

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Grundlagen der Zerstäubung	7
2.1 Zerstäubungsmodelle	11
2.1.1 Single knock-on regime	12
2.1.2 Linear collision cascade	12
2.1.3 Spike regime	13
3 Molekulardynamik Simulation	15
3.1 Potentiale	17
3.1.1 Paarpotentiale	17
3.1.2 Vielteilchenpotentiale	21
3.2 Randbedingungen und Kristallgröße	27
3.3 Integrationsalgorithmen	31
3.3.1 Gear-Predictor-Corrector-Algorithmus .	32
4 Simulation der Teilchendynamik mit SPUT93	35
4.1 Modellkristall und Positionierung/Geschwindigkeit der Projektil	36
4.2 Zeitschrittänge und Nachbarschaftslisten	40
4.3 Abbruchbedingung	41
4.4 Analyse der zerstäubten Teilchen	42

Inhaltsverzeichnis

5 Anregungsmodelle	45
5.1 Elektronische Reibung	46
5.2 Electron Promotion	52
5.2.1 Zener-Formalismus	57
5.2.2 Ratenmodell für Übergänge aus dem dia- batischen Modell	59
5.2.3 Anregungsspektrum	63
6 Transport der Anregungsenergie	65
6.1 Diffusionskoeffizient	67
6.2 Numerische Implementierung	70
6.3 Randbedingungen	72
6.4 Auswirkungen verschiedener physikalischer Pa- rameter auf die Elektronentemperaturen	75
6.4.1 Lochenergien	75
6.4.2 Cut-off-Radius	76
6.4.3 Anfangsbedingungen	77
6.4.4 Weitere Parameter	78
7 Sekundärionenbildung	81
7.1 Einleitung	81
7.2 Modell	81
7.3 Ergebnisse	88
7.4 Zusammenfassung	100
8 Einfluss der Anregungs- und Transportparameter auf die Sekundärionenbildung	101
8.1 Abhängigkeit der Ionisierungswahrscheinlichkeit vom Parameter r_{cut}	102
8.2 Energie in den Löchern des d -Bandes nach der Autoionisation in harten Stößen	103

8.3	Einfluss weiterer Parameter auf die Ionisierungswahrscheinlichkeit	105
8.4	Zusammenfassung	107
9	Einfluss der Oberflächenkonfiguration	109
9.1	Motivation	109
9.2	Ergebnisse	110
10	Einfluss des Beschusswinkels auf die Ionisierungswahrscheinlichkeit	117
10.1	Vorbemerkungen	117
10.2	Ergebnisse	118
10.3	Zusammenfassung	122
11	Einfluss der Projektilladung auf die Ionisierungswahrscheinlichkeit	125
11.1	Modell für die Anregung des Elektronengases	127
11.2	Thermische Elektronenemission	129
11.3	Ergebnisse für den Beschuss mit hochgeladenen Ionen	130
11.4	Zusammenfassung	134
12	Mehratomige Projektile	137
12.1	Besonderheiten der elektronischen Anregung unter Clusterbeschuss	138
12.2	Abhängigkeit der elektronischen Reibung von der Elektronendichte	141
12.3	Berücksichtigung der Kraterbildung als veränderliche Randbedingung der Diffusionsgleichung	149
12.3.1	Algorithmische Detektion der Oberfläche	150

Inhaltsverzeichnis

12.3.2 Berücksichtigung der Oberfläche in der Diffusionsgleichung	152
12.3.3 Behandlung der Anregungsenergie an der dynamischen Oberfläche	154
12.4 Ergebnisse bezüglich der Elektronentemperaturen unter Clusterbeschuss	155
12.5 Sekundärionenbildung unter Clusterbeschuss	162
12.6 Zusammenfassung bezüglich des Clusterbeschusses	169
13 Resümee	173
14 Danksagung	199