

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Zerstäubung</b>	<b>7</b>
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
<b>3</b>	<b>Molekulardynamik Simulation</b>	<b>15</b>
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
<b>4</b>	<b>Simulation der Teilchendynamik mit SPUT93</b>	<b>35</b>
4.1	Modellkristall und Positionierung/Geschwindigkeit der Projektile . . . . .	36
4.2	Zeitschrittlänge und Nachbarschaftslisten . . . . .	40
4.3	Abbruchbedingung . . . . .	41
4.4	Analyse der zerstäubten Teilchen . . . . .	42

<b>5</b>	<b>Anregungsmodelle</b>	<b>45</b>
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
<b>6</b>	<b>Transport der Anregungsenergie</b>	<b>65</b>
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
<b>7</b>	<b>Sekundärionenbildung</b>	<b>81</b>
7.1	Einleitung . . . . .	81
7.2	Modell . . . . .	81
7.3	Ergebnisse . . . . .	88
7.4	Zusammenfassung . . . . .	100
<b>8</b>	<b>Einfluss der Anregungs- und Transportparameter auf die Sekundärionenbildung</b>	<b>101</b>
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
<b>9</b>	<b>Einfluss der Oberflächenkonfiguration</b>	<b>109</b>
9.1	Motivation . . . . .	109
9.2	Ergebnisse . . . . .	110
<b>10</b>	<b>Einfluss des Beschusswinkels auf die Ionisierungswahrscheinlichkeit</b>	<b>117</b>
10.1	Vorbemerkungen . . . . .	117
10.2	Ergebnisse . . . . .	118
10.3	Zusammenfassung . . . . .	122
<b>11</b>	<b>Einfluss der Projektilladung auf die Ionisierungswahrscheinlichkeit</b>	<b>125</b>
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
<b>12</b>	<b>Mehratomige Projektil</b>	<b>137</b>
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

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
<b>13</b>	<b>Resümee</b>	<b>173</b>
<b>14</b>	<b>Danksagung</b>	<b>199</b>