädigungsrate voll aus, da für jede Energie eine neue Aluminium-Eichmessung nötig ist.

In die Winkelabhängigkeit dagegen geht nur noch eine mögliche Strahlinhomogenität ein, deren Fehlerbeitrag zu maximal 3% abgeschätzt werden kann /55/. Diese Größe des relativen Meßfehlers konnte durch die Reproduzierbarkeit der Aluminiummessungen bestätigt werden. Bei Versuchen, den Absolutwert des Strahlstroms abzuschätzen, wurden die aus den Aluminiummessungen abgeleiteten Werte im Rahmen der Meßgenauigkeit bestätigt, wobei die erreichbaren Fehlergrenzen allerdings erheblich weiter waren.

c) Systematische Fehler

Eine mögliche Beeinflussung der Meßergebnisse beim Drehen der Probenkammer durch eine Änderung der effektiven Dicke von Fenster und Kühlmittel, konnte durch die Messungen am polykristallinen Aluminium ausgeschlossen werden. Dies wurde weiterhin durch wechselseitiges Vertauschen der Proben sowie Umdrehen des Probenhalters untermauert.

Während die auf die (110)-Richtung normierten Schädigungsraten stets unabhängig von der Defektkonzentration waren, ist die Absolutbestimmung der Anfangsschädigungsrate mit einem Fehler behaftet, der durch die Extrapolation des linearen Verlaufs der Schädigungsrate auf $\Delta\varphi \rightarrow 0$ hereinkommt. Eine Abschätzung der Unsicherheit dieser Extrapolation ist sehr schwierig und stark von der Energie und Bestrahlungsdauer abhängig. Daher soll nur angegeben werden, daß die Extrapolation im ungünstigsten Fall auf ca 7% reproduzierbar war, wobei die **relative Unsicherheit der Dosismessung (3 %) bereits enthalten ist.**

Von ausschlaggebender Bedeutung ist schließlich der Zustand der Proben; neben der Reinheit besonders die Mosaikstruktur und die Ebenheit der Folien. Es soll daher kurz der Einfluß von kleinen Unebenheiten der Proben und von Kornverkippungen angegeben werden. Dabei haben Unebenheiten der Proben die gleiche Wirkung wie eine Verkippung der Körner aus der (110)-Folienebene. Eine Abweichung der Drehachse andererseits ist gleichbedeutend mit einer kleinen Verdrehung der Körner in der Probenebene (vergl. Abb 18c).

Eine leichte Verkippung eines großen Teils der Probe um die Drehachse macht sich durch eine Verschiebung des Winkelsymmetriepunkts bemerkbar (Verschiebungen bis zu 5° wurden beobachtet) und ist leicht zu eliminieren (Abb. 25). Wenn nur Teile der Probe oder einzelne Körner an der Verkippung beteiligt sind, ergibt sich zudem noch eine Winkelverschmierung, die sich analog einer Strahlaufweitung auswirkt.

Probenunebenheiten (Welligkeit) oder Kornverkippungen in Längsrichtung der Proben machen sich am stärksten in der Ausgangsstellung bemerkbar, während ihr Einfluß mit zunehmendem Drehwinkel τ wie $\cos \tau$ abnimmt. Im Gegensatz dazu nimmt der Ein-

fluß eines Fehlers in der Bestimmung der Drehachse mit $\sin \tau$ zu. Da alle Proben mit Röntgenstrahlung sehr genau untersucht wurden, konnten Fehler der Drehachse kleiner als 1° gehalten werden. Ebenso war es möglich jene Proben auszusondern, die Verkippungen oder Verdrehungen einzelner Körner um mehr als 3° enthielten.

Damit bleibt als größte Fehlerquelle eine evtl. Unebenheit in Folienlängsrichtung, die beim Aufschweißen der Potentialabgriffe und auch durch unterschiedliche Ausdehnungskoeffizienten von Probe und Probenrähmchen beim Abkühlen entstehen konnte. Untersuchungen am Mikroskop zeigten tatsächlich Unebenheiten dieser Art. Wenn man als obere Grenze für solche Unebenheiten 5° bis 10° ansetzt, ergibt sich im ungünstigsten Fall (vergl. Abb. 25) ein Fehler von 5 bis 10%, der allerdings auch in die normierten Schädigungsraten eingeht.

Zusammenfassend muß daher als Fehler für die normierten Werte der Schädigungsraten ca 10%, verursacht vor allem durch die Probenunebenheiten und für die absoluten Werte ca 15% eingesetzt werden; wobei in letzteren Wert vor allem noch die Unsicherheit der Dosimessung eingeht.

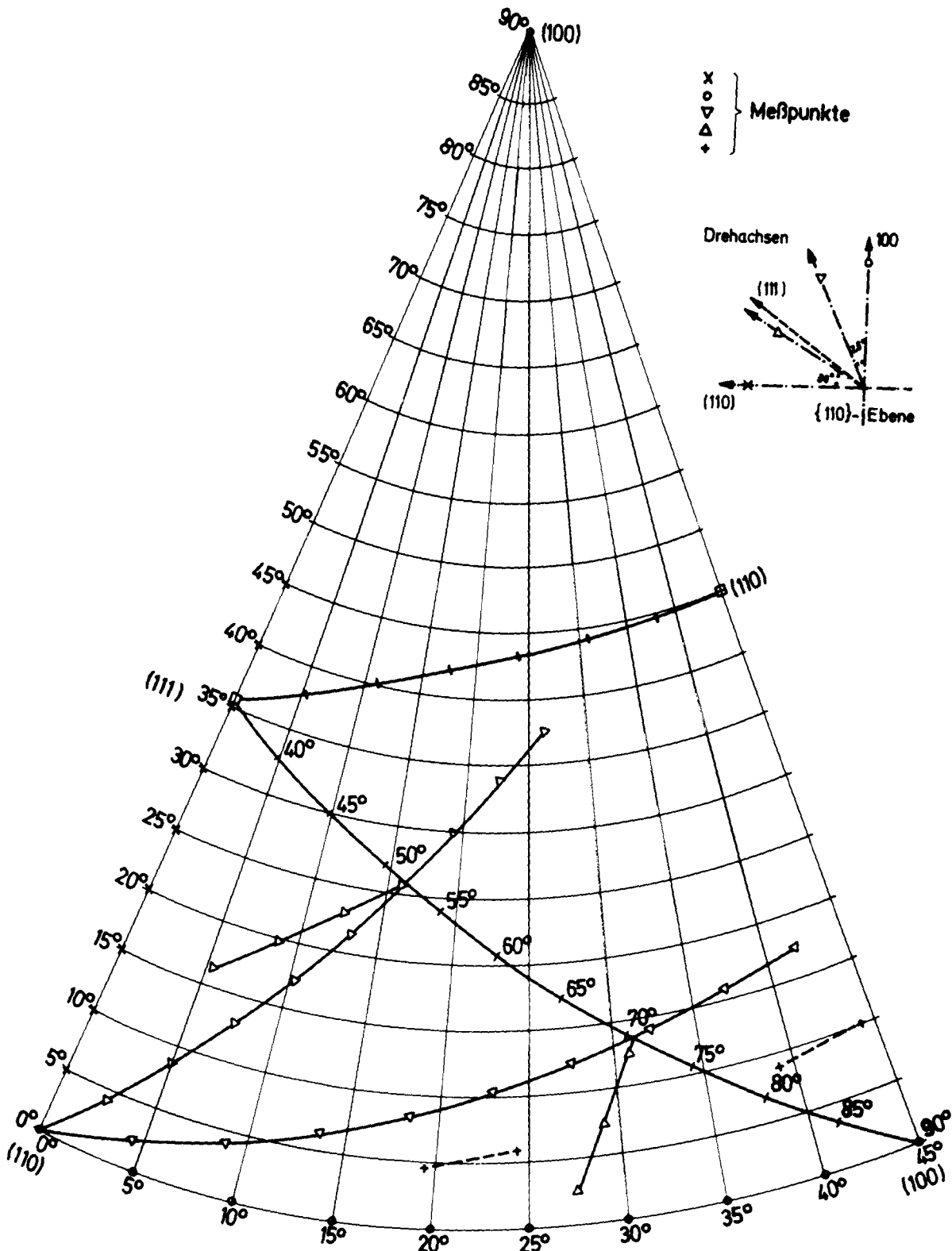


Abb. 39 $1/16$ einer Kugeloberfläche und 5° - Koordinatensystem
 Im unteren der drei Orientierungsdreiecke ist die Lage jener Kristallrichtungen eingezeichnet in denen die Schädigungsrate gemessen wurden

6. Die Anpassung der Meßergebnisse an ein Schwellenenergieprofil

6.1. Reduktion auf Dicke Null

Wegen der Strahlaufweitung stellen auch die korrigierten Meßwerte nur eine Mittelung über Winkelbereiche von der Größenordnung der Gaußbreite $\bar{\alpha}$ dar. Um die Ergebnisse weiter verwenden zu können, muß diese Verschmierung rückgängig gemacht werden. Dazu wurden die Messungen mit Drehachsen zwischen der (100)- und (110)-Richtung durchgeführt und so die Schädigungsrate auch in Punkten außerhalb der Verbindungslinien der Hauptrichtungen bestimmt. Abbildung 39 zeigt in schematischer Darstellung 1/16 einer Kugeloberfläche mit Kugelkoordinaten und die Grenzen der Orientierungsdreiecke, die je 1/48 der Kugeloberfläche ausmachen, sowie die Lage der Meßpunkte. Aus diesen Meßpunkten konnte man näherungsweise die Schädigungsraten in allen Punkten des 5°-Koordinatennetzes erhalten, wenn man längs der Koordinatenlinien interpolierte.

Jedem dieser 5°-Schnittpunkte wurde sodann als Unbekannte die Schädigungsrate bei verschwindender Strahlaufweitung $\left[\frac{\Delta \mathcal{P}}{\Delta \Phi} (\vartheta, \varphi, E) \right]_{\bar{\alpha}=0}$ zugeordnet (vergl. Gleichung (10)). Die gemessenen Schädigungsraten können dann als lineare Gleichungen dieser Unbekannten dargestellt werden:

$$\frac{\Delta \mathcal{P}}{\Delta \Phi} (\vartheta_j, \varphi_j, E) = \sum_i \left[\frac{\Delta \mathcal{P}}{\Delta \Phi} (\vartheta_i, \varphi_i, E) \right]_{\bar{\alpha}=0} \cdot H(\alpha_{ij}, \bar{\alpha}(E)) \cdot \cos \vartheta_i \cdot \Delta \vartheta_i \cdot \Delta \varphi_i \quad (34)$$

$\Delta \vartheta_i$ und $\Delta \varphi_i$ entsprechen der Weite des Koordinatennetzes und sind hier konstant gleich 5 Grad.

Die Koeffizienten H_{ij} des Gleichungssystems ergeben sich aus der Theorie der Strahlaufweitung (s. Kap. 2.2). Sie sind Funktionen der Gaußbreite $\bar{\alpha}$ und des Winkelabstands α_{ij} zwischen Meßgröße (ϑ_j, φ_j) und Unbekannter (ϑ_i, φ_i)

$$\cos \alpha_{ij} = \cos \vartheta_j \cos \vartheta_i \cos(\varphi_j - \varphi_i) + \sin \vartheta_j \sin \vartheta_i \quad (35)$$

und ergeben sich aus der Gaußverteilung $G(\alpha, \bar{\alpha})$ in Gleichung (5) durch Rückgängigmachung der Integration über den Raumwinkel $d\Omega$:

$$H(\alpha, \bar{\alpha}) d\Omega = G(\alpha, \bar{\alpha}) d\alpha \quad \text{mit} \quad d\Omega = 2\pi \sin \alpha d\alpha \quad (36)$$

Um die Änderung der Aufweitung des Strahls beim Durchdringen der Probe zu berücksichtigen, wurden vier Verteilungen mit den Gaußbreiten für die Probendicken $0, \frac{1}{3}d, \frac{2}{3}d$ und d addiert, wobei berücksichtigt wurde, daß der Strahl bereits beim Auftreffen auf die Probe durch Fenster und Kühlmittel etwas aufgeweitet ist. Es gilt dann:

$$H(\theta, \phi, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \frac{\pi^{-3/2}}{\sin \alpha} \left[\frac{1}{\alpha_0} e^{-\alpha^2/\alpha_0^2} + \frac{1}{\alpha_{1/3}} e^{-\alpha^2/\alpha_{1/3}^2} + \frac{1}{\alpha_{2/3}} e^{-\alpha^2/\alpha_{2/3}^2} + \frac{1}{\alpha_d} e^{-\alpha^2/\alpha_d^2} \right] \quad (37)$$

Da H für $\alpha \rightarrow 0$ wegen des Faktors $\frac{1}{\sin \alpha} \approx \frac{1}{\alpha}$ divergiert, war eine Mittelung von $\frac{1}{\alpha}$ für die Koeffizienten der Diagonalglieder ($i=j$) nötig und soweit

$\alpha \lesssim 2.5$ Grad auch für Koeffizienten in der Nähe der Diagonalen. Es werde zunächst der Mittelwert für das erste Diagonalelement ($\theta=0$) dadurch bestimmt, daß man die Volumina der beiden schraffierten Rotationskörper in Abbildung 40 gleichsetzt:

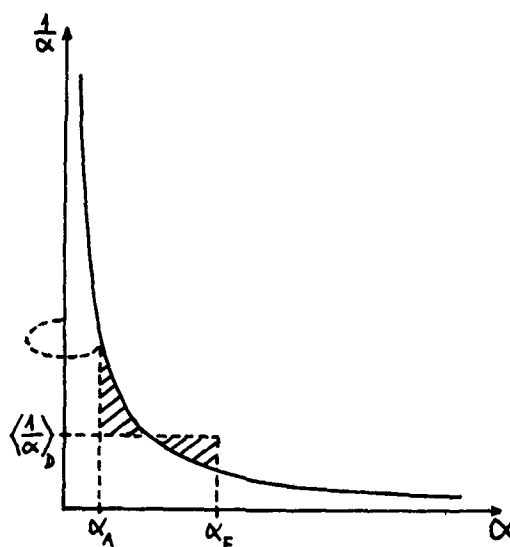


Abb.40

$$\left\langle \frac{1}{\alpha} \right\rangle_{D, \theta=0} = \frac{2}{\alpha_A + \alpha_E} \quad (38)$$

Es gilt dann $\alpha_A = 0$ und $\alpha_E^2 \pi = \Delta \vartheta \cdot \Delta \varphi$. Mit $\Delta \vartheta = \Delta \varphi$ erhält man:

$$\left\langle \frac{1}{\alpha} \right\rangle_{D, \theta=0} = \frac{2 \sqrt{\pi}}{\Delta \vartheta} \quad (39)$$

Allgemein kann man für die Diagonalelemente ($\theta > 0$) in guter Näherung setzen (Abb.41):

$$\left\langle \frac{1}{\alpha} \right\rangle_D = \frac{1}{F} \left(\frac{F}{\alpha_0} + 2 \sum_{i=1}^{[L]} \frac{F_i}{\alpha_i} \right) \quad (40)$$

Mit $F = \Delta \varrho \cdot \Delta \varphi \cos \theta$

$$F_0 = (\Delta \varphi \cos \theta)^2 = F_i$$

$$\alpha_i = \frac{1}{\sqrt{i}} \frac{\Delta \varphi \cos \theta}{2} \quad (\text{s.o.})$$

und $\alpha_i = i \cdot (\Delta \varphi \cos \theta)$

Eingesetzt erhält man:

$$\langle \frac{1}{\alpha} \rangle = \frac{2}{\Delta \varrho} \left(\sqrt{\pi} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{i} \right) \quad (41)$$

mit

$$[i] = \frac{1}{2} \frac{\Delta \varrho}{\Delta \varphi \cos \theta}$$

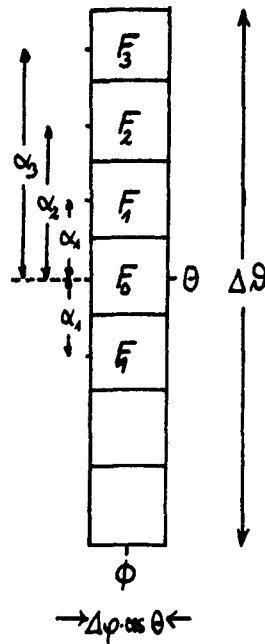


Abb. 41

Um den \sum -Ausdruck durch eine stetige Funktion annähern zu können, ersetzt man $\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{i}\right)$ durch $\sum_{i=1}^{n+1/2} \left(\frac{1}{i}\right) - 1$. Es gilt dann in sehr guter Näherung:

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{i} = \gamma + \ln(n) + \frac{1}{2n} - \dots \quad \gamma = 0.577.. (\text{Eulersche Konst.}) \quad (42)$$

und erhält so als Ergebnis für die Diagonalelemente:

$$\langle \frac{1}{\alpha} \rangle = \frac{2}{\Delta \varrho} \left(\sqrt{\pi} + \gamma + \ln\left(\frac{1}{2}(1 + \cos \theta)\right) + \frac{1}{1 + \frac{1}{\cos \theta}} - 1 \right) \quad (43)$$

Bei $\theta \gg 0^\circ$ müssen auch für die Nichtdiagonalelemente Mittelungen von $\frac{1}{\alpha}$ über das jeweilige Winkелеlement durchgeführt werden. Da eine exakte Berechnung sehr umfangreich würde, wurde eine einfache Interpolation angewendet. Entsprechend Abbildung 42 wurde zwischen dem $\langle \alpha \rangle$ -Wert des Diagonalelements und den α -Werten in großer Entfernung ($\alpha \gg 2.5^\circ$) von den Diagonalen entlang einer Hyperbel interpoliert:

$$\alpha^2 = \alpha_b^2 + (\phi - \varphi)^2 \cos^2 \theta$$

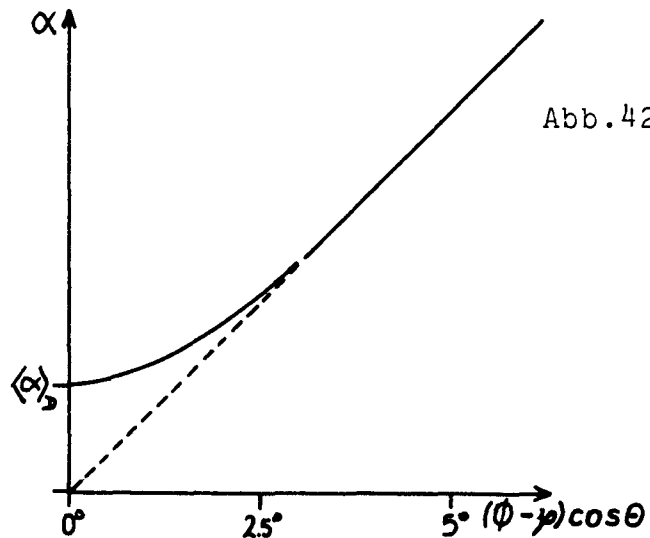


Abb. 42

Dann ergibt sich allgemein als Mittelung für $\frac{1}{\alpha}$:

$$\left\langle \frac{1}{\alpha} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\alpha_D^2 + (1-\varphi)\cos^2\theta}} \quad (44)$$

Bei einem 5° -Koordinatennetz ($\Delta\vartheta = \Delta\varphi = 5^\circ$) ist es nun möglich, entweder ein Gleichungssystem mit 181 Unbekannten, entsprechend den Koordinatenschnittpunkten auf $1/16$ der Kugeloberfläche zu lösen, oder durch Reduktion auf das unterste Orientierungsdreieck in Abbildung 39 die Zahl der Gleichungen auf ca 49 zu verringern. Beide Möglichkeiten haben spezifische Nachteile:

Das große Gleichungssystem ist aus algebraischen Gründen (Kondition der Matrix) sehr empfindlich bezüglich Rundungsfehlern und Auswirkung von Meßfehlern, besonders bei großer Strahlaufweitung. Beim kleinen System hingegen ist wegen des endlich feinen Koordinatennetzes die Zuordnung zwischen den 5° -Schnittpunkten in den einzelnen Orientierungsdreiecken nicht eindeutig. Dies ist vor allem an der (100)-(111)-Verbindungsline von Bedeutung, da hier wegen der kleineren Winkelabstände α die Beiträge aus den anderen Orientierungsdreiecken relativ groß sind. Ein wesentlich feineres Koordinatennetz läßt aber der Speicherplatz der Rechenmaschine (IBM 360) nicht zu. Es wurden Rechnungen mit beiden Systemen durchgeführt, wodurch die jeweiligen Nachteile weitgehend ausgeglichen werden konnten. Die Lösungen (Programm GELMP) waren erwartungsgemäß für höhere Energien wegen der geringen Strahlaufweitung am besten, da hier die Koeffizientenmatrix H stark auf die Diagonalglieder konzentriert war.

Die Gleichungssysteme wurden für die Elektronenenergien 1.5, 2.0, 2.5 und 3.0 MeV gelöst. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 26, 28, 30, 32 sowie 24 und 38 mit eingezeichnet. Es zeigt sich erwartungsgemäß, daß die Strahlaufweitung eine scheinbare Verringerung der Anisotropie bewirkt hatte. Dadurch, daß der Wert für die (110)-Richtung, der wieder als Normierung verwendet wurde, großemäßig zwischen denen der beiden anderen Hauptrichtungen liegt, wird er durch die Strahlaufweitung kaum beeinflusst. Nur bei 2.5 MeV (vergl. Abb.30) betrug die Änderung ca 5%.

Um die Mittelung von Gleichung (44) zu umgehen, wurden auch Gleichungssysteme untersucht, bei denen die Unbekannten Winkeln (ϑ, φ) zwischen den Winkeln der Meßwerte (θ, ϕ) zugeordnet wurden;

z.B. : $(\vartheta, \varphi) = (2.5^\circ, 2.5^\circ)$, $(2.5^\circ, 7.5^\circ)$, ... $(7.5^\circ, 2.5^\circ)$...
 usw. (vergl. Abb. 39). Daraus ergibt sich natürlich als Nachteil, daß die reduzierten Schädigungsraten in den Hauptrichtungen :

$(\vartheta, \varphi) = (0^\circ, 0^\circ)$, $(0^\circ, 45^\circ)$, $(35^\circ, 0^\circ)$ extrapoliert werden müssen. Diese Gleichungssysteme hatten nun entsprechend 162 bzw. ca. 39 Unbekannte und sie waren wegen der wesentlich geringeren Konzentration der Matrix auf die Diagonale nur bei doppelter Rechengenauigkeit (14 statt 7 Stellen pro Zahl, Lösungsprogramm DGELG) lösbar. Die Ergebnisse aus den ursprünglichen Gleichungssystemen wurden dabei gut bestätigt.

6.2 Die Schwellenenergien

Aus den auf Dicke Null reduzierten Meßwerten soll nun die Richtungsabhängigkeit der Schwellenenergie $T_d(\theta, \phi)$ bestimmt werden. Diese Bestimmung erfolgt über eine Anpassung von nach Gleichung (10) berechneten Schädigungsraten an die auf Strahlaufweitung korrigierten Meßwerte. Wegen des begrenzten Speicherplatzes der Rechenmaschine konnte nur ein kleiner Teil der Meßwerte zum Fit verwendet werden. Dies waren im allgemeinen die Schädigungsraten bei Bestrahlung in den drei Hauptrichtungen bei den Bestrahlungsenergien 1.5, 2.0, 2.5 und 3.0 MeV. Testrechnungen ergaben zwischen diesen Energien einen weitgehend glatten Verlauf der Schädigungsraten; dasselbe gilt nach Abbildung 24 auch für die Meßwerte. Die Hauptrichtungen wurden verwendet, weil sie extremale Schädigungsraten aufweisen und deshalb die Anisotropie am stärksten repräsentieren. Die endgültigen Fitergebnisse (s.u.) wurden dann aber auch durch Anpassung von Meßwerten außerhalb der Hauptrichtungen überprüft und bestätigt. Die Anpassung erfolgte in getrennten Rechnungen sowohl für die absoluten (Abb. 24), als auch für die normierten (Abb. 38) Schädigungsraten. Dabei ergaben sich in beiden Fällen für die Fitparameter innerhalb der Fehlergrenzen dieselben Werte.

Die Güte der Anpassung wurde durch Summation der mit dem jeweiligen Meßfehler $\Delta\left(\frac{\Delta Q}{\Delta \Phi}\right)_{\text{Mess.}}$ gewichteten Abweichungsquadrate bestimmt:

$$\sum \left(\frac{\left(\frac{\Delta Q}{\Delta \Phi}\right)_{\text{Mess.}} - \left(\frac{\Delta Q}{\Delta \Phi}\right)_{\text{Rechn.}}}{\Delta\left(\frac{\Delta Q}{\Delta \Phi}\right)_{\text{Mess.}}} \right)^2 \quad (45)$$

Dabei wurde auch für den Fit mit den absoluten Meßwerten nur ein Fehler von ca. 10 % angenommen, da der Fehler bei der Bestimmung des Strahlstroms über die Aluminium - Eichmessungen (vergl./56/) weitgehend energieunabhängig ist.

Der volle Fehler von ca. 15 % (s. Kapitel 5.4) geht erst in die Bestimmung des Widerstands pro Atomprozent Frenkelpaare ρ_F ein, die über einen Vergleich der gemessenen und berechneten Schädigungsraten für die (110) - Richtung bei 2.5 MeV erfolgte.

Es boten sich zwei Ausgangsmöglichkeiten für das Schwellenenergieprofil an:

a) Die von v.Jan und Seeger /57/ für Kupfer verwendete Entwicklung der Schwellenenergien nach Kubisch Harmonischen

$$T(\theta, \phi) = (2T_{110} - T_{100}) + 2(T_{100} - T_{110}) \cdot \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta \cdot (1 + 4 \sin^2 \phi \cos^2 \phi) + \sin^4 \theta\right) + \frac{9}{4} (T_{100} - 4T_{110} + 3T_{111}) \cdot \cos^2 \theta \cdot \sin^2 \theta \cdot (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)^2 \quad (46)$$

wobei die folgende Winkelzuordnung (θ, ϕ) für die Hauptrichtungen gilt: $(0^\circ, 0^\circ) = (110)$, $(0^\circ, 45^\circ) = (100)$, $(35^\circ, 0^\circ) = (111)$. Diese Darstellung hat den Vorzug, nur von drei Parametern - den Schwellen in den Hauptrichtungen - abzuhängen. Es ergab sich aber im ganzen denkbaren Variationsbereich der Parameter (ca. 30 bis 150 eV) keine gute Übereinstimmung. Der relativ beste Fit (vergl. Abb. 43 und 44) wurde erhalten mit:

$$T_{100} = 51 \pm 2 \text{ eV}, \quad T_{110} = 31 \pm 2 \text{ eV}, \quad T_{111} = 37 \pm 1 \text{ eV}, \quad \rho_F = 6.5 \frac{\mu\Omega \text{ cm}}{\text{at}\%}$$

b) Als zweiter Ausgangspunkt lagen die Ergebnisse der Computerexperimente von C.Erginsoy et al. /43/ vor (vergl. Kapitel 3.2). Das Erginsoy'sche Profil wurde vereinfacht übernommen (Abb. 45 A), wobei die Schwellen innerhalb von Bereichen um die drei Hauptrichtungen als konstant und der Schwellenwert im Zwischenbereich als vierter Parameter angenommen wurde. Es zeigte sich sofort, daß eine Anpassung überhaupt erst denkbar war, wenn man die Schwelle in (100)-Richtung höher als in den beiden anderen Hauptrichtungen setzte, entgegen der Annahme von Erginsoy. Der beste Fit wurde mit

$$T_{100} = 56 \pm 3 \text{ eV}, \quad T_{110} = 34 \pm 2 \text{ eV}, \quad T_{111} = 35 \pm 1 \text{ eV}, \quad T_{\text{rest}} \geq 120 \text{ eV}, \quad \rho_F = 15.0 \frac{\mu\Omega \text{ cm}}{\text{at}\%}$$

erreicht und ist ebenfalls in den Abbildungen 43 und 44 eingezeichnet.

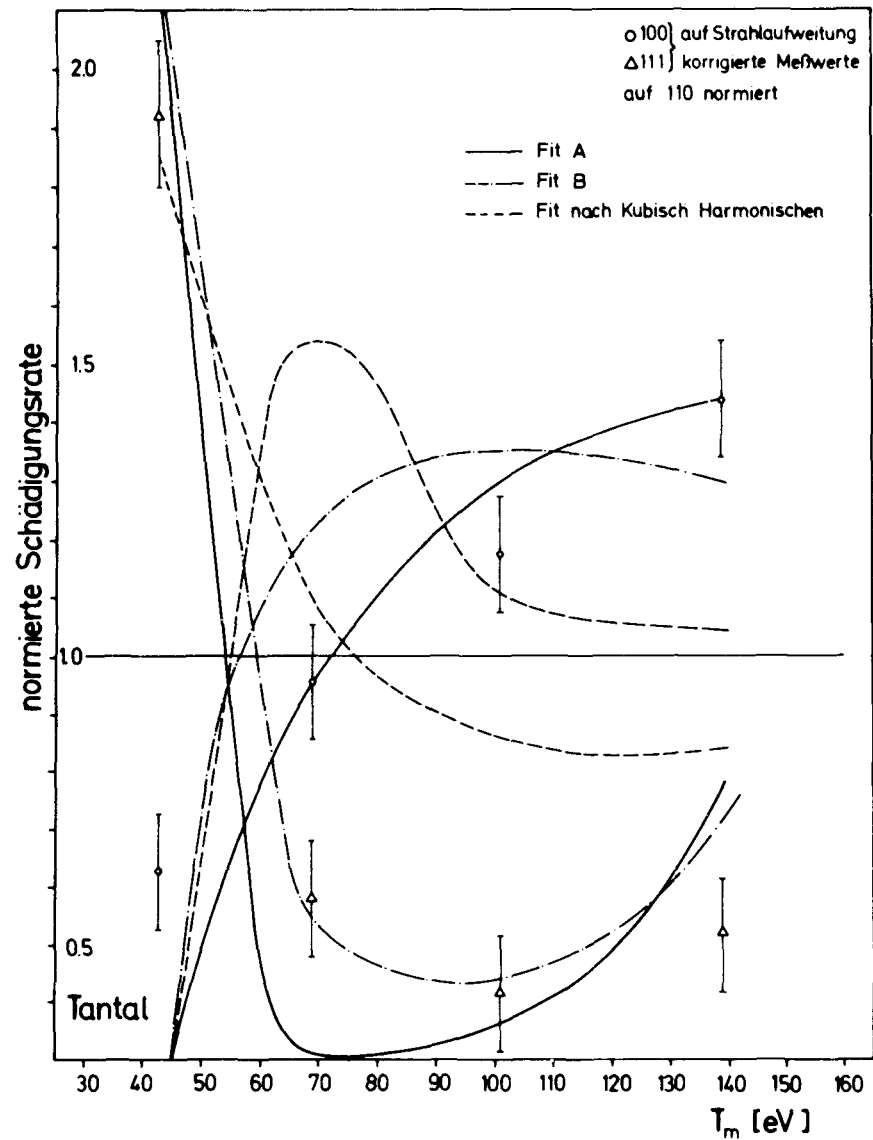
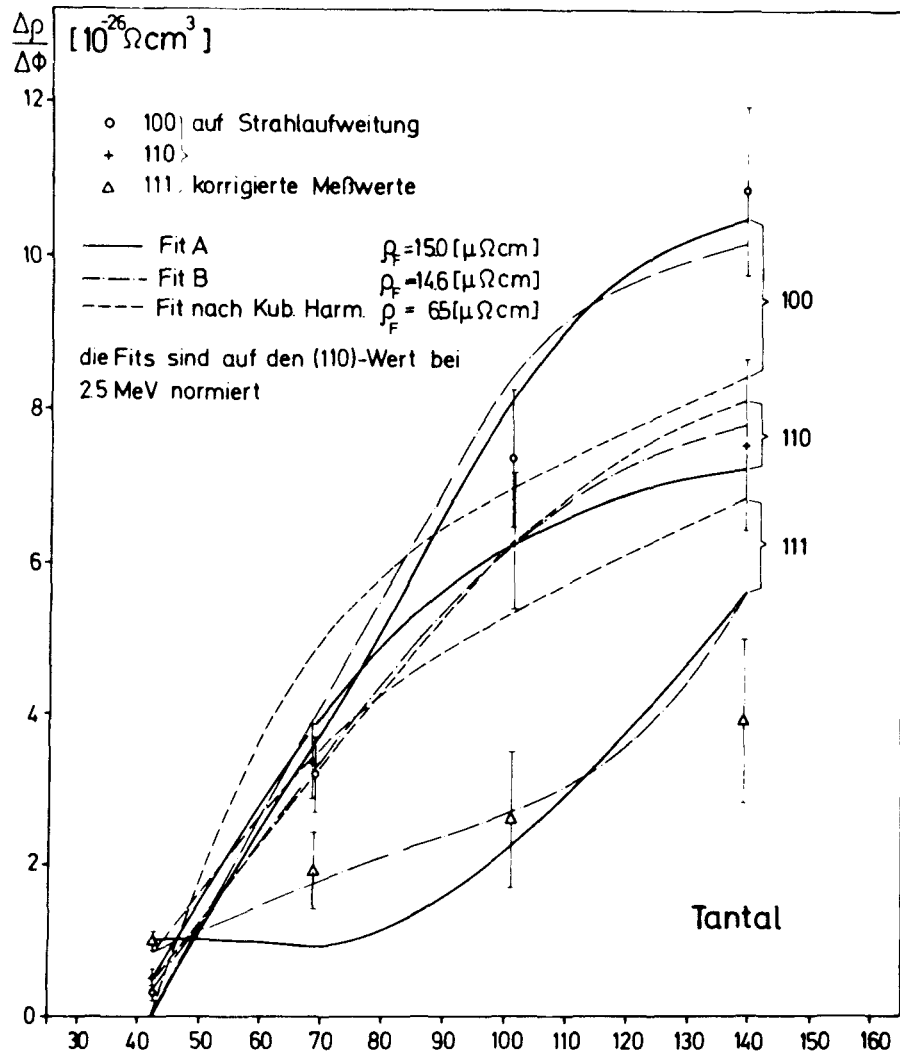


Abb. 43 und 44

Anpassung der gemessenen absoluten bzw. normierten Schädigungsraten mit den beiden in Abb. 45 dargestellten Profilen und mit dem Profil nach Kub.-Harm.

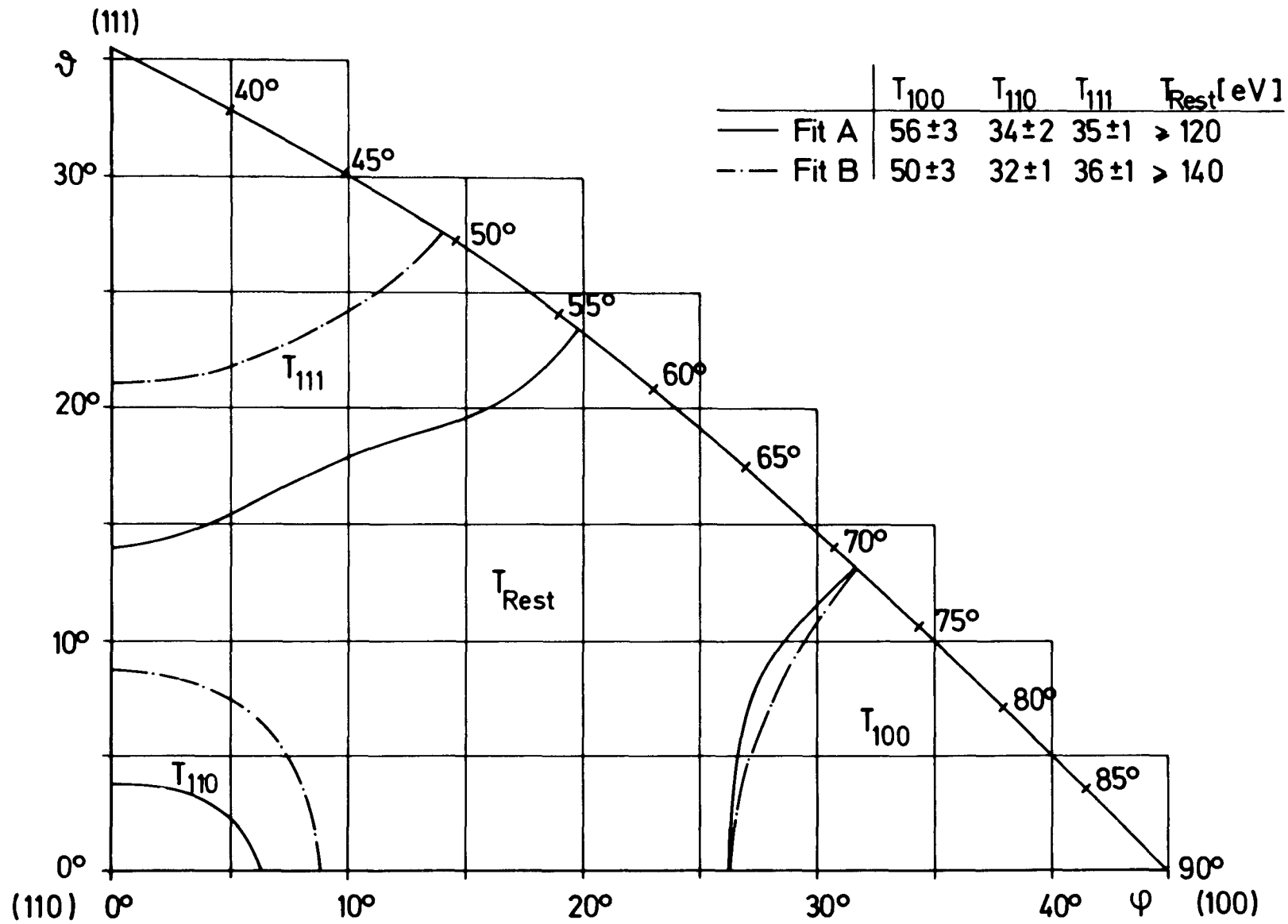


Abb. 45 Vereinfachte Schwellenenergieprofile mit vier Parametern

Der Einfluß der Mehrfachverlagerung auf Einkristallmessungen wurde durch Verwendung des Kinchin-Pease-Modells untersucht, wobei die Anisotropie dieses Beitrages durch Verwendung von

$$n(\theta, \phi, T) = \begin{cases} 1 & \text{für } T \leq 2T_d(\theta, \phi) \\ T/2T_d(\theta, \phi) & \text{für } T \geq 2T_d(\theta, \phi) \end{cases} \quad (47)$$

sicher stark überbewertet wurde (vergl. Kapitel 2.4). Für die absoluten Schädigungsraten ergaben sich damit durch die Mehrfachverlagerung bei 2.5 MeV eine Erhöhung um ca. 2 % und bei 3.0 MeV um ca. 7 %. Hingegen wurden die auf die (110)-Richtung normierten Schädigungsraten von der Mehrfachverlagerung selbst bei 3.0 MeV um weniger als 1 % beeinflusst. Da sich diese Werte auch für andere Ansätze des Schwellenenergieprofils kaum ändern, ergibt sich ein weiteres Argument die Anpassung an die normierten Meßwerte stärker zu berücksichtigen.

Um die Anpassung zu verbessern, wurden nun auch Form und Größe der Bereiche um die Hauptachsen variiert. Etwa zwanzig solcher Profile wurden gerechnet. Dabei stimmten die jeweils optimalen T_d -Werte immer in engen Schranken mit den obigen überein. Die erreichbare Anpassung dagegen war stark von der relativen und absoluten Größe der Winkelbereiche um die Hauptrichtungen abhängig. Die beste Übereinstimmung wurde dabei mit einer Bereichseinteilung erzielt, die etwa der Erginsoy'schen entsprach (vergl. Abb. 45 B). Als Mittelwerte für die Schwellenenergieparameter ergab sich:

$$T_{100} = 53 \pm 3 \text{ eV}, \quad T_{110} = 32 \pm 2 \text{ eV}, \quad T_{111} = 36 \pm 2 \text{ eV}, \quad T_{\text{best}} \geq 130 \text{ eV}, \quad \rho_F = 14.8 \frac{\mu\Omega\text{cm}}{\text{at}\%}.$$

Da die scharfe Trennung in vier Bereiche mit konstanter Schwelle sicher unrealistisch ist, wurde nun ein Fitprogramm verwendet, in welchem die Schwellen nur noch in 5° -Bereichen konstant angesetzt wurden. Es ergaben sich so ca. 39 unabhängige Parameter, die auf ein Minimum des Abweichungsquadrats hin variiert wurden.

Es wurden zwei verschiedene Verfahren verwendet. Beim einen wurde nacheinander jeder Parameter um einen bestimmten Betrag verändert. Wenn bei einer dieser Änderungen die Anpassung nicht verbessert wurde, wurde sie rückgängig gemacht. Dieses Verfahren wurde zyklisch so lange durchgeführt, bis ein stabiles Minimum erreicht war.

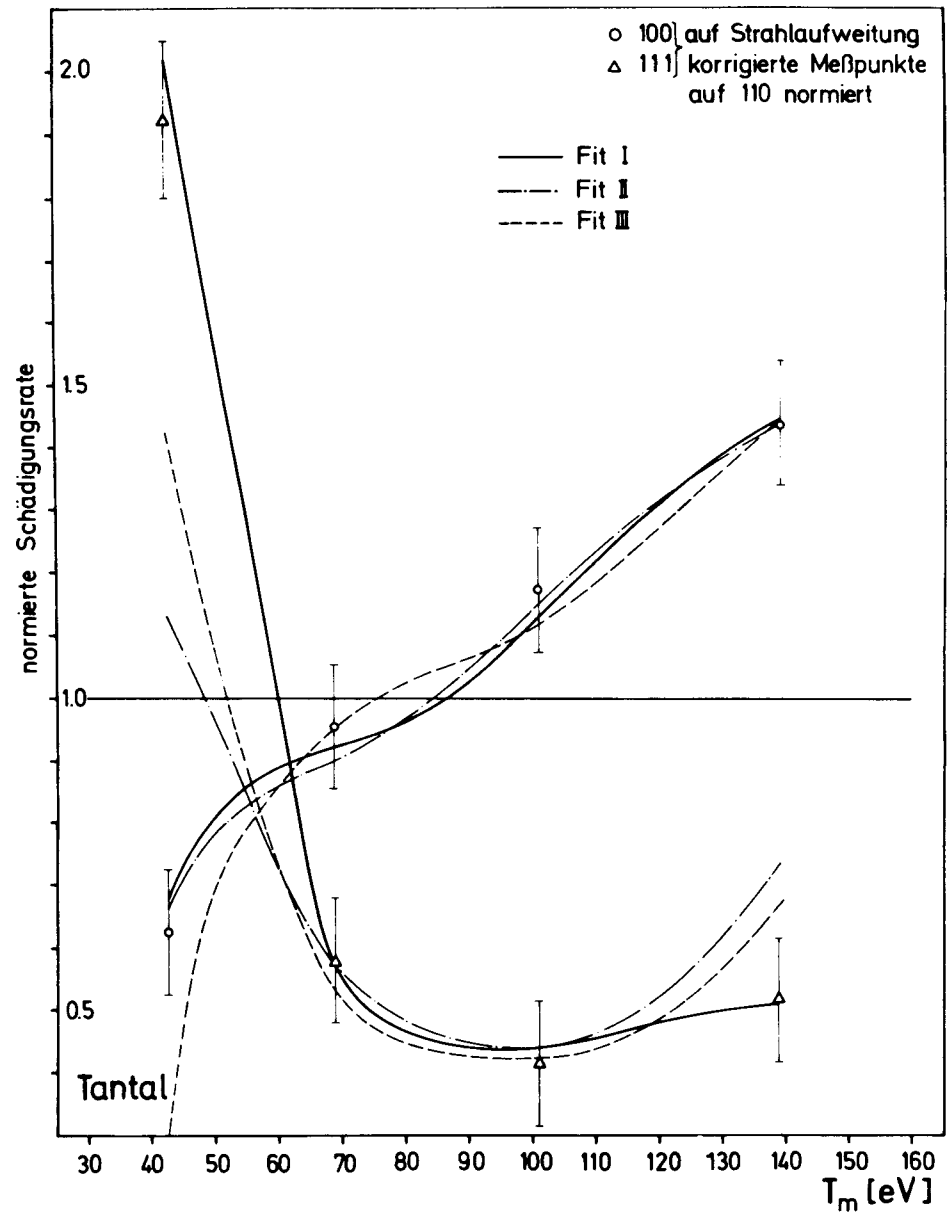
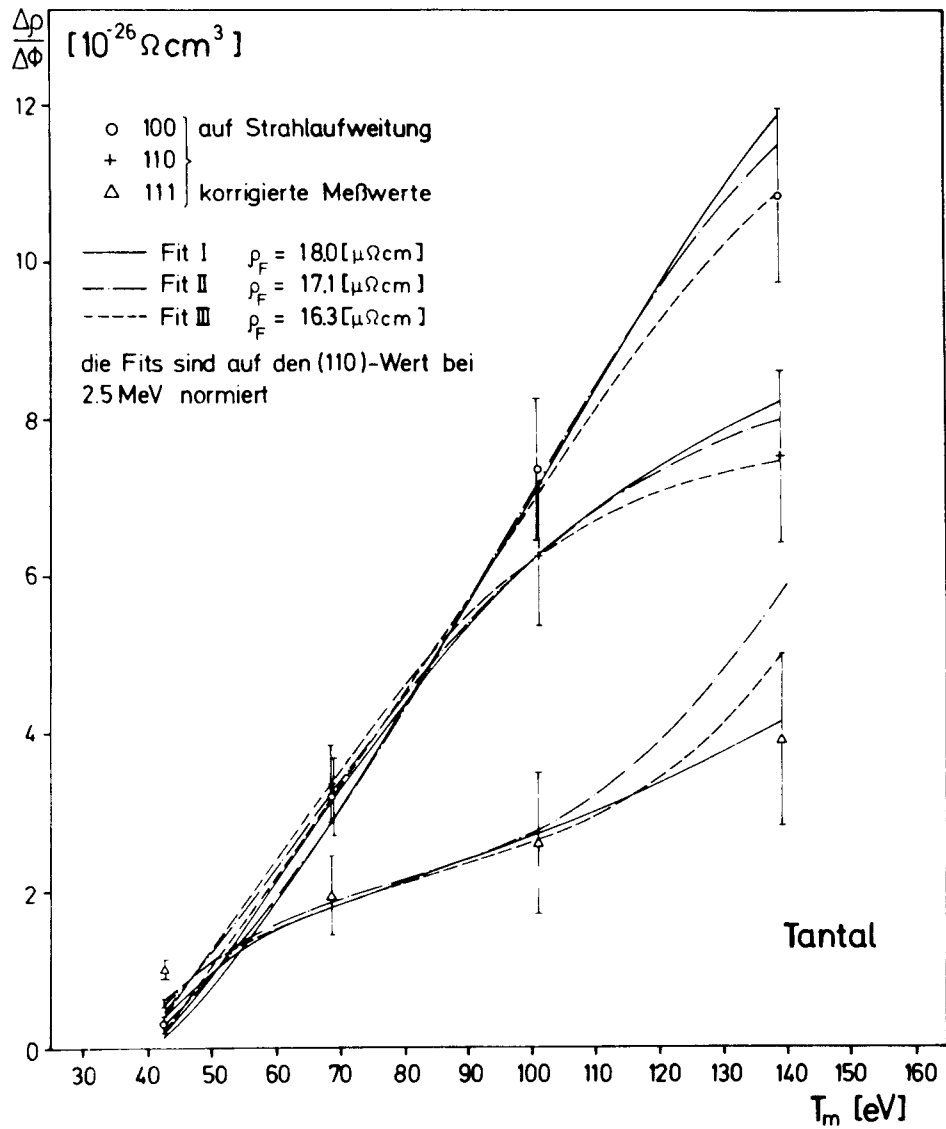


Abb. 46 und 47

Anpassung der gemessenen absoluten bzw. normierten Schädigungsraten mit den in Abb. 48 angegebenen Profilen.

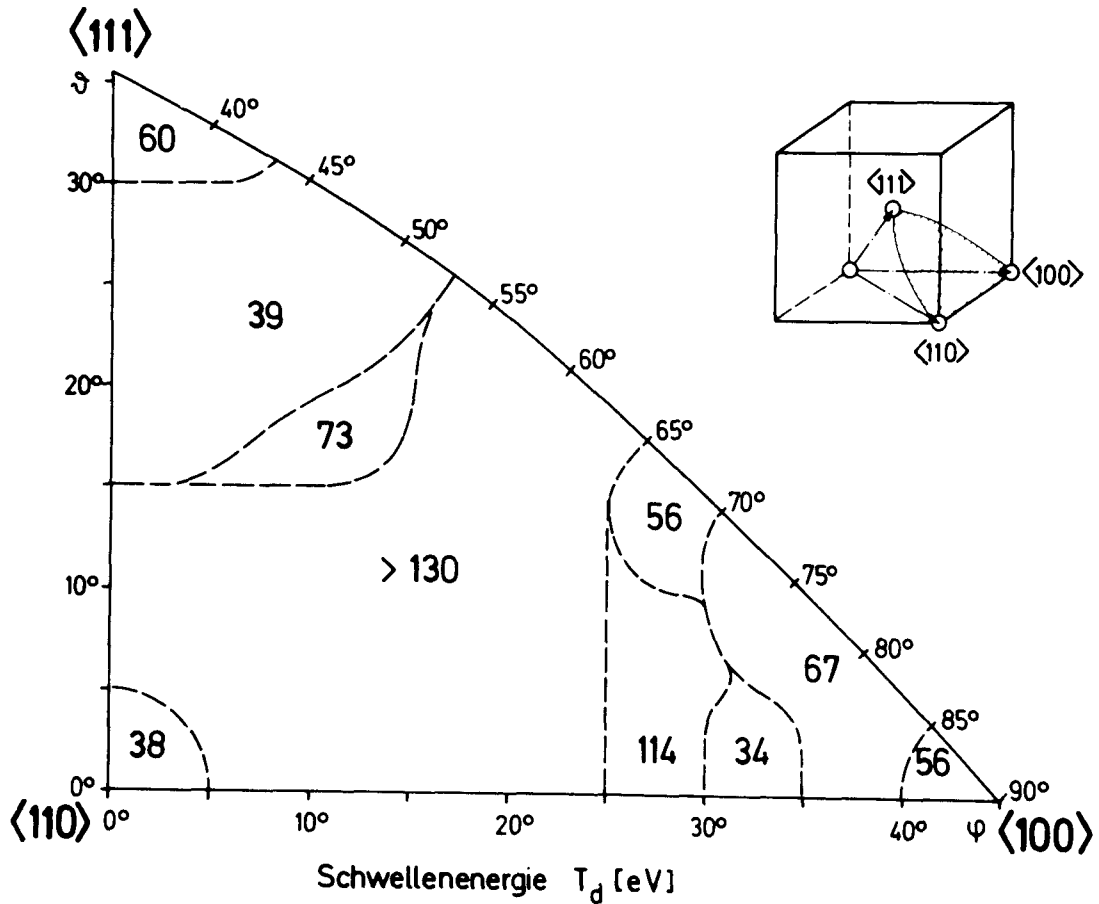
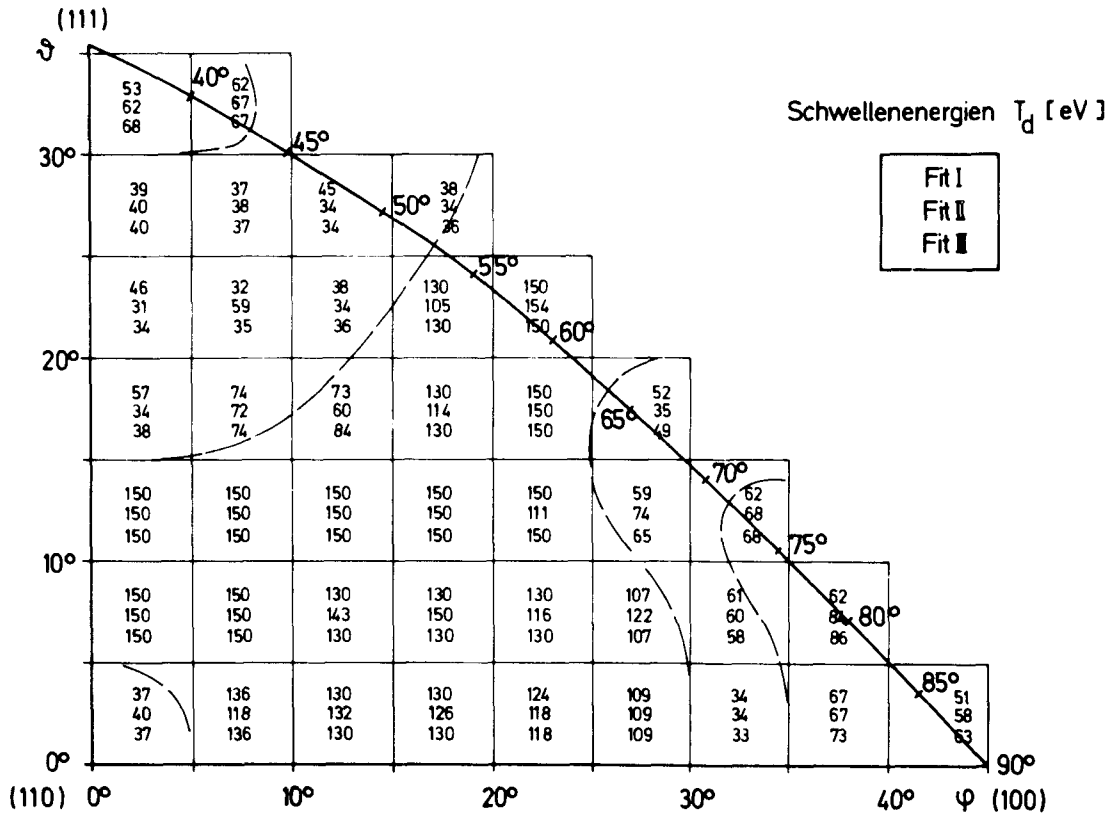


Abb. 48a/b Angepaßte Schwellenenergieprofile für Tantal:
 a) Für drei Fit - Läufe
 b) Mittelwerte

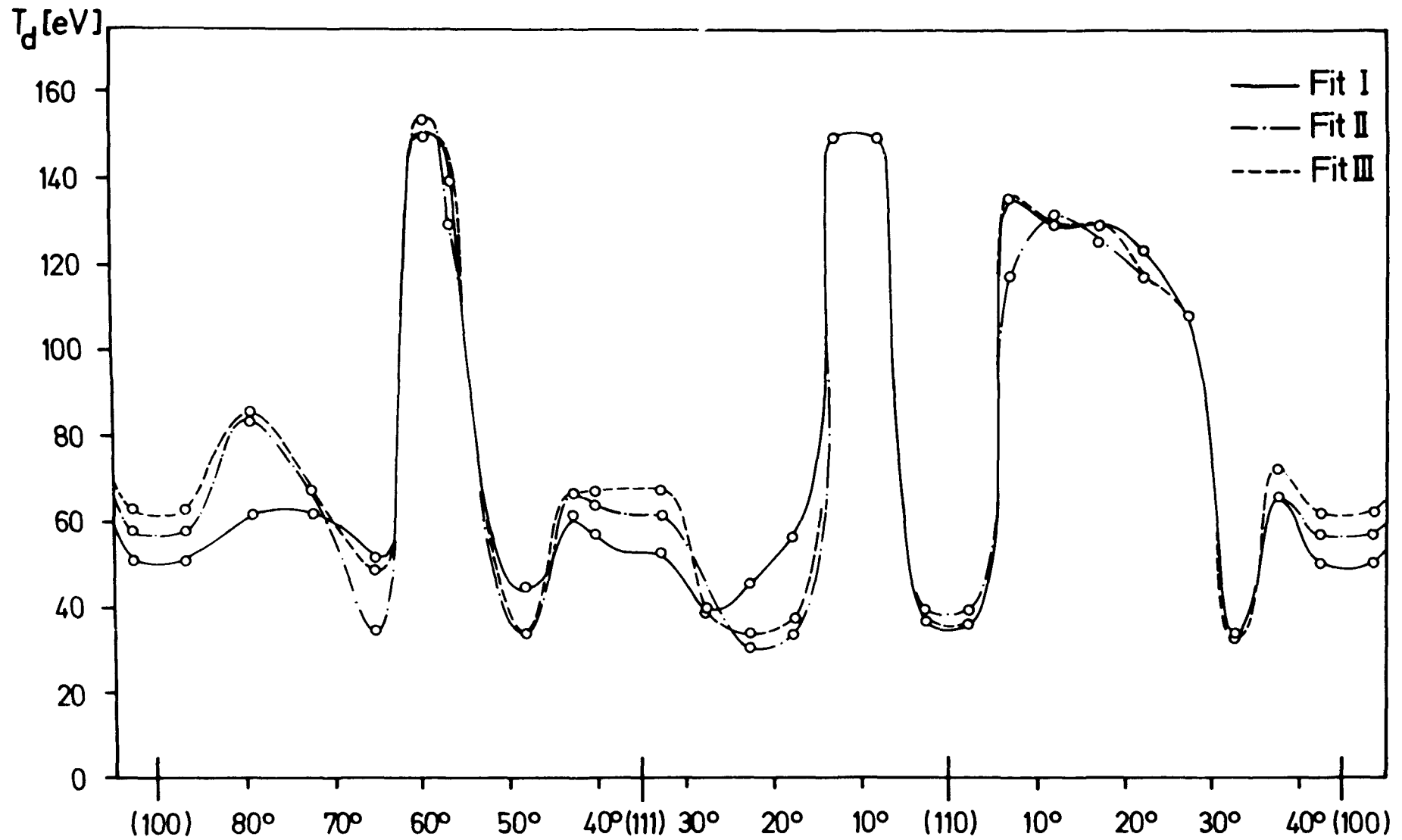


Abb. 49 Verlauf der Schwellenenergieprofile von Abb. 48 längs des Randes des Orientierungsdreiecks.

Das zweite Verfahren bestand darin, für jeden Parameter bei Konstanzhaltung der anderen das Minimum der Abweichung zu suchen. Auch dieses Verfahren wurde mehrmals durchgeführt, bis sich kein Parameterwert mehr verbessern ließ.

Beide Methoden sind insofern unbefriedigend, als sie an sich nur das Auffinden lokaler Minima gestatten. Diese Unsicherheit konnte aber durch Variation der Ausgangsparameter und der Änderungsschrittweiten beseitigt werden. Es zeigte sich, daß nur ein einziges absolutes Minimum existiert, das aber für einzelne Schwellwertparameter, besonders für diejenigen der Bereiche zwischen den Hauptrichtungen ziemlich flach ist. In den Abbildungen 46 und 47 sind einige Fits eingetragen. Die zugehörigen Schwellenenergien im Orientierungsdreieck bzw. entlang dessen Grenzen sind in den Abbildungen 48 und 49 wiedergegeben. Man sieht, daß sich tatsächlich flache Bereiche mit niederen Schwellen um die drei Hauptrichtungen ergeben und daß außerhalb dieser Bereiche die Schwellenenergie rasch auf über 130 eV ansteigt.

Der Winkelbereich um die (110)-Richtung ist erheblich kleiner als diejenigen um die beiden anderen Hauptrichtungen. Es läßt sich nicht mit absoluter Sicherheit sagen, ob in (110)-Richtung überhaupt ein Minimum existiert, da der entsprechende kleine Bereich nur bei Energien nahe der Schwelle die Anpassung beeinflusst. Um diese Frage zu entscheiden, wären sehr genaue Messungen bei niederen Energien nötig. Weiterhin sind die Bereiche deutlich nicht kreisförmig, sondern mehr oder weniger stark in Richtung der anderen Hauptrichtung deformiert. Die (100)- und (111)-Bereiche zeigen entlang der Hauptrichtungen deutliche Maxima und erst etwas außerhalb der Hauptrichtung treten Gebiete mit geringerer Schwelle auf. Diese Tatsache ist in Einklang mit den Ergebnissen von Erginsoy et al. (s. Abb. 14 und 15).

Das so erhaltene Schwellenenergieprofil wurde nun durch Anpassung von Meßpunkten außerhalb der Hauptrichtungen überprüft. Dabei ergaben sich Schwellenenergiewerte, die nahezu ausnahmslos innerhalb des Streubereiches der Werte in Abbildung 48a lagen, d.h. es ergab sich im wesentlichen derselbe Profilverlauf.

Als niederster T_d -Wert wurde, ebenso wie bei den Anpassungen mit dem Kastenprofil stets 32 ± 2 eV erhalten. Dieser Wert ist

in Übereinstimmung mit bisherigen Meßergebnissen an polykristallinem Tantal von D.Meißner /54/ (ca. 32 eV) und G.Youngblood et al. /58/, die 32 ± 3 eV als minimale Schwelle angeben.

Der mittlere Wert für den Widerstand pro Atomprozent Frenkel-paare:

$$\rho_F \approx 17 \pm 3 \mu\Omega\text{cm} / \text{at} \%$$

liegt etwas über dem nach der Regel von Lucasson und Walker /59/ zu erwartenden Wert. Diese empirische Regel, die aus Anpassungen von Messungen an verschiedenen polykristallinen Metallen /60/ abgeleitet wurde, besagt, daß ρ_F etwa gleich dem thermischen Widerstand bei 0°C (oder bei der Debye-Temperatur Θ) ist. Für Tantal liegt die Debye-Temperatur etwa bei 240 K und die entsprechenden Widerstandswerte sind etwa:

$$\rho_0 \approx 12.6 \mu\Omega\text{cm} \quad \text{bzw.} \quad \rho_\Theta \approx 11.5 \mu\Omega\text{cm} .$$

6.3 Diskussion

Um die Herleitung der gemessenen Verläufe der Schädigungs-raten (Abb. 24 und 38) aus einem einfachen Schwellenenergieprofil (Abb. 45 A) anschaulich zu machen, ist in Abbildung 50 der Beitrag der einzelnen Bereiche um die Hauptrichtungen zur Gesamtschädigungsrate getrennt aufgetragen. Allgemein sieht man, daß der Beitrag eines Bereichs umso später wirksam wird und wegen des starken Ansteigens des Wirkungsquerschnitts mit dem Streuwinkel (s. Gleichung (3)) umso mehr Gewicht erhält, je größer der Winkelabstand des Bereichs von der Einschußrichtung der Elektronen ist. Weiter spielt natürlich für den Beitrag eines Bereichs seine Größe im Orientierungsdreieck eine entscheidende Rolle. Wird nach Gleichung (2) an jeder Stelle eines Bereichs dessen Schwellenenergie von der Rückstoßenergie der in diese Richtung gestoßenen Atome übertroffen, so nimmt die Schädigungsrate mit zunehmender Energie etwa wie $1/T$ ab.

Im einzelnen sieht man, daß bei Bestrahlung in (111)-Richtung zunächst der Beitrag des (111)-Bereichs überwiegt, und erst ab ca 80 eV die Beiträge aus den (100)-Bereichen (mittlerer Winkelabstand 45°) und aus anderen (111)-Bereichen (mittlerer Winkelabstand 70°) hinzukommen. Die Schädigung bei Bestrahlung in (110)-

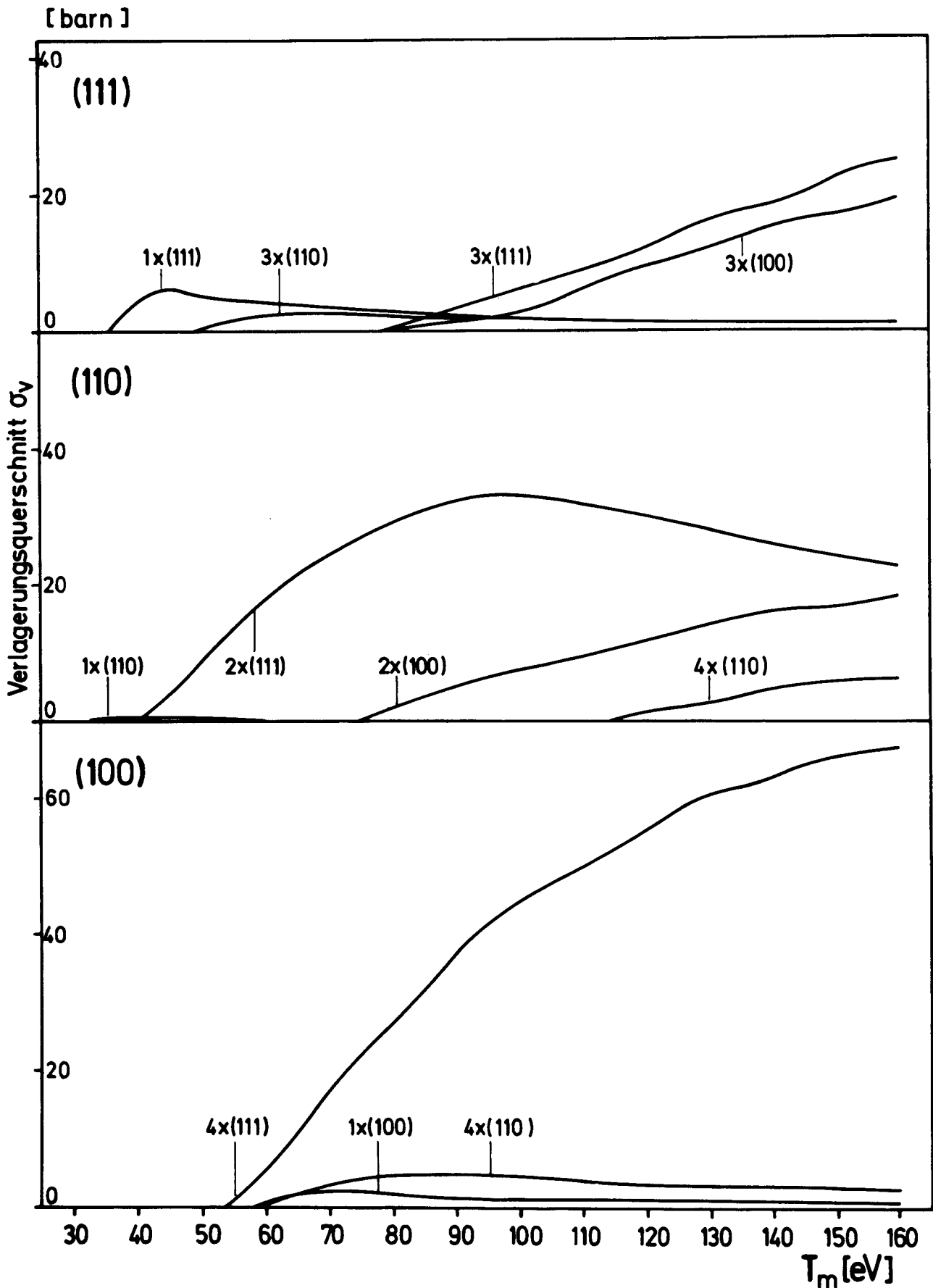


Abb. 50

Beitrag der einzelnen Bereiche um die drei Hauptrichtungen des Schwellenenergieprofils in Abb. 45 A zur Schädigungsrate in den Hauptrichtungen. Es wird jeweils die Anzahl der Bereiche angegeben, von denen der entsprechende Beitrag herrührt.

Richtung erfolgt bei niederen Energien vor allem im (111)-Bereich (mittlerer Winkelabstand 35°). Ab ca 75 eV kommt ein steigender Anteil der (100)-Richtung (mittlerer Winkelabstand 45°) und ab ca 115 eV ein kleiner Anteil weiterer (110)-Richtungen (mittlerer Winkelabstand 60°) hinzu. Im Gegensatz dazu trägt bei Bestrahlung in (100)-Richtung praktisch im ganzen Energiebereich nur der Beitrag der (111)-Bereiche (mittlerer Winkelabstand 55°) zur Schädigung bei.

Einfachere Überlegungen dieser Art wurden für Silizium von P.C.Banbury et al. /29, 30/ angestellt, wobei angenommen wurde, daß nur in kleinen Bereichen um die (111)-Richtung die Schwelle endlich ist. Die Größenverhältnisse der Schädigungsraten bei Bestrahlung in den Hauptrichtungen wurden dann einfach durch Abzählen der bei einer bestimmten Energie erreichbaren (111)-Bereiche abgeschätzt. Dieses Modell wurde von P.L.F.Hemment et al. /31/ durch Computerrechnungen mit Profilen der in Abbildung 45 dargestellten Art ausgebaut. Analog zur vorliegenden Arbeit ergaben sich bei der Anpassung an die experimentellen Daten von Banbury große Bereiche mit niederen Schwellenenergiewerten um die (111)-Richtungen, kleinere um (100) und vernachlässigbare um (110). Die Existenz solcher Schwellenenergie-"Fenster", wie sie also in Tantal und Silizium gefunden werden, geben aber nach Kapitel 3.2 Anlaß anzunehmen, daß die Entstehung von Frenkeldefekten vor allem über Ersetzungsstöße abläuft.

Weitere Vergleiche sollen wegen des unterschiedlichen Kristall- und Bindungstyps nicht angestellt werden.

Andererseits sollten im fcc-Gitter Unterschiede der Schwellenenergie zwischen den einzelnen Hauptrichtungen von mindestens derselben Größe wie im bcc-Gitter erwartet werden (vergleiche Tabelle I und II). Es ist daher unerklärlich, daß die bisherigen Einkristall-Messungen an fcc-Metallen keine nennenswerte Anisotropie der Schädigungsraten erbrachten.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß aus experimentell bestimmten Schwellenenergieprofilen rückwärts über Computerrechnungen (s. Kapitel 3.2) mit möglichst allgemeinem Potentialansatz Aufschluß über den tatsächlichen Verlauf des Wechselwirkungspotentials, zumindest im Bereich hoher Energien, erhalten werden könnte.

7. Zusammenfassung

An 15 μm Tantal-Einkristallfolien mit (110)-Orientierung wurde im Energiebereich von 1.0 bis 3.2 MeV der Wirkungsquerschnitt für die Erzeugung von Frenkelpaaren in Abhängigkeit von der Orientierung der Folie zum Elektronenstrahl über einen weiten Bereich im Orientierungsdreieck bestimmt. Im Gegensatz zu den bisher untersuchten fcc - Metallen Kupfer und Gold ergab sich eine starke Richtungsabhängigkeit der Schädigungsrate im Energiebereich über 1.3 MeV.

Die Meßwerte wurden bezüglich der Strahlaufweitung durch die endliche Probendicke rechnerisch korrigiert. Es wurde versucht, an diese korrigierten Werte verschiedene Schwellenenergieprofile anzupassen. Dabei war eine befriedigende Übereinstimmung nur mit solchen Profilen zu erzielen, bei denen die mittlere Schwellenenergie in Bereichen von ca. 20° um die (111)-Richtung 36 ± 2 eV und in Bereichen von ca. 18° um die (100)-Richtung 53 ± 3 eV betrug und im Bereich zwischen den Hauptrichtungen auf über 130 eV anstieg.

Die Existenz solcher "Fenster" um die Hauptrichtungen ist ein starker Hinweis darauf, daß stabile Frenkelpaare über Ersetzungsstöße erzeugt werden, d.h. daß im allgemeinen nicht das primär angestoßene Atom das Zwischengitteratom bildet.

Während das Auftreten dieser Schwellenenergie-"Fenster" um die (111)- und die (100)-Richtung mit den Ergebnissen aus Computer-"Experimenten" von C. Erginsoy et al. für bcc-Eisen übereinstimmt, stehen die Größenverhältnisse der Schwellen in den Hauptrichtungen im Gegensatz zu den Ergebnissen von Erginsoy und auch zu den Abschätzungen von H.H. Andersen et al. für Tantal.

Als niederste Schwelle ergab sich 32 ± 2 eV und für den Widerstandszuwachs pro Atomprozent Frenkelpaare $17 \pm 3 \mu\Omega\text{cm}$.

8. Literaturverzeichnis

- / 1/ N.F. Mott, Proc. Roy. Soc. 124 (1929) 426; 135 (1932) 429
- / 2/ W.A. McKinley, H. Feshbach, Phys. Rev. 74 (1948) 1759
- / 3/ O.S. Oen, Oak Ridge Nat. Lab. ORNL-3813 (1965)
- / 4/ J.M. Corbett, in F. Seitz und D. Turnbull (Ed.) "Solid State Physics Suppl. 7", New York (1966)
- / 5/ G. Moliere, Z. f. Naturforschung 3a (1948) 78
- / 6/ O.S. Oen, in F.L. Vook (Ed.) "Radiation Effects in Semiconductors" (1968), Proc. Santa Fe Conf. on Rad. Effects in Semiconductors 1967, p. 264
(O.S. Oen erhält in Gleichung (7) als Zahlenfaktor 6680, wodurch aber $\bar{\alpha}^2$ um weniger als 3% geändert wird.
- / 7/ B. Rossi, K. Greisen, Rev. Mod. Phys. 13 (1941) 240
- / 8/ N.F. Mott, H.S.W. Massey, Rev. Mod. Phys. 17 (1945) 467
- / 9/ A.O. Hanson, L.H. Lanzl, E.M. Lyman, M.B. Scott, Phys. Rev. 84 (1951) 634
- /10/ C.N. Yang, Phys. Rev. 84 (1951) 599
- /11/ A.T. Nelms, NBS-Circular 577 (26.7.1956)
- /12/ C.H. Sherman, L.F. Love, E.A. Burke, Phys. Rev. 145 (1966) 568
- /13/ H. Wenzl, in A. Seeger (Ed.) "Vacancies and Interstitials in Metals" (1969) 363
- /14/ K. Feese, KFA Jülich Rep. Jül-658-FN-April 1970

- /15/ R.E. Longshore, R.L. Chaplin, Bull. Am. Phys. Soc. 12 (1967) 302
- /16/ A. Sosin, K. Garr, Phys. Stat. Sol. 8 (1965) 481
- /17/ Chr. Lehmann, Nukleonik 3 (1961) 1
- /18/ G.H. Kinchin, R.S. Pease, Rep. Prog. Phys. 18 (1955) 1
- /19/ J. Wurm, F. Dworschak, H. Schuster, H. Wollenberger, Rad. Eff. 5 (1970) 117
- /20/ C. Erginsoy, G.H. Vinegard, A. Shimizu, Phys. Rev. 139 (1965) A 118
- /21/ W. Bauer, A. Sosin, J. Appl. Phys. 35 (1964) 703
- /22/ K. Kamada, Y. Kazumata, S. Suda, Phys. Stat. Sol. 7 (1964) 231
- /23/ W.L. Brown, W.M. Augustiniak, J. Appl. Phys. 30 (1959) 1300
- /24/ Y. Chen, J.W. MacKay, Phys. Rev. 167 (1968) 745
- /25/ H.H. Neely, W. Bauer, Phys. Rev. 149 (1966) 535
- /26/ C.G. Roberts, W.P. Rickey, P.E. Shearin, J. Appl. Phys. 37 (1966) 4517
- /27/ I.N. Haddad, P.C. Banbury, J.A. Grimshaw, Phil. Mag. 12 (1965) 1203
- /28/ I.N. Haddad, P.C. Banbury, Phil. Mag. 14 (1966) 829
- /29/ P.C. Banbury, I.N. Haddad, Phil. Mag. 14 (1966) 841
- /30/ P.C. Banbury, in F.L. Vook (Ed.) "Radiation Effects in

- /30/ Semiconductors" (1968), Proc. of the Santa Fe Conf. on Rad. Eff. in Semiconductors 1967, p. 280
- /31/ P.L.F. Hemment, P.R.C. Stein, in F.L.Vook (Ed.) "Radiation Effects in Semiconductors" (1968), Proc. of the Santa Fe Conf. on Rad. Eff. in Semiconductors 1967, p. 290
- /32/ T. Iwata, T. Nihira, Phys. Lett. 23 (1966) 631
- /33/ G.L. Montet, Carbon 5 (1967) 19
- /34/ F.H. Eisen, Phys. Rev. 135 (1964) 1394
- /35/ A. Sosin, W. Bauer, in G.J. Dienes (Ed.) "Studies in Rad. Effects in Solids" Vol 3 (1969), p. 153
- /36/ W. Bauer, A. Sosin, J. Appl. Phys. 37 (1966) 1780
- /37/ H. Wollenberger, J. Wurm, Phys. Stat. Sol. 9 (1965) 601
- /38/ Duesing, Diplomarbeit, Techn. Hochschule Aachen (1964)
- /39/ J.N. Lomer, M. Pepper, Phil. Mag. 16 (1967) 1119
- /40/ P.C. Banbury, J.N. Lomer, E.W.J. Mitchell, in A. Goland (Ed.) "Int. Conf. on Solid State Physics Research with Accelerators" (1967), p. 304
- /41/ W.E. Gettys, Phys. Rev. 146 (1966) 480
- /42/ J.B. Gibson, A.N. Goland, M. Milgram, G.H. Vinegard, Phys. Rev. 120 (1960) 1229
- /43/ C. Erginsoy, G.H. Vinegard, A. Englert, Phys. Rev. 133 (1964) A 595
- /44/ A. Anderman, Rep. AD-643956 (1966)

- /45/ A.H. Scholz, KFA Jülich, Rep. Jül-653-MA (April 1970)
- /46/ E. Mann, A. Seeger, J. Phys. Chem. Sol. 12 (1960) 314
- /47/ M.W. Thompson, in R. Strumane (Ed.) "The Interaction of Radiation with Solids" (1964) p. 84
- /48/ G. Duesing, G. Leibfried, Phys. Stat. Sol. 9 (1965) 463
- /49/ A. Sosin, Phys. Rev. 126 (1962) 1698
- /50/ P. und A. Lucasson, J. de Phys. 24 (1963) 503
- /51/ H.H. Andersen, P. Sigmund, Risø Rep. 103 (1965)
- /52/ Chr. Lehmann, G. Leibfried, Z. Phys. 162 (1961) 203
- /53/ G. Leibfried, J. Appl. Phys. 30 (1959) 1388
- /54/ D. Meißner, KFA Jülich, Rep. Jül-642-FN (März 1970)
- /55/ J. Hemmerich, KFA Jülich, Rep. Jül-579-FN (März 1969) und Z. Angew. Phys. 29 (1970) 1
- /56/ J. Wurm, KFA Jülich, Rep. Jül-581-FN (März 1969)
- /57/ R. v.Jan, A. Seeger, Phys. Stat. Sol. 3 (1969) 465
- /58/ G. Youngblood, S. Myhra, J.W. DeFord, Phys. Rev. 188 (1969) 1101
- /59/ P.G. Lucasson, R.M. Walker, Phys. Rev. 127 (1962) 1130
- /60/ P.G. Lucasson, R.M. Walker, Phys. Rev. 127 (1962) 485

Diese Arbeit wurde im Institut IX (Gitterfehlordnung) des Instituts für Festkörperforschung der Kernforschungsanlage Jülich GmbH durchgeführt.

Ich möchte vor allem Herrn Professor Dr. W. Schilling für die Anregung zu dieser Arbeit und sein stets förderndes Interesse danken.

Weiter bedanke ich mich bei Herrn Dr. H. Hemmerich und der Bestrahlungsgruppe des Instituts für die unermüdliche Hilfe bei der experimentellen Durchführung,

Herrn Dipl.-Phys. R. Amadori für die Unterstützung bei der Anfertigung der Rechenprogramme,

Herrn M. Beyß für die Reinigung der Proben

und den Herren von der Werkstatt für die Anfertigung wesentlicher Teile der Meßapparatur.

Nicht vergessen möchte ich, mich für die stete Diskussionsbereitschaft dieser und anderer Mitglieder des Instituts zu bedanken, die viele Probleme klären half.