



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5833

Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Schädigung und Aktivierung von reinem Eisen unter Bestrahlung mit höherenergetischen leichten Ionen

E. Daum

Institut für Materialforschung

Oktober 1996

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5833

**Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur
Schädigung und Aktivierung von reinem Eisen unter
Bestrahlung mit höherenergetischen leichten Ionen**

E. Daum

Institut für Materialforschung

**Von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation**

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1996

**Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

ISSN 0947-8620

Kurzfassung

In diesem Bericht wird mit experimentellen und theoretischen Ansätzen untersucht, inwiefern Leichtionenbestrahlungen zur Simulation von Verlagerungsschädigung durch Fusionsneutronenbestrahlung anwendbar sind. Dazu wurde die Produktion von primären Rückstoßkernen (PKA) und die Verlagerung von Gitteratomen (DPA) unter Protonen- und Alphateilchenbestrahlung in reinem Eisen betrachtet. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt auf den durch Kernreaktionen induzierten nichtelastischen Prozessen, welche zum ersten Mal quantitativ untersucht werden konnten. Der Verlauf eines nichtelastischen PKA-Spektrums kann durch die Anregungsfunktionen der auftretenden Kernreaktionen und durch die Rückstoßreichweiten der Restkerne charakterisiert werden.

In diesem Rahmen wurden die Anregungsfunktionen der Protonen- und Alphateilchen-induzierten Kernreaktionen, die auf die langlebigen Nuklide von ^{57}Ni bis ^{47}Sc führen, experimentell gemessen. Die kurzlebigen Nuklide wie $^{53}\text{Fe}_g$, $^{53}\text{Fe}_m$, $^{52}\text{Mn}_m$ und ^{52}V konnten zum ersten Mal untersucht werden. Die mittleren Rückstoßreichweiten der nichtelastisch erzeugten Rückstoßkerne wurden mit der selben Meßanordnung erhalten. Zur theoretischen Bestimmung des nichtelastischen PKA-Spektrums wurden Kern- und Reichweitenmodelle verwendet.

Ein Vergleich der experimentellen und theoretischen Daten zeigt, daß bei den meisten Anregungsfunktionen eine sehr gute Übereinstimmung und bei den mittleren Rückstoßreichweiten eine ausreichend gute Übereinstimmung vorhanden ist. Die Auswertung der Leichtionen-induzierten PKA-Spektren ergibt, daß die elastischen PKA einen großen Beitrag bei geringen Energien leisten, während die nichtelastischen PKA einen deutlichen Beitrag bei Energien oberhalb von 0,1 MeV zeigen. Der nichtelastische Beitrag nimmt mit steigender Projektilenergie zu. Der Vergleich der PKA-Spektren zwischen Leichtionen und Fusionsneutronen zeigt, daß mit 20 MeV Protonen die beste Simulation der Fusionsneutronen erreicht wird. Bei den α -Teilchen wird jedoch ein zu großer hochenergetischer Anteil erzeugt, der zu viele Kaskaden und Subkaskaden produziert. Allgemein betrachtet zeigt sich, daß Leichtionen viel besser zur Simulation von Fusionsneutronen geeignet sind, als bisher angenommen wurde. Die Analyse der DPA-Produktion führt auf einen zusätzlichen nichtelastischen Anteil gemessen an der Gesamtproduktion bei Protonen von ca. 30 % und bei α -Teilchen von ca. 20 %. Dies bedeutet für bisherige DPA-Berechnungen in Simulationsexperimenten, daß die Leichtionen-induzierten DPA-Werte um ca. 20 - 30 % erhöht werden müssen, wenn der nichtelastische Anteil berücksichtigt wird.

Mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit wurde das Computerprogramm LINDA (Light Ion Induced Non-elastic Damage and Activation) entwickelt. Dieses Programm kann dazu verwendet werden, die Aktivierung und die nichtelastische Verlagerungsschädigung von reinem Eisen in Abhängigkeit von der Eindringtiefe für typische Leichtionensimulationsexperimente zu berechnen.

Abstract

Theoretical and Experimental Investigations of the Damage and Activation of Pure Iron under Irradiation with Energetic Light Ions

In this report the applicability of light ion simulation irradiations with respect to the displacement damage under fusion neutron irradiation is investigated by theoretical and experimental activities. The production of primary knock-on atoms (PKA) and the displacement of lattice atoms (DPA) under proton and α -particle irradiation is considered in pure iron. The main focus is put on the effect of the non-elastic processes which are characterized by nuclear reactions and taken into account quantitatively for the first time. The profiles of the non-elastic PKA spectra can be characterized by the excitation functions of the corresponding nuclear reactions and by the mean recoil ranges of the residue nuclides.

In this framework the excitation functions of proton- and α -particle-induced nuclear reactions leading to the long-lived nuclides from ^{57}Ni to ^{47}Sc are measured. The short-lived nuclides $^{53}\text{Fe}_g$, $^{53}\text{Fe}_m$, $^{52}\text{Mn}_m$ and ^{52}V are investigated for the first time. The mean recoil ranges of the non-elastic PKA are experimentally determined by the same method. Based on theoretical calculations with nuclear and range models, non-elastic PKA spectra are obtained for all open reaction channels.

A comparison of experimental and theoretical data shows for the excitation functions a very good agreement and for the mean recoil ranges a reasonably good agreement. The analysis of the light ion-induced PKA spectra shows that the elastic PKA cause a broad contribution at low PKA energies while the non-elastic PKA provide a clear contribution at PKA energies higher than 0.1 MeV. The non-elastic fraction becomes more important for higher projectile energies. The comparison of the PKA-spectra between light ions and fusion neutrons shows, that 20 MeV protons are most suitable for simulation of fusion neutrons. The α -particles show however a high-energy tail which is too broad causing too much cascade and subcascade formation. Generally it is shown that the light ion-induced displacement damage is much more suitable for simulating fusion neutron induced displacement damage than previously believed. The analysis of the DPA-production shows that the additional non-elastic contribution to the total atomic displacements for high energetic protons and α -particles is $\approx 30\%$ and $\approx 20\%$, respectively. This means, that previously used DPA can be enhanced by 20 % to 30 % and former light ion simulation experiments might be reevaluated with respect to non-elastic displacement damage.

The investigations result in the computer code LINDA (Light Ion Induced Non-elastic Damage and Activation). With this code a quick calculation of the activation and the non-elastic displacement damage in pure iron as function of the penetration depth for typical light ion simulation irradiation experiments is possible.

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS	I
VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN	III
VERZEICHNIS DER TABELLEN	V
VERZEICHNIS HÄUFIG VERWENDETER ABKÜRZUNGEN UND BEGRIFFE	VII
1 EINFÜHRUNG IN DIE THEMATIK UND DAS KONZEPT DER ARBEIT	1
2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN	9
2.1 KERNREAKTIONEN	9
2.1.1 Verwendete Kernmodelle in ALICE-91	10
2.1.2 Berechnung der Anregungsfunktionen	13
2.1.3 Berechnung der Rückstoßenergiespektren	15
2.2 REICHWEITE VON IONEN IN METALLEN	18
2.2.1 Monte-Carlo Rechnungen mit TRIM-91	23
2.2.2 Semi-Analytische Rechnungen mit PRAL	25
2.3 SCHÄDIGUNGSTHEORIE	28
2.3.1 Elastische Schädigung	30
2.3.2 Nichtelastische Schädigung	37
3 EXPERIMENTELLE GRUNDLAGEN	43
3.1 BESTRAHLUNGSEINRICHTUNGEN	43
3.2 PROBENPRÄPARATION UND DURCHFÜHRUNG DER BESTRAHLUNGEN	45
3.3 γ -SPEKTROSKOPIE	52
3.4 BERECHNUNG DER ANREGUNGSFUNKTIONEN	57
4 BESTIMMUNG DER LEICHTIONENINDUZIERTEN ANREGUNGSFUNKTIONEN	63
4.1 MESSUNG DER P-INDUZIERTEN ANREGUNGSFUNKTIONEN	63
4.2 MESSUNG DER α -INDUZIERTEN ANREGUNGSFUNKTIONEN	73
4.3 BERECHNUNG DER AKTIVIERUNG UND DES ZERFALLS	97
5 BESTIMMUNG DER SCHÄDIGUNG UNTER LEICHTIONENBESTRAHLUNG	103
5.1 BESTIMMUNG DER RÜCKSTOßREICHWEITEN	103
5.1.1 Thin-Foil - Thick-Catcher - Technique	103
5.1.2 Theoretische Berechnung der Rückstoßreichweiten	108
5.1.3 Vergleich mit theoretischen Werten und Literaturdaten	109
5.2 BESTIMMUNG DES ELASTISCHEN SCHÄDIGUNGSANTEILS	111
5.3 BESTIMMUNG DES NICHTELASTISCHEN SCHÄDIGUNGSANTEILS	115
6 QUALIFIZIERUNG DER SCHÄDIGUNGSRISIKO	127
6.1 DISKUSSION DER PKA-SPEKTREN	127
6.2 DISKUSSION DER LEICHTIONENINDUZIERTEN VERLAGERUNGSQUERSCHNITTE	133
6.3 DISKUSSION DER DPA-PRODUKTIONS-RATEN	136
6.4 DISKUSSION DER SCHÄDIGUNGSKASKADEN	143
SCHLUßFOLGERUNGEN	155
ZUSAMMENFASSUNG	157

AUSBLICK.....	161
ANHANG	163
LITERATURVERZEICHNIS	183

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Übersicht über die verwendeten experimentellen und theoretischen Werkzeuge	5
Abbildung 1-2: Übersicht über den Informationsfluß im Computerprogramm LINDA	6
Abbildung 2-1: Ablauf einer Kernreaktion nach dem Excitonenmodell.....	11
Abbildung 2-2: Schematische Darstellung der Teilchenemission in einem Z,N-Compound-System	12
Abbildung 2-3: Offene Reaktionskanäle bei der Reaktion $^{56}\text{Fe}(p,x)y$ mit EP = 30 MeV	14
Abbildung 2-4: Anteil der Pre- und Compound-Reaktionen am totalen Reaktionsquerschnitt	15
Abbildung 2-5: Darstellung der Rückstoßimpulsberechnung mit dem ALICE-91 Code	16
Abbildung 2-6: Typische Rückstoßenergiespektren bei $^{56}\text{Fe}(\alpha,xy)$ Reaktionen	17
Abbildung 2-7: Rückstoßenergieverteilung als Funktion der Projektilenergie bei $^{56}\text{Fe}(\alpha,p2n)^{57}\text{Co}$	18
Abbildung 2-8: Darstellung der projizierten Reichweite und der Reichweitestreuung	19
Abbildung 2-9: Berechnete Abschirmfunktion für eine Vielzahl von Ionenpaaren	21
Abbildung 2-10 Projizierte Reichweitenverteilung für 100 MeV Protonen in Aluminium.....	24
Abbildung 2-11: Darstellung der Erzeugung eines Rückstoßatoms bei einem elastischen Stoß.	16
Abbildung 2-12: Nucl. und elektron. Energieverlust als Funktion der Projektilgeschwindigkeit	29
Abbildung 2-13: Vergleich verschiedener Streufunktionen.....	33
Abbildung 2-14: Abhängigkeit der Verlagerungs- Anregungsenergie von der PKA-Energie T	37
Abbildung 2-15: Rückstoßenergie der Restkerne als Funktion der Projektilenergie (nichtelastisch)	38
Abbildung 2-16: Rückstoßenergie der Restkerne als Funktion der Projektilenergie (elastisch)	39
Abbildung 2-17: Elastischer und nichtelastischer Anteil am PKA-Spektrum α -induzierter Prozesse.....	40
Abbildung 2-18: Typische Rückstoßenergiespektren in Gruppendarstellung	41
Abbildung 3-1: Teilchenenergie-Bahnradius-Relation des KIZ für α -Teilchen.	43
Abbildung 3-2: Anordnung der Experimentierareale in der Hauptabteilung Zyklotron (HZY).	44
Abbildung 3-3: Darstellung des Aufbaus für Protonenbestrahlung	48
Abbildung 3-4: Aufzeichnung des Strahlstromverlaufs während einer Bestrahlung am KIZ	48
Abbildung 3-5: Darstellung des Aufbaus für interne KIZ-Bestrahlungen.....	49
Abbildung 3-6: Probenhalter für interne KIZ-Bestrahlungen.....	50
Abbildung 3-7: Eichspektrum der Referenznuclide	53
Abbildung 3-8: Eichkurve der Nachweiswahrscheinlichkeit	54
Abbildung 3-9: Aufbau der neuen Bleiabschirmung des γ -Spektrometers	57
Abbildung 4-1: bis.....	65
Abbildung 4-7: Anregungsfunktionen p-induzierter Reaktionen.....	72
Abbildung 4-8: bis.....	76
Abbildung 4-23: Anregungsfunktionen α -induzierter Reaktionen.....	96
Abbildung 4-24: Querschnittzeichnung einer Dual-Beam-Ermüdungsprobe	99
Abbildung 4-25: Protoneninduzierte Aktivierung.....	100
Abbildung 4-26: α -Teilchen-induzierte Aktivierung.....	101
Abbildung 5-1: Anordnung der Folien bei der „Thin-Foil-Thick-Catcher-Technique“.....	103
Abbildung 5-2: γ -Spektrum einer Al-Catcher-Folie	106
Abbildung 5-3: Typisches Rückstoßenergiespektrum	108
Abbildung 5-4: Reichweite als Funktion der Rückstoßenergie.....	109
Abbildung 5-5: Vergleich experimenteller und theoretischer Rückstoßreichweiten	110
Abbildung 5-6: Vergleich experimenteller Rückstoßreichweiten mit theoretischen LSS-Werten.	111
Abbildung 5-7: Projektilenergie und Verlagerungsschädigung als Funktion der Eindringtiefe	112
Abbildung 5-8: Elast. Schädigung als Funktion der Reichweite für unmoderierte α -Teilchen	113
Abbildung 5-9: Elast. Schädigung als Funktion der Reichweite für energiemodериerte α -Teilchen.....	113
Abbildung 5-10: Vergleich der mit TRIM-91 und DPAX berechneten Schädigung	114
Abbildung 5-11: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite für unmoderierte Protonen.....	116
Abbildung 5-12: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite unmoderierter α -Teilchen (^{56}Ni bis ^{55}Co)	117
Abbildung 5-13: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite unmoderierter α -Teilchen (^{53}Fe bis ^{48}V)	118
Abbildung 5-14: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite für moderierte Protonen.....	118
Abbildung 5-15: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite moderierter α -Teilchen (^{58}Ni bis ^{55}Co).....	119
Abbildung 5-16: Nichtel. Schädigung als Funktion der Reichweite moderierter α -Teilchen (^{59}Fe bis ^{48}V)	119
Abbildung 5-17: Nichtel. Schädigung für Protonen mit Reichweitestreuung.....	120
Abbildung 5-18: Nichtel. Schädigung für α -Teilchen mit Reichweitestreuung	121
Abbildung 5-19: Experimenteller und Gesamtanteil der nichtelastischen Schädigung für p und α	123
Abbildung 5-20: Elastische und nichtel. Schädigung für unmoderierte Protonen und α -Teilchen.	124
Abbildung 5-21: Elastische und nichtel. Schädigung für moderierte Protonen und α -Teilchen.	125
Abbildung 6-1: Elastisches PKA-Spektrum für α -Teilchen	128
Abbildung 6-2: Elastische und nichtelastische PKA-Spektren für α -Teilchen.....	130

Abbildung 6-3: Vergleich der PKA-Spektren von α -Teilchen mit Erste Wand Fusionsneutronen.....	131
Abbildung 6-4: Vergleich der PKA-Spektren von Protonen mit Erste Wand Fusionsneutronen.....	132
Abbildung 6-5: Nichtelastische protoninduzierte Verlagerungsquerschnitte.....	134
Abbildung 6-6: Nichtelastische α -Teilchen-induzierte Verlagerungsquerschnitte	134
Abbildung 6-7: Vergleich der leichtioneninduzierten Verlagerungsquerschnitte	135
Abbildung 6-8: Vergleich der Schädigung von unmoderierten Leichtionen mit Erste Wand Fusionsneutronen.	138
Abbildung 6-9: Querschnitt einer DUAL-BEAM Ermüdungsprobe	139
Abbildung 6-10: Vergleich der Schädigung von moderierten α -Teilchen mit Erste Wand Fusionsneutronen	141
Abbildung 6-11: Vergleich der Schädigung von moderierten Protonen mit Erste Wand Fusionsneutronen	142
Abbildung 6-12: Subkaskadenstruktur bei Bestrahlung von Au mit 14 MeV Neutronen	144
Abbildung 6-13: Subkaskadenstruktur in Au nach 300 keV Eigenionenbestrahlung.....	144
Abbildung 6-14: Vergleich von Schädigungsbereichen	145
Abbildung 6-15: Schematische Darstellung des Kriteriums für Subkaskadenbildung.....	146
Abbildung 6-16: Qualitative Darstellung von PKA-Spektren für 1 MeV Projektile in Cu.....	146
Abbildung 6-17: Vergleich der Schädigungsmorphologie für verschiedene Teilchen bei $E = 1$ MeV.....	147
Abbildung 6-18: $W(T)$ -Funktion für Protonen und Erste-Wand-Fusionsneutronen	149
Abbildung 6-19: $W(T)$ -Funktion für α -Teilchen und Erste-Wand-Fusionsneutronen.....	150
Abbildung 6-20: Verteilung der Anzahl der Subkaskaden bei 14 MeV Neutronenbestrahlungen in Cu.....	151
Abbildung 6-21: Verteilung der Anzahl der Subkaskaden in Cu berechnet nach der BCA-Methode.....	152
Abbildung 6-22: Abhängigkeit der mittleren Anzahl der Subkaskaden von der Schädigungsenergie.....	153
Abbildung 6-23: Änderung der $W(T)$ -Funktion durch Berücksichtigung des Subkaskadenaufbruchs.....	153

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1: Verunreinigungen der hochreinen Eisenfolie	46
Tabelle 3-2: Liste der durchgeführten Bestrahlungen.....	46
Tabelle 3-3: Übersicht über die zur Eichung verwendete Referenznuklide	53
Tabelle 3-4: Liste der betrachteten Fehlermöglichkeiten bei der Aktivierungsanalyse	58
Tabelle 4-1: Zusammenstellung aller identifizierten Produktnuklide p-induzierter Reaktionen.....	63
Tabelle 4-2: Experimentelle Werte der p-induzierten Anregungsfunktionen in Fe.....	63
Tabelle 4-3: Zusammenstellung aller identifizierten Produktnuklide α -induzierter Reaktionen	73
Tabelle 4-4: Experimentelle Werte der α -induzierten Anregungsfunktionen in ^{nat}Fe (^{67}Ni bis ^{52}Fe).....	74
Tabelle 4-5: Experimentelle Werte der α -induzierten Anregungsfunktionen in ^{nat}Fe (^{56}Mn bis ^{47}Sc)	75
Tabelle 5-1: Experimentell ermittelte mittlere Rückstoßreichweiten von ^{57}Ni bis ^{56}Co	107
Tabelle 5-2: Experimentell ermittelte mittlere Rückstoßreichweiten von ^{54}Mn bis ^{47}Sc	107

Liste häufig verwendeter Abkürzungen und Begriffe

ALICE-Code	Computerprogramm zur Berechnung von Anregungsfunktionen
Anregungsfunktion	Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung eines Reaktionsproduktes in Abhängigkeit der Primärenergie des Projektils
ASTM	American Standards of Materials
BCA	Binary Collision Approximation
Catcher-Folie	Eine strahlabwärts hinter der zu bestrahlenden Folie angebrachte Folie aus anderem Material, die die austretenden Rückstoßkerne auffängt
Compound-Emission	Emission von Nukleonen aus einem angeregten Kern, der sich im thermischen Gleichgewicht befindet
DEMO	Demonstrationsreaktor eines zukünftigen, kommerziellen Fusionsreaktors
DPA	Displacements per Atom , Maßeinheit, die angibt, wie oft im Mittel ein Matrixatom während der Bestrahlung verlagert wurde
Dual-Beam Anlage	Bestrahlungseinrichtung, bei der gleichzeitig ein Protonen- und ein Alphateilchenstrahl auf das Target gelenkt werden können
Elastische Schädigung	Verlagerungen von Matrixatomen, die durch elastische Wechselwirkung erzeugt werden
Elektronischer Wirkungsquerschnitt	Wirkungsquerschnitt, der den Energieverlust der Ionen beim Durchgang durch Materie über elektronische Anregungen beschreibt
Excitonen-Model	Kernmodell, das die Kernzustände über Anregungszustand-Lochpaare beschreibt
Fermi-Level-Density	Zustandsdichtefunktion nach Fermi, die die Anregungszustände von Kernen beschreibt
Folienstapel	Experimentelle Anordnung, bei der mehrere hintereinander angebrachte Folien bestrahlt werden
Frenkel-Defekt	Anordnung in der Matrix, bestehend aus einem Zwischengitteratom und einer Leerstelle
Gammaspektroskopie	Kernphysikalische Meßmethode, die die beim Kernzerfall auftretenden Gammas analysiert
GDH	Geometry Dependent Hybrid Model , Kernmodell zur Beschreibung von Precompoundkernreaktionen
IFMIF	International Fusion Materials Irradiation Facility
ITER	International Thermonuclear Experimental Reactor
JET	Joint European Torus
KAZ	Karlsruher Zyklotron , Kompaktzyklotron zur Erzeugung von 40 MeV Protonen
KIZ	Karlsruher Isochron Zyklotron , Zyklotron zur Erzeugung von 104 MeV Alphateilchen
KRLD	Kataria Rammamurthy Level Density , Zustandsdichtefunktion, die Schaleneffekte mitberücksichtigt
LINDA	Light-Ion Induced Nonelastic Damage and Activation , Computerprogramm zur Berechnung von Schädigung und Aktivierung
MARLOWE	Computerprogramm für molekulardynamische Simulationrechnungen von Defekten
Matrixatom	Atom des Gitterverbandes
Nichtelastische Schädigung	Verlagerungen von Matrixatomen, die durch Rückstoßkerne aus Kernreaktionen erzeugt werden
NRT	Norgett, Robinson und Torrens , die Begründer des modernen DPA-Modells
Nuklearer Wirkungsquerschnitt	Wirkungsquerschnitt, der den Energieverlust der Ionen beim Durchgang durch Materie über elastische Kernstreuung beschreibt
PKA	Primary Knock-on Atom , das erste von einem Ion verlagerte Matrixatom
PRAL	Projected Range Algorithm , Computerprogramm zur Berechnung von Reichweiten geladener Teilchen in Materie
Precompound-Emission	Emission von Nukleonen in einem angeregten Kern vor Erreichen des thermischen Gleichgewichtszustandes
Restkerne	Kerne, die nach einer Kernreaktion (Emission von Nukleonen) übrig sind
Schädigungskaskaden	Bereiche in der Matrix, die eine sehr hohe Verlagerungsdichte aufweisen
Thin-Foil-Thick-Catcher-Technique	Experimentelle Technik zur Bestimmung der Reichweite von Rückstoßkernen
TRIM	Transport of Ions in Matter , Monte-Carlo Computerprogramm zur Simulation des Verhaltens von Ionen in fester Materie

Verlagerungsquerschnitt

Weißkopf-Ewing-
Evaporation Model

Wirkungsquerschnitt, der die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung einer
Verlagerung angibt
Modell zur Beschreibung von Kernreaktionen, in dem Nukleonen aus dem
thermischen Gleichgewichtszustand emittiert werden

1 Einführung in die Thematik und das Konzept der Arbeit

Seit der Aussage von Atkins und Houtermanns im Jahre 1929, daß durch Reaktionen leichter Kerne die Energiequellen der Sterne erklärbar seien, wird an der Herausforderung Kernfusion gearbeitet. Bereits 1934 konnte von Rutherford mit Deuteronen die erste Kernfusion experimentell bestätigt werden. Nachdem 1958 EURATOM gegründet und die Geheimhaltung der Fusionsforschung aufgegeben wurde, konnte die wissenschaftliche Fusionsforschung in Europa auf breiter Basis durchgeführt werden. Begleitet durch die 73er Ölkrise wurden die Fusionsprogramme erweitert und internationalisiert. Daher wird seit den letzten 20 - 25 Jahren weltweit intensiv die technologische Energiegewinnung mittels Fusion erforscht. Das bisher am weitesten fortgeschrittene Prinzip des magnetischen Plasmaeinschlusses ist das Tokamak-Prinzip. Tokamaks sind ringförmige Maschinen, die durch Toroidal- und Poloidalfeldspulen ein Magnetfeld erzeugen, welches das Fusionsplasma einschließt. Eine zusätzlich angebrachte Transformatorspule treibt im Plasma einen Ringstrom, so daß die dadurch resultierende Verschraubung der Magnetfeldlinien einen stabilen Plasmaeinschluß erlaubt. Ein Beispiel für einen Tokamak ist das europäische Großexperiment JET (Joint European Torus) in Culham, Großbritannien [1-1]. Eine Erfolgsmeldung ende der 80er Jahre über ein erfolgreiches JET-Experiment mit einem d-t-Plasma soll aber nicht darüber hinwegtäuschen, daß der Weg bis zur vollständigen Entwicklung eines kommerziellen Fusionsleistungsreaktors noch weit ist. Auf dem Weg, die Fusionsenergie kommerziell nutzbar zu machen, müssen noch sehr viele Fragen beantwortet werden. Unter anderem sind dies Fragen, die die Entwicklung neuer Materialien betreffen, die den Fusionsbedingungen standhalten müssen [1-2].

Zwei besonders wichtige Fragen im Bereich der Materialentwicklung der Erste-Wand-Werkstoffe der Vakuumkammer eines zukünftigen Tokamak-Fusionsreaktors (ITER, DEMO) stellen die Materialaktivierung und die Verlagerungsschädigung durch die 14 MeV Neutronenstrahlung dar. Die 14 MeV Neutronen entstehen beim Fusionsprozeß durch die $d+t \rightarrow {}^4\text{He}+n$ Reaktion. Da Neutronen elektrisch neutral sind, können sie nicht wie die geladenen Teilchen durch toroidale und poloidale Magnetfelder im Plasma eingeschlossen werden und treffen somit kurze Zeit nach ihrer Entstehung auf die Erste-Wand, für die als ein möglicher metallischer Werkstoff eine hochlegierte ferritisch-martensitische Eisenbasislegierung verwendet werden kann [1-3 bis 1-5]. Die Neutronenbelastung liegt ca. bei $\int 1.4 \times 10^{15} \text{ n/s/cm}^2$, was einer thermischen Belastung von ca. 2,2 - 2,5 MW/m² entspricht [1-6, 1-7].

Die oben angesprochene neutroneninduzierte Materialaktivierung kann durch bisher durchgeführte Messungen der Anregungsfunktionen (Literaturdaten) und ergänzt durch theoretische Kernmodellrechnungen bestimmt werden. Ein wichtiges Problem in diesem Bereich stellt die Langzeitaktivierung der verwendeten Materialien dar, die durch Optimierung der Legierungszusammensetzung minimiert werden kann. Bei der Beurteilung der für eine Legierung in Frage kommenden Elemente wurde festgestellt, daß bei derart hohen Primärteilchenflüssen die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen einen deutlichen Beitrag zur Gesamtaktivierung leisten können. Die Aktivierungsproblematik

bezüglich ferritisch-martensitischer Stähle wurde in jüngster Zeit bearbeitet und ist weitestgehend gelöst [1-8 bis 1-12].

Bei der Materialschädigung sind die Schwierigkeiten etwas anders gelagert. Um metallische Werkstoffe, die den Fusionsbelastungen genügen, entwickeln zu können, müssen auch experimentelle Umgebungen geschaffen werden, um mögliche Kandidaten unter den oben genannten Bedingungen zu testen. Die zur Zeit in Europa zur Verfügung stehenden Neutronen-Bestrahlungsquellen sind Hochfluß-Spaltreaktoren mit unterschiedlichen Neutronenspektren (HFR, BR2 und Super-Phenix) und beschleunigergetriebene Neutronenquellen. Die Bestrahlungen in den Reaktoren sind jedoch, bedingt durch die deutlichen Unterschiede im Neutronenspektrum verglichen mit einem Fusionsneutronenspektrum, nur teilweise für Fusionszwecke verwendbar. Ebenfalls sind die heute zur Verfügung stehenden beschleunigergetriebenen Neutronenquellen nur bedingt nutzbar, da die erzielte Strahlintensität um mehrere Größenordnungen unterhalb der eines Fusionsreaktors liegt. Eine momentan laufende Konzept-Design-Studie zu einer hochintensiven Neutronenquelle IFMIF (International Fusion Materials Irradiation Facility) könnte dieses Manko beheben [1-13 bis 1-16].

Da durch Erfahrungen bei der Materialentwicklung unter Neutronenbestrahlung festgestellt wurde, daß die neutroneninduzierte Erzeugung von gasförmigen Transmutationsprodukten (n,p) Wasserstoff und (n,α) Helium sich maßgeblich auf die Lebensdauer der metallischen Werkstoffe auswirken, wurden in den letzten Jahren sogenannte Dual-Beam-Simulationsexperimente entwickelt. Bei diesen Experimenten werden in die Proben durch gleichzeitiges Bestrahlen mit Protonen und α -Teilchen mit geeigneten Energien Wasserstoff- und Heliumionen homogen implantiert, wie sie durch (n,p)- bzw. (n,α)-Prozesse unter Neutronenbestrahlung erzeugt werden. Die homogene Implantation wird erreicht, indem die Primärenergie der Projektile moderiert wird, so daß die Projektile an definierten Orten im Target abgestoppt werden. Auf diesem Sektor wurde in den letzten 15 Jahren am Forschungszentrum Karlsruhe eine Dual-Beam Anlage konzipiert, entwickelt und betrieben, die aufgrund der weltweit anerkannten Ergebnisse eine außerordentlichen Stellung einnimmt. Die Anlage wurde so konzipiert, daß durch simultanes Bestrahlen mit Protonen und Alphateilchen und Ermüden von miniaturisierten Proben materialrelevante Parameter ermittelt werden konnten [1-17].

Bei der Bestrahlung mit leichten Ionen tritt wie bei der Neutronenbestrahlung der Effekt der Gitterschädigung auf, der durch Verlagerungen der Gitteratome (sog. Displacements per Atom, DPA) beschrieben wird. Der DPA-Wert beschreibt, normiert auf die Anzahl der vorhandenen Targetatome im bestrahlten Bereich, die Verlagerungen pro Atom, d.h. es wird angegeben, wie oft jedes Atom im Mittel während der Bestrahlung seinen Gitterplatz gewechselt hat. Solche Verlagerungen können durch elastische Streuungen (elastische Verlagerungsschädigung) der Projektile an Gitteratomen erzeugt werden, wenn beim Streuvorgang ein Wert ΔE größer als die mittlere Verlagerungsenergie $E_d = 40$ eV (in Fe) übertragen wurde. Zusätzlich können Gitteratome verlagert werden, wenn bei den auftretenden Kernreaktionen die Restkerne eine Rückstoßenergie $E_R > E_d$ erhalten, wodurch weitere sekundäre Verlagerungen erzeugt werden können. Dieser Beitrag wird nichtelastische Verlagerungsschädigung genannt.

Die für einen Vergleich zwischen Leichtionenbestrahlung und Neutronenbestrahlung wichtigen Parameter sind zum einen die Spektren der primär verlagerten Atome (PKA-Spektren), woraus auf die Art der erzeugten Defekte geschlossen werden kann. Niederenergetische PKA's fördern die Bildung von einfachen Frenkeldefekten, während hochenergetische PKA's zur Bildung von komplexen Schädigungskaskaden führen. Desweiteren werden aus den PKA-Spektren durch Anwenden des NRT-Modells (Schädigungsmodell nach Norget, Robinson und Torrens) die Anzahl der verlagerten Atome (DPA-Wert) berechnet.

In der Vergangenheit wurde zur Bestimmung der DPA-Werte bei Leichtionenbestrahlungen der Einfachheit halber nur der elastische Anteil der Verlagerungsschädigung berücksichtigt. Der nichtelastische Anteil wurde als Effekt 2. Ordnung betrachtet und vernachlässigt. Die durch Rutherfordstreuung erzeugten elastischen PKA's zeigen einen sehr hohen Anteil bei geringen Energien und einen geringen Anteil bei hohen Energien. Diskussionen über die Vergleichbarkeit von Leichtionenbestrahlungen mit Fusionsneutronenbestrahlungen endeten in der Vergangenheit mit dem Ergebnis, daß sie unter dem Gesichtspunkt des Mangels an hochenergetischen PKA's bei leichtioneninduzierter Schädigung nur als grobe Näherung betrachtet wurden. Unter diesen Randbedingungen ist es klar ersichtlich, daß zur Klärung der Frage des hochenergetischen PKA-Anteils als Hauptthema der vorliegenden Arbeit die Charakterisierung der nichtelastischen Verlagerungsschädigung unter Leichtionenbestrahlung in reinem Eisen gewählt wurde.¹ Zur Charakterisierung der nichtelastischen Verlagerungsschädigung ist die Kenntnis der Anregungsfunktionen der Kernreaktionen notwendig. Deshalb wurde als weitere Aufgabe die Bestimmung der Aktivierung unter Leichtionenbestrahlung bearbeitet. Die Aktivierung kann mit der Kenntnis der Anregungsfunktionen leicht erhalten werden. Hier wurde der Schwerpunkt insbesondere auf die kurzlebigen Nuklide gelegt.

Um die hinter der Arbeit stehende Philosophie genauer zu erläutern, sind in Abb. 1-1 die verwendeten theoretischen und experimentellen Werkzeuge eingezeichnet. Anhand ihres Zusammenspiels soll erläutert werden, wie die gesuchte Information, Aktivierung und Verlagerungsschädigung (elastische und nichtelastische Verlagerungsschädigung) erhalten wird. Ausgehend von Protonen bzw. α -Teilchen als Projektile werden im Experiment durch Bestrahlung von dünnen Targetfolien und anschließender γ -Spektroskopie Erkenntnisse über die erzeugte Aktivität und daraus über die Anzahl der erzeugten Nuklide gewonnen. Unter Einbeziehung der Bestrahlungs- und Targetparameter lassen sich die verschiedenen Anregungsfunktionen der Kernreaktionen ableiten. Sind die Anregungsfunktionen der instabilen Reaktionsendprodukte einmal bekannt, so kann sehr einfach die unter gewissen Bestrahlungsbedingungen erzeugte Aktivierung berechnet werden. Durch eine spezielle Bestrahlungstechnik - Anbringen einer Catcher-Folie strahlabwärts hinter der zu bestrahlenden Targetfolie - können die aus der Targetfolie strahlabwärts austretenden Nuklide in der Catcher-Folie eingefangen werden. Durch Auswerten der in den

¹ Die Untersuchungen wurden auf reines Eisen beschränkt (Isotope ^{54}Fe , ^{56}Fe , ^{57}Fe und ^{58}Fe). Die Betrachtung der Hauptbestandteile einer Eisenbasislegierung hätte zur Folge gehabt, daß 22 stabile Isotope der Legierungspartner hätten untersucht werden müssen. Dies hätte den Rahmen dieser Arbeit überschritten.

Catcher-Folien eingefangenen Aktivitäten und Vergleich mit den Targetaktivitäten läßt sich Information über die mittlere Reichweite der bei den Kernreaktionen erzeugten schweren Rückstoßkerne gewinnen.

Wiederum ausgehend von den leichten Ionen Protonen und α -Teilchen können mittels des Kernmodell-Computerprogramms ALICE die Anregungsfunktionen nach theoretischen Modellen berechnet werden. ALICE benutzt dazu für Precompoundprozesse das Geometry-Dependent-Hybrid-Model und für Compoundprozesse das Weißkopf-Ewing-Evaporation-Model.

Ein Vergleich der theoretischen und experimentellen Anregungsfunktion zeigt, inwiefern die Kernmodelltheorie die Realität beschreibt. Stimmen die theoretischen und experimentellen Anregungsfunktionen ausreichend gut überein, so kann zur theoretischen Berechnung der Rückstoßenergiespektren der schweren Restkerne übergegangen werden. Die mittleren Rückstoßenergien, erhalten durch Mittelung der spektralen Rückstoßenergieverteilung, dienen als Eingangsgröße für das Monte-Carlo-Computerprogramm TRIM (Transport of Ions in Matter). TRIM berechnet aus der mittleren Rückstoßenergie der Restkerne deren mittlere Reichweite im Target. Da Monte-Carlo Programme generell sehr lange Rechenzeiten benötigen, wurde zusätzlich das semi-analytische Reichweitenprogramm PRAL (Projected Range Algorithm) verwendet. Diese theoretisch erhaltenen mittleren Reichweiten können dann mit den experimentellen Werten verglichen werden. Stimmen diese ausreichend gut überein, so schließt sich der Kreis und es kann ausgehend von den Rückstoßenergiespektren die Berechnung der nichtelastischen Schädigung durchgeführt werden.

Der nichtelastische Charakter des Schädigungsproblems kommt durch den Produktionsmechanismus der primär verlagerten Atome (PKA, Primary knock-on Atoms, Rückstoßkerne) ins Spiel. Im Gegensatz zur elastischen Schädigung (PKA-Produktion durch elastische Kernstreuung, Rutherfordstreuung) werden die PKA's bei der nichtelastischen Schädigung durch Kernreaktionen (nichtelastische Prozesse) erzeugt. Da es für ein einmal erzeugtes PKA unerheblich ist welchem Ursprung es entstammte, kann die Berechnung der sekundären Schädigung für den elastischen und nichtelastischen Fall direkt aus den jeweiligen PKA-Spektren nach dem NRT-Modell erfolgen. Die so erhaltenen DPA-Werte ergeben aus den elastischen und nichtelastischen Daten durch einfache Addition die gesamte leichtioneninduzierte Verlagerungsschädigung.

Mit der Kenntnis der elastischen Schädigung (Literaturdaten) und der nichtelastischen Schädigung kann die Verlagerungsschädigung unter Dual-Beam-Bedingungen charakterisiert werden. Unter Einbeziehung von neutroneninduzierten Schädigungsdaten kann die Dual-Beam-Experimentiertechnik in Bezug auf die in der Fusion auftretenden Schädigungswerte charakterisiert werden. Die spezielle Kenntnis der PKA-Spektren erlaubt einen tiefergehenden Vergleich der Art der erzeugten Schädigung, da anhand der PKA-Energien die Qualität der Verlagerungsschädigung differenziert nach Einzel- und Kaskadendefekten betrachtet werden kann.

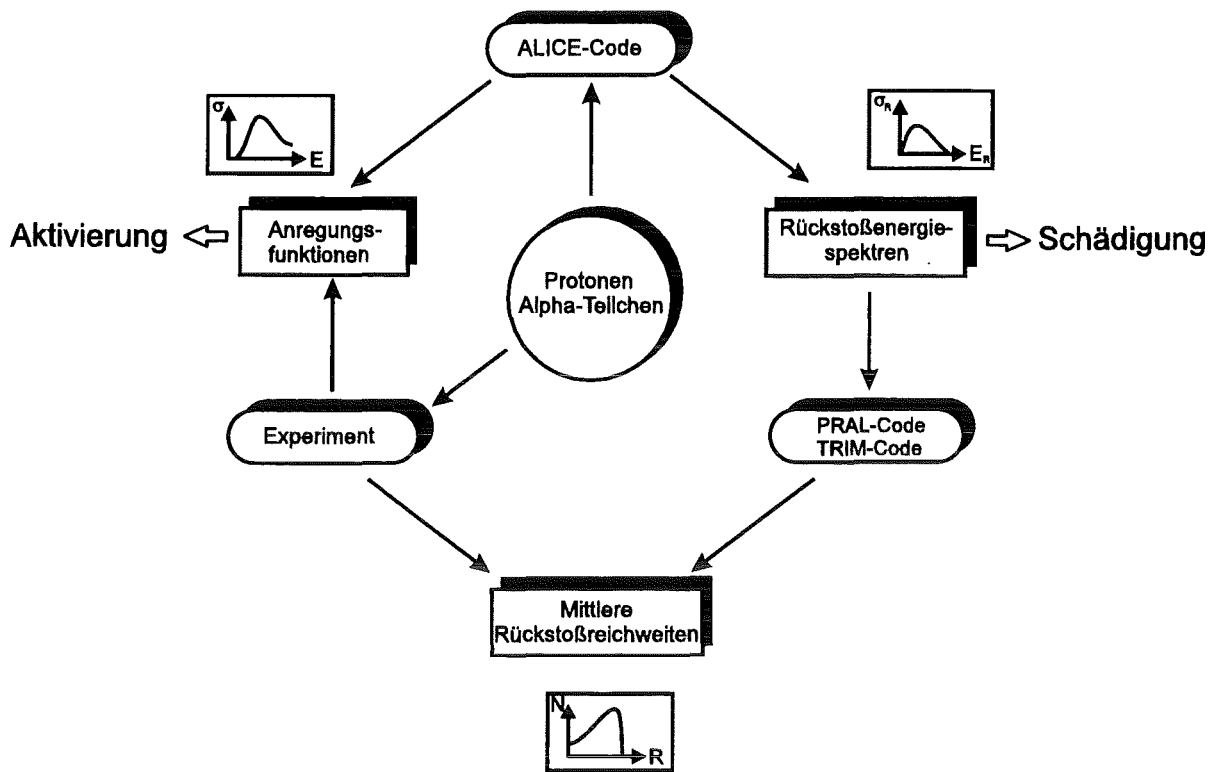


Abbildung 1-1: Übersicht über die verwendeten experimentellen und theoretischen Werkzeuge und ihr Zusammenspiel. Die an den Koordinatenachsen verwendeten Bezeichnungen bedeuten: σ = Anregungsfunktion, E = Projektilenergie, $\sigma_r = d^2\sigma/dE dE_r$ = Produktionswahrscheinlichkeit für einen Rückstoßkern, N = Anzahl der implantierten Rückstoßkerne und R = Reichweite der Rückstoßkerne.

Mit der Kenntnis der oben diskutierten Fakten war es möglich das Computerprogramm LINDA (Light Ion induced Nonelastic Damage and Activation) zu erstellen, das die Berechnung der Aktivierung und der nichtelastischen Schädigung in Abhängigkeit von den experimentellen Parametern berechnet. In Abb. 1-2 ist der Ablaufplan des Programms LINDA vereinfacht dargestellt.

LINDA führt drei Schritte aus. Die ersten beiden Schritte, die Berechnung der Aktivierung und des anschließenden Zerfalls, sind mit Kenntnis der Anregungsfunktionen und Zerfallskonstanten einfach durchführbar und benötigen keiner weiteren Erläuterung. Der dritte Schritt, die Berechnung der nichtelastischen Schädigung, kombiniert die experimentellen und theoretischen Anregungsfunktionen und liefert aus den PKA-Spektren die nichtelastische Schädigung in Abhängigkeit von der Projektilenergie und vom Ort im Target. Die PKA-Spektren werden aus den mit ALICE berechneten Rückstoßenergieverteilungen mittels des Programms PKA erhalten.

Mit dem Computerprogramm LINDA ist es nun möglich, innerhalb kurzer Zeit die Charakterisierung von Leichtionenbestrahlungen in Bezug auf Aktivierung und Schädigung für Dual-Beam Bestrahlungsbedingungen vorzunehmen.

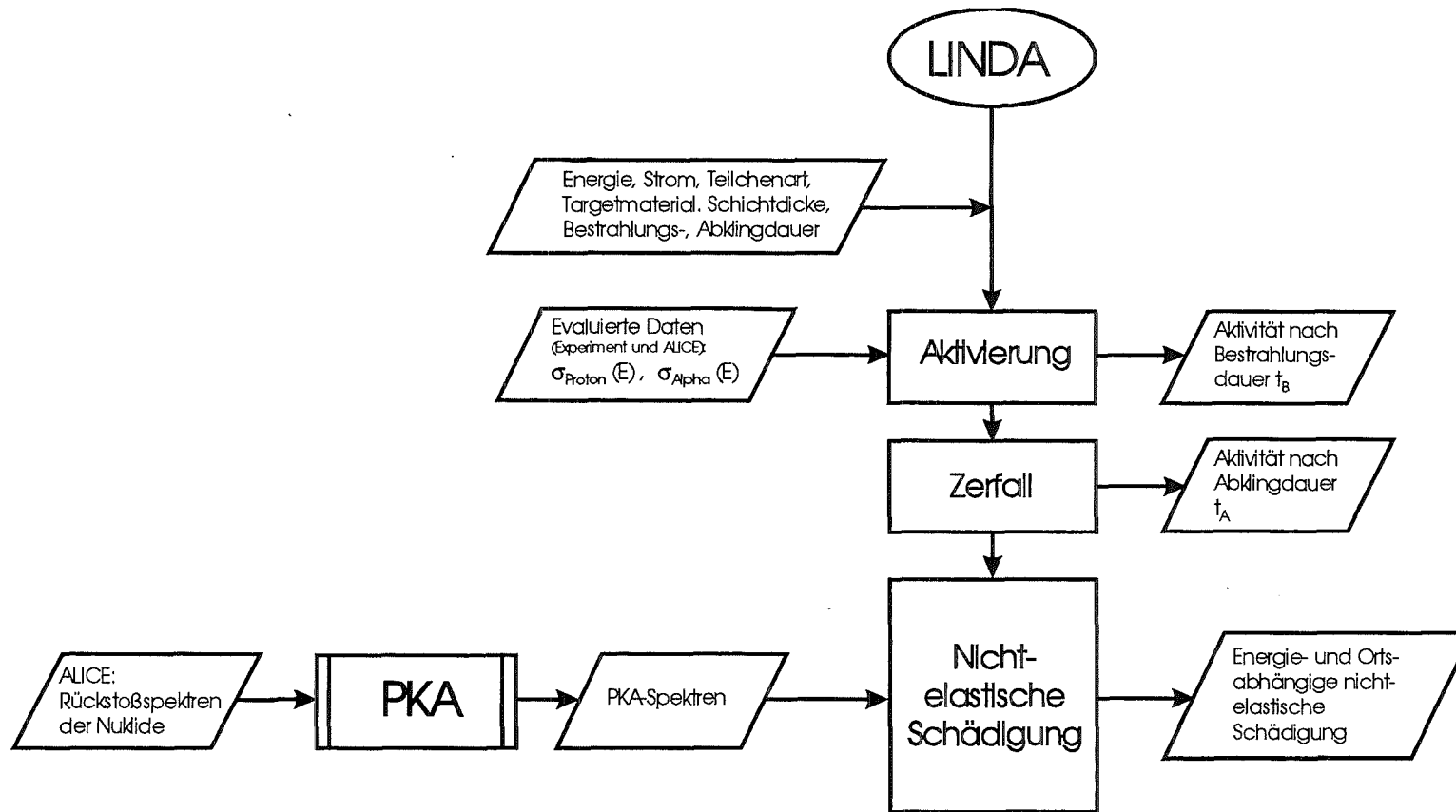


Abbildung 1-2: Übersicht über den Informationsfluß und die Informationsverarbeitung im hier entwickelten Computerprogramm LINDA (Light-Ion induced Nonelastic Damage and Activation). Das Programm durchläuft drei Schritte: Berechnung der Aktivierung, Berechnung des Zerfalls und Berechnung der nichtelastischen Schädigung. Die PKA-Spektren werden mit dem separaten Programm PKA berechnet.

Im folgenden sei noch eine Übersicht über die weiteren Kapitel dieser Arbeit gegeben.

Kapitel 2 beschreibt die theoretischen Grundlagen zur Behandlung von Kernreaktionen nach dem Precompound- und Compoundkernmodell, zur Berechnung von Rückstoßenergiespektren (Punktdaten und gruppengemittelte Daten), zur Berechnung von Reichweiten von Ionen in Metallen und zur Berechnung der elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung.

Kapitel 3 beschreibt die experimentellen Grundlagen. Es wird eine Übersicht über die verwendeten Bestrahlungseinrichtungen (KIZ und KAZ) gegeben. Die Bestrahlungsanordnungen sowie die Targetpräparation, die γ -Spektroskopie und die durchgeführten Bestrahlungen werden erläutert.

Kapitel 4 beschreibt die Bestimmung der leichtioneninduzierten Anregungsfunktionen. Es werden alle gemessenen p-induzierten und α -induzierten Anregungsfunktionen diskutiert. Es wird ein Vergleich zwischen experimentell gemessenen und theoretisch berechneten Anregungsfunktionen durchgeführt. Bei den p-induzierten Reaktionen wurden zum ersten Mal bei ^{54}Mn Werte unterhalb 30 MeV gemessen. Bei den α -induzierten Reaktionen wurden zum ersten Mal die Anregungsfunktionen der Nuklide $^{53}\text{Fe}_g$, $^{53}\text{Fe}_m$, $^{52}\text{Mn}_m$, ^{49}Cr , ^{52}V und ^{47}Sc gemessen. Desweiteren wurden in diesem Parameterbereich zum ersten Mal theoretische Daten, berechnet mit der Kataria-Ramamurthy-Level-Density, mit experimentellen Werten verglichen. Abschließend wird das Aktivierungsverhalten unter Dual-Beam-Bedingungen diskutiert.

Kapitel 5 beschreibt die Bestimmung der elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung. Es werden die Schädigungsprofile, aufgetragen über der Eindringtiefe, für die nichtenergiemodierten und energiemodierten Bestrahlungsmodi für die elastische und nichtelastische Verlagerungsschädigung diskutiert. Auf den Effekt der Reichweitenstreuung wird ebenfalls eingegangen. Zusätzlich wird auf den Vergleich der theoretischen und experimentellen Werte für die mittlere Rückstoßreichweite der schweren Restkerne eingegangen.

Kapitel 6 beschreibt die Diskussion der leichtioneninduzierten elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung im Vergleich mit 14 MeV Fusionsneutronenbestrahlungen. Die Diskussion wird sowohl auf dem PKA-Level als auch auf dem DPA-Level durchgeführt. Auf der PKA-Ebene ist ein detaillierter Vergleich zwischen der Art der erzeugten Materialschädigung unter Protonen- bzw. α -Teilchenbestrahlung mit der durch Fusionsneutronen möglich, während auf der DPA-Ebene die Anzahl der unter gewissen Bestrahlungsbedingungen für Leichtionenbestrahlung und Neutronenbestrahlung erzeugten atomaren Verlagerungen quantifiziert werden kann.

Es wird ein detaillierter Vergleich zwischen den leichtioneninduzierten PKA-Spektren und den durch 14 MeV Erste-Wand Fusionsneutronen induzierten PKA-Spektren durchgeführt. Bei den Leichtionen werden Protonen (bis 30 MeV) und Alphateilchen (bis 104 MeV) diskutiert. Aufgrund der neutronenähnlicheren Masse und der geringeren Primärenergie

wird bei den Protonen eine weitaus bessere Simulation der Fusionsneutronen erwartet als bei den Alphateilchen. Dies zeigt auch sehr deutlich der Vergleich des Anteils der bis zu einer bestimmten PKA-Energie erzeugten Verlagerungen ($W(T)$ -Funktion). Abschließend wird der Subkaskadenaufbruch mit einer Subkaskadenenergieschwelle von 10 keV und die Auswirkungen auf die PKA-Spektren diskutiert.

Zum Schluß wird eine Liste der Schlußfolgerungen, eine Zusammenfassung und ein Ausblick auf die Verwendbarkeit der erzielten Resultate gegeben.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden in kompakter Form die theoretischen Grundlagen des in der Arbeit behandelten Themenkomplexes dargestellt. In die den Berechnungen der Anregungsfunktionen zugrunde liegenden Kerntheorie - Weißkopf-Ewing-Formalismus und das Excitonen-Modell - wird eingeführt. Ebenso wird auf die Berechnung der Rückstoßenergieverteilungen der Restkerne eingegangen.

Desweiteren wird der Energieverlust leichter und schwerer Ionen in Festkörpern behandelt. Dabei werden die wichtigsten Prozesse diskutiert wobei der Energieverlust in eine nukleare und elektronische Komponente aufgeteilt wird. Der gesamte Energieverlust der Ionen steht in direktem Zusammenhang zur Reichweite im Festkörper.

Die Schädigungstheorie wird in zwei verschieden zu behandelnde Bereiche unterteilt. Die elastische Schädigung wird nach dem NRT-Modell behandelt. Die nichtelastische Schädigungstheorie wird zum ersten Mal für schwere Rückstoßkerne entwickelt.

2.1 Kernreaktionen

Der Verlauf des Wirkungsquerschnitts für eine Kernreaktion als Funktion der Projektilenergie, auch bezeichnet als Anregungsfunktion, kann im Prinzip sowohl mit mikroskopischen als auch mit statistischen Modellen beschrieben werden [4-28]. Bei der mikroskopischen Beschreibung sind sowohl der Eingangskanal als auch der Ausgangskanal genau festgelegt. Bei der Untersuchung der p- bzw. α -induzierten Reaktionen in ^{nat}Fe kommen nun sehr viele verschiedene Ausgangskanäle in Frage, die sich durch Energie, Winkel, Drehimpuls und Teilchensorte voneinander unterscheiden. Für die Berechnung der Anregungsfunktion müssen Integrationen über alle offenen Ausgangskanäle durchgeführt werden. Diese Art der Ermittlung der Anregungsfunktionen ist außerordentlich rechenintensiv. Deshalb werden die mikroskopischen Modelle gewöhnlich nur zur Berechnung differentieller Wirkungsquerschnitte eingesetzt. Zur Berechnung integraler Wirkungsquerschnitte werden statistische Modelle verwendet. Bei Projektilenergien bis 100 MeV und Targetkernen im mittleren Massenbereich empfehlen sich für den Precompoundzerfall das Excitonen-Modell und für den Compoundzerfall nach der vollständigen statistischen Theorie das Weißkopf-Ewing-Verdampfungsmodell. Die Precompoundprozesse dürfen nicht vernachlässigt werden, da bei höheren Anregungsenergien vor dem Erreichen des statistischen Gleichgewichts im Kern eine genügend große Wahrscheinlichkeit zur Teilchenemission besteht. Ein Ziel dieser Arbeit war es, die Anregungsfunktionen und Rückstoßenergieverteilungen mit gängigen vorhandenen Kernmodellen zu berechnen.

Die Vereinigung des Precompound- und Compound-Kernmodells in dem Computerprogramm ALICE wurde in den 70er Jahren von M. Blann begonnen. Das Programm wird bis heute weiterentwickelt und erweitert [2-17, 2-18]. Die in dieser Arbeit verwendete Version war eine für Rückstoßenergieberechnungen erweiterte

ALICE-91-Version. ALICE-91 berechnet für eine gegebene Energie, Projektil- und Targetsorte nach dem geometrieabhängigen Hybridmodell (GDH-Modell), einem verbesserten Excitonenmodell, die Precompoundkanäle (x,p), (x,n), (x,pp), (x,nn) und (x,pn). Das x steht für Protonen bzw. Alphateilchen. Die gesamte Precompound-Anregungsfunktion ergibt sich als Summe der Einzelkanäle.

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{prec}} = \sigma_p + \sigma_{pp} + \sigma_n + \sigma_{nn} + \sigma_{pn} \quad (2-1)$$

Der sich aus allen Verdampfungsreaktionen ergebende Wirkungsquerschnitt berechnet sich aus der Summe über alle entstehenden Nuklide. Die Parameter i und j entsprechen den Größen N und Z in Abb. 2-2.

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{comp}} = \sum_{ij} \sigma_{ij} \quad i : \text{Neutronenzahl} \quad j : \text{Kernladungszahl} \quad (2-2)$$

Durch Abdampfen von Nukleonen (Protonen bzw. Neutronen) oder Nukleonenclustern (Deuteronen bzw. Alphateilchen) teilt sich je nach Anregungsenergie der totale Compound-Wirkungsquerschnitt in viele Anregungskanäle auf (σ_{ij}). Aufsummieren der nach Endkernen differenzierten Precompound- und Compound- Wirkungsquerschnitten ergibt die jeweilige Anregungsfunktion.

Nachfolgend werden die in ALICE-91 verwendeten Kernmodelle näher erläutert. Es wird auch auf die verwendeten Zustandsdichtefunktionen Fermi-Level-Density (FLD) und die Schaleneffekte korrigierende Kataria-Ramamurthy-Level-Density (KRLD) eingegangen. Die von M. Blann kürzlich in ALICE-91 eingebrachte und bisher undokumentierte Erweiterung zur Berechnung der Rückstoßenergiespektren der Restkerne wird ebenfalls erläutert.

2.1.1 Verwendete Kernmodelle in ALICE-91

Anfang der 70er Jahre beschäftigten sich mehrere Autoren mit der Berechnung der absoluten Teilchenspektren bei der Emission vor Erreichen des statistischen Gleichgewichts. Zum einen war da der Ansatz von Harp, Miller und Berne (HMB) bei dem mit einem Satz gekoppelter Differentialgleichungen die Konkurrenz zwischen Teilchenemissionen und höheren Anregungszuständen beschrieben wurde [2-22, 2-23]. Ein weiterer Ansatz war das Excitonenmodell von Griffin, welches die Anregung über eine Reihe von Zweiteilchen-Wechselwirkungen beschreibt [2-24, 2-25]. Eine Erweiterung des Excitonenmodells wurde von M. Blann durchgeführt. Diese Erweiterung wurde als Hybrid-Modell bekannt [2-19, 2-20] und kombiniert den HMB-Ansatz mit dem Excitonenmodell. Eine spätere Verbesserung der nuklearen Dichteverteilung der Anregungszustände verbesserte die Vorhersagen des Hybrid-Modells [2-21].

Im Excitonenmodell wird der Ablauf einer Kernreaktion von der ersten Wechselwirkung des Projektils mit dem Targetkern bis zum Erreichen des thermischen Gleichgewichts im Zwischenkern unter ständiger Berücksichtigung von Teilchenemission aus allen Zwischenzuständen und dem Gleichgewichtszustand heraus beschrieben. Als Parameter der einzelnen Zustände werden

- die gesamte Anregungsenergie des Zwischenkerns
- die Zahl n_p der Nukleonen oberhalb der Fermienergie (Teilchen-Excitonen)
- die Zahl n_h der Lochzustände unterhalb der Fermienergie (Loch-Excitonen)
- die Gesamtexcitonenanzahl $n = n_p + n_h$

benutzt. Abb. 2-1 zeigt anschaulich wie eine Kernreaktion im Excitonenmodell abläuft.

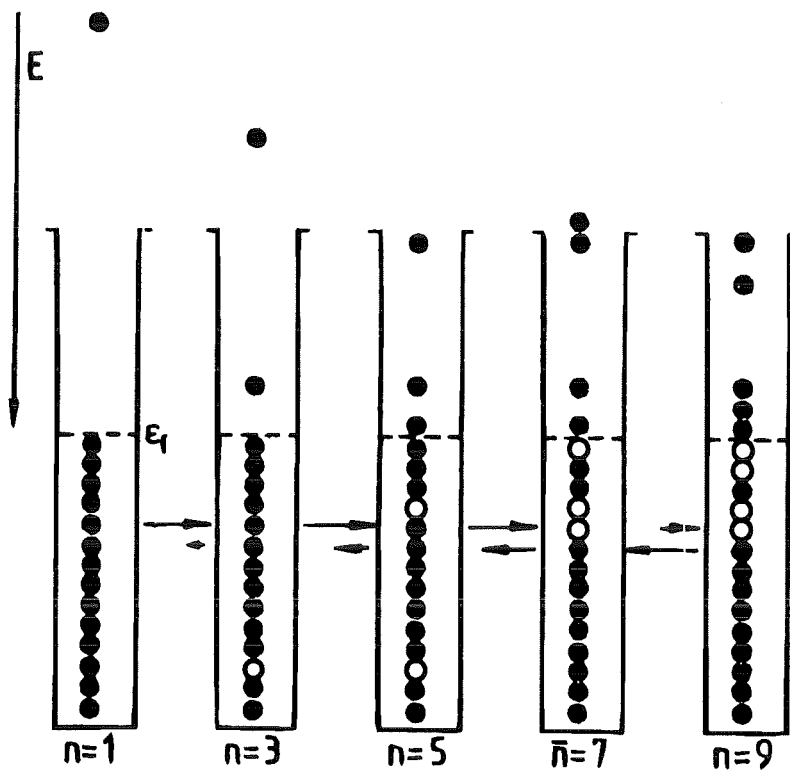


Abbildung 2-1: Ablauf einer Kernreaktion nach dem Excitonenmodell (ϵ_f = Fermienergie) [4-11].

Bei $n = 1$ befindet sich das System im Grundzustand. In einer ersten Wechselwirkung wird Energie auf ein gebundenes Nukleon übertragen womit der Zustand $n = 3$ (2 Teilchen-Excitonen, 1 Loch-Exciton) entsteht. Dieser Zustand kann nun Teilchen ins Kontinuum emittieren oder durch Exciton-Exciton-Wechselwirkung in Zustände höherer oder niedriger Anregung übergehen. Da nur Zweiteilchenwechselwirkungen zugelassen sind, ändert sich die Excitonenanzahl von Anregungszustand zu Anregungszustand immer nur um $\Delta n = -2, 0, 2$.

Für jeden Zustand, der durch n und E charakterisiert ist, können die Größen

- λ_+ : Übergangsrate in den nächst höheren Zustand
- λ_- : Übergangsrate in den nächst niedrigeren Zustand
- λ_c : Emissionsrate für Teilchen aus dem gegebenen Zustand ins Kontinuum

berechnet werden.

Wenn die Teilchenemissionsraten λ_c klein gegenüber den Übergangsraten zwischen den einzelnen Zuständen sind, dann wird sich der Zwischenkern zunächst zu größeren n hin entwickeln, bis die Rückübergangsraten λ_- größer werden als λ_+ . Die in ALICE-91 berücksichtigten Precompound-Emissionskanäle sind n , nn , p , pp , pn . Neben der Emissionswahrscheinlichkeit wird noch die Winkelverteilung der in Vorwärtsrichtung betonten (CM-System) Kanäle berücksichtigt. Der Zwischenkern erreicht schließlich einen Gleichgewichtszustand, der durch vorwiegende Besetzung von Zuständen um ein wahrscheinlichstes n (\bar{n} in Abb. 2-1) charakterisiert ist. Dies ist dann die gleiche Situation, wie sie im Compound-Kernmodell der vollständigen statistischen Theorie beschrieben ist. Im Gleichgewichtsfall ist es nicht mehr notwendig, die zeitliche Entwicklung des Systems zu verfolgen. Es genügt eine Verdampfungsrechnung nach Weißkopf-Ewing [2-26, 2-27] durchzuführen, um die Teilchenspektren zu erhalten. Die Teilchenemission im Gleichgewichtszustand wird für gewöhnlich als isotrop betrachtet (IECN, Isotropic Emitting Compound Nucleus). Der Emissionsvorgang im Compoundkern ist schematisch in Abb. 2-2 dargestellt.

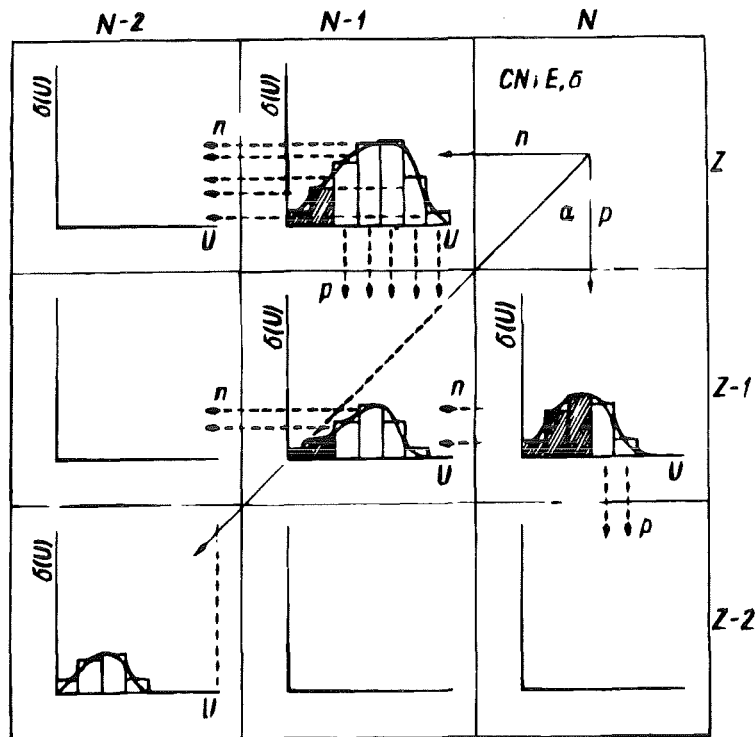


Abbildung 2-2: Schematische Darstellung der Teilchenemission (p, n, α) in einem Z, N -Compound-System [2-17]

Bei der Berechnung der angeregten Kernzustände wird in der Regel die einfache Beschreibung nach dem Fermi-Gas-Modell angewandt, die unter dem Begriff Fermi-Level-Density (FLD) bekannt ist. Diese Zustandsdichtefunktion beschreibt sehr viele Kerne recht gut. Es treten dann Ungenauigkeiten auf, wenn es um Kerne geht, bei denen sich die Nukleonen in abgeschlossenen Schalen befinden [2-28]. Dies trifft für Kerne in der Ni-Region ($Z = 28$) zu. Zur Korrektur dieser Schaleneffekte wurde von Kataria und Ramamurthy eine Zustandsdichtefunktion entwickelt, die bessere Resultate in der Ni-Region liefert als FLD [2-29 bis 2-31]. Diese Zustandsdichtefunktion (Kataria-Ramamurthy-Level-Density) wird in Kapitel 4 verwendet und ist mit KRLD bezeichnet.

In Abb. 2-2 ist im Feld oben rechts im Feld (Z,N) ein Compoundkern eingezeichnet, der durch die Anregungsfunktion σ , die Projektilenergie E , die Kernladungszahl Z und die Neutronenzahl N charakterisiert ist. Durch Emission eines Neutrons wird N um den Wert 1 erniedrigt. Dasselbe gilt bei p-Emission für Z . α -Emission erniedrigt Z und N jeweils um 2. In den restlichen Feldern sind die jeweiligen Bildungswahrscheinlichkeiten der Zustände dargestellt, die unter Emission der Teilchen entstehen, die auf das jeweilige Feld führen. U charakterisiert in diesem Fall die Anregungsenergie des jeweiligen Zustands und $\sigma(U)$ charakterisiert die Bildungswahrscheinlichkeit für einen Zustand einer bestimmten Anregungsenergie. Die schraffierten Bereiche bezeichnen die Anregungsenergien U , die so niedrig sind, daß keine weitere Nukleonenemission aus diesem Kanal möglich ist. Die Emissionsmatrix wird soweit fortgesetzt, bis die Anregungsenergie des Compoundkerns unter die Bindungsenergie der Nukleonen (ca. 8 MeV pro Nukleon bei mittelschweren Kernen wie Eisen) gefallen ist.

2.1.2 Berechnung der Anregungsfunktionen

Die theoretische Berechnung der Anregungsfunktionen mit ALICE-91 wird im folgenden anschaulich illustriert. Wie oben bereits aufgeführt, werden Teilchenemissionen im precompound (precompound emission, PE) und compound (compound emission, CE) Zustand betrachtet.

Abb. 2-3 veranschaulicht die große Anzahl der möglichen Teilchenemissionen bei einer Projektilenergie von $E_p = 30$ MeV des einfallenden Protons. Alle identischen Endzustände fallen in Abb. 2-2 in das gleiche (Z,N) -Feld. Bei dieser Reaktion entstehen ^{56}Co , ^{55}Co , ^{56}Fe , ^{55}Fe , ^{54}Fe , ^{55}Mn , ^{54}Mn , ^{52}Mn , ^{54}Cr , ^{52}Cr , ^{51}Cr und ^{49}V . In Abb. 2-4 wird die Aufteilung des gesamten Wirkungsquerschnitts in die Precompound- und Compound-Anteile dargestellt.

In Abb. 2-4 wurden α -induzierte Daten dargestellt, da bei den hohen α -Energien der Precompoundanteil deutlicher zum Tragen kommt. Es ist deutlich zu erkennen, daß bei $E_\alpha = 104$ MeV der Compoundanteil um ca. 2 Größenordnungen geringer ist als der Gesamtquerschnitt. Bei $E_\alpha = 70$ MeV ist es noch ca. 1 Größenordnung. Das bedeutet, daß im Energiebereich zwischen 70 und 104 MeV die Precompoundprozesse eindeutig dominierend sind. Die Einteilchen-Precompoundprozesse (α,n) und (α,p) haben ihr Maximum schon durchlaufen, während die höheren Prozesse (α,pp) , (α,nn) und (α,pn) noch

deutlich steigende Tendenz aufweisen. Werden die Compoundreaktionen betrachtet, so sind sie bis ca. $E_\alpha = 20$ MeV um mehr als eine Größenordnung stärker vertreten als die Precompoundprozesse, d.h. sie dominieren bei $E_\alpha < 20$ MeV.

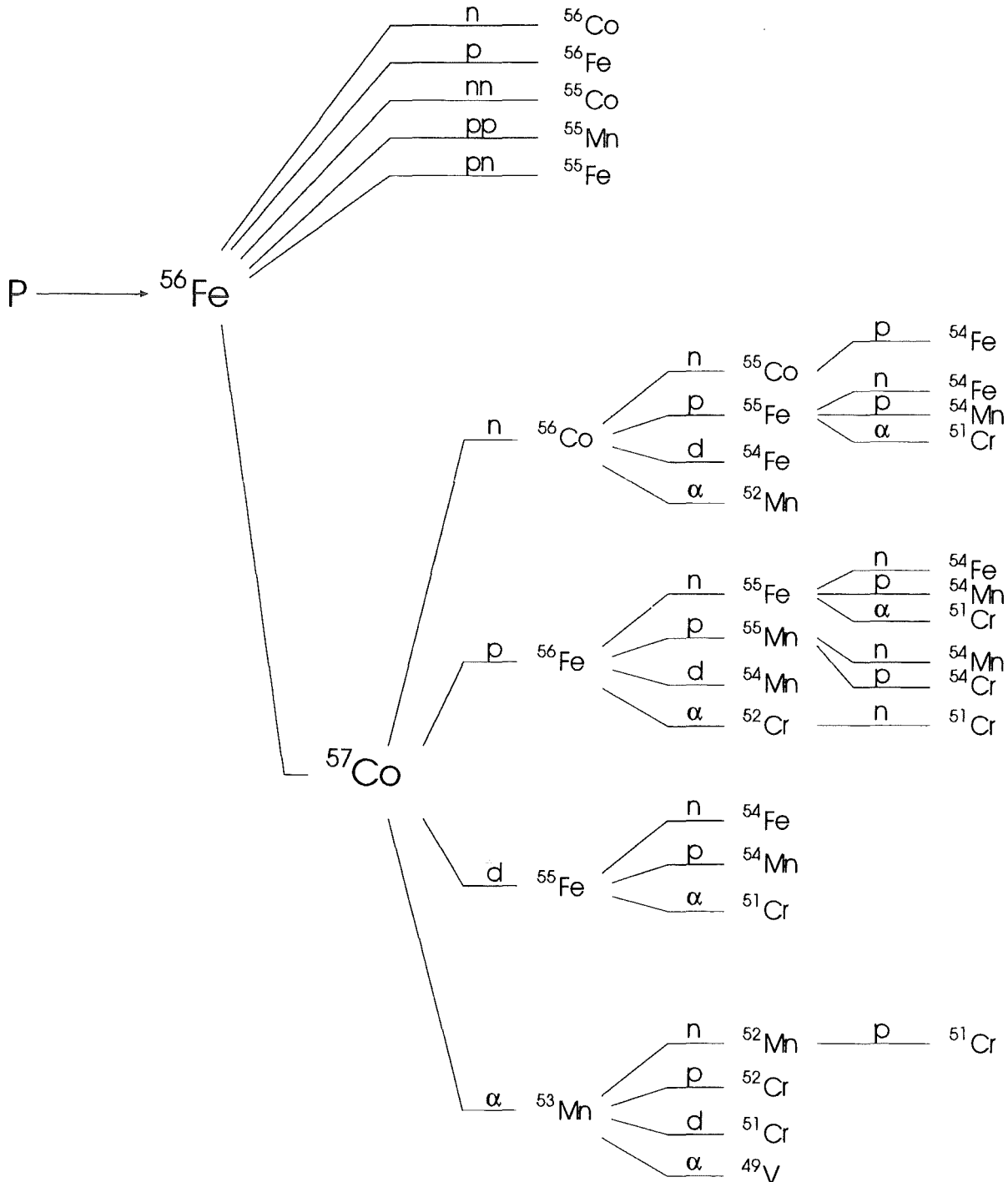


Abbildung 2-3: Offene Reaktionskanäle (oberer Zweig Precompoundemission (PE), unterer Zweig Compoundemission (CE)) bei der Reaktion $^{56}\text{Fe}(p,x)y$ mit $E_p = 30$ MeV

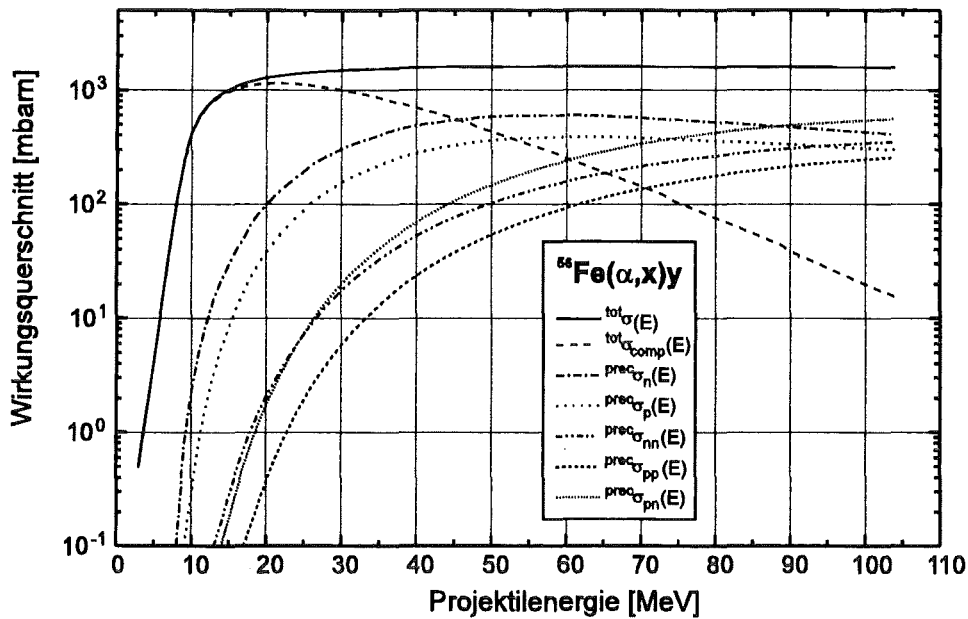


Abbildung 2-4 : Anteile der Precompound- und Compound-Reaktionen am gesamten Reaktionsquerschnitt bei der Reaktion $^{56}\text{Fe}(\alpha, x)y$

Die Berechnung der Anregungsfunktion für ein Nuklid in reinem Eisen ergibt sich aus

$$\sigma_{\text{ISO}}^{\text{Nuc}}(E) = \text{Prec} \sigma_{\text{ISO}}^{\text{Nuc}}(E) + \text{Comp} \sigma_{\text{ISO}}^{\text{Nuc}}(E) \quad (2-3)$$

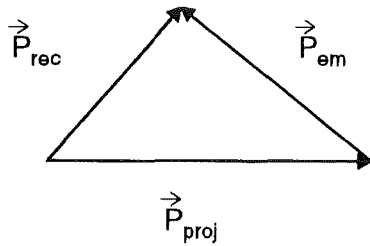
$$\sigma^{\text{Nuc}}(E) = \sum_{\text{ISO}} a_{\text{ISO}} \sigma_{\text{ISO}}^{\text{Nuc}}(E)$$

Nuc bezeichnet die Nuklide, ISO die Eisenisotope und a_{ISO} der relative Häufigkeit der Isotope.

2.1.3 Berechnung der Rückstoßenergie Spektren

Die Kenntnis der Rückstoßenergieverteilungen der in den Kernreaktionen erzeugten Restkerne ist für die Berechnung des nichtelastisch erzeugten Schädigungsbeitrags (Kap. 2.3.2) sehr wichtig.

Die von M. Blann in ALICE-91 eingebrachte Berechnung der nuklidspezifischen Rückstoßenergiespektren berücksichtigt die Teilchenemission in einer Ebene. Allgemein ergibt sich nach der Impulserhaltung für den Rückstoßimpuls eines Restkerns im Laborsystem



$$\vec{P}_{rec} = \vec{P}_{proj} + \vec{P}_{em}$$

$$\text{mit } \vec{P}_{em} = \sum_i \vec{P}_i$$

wobei \vec{P}_{proj} den Projektilimpuls, \vec{P}_{em} den Impulssummenvektor aller emittierten Teilchen \vec{P}_i und \vec{P}_{rec} den Rückstoßimpuls des Restkerns beschreibt. Die Berechnungen von ALICE-91 werden im CMS-System durchgeführt, wie in Abb. 2-5 dargestellt ist. Ausgehend von einer Transformation von Laborsystem (LS) in Schwerpunktsystem (CMS) werden die Precompoundemission (PE) und Compoundemission (CE) durchgeführt. Die bei PE und CE eingezeichneten Pfeile geben die Emissionswahrscheinlichkeit in die unterschiedlichen Raumrichtungen an. Ist der Impuls des Restkerns im CM-System bestimmt, wird CMS \rightarrow LS transformiert. Danach erfolgt die Berechnung der Rückstoßenergie.

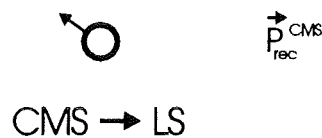
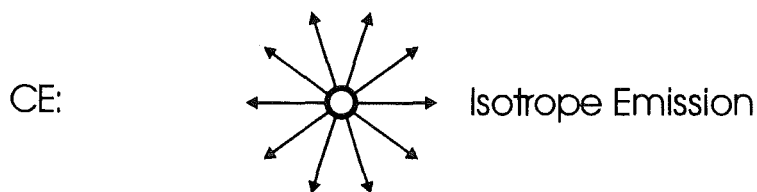
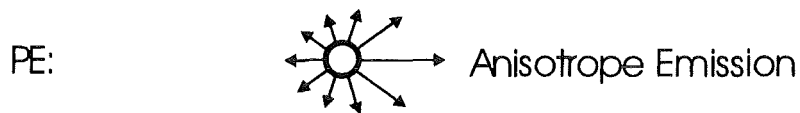
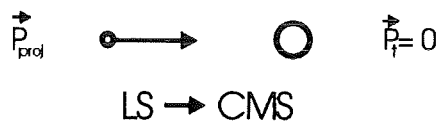


Abbildung 2-5: Darstellung der Rückstoßimpulsberechnung mit dem ALICE-91 Code

In Abb. 2-6 ist für eine Reihe von Rückstoßkernen ihr Rückstoßenergiespektrum (Punktdaten) bei $^{56}\text{Fe}(\alpha, x)y$ Reaktionen mit einer Primärenergie der α -Teilchen von 45 MeV angegeben. Die Rückstoßenergiespektren haben je nach Endnuklid eine deutlich verschiedene Form. Bei den Nukliden, die viele Nukleonen oder Nukleoncluster emittiert haben, tritt eine markante Verbreiterung der Rückstoßenergieverteilung auf, die eine Erhöhung der mittleren Rückstoßenergie zur Folge hat. Diese hohe Rückstoßenergie des Restkerns kommt durch die im Compoundzerfall mögliche Emission der Nukleonen in alle Raumrichtungen zustande. Bei den Restkernen, deren Massenzahl und Kernladungszahl nahe am Compoundkern liegt, werden in der Regel nur wenige Nukleonen emittiert. Dies läuft zudem bevorzugt über einen Precompoundzerfall ab, so daß die in Vorwärtsrichtung kollimierten Ejektile dem Restkern nur einen sehr geringen Restimpuls und damit eine geringe Rückstoßenergie überlassen.

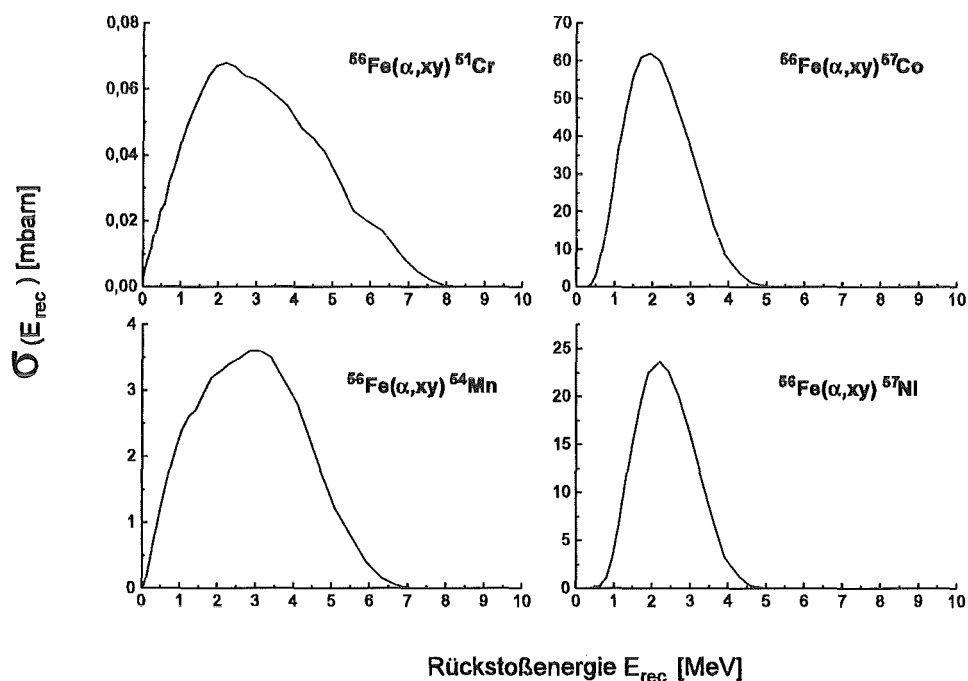


Abbildung 2-6: Typische Rückstoßenergiespektren (Punktdaten) bei $^{56}\text{Fe}(\alpha, x y)$ Reaktionen

In Abb. 2-7 wird die Abhängigkeit von der Rückstoßenergieverteilung von der Projektilenergie für den Fall $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)^{57}\text{Co}$ demonstriert. Es ist zu erkennen, wie die Anregungsfunktion zu höheren Energien hin einen geringeren Wert annimmt und wie gleichzeitig die Breite der Rückstoßenergieverteilungen zunimmt. Durch die Zunahme der Breite erhöht sich auch der Wert der mittleren Rückstoßenergie. Die Zunahme der Rückstoßenergie zu höheren Projektilenergien hin ist nicht direkt ersichtlich, da bei höheren Projektilenergien die Precompoundemission deutlich dominiert. Jedoch läßt sich der dargestellte Prozeß $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)^{57}\text{Co}$ nicht ausschließlich durch Precompoundemission erklären, da nur maximal zwei emittierte Nukleonen durch Precompoundprozesse

berücksichtigt werden können. Das dritte zu emittierende Nukleon kann mit zunehmender Projektilenergie einen immer größer werdenden Betrag an Energie erhalten. Da die Emission des dritten Nukleons über einen Compoundkanal verlaufen muß, und dieser im CMS mit einer isotropen Winkelverteilung behandelt wird, führt die Compoundemission des dritten Nukleons zu dieser deutlichen Erhöhung der Rückstoßenergie. Für den weiteren Verlauf der Berechnungen wurden die Punktdaten der Rückstoßenergiespektren in gruppengemittelte Daten mittels eines FORTRAN Programms umgerechnet. Diese Gruppendaten werden in Kap. 2.3.2 bei der Berechnung der nichtelastischen Schädigung benutzt. Dort ist auch die Umrechnungsprozedur näher beschrieben.

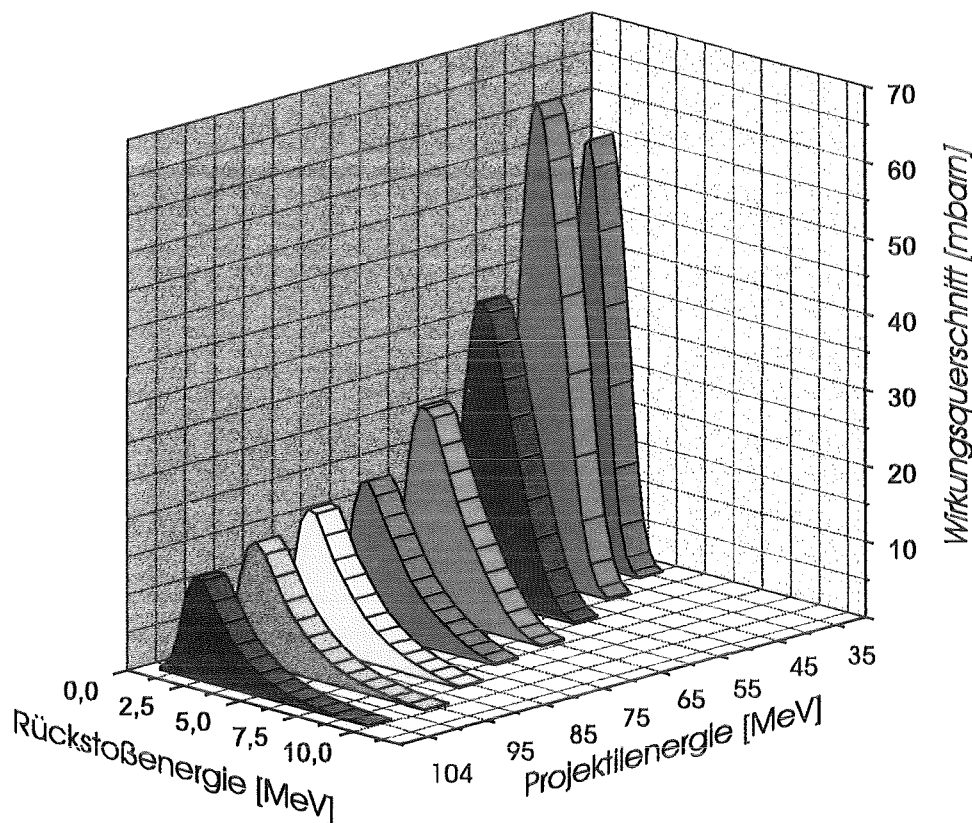


Abbildung 2-7: Abhängigkeit von der Rückstoßenergieverteilung (Punktdaten) von der Projektilenergie bei $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)^{57}\text{Co}$

2.2 Reichweite von Ionen in Metallen

Zur Berechnung der Reichweite von Ionen in Metallen wurde die erste umfassende Theorie anfangs der 60er Jahre von Lindhard, Scharff und Schiott (LSS-Theorie) [5-3] formuliert. Die heute verwendete Reichweitentheorie stellt eine Weiterentwicklung der LSS-Theorie dar. In Ref. [5-4] wird die von den Autoren Ziegler, Biersack und Littmark verbesserte Reichweitentheorie (ZBL-Theorie) ausführlich dargestellt. Zusätzlich wird ein chronologischer Überblick über die Entwicklung der Reichweitentheorie gegeben. Aus der

ZBL-Theorie entstand zuerst das Computerprogramm PRAL (Projected Range Algorithm). Unter Einbeziehung der Schädigungstheorie entstand später das Computerprogramm TRIM (Transport of Ions in Matter). TRIM ist ein Monte-Carlo-Programm zur Berechnung von Reichweite und Schädigung (Modified Kinchin-Pease) von Ionen in Festkörpern. PRAL ist ein semi-analytisches Programm zur Berechnung der projizierten Reichweite und der zugehörigen longitudinalen und transversalen Reichweitenstreuung, siehe Abb. 2-8, mit Hilfe von Transportgleichungen.

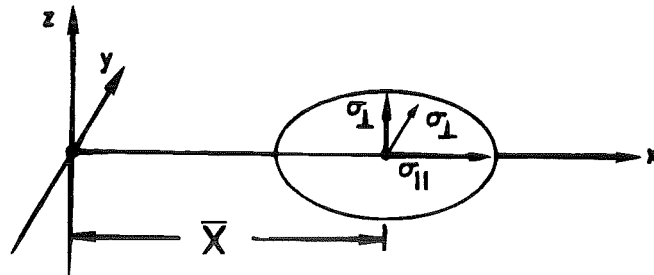


Abbildung 2-8: Darstellung der projizierten Reichweite \bar{X} und der longitudinalen σ_{11} und transversalen σ_{\perp} Reichweitestreuung [2-15]

Beide Programme wurden in dieser Arbeit angewendet und sind in den Unterkapiteln 2.2.1 und 2.2.2 näher beschrieben.

Nachfolgend werden die Grundlagen der ZBL-Theorie beschrieben:

Die Wirkung zweier geladener Teilchen aufeinander wird durch das Coulombpotential beschrieben,

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \quad (2-4)$$

wobei r den Abstand und z_1 bzw. z_2 die Ladungszahlen von Projektil und Target charakterisieren. In Festkörpern tritt der Effekt auf, daß das Projektil je nach Streuparameter nicht die gesamte Ladung des Targetkerns sieht, sondern nur den Teil, der nicht durch die Elektronen abgeschirmt ist, die den Targetkern umgeben. Dadurch wird der Energieübertrag vom Projektil auf das Streuzentrum verringert. Thomas und Fermi erweiterten deshalb das Coulomb-Potential um den Faktor $\phi(r/a)$

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \phi(r/a) \quad (2-5)$$

zum sogenannten Thomas-Fermi-Potential. ϕ beschreibt die Abschirmfunktion deren Stärke durch den Parameter a (Abschirmlänge, Streulänge) bestimmt wird.

$$a = \frac{a_0}{(z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (2-6)$$

a wird in Abhängigkeit von den Ladungszahlen z_1 und z_2 in Bruchteilen des Bohrradius a_0 angegeben.

Firsov und Lindhard lieferten weitere Ansätze für die Streulänge. Eine Untersuchung von Wilson [2-7] zeigt, daß bei kleinen Energien die Moliere'sche Approximation [2-8] am Thomas-Fermi-Potential gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten liefert, wobei $\phi(r/a)$ zu

$$\phi(r/a) = 0.35e^{-0.3r/a} + 0.55e^{-1.2r/a} + 0.1e^{-6r/a} \quad (2-7)$$

mit der Firsov'schen Streulänge [2-9] bestimmt wurde.

$$a = \left(\frac{3\pi^2}{4}\right)^{1/3} a_0 (\sqrt{z_1} + \sqrt{z_2})^{-2/3} \quad (2-8)$$

Ziegler, Biersack und Littmark definierten ein interatomares Potential ϕ_I ,

$$\phi_I = \frac{V(r)}{z_1 z_2 e^2 r} \quad (2-9)$$

das das Verhältnis des Potentials zwischen zwei Ionen relativ zum Coulomb-Potential beschreibt. Für eine Vielzahl von Ionenpaaren wurde ϕ_I berechnet, wobei die optimierte Streulänge

$$a_1 = \frac{0,8854 \cdot a_0}{z_1^{0,23} + z_2^{0,23}} \quad (2-10)$$

gefunden wurde. Aus der Auftragung $\phi_I(r/a_1)$ (Abb. 2-9) wurde unter Umbenennung von a_1 zu a_u eine universale Abschirmfunktion $\phi_u(r/a_u)$ abgeleitet.

$$\phi_u = 0,1818 \cdot e^{-3,2x} + 0,5099 \cdot e^{-0,9423x} + 0,2802 \cdot e^{-0,4029x} + 0,02817 \cdot e^{-0,2016x} \quad \text{mit } x = r/a_u \quad (2-11)$$

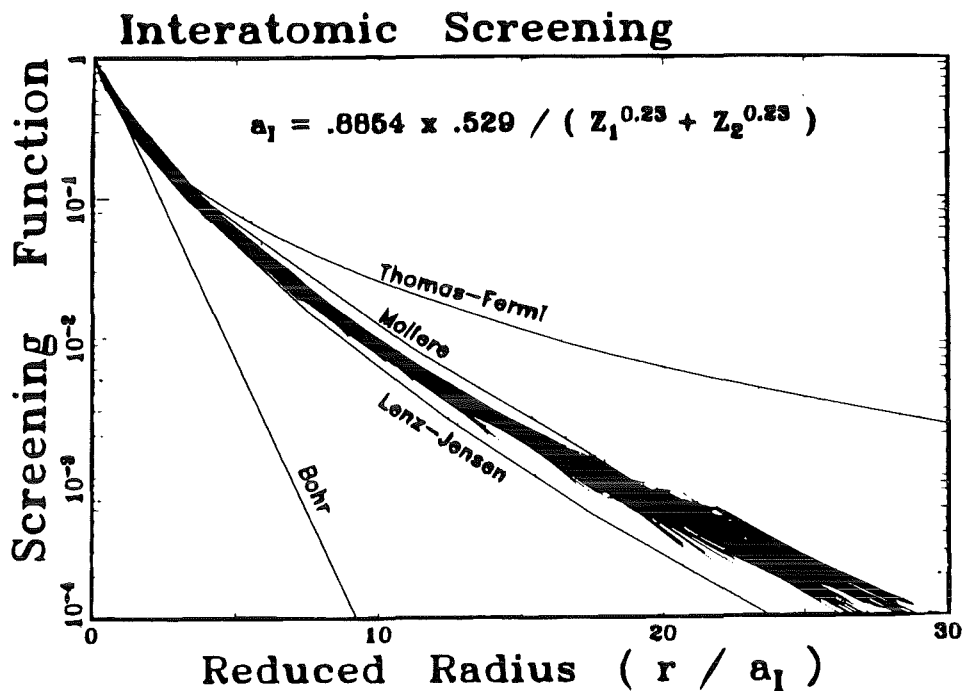


Abbildung 2-9: Berechnete Abschirmfunktion ϕ_1 für eine Vielzahl von Ionenpaaren [2-15]

Die Berechnung der Reichweite eines energetischen Projektils in einem Festkörper kann in zwei Anteile aufgeteilt werden. Zum einen wird Energie an die Targetelektronen übertragen (electronic stopping or inelastic energy loss), zum anderen an die Targetkerne (nuclear stopping or elastic energy loss). Die Aufteilung ist besonders bei geringen Projektilenergien notwendig, da bei diesen Energien die elastische Kernstreuung die elektronische Anregung deutlich überwiegt. Der nukleare Energieverlust pro Einheitswegstrecke dE/dR wird durch den nuclear stopping cross section $S_n(E)$ durch den Term

$$\frac{dE}{dR} = N \cdot S_n(E) \quad (2-12)$$

beschrieben, wobei N die atomare Dichte und E die Projektilenergie angibt. Unter Verwendung der universellen Abschirmfunktion ϕ_u wird der mittlere nukleare Energieverlust $S_n(E)$ zu

$$S_n(E) = 8,462 \cdot 10^{-15} \frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \cdot S_n(\epsilon) \quad \text{in } \frac{\text{eV}}{\text{atom / cm}^2} \quad (2-13)$$

bestimmt, wobei die reduzierte Energie ϵ berechnet wird aus

$$\epsilon = 32,53 \cdot \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \frac{1}{z_1 z_2 (z_1^{0,23} + z_2^{0,23})} \cdot E \quad \text{mit } E \text{ in keV} \quad (2-14)$$

und der reduzierte nukleare Energieverlust sich nach

$$\epsilon \leq 30: \quad S_n(\epsilon) = \frac{\ln(1 + 1,1383 \cdot \epsilon)}{2[\epsilon + 0,01321 \cdot \epsilon^{0,21226} + 0,19593 \cdot \epsilon^{0,5}]} \quad (2-15)$$

$$\epsilon > 30: \quad S_n(\epsilon) = \frac{\ln(\epsilon)}{2 \cdot \epsilon} \quad (2-16)$$

berechnet. ZBL bemerken, daß die Aufteilung des Energieverlusts in einen elastischen und nichtelastischen Anteil eine mögliche Korrelation zwischen der Kernstreuung und der elektronischen Anregung vernachlässigt. Jedoch folgern sie, daß diese Korrelation nicht signifikant ist, wenn ein Mittelwert über viele Streu- und Anregungsprozesse berechnet wird, was für ein Ion in einem Festkörper zutrifft.

Der elektronische Energieverlust S_e beschreibt Prozesse wie

- direkter Energietransfer an Targetelektronen durch Elektron-Elektron-Stöße
- Anregung von Targetatomen
- Elektronenabgabe oder Elektroneneinfang beim Ion selbst

und wird nach dem Ansatz der Wechselwirkung eines Ions mit einem freien Elektronengas (Metalle) nach

$$S_e(E) = \int I(E, \rho) \cdot z_1^2 \cdot \rho \, dV \quad (2-17)$$

berechnet. I ist die Wechselwirkungsfunktion für den Energieverlust eines Teilchens mit der Einheitsladung und der Energie E in einem Elektronengas der Dichte ρ . z_1 gibt die Ladung des Ions an. In Abhängigkeit von der Projektilenergie kann das Problem auftreten, daß das Projektil nicht vollständig ionisiert ist. Dies wird durch eine energieabhängige Ladungszahl $z_1^*(E)$ berücksichtigt.

$$S_e(E) = \int I(E, \rho) \cdot (z_1^+(E))^2 \cdot \rho \, dV \quad (2-18)$$

Die Kenntnis des nuklearen Energieverlusts $S_n(E)$ und des elektronischen Energieverlusts $S_e(E)$ für eine Vielzahl von Wechselwirkungspaaren ermöglichte es ZBL, universell einsetzbare Rechenprogramme wie TRIM und PRAL zu entwickeln.

2.2.1 Monte-Carlo Rechnungen mit TRIM-91

Eine erste umfassende Publikation zu TRIM wurde 1980 von Biersack und Haggmark veröffentlicht [2-16]. Weiterentwicklungen sind z.B. TRIM-85 [5-4] und TRIM-91. Die Zahl bezeichnet das Jahr, in dem diese TRIM-Version freigegeben wurde. Die in dieser Arbeit benutzte Version ist TRIM-91, wobei von der zusätzlichen Funktion der Kaskadenberechnung und Verfolgung der verlagerten Atome kein Gebrauch gemacht wurde, da bei den zu erwartenden hochenergetischen Verlagerungsatomen für eine ausreichend gute Statistik unzumutbare Rechenzeiten entstanden wären. Die mit TRIM-91 berechnete elastische Verlagerungsschädigung wurde nach dem modifizierten Kinchin-Pease Ansatz (siehe Kapitel 2.3.1) berechnet. Derart benutzt ist TRIM-91 mit TRIM-85 identisch.

Nachfolgend werden die Eigenschaften von TRIM-85 kurz umrissen.

Da in Kapitel 2.3 die Schädigungstheorie dargestellt ist, wird hier nicht im Detail auf die Schädigungsberechnung eingegangen. TRIM ist ein Monte-Carlo (MC) Programm zur Simulation von Abbrems- und Streuprozessen von energetischen Ionen in Festkörpern. Es können Effekte wie Implantation, Strahlenschädigung, Sputtern und Transmission von Ionen studiert werden. Wie in anderen MC-Simulationen ist eine Berechnung von sehr vielen Ereignissen (>100.000) notwendig, um eine gute statistische Genauigkeit zu erreichen. Jedes Ereignis beginnt mit einer vorgegebenen Energie, Position und Richtung. Das Teilchen ändert dann Energie und Richtung durch binäre nukleare Stöße, wobei es sich zwischen den Stößen auf einer geradlinigen Bahn bewegt. Die Energie wird durch den nuklearen und elektronischen Energieverlust bestimmt. Die Verfolgung eines Projektils stoppt dann, wenn die Energie des Projektils geringer wird als die vorgegebene Energieschwelle wird, oder wenn die Projektilposition außerhalb des Targets liegt. Das Target wird als amorph betrachtet mit Atomen an zufälligen Orten. Deshalb können richtungsabhängige Streueigenschaften nicht studiert werden. Dieser Algorithmus kann für Energien von 0,1 keV bis weit in den MeV-Bereich angewendet werden. Die untere Grenze kommt durch die Gültigkeit des BCA-Modells (Binary Collision Approximation) zustande, während die obere Grenze durch relativistische Effekte verursacht wird. Die Autoren machen darauf aufmerksam, daß Kernreaktionen zur Schädigungsproduktion beitragen können. In TRIM wurde dieser Aspekt jedoch nicht berücksichtigt. (Hauptthema dieser Arbeit, siehe Kap. 2.3.2 und Kap. 5).

Die hohe Effizienz bei der Behandlung hochenergetischer Projektile wird durch eine energieabhängige freie Weglänge zwischen zwei Stößen erreicht. Diese freie Weglänge wird mit abnehmender Projektilenergie kontinuierlich reduziert.

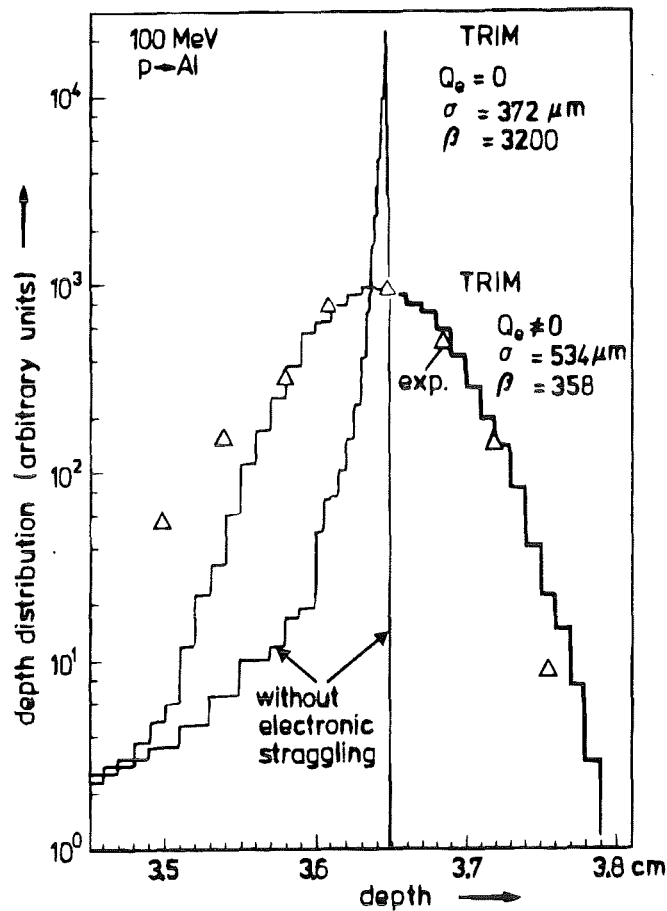


Abbildung 2-10 Projizierte Reichweitenverteilung für 100 MeV Protonen in Aluminium [5-4]

Die nuklearen und elektronischen Energieverluste werden als voneinander unabhängig behandelt. Der angewendete Formalismus erlaubt es, TRIM für alle möglichen Ion-Target-Kombinationen zu verwenden.

Die Hauptverwendung des TRIM-Codes in dieser Arbeit war die Berechnung der Reichweiten von 30 MeV Protonen und 104 MeV α -Teilchen und die Berechnung der elastischen Verlagerungsschädigung für die oben genannten Projektile und Energien.

Die Qualität der Reichweitedaten von TRIM-Berechnungen im Hochenergiebereich zeigt Abb. 2-10. Aufgetragen ist die Anzahl der implantierten Protonen in Abhängigkeit von der Reichweite bei der Implantation von 100 MeV Protonen in Aluminium. Die Abbildung zeigt Berechnungen mit ($Q_e \neq 0$) und ohne ($Q_e = 0$) Reichweitenstreuung (electronic straggling). Der Parameter Q_e beschreibt zusätzlich zum elektronischen Energieverlust die energieabhängige Aufstreuung, die als Reichweitenstreuung interpretiert werden kann. Ohne Aufstreuung ist die Reichweite der Protonen exakt definiert. Dies entspricht jedoch

nicht den experimentellen Ergebnissen. Die reichweitengestreuten Werte können jedoch gut mit den experimentellen Daten (offene Dreiecke) verglichen werden, wobei die experimentellen Werte eine zu geringeren Reichweiten hin verschobene breitere Streuung zeigen.

2.2.2 Semi-Analytische Reichweite-Berechnungen mit PRAL

PRAL (Projected Range Algorithm) ist ein Algorithmus zur Berechnung von der in strahlrichtung projizierten Reichweite energetischer Ionen in Festkörpern mit dem Computer. Gegenüber anderen Ansätzen erlangte PRAL seine weite Verbreitung dadurch, daß der Algorithmus

- einfacher und schneller auf Computern läuft
- nuklearen und elektronischen Energieverlust berücksichtigt
- alle Massenverhältnisse m_1/m_2 gleichermaßen bearbeiten kann
- die Reichweite in komplexen Targets (chemische Verbindungen, metallische und nichtmetallische Werkstoffe) berechnen kann
- gute Übereinstimmung mit experimentellen Werten in Bezug auf projizierte Reichweite und longitudinale Reichweitenstreuung für alle Energien und Projektile in einer Vielzahl von Targets zeigt.

Grundlage der Berechnungen ist ein amorphes und unendlich ausgedehntes Target, in dem die räumliche Verteilung (Reichweitenprofil, Implantationsprofil) der gestoppten Teilchen vorhergesagt werden soll. In den Publikationen [2-14] und [5-4] sind die PRAL-Gleichungen von der Transporttheorie abgeleitet.

Die Reichweitenverteilung von Ionen, die in die Oberfläche eines Targets eingeschossen werden, wird durch die Wahrscheinlichkeit definiert, ein gestopptes Teilchen an einem bestimmten Ort im Target zu finden. Dies zeigt den statistischen Charakter, da ein einzelnes Ereignis keine experimentelle Situation repräsentieren kann.

Der Ansatz über die Transporttheorie ergab eine Lösung, die beschreibt, wie die eingeschossenen Ionen ihre Energie abgeben, bis sie zur Ruhe gekommen sind. Es wurde angenommen, daß die Bestrahlung die Targetkonstitution nicht verändert. Nachbestrahlungseffekte wie z.B. thermische Diffusion werden auch vernachlässigt. Die Wechselwirkung zwischen Ion und Target wurde über den nuklearen und elektronischen Energieverlust definiert. Eine Korrelation zwischen den beiden Effekten wurde nicht betrachtet. Da beide Effekte statistischer Natur sind, tragen beide zur Reichweitenverteilung bei.

Der allgemeine Ansatz einer linearisierten Boltzmann-Gleichung für das Reichweitenproblem lautet

$$\begin{aligned}
-\cos\theta \frac{\partial F(E, \vec{e}, x)}{\partial x} &= N \int \frac{d\sigma_n}{dE} [F(E, \vec{e}, x) - F(E - T_n, \vec{e}', x)] dE \\
&+ N \int \frac{d\sigma_e}{dE} [F(E, \vec{e}, x) - F(E - T_e, \vec{e}, x)] dE
\end{aligned}
\tag{2-19}$$

wobei \vec{e} die Einstrahlrichtung und \vec{n} die Oberflächennormale angibt ($\vec{n} \cdot \vec{e} = \cos \theta$). z_1 , m_1 und E sind die Projektilparameter. z_2 , m_2 und T sind die Parameter des Rückstoßatoms nach der Kollision, wobei \vec{e}'' die Richtung des Rückstoßatoms und \vec{e}' die Richtung des Projektils nach dem Stoß definiert. Die 3-dimensionale Reichweitenverteilung, abhängig von der Projektilenergie E und der Einstrahlrichtung \vec{e} , wird durch $F(E, \vec{e}, \vec{r})$ beschrieben. Im eindimensionalen Fall gilt $F(E, \vec{e}, x)$.

N beschreibt die atomare Dichte und $d\sigma_n$ bzw. $d\sigma_e$ geben die nuklearen bzw. elektronischen Streuquerschnitte an. In Abb. 2-11 wird der Streuprozess nochmals graphisch verdeutlicht.

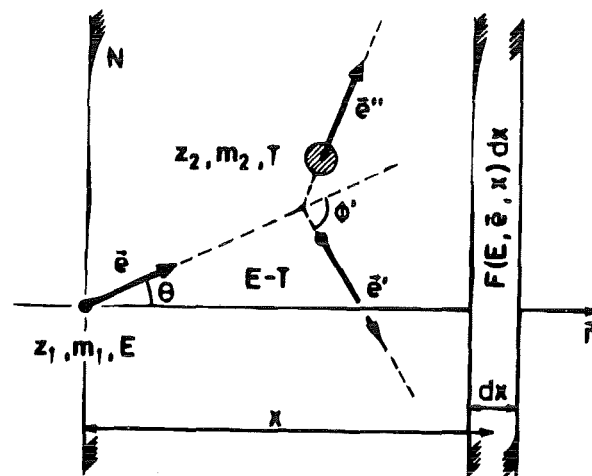


Abbildung 2-11: Schematische Darstellung der Erzeugung eines Rückstoßatoms bei einem elastischen Stoß.

In Gleichung (2-19) charakterisiert der 1. Integralterm die nukleare Streuung, wobei das Projektil seine Richtung ändert, während die Energie T_n übertragen wird. Der 2. Integralterm behandelt den elektronischen Anteil, wobei die Richtung des Projektils während des Energieübertrags unbeeinflusst bleibt. $\cos \theta$ beschreibt die Einstrahlrichtung, die aber für gewöhnlich als senkrecht angenommen wird. Daraus folgt $\cos \theta = 1$.

In [5-4] wurde Gleichung (2-19) nach längerer Rechnung gelöst und die Gleichungen für die mittlere projizierte Reichweite \bar{X} und die longitudinale Reichweitenstreuung angegeben.

Für die gesamte Weglänge s folgt

$$s = \int ds = \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_t(E)} \quad (2-20)$$

wobei E_0 die Primärenergie des Projektils und S_t den totalen Energieverlust angibt. Der totale Energieverlust berechnet sich aus

$$S_t(E) = S_n(E) + S_e(E) \quad (2-21)$$

S_n und S_e geben die unter Kap.2-2 definierten nuklearen bzw. elektronischen Energieverlustfaktoren an. Für die mittlere projizierte Reichweite folgt dann

$$\bar{x} = \int \langle \cos \psi \rangle ds \quad (2-22)$$

wobei $\langle \cos \psi \rangle$ die mittlere Projektion aller Richtungen ψ in Strahlrichtung in Abhängigkeit von der Projektilenergie angibt. Für hohe Energien ist $\langle \cos \psi \rangle \cong 1$, da die Projektile nur sehr unwahrscheinlich um große Winkel abgelenkt werden. Für kleine Energien geht $\langle \cos \psi \rangle \rightarrow 0$, da nach längerer Wegstrecke und vielen Stößen die Information über die Einfallsrichtung verloren gegangen ist. Die Teilchenbewegung geht schließlich in die Brown'sche Bewegung über, in der alle Richtungen gleich wahrscheinlich sind.

Dies führt dann auf eine lineare Differentialgleichung für die projizierte Reichweite

$$\frac{d\bar{x}(E)}{dE} = \frac{1}{S_t(E)} - \frac{\mu S_n(E)}{2S_t(E) \cdot E} \cdot \bar{x}(E) \quad (2-23)$$

mit der Anfangsbedingung $\bar{x}(E=0)=0$. Die Integration über den ersten Bruch ergibt die gesamte Reichweite s . Da die projizierte Reichweite gesucht ist, muß von der gesamten Reichweite ein Faktor subtrahiert werden, der die Winkelaufstreuung (abhängig von $S_n(E)$) und damit die Reduzierung der gesamten Reichweite auf die Projektion in Einfallsrichtung beschreibt. Umgeschrieben auf

$$\bar{x}(E_0 + \Delta E) = \bar{x}(E_0) + \left(1 - \frac{\mu S_n(E_0)}{2E_0} \right) \cdot \frac{\Delta E}{S_t(E_0)} \quad (2-24)$$

kann die Gleichung leicht numerisch gelöst werden (PRAL-Algorithmus). μ gibt die reduzierte Masse des Projektils m_1 und Targetkerns m_2 als $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ an.

Die longitudinale Reichweitenstreuung wird aus der Varianz erhalten

$$\sigma_{\parallel}^2 = \sigma_x^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (2-25)$$

Das Programm PRAL wurde in dieser Arbeit benutzt, um die bei den Bestrahlungen benötigten Energieverluste in den Moderatorfolien (Al-Folien) und in den Targetfolien (Fe-Folien) bei Bestrahlungen (α , p) von Folienstapeln zu berechnen. Desweiteren wurde aus den Reichweitestreuungen auf die Energieunsicherheiten zurückgerechnet.

Ebenso wurden die Reichweiten der durch Kernreaktionen erzeugten schweren Rückstoßkerne berechnet, um einen Vergleich zwischen Experiment und Theorie durchführen zu können.

2.3 Schädigungstheorie

Ziel dieses Kapitels ist die Darstellung der schädigungstheoretischen Grundlagen zur Produktion von elastischen und nichtelastischen Verlagerungsdefekten in Festkörpern unter Bestrahlung mit leichten Ionen (p, α). Einführende Information dazu findet sich bei Robinson [2-37, 2-38].

Der Energieverlust bzw. Intensitätsverlust, den leichte Ionen beim Durchdringen von Festkörpern erfahren, kann über die Mechanismen

- Anregung von Atomen (inelastische Prozesse)
- Elastische Streuung an Atomkernen (elastische Prozesse)
- Kernreaktionen (nichtelastische Prozesse)
- Bremsstrahlungseffekte,

die sich auf die elektromagnetische bzw. starke Wechselwirkung zurückführen lassen, erklärt werden.

Die Anregung und Ionisierung von Atomen stellt mit über 99 % den höchsten Anteil am Energieverlust von hochenergetischen leichten Ionen dar. Die elastische Streuung erzeugt bei niedrigen Projektilenergien einen Beitrag, der deutlich oberhalb der elektronischen Anregung liegt, verliert aber mit zunehmender Energie wesentlich an Bedeutung für den Energieverlust. Dies ist in Abb. 2-12 veranschaulicht [2-32].

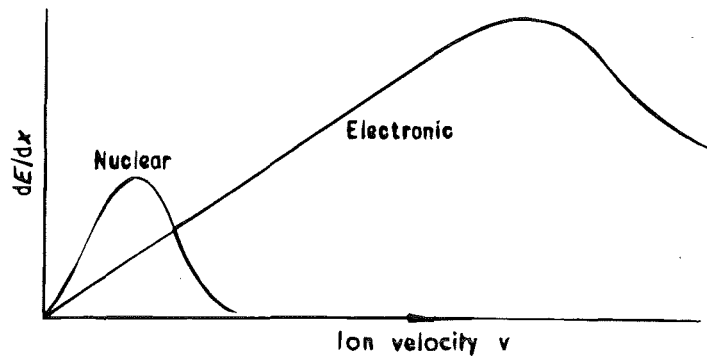


Abbildung 2-12: Verlauf des nuklearen und elektronischen Energieverlusts als Funktion der Projektilgeschwindigkeit v [2-32]

Der Beitrag durch Kernreaktionen am Energieverlust ist sehr gering, da die leichten Ionen bei mittleren Energien nur mit einem Wirkungsquerschnitt von ca. 1000-1500 mbarn Reaktionen erzeugen, was gegenüber dem elastischen Streuungsquerschnitt vernachlässigt werden kann. Der Anteil der Bremsstrahlung am Energieverlust kann bei leichten Ionen im Energiebereich < 100 MeV vernachlässigt werden.

Die Reichweite von leichten geladenen Projektilen wird somit fast ausschließlich durch den Grad der Anregung und Ionisierung von Atomen bestimmt. Die dabei an die Matrix abgegebene Energie wird bei diesen Prozessen in Wärme umgewandelt. Die energieverlustmäßig minoren Prozesse der elastischen Streuung und der Kernreaktionen erzeugen neben Wärme atomare Verlagerungen von Gitteratomen.

Diese durch Leichtionen verursachten bestrahlungsinduzierten Gitterdefekte wurden in der Vergangenheit ausschließlich durch elastische Streuung erklärt und sind bei [2-1, 2-2, 2-3] dargestellt. Da die elastischen Prozesse bei geringeren Projektilenergien mit einem um mehrere Größenordnungen höheren Wirkungsquerschnitt als die nichtelastischen Prozesse stattfinden, ist diese Annahme gerechtfertigt. In der vorliegenden Arbeit soll jedoch der nichtelastisch produzierte Anteil der Verlagerungsschädigung untersucht werden. Es wird davon ausgegangen, daß die nichtelastischen Prozesse auf wenig wahrscheinliche, aber sehr schädigungsintensive Rückstoßkerne führen, die integral einen gegenüber der elastischen Schädigung nicht zu vernachlässigenden Anteil an Verlagerungsschädigung erzeugen. Sowohl der energieabhängige elastische wie auch der nichtelastische Verlagerungsquerschnitt lassen sich nach dem Ausdruck

$$\sigma_D(E) = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} v(T) \cdot \frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT \quad (2-26)$$

berechnen, wobei der Verlauf des Verlagerungsquerschnitts in erster Linie durch das zugrundeliegende PKA-Spektrum $d\sigma(E, T)/dT$ bestimmt wird. Die differenzierte Behandlung

der elastischen und nichtelastischen Schädigung, die sich auf die Berechnung der jeweiligen gültigen PKA-Spektren reduzieren läßt, erfolgt in den beiden folgenden Unterkapiteln.

2.3.1 Elastische Schädigung

Zur Berechnung der Strahlungsschädigung in fester Materie werden generell zwei Effekte unterschieden [2-4]:

Primäre Schädigung:

Die Projektile (z.B. Neutronen, Elektronen, Ionen) werden elastisch an den ruhenden Gitteratomen gestreut und erzeugen dabei PKA's (primary knock-on atoms), denen je nach Projektilenergie und Streuwinkel unterschiedliche kinetische Energien T übertragen werden (PKA-Spektrum). Wird genügend Energie übertragen ($T > E_d$), so kann das PKA seinen Gitterplatz verlassen.

Sekundäre Schädigung:

Die primär erzeugten PKA's geben ihre Energie in Form von elektronischer Anregung oder ebenfalls elastischer Streuung mit Matrixatomen ab. Dabei werden je nach primärer Energie des PKA's Frenkelpaare oder Schädigungskaskaden erzeugt. Die Beschreibung erfolgt durch den sekundären Schädigungsfaktor $\nu(T)$, der durch unterschiedliche Schädigungsmodelle beschrieben werden kann und die Anzahl der erzeugten Verlagerungen als Funktion der PKA-Energie wiedergibt. Neben dem historischen Schädigungsmodell von Kinchin-Pease [2-5] wird heute noch das von der IAEA empfohlene NRT-Standardmodell [2-6] verwendet, welches auch Grundlage dieser Arbeit bildet.

In die primäre Schädigung geht nur die PKA-Bildungswahrscheinlichkeit ein, während die sekundäre Schädigung die Auswirkung der PKA's auf die Schadenserzeugung im Matrixgitter beschreibt und damit unabhängig vom PKA-Erzeugungsmechanismus ist. Diese zentrale Aussage ist von besonderer Wichtigkeit für die spätere Berechnung des nichtelastisch produzierten Schädigungsanteils.

Bestimmung des elastischen Verlagerungsquerschnitts

Die Bestimmung des totalen Verlagerungsquerschnitts $\sigma_D(E^{proj})$ macht es notwendig, auf die primären und sekundären Schädigungsmechanismen getrennt einzugehen.

Die primäre Schädigung wird für leichte Ionen (Protonen, α -Teilchen) mit Energien im MeV Bereich durch den differentiellen Rutherford-Streuquerschnitt beschrieben, der die Wahrscheinlichkeit angibt, daß ein Ion der Masse m_1 , der Ladungszahl z_1 und der Energie E^{proj} an einem Targetatom der Masse m_2 und Ladungszahl z_2 beim Streuvorgang um den

Winkel ϑ in das Raumwinkelintervall $d\Omega$ gestreut wird. Die nachfolgenden Betrachtungen gelten für $m_1 / m_2 \ll 1$ im Laborsystem

$$d\sigma(E^{\text{proj}}) = \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 E^{\text{proj}}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)} d\Omega \quad (2-27)$$

Wird die an das Streuzentrum (PKA) übertragene streuwinkelabhängige Energie $T(E^{\text{proj}}, \vartheta)$ betrachtet [5-4],

$$T(E^{\text{proj}}, \vartheta) = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E^{\text{proj}} \sin^2(\vartheta/2) \quad (2-28)$$

so kann der Rutherford-Streuquerschnitt umgerechnet werden, wobei er dann die Wahrscheinlichkeit angibt, daß ein Projektil während des Streuvorgangs an das PKA die Energie $T+dT$ überträgt:

Bei der elastischen Kernstreuung gilt Rotationssymmetrie bezüglich der Strahlrichtung. Damit läßt sich $d\Omega$ durch Integration von 0 bis 2π über den Winkel φ durch

$$d\Omega = 2\pi \sin(\vartheta) d\vartheta \quad (2-29)$$

ausdrücken. Für die Funktionaldeterminante folgt dann

$$d\Omega = \frac{d\Omega}{d\vartheta} \cdot \frac{1}{\frac{dT}{d\vartheta}} \cdot dT \quad (2-30)$$

wobei für $d\Omega/d\vartheta$

$$\frac{d\Omega}{d\vartheta} = 2\pi \sin \vartheta \quad (2-31)$$

und für $dT/d\vartheta$

$$\frac{dT}{d\vartheta} = 2 \frac{m_1 \cdot m_2}{(m_1 + m_2)^2} E^{\text{proj}} \sin \vartheta \quad (2-32)$$

eingesetzt werden kann. Damit folgt für $d\sigma/dT$

$$d\sigma(E^{\text{proj}}, T) = 4\pi a_0^2 \frac{z_1^2 z_2^2 E_R^2}{E^{\text{proj}} T^2} \frac{m_1 \cdot m_2}{(m_1 + m_2)^2} dT \quad (2-33)$$

mit

$$E_R = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = 13.6 \text{ eV} \quad a_0 = 0.53 \text{ \AA} \text{ Bohr'scher Radius}$$

Aus Gleichung (2-28) folgt, daß selbst bei konstanter Projektilenergie die PKA's eine Energieverteilung aufweisen, wobei die Maximalenergie gleich T_{max} ist

$$T_{\text{max}} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E^{\text{proj}} \quad (2-34)$$

Während in Gleichung (2-27) reine Coulombstreuung vorausgesetzt wurde, muß für Energien im Bereich einiger keV und darunter ein durch eine Abschirmfunktion $\phi(r/a)$ erweitertes Streupotential (z.B. Thomas-Fermi-Potential) verwendet werden.

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \phi(r/a) \quad (2-35)$$

Diese Abschirmfunktion beschreibt, wie die Coulombkraft, die durch die positive Punktladung im Kern hervorgerufen wird, durch die umgebende Elektronenwolke in Abhängigkeit vom Abstand r reduziert wird (die Streulänge a gibt die Stärke der Reduktion an). In Abb. 2-13 ist dies veranschaulicht [2-32]. Der in Abb. 2-13 verwendete Parameter t hängt von der reduzierten Energie ϵ (siehe Gleichung 2-43) und dem Streuwinkel θ im CM-System ab. Er wird durch den Ausdruck $t = \epsilon^2 \cdot \sin^2 \theta_{\text{cm}} / 2$ beschrieben.

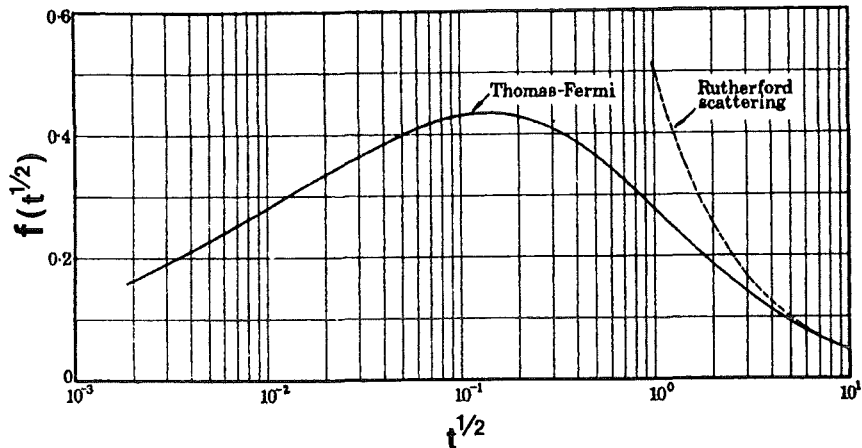


Abbildung 2-13: Vergleich verschiedener Streufunktionen [2-32]

Ziegler, Biersack und Littmark (siehe Kapitel 2.2) [5-4] zeigten, daß die vier Approximationen von Thomas-Fermi, Moliere, Lenz-Jensen und Bohr bei geringen Energien deutliche Unterschiede aufweisen. Mit der Definition einer universalen, interatomaren *screening function* ϕ_u wird auch im unteren Energiebereich eine sehr gute mittlere Funktion angegeben.

$$\phi_u = 0,1818 \cdot e^{-3,2x} + 0,5099 \cdot e^{-0,9423x} + 0,2802 \cdot e^{-0,4029x} + 0,02817 \cdot e^{-0,2016x} \quad \text{mit } x = r/a_u \quad (2-36)$$

Diese Funktion wurde mittels der universellen Streulänge a_u bestimmt.

$$a_u = \left(\frac{3\pi^2}{4}\right)^{1/3} a_0 (z_1^{0,23} + z_2^{0,23})^{-1} \quad (2-37)$$

Die sekundäre Schädigung wird durch die Energieabgabe des PKA entlang seines Laufweges charakterisiert. Die kinetische Energie T wird dabei in Verlagerungsenergie T_{dam} und elektronische Anregungsenergie T_{elektr} aufgeteilt. Da die elastisch erzeugten PKA's mit den restlichen Gitteratomen, was Ladung und Masse betrifft, identisch sind, ist aus Gleichung (2-28) ersichtlich, daß ein sehr günstiges Verhältnis zum Energieübertrag T_{dam} an weitere Gitteratome besteht. Das bedeutet, daß ein PKA auf kurzer Wegstrecke unter Erzeugung einer Verlagerungskaskade eine Vielzahl von Atomen verlagern kann. Der hohe sekundäre Energieübertrag führt dann auch zur Bildung von Subkaskaden. Die Verlagerungskaskade endet schließlich, wenn das PKA weniger kinetische Energie besitzt als zur Verlagerung eines weiteren Gitteratoms notwendig wäre.

Die Energieschwelle E_d , die als mittlere Verlagerungsenergie zur Bildung einer permanenten Verlagerung anzusehen ist, wurde von ASTM und UK in Eisenbasislegierungen mit $E_d = 40$ eV empfohlen und dient im NRT-Standardmodell [2-6] als Grundlage zur Berechnung der Anzahl der Verlagerungen. Desweiteren wurden in das

NRT-Standardmodell die Empfehlungen der IAEA [2-12] und USERDA [2-13] bezüglich der Anzahl der sekundär erzeugten Frenkelpaare $v(T)$ aufgenommen. Damit wurde die Energiepartitionierung der kinetischen Energie des PKA in Schädigungsenergie (T_{dam}) und elektronische Anregungsenergie (T_{elektr}) nach Lindhard [5-3] berücksichtigt. Die Anzahl der sekundären Verlagerungen wird nach dem NRT-Standardmodell mit folgendem Ansatz berechnet:

$$\begin{aligned}
 v(T) &= 0 & \text{für} & \quad T_{\text{dam}} < E_d \\
 v(T) &= 1 & \text{für} & \quad E_d < T_{\text{dam}} < 2,5E_d \\
 v(T) &= k \frac{(T - T_{\text{elektr}})}{2E_d} & & \quad (2-38) \\
 &= k \frac{T_{\text{dam}}}{2E_d} & \text{für} & \quad T_{\text{dam}} > 2,5E_d
 \end{aligned}$$

k: Verlagerungseffektivität ($k = 0,8$)

Zwischen dem heute gängigen NRT-Modell und dem früher verwendeten Kinchin-Pease-Modell [2-5] wurde die sekundäre Schädigungsfunktion $v(T)$ experimentellen Resultaten angepaßt, indem die Energiepartition ($T \rightarrow T_{\text{dam}}$) und ein Faktor k eingeführt wurde, der die Verlagerungseffektivität charakterisiert (siehe Gleichung 2-38). Für k wurde ein mittlerer Wert von $k = 0,8$ angenommen. Daß die Verlagerungseffektivität nicht konstant ist, sondern von der PKA-Energie T abhängt und nur zur Vereinfachung der sekundären Schädigungsfunktion $v(T)$ auf den konstanten Wert von $k = 0,8$ gesetzt wurde [2-35], kann den Arbeiten von J.H. Kinney et al. [2-34] und P. Jung [2-33] entnommen werden. In Kap. 6.4 dieser Arbeit wird dieser Aspekt der Verlagerungseffektivität in Bezug auf Kaskadenbildung ausführlicher diskutiert.

Die Berechnung der für Schädigung zur Verfügung stehenden Energie T_{dam} erfolgt nach Lindhard [5-3] und Robinson [2-11] nach einer analytischen Näherung:

Es ergibt sich

$$T_{\text{dam}} = \frac{T}{1 + k_d g(\epsilon)} \quad (2-39)$$

mit k_d

$$k_d = \frac{0.0793 z_1^{3/2} z_2^{1/2} (m_1 + m_2)^{3/2}}{(z_1^{3/2} + z_2^{3/2})^{3/4} m_1^{1/2} m_2^{1/2}} \quad (2-40)$$

In monoatomaren Targets (d.h. PKA und Gitteratome haben dieselbe Massen- und Ladungszahl) mit $m_1 = m_2 = m$ bzw. $z_1 = z_2 = z$ gilt

$$k_d = 0.1334 z^{2/3} m^{-1/2} \quad (2-41)$$

Weiterhin ist $g(\epsilon)$

$$g(\epsilon) = \epsilon + 0.40244 \epsilon^{3/4} + 3.4008 \epsilon^{1/6} \quad (2-42)$$

mit ϵ

$$\epsilon = T \frac{a_L m_2}{z_1 z_2 e^2 (m_1 + m_2)} = 0.03253 \cdot m_2 T \left[z_1 z_2 (m_1 + m_2) (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{1/2} \right]^{-1}$$

ϵ reduzierte, dimensionslose Energie
 a_L Lindhard - Streulänge
 T PKA - Energie in eV

Für ϵ folgt in monoatomaren Targets

$$\epsilon = 0.01151 z^{-2/3} T, \quad T \text{ in eV} \quad (2-43)$$

Mit $E_d = 40$ eV und einer Verlagerungseffektivität $k = 0.8$ ergibt sich dann für monoatomare Targets der sekundäre Schädigungsfaktor zu

$$v(T) = \frac{k T_{\text{dam}}}{2 E_d} = 0.01 T_{\text{dam}} = 0.01 \frac{T}{1 + k_d g(\epsilon)} \quad (2-44)$$

Da der Nenner von $v(T)$ für kleine T stärker wächst als der Zähler, aber für große T wie der linear anwachsende Zähler wächst, wird die Schädigung mit zunehmender Projektilenergie ineffektiver und erfährt eine Sättigung. Dies wird deutlich durch Abb. 2-14 veranschaulicht. Diese Abbildung zeigt, wie sich die PKA-Energie T in einen reinen Schädigungsanteil T_{dam} und einen elektronischen Anteil T_{elektr} aufteilt. T_{dam} wird durch die analytische Näherung (2-39) bestimmt. Damit ergibt sich $T_{\text{elektr}} = T - T_{\text{dam}}$.

Die Verknüpfung von Gleichung (2-33) (Wahrscheinlichkeit der PKA-Erzeugung) und (2-38) (Anzahl der pro PKA erzeugten Verlagerungen) führt auf den elastischen Verlagerungsquerschnitt

$$\sigma_D(E^{\text{proj}}) = \int_{E_d}^{T_{\text{max}}} \frac{d\sigma(E^{\text{proj}}, T)}{dT} v(T) dT \quad (2-45)$$

Einsetzen der Gleichungen (2-39) bis (2-44) führt auf

$$\sigma_D(E^{\text{proj}}) = \frac{z_1^2 z_2^2 e^4}{16\pi\epsilon_0^2} \frac{1}{2E_d E^{\text{proj}}} \frac{m_1 \cdot m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left(1 + k \int_{2E_d}^{T_{\text{max}}} \frac{dT}{T(1+k_d g(\epsilon))} \right) \quad (2-46)$$

Das nichtanalytische Integral wird mittels eines numerischen Integrationsverfahrens durch das Programm DPAE [2-10] gelöst. Der somit berechnete elastische Schädigungsquerschnitt beschreibt die mittlere Anzahl von elastischen Verlagerungen, normiert auf die Gesamtanzahl der Gitteratome im Bestrahlungsvolumen und auf die Anzahl einlaufender Ionen pro cm^2 .

Es besteht jedoch eine Restriktion deren Beachtung eine große Bedeutung zukommt. Da bei Ausdruck (2-45) für die PKA-Produktionswahrscheinlichkeit der Ausdruck (2-33) eingesetzt wird, und dieser nur für reine Rutherfordstreuung abgeleitet wurde, gilt Gleichung (2-46) nicht für den gesamten Bereich der Projektilenergie. Die Einschränkung ist darin begründet, daß bei ZBL [5-4] für Rutherfordstreuung die in Ausdruck (2-42) definierte reduzierte Energie ϵ nur für Werte $\epsilon > 30$ gültig ist. Werden in Gleichung (2-42) die Massen m_1 (Proton) und m_2 (reines Eisen) bzw. m_1 (α -Teilchen) und m_2 (reines Eisen) eingesetzt, so folgen für Werte $\epsilon > 30$ die unteren Grenzenergien von $E_{\text{proj}} > 0,09$ MeV (Protonen) und $E_{\text{proj}} > 0,18$ MeV (α -Teilchen). Der signifikante Unterschied zwischen dem reinen Rutherford-Potential und dem Thomas-Fermi-Potential führt dazu, daß bei Energien kleiner als die angegebenen Grenzenergien durch den Ausdruck (2-46) unrealistisch hohe Verlagerungsquerschnitte berechnet werden.

Für die gesamte elastische Verlagerungsschädigung ($\text{DPA}_{\text{el}}(E^{\text{proj}})$) bei konstanter Projektilenergie E^{proj} ergibt sich

$$\text{DPA}_{\text{el}}(E^{\text{proj}}) = \sigma_D(E^{\text{proj}}) \cdot \phi(E^{\text{proj}}) \cdot t \quad (2-47)$$

unter Bestrahlung mit einer Ionendosis $\phi \cdot t$. Für gewöhnlich ist die Strahlstromstärke und damit der Teilchenfluß ϕ bei Langzeitbestrahlungen nicht konstant zu halten. Für DPA_{el} ergibt sich dann durch Integration über die Bestrahlungsdauer

$$\text{DPA}_{\text{el}} = \int_{\text{Bestrahlungsdauer}} \sigma_D(E^{\text{proj}}(t)) \cdot \phi(E^{\text{proj}}(t)) dt \quad (2-48)$$

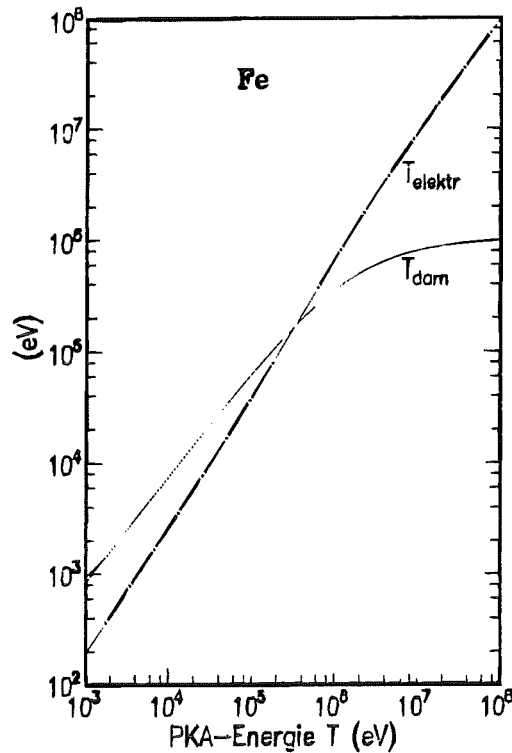


Abbildung 2-14: Abhängigkeit der Verlagerungsenergie T_{dam} und der elektronischen Anregungsenergie T_{elekt} von der PKA-Energie T [2-4]

2.3.2 Nichtelastische Schädigung

Wie bei der Berechnung der elastischen Schädigung werden bei der nichtelastischen Schädigung die primäre und sekundäre Schädigung unterschieden. Während die sekundäre Schädigung in beiden Fällen mathematisch gleich behandelt werden kann, zeigt die primäre Schädigung - Produktion der PKA's - ein deutlich anderes Verhalten. Dies kommt dadurch zustande, daß im nichtelastischen Fall die PKA's mittels Kernreaktionen erzeugt werden. Somit stellen die PKA's Restkerne dar, die teilweise mehrere MeV kinetische Energie besitzen können.

Werden die Wirkungsquerschnitte σ^{el} und σ^{nichtel} für die Produktion der PKAs verglichen, so zeigt sich, daß die nichtelastischen PKA's um ca. 4 Größenordnungen weniger wahrscheinlich produziert werden. Ausgehend von diesem Vergleich wurden in der Vergangenheit die Schädigungsrate nur aufgrund der Wirkungsquerschnitte beurteilt. Deshalb schienen in der Vergangenheit die nichtelastischen PKA's vernachlässigbar. Jedoch zeigt sich, wie nachfolgend begründet wird, daß die mittlere kinetische Energie, produziert durch 104 MeV α -Teilchen Bestrahlung, für elastische Prozesse bei $\bar{T} \approx 0.5$ keV (siehe Gleichung 2-49) und für nichtelastische Prozesse bei $\bar{E}^{\text{nichtel}} \approx 3$ MeV (Abb. 2-15) liegt, was dazu führt, daß die nichtelastischen PKA's im Mittel eine um ca. 3 Größenordnungen höhere Schädigung verursachen. Damit ist die nichtelastische Schädigung vergleichbar effizient wie die elastische Schädigung.

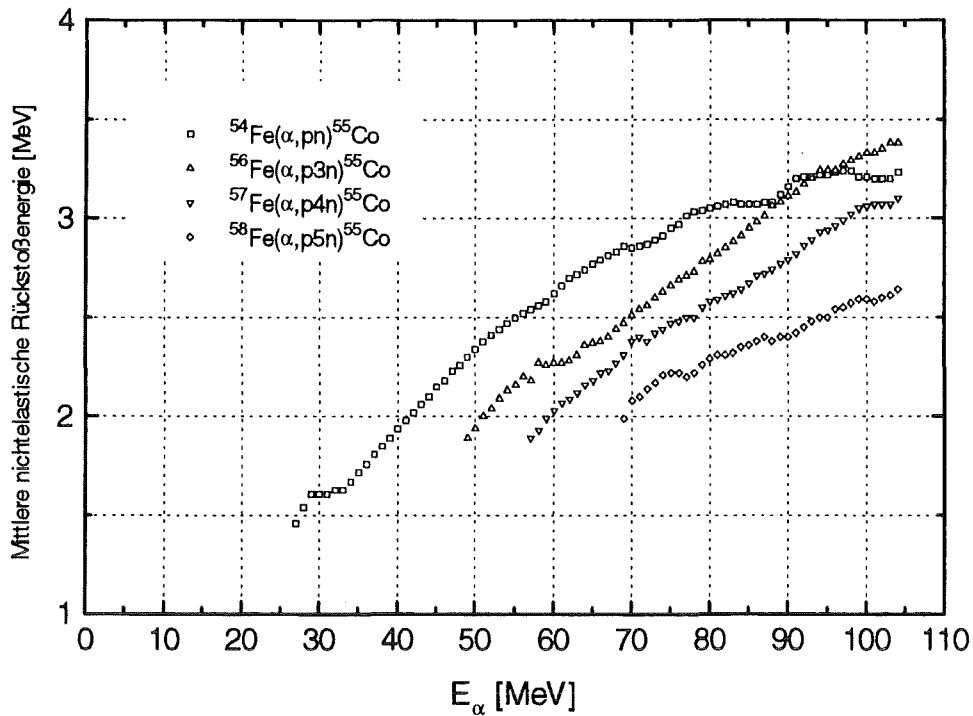


Abbildung 2-15: Durch Kernreaktionen erzeugte mittlere nichtelastische Rückstoßenergie des Restkerns ^{55}Co als Funktion der Projektilenergie für die stabilen Eisenisotope ^{54}Fe bis ^{58}Fe

Nach [2 - 4] ergibt sich für die mittlere PKA - Energie im elastischen Fall nach

$$\bar{T}(E^{\text{proj}}) = \frac{1}{\alpha(E^{\text{proj}})} \int_{E_d}^{T_{\text{max}}} T \frac{d\alpha(E^{\text{proj}}, T)}{dT} dT$$

zu

$$\bar{T}(E^{\text{proj}}) = \frac{E_d \ln(T_{\text{max}} / E_d)}{1 - (E_d / T_{\text{max}})} \quad (2-49)$$

wobei $d\alpha(E^{\text{proj}}, T)$ und T_{max} die Ausdrücke (2-33) und (2-34) verwendet wurden. Der Verlauf der Funktion (2-49) ist in Abb. 2-16 wiedergegeben.

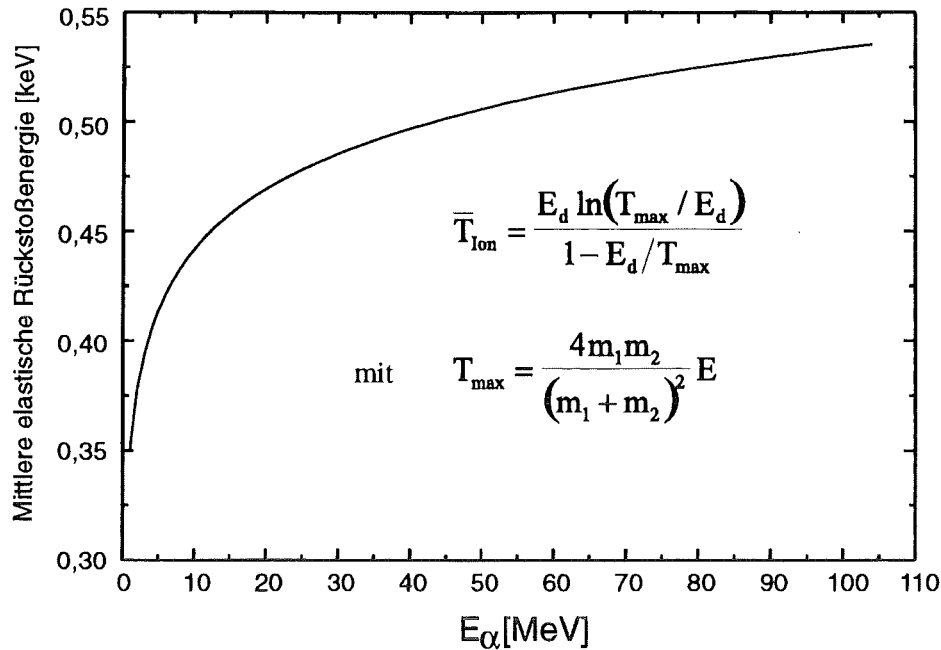


Abbildung 2-16: Durch Rutherfordstreuung erzeugte mittlere elastische Rückstoßenergie als Funktion der Projektilenergie

In Abb. 2-17 sind zum Vergleich die Punktdaten des elastischen Streuquerschnitts und für einen Fall (^{57}Co) der nichtelastische Anteil am PKA-Spektrum über der PKA-Energie aufgetragen. Der elastische Anteil erreicht bei kleinen Energien sehr hohe Werte (im gewählten Koordinatenbereich nicht sichtbar), während das Maximum des nichtelastischen PKA-Anteils (^{57}Co) anschaulich dargestellt werden kann. Durch die gewählte lineare Ordinatenkala wird sehr gut veranschaulicht, daß die mittlere elastische Verlagerungsenergie \bar{T}^{el} bei sehr kleinen Energien liegt, während \bar{T}^{nichtel} durch die etwas asymmetrische nichtelastische PKA-Verteilung bei ca. 3 MeV zu liegen kommt.

Für die Berechnung des nichtelastischen Verlagerungsquerschnitts nach Gleichung 2-26, ist die Kenntnis der PKA-Verteilungen der jeweiligen Reaktionskanäle notwendig. Wie oben schon ausgeführt, werden die PKA-Spektren für alle zu betrachtenden Reaktionskanäle als Punktdaten vom Computerprogramm ALICE berechnet. Um die nichtelastischen Verlagerungsquerschnitte numerisch berechnen zu können, müssen diese Punktdaten in Gruppendaten transformiert werden. Liegen die PKA-Daten als Gruppendaten vor, so hat dies den weiteren Vorteil, daß ein Vergleich sowohl mit den elastischen PKA-Daten als auch mit den durch Fusionsneutronen induzierten PKA-Daten möglich ist (siehe Diskussion Kap. 5). Liegen die PKA-Daten als Gruppendaten vor, kann das Integral bei der Berechnung der nichtelastischen Verlagerungsquerschnitte in Gleichung 2-26 in eine Summe umgewandelt werden, die über alle Energiegruppen des PKA-Spektrums läuft. Dies ergibt Ausdruck 2-50.

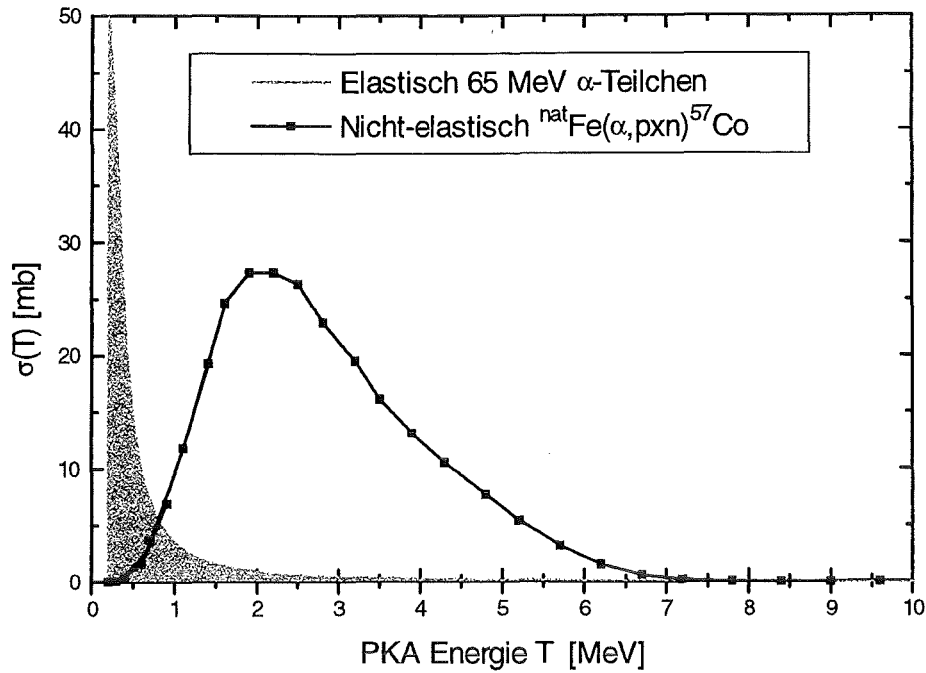


Abbildung 2-17: Auftragung des elastischen und nichtelastischen Anteils (^{57}Co) am PKA-Spektrum für 65 MeV α -induzierte Prozesse (Punktdaten).

$$\sigma_D^{\text{nonel}}(E) = \sum_{T_{\text{min}}}^{T_{\text{max}}} v(T) \cdot \frac{d\sigma(E, T)}{dT} \Delta T \quad (2-50)$$

Für die Umrechnung der PKA-Punktdaten in PKA-Gruppensdaten wurde das Fortran Programm PKA erstellt (siehe Abb 1-2). Mit diesem Programm werden alle von ALICE gelieferten PKA-Punktdatensätze in Gruppensätze konvertiert. Als Energiegruppenstruktur wurde die bisher von L. Greenwood für neutroneninduzierte PKA-Gruppenspektren vorgeschlagene und im SPECTER-Code angewendete 100er-Energiegruppenstruktur verwendet [6-5]. Die Umrechnung gestaltete sich etwas schwierig, da die ALICE-Punktdaten in nichtäquidistanten Abständen vorlagen und wiederum in nichtäquidistante Energiegruppen umgerechnet werden mußten. Bei der Konvertierung mußten daher Fallunterscheidungen berücksichtigt werden, wobei neben dem Idealfalles fällt genau ein Datenpunkt in die Energiegruppe), Mittelwertbildung (es fallen mehrere Datenpunkte in die Energiegruppe) und Interpolation (es fällt kein Datenpunkt in die Energiegruppe) durchgeführt werden mußten.

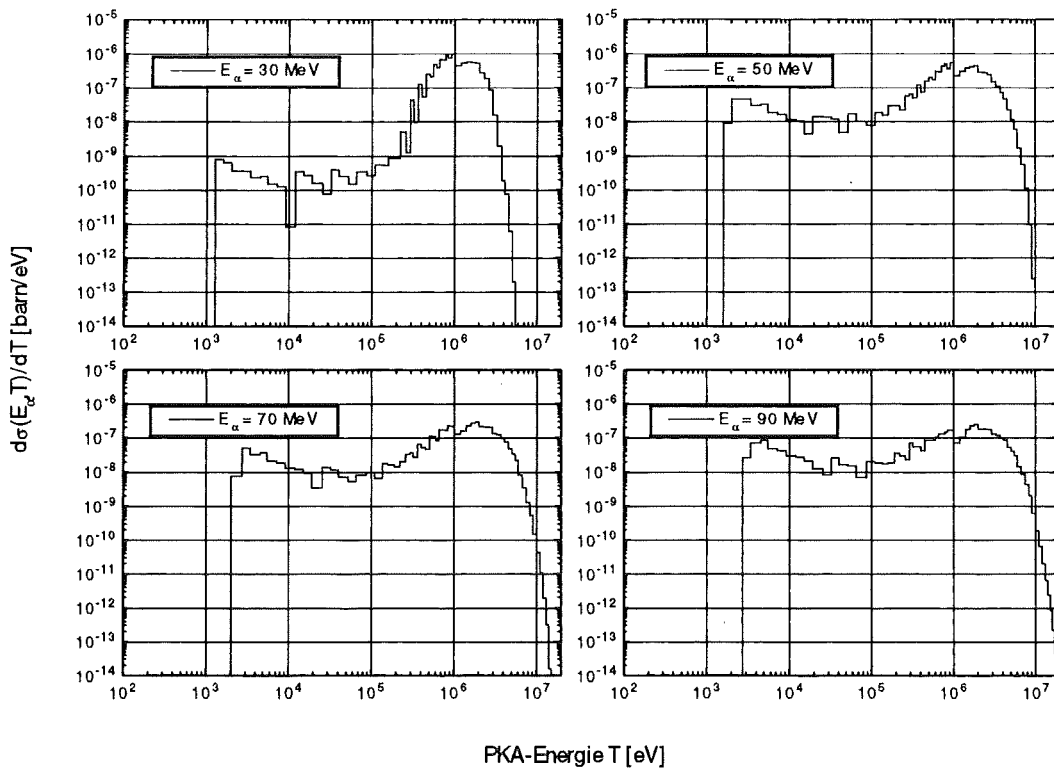


Abbildung 2-18: Typische Rückstoßenergiespektren bei $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)^{57}\text{Co}$ in Gruppendarstellung. Es ist deutlich zu erkennen, wie sich mit zunehmender Projektilenergie die maximale Rückstoßenergie erhöht.

In Abb. 2-18 sind für eine typische Reaktion die mit dem Programm PKA berechneten Rückstoßenergiespektren in Gruppendarstellung eingezeichnet. Bei den verschiedenen PKA-Spektren wurde die α -Teilchenenergie im Bereich von 30 MeV bis 90 MeV variiert. Es ist deutlich zu erkennen, wie sich mit zunehmender Projektilenergie die maximale Rückstoßenergie erhöht. Die im Bereich 1 KeV PKA-Energie auftretende Schwelle liegt im Berechnungsvorgang begründet. Die PKA's mit geringerer Energie können wie später noch deutlich ersichtlich wird vernachlässigt werden. Durch die doppeltlogarithmische Auftragung unterscheidet sich diese Darstellung deutlich von den Rückstoßenergiespektren in den Abbildungen 2-6 und 2-7.

Durch die Kenntnis der nichtelastischen PKA-Spektren und darausfolgender Berechnung der nichtelastischen Verlagerungsquerschnitte nach Ausdruck 2-50, folgt für die Berechnung der nichtelastischen DPA-Rate bzw. der nichtelastischen DPA-Werte ($\text{DPA}_{\text{nonel}}(E^{\text{proj}})$) analog zur elastischen Schädigung die Berechnung bei konstanter Projektilenergie E^{proj} nach

$$\text{DPA}_{\text{nonel}}(E^{\text{proj}}) = \sigma_{\text{D}}^{\text{nonel}}(E^{\text{proj}}) \cdot \phi(E^{\text{proj}}) \cdot t \quad (2-51)$$

unter Bestrahlung mit einer Ionendosis $\phi \cdot t$. Für gewöhnlich ist die Strahlstromstärke und damit der Teilchenfluß ϕ bei Langzeitbestrahlungen nicht konstant zu halten. Für DPA_{nonel} ergibt sich dann durch Integration über die Bestrahlungsdauer

$$DPA_{\text{nonel}} = \int_{\text{Bestrahlungsdauer}} \sigma_{\text{D}}^{\text{nonel}}(E^{\text{proj}}(t)) \cdot \phi(E^{\text{proj}}(t)) dt \quad (2-52)$$

Die so ermittelten Werte stellen die spezifischen Daten für jeweils einen Reaktionskanal dar. Um die gesamte nichtelastische Schädigung bzw. den gesamten nichtelastischen Verlagerungsquerschnitt zu erhalten, müssen alle offenen Reaktionskanäle aufsummiert werden. Dies wird bei der Berechnung und Auswertung der Schädigungsdaten in Kapitel 5 diskutiert.

3 Experimentelle Grundlagen

3.1 Bestrahlungseinrichtungen

Die zur Bestimmung der Protonen- bzw. alpha-induzierten Anregungsfunktionen in reinem Eisen (5,8 % ^{54}Fe , 91,8 % ^{56}Fe , 2,15 % ^{57}Fe , 0,25 % ^{58}Fe) notwendigen Bestrahlungen wurden an den relativistischen Karlsruher Zyklotrons KIZ (**K**arlsruher-**I**sochron-**Z**yklotron) und KAZ (**K**arlsruher-**K**ompakt-**Z**yklotron) durchgeführt.

Das KIZ, gebaut in den Jahren 1960 - 62, besteht aus 3 Sektoren (Dees) mit 60° Öffnungswinkel und erlaubt bei einem maximalen Bahnradius von 104,5 cm die Beschleunigung von Deuteronen (d) auf 52 MeV und α -Teilchen auf 104 MeV. Die Teilchenbahnen sind selbstoptimierend und räumlich separiert. Der Energiezuwachs pro Bahnumlauf bei α -Teilchen beträgt 0,24 MeV. Die Energieauflösung ist gleich $\Delta E/E = 0,3\%$ [3-1, 3-2]. Die separierten Teilchenbahnen erlauben interne Bestrahlungen, wobei die Teilchenenergie über den Bahnradius, siehe Abb. 3-1, ausgewählt wird. Die Teilchenextraktion erfolgt an der äußersten Bahn mittels eines Septums. Es stehen demzufolge extern α -Teilchen mit 104 MeV und intern α -Teilchen mit kontinuierlich einstellbarer Energie von $8 \text{ MeV} < E_\alpha < 104 \text{ MeV}$ zur Verfügung.

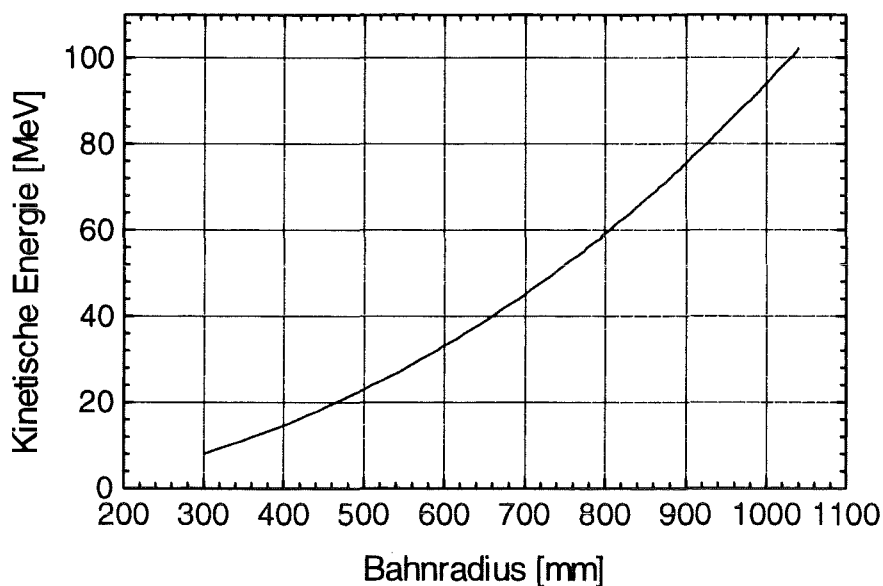


Abbildung 3-1: Teilchenenergie - Bahnradius - Relation des KIZ für α -Teilchen.

Das KAZ, gebaut 1982, ist ein Kompaktzyklotron vom Typ CP-42 (H^-) der Berkley Cyclotron Corporation [3-3]. Es ist eine 2-Dee (jeweils 90° Sektoren) Maschine, die H^- -Ionen zwischen 15 und 42 MeV zur Verfügung stellt. Die Protonen werden mit einer Stripperfolie (Ladungsaustausch) extrahiert. Die Energieauflösung ist gleich $\Delta E/E = 1,0\%$ [3-9]. Demzufolge stehen extern Protonen mit einer Energie von 15 - 42 MeV zur Verfügung.

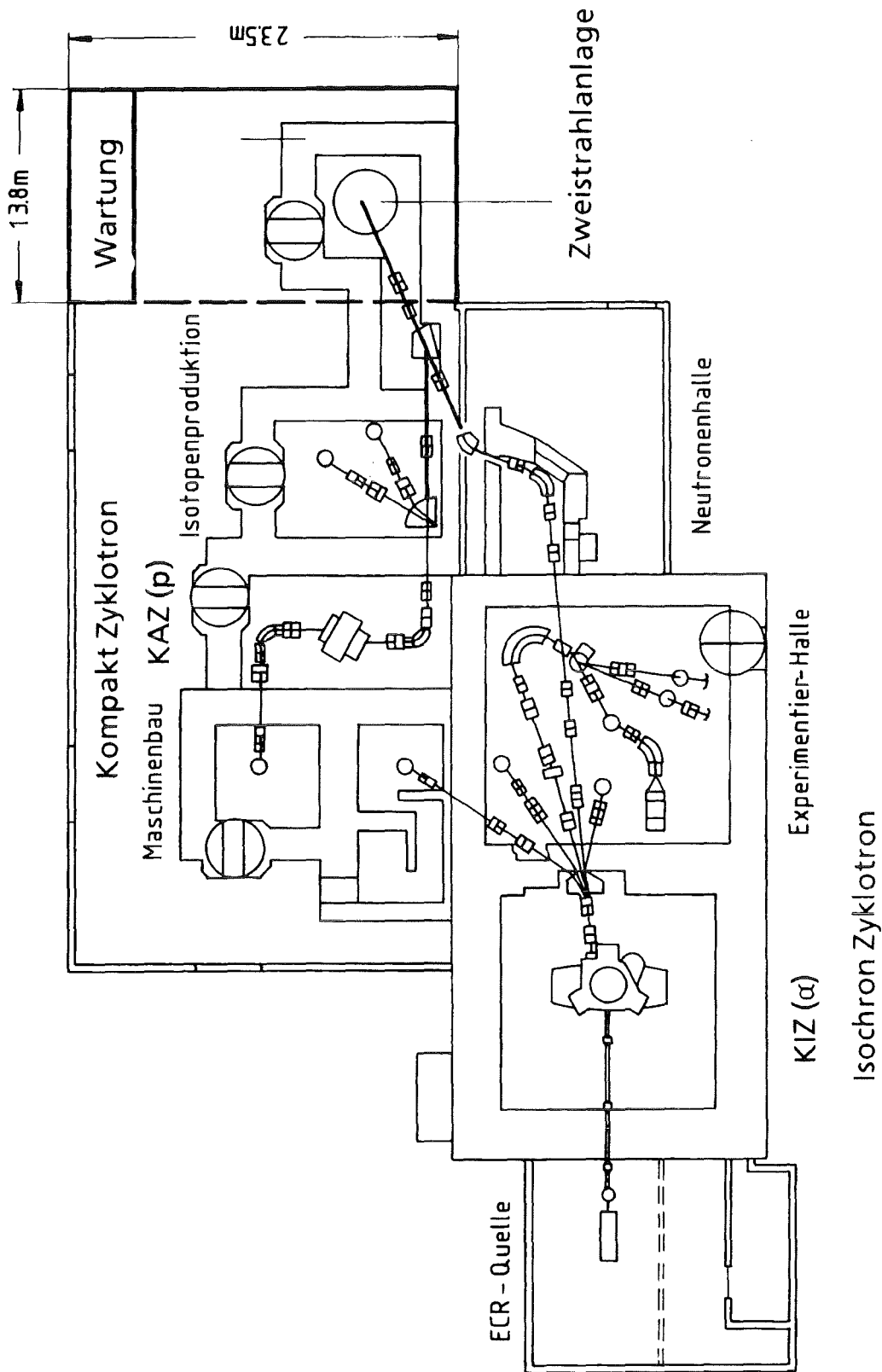


Abbildung 3-2: Räumliche Anordnung der Zyklotrons, Strahlführungen und Experimentierareale in der Hauptabteilung Zyklotron (HZY) des Forschungszentrums für Technik und Umwelt In Karlsruhe.

Jedoch läßt die Einstellung bzw. Abstimmung der Strahlführungsmagnete der Beamline vom KAZ zum Dual-Beam-Areal (DB-Areal) nur Protonen mit einer Energie von 30 MeV zu. Dies führt dazu, daß die Einstellung der Protonenergie extern mit einem zusätzlichen Energiemoderator vorgenommen werden muß, um Protonenergien kleiner 30 MeV zu erreichen.

Die beiden Zyklotrons sind räumlich getrennt aufgebaut, jedoch vereinigen sich die beiden Strahlführungen in der Vakuumkammer der Zweistrahlanlage (DUAL-BEAM-Anlage), in der simultan mit Protonen und Alphateilchen bestrahlt werden kann. Abb. 3-2 zeigt die räumliche Anordnung der Beschleuniger, den Verlauf der Strahlführung und die verschiedenen Experimentierareale. Die in dieser Arbeit beschriebenen Bestrahlungen wurden entweder intern im KIZ oder extern im Dual-Beam-Areal durchgeführt.

3.2 Probenpräparation und Durchführung der Bestrahlungen

Die Bestrahlungen wurden unter folgenden Gesichtspunkten geplant:

1. Erfassung von Nukliden mit Halbwertszeiten im Minutenbereich
2. Geringe Energieunschärfe der Meßpunkte
3. Erfassung des Energiebereichs von den Reaktionsschwellen bis zur Maximalenergie der Projektile
4. Messung der mittleren Rückstoß-Reichweiten der erzeugten Kerne

Um diese Voraussetzungen zu befriedigen, mußte gewährleistet sein,

- daß direkt nach Bestrahlungsende auf das Target zugegriffen werden konnte,
- daß der Transportweg vom Bestrahlungsareal bis zum Gammaspektroskopie-meßstand kurz ist,
- daß die Energie der Projektile genau bestimmbar ist und die Folien sehr dünn sind,
- daß die Projektilenergie in weitem Bereich variierbar ist,
- und daß die Erfassung sehr geringer Aktivitäten mit dem Gamma-Spektrometer möglich ist.

Am KAZ [3-4] und KIZ wurden zusammengenommen 16 Bestrahlungen durchgeführt. Bestrahlt wurden 18 µm dünne, hochreine Eisenfolien (Marz Grade Iron [3-5]). Die Verunreinigungsangaben des Herstellers sind in Tab. 3-1 aufgelistet. Da die Verunreinigungen maximal im ppm-Bereich liegen, ist ein Einfluß auf die Messung der Anregungsfunktionen in Fe auszuschließen. Die Dicke der Eisenfolie war vom Hersteller mit 18 µm angegeben. Um die Dicke der Folien genau zu bestimmen, wurde die Wägemethode angewendet. Die mittlere Dicke wurde zu $(16,41 \pm 0,18)$ µm bestimmt. Die Präparation der Targetfolien wird bei der Beschreibung der Bestrahlungen diskutiert.

Es wurden 4 verschiedene experimentelle Aufbauten verwendet, wobei von Anordnung zu Anordnung die experimentellen Möglichkeiten verbessert wurden. Generell wurde mit geringen, konstanten Strömen (0,3 bis 0,35 μA) derart bestrahlt, daß nach ca. 20 - 25 min. ein Integral von $Q = 0,5 \text{ mC}$ erreicht wurde. Diese Bestrahlungsdosis wurde gewählt, um keine zu hohe Kurzzeitaktivität zu erzeugen. Dadurch konnten bei der γ -Spektroskopie zu hohe Totzeiten ($> 15\%$) vermieden werden. Eine Ausnahme stellt die Bestrahlung des Folienstapels dar ($I = 0,5 \mu\text{A}$, $Q = 1 \text{ mC}$), bei dem es jedoch nur auf die Messung der Langzeitaktivität ankam.

Verunreinigung	Konzentration (wt.-ppm)	Verunreinigung	Konzentration (wt.-ppm)	Verunreinigung	Konzentration (wt.-ppm)
C	8	Cu	< 0.02	Pt	< 0.025
H	< 0.1	Hf	< 0.025	Rh	< 0.03
O	7.2	K	0.2	S	1.2
N	7.0	Mg	8	Si	0.5
Ag	< 0.04	Mn	0.1	Sn	< 0.02
Al	---	MO	0.2	Ta	< 1
Bi	< 0.008	Na	0.08	Ti	0.5
Ca	2	Nb	0.03	V	< 0.1
Cd	< 0.08	Ni	1.2	W	< 0.1
Co	0.3	Pb	< 0.015	Zn	< 0.8
Cr	0.6	Pd	< 0.08	Zr	< 0.06

Tabelle 3-1: Verunreinigungen der hochreinen Eisenfolien (Márz Grade Iron)

Art der Bestrahlung bei $E_{\text{primär}}$ [MeV]	ΔE [MeV] Zyklotron (1,0 % $E_{\text{primär}}$ KAZ) (0,3 % $E_{\text{primär}}$ KIZ)	ΔE [MeV] Moderator (Fe, C oder Al)	ΔE [MeV] Targetfolie	$E_{\text{Bestrahlung}} \pm \Delta E_{\text{Bestrahlung}}$ [MeV] Bestrahlung
Protonen 10,8 MeV	0,11	1,11 (Fe)	0,31	10,6 \pm 1,4
Protonen 15,6 MeV	0,16	0,71 (Fe)	0,27	15,4 \pm 1,0
Protonen 19,9 MeV	0,20	0,40 (C)	0,22	19,8 \pm 0,7
Protonen 25,1 MeV	0,25	0,20 (C)	0,20	25,0 \pm 0,6
Protonen 30,0 MeV	0,30		0,18	29,9 \pm 0,4
α - Teilchen 35 MeV	0,11		1,69	34,2 \pm 1,0
α - Teilchen 45 MeV	0,14		1,44	44,3 \pm 0,9
α - Teilchen 55 MeV	0,16		1,23	54,4 \pm 0,8
α - Teilchen 63,6 MeV	0,19	0,60 (Al)	1,11	63,1 \pm 1,3
α - Teilchen 65 MeV	0,20		1,08	64,5 \pm 0,7
α - Teilchen 75 MeV	0,23		0,99	74,5 \pm 0,7
α - Teilchen 79 MeV	0,24	1,60 (Fe)	0,96	78,5 \pm 2,3
α - Teilchen 85 MeV	0,25		0,89	84,5 \pm 0,7
α - Teilchen 91,4 MeV	0,27	1,00 (Stack)	0,87	91,0 \pm 1,7
α - Teilchen 95 MeV	0,29		0,85	94,6 \pm 0,7
α - Teilchen 95,8 MeV	0,29	0,60 (Stack)	0,83	95,4 \pm 1,3
α - Teilchen 100,1 MeV	0,30	0,30 (Stack)	0,80	99,7 \pm 1,0
α - Teilchen 104 MeV	0,31		0,75	103,6 \pm 0,9

Tabelle 3-2: Liste der durchgeführten Bestrahlungen

Eine Übersicht über die vier verschiedenen experimentellen Anordnungen zeigt folgende Liste:

1. Bestrahlung mit Protonen (KAZ) im DB-Areal. Die Auslegung der Ablenkmagnete der Strahlführung von KAZ zum DB-Areal erlaubt nur eine konstante Protonenenergie von 30 MeV. Die Moderation wurde durch zwei gegenüberliegende Graphitkeile (Reaktorgraphit, $\rho = 1,8 \text{ g/cm}^2$) erreicht.
2. Bestrahlungen mit 30 MeV Protonen (KAZ) und 104 MeV α -Teilchen (KIZ) im DB-Areal. Die Moderation der Teilchenenergie wurde im Gegensatz zu 1. mit unterschiedlich dicken Eisenblechen durchgeführt, um die zusätzliche Aktivierung der Bestrahlungskammer zu verringern.
3. Bestrahlungen mit α -Teilchen am internen Strahl des KIZ (35-95 MeV). Erste Messungen der Rückstoßreichweiten.
4. Bestrahlung mit α -Teilchen im DB-Areal unter Verwendung eines Folienstapels (Stacked-Foil-Technique). Verbesserte Messung der Anregungsfunktionen und der Rückstoßreichweiten im oberen α -Energiebereich.

Im folgenden werden die Bestrahlungen (Anordnung 1 bis Anordnung 4) detaillierter beschrieben. Eine vollständige Liste der durchgeführten Bestrahlungen zeigt Tab. 3-2. Bei der in Tabelle 3.2 aufgelisteten Werten $E_{\text{Bestrahlung}} \pm \Delta E_{\text{Bestrahlung}}$ wurde ΔE mit folgendem Ausdruck berechnet:

$$\Delta E_{\text{Bestrahlung}} = \Delta E_{\text{Zyklotron}} + \Delta E_{\text{Moderator}} + \frac{1}{2} \Delta E_{\text{Targetfolie}} \quad (3-1)$$

Damit wird die Bestrahlungsenergie gleich der Teilchenenergie in die Mitte der Schichtdicke der Targetfolie gesetzt. Dies führt dazu, daß die Bestrahlungsenergie $E_{\text{Bestrahlung}}$ leicht gegenüber der Primärenergie $E_{\text{Primär}}$ zu kleineren Werten hin verschoben ist.

ANORDNUNG 1

Diese Bestrahlungen dienten in erster Linie dazu, Erfahrungen mit der Bestrahlungseinrichtung, der Probenpräparation, den Bestrahlungsbedingungen und der γ -Spektroskopie zu gewinnen. Die Protonen wurden mit 30 MeV am KAZ extrahiert und in der DB-Vakuumkammer mit dem Kohlenstoffmoderator moderiert. Es wurden 3 Bestrahlungen bei $E_p = 30 \text{ MeV}$, $E_p = 25,1 \text{ MeV}$ und bei $E_p = 19,9 \text{ MeV}$ durchgeführt. Der schematische Aufbau ist in Abb. 3-3 dargestellt. Der Protonenstrahl wurde von den KAZ-Operateuren bis zum Beam-Stop vor den C-Moderator gefädelt. Bei ganz geöffnetem Moderator wurde ein Zink-Sulfid beschichteter Drehspiegel (ohne Abbildung) hydraulisch wenige mm vor (strahlaufwärts) dem Probenhalter positioniert, um die exakte Strahlage und Strahlform fein abzustimmen. Strahlaufwärts, vor dem Keilmoderator, befinden sich zwei Ablenkungsmagnete, die den Strahl über die Blendenöffnung derart wobbeln, daß eine

homogene Bestrahlung der Targetfolie gewährleistet ist. Die Blende besteht aus Reaktorgraphit und ist mit einer \varnothing 4,3 mm Bohrung versehen. Die Blende ist ausreichend dick, so daß die Protonen, die nicht in die Blendenöffnung treffen, mit Sicherheit abgestoppt werden.

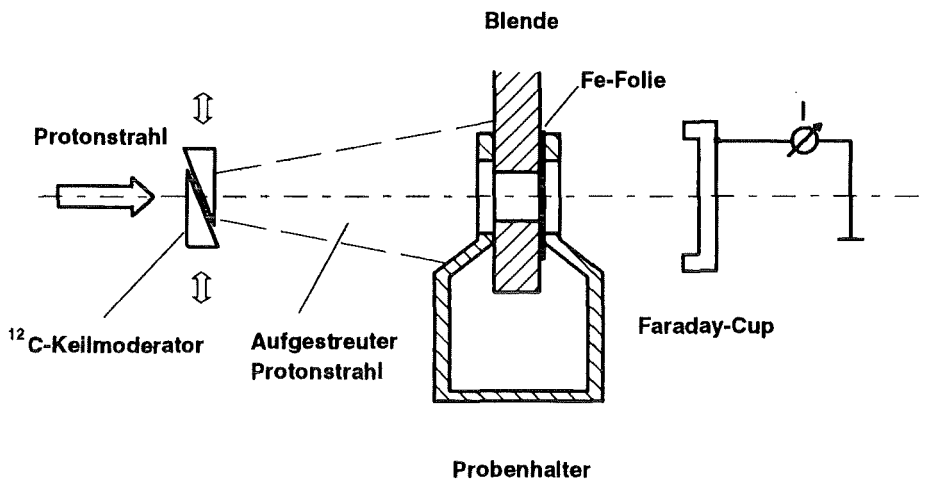


Abbildung 3-3: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus für Protonenbestrahlung mit dem Kohlenstoffmoderator

Der Probenhalter ist eine aus 1,5 mm dickem Stahlblech gefertigte Halteklammer, versehen mit zwei 10 mm großen Bohrungen. Er dient dazu, die Targetfolie direkt hinter der Blende festzuklemmen. Als Targetfolie wurde ein 12 mm breiter und 1 Zoll langer Streifen der oben genannten hochreinen Fe-Folie (Tab. 3-1) verwendet, der die Blendenöffnung ohne Feinjustierung mit Sicherheit komplett abdeckt. Als Strommesser diente ein Faraday-Cup, der die transmittierten Protonen sammelte.

Der Strom wurde von einem Knick-nA-Meter angezeigt und auf einem Signalprozessor integriert und mitgeschrieben. Eine typische Aufzeichnung zeigt Abb. 3-4. Die in dieser Abbildung sichtbaren Unterbrechungen des Strahlstroms wurden durch Ausfälle (von max. 0.5 sec Dauer) der Hochfrequenz des Beschleunigers verursacht. Strahlausfälle von solch kurzer Dauer haben keinen Einfluß auf das Meßergebnis.

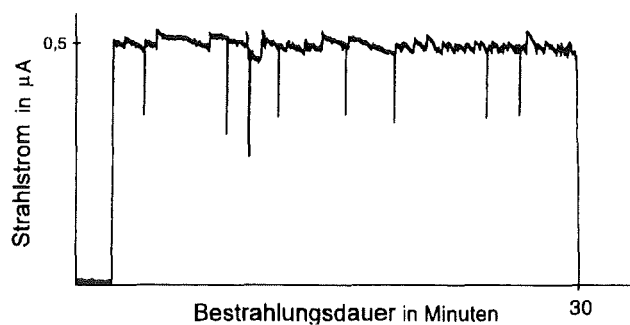


Abbildung 3-4: Typische Aufzeichnung des Strahlstromverlaufs während einer Bestrahlung am KIZ

Die Energiemoderation der Protonen wurde durch Zusammenfahren der aus rechtwinkligen Dreiecken geformten Moderatorkeile erreicht. Im Überlappungsbereich kommt dadurch eine Kohlenstoffschicht mit parallelen Begrenzungsflächen und variabler Dicke zustande. Die Protonenergie konnte somit sehr genau auf die gewünschten Werte justiert werden (1560 μm bei 25,1 MeV, 2940 μm bei 19,9 MeV). Als Nachteil hat sich jedoch der große Abstand (20 cm) vom C-Moderator bis zur Blende erwiesen. Wie Abb. 3-3 zeigt, wird der moderierte Protonenstrahl aufgestreut. Die Aufstreuung ist um so stärker, je mehr die Protonen moderiert werden. Somit wird außer der Targetfolie auch das Inventar der Experimentierkammer stark aktiviert. Da auch Nuklide mit kurzer Halbwertszeit spektroskopisch erfaßt werden sollten, mußte ein Zugriff auf die Targetfolie unmittelbar nach Bestrahlungsende gewährleistet sein. Deshalb mußte bei Protonenergien unter 20 MeV ein anderer Moderatortyp verwendet werden, um die Umgebungsaktivierung in Grenzen zu halten.

ANORDNUNG 2

Bei dieser Anordnung wurden Bestrahlungen mit Protonen bei 15,6 MeV bzw. 10,8 MeV und α -Teilchen bei 104 MeV bzw. 79 MeV durchgeführt. Als Moderator material dienten 1cm^2 große Eisenbleche bzw. Eisenfolien in Dicken von 0,5 mm, 0,25 mm und 0,1 mm, die je nach gewünschter Energie zusammengestellt und an den Rändern punktverschweißt wurden. Gegenüber dem C-Moderator (Anordnung 1) konnte die zusätzliche Umgebungsaktivierung deutlich verringert werden. Die störende Aktivität war maßgeblich im Fe-Moderator konzentriert, der jedoch leicht auswechselbar war. Gegenüber Anordnung 1 konnte jedoch die Energie der Projektile nicht mehr so fein justiert werden. In Abb. 3-5 ist der experimentelle Aufbau für die α -Teilchen dargestellt. Die α -Teilchen laufen unter einem Winkel von 10° schräg von oben ein. Dies erfordert eine angepaßte Blende. Die α -Teilchen Blende ist aus Aluminium gefertigt und mit einer 10° Bohrung \varnothing 4,3 mm versehen. Der α -Teilchenstrahl wurde analog zum Protonenstrahl über die Blendenöffnung gewobbelt, um ein homogenes Strahlprofil zu simulieren.

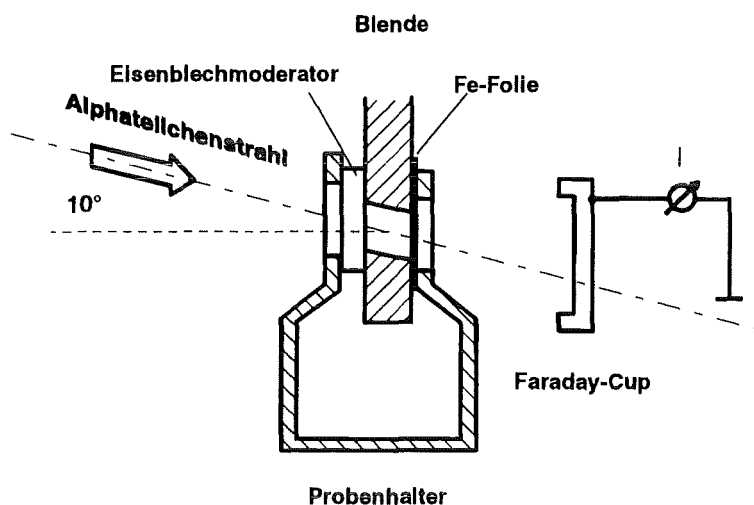


Abbildung 3-5: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus für Alpha-Teilchen mit dem Fe-Moderator

ANORDNUNG 3

Bei den α -Teilchen Bestrahlungen sollte energetisch der Bereich von den Schwellenenergien bis zur Maximalenergie abgedeckt werden. Wird für z.B. $E_{\alpha} = 35$ MeV die Methode nach Anordnung 2 angewandt, so wird durch den relativ dicken Fe-Moderator eine große Unschärfe der α -Energie, verursacht durch die Energieaufstreuung während des Moderierens, erzeugt, die bis zu mehrere MeV betragen kann. Wird jedoch zyklotronintern bestrahlt, so ist die Energieunschärfe durch die energetische Auflösung des Isochron-Zyklotrons ($\Delta E/E = 0,3\%$) gegeben. Der Vorteil der internen Bestrahlungen in Bezug auf die Energieunsicherheit kann in Tab. 3-2 deutlich abgelesen werden. Bei einer externen Bestrahlung mit $E_{\alpha} = 79$ MeV erzeugt der Moderator eine Energieunsicherheit von $\Delta E_{\text{Moderator}} = 1,6$ MeV. Vergleichend dazu tritt bei $E_{\alpha} = 35$ MeV, einer Energie, bei der die Energieunsicherheit des externen Moderators mehrere MeV betragen würde, eine zyklotroninterne Unsicherheit von nur $\Delta E_{\text{Zyklotron}} = 0,11$ MeV auf.

Dem Vorteil der genaueren Energie steht jedoch ein höherer Aufwand bei der Probenpräparation und bei der Durchführung der internen Bestrahlungen gegenüber. Abb. 3-6 zeigt den Probenhalter, der bei den internen KIZ-Bestrahlungen verwendet wurde. Dieser Halter wird in liegender Stellung radial in das KIZ eingefahren. Der Bestrahlungskopf besteht aus einem Aluminiumfuß, auf den ein Kupferblock aufgesetzt ist. Am oberen Ende des Kupferblocks befindet sich ein beweglicher Schlitten, der einen Spalt zur Aufnahme der Targetfolie freigibt.

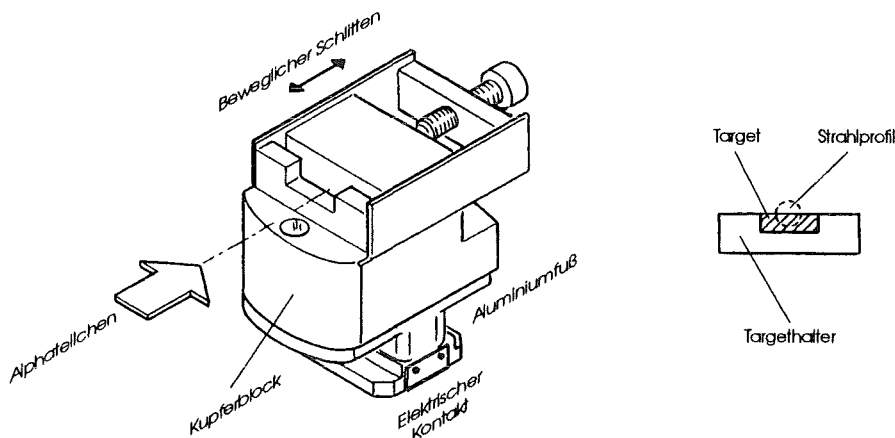


Abbildung 3-6: Maßstäbliche Zeichnung des Probenhalters, der bei internen KIZ-Bestrahlungen verwendet wurde. Die rechte Ansicht zeigt die Stirnseite des Schlittens in Strahlrichtung gesehen. In die Öffnung, die durch den beweglichen Schlitten freigegeben wird, können die zu bestrahlenden Folien eingesetzt werden.

Ist die Targetfolie arretiert, so können die α -Teilchen durch die Aussparung (Bestrahlungsfenster) an der Stirnseite des Kupferblocks auf das Target treffen. Die rechte Abbildung zeigt schematisch die Lage des Strahlflecks im Bestrahlungsfenster. Der

Teilchenstrahl wird nur partiell ausgenutzt. Die Strommessung erfolgt über den elektrischen Kontakt am Alu-Fuß.

Es werden alle α -Teilchen gemessen, die im Cu-Block abgestoppt werden. Um eine gute Strommessung zu gewährleisten, muß vor jeder Bestrahlung eine Strahlagenmessung durchgeführt werden. Dazu wird in den Targethalter eine Kunststoffolie eingebracht, die sich unter Bestrahlung gelblich verfärbt bzw. anschmilzt. Es muß gewährleistet sein, daß bei der ausgewählten, radialen Bestrahlungsposition der Strahlfleck exakt in den Fensterbereich trifft und nicht durch Auftreffen am Rand die Strommessung verfälscht. Desweiteren muß die zu bestrahlende Eisenfolie sehr exakt geschnitten werden, um nicht über den Kupferblock hinauszuragen bzw. unterhalb der Kupferbegrenzung zu enden. Dies würde eine zu kleine bzw. zu große Strommessung zur Folge haben.

Intern wurden Bestrahlungen von 35-95 MeV in 10 MeV-Schritten durchgeführt. Bei Energien unterhalb 35 MeV konnte keine exakte Strahlpositionierung bzw. Strahlfokussierung mehr erreicht werden, so daß wegen zu großer Unsicherheiten in der Strommessung von den Bestrahlungen mit $E_\alpha < 35$ MeV abgesehen wurde. Gleichzeitig zur Aktivierungsbestrahlung wurde hinter der Eisenfolie eine hochreine Aluminiumfolie (35 μ m, [3-6]) angebracht, um die aus der Fe-Folie strahlabwärts austretenden Rückstoßkerne abzustoppen. D.h. es mußte zusätzlich eine sehr genau geschnittene Al-Folie präzise hinter der Fe-Folie positioniert werden. Um keine zu großen Fehler in der Strommessung zuzulassen, wurde davon abgesehen, intern Folienstapel zu bestrahlen.

ANORDNUNG 4

Um die Meßreihen im oberen α -Energiebereich zu verbessern, wurde ein Folienstapel, bestehend aus 17 Folien, in der DB-Vakuumkammer analog zu Anordnung 2 ohne Moderator bestrahlt. Die Bestrahlungsenergien und die Energiestreuungen der Fe-Folien lagen bei 104 MeV, 100,1 MeV, 95,8 MeV und 91,4 MeV (siehe Tab. 3-2). Die Energien 100,1 MeV, 95,8 MeV und 91,4 MeV wurden anhand des Folienstapelaufbaus mit dem Programm PRAL (siehe Abschnitt 2.2.2.) berechnet. Bei der Bestrahlung von Folienstapeln übernehmen in den Stapel eingebrachte Moderatorfolien die Energiedegradation. Je dicker ein Stapel ist, d.h. je mehr Folien ein Stapel enthält, desto unschärfer ist die Energie definiert. Es wurde daher der Stapel auf 4 Fe-Folien beschränkt. Die α -Teilchen treffen von links auf den Folienstapel auf. Der Aufbau des Folienstapels war wie folgt:

$A_1 C_1 M_1 M_2 M_3 A_2 C_2 M_4 M_5 M_6 A_3 C_3 M_7 M_8 M_9 A_4 C_4$

A_1 bis A_4 : Fe-Folien zur Aktivierungsmessung (17,25 μ m Dicke)

C_1 bis C_4 : Al-Catcher-Folien zur Messung der mittleren Rückstoßreichweiten (36,19 μ m Dicke)

M_1 bis M_9 : Al-Moderatorfolien (52,99 μ m Dicke)

Da nur ein γ -Spektrometer zur Verfügung stand, konnten nur Aktivitäten von Nukliden mit langer Halbwertszeit (> 1 Tag) untersucht werden. Um bei den Catcher-Folien eine Verbesserung der Statistik bei der γ -Spektroskopie zu erzielen, und da gleichzeitig die

hohen Aktivitäten der Nuklide mit kurzen Halbwertszeiten bei der Messung wegfallen, wurde der Folienstapel mit höherer Dosis bestrahlt als die bisherigen Einzelfolien.

3.3 γ -Spektroskopie

Der zur Messung der γ -Spektren benutzte Detektor erfaßt den Energiebereich von ca. 50 keV bis zu 4000 keV. Der Detektor besteht aus einem hochreinen Germaniumkristall vom Typ *HPGe, GEM-2185-P, EG&G ORTEC* [3-7], der auf LN_2 Temperatur gehalten wird. Der zylindrische Kristall hat einen Durchmesser von 5,45 cm und eine Länge von 6,44 cm woraus sich ein Volumen von $150,25 \text{ cm}^3$ ergibt. Die angelegte Hochspannung beträgt +2000 V. Die spezifizierten Daten, gemessen bei einer nominalen Zählrate von 1000 Ereignissen pro Sekunde, sind:

- | | |
|---|----------|
| - Auflösung (FWHM) bei 1,33 MeV, ^{60}Co | 1,65 keV |
| - Peak / Compton Verhältnis, ^{60}Co : | 66,9 |
| - Relative Nachweiswahrscheinlichkeit bei 1,33 MeV, ^{60}Co , bezogen auf einen 3 Zoll x 3 Zoll NaJ-Detektor | 30,3 % |
| - Peak-Form (FWTM/FWHM), ^{60}Co | 1.84 |
| - Auflösung (FWHM) bei 122 keV, ^{57}Co | 728 eV |

Die Detektoreichung, Datenaufnahme und Datenanalyse erfolgte mit der Software *Gamma Vision, EG&G, ORTEC* [3-8], die auf einem handelsüblichen PC installiert ist. Die Meßapparatur wurde so programmiert, daß nach dem Start einer Messung alle 200 sec. ein Spektrum abgespeichert wurde. Dadurch wurde ein kontinuierlicher Meßvorgang erreicht und gleichzeitig konnte aus der Abnahme der Aktivitäten der γ -Linien bei Mehrdeutigkeiten die Halbwertszeiten der Nuklide ermittelt werden.

Um gleichzeitig während des Meßvorgangs die Messung zu kontrollieren und Daten auswerten zu können, wurde über LAN eine Netzwerkverbindung zwischen dem Meßrechner und einem Auswerterechner hergestellt. Diese LAN-Verbindung erwies sich als sehr vorteilhaft, da schon während der Messung der langhalbwertszeitigen Nuklide, die Nuklide mit kurzen und mittleren Halbwertszeiten bereits ausgewertet werden konnten, wodurch schnell ein Überblick über die Qualität der Bestrahlung gewonnen werden konnte. Bei Bestrahlungen von Folienpaaren (Fe-Aktivierung und Al-Catcher) wurde immer zuerst die Fe-Folie ausgemessen und anschließend die Al-Catcher-Folie. Dadurch war gewährleistet, daß die Anregungsfunktionen von Nukliden kurzer Halbwertszeit genau bestimmt werden konnten.

Da die Aktivitäten in den Al-Catcher-Folien nur einen Bruchteil der Aktivität der Fe-Folien ausmachten, mußten die verschiedenen Folien in unterschiedlichem Abstand zum Spektrometer gemessen werden. Gleichzeitig mußte dafür gesorgt werden, daß Aktivitäten im Bereich einiger Bq sauber erfaßt werden konnten. Dies setzte voraus, daß der Detektor

besonders gut gegen Untergrundstrahlung, wie z.B. ^{40}K aus den umgebenden Betonwänden, abgeschirmt sein mußte.

Die Energie-Eichung

Zur Eichung der Energie standen 6 Referenzpräparate (^{241}Am , ^{133}Ba , ^{60}Co , ^{137}Cs , ^{152}Eu und ^{22}Na) [3-10] zur Verfügung.

Nuklid	Eichzeitpunkt	Aktivität [μCi]	Unsicherheit [μCi]
^{241}Am	1.6.1979, 12:00 Uhr	11.31	± 0.56
^{133}Ba	1.6.1979, 12:00 Uhr	10.63	± 0.51
^{60}Co	1.6.1979, 12:00 Uhr	10.33	± 0.20
^{137}Cs	1.6.1979, 12:00 Uhr	10.83	± 0.38
^{152}Eu	1.6.1979, 12:00 Uhr	11.40	± 0.99
^{22}Na	1.6.1979, 12:00 Uhr	10.15	± 0.37

Tabelle 3-3: Übersicht über die zur Eichung verwendeten Referenznuklide

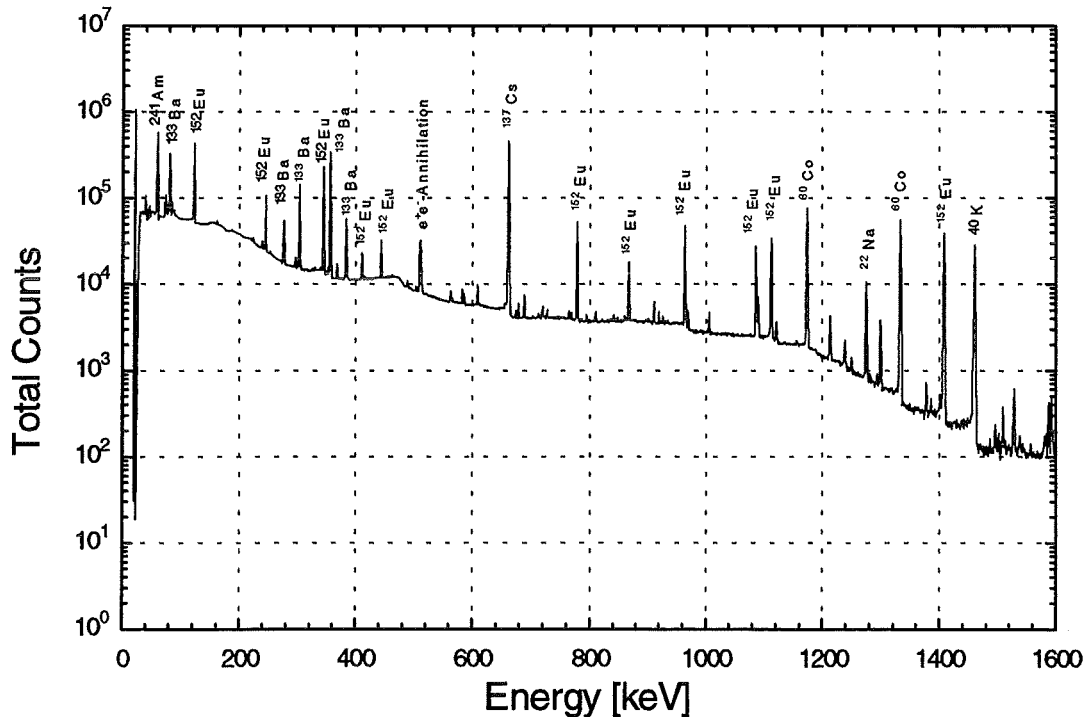


Abbildung 3-7: Eichspektrum der Referenznuklide

Die Daten der Referenznuklide sind in Tab. 3-3 aufgelistet. Die Umrechnung von μCi nach Bq erfolgt mit $1 \mu\text{Ci} = 37000 \text{ Bq}$. Da die Energie-Eichung unabhängig vom Abstand Target - Detektor ist, wurde die Eichung bei maximalem Abstand durchgeführt. Das

aufgenommene Eichspektrum zeigt Abb. 3-6. Die Zuordnung der Kanalnummern zur γ -Energie zeigt nur eine sehr schwache Nichtlinearität. Durch die Meßwerte wurde eine Polygon 2. Ordnung gefittet:

$$E(C) = a_1 + a_2C + a_3C^2$$

E = Energie (3-2)

a_i = Koeffizienten

C = Kanalnummern

Die Fit-Koeffizienten für eine typische Energieeichung sind in Anhang A aufgelistet. Die sehr geringe quadratische Abhängigkeit kommt erst bei sehr hohen Kanalnummern zum Tragen. Die typisch erwarteten γ -Energien liegen jedoch unterhalb 2500 keV. Somit stellt die quadratische Abhängigkeit eine 10^{-2} Korrektur dar.

Eichung der Nachweiswahrscheinlichkeit

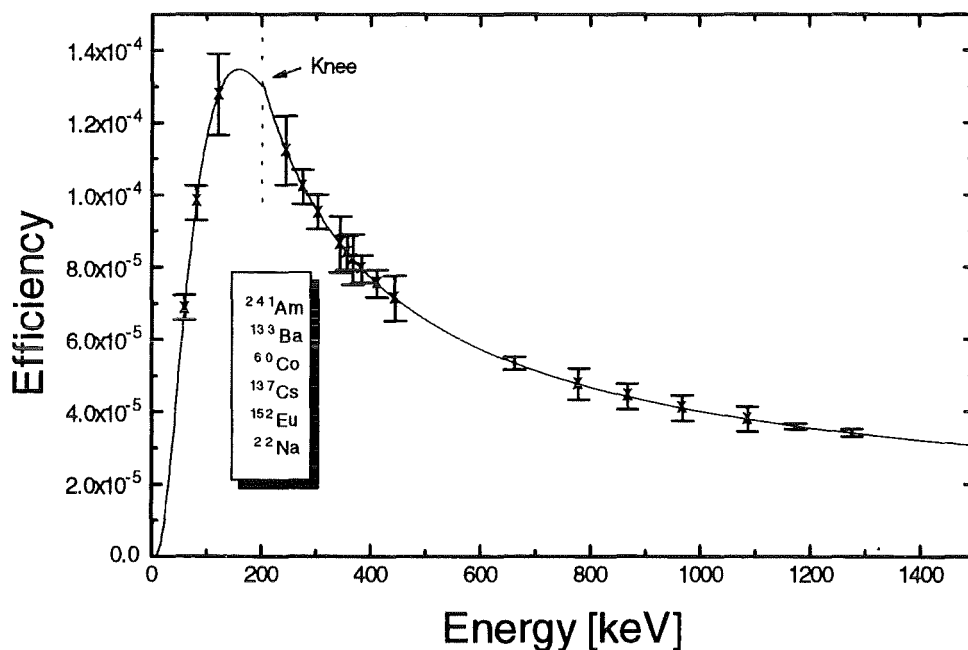


Abbildung 3-8: Eichkurve der Nachweiswahrscheinlichkeit bei Position 11. Die bei den Meßpunkten eingezeichneten Fehlerbalken entsprechen den Unsicherheiten der verwendeten Eichpräparate.

Die Eichung der Nachweiswahrscheinlichkeit (Efficiency) wurde an den verschiedenen Meßpositionen vorgenommen. Über die Zuordnung der 9 Positionen P_3 bis P_{11} , siehe Unterkapitel „Reduzierung des Untergrunds“. Es sollte gewährleistet sein, daß alle Messungen in Punktgeometrie vorgenommen werden konnten. Da die Referenznuklide ≈ 2 mm Durchmesser und der Strahlfleck der bestrahlten Folien ≈ 4 mm Durchmesser hatte, durfte ein gewisser Mindestabstand (≈ 13 cm) von Detektoroberfläche zur Targetoberfläche

nicht unterschritten werden. Dieser Minimalabstand wurde durch Position P_3 gegeben. Es zeigte sich, daß es ausreichend war, die Fe-Folien auf Position P_{11} (≈ 53 cm) und die Al-Catcher-Folien auf Position P_3 zu messen. Beide Positionen stehen in einem Abstandsverhältnis $P_{11}/P_3 = 4:1$. Der Raumwinkel Ω geht reziprok quadratisch mit dem Abstand: D.h. $\Omega_{P_{11}}/\Omega_{P_3} = 1:16$. Da die Reichweiten der Rückstoßkerne bei $R_r \leq 1 \mu\text{m}$ liegen (theoretische Voraussage von PRAL), ergibt sich für das Verhältnis der Aktivitäten $A_{Fe}/A_{Al} = d_{Fe}/R_r = 18:1$. Demzufolge werden die geringen Aktivitäten der Catcher-Folie durch die Verringerung des Abstandes Target - Detektor kompensiert und es können beide Folien bei annähernd gleicher Zählrate (betrifft nur die Langzeitaktivitäten) und darausfolgend gleicher Totzeit (\approx einige %) des γ -Spektrometers gemessen werden. Durch den großen Abstand P_{11} war es auch gewährleistet, daß die anfängliche Totzeit, verursacht durch die hohen Aktivitäten der kurzzeitigen Nuklide, immer < 15 % lag. D.h. es war nur die Eichung der Efficiency der Positionen P_3 und P_{11} notwendig.

Die typische Durchführung einer Efficiency-Eichung ist im folgenden beschrieben. Jede Eichkurve eines Halbleiterkristalls zeigt bei kleinen γ -Energien einen starken Anstieg von 0 an und durchläuft im Bereich 100 - 200 keV ein Maximum, um danach zu höheren Energien hin kontinuierlich abzufallen. Ein typischer Verlauf zeigt Abb. 3-8. Die Meßdaten werden knapp oberhalb des Maximums in zwei Bereiche eingeteilt (Knie). Beide Bereiche werden durch quadratische logarithmische Ausgleichsfunktionen gefittet, die am Knie möglichst glatt ineinander übergehen sollen. Generell gilt folgender Zusammenhang:

$$\ln(\varepsilon(E)) = a_1 + a_2 \ln(E) + a_3 (\ln(E))^2$$

$$\begin{array}{ll} \varepsilon & = \text{Efficiency} \\ a_i & = \text{Koeffizienten} \\ E & = \text{Energie} \end{array} \quad (3-3)$$

In Anhang A sind die Fitparameter für eine Efficiency-Eichung angegeben. Die in Abb. 3-8 eingezeichneten Fehlerbalken sind die Unsicherheiten der Efficiency-Werte, die aus den Unsicherheiten der Aktivitäten der Referenznuklide herrühren. Die Efficiency berechnet sich wie folgt:

$$N = \varepsilon \cdot A \cdot t \cdot Y_\gamma \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = \frac{N}{A \cdot t \cdot Y_\gamma}$$

$$\Delta\varepsilon = \frac{N}{t \cdot Y_\gamma} \cdot \frac{\Delta A}{A^2} = \varepsilon \cdot \frac{\Delta A}{A}$$

$$\begin{array}{ll} N & = \text{Anzahl der Ereignisse} \\ \varepsilon & = \text{Efficiency} \\ A & = \text{Aktivität des Referenznuklides} \\ t & = \text{Messzeit} \\ Y_\gamma & = \text{Ausbeute der Gammaquanten pro Zerfall} \\ \Delta\varepsilon & = \text{Unsicherheit der Efficiency} \\ \Delta A & = \text{Unsicherheit der Referenzaktivität} \end{array} \quad (3-4)$$

Der relative Fehler der Efficiency entspricht somit dem relativen Fehler der Referenzpräparate, wobei die Unsicherheiten der Größen N , t , Y_γ gegenüber ΔA vernachlässigbar sind. Daß der Fehler von Y_γ , der typischerweise bei 10 - 20 % liegt, an dieser Stelle vernachlässigt werden kann, liegt daran, daß der Hersteller der Referenznuklide diese Unsicherheit von Y_γ bereits in die Unsicherheitsangabe der Referenzaktivitäten eingerechnet hat. Bei einer Messung der Nuklidaktivität, wie sie später beschrieben wird, muß die Unsicherheit von Y_γ in jedem Fall berücksichtigt werden. In Abb. 3-8 ist deutlich zu erkennen, wie der Fehler $\Delta \epsilon$ in Funktion der Energie variiert. Es muß daher bei der γ -spektroskopischen Datenauswertung darauf geachtet werden, bei welcher γ -Energie die Linie des zu identifizierenden Nuklids liegt, um den Fehler aus der Eichung der Nachweiswahrscheinlichkeit korrekt zu berücksichtigen.

Reduzierung des Untergrunds

Das γ -Spektrum der Referenznuklide Abb. 3-7 zeigt bei ^{40}K (1460,6 keV) einen deutlichen Untergrundpeak. Dies kommt daher, daß bei der Aufnahme dieses Spektrums noch die alte Bleiabschirmung, bestehend aus einem zylindrischen Bleirohr von 1 cm Wandstärke, 10 cm Länge und 10 cm Außendurchmesser, die einfach über den Detektorkopf geschoben war, verwendet wurde. Um den Untergrund bestmöglichst zu unterdrücken wurde eine neue Bleiabschirmung konzipiert, die aus 25 x 20 x 10 cm Bleiquadern gefertigt wurde.

In den ersten Bleiquader (P_1) wurde das Detektorgehäuse eingepaßt. Die Abschirmung erreicht dadurch an ihrer dünnsten Stelle noch 4 cm Wandstärke. Aus 2 Bleiquadern wurden 10 Bleiplatten (je 5 cm dick) geschnitten, mit denen ein Kollimatorkanal mit 60 mm Innendurchmesser aufgebaut wurde. In Abb. 3-9 ist die neu konstruierte Bleiabschirmung maßstäblich eingezeichnet. Die Nummern 1 bis 11 geben die Targetpositionen direkt hinter den jeweiligen Bausteinen an. In den hier beschriebenen Experimenten wurden die Positionen 3 und 11 verwendet. Durch die handliche Größe der Bleiplatten ist die Bleiabschirmung leicht den Erfordernissen anpaßbar. Die Verwendung eines Pb-Kollimators verändert leicht die Form der γ -Spektren. Es treten dabei folgende Effekte auf.

- Compton-Vorwärtsstreuung
- Anregung von Bleiatomen \Rightarrow Zusätzliche Röntgenlinien bei $E(K_{\alpha 1}) = 74,97$ keV, $E(K_{\alpha 2}) = 72,8$ keV, $E(K_{\beta 1}) = 84,94$ keV und $E(K_{\beta 2}) = 87,36$ keV

Die dadurch verursachten Unsicherheiten sind jedoch nur von untergeordneter Bedeutung. Da keine schwachen niederenergetischen Linien bei gleichzeitigen starken hochenergetischen Linien gemessen werden sollen, ist dieser Einfluß zu vernachlässigen. Ebenso liegen die K_α und K_β Röntgenlinien in einem Energiebereich, der nur bei der Eichung durch die 81 keV Linie des ^{133}Ba benutzt wird. Alle gemessenen Linien der in Fe induzierten Nuklide liegen bei Energien oberhalb 100 keV (siehe Anhang B).

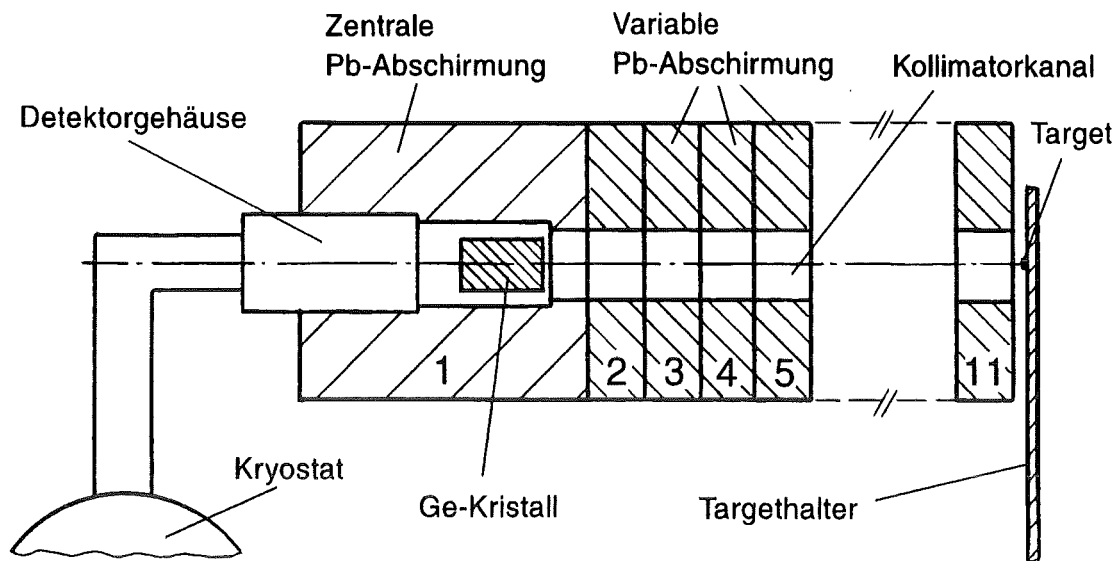


Abbildung 3-9: Querschnittszeichnung des Aufbaus der neuen Bleiabschirmung des γ -Spektrometers. Das Target ist bei Position 11 angebracht.

3.4 Berechnung der Anregungsfunktionen

In die Bestimmung der Anregungsfunktion gehen neben den experimentellen Parametern (Projektilstrom, Bestrahlungsdauer und Nuklidaktivität) auch die Target- und Nuklid-Parameter (M_{Mol} , $T_{1/2}$, ρ_{Fe} , d_{Fe}) ein, woraus sich Term (3-5) ergibt. Die Aktivität des Nuklids nach Bestrahlungsende A_0^{Nuc} setzt sich aus der Aktivität der Targetfolie und der Aktivität der Catcherfolie zusammen. Wie die Aktivität eines Nuklids mittels der Software GammaVision aus der Peak-Nettofläche ermittelt wurde kann Anhang D entnommen werden.

Mit den Korrekturen für den Zerfall kurzlebiger Nuklide während der Bestrahlung (Decay During Irradiation, DDI, (3-6)) und während der Messung (Decay During Acquisition, DDA, (3-7)) ergibt sich die korrigierte Anregungsfunktion (3-8). Unter der Berücksichtigung des Efficiency-Fehlers (3-4), der Unsicherheiten der Zerfallsdaten (3-9) und den restlichen in Tab. 3-4 aufgeführten und im Anhang D diskutierten Fehlermöglichkeiten ergibt sich für den relativen Fehler der Anregungsfunktion (3-8) Ausdruck (3-10).

1. Unsicherheit der Anzahl der Targetatome pro Einheitsfläche im Strahl
2. Aktivitäten produziert durch Konkurrenzreaktionen
3. Sekundärreaktionen induziert durch Reaktionsprodukte (n, p, d, α)
4. Unsicherheit der Aktivität durch aus dem Target austretende Rückstoßkerne
5. Während der Bestrahlung auftretender Zerfall (DDI, decay during irradiation)
6. Während der Spektroskopie auftretender Zerfall (DDA, decay during aquisition)
7. Zerfallsreihen
8. Änderung der Anzahl der Targetatome während der Bestrahlung
9. Schwankung der Strahlintensität während der Bestrahlung
10. Unsicherheit der Strommessung
11. Statistische Fehler
12. Unsicherheit des Ansprechvermögens (Efficiency) des γ -Spektrometers
13. Totzeit des γ -Spektrometers während der Messung
14. Selbstabsorption niederenergetische γ 's im Target

Tabelle 3-4: Liste der betrachteten Fehlermöglichkeiten bei der Aktivierungsanalyse

$$\sigma^{\text{Nuc}}(E_p) = \frac{e \cdot M_{\text{Mol}} T_{1/2}}{N_A \rho_{\text{Fe}} d_{\text{Fe}} \cdot \ln 2} \cdot \frac{A_0^{\text{Nuc}}(E_p)}{\int I_p(t) dt} \quad (3-5)$$

$\sigma^{\text{Nuc}}(E_p)$: Anregungsfunktion des Nuklids *Nuc* bei der Protonenergie E_p in $^{\text{nat}}\text{Fe}$
 e : Elementarladung, d.h. Ladung des Projektils. Bei Alphateilchen muß e durch $2e$ ersetzt werden.

M_{mol} : Molare Masse des Eisens

$T_{1/2}$: Halbwertszeit des Nuklids *Nuc*

ρ_{Fe} : Dichte des Eisen

d_{Fe} : Dicke der Targetfolie

A_0^{Nuc} : Aktivität des Nuklids *Nuc* direkt nach Bestrahlungsende
 (Summe aus Target- plus Catcherfolie)

$I_p(t)$: Protonstrom während der Bestrahlung

$$\text{DDI} = \frac{\ln(2) t_{\text{irr}}/T_{1/2}}{\left(1 - e^{-\ln(2)t_{\text{irr}}/T_{1/2}}\right)} \quad (3-6)$$

t_{irr} : Bestrahlungsdauer

$$DDA = \frac{\ln(2) R_T / T_{1/2}}{\left(1 - e^{-\ln(2) R_T / T_{1/2}}\right)} \quad (3-7)$$

R_T : Dauer der Messung (real time)

$$\sigma^{Nuc}(E_p) = \frac{e M_{Mol} T_{1/2}}{N_A \rho_{Fe} d_{Fe} \ln(2)} \frac{A_0^{Nuc}(E_p)}{\int I_p(t) dt} \frac{\ln(2) t_{irr} / T_{1/2}}{\left(1 - e^{-\ln(2) t_{irr} / T_{1/2}}\right)} \frac{\ln(2) R_T / T_{1/2}}{\left(1 - e^{-\ln(2) R_T / T_{1/2}}\right)} \quad (3-8)$$

Aus (3-4) ergibt sich für den Fehler der Nuklidaktivität

$$\Delta A^{Nuc} = A^{Nuc} \sqrt{\left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2 + \left(\frac{\Delta A^{ref}}{A^{ref}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Y_\gamma}{Y_\gamma}\right)^2} \quad (3-9)$$

Damit folgt für den Fehler von $\sigma(E)$ gewichtet für die Anteile der Aktivität von Target (Fe) und Catcher (C) Ausdruck (3-10):

$$\frac{\Delta \sigma^{Nuc}}{\sigma^{Nuc}} = \sqrt{\left(\frac{A_{Fe}}{A_{tot}}\right) \left(\frac{\Delta A^{Fe}}{A^{Fe}}\right)^2 + \left(\frac{A_C}{A_{tot}}\right) \left(\frac{\Delta A^C}{A^C}\right)^2 + \left(\frac{\Delta A^{ref}}{A^{ref}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Y_\gamma}{Y_\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \int I(t) dt}{\int I(t) dt}\right)^2 + \left(\frac{\Delta d}{d}\right)^2} \quad (3-10)$$

Bestimmung der Korrektur durch Zerfallsreihen

Bei der Berechnung der Anregungsfunktionen von Nukliden mit kurzer Halbwertszeit muß außer DDA und DDI noch ein weiterer Effekt berücksichtigt werden. Tritt eine Zerfallsreihe auf, d.h. zerfällt ein Nuklid mit kurzer Halbwertszeit auf ein Nuklid dessen Anregungsfunktion gemessen werden soll, so wird diese durch die zusätzliche Produktion verfälscht. Dies tritt z.B bei $^{53}Fe_m$ ($T_{1/2}=2,53$ m) \rightarrow $^{53}Fe_g$ ($T_{1/2}=8,51$ m) auf und ist nicht vernachlässigbar.

Bei der Produktion von Nukliden lassen sich im allgemeinen drei Fälle unterscheiden:

(I) Produktion eines Nuklids durch Bestrahlung mit $T_{1/2} \gg$ Bestrahlungsdauer

$$\frac{dN_1}{dt} = c_1 \quad \rightarrow \quad N_1(t) = c_1 t \quad (3-11)$$

N_1 : Anzahl der Kerne N_1 nach der Bestrahlungszeit t
 c_1 : Produktionsrate der Kerne N_1 (siehe (3-20))
 t : Bestrahlungsdauer

(II) Produktion eines Nuklids durch Bestrahlung mit $T_{1/2} <$ Bestrahlungsdauer

$$\frac{dN}{dt} = c_1 - \lambda_1 N_1 \quad \rightarrow \quad N_1(t) = N^\infty (1 - e^{-\lambda_1 t}) \quad (3-12)$$

λ_1 : Zerfallskonstante ($\lambda_1 = \ln(2)/T_{1/2}$)
 $T_{1/2}$: Halbwertszeit
 N^∞ : Gleichgewichtszahl der Kerne, bei der der Zerfall die Produktion aufwiegt ($N^\infty = c_1/\lambda_1$)

Die Produktionsrate läßt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$c_1 = \phi \sigma \frac{\rho d N_A}{M_{\text{Mol}}} = \frac{I}{ze} \sigma \frac{\rho d N_A}{M_{\text{Mol}}} \quad (3-13)$$

c_1 : Produktionsrate der Kerne N_1
 ϕ : Teilchenstrom
 I : Elektrischer Teilchenstrom
 z : Projektilladungszahl
 e : Elementarladung
 σ : Produktionswirkungsquerschnitt (Anregungsfunktion)
 ρ : Dichte des Targetmaterials
 d : Dicke des Targets
 N_A : Avogadrozahl
 M_{mol} : Molare Masse des Targetmaterials

Die Fälle (I) und (II) sind bei der obigen Berechnung der korrigierten Anregungsfunktion (3-8) berücksichtigt. Der Fall (II) wurde durch Einführung des DDI-Faktors (3-6) korrigiert.

- (III) Dieser Fall berücksichtigt zusätzlich zur Produktion durch Bestrahlung die Produktion eines Nuklids durch Zerfallsreihen des Typs $N_1 \rightarrow N_2 \rightarrow N_3 \rightarrow \dots$, wobei die Anregungsfunktion eines Tochternuklides gesucht ist. Da in der Standardliteratur nur der allgemeine Fall ($N_2(t=0)=0$, $N_3(t=0)=0$, $c_1=0$) diskutiert wird, mußte ein System inhomogener linearer Differentialgleichungen gelöst werden.

Es gilt folgendes Differentialgleichungssystem mit der Anfangsbedingung $N_i(t=0)=0$:

$$\dot{N}_1 = c_1 - \lambda_1 N_1 \quad (3-14)$$

$$\dot{N}_2 = c_2 + \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2 \quad (3-15)$$

$$\dot{N}_3 = c_3 + \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3 \quad (3-16)$$

- c_i : Produktionsrate des Nuklids i (siehe (3-13))
 λ_i : Zerfallskonstante des Nuklids i
 N_i : Anzahl der Kerne des Nuklids i

In den Gleichungen (3-14), (3-15) und (3-16) beschreiben die Produkte mit positivem Vorzeichen $\lambda_i N_i$ den Zerfall des Nuklids i . Die Produkte $\lambda_i N_i$ mit negativem Vorzeichen beschreiben, wie das Nuklid i aus dem Nuklid $i-1$ durch dessen Zerfall aufgebaut wird.

Die Lösung von (3-14) ist identisch mit der von Fall (II):

$$N_1(t) = \frac{c_1}{\lambda_1} (1 - e^{-\lambda_1 t}) \quad (3-17)$$

Die Lösung von (3-15) lautet:

$$N_2(t) = \frac{c_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) + \frac{c_1 + c_2}{\lambda_2} (1 - e^{-\lambda_2 t}) \quad (3-18)$$

Da in dieser Arbeit keine höhere Zerfallsreihe behandelt wird, wurde auf die Lösung von (3-16) verzichtet.

Zusätzlich zur Korrektur des Zerfallsreihen-Effektes während der Produktionsphase muß noch der Effekt der Zerfallsreihen im Zeitraum zwischen Abschaltung der Bestrahlung und Ende der Messung beachtet werden. Für diesen Fall gelten folgende Differentialgleichungen mit den Anfangsbedingungen ($N_1(t=0)=N_1^0$, $N_2(t=0)=N_2^0$):

$$\dot{N}_1 + \lambda_1 N_1 = 0 \quad (3-19)$$

$$\dot{N}_2 + \lambda_2 N_2 - \lambda_1 N_1 = 0 \quad (3-20)$$

Die Lösung von (3-19) ist Standard und lautet:

$$N_1(t) = N_1^0 e^{-\lambda_1 t} \quad (3-21)$$

Die Lösung von (3-20) lautet:

$$N_2(t) = N_2^0 e^{-\lambda_2 t} + N_1^0 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) \quad (3-22)$$

4 Bestimmung der leichtioneninduzierten Anregungsfunktionen

Es wurden reine Eisenfolien mit Protonen im Energiebereich 10 - 30 MeV und mit α -Teilchen im Energiebereich 35 - 104 MeV bestrahlt. Die Diskussion der Resultate wird in 2 Gruppen (p-induzierte Anregungsfunktionen, α -induzierte Anregungsfunktionen) eingeteilt. Die experimentellen Werte werden mit theoretisch berechneten Anregungsfunktionen verglichen. Für die Protonen wurden theoretische Daten nach dem precompound-compound-Kernmodell (ALICE-91) unter Verwendung der „Fermi-Level-Density“ (FLD) berechnet. Für die α -Teilchen wurden theoretische Daten ebenfalls mit ALICE-91 zum einen mit der „Fermi-Level-Density“ (FLD) berechnet, zum anderen wurde mit der „Kataria-Ramamurthy-Level-Density“ (KRLD) gearbeitet, um die Schaleneffekte, die bei Erzeugung von angeregten Ni-Compoundkernen durch α -induzierte Prozesse auftreten, korrigieren bzw. untersuchen zu können. Abschließend werden die experimentellen und theoretischen Daten mit soweit vorhandenen Literaturdaten verglichen. Viele der Literaturzitate wurden aus den Zusammenstellungen [4-1] bis [4-9] entnommen. Zur Identifizierung wurden die Nuklidaten ($T_{1/2}$, E_γ , Y_γ) aus dem γ -Ray-Katalog von U. Reuss [4-10] verwendet.

4.1 Messung der p-induzierten Anregungsfunktionen

Bei der Untersuchung p-induzierter Anregungsfunktionen konnten für das Targetelement Fe im Energiebereich 10 - 30 MeV insgesamt 7 Anregungsfunktionen identifiziert werden.

Reaktionstyp	Produkt nuklid
(p, xn)	$^{58}\text{Co}_g$, ^{57}Co , ^{56}Co , ^{55}Co
(p, pxn)	$^{53}\text{Fe}_g$
(p, 2pxn) bzw. (p, α xn)	^{54}Mn , $^{52}\text{Mn}_g$

Tabelle 4-1: Zusammenstellung aller identifizierten Produkt nuklide p-induzierter Reaktionen

E_{Proton} [MeV]	^{58}Co	^{57}Co	^{56}Co	^{55}Co	$^{53}\text{Fe}_g$	^{54}Mn	$^{52}\text{Mn}_g$
$29,9 \pm 0,4$	0,18 $\pm 0,09$	2,20 $\pm 0,34$	35,9 $\pm 6,2$	50,3 $\pm 8,3$	14,6 $\pm 2,2$	38,3 $\pm 5,7$	30,8 $\pm 7,7$
$25,0 \pm 0,6$	0,22 $\pm 0,05$	3,73 $\pm 0,58$	50,1 $\pm 8,6$	71,5 $\pm 11,2$	17,5 $\pm 3,1$	1,42 $\pm 0,29$	19,1 $\pm 4,4$
$19,8 \pm 0,7$	0,46 $\pm 0,20$	6,50 $\pm 1,12$	121 ± 19	48,5 $\pm 7,6$	7,25 $\pm 1,08$	1,08 $\pm 0,44$	
$15,4 \pm 1,0$	0,93 $\pm 0,42$	8,62 $\pm 2,32$	289 ± 42	0,40 $\pm 0,18$	0,51 $\pm 0,12$	1,28 $\pm 0,43$	
$10,6 \pm 1,4$	2,48 $\pm 0,78$	18,4 $\pm 2,9$	397 ± 62			0,80 $\pm 0,26$	

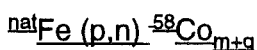
Tabelle 4-2: Experimentelle Werte der p-induzierten Anregungsfunktionen in Fe (Werte in mbarn)

Davon war eine Anregungsfunktion, nämlich $^{53}\text{Fe}_g$, ein Produktnuklid mit kurzer Halbwertszeit ($T_{1/2} = 8,53 \text{ m}$). Die Reaktionskanäle reichten von (p, xn) bis zu $(p, \alpha xn)$. Eine Übersicht der Produktnuklide, einschließlich der jeweiligen Reaktionstypen, ist in Tab. 4-1 wiedergegeben. Tabelle 4-2 listet die experimentellen Werte der p-induzierten Anregungsfunktionen in ^{nat}Fe dieser Arbeit auf.

Wie oben schon kurz erwähnt, wurde als einziges kurzlebige Produktnuklid $^{53}\text{Fe}_g$ nachgewiesen. Weitere kurzlebige Nuklide wären z.B. $^{53}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 2,53 \text{ m}$) und ^{52}V ($T_{1/2} = 3,75 \text{ m}$) gewesen. Es gibt mehrere Gründe, warum diese Nuklide nicht identifiziert werden konnten. Zum einen wurde erkannt, daß die Transportzeit vom Abschalten des Strahls im DB-Areal bis zum γ -Spektroskopie Meßstand von anfänglich ≈ 15 Minuten zu lang war. Dies wurde für die α -Bestrahlungen optimiert und auf 5 - 7 Minuten reduziert. Zum anderen wurden die protonbestrahlten Fe-Folien nicht kontinuierlich gemessen, sondern es wurden die Meßzeiten variiert, um herauszufinden, wie die kurz-, mittel- und langlebigen Nuklide optimal gemessen werden können. Durch das Aufnehmen von Meßserien von Hand gab es zwischen den einzelnen Spektren unterschiedlich lange Meßpausen, deren Korrektur, die notwendig für das Aufsummieren der nacheinander gemessenen Spektren ist, eine unnötig große Unsicherheit in den Zählraten verursachte. Deshalb wurde bei den Protonbestrahlungen davon abgesehen, weitere kurzlebige Nuklide außer $^{53}\text{Fe}_g$ zu identifizieren. Für die α -Teilchen Bestrahlungen wurde jedoch die optimierte, automatisch gesteuerte Meßwerterfassung (kontinuierliches Messen über Stunden und alle 200 Sekunden automatisches Abspeichern) mit Erfolg angewendet.

Der (p,xn)-Kanal

Die Reaktionen von Typ (p, xn) führen in ^{nat}Fe auf Co-Nuklide. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.



Beim ^{58}Co -Nuklid konnte nur eines der beiden ^{58}Co -Isomere, nämlich $^{58}\text{Co}_g$ ($T_{1/2} = 70,78 \text{ d}$), identifiziert werden. Das Isomer $^{58}\text{Co}_m$ ($T_{1/2} = 9,15 \text{ h}$) lag mit $E_\gamma = 24,2 \text{ keV}$ außerhalb des Meßbereichs. $^{58}\text{Co}_g$ konnte anhand der $E_\gamma = 810,8 \text{ keV}$ (99,5%) Linie eindeutig nachgewiesen werden.

Abb. 4-1 zeigt die $^{58}\text{Co}_{g+m}$ -Anregungsfunktionen. Von den 4 stabilen Fe-Isotopen im Target führt jedoch nur ^{56}Fe durch eine (p, n) Reaktion auf $^{58}\text{Co}_g$. Der Q-Wert dieser Reaktion liegt bei $Q = -4 \text{ MeV}$. ALICE-91 berechnete diesen Reaktorkanal ^{58}Co ohne Unterscheidung, ob ein g- oder m-Isomer produziert wird, d.h. es wird die Summe der beiden Isomere berechnet. ALICE-91 berücksichtigt für diese Reaktionen den precompound-Reaktionsanteil der Gesamtanregungsfunktion. Die experimentellen Werte dieser Arbeit decken sich bis zu 15 MeV gut mit den Daten von Brinkmann [4-11] und Michel [4-12], liegen jedoch bei Energien von 20 MeV und höher um einen Faktor 2 oberhalb der Literaturwerte von Michel und den ALICE-91-Werten. Daß die theoretische Anregungsfunktion sehr gut (bis 30 MeV)

den Werten von Michel folgt, liegt unter anderem daran, daß die Modellparameter an experimentelle Daten angepaßt wurden. Die Meßwerte inklusive ihrer Unsicherheiten sind in Tab. 4-2 eingetragen

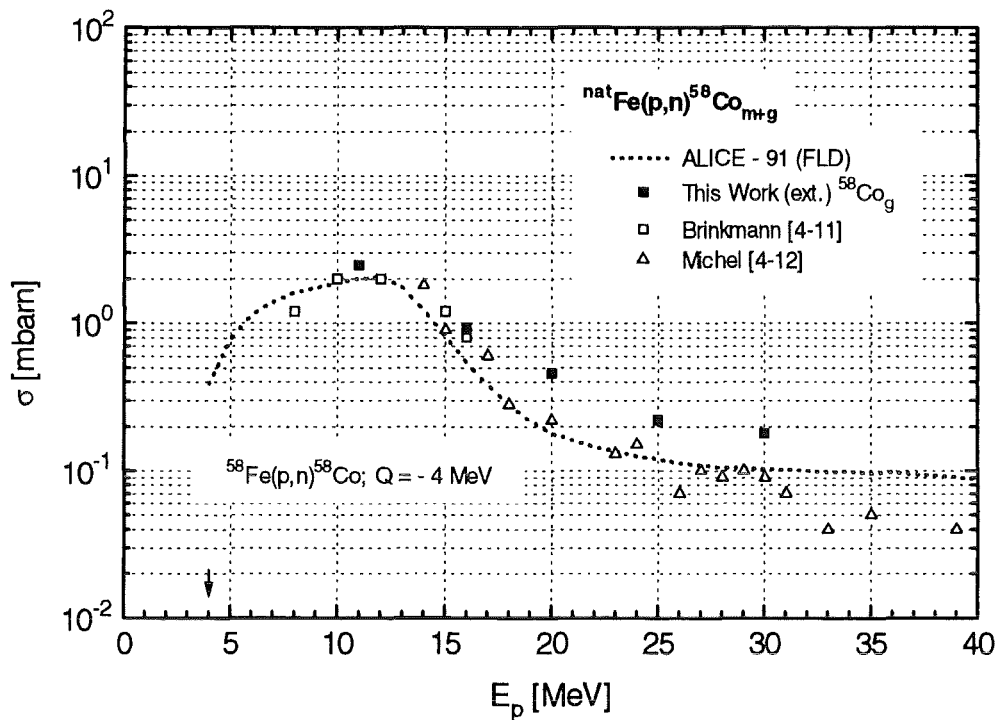


Abbildung 4-1: Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,n){}^{58}\text{Co}_{m+g}$ -Reaktion. Der eingezeichnete Pfeil zeigt auf den Q-Wert der Reaktion.

${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,xn){}^{57}\text{Co}$

Das ${}^{57}\text{Co}$ -Nuklid ($T_{1/2} = 271,77$ d) konnte anhand der beiden γ -Linien bei 122,1 keV (85,6 %) bzw. 136,4 keV (10,6 %) identifiziert werden. Das ${}^{57}\text{Co}$ -Nuklid wird durch eine (p,n)-Reaktion in ${}^{57}\text{Fe}$ ($Q = -3$ MeV) und eine (p,2n)-Reaktion in ${}^{58}\text{Fe}$ ($Q = -12$ MeV) erzeugt. Für beide Reaktionskanäle berücksichtigt ALICE-91 den precompound-Anteil.

Abb. 4-2 zeigt die ${}^{57}\text{Co}$ -Anregungsfunktionen. Die experimentellen Werte liegen bei 10 MeV ca. 30 % und bei $E > 10$ MeV ca. einen Faktor 2 oberhalb den ALICE-91 (FLD) Daten. Die Daten von Johnsen [4-13], Tanaka [4-14], [4-15], Brinkmann [4-11] und Michel [4-12] folgen gut den theoretischen Werten bis auf den Bereich des Maximums, bei ca. 10 MeV, bei dem die Literaturdaten ca. 60 % unterhalb der ALICE-91-Daten liegen.

Es ist anzumerken, daß die Daten von Michel mit denen von Brinkmann ab 15 MeV aufwärts identisch sind. Die qualitativ gute Beschreibung der Literaturdaten durch die Theorie ist durch die Anpassung der Modellparameter an die Literaturdaten gegeben. Die Daten von Brodzinski [4-16] zeigen jedoch bei den Energien 14,5 MeV bzw. 15 MeV eine Differenz von 40 %.

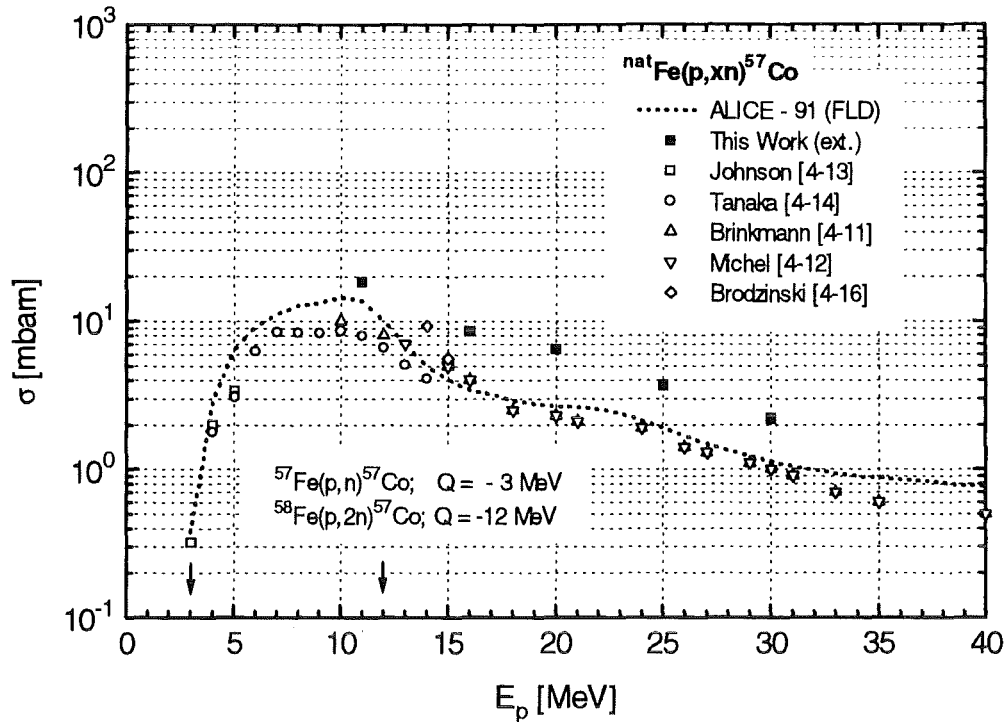


Abbildung 4-2: Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,xn){}^{57}\text{Co}$ -Reaktion

${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,xn){}^{56}\text{Co}$

Das ${}^{56}\text{Co}$ -Nuklid ($T_{1/2} = 77,1$ d) wurde anhand der γ -Linie 846,8 keV (99,9 %) identifiziert. Diese γ -Linie kommt auch noch beim Zerfall von ${}^{56}\text{Mn}$ ($T_{1/2} = 2,58$ h), $E_{\gamma} = 846,6$ (99,0 %) vor, jedoch ist die Bildung von ${}^{56}\text{Mn}$ durch den Prozeß ${}^{58}\text{Fe}(p,2p){}^{56}\text{Mn}$ durch den geringen Anteil (0,025 %) ${}^{58}\text{Fe}$ in ${}^{\text{nat}}\text{Fe}$ gegenüber ${}^{56}\text{Fe}(p,n){}^{56}\text{Co}$ sehr stark unterdrückt und kann daher vernachlässigt werden.

Abb. 4-3 zeigt die Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,xn){}^{56}\text{Co}$ - Reaktion. Bis auf die Literaturdaten von Jenkins [4-17] bei $E > 15$ MeV und generell bei Williams [4-18] stimmen die gemessenen Werte dieser Arbeit sehr gut mit den Daten von Gadioli [4-19] und Tanaka [4-20] überein. Die Daten von Michel [4-21] und Brinkmann [4-22] folgen den obigen Werten bis zu $E = 20$ MeV. Oberhalb dieser Energie weichen die Michel-Daten etwas nach unten ab, während die Brinkmann-Daten sehr deutlich geringere Werte annehmen. Der Übersichtlichkeit halber nicht eingezeichnet, jedoch in guter Übereinstimmung, sind die Daten von Samuelson [4-20], Barrandon [4-21], Brodzinski [4-16] und Takács [4-22]. Insbesondere stellt Takács einen aktuellen Übersichtsartikel über bisherige Messungen der Anregungsfunktionen von ${}^{56}\text{Co}$ in ${}^{\text{nat}}\text{Fe}$ dar. Die Messung der ${}^{56}\text{Co}$ -Anregungsfunktion durch eine solch große Anzahl von Autoren unterstreicht die Wichtigkeit der ${}^{56}\text{Fe}(p,n){}^{56}\text{Co}$ -Reaktion als Monitorreaktion.

Die sehr gute Übereinstimmung der Daten dieser Arbeit mit den oben genannten Literaturwerten ist ein Maß für die Güte der durchgeführten Bestrahlungen. Die theoretischen Vorhersagen des ALICE-91-Programms liegen über einen weiten Bereich sehr dicht an den experimentellen Werten. Der Bereich des Maximums der Anregungsfunktion um 12 MeV wird jedoch um ca. 25% überschätzt. ALICE-91 berücksichtigt bei den $^{56}\text{Fe}(p,n)^{56}\text{Co}$ und $^{57}\text{Fe}(p,2n)^{56}\text{Co}$ Reaktionen zusätzlich den Precompound-Anteil. Bei $^{58}\text{Fe}(p,3n)^{56}\text{Co}$ wird ausschließlich der Compound-Anteil berücksichtigt.

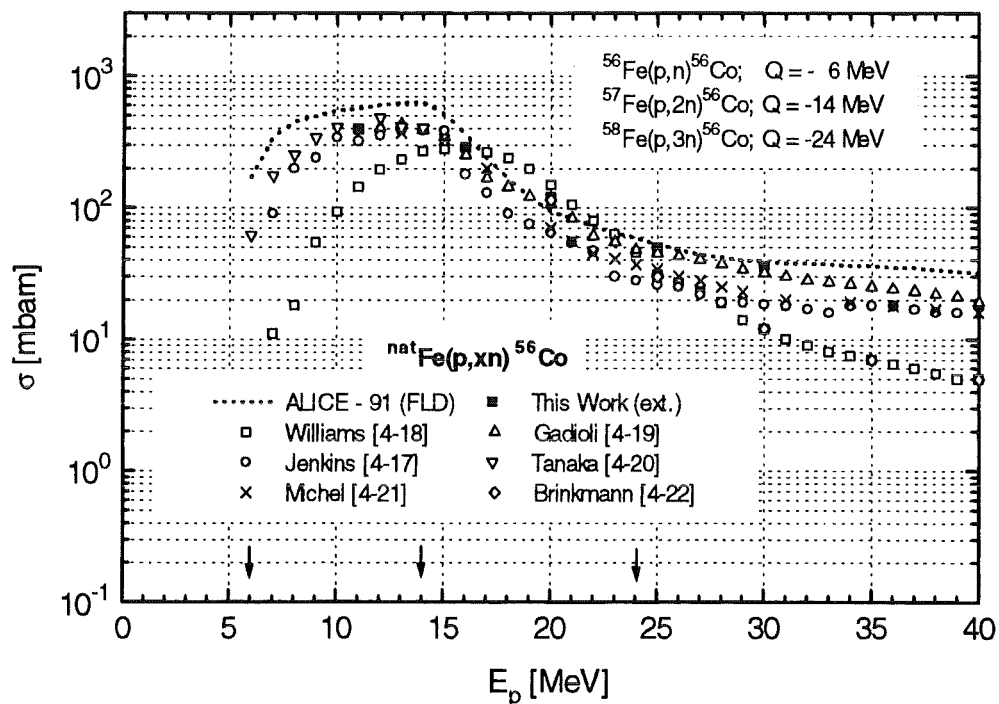


Abbildung 4-3: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(p,xn)^{56}\text{Co}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(p,xn)^{55}\text{Co}$

Das ^{55}Co -Nuklid ($T_{1/2} = 17,54$ h) konnte anhand der γ -Linien 931,5 keV (75,0 %) und 477,2 keV (20,3 %) identifiziert werden. Dieses Nuklid hat gegenüber den anderen Co-Nukliden schon eine relativ kurze Halbwertszeit, die meßtechnisch jedoch kein Problem darstellte. Die 931,5 keV Linie liegt benachbart zur 935,6 keV (93,0 %) Linie des $^{52}\text{Mn}_g$ ($T_{1/2} = 5,59$ d). Die gute spektroskopische Energieauflösung von $\sim 1,1$ keV (FWHM) bei 950 keV erlaubt es jedoch, diese beiden Linien problemlos getrennt aufzunehmen.

Abb. 4-4 zeigt die Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(p,xn)^{55}\text{Co}$ -Reaktion. Bei dieser Anregungsfunktion liegen die Meßwerte dieser Arbeit in sehr gutem Einklang mit den Literaturdaten von Lagunas-Solar [4-23]. Eine frühe Messung von Williams [4-18] zeigt ab 30 MeV aufwärts eine gute Übereinstimmung mit den Lagunas-Solar Werten, jedoch

unterhalb 30 MeV liegen die Williams-Daten deutlich zu niedrig. Da derselbe Effekt ebenfalls bei den ^{56}Co -Daten auftritt, wird angenommen, daß Williams bei seinen Messungen im Energiebereich unterhalb 30 MeV mit einer zu geringen Detektorefficiency gearbeitet hat. Zudem läßt sich aus den Meßpunkten unterhalb der niedrigsten Reaktionsschwelle (16 MeV) schließen, daß die Berechnungen des Energieverlusts von Ionen in Metallen bzw. der Reichweite von Ionen in Metallen noch ungenau war und somit bei Bestrahlungen von Folienstapeln besonders den Folien mit niedriger Energie ein zu geringer Energiewert zugeordnet wurde. Der einzige vorhandene Meßwert von Cohen [4-25] [4-26] bei 21 MeV liegt um einen Faktor 2 oberhalb der Daten dieser Arbeit. ALICE-91 berücksichtigt von den 3 offenen Reaktionskanälen nur bei der Reaktion $^{56}\text{Fe}(p,2n)^{55}\text{Co}$ den Precompound-Anteil.

Die theoretischen Werte treffen bei der Reaktionsschwelle den Anstieg ganz gut, liegen jedoch beim Maximum um mehr als einen Faktor 2 über den experimentellen Daten. Bei höheren Energien liegen die ALICE-91-Werte noch ca. einen Faktor 1,5 oberhalb der experimentellen Daten. In der Arbeit von Lagunas-Solar liegt ein Datensatz berechnet mit der Version ALICE-82 vor. Dieser Datensatz liegt jedoch deutlich oberhalb der ALICE-91 Werte und zeigt damit die Verbesserung der Kernmodellrechnungen innerhalb von 10 Jahren. Die experimentellen Daten sind in Tab. 4-2 aufgelistet.

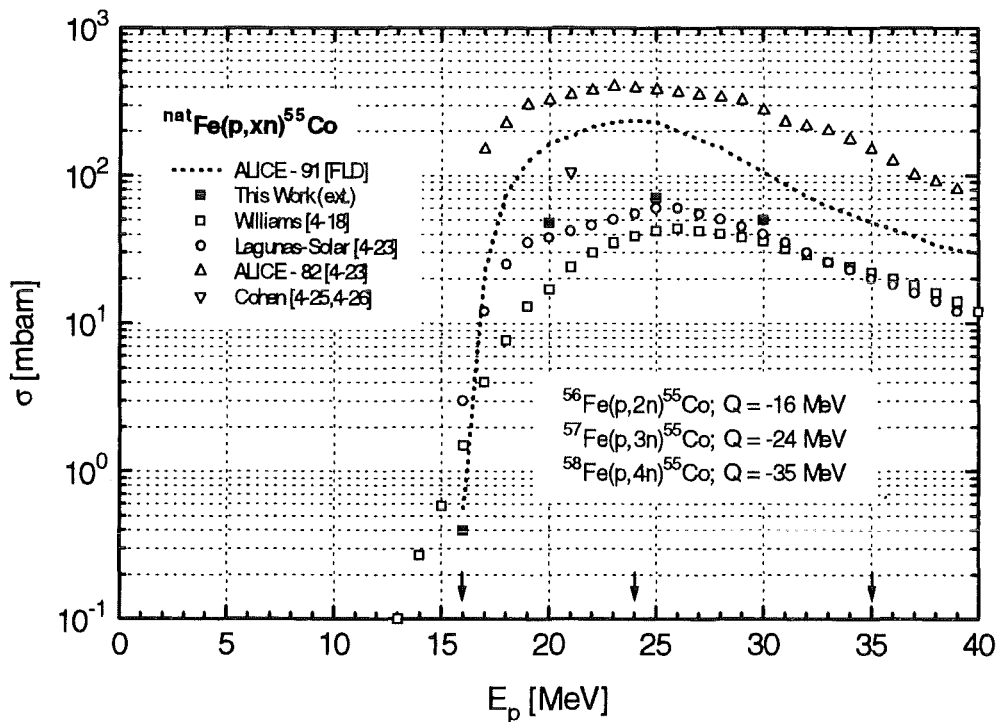


Abbildung 4-4: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(p,xn)^{55}\text{Co}$ -Reaktion

Der (p,pxn) - Kanal

Die Reaktionen vom Typ (p,pxn) führen in ^{nat}Fe auf Fe-Nuklide. Das Nuklid $^{53}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 2,53 \text{ m}$) konnte, wie oben bereits diskutiert, wegen seiner sehr kurzen Halbwertszeit nicht identifiziert werden.

$^{nat}\text{Fe} (p,pxn) ^{53}\text{Fe}_g$

Das $^{53}\text{Fe}_g$ -Nuklid ($T_{1/2} = 8,51 \text{ m}$) konnte anhand der γ -Linie 377,9 keV (40 %) identifiziert werden. Dieses Nuklid hat die kürzeste Halbwertszeit aller gemessenen p-induzierten Nuklide. Die kurze Halbwertszeit machte es erforderlich, die Messung innerhalb der ersten 30 Minuten nach Bestrahlungsende durchzuführen und abzuschließen, da wegen der niedrigen γ -Energie die $^{53}\text{Fe}_g$ - γ -Linie im durch die anderen Linien erzeugten Untergrund verschwindet.

Abb. 4-5 zeigt die Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(p,pxn)^{53}\text{Fe}_g$ -Reaktion. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen ab der Reaktionsschwelle ($Q = 15 \text{ MeV}$) einen stark ansteigenden Verlauf, der bei 25 MeV ein Maximum durchläuft. Es ist zu beachten, daß bei Nukliden mit einer Halbwertszeit kürzer als die Bestrahlungs- bzw. Meßdauer der Zerfall der produzierten Nuklide während der Bestrahlung bzw. Messung zu berücksichtigen ist, um korrekte Werte für die Anregungsfunktion zu erhalten. Desweiteren wurden die Daten um 35 % nach unten korrigiert. Diese Korrektur, verursacht durch die Zerfallsreihe $^{53}\text{Fe}_m \rightarrow ^{53}\text{Fe}_g$ wird bei der α -induzierten Anregungsfunktion detailliert beschrieben. Da keine p-induzierten $^{53}\text{Fe}_m$ Daten gemessen werden konnten, muß, um die p-induzierten und α -induzierten Daten gleichermaßen korrigieren zu können, vorausgesetzt werden, daß die jeweilige Bestrahlungs- und Meßdauer gleichlang sind, was bei der Durchführung der Experimente eingehalten wurde, und daß das Verhältnis $\sigma(^{53}\text{Fe}_g)/\sigma(^{53}\text{Fe}_m)$ in beiden Fällen übereinstimmt.

Bei dieser Anregungsfunktion liegen nur wenig zu vergleichende Literaturdaten vor. Der einzige vorliegende Meßpunkt von Cohen [4-25], [4-26] bei 21 MeV zeigt gute Übereinstimmung mit den Werten dieser Arbeit. Die Daten von Escola [4-27] liegen jedoch im Energiebereich 19 - 29 MeV um einen Faktor 2 unterhalb den Daten dieser Arbeit. Die ALICE-91 Berechnungen geben den Anstieg zwischen 16 und 20 MeV sehr gut wieder, jedoch oberhalb 20 MeV liegen die theoretischen Werte ca. um einen Faktor 2 oberhalb der experimentellen Daten.

Es ist jedoch zu berücksichtigen, daß ALICE-91 die Anregungsfunktion für die beiden Isomere $^{53}\text{Fe}_{g+m}$ zusammen berechnet. Das Isomer $^{53}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 2,53 \text{ m}$) konnte wegen seiner kurzen Halbwertszeit mit der hier verwendeten Meßmethode nicht erfaßt werden. Es ist somit klar, daß die theoretische Anregungsfunktion oberhalb der experimentellen Daten des Isomers $^{53}\text{Fe}_g$ liegen muß. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-2 aufgelistet.

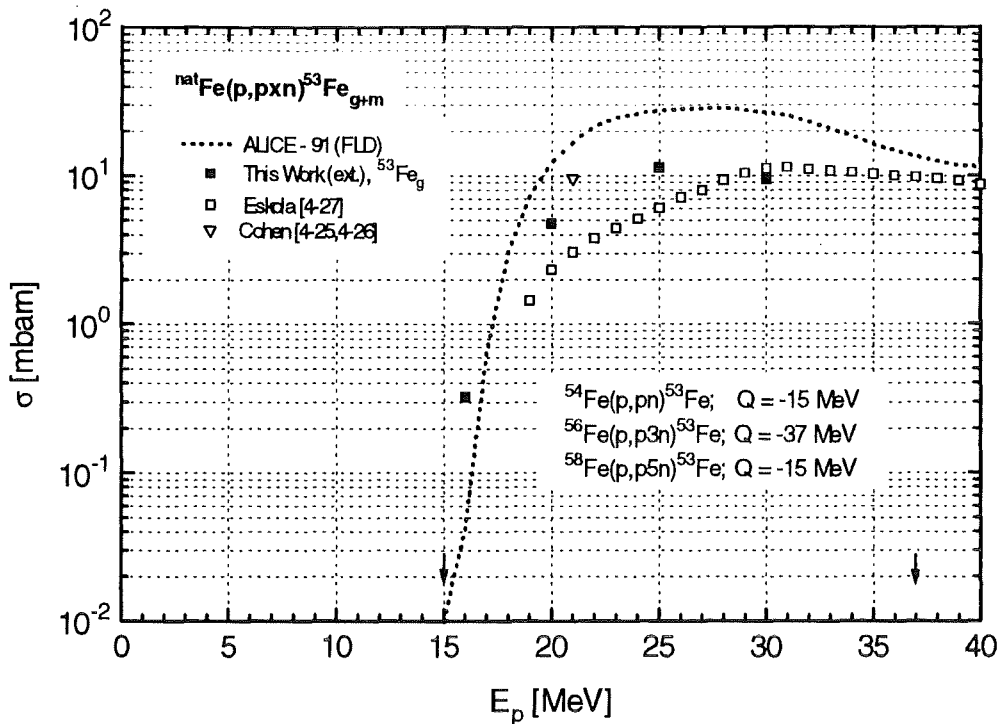


Abbildung 4-5: Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,pxn){}^{53}\text{Fe}_{g,m}$ -Reaktion

Der (p,x α ypzn) - Kanal

Die Reaktionen vom Typ (p,x α ypzn) führen in ${}^{\text{nat}}\text{Fe}$ auf Mn-Nuklide. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.

${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,x\alpha y p z n){}^{54}\text{Mn}$

Das ${}^{54}\text{Mn}$ -Nuklid ($T_{1/2} = 312,2$ d) konnte anhand der γ -Linie 834,8 keV (99,98 %) identifiziert werden. Abb. 4-6 zeigt die Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p,x\alpha y p z n){}^{54}\text{Mn}$ -Reaktion. Die experimentellen Werte sind in Tab. 4-2 eingetragen. Das Nuklid ${}^{54}\text{Mn}$ kann über 3 Prozesse erzeugt werden, wobei der Prozeß ${}^{57}\text{Fe}(p,\alpha){}^{54}\text{Mn}$ ($Q = -7$ MeV) die geringste Reaktionsschwelle besitzt. Bei Kernen mit $A = 56$ liegt die Separations-Energie pro Nukleon bei ca. 8 MeV und die Höhe der Coulomb-Barriere bei ca. 12 MeV. Die Emission von α -Teilchen findet bei niedrigen Energien statt, da durch die Formierung eines α -Clusters im angeregten Kern die Bindungsenergie von 28,3 MeV freigesetzt wird. Der Energieerhaltungssatz zeigt, daß ca. 7 MeV kinetische Energie aufgewendet werden müssen, um die Coulomb-Barriere überwinden zu können.

Es wurden zum erstenmal Messungen der Anregungsfunktion im Energiebereich 10 - 30 MeV durchgeführt. Die experimentellen Daten dieser Arbeit zeigen kein ausgeprägtes Minimum bzw. Maximum im Energiebereich 15 - 25 MeV, sondern eine bei niedrigen Energien sehr flach verlaufende Anregungsfunktion, die bei 25 - 30 MeV deutlich ansteigt. Verglichen mit den einzigen vorliegenden Literaturdaten von Williams [4-18], die

ab 30 MeV aufwärts vorhanden sind, zeigt sich ein Unterschied um einen Faktor 5 (bei 30 MeV).

ALICE-91 berechnet für den Verlauf der Anregungsfunktion ein Zwischenmaximum bei ca. 16 MeV, ein Minimum bei ca. 25 MeV und oberhalb 25 MeV einen deutlichen Anstieg. Das schwache Maximum wird durch die Emission von α -Teilchen in den Prozessen (p,α) und $(p,\alpha n)$ in ^{57}Fe und ^{58}Fe erzeugt. Der starke Anstieg oberhalb 25 MeV ist durch den Prozeß $(p,2pn)$ in ^{56}Fe charakterisiert. Die hohen Werte kommen durch den relativen Anteil von 91,8 % von ^{56}Fe in $^{\text{nat}}\text{Fe}$ zustande. Bei den höheren Energien liegen die ALICE-91-Werte, verglichen mit den experimentellen Daten dieser Arbeit, deutlich unterhalb. Die Literaturdaten von Williams sind in guter Übereinstimmung mit den theoretischen Werten. Jedoch ist anzumerken, daß Williams z.B. bei der Messung von ^{56}Co und bei ^{55}Co scheinbar eine zu niedrige Detektor-Efficiency benutzt hat.

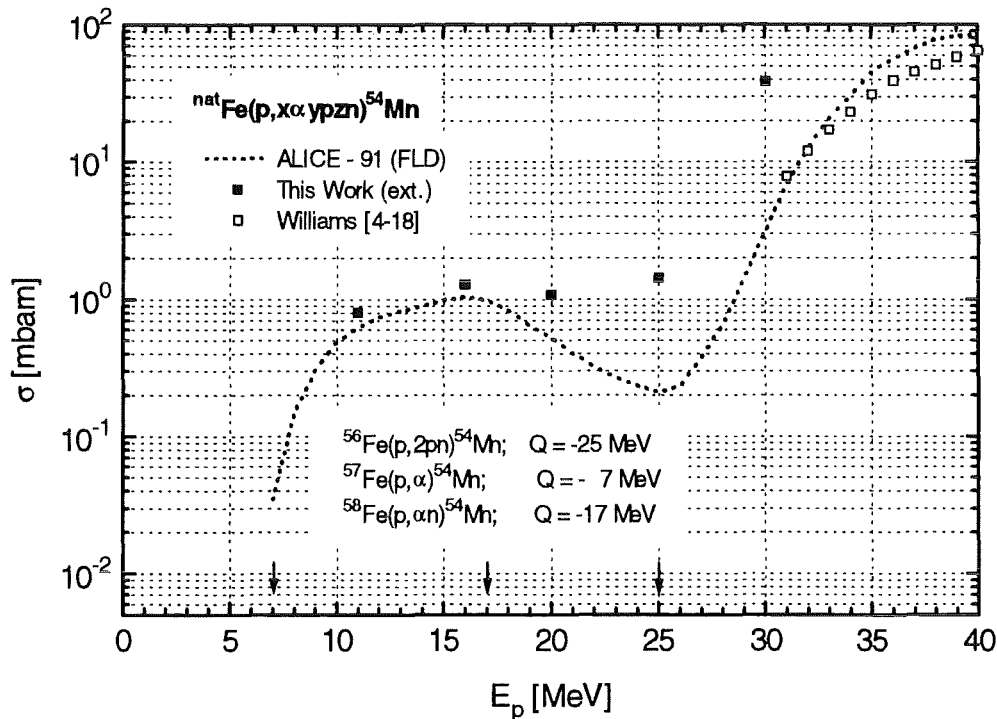


Abbildung 4-6: Anregungsfunktion der $^{\text{nat}}\text{Fe}(p,x\alpha y p z n)^{54}\text{Mn}$ -Reaktion

$^{\text{nat}}\text{Fe}(p,x\alpha y p z n)^{52}\text{Mn}_{g+m}$

Beim ^{52}Mn -Nuklid tritt zusätzlich zu $^{52}\text{Mn}_g$ noch das Isomer $^{52}\text{Mn}_m$ auf. Das Nuklid $^{52}\text{Mn}_g$ ($T_{1/2} = 5,59$ d) konnte anhand der γ -Linien 935,6 keV (93 %) und 744,2 keV (85 %) identifiziert werden. Abb. 4-7 zeigt die Anregungsfunktion der $^{\text{nat}}\text{Fe}(p,x\alpha y p z n)^{52}\text{Mn}_{g+m}$ -Reaktion. Die experimentellen Werte sind in Tab. 4-2 eingetragen. Das Nuklid $^{52}\text{Mn}_g$ kann über 3 Prozesse erzeugt werden, deren Reaktionsschwellen jedoch dicht beieinander liegen. Die niedrigste Reaktionsschwelle liegt bei 20 MeV. Dies erlaubt daher nur die Messung zweier Datenpunkte. Ein Vergleich der Datenpunkte dieser Arbeit mit Literaturdaten von Williams [4-18] und Jenkins [4-17] zeigt etwas Uneinigkeit. Während im

Bereich 20 - 25 MeV die Literaturdaten ca. 30-50% unterhalb den experimentellen Werten liegen, zeigt sich im Bereich $E < 20$ MeV, daß die Williams-Daten deutlich (Faktor 2 bis 4) unterhalb der Jenkins-Daten liegen, während bei Energien $E > 25$ MeV die Jenkins-Daten deutlich (Faktor 2-3) unterhalb den Williams-Daten liegen. Da die Reaktionsschwellen der beitragenden Prozesse eng beieinander liegen, werden keine ausgeprägten Maxima bzw. Minima im Anregungsfunktionsverlauf erwartet.

Das oben genannte Isomer $^{52}\text{Mn}_m$ ($T_{1/2} = 21,1$ m) kann nur über die γ -Linie mit der Energie $E_\gamma = 1434,3$ keV nachgewiesen werden. Diese Linie tritt auch bei ^{52}V ($T_{1/2} = 3,75$ m) auf. Da die Messungen der p-induzierten Reaktionsprodukte nicht auf kurzlebige Nuklide optimiert waren, konnte nicht festgestellt werden, wie sich die 1434,4 keV-Linie auf die beiden Nuklide verteilt. Somit konnten keine Werte der Anregungsfunktion von $^{52}\text{Mn}_m$ gewonnen werden.

Ein Vergleich mit den theoretischen ALICE-91-Werten zeigt, daß der Anstieg der Anregungsfunktion mit den Jenkins-Daten gut übereinstimmt. Generell liegen die theoretischen Daten näher an den Werten dieser Arbeit als an den Literaturdaten. Daß die ALICE-Daten immer oberhalb der experimentellen Werte liegen, ist durch den oben diskutierten Umstand gegeben, da der Beitrag des Isomers $^{52}\text{Mn}_m$ in den experimentellen Daten fehlt. Qualitativ betrachtet trifft der theoretisch berechnete Verlauf jedoch sehr gut den experimentellen Verlauf.

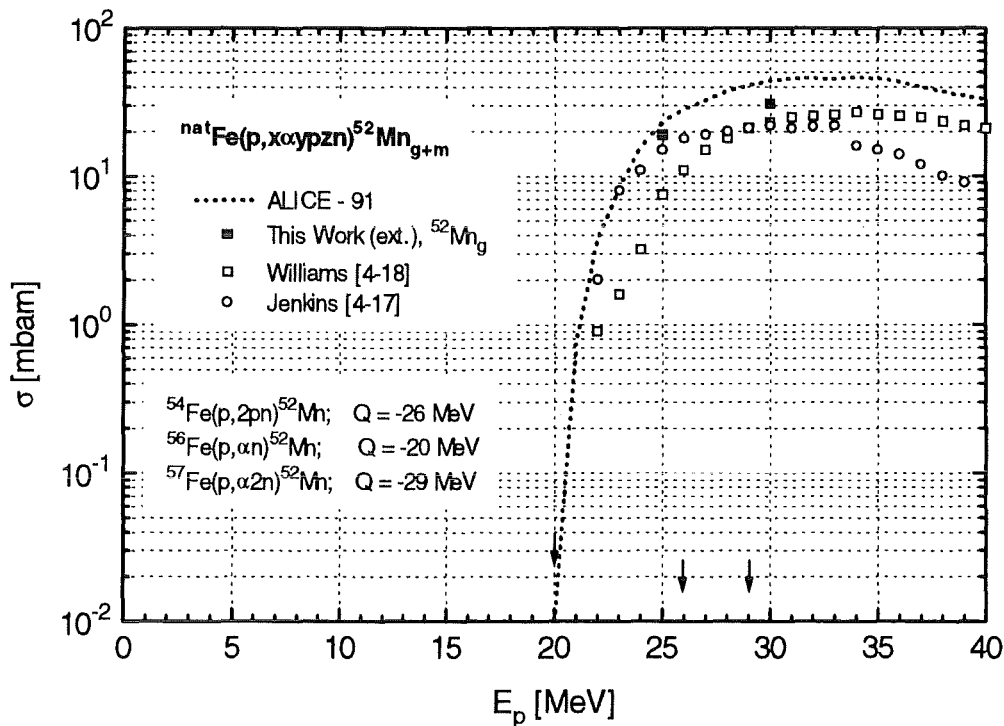


Abbildung 4-7: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(p, x\alpha pzn)^{52}\text{Mn}_{g,m}$ -Reaktion

4.2 Messung der α -induzierten Anregungsfunktionen

Bei der Untersuchung der α -induzierten Anregungsfunktionen konnten für das Targetelement ^{nat}Fe im Energiebereich 35 - 104 MeV insgesamt 18 Anregungsfunktionen gemessen werden. Darin enthalten sind Anregungsfunktionen von Nukliden mit sehr kurzer Halbwertszeit wie z.B. $^{53}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 2,53$ m), $^{53}\text{Fe}_g$ ($T_{1/2} = 8,51$ m), $^{52}\text{Mn}_m$ ($T_{1/2} = 21,1$ m), ^{49}Cr ($T_{1/2} = 42,1$ m) und ^{52}V ($T_{1/2} = 3,75$ m). Zu diesen Anregungsfunktionen liegen bisher noch keine anderen Messungen vor. Ebenso wurde zum erstenmal ein Datensatz der Anregungsfunktion ^{47}Sc ($T_{1/2} = 3,42$ d) gemessen. Es wurde ebenfalls versucht, die Anregungsfunktion von $^{52}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 45,9$ s) experimentell zu erfassen. Jedoch war die Halbwertszeit zu kurz. Die gemessenen Reaktionskanäle reichten von (α, n)- bzw. (α, p)-Reaktionen bis zur ($\alpha, 3\alpha p 2n$)-Reaktion. Eine Übersicht der Produktnuklide, einschließlich der jeweiligen Reaktionstypen, ist in Tabelle 4-3 wiedergegeben.

Bei der Messung der α -induzierten Anregungsfunktionen wurde sehr darauf geachtet, die Bestrahlungen und Messungen so durchzuführen, daß besonders die kurzlebigen Nuklide ($T_{1/2}$ einige Minuten) erfaßt werden konnten. Aus diesem Grund wurde die Transportzeit der Targetfolien von nach Abschalten des Strahls bis zum Start der Messung auf 5-7 Minuten optimiert. Dies wurde zum einen dadurch erreicht, daß vor Beginn der Bestrahlungen (DB-Areal) sämtliche benötigten Utensilien wie Pb-Transportbehälter (Typ-A), Werkzeuge und Verpackungsmaterial akkurat vorbereitet wurden. Zum anderen wurde speziell bei den externen DB-Bestrahlungen die Vakuumkammer vor Beginn der Bestrahlung zum schnellen Öffnen vorbereitet, d.h. nach Aufbau des Vakuums wurden die Halteschrauben des Vakuumdeckels bis auf 2 Stück entfernt (ca. 3 Minuten Zeitersparnis). Es wurde davon abgesehen, alle Schrauben zu entfernen, da bei einem plötzlichen Vakuumleck kein sicheres Halten des Vakuumdeckels gewährleistet werden konnte. Bei den internen Bestrahlungen wurde die Zusammenarbeit mit den KIZ-Operateuren optimiert, so daß als einziger Zeitbedarf der automatische Transport des Bestrahlungskopfes vom Zyklotron zum Präparationsraum (ca. 3 Minuten) in Kauf genommen werden mußte.

Reaktionstyp	Produktnuklid
(α, xn)	^{57}Ni , ^{56}Ni
(α, pxn)	$^{58}\text{Co}_g$, ^{57}Co , ^{56}Co , ^{55}Co
($\alpha, \alpha xn$)	$^{53}\text{Fe}_{g+m}$, $^{52}\text{Fe}_g$
($\alpha, 3pxn$) bzw. ($\alpha, \alpha pxn$)	^{56}Mn , ^{54}Mn , $^{52}\text{Mn}_{g+m}$
($\alpha, \alpha 2pxn$) bzw. ($\alpha, 2\alpha xn$)	^{51}Cr , ^{49}Cr
($\alpha, 5pxn$) bzw. ($\alpha, \alpha 3pxn$) bzw. ($\alpha, 2\alpha pxn$)	^{52}V , ^{48}V
($\alpha, 2\alpha 3p$) bzw. ($\alpha, 3\alpha pxn$)	^{47}Sc

Tabelle 4-3: Zusammenstellung aller identifizierten Produktnuklide α -induzierter Reaktionen

Die Messung der Targetfolien wurde ebenfalls derart vorbereitet, daß die Targetfolien nur noch vor dem Detektor positioniert werden mußten. Die Durchführung der Messung mit der Gamma-Vision-Software wurde mittels kurzer Prozeduren (Hilfsprogramme) programmiert, so daß nach Anbringen der Targetfolie nur noch die Prozedur gestartet werden mußte. Die Folien wurden in der Regel einen Tag lang ausgemessen, da das Bestrahlungsprogramm pro Tag eine Bestrahlung vorsah. Nach dem Start der Messung wurde alle 200 Sekunden ein Meßspektrum in den Puffer geschrieben (Zeitaufwand $t < 1$ ms) und eine neue Messung gestartet. Danach wurde das gepufferte Spektrum auf Festplatte abgespeichert. Durch die Zwischenpufferung konnte ein quasi kontinuierlicher Meßvorgang erreicht werden, da bei 1000 abgespeicherten Spektren nur ca. 1 Sekunde Meßzeit verlorengeht, was $1/200000 = 5$ ppm entspricht. Dieser Meßzeitverlust kann ohne Korrektur vernachlässigt werden. Es wurden pro Tag ca. 400 Spektren aufgezeichnet, was einem Speicherplatzbedarf von ca. 8 Mbyte entspricht.

E_{α} [MeV]	^{57}Ni	^{56}Ni	^{58}Co	^{57}Co	^{56}Co	^{55}Co	$^{59}\text{Fe}_g$	$^{59}\text{Fe}_m$	^{52}Fe
$103,6 \pm 0,7$	1,83 $\pm 0,26$	0,19 $\pm 0,04$	23,1 $\pm 3,3$	75,4 $\pm 10,6$	62,7 $\pm 8,9$	13,1 $\pm 1,9$			
$99,7 \pm 1,0$	1,91 $\pm 0,27$	0,21 $\pm 0,03$	24,9 $\pm 3,5$	82,7 $\pm 11,7$	63,4 $\pm 8,9$	14,9 $\pm 2,1$			
$95,4 \pm 1,3$	2,20 $\pm 0,31$	0,23 $\pm 0,03$	27,0 $\pm 3,8$	89,3 $\pm 12,6$	66,6 $\pm 9,4$	16,9 $\pm 2,8$			
$94,6 \pm 0,7$	1,73 $\pm 0,28$	0,23 $\pm 0,06$	15,4 $\pm 2,8$	89,6 $\pm 15,4$	69,8 $\pm 12,0$	15,3 $\pm 2,5$	15,3 $\pm 2,6$	5,55 $\pm 0,93$	1,10 $\pm 0,19$
$91,0 \pm 1,7$	2,40 $\pm 0,34$	0,27 $\pm 0,04$	27,8 $\pm 3,9$	96,6 $\pm 13,7$	69,5 $\pm 9,7$	14,2 $\pm 2,5$			
$84,5 \pm 0,7$	2,19 $\pm 0,31$	0,31 $\pm 0,07$	22,1 $\pm 3,1$	108 ± 15	73,3 $\pm 10,7$	17,0 $\pm 2,4$	12,2 $\pm 1,8$	4,44 $\pm 0,65$	0,957 $\pm 0,137$
$78,5 \pm 2,3$	3,27 $\pm 0,46$	0,38 $\pm 0,08$	16,6 $\pm 3,4$	143 ± 23	94,5 $\pm 15,1$	17,7 $\pm 2,5$	12,0 $\pm 1,8$	3,49 $\pm 0,55$	1,05 $\pm 0,15$
$74,5 \pm 0,7$	3,54 $\pm 0,50$	0,46 $\pm 0,08$	35,8 $\pm 5,1$	153 ± 21	106 ± 15	20,9 $\pm 3,0$	13,0 $\pm 1,9$	2,85 $\pm 0,42$	0,705 $\pm 0,105$
$64,5 \pm 0,7$	4,91 $\pm 0,69$	0,52 $\pm 0,09$	48,3 $\pm 6,8$	171 ± 24	148 ± 21	12,1 $\pm 1,7$	19,1 $\pm 2,8$	7,08 $\pm 1,00$	0,312 $\pm 0,048$
$63,1 \pm 1,3$	4,98 $\pm 0,71$	0,63 $\pm 0,10$	51,9 $\pm 7,3$	207 ± 29	144 ± 20	10,5 $\pm 1,5$	20,7 $\pm 3,0$	9,10 $\pm 1,29$	0,279 $\pm 0,043$
$54,4 \pm 0,8$	9,76 $\pm 1,38$	0,47 $\pm 0,08$	69,4 $\pm 9,8$	297 ± 42	146 ± 21	6,08 $\pm 0,86$	8,24 $\pm 1,20$	3,38 $\pm 0,49$	0,375 $\pm 0,055$
$44,3 \pm 0,9$	18,6 $\pm 2,7$	0,32 $\pm 0,07$	131 ± 18	537 ± 76	32,8 $\pm 5,0$	7,18 $\pm 1,02$	1,90 $\pm 0,28$	0,410 $\pm 0,078$	0,175 $\pm 0,027$
$34,2 \pm 1,0$	5,81 $\pm 0,82$	0,31 $\pm 0,05$	378 ± 54	368 ± 52	28,1 $\pm 4,2$	3,19 $\pm 0,45$	3,78 $\pm 0,56$	0,920 $\pm 0,140$	0,016 $\pm 0,007$

Tabelle 4-4: Experimentelle Werte (Angaben in mbarn) der α -induzierten Anregungsfunktionen in ^{56}Fe (^{57}Ni bis ^{52}Fe)

Durch die kontinuierliche Messung war es möglich, für die Auswertung 3 Zeitbereiche einzuteilen ($T_{1/2} < 10$ Minuten, 10 Minuten $< T_{1/2} < 1$ Stunde, $T_{1/2} > 1$ Stunde). Um die Nuklide der verschiedenen Halbwertszeiten optimal auswerten zu können, wurden die Spektren in verschiedenen Zeitfenstern aufintegriert. So wurden für die $T_{1/2} < 10$ Minuten die ersten 5 Spektren aufsummiert. Für die zweite Gruppe 10 Minuten $< T_{1/2} < 1$ Stunde

wurden die Spektren 10 - 100 aufintegriert und für die dritte Gruppe, $T_{1/2} > 1$ Stunde, wurden die Spektren 150 - 400 aufintegriert. Damit wurde erreicht, daß die hohen Anfangsaktivitäten nicht als störender Untergrund auf die Spektren für mittlere bzw. lange Halbwertszeiten einwirken konnten. Es wurde damit besonders im unteren γ -Energiebereich eine gute Verbesserung des Peak zu Untergrund-Verhältnisses erzielt. Desweiteren wurden durch diese Methode Mehrdeutigkeiten bei den γ -Linien ausgeschaltet. Dies trifft z.B. auf die 1434 keV Linie zu, die durch ^{52}V ($T_{1/2} = 3,75$ m), $^{52}\text{Mn}_m$ ($T_{1/2} = 21,3$ m) und $^{52}\text{Mn}_g$ ($T_{1/2} = 5,7$ d) besetzt ist. Nach den ersten 10 gemessenen Spektren plus ca. 5 Minuten Transportzeit der Targetfolie sind für das Nuklid ^{52}V bereits 10 $T_{1/2}$ vergangen. Genauso sind nach 150 gemessenen Spektren für das Nuklid $^{52}\text{Mn}_m$ 23 $T_{1/2}$ vergangen. D.h. die einzelnen Nuklide können voneinander entkoppelt ausgemessen werden, wobei der Einfluß der Nuklide mit mittleren bzw. langen Halbwertszeiten auf die Messung der Nuklide mit kurzen Halbwertszeiten, wenn notwendig, korrigiert werden kann.

Es ist eindeutig, daß eine ausgeklügelte Meß- bzw. Analysemethode notwendig ist, um mit der γ -Spektroskopie gute Ergebnisse zu erzielen. Die gemessenen Anregungsfunktionen werden im folgenden diskutiert.

E_α [MeV]	^{56}Mn	^{54}Mn	$^{52}\text{Mn}_g$	$^{52}\text{Mn}_m$	^{51}Cr	^{49}Cr	^{52}V	^{48}V	^{47}Sc
$103,6 \pm 0,7$		147 ± 21	72,8 $\pm 10,3$		153 ± 22			29,0 $\pm 4,1$	0,641 $\pm 0,093$
$99,7 \pm 1,0$		135 ± 19	75,3 $\pm 10,6$		144 ± 21			24,4 $\pm 3,4$	0,518 $\pm 0,074$
$95,4 \pm 1,3$		135 ± 19	80,4 $\pm 11,4$		130 ± 18			18,2 $\pm 2,6$	0,452 $\pm 0,065$
$94,6 \pm 0,7$	6,80 $\pm 1,15$	164 ± 27	91,8 $\pm 15,2$	1,97 $\pm 0,28$	176 ± 31	8,29 $\pm 1,37$	51,2 $\pm 8,5$	25,7 $\pm 4,3$	0,573 $\pm 0,107$
$91,0 \pm 1,7$		122 ± 17	86,5 $\pm 12,3$		105 ± 15			11,0 $\pm 1,6$	0,406 $\pm 0,059$
$84,5 \pm 0,7$	6,81 $\pm 0,99$	129 ± 19	105 ± 15	1,87 $\pm 0,27$	92,2 $\pm 14,6$	6,26 $\pm 0,89$	42,9 $\pm 6,1$	7,00 $\pm 1,02$	0,407 $\pm 0,073$
$78,5 \pm 2,3$	8,38 $\pm 1,19$	104 ± 18	97,8 $\pm 13,9$	2,15 $\pm 0,31$	60,0 $\pm 14,2$	1,90 $\pm 0,27$	61,2 $\pm 8,8$	4,05 $\pm 0,76$	0,390 $\pm 0,071$
$74,5 \pm 0,7$	8,47 $\pm 1,21$	117 ± 17	105 ± 15	1,62 $\pm 0,23$	49,5 $\pm 10,5$	2,45 $\pm 0,35$	25,3 $\pm 3,5$	4,41 $\pm 0,66$	0,372 $\pm 0,090$
$64,5 \pm 0,7$	8,18 $\pm 1,17$	116 ± 17	27,4 $\pm 3,9$	0,534 $\pm 0,120$	47,5 $\pm 9,2$	0,763 $\pm 0,110$	10,3 $\pm 1,5$	2,27 $\pm 0,38$	0,270 $\pm 0,052$
$63,1 \pm 1,3$	8,02 $\pm 1,15$	121 ± 18	21,7 $\pm 3,1$	0,446 $\pm 0,100$	47,9 $\pm 8,3$	0,799 $\pm 0,115$	10,4 $\pm 1,5$	3,75 $\pm 0,59$	0,083 $\pm 0,038$
$54,4 \pm 0,8$	3,20 $\pm 0,47$	171 ± 25	13,1 $\pm 1,9$	0,288 $\pm 0,065$	47,7 $\pm 7,7$	0,914 $\pm 0,130$	5,56 $\pm 0,80$	0,544 $\pm 0,231$	
$44,3 \pm 0,9$	0,373 $\pm 0,080$	179 ± 25	13,3 $\pm 1,9$	0,037 $\pm 0,012$	18,3 $\pm 5,8$	0,074 $\pm 0,011$	6,18 $\pm 0,88$		
$34,2 \pm 1,0$	0,372 $\pm 0,074$	15,8 $\pm 3,0$	1,08 $\pm 0,17$	0,018 $\pm 0,005$	5,50 $\pm 4,13$		0,386 $\pm 0,060$		

Tabelle 4-5: Experimentelle Werte (Angaben in mbarn) der α -induzierten Anregungsfunktionen in ^{56}Fe (^{56}Mn bis ^{47}Sc)

In die Plots der Anregungsfunktionen sind neben den experimentellen Werten auch theoretische Vorhersagen, berechnet mit dem ALICE-91-Code, eingezeichnet. Zum einen wurde mit Standardparametern gerechnet (Fermi-Level-Density (FLD)) und zum andern wurde berücksichtigt, daß durch α -Reaktionen mit ^{nat}Fe Compoundkerne in der Nickelregion gebildet werden, die mit $Z = 28$ als Magische Kerne bezeichnet werden können. Da Magische Kerne in Bezug auf Kernanregung und Kernabregung anders reagieren als „gewöhnliche“ Kerne, wurde zur Korrektur der Schalenefekte mit einer spinabhängigen Zustandsdichte (Kataria-Ramamurthy-Level-Density (KRLD)) gerechnet. Da beide theoretische Kurven in die Anregungsfunktionsplots eingezeichnet sind, kann ein Vergleich gemacht werden, bei welchen Kernen FLD und bei welchen Kernen KRLD zutrifft. In den Tabellen 4-4 und 4-5 sind die experimentellen Werte der α -induzierten Anregungsfunktionen in reinem Eisen dieser Arbeit aufgelistet.

Der (α, xn) - Kanal

Die Reaktionen vom Typ (α, xn) führen auf Ni-Nuklide. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, xn)^{57}\text{Ni}$

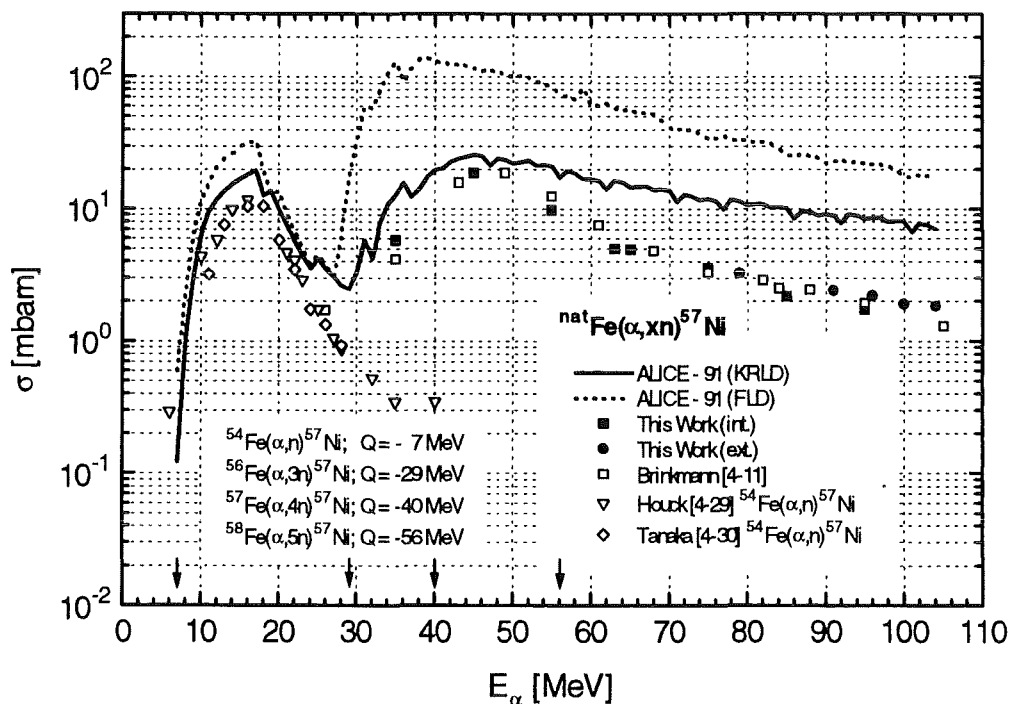


Abbildung 4-8: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, xn)^{57}\text{Ni}$ -Reaktion

Das ^{57}Ni -Nuklid ($T_{1/2} = 36,1$ h) konnte anhand der γ -Linie 1377,6 keV (84,9 %) identifiziert werden. Für das ^{57}Ni -Nuklid liegen experimentelle Daten aus Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den

Verlauf der Anregungsfunktion, induziert durch $(\alpha, 3n)$, $(\alpha, 4n)$ und $(\alpha, 5n)$ Prozesse, oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-8 abgebildet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen.

Die Werte decken sich sehr gut mit der Messung von Brinkmann [4-11]. Im Energiebereich < 30 MeV liegen Literaturdaten von Houck [4-29] und Tanaka [4-30] vor, die ein Maximum bei ca. 18 MeV, induziert durch den (α, n) Prozeß in ^{54}Fe , in guter Übereinstimmung aufweisen.

Werden die experimentellen Werte mit den theoretischen Rechnungen von ALICE-91 verglichen, so zeigt sich, daß die KRLD-Daten weit besser den experimentellen Werten folgen als die FLD-Daten. Dies gilt besonders für den Energiebereich oberhalb 30 MeV. Die KRLD-Daten sind in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten bis ca. 50 MeV. Oberhalb 50 MeV fällt KRLD ebenfalls wesentlich flacher ab als die Meßdaten. Diese Diskrepanz wird bei der Maximalenergie ($E_{\alpha} = 104$ MeV) am deutlichsten, bei der KRLD ca. einen Faktor 4 zu hoch liegt. Diese Anregungsfunktion zeigt eindeutig, daß die Kernkräfte einen spinabhängigen Anteil besitzen, der bei Magischen Kernen (Ni, $Z = 28$) besonders ausgeprägt ist. Eine weitere Begründung für die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment bei hohen Energien könnte der Pre-Compound-Mechanismus sein. Der ALICE-91-Code kann nur beim (α, n) -Prozeß precompound-Reaktionen berücksichtigen. Dies bedeutet für die (α, xn) -Prozesse bei höheren Energien, daß durch Precompound-Reaktionen, die auf andere Endprodukte führen können, der Compound-Anteil verringert werden kann. Somit würden die experimentellen Resultate besser den theoretischen Werten entsprechen.

Es soll noch zusätzlich erwähnt werden, daß durch Einführung von KRLD gegenüber FLD eine Verbesserung von teilweise mehr als einem Faktor 10 (30 - 45 MeV-Bereich) erzielt wurde.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, xn)^{56}\text{Ni}$

Das ^{56}Ni -Nuklid ($T_{1/2} = 6,1$ d) konnte anhand der γ -Linien 750,6 keV (53,8 %) und 158,3 keV (99,0 %) identifiziert werden. Eine dritte starke γ -Linie bei 812,2 keV (90,5 %), die benachbart zur ^{58}Co -Linie bei 810,8 keV (99,5 %) liegt, konnte nach Entfaltung ebenfalls zur Auswertung herangezogen werden. Eine Entfaltung der dicht benachbarten Linien war möglich, da die Auflösung des γ -Spektrometers bei 800 keV bei ca. 1,0 keV lag.

Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2-4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion, induziert durch $(\alpha, 4n)$, $(\alpha, 5n)$ und teilweise $(\alpha, 2n)$ ($E < 44$ MeV) Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-9 abgebildet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen. Zum ersten Mal wurden experimentelle Daten bei Energien oberhalb 87 MeV bestimmt. Über den Energiebereich 40 - 87 MeV zeigen die experimentellen Daten gute Übereinstimmung mit Brinkmann [4-11]. Die Literaturdaten von Houck [4-29] und Tanaka [4-30] beschreiben den Bereich von der

Reaktionsschwelle (18 MeV) bis zu 40 MeV in guter gegenseitiger Übereinstimmung. Der experimentelle Wert bei 35 MeV liegt im Vergleich mit Houck und Tanaka etwas zu tief. Die Daten von Ewart [4-32] im Bereich 50 - 70 MeV zeigen eine große Streubreite und liegen tendenziell etwas zu niedrig. Der Grund der etwas zu niedrig liegenden Werte ist der, daß Ewart mit einem angereichernten ^{56}Fe -Target gearbeitet hat und nur den Prozeß $^{56}\text{Fe}(\alpha,4n)^{56}\text{Ni}$ gemessen hat. Die auftretende Differenz läßt sich dann durch den fehlenden Anteil $^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha 2n)^{56}\text{Ni}$ erklären.

Beim Vergleich der experimentellen Daten mit den theoretischen ALICE-91-Werten zeigt sich analog zur ^{57}Ni -Diskussion, daß die KRLD-Werte weit besser den experimentellen Daten entsprechen als die FLD-Werte, teilweise sogar um mehr als eine Faktor 10. Die bei der KRLD-Kurve oberhalb 50 MeV in periodischen Abständen auftretenden Peaks spiegeln keine Physik wieder, sondern sind Rechenungenauigkeiten zuweisbar, wie sie bei der numerischen Integration der zu lösenden Integrale auftreten. Die KRLD-Kurve liegt dennoch über den gesamten Energiebereich ca. einen Faktor 3 oberhalb der experimentellen Werte. Auch zeigt KRLD kein so deutliches Minimum bei ca. 50 MeV wie die experimentellen Daten. Analog zu ^{57}Ni tritt auch hier bei hohen Energien ein deutlich stärkerer Abfall der Anregungsfunktion auf als KRLD berechnet. Erstaunlicherweise tritt im Bereich $^{54}\text{Fe}(\alpha,2n)^{56}\text{Ni}$ (18 - 44 MeV) eine deutliche Abweichung zwischen Experiment und Theorie auf, obwohl ALICE-91 für den $(\alpha,2n)$ -Prozeß den precompound-Anteil berücksichtigt.

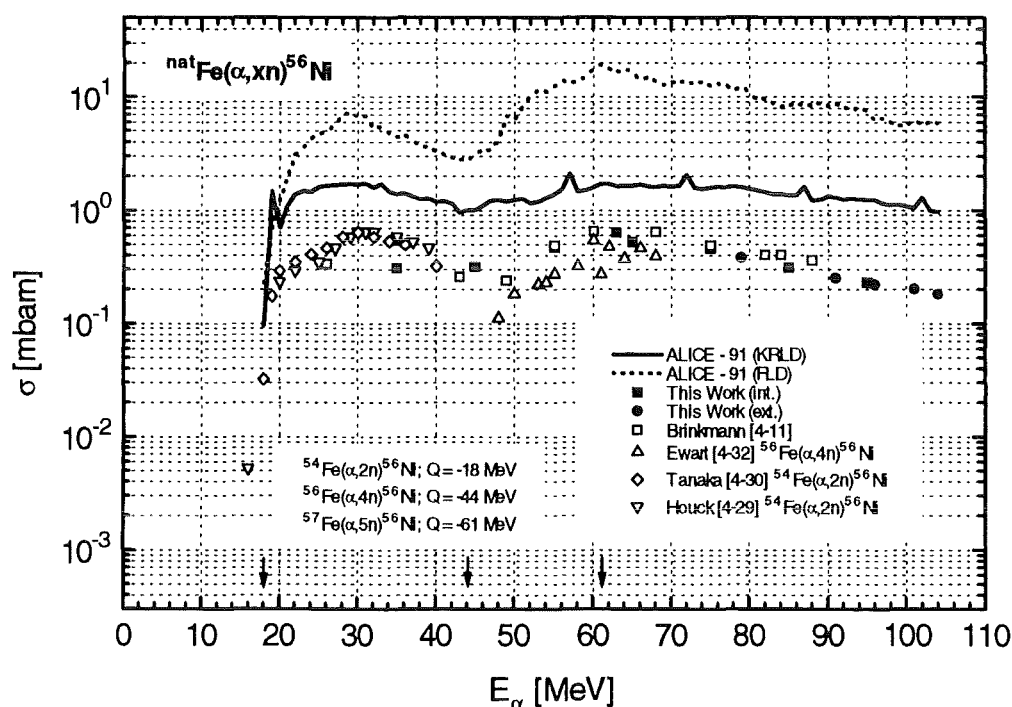


Abbildung 4-9: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, xn)^{56}\text{Ni}$ -Reaktion

Der (α ,pxn) - Kanal

Die Reaktionen vom Typ (α ,pxn) führen auf Co-Nuklide. In der folgenden Diskussion wird sich zeigen, daß der KRLD-Ansatz die Prozesse der (α ,pxn)-Familie sehr gut beschreibt. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha,pxn)^{58}\text{Co}_{g+m}$

Beim ^{58}Co -Nuklid konnte nur das ^{58}Co -Isomer, $^{58}\text{Co}_g$ ($T_{1/2} = 70,78$ d), gemessen werden. Das Isomer $^{58}\text{Co}_m$ ($T_{1/2} = 9,15$ h) lag mit $E_\gamma = 24,2$ keV außerhalb des Meßbereichs. $^{58}\text{Co}_g$ konnte anhand der γ -Linie 810,8 keV (99,5 %) identifiziert werden. Diese γ -Linie liegt jedoch direkt benachbart zur ^{56}Ni γ -Linie bei 812,2 keV (91,5 %) und konnte nur durch Entfaltung des Dubletts zur Auswertung herangezogen werden. Eine Entfaltung der direkt benachbarten Linien war möglich, da die Auflösung des γ -Spektrometers bei 800 keV bei ca. 1,0 keV lag.

Die Entfaltung der Linien wurde folgendermaßen vorgenommen: Das ^{56}Ni -Nuklid besitzt noch 2 weitere meßbare Linien, aus denen die Nuklidaktivität bestimmt werden konnte. Geht die Aktivität des 812,2 keV Peaks mit diesen beiden Linien konform, so wurden die Entfaltungsparameter richtig gewählt. Daraus folgte, daß die Aktivität des $^{56}\text{Co}_g$ Nuklids korrekt erhalten wurde.

Es liegen experimentelle Daten aus Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion, induziert durch (α ,pn), (α ,p2n) und (α ,p3n) Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-10 abgebildet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen.

Die experimentellen Werte dieser Arbeit zeigen einen kontinuierlichen Abfall der Anregungsfunktion oberhalb des Maximums, das bei 30 MeV liegt. Der externe Meßpunkt bei 79 MeV streut etwas nach unten. Die Folienstapel-Messungen liegen etwas oberhalb der internen Meßpunkte. Der Vergleich der Daten dieser Arbeit mit den Brinkmann [4-11] Daten zeigt, daß die Brinkmann-Werte bis zu einem Faktor 2 oberhalb dieser Messung liegen. Die Literaturdaten von Ewart [4-32] zeigen den Verlauf der $^{56}\text{Fe}(\alpha, pn)^{58}\text{Co}$ Reaktion. Ewart verwendete eine hochangereicherte ^{56}Fe -Folie, um die restlichen Prozesse auszuschließen. Die Ewart-Daten zeigen sehr gut den Verlauf ab der Reaktionsschwelle (17 MeV) bis zu 40 MeV. Oberhalb 40 MeV liegen die Daten unterhalb der anderen experimentellen Werte, was aber durch das Fehlen der (α , p2n) bzw. (α , p3n) in ^{57}Fe bzw. ^{58}Fe -Anteile erklärt werden kann.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 geben sowohl mit FLD als auch mit KRLD eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Unterschiede zwischen FLD und KRLD sind gering (maximal Faktor 2 bei 30 MeV). ALICE-91 berechnet die Anregungsfunktion für beide $^{58}\text{Co}_{g+m}$ Isomere zusammen. Da die Differenz zu den experimentellen Daten von $^{58}\text{Co}_g$ sehr gering ist, ist anzunehmen, daß der $^{58}\text{Co}_m$ -Anteil an

der Gesamtanregungsfunktion sehr gering sein muß. Zusätzlich berücksichtigt ALICE-91 bei (α, pn) Reaktionkanal auch den precompound-Anteil, der jedoch bei Energien von 17 - 40 MeV noch keinen sehr großen Anteil von der Gesamtanregungsfunktion ausmacht.

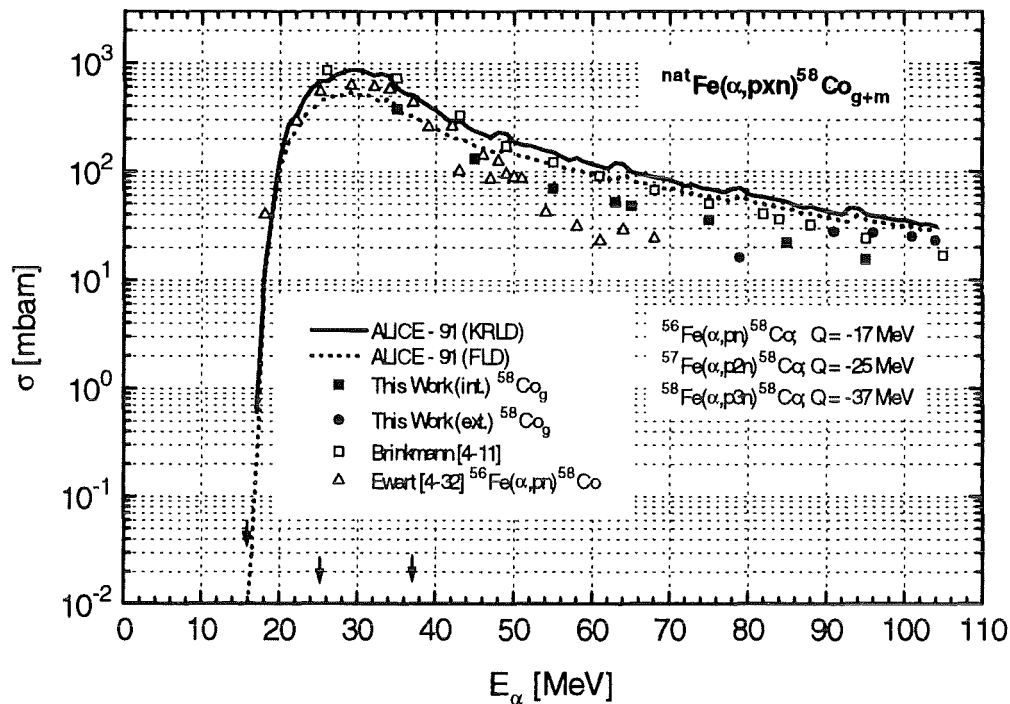


Abbildung 4-10: Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\alpha, \text{pxn}) {}^{58}\text{Co}_{\text{g+m}}$ -Reaktion

${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\alpha, \text{pxn}) {}^{57}\text{Co}$

Das ${}^{57}\text{Co}$ -Nuklid ($T_{1/2} = 271,77$ d) konnte anhand der γ -Linien bei 122,1 keV (85,6 %) und bei 136,4 keV (10,6 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, p2n)$, $(\alpha, p3n)$ und $(\alpha, p4n)$ Prozesse oberhalb 35 MeV. Der (α, p) Prozeß in ${}^{54}\text{Fe}$ konnte nicht erfaßt werden, da er mit $Q = -5$ MeV deutlich unterhalb des ersten Meßpunktes bei 35 MeV beginnt und bei 35 MeV fast keine Bedeutung mehr hat. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-11 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen.

Die experimentellen Werte dieser Arbeit erfassen das Maximum der Anregungsfunktion und zeigen zu höheren Energien hin einen kontinuierlichen Abfall. Ein Vergleich mit Brinkmann [4-11] zeigt eine sehr gute Übereinstimmung über den gesamten Energiebereich von 35 - 104 MeV. Zur Beschreibung des niederenergetischen Anteils der ${}^{57}\text{Co}$ -Anregungsfunktion sind Literaturdaten von Houck [4-29] und Tanaka [4-30] vorhanden. Beide Autoren verwendeten hochangereicherte ${}^{54}\text{Fe}$ -Targetfolien und erzielten sehr gut übereinstimmende Resultate. Die Datenpunkte von Houck im Energiebereich 25 - 35 MeV zeigen den weiteren Verlauf der ${}^{54}\text{Fe}(\alpha, p){}^{57}\text{Co}$ -Reaktion. Die Literaturdaten von Ewart [4-23] zeigen den in angereicherterem ${}^{56}\text{Fe}$ gemessenen Verlauf der ${}^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n){}^{57}\text{Co}$ -Reaktion. Die Daten liegen zum einen tendenziell etwas zu niedrig, was

sich aber durch das Fehlen der restlichen Prozesse erklären läßt, zum anderen sind die Meßwerte etwas zu höheren Energien hin verschoben, was auf Unsicherheiten bei der Energiebestimmung in Folienstapeln durch ungenau bekannte Teilchenreichweiten schließen läßt. Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 geben im Energiebereich oberhalb 30 MeV sowohl mit FLD, als auch mit KRLD eine erstaunlich gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Einzig im Energiebereich 15 - 25 MeV zeigen die FLD-Rechnungen um einen Faktor 5 zu geringe Werte, während die KRLD-Rechnungen exakt dem experimentellen Verlauf folgen. Dies heißt, daß mit dem KRLD-Ansatz die ^{57}Co -Anregungsfunktion in reinem Eisen über den gesamten Energiebereich von der Reaktionsschwelle (5 MeV) bis zu 104 MeV sehr gut beschrieben wird.

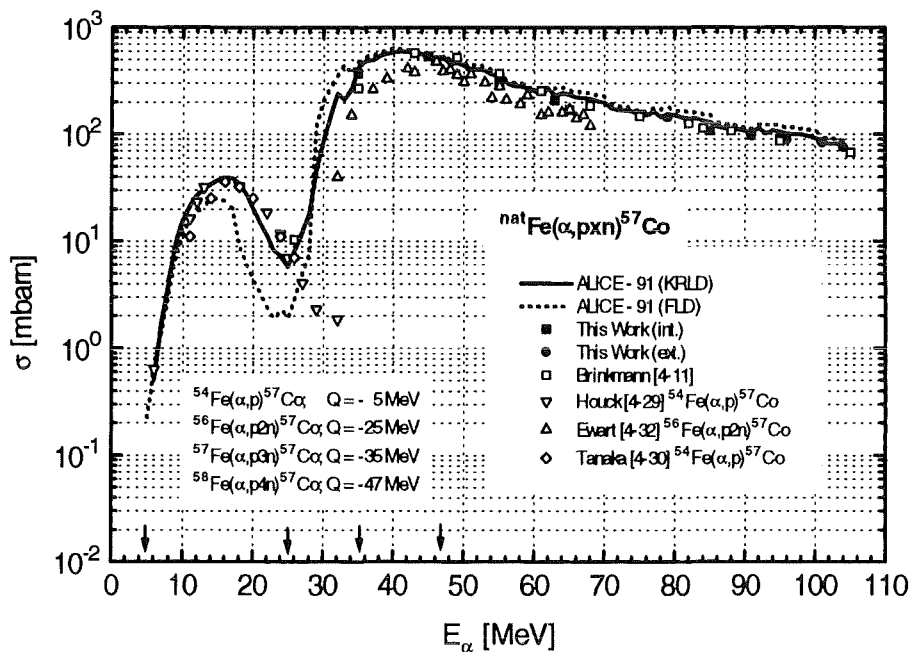


Abbildung 4-11: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha,pxn)^{57}\text{Co}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(\alpha,pxn)^{56}\text{Co}$

Das ^{56}Co -Nuklid ($T_{1/2} = 77,1$ d) konnte anhand der γ -Linien 1238,3 keV (67,6 %), 2598,6 keV (16,9 %) und 1.771,5 keV (15,7 %) identifiziert werden. Die Hauptlinie des ^{57}Co -Nuklids, 846,8 keV (99,9 %), überlappt stark mit der ^{56}Mn -Linie 846,6 keV (99,0 %) und konnte trotz der guten spektrometrischen Auflösung bei 850 keV von 1,05 keV nicht zur Auswertung herangezogen werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion, induziert durch $(\alpha, p3n)$, $(\alpha, p4n)$, $(\alpha, p5n)$ und teilweise (α, pn) Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-12 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen. Die experimentellen Werte dieser Arbeit erfassen das Maximum der ^{56}Co -Anregungsfunktion

bei ca. 60 MeV und zeigen zu höheren Energien hin nur einen schwachen Abfall. Ein Vergleich dieser Werte mit den Literaturdaten von Brinkmann [4-11] zeigt über den gesamten Energiebereich von 35 - 104 MeV eine sehr gute Übereinstimmung. Die Literaturdaten von Ewart [4-32] zeigen den in angereicherterem ^{56}Fe gemessenen Verlauf der $^{56}\text{Fe}(\alpha, p3n)^{56}\text{Co}$ -Reaktion. Die Daten zeigen eine große Streubreite und liegen tendenziell unterhalb von den anderen experimentellen Daten, was sich durch das Fehlen der Prozesse (α, pn) und $(\alpha, p4n)$ in ^{54}Fe bzw. ^{57}Fe erklären läßt. Im Energiebereich unterhalb 40 MeV tritt nur der (α, pn) Prozeß in ^{54}Fe auf, der durch Literaturdaten von Houck [4-29] und Tanaka [4-30] eindrucksvoll belegt wird. Diese Literaturdaten sind in sehr guter Übereinstimmung mit den Brinkmann-Daten und dem 35 MeV Meßpunkt dieser Arbeit.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 sind im Energiebereich bis 40 MeV sowohl bei den FLD-Rechnungen als auch bei den KRLD-Rechnungen in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Oberhalb 40 MeV beschreiben nur noch die KRLD-Rechnungen den Verlauf der experimentellen Werte sehr gut, während die FLD-Rechnungen um ca. einen Faktor 2 die Werte zu groß berechnen. Oberhalb 75 MeV zeigen dann auch die KRLD-Werte Abweichungen bis zu 20 % von den experimentellen Daten.

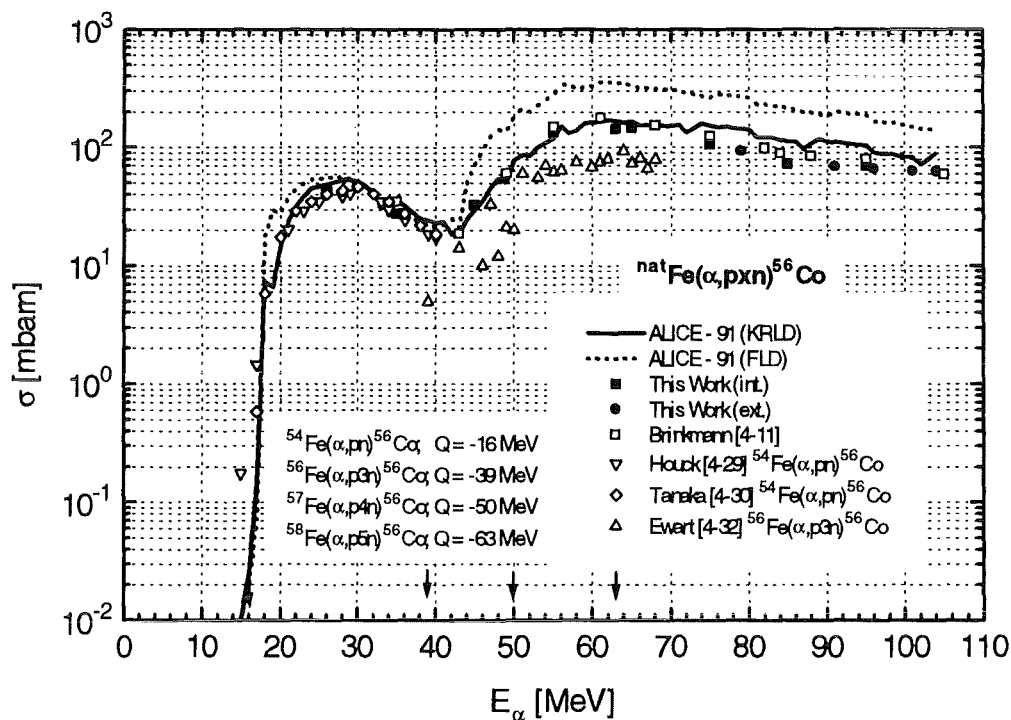


Abbildung 4-12: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, pxn)^{56}\text{Co}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, pxn)^{55}\text{Co}$

Das ^{55}Co -Nuklid ($T_{1/2} = 17,54$ h) konnte anhand der γ -Linien 931,5 keV (75,0 %) und 477,2 keV (20,3 %) identifiziert werden. Dieses Nuklid hat gegenüber den anderen

Co-Nukliden schon eine relativ kurze Halbwertszeit, die jedoch meßtechnisch kein Problem darstellte. Die 931,5 keV-Linie liegt direkt benachbart zur 935,6 keV (93,0 %)-Linie des $^{52}\text{Mn}_g$ ($T_{1/2} = 5,59$ d) Nuklids. Die gute spektroskopische Energieauflösung von $\sim 1,1$ keV bei 950 keV erlaubt es jedoch, diese beiden Linien problemlos getrennt auszuwerten.

Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, p2n)$, $(\alpha, p4n)$, $(\alpha, p5n)$ und $(\alpha, p6n)$ Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-13 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen. Die experimentellen Werte dieser Arbeit erfassen den Verlauf der Anregungsfunktion fast vollständig, da die niedrigste Reaktionsschwelle bei 27 MeV liegt.

Ein Vergleich dieser Werte mit den Literaturdaten von Brinkmann [4-11] zeigt über den gesamten Energiebereich von 35 - 104 MeV eine gute Übereinstimmung, jedoch ist zu bemerken, daß die Brinkmann-Daten konstant ca. 20 % unterhalb der experimentellen Daten dieser Arbeit liegen. Besonders deutlich wird dies im Bereich 55 - 65 MeV, in dem Brinkmann ein weit ausgeprägtes Minimum im Anregungsfunktionsverlauf gemessen hat. Die Literaturdaten von Ewart [4-32] eignen sich nicht direkt für einen Vergleich, da sie in isopenangereichertem ^{56}Fe gemessen wurden. Sie geben jedoch ein gutes Bild vom Anstieg des $^{56}\text{Fe}(\alpha, p4n)^{55}\text{Co}$ -Prozesses. Es ist zu bemerken, daß die Ewart-Datenpunkte bei Energien unterhalb des von ALICE-91 berechneten Q-Wertes ($Q = -53$ MeV) für den $(\alpha, p4n)$ -Prozeß gemessen hat. Dies läßt auf Ungenauigkeiten bei der Energiebestimmung in einem Folienstapel schließen, was oben bereits diskutiert wurde.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 zeigen für FLD und KRLD deutlich unterschiedliche Resultate. Die KRLD-Rechnungen folgen sehr gut den experimentell gemessenen Werten, während die FLD-Rechnungen bis zu einem Faktor 5 über den KRLD-Rechnungen liegen. Bei Energien oberhalb 80 MeV zeigen auch die KRLD-Rechnungen eine schwache Abweichung von bis zu 30 % nach oben gegenüber den experimentellen Werten. Die Diskrepanz zwischen den FLD- und KRLD-Rechnungen im Vergleich zu den anderen Co-Nukliden kann darin liegen, daß ^{55}Co mit 27 Protonen und 28 Neutronen im Kern eine Magische Neutronenanzahl aufweist. Daß die FLD-Werte relativ zu den KRLD-Werten mit der Neutronenanzahl skalieren, ist durch einen Vergleich der Lage der FLD-Werte, die bei $^{58}\text{Co}_{g+m}$ leicht unterhalb, bei ^{57}Co leicht oberhalb, bei ^{56}Co schon deutlicher oberhalb und bei ^{55}Co dann ganz deutlich oberhalb der KRLD-Werte liegen, nachzuweisen.

Da über die 4 Co-Nuklide gesehen KRLD immer sehr gut die experimentellen Werte beschreibt, kann davon ausgegangen werden, daß im ^{55}Co -Fall die Magische Neutronenanzahl bzw. in den übrigen Fällen der quasi-magische 1-Loch Zustand der Protonen ($Z = 27$) für die gute Übereinstimmung verantwortlich ist.

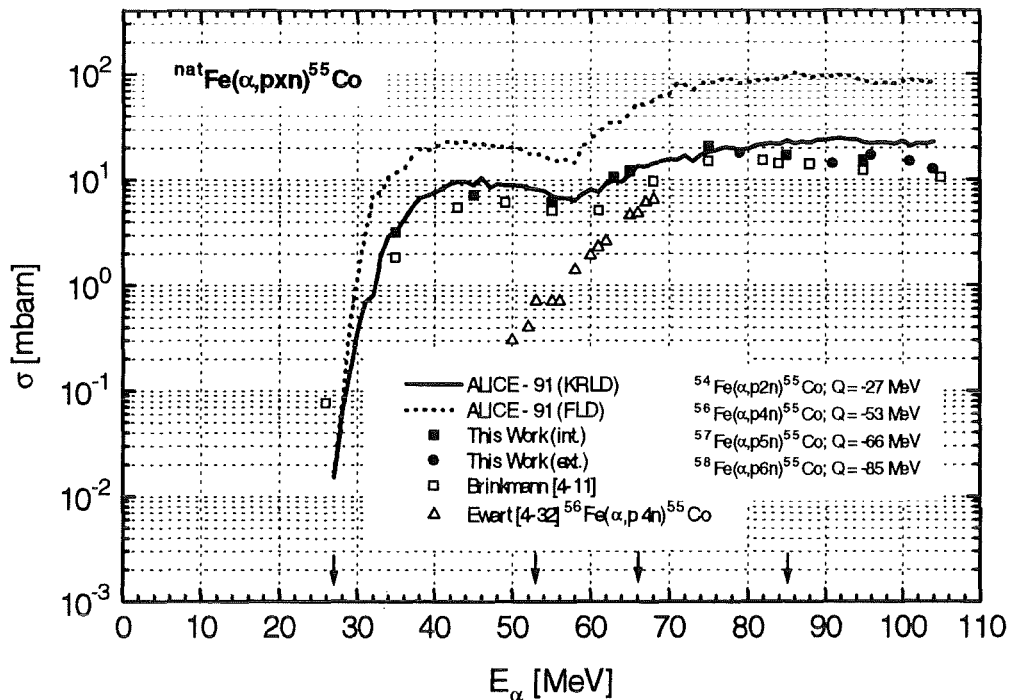


Abbildung 4-13: Anregungsfunktion der ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\alpha, \text{pxn}) {}^{55}\text{Co}$ -Reaktion

Der $(\alpha, \alpha \text{xn})$ - Kanal

Die Reaktionen vom Typ $(\alpha, \alpha \text{xn})$ führen auf Fe-Nuklide. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.

${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\alpha, \alpha \text{xn}) {}^{53}\text{Fe}_{\text{g+m}}$

Beim ${}^{53}\text{Fe}$ -Nuklid konnte ${}^{53}\text{Fe}_{\text{g}}$ ($T_{1/2} = 8,51 \text{ m}$) und sein Isomer ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$ ($T_{1/2} = 2,53 \text{ m}$) gemessen werden. ${}^{53}\text{Fe}_{\text{g}}$ konnte anhand der γ -Linie 168,8 keV (100 %) und das Isomer ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$ anhand der γ -Linien 701,1 keV (98,6 %), 1.328,1 keV (84,8 %) und 1.011,5 keV (83,8 %) identifiziert werden. Beide Nuklide haben eine sehr kurze Halbwertszeit und wurden zum ersten Mal experimentell erfaßt. Die sehr kurze Halbwertszeit machte es notwendig, die Probenhandlung zu optimieren, um nach spätestens 2 - 3 $T_{1/2}$ von ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$ nach Abschalten des Strahls mit der Messung beginnen zu können. Da die Bestrahlungsdauer und die Meßdauer jeweils viel länger andauerten als $T_{1/2}$ von ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$, zeigten die Korrekturen bezüglich der Aktivität (DDI und DDA, siehe Kap. 3.4) einen großen Effekt. Zusätzlich muß bei diesem kurzlebigen Nuklid eine weitere Korrektur durchgeführt werden, da die Zerfallsreihe ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}} \rightarrow {}^{53}\text{Fe}_{\text{g}}$ existiert. Durch die DDI- und DDA-Korrektur wird der Zerfall von ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$ während der Bestrahlungs- und Meßzeit korrigiert, jedoch wird der zusätzliche Zuwachs von ${}^{53}\text{Fe}_{\text{g}}$ durch den ${}^{53}\text{Fe}_{\text{m}}$ Zerfall nicht berücksichtigt. Mittels der in Kap. 3.4 beschriebenen Verfahren wurde dieser zusätzliche Zuwachs während der Strahl- und Meßzeit berechnet. Wie in Anhang C beschrieben, betrifft die Gesamtkorrektur

eine Verringerung der Anregungsfunktion von 35.1 %, wovon 24.6 % während der Strahlzeit und 10.5 % während der Transport- und Meßzeit anfallen.

Es liegen experimentelle Daten aus Messungen mit den Setups 2 und 3 über den Energiebereich von 35 - 95 MeV vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, \alpha n)$, $(\alpha, \alpha 3n)$, $(\alpha, \alpha 5n)$ Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-14 abgebildet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 getrennt für $^{53}\text{Fe}_g$ und $^{53}\text{Fe}_m$ eingetragen.

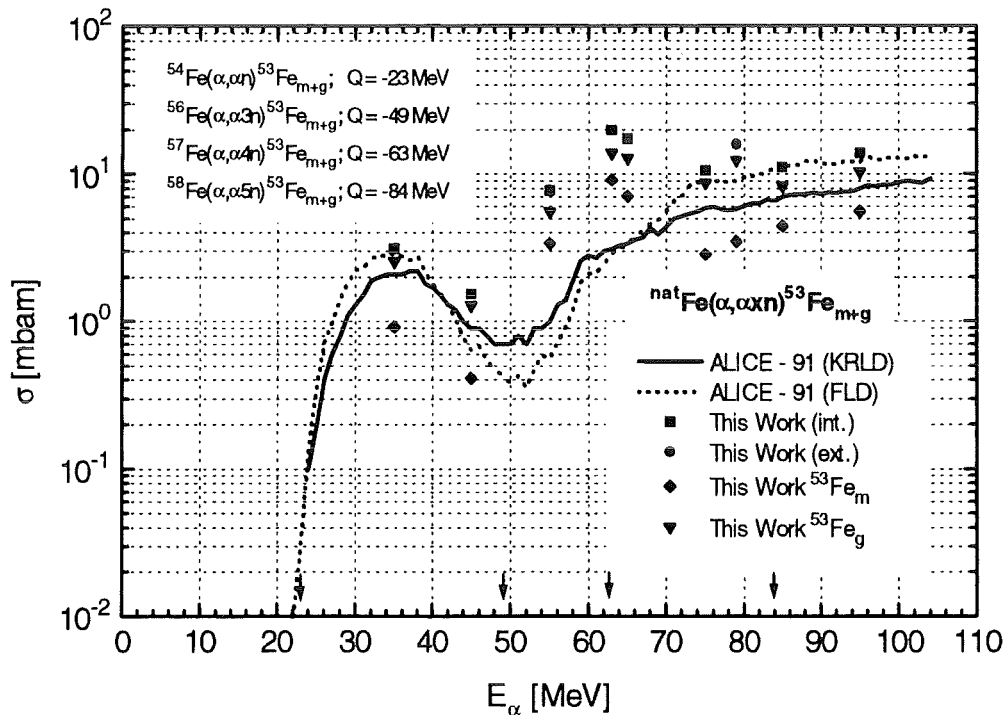


Abbildung 4-14: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \alpha n)^{53}\text{Fe}_{g+m}$ -Reaktion

Die experimentellen Werte dieser Arbeit zeigen, daß der Verlauf von $^{53}\text{Fe}_g$ und $^{53}\text{Fe}_m$ die gleiche Form besitzt. Jedoch liegen die Werte für $^{53}\text{Fe}_m$ über den gesamten Energiebereich ca. um einen Faktor 3 unterhalb den $^{53}\text{Fe}_g$ -Werten. Der Anregungsfunktionsverlauf zeigt zwei Maxima. Das eine Maximum im Energiebereich 30 - 40 MeV wird durch die Reaktion $^{54}\text{Fe}(\alpha, \alpha n)^{53}\text{Fe}_{g+m}$ ($Q = -23$ MeV) hervorgerufen. Das andere Maximum im Bereich um 60 MeV tritt, verglichen mit den langhalbwertszeitigen Nukliden von Co und Ni, sehr deutlich in Erscheinung. Dieses zweite Maximum kann durch den Prozeß $^{56}\text{Fe}(\alpha, \alpha 3n)^{53}\text{Fe}_{g+m}$ ($Q = -49$ MeV) charakterisiert werden. Daß sich diese zwei Maxima derart deutlich differenzieren lassen, liegt zum einen an der großen Differenz der Q-Werte und zum anderen daran, daß der $(\alpha, \alpha 3n)$ -Prozeß ungewöhnlich stark auftritt.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 geben sowohl mit FLD als auch mit KRLD keine sehr gute Übereinstimmung. Selbst die FLD-Werte und die KRLD-Werte variieren untereinander deutlich, so daß teilweise FLD oberhalb KRLD liegt und teilweise umgekehrt.

Generell wird das erste Maximum qualitativ korrekt wiedergegeben. Quantitativ liegt es bei FLD an der richtigen Stelle, bei KRLD jedoch um einen Faktor 1.5 unterhalb den experimentellen Werten. Das zweite Maximum wird von der Theorie nicht beschrieben. Generell gibt die Theorie bei $^{53}\text{Fe}_{g+m}$ ein uneindeutiges Bild ab. Da keine Literaturdaten zu $^{53}\text{Fe}_{g+m}$ vorliegen, kann kein weiterer Vergleich gemacht werden.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \alpha xn)^{52}\text{Fe}$

Das $^{52}\text{Fe}_g$ -Nuklid ($T_{1/2} = 8,3$ h) konnte anhand der γ -Linien bei 168,8 keV (100,0 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus Messungen mit den Setups 2 und 3 über den Energiebereich von 35 - 95 MeV vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, \alpha 3n)$ und $(\alpha, \alpha 4n)$ Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Reaktionsschwelle des Prozesses $(\alpha, \alpha 5n)$ in ^{58}Fe liegt mit 97 MeV oberhalb des experimentell erfaßten Bereichs. Da die niedrigste Reaktionsschwelle bei 37 MeV liegt, konnte der gesamte Verlauf der Anregungsfunktion ausgemessen werden. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-15 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-4 eingetragen. Da die Werte in der Größenordnung von 1 mbarn und kleiner liegen, wurden an die Messung und Auswertung dieser Anregungsfunktion erhöhte Anforderungen gestellt.

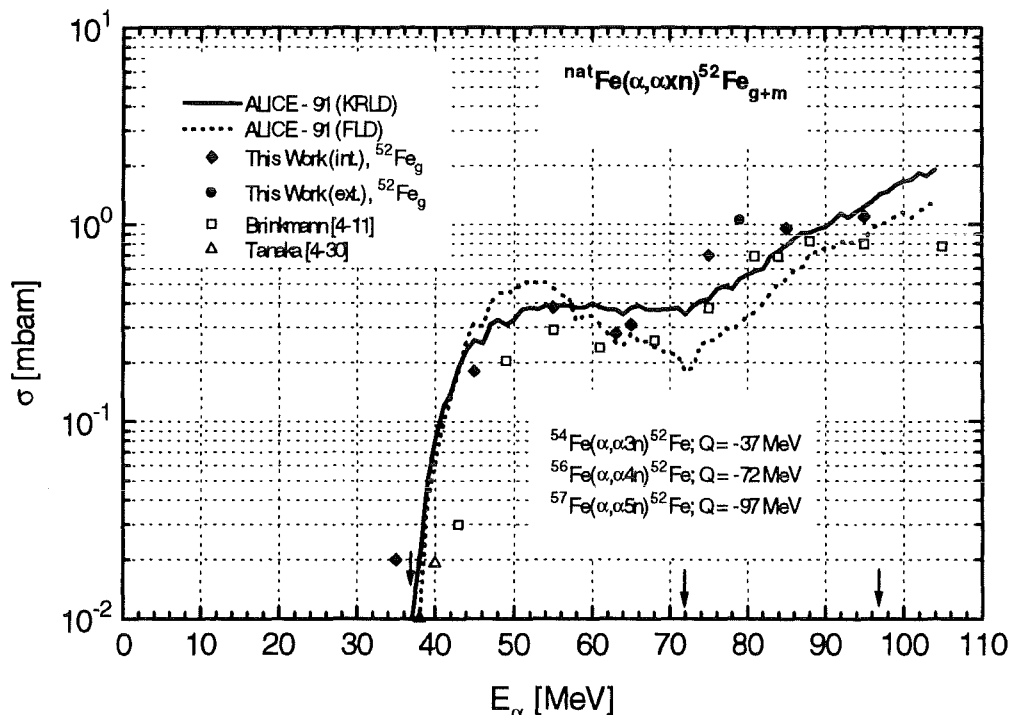


Abbildung 4-15: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \alpha xn)^{52}\text{Fe}_{g+m}$ -Reaktion

Die Werte beschreiben sehr gut den Verlauf des $(\alpha, \alpha 3n)$ Prozesses in ^{54}Fe im Energiebereich 35 - 70 MeV. Oberhalb 70 MeV wird der $(\alpha, \alpha 4n)$ Prozeß in ^{56}Fe

beschrieben. Ein Vergleich mit den vorliegenden Literaturdaten von Brinkmann [4-11] zeigt qualitativ eine sehr gute Übereinstimmung des Anregungsfunktionsverlaufs. Jedoch sind quantitative Abweichungen von 30 - 50 % zu kleineren Werten hin für die Brinkmann-Daten festzustellen. Besonders im Bereich > 70 MeV zeigen die Brinkmann-Daten keinen so deutlichen Anstieg der Anregungsfunktion wie die Meßwerte dieser Arbeit. Die Datenpunkte von Tanaka [4-30] bei 38 und 40 MeV zeigen sehr deutlich den Beginn des Anstiegs der Anregungsfunktion. Der Datenpunkt dieser Arbeit bei 35 MeV ist mit einer großen Unsicherheit von ± 44 % versehen, da es sehr schwierig war, Werte, die im Bereich einiger hundertstel mbarn liegen, experimentell nachzuweisen.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 zeigen für FLD und KRLD keine eindeutige Tendenz. Unterhalb 55 MeV liegen die FLD-Rechnungen oberhalb den KRLD-Rechnungen. Oberhalb 55 MeV ist es umgekehrt. Generell zeigt sich jedoch, daß die KRLD-Rechnungen die experimentellen Werte besser beschreiben.

Der ($\alpha, 3pxn$) - Kanal bzw. ($\alpha, \alpha pxn$) - Kanal

Die Reaktionen von Typ ($\alpha, 3pxn$) bzw. ($\alpha, \alpha pxn$) führen auf Mn-Nuklide. Es wurden mit ^{56}Mn , ^{54}Mn und $^{52}\text{Mn}_{g+m}$ drei Mn-Nuklide identifiziert, wobei bei $^{52}\text{Mn}_{g+m}$ ein Isomer auftritt. Die Anregungsfunktionen werden nach absteigender Masse diskutiert.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \)^{56}\text{Mn}$

Das ^{56}Mn -Nuklid ($T_{1/2} = 2,58$ h) konnte anhand der γ -Linien 1811,2 keV (27,2 %) und 2112,6 keV (14,3 %) identifiziert werden. Die Hauptlinie des ^{56}Mn -Nuklids, 846,6 keV (99,0 %) liegt dicht benachbart zur ^{57}Co -Linie 846,8 (99,9 %) und konnte aber trotz der guten Energieauflösung des γ -Spektrometers von 1,05 keV bei 850 keV nicht zur Auswertung herangezogen werden.

Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 und 3 über den Energiebereich von 35 - 95 MeV vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch ($\alpha, 3pn$), ($\alpha, \alpha p$) und ($\alpha, \alpha pn$) Prozesse oberhalb 35 MeV. Es konnten zum ersten Mal Meßpunkte im Energiebereich 35 - 55 MeV gewonnen werden. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-16 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte dieser Arbeit beschreiben im unteren Energiebereich den Verlauf des ($\alpha, \alpha p$) Prozesses in ^{57}Fe . Der bei 33 MeV startende Prozeß ($\alpha, \alpha pn$) in ^{58}Fe ist wegen der geringeren relativen Häufigkeit von ^{58}Fe in ^{nat}Fe von nur 0,25 % stark unterdrückt und beeinflusst den Verlauf der Anregungsfunktion nur marginal. Ab 45 MeV beginnt der stärkere Prozeß ($\alpha, 3pn$) in ^{56}Fe . Ein Vergleich der gemessenen Werte mit den einzigen vorliegenden Literaturdaten von Brinkmann [4-11] zeigt im Energiebereich von 55 - 95 MeV eine sehr gute Übereinstimmung der Daten. Werte unterhalb von 55 MeV

werden von Brinkmann nicht angegeben. Die Werte von Brinkmann liegen generell jedoch zwischen 10 % und 25 % unterhalb den Werten dieser Arbeit. Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 zeigen für das ^{56}Mn -Nuklid eine deutliche Diskrepanz zwischen den FLD- und KRLD-Rechnungen. Während über den gesamten Energiebereich die KRLD-Werte deutlich oberhalb den experimentellen Daten liegen, zeigen die FLD-Werte nur bis zu 80 MeV eine deutliche Abweichung nach unten. Oberhalb 80 MeV kann die Beschreibung der Experimentdaten durch die FLD-Rechnungen quantitativ als gut bezeichnet werden.

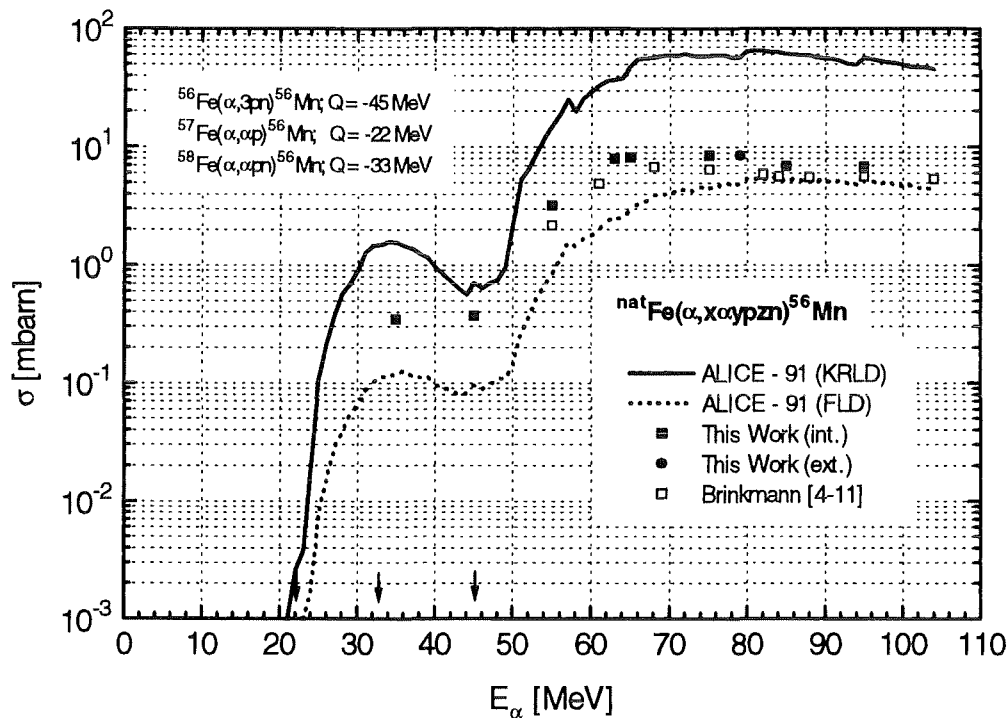


Abbildung 4-16: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \)^{56}\text{Mn}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \)^{54}\text{Mn}$

Das ^{54}Mn -Nuklid ($T_{1/2} = 312,2$ d) konnte anhand der γ -Linie 834,8 keV (99,98 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 - 4 über den gesamten erfaßten Energiebereich von 35 - 104 MeV vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 3p2n)$, $(\alpha, \alpha p2n)$, $(\alpha, \alpha p3n)$ und $(\alpha, \alpha p4n)$ Prozesse oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-17 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte beschreiben eine sehr glatt verlaufende Anregungsfunktion mit einem Maximum bei ca. 50 MeV und einem stetigen Anstieg der Werte zu höheren Energien hin. Da die Reaktionsschwellen dicht beieinander liegen, kommt es zu einer starken Überlappung der Beträge der einzelnen Reaktionskanäle, und deshalb sind keine sehr ausgeprägten Maxima bzw. Minima zu erkennen. Ein Vergleich der gemessenen

Werte mit den einzigen vorliegenden Literaturdaten von Brinkmann [4-11] zeigt über den gesamten Energiebereich eine gute bis sehr gute Übereinstimmung. Zu höheren Energien hin liegen die Brinkmann-Daten zwischen 10 % und 20 % oberhalb den Werten dieser Arbeit.

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 zeigen für das ^{54}Mn -Nuklid, daß sowohl die KRLD-Werte als auch die FLD-Werte deutlich unterhalb den experimentellen Daten liegen. Die KRLD-Rechnungen zeigen bis ca. 80 MeV um einen Faktor 2 zu geringe Werte, während sie sich bei Energien > 90 MeV deutlich an die experimentellen Daten annähern.

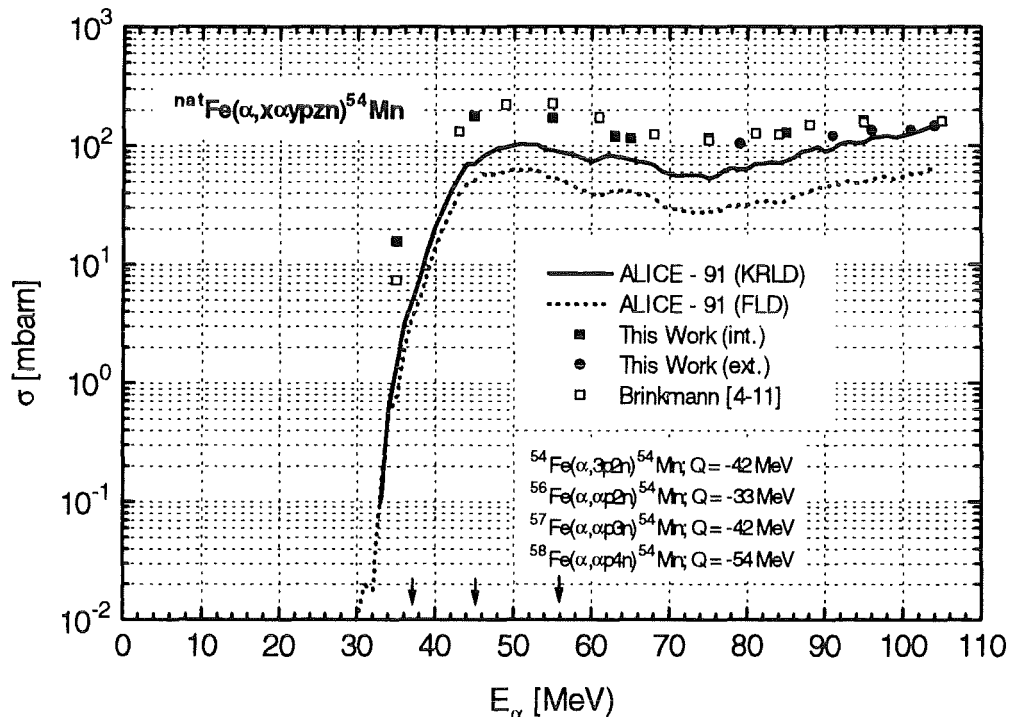


Abbildung 4-17: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \text{)}^{54}\text{Mn}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \text{)}^{52}\text{Mn}_{g+m}$

Beim ^{52}Mn -Nuklid konnte $^{52}\text{Mn}_g$ ($T_{1/2} = 5,59$ d) und zum ersten Mal das Isomer $^{52}\text{Mn}_m$ ($T_{1/2} = 21,1$ m) separat gemessen werden. $^{52}\text{Mn}_g$ konnte anhand der γ -Linien 935,63 keV (95 %) und 744,2 keV (85,0 %) und das Isomer $^{52}\text{Mn}_m$ anhand der γ -Linien 1434,3 keV (100 %) identifiziert werden. Die bei der Energie $E_\gamma = 1434,3$ keV auftretende Mehrdeutigkeit der γ -Energie mit dem ^{52}V -Nuklid ($T_{1/2} = 3,75$ m) konnte bei der verwendeten Meßmethode durch die unterschiedlich langen Halbwertszeiten separiert werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2-4 ($^{52}\text{Mn}_g$) und den Setups 2 und 3 ($^{52}\text{Mn}_m$) vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, \alpha p n)$, $(\alpha, \alpha p 3 n)$, $(\alpha, \alpha p 4 n)$ und $(\alpha, \alpha p 5 n)$ oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-18 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte von $^{52}\text{Mn}_g$ beginnen bei der untersten Reaktionsschwelle von 32 MeV. Da der nächste Prozeß erst bei 55 MeV startet, zeigt die Anregungsfunktion bei ca. 50 MeV ein Maximum, erzeugt durch die $^{52}\text{Mn}_g$ -Produktion in ^{54}Fe . Oberhalb 60 MeV steigt die Anregungsfunktion um ca. eine Größenordnung an, um dann ab ca. 75 MeV fast konstant bzw. leicht fallend bis zu 104 MeV weiterzulaufen. Der Anteil der $^{52}\text{Mn}_m$ -Anregungsfunktion liegt permanent um bis zu zwei Größenordnungen unterhalb von $^{52}\text{Mn}_g$ und zeigt keine so ausgeprägte Struktur, sondern eher einen kontinuierlichen Anstieg bis zu 80 MeV, der dann in einen konstanten Verlauf übergeht. Ein Vergleich mit Literaturdaten kann nur bei $^{52}\text{Mn}_g$ durchgeführt werden, da bei $^{52}\text{Mn}_m$ bisher keine Berechnungen bzw. Messungen durchgeführt worden sind. Bis 40 MeV sind $^{52}\text{Mn}_g$ -Daten von Tanaka [4-30] in sehr guter Übereinstimmung mit den restlichen experimentellen Daten. Ebenfalls sind die Daten von Brinkmann [4-11] über den gesamten Meßbereich in sehr guter Übereinstimmung mit den Werten dieser Arbeit. Einzig der Datenpunkt von Brinkmann bei 26 MeV fällt aus der Reihe, da er deutlich unterhalb der niedrigsten Reaktionsschwelle von 32 MeV liegt.

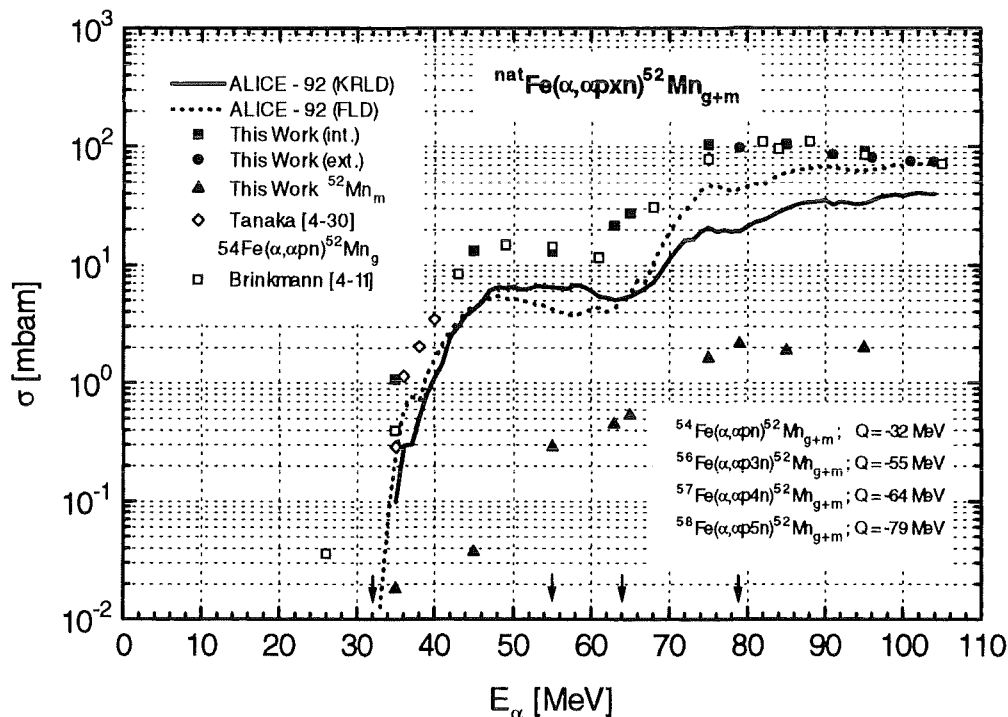


Abbildung 4-18: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha,)^{52}\text{Mn}_{g,m}$ -Reaktion

Die theoretischen Rechnungen mit ALICE-91 zeigen für das Nuklid $^{52}\text{Mn}_{g+m}$ einen uneinheitlichen Verlauf. Im Energiebereich bis zu 60 MeV liegen die KRLD-Werte leicht unterhalb bzw. oberhalb der FLD-Werte. Oberhalb 60 MeV liegen jedoch die FLD-Werte deutlich über den KRLD-Rechnungen. Die FLD-Werte beschreiben auch die experimentellen Daten wesentlich besser. Generell liegen die theoretischen Daten ca. 50 % unter den experimentell gemessenen Werten. Jedoch stimmen bei ganz hohen Energien die FLD-Werte mit den experimentellen Daten überein. Dies kommt daher, daß die FLD-Werte eine stetig steigende Tendenz zeigen, während die experimentellen Werte bei

ca. 85 MeV ein flaches Maximum durchlaufen. Um einen exakten Vergleich zwischen Theorie und Experiment durchführen zu können, müßte $\sigma_{\text{tot}} = \sigma(^{52}\text{Mn}_g) + \sigma(^{52}\text{Mn}_m)$ berechnet werden. Jedoch würden die σ_{tot} -Datenpunkte sich nicht von den in Abb. 4-18 eingezeichneten $\sigma(^{52}\text{Mn}_g)$ -Werten unterscheiden, da die $^{52}\text{Mn}_m$ -Beiträge zu σ_{tot} um bis zu zwei Größenordnungen geringer als die von $^{52}\text{Mn}_g$ sind.

Der $(\alpha, \alpha 2pxn)$ - Kanal bzw. $(\alpha, 2\alpha xn)$ - Kanal

Die Reaktionen von Typ $(\alpha, \alpha 2pxn)$ bzw. $(\alpha, 2\alpha xn)$ führen auf Cr-Nuklide. Es wurden mit ^{51}Cr und ^{49}Cr zwei Nuklide identifiziert. Das Nuklid ^{48}Cr lag unterhalb der Nachweiswahrscheinlichkeit der Apparatur und konnte deshalb nicht gemessen werden. Die gemessenen Nuklide werden nach absteigender Masse diskutiert.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{51}\text{Cr}$

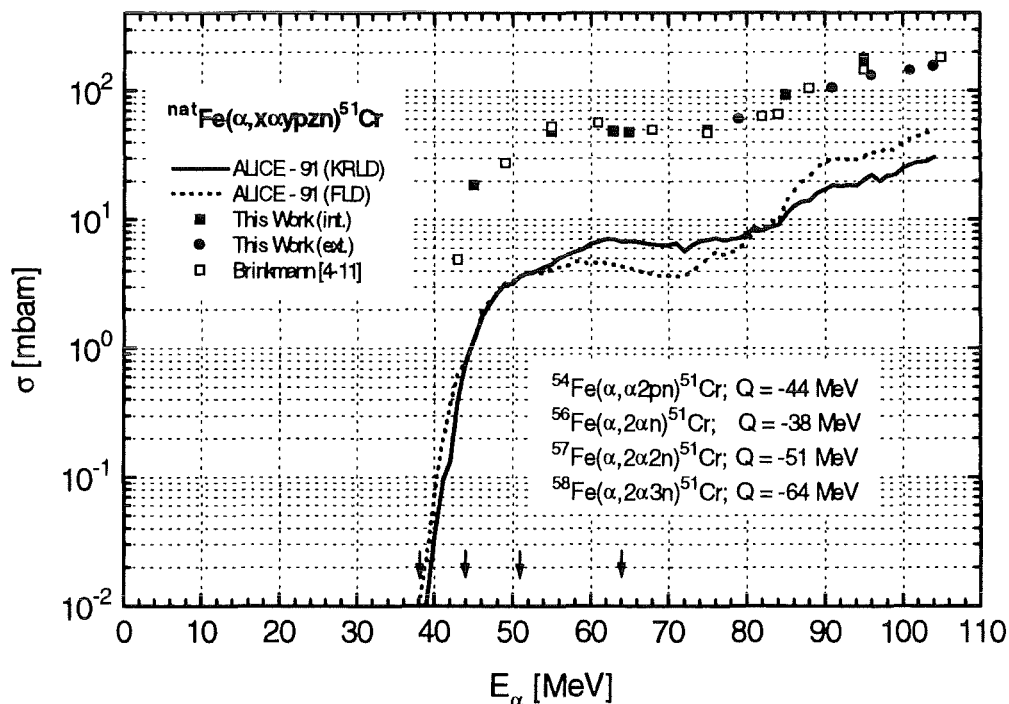


Abbildung 4-19: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{51}\text{Cr}$ -Reaktion

Das ^{51}Cr -Nuklid ($T_{1/2} = 27,7$ d) konnte anhand der γ -Linie 320,7 keV (9,8 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2-4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 2\alpha n)$, $(\alpha, 2\alpha 2n)$ und $(\alpha, 2\alpha 3n)$ Prozesse oberhalb

35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-19 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte beschreiben eine glatt verlaufende Anregungsfunktion. Es bildet sich bei ca. 60 MeV nur ein schwaches Maximum aus, obwohl die Reaktionsschwellen dicht beieinander liegen. Oberhalb 70 MeV steigt die Anregungsfunktion dann stetig an. Bei den experimentellen Werten dieser Arbeit zeigt sich zusätzlich, daß die mit Setup 4 gemessenen externen Daten bei $E > 90$ MeV ca. 30 % unterhalb des internen Datenpunktes (Setup 3) bei $E = 95$ MeV liegen.

Werden die Daten dieser Arbeit mit den einzigen vorliegenden Literaturdaten von Brinkmann [4-11] verglichen, so zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung über den gesamten Energiebereich.

Ein Vergleich mit den theoretischen ALICE-91-Rechnungen zeigt, daß die KRLD-Daten und FLD-Daten wenig differieren. FLD beschreibt das Maximum bei ca. 60 MeV deutlicher als KRLD, jedoch liegen die FLD-Werte unter den KRLD-Werten. Bei $E > 80$ MeV liegt FLD dann wieder oberhalb von KRLD. Generell gilt jedoch, daß die ALICE-91-Berechnungen um eine Größenordnung zu gering ausfallen und deshalb quantitativ von keiner guten Übereinstimmung gesprochen werden kann.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{49}\text{Cr}$

Das ^{49}Cr -Nuklid ($T_{1/2} = 42,1$ m) konnte zum ersten Mal experimentell gemessen werden. Es konnte anhand der γ -Linien 90,6 keV (95 %) und 308,3 keV (99 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 und 3 vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 2\alpha n)$, $(\alpha, 2\alpha 3n)$ und $(\alpha, 2\alpha 4n)$ Prozesse oberhalb 40 MeV. Die Anregungsfunktion ist in die Abb. 4-20 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte beschreiben eine Anregungsfunktion mit einem ausgeprägten Maximum bei 55 MeV und einem stetigen Anstieg bei Energien $E > 70$ MeV. Der externe 79 MeV Meßpunkt liegt etwas unterhalb der intern gemessenen Daten im Bereich 75 - 95 MeV. Da dieses Nuklid zum ersten Mal gemessen wurde, liegen keine Literaturdaten zum Vergleich vor.

Ein Vergleich mit den theoretischen ALICE-91-Berechnungen zeigt ein Verhalten der KRLD- bzw. FLD-Anregungsfunktion wie bei ^{51}Cr , jedoch etwas ausgeprägter. Im Bereich $E < 70$ MeV liegen die KRLD-Werte näher an den experimentellen Daten und bei $E > 70$ MeV beschreibt FLD besser den experimentellen Verlauf. Generell liegen jedoch die theoretischen Rechenwerte zwischen einem Faktor 3 bis 10 unterhalb den Daten des Experiments.

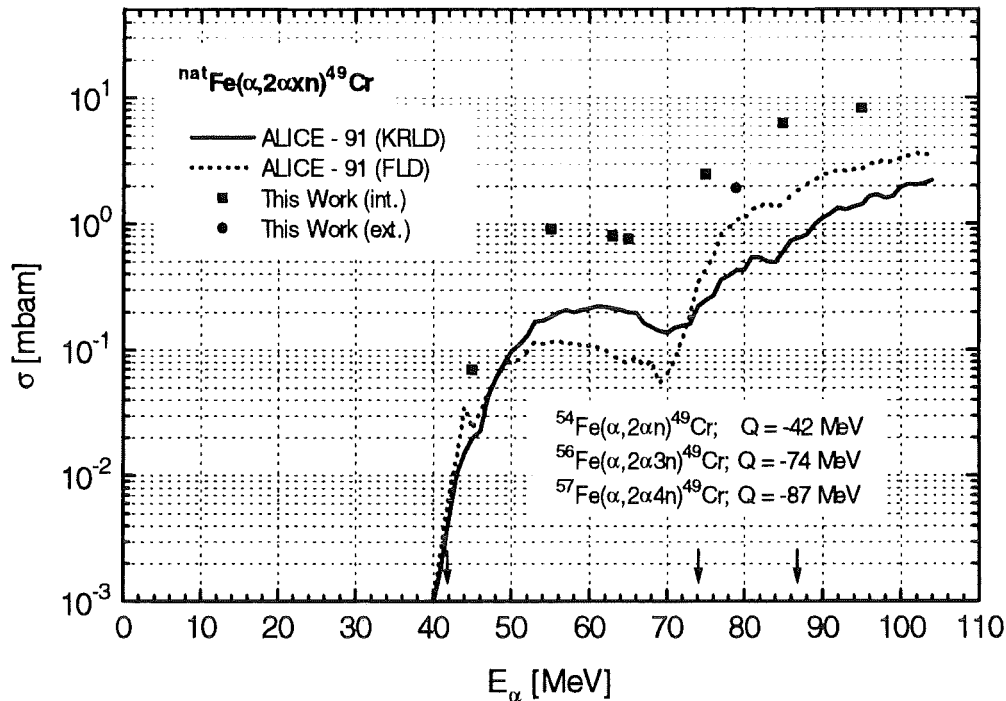


Abbildung 4-20: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \)^{49}\text{Cr}$ -Reaktion

Der $(\alpha, 5pn)$ - Kanal bzw. $(\alpha, \alpha 3pn)$ - Kanal bzw. $(\alpha, 2\alpha pn)$ - Kanal

Die Reaktionen vom Typ $(\alpha, 5pn)$, $(\alpha, \alpha 3pn)$ und $(\alpha, 2\alpha pn)$ führen auf V-Nuklide. Es wurden mit ^{52}V und ^{48}V zwei Nuklide gemessen, die nach absteigender Masse diskutiert werden.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \)^{52}\text{V}$

Das ^{52}V -Nuklid ($T_{1/2} = 3,75$ m) konnte zum ersten Mal experimentell gemessen werden. Es wurde anhand der γ -Linie 1434,1 keV (100 %) identifiziert. Diese Messung gestaltete sich wegen der sehr kurzen Halbwertszeit ähnlich schwierig wie die des $^{53}\text{Fe}_m$ Isomers. Jedoch mußte beim ^{52}V -Nuklid keine Zerfallsreihe berücksichtigt werden (siehe Kap. 3.3). Es wurden wegen der kurzen Halbwertszeit an den gemessenen Daten Korrekturen bezüglich des Zerfalls von ^{52}V während der Bestrahlung (DDI, siehe Kap. 3.4) und während des Transports bzw. während der Messung (DDA, siehe Kap. 3.4) durchgeführt. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2 und 3 vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 5pn)$, $(\alpha, \alpha 3pn)$, $(\alpha, 2\alpha p)$ und $(\alpha, 2\alpha pn)$ oberhalb 35 MeV. Die Anregungsfunktion ist in die Abb. 4-21 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte beschreiben ein leichtes Maximum bei ca. 45 MeV und einen stetigen Anstieg zu höheren Energien. Der externe Meßpunkt bei 79 MeV liegt etwas

oberhalb der intern gemessenen Daten im Energiebereich 75 - 95 MeV. Da dieses Nuklid zum ersten Mal gemessen wurde, liegen kein Literaturdaten zum Vergleich vor.

Der Vergleich mit den theoretischen ALICE-91-Berechnungen zeigt, daß die KRLD-Werte ca. eine Größenordnung oberhalb den FLD-Werten liegen. Jedoch liegen selbst die KRLD-Rechnungen zwischen einer und zwei Größenordnungen tiefer als die experimentellen Werte. Davon ausgenommen sind die Werte bei $E > 80$ MeV, bei denen die Abweichung nur noch ca. einen Faktor 5 beträgt. Zusätzlich liegt ein experimenteller Datenpunkt unterhalb der von ALICE-91 berechneten niedrigsten Reaktionsschwelle. Wird noch das Maximum betrachtet, welches bei den experimentellen Daten ca. 10 MeV tiefer liegt als bei den theoretischen Rechnungen, so liegt der Schluß nahe, daß für das Nuklid ^{52}V weder qualitativ noch quantitativ eine gute theoretische Beschreibung erreicht wird. Es stellt sich zusätzlich die Frage, inwieweit die Berechnungen der Q-Werte bei $(\alpha, 2\alpha\dots)$ -Prozessen den wahren Werten entsprechen? Aus den vorliegenden Daten kann nur die Aussage abgeleitet werden, daß der geringste Q-Wert scheinbar zwischen 5 - 10 MeV tiefer liegt als theoretisch berechnet.

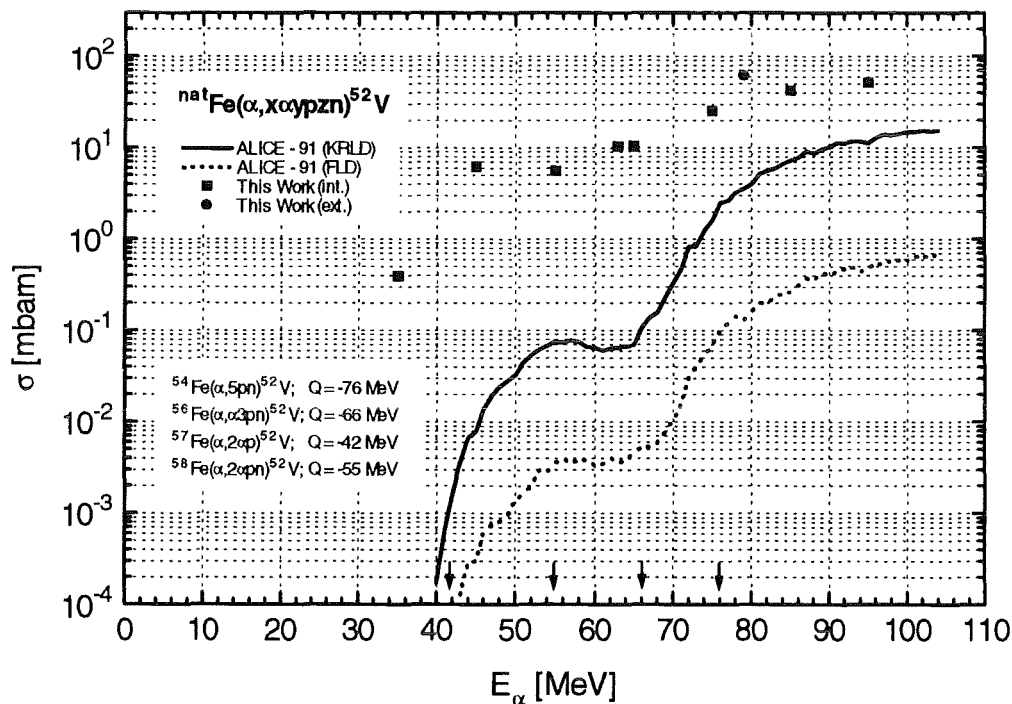


Abbildung 4-21: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{52}\text{V}$ -Reaktion

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{48}\text{V}$

Das ^{48}V -Nuklid ($T_{1/2} = 15,97$ d) konnte anhand der γ -Linien 983,5 keV (100 %) und 1311,6 keV (98 %) gemessen werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2-4 über den gesamten erfaßten Energiebereich vor. Die Werte beschreiben

den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 2\alpha pn)$, $(\alpha, 2\alpha p3n)$ und $(\alpha, 2\alpha p4n)$ oberhalb 55 MeV. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-22 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

Die experimentellen Werte beschreiben unterhalb 80 MeV einen bauchigen Verlauf, der ein Maximum bei 75 MeV andeutet. Oberhalb 80 MeV steigt die Anregungsfunktion deutlich an. Es zeigt sich, daß die intern und extern gemessenen Daten in gutem Einklang sind. Werden die Datenpunkte dieser Arbeit mit den einzigen vorhandenen Literaturdaten von Brinkmann [4-11] verglichen, so zeigt sich ebenfalls gute bis sehr gute Übereinstimmung. Im Energiebereich um 55-65 MeV liegen die Brinkmann-Daten etwas unterhalb den experimentellen Werten dieser Arbeit. Jedoch ist anzumerken, daß ein Vergleich der Datenpunkte am steilen Anstieg der Anregungsfunktion besonders schwierig ist, da geringe Unsicherheiten in der Energiebestimmung das Bild deutlich verändern können.

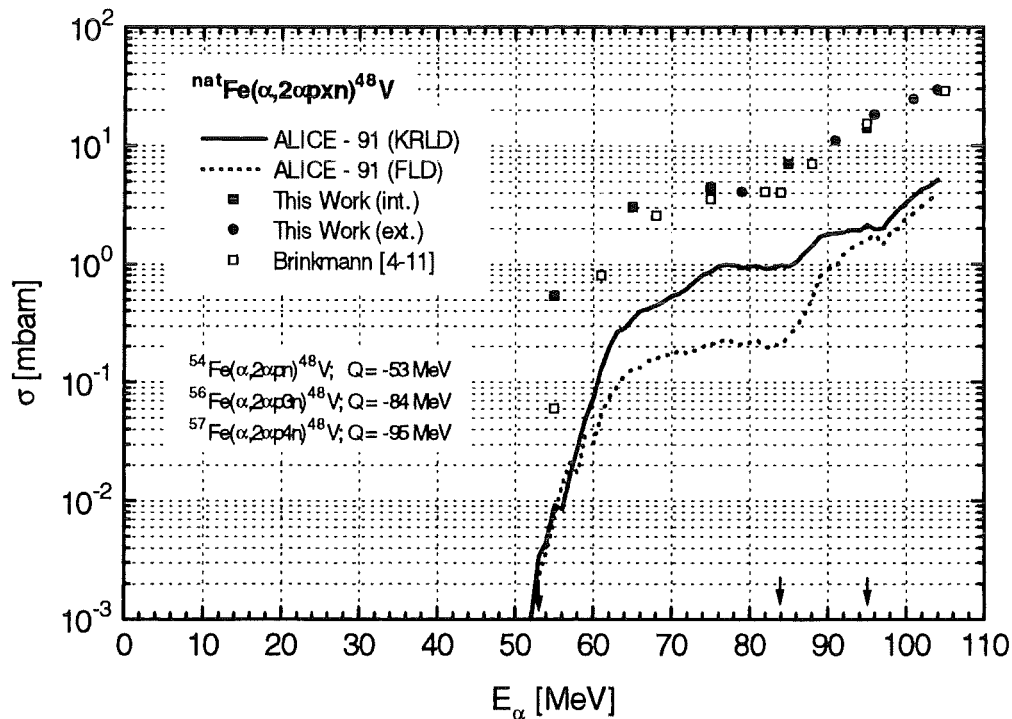


Abbildung 4-22: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha,)^{48}\text{V}$ -Reaktion

Der Vergleich mit den theoretischen ALICE-91-Rechnungen zeigt, daß die KRLD-Werte deutlich über den FLD-Werten liegen, und die FLD-Werte einen deutlichen Bauch zeigen. Andererseits liegen trotzdem die KRLD-Werte bis zu einer Größenordnung unterhalb den experimentell gemessenen Werten. Im Vergleich mit den ^{52}V -Berechnungen liegt jedoch hier die unterste Reaktionsschwelle, obwohl $(\alpha, 2\alpha \dots)$ -Prozesse auftreten, bei der experimentell gefundenen Energie. Für ^{48}V bedeutet dies, daß ALICE-91 nur qualitativ den Verlauf der Anregungsfunktion richtig wiedergeben kann.

Der $(\alpha, 2\alpha 3p)$ - Kanal bzw. $(\alpha, 3\alpha p x n)$ - Kanal

Die Reaktionen von Typ $(\alpha, 2\alpha 3p)$ und $(\alpha, 3\alpha p x n)$ führen auf Sc-Nuklide. Obwohl mehrere instabile Sc-Nuklide im Meßbereich existieren, wurden nur Werte von ^{47}Sc oberhalb des MDA-Levels (Minimal detektierbare Aktivität) produziert.

$^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{47}\text{Sc}$

Das ^{47}Sc -Nuklid ($T_{1/2} = 3,42 \text{ d}$) konnte zum ersten Mal experimentell gemessen werden. Es konnte anhand der γ -Linie 159,4 keV (68 %) identifiziert werden. Es liegen experimentelle Daten aus den Messungen mit den Setups 2-4 über den gesamten erfaßten Meßbereich vor. Die Werte beschreiben den Verlauf der Anregungsfunktion induziert durch $(\alpha, 2\alpha 3p)$, $(\alpha, 3\alpha p)$, $(\alpha, 3\alpha p n)$ und $(\alpha, 3\alpha p 2n)$ -Prozesse. Die Anregungsfunktion ist in Abb. 4-23 eingezeichnet. Die experimentellen Werte sind in Tabelle 4-5 eingetragen.

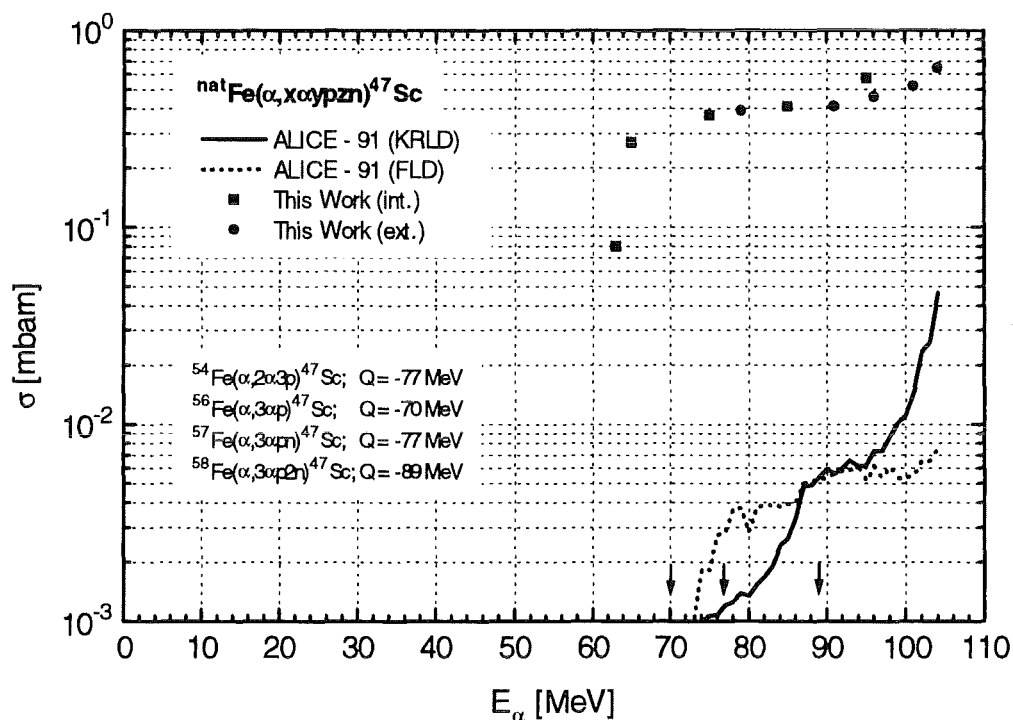


Abbildung 4-23: Anregungsfunktion der $^{nat}\text{Fe}(\alpha, \dots)^{47}\text{Sc}$ -Reaktion

Die experimentellen Werte beschreiben oberhalb 60 MeV einen steilen Anstieg, der in ein Plateau mündet. Oberhalb 90 MeV beginnen die Werte dann weiter anzusteigen. Bei $E = 94,6 \text{ MeV}$ liegt der interne Meßpunkt ca. 20 % oberhalb des extern (Setup 4) gemessenen Verlaufs. Diese Abweichung wird aber von den angegebenen experimentellen Unsicherheiten abgedeckt. Da keine Literaturdaten vorliegen, kann kein weiterer Vergleich durchgeführt werden.

Der Vergleich mit den theoretischen ALICE-91 Berechnungen zeigt, daß bei diesem Prozeß endgültig der Gültigkeitsbereich der ALICE-Resultate überschritten wurde. Die KRLD- und FLD-Werte liegen deutlich zu tief. Bei den FLD-Werten, die qualitativ den Verlauf andeutungsweise richtig wiedergeben, fehlen ca. zwei Größenordnungen, um die experimentellen Daten zu erreichen. Zum anderen zeigen die KRLD-Werte einen völlig davon verschiedenen Verlauf, wobei der starke Anstieg bei den hohen Energien eher zufälligen Charakter besitzt. Zusätzlich wurden noch Datenpunkte bei Energien unterhalb der niedrigsten mit ALICE-91 berechneten Reaktionsschwelle gemessen. Dies deutet darauf hin, daß möglicherweise schwerere Cluster (z.B. Li, Be) als α -Teilchen abgedampft werden können. Solche Reaktionen führen, wegen der hohen Bindungsenergie der Cluster, zu geringeren Energien hin verschobenen Reaktionsschwellen. Diese Betrachtungen führen auf den Schluß, daß bei hochangeregten Zuständen, die sich unter Abdampfung von mehreren leichten oder wenigen schweren Nukleon-Clustern abregen, die von ALICE-91 berechneten Anregungsfunktionen genau zu prüfen sind.

4.3 Berechnung der Aktivierung und des Zerfalls

Um das Kapitel über die Aktivierung von ^{nat}Fe unter Protonen- bzw. α -Bestrahlung abzuschließen, wurde eine Aktivierungsdatenbibliothek der oben graphisch veranschaulichten Anregungsfunktionen erstellt. Desweiteren wurde der Teil des Computerprogramms LINDA (Light-Ion induced Nonelastic Damage and Activation), siehe Abb. 1-2, entwickelt, der für die Berechnung der Aktivierung und des Zerfalls zuständig ist. Die Aktivierungsdatenbibliothek ist im Anhang E aufgeführt.

Die Aktivierungsdatenbibliothek enthält wie unter Kap. 4.1. und 4.2. diskutiert 7 protoninduzierte und 18 α -induzierte Anregungsfunktionen, die die Produktion der wichtigsten kurz- und langlebigen Nuklide beschreiben, die unter Leichtenbestrahlung von ^{nat}Fe erzeugt werden. Die Anregungsfunktionen liegen in 1 MeV äquidistanten Gruppen von 1 MeV bis zur maximalen Bestrahlungsenergie ($E_p^{\max} = 30 \text{ MeV}$, $E_\alpha^{\max} = 104 \text{ MeV}$) vor. Da die Messungen dieser Arbeit in 5 MeV bzw. 10 MeV Schritten durchgeführt wurden, wurden die Lücken unter Zuhilfenahme anderer Literaturdaten bzw. der ALICE-91 Berechnungen interpoliert. Eine detaillierte Beschreibung des Daten-Headers und der Daten ist in Anhang E gegeben.

LINDA ermöglicht die Berechnung (Gleichung 4-1) der nuklidspezifischen Aktivitäten (A^{Nuc}) in Abhängigkeit von der Projektionsart ((Proj=p, α), bei Alphateilchen ist e durch 2e zu ersetzen) Bestrahlungsdauer, Projektilenergie und -Strom, und der Schichtdicke (Δd) des durchstrahlten Targetmaterials.

$${}_{\text{Proj}} A_{\Delta d}^{\text{Nuc}} = \sigma(E) \cdot \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \cdot \frac{N_A \cdot \rho_{\text{Fe}} \cdot \Delta d_{\text{Fe}}}{M_{\text{Mol}}} \cdot \frac{\int I(t) dt}{e} \quad (4 - 1)$$

Wird die Aktivität in einer dicken Schicht berechnet, so wird diese in dünne Schichten à 1 MeV Dicke unterteilt, um dem Wirkungsquerschnittsverlauf Rechnung zu tragen. Die Gesamtaktivität in einer dicken Probe bei einer konstanten Bestrahlungsenergie wird durch Summierung der Einzelschichten berechnet.

Wird die Bestrahlungsenergie der Projektile moderiert, d.h. werden die Projektile im Target implantiert, so trifft die dem Programm zugrundeliegende Näherung, daß der Projektilstrom unabhängig von der Eindringtiefe ist, selbst dann noch zu, da nur ein geringer Anteil der Projektile vor Erreichen der maximalen Reichweite abgestoppt wird bzw. durch stattfindende Kernreaktionen verringert wird. Die Gesamtaktivität eines Nuklids wird durch Summierung, der in den einzelnen dünnen Schichten erzeugten Aktivitäten, über den moderierten Energiebereich berechnet.

Die Gesamtaktivität aller Nuklide, die durch eine Projektilsorte erzeugt wird, wird durch Summierung über die Einzelbeiträge aller Nuklide berechnet. Die Gesamtaktivität, die unter gleichzeitiger Bestrahlung mit Protonen und α -Teilchen erzeugt wird, wird durch Summierung über die einzelnen Projektilbeiträge berechnet.

$$A_{\text{tot}}^{\alpha} = \sum_{\text{Nuc}} \sum_E \sum_{d_{\text{Tar}}} \alpha A_{\Delta d}^{\text{Nuc}} \quad A_{\text{tot}}^{\text{P}} = \sum_{\text{Nuc}} \sum_E \sum_{d_{\text{Tar}}} \text{P} A_{\Delta d}^{\text{Nuc}} \quad (4-2)$$

Die Programmausgabe erzeugt neben einer Liste der Bestrahlungsparameter eine Liste der nuklidbezogenen Aktivierungsdaten direkt nach der Bestrahlung und nach der angegebenen Abklingdauer. Die Werte werden differenziert nach Projektile und Nukliden ausgegeben. Führen die Protonen und Alphas auf dasselbe Nuklid, so wird die Summenaktivität des Nuklids berechnet. Am Schluß der Tabelle wird die Gesamtaktivität ausgegeben. Zusätzlich wird zu jedem Nuklid die erwartete γ -Energie-Dosisrate D (siehe Gl. 4-4) berechnet. Die Berechnung erfolgt durch Multiplikation mit dem Wert der emittierten Energie pro Zerfall E_{γ}^{Nuc} . Der Wert D hat die Einheit MeV/Sekunde pro gegebener Probenmasse. Diese Einheit kann auch in Sv/h umgerechnet werden, da es sich um Gammastrahlung handelt (Qualitätsfaktor = 1).

Mit

$$A_{\text{tot}}^{\text{Nuc}} = \sum_E \sum_{d_{\text{Tar}}} \text{Proj} A_{\Delta d}^{\text{Nuc}} \quad (4-3)$$

folgt

$$D = \sum_{\text{Proj}} \sum_{\text{Nuc}} \text{Proj} A_{\text{tot}}^{\text{Nuc}} \cdot E_{\gamma}^{\text{Nuc}} \quad (4-4)$$

Zur Veranschaulichung des Aktivierungsverhaltens von reinem Eisen wurden für Protonen und α -Teilchen je ein Datensatz für eine Dual-Beam-relevante Probengeometrie und

Bestrahlungssituation berechnet. Die simulierte Probe ist in einer Querschnittszeichnung in Abb. 4-24 dargestellt. Die Ermüdungsprobe ist eine quadratische Hohlprobe mit 0.4 mm Wandstärke. In den zu bestrahlenden Bereich sollen homogen jeweils Protonen oder Alphateilchen implantiert werden. Damit die bestrahlte Schicht über den Strahlleck gesehen gleich dick ist, wird die Probe mit einer ihrer Kanten in Strahlrichtung gedreht und bestrahlt. In dieser Anordnung ist eine homogene Implantation gewährleistet. Zur Veranschaulichung wurde in Abb. 4-24 die Materialbelegung in Strahlrichtung eingezeichnet. Links ist der Schnitt senkrecht zur Längsachse einer quadratischen Dual-Beam Ermüdungsprobe zu sehen. Die rechte Abbildung zeigt die Massenbelegung senkrecht zur Einstrahlrichtung der links dargestellten Probe.

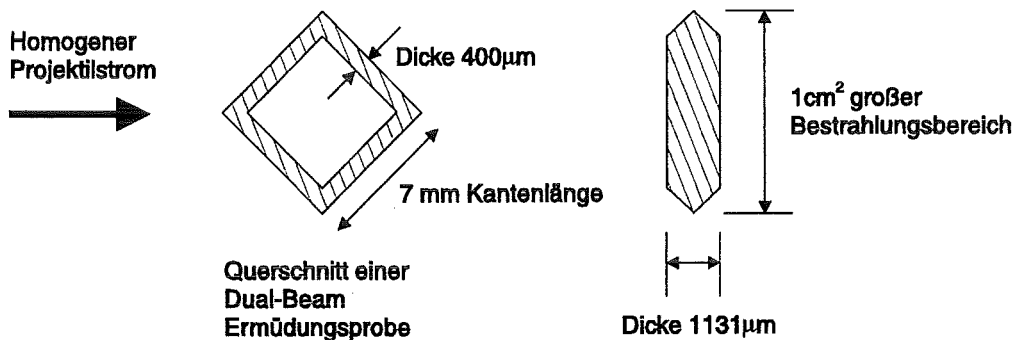


Abbildung 4-24: Querschnittszeichnung einer Dual-Beam-Ermüdungsprobe. Die rechte Abbildung zeigt die Massenbelegung senkrecht zur Strahlrichtung.

Die 1cm² große Bestrahlungsfläche erfasst die gesamte Probe. Dies ist der Bereich konstanter Dicke (1,13mm) und die oben und unten spitz zulaufenden Enden der Probe. Diese spitz zulaufenden Enden müssen bei der Bestimmung der Aktivierung der Probe mit einem Korrekturfaktor (ca. 0,94) berücksichtigt werden, da in die Berechnung eine über den bestrahlten Bereich konstante Dicke angenommen wurde. Berechnet wurden folgende Parametersätze:

	E_{Prim}	Energie- moderation	Strahlstrom	Bestrahlungs- dauer	Abklingzeit
Protonen	30 MeV	30 MeV - 1 MeV	1µA	1 sec	bis 100 Jahre
α-Teilchen	104 MeV	104 MeV - 1 MeV	1µA	1 sec	bis 100 Jahre

In den folgenden Abb. 4-25 und 4-26 ist für Protonen und α-Teilchen die nuklidspezifische Aktivierung in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. Die Aktivität ist pro Sekunde Bestrahlungsdauer und pro Mikroampere Strahlstrom angegeben. Die Auftragung wurde auf die markanten Nuklide für Kurzzeitaktivität und Langzeitaktivität beschränkt.

Aus diesen Abbildungen kann für höhere Strahlströme und längere Strahlzeiten die erzeugte Aktivierung abgeschätzt werden. Bei der Bestimmung der Aktivierung für höhere Strahlströme sind die angegebenen Werte einfach mit dem Strahlstrom in Mikroampere zu multiplizieren.

Bei längeren Bestrahlungsdauern berechnet sich die Aktivierung für Nuklide mit Halbwertszeiten, die groß gegenüber dem Bestrahlungszeitraum sind, ebenfalls durch einfache Multiplikation mit der Zeitdauer in Sekunden. Für die Nuklide mit kurzen Halbwertszeiten gegenüber dem Bestrahlungszeitraum ist eine Abschätzung der produzierten Aktivierung anhand dieser Abbildungen nur im Zeitraum bis einige Minuten sinnvoll, da diese Nuklide einen Sättigungscharakter in Bezug auf ihre Produktion zeigen.

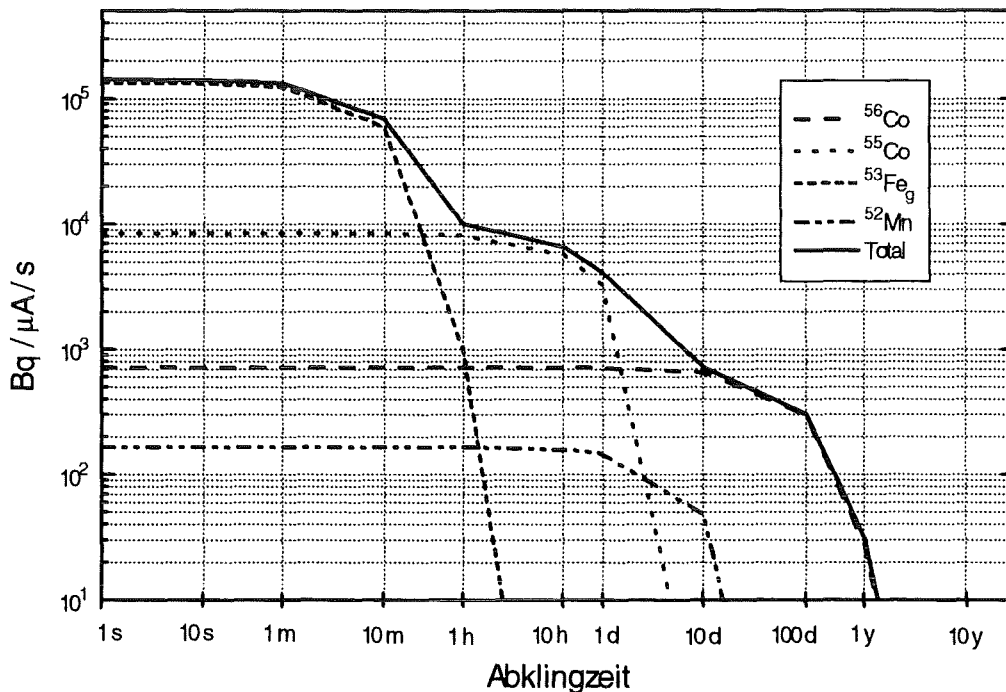


Abbildung 4-25: Protoninduzierte Aktivierung bezogen auf 1μA Strahlstrom und 1 Sekunde Bestrahlungsdauer

Die Aktivierungsdatenbibliothek zusammen mit dem LINDA-Aktivierungsprogramm ermöglicht im jetzigen Zustand eine schnelle Voraussage der zu erwartenden Aktivitäten bei Leichtenbestrahlung von reinem Eisen bzw. von niedriglegierten Eisenbasislegierungen.

Die Wahl der Parameter wie Bestrahlungsenergie, Bereich der Energiemoderation, Targetdicke, Strahlstrom, Bestrahlungsdauer und Abklingzeit ist beliebig. Alphateilchen und Protonen können in beliebigen Intensitäten und Energien gemischt werden.

Ist eine Aussage zur Aktivierung von hochlegierten Eisenbasislegierungen erforderlich, so muß, um belastbare Resultate zu erhalten, die Aktivierungsdatenbibliothek mit den wichtigsten Anregungsfunktionen der Legierungspartner (Cr, Ni, Mn) erweitert werden, da diese Legierungselemente nicht zu vernachlässigende Beiträge zur Gesamtaktivierung liefern.

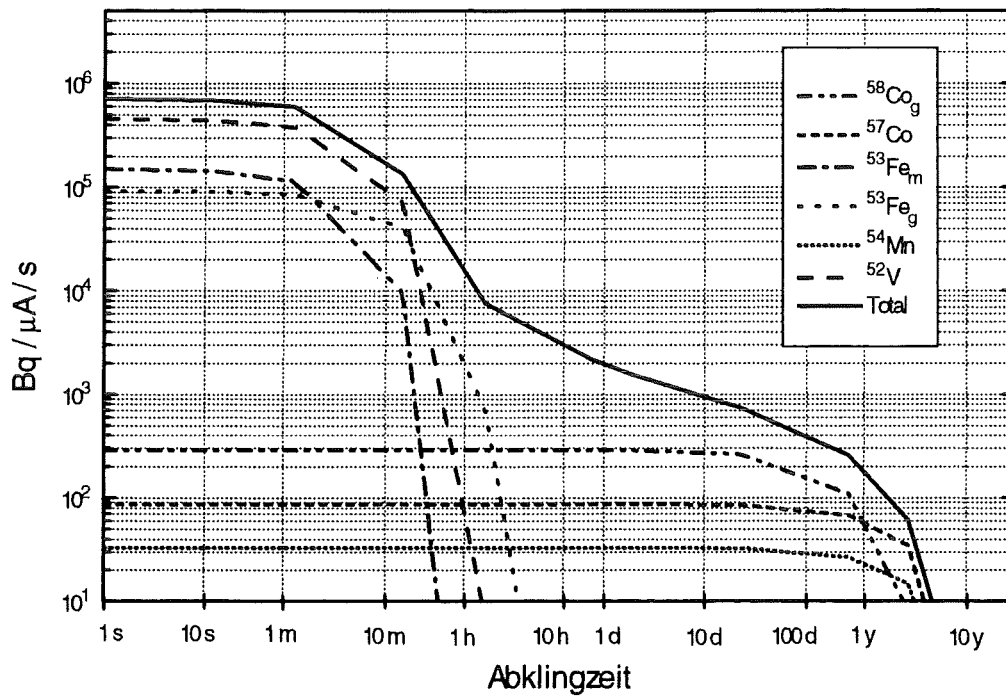


Abbildung 4-26: α -Teilchen-induzierte Aktivierung bezogen auf 1 μ A Strahlstrom und 1 Sekunde Bestrahlungsdauer

5 Bestimmung der Schädigung unter Leichtionenbestrahlung

Die Bestimmung der Schädigung erfolgt in mehreren Schritten. Zuerst werden im Experiment die mittleren, in Strahlrichtung projizierten Rückstoßreichweiten gemessen und mit den Ergebnissen theoretischer Modellrechnungen verglichen. Danach wird der elastische Schädigungsanteil bestimmt. Der dritte und am detailliertesten ausgearbeitete Abschnitt beschreibt die Bestimmung der nichtelastischen Schädigung. Die nichtelastische Schädigung wird in dieser Form zum ersten Mal für Leichtionen dargestellt.

5.1 Bestimmung der Rückstoßreichweiten

Die unter Leichtionenbestrahlung (α, p) stattfindenden Kernreaktionen ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(p, xy)\text{B}$ bzw. ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\alpha, xy)\text{B}$ erzeugen Restkerne B, die eine mehrere MeV große Rückstoßenergie erhalten können. Die Rückstoßenergien können zum einen experimentell gemessen werden, zum anderen ist eine Berechnung der Rückstoßimpulsverteilung, die in eine Rückstoßenergieverteilung transformiert werden kann, möglich. In den folgenden drei Unterkapiteln wird der experimentelle und theoretische Aspekt näher ausgeführt und ein Vergleich der Resultate vorgenommen.

5.1.1 Thin-Foil - Thick-Catcher - Technique

Die in der Einleitung zu diesem Kapitel genannte Rückstoßenergie der Restkerne steht in direktem Zusammenhang mit der Wegstrecke, die ein energetisches Ion in einem Festkörper zurücklegen kann. Eine Erläuterung der Theorie dazu ist in Kap. 2.2 gegeben. Für die Restkerne, die als radioaktive Nuklide vorliegen, kann mittels eines einfachen experimentellen Aufbaus die mittlere Rückstoßreichweite bestimmt werden. Dieser experimentelle Aufbau wird in der Literatur unter „Thin-Foil - Thick-Catcher - Technique“ geführt. Der Begriff „Thin“ beziehen sich auf den Vergleich der Dicke der Targetfolie D mit der Reichweite der Restkerne. In Abb. 5-1 ist die Anordnung der Target- und Catcher-Folie skizziert.

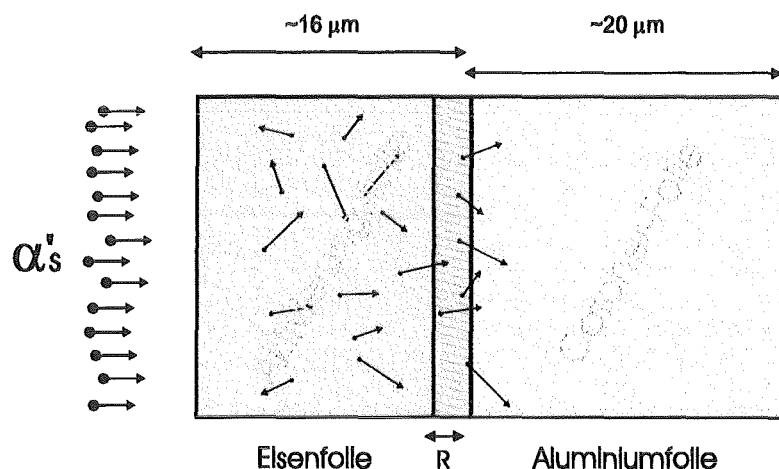


Abbildung 5-1: Anordnung der Target und Catcher Folie bei der „Thin-Foil - Thick-Catcher - Technique“

Die in einer Targetfolie (^{nat}Fe) induzierten Rückstoßkerne haben eine gewisse Reichweite. Diese Reichweite führt dazu, daß die Rückstoßkerne insbesondere strahlabwärts die Eisenfolie verlassen und somit in die direkt dahinter angebrachte Aluminiumfolie implantiert werden. Der in Abb. 5-1 schraffiert eingezeichnete Bereich R der Eisenfolie gibt den Bereich der Reichweite an, aus dem die Rückstoßkerne die ^{nat}Fe -Folie verlassen können. Die Kombination Fe/Al wurde gewählt, da die α -induzierte Eigenaktivierung im Al keine γ -Linien erzeugt, die mit γ -Linien der implantierten Rückstoßkerne interferieren können. Durch γ -spektroskopische Messung der Catcher-Folien kann nach Nukliden differenziert der implantierte Anteil der insgesamt erzeugten Kerne gemessen werden. Damit läßt sich dann die in Strahlrichtung projizierte Reichweite und daraus die mittlere Rückstoßenergie bestimmen. In [5-1] und [4-32] ist die Vorgehensweise detailliert beschrieben.

Zur Messung der in Strahlrichtung projizierten mittleren Reichweite muß der Bruchteil der Aktivität A^{Nuc} eines bestimmten Nuklids Nuc in der Catcher-Folie gemessen werden.

$$f^{\text{Nuc}} = \frac{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}}}{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}} + A_{\text{T}}^{\text{Nuc}}} \quad (5 - 1)$$

$A_{\text{C}}^{\text{Nuc}}$ ist die Aktivität des Nuklids in der Catcher-Folie und $A_{\text{T}}^{\text{Nuc}}$ ist die Aktivität des Nuklids in der Targetfolie

Unter den Annahmen, daß der Wirkungsquerschnitt $\sigma^{\text{Nuc}}(E)$ über die Foliendicke konstant ist, bzw. die Folie energetisch dünn gegenüber der Projektilenergie ist und daß alle innerhalb der mittleren Reichweite R , gemessen vom strahlabwärts liegenden Ende der Folie, produzierten Kerne die Targetfolie verlassen, gilt $A_{\text{C}} + A_{\text{T}} \sim D$ und $A_{\text{C}} \sim R$. Somit folgt

$$f^{\text{Nuc}} = \frac{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}}}{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}} + A_{\text{T}}^{\text{Nuc}}} = \frac{R^{\text{Nuc}}}{D} \quad (5 - 2)$$

und für die in Strahlrichtung projizierten mittleren Reichweiten gilt

$$R^{\text{Nuc}} = D \frac{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}}}{A_{\text{C}}^{\text{Nuc}} + A_{\text{T}}^{\text{Nuc}}} \quad (5 - 3)$$

Für den Fehler $\Delta R^{\text{Nuc}}/R^{\text{Nuc}}$ folgt

$$\frac{\Delta R^{Nuc}}{R^{Nuc}} = \left[\left(\frac{\Delta D}{D} \right)^2 + \left(\frac{\Delta A_T^{Nuc}}{A_C^{Nuc} + A_T^{Nuc}} \right)^2 + \left(\frac{A_T^{Nuc} \Delta A_C^{Nuc}}{A_C^{Nuc} (A_C^{Nuc} + A_T^{Nuc})} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5 - 4)$$

In den Tabellen (5-1) und (5-2) sind die gemessenen mittleren Reichweiten inklusive ihrer experimentellen Unsicherheiten angegeben. Die Bestrahlung der Targets erfolgte wie in Kap. 3 beschrieben. Die verwendeten Catcher-Folien waren hochreine Aluminiumfolien (Reinheit 99,999*) [3-6]. Die γ -spektroskopische Analyse ergab teilweise sehr geringe Aktivitäten, denen mit entsprechenden statistischen Fehlern Rechnung getragen wurde. In Abbildung 5-2 ist ein γ -Spektrum einer Al-Catcher-Folie (A) wiedergegeben. Dieses Spektrum resultierte aus einer 65 MeV α -Bestrahlung einer Fe-Folie mit dahinter angebrachter Al-Catcher-Folie, wobei nach der Bestrahlung die Al-Folie 4 Stunden lang bei geringstem Abstand zum γ -Detektor (Position 3) ausgemessen wurde. In Abb. 5-2 ist zum Vergleich das γ -Spektrum einer auf dieselbe Meßdauer wie oben normierte α -aktivierte Al-Folie (B), welches zur besseren Übersichtlichkeit um einen Faktor 1000 nach unten skaliert wurde, eingezeichnet. Die im oberen Spektrum in Abb. 5-2 zusätzlich vorhandenen kleinen Peaks stellen die Aktivitäten der eingefangenen Rückstoßkerne von Mn bis Co und Ni dar.

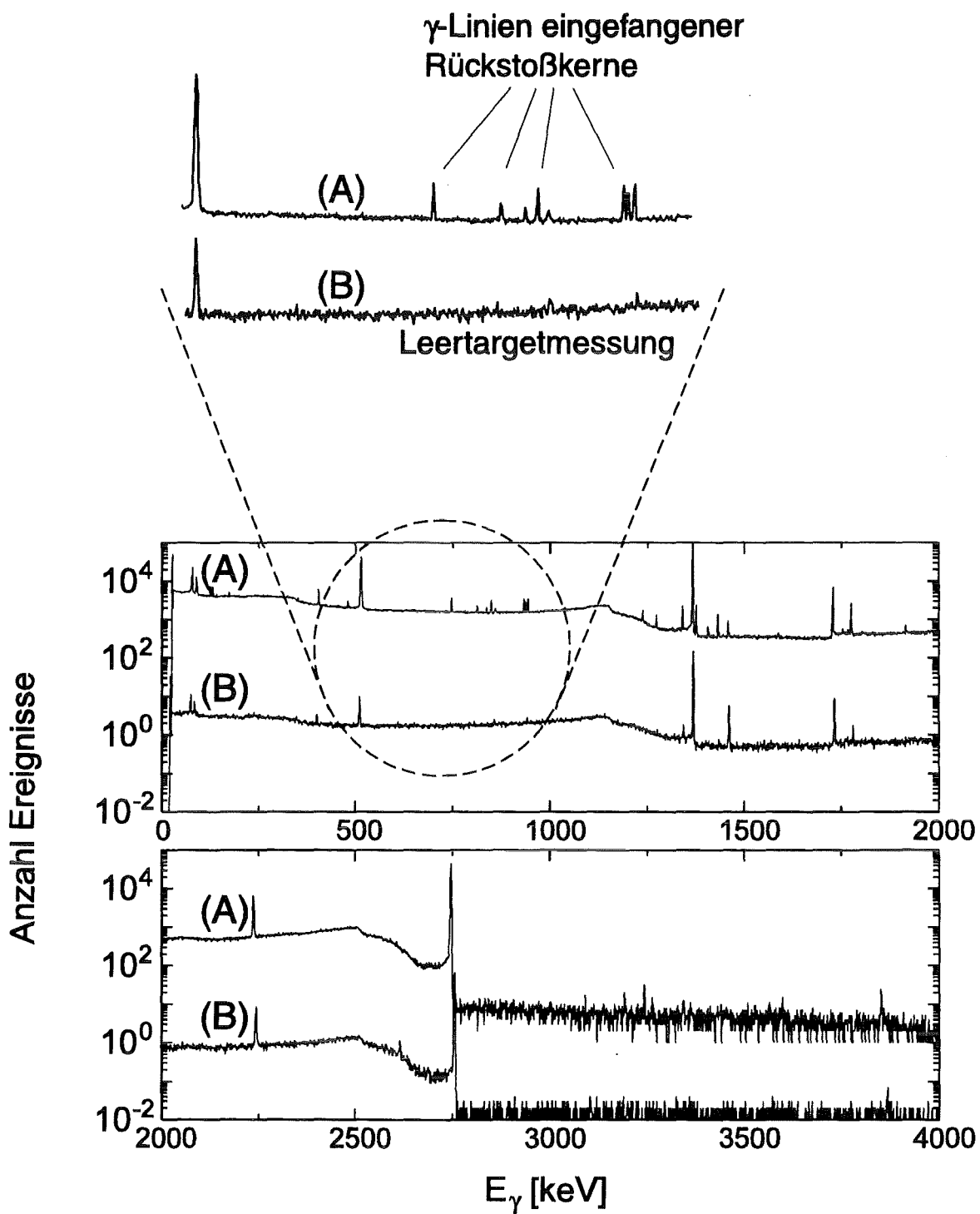


Abbildung 5-2: γ -Spektrum einer Al-Catcher-Folie, die hinter einer mit 65 MeV α -bestrahlten Fe-Folie angebracht war.

E_α [MeV]	^{57}Ni	^{56}Ni	$^{58}\text{Co}_g$	^{57}Co	^{56}Co	^{55}Co
$103,6 \pm 0,7$	0,66 $\pm 0,06$	1,05 $\pm 0,47$	0,59 $\pm 0,10$	0,54 $\pm 0,05$	0,77 $\pm 0,05$	0,91 $\pm 0,04$
$99,7 \pm 1,0$	0,74 $\pm 0,06$	0,99 $\pm 0,30$	0,60 $\pm 0,06$	0,60 $\pm 0,03$	0,75 $\pm 0,04$	0,85 $\pm 0,05$
$95,4 \pm 1,3$	0,74 $\pm 0,04$	0,93 $\pm 0,21$	0,59 $\pm 0,04$	0,61 $\pm 0,03$	0,87 $\pm 0,04$	0,80 $\pm 0,08$
$91,0 \pm 1,7$	0,79 $\pm 0,06$	1,04 $\pm 0,17$	0,67 $\pm 0,03$	0,68 $\pm 0,03$	0,84 $\pm 0,03$	1,03 $\pm 0,18$
$64,5 \pm 0,7$	0,62 $\pm 0,03$	0,99 $\pm 0,39$	0,70 $\pm 0,09$	0,66 $\pm 0,04$	1,14 $\pm 0,08$	0,69 $\pm 0,04$
$54,4 \pm 0,8$	0,65 $\pm 0,03$	0,52 $\pm 0,28$	0,56 $\pm 0,08$	0,56 $\pm 0,05$	0,79 $\pm 0,06$	0,62 $\pm 0,05$
$44,3 \pm 0,9$	0,54 $\pm 0,02$	0,75 $\pm 0,37$	0,74 $\pm 0,03$	0,60 $\pm 0,02$	0,49 $\pm 0,08$	0,67 $\pm 0,03$
$34,2 \pm 1,0$	0,43 $\pm 0,02$	0,88 $\pm 0,19$	0,73 $\pm 0,02$	0,35 $\pm 0,02$	0,61 $\pm 0,05$	0,46 $\pm 0,02$

Tabelle 5-1: Experimentell ermittelte mittlere Rückstoßreichweiten von ^{57}Ni bis ^{55}Co (Werte in μm)

E_α [MeV]	^{54}Mn	$^{52}\text{Mn}_g$	^{51}Cr	^{48}V	^{47}Sc
$103,6 \pm 0,7$	1,04 $\pm 0,10$	1,07 $\pm 0,03$	1,15 $\pm 0,06$	1,17 $\pm 0,04$	1,11 $\pm 0,12$
$99,7 \pm 1,0$	0,93 $\pm 0,09$	1,11 $\pm 0,04$	1,12 $\pm 0,05$	1,21 $\pm 0,04$	1,06 $\pm 0,12$
$95,4 \pm 1,3$	0,96 $\pm 0,05$	1,11 $\pm 0,04$	1,10 $\pm 0,05$	1,09 $\pm 0,04$	1,07 $\pm 0,12$
$91,0 \pm 1,7$	1,04 $\pm 0,05$	1,15 $\pm 0,04$	1,09 $\pm 0,05$	1,10 $\pm 0,04$	1,24 $\pm 0,12$
$64,5 \pm 0,7$	0,74 $\pm 0,18$	0,74 $\pm 0,03$	1,34 $\pm 0,49$	1,01 $\pm 0,48$	1,13 $\pm 0,49$
$54,4 \pm 0,8$	0,85 $\pm 0,13$	0,77 $\pm 0,04$	1,26 $\pm 0,42$		
$44,3 \pm 0,9$	0,70 $\pm 0,06$	0,68 $\pm 0,03$	0,86 $\pm 0,64$		
$34,2 \pm 1,0$	0,64 $\pm 0,02$	0,29 $\pm 0,08$			

Tabelle 5-2: Experimentell ermittelte mittlere Rückstoßreichweiten von ^{54}Mn bis ^{47}Sc (Werte in μm)

5.1.2 Theoretische Berechnung der Rückstoßreichweiten

Wie in Kap. 2.1 bereits ausgeführt, wurde der Kernmodell-Code ALICE-91 mit der Option versehen, Rückstoßenergiespektren für die Restkerne bei Kernreaktionen von

mittelschweren Kernen nach dem Compound- bzw. Precompound-Kernmodell zu berechnen. Solch ein typisches Spektrum zeigt Abb. 5-3.

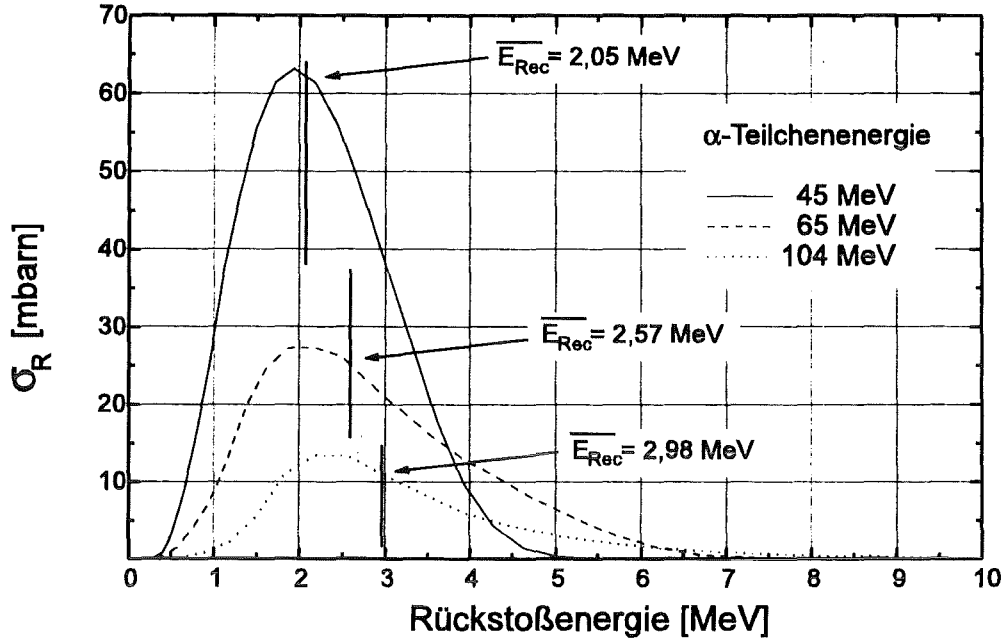


Abbildung 5-3: Typisches Rückstoßenergiespektrum bei der Reaktion $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)^{57}\text{Co}$

Solche Spektren wurden für die in Kap. 4 diskutierten Reaktionsprodukte als Funktion von der Projektilenergie berechnet. Die Daten liegen bei 40 Energiewerten mit nicht-äquidistanten Abständen vor. Es gelten für den gesamten Reaktionsquerschnitt σ_{tot} eines Nuklids *Nuc* für ein Eisenisotop *Iso*

$${}_{\text{Iso}} \sigma_{\text{tot}}^{\text{Nuc}} = \sum_{E_R} {}_{\text{Iso}} \sigma_R^{\text{Nuc}} \quad (5 - 5)$$

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{Nuc}} = \sum_{\text{Iso}} a_{\text{Iso}} {}_{\text{Iso}} \sigma_{\text{tot}}^{\text{Nuc}} = \sum_{\text{Iso}} a_{\text{Iso}} \sum_{E_R} {}_{\text{Iso}} \sigma_R^{\text{Nuc}}$$

und für die mittlere Rückstoßenergie \bar{E}_R

$${}_{\text{Iso}} \bar{E}_R^{\text{Nuc}} = \frac{\sum_{E_R} {}_{\text{Iso}} \sigma_R^{\text{Nuc}} E_R}{\sum_{E_R} {}_{\text{Iso}} \sigma_R^{\text{Nuc}}} \quad (5 - 6)$$

$$\bar{E}_R^{\text{Nuc}} = \sum_{\text{Iso}} a_{\text{Iso}} \bar{E}_R^{\text{Nuc}} = \sum_{\text{Iso}} a_{\text{Iso}} \frac{\sum_{E_R} \sigma_R^{\text{Nuc}} E_R}{\sum_{E_R} \sigma_R^{\text{Nuc}}} \quad (5-7)$$

a_{Iso} = relative Häufigkeit der Eisenisotope

σ_R = Wahrscheinlichkeit für die Produktion eines Rückstoßkerns der Energie E_R .

Werden die mittleren Rückstoßenergien \bar{E}_R in PRAL eingegeben (siehe Kap. 2.2.2), so kann die mittlere, in Strahlrichtung projizierte Reichweite berechnet werden. Einen typischen Verlauf für die Reichweite von ^{56}Co in $^{\text{nat}}\text{Fe}$ zeigt Abb. 5-4.

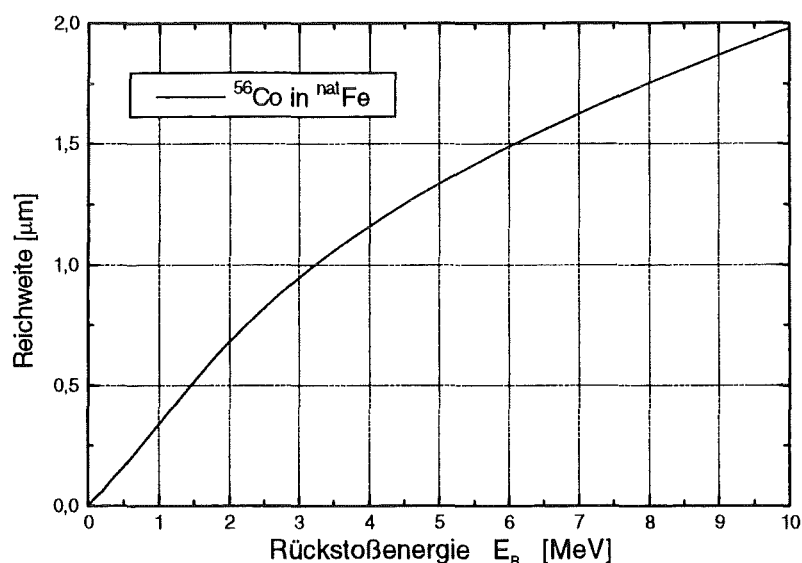


Abbildung 5-4: Reichweite als Funktion der Rückstoßenergie E_R für ^{56}Co in $^{\text{nat}}\text{Fe}$ (Berechnung mit PRAL)

5.1.3 Vergleich mit theoretischen Werten und Literaturdaten

Die experimentell gemessenen Rückstoßreichweiten können mit den theoretischen PRAL-Berechnungen und mit Literaturdaten verglichen werden. Der Vergleich mit der Theorie ist in Abb. 5-5 dargestellt.

Das in Abb. 5-5 grau eingezeichnete Streuband stellt den theoretisch vorhergesagten Bereich der Rückstoßreichweite als Funktion der Rückstoßenergie für die in der Legende aufgeführten Nuklide dar. Das Streuband kommt durch die unterschiedlichen Massen- und Ladungszahlen der Rückstoßkerne zustande. Die eingezeichneten Meßpunkte sind die experimentellen Reichweitenwerte aus den Tabellen 5-1 und 5-2, denen ein mittlerer theoretischer Rückstoßenergiewert (PRAL) zugeordnet wurde. Von den eingezeichneten Meßpunkten liegt fast die Hälfte innerhalb des theoretischen Streubandes. Die Tendenz der

außerhalb liegenden Werte ist jedoch nicht symmetrisch zum Streuband, sondern zu geringeren Reichweiten hin verschoben. Werden die Fehlerbalken der experimentellen Werte betrachtet, so kann der Anteil der Meßpunkte, die mit den theoretischen Daten vereinbar sind, auf über 70% gesteigert werden.

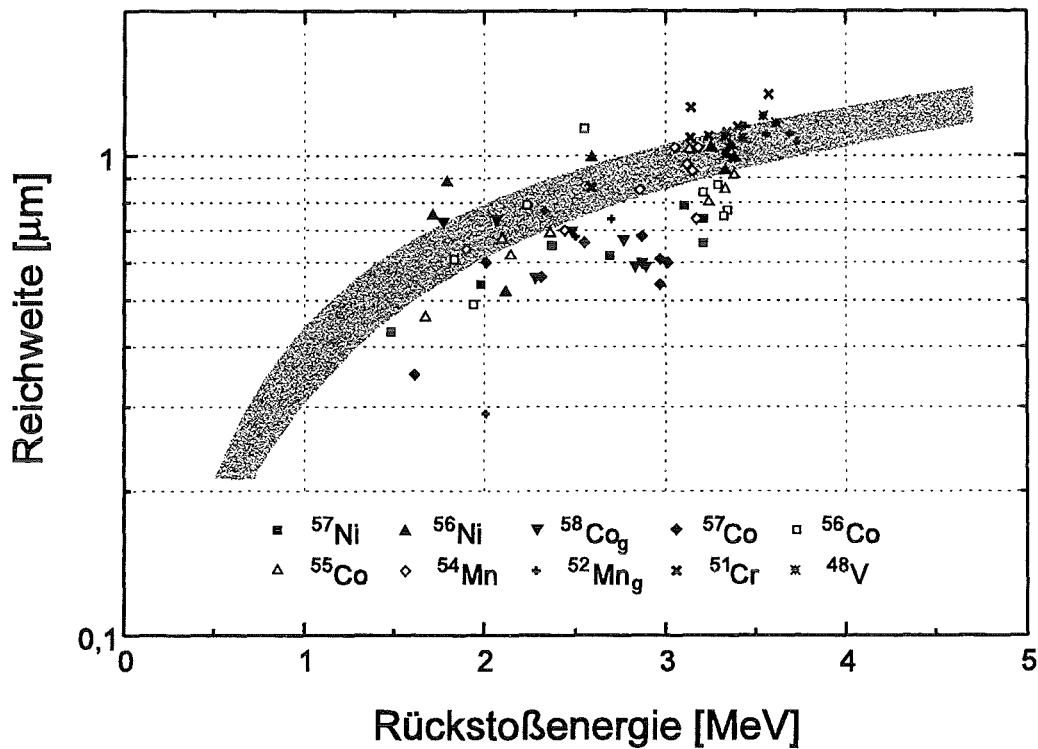


Abbildung 5-5: Vergleich der experimentell gemessenen Reichweiten mit den theoretischen Vorhersagen (PRAL-Code).

Ein direkter Vergleich mit Literaturdaten kann nicht durchgeführt werden, da bisher keine Arbeiten vorliegen, bei denen die mittlere Rückstoßenergie aus einer spektralen Verteilung ermittelt wurde. Die einzigen vorliegenden Literaturangaben [4-32, 5-1, 5-2] diskutieren Rückstoßreichweiten verschiedener Nuklide in Eisenisotopen bzw. in reinem Eisen. Die Bestrahlungen der Targets wurden mit ^3He - und ^4He -Kernen durchgeführt. Als Theorie für den Vergleich der Reichweiten wurde die Theorie von Lindhard, Scharff und Schiott (LSS-Theorie) [5-3] herangezogen. Die von der LSS-Theorie gelieferten Reichweiten wurden korrigiert, um die in Strahlrichtung projizierte mittlere Reichweite zu erhalten. Desweiteren wurden nur Reaktionen verwendet, von denen angenommen werden konnte, daß das Projektil seinen gesamten Impuls an den Targetkern abgegeben hat. Zusätzlich wurden Korrekturen durch den Einfluß der Nukleonenemission durchgeführt.

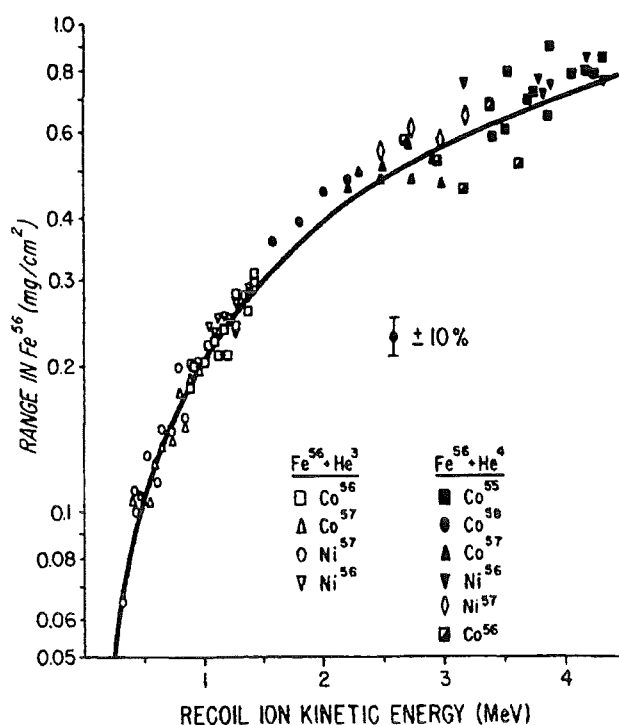


Abbildung 5-6: Vergleich der experimentellen Rückstoßreichweiten mit den theoretischen LSS-Werten [4-32].

In Abb. 5-6 sind Literaturdaten angegeben. Die Reichweitewerte sind auf mg/cm^2 normiert, um sie mit Targets anderer Dichte vergleichen zu können. Der Wert $1\text{mg}/\text{cm}^2$ entspricht $1,27\mu\text{m}$ Reichweite in reinem Eisen.

Es zeigt sich bei geringen Rückstoßenergien aufgrund der Korrekturen eine erstaunlich gute Übereinstimmung der experimentellen Werte mit LSS. Im Gegensatz dazu entsteht bei höheren Rückstoßenergien ein breites Streuband der experimentellen Werte. Dies bedeutet, daß für den oberen Energiebereich die Korrekturen nicht so einfach durchzuführen waren.

Ein Vergleich der LSS-Werte mit dem mit PRAL berechneten Streuband in Abb. 5-5 zeigt, daß die LSS-Kurve ca. 10%-15% unterhalb des PRAL-Streubandes zu liegen kommt. Dies kommt durch die Verwendung einer verbesserten Nuclear Stopping Power in PRAL zustande, wie in Ref. [5-4] erläutert ist.

Abschließend läßt sich sagen, daß die in Abb. 5-6 im oberen Energiebereich liegenden Datenpunkte unter Einbeziehung der $\pm 10\%$ Fehlerbalken mit den PRAL-Rechnungen verträglich sind.

5.2 Bestimmung des elastischen Schädigungsanteils

Die in Kap. 2.3.1 eingeführten Formeln dienen zur Berechnung der Verlagerungsschädigung bei rein elastischer Projektil-Matrixatom-Wechselwirkung, welche deshalb als elastische Verlagerungsschädigung bezeichnet wird. Soll die elastische Schädigung differentiell als Funktion der Reichweite richtig berechnet werden, so muß die Reichweitenstreuung in die Thematik der Schädigungsberechnung einbezogen werden. Ein Verfahren dazu wurde von J. Bertsch entwickelt. Es ist in [5-5] beschrieben und wird anhand Abbildung 5-7 erläutert.

Die Gültigkeit des elastischen Verlagerungsquerschnitts bei geringen Projektilenergien wurde bereits in Kap. 2 diskutiert. Hier entsprechen die geringen Projektilenergien den großen Eindringtiefen. Der bei maximaler Eindringtiefe auftretende Schädigungspeak wird demnach zu groß berechnet. Es wird aber auf den nächsten Seiten gezeigt, daß dieser Fehler in der Peakhöhe durch die Anwendung des Reichweitenstreuerverfahrens vermindert wird. Dies bedeutet, daß die elastischen, reichweitengestauten Schädigungswerte wie bisher verwendet werden können.

Ausgehend von der energieabhängigen elastischen Schädigung, siehe Kap. 2.3.1, wurde eine Gauß-Verteilung als Reichweitenstreuung angenommen. Dabei wird der Schädigungspeak über den Bereich der Reichweitenstreuung variiert und anhand der Verteilungsfunktion gewichtet. Diese Aufgabe wurde mit dem Fortran-Programm DPAX [5-6] gelöst. Dieses Programm stellt eine Weiterentwicklung des Programms DPAE [2-10] dar und berechnet allgemein für verschiedene Projektile und Targets die reichweitenabhängige elastische Schädigung, wie in Abb. 5-8 eingezeichnet.

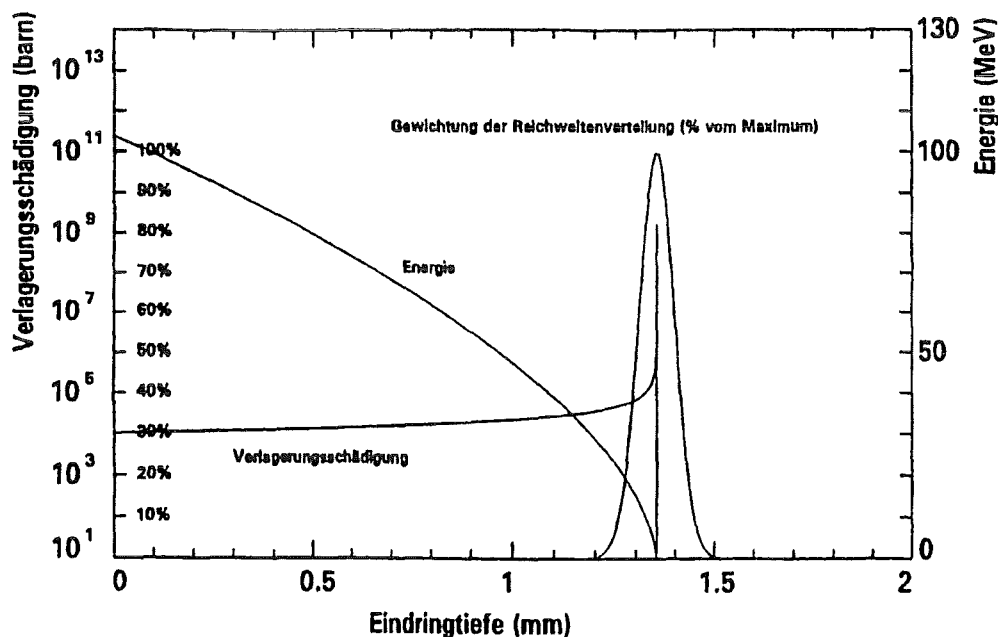


Abbildung 5-7: Darstellung der Größen Energieverlust, Schädigung und Reichweitenverteilung über der Eindringtiefe in ^{nat}Fe für 104 MeV α -Teilchen [5-5].

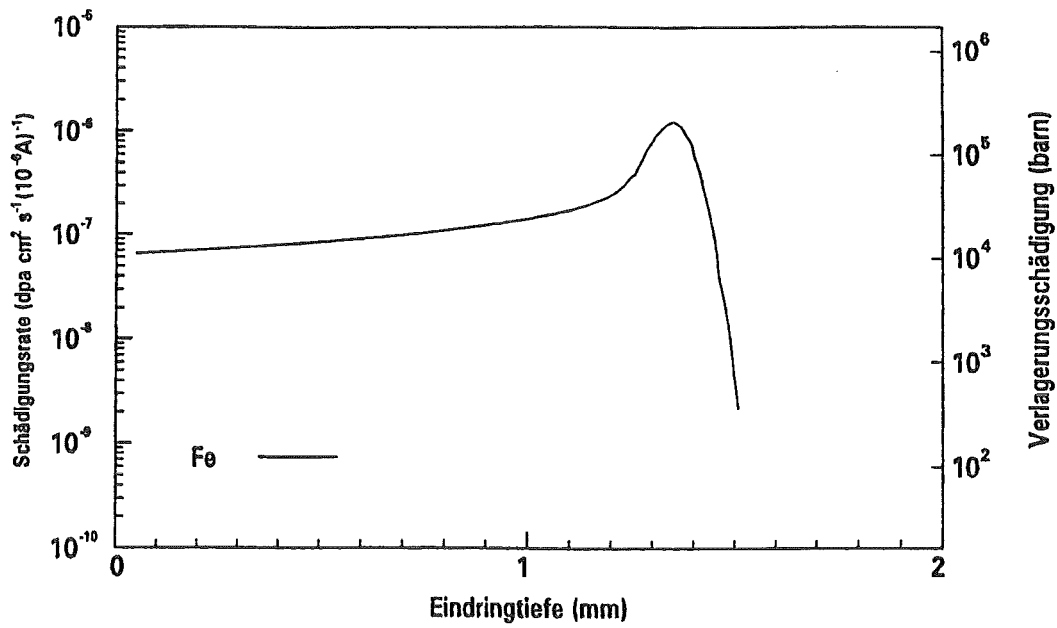


Abbildung 5-8: Reichweitenabhängige elastische Verlagerungsschädigung für 104 MeV α -Teilchen in $^{\text{nat}}\text{Fe}$ [5-5].

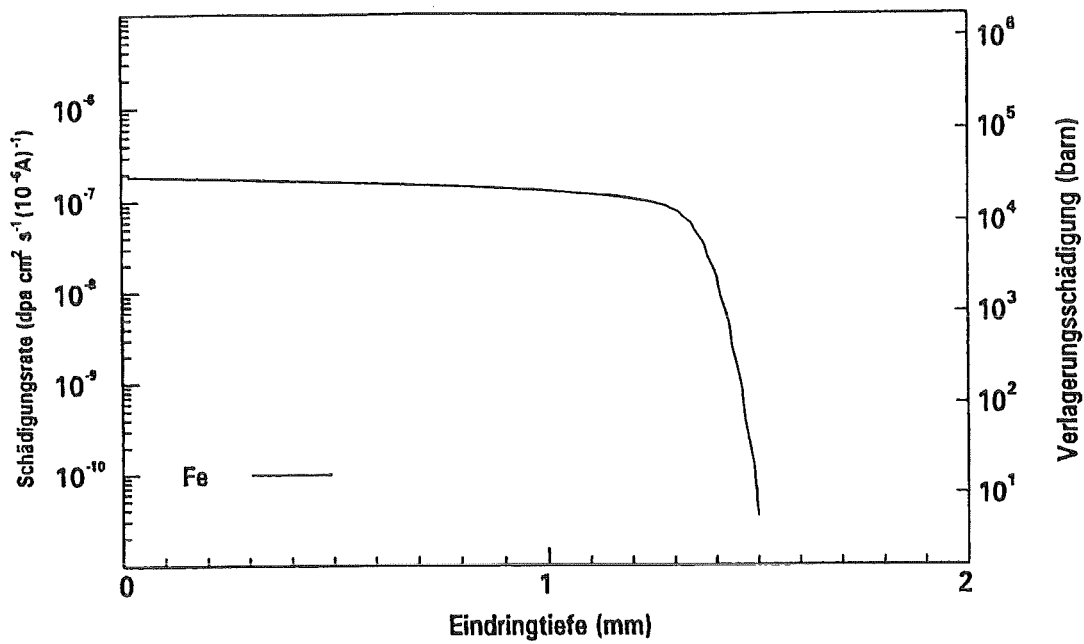


Abbildung 5-9: Reichweitenabhängige Verlagerungsschädigung für linear energiemodulierte α -Teilchen in $^{\text{nat}}\text{Fe}$ mit 104 MeV Maximalenergie [5-5].

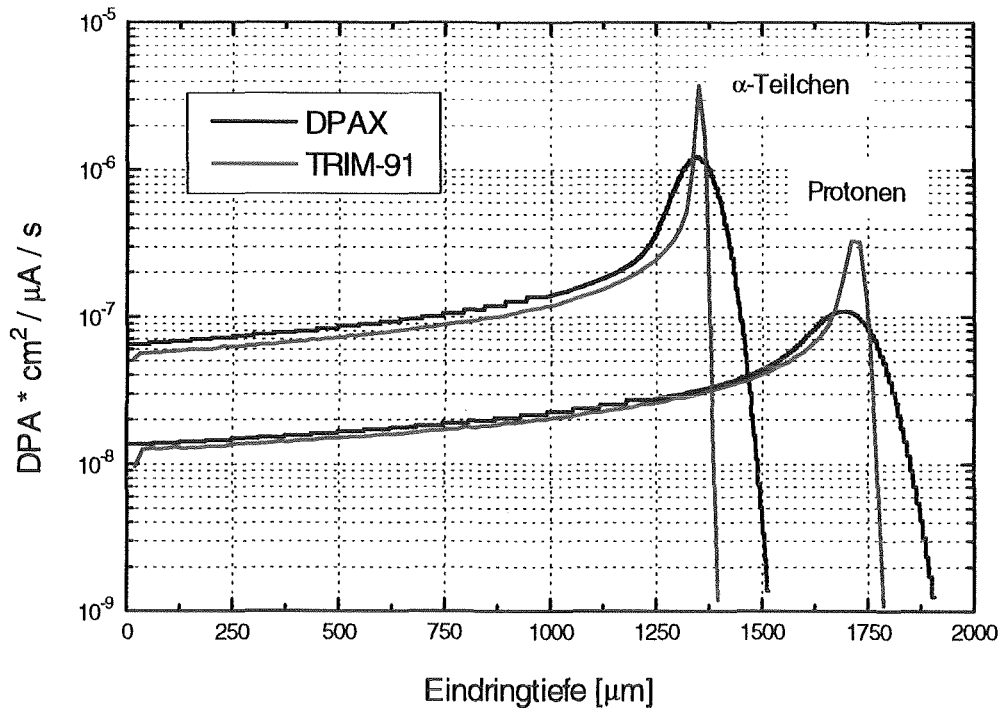


Abbildung 5-10: Vergleich der mit TRIM-91 und DPAX berechneten Schädigung in reinem Eisen für Protonen und α -Teilchen

Wird zum Zwecke der Implantation der Projektile zusätzlich die Primärenergie der Projektile moderiert, so verschiebt sich der Schädigungspeak der Schädigungskurve zu kleineren Reichweiten hin. Wird diese Energiemoderation linear in der Zeit t vorgenommen, so verändert sich das Schädigungsprofil, wie in Abbildung 5-9 eingezeichnet.

Um die Resultate einordnen zu können, wurde zusätzlich ein Vergleich der elastischen Schädigungsergebnisse mit Berechnungen des weit verbreiteten Monte-Carlo-Programms TRIM-91 (siehe Kap. 2.2.1) durchgeführt. Um eine genügend gute Statistik zu erreichen, wurde der TRIM-91-Code auf einem mit einem 90 MHz-Pentium-Prozessor ausgestatteten PC ausgeführt. Nach ca. 1 Woche Rechenzeit pro Datensatz stand je eine Schädigungskurve für Protonen (30 MeV) und α -Teilchen (104 MeV) zur Verfügung. In Abbildung 5-10 sind die TRIM-91 Ergebnisse und die DPAX-Resultate für Protonen und α -Teilchen vergleichend eingezeichnet.

Der Vergleich zeigt im Hochenergiebereich (geringe Eindringtiefe) sowohl bei α -Teilchen wie bei Protonen eine gute bis sehr gute Übereinstimmung. Bei den α -Teilchen liegen die TRIM-91 Werte ca. 10% unterhalb den DPAX Werten. Bei den Protonen liegen die TRIM-91 Werte ca. 5 % unter den DPAX Werten. Im Bereich der maximalen Eindringtiefen zeigt sich jedoch ein Unterschied, der durch die unterschiedlichen Rechenmethoden von TRIM-91 und DPAX zustandekommt. Während bei TRIM-91 mit der korrekten Form des Streupotentials (Thomas-Fermi-Potential) bei geringen Projektilenergien gearbeitet wird, zeigen die nach Rutherford berechneten und reichweitestrestreuten DPAX-Daten einen etwas anderen Verlauf. Die Höhe des Peaks bei maximaler Eindringtiefe hängt deutlich von der verwendeten Reichweitestrefunktion ab.

Dadurch, daß TRIM-91 eine etwas geringere Streubreite als die in DPAX verwendete Halbwertsbreite der zu erwartenden Gaußverteilung verwendet, berechnet TRIM-91 um bis zu einem Faktor 4 höhere Spitzenschädigungswerte. Dieser Bereich höherer Schädigungswerte hat jedoch nur eine geringe räumliche Ausdehnung und spielt bei den später zu betrachtenden moderierten Schädigungswerten keine Rolle mehr. Entscheidend ist, daß die integrale Schädigung bei TRIM-91 und DPAX gut übereinstimmt. Dies kann jedoch aus Figur 5-10 nicht einfach abgelesen werden, da eine halblogarithmische Auftragung vorliegt. Desweiteren ist jedoch eindeutig ersichtlich, daß der eingangs dieses Kapitels genannte Effekt des zu hohen Schädigungspeaks der nichtreichweitengestreuten Schädigungswerte durch die in DPAX angewandte Reichweitenstreuung nicht mehr auftritt. Um die Unterschiede zwischen den TRIM-91 und DPAX Resultaten vollständig zu beheben, wäre eine sehr gute experimentelle Bestimmung der Reichweitenverteilung notwendig.

5.3 Bestimmung des nichtelastischen Schädigungsanteils

In den Kapiteln 1 und 2.3.2 wurde ausgeführt, wie die Berechnung der nichtelastischen Schädigung mit dem Code LINDA durchgeführt wird. Die nichtelastische Schädigung kann in Abhängigkeit von der Eindringtiefe der Projektile im Target berechnet werden. Als Parameter können die Projektilsorte (α, p), kinetische Energie, Bereich der Energiemoderation, Bestrahlungsstrom, Dicke des Targets und die Bestrahlungsdauer variiert werden. Im folgenden wird für dicke Targets die Produktion der nichtelastischen Schädigung im Dual-Beam-Parameterbereich ($E_{\max}^{\alpha} = 104 \text{ MeV}, E_{\max}^p = 30 \text{ MeV}$) diskutiert.

Der erste Fall beschreibt die Bestrahlung eines dicken ^{nat}Fe -Targets mit Protonen mit einer konstanten Primärenergie von 30 MeV. Wie in Kapitel 4 diskutiert, werden dabei Rückstoßkerne vom Typ $^{58,57,56,55}\text{Co}$, ^{53}Fe und $^{54,52}\text{Mn}$ erzeugt. LINDA berechnet unter Berücksichtigung der typischen Rückstoßenergiespektren nach dem NRT-Modell die in Abbildung 5-11 dargestellten, nichtelastischen, reichweiteabhängigen Schädigungsverläufe. Die Reichweitenstreuung wurde in diesem Fall noch nicht berücksichtigt.

Die über dem Ort aufgetragene Größe DPA wurde auf 1 cm^2 Bestrahlungsfläche, $1 \mu\text{A}$ Teilchenstrom und auf 1s Bestrahlungszeit normiert. Die Normierung auf $1 \mu\text{A}$ Teilchenstrom bedeutet bei Protonenbestrahlung, daß die Anzahl Teilchen auf das Target treffen, die einem elektrischen Strom von $1 \mu\text{A}$ gleichzusetzen sind. Treten höher geladene Projektile auf wie z.B. α -Teilchen mit $z = 2$, so entspricht die Normierung auf $1 \mu\text{A}$ Teilchenstrom einer Normierung auf einen elektrischen Strom von $2 \mu\text{A}$.

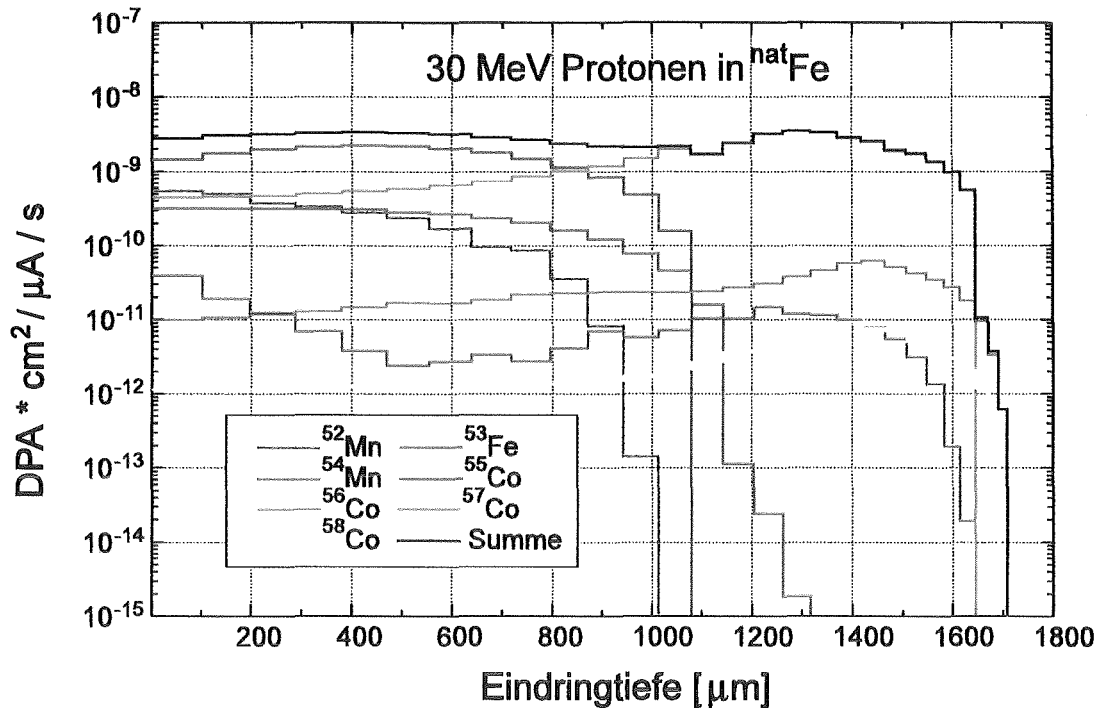


Abbildung 5-11: Nuklidspezifische, nichtelastische Verlagerungsschädigung unter unmoderierter 30 MeV Protonenbestrahlung

Die Kernreaktion mit den geringsten Reaktionsschwellen liefern die Nuklide ⁵⁶Co, ⁵⁷Co und ⁵⁸Co, wobei die Beiträge von ⁵⁷Co und ⁵⁸Co zur Gesamtsumme gegenüber ⁵⁶Co vernachlässigbar gering sind. ⁵⁶Co liefert bei Eindringtiefen oberhalb 1,2 mm den Hauptbeitrag der nichtelastischen Schädigung. Im hochenergetischen Bereich, d.h. bei geringen Eindringtiefen erzeugt in erster Linie ⁵⁴Mn die nichtelastische Schädigung, unterstützt von ⁵⁵Co und ⁵⁶Co. Die Nuklide ⁵³Fe und ⁵²Mn leisten nur einen sehr geringen Beitrag zur gesamten nichtelastischen Verlagerungsschädigung. Als Superposition aus allen Beiträgen ergibt sich ein Kurvenverlauf um $3 \cdot 10^{-9}$ DPA*cm²/μA/s, der bei 1 mm Eindringtiefe ein schwaches Minimum und bei 1,4 mm Eindringtiefe ein schwaches Maximum zeigt.

Die Bestrahlung eines dicken ^{nat}Fe-Targets mit α-Teilchen einer konstanten Energie von 104 MeV diskutiert sich wie folgt. Wie in Kapitel 4 aufgeführt, werden unter diesen Bedingungen experimentell verifizierbar Rückstoßkerne vom Typ ^{57,56}Ni, ^{58,57,56,55}Co, ^{53,52}Fe, ^{54,52}Mn, ^{51,49,48}Cr, ^{52,48}V, und ⁴⁷Sc erzeugt. Da die theoretische Berechnung der Anregungsfunktion von ⁴⁷Sc nicht mit dem Experiment vereinbar ist, wird ⁴⁷Sc nicht weiter

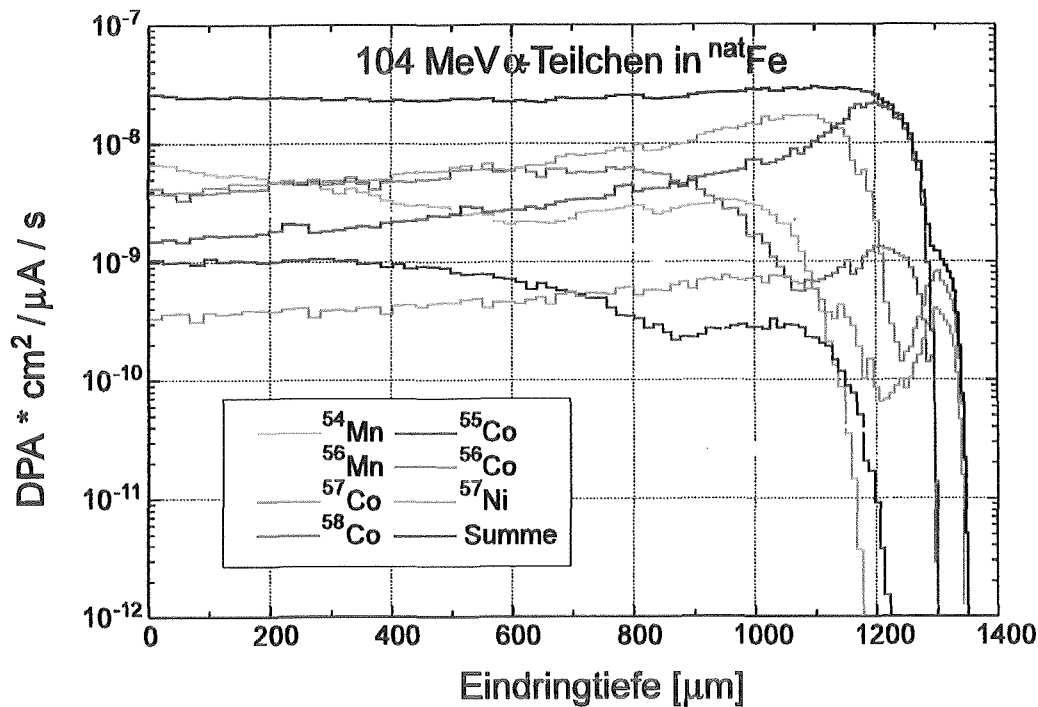


Abbildung 5-12: Nuklidspezifische, nichtelastische Verlagerungsschädigung unter unmoderierter 104 MeV α -Teilchen Bestrahlung für die Nuklide ⁵⁸Ni bis ⁵⁵Co.

diskutiert. In den Abbildungen 5-12 und 5-13 sind die nichtelastischen Schädigungsbeiträge unter α -Bestrahlungen eingezeichnet. Bei niedrigen Projektilenergien, d.h. bei großen Eindringtiefen ($> 1,2$ mm) ist der nichtelastische Schädigungsanteil hauptsächlich durch die Rückstoßkerne ⁵⁷Co und ⁵⁸Co charakterisiert, wie Abbildung 5-12 zu entnehmen ist. Vernachlässigbare Beiträge in diesem Eindringtiefenbereich werden von ⁵⁷Ni, ⁵⁶Ni und ⁵⁶Co geliefert. Bei hohen Energien, d.h. geringen Eindringtiefen stammen die relevanten Beiträge von den Nukliden ⁵¹Cr, ⁵⁴Mn, ⁵²Mn, ⁵⁷Co und ⁵⁶Co. Die restlichen Beiträge der Nuklide ⁵⁵Co, ⁵²V, ⁴⁸V, ⁵³Fe, ⁴⁹Cr, ⁵⁶Mn und ⁵²Fe liefern Beiträge $< 5\%$ zur Gesamtsumme. Als Gesamtsumme ergibt sich aus der Superposition aller experimentell erfaßten Nuklide ein Verlauf $> 2 \cdot 10^{-8}$ DPA*cm²/μA/s. Dieser Wert ist im Tiefenbereich von 0 bis 700 μ m konstant und steigt zu größeren Eindringtiefen bis auf $3 \cdot 10^{-8}$ DPA*cm²/μA/s an.

Bei Dual-Beam-Bestrahlungen werden, um eine homogene Implantation der H- und He-Atome zu erreichen, die Projektilenergien für p und α moderiert. Diese Energiemoderation hat deutliche Auswirkungen auf die Tiefenverteilungen der nichtelastischen Schädigung. Dieser Effekt soll im folgenden diskutiert werden.

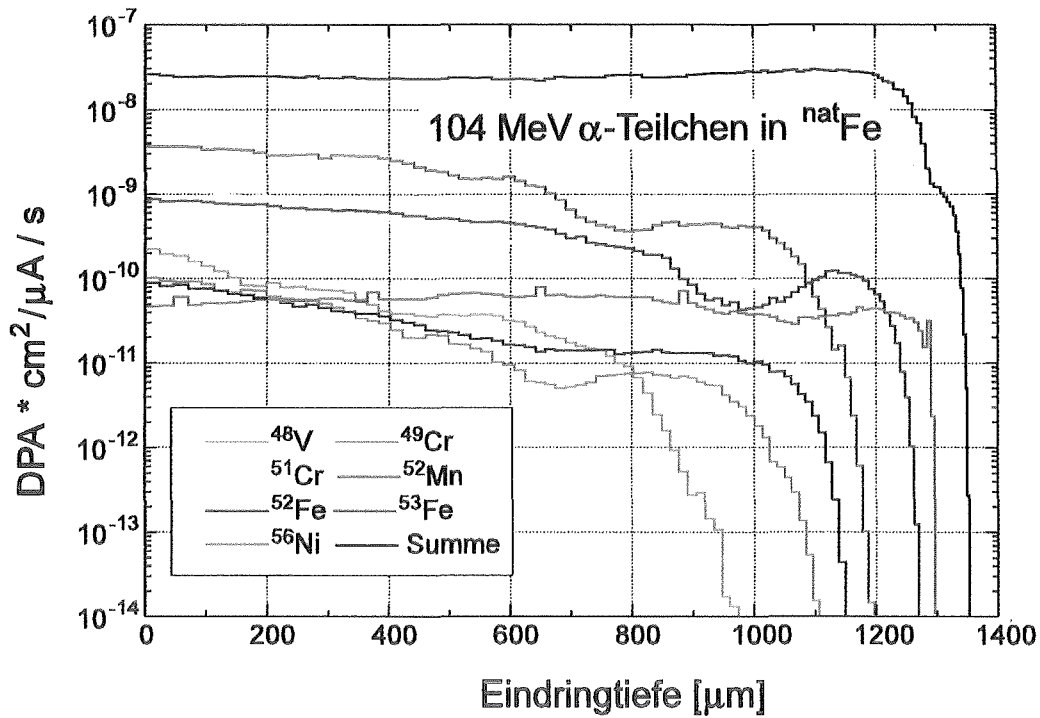


Abbildung 5-13: Nuklidspezifische, nichtelastische Verlagerungsschädigung unter unmoderierter 104 MeV α -Teilchen Bestrahlung für die Nuklide ^{53}Fe bis ^{48}V .

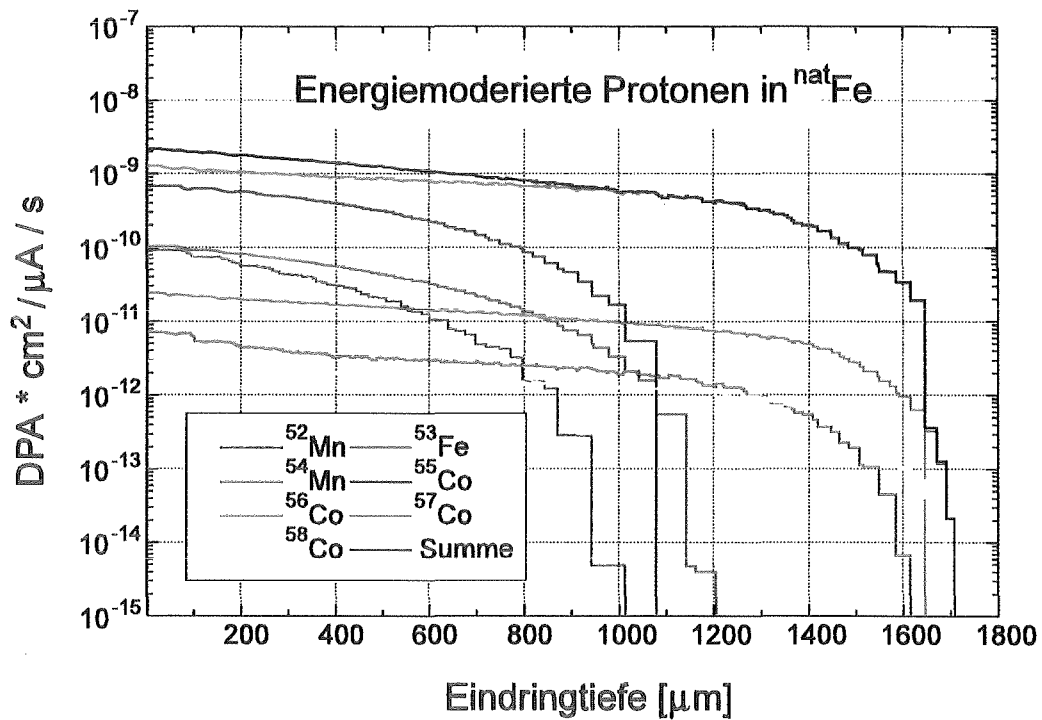


Abbildung 5-14: Nuklidspezifische nichtelastische Verlagerungsschädigung unter moderierter Protonenbestrahlung

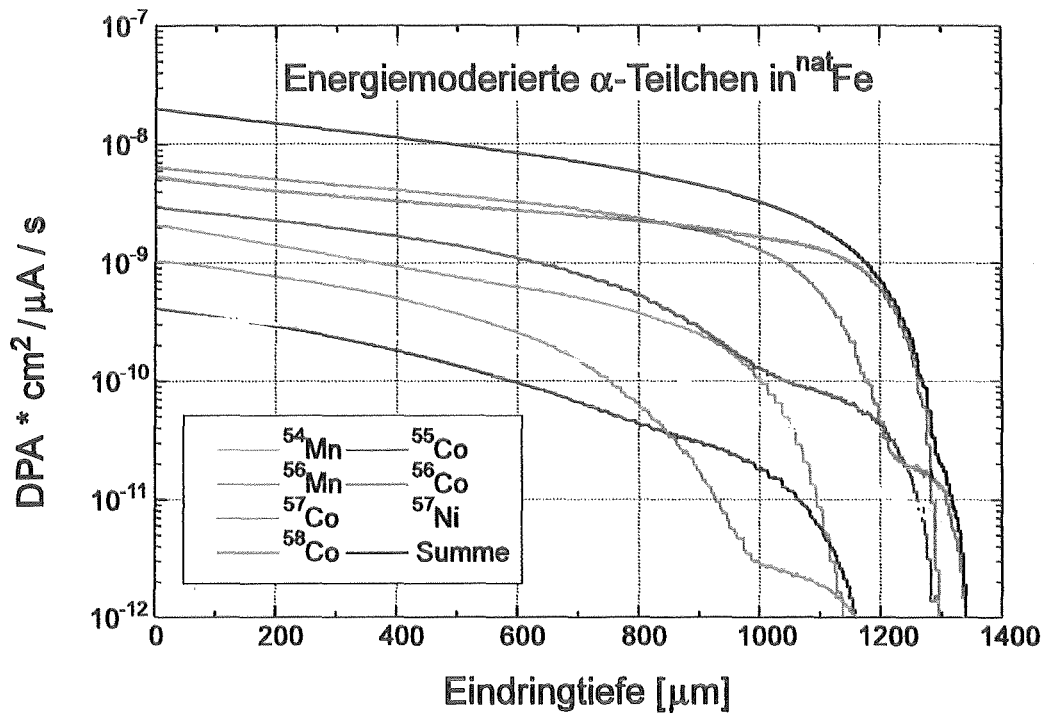


Abbildung 5-15: Nuklidspezifische nichtelastische Verlagerungsschädigung unter moderierter α -Teilchen Bestrahlung für die Nuklide ⁵⁸Ni bis ⁵⁵Co

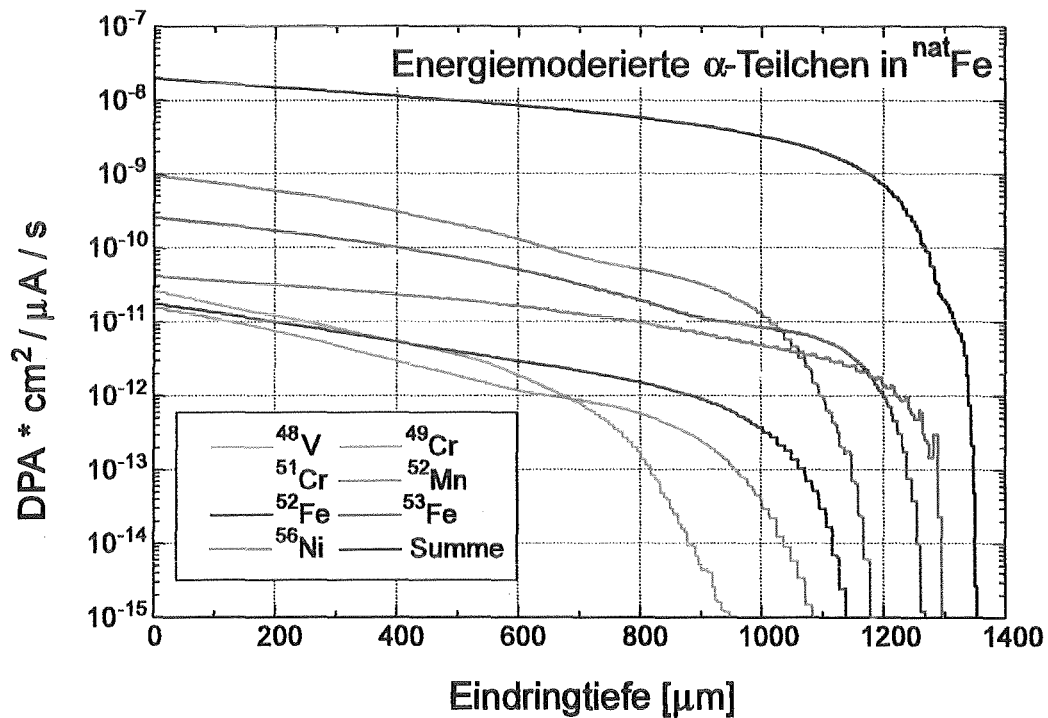


Abbildung 5-16: Nuklidspezifische nichtelastische Verlagerungsschädigung unter moderierter α -Teilchen Bestrahlung für die Nuklide ⁵³Fe bis ⁴⁸V

Bei den Protonen wurde für ein dickes Target die Teilchenenergie von 1 MeV bis 30 MeV variiert, während bei den α -Teilchen ebenfalls für ein dickes Target die Energie im Bereich 1 MeV bis 104 MeV moderiert wurde. Die nuklidspezifischen nichtelastischen Schädigungsbeiträge unter energiemodierten Bedingungen sind in den Abbildungen 5-14 bis 5-16 dargestellt.

Beim Vergleich der moderierten Schädigungsverteilungen mit den nichtmoderierten Schädigungsverteilungen zeigt sich insbesondere bei großen Eindringtiefen ein deutlicher Rückgang der Schädigungswerte. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die großen Eindringtiefen nur durch Projektile mit hohen Anfangsenergien erreichbar sind. Bei der durchgeführten Moderation werden alle Energieintervalle gleichmäßig durchlaufen. Dadurch treten die hohen Energien weniger wahrscheinlich auf als bei einer Bestrahlung mit konstanter, hoher Projektilenergie. Daß die Flächen unter den Schädigungskurven für moderierte Berechnungen deutlich unterhalb denen für nichtmoderierte Berechnungen liegen, erklärt sich dadurch, daß im moderierten Fall nur 50 % der Energie des nichtmoderierten Falls im Target deponiert wird, was natürlich zur Verringerung der integralen Anzahl der Verlagerungen führen muß. Lediglich bei sehr geringen Eindringtiefen kommt es bei manchen Nukliden zu geringfügig höheren moderierten Schädigungswerten als im nichtmoderierten Fall. Dies kommt daher, weil die Schädigungsprofile dieser Nuklide im nichtmoderierten Fall bei diesen Nukliden bei größeren Eindringtiefen höhere Werte annehmen als bei geringeren Eindringtiefen. Durch die Energiemoderation werden diese Maxima nach links verschoben, wodurch sie dann bei den geringen Eindringtiefen zu einer Erhöhung der Schädigung führen.

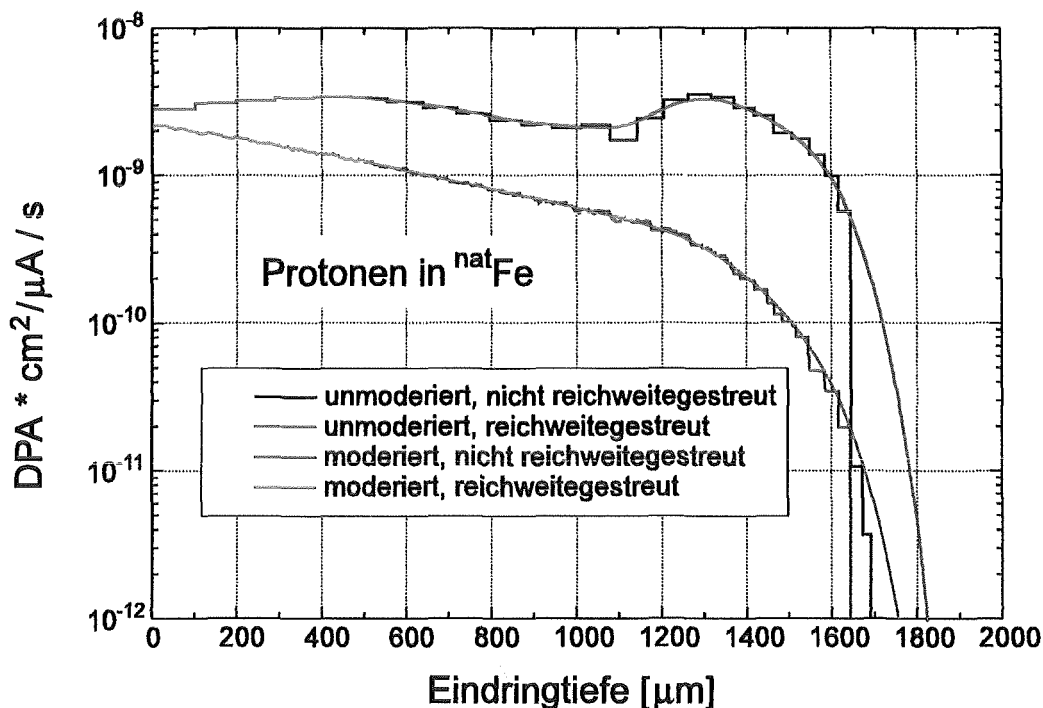


Abbildung 5-17: Nichtelastische Summschädigungsprofile für Protonen im moderierten nichtmoderierten und reichweitestreu / nichtreichweitestreu Fall für 30 MeV Protonen.

Die jeweiligen energiemodierten Schädigungssummenprofile zeigen einen sehr glatten Verlauf mit dem höchsten Wert der Schädigung an der strahlaufwärts gelegenen Targetoberfläche. Um die nichtelastischen Schädigungsprofile direkt mit den elastischen Schädigungsprofilen vergleichen zu können, muß der Einfluß der Reichweitenstreuung der Projektile auf die nichtelastischen Schädigungskurven bestimmt werden. Bei den elastischen Werten mußte ein sehr großer Aufwand betrieben werden, um den innerhalb weniger Gitterkonstanten auftretenden Schädigungspeak korrekt über den Bereich der gaußverteilten longitudinalen Reichweitenstreuung zu verteilen. Da bei den nichtelastischen Schädigungswerten vorwiegend sehr glatte Verläufe auftreten, kann eine vereinfachte Reichweitestreppezur angewendet werden. Die aus dem Programm PRAL erhaltenen reichweiteabhängigen Werte der Standardabweichung für die longitudinale Reichweitenstreuung wurden in eine Gaußverteilung eingesetzt, um an jedem Ort der Reichweitekurve das Streuprofil zu erhalten. Die nichtelastischen Schädigungswerte wurden dann nach den Gaußfunktionen ortsabhängig gewichtet. Durch Superposition der einzelnen Verteilungen wurde die reichweitengestreurte, nichtelastischen Schädigungskurve erhalten. Die Verläufe der reichweitengestreurten und nichtreichweitengestreurten Summenprofile im moderierten und nichtmoderierten Fall sind für Protonen in Abb. 5-17 und für α -Teilchen in Abb. 5-18. zusammengestellt

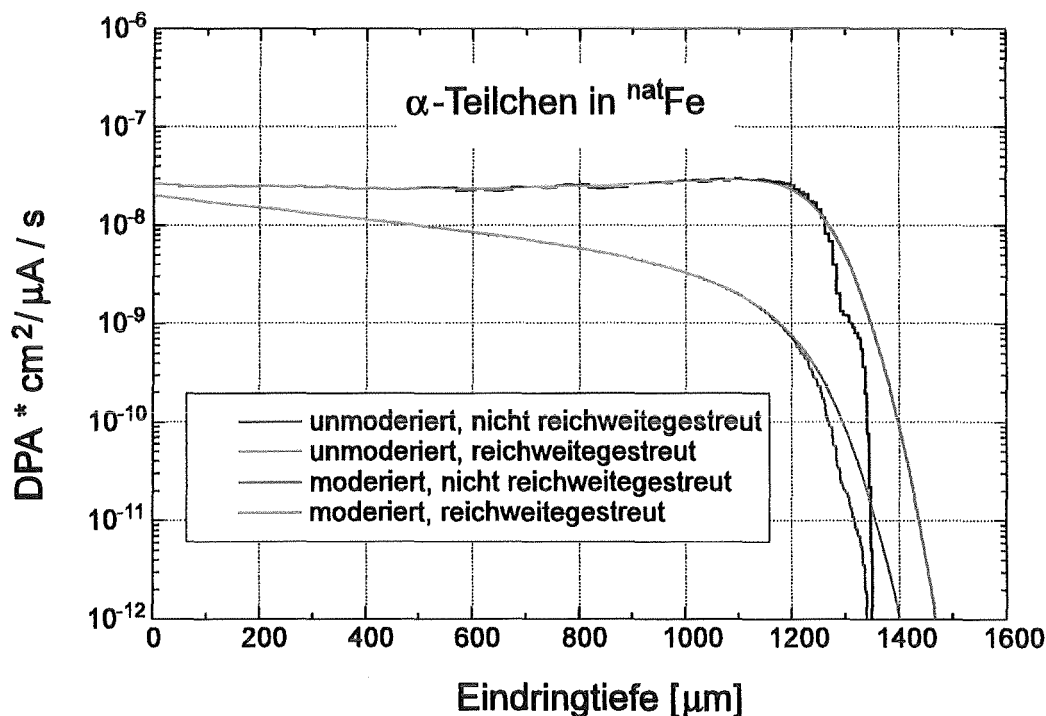


Abbildung 5-18: Nichtelastische Summenschädigungsprofile für α -Teilchen im moderierten / nichtmoderierten und reichweitengestreurten / nichtreichweitengestreurten Fall für 104 MeV Alphateilchen.

Bisher wurden nur die Beiträge zur nichtelastischen Schädigung der in Kapitel 4 aufgeführten und damit experimentell erfaßten Nuklide diskutiert. Experimentell erfaßt werden konnten nur solche Nuklide, die beim radioaktiven Zerfall γ 's mit Energien im Bereich 50 keV bis 4000 keV emittierten. Werden alle theoretisch möglichen

Reaktionskanäle betrachtet, die aus Berechnungen mit dem ALICE-91-Code hervorgehen, so läßt sich der Anteil der experimentell erfaßten Reaktion bezogen auf die gesamte Anzahl abschätzen. Dies ist jedoch nur unter der Annahme möglich, daß die experimentell erfaßten Nuklide in Bezug auf die nichtelastische Schädigung ein repräsentatives Ensemble darstellen, was vorausgesetzt wird.

In Anhang F ist dargestellt, welche der offenen Reaktionskanäle unter Protonenbestrahlung und α -Teilchen-Bestrahlung experimentell nachweisbar waren. Für die α -Teilchen zeigt sich, daß von den 44 offenen Reaktionskanälen ($\sigma > 0,1$ mb) bei $E_\alpha = 104$ MeV 17 Nuklide experimentell nachgewiesen werden konnten, was einen Anteil von 36,3 % ausmacht. Wird der totale Reaktionsquerschnitt betrachtet, so zeigt sich $\sigma^{\text{exp}}(104 \text{ MeV}) = 597$ mb und $\sigma^{\text{tot}}(104 \text{ MeV}) = 1579$ mb, was einen Anteil von 37,7 % ausmacht. Wird dieser Vergleich auch für die Protonen durchgeführt, so zeigt sich, daß bei 30 MeV Protonenergie von den 24 offenen Reaktionskanälen ($\sigma > 0,1$ mb) 7 Nuklide gemessen werden konnten, was 29,2 % ergibt. Bezogen auf die Reaktionsquerschnitte bedeutet dies, daß mit $\sigma^{\text{exp}}(30 \text{ MeV}) = 194$ mb von $\sigma^{\text{tot}}(30 \text{ MeV}) = 957$ mb ein Anteil von 20,3 % erfaßt wurde.

Daraus folgt, daß zur Bestimmung der totalen, nichtelastischen Schädigung bei 30 MeV Protonenergie bzw. bei 104 MeV α -Energie die experimentell basierten Werte um den Faktor 1/0,203 bei den Protonen und um den Faktor 1/0,377 bei den α -Teilchen nach oben skaliert werden müssen. Diese Skalierungsfaktoren gelten jedoch nur bei exakt diesen Energiewerten.

Für den Fall eines dicken Targets treten bis zur maximalen Reichweite alle Energien zwischen der Maximalenergie und 1 MeV auf. Dasselbe trifft auf die energiemodierten nichtelastischen Schädigungswerte zu. Hier läßt sich diese Normierung nicht so einfach ausführen. Da bei der Energiemoderation sämtliche Energien auftreten, wurde der Faktor $\sigma^{\text{exp}}(E^{\text{proj}}) / \sigma^{\text{tot}}(E^{\text{proj}})$ für Protonen bei den Energien 10, 15, 20, 25 und 30 MeV ermittelt. Für die α -Teilchen wurde dieser Faktor bei den Energien 35, 45, 55, 65, 75, 85, 95 und 104 MeV berechnet. Daraus wurde jeweils der Mittelwert gebildet, der sich bei den Protonen auf 27 % und bei den α -Teilchen auf 45 % beläuft. Dies bedeutet, daß die energiemodierten, nichtelastischen Schädigungswerte bei den Protonen mit dem Faktor 1/0,27 und bei den α -Teilchen mit dem Faktor 1/0,45 zu multiplizieren sind. Die auf die Gesamtanzahl der offenen Reaktionskanäle normierten reichweitegestreuten, nichtelastischen Schädigungsdaten sind in Abb. 5-19 für den unmodierten und moderierten Fall dargestellt. Die gestrichelten farbigen Kurven stellen die experimentell erfaßten Schädigungswerte dar, die durchgezogenen farbigen Kurven sind die auf 100 % normierten Schädigungswerte.

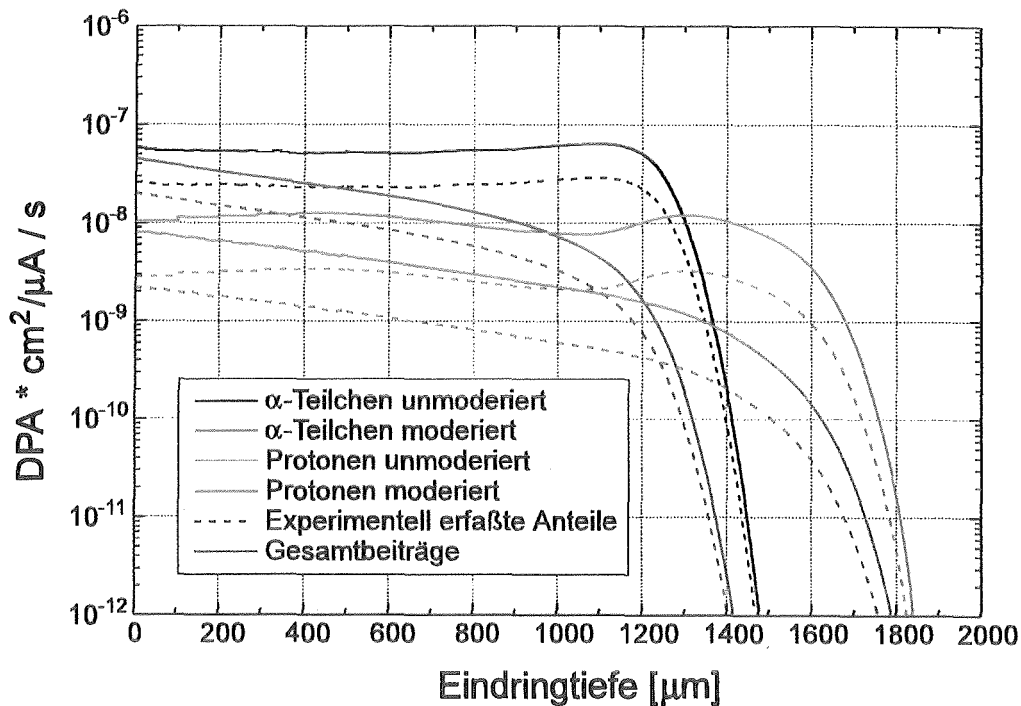


Abbildung 5-19: Experimentell erfaßte Anteile (- - - -) und Gesamtbeiträge (—) der nichtelastischen Schädigung für p und α .

Nachdem der gesamte Anteil der nichtelastischen Schädigung bekannt ist, kann ein direkter Vergleich mit der elastischen Schädigung durchgeführt werden. Zuerst sollen die unmoderierten Anteile verglichen werden, wie sie in Abb. 5-20 eingezeichnet sind.

Der Vergleich in Abb. 5-20 zeigt Protonen (30 MeV Primärenergie) und α -Teilchen (104 MeV Primärenergie) bei der Bestrahlung eines dicken ^{nat}Fe-Targets. Die Figur zeigt eine Übersicht über die gesamte Eindringtiefe.

Bei den Protonen zeigt sich, daß über den gesamten Bereich die nichtelastische Schädigung unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Der Beitrag der nichtelastischen Schädigung zur Gesamtschädigung entspricht dem Zwischenraum zwischen der gestrichelten und der durchgezogenen roten Linie. Dieser Bereich zeigt, daß die Gesamtschädigung bei den Reichweiten 0 - 1400 μm um ca. einen Faktor 1,5 bis 2 oberhalb der elastischen Schädigung liegt. Bei genauer Betrachtung der Einzelkurven der protoninduzierten Schädigung zeigt sich, daß ab Eindringtiefen von 1600 μm die nichtelastische Schädigung deutlich abgeschwächt ist. Daraus folgt, daß bei geringen Protonenergien (< 10 MeV) die Materialschädigung primär über elastische Prozesse erfolgt.

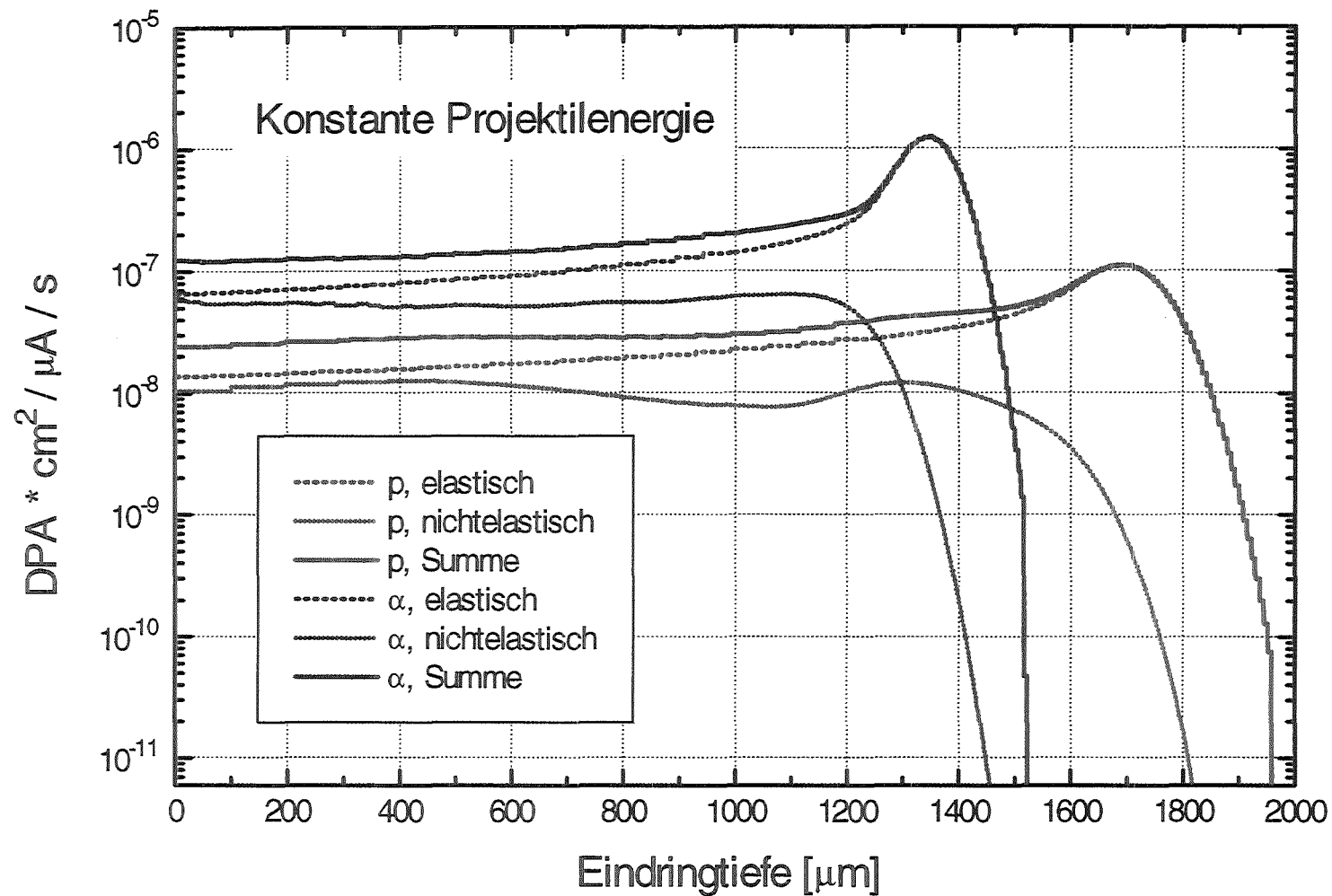


Abbildung 5-20: Vergleich der unmoderierten elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung für Protonen und α -Teilchen in reinem Eisen.

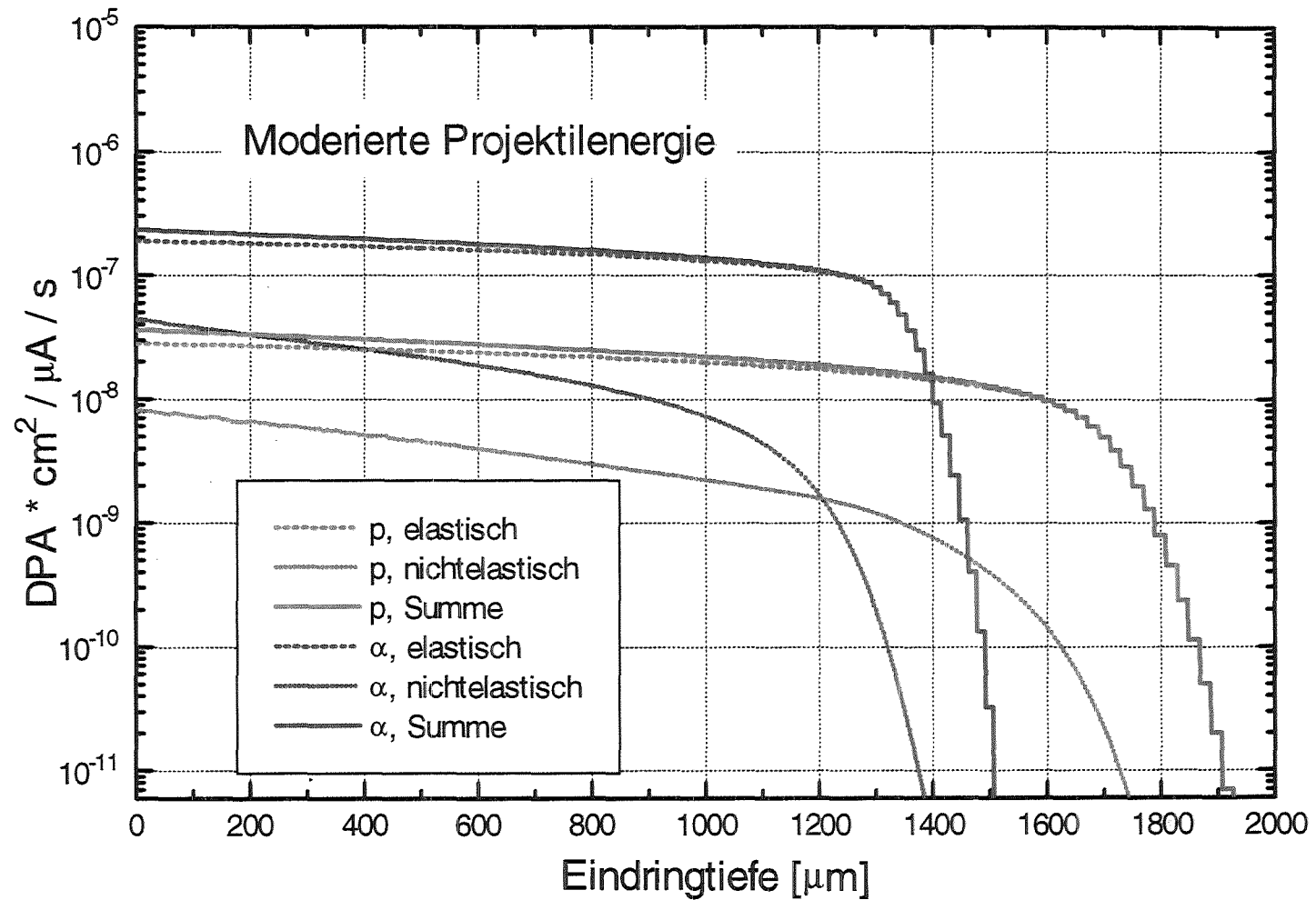


Abbildung 5-21: Vergleich der moderierten elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung für Protonen und α -Teilchen in reinem Eisen.

Bei den α -Teilchen sind die Verhältnisse ähnlich. Der Beitrag der nichtelastischen Schädigung zur Gesamtschädigung entspricht dem Zwischenraum zwischen der gestrichelten und der durchgezogenen blauen Linie. Dieser Bereich zeigt, daß die Gesamtschädigung bei den Reichweiten 0 - 1100 μm um ca. einen Faktor 1,5 bis 2 unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Bei genauer Betrachtung der Einzelkurven der α -induzierten Schädigung zeigt sich, daß ab Eindringtiefen von 1250 μm (ca. 35 MeV α -Teilchenenergie) die nichtelastische Schädigung um ca. eine Größenordnung unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Bei ca. 1350 μm erreicht die α -induzierte elastische Schädigung ihr Maximum welches auch gleichzeitig den maximalen Wert der α -induzierten Gesamtschädigung von ca. $1,2 \cdot 10^{-6}$ DPA* $\text{cm}^2/\mu\text{A/s}$ ist. Daraus folgt, daß bei α -Teilchenenergien < 35 MeV die Materialschädigung hauptsächlich durch elastische Verlagerungen erzeugt wird, während bei α -Teilchenenergien > 35 MeV die α -induzierte Gesamtschädigung zu 55% aus elastischer und zu 45% aus nichtelastischer Verlagerungsschädigung besteht.

Der Vergleich in Abb. 5-21 zeigt energiemodierte Protonen (30 MeV Primärenergie) und energiemodierte α -Teilchen (104 MeV Primärenergie) bei der Bestrahlung eines dicken ^{56}Fe -Targets. Die Figur zeigt eine Übersicht über die gesamte Eindringtiefe.

Bei den Protonen zeigt sich, daß über den gesamten Bereich die nichtelastische Schädigung deutlich unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Der Beitrag der nichtelastischen Schädigung zur Gesamtschädigung entspricht dem Zwischenraum zwischen der gestrichelten und der durchgezogenen roten Linie. Dieser Bereich zeigt, daß die Gesamtschädigung bei der Eindringtiefe 0 μm um fast einen Faktor 4 unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Bis zur Reichweite von 1600 μm nimmt der Beitrag der nichtelastische Schädigung kontinuierlich ab und liegt dann zwei Größenordnungen unterhalb der elastischen Schädigung. Dies bedeutet, daß für Eindringtiefen im Bereich 1600 bis 1800 μm vorwiegend elastische Schädigung erzeugt wird, während im davorliegenden Bereich bis zu 30% nichtelastische Schädigung berücksichtigt werden müssen.

Bei den α -Teilchen sind die Verhältnisse ähnlich. Der Beitrag der nichtelastischen Schädigung zur Gesamtschädigung entspricht dem Zwischenraum zwischen der gestrichelten und der durchgezogenen blauen Linie. Dieser Bereich zeigt, daß die Gesamtschädigung bei der Reichweite von 0 μm um ca. einen Faktor 5 unterhalb der elastischen Schädigung liegt. Bei ca. 800 μm ist die Differenz bereits auf eine Größenordnung angewachsen und bei ca. 1200 μm auf zwei Größenordnungen angewachsen. Dies bedeutet, daß für Eindringtiefen im Bereich 1200 bis 1450 μm vorwiegend elastische Schädigung erzeugt wird, während im davorliegenden Bereich bis zu 20% nichtelastische Schädigung berücksichtigt werden müssen.

In Kapitel 6 werden die Effekte der nichtelastischen Schädigung noch detaillierter diskutiert.

6 Qualifizierung der Schädigungsergebnisse

Dieses Kapitel soll Aufschluß darüber geben, wie gut leichte Ionen überhaupt neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung simulieren können. Diese Frage wurde in der Vergangenheit häufig diskutiert, wobei bisher die vorherrschende Meinung galt, daß die leichtioneninduzierten PKA-Spektren deutlich von den neutroneninduzierten PKA-Spektren abweichen [6-1]. Insbesondere wurde den leichtioneninduzierten PKA-Spektren ein im Vergleich mit Neutronen zu weicher Verlauf im hochenergetischen PKA-Bereich attestiert. Um diese Frage aussagekräftig beantworten zu können, ist es notwendig, Gemeinsamkeiten und Unterschiede hinsichtlich der Defekterzeugungsprozesse in beiden Fällen zu betrachten. Die weitere Diskussion soll der Übersichtlichkeit halber in drei Bereiche unterteilt werden. Für Betrachtungen auf grundlegender Ebene werden die PKA-Spektren der elastischen Schädigung, der nichtelastischen Schädigung und der neutroneninduzierten Schädigung [6-2] diskutiert. Zur Verdeutlichung des nichtelastischen Einflusses auf die Gesamtschädigung unter Leichtionenbestrahlung werden auf einer zweiten Ebene die elastischen und nichtelastischen Verlagerungsquerschnitte diskutiert. Auf der dritten und letzten Ebene wird die Berechnung der Schädigungsraten (DPA/sec.) für elastische Schädigung, nichtelastische Schädigung und neutroneninduzierte Schädigung [6-3] diskutiert. Weitergehende Fragen bezüglich der Defektmorphologie, wie die der Kaskadenbildung und Kaskadenstabilität in Abhängigkeit von der PKA-Energie, werden im Unterkapitel 6.4 behandelt.

6.1 Diskussion der PKA-Spektren

Die Berechnung der PKA-Spektren für Leichtionenbestrahlung wurde bereits in Kap. 2 und Kap. 5 besprochen. Werden zuerst nur die unter elastischer Wechselwirkung erzeugten PKA's betrachtet, so ergibt sich für den Fall von α -Teilchen Bestrahlung von reinem Eisen eine wie in Abb. 6-1 dargestellte Charakteristik. In Abb. 6-1 sind die PKA-Produktionswahrscheinlichkeiten in barn/eV über der PKA-Energie aufgetragen. Für diese Abbildung und alle weiteren PKA-Spektren wurde die 100er Specter-Gruppenstruktur [6-5] (siehe auch Kap. 2) verwendet. Die eingezeichneten Funktionen entsprechen Gleichung 2-33, wobei die Restriktion, der bei einem elastischen Stoß maximal zu übertragenden Energie, Gleichung 2-34, berücksichtigt werden muß. Als Projektile dienen α -Teilchen und als Target wurde ^{nat}Fe verwendet. Die Projektilenergie wurde über vier Dekaden von 0,1 MeV bis 100 MeV variiert, um den Unterschied zwischen niederenergetischer und hochenergetischer α -Teilchen Bestrahlung zu veranschaulichen. Die Darstellung von Projektilenergien unterhalb 0,1 MeV ist nicht sinnvoll, da in diesem Bereich die Diskrepanz zwischen Streuung nach dem Thomas-Fermi-Potential und reiner Rutherfordstreuung zu groß wird. Experimentell im Sinne von Bestrahlung makroskopischer Proben gesehen, machen derart geringe Projektilenergien keinen Sinn, da die Reichweite solcher Projektile äußerst gering ist. Der auf der Abszisse verwendete Koordinatenbereich wurde von 100 eV bis 20 MeV gewählt, da typischerweise unterhalb von 100 eV PKA-Energie keine Verlagerungen in Eisen mehr stattfinden ($E_d = 40$ eV) und oberhalb 20 MeV die von L. Greenwood definierte 100er Gruppenstruktur endet. In der doppelt-logarithmischen Darstellung zeigt Abb. 6-1, daß mit zunehmender Projektilenergie die

Produktionswahrscheinlichkeit der PKA's abnimmt. Da in Gleichung 2-33 eine $1/E$ -Abhängigkeit besteht, geht bei Erhöhung der Projektilenergie um eine Größenordnung die Produktionswahrscheinlichkeit genau um eine Größenordnung zurück. Desweiteren zeigt sich, daß bei konstanter Projektilenergie PKA's mit höherer Energie weniger wahrscheinlich produziert werden als PKA's mit geringerer Energie. Die negative Steigung des linearen Verlaufs entspricht gerade der Potenz der T^{-2} Abhängigkeit in Ausdruck 2-33. Die maximale Rückstoßenergie geht auch linear mit der Projektilenergie nach oben. Dies ist wieder aus den Dekadenschritten ersichtlich. Generell zeigt sich, daß bei geringen Projektilenergien niederenergetische PKA's mit höherer Wahrscheinlichkeit erzeugt werden. Im Gegensatz dazu werden bei Projektilenergien um 100 MeV PKA's mit einer Maximalenergie von über 20 MeV erzeugt, jedoch nur mit sehr geringer Wahrscheinlichkeit.

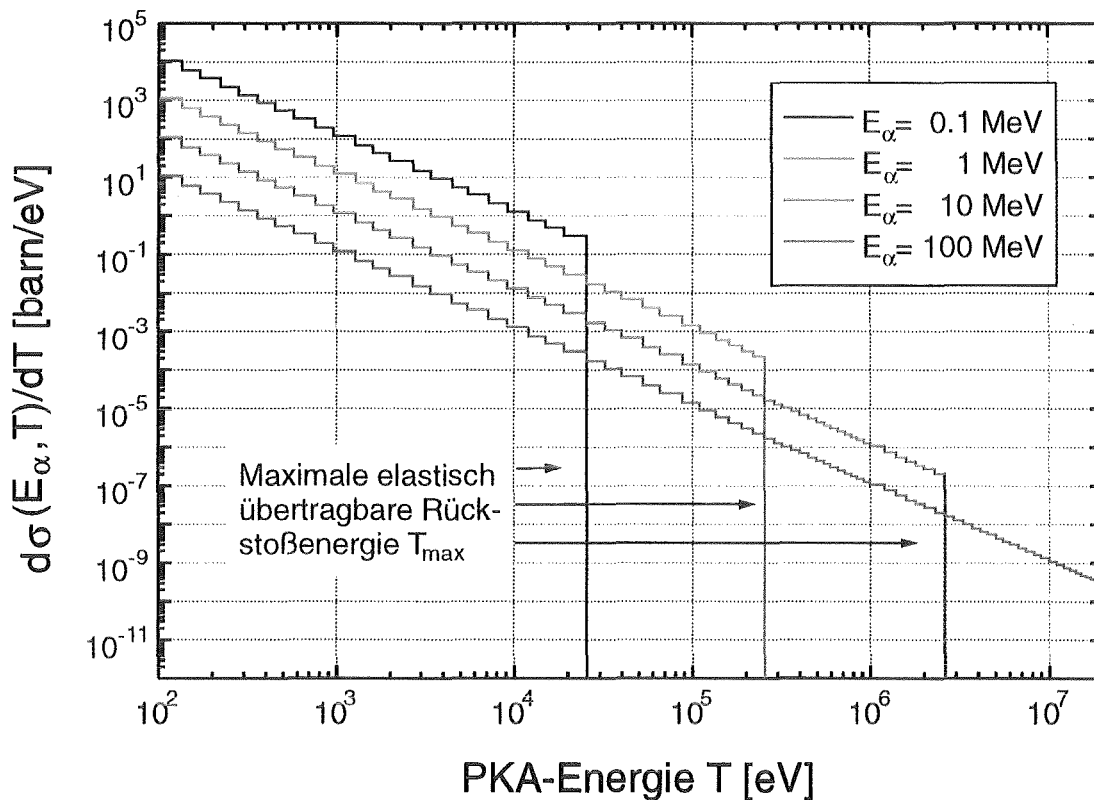


Abbildung 6-1: PKA-Spektrum erzeugt unter elastischer Wechselwirkung von α -Teilchen mit ^{nat}Fe .

Werden nun zusätzlich die nichtelastisch produzierten PKA's betrachtet, so ergeben sich PKA-Spektren vom Typ wie sie in Kap. 2 in Abb. 2-18 dargestellt sind. In Abb. 6-2 wurden diese nichtelastischen PKA-Spektren zusätzlich zu den elastischen PKA-Spektren eingezeichnet. Der dargestellte Bereich bezüglich Ordinaten- und Abszissenskala ist identisch mit Abb. 6-1. Der Übersichtlichkeit halber wurden nur vier α -Teilchen-Energien von 10 MeV bis 100 MeV eingezeichnet. Projektilenergien kleiner als 10 MeV spielen in dieser Darstellung keine Rolle, da die nichtelastischen Beiträge vernachlässigbar klein sind. In Abb. 6-2 wurden für die elastischen PKA-Spektren die Darstellung *weit-gepunktet*, für die nichtelastischen PKA-Spektren die Darstellung *eng-gepunktet* und für die Summen-PKA-Spektren *durchgezogene Linien* gewählt. Es ist sehr deutlich zu erkennen, in welchen

PKA-Energiebereichen sich die elastischen und nichtelastischen PKA-Spektren überlappen. Bei PKA-Energien T kleiner 0,3 MeV spielen die nichtelastischen Beiträge praktisch keine Rolle, da sie um mehrere Größenordnungen unter den elastischen Werten liegen. Erst im Bereich der höherenergetischen bzw. hochenergetischen PKA-Energien wird der Einfluß merklich. Bei der Projektilenergie von 10 MeV haben die nichtelastischen PKA's keinen sichtbaren Einfluß auf das Summenspektrum. Im Gegensatz dazu wird jedoch bei 100 MeV Projektilenergie das Summenspektrum im Bereich von 1 MeV bis 8 MeV PKA-Energie deutlich über die elastischen Werte angehoben. Deutlich bedeutet in diesem Fall, daß die maximale Erhöhung bei ca. einer Größenordnung liegt. Insgesamt zeigt sich jedoch, daß die Produktion niederenergetischer PKA's auch unter Berücksichtigung des nichtelastischen Anteils um mehrere Größenordnungen oberhalb der Produktion hochenergetischer PKA's (> 1 MeV) liegt. Dies bedeutet für die Art der durch Leichtionenbestrahlung induzierten Defekte, daß mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit Frenkel-Defekte erzeugt werden, während um mit mindestens 5 Größenordnungen verminderter Wahrscheinlichkeit Schädigungskaskaden erzeugt werden. Es soll hier nicht darauf eingegangen werden, ab welcher PKA-Energie von stabilen Kaskaden gesprochen werden kann bzw. ab welcher PKA-Energie die erzeugten Kaskaden in Subkaskaden zerfallen, da diese Diskussion für den Vergleich der leichtioneninduzierten PKA-Spektren mit den neutroninduzierten PKA-Spektren nicht notwendig ist. Diese Thematik wird jedoch in Unterkapitel 6.4 angesprochen.

Für den Vergleich der leichtioneninduzierten Schädigung mit der neutroninduzierten Schädigung ist einzig und allein von Bedeutung, inwiefern sich die induzierten PKA-Spektren der Form nach gleichen oder wo Unterschiede bestehen. Um diesen Vergleich durchführen zu können, wurde in Abb. 6-3 ein durch 14 MeV Fusionsneutronen in ^{nat}Fe induziertes PKA-Summenspektrum neben den α -induzierten PKA-Summenspektren eingezeichnet. Das verwendete neutroninduzierte PKA-Spektrum wurde von Mitarbeitern des Instituts für Neutronen- und Reaktorphysik am Forschungszentrum Karlsruhe berechnet [6-2]. Ausgehend von den 14 MeV Neutronen, die bei der Fusion im Plasma entstehen, wurde mittels Neutrontransportrechnung für ein spezielles ITER Be-Feststoff Blanket Design das Neutronspektrum in der Ersten-Wand des Blankets ermittelt. Dieses Neutronspektrum besteht in erster Linie aus dem 14 MeV Peak und niederenergetischeren, aus dem Brutblanket rückgestreuten Neutronen. Dieses Neutronspektrum wurde im Computercode NJOY [6-4] unter Berücksichtigung der Bestrahlungsparameter zu einem PKA-Spektrum weiterverarbeitet. Dieses PKA-Spektrum stellt ein Summenspektrum dar, welches bis auf den (n,γ) -Anteil den elastischen Streuanteil und den nichtelastischen Reaktionsanteil enthält.

Der erste Eindruck von Abb. 6-3 zeigt, daß das neutroninduzierte PKA-Spektrum für alle PKA-Energien unterhalb der eingezeichneten α -induzierten PKA-Spektren liegt. Dies charakterisiert den Unterschied in der zugrundeliegenden physikalischen Projektil-Target-Wechselwirkung. Während die geladenen Teilchen durch die elektromagnetische Wechselwirkung pro Wegstrecke viel Energie an die Matrixatome abgeben, besitzen die Neutronen zwischen zwei Stößen eine sehr große freie Weglänge, wodurch die Wahrscheinlichkeit der PKA-Bildung stark vermindert wird. Dies ist deutlich am niederenergetischen Spektrumsanteil zu erkennen, wo sich ein Unterschied in der

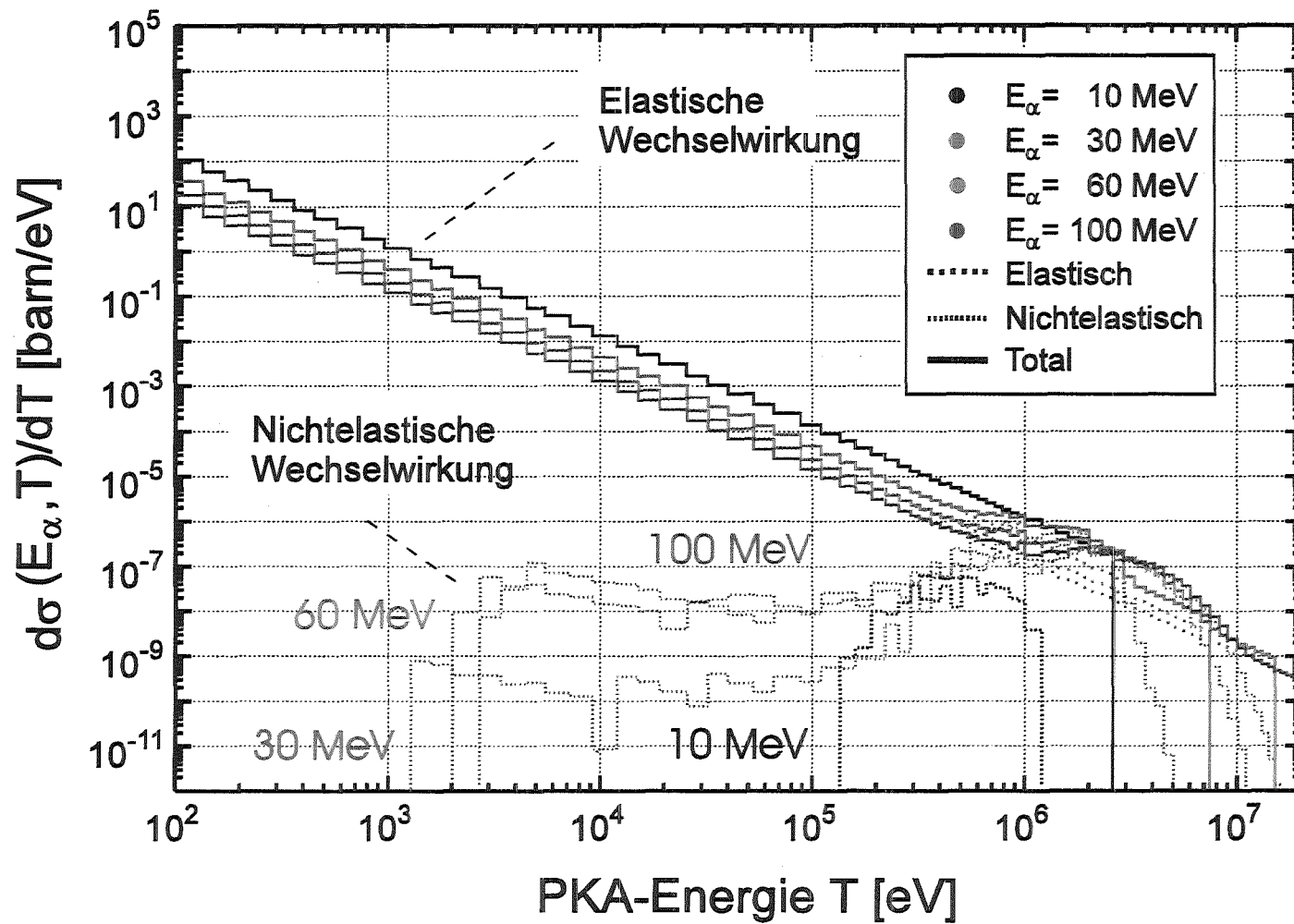


Abbildung 6-2: Vergleich der elastischen und nichtelastischen PKA-Spektren unter α -Teilchen-Bestrahlung von ^{nat}Fe

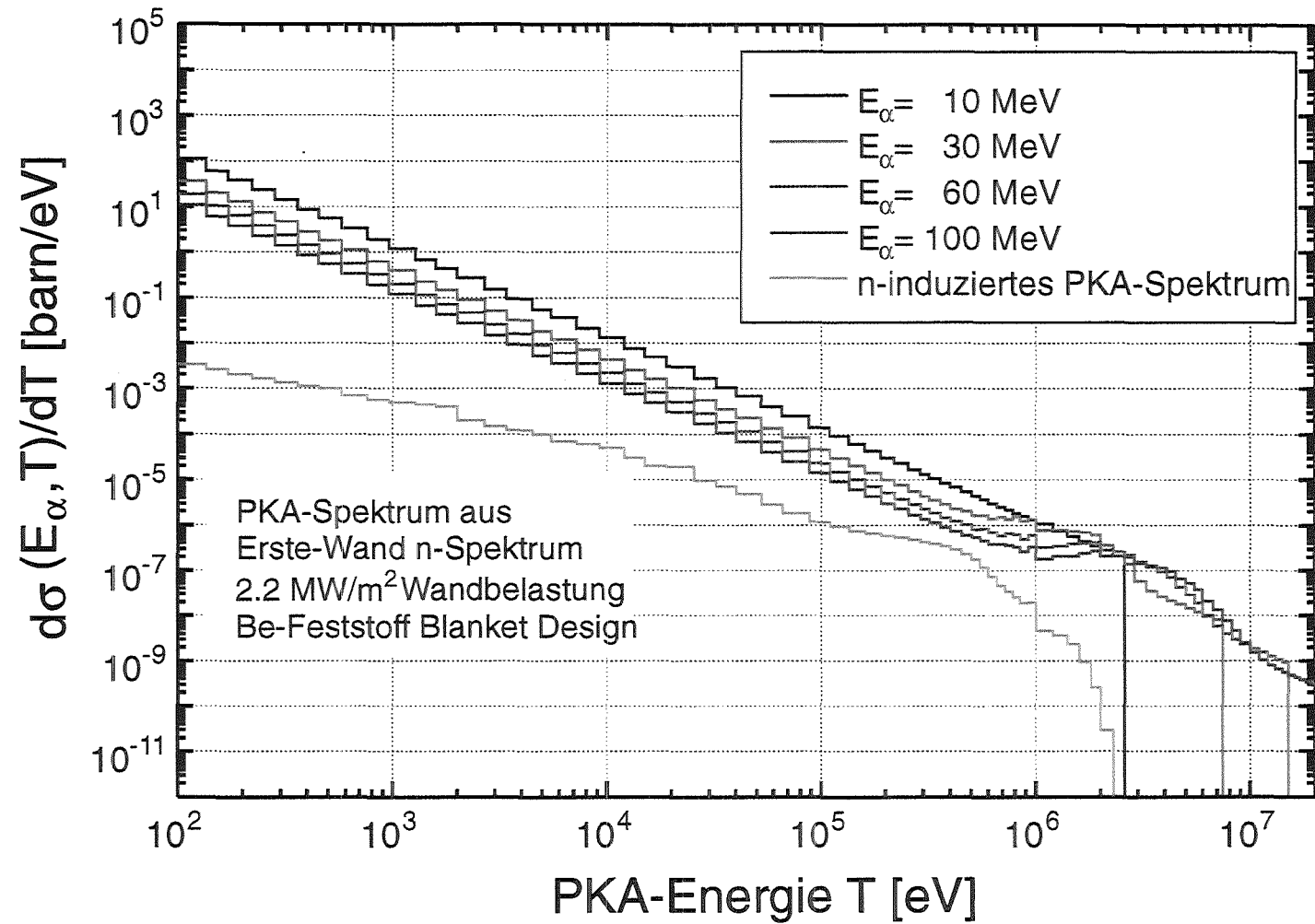


Abbildung 6-3: Vergleich der α -induzierten Summen-PKA-Spektren mit einem Erste-Wand fusionsneutroneninduzierten PKA-Spektrum

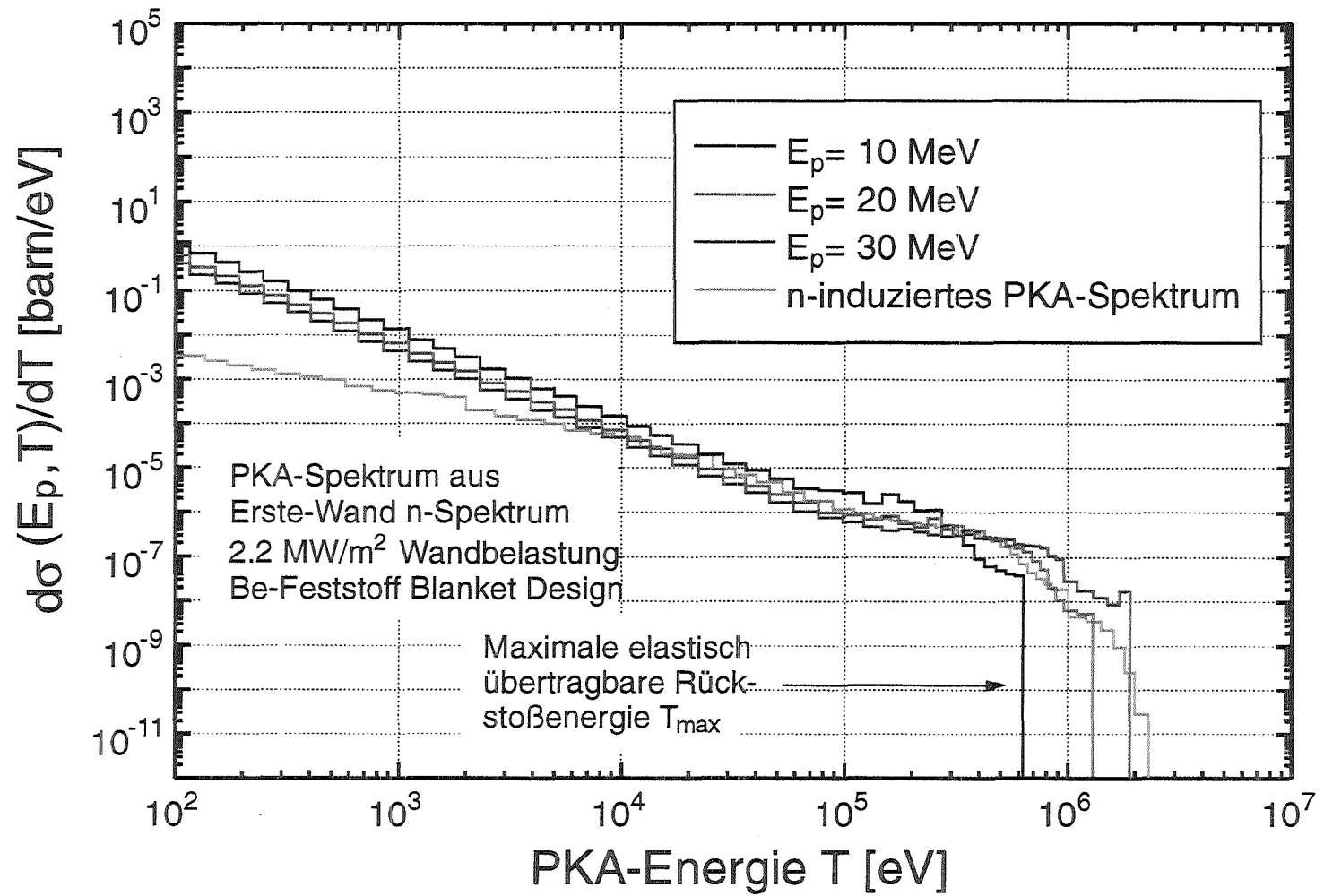


Abbildung 6-4: Vergleich der protoninduzierten Summen-PKA-Spektren mit einem Erste-Wand fusionsneutroneninduzierten PKA-Spektrum

Bildungswahrscheinlichkeit von mehreren Größenordnungen zeigt. Im hochenergetischen Spektrumsanteil zeigt sich, daß bei den Leichtionenbestrahlungen aufgrund höherer Projektilenergien deutlich höhere PKA-Energien erzeugt werden können. Der Vergleich der PKA-Spektren in Abb. 6-3 zeigt nun, daß keine *Eins-zu-Eins* Simulation der neutroninduzierten Verlagerungsschädigung durch α -Teilchen Bestrahlung erreicht werden kann. Bei α -Teilchen Bestrahlungen muß mit einem höheren Frenkel-Defekt-Anteil gerechnet werden. Zudem tritt zusätzlich ein hoher Anteil Kaskaden, erzeugt durch sehr hochenergetische PKA's, auf. Diese großen Kaskaden können jedoch in Subkaskaden zerfallen, bei deren Betrachtung die α -Teilchenbestrahlungen doch neutronähnlicher erscheinen als es zunächst den Anschein hat. Dieser Aspekt wird in Unterkapitel 6.4 behandelt.

Für Protonenbestrahlungen verhält sich das Ganze jedoch etwas anders. Bedingt durch die geringere Projektilmasse und Projektilladung verringert sich unter Protonbestrahlung die Produktionswahrscheinlichkeit elastischer PKA's gegenüber der bei α -Teilchen Bestrahlung. Das reine elastische PKA-Spektrum deckt sich dadurch mit dem durch Fusionsneutronen induzierten PKA-Spektrum in weiten Bereichen. Im niederenergetischen Bereich liegt es oberhalb und im hochenergetischen Bereich liegt es etwas unterhalb der Neutrondaten. Werden zu den elastischen PKA-Daten noch die nichtelastischen PKA-Daten addiert, so ergibt sich der in Abb. 6-4 dargestellte Vergleich. Während bei PKA-Energien bis zu 10 keV die elastischen PKA's um bis zu zwei Größenordnungen oberhalb der neutroneninduzierten PKA's liegen, zeigen PKA's bei Energien oberhalb 10 KeV eine gute Übereinstimmung der proton- und neutroninduzierten PKA-Spektren. Besonders im hochenergetischen PKA-Bereich zeigt sich, daß sich die nichtelastischen PKA's sehr vorteilhaft mit den elastischen ergänzen und die Summenfunktionen sehr gut den neutroninduzierten hochenergetischen Verlauf widerspiegeln. Dies trifft insbesondere für die 20 MeV Protonen zu, die über den Energiebereich von ca. 10 KeV bis oberhalb von 1 MeV unerwartet gut übereinstimmen. Jedoch erreicht das protoneninduzierte PKA-Spektrum nicht ganz die maximale neutroneninduzierte PKA-Energie. Das Kriterium der hohen PKA-Energien erfüllen jedoch die 30 MeV Protonen ausgezeichnet. Allerdings werden bei den 30 MeV Protonen die hochenergetischen PKA's mit geringfügig höherer Wahrscheinlichkeit produziert als die neutroneninduzierten PKA's. Dieses Verhalten führt auf die Schlußfolgerung, daß die beste Simulation des neutroneninduzierten PKA-Spektrums durch eine Superposition der PKA-Spektren zwischen 20 MeV und 30 MeV erreicht wird. Experimentell entspricht dies einer leicht durchführbaren Moderation der Protonen in diesem Energiebereich.

6.2 Diskussion der leichtioneninduzierten Verlagerungsquerschnitte

Stehen die leichtioneninduzierten PKA-Spektren zur Verfügung, so kann durch Berücksichtigung der sekundären Schädigungsfunktion der elastische Verlagerungsquerschnitt (Gleichung 2-46) und der nichtelastische Verlagerungsquerschnitt (Gleichung 2-50) berechnet werden. Im nichtelastischen Fall treten je nach der Anzahl der offenen Reaktionskanäle eine große Anzahl an spezifischen Verlagerungsquerschnitten auf, die jeder für sich genau einen Prozeß charakterisieren. In den Abbildungen 6-5 und 6-6

sind die wichtigsten protoninduzierten und α -induzierten Verlagerungsquerschnitte in Abhängigkeit von der Projektilenergie angegeben.

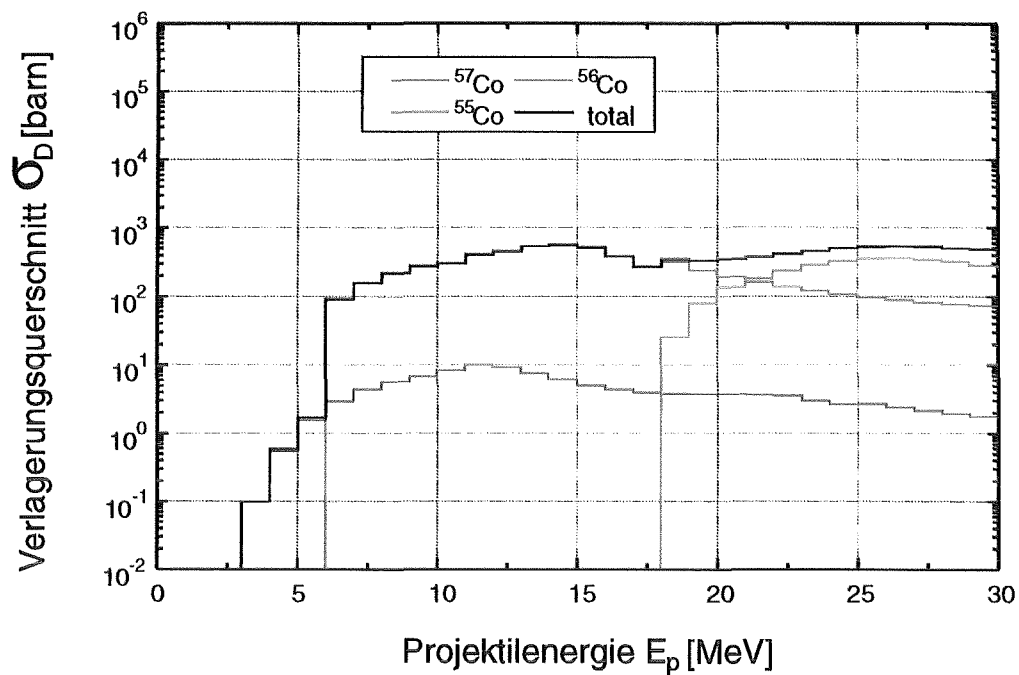


Abbildung 6-5: Nichtelastische protoninduzierte Verlagerungsquerschnitte (Auszug)

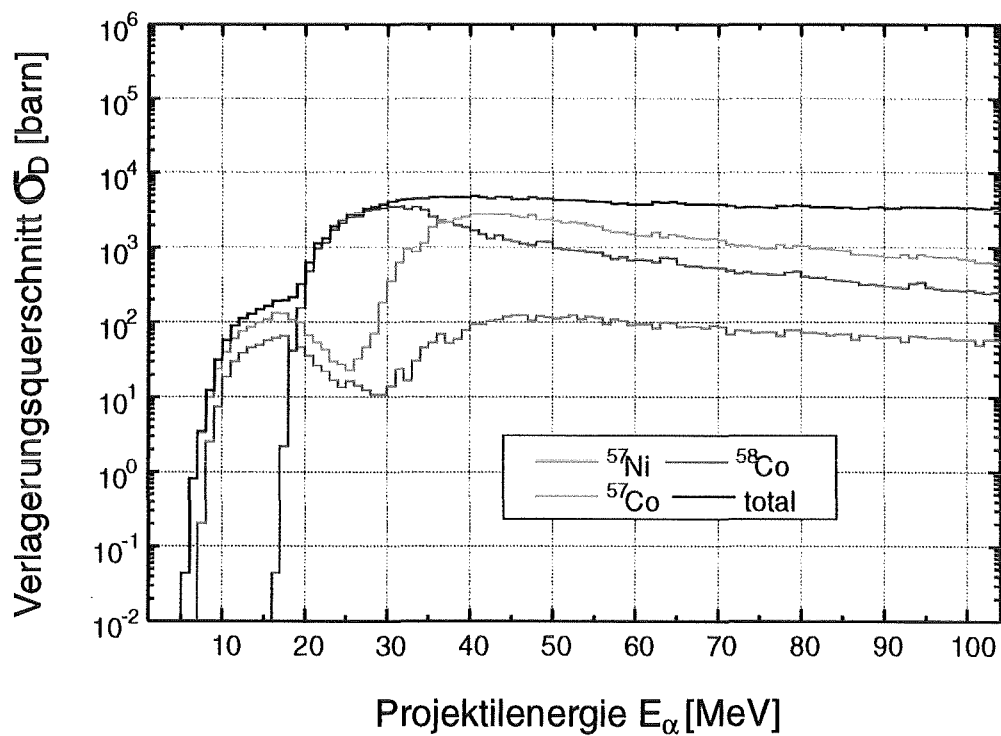


Abbildung 6-6: Nichtelastische α -induzierte Verlagerungsquerschnitte (Auszug)

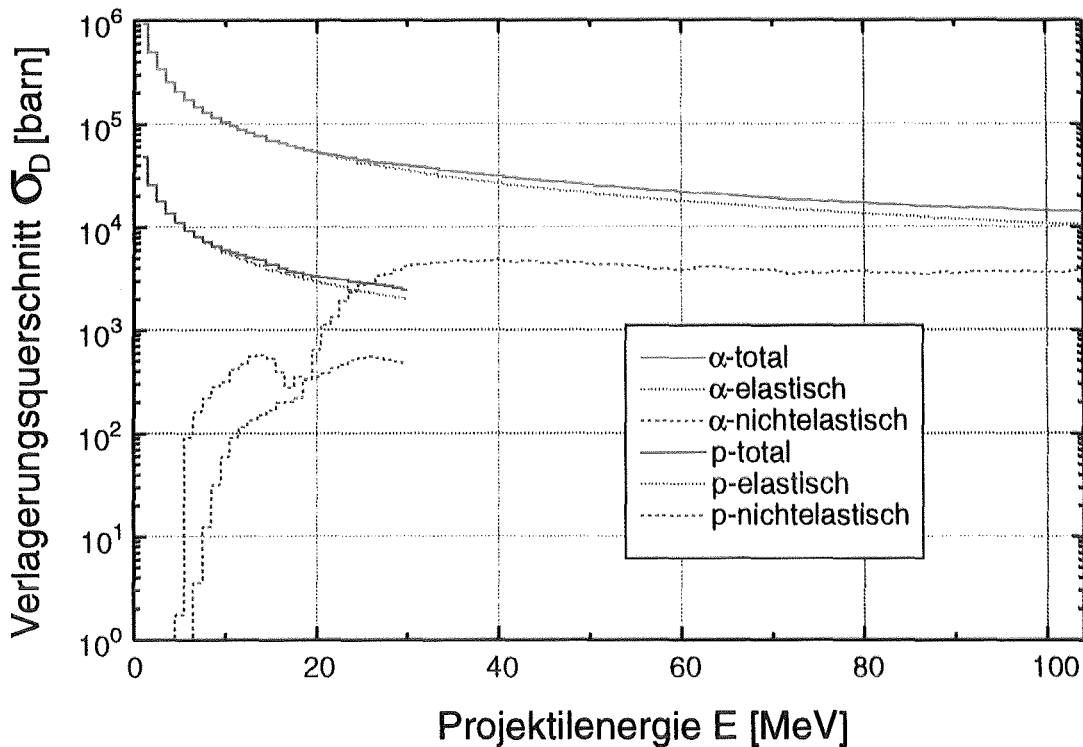


Abbildung 6-7: Vergleich der elastischen und nichtelastischen leichtioneninduzierten Verlagerungsquerschnitte

Bei den protoneninduzierten nichtelastischen Verlagerungsquerschnitten erzeugen die Rückstoßkerne ^{57}Co , ^{56}Co und ^{55}Co die wichtigsten Beiträge. Bei den α -induzierten nichtelastischen Verlagerungsquerschnitten sind dies ^{57}Ni , ^{58}Co und ^{57}Co . Der in Abb. 6-7 durchgeführte Vergleich zwischen den elastischen und nichtelastischen Summenverlagerungsquerschnitten für den protonen- und α -induzierten Fall zeigt, daß sowohl bei den Protonen als auch bei den α -Teilchen die nichtelastischen Anteile deutlich unterhalb den elastischen Beiträgen liegen. Bei den hohen Projektilenergien erreichen die nichtelastischen Beiträge ca. 40 % des elastischen Anteils bei den α -Teilchen und ca. 20% bei den Protonen. Bei den α -Teilchen läßt sich daraus für Projektilenergien oberhalb 40 MeV ein nicht zu vernachlässigender Anteil prognostizieren. Bei den Protonen ist dies für Projektilenergien oberhalb 20 MeV der Fall. Zu geringeren Projektilenergien hin werden dann jedoch die nichtelastischen Anteile sehr schnell unbedeutend, da die elastischen Beiträge sehr stark anwachsen.

Die Zuordnung der aus den Verlagerungsquerschnitten resultierenden Schädigung zu bestimmten Projektilenergien macht nur in dem Fall Sinn, in dem die Targets mit konstanten Energien bestrahlt werden, da nur dann eine direkte Zuordnung von Ort und Projektilenergie möglich ist. Werden z.B. dünne Fe-Folien mit hoher konstanter Energie durchstrahlt, so darf der nichtelastische Schädigungsanteil nicht vernachlässigt werden, da die oben genannten nichtelastischen Anteile von 40 % bei α -Teilchen und 20 % bei Protonen beachtlich sind. Etwas anders verhält sich dies, wenn die Bestrahlungsenergie moderiert wird, wie später noch diskutiert wird.

6.3 Diskussion der DPA-Produktionsraten

Bisher wurde gezeigt, daß unter Leichtenbestrahlung mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit elastische PKA's im KeV Bereich erzeugt werden und dagegen relativ unwahrscheinlich nichtelastische PKA's im MeV Bereich. Jedoch erzeugen die wenig wahrscheinlichen nichtelastischen PKA's eine höhere Anzahl an Verlagerungen, so daß sie über einen weiten Bereich (vgl. Abb. 5-20 und 5-21) an den elastischen Beitrag bis auf einen geringen Faktor herankommen.

Bei den Neutronen verhält es sich ähnlich. Während niederenergetische Neutronen ($< 0,1$ MeV) vorwiegend isotrop gestreut werden, bevorzugen 14 MeV Neutronen Kleinwinkelstreuung. Dabei wird nur wenig Energie an das Streuzentrum übertragen. Neben den elastischen Streuprozessen finden zusätzlich Kernreaktionen statt, die zusätzlich einen hohen Energieübertrag an den Reaktionspartner leisten und somit einen nichtelastischen Schädigungsbeitrag erzeugen. Die wichtigsten sind (n,p) , (n,α) , $(n,2\alpha)$ und (n,γ) .

Für den Vergleich mit Fusionsneutronen wird das oben definierte Erste-Wand Referenzspektrum verwendet. Dieses Neutronspektrum ist dem Erste-Wand Neutronspektrum des DEMO Reaktors [6-3] sehr ähnlich, welches die Neutronflußverteilung in der Ersten-Wand des DEMO Tokamak Reaktors beschreibt. Der integrale Neutronenfluß beträgt bei $2,5$ MW/m² Wandbelastung $1,41 \cdot 10^{15}$ n/s/cm². Mit diesem Neutronspektrum wurde unter Zuhilfenahme des Programms SPECTER [6-5] und den Damage-Energy-Cross-Sections [6-6] die Schädigungsrate in Fe berechnet [6-7]. Es ergibt sich eine spektral gemittelte Verlagerungsschädigungsrate von $6,6 \cdot 10^{-7}$ DPA/sec. Da die mittlere Streulänge der 14 MeV Neutronen in Eisen mehrere cm beträgt, kann über den Bereich von 1 bis 2 mm die neutroninduzierte Schädigungsrate als konstant angenommen werden. Die neutroninduzierte Schädigungsrate stellt somit eine mittlere Schädigungsrate in der Ersten-Wand dar.

Für eine Diskussion der DPA-Raten sind zwei Fälle von besonderem Interesse:

- A) Fall A entspricht der Bestrahlung dünner Folien mit konstanten Projektilenergien. Dieser Fall kann unter Bezugnahme auf Kapitel 5, den Vergleich der elastischen und nichtelastischen Schädigung unter nichtmoderierter Protonen- und α -Teilchen-Bestrahlung, diskutiert werden.
- B) Fall B entspricht den in der Vergangenheit durchgeführten DUAL-BEAM Bestrahlungen mit moderierter Protonen- bzw. α -Teilchen Bestrahlung. In diesem Fall wird die typische DUAL-BEAM Probengeometrie, eine quadratische Hohlprobe für Ermüdungsexperimente, diskutiert.

Fall A: Bestrahlungen mit konstanter Projektilenergie

Werden dünne Folien mit konstanter Projektilenergie bestrahlt, bedeutet das in den meisten Fällen eine Durchstrahlung der Targetfolie. Ist der spezifische Energieverlust der Teilchen innerhalb der Folie gering gegenüber ihrer Primärenergie, so kann aus dem

Schädigungsprofil ein eng begrenzter Bereich zur Bestimmung der eingebrachten Schädigung ausgewählt werden. In einem solchen Fall ist das in Kap. 5 Abb. 5-20 abgebildete Schädigungsprofil von besonderem Interesse. Bei sehr dünnen Folien (einige μm) ist zu beachten, daß Strahlabwärts nichtelastisch produzierte Rückstoßkerne aus den Folien austreten können bevor sie ihre gesamte Schädigungswirksamkeit entfaltet haben. Dies führt dann zu einer Verringerung des eingebrachten Schädigung.

Eine um die durch Fusionsneutronen induzierte Schädigung ergänzte Figur zeigt Abb. 6-8. Es ist die Schädigungsrate über der Eindringtiefe aufgetragen. Die eingezeichneten, leichten-induzierten Schädigungsrate wurden auf die Teilchenstromdichte von $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ normiert. Bei den α -Teilchen wurden 104 MeV und bei den Protonen wurden 30 MeV als Primärenergie verwendet. Prinzipiell kann zur Bestimmung der Schädigung für Projektile mit geringerer Projektilenergie auch bei Orten $> 0 \mu\text{m}$ begonnen werden, welche sich aus einer Energie-Ort-Relation nach Bethe-Bloch bestimmen lassen. Diese Orte sind dann gleich 0 zu setzen. Die restliche Abszisse skaliert sich entsprechend. In Abb. 6-8 ist jedoch die Reichweitestreuung bzw. die Energieaufstreuung eingezeichnet. Diese Streuungen verhalten sich für verschiedene Projektilenergien unterschiedlich. Somit kann nur in beschränktem Maße mit der oben beschriebenen Methode gearbeitet werden. Genaugenommen müßte für jede Projektilenergie zur exakten Berücksichtigung der Reichweitestreuung ein solches Schädigungsprofil erstellt werden.

Der interessanteste Bereich, der einen kleinen Schädigungsgradienten aufweist, liegt für Protonen und α -Teilchen im Bereich 0 bis $1000 \mu\text{m}$. Für Foliendicken von bis zu $100 \mu\text{m}$ kann bei allen in diesem Bereich liegenden Energien von einem quasi konstanten Schädigungsprofil entlang der Strahlrichtung gesprochen werden. Bei höheren Projektilenergien ist jedoch der größere Anteil der nichtelastischen Schädigung an der Gesamtschädigung zu beachten. Da in der Vergangenheit nur der elastische Schädigungsanteil betrachtet wurde, stellt der nichtelastische Anteil eine wichtige Ergänzung dar. Unabhängig von der Art der erzeugten Effekte zeigt sich, daß bei hohen Primärenergien bis zu einem Faktor 2 kürzere Bestrahlungsdauern für eine gegebene Bestrahlungsdosis möglich sind.

Bei der Simulation der neutroninduzierten Schädigung des oben eingeführten Erste-Wand Referenzspektrums zeigt sich, daß die mittlere Schädigung von $6,6 \cdot 10^{-7}$ DPA/sec sehr einfach durch geeignete Strahlstromereinstellungen, nämlich $7 \mu\text{A}$ bis $11 \mu\text{A}$ bei den α -Teilchen und $22 \mu\text{A}$ bis $28 \mu\text{A}$ bei den Protonen, erreicht werden kann.

Ein weiterer sehr interessanter Bereich liegt im Bereich der Schädigungsmaxima. Die Schädigungsmaxima liegen bei sehr geringen Projektilenergien, wodurch die zu bestrahlende Dicke der Folien durch die geringe Projektilreichweite stark begrenzt ist. Hinzu kommt, daß um den Bereich der Schädigungsmaxima sehr große Schädigungsgradienten auftreten, die eine inhomogene Schädigung in der Targetfolie zur Folge hätte, wenn die Dicke der Targetfolie zu groß gewählt werden würde.

Bei den α -Teilchen liegt der Bereich des Maximums zwischen $1330 \mu\text{m}$ und $1360 \mu\text{m}$. Dieser schmale Bereich erlaubt demnach nur die Bestrahlung von maximal $30 \mu\text{m}$ dicken

Folien. Innerhalb dieses Bereichs ist jedoch gewährleistet, daß die eingebrachte Verlagerungsschädigung homogen entlang der Strahlrichtung verläuft. Bei genauer Betrachtung der Abb. 6-8 zeigt sich, daß in diesem Bereich der nichtelastische Schädigungsanteil keine Rolle mehr spielt und daß die pro $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ erreichte Schädigungsrate deutlich über dem Wert der Fusionsneutronen liegt. Bezugnehmend auf Abb. 6-3 bedeutet das für die erzeugte Schädigung, daß anzahlmäßig sehr leicht sehr hohe Schädigungswerte erreicht werden können, und daß diese Schädigung sich außerdem dem PKA-Spektrum der Fusionsneutronen oberhalb 10 KeV zufriedenstellend anpaßt. Sogar die maximal zu erreichenden PKA-Energien stimmen gut überein. Dies bedeutet, daß für sehr dünne Folien durch niederenergetische α -Teilchen Bestrahlung ein effektives und ausreichend gut funktionierendes Instrument zur Simulation der Verlagerungsschädigung durch Fusionsneutronen zur Verfügung steht.

Bei den Protonen liegt der Bereich des Schädigungsmaximums zwischen 1665 μm und 1715 μm , wodurch eine Folie der maximalen Dicke von 50 μm mit homogener Verlagerungsschädigung beaufschlagt werden kann. Das auf 1 $\mu\text{m}/\text{cm}^2$ normierte Maximum der Schädigungsrate liegt jedoch deutlich unterhalb der durch Fusionsneutronen induzierten Schädigungsrate. Bezugnehmend auf Abb. 6-4 zeigt sich, daß das PKA-Spektrum der 10 MeV Protonen im PKA-Energiebereich größer 10 keV bis 600 keV dem fusionsneutroneninduzierten PKA-Spektrum gut entspricht. Jedoch werden keine PKA's oberhalb 600 keV erzeugt, was dazu führt, daß das protoninduzierte PKA-Spektrum etwas zu weich ist. Dies bedeutet, daß durch Bestrahlung von dünnen Folien mit niederenergetischen Protonen trotz guter Verlagerungseffizienz keine zufriedenstellende Simulation der durch Fusionsneutronen induzierten Schädigung erreicht werden kann.

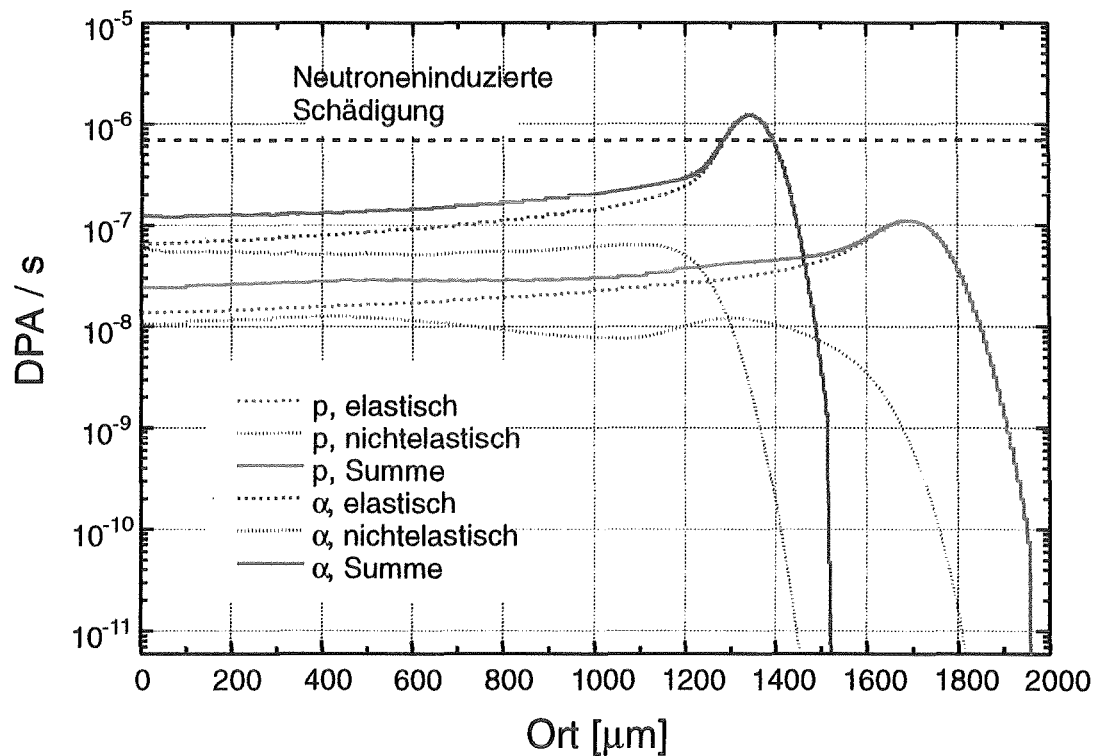


Abbildung 6-8: Vergleich der unmoderierten elastischen und nichtelastischen Verlagerungsschädigung bei Protonen und α -Teilchen mit der durch Fusionsneutronen induzierten Verlagerungsschädigung. Die leichtioneninduzierten Werte wurden auf $1\mu\text{A}/\text{cm}^2$ Teilchenstromdichte normiert.

Fall B: Bestrahlungen mit moderierter Projektilenergie

Durch die Moderation der Primärenergie der Projektile wird erreicht, daß die H- bzw. He-Atome in dicken Proben implantiert werden. Experimente solchen Typs wurden in der Vergangenheit am Forschungszentrum Karlsruhe an der Dual-Beam Anlage durchgeführt. Eine typische Dual-Beam Bestrahlungsgeometrie ist in Abb. 6-9 dargestellt. Von links fällt ein homogener Protonen- oder α -Teilchen-Strom auf eine quadratische Hohlprobe mit 7 mm Kantenlänge und 400 μm Wandstärke. Da die Ecken der Probe in Strahlrichtung liegen, ist die durchstrahlte Schichtdicke $2\sqrt{2}$ mal 400 μm = 1131 μm . Durch den senkrechten Schnitt wird die Probe in zwei getrennt zu betrachtende Bereiche (Bereich I und Bereich II) eingeteilt. Im rechten Teil der Abbildung ist die Materialbelegung in Strahlrichtung eingezeichnet. Im Bereich des oberen und unteren spitz zulaufenden Endes ist die Materialbelegung geringer als im Bereich der planparallelen Randflächen. Da in der folgenden Diskussion die Verlagerungsraten über der Eindringtiefe aufgetragen werden ist die Diskussion nur für den mittleren Bereich der Probe anschaulich möglich.

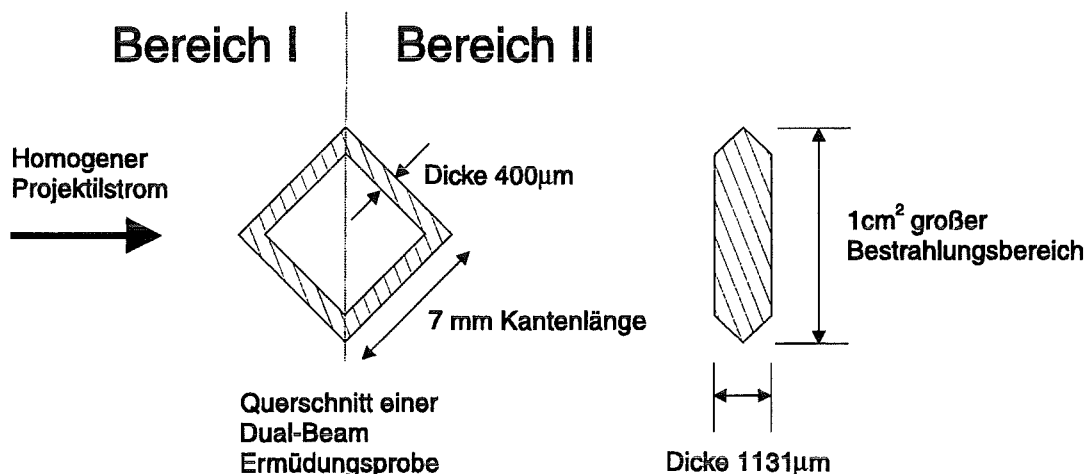


Abbildung 6-9: Querschnitt einer DUAL-BEAM Ermüdungsprobe

Wird die Ioneninduzierte Schädigungsrate für den Fall der Energiemoderation in einer Dual-Beam Ermüdungsprobe betrachtet, so ergeben sich Abb. 6-10 für moderierte 104 MeV α -Teilchen und Abb. 6-11 für moderierte 30 MeV Protonen. In diesen Abbildungen ist die Schädigungsrate DPA/s normiert auf 1 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ über der Eindringtiefe aufgetragen. Zusätzlich ist die oben zitierte neutroninduzierte Schädigungsrate eingezeichnet.

Die Abbildungen 6-10 und 6-11 kommen zustande, wenn die in Abb. 6-8 eingezeichneten Schädigungsverläufe bei konstanter Projektilenergie über den Bereich von maximaler Reichweite bis zur Reichweite 0 μm gewobelt und superpositioniert wird. Da im Experiment die zur Moderation verwendete Graphitscheibe nicht beliebig dünn gemacht werden kann, beträgt die maximale Projektilenergie etwas weniger als die oben angegebenen 104 MeV bzw. 30 MeV. Dem wurde dadurch Rechnung getragen, daß der in Abb. 6-10 bzw. Abb. 6-11 eingezeichnete Bereich I nicht bei 0 μm sondern bei 100 μm beginnt.

Es ergeben sich sehr glatte Kurvenverläufe ohne Maxima, die bei geringen Eindringtiefen höhere Schädigungsraten aufweisen als bei größeren Eindringtiefen. Generell zeigt sich gegenüber den Bestrahlungen mit konstanter Energie, daß die nichtelastischen Schädigungsraten bei den Protonen wie bei den α -Teilchen zu größeren Eindringtiefen hin deutlich abnehmen. Dies ist bei den α -Teilchen (Abb. 6-10) noch deutlicher der Fall als bei den Protonen (Abb. 6-11).

Die nachfolgende Diskussion gilt ausschließlich für die α -Teilchen in Abb. 6-10. Generell fällt auf, daß der nichtelastische Anteil der Schädigung sehr deutlich unterhalb des elastischen Anteils liegt. Dies ist dadurch bedingt, daß der in Abb. 6-8 eingezeichnete α -teilcheninduzierte Schädigungspeak, bedingt durch die Lageverschiebungen während der Energiemoderation, maßgeblich die energiemoderierte elastische Verlagerungsschädigung verursacht. Während in Bereich I das Verhältnis von elastischer zu nichtelastischer Schädigung zwischen 5 und 9 liegt, ändert sich dies im Bereich II drastisch auf die Werte zwischen 9 und 100. Dies hat zur Folge, daß in den Bereichen I und II der bestrahlten Ermüdungsprobe ein deutlich unterschiedlicher Anteil an nichtelastischer Schädigung zur Gesamtschädigung beiträgt. Werden die Mittelwerte über die beiden Bereiche berechnet, so ergibt sich im Bereich I ein nichtelastischer Anteil von 15% und im Bereich II ein nichtelastischer Anteil von 6% an der Gesamtschädigung. Jedoch darf nicht vernachlässigt werden, daß die nichtelastischen Schädigungsgradienten in den einzelnen Bereichen deutlich sind, was besonders stark bei hohen Eindringtiefen im Bereich II auftritt. Ist die erzeugte Defektmorphologie nicht von primärem Interesse, so kann bei Betrachtung der Gesamtschädigungsrate in 1. Näherung von einem quasi konstanten Verlauf über die Bereiche I und II gesprochen werden. Um die neutroninduzierte Schädigungsrate zu erreichen, bedarf es somit im Mittel einer Erhöhung der α -Teilchen-Stromdichte von $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ auf ca. $6 \mu\text{A}/\text{cm}^2$, was einer elektrischen Strahlstromdichte von ca. $12 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ entspricht. Dieser Wert ist ohne großen technischen Aufwand zu erreichen. Dies bedeutet, daß mit moderierten 104 MeV α -Teilchen, sofern nur die erzeugte DPA-Rate und nicht die Defektmorphologie interessant ist, eine gute Simulation der fusionsneutroneninduzierten Schädigungsrate erreicht werden kann.

Bei den in Abb. 6-11 eingezeichneten protoneninduzierten, energiemoderierten Werten zeigt sich, daß der nichtelastische Schädigungsanteil deutlich unterhalb des elastischen Wertes liegt. Während in Bereich I das Verhältnis von elastischer zu nichtelastischer Schädigung zwischen 4 und 7 liegt, kommt es im Bereich II zwischen 7 und 12 zu liegen. Dies bedeutet, daß der nichtelastische Schädigungsgradient bei den Protonen bei weitem nicht so dramatisch verläuft wie bei den α -Teilchen. Dies hat auch zur Folge, daß in den Bereichen I und II der Anteil der nichtelastischen Schädigung von der elastischen Schädigung nicht sehr verschieden ist. Werden die Mittelwerte über die beiden Bereiche betrachtet, so ergibt sich im Bereich I ein nichtelastischer Anteil von 19% und im Bereich II ein nichtelastischer Anteil von 12% an der Gesamtschädigung. Jedoch darf nicht vernachlässigt werden, daß die nichtelastischen Schädigungsgradienten immer noch

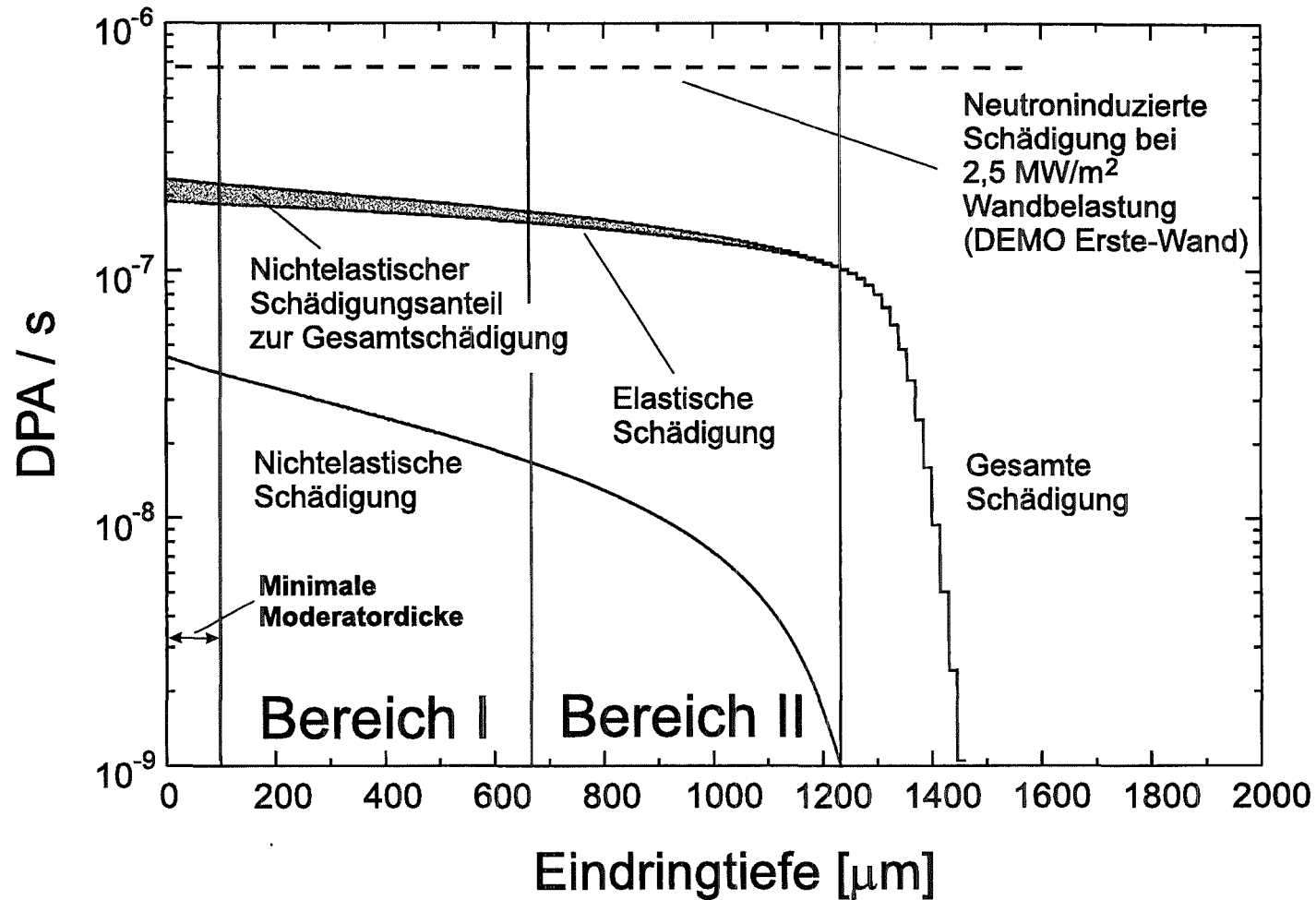


Abbildung 6-10: Vergleich der neutroninduzierten und moderierten α -induzierten Verlagerungsschädigung in Eisen. Die α -induzierten Werte wurden auf $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ α -Teilchenstromdichte normiert. Um die neutroninduzierte Schädigungsrate zu erreichen, ist ein Strahlstrom von $12 \mu\text{A}$ erforderlich.

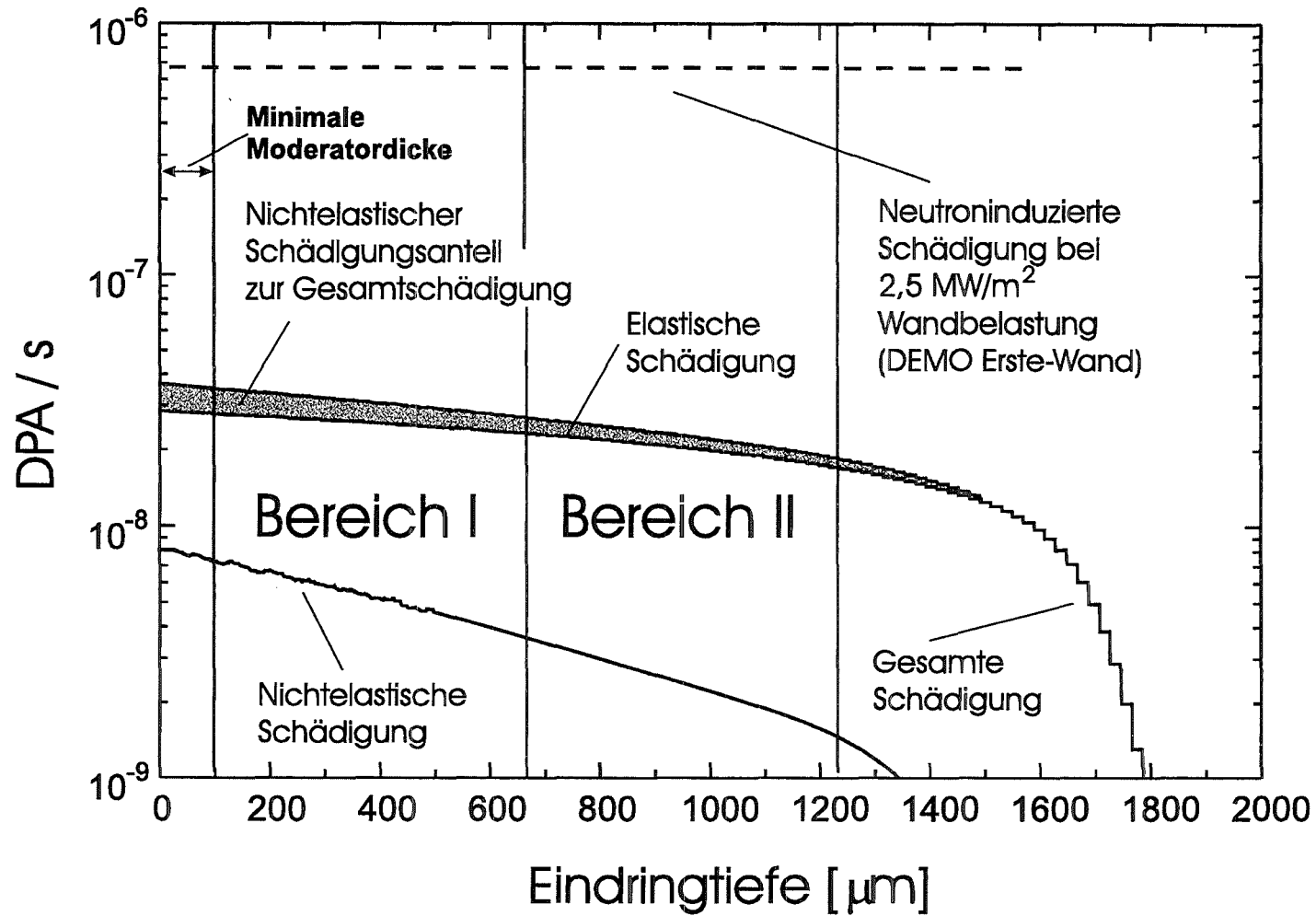


Abbildung 6-11: Vergleich der neutroninduzierten und moderierten protoninduzierten Verlagerungsschädigung in Eisen. Die p-induzierten Werte wurden auf $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ α -Teilchenstromdichte normiert. Um die neutroninduzierte Schädigungsrate zu erreichen, ist ein Strahlstrom von $25 \mu\text{A}$ erforderlich.

deutlich sind. Bei Betrachtung der Defektmorphologie kann bei den Protonen in grober Näherung davon gesprochen werden, daß in den Bereichen I und II annähernd der gleiche nichtelastische Anteil auftritt. Wird weiterhin der Verlauf der Gesamtschädigungsrate in 1. Näherung als konstant betrachtet, so zeigt sich, daß für die Simulation der fusionsneutroneninduzierten Schädigungsrate eine mittlere Projektilstromdichte von $25 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ notwendig ist, was einer Protonen-Strahlstromdichte von ebenfalls $25 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ entspricht. Da dieser Wert technisch ohne großen Aufwand erzeugt werden kann, bedeutet dies, daß die neutroninduzierte DPA-Rate unter Berücksichtigung der Simulation der annähernd gleichen Defektmorphologie in 1. Näherung gewährleistet ist.

Speziell zur Erzeugung der Defekte soll für Protonen nochmals Abb. 6-4 betrachtet werden. Je höher die Primärenergie der Protonen, desto höher sind auch die maximal erreichbaren PKA-Energien. Bei 30 MeV Protonen erreicht die maximale PKA-Energie gerade das Fusionsneutronen-PKA-Spektrum. Durch Moderation der Projektilenergie wandert jedoch die maximale Energiegrenze nach unten. Dies bedeutet, daß die PKA-Spektren mit abnehmender Projektilenergie immer weicher werden. Daraus folgt, daß ein energiemodiertes PKA-Spektrum weicher sein muß als ein 30 MeV Spektrum, da die höchste Projektilenergie und somit die höchste PKA-Energie weniger wahrscheinlich auftritt. Somit ist ein energiemodiertes Proton-PKA-Spektrum in jedem Fall etwas weicher als das zu simulierende neutroneninduzierte-PKA-Spektrum.

6.4 Diskussion der Schädigungskaskaden

In den bisherigen Kapiteln dieser Arbeit wurden die Prozesse zur Erzeugung von Rückstoßkernen dargestellt. Ebenfalls wurden die dadurch entstehenden PKA-Spektren und daraus folgend die Anzahl der Verlagerungen energie- und ortsabhängig im Hinblick auf die Betrachtung von reinem Eisen diskutiert. Wird jedoch weiter differenziert, so treten neben Verlagerungen wie Frenkel-Defekten auch noch Bereiche hoher Schädigungsdichte d.h. Schädigungskaskaden auf, die ihrerseits wiederum von Subkaskaden begleitet werden. Diese verschiedenen Schädigungsmorphologien können in Abhängigkeit von der PKA-Energie T klassifiziert werden. Unabhängig von der Art des erzeugenden Prozesses (elastisch oder nichtelastisch) erhält jedes PKA eine mehr oder weniger hohe kinetische Energie T . Bezugnehmend auf die im Mittel für eine permanente Verlagerung benötigte Energie E_d , können folgende Schädigungsmechanismen eingeteilt werden.

$T < E_d = 40 \text{ eV}$	---->	Platzwechselprozesse (Projektil <--> Gitteratom)
$T < 2E_d = 80 \text{ eV}$	---->	Platzwechselprozesse (PKA <--> Gitteratom)
$T > E_d$	---->	Frenkel-Defekte
$T \gg E_d$	---->	Schädigungskaskadenbildung bzw. Subkaskadenaufbruch

Im folgenden wird nur auf den Energiebereich $T \gg E_d$ - Produktion von Kaskaden und Subkaskaden - eingegangen.

K. Merkle beschreibt in einem Übersichtsartikel [6-10] sehr anschaulich, daß die Bestrahlung von Metallen mit hochenergetischen Teilchen (e^- , p , α , n) eine Überlagerung verschiedener Defektstrukturen liefert. Merkle zeigt zum ersten Mal mit TEM-Aufnahmen, daß bei 14 MeV Neutronenbestrahlungen (Abb. 6-12) und bei 300 keV Eigenionenbestrahlungen (Abb. 6-13) in Au neben Schädigungskaskaden auch Subkaskadenstrukturen auftreten.

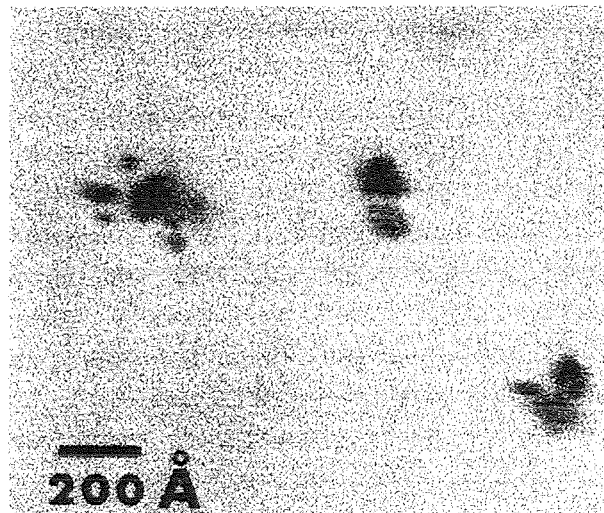


Abbildung 6-12: Subkaskadenstruktur bei Bestrahlung von Au nach 14 MeV Neutronenbestrahlung ($7 \times 10^{15} \text{ n/cm}^2$) [6-10].

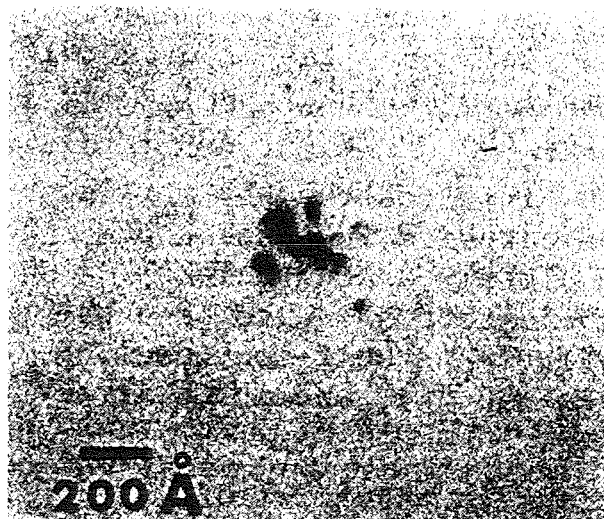


Abbildung 6-13: Subkaskadenstruktur in Au nach 300 keV Eigenionenbestrahlung [6-10].

Diese Beobachtungen führen auf ein einfaches schematisches Bild über die Produktion von Defektbereichen. Abbildung 6-14 erläutert die Morphologie von Schädigungsbereichen bei Bestrahlung mit leichten Projektilen und schweren Ionen (Eigenionen).

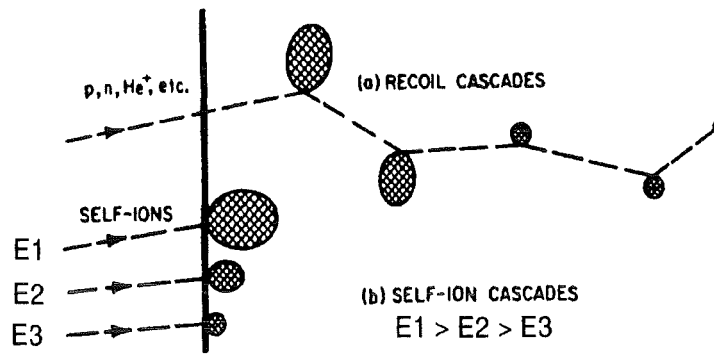


Abbildung 6-14: (a) Schematische Ansicht von Schädigungsbereichen produziert durch leichtioneninduzierte Rückstoßkerne. (b) Im Vergleich dazu sind Schädigungsbereiche erzeugt durch Eigenionenbestrahlung verschiedener Energie dargestellt. [6-10]

Es ist gut zu erkennen, daß das Modell die Simulation der unter den leichten Projektilen erzeugten Schädigungskaskaden verschiedener Größe mittels Eigenionen verschiedener Energie erlaubt. Die Produktion von Subkaskaden ist in dieser Darstellung nicht enthalten.

Der Unterschied in der Schädigungswirksamkeit zwischen den eigenioneninduzierten Kaskaden und den PKA-induzierten Kaskaden beschreibt Merkle mit:

- (a) Eigenioneninduzierte Kaskaden liegen nahe bei der Materialoberfläche, während PKA-induzierte Kaskaden eine Tiefenverteilung aufweisen.
- (b) PKA-induzierte Kaskaden beginnen bei einem Gitteratom während die Eigenionenkaskaden nicht bei Gitterpositionen beginnen müssen und somit Gittersteuerungseffekte, wie z.B. Channeling, die Produktion der Eigenionenkaskaden maßgeblich beeinflussen können, da sie von der gewählten Einstrahlrichtung abhängen können.

Als Verursacher von Subkaskaden gelten nach Merkle Gitteratome im Kaskadengrund, die eine so hohe kinetische Energie erhalten, daß sie den Bereich der eigentlichen Kaskade verlassen können und räumlich separiert einen Bereich hoher Schädigungsdichte (Subkaskade) erzeugen können. Dies ist darin begründet, daß die Schädigungsdichte mit abnehmender Ionenenergie zunimmt. Somit können hochenergetische Gitteratome eine „große Strecke“ im Vergleich mit der Kaskadengröße bei geringer Verlagerungsproduktion zurücklegen, bevor sich eine Subkaskade bildet.

Ein weiteres Modell über die Entstehung von Kaskaden und Subkaskaden liefert Kiritani [6-11, 6-12, 6-14 und 6-15]. Kiritani beschreibt, daß der Aufbruch von Kaskaden in Subkaskaden durch Berechnungen nach der „Binary Collision Approximation“ (BCA) erklärt werden kann. Eine schematische Darstellung dieses Aufbruchkriteriums zeigt Abb. 6-15.

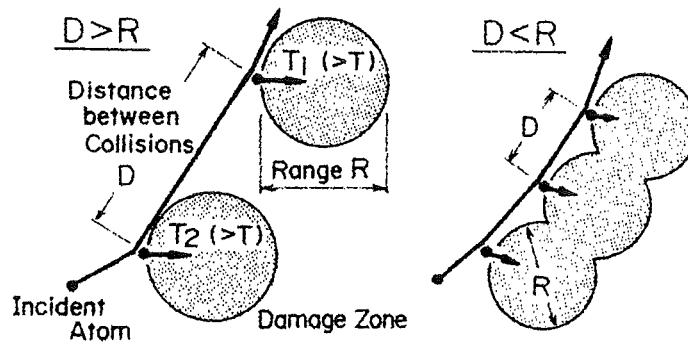


Abbildung 6-15: Schematische Darstellung des Kriteriums für Subkaskadenbildung nach Kiritani [6-15].

Eine Annahme bei BCA-Berechnungen ist, daß ein energetisches Gitteratom beim Unterschreiten der Subkaskadenaufbruchsenergie E_{SC} einen Schädigungsbereich bildet. Dieser Schädigungsbereich hat einen mittleren Durchmesser R . Ist der Abstand D zwischen zwei Kollisionen, die zur Bildung eines Schädigungsbereichs führen, größer als der Durchmesser R , so sind diese zwei Schädigungsbereiche räumlich separiert und werden als Subkaskaden bezeichnet. Gilt jedoch $D < R$, so findet eine Überlappung der Schädigungsbereiche statt, was als Kaskade bezeichnet wird.

In den Arbeiten von Averback [6-8] und Was et al [6-16] finden sich analog zu Abbildung 6-14 qualitative, graphische Darstellungen von Rückstoßenergiespektren, induziert durch 1 MeV Teilchen.

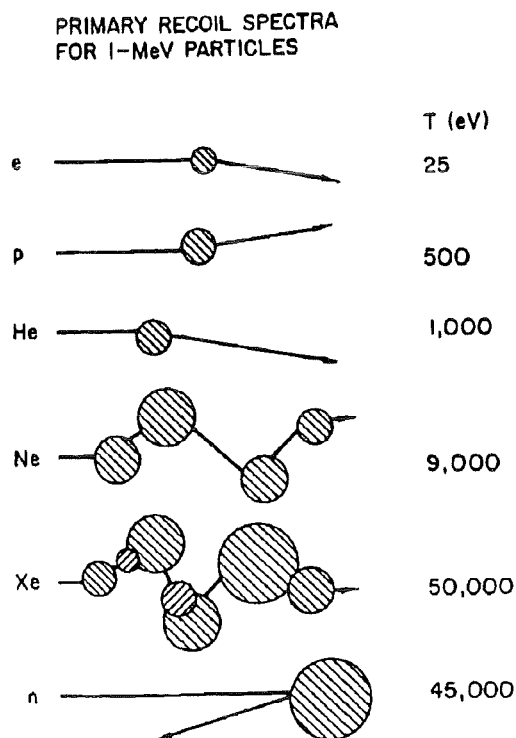


Abbildung 6-16: Qualitative Darstellung von PKA-Spektren für 1 MeV Projektile in Cu. Die Kreise stellen den Ort dar, an dem die PKA's erzeugt werden. Die Größe der Kreise veranschaulicht die mittlere übertragene Energie T [6-8].

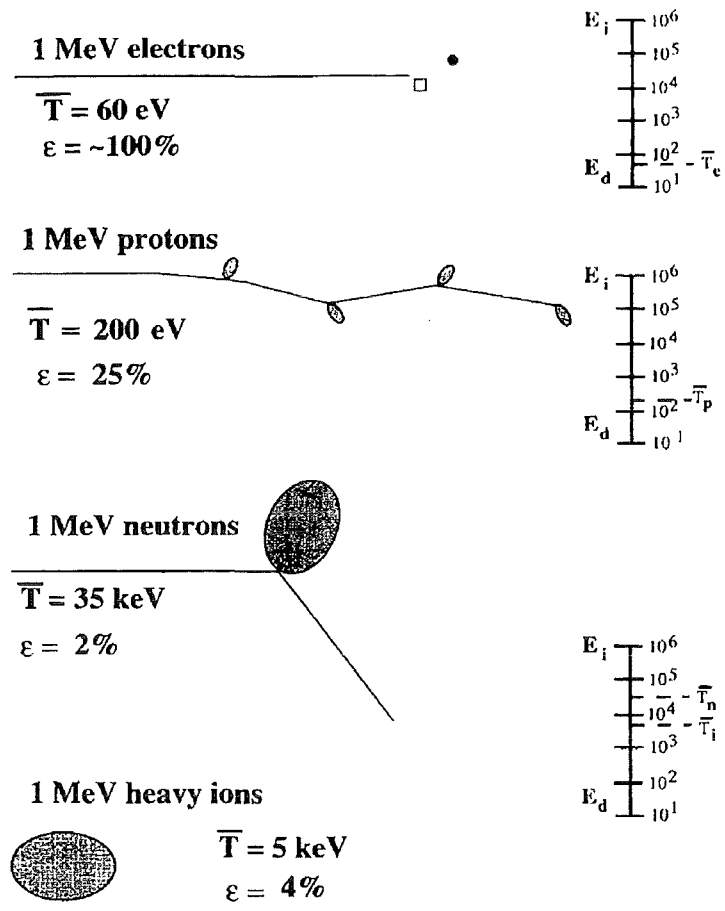


Abbildung 6-17: Qualitative Beschreibung der Schädigungsmorphologien für Bestrahlungen von reinem Nickel mit verschiedenen Teilchen bei $E = 1 \text{ MeV}$. T stellt die mittlere übertragene Rückstoßenergie dar. ϵ gibt den Bruchteil der insgesamt erzeugten Defekte an, die als „Freely Migrating Defects“ überleben [6-16].

Da der Schwerpunkt bei den in dieser Arbeit diskutierten PKA-Spektren auf den hochenergetischen PKA's liegt, wird die Diskussion dieser PKA-Spektren in Bezug auf Schädigungskaskaden an dieser Stelle nochmals aufgenommen. In Kapitel 6.1 wurden bereits die leichtioneninduzierten PKA-Spektren für Protonen und α -Teilchen eingehend diskutiert. Wie in den Abbildungen 6-3 (α -Teilchen) und 6-4 (Protonen) aufgezeigt wurde, eignen sich die hochenergetischen leichten Ionen mehr oder weniger gut zur Simulation von Erste-Wand Fusionsneutronen. Die besten Resultate in puncto Simulationbestrahlung werden mit 20 MeV Protonen erreicht. In Bezug zur Diskussion der durch hochenergetische PKA's erzeugten Schädigungskaskaden soll die Frage der Simulationsfähigkeit von Erste-Wand Fusionsneutronen durch hochenergetische Protonen und α -Teilchen nochmals unter Berücksichtigung der sekundären Schädigungsfunktion $\nu(T)$ diskutiert werden. Zu diesem Zweck wird im Gegensatz zu den doppelt logarithmischen Darstellungen Abb. 6-3 und Abb. 6-4 eine Funktion $W(E,T)$ berechnet, die den Anteil der Defekte angibt, die durch PKA's mit einer kinetischen Energie kleiner als T produziert werden. $W(E,T)$ wird für α -Teilchen und

Protonen bei verschiedenen Primärenergien E und für die elastisch und nichtelastisch erzeugten PKA's berechnet. In den Arbeiten von L.E. Rhen et al. [6-17], R.S. Averback [6-8] und R.S. Averback et al. [6-18] wurden $W(E,T)$ -Funktionen für niederenergetische (bis max. 1 MeV) leichte, mittelschwere und schwere Ionen (Eigenionen) auf verschiedene mittelschwere bis schwere Targets (zumeist Cu oder Au) diskutiert. Bei [6-17] wird eindrucksvoll demonstriert, inwiefern sich Elektronenbestrahlungen mit relativistischen 1 MeV Elektronen von 1 MeV Protonenbestrahlungen in Cu unterscheiden. R.S. Averback zeigt in [6-8], daß sich in Cu die schweren Projektile He und Kr weitaus besser zur Simulation von 1 MeV Neutronen eignen als 1 MeV Protonen.

Die Herleitung von $W(E,T)$ ist in [6-8] und [6-17] gleichermaßen übersichtlich dargestellt. Bezogen auf die in Kapitel 2 verwendete Notation stellt sich $W(E,T)$ für eine bestimmte Projektilsorte und eine gegebene Primärenergie E wie folgt dar:

$$\sigma_D(E, T) = \int_{E_d}^T \frac{dT(E, T)}{dT} v(T) dT \quad (6-1)$$

$$W(E, T) = \frac{\sigma_D(E, T)}{\sigma_D(E, T_{\max})} \quad (6-2)$$

Gleichung 6-1 stellt den in Kapitel 2 eingeführten Verlagerungsquerschnitt dar. Durch Einsetzen des elastischen PKA-Spektrums bzw. des gesamten nichtelastischen PKA-Spektrums gelten die Gleichungen 2-40 bzw. 2-45.

Im Gegensatz zu den Abbildungen 6-5 und 6-6, bei denen $\sigma_D(E, T_{\max})$ in Abhängigkeit von der Primärenergie E diskutiert wurde, soll hier für eine gegebene, feste Primärenergie die Abhängigkeit des Verlagerungsquerschnitts σ_D von der PKA-Energie T diskutiert werden. Da der Verlagerungsquerschnitt σ_D direkt proportional zur Anzahl der erzeugten Verlagerungen ist (Gleichungen 2-42 bzw. 2-47), stellt $W(E,T)$ bei konstanter Projektilenergie E die bis zur PKA-Energie T erzeugten Verlagerungen normiert auf die Gesamtzahl der Verlagerungen bei T_{\max} dar. Für die maximale PKA-Energie T_{\max} gilt im elastischen Fall Gleichung 2-29 und im nichtelastischen Fall die durch das Programm ALICE bzw. daraus folgend durch das Programm PKA berechnete maximale PKA-Energie. Die Funktion $W(E,T)$ erlaubt also einen tieferen Einblick in das Verhalten der PKA-Spektren, indem die PKA-Spektren mit der Anzahl der erzeugten Defekte gewichtet werden.

Die Funktion $W(E,T)$ ist für elastische PKA-Spektren und Gesamt-PKA-Spektren (elastisch + nichtelastisch) in den Abbildungen 6-12 (Protonen) und 6-13 (α -Teilchen) eingezeichnet. Zur Veranschaulichung der Simulationsfähigkeit der Leichtionen in Bezug auf die Erste-Wand-Fusionsneutronen sind diese vergleichend dazu angegeben.

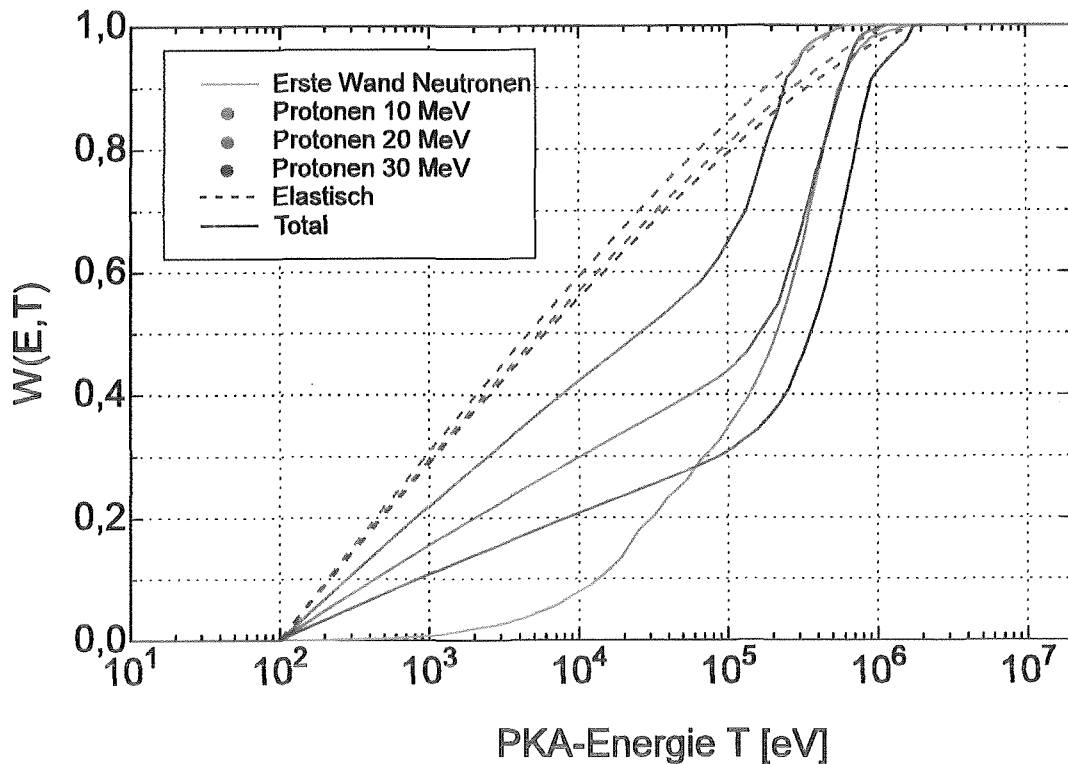


Abbildung 6-18: Gewichtete PKA-Spektren für Protonen verschiedener Primärenergie und Erste-Wand-Fusionsneutronen in reinem Eisen

Da die Bewertung der Simulationsfähigkeit und das Verhalten der kaskadenträchtigen hochenergetischen PKA's im Vordergrund stehen, wird nicht der Verlauf allgemein, sondern nur die Korrelation zu den Erste-Wand-Neutronen besprochen.

Wie Abbildung 6-18 zeigt, haben die durch Protonen induzierten rein elastischen Verlagerungen wenig mit den Fusionsneutronen gemeinsam. Während bei $T = 10$ keV bei den Neutronen ca. 10% der Defekte erzeugt wurden, sind die elastischen Werte schon deutlich oberhalb von 50% angelangt. Erst durch die Berücksichtigung des nichtelastischen, protoneninduzierten Anteils, der nur bei hohen PKA-Energien T einen Beitrag liefert, wird der bei den Fusionsneutronen typische Verlauf annähernd wiedergegeben. Eine sehr gute Annäherung wird bei den 20 MeV Protonen erreicht. Der optimale Wert der Primärenergie dürfte jedoch etwas oberhalb 20 MeV liegen. Diese Ergebnisse decken sich mit der Auswertung und Diskussion von Abbildung 6-4. Jedoch kommen in Abbildung 6-18 Unterschiede in den Anteilen bei den nieder- und hochenergetischen PKA's weitaus deutlicher zum Ausdruck.

Wie Abbildung 6-19 zeigt, liegen die durch α -Teilchen induzierten rein elastischen Verlagerungen über den gesamten PKA-Energiebereich sehr deutlich oberhalb der Fusionsneutronen. Die rein elastischen Daten für 10 MeV α -Teilchen liegen exakt unterhalb der Kurve für das totale PKA-Spektrum bei 10 MeV, da der nichtelastische PKA-Anteil bei dieser Energie vernachlässigbar gering ist. Bei den höheren Primärenergien von 30 MeV, 60 MeV und 100 MeV zeigt sich jedoch eine deutliche Veränderung des $W(E,T)$ -Verlaufs

hin zu den Fusionsneutronen. Jedoch kann bei den α -Teilchen bei weitem keine so gute Übereinstimmung wie bei den Protonen erreicht werden. Es ist zwar im niederenergetischen Bereich eine klare Absenkung des Verlagerungsanteils zu erkennen, jedoch bleibt im Gegensatz dazu im hochenergetischen Bereich der Verlauf deutlich hinter den Fusionsneutronen zurück. Dies ist unter anderem dadurch begründet, daß die α -Teilchen induzierten PKA-Spektren bis zu Energien deutlich oberhalb 2 MeV (max. PKA-Energie für die Fusionsneutronen) führen. Der Hauptgrund ist jedoch die Überbetonung des niederenergetischen Anteils. Die in Abbildung 6-19 dargestellte Funktion $W(E,T)$ zeigt für die α -Teilchen, daß weder im nieder- noch im hochenergetischen Bereich eine gute Simulation der Erste-Wand-Fusionsneutronen über den gesamten Primärenergiebereich gegeben ist.

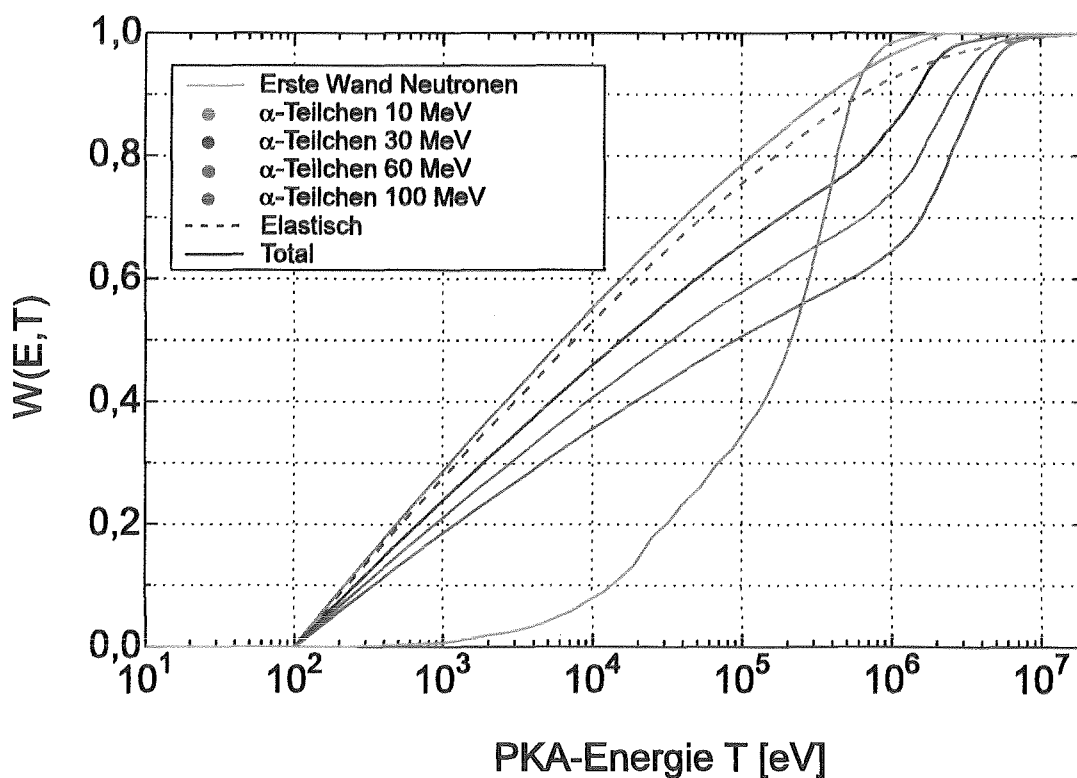


Abbildung 6-19: Gewichtete PKA-Spektren für α -Teilchen verschiedener Primärenergie und Erste-Wand-Fusionsneutronen in reinem Eisen.

Durch Berücksichtigung des nichtelastischen PKA-Anteils konnte in den Abbildungen 6-18 und 6-19 gezeigt werden, daß eine Umverteilung der PKA-Produktionswahrscheinlichkeit von niederen Energien zu höheren Energien hin stattfindet, wodurch die leichten-induzierten PKA-Spektren fusionsneutronenähnlicher werden. Der hochenergetische Anteil des PKA-Spektrums bei den α -Teilchen kann jedoch durch Berücksichtigung des Subkaskadenaufbruchs entschärft werden. Wie das aussieht, soll im folgenden Abschnitt diskutiert werden.

In der Vergangenheit haben sich Merkle [6-10], Wiedersich [6-13], Kiritani [6-11, 6-14 und 6-15] und Satoh et al [6-9] mit dem Problem des Subkaskadenaufbruchs beschäftigt, wobei Satoh auf Kiritani's Arbeiten aufbaut und den am weitesten entwickelten Beitrag liefert.

Satoh gibt für Cu und Fe eine Subkaskadenaufbruchsenergie E_{SC} von ungefähr 10 keV an. Satoh erhält diesen Wert aus BCA-Berechnungen mit dem Code MARLOWE indem für Subkaskadenformation eine Energieschwelle E_{SC} eingeführt wird. Es wird sehr anschaulich demonstriert, wie damit die experimentell gemessene Subkaskadenverteilung berechnet werden kann.

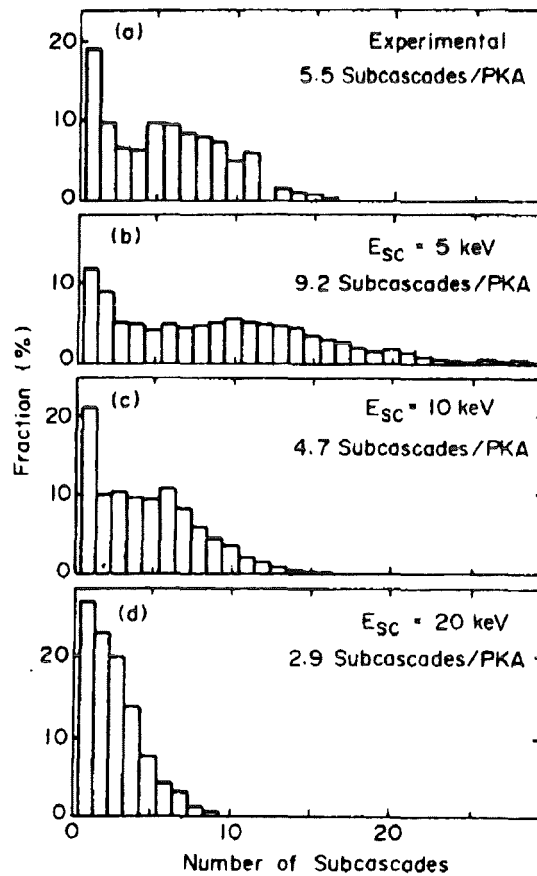


Abbildung 6-20: Verteilung der Anzahl der Subkaskaden bei 14 MeV Neutronenbestrahlungen in Cu. (a) Experimentelle Analyse, (b) - (d) Modellrechnungen mit MARLOWE mit einer Subkaskadenaufbruchschwelle von 5, 10 und 20 keV [6-9].

Abbildung 6-20 zeigt, daß mit $E_{SC} = 10 \text{ keV}$ die Subkaskadenverteilung annähernd der experimentellen Analyse entspricht. Die im Mittel erzeugte Anzahl von Subkaskaden zeigt ebenfalls eine gute quantitative Übereinstimmung. Wird bei $E_{SC} = 10 \text{ keV}$ die Subkaskadenverteilung in Abhängigkeit von der PKA-Energie untersucht, so ergibt sich Abbildung 6-21.

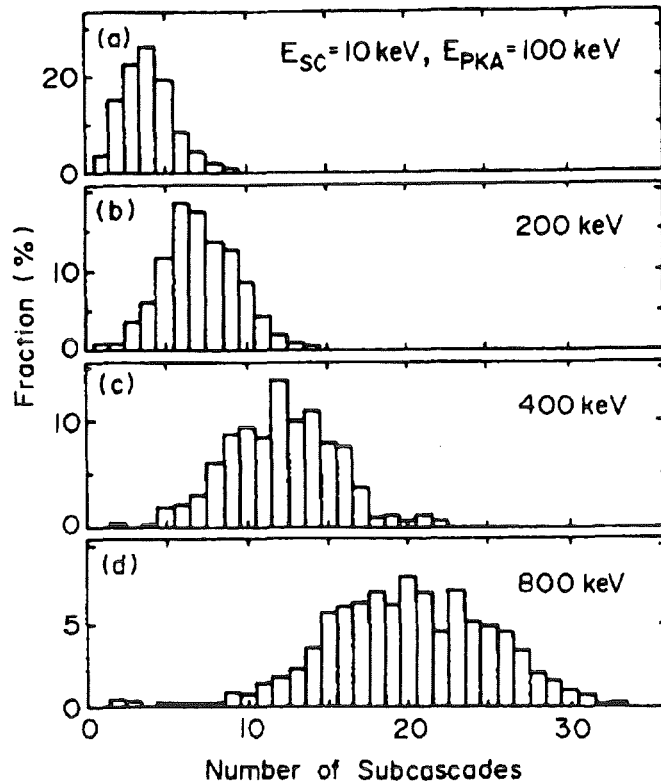


Abbildung 6-21: Verteilung der Anzahl der produzierten Subkaskaden in Cu berechnet mit einer „Binary Collision Approximation“ (BCA) Simulation. Als Schwellenenergie für den Subkaskadenaufbruch wurden 10 KeV angenommen. Von a) bis d) wird der Parameter PKA-Energie von 100 KeV bis 800 KeV variiert [6-9].

Wird die mittlere Anzahl der produzierten Subkaskaden und die zugehörige Halbwertsbreite über der Schädigungsenergie aufgetragen, so ergibt sich Abbildung 6-22.

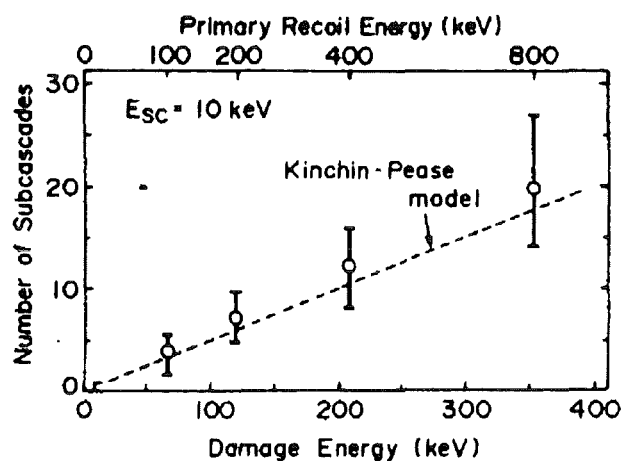


Abbildung 6-22: Abhängigkeit der mit MARLOWE berechneten mittleren Anzahl der Subkaskaden von der Schädigungsenergie. Die gestrichelt eingezeichnete Linie zeigt das Resultat für eine Berechnung nach dem Kinchin-Pease Modell mit $E_{SC} = 10 \text{ keV}$ [6-9].

Abbildung 6-22 zeigt einen fast linearen Anstieg der mittleren Anzahl der Subkaskaden mit der Schädigungsenergie. Die Modellrechnungen nach Kinchin-Pease ergeben nahezu dasselbe Resultat. Damit läßt sich nun für sehr hochenergetische PKA's ein Gefühl für die mittlere Anzahl von Subkaskaden und deren Verteilungsbreite erhalten.

Die Anwendung dieser Resultate auf die leichtioneninduzierten PKA-Spektren dieser Arbeit (Abbildungen 6-3 und 6-4) läßt nun den Schluß zu, daß die hochenergetischen PKA's eine mehr oder weniger große Anzahl 10 keV großer Sukaskaden erzeugen, und somit der hochenergetische PKA-Spektrumsanteil zu niedrigeren Energien hin verlagert wird. Somit kann der in Abbildung 6-19 aufgetretene, unerwünschte, hochenergetische PKA-Anteil, wie in Abbildung 6-23 demonstriert wird, umgelagert werden.

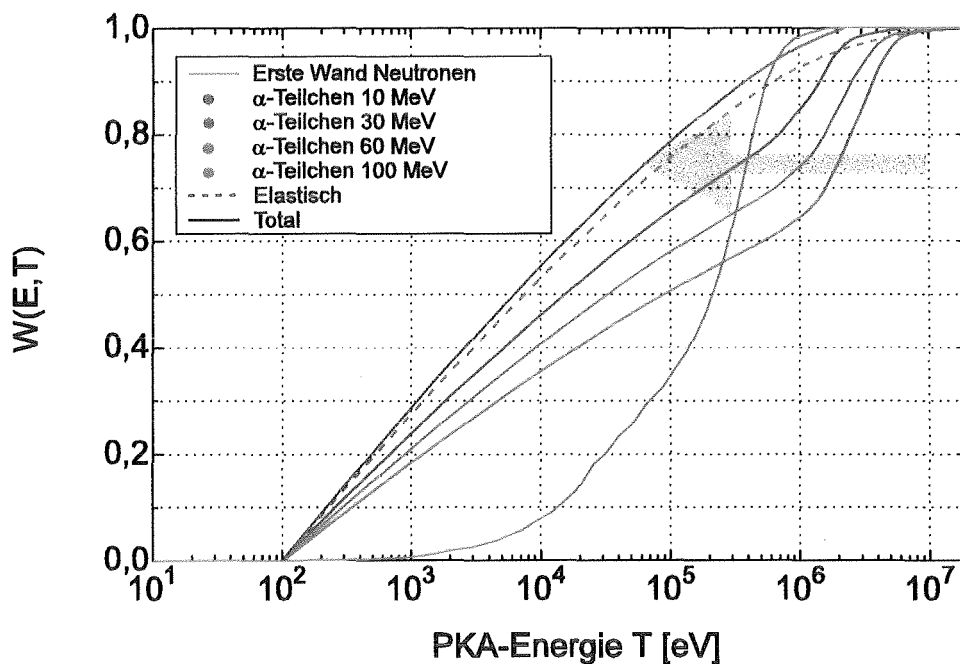


Abbildung 6-23: Demonstration der Verlagerung von PKA-Produktionswahrscheinlichkeit durch Berücksichtigung des Subkaskadenaufbruchs nach Satoh.

Für die PKA-Spektren (leichtionen- bzw. neutroneninduziert) bedeutet das, daß bei $T = 10$ keV eine Erhöhung der Produktionswahrscheinlichkeit auftritt, die aus der Abnahme der $T > 10$ keV PKA's resultiert. Dies bedeutet, daß im Hochenergiebereich die Simulationsfähigkeit der Leichtionenbestrahlungen in Bezug auf 14 MeV Fusionsneutronen durch die Berücksichtigung der Subkaskadenenergieschwelle $E_{SC} = 10$ keV besser erklärt werden kann.

Für die Praxis bedeutet das, daß die Unterschiede im Hochenergiebereich der PKA-Spektren zwischen den Fusionsneutronen und den Alphateilchen keinen sehr großen Einfluß auf die Art der erzeugten Schädigung haben wird, da die sehr großen Kaskaden in Subkaskaden aufbrechen, die ihrerseits unabhängig von ihrem Ursprung eine sehr ähnliche Schädigungsmorphologie besitzen.

Schlußfolgerungen

Im folgenden wird eine Liste der wichtigsten Schlußfolgerungen aus den in dieser Arbeit gewonnenen Resultaten aufgeführt.

- (1) Die Aktivierungsanalyse erlaubt durch die Kenntnis aller wichtigen, kurz- und langlebigen radioaktiven Reaktionsprodukte eine detaillierte Aussage darüber, welches radioaktive Inventar in Bezug auf Kurzzeit- und Langzeitaktivierung bei der Bestrahlung von reinem Fe mit Protonen und Alphateilchen erhalten wird.
- (2) In Abhängigkeit von den Bestrahlungsparametern können Vorhersagen über die Abklingdauer von mit Protonen und Alphateilchen bestrahlten reinen Fe-Proben und damit über die Wartezeit bis zum gefahrlosen Umgang mit diesen Präparaten gemacht werden.
- (3) Die experimentelle Verifizierung der Anregungsfunktionen zeigt, daß die modelltheoretischen Berechnungen mit dem ALICE-Code unter Verwendung der Kataria-Rammamurthy Zustandsdichtefunktion die gemessenen Datenpunkte bei einem Großteil der Anregungsfunktionen weitaus besser beschreibt als die Fermi-Zustandsdichtefunktion.
- (4) Bei Kernreaktionen, bei denen eine hohe Anzahl Nukleonen am Kernprozess beteiligt sind und emittiert werden, wie z.B. bei ^{49}Cr , ^{48}V und ^{47}Sc , ist die Bildungs- und Emissionswahrscheinlichkeit von weiteren Clustern (z.B. ^3He , ^3H , ^6Li und ^8Be) bei den theoretischen Modellrechnungen zu berücksichtigen, um die experimentell gemessenen Werte zu bestätigen.
- (5) Die Gültigkeit der Berechnung der Rückstoßenergiespektren mit dem ALICE-Code konnte durch die aus den Rückstoßenergiespektren folgende theoretische Berechnung der mittleren Rückstoßreichweiten mittels eines Vergleichs mit den experimentell bestimmten Rückstoßreichweiten gezeigt werden.
- (6) Die elastischen Anteile der Protonen und Alphateilchen induzierten PKA-Spektren sind im allgemeinen weicher als die durch 14 MeV Erste-Wand Fusionsneutronen induzierten PKA-Spektren. Die Berücksichtigung des nichtelastischen PKA-Anteils bei den leichten Ionen bringt jedoch eine deutliche Annäherung der leichtioneninduzierten PKA-Spektren an die fusionsneutroneninduzierten PKA-Spektren. Damit werden die Simulationseigenschaften der Leichtionen bezüglich fusionsneutronen-induzierter Verlagerungsschädigung deutlich verbessert.
- (7) Die bisher veröffentlichten Daten in Bezug auf leichtioneninduzierte Verlagerungen basierten im wesentlichen auf elastischen Berechnungen. Die Berücksichtigung der nichtelastisch produzierten Verlagerungen bewirkt eine Erhöhung der DPA-Produktionsraten. Dies bedeutet, daß für die Abschätzung der bestrahlungsinduzierten Materialeigenschaftsänderung eine Renormierung durchgeführt werden muß, um verlässliche Daten zu erhalten.

- (8) Der Vergleich der Protonen, Alphateilchen und Fusionsneutronen induzierten PKA-Spektren zeigt, daß die Simulationsfähigkeit für 14 MeV Erste-Wand Fusionsneutronen bei ca. 20 MeV Protonen am ausgeprägtesten ist.
- (9) Die Berücksichtigung des Subkaskadenaufbruchs bringt eine Verbesserung der Simulationsfähigkeit der Alphateilchen im hochenergetischen Bereich.

Zusammenfassung

Zur Charakterisierung der Verwendbarkeit von Leichtionenstrahlungsbestrahlungen (Dual-Beam Anlage) bezüglich der Verlagerungsschädigung unter Fusionsneutronenbestrahlung eines Erste-Wand Werkstoffes von zukünftigen DEMO-Fusionsreaktoren wurden theoretische und experimentelle Untersuchungen durchgeführt. Es wurde dazu die bestrahlungsinduzierte Produktion von primären Rückstoßkernen (PKA) und der dadurch erzeugten atomaren Verlagerungen (DPA) unter Protonenbestrahlung, α -Teilchenbestrahlung und fusionstypischer Neutronenbestrahlung in reinem Eisen betrachtet. Als Novum wurden in dieser Arbeit zum ersten Mal die durch leichtioneninduzierte Kernreaktionen während des Bestrahlungsvorgangs erzeugten nichtelastischen PKA's in die Betrachtungen quantitativ mit einbezogen.

Im Rahmen der Untersuchung der nichtelastischen Verlagerungsschädigung wurden Bestrahlungen von reinen Eisenfolien mit Protonen und α -Teilchen im Energiebereich von 10 - 30 MeV bzw. 35 - 104 MeV durchgeführt. Neben den Anregungsfunktionen der langlebigen Nuklide ^{57}Ni , ^{56}Ni , ^{58}Co , ^{57}Co , ^{56}Co , ^{55}Co , ^{56}Mn , ^{54}Mn , $^{52}\text{Mn}_g$, ^{51}Cr , ^{49}Cr , ^{48}V und ^{47}Sc wurden zum ersten Mal die kurzlebigen Nuklide $^{53}\text{Fe}_g$ ($T_{1/2} = 8,51$ min), $^{53}\text{Fe}_m$ ($T_{1/2} = 2,53$ min), $^{52}\text{Mn}_m$ ($T_{1/2} = 21,2$ min) und ^{52}V ($T_{1/2} = 3,75$ min) gamma-spektroskopisch gemessen. Durch eine geringe Veränderung des Bestrahlungssetups konnten die mittleren in Strahlrichtung projizierten Reichweiten der bei den Kernreaktionen entstehenden hochenergetischen Restkerne nach der „Thin-Target-Thick-Catcher-Technique“ bestimmt werden.

Die theoretischen Kernmodellrechnungen wurden nach dem „Geometry Dependent Hybrid Model“ (Precompound-Anteil) und dem Weisskopf-Ewing Verdampfungsmodell (Compound-Anteil) mit dem Computer-Code ALICE durchgeführt. Die Anregungsfunktionen wurden für alle offenen Reaktionskanäle für Protonen und α -Teilchen als Projektile und den stabilen Eisenisotopen ^{58}Fe , ^{57}Fe , ^{56}Fe und ^{54}Fe als Targetkerne in den Energiebereichen von 1 - 30 MeV (Protonen) bzw. 1 - 104 MeV (α -Teilchen) in 1 MeV Schritten berechnet. Als Niveaudichteparameter wurden die Fermi-Level-Density (FLD) und zur Korrektur der Schaleneffekte in der Ni-Region die Kataria-Ramamurthy-Level-Density (KRLD) benutzt. Mit einer speziellen Erweiterung von ALICE wurden zusätzlich die Rückstoßenergieverteilungen der Restkerne über den gesamten Parameterbereich berechnet.

Der Vergleich der in dieser Arbeit experimentell gemessenen Anregungsfunktionsdaten zeigt gute Übereinstimmung mit den im Bereich der Nuklide mit langen Halbwertszeiten vorhandenen Literaturdaten. Der Vergleich mit den ALICE-Modellrechnungen zeigt, daß in den meisten Fällen die KRLD den experimentellen Anregungsfunktionsverlauf besser beschreibt als die FLD. Bei den zum ersten Mal gemessenen Nukliden mit kurzen Halbwertszeiten konnte im Vergleich mit den theoretischen Rechnungen bei ^{53}Fe und ^{52}Mn eine gute quantitative Übereinstimmung festgestellt werden. Von besonderem Interesse ist die zusätzliche Information, die durch die getrennte experimentelle Erfassung der Isomere $^{53}\text{Fe}_g$, $^{53}\text{Fe}_m$, $^{52}\text{Mn}_g$ und $^{52}\text{Mn}_m$ gewonnen werden konnte, da bei den ALICE-Modellrechnungen keine Unterscheidung nach Isomeren möglich ist. Bei ^{52}V zeigt

der Vergleich zwischen Theorie und Experiment, daß bei den theoretischen Berechnungen die Emission von schwereren Clustern als Heliumkerne berücksichtigt werden muß, um die experimentell gemessenen Werte zu erhalten. Besonders deutlich tritt dies bei dem leichtesten gemessenen Kern ^{47}Sc auf, bei dem der Unterschied zwischen Theorie und Experiment bis zu zwei Größenordnungen annimmt.

Der Vergleich der mittleren projizierten Reichweiten der hochenergetischen Restkerne zeigt, daß eine im Rahmen der Meßgenauigkeit ausreichend gute Übereinstimmung sowohl mit der theoretischen Vorhersagen von PRAL als auch mit Literaturdaten vorhanden ist.

Aufbauend auf den experimentellen Aktivierungsanalysen und den kernmodelltheoretischen Berechnungen wurden elastische und nichtelastische PKA-Spektren für Protonen der Primärenergien bis 30 MeV und für α -Teilchen der Primärenergien bis 104 MeV bestimmt. Es zeigt sich, daß allgemein die durch Rutherfordstreuung erzeugten elastischen PKA's einen sehr großen Beitrag im niederenergetischen Teil des PKA-Spektrums erzeugen, während die durch Kernreaktionen erzeugten nichtelastischen PKA's erst im PKA-Energiebereich oberhalb 0,1 MeV je nach Projektilenergie und -sorte mehr oder weniger deutlich zum PKA-Spektrum beitragen. Die größten nichtelastischen Beiträge werden bei den höchsten Primärenergien erreicht. Zusätzlich fallen bei höheren Projektilenergien die nichtelastischen PKA's gegenüber den elastischen PKA's relativ gesehen deutlicher ins Gewicht, da die Produktionswahrscheinlichkeit elastischer PKA's mit zunehmender Projektilenergie abnimmt.

Für eine gute Simulation der neutroneninduzierten Verlagerungsschädigung durch Leichtenen ist es zwingend notwendig, daß die Profile der leichteneninduzierten und der neutroninduzierten PKA-Spektren gut übereinstimmen, da davon ausgegangen werden kann, daß ein einmal erzeugtes PKA gegebener Energie unabhängig seiner Herkunft statistisch gemittelt immer den gleichen Schädigungscharakter besitzt.

Der Vergleich der leichteneninduzierten und der neutroninduzierten PKA-Spektren im PKA-Energiebereich von 100 eV bis 20 MeV zeigt, daß die α -Teilchen im elastischen Bereich eine um bis zu 2 Größenordnungen höhere Schädigungseffizienz als die Protonen aufweisen. Die Protonen liegen ihrerseits im PKA-Energiebereich bis 5 keV wiederum um bis zu zwei Größenordnungen über den Neutronen. Wird das hochenergetische Ende der PKA-Spektren betrachtet, so zeigt sich, daß bei den α -Teilchen PKA-Energien bis über 20 MeV auftreten können. Bei den Protonen liegen die maximalen Energien bedingt durch die geringere maximale Primärenergie bei 2 MeV. Verglichen mit den Neutronen bedeutet das, daß die Protonen im PKA-Energiebereich von 5 keV bis 2 MeV sehr gut übereinstimmen. Die beste Übereinstimmung wird bei 20 MeV Protonen erreicht, die den Hochenergiebereich fast exakt abbilden. Die α -Teilchen zeigen im Vergleich mit den Neutronen, daß sie nur im PKA-Energiebereich von 20 keV bis 500 keV den selben Verlauf besitzen, jedoch mit dem Vorteil einer um 2 Größenordnungen höheren Schädigungseffizienz. Der Hochenergiebereich ist jedoch deutlich überbetont.

Unter Berücksichtigung des Schädigungscharakters der PKA's - niederenergetische PKA's erzeugen Frenkeldefekte, hochenergetische PKA's erzeugen Schädigungskaskaden - läßt sich der Hochenergiebereich noch detaillierter betrachten. Da bei hochenergetischen

Schädigungskaskaden ein Aufbruch der Kaskaden in Subkaskaden stattfindet, kann davon gesprochen werden, daß oberhalb der Subkaskadenaufbruchsenergie von 10 keV die Produktionswahrscheinlichkeit von Kaskaden höherer Energie durch diesen Effekt deutlich verringert sein wird. Dadurch wird der α -Teilchen-induzierte Hochenergiebereich der PKA-Spektren deutlich entschärft und dem neutroninduzierten PKA-Spektrum ähnlicher.

Aus dem durchgeführten Vergleich zwischen den leichtionen- und neutroninduzierten PKA-Spektren lassen sich nun die Schlußfolgerungen ziehen, daß die Protonen sehr gut zur Simulation der Fusionsneutronen geeignet sind. Unter Berücksichtigung des Subkaskadenaufbruchs sind die α -Teilchen ebenfalls zur Simulation geeignet. Generell läßt sich die bis dato kursierende Behauptung, daß Leichtionen zur Simulation von Neutronen bezüglich Verlagerungsschädigung durch ihre sehr unterschiedlichen PKA-Spektren ungeeignet wären, deutlich entkräften.

Um den Materialentwicklern ein leistungsfähiges Werkzeug in Bezug auf Charakterisierung der Aktivierung und Verlagerungsschädigung von Metallen unter Leichtionenbestrahlung zur Verfügung zu stellen, wurde das Programm LINDA (Light Ion Induced Nonelastic Damage and Activation) entwickelt. Als Datenbasis stehen LINDA die Datensätze zur Verfügung, in die die oben diskutierten experimentellen und theoretischen Resultate zur Aktivierung und zur Verlagerungsschädigung eingeflossen sind. LINDA berechnet damit für in der Materialentwicklung im Fusionsbereich typische Probengeometrien, bestehend aus reinem Eisen, die unter DUAL-BEAM-Experimenten mit Protonen und α -Teilchen variabler Primärenergie erzeugte Materialaktivierung und Verlagerungsschädigung (DPA's) in Abhängigkeit von den Strahlströmen und der Bestrahlungsdauer.

Damit wurde die Möglichkeit geschaffen, innerhalb kurzer Zeit eine detaillierte Voraussage der unter den gewählten experimentellen Bedingungen über die Materialaktivierung und Verlagerungsschädigung zu erhalten. Mit diesem Werkzeug kann die Materialentwicklung in Zukunft effizienter durchgeführt werden.

Ausblick

Im Hinblick auf zukünftig durchzuführende Dual-Beam Simulationsexperimente mit leichten Ionen wird ein kurzer Überblick über die Verwendung der in dieser Arbeit gewonnenen Resultate gegeben.

Sehr wichtige Größen in Bezug auf die Beurteilung von Simulationsbestrahlungen sind das H/DPA und das He/DPA Verhältnis. Bisher wurden diese Verhältnisse erhalten, indem die implantierten H- bzw. He-Atome durch die Anzahl der elastisch erzeugten DPA's dividiert wurden. Da jetzt die nichtelastisch erzeugten DPA's berücksichtigt werden, werden diese Verhältnisse kleiner, womit eine realitätsnähere Abschätzung möglich ist. Diese Verhältnisse können jedoch noch präziser bestimmt werden, indem der Einfluß der Reaktionskanäle ($p, x\alpha$) und (α, xp) auf die Gasproduktionsraten berücksichtigt wird. Eine grobe Abschätzung zeigt, daß dieser Einfluß jedoch im Bereich kleiner 10% liegen wird.

Die vorgestellten Aktivierungsdaten von Fe unter p- bzw. α -Strahlung erlauben eine gute Abschätzung des bei einer Bestrahlung zu erhaltenden radioaktiven Inventars. Diese Aktivierungskurven können somit zur Optimierung der Bestrahlungsparameter bei den Strahlzeiten verwendet werden.

Bei der Durchführung dieser Arbeit wurden natürlich weitere Fragen aufgeworfen, aufgrund deren Lösungen ein tieferes Verständnis der Materialveränderung unter Bestrahlung gewonnen werden kann.

1. Das Problem der Kaskadenbildung und des Subkaskadenaufbruchs ist bei sehr hohen PKA-Energien bislang nur unbefriedigend behandelt worden. Der Ansatz von Satoh ist sehr gut, jedoch müssen die Berechnungen der Subkaskadenverteilungen noch zu höheren PKA-Energien hin erweitert werden. Ist dies der Fall, so kann dieser Ansatz auf das α -induzierte PKA-Spektrum angewendet werden, um den hochenergetischen PKA-Anteil besser charakterisieren zu können.
2. Die Funktion $W(E,T)$ stellt ein sehr gutes Instrument zur Beurteilung der Simulationsfähigkeit von Bestrahlungen mit verschiedenen Teilchen dar. Um das Bild zu komplettieren, sollte ein Vergleich der $W(E,T)$ -Funktionen zwischen Fusionsneutronen und den heute für die Materialforschung verwendeten Spaltreaktorneutronen (z.B. HFR-Neutronen) durchgeführt werden. Um Aussagekräftig zu sein, sollte dieser Vergleich die nichtelastischen PKA-Anteile enthalten. Damit könnte wertvolle Information zum Vergleich von Spaltreaktorsimulationsbestrahlungen mit Leichtionensimulationsbestrahlungen gewonnen werden.

3. Zur Erweiterung der Datenbasis in Bezug auf Aktivierung und Schädigung sollten mit den in dieser Arbeit entwickelten Werkzeugen weitere Schlüsselemente der Materialentwicklung für die Fusionstechnologie untersucht werden. Dies könnten zum Beispiel die Elemente Cr, V, Ta und Ti sein, die in den ferritisch-martensitischen Legierungen und den Vanadin-Legierungen Verwendung finden. Erst durch die zusätzliche Untersuchung dieser Elemente wird es möglich sein, die leichtenioninduzierte Verlagerungsschädigung bei fusionstypischen Stählen mit sehr guter Genauigkeit charakterisieren zu können.

Anhang A

Daten der Energieeichung

Energy Calibration Fit

Energy = -4.9012 +1.005840*Channel -1.25586e-007*Channel**2
 FWHM = 0.8792 +0.001902*Channel -8.71073e-007*Channel**2

Energy/FWHM Table

Channel	Energy(keV)	Fit(keV)	Delta	FWHM	Fit	Delta
63.96	59.54	59.44	0.17%	1.08	1.00	7.21%
126.03	121.78	121.86	-0.06%	1.09	1.11	-2.35%
248.21	244.70	244.75	-0.02%	1.27	1.31	-2.81%
347.21	344.28	344.32	-0.01%	1.33	1.44	-8.53%
413.63	411.11	411.12	-0.00%	1.69	1.53	9.94%
446.27	443.98	443.95	0.01%	1.49	1.56	-4.91%
779.29	778.91	778.86	0.01%	1.78	1.84	-3.78%
867.27	867.39	867.34	0.01%	1.80	1.88	-4.92%
963.37	964.13	963.98	0.02%	1.99	1.91	3.76%
1084.97	1085.91	1086.25	-0.03%	2.03	1.93	4.79%
1110.65	1112.12	1112.08	0.00%	1.93	1.93	0.23%
1171.46	1173.24	1173.23	0.00%	2.16	1.92	10.96%
1210.91	1212.95	1212.90	0.00%	1.68	1.92	-14.17%
1296.67	1299.18	1299.13	0.00%	2.01	1.89	5.91%
1329.86	1332.50	1332.50	-0.00%	1.81	1.88	-3.85%
1404.95	1408.01	1408.01	-0.00%	1.78	1.84	-3.79%

Daten der Efficiency-Eichung

Efficiency Calibration Fit

Knee Energy = 190.00 keV
 Above the Knee: Quadratic Uncertainty = 1.1131 %
 LOG(Eff) = -4.3594 -0.624405*LOG(Eng) -0.00910278*(LOG(Eng))**2
 Below the Knee: Quadratic Uncertainty = 0.0000 %
 LOG(Eff) = -31.6882 +9.630591*LOG(Eng) -0.970895*(LOG(Eng))**2

Efficiency Table

Energy	Effic.	Fit	Delta
59.47	0.000194	0.000194	0.00%
121.83	0.000398	0.000398	-0.00%
190.00	=====	Knee	=====
244.54	0.000318	0.000313	1.51%
344.11	0.000245	0.000244	0.25%
411.49	0.000205	0.000214	-4.32%
778.57	0.000137	0.000134	2.38%
867.07	0.000127	0.000123	3.05%
963.61	0.000111	0.000114	-2.73%
1086.29	0.000105	0.000104	0.40%
1112.43	0.000102	0.000102	-0.77%
1172.77	0.000100	0.000098	1.37%
1212.99	0.000097	0.000096	1.57%
1299.46	0.000089	0.000091	-2.60%
1332.64	0.000091	0.000089	1.36%
1408.06	0.000084	0.000086	-1.76%

Anhang B

In Tabelle B-1 sind die Daten der in dieser Arbeit verwendeten Nuklide aufgelistet. Zusätzlich sind die Reaktionen und die Q-Werte dieser Reaktionen durch die diese Nuklide erzeugt werden aufgelistet (Auszug aus [4-10]). In der Rubrik Bemerkungen werden Hinweise auf γ -spektroskopische Schwierigkeiten gegeben.

Tabelle B-1: Tabelle der Zerfallsdaten der in dieser Arbeit verwendeten Nuklide

Nuklid	Halbwertszeit	E_γ [keV]	Y_γ [%]	Reaktion	Q-Wert [MeV]	Bemerkung
^{57}Ni	36,1 h	1377,6 127,3 1919,6	84,9 15,0 15,0	$^{54}\text{Fe}(\alpha, n)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, 3n)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, 4n)$ $^{58}\text{Fe}(\alpha, 5n)$	-7 -29 -40 -56	
^{56}Ni	6,1 d	750,6 812,2 158,3 480,7 269,6 1562,5	53,8 90,5 99,0 41,0 40,0 12,5	$^{54}\text{Fe}(\alpha, 2n)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, 4n)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, 5n)$	-18 -44 -61	Benachbart zu 810,8 keV Linie von ^{58}Co
$^{58}\text{Co}_g$	70,78 d	810,8	99,5	$^{58}\text{Fe}(p, n)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, pn)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, p2n)$ $^{58}\text{Fe}(\alpha, p3n)$	-4 -17 -25 -37	Benachbart zu 812,2 keV Linie von ^{56}Ni
^{57}Co	271,77 d	122,1 136,4	85,6 10,6	$^{57}\text{Fe}(p, n)$ $^{58}\text{Fe}(p, 2n)$ $^{54}\text{Fe}(\alpha, p)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, p2n)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, p3n)$ $^{58}\text{Fe}(\alpha, p4n)$	-3 -12 -5 -25 -35 -47	Mehrdeutig- keit mit ^{57}Mn ($T_{1/2} = 121$ s)
^{56}Co	77,1 d	1238,3 2598,6 1771,5 1037,8 846,8	67,6 16,9 15,7 14,0 99,9	$^{56}\text{Fe}(p, n)$ $^{57}\text{Fe}(p, 2n)$ $^{58}\text{Fe}(p, 3n)$ $^{54}\text{Fe}(\alpha, pn)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, p3n)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, p4n)$ $^{58}\text{Fe}(\alpha, p5n)$	-6 -14 -24 -16 -39 -50 -63	846,8 keV Linie mehrdeutig (^{56}Mn)
^{55}Co	17,54 h	931,5 477,2 1408,7	75,0 20,3 16,5	$^{56}\text{Fe}(p, 2n)$ $^{57}\text{Fe}(p, 3n)$ $^{58}\text{Fe}(p, 4n)$ $^{54}\text{Fe}(\alpha, p2n)$ $^{56}\text{Fe}(\alpha, p4n)$ $^{57}\text{Fe}(\alpha, p5n)$ $^{58}\text{Fe}(\alpha, p6n)$	-16 -24 -35 -27 -53 -66 -85	
$^{53}\text{Fe}_g$	8,51 m	377,9	40,0	siehe $^{53}\text{Fe}_m$	siehe $^{53}\text{Fe}_m$	

Nuklid	Halbwertszeit	E_γ [keV]	Y_γ [%]	Reaktion	Q-Wert [MeV]	Bemerkung
$^{53}\text{Fe}_m$	2,53 m	701,1	98,6	$^{54}\text{Fe}(p,pn)$	-15	
		1328,1	84,8	$^{56}\text{Fe}(p,p3n)$	-37	
		1011,5	83,8	$^{58}\text{Fe}(p,p4n)$	-15	
		2339,6	13,8	$^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha n)$	-23	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,\alpha 3n)$	-49	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,\alpha 4n)$	-63	
			$^{58}\text{Fe}(\alpha,\alpha 5n)$	-84		
$^{52}\text{Fe}_g$	8,3 h	168,8	100,0	$^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha 2n)$	-37	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,\alpha 4n)$	-72	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,\alpha 5n)$	-97	
^{56}Mn	2,58 h	1811,2	27,2	$^{56}\text{Fe}(\alpha,3pn)$	-45	846,6 keV Linie mehr- deutig (^{56}Co)
		2112,6	14,3	$^{57}\text{Fe}(\alpha,\alpha p)$	-22	
		846,6	99,0	$^{58}\text{Fe}(\alpha,\alpha pn)$	-33	
^{54}Mn	312,2 d	834,8	99,98	$^{56}\text{Fe}(p,2pn)$	-25	
				$^{57}\text{Fe}(p,\alpha)$	-7	
				$^{58}\text{Fe}(p,\alpha n)$	-17	
				$^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha p)$	-42	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 2n)$	-33	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 3n)$	-42	
				$^{58}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 4n)$	-54	
$^{52}\text{Mn}_g$	5,59 d	935,6	93,0	$^{54}\text{Fe}(p,2pn)$	-26	
		744,2	85,0	$^{56}\text{Fe}(p,\alpha n)$	-20	
				$^{57}\text{Fe}(p,\alpha p 2n)$	-29	
				$^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha pn)$	-32	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 3n)$	-55	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 4n)$	-64	
				$^{58}\text{Fe}(\alpha,\alpha p 5n)$	-79	
$^{52}\text{Mn}_m$	21,1 m	1434,3	100,0	siehe ^{52}Mn	siehe ^{52}Mn	$T_{1/2}$ unterscheidet ^{52}V und $^{52}\text{Mn}_m$
^{51}Cr	27,7 d	320,7	9,8	$^{54}\text{Fe}(\alpha,\alpha 2pn)$	-44	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,2\alpha n)$	-38	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,2\alpha 2n)$	-51	
				$^{58}\text{Fe}(\alpha,2\alpha 3n)$	-64	
^{49}Cr	42,1 m	90,6	95,0	$^{54}\text{Fe}(\alpha,2\alpha n)$	-42	
		308,3	99,0	$^{56}\text{Fe}(\alpha,2\alpha 3n)$	-74	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,2\alpha 4n)$	-87	
^{52}V	3,75 m	1434,1	100	$^{54}\text{Fe}(\alpha,5pn)$	-76	$T_{1/2}$ unterscheidet $^{52}\text{Mn}_m$ und ^{52}V
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,\alpha 3pn)$	-66	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,2\alpha p)$	-42	
				$^{58}\text{Fe}(\alpha,2\alpha pn)$	-55	
^{48}V	15,97 d	983,5	100,0	$^{54}\text{Fe}(\alpha,2\alpha pn)$	-53	
		1311,6	98,0	$^{56}\text{Fe}(\alpha,2\alpha p 3n)$	-84	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,2\alpha p 4n)$	-95	
^{47}Sc	3,42 d	159,4	68,0	$^{54}\text{Fe}(\alpha,2\alpha 3p)$	-77	
				$^{56}\text{Fe}(\alpha,3\alpha p)$	-70	
				$^{57}\text{Fe}(\alpha,3\alpha pn)$	-77	
				$^{58}\text{Fe}(\alpha,3\alpha p 2n)$	-89	

Anhang C

Im folgenden ist eine Liste aller identifizierten Nuklide und ihre Vorgänger-Nuklide (Precursor) aufgelistet. Die Nuklide lassen sich grob in zwei Gruppen unterteilen. Die eine Gruppe umfaßt die Nuklide, die aus diversen Gründen, die unten näher erläutert sind, nicht zu korrigiert werden brauchen. Die zweite Gruppe enthält die Nuklide, die einer Korrektur bedürfen. Insbesondere ist das Isomer $^{53}\text{Fe}_g$ zu erwähnen, welches durch seinen kurzhalbwertszeitigen Precursor $^{53}\text{Fe}_m$ eine starke Korrektur erfährt.

Tabelle C-1: Liste aller identifizierten Nuklide inklusive der zugehörigen Vorgänger.

	Nuklide	$T_{1/2}$	1. Precursor	$T_{1/2}$	2. Precursor	$T_{1/2}$	Bemerkungen
1	^{57}Ni	36,1 h	unbekannt				Keine Korrektur notwendig (siehe 1.)
2	^{56}Ni	6,1 d	unbekannt				Keine Korrektur notwendig (siehe 1.)
3	$^{58}\text{Co}_g$	70,78 d	$^{58}\text{Co}_m$	9,15 h	nein		Keine Korrektur notwendig (siehe 3.)
4	^{57}Co	271,77 d	^{57}Ni	36,1 h	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 3.)
5	^{56}Co	77,1 d	^{56}Ni	6,1 d	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 3.)
6	^{55}Co	17,54 h	^{55}Ni	0,189 s	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)
7	$^{53}\text{Fe}_m$	2,53 m	$^{53}\text{Co}_m$	0,247 s	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)
8	$^{53}\text{Fe}_g$	8,51 m	$^{53}\text{Fe}_m$	2,53 m	$^{53}\text{Co}_m$	0,247 s	Kein weiterer Precursor vorhanden, Korrektur notwendig (siehe 4.)
9	$^{52}\text{Fe}_g$	8,3 h	unbekannt				Keine Korrektur notwendig (siehe 1.)
10	^{56}Mn	2,58 h	^{56}Cr	5,94 m	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)
11	^{54}Mn	312,2 d	nein				Keine Korrektur notwendig (siehe 1.)
12	$^{52}\text{Mn}_m$	21,1 m	$^{52}\text{Fe}_g$	8,27 h	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 3.)
13	$^{52}\text{Mn}_g$	5,59 d	$^{52}\text{Mn}_m$	21,1 m	$^{52}\text{Fe}_g$	8,27 h	Weitere Precursor nicht bekannt, Keine Korrektur notwendig (siehe 5.)
14	^{51}Cr	27,7 d	^{51}Mn	46,2 m	^{51}Fe	0,27 s	Weitere Precursor unbekannt, Korrektur notwendig (siehe 6.)
15	^{49}Cr	42,1 m	^{49}Mn	0,38 s	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)
16	^{52}V	3,75 m	^{52}Ti	1,7 m	^{52}Sc	8 s	3. Precursor: ^{52}Ca ($T_{1/2} = 3,2$ s), weitere Precursor unbekannt, Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)
17	^{48}V	15,97 d	^{48}Cr	22,96 h	unbekannt		Keine Korrektur notwendig (siehe 3.)
18	^{47}Sc	3,34 d	^{47}Ca	4,54 d	^{47}K	17,5 s	Weitere Precursor unbekannt, Keine Korrektur notwendig (siehe 2.)

- 1) Die Nuklide dieser Gruppe (^{57}Ni , ^{56}Ni , $^{52}\text{Fe}_g$, ^{54}Mn und ^{48}Cr) besitzen keinen Vorgänger (Precursor) oder es ist nicht bekannt, ob sie weitere Vorgänger besitzen. Daher ist keine Korrektur notwendig.
- 2) Die Nuklide dieser Gruppe ($^{58}\text{Co}_g$, $^{53}\text{Fe}_m$, ^{56}Mn , ^{49}Cr , ^{52}V und ^{47}Sc) besitzen Precursor deren Anregungsfunktion nach ALICE-91 Berechnungen zu gering ist (< 1 mb), um einen Effekt zu machen.
- 3) Die Nuklide dieser Gruppe ($^{58}\text{Co}_g$, ^{57}Co , ^{56}Co , $^{52}\text{Mn}_m$ und ^{48}V) verursachen einen Effekt < 1 % (berechnet nach Kap. 3.4 bei ^{57}Co , 0,7 %).
- 4) Das Nuklid $^{53}\text{Fe}_g$ zeigt eine starke Abweichung verursacht durch den Precursor $^{53}\text{Fe}_m$ mit einer sehr kurzen Halbwertszeit. Die Korrektur, berechnet nach Kap. 3.4, beläuft sich während der Bestrahlungsdauer auf 24,6 % und während des Transports und der Messung auf 10,5 %, was zusammengerechnet eine Verringerung des gemessenen Wertes der Anregungsfunktion von 35,1 % ergibt.
- 5) Unter Nummer 13 ist die zweistufige Zerfallsreihe $^{52}\text{Fe}_g \rightarrow ^{52}\text{Mn}_m \rightarrow ^{52}\text{Mn}_g$ aufgeführt. Das erste Glied der Zerfallsreihe entspricht der unter Listennummer 12 aufgeführten Zerfallsreihe. Bei dieser ist der zusätzliche Produktionseffekt < 1 % und bedurfte somit keiner Korrektur. Das zweite Glied, $^{52}\text{Mn}_m \rightarrow ^{52}\text{Mn}_g$, bedarf auch keiner Korrektur, da die Anregungsfunktion für $^{52}\text{Mn}_m$ ca. zwei Größenordnungen unter der von $^{52}\text{Mn}_g$ liegt, wodurch der zusätzliche Produktionseffekt ebenso in den sub-Prozent Bereich (0,5 %) abfällt.
- 6) Bei der zweistufigen Zerfallsreihe $^{51}\text{Fe} \rightarrow ^{51}\text{Mn} \rightarrow ^{51}\text{Cr}$ benötigt ^{51}Cr eine Korrektur, da ein um 4.1 % zu großer ^{51}Cr -Anteil gemessen wurde.

Anhang D

Diskussion der betrachteten Fehler aus Tabelle 3.4:

1. Unsicherheit der Anzahl der Targetatome pro Einheitsfläche im Strahl
2. Aktivitäten produziert durch Konkurrenzreaktionen
3. Sekundärreaktionen induziert durch Reaktionsprodukte (n, p, d, α)
4. Unsicherheit der Aktivität durch aus dem Target austretende Rückstoßkerne
5. Während der Bestrahlung auftretender Zerfall (DDI, decay during irradiation)
6. Während der Spektroskopie auftretender Zerfall (DDA, decay during acquisition)
7. Zerfallsreihen
8. Änderung der Anzahl der Targetatome während der Bestrahlung
9. Schwankung der Strahlintensität während der Bestrahlung
10. Unsicherheit der Strommessung
11. Statistische Fehler
12. Unsicherheit des Ansprechvermögens (Efficiency) des γ -Spektrometers
13. Totzeit des γ -Spektrometers während der Messung
14. Selbstabsorption niederenergetischer γ 's im Target

Die in obiger Liste aufgeführten Unsicherheiten werden in der folgenden Fehlerbetrachtung diskutiert.

Die in Punkt 1 angesprochene Unsicherheit der Anzahl der Targetatome wurde durch Bestimmung der Foliendicke nach der Wägemethode zu $\Delta d/d = 1,1 \%$ berechnet (siehe Angabe in Kap. 3.2). Diese Fehlerangabe ist in der Formel (3-17) für den relativen Fehler $\Delta\sigma/\sigma$ berücksichtigt.

Die Produktion von Nukliden durch Konkurrenzreaktionen (Punkt 2) kann ausgeschlossen werden, da die Konzentrationen der Verunreinigungen in der Targetfolie im ppm- bzw. sub-ppm-Bereich liegen (siehe Tab. 3-1). Verglichen mit der relativen Häufigkeit von $0,25 \%$ = $2500 \text{ ppm } ^{58}\text{Fe}$, dem Fe-Isotop mit dem geringsten relativen Anteil, sind die Verunreinigungen um mehr als drei Größenordnungen unterdrückt.

Die in Punkt 3 aufgeführten Sekundärreaktionen, induziert durch Reaktionsprodukte, können bei den hier aufgetretenen geringen Strahlströmen und kurzen Bestrahlungsdauern vernachlässigt werden. Solche sequentiellen Reaktionen treten erst bei sehr hohen Teilchenflüssen ($\sim 10^{15}/\text{s}/\text{cm}^2$) und langen Strahlzeiten (Bereich Wochen bis Monate), wie in Ref. [3-11] diskutiert, auf.

Der Einfluß der Rückstoßkerne auf die Targetaktivität, Punkt 4, kann durch eine strahlabwärts angebrachte „Catcher-Folie“ bestimmt werden. Der in der Catcher-Folie eingefangene Aktivitätsanteil beträgt je nach Projektilenergie 5-8 % der Gesamtaktivität. Die gemessenen Aktivitäten werden durch die in den Catcher-Folien eingefangenen Aktivitäten korrigiert.

Die in den Punkten 5+6 aufgeführten Korrekturen treffen nur auf Nuklide mit kurzen Halbwertszeiten zu. Besonders deutlich ist der Effekt bei $T_{1/2} < \text{Bestrahlungsdauer}$ bzw. $T_{1/2} < \text{Meßdauer}$. Diese Effekte werden durch die Terme für die DDI-Korrektur (3-13) und die DDA-Korrektur (3-14) berücksichtigt, wodurch sich der Ausdruck der Berechnung der Anregungsfunktion (3-12), zum Ausdruck (3-15) erweitert.

Das Auftreten von Zerfallsreihen, Punkt 7, d.h. Nuklid A zerfällt in Nuklid B, verursacht nur einen Effekt wenn die Nuklide A und B spektroskopiert werden und die $T_{1/2}$ von A kurz gegen die Bestrahlungsdauer bzw. Meßdauer ist. Der Zerfall von A wird bereits durch die unter Punkt 6 diskutierte DDA-Korrektur berücksichtigt. Zusätzlich muß das Anwachsen von B korrigiert werden. Dieser Effekt wird durch die Ansätze (I) bis (III) und die daraus resultierenden Terme (3-18) bis (3-29) berücksichtigt. Da dieser Effekt nur ein einziges Mal auftritt, wurde die Korrektur nicht in den Ausdruck (3-15) aufgenommen.

Der Punkt 8 diskutiert sich wie folgt. Die Anzahl der Targetatome im Strahlfleck (\varnothing 4.3 mm) beträgt ca. 2×10^{19} Kerne. Demgegenüber kann die Anzahl der produzierten Nuklide auf ca. 2×10^{11} abgeschätzt werden, woraus sich ein Verhältnis von 10^{-8} berechnet. D.h., die Änderung der Anzahl der Targetkerne ist vernachlässigbar.

Die in Punkt 9 angesprochene Schwankung der Strahlstromintensität hat keinen Einfluß auf die im Target induzierten Aktivitäten wenn die Schwankungsdauern kurz gegenüber der kürzesten Halbwertszeit sind. Die bei den hier durchgeführten Bestrahlungen aufgetretenen Schwankungen sind zum einen Ausfälle der Hochfrequenz (Dauer $< 0,5\text{s}$) und zum anderen die betriebsdauerabhängige Stromänderung der Ionenquelle, die durch die Operateure des Zyklotrons während der Bestrahlung instantan geregelt wurde. Die trotzdem entstandenen Schwankungen liegen bei $\Delta I/I \sim \pm 4\%$ (Abb. 3-3). Da jedoch die Schwankungsdauern in beiden Fällen kurz gegenüber der kürzesten $T_{1/2} = 2.53 \text{ m}$ ($^{53}\text{Fe}_m$) waren, geht die Stromschwankung nicht in die Fehlerbetrachtung ein.

Unter Punkt 10 wird die Strommessung diskutiert. Da verschiedene experimentelle Anordnungen (intern, extern) verwendet wurden, muß auf die Unsicherheiten im einzelnen eingegangen werden. Bei den Anordnungen 1,2 und 4 wurde der Strahlstrom mit einem Faraday-Cup erfaßt (Abb. 3-2, 3-4) und mit einem Knick-nA-Meter gemessen. Der experimentelle Aufbau war so gewählt, daß der gesamte durch die Targetfolie gehende Strahl gemessen wurde. Da sehr viel Wert auf die elektrische Isolation des Faraday-Cup

gelegt wurde, wird für diesen Fall für den relativen Fehler des Integrals des Strahlstroms $\Delta Q/Q = \pm 2 \%$ angesetzt. Bei der Bestrahlung mit Anordnung 3 wurde der interne Teilchenstrahl nur partiell ausgenutzt (Abb. 3-5). Obwohl die Strahlage von jeder einzelnen radialen Position kontrolliert wurde und die Target- bzw. Catcher-Folien möglichst präzise geschnitten waren, muß für das Integral des Strahlstroms ein relativer Fehler $\Delta Q/Q = \pm 5 \%$ angenommen werden.

Der durch die Aktivitäten der γ -Linien und durch die Meßdauer bestimmte statistische Fehler (Punkt 11) wurde direkt von der GammaVision Software ausgegeben und lag bei $< 1 \%$ für die hohen Aktivitäten der Targetfolien und reichte bis ca. 50 % für die geringsten Aktivitäten der Catcher-Folien.

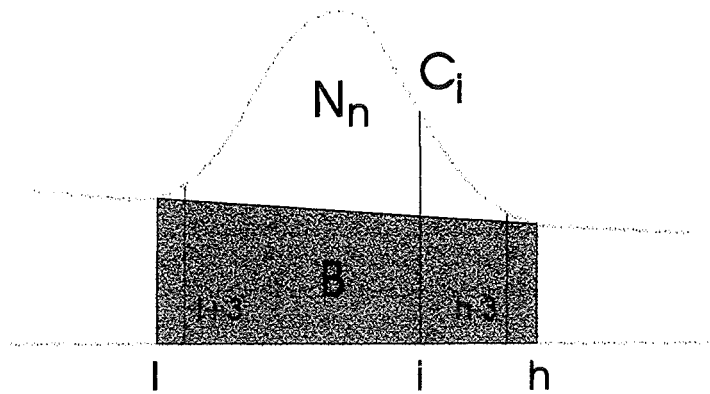
Die Unsicherheit im Ansprechvermögen des γ -Spektrometers (Punkt 12) wird aus (Gleichung 3-10) berechnet und ist in (Gleichung 3-11) angegeben. Zusammen mit den Unsicherheiten der Daten der Zerfallschemata [4-10] ergibt sich der relative Fehler der Nuklidaktivität (Gleichung 3-16). Die relativen Fehler von Target- und Catcher-Folie gehen gewichtet nach ihren Anteilen in die Berechnung des relativen Fehlers der Anregungsfunktion (Gleichung 3-17) ein.

Die verwendete Meßelektronik besitzt eine automatische, elektronisch geregelte Totzeitkorrektur (Punkt 13), die zuverlässig Totzeiten bis 25 % verarbeiten kann. D.h., bei Totzeiten $< 25 \%$ sind die bestimmten Aktivitäten zählratenunabhängig. Da durch Variation des Abstandes Target - Zähler die Totzeit bei allen Messungen unter 15 % gehalten werden konnte, ist keine zusätzliche Korrektur der Ergebnisse notwendig.

Die Absorption von γ -Quanten (Punkt 14) im Target wird durch den Photoeffekt, Compton-Effekt und Paarbildung charakterisiert. Zwischen 10 keV und 100 keV verringert sich der Absorptionskoeffizient um zwei Größenordnungen und zwischen 100 keV und 2.5 MeV um ca. eine weitere Größenordnung. Die experimentell interessanten γ -Energien lagen bei Energien > 100 keV. Darausfolgend zeigen die ca. 17 μm dicken Fe-Targetfolien und die ca. 30 μm dicken Al-Catcher-Folien eine mittlere relative Intensitätsabnahme im Meßbereich $100 \text{ keV} < E_\gamma < 2500 \text{ keV}$ um $d\dot{N}/\dot{N} = -\mu x$ (μ = Absorptionskoeffizient) $d\dot{N}/\dot{N} \approx 10^{-3}$, was vernachlässigt werden kann.

Bestimmung der Nettofläche unter einem Peak

Die Nettofläche ($N_n + B$) unter einem γ -Peak entspricht der Zählrate dieses Peaks integriert über die Meßzeit. Die Bruttofläche ist jedoch von Untergrundereignissen überlagert, so daß, um die Nettofläche N_n zu erhalten, der Untergrund ermittelt und subtrahiert werden muß.



Graphische Darstellung der Peakfläche und der zugehörigen Untergrundfläche

Die folgenden Formeln sind dem GammaVision Users Manual [3-8] entnommen und stellen die Auswertung dar, wie sie von GammaVision durchgeführt wird. Die obige Abbildung zeigt schematisch einen solchen gemessenen Peak, der ROI (Region of Interest) genannt wird.

Die Untergrundfläche wird durch Multiplikation des Mittelwerts der Einträge C_i der drei äußersten Kanäle (oben und unten) mit der Breite des ROI berechnet.

$$B = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=1}^{l+2} C_i + \sum_{i=h-2}^h C_i \right) (h - l + 1)$$

B = Untergrundfläche
 l = Untere ROI Grenze
 h = Obere ROI Grenze
 C_i = Inhalt von Kanal i

Die Gesamtfläche entspricht der Summe über alle Kanäle des ROI-Bereichs. Gewöhnlich wäre es ausreichend, als Nettofläche die Differenz zwischen Gesamtfläche und Untergrundfläche zu verwenden. Diese Vorgehensweise ist zulässig, solange sich die Höhe der Untergrundeinträge am oberen und unteren Ende des ROI nicht stark voneinander unterscheiden.

$$N_g = \sum_{i=1}^h C_i$$

N_g = Gesamtanzahl der Einträge innerhalb der ROI

Um solche Fälle mit abzudecken, wird ein verbesserter Algorithmus verwendet. Die justierte Gesamtfläche N_{ag} entspricht der Gesamtfläche N_g ohne die 3 oberen und 3 unteren Randkanäle.

$$N_{ag} = \sum_{i=1+3}^{h-3} C_i$$

N_{ag} = Justierte Gesamtanzahl der Einträge innerhalb der ROI

Die Nettofläche und ihre Unsicherheit berechnet sich dann indem von der justierten Gesamtfläche eine gewichtete Untergrundfläche subtrahiert wird.

$$N_n = N_{ag} - \frac{B(h-1-5)}{h-1+1}$$

$$\Delta N_n = \sqrt{N_{ag}^2 + \left(B \left(\frac{h-1-5}{h-1+1} \right) \right)^2}$$

N_n = Nettofläche

ΔN_n = Fehler der Nettofläche

Anhang E

Erstellung der Aktivierungsdatenbibliothek

Wie in den Kapitel 4.1 und 4.2 diskutiert wurden 7 Proton-induzierte und 18 α -induzierte Anregungsfunktionen in reinen Eisen bestimmt. Aus den experimentellen Daten dieser Arbeit, den theoretisch berechneten Werten von ALICE-91 dieser Arbeit und aus vorhandenen Literaturdaten wurde eine Datenbank für Aktivierungswirkungsquerschnitte erstellt. Die Werte wurden derart ausgewertet, daß bei vorhandenen experimentellen Daten über diese gemittelt wurde. Es wurde jedoch die Qualität der Daten gewichtet. Waren keine experimentellen Daten vorhanden, so wurde der theoretische Verlauf nach ALICE-91 ausgewertet.

Die Datei wurde in einem lesbaren Format erstellt. Der Datenkopf enthält folgende Information:

- 1. Zeile: 3-4: Kernladungszahl des Targetelements
 5: Masse des Projektils
 6: Ladungszahl des Projektils
 7-8: Massenzahl des erzeugten Nuklids
 9-10: Kernladungszahl des erzeugten Nuklids
 11: Angabe, ob ein Isomer vorliegt
 14-16: Anzahl der Datenpunkte in 1 MeV Abstand
 19-35: Bezeichnung der Kernreaktion
 40-45: Angabe der Halbwertszeit des Nuklids
 49-56: Kerma-Faktor der γ -Emission zur Bestimmung der γ -Dosis

- 2. Zeile: Kommentarzeile

Im folgenden sind die Datensätze aufgelistet:

```
26115827g 30 natFe(p,x)58Cog d70.8 821.37
KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95
0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 3.900e-01 7.800e-01 1.130e+00 1.420e+00
1.780e+00 2.160e+00 2.370e+00 2.380e+00 2.290e+00 2.010e+00 1.530e+00
1.190e+00 8.700e-01 6.200e-01 4.800e-01 4.000e-01 3.400e-01 2.800e-01
2.400e-01 2.100e-01 1.800e-01 1.600e-01 1.500e-01 1.400e-01 1.390e-01
1.380e-01 1.350e-01
```

```
26115727 30 natFe(p,x)57Co d270.9 121.4877
KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95
0.000e+00 0.000e+00 3.200e-01 2.250e+00 5.720e+00 8.840e+00 1.100e+01
1.298e+01 1.505e+01 1.680e+01 1.616e+01 1.473e+01 1.371e+01 1.100e+01
8.840e+00 6.860e+00 5.920e+00 5.300e+00 4.750e+00 4.600e+00 4.180e+00
3.810e+00 3.490e+00 3.130e+00 2.700e+00 2.510e+00 2.290e+00 2.050e+00
1.880e+00 1.620e+00
```

```
26115627 30 natFe(p,x)56Co d78.8 3397.32
```

KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 1.119e+02 1.946e+02
 2.992e+02 3.969e+02 4.601e+02 5.203e+02 5.077e+02 4.984e+02 4.687e+02
 4.069e+02 2.866e+02 2.160e+02 1.467e+02 1.147e+02 9.890e+01 8.230e+01
 7.140e+01 6.320e+01 5.590e+01 5.160e+01 4.650e+01 4.210e+01 3.960e+01
 3.630e+01 3.500e+01

26115527 30 natFe(p,x)55Co h17.5 1846.22
 KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 4.000e-01 1.209e+01 3.007e+01 4.346e+01 4.931e+01 6.244e+01
 6.488e+01 7.263e+01 7.907e+01 7.651e+01 6.969e+01 6.489e+01 6.142e+01
 5.503e+01 4.931e+01

26115326g 30 natFe(p,x)53Feg m8.51 170.69
 KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 3.200e-01 8.700e-01 2.290e+00 4.030e+00 4.930e+00 6.240e+00
 7.480e+00 9.690e+00 1.142e+01 1.161e+01 1.142e+01 1.124e+01 1.099e+01
 1.041e+01 9.530e+00

26115425 30 natFe(p,x)54Mn d312.5 834.8
 KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 3.300e-02
 1.400e-01 3.300e-01 5.800e-01 8.000e-01 9.600e-01 1.140e+00 1.260e+00
 1.310e+00 1.310e+00 1.260e+00 1.210e+00 1.140e+00 1.100e+00 1.180e+00
 1.210e+00 1.280e+00 1.390e+00 1.480e+00 1.980e+00 2.980e+00 4.350e+00
 1.116e+01 3.841e+01

26115225g 30 natFe(p,x)52Mng d5.59 3151.0
 KAZ-externe Bestrahlung 10 - 30 MeV moderiert, interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 4.000e-01
 2.750e+00 8.350e+00 1.615e+01 1.936e+01 2.333e+01 2.604e+01 2.906e+01
 3.173e+01 3.121e+01

26425728 104 natFe(a,x)57Ni h36.0 1502.07
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 1.450e-01
 7.300e-01 2.770e+00 5.120e+00 5.510e+00 5.940e+00 7.410e+00 9.590e+00
 1.072e+01 1.112e+01 1.071e+01 9.960e+00 8.280e+00 5.940e+00 4.760e+00
 3.960e+00 3.060e+00 2.840e+00 2.640e+00 2.540e+00 2.450e+00 2.540e+00
 2.630e+00 2.950e+00 3.290e+00 3.820e+00 4.260e+00 4.940e+00 5.520e+00
 6.390e+00 7.410e+00 8.540e+00 1.045e+01 1.289e+01 1.457e+01 1.608e+01
 1.710e+01 1.818e+01 1.899e+01 1.969e+01 1.970e+01 1.898e+01 1.896e+01
 1.785e+01 1.679e+01 1.422e+01 1.312e+01 1.234e+01 1.112e+01 9.250e+00
 8.380e+00 7.880e+00 7.100e+00 6.680e+00 6.560e+00 6.050e+00 5.790e+00
 5.450e+00 5.120e+00 4.820e+00 4.730e+00 4.530e+00 4.340e+00 4.260e+00
 4.010e+00 3.930e+00 3.760e+00 3.540e+00 3.480e+00 3.410e+00 3.350e+00
 3.290e+00 3.250e+00 3.170e+00 3.060e+00 2.950e+00 2.840e+00 2.740e+00
 2.610e+00 2.560e+00 2.500e+00 2.450e+00 2.450e+00 2.430e+00 2.410e+00
 2.370e+00 2.300e+00 2.220e+00 2.140e+00 2.080e+00 2.080e+00 2.000e+00
 2.000e+00 1.980e+00 1.960e+00 1.940e+00 1.920e+00 1.850e+00

26425628 104 natFe(a,x)56Ni h6.0 1720.71
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 3.200e-02 1.760e-01 2.700e-01 3.000e-01
 3.700e-01 4.000e-01 4.200e-01 4.400e-01 5.100e-01 5.500e-01 6.200e-01
 6.500e-01 6.500e-01 6.200e-01 6.000e-01 5.900e-01 5.500e-01 4.900e-01
 4.900e-01 4.600e-01 4.200e-01 3.800e-01 3.300e-01 3.100e-01 2.900e-01
 2.900e-01 2.600e-01 2.600e-01 2.600e-01 2.600e-01 2.600e-01 2.600e-01
 2.600e-01 2.700e-01 2.800e-01 2.800e-01 2.900e-01 3.200e-01 3.400e-01
 3.800e-01 3.900e-01 4.000e-01 4.300e-01 4.700e-01 5.500e-01 5.800e-01
 5.800e-01 6.000e-01 6.100e-01 6.080e-01 6.040e-01 5.600e-01 5.500e-01
 5.400e-01 5.300e-01 5.200e-01 5.100e-01 5.000e-01 4.900e-01 4.800e-01
 4.700e-01 4.500e-01 4.100e-01 3.900e-01 3.800e-01 3.800e-01 3.700e-01
 3.600e-01 3.500e-01 3.400e-01 3.300e-01 3.200e-01 2.900e-01 2.800e-01
 2.700e-01 2.600e-01 2.500e-01 2.450e-01 2.400e-01 2.350e-01 2.300e-01
 2.250e-01 2.200e-01 2.100e-01 2.050e-01 2.000e-01 1.900e-01

26425827g 104 natFe(a,x)58Cog d70.8 821.59

KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	1.000e-02	1.800e-01	1.560e+01	7.190e+01	1.448e+02	2.508e+02
3.310e+02	4.240e+02	5.730e+02	6.870e+02	7.750e+02	7.920e+02	8.350e+02
8.160e+02	7.740e+02	7.570e+02	7.180e+02	6.520e+02	5.910e+02	5.320e+02
4.930e+02	4.240e+02	3.850e+02	3.490e+02	2.910e+02	2.640e+02	2.390e+02
2.220e+02	1.950e+02	1.600e+02	1.520e+02	1.380e+02	1.190e+02	1.130e+02
1.040e+02	9.200e+01	8.800e+01	8.300e+01	8.100e+01	7.900e+01	7.800e+01
7.600e+01	7.500e+01	7.400e+01	7.300e+01	7.250e+01	7.150e+01	7.050e+01
6.880e+01	6.580e+01	6.290e+01	6.009e+01	5.740e+01	5.490e+01	5.250e+01
5.016e+01	4.795e+01	4.583e+01	4.380e+01	4.190e+01	4.100e+01	4.010e+01
3.910e+01	3.820e+01	3.660e+01	3.496e+01	3.342e+01	3.260e+01	3.190e+01
3.050e+01	2.980e+01	2.920e+01	2.860e+01	2.790e+01	2.720e+01	2.670e+01
2.620e+01	2.570e+01	2.520e+01	2.470e+01	2.420e+01	2.370e+01	2.320e+01
2.270e+01	2.220e+01	2.170e+01	2.120e+01	2.070e+01	2.019e+01	

26425727 104 natFe(a,x)57Co d270.9 121.4877
KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	2.100e-01	6.500e-01	1.520e+00
3.540e+00	8.820e+00	1.497e+01	2.011e+01	2.593e+01	2.975e+01	3.320e+01
3.630e+01	3.880e+01	3.560e+01	3.320e+01	2.780e+01	2.470e+01	2.050e+01
1.840e+01	1.490e+01	1.190e+01	9.100e+00	8.100e+00	7.400e+00	6.300e+00
5.600e+00	6.600e+00	1.080e+01	4.080e+01	9.960e+01	1.640e+02	3.260e+02
4.290e+02	5.390e+02	5.650e+02	5.770e+02	6.480e+02	6.310e+02	6.050e+02
5.890e+02	5.500e+02	5.390e+02	5.280e+02	4.690e+02	4.600e+02	4.470e+02
4.010e+02	3.820e+02	3.490e+02	3.330e+02	3.170e+02	2.970e+02	2.900e+02
2.840e+02	2.760e+02	2.600e+02	2.600e+02	2.550e+02	2.500e+02	2.450e+02
2.360e+02	2.260e+02	2.170e+02	2.090e+02	2.000e+02	1.930e+02	1.900e+02
1.865e+02	1.830e+02	1.795e+02	1.760e+02	1.725e+02	1.690e+02	1.655e+02
1.620e+02	1.585e+02	1.550e+02	1.515e+02	1.480e+02	1.445e+02	1.410e+02
1.375e+02	1.340e+02	1.305e+02	1.270e+02	1.235e+02	1.200e+02	1.165e+02
1.130e+02	1.095e+02	1.060e+02	1.025e+02	9.900e+01	9.550e+01	9.200e+01
8.850e+01	8.500e+01	8.150e+01	7.800e+01	7.550e+01	7.410e+01	

26425627 104 natFe(a,x)56Co d78.8 3397.32
KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
1.000e-02	9.000e-02	9.400e-01	5.720e+00	1.161e+01	1.153e+01	2.154e+01
2.975e+01	3.730e+01	4.190e+01	4.280e+01	4.390e+01	4.460e+01	4.550e+01
4.600e+01	4.550e+01	4.360e+01	4.190e+01	3.560e+01	3.090e+01	2.830e+01
2.520e+01	2.350e+01	2.150e+01	1.970e+01	1.840e+01	1.840e+01	1.840e+01
1.920e+01	2.420e+01	3.320e+01	3.810e+01	4.580e+01	5.370e+01	6.160e+01
7.410e+01	8.500e+01	9.110e+01	1.030e+02	1.140e+02	1.320e+02	1.500e+02
1.550e+02	1.650e+02	1.790e+02	1.800e+02	1.880e+02	1.760e+02	1.720e+02
1.680e+02	1.610e+02	1.610e+02	1.570e+02	1.540e+02	1.530e+02	1.480e+02
1.400e+02	1.340e+02	1.290e+02	1.240e+02	1.190e+02	1.169e+02	1.148e+02
1.127e+02	1.106e+02	1.085e+02	1.064e+02	1.043e+02	1.022e+02	1.001e+02
9.800e+01	9.590e+01	9.380e+01	9.170e+01	8.960e+01	8.750e+01	8.540e+01
8.330e+01	8.120e+01	7.910e+01	7.700e+01	7.490e+01	7.280e+01	7.070e+01
6.860e+01	6.650e+01	6.440e+01	6.230e+01	6.100e+01	6.090e+01	

26425527 104 natFe(a,x)55Co h17.5 1846.22
KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
1.400e-01	3.300e-01	5.900e-01	8.600e-01	1.250e+00	1.710e+00	2.270e+00
2.800e+00	3.420e+00	3.900e+00	4.760e+00	5.720e+00	6.680e+00	7.550e+00
7.790e+00	7.970e+00	7.560e+00	7.380e+00	6.990e+00	6.680e+00	6.380e+00
6.330e+00	6.200e+00	6.000e+00	5.900e+00	5.800e+00	5.720e+00	5.860e+00
6.180e+00	6.330e+00	6.990e+00	7.560e+00	8.410e+00	9.520e+00	9.740e+00
1.028e+01	1.110e+01	1.265e+01	1.324e+01	1.431e+01	1.475e+01	1.593e+01
1.631e+01	1.720e+01	1.760e+01	1.800e+01	1.844e+01	1.858e+01	1.858e+01
1.810e+01	1.810e+01	1.775e+01	1.730e+01	1.690e+01	1.690e+01	1.690e+01
1.690e+01	1.690e+01	1.690e+01	1.685e+01	1.660e+01	1.640e+01	1.620e+01
1.550e+01	1.550e+01	1.550e+01	1.550e+01	1.550e+01	1.550e+01	1.520e+01
1.500e+01	1.480e+01	1.470e+01	1.450e+01	1.410e+01	1.350e+01	

26425326g 104 natFe(a,x)53Feg m8.51 170.73
KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
1.000e-02	2.800e-02	1.150e-01	3.800e-01	6.500e-01	9.700e-01	1.380e+00
1.740e+00	2.100e+00	2.350e+00	2.560e+00	2.620e+00	2.660e+00	2.560e+00
2.480e+00	2.340e+00	2.260e+00	2.140e+00	1.950e+00	1.750e+00	1.540e+00
1.400e+00	1.330e+00	1.230e+00	1.170e+00	1.070e+00	9.900e-01	9.700e-01

1.010e+00 1.070e+00 1.280e+00 1.810e+00 3.190e+00 5.620e+00 6.890e+00
 8.400e+00 1.029e+01 1.261e+01 1.597e+01 1.715e+01 1.597e+01 1.454e+01
 1.354e+01 1.282e+01 1.148e+01 1.087e+01 1.046e+01 1.012e+01 9.790e+00
 9.580e+00 9.270e+00 8.970e+00 8.680e+00 9.220e+00 1.046e+01 1.193e+01
 1.233e+01 1.213e+01 1.193e+01 1.069e+01 9.580e+00 8.720e+00 8.260e+00
 7.990e+00 8.260e+00 8.390e+00 9.070e+00 9.220e+00 9.270e+00 9.580e+00
 9.900e+00 1.023e+01 1.030e+01 1.040e+01 1.050e+01 1.060e+01 1.070e+01
 1.080e+01 1.090e+01 1.100e+01 1.110e+01 1.120e+01 1.130e+01

26425326m 104 natFe(a,x)53Fem m2.53 2734.90
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 1.000e-02 2.000e-02 3.100e-02 4.100e-02 6.000e-02 9.000e-02 2.000e-01
 3.000e-01 4.600e-01 6.700e-01 8.700e-01 9.500e-01 9.300e-01 9.200e-01
 8.400e-01 7.900e-01 7.500e-01 6.800e-01 5.900e-01 5.400e-01 4.900e-01
 4.400e-01 4.000e-01 4.100e-01 4.300e-01 4.900e-01 5.600e-01 7.500e-01
 1.070e+00 1.590e+00 2.100e+00 2.620e+00 2.970e+00 3.500e+00 3.970e+00
 4.950e+00 6.410e+00 7.820e+00 8.870e+00 9.900e+00 9.370e+00 9.070e+00
 8.120e+00 7.000e+00 6.070e+00 5.440e+00 4.870e+00 3.970e+00 3.500e+00
 3.070e+00 2.970e+00 2.870e+00 2.780e+00 2.880e+00 3.070e+00 3.240e+00
 3.320e+00 3.430e+00 3.620e+00 3.820e+00 3.910e+00 4.130e+00 4.360e+00
 4.440e+00 4.590e+00 4.740e+00 4.900e+00 5.070e+00 5.230e+00 5.410e+00
 5.450e+00 5.500e+00 5.550e+00 5.590e+00 5.650e+00 5.700e+00 5.750e+00
 5.800e+00 5.850e+00 5.900e+00 5.950e+00 6.000e+00 6.050e+00

26425226g 104 natFe(a,x)52Feg h8.27 1642.01
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 1.000e-02 2.800e-02 6.200e-02 8.600e-02 1.190e-01
 1.500e-01 1.700e-01 1.800e-01 1.880e-01 1.980e-01 2.010e-01 2.040e-01
 2.160e-01 2.300e-01 2.700e-01 2.950e-01 3.300e-01 3.380e-01 3.380e-01
 3.300e-01 3.200e-01 3.100e-01 2.990e-01 2.910e-01 2.750e-01 2.830e-01
 2.910e-01 3.170e-01 3.200e-01 3.400e-01 3.500e-01 3.800e-01 4.000e-01
 4.100e-01 4.300e-01 4.800e-01 5.300e-01 5.800e-01 6.600e-01 7.500e-01
 8.500e-01 8.700e-01 9.300e-01 9.400e-01 9.200e-01 9.200e-01 9.100e-01
 9.100e-01 9.000e-01 8.900e-01 8.800e-01 8.760e-01 8.760e-01 8.760e-01
 8.850e-01 8.980e-01 9.200e-01 9.400e-01 9.600e-01 9.900e-01 1.010e+00
 1.040e+00 1.060e+00 1.090e+00 1.120e+00 1.150e+00 1.180e+00

26425625 104 natFe(a,x)56Mn h2.58 1690.64
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 1.000e-03 2.000e-03 5.000e-03 1.500e-02 3.900e-02 7.500e-02 1.460e-01
 2.360e-01 2.900e-01 3.500e-01 3.800e-01 3.900e-01 3.800e-01 3.600e-01
 3.400e-01 3.200e-01 3.100e-01 3.100e-01 3.100e-01 3.200e-01 3.200e-01
 3.200e-01 3.400e-01 3.500e-01 3.800e-01 4.000e-01 4.400e-01 4.900e-01
 5.800e-01 7.400e-01 9.900e-01 1.370e+00 2.150e+00 2.640e+00 2.970e+00
 3.410e+00 3.910e+00 4.680e+00 5.260e+00 6.030e+00 6.590e+00 7.560e+00
 8.100e+00 8.500e+00 8.100e+00 7.770e+00 7.940e+00 7.770e+00 8.000e+00
 8.100e+00 8.200e+00 8.300e+00 8.400e+00 8.450e+00 8.450e+00 8.450e+00
 8.450e+00 8.450e+00 8.300e+00 8.100e+00 7.900e+00 7.800e+00 7.600e+00
 7.400e+00 7.200e+00 7.000e+00 6.870e+00 6.600e+00 6.600e+00 6.600e+00
 6.600e+00 6.600e+00 6.600e+00 6.600e+00 6.500e+00 6.400e+00 6.300e+00
 6.150e+00 6.000e+00 5.900e+00 5.800e+00 5.700e+00 5.600e+00

26425425 104 natFe(a,x)54Mn d312.2 834.66
 KIZ-interne Bestrahlung 35 - 104 MeV , interpoliert 24.1.95

0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00 0.000e+00
 0.000e+00 0.000e+00 2.000e-02 1.200e-01 5.200e-01 2.460e+00 1.137e+01
 2.647e+01 3.890e+01 7.210e+01 9.960e+01 1.166e+02 1.400e+02
 1.530e+02 1.640e+02 1.790e+02 1.970e+02 2.060e+02 2.140e+02 2.230e+02
 2.330e+02 2.330e+02 2.230e+02 2.140e+02 2.060e+02 1.970e+02 1.890e+02
 1.820e+02 1.740e+02 1.680e+02 1.610e+02 1.540e+02 1.480e+02 1.420e+02
 1.360e+02 1.310e+02 1.250e+02 1.250e+02 1.250e+02 1.200e+02 1.200e+02
 1.200e+02 1.200e+02 1.150e+02 1.150e+02 1.150e+02 1.110e+02 1.110e+02
 1.060e+02 1.060e+02 1.110e+02 1.150e+02 1.210e+02 1.250e+02 1.250e+02
 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02
 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.310e+02 1.360e+02
 1.360e+02 1.360e+02 1.360e+02 1.360e+02 1.420e+02 1.420e+02

Anhang F

Offene Reaktionskanäle bei Bestrahlung von ^{nat}Fe mit 104 MeV α -Teilchen

Z↓	A→	59	58	57	56	55	54	53	52	51	50	49	48	47	46
28	Ni	x	#	!	!	(
27	Co	#	!	!	!	!	+								
26	Fe		#	#	#	7	#	!	!						
25	Mn			(!	#	!	x	!	+	(
24	Cr					+	#	#	#	!	#	!			
23	V								!	#	(x	!		
22	Ti										#	#	#	#	#
21	Sc													!	

Tabelle F-1: Matrix der von ALICE-91 berechneten offenen Reaktionskanäle bei α -Bestrahlung von ^{nat}Fe mit 104 MeV Alphateilchen.

- ! : Messung mit HPGe durchgeführt
- # : Stabiles Nuklid
- 7 : γ -Energie unterhalb des Meßbereichs (HPGe)
- (: $T_{1/2} < 2 \text{ m}$ oder $T_{1/2} > 10 \text{ y}$, d.h Aktivität zu schnell abgeklungen oder zu gering
- + : Zu geringe γ -Ausbeute
- x : Keine γ s

44 offene Reaktionskanäle $> 0,1 \text{ mb}$ (berechnet mit ALICE - 91 mit KRLD)

1 experimentell nachweisbar, obwohl Anregungsfunktion nach ALICE - 91 $< 0,1 \text{ mb}$

17 stabile Nuklide

10 keine γ 's, γ -Ausbeute zu gering, Halbwertszeit zu kurz oder zu lang

1 γ -Energie zu gering

17 Nuklide gemessen mit HPGe (ca. 36,3 %)

Z↓	A→	59	58	57	56	55	54	53	52	51	50	49	48	47	46
28	Ni			19	6										
27	Co		28	90	146	86									
26	Fe							27	2,1						
25	Mn				4,7		67		65						
24	Cr									49		1,9			
23	V								0,7				4		
22	Ti														
21	Sc														0,7

Tabelle F-2: Matrix der experimentell erfaßten Reaktionskanäle bei Bestrahlung von ^{nat}Fe mit 104 MeV Alphateilchen.

$$\sigma_{\text{tot}}(E = 104 \text{ MeV}) = 1578,6 \text{ mb}$$

$$\sigma_{\text{gemessen}}(E = 104 \text{ MeV}) = 596,6 \text{ mb (ca. 37,7 \%)}$$

Offene Reaktionskanäle bei Bestrahlung von ^{nat}Fe mit 30 MeV Protonen

Z↓	A→	58	57	56	55	54	53	52	51	50	49
27	Co	!	!	!	!	+	(
26	Fe	#	#	#	7	#	!	?			
25	Mn			?	#	!	x	!	+	(
24	Cr							#	?	#	?

Tabelle F-3: Matrix der von ALICE-91 berechneten offenen Reaktionskanäle bei p-Bestrahlung von ^{nat}Fe

- ! : Messung mit HPGe durchgeführt
- # : Stabiles Nuklid
- 7 : γ -Energie unterhalb des Meßbereichs (HPGe)
- (: $T_{1/2} < 2 \text{ m}$ oder $T_{1/2} > 10 \text{ y}$, d.h Aktivität zu schnell abgeklungen oder zu gering
- + : Zu geringe γ -Ausbeute
- x : Keine γ 's
- ? : Aktivität zu gering, nicht meßbar (< MDA-Level)

24 offene Reaktionskanäle > 0,1 mb (berechnet mit ALICE - 91 mit FLD)

- 7 stabile Nuklide
- 9 keine γ 's, γ -Ausbeute zu gering, Halbwertszeit zu kurz oder zu lang, Aktivität zu gering
- 1 γ -Energie zu gering
- 7 Nuklide gemessen mit HPGe (ca. 29,2 %)

Z↓	A→	58	57	56	55	54	53	52	51	50	49
27	Co	0,1	0,7	29	24						
26	Fe						11				
25	Mn					93		36			
24	Cr										

Tabelle F-4: Matrix der experimentell erfaßten Reaktionskanäle bei Bestrahlung von ^{nat}Fe mit 30 MeV Protonen.

$$\sigma_{\text{tot}}(E = 30 \text{ MeV}) = 956,9 \text{ mb}$$

$$\sigma_{\text{gemessen}}(E = 30 \text{ MeV}) = 193,8 \text{ mb (ca. 20,3 \%)}$$

Literaturverzeichnis

- [1-1] J.E. Vetter, *Die Entwicklung der Fusionsforschung im internationalen Rahmen*, Kernfusion, Forschung und Entwicklung, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1991, 77 - 80
- [1-2] S. Cierjacks and K. Ehrlich, *Nuclear Data for Fusion Materials Research*, Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Jülich, Germany, May 1991
- [1-3] S.N. Rosenwasser et al, *The Application of Martensitic Stainless Steels in Long Lifetime Fusion First Wall/Blankets*, JNM 85 & 86 (1979) 177-182
- [1-4] R.L. Klueh et al, *Ferritic / martensitic steels: promises and problems*, JNM 191 - 194 (1992) 116-124
- [1-5] P. Schiller et al, *History, present status and future of fusion reactor materials research in the EC and other European countries*, JNM 179 - 181 (1991) 13 - 18
- [1-6] L.J. Backer et al, *Fusionsneutronenspektrum in der Ersten-Wand eines DEMO Fusionsreaktors mit 2,5 MW/m² Wandbelastung*, Cullham Report CLM-R-254, 1985
- [1-7] D. Hermanutz, Forschungszentrum Karlsruhe, Private Mitteilung, 1995
- [1-8] S. Cierjacks et al, *Activation Calculations for Single Elements and Alloys Including Sequential (x,n) Reactions*, Progress Report on Nuclear Data Research in the Federal Republic of Germany, Edited by S. Quaim, July 1993 NEA/NSC/DOC(93)17, INDC(Ger)-037/LN, Jül-2803
- [1-9] S. Kelzenberg et al, *Integral Data Testing of Critical Activation Cross Sections for Fusion Materials Development at the Karlsruhe Isochronous Cyclotron*, Proceedings of a Topical Conference on Nuclear Data for Fusion Reactor Technology, Edited by S. Cierjacks, October 1993, NEANDC-307 'U', INDC(Ger)-035/L, KfK 5062
- [1-10] S. Kelzenberg and P. Oblozinsky, *Influence of Sequential (x,n) Reactions on Production of Long-lived Radionuclides in Fusion Reactors*, INDC(NDS)-286/L, November 1993
- [1-11] S. Cierjacks et al, *Development of a Novel Algorithm and Production of New Data Libraries for the Treatment of Sequential (x,n) Reactions in Fusion Material Activation Calculations*, Fusion Technology, Vol. 24, Nov. 1993, pp. 277
- [1-12] S. Kelzenberg, *Berechnung und experimentelle Verifizierung von Materialaktivierungen in D-T-Fusionsreaktoren*, Dissertation, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Materialforschung I, in Vorbereitung
- [1-13] T. Kondo et al, *Status and prospects of high energy neutron test facilities for fusion materials development*, JNM 191-94 (1992) 100
- [1-14] S. Cierjacks and E. Daum, *Study of High-Intensity, High-Energy Neutron Sources for End-of-Life Fusion Materials Testing*, Progress Report on Nuclear Data Research in the Federal Republic of Germany, Edited by S. Quaim, July 1993 NEA/NSC/DOC(93)17, INDC(Ger)-037/LN, Jül-2803
- [1-15] K. Ehrlich und E. Daum, *Proceedings of the IEA-Workshop on Intense Neutron Sources, Karlsruhe, Germany, 21-23 September 1992*, Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 5296, Mai 1994
- [1-16] K. Ehrlich and R. Lindau, *Proceedings of the IEA-Technical Workshop for an International Fusion Material Irradiation Facility, Karlsruhe, Germany, September 26 - 29, 1994*, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5553

- [1-17] A. Möslang et al, *Die Dual-Beam-Technik - eine Einrichtung zur Simulation der Strahlenschädigung in Fusionsreaktorwerkstoffen*, KfK-Nachrichten, Jahrg. 19, 1/87, S. 37-43
- [2-1] N. Bohr, Kgl. Dan. Vid. Sel., Mat. - Fys. Medd., 18, No. 8 (1948)
- [2-2] J. Lindhard, *Studies of Penetration of Charged Particles in Matter*, Publication 1133, Nuclear Sciences Series Report No. 39, p. 1, National Academy of Sciences, National Research Council, Washington D.C. 1964
- [2-3] G. Leibfried, *Bestrahlungseffekte in Festkörpern*, Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1965
- [2-4] A. Möslang, unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, April 1990
- [2-5] G.H. Kinchin and R.S. Pease, *The Displacement of Atoms in Solids by Radiation*, Rep. Prog. Phys. 18 (1955)
- [2-6] M.J. Norget, M.T. Robinson and J.M. Torrens, *A Proposed Standard for Calculating Displacement Damage Dose Rates*, Proceedings of the IAEA Specialist Meeting, Seattle, Washington (1972), pp 1 - 14
- [2-7] W.D. Wilson et. al., Phys. Rev. B15, 2548 (1977)
- [2-8] G. Moliere, Z. Naturforsch. A2, 133 (1947)
- [2-9] O.B. Firsov, Societ Phys. JETP6, 534 (1958)
- [2-10] A. Möslang, Forschungszentrum Karlsruhe, Interne Mitteilung, 1992
- [2-11] M.T. Robinson, Nuclear Fission Reactors, British Nuclear Energy Society, London, 1970, p. 364
- [2-12] IAEA Specialists Meeting on Radiation Damage Units and Stainless Steels, OCT. 31 - Nov. 1, 1972, Seattle, Washington, Proceedings in Nucl. Eng. Des., NEDEA
- [2-13] D.G. Doran et. al., *Reporting on the Working Group on Displacement Models and Procedures for Damage Calculations*, Report HEDL - TME 73 - 76 (1973)
- [2-14] J.P. Biersack, *New Projected Range Algorithm as Derived from Transport Equations*, Z. Phys. A, Atoms and Nuclei 305, 95 - 101 (1982)
- [2-15] U. Littmark, J.F. Ziegler, *Handbook of Range Distributions in all Elements*, Vol. 6 of The Stopping and Ranges in Matter, Pergamon Press, 1980
- [2-16] J.P. Biersack, L.G. Haggmark, *A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets*, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980), 257 - 269
- [2-17] M. Blann und J. Bisplinghoff, *CODE ALICE/Livermore 82*, UCID-19614, Lawrence Livermore National Laboratory, November 1982
- [2-18] M. Blann, *CODE ALICE/85/300*, UCID-20169, Lawrence Livermore National Laboratory, September 1984
- [2-19] M. Blann and A. Mignerey, *Pre-Equilibrium Decay of Moderate Excitations and the Hybrid Model*, Nuc. Phys. A186 (1972) 245-256
- [2-20] M. Blann, *Hybrid Model for Pre-Equilibrium Decay in Nuclear Reactions*, Phys. Rev. Lett., Vol. 27, No. 6, August 1971, pp 337 - 340
- [2-21] M. Blann, *Importance of the Nuclear Density Distribution on Pre-Equilibrium Decay*, Phys. Rev. Lett., Vol. 28, No. 12, March 1972, pp 757 - 759
- [2-22] G.D. Harp et. al., *Attainment of Statistical Equilibrium in Excited Nuclei*, Phys. Rev. 165, 1166 (1968)
- [2-23] G.D. Harp et. al., *Precompound Decay from a Time-Dependent Point of View*, Phys. Rev. C3, 1847 (1971)

- [2-24] J.J. Griffin, *Statistical Model of Intermediate Structure*, Phys. Rev. Lett. 17, 478 (1966)
- [2-25] J.J. Griffin, *Energy Dependence of Average Direct Reaction Cross Section and Partial Nuclear Level Densities*, Phys. Lett. 24B, 5 (1967)
- [2-26] V. Weißkopf, Phys. Rev. 52 (1937) 295
- [2-27] V. Weißkopf, and H.D. Ewing, Phys. Rev. 57 (1940) 472
- [2-28] M. Blann, *Evidence for the influence of Shell Structure on Level Densities in the Continuum*, Nuc. Phys. 80 (1966) 223-236
- [2-29] V.S. Ramamurthy et. al., *On a New Shell Dependent Nuclear Level Density Formula, Proceedings of the International Conference on the Interactions of Neutrons with Nuclei*, CONF-760715-P2, Volume II, Lowell, Massachusetts, July 6-9 1976, pp 117 - 129
- [2-30] V.S. Ramamurthy et. al., *On a New Semiempirical Nuclear Level Density Formula with Shell Effects*, IAEA Technical Document IAEA-190, Nuclear Theory in Neutron Nuclear Data Evaluation, Vol. II, Vienna 1976, pp. 117
- [2-31] V.S. Ramamurthy et. al., *Review of Recent Phenomenological Approaches to the Description of Nuclear Level Densities*, BNL-NCS-51964, June 1983, pp. 187
- [2-32] S. Amelincks et al, *Series: Defects in Crystals and Solids, Volume 8, Ion Implantation*, North Holland Publishing Company, 1973
- [2-33] P. Jung, *Atomic Displacement Functions of Cubic Metals*, JNM 117 (1983) 70-77
- [2-34] J.H. Kinney et al., *Defect Production Efficiencies in Thermal Neutron Irradiated Copper and Molybdenum*, JNM 122&123 (1984) 1028-1032
- [2-35] M.J. Norget et al, *A Proposed Method of Calculating Displacement Dose Rates*, Nucl. Eng. Des. 33 (1975) 50-54
- [2-36] R.S. Averback et al., *Energetic Displacement Cascades and their Roles in Irradiation Effects*, Materials Science Forum, Volumes 15-18 (1987), pp 963-984
- [2-37] M.T. Robinson, *Basic Physics of Radiation Damage Production*, JNM 216 (1994), pp 1-28
- [2-38] M.T. Robinson, *The Theory of Radiation Induced Defect Production*, Radiation Damage in Metals, American Society for Metals, Metals Park, Ohio (1975), pp 1-27
- [3-1] Fred. T. Howard, *Cyclotrons - 1975, AFV and FM*, 7th International Conference on Cyclotrons and their Applications, August 19 - 22, 1975, Zürich, Switzerland, Printed by S.I.N.
- [3-2] M. Reiser, *Ionenquelle und Anfangsbahnen des relativistischen Isochron-Zyklotrons Karlsruhe*, Dissertation UNI Mainz, 1960
- [3-3] *CP - 42, Cyclotron Operations Manual*, The Cyclotron Corporation, Berkeley, 1982
- [3-4] E. Daum, unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, November 1994
- [3-5] Materials Research Corporation, Orangeburg, New York 10962, Marz Grade Iron
- [3-6] Fa. Goodfellow Metals GmbH, Bad Nauheim
- [3-7] *Solid State Photon Detectors Operators Manual*, GEM Series, HPGe, Coaxial Detector System, EG&G, ORTEC
- [3-8] *GammaVision Software User's Manual*, ORTEC Part No. 762880, Revision A

- [3-9] B. Martin, K. Ziegler, *Twelfth International Conference on Cyclotrons and their Applications, May 8 - 12, 1989, Berlin, Germany, Published by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.*
- [3-10] Fa. Amershon, Braunschweig
- [3-11] S. Cierjacks et al, *Development of a novel algorithm and production of a new library for the treatment of sequential (x,n)-reactions in fusion material activation calculations, Fusion Technology, Vol. 24, No. 3, November 1993, pp 277 - 287*
- [4-1] H. Münzel et. al., *Physik Daten, Karlsruhe Charged Particle Reaction Data Compilation, Institut für Radiochemie, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Germany*
- [4-2] *Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, H. Schopper (Ed.), Volume 5, Q-Values and Excitation Functions of Nuclear Reactions, Springer-Verlag 1973*
- [4-3] T.W. Burrows, P. Dempsey, *The Bibliography of Integral Charged Particle Nuclear Data, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, BNL-NCS-50640, March 1980*
- [4-4] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part A: Z = 3 to Z = 27, Nuclear Data Tables, A6, 353 - 644 (1969)*
- [4-5] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part I: Z = 1 to Z = 98, Nuclear Data Tables, 9, 469 - 619 (1971)*
- [4-6] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part A: Z = 1 to Z = 98, Nuclear Data Tables, 11, 1 - 126 (1972)*
- [4-7] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part A: Z = 1 to Z = 98, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 12, 499 - 583 (1973)*
- [4-8] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part A: Z = 1 to Z = 98, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 15, 189 - 303 (1975)*
- [4-9] F.K. McGowan et al, *Reaction List for Charged-Particle-Induced Nuclear Reactions, Part A: Z = 1 to Z = 98, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 18, 1 - 136 (1976)*
- [4-10] U. Reuss et al, *Gamma-Ray Catalog, GSI 79-2, Darmstadt, Februar 1979*
- [4-11] Gerd Brinkmann, *Integrale Anregungsfunktionen für Protonen- und Alpha-induzierte Reaktionen an Targetelementen $22 \leq Z \leq 28$, Inaugural-Dissertation, Universität zu Köln, Köln 1979*
- [4-12] R. Michel et al, *Measurement and Hybrid-Model Analysis of Proton-Induced Reactions with V, Fe and Co, Nuclear Physics A322 (1979) 40 - 60*
- [4-13] C.H. Johnson et. al., *Cross Sections for (p,n) Reactions in Intermediaweight Nuclei, Prog. Rept. ORNL-2910 (1960), Prog. Rept. ORNL-2501 (1958)*
- [4-14] S. Tanaka, M. Furukawa, *Excitation Functions for (p,n) Reactions with Titanium, Vanadium, Chromium, Iron and Nickel up to 14 MeV, J. Phys. Soc. Jap., Vol. 14, 1269 (1959)*
- [4-15] S. Tanaka, *The Cross Sections of (p,n) Reactions for the Nuclei of Atomic Number 22 to 30, Journal of the Atomic Energy Society of Japan, Vol. 1, No. 3, 171 (1959)*
- [4-16] R.L. Brodzinski et al, *High-Energy Proton Spallation of Iron, Phys. Rev. C4 (4) (1971), p. 1257*
- [4-17] I.L. Jenkins, A.G. Wain, *Excitation Functions for the Bombardment of ^{56}Fe with Protons, J. Inorg. Nucl. Chem., Vol. 32, 1419 (1970)*

- [4-18] I.R. Williams, C.B. Fulmer, *Excitation Functions for Radioactive Isotopes Produced by Protons below 60 MeV on Al, Fe and Cu*, Phys. Rev., Vol. 162, 1055 (1967)
- [4-19] E. Gadioli et. al., *Excitation Functions of ^{51}V , ^{56}Fe , $^{65}\text{Cu}(p,n)$ Reactions Between 10 and 45 MeV*, Nuovo Cimento A, Vol. 22, 547 (1974)
- [4-20] Samuelson et al, siehe Referenz [4-11] Seite 29 unten
- [4-21] J.M. Barrandon et al, *ÉTUDE DU DOSAGE DE Ti, V, Cr, Fe, Ni, Cu ET Zn PAR ACTIVATION AVEC DES PROTONS D'ÉNERGIE LIMITÉE A 20 MEV*, Nucl. Instr. Meth. **127** (1975) pp. 269 - 278
- [4-22] S. Takács et al, *Remeasurement of Proton Induced Reactions on Iron for Activation Techniques*, Nucl. Instr. Meth. **B89** (1994) 88 - 94
- [4-23] Manuel C. Lagunas-Solar and Ronald Haff, *Theoretical and Experimental Excitation Functions for Proton Induced Nuclear Reactions on $Z = 10$ to $Z = 82$ Target Nuclides*, Radiochemica Acta 60, 57-67 (1993), R. Oldenbourg Verlag München
- [4-24] C.H. Johnson et. al., *Cross Sections for (p,n) Reactions in Intermediaweight Nuclei*, Prog. Rept. ORNL-2910 (1960), Prog. Rept. ORNL-2501 (1958)
- [4-25] B.L. Cohen, E. Newman, *(p,pn) and $(p,2n)$ Cross Sections in Medium Weight Elements*, Phys. Rev., Vol. 99, 718 (1955)
- [4-26] B.L. Cohen et. al., *$(p,pn) + (p,2n)$ and $(p,2p)$ Cross Sections in Medium Weight Elements*, Phys. Rev., Vol. 99, 723 (1955)
- [4-27] K. Eskola, Ann. Acad. Sci. Fenn. Ser. A VI **261** (1967)
- [4-28] G. Musiol, *Kern- und Elementarteilchenphysik*, VCH-Verlag, 1988
- [4-29] Frank S. Houck, J.M. Miller, *Reactions of Alpha-Particles with Iron-54 and Nickel-58*, Physical Review, Volume 123, Number 1, July 1961, pp 231 - 240
- [4-30] Shigeo Tanaka et al, *Reactions of Iron-54 with Alpha-Particles*, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 15, No. 9, September 1960, pp 1547 - 1551
- [4-31] R. Michel, G. Brinkmann, *Alpha-Induced Reactions in Cobalt*, Nuclear Physics **A388** (1980) 167 - 189
- [4-32] Alan Ewart et al, *Excitation Function and Mean Recoil Ranges Resulting from the Bombardment of ^{56}Fe with 18 - 68 MeV ^4He Ions*, Nuclear Physics **69** (1965) 625 - 636
- [5-1] Jean - Pierre Hazan and Marshall Blann, *Excitation Functions, Recoil Ranges and Statistical Theory Analysis of Reactions Induced in ^{56}Fe with 6 - 29 MeV ^3He Ions*, Phys. Rev., Vol. 137, No. 5B, March 1965
- [5-2] W.W. Bowman et. al., *Recoil Ranges of 0.22 - 5.2 MeV Ions in Vanadium, Iron, Nickel, Zirconium and Gold*, Phys. Rev., Vol. 165, No. 2, January 1968
- [5-3] J. Lindhard, M. Scharff and E. Schiott, Mat. - Fys. Dan. Medd. Vid. Selsk. 33, No. 14 (1963)
- [5-4] J.F. Ziegler et. al., *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Volume I, Pergamon Press, 1985
- [5-5] J. Bertsch, unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Oktober 1993
- [5-6] J. Bertsch, Forschungszentrum Karlsruhe, Private Mitteilung, 1993
- [6-1] C. Abromeit, *Aspects of simulation of neutron damage by ion irradiation*, JNM 216(1994) 78-96

- [6-2] D. Hermanutz und U. Fischer, Forschungszentrum Karlsruhe, Private Mitteilung, 1995
- [6-3] L.J. Backer et al, Cullham Report CLM-R-254 (1985)
- [6-4] R.E. MacFarlane et al, *The NJOY Nuclear Data Processing System*, Los Alamos National Laboratory, LA-9303-M
- [6-5] L.R. Greenwood and R.K. Smither, *SPECTER, Neutron Damage Calculations for Materials Irradiations*, Report ANL/FFP/TM-197, January 1985
- [6-6] L.R. Greenwood, ANL: *Extended Damage Energy Cross Sections*, Private Mitteilung
- [6-7] E. Daum, *User and Reference Manual for the KfK-Code INS*, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Bericht KfK 5230, September 1993
- [6-8] R.S. Averback, *Atomic displacement processes in irradiated metals*, JNM 216 (1994) 49-62
- [6-9] Y.Satoh et al., *Binary collision calculation of subcascade structure and its correspondence to observed subcascade defects in 14 MeV neutron irradiated copper*, JNM 191-194 (1992), 1101-1105
- [6-10] K.L. Merkle, *Defect Production by Energetic Particle Bombardment*, Radiation Damage in Metals, American Society for Metals, Metals Park, Ohio (1975), pp 58-94
- [6-11] M. Kiritani, *Point Defect Processes in the Defect Structure Development from Cascade Damage*, Materials Science Forum Volumes 15-18 (1987), pp 1023-1046
- [6-12] M. Kiritani, *Influence of primary recoil energy spectrum on microstructural evolution*, JNM 191-194 (1992) 125-131
- [6-13] H. Wiedersich, *Effects of the primary recoil spectrum on microstructural evolution*, JNM 179-181 (1991) 70-75
- [6-14] M. Kiritani et al., *Recoil Energy Spectrum Analysis and Impact Effect of Cascade and Subcascade in 14 MeV D-T Fusion Neutron Irradiated FCC Metals*, Radiation Effects and Defects in Solids, 1990, Vol. 113, pp 75-96
- [6-15] M. Kiritani, *Microstructure evolution during irradiation*, JNM 216 (1994) 220-264
- [6-16] G.S. Was et al., *Effects on irradiation on intergranular stress corrosion cracking*, JNM 216 (1994) 326-347
- [6-17] L.E. Rhen et al., *Production of Freely-Migrating Defects During Irradiation*, Materials Science Forum, Volumes 15-18 (1987), pp 985-1002
- [6-18] R.S. Averback et al., *Ion-Irradiation Studies of the Damage Function of Copper and Silver*, Phys. Rev. B, Vol. 18 No. 8, 1978, pp 4156-4171