

5. Theoretische Simulation der Emissionsspektren

5.1 Theoretisches Modell für die Gitterführung von Elektronen und die Simulation der Effekte mit der Manybeam-Rechnung

Die de Broglie Wellenlänge von Elektronen mit einer Energie von mehreren hundert keV liegt in der Größenordnung der Abstände der Atome im Kristall. Deshalb ist eine quantenmechanische Beschreibung der Elektronen nötig. Eine andere Abschätzung, ob quantenmechanisch gerechnet werden muß, ist die Anzahl der gebundenen Zustände im Kontinuumspotential. Sind nur wenige (1-5) gebundene Zustände vorhanden, so muß quantenmechanisch gerechnet werden. Ihre Anzahl kann aus Phasenraumbetrachtungen abgeschätzt werden, in die z.B. das Standardkontinuumspotential von Lindhard eingeht. [LIND70]. In Bild 5.1 sieht man, daß hier zwei gebundene Zustände im transversalen Potential existieren.

Wir können die Bewegung des Elektrons durch eine Kugelwelle, die vom Emitter ausgeht, beschreiben. Diese wechselwirkt mit dem periodischen Potential der Gitteratome. Die resultierende Welle beschreiben wir als Blochwelle. In der quantenmechanischen Berechnung müssen wir die Klein-Gordon-Gleichung für relativistische Elektronen lösen. Man erhält dann die Energieeigenwerte und Eigenzustände der Blochwellenfunktionen [HOFS94]. Das Potential wird durch eine Summe von Gaußfunktionen dargestellt. Die Potentiale der meisten Atome wurden von Doyle und Turner mit Hartree-Fock-Rechnung berechnet. Die Potentiale wurden dann als eine Summe von vier Gaußfunktionen als Parameterform dargestellt. Die Parameter können von Doyle und Turner [DOYLE68] übernommen werden. Zusätzlich nähern wir das Potential zweidimensional, indem wir die Atomreihen senkrecht zur Oberfläche als Kontinuum ansehen, da wir nur die Ausbreitung nahezu parallel zur Achse betrachten.

Das axiale Kontinuumspotential hat die Form:

$$U(r) = -\frac{2e^2 a_0}{d} \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{b_i / 4\pi^2 + \rho^2} e^{-\frac{r^2}{b_i / 4\pi^2 + \rho^2}}$$

a_0 :	Bohr'scher Radius
d :	mittlerer Abstand der Atome in der Reihe
a_i und b_i :	Doyle-Turner-Koeffizienten
ρ^2 :	mittlere quadratische thermische Auslenkung

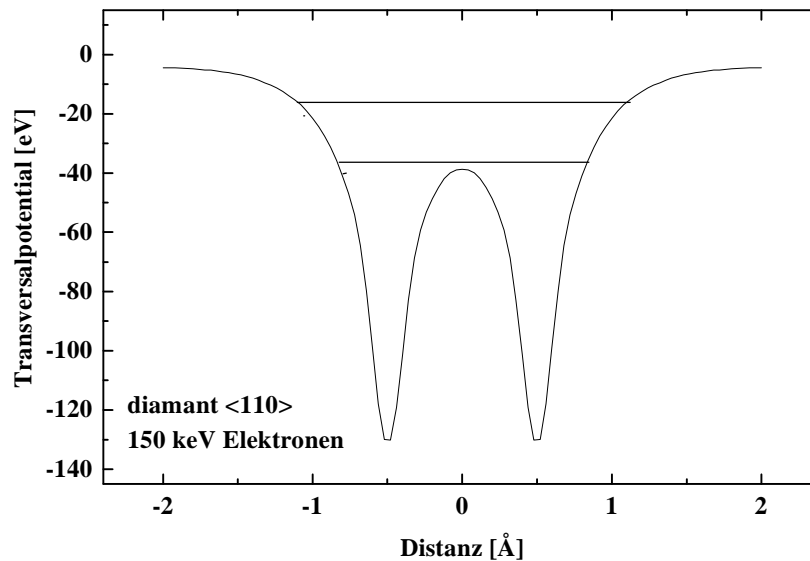


Bild. 5.1: Axiales Kontinuumspotential, berechnet für Diamant in $\langle 110 \rangle$ Kristallachsenrichtung. Eingezeichnet sind die energetischen Lagen der Elektronenzustände für eine Energie der Elektronen von 150 keV

In diesem Fall wird nur die Transversalbewegung betrachtet. Dies führt zu diskreten Energieniveaus im transversalen Potential, die in Bild 5.1 für Elektronen mit einer Energie von 150 keV im Diamantgitter dargestellt sind. Jeder Zustand entspricht einer Blochwelle. Die Blochwellen wandern durch den Kristall nach außen. Außerhalb des Kristalls beschreiben wir die Elektronen als ebene Welle, die zu dem longitudinalen Anteil nun auch eine transversale Komponente besitzt, wodurch sich ein Winkel Θ gegenüber der Kristallnormale bildet. Wegen des Reziprozitätstheorems der Streutheorie [ANDE68] können wir in der Rechnung den in der Zeit gespiegelten Vorgang rechnen und beschreiben die einfallenden Elektronen als ebene Welle und berechnen die Elektronenflußdichte aus den Intensitäten der Blochwellen im transversalen Kontinuumspotential. Der Vorteil dieser Rechnung ist, daß man mit einem Rechenvorgang die Elektronenflußdichte in Abhängigkeit der Tiefe und des Abstandes des Emitters zu einer Atomreihe für einen bestimmten Winkel erhält. Würde man die Elektronen als einzelne Emitter rechnen, so müßte für jede Tiefe und jede Emitterposition eine Rechnung durchgeführt werden. Die Rechenmethode ist schematisch in Bild 5.2 gezeigt.

Prozesse, die eine Verringerung der Anzahl der gittergeführten Elektronen im Kristallgitter bewirken, werden Dechanneling genannt. Das sind, klassisch betrachtet, Prozesse mit kleinem Stoßparameter. Quantenmechanisch bedeutet Dechanneling die Entvölkerung der gebundenen Zustände der Wellenfunktion durch Übergänge zwischen diesen Zuständen und dem Kontinuum. Dechanneling führt zu einer exponentiellen Abnahme der Elektronenflußdichte mit der freien Weglänge der Elektronen. Im Gegensatz zum Ionen-Channeling hat man beim Elektronen-Channeling selbst im perfekten Kristall Dechanneling.

Drei Prozesse sind daran beteiligt [ANDE82]:

1. Streuung an Phononen (thermisch inkohärente Streuung)
2. Streuung an den Elektronen des Kristalls (Plasmonenanregung)
3. Streuung an strukturellen Defekten

Um quantitative Aussagen über Gitterplätze der Emitter machen zu können, muß der Channelingeffekt möglichst genau simuliert und dann mit den experimentellen Messungen verglichen werden. Hierzu bedient man sich der Manybeam-Simulation. Zuerst entwickelt man die Potentiale und die Wellenfunktionen als Fourierreihe. Jede Fourierkomponente entspricht einem Strahl, bzw. einem beam (Manybeam). Die resultierende Elektronenflußdichte ergibt die normierte Emissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Implantationstiefe, des Ortes und des Winkels. Diese wird mit dem Implantationsprofil der Emitter gefaltet (siehe Bild 5.3). Man rechnet nun ein Raster von Emissionswinkeln, indem man den Azimut und den Polarwinkel variiert, und die Rechnung für jeden Punkt durchführt.

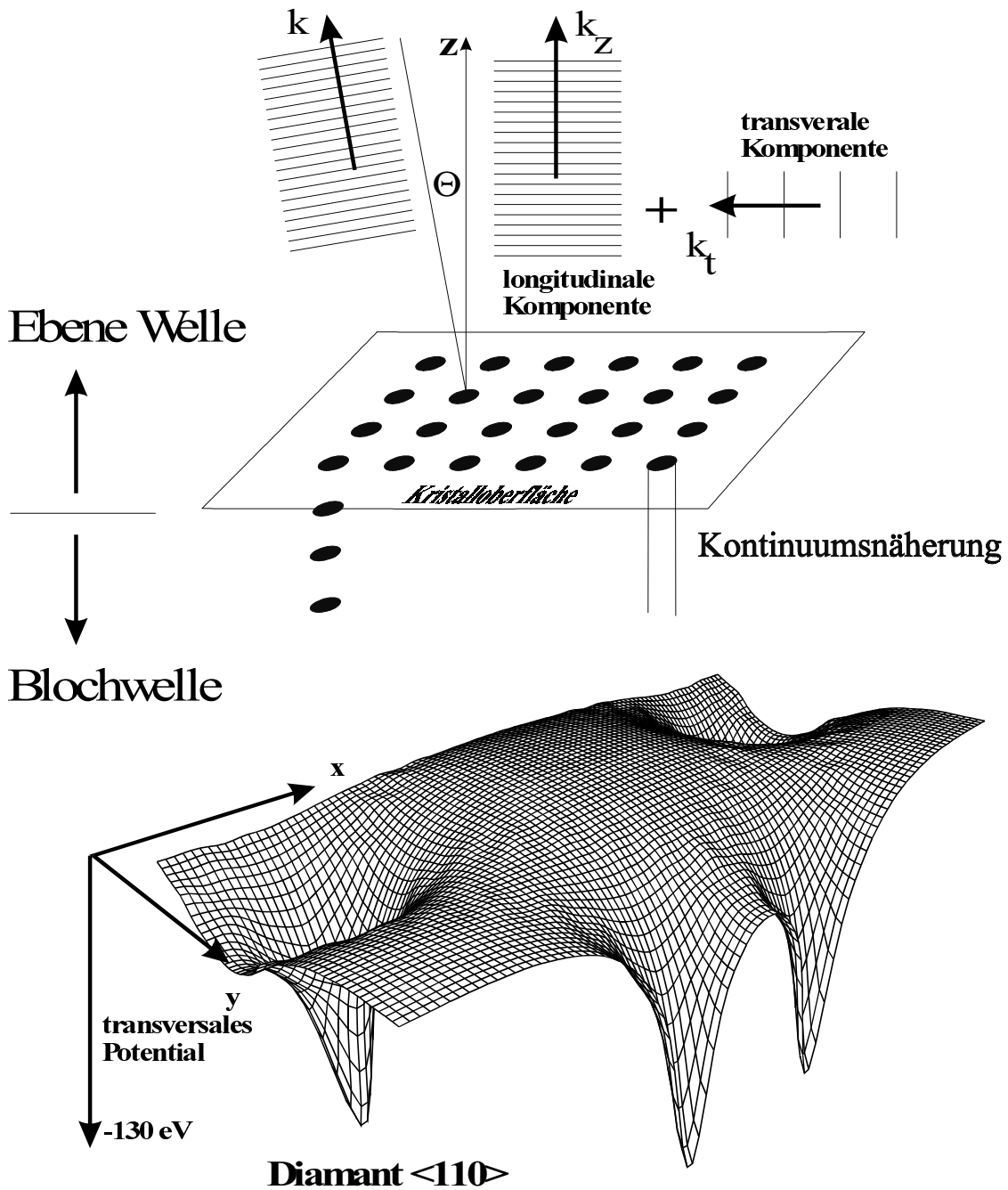


Bild 5.2: Schematisch dargestellt ist hier die Rechenmethode der Manybeam Simulation. Man betrachtet die transversale Komponente der Elektronenbewegung als ebene Welle außerhalb und als Blochwelle innerhalb des Kristalls.

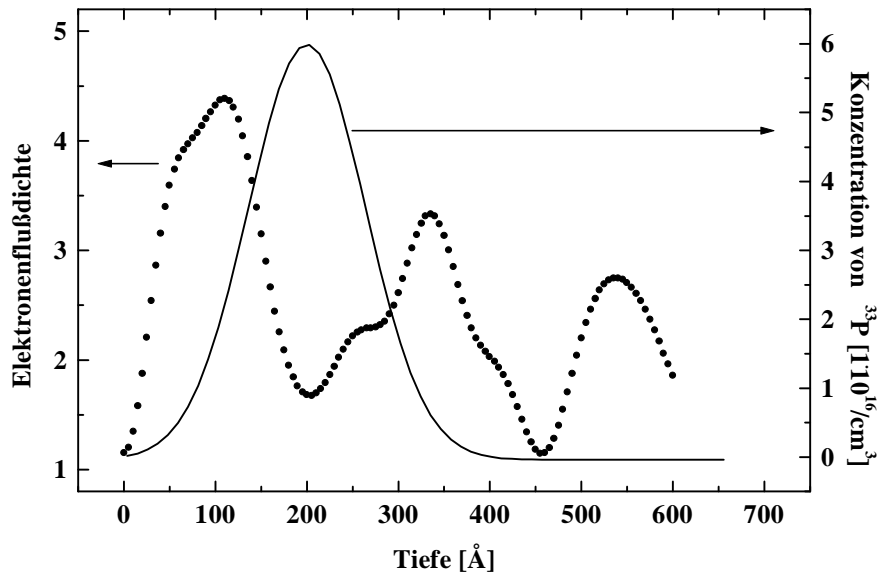


Bild 5.3.: Elektronenflußdichte, berechnet für 150 keV Elektronen im Diamantgitter entlang der $\langle 110 \rangle$ Achse, für den Winkel 0° und das Implantationsprofil von ^{33}P implantiert mit 30 keV.

5.2 Empfindlichkeit der Rechnung auf experimentelle Parameter

Da das Dechanneling durch thermisch inkohärente Streuung von den Gitterschwingungen des Kristalls abhängt und diese nach folgender Formel von der Temperatur des Substrats und der Debyetemperatur abhängen, gehen diese Größen auch in die Simulation mit ein und müssen berücksichtigt werden.

$$u^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4Mk_B\Theta_D} \left[1 + \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x}{e^x - 1} dx \right]$$

Für den Emitter ergibt sich das Problem, daß eine Debytemperatur für ein einzelnes Atom in einem fremden Gitter nicht immer bekannt ist. Deshalb verwendet man folgende Beziehung um experimentell nicht bekannte Debytemperaturen von Fremdatomen zu berechnen.

$$\Theta_{(\text{eff})} = \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \Theta_D$$

Dabei wird angenommen, daß die Bindungskräfte unter Gitteratomen und zwischen Fremdatomen und Gitteratomen gleich sind [SCHP64].

Außerdem hängt das Dechanneling auch von der Implantationstiefe ab, da die Elektronenflußdichte exponentiell mit der Tiefe abnimmt. Die Implantationstiefe kann, wie schon beschrieben, mit TRIM [ZIEG85] berechnet werden.

In die simulierte Effekthöhe der Channelingspektren geht die Winkelauflösung mit ein. Das gerechnete Emissionchannelingspektrum muß mit der experimentellen Winkelauflösung des Detektors gefaltet werden.

Die Besetzung der Zustände im transversalen Potential hängt von der Energie der Zerfallsprodukte in transversaler Richtung und damit von ihrer Gesamtenergie ab. Deshalb muß die Energie der Elektronen ermittelt und eingegeben werden, was beim Channeling von Konversionselektronen kein Problem darstellt, jedoch bei β^- Emittern zu einer neuen Problematik führt, auf die in Kapitel 6.2 genauer eingegangen werden soll.

Eine weitere Fragestellung ist die Abhängigkeit der Simulation auf eine Auslenkung der Emitteratome aus der Kristallachse, also die Fragestellung, bis zu welcher statischen Auslenkung das Atom für uns noch als substitutionell gilt, beziehungsweise, ob Kristallschwingungen hier den Effekt auch auf direkte Weise und nicht nur über das Dechanneling beeinflussen können, indem die Auslenkungen der Gitteratome die Emitter aus dem Gitterführungspotential führen und die dann emittierten Elektronen in dem Potential nicht mehr geführt werden. In Bild 5.4 sind Rechnungen für verschiedene statische Auslenkungen der Emitter ^{33}P von der $\langle 110 \rangle$ Kristallachse für eine Elektronenenergie von 150 keV gezeigt. Man erkennt eine deutliche Reduzierung der Effekte für Abweichungen größer 0.2 \AA vom substitutionellen Platz.

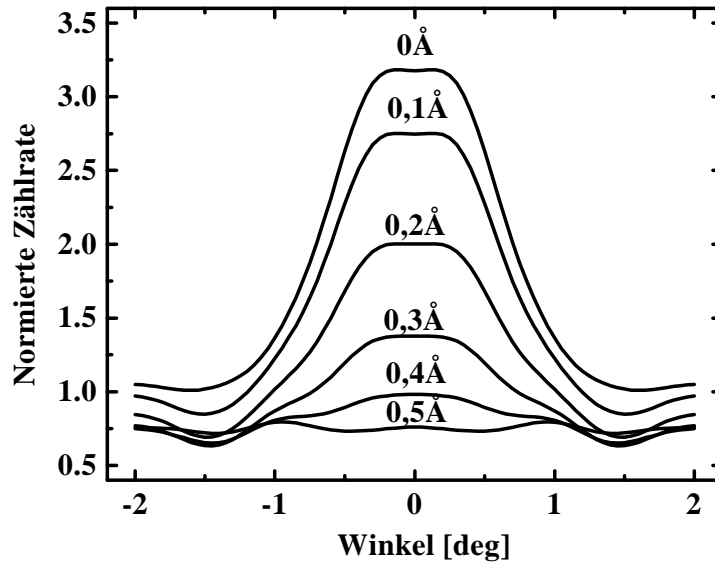


Bild 5.4: Simulierte Emissionshöhe in Abhängigkeit der Auslenkung der Emitter ^{33}P von der $\langle 110 \rangle$ Kristallachse mit einer Elektronenenergie von 150 keV.

6. Radioaktive Sondenatome

6.1 Der Beta - Zerfall und die schwache Wechselwirkung

1914 wurde von Chadwick gezeigt, daß Kerne Elektronen mit einer kontinuierlichen Energieverteilung emittieren. Die Kernladungszahl ändert sich dabei um Eins. Da es sich um einen Übergang zwischen Grundzuständen mit fest definierter Energie handelt, wäre der Energieerhaltungssatz verletzt. Ähnlich verhält es sich mit dem Drehimpuls: Die Spins von Mutter- und Tochterkern unterscheiden sich um Null oder Eins, während man bei der Emission von Elektronen eine halbzahlige Spinänderung erwarten würde. Daher forderte Pauli 1930 die Existenz des Neutrinos. Der direkte Nachweis konnte jedoch erst in den 50er Jahren ausgeführt werden.

Da β - Zerfallsprozesse sehr viel kleinere Übergangswahrscheinlichkeiten haben als Prozesse, die durch Kernkräfte oder elektromagnetische Kräfte verursacht werden, spricht man auch von der schwachen Wechselwirkung.