

Einfluß der Oberflächentemperatur auf die  
Streuung von niederenergetischen Ionen (ISS)  
an einer Cu(110)-Oberfläche

Influence of the Surface Temperature on  
the Scattering of Low-Energy Ions (ISS)  
from a Cu(110)-Surface

G. Engelmann

IPP 9/62

Juli 1987



**MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK**

**8046 GARCHING BEI MÜNCHEN**

„Dieser IPP-Bericht ist als Manuskript des Autors gedruckt. Die Arbeit entstand im Rahmen der Zusammenarbeit zwischen dem IPP und EURATOM auf dem Gebiet der Plasma-physik. Alle Rechte vorbehalten.“

“This IPP-Report has been printed as author's manuscript elaborated under the collaboration between the IPP and EURATOM on the field of plasma physics. All rights reserved.”

**MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK**  
**GARCHING BEI MÜNCHEN**

Einfluß der Oberflächentemperatur auf die  
Streuung von niederenergetischen Ionen (ISS)  
an einer Cu(110)-Oberfläche

Influence of the Surface Temperature on  
the Scattering of Low-Energy Ions (ISS)  
from a Cu(110)-Surface

G. Engelmann

IPP 9/62

Juli 1987

Diese Arbeit ist identisch mit einer Dissertation gleichen Titels,  
die im März 1986 bei der Technischen Universität München einge-  
reicht wurde.

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem  
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die  
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*



July 1987

Abstract

Ion yields are reported for 1 keV  $\text{Ne}^+$  and  $\text{Na}^+$  scattered from a single crystal surface (Cu(110)) in dependence of the temperature (100 K to 500 K). The understanding of the dependence of ion scattering on thermal vibrations and the thermal properties of the surface are the main issue. The charge exchange between the target atoms and the projectiles and the ion-induced surface damages are also determining the scattering intensity.

An analytical two-atom model describes the temperature dependence of the  $\text{Ne}^+$  scattering intensity. The value for the surface Debye temperature (Cu:  $(150 \pm 30)$  K) found could be corroborated by three-dimensional numerical calculations (ARGUS code) and also allows the simulation of the  $\text{Na}^+$  scattering intensity. In these calculations the different trajectories are distinguished. In this way additional information about the trajectory dependent neutralisation of  $\text{Ne}^+$  is found. The dependence is reproduced by an atomic neutralisation model.



Juli 1987

Zusammenfassung

Diese Arbeit liefert einen Beitrag zum Verständnis der Streuung von 1 keV  $\text{Ne}^+$ - und  $\text{Na}^+$ -Ionen an einer Einkristalloberflächen (Cu 110). Im Vordergrund stehen der Einfluß der thermischen Bewegung auf die Ionenstreuung und die thermischen Eigenschaften der Oberfläche, die durch Mehrfachstreuung sichtbar werden. Der Ladungsaustausch zwischen den Probenatomen und den Projektile und ioneninduzierten Oberflächenschäden sind für die Streuintensität ebenfalls bestimmend.

Mit einem analytischen Zweiatommodell kann die Temperaturabhängigkeit (100 K bis 500 K) der  $\text{Ne}^+$ -Streuintensität beschrieben werden. Der so gewonnene Wert für die Oberflächen-Debye-Temperatur (Cu:  $(150 \pm 30)$  K) konnte durch dreidimensionale numerische Rechnungen (ARGUS Code) bestätigt werden und ermöglicht auch die numerische Simulation der  $\text{Na}^+$ -Streuintensität. In diesen Rechnungen wird zwischen den verschiedenen Trajektorien unterschieden, so daß sich zusätzliche Information über die trajektorienabhängige Neutralisation von  $\text{Ne}^+$  ergibt. Diese Abhängigkeit wird durch ein atomares Neutralisationsmodell reproduziert.





## INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1. EINLEITUNG . . . . .	1
2. APPARATUR UND EXPERIMENTELLES VORGEHEN . . . . .	3
2.1 Überblick zum experimentellen Aufbau. . . . .	3
2.1.1 Ionenquellen und der Weg der Ionen in den Detektor. . . . .	4
2.1.2 Manipulator. . . . .	7
2.2 Sonden, Probe, Messung und Auswertung . . . . .	10
2.2.1 Die Sonden und die Probe . . . . .	10
2.2.2 Probenpräparation. . . . .	12
2.2.3 Meßablauf. . . . .	14
2.2.4 Auswertung der Daten . . . . .	14
3. PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN . . . . .	17
3.1 Grundlagen der Ionenstreuung. . . . .	17
3.1.1 Kinematik . . . . .	17
3.1.1.1 Beschränkung des Streuwinkels und Mehrfachstreuung . . . . .	21
3.1.1.2 Der Schattenkegel. . . . .	25
3.1.2 Die Streuintensität der Einfachstreuung. . . . .	28
3.1.3 Potentiale und Rechenprogramme . . . . .	30
3.2 Der Ladungszustand gestreuter Ionen . . . . .	32
3.2.1 Die Augerneutralisation. . . . .	35
3.2.2 Die Resonanzneutralisation . . . . .	39
3.3 Mechanische und thermische Eigenschaften der Kristalle . . . . .	42
3.3.1 Die quadratische Schwankung im Debye-Modell . . . . .	45
3.3.2 Thermische Bewegung an der Oberfläche. . . . .	47
Tabelle I . . . . .	49
Tabelle II . . . . .	50
Tabelle III . . . . .	52
3.3.3 Niederenergetische Ionenstreuung und thermische Bewegung an der Oberfläche. . . . .	53
3.4 Schäden durch niederenergetische Ionenstreuung auf Einkristalloberflächen. . . . .	61

4.	ERGEBNISSE . . . . .	64
4.1	Simulationsrechnungen zur Abhängigkeit der Streuintensität von der Temperatur (MARLOWE). . . . .	64
4.2	Erzeugung und Ausheilen von ioneninduzierten Ober- flächenschäden als Funktion der Temperatur. . . . .	70
4.3	Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung . . . . .	78
4.3.1	Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung bei der Quasi-Einfach- streueenergie . . . . .	78
4.3.1.1	Zweiatommodell für die $\text{Ne}^+$ -Streuung an den dichtgepackten Ketten. . . . .	78
4.3.1.1.1	Wahrscheinlichkeit der Streuung an einem Oberflächenatom im Debye-Modell. . . . .	80
4.3.1.2	Streuung von 1 keV $\text{Ne}^+$ -Ionen entlang der [110]-Richtung als Funktion von T und $\psi$ . . .	84
4.3.1.3	Vergleich der Streuintensität bei der Quasi-Einfachstreueenergie aus den Messungen und den Simulationsrechnungen (ARGUS). . . . .	88
4.3.1.3.1	Bestimmung der Überlebenswahrscheinlich- keit von $\text{Ne}^+$ mit Hilfe der Simulations- rechnungen . . . . .	97
4.3.1.4	Streuung von 1 keV $\text{Ne}^+$ -Ionen entlang der [100]-Richtung als Funktion von T und $\psi$ . . .	98
4.3.1.4.1	Weitere Informationen über die Streuung von $\text{Ne}^+$ - und $\text{Na}^+$ -Ionen in der [100]-Richtung aus den ARGUS-Rechnungen. . .	101
4.3.1.5	Einige Energiespektren für "willkürliche" Oberflächenrichtungen. . . . .	105
4.3.1.6	Bestimmung der Überlebenswahrscheinlichkeit der einfachgestreuten $\text{Ne}^+$ -Ionen mit Hilfe eines "Hagstrum"-ähnlichen Neutralisations- modells. . . . .	111
	Tabelle IV	121
4.3.2	Abhängigkeit der Streuintensität von der ther- mischen Unordnung bei der Quasi-Doppelstreu- energie. . . . .	123
4.3.3	Diskussion der Ergebnisse bezüglich der Streu- intensität von der schadenfreien Oberfläche. . .	131
5.	ZUSAMMENFASSUNG. . . . .	133
6.	LITERATURVERZEICHNIS . . . . .	136

## 1. EINLEITUNG

Die Streuung niederenergetischer Ionen (ISS) ist eine sehr empfindliche Methode, um die geometrische Lage und Masse von Atomen in Oberflächen zu bestimmen /1, 2, 3/. Diese Fähigkeit gewinnt im Zeitalter der Monolage für Monolage "konstruierten" Substanzen an Bedeutung. Nicht zufällig entstand ein gleichzeitig energie- und winkelauflösendes Spektrometer für Ionenstreuung, das ausreichende Informationsmengen zur vollständigen Charakterisierung von Oberflächen quasi-zerstörungsfrei zu liefern in der Lage ist, gerade in Eindhoven /4/.

Die Empfindlichkeit auf die Geometrie geordneter Oberflächenstrukturen bedingt die Frage nach dem Einfluß der Störung der Ordnung durch thermische Bewegung. Die Schwingung der Atome wird nämlich durch die gestreuten Ionen als statische Unordnung des Oberflächen-gitters wahrgenommen. Mehrfachstreuereignisse werden von der Unschärfe der Periodizität stark in Mitleidenschaft gezogen /5/. Die Temperaturabhängigkeit der Mehrfachstreuung ist wiederholt theoretisch untersucht worden /6-16/, aber es liegen wenig experimentelle Daten vor /6, 10, 11/.

Aufgabe dieser Arbeit ist es, den Einfluß der thermischen Bewegung auf die Ionenstreuung am Beispiel der Cu(110)-Oberfläche mit  $\text{Ne}^+$  und  $\text{Na}^+$  zu studieren und gleichzeitig neue Informationen über die thermischen Eigenschaften zu gewinnen. Die Hauptschwierigkeiten hierbei sind, wie aus der oben erwähnten Literatur hervorgeht, die während der Messung erzeugten Oberflächenveränderungen, die bei niedrigen Temperaturen verstärkt auftreten, unter Kontrolle zu bringen, die Streuintensitäten im Energiespektrum eindeutig einem Typ von Streuereignis zuzuordnen, den Beitrag von Neutralisation und Ionenfluß auf die streuenden Atome zu diesen Streuintensitäten aufzutrennen und ein Maß für die Ortsunschärfe der Atome zu gewinnen, das von Vorkenntnissen über das Potential zwischen Ion und Atom möglichst unabhängig ist.

Aus diesem Grund sind zusätzliche Kenntnisse über weitere Festkörpereigenschaften notwendig, die sich in der Ion-Oberflächenwechselwirkung niederschlagen. Am Anfang aller experimentellen Untersuchungen steht deshalb die Beobachtung der Empfindlichkeit der Cu(110)-Oberfläche auf Schäden durch 1 keV  $\text{Ne}^+$ -Ionen in Abhängigkeit von der Temperatur und die Bestimmung der Art der entstandenen Oberflächenveränderungen. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird die Abhängigkeit der Ionenstreuung von der Temperatur durch Wahl geeigneter Parameter so herauspräpariert, daß eine Aussage über die relative Schwankung nächster Nachbarn an der Oberfläche möglich wird. Die Bestimmung der übrigen Beiträge zur Streuintensität wurde durch die Analyse der Energiespektren im Vergleich von Edelgas- und Alkali-Ionen ( $\text{Ne}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ) und durch Simulationsrechnungen auf bewährte Art unterstützt /17/.

Nel mezzo del cammin di nostra vita  
mi ritrovai per una selva oscura,  
chè la diritta via era smarrita.

E quanto a dir qual era è cosa dura  
esta selva selvaggia e aspra e forte  
che nel pensier rinnova la paura!

Ich fand mich, grad in unseres Lebens Mitte,  
In einem finstern Wald zurück, verschlagen,  
Weil ich vom rechten Pfad gelenkt die Schritte.  
Ha! wie er ausgesehn ist hart zu sagen,  
Der wüste Wald mit wildverwachsenen Strecken,  
Daß in Gedanken sich erneut mein Zagen.

/113/

## 2. APPARATUR UND EXPERIMENTELLES VORGEHEN

### 2.1 Überblick zum experimentellen Aufbau

Die UHV-Apparatur SORBAS (siehe Abb. 2.1) wurde bereits an anderer Stelle beschrieben /18/. In der Zwischenzeit wurde sie jedoch in einigen wesentlichen Punkten verbessert:

- die Pumpleistung wurde erhöht,
- der Manipulator wurde neu konstruiert,
- die Ionenquelle wurde zur Verwendung von Alkaliionen umgebaut und modernisiert,
- es steht eine elektronische Datenerfassung zur Verfügung /17/.

Nach Erreichen des Enddrucks des Vorvakuumsystems übernehmen drei Ionengetterpumpen (IZ), die jeweils der Ionenquelle, der Ionenoptik und der Streukammer abschnittsweise zugeordnet sind, die Vakuumerzeugung. Eine zusätzliche Verbesserung des Enddruckes um eine Größenordnung wird durch zwei mit flüssigem Stickstoff gekühlte Titansublimationspumpen (TSP), die mit großem Leitwert sowohl zwischen der Streukammer als auch der Ionenquelle und der diesen Apparaturteilen zugeordneten IZ-Pumpen montiert sind, ermöglicht.

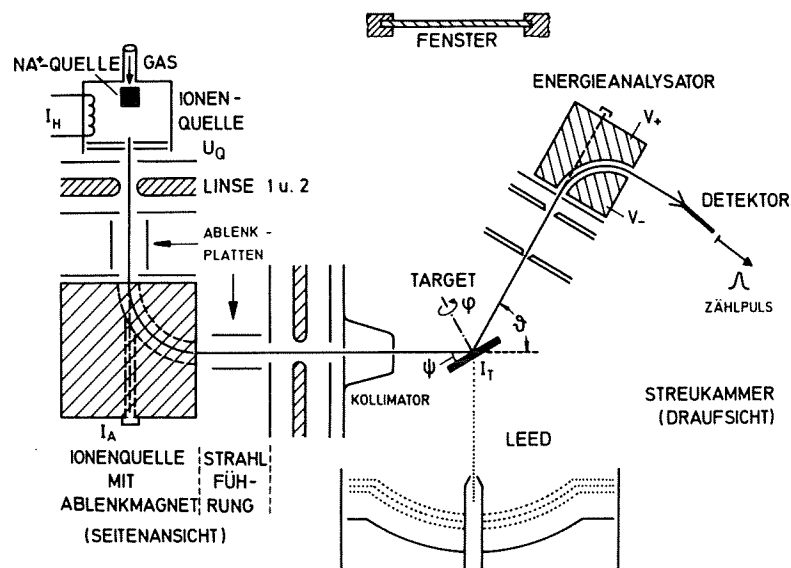


Abb. 2.1: Schematische Skizze der Versuchsanordnung

Zur Druckmessung stehen drei Bayard-Alpert-Röhren zur Verfügung, die die Überwachung des Vakuums in den drei Pumpabschnitten getrennt ermöglichen. Im Hauptgefäß lassen sich nach Ausheizen der gesamten Apparatur und unter Benutzung der gekühlten TSP  $6 \times 10^{-9}$  Pa erreichen. Das Restgas wird auch dann noch ausreichend gepumpt, wenn die IZ-Pumpen ausgeschaltet werden und in die Apparatur zum Betrieb der Ionenquelle Edelgas bis zu einem Druck von  $3 \times 10^{-4}$  Pa eingelassen wird.

### 2.1.1 Ionenquellen und der Weg der Ionen in den Detektor

Die Edelgasionen werden in einer Ionenstoßquelle erzeugt, deren Prinzip anhand eines Vorläufermodells von Grundner /19/ beschrieben worden ist. Der nunmehr am SORBAS verwendete Typ ist in Abb. 2.2 zu sehen. Die Quelle liefert Ionen mit Primärenergien  $E_0$  zwischen 150 und 1200 eV. Experimentell wurde eine energieunabhängige Abweichung der Primärenergie  $E_0$  von der an die Ionenquelle gegenüber

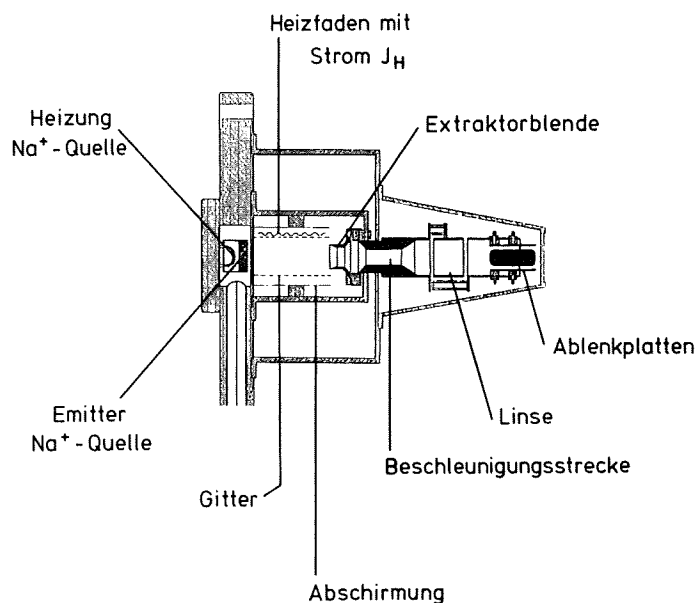


Abb. 2.2: Kombinierte Ionenquellen: thermionische Na<sup>+</sup>-Quelle und Elektronenstoßquelle für He<sup>+</sup>-Ionen



der geerdeten Probe angelegten Spannung  $U_Q$  von  $-46 \text{ eV} \pm 4 \text{ eV}$  festgestellt. Offenbar entstehen die Ionen an einem Ort entsprechend geringeren Potentials. Gasdruck und Ionenstrom sind zueinander annähernd proportional. Die Quelle benötigt zum Beispiel zur Erzeugung eines  $\text{Ne}^+$ -Ionenstroms von  $3 \text{ nA}$  einen Gasdruck von ungefähr  $2 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ .

Wie schon bei der älteren Ausführung der Edelgasionenquelle wurde coaxial zur neuen eine thermionische  $\text{Na}^+$ -Quelle der Firma Spectra-Mat eingebaut. Bei ohmscher Heizung des Heizelementes auf  $1300 - 1400 \text{ K}$  emittiert der mit einem natriumoxidhaltigen Aluminiumsilicat ( $m\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot n\text{SiO}_2$ ) imprägnierte poröse Wolframemitter die  $\text{Na}^+$ -Ionen. Vor dem Einbau wurde die  $\text{Na}^+$ -Quelle mit Hilfe eines Versuchsaufbaus getestet. Es ergab sich ein exponentieller Anstieg der Ionenausbeute mit dem Heizstrom, der in Abb. 2.3 dargestellt ist. Das Potential der Quelle  $U_Q$  bestimmt die Ionenenergie, wobei der Emitter zur Erzeugung eines  $\text{Na}^+$ -Strahls auf ein geringfügig höheres Potential gebracht werden muß. Gleichzeitig wird der Heizfadenstrom  $J_H$  der Edelgasionenquelle auf die Hälfte reduziert und die Elektronenbeschleunigungsspannung abgeschaltet.

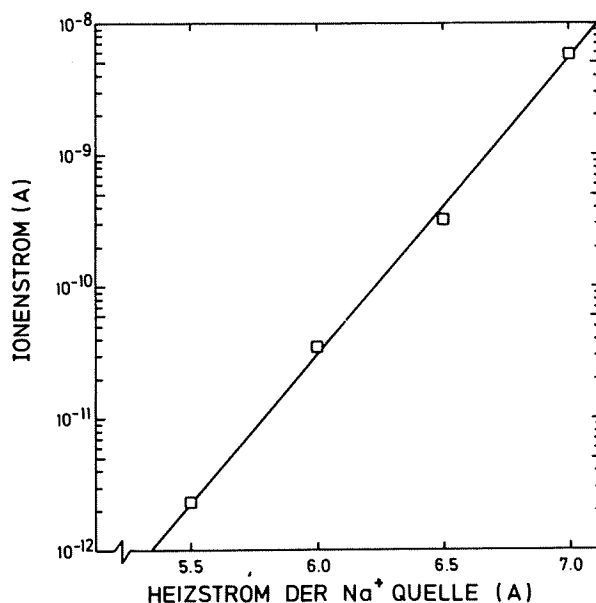


Abb. 2.3: Exponentielle Abhängigkeit der Ionenausbeute vom Heizstrom der  $\text{Na}^+$ -Quelle

Der Weg der Ionen von den Ionenquellen zum Detektor ist in Abb. 2.1 schematisch dargestellt. Die Potentiale an der Extraktorblende, den Ablenkplatten und der Einzellinse 1 werden abgestimmt, um in die Eingangsblende des Magneten den maximalen Ionenstrom einzufädeln. Der 90°-Umlenkmagnet dient als Massenseparator und begrenzt auch die Energiebreite der Ionen gleicher Masse auf 3 %. Der zweite Satz Ablenkplatten, Einzellinse 2 und der Kollimator zentrieren den Strahl auf die Probenmitte. Deren Einstellung wird für ISS-Messungen so optimiert, daß man das maximale Signal  $I$  im Detektor bei kleinstmöglichem Probenstrom  $J_p$  erhält. Diese Einstellung entspricht der höchsten Stromdichte im Akzeptanzfleck des Energieanalysators auf der Probe.

Zur Reinigung der Probe durch Zerstäubung wird Linse 2 so verstellt, daß der Probenstrom  $J_p$  maximal wird. Die 50 % Stromerhöhung gegenüber dem fokussierten Strahl vermag jedoch bei weitem nicht die in diesem Fall erwünschte Strahlverbreiterung wettzumachen, so daß relativ lange Beschußzeiten in Kauf genommen werden müssen. Die Untersuchung der Strahlprofile durch W. Englert /17/ ergaben Halbwertsbreiten von  $(0.9 \pm 0.2)$  mm für den fokussierten und  $(2.5 \pm 0.2)$  mm für den "breit" eingestellten Strahl am Ort der Probe.

In unmittelbarer Nähe der Probe befindet sich ein Viergittergegenfeldanalysator mit einer konzentrisch angeordneten Kanone, die Elektronen mit Energien von 60 - 200 eV liefert. Bringt man die Probe in die Stellung, die einem Einfallswinkel  $\psi$  von 180° bezüglich des Ionenprimärstrahls entspricht, kann durch Beugung langsamer Elektronen (LEED) an der Probe deren reziprokes Oberflächen-gitter als Intensitätsmaxima der Beugung auf dem Leuchtschirm sichtbar gemacht werden.

Im ISS-Betrieb gelangen die Ionen nach der Streuung an der Probe in den Energieanalysator, einem von Grundner /19/ erprobten 90°-Kugellkondensator. Er ist bezüglich der Ioneneinfallrichtung in einem Streuwinkelbereich von 0° - 98° schwenkbar und ermöglicht die Einstellung des Streuwinkels  $\psi$  mit einer Reproduzierbarkeit

von  $< 1/3^\circ$ . Der Nullpunkt läßt sich mit Hilfe des Primärstrahls auf  $\pm 0.5^\circ$  genau eichen. Die Analysatorblenden (siehe Abb. 2.1), deren kreisförmige Öffnungen einen Durchmesser von 1.5 mm haben, legen die obere Grenze der Auflösung des Kugelkondensators  $\Delta E/E = 2\%$  fest, gleichzeitig beschränken sie die Divergenz des Ausfallswinkels auf  $\pm 1.8^\circ$ . Der elliptische Akzeptanzfleck des Analysators auf der Probe, der sich aus der Anordnung ergibt, hat einen kleinen Halbmesser von 2.2 mm (großer Halbmesser:  $2.2 \text{ mm}/\sin(\vartheta - \psi)$ ). Die Teilchen durchlaufen den Kondensator, dessen Mittelbahn auf dem Potential  $U = 0$  liegt, während die Spannungen auf den Kondensatorplatten mit Hilfe einer Rampe so durchgeföhren werden, daß Teilchen der Energie  $E \pm \Delta E/2$  im gewünschten Energiebereich den Analysator passieren können und mit einem Spiraltron (Galileo) im Zählbetrieb nachgewiesen werden.

### 2.1.2 Manipulator

Der neue kühlbare Manipulator (Abb. 2.4) wurde in Zusammenarbeit mit der DFVLR entwickelt. Die feinmechanischen Arbeiten wurden im Hause ausgeführt. Der Manipulator besitzt lineare Verstellmöglichkeiten in x,y-Richtung ( $x \cong$  Primärstrahlrichtung), da die Manipulatorachse, die in z-Richtung verläuft, an zwei senkrecht zueinander beweglichen und übereinander kugelgelagerten Plattformen aufgehängt ist. Zwei Mikrometerschrauben ermöglichen die Einstellung in der x,y-Ebene. In z-Richtung ist der Manipulator nicht verstellbar, jedoch kann die Probenposition in dieser Richtung bei der Montage vorjustiert werden. Die Drehung um die Manipulatorachse entspricht der Einstellung des Ioneneinfallswinkels  $\psi$  auf der Probe. Sie ist von  $0^\circ$  (parallel zur Ioneneinfallrichtung) bis  $180^\circ$  (LEED-Position) nutzbar. Die Einstellung des Winkels  $\psi$  ist mit dem Manipulator auf  $0.5^\circ$  genau möglich. Die Primärstrahlföhierung, der Flansch des Manipulators und das Fenster der Vakuumkammer (Abb. 2.1) wurden bei der Konstruktion der Apparatur so ausgelegt, daß die Einfallrichtung  $\psi = 0^\circ$  parallel zu diesem Fenster verläuft und genau auf das Zentrum der Probe (y-Position = 0) zeigt. Die Abweichung der tatsächlichen Ionenstrahlrichtung gegenüber der Fensterfläche

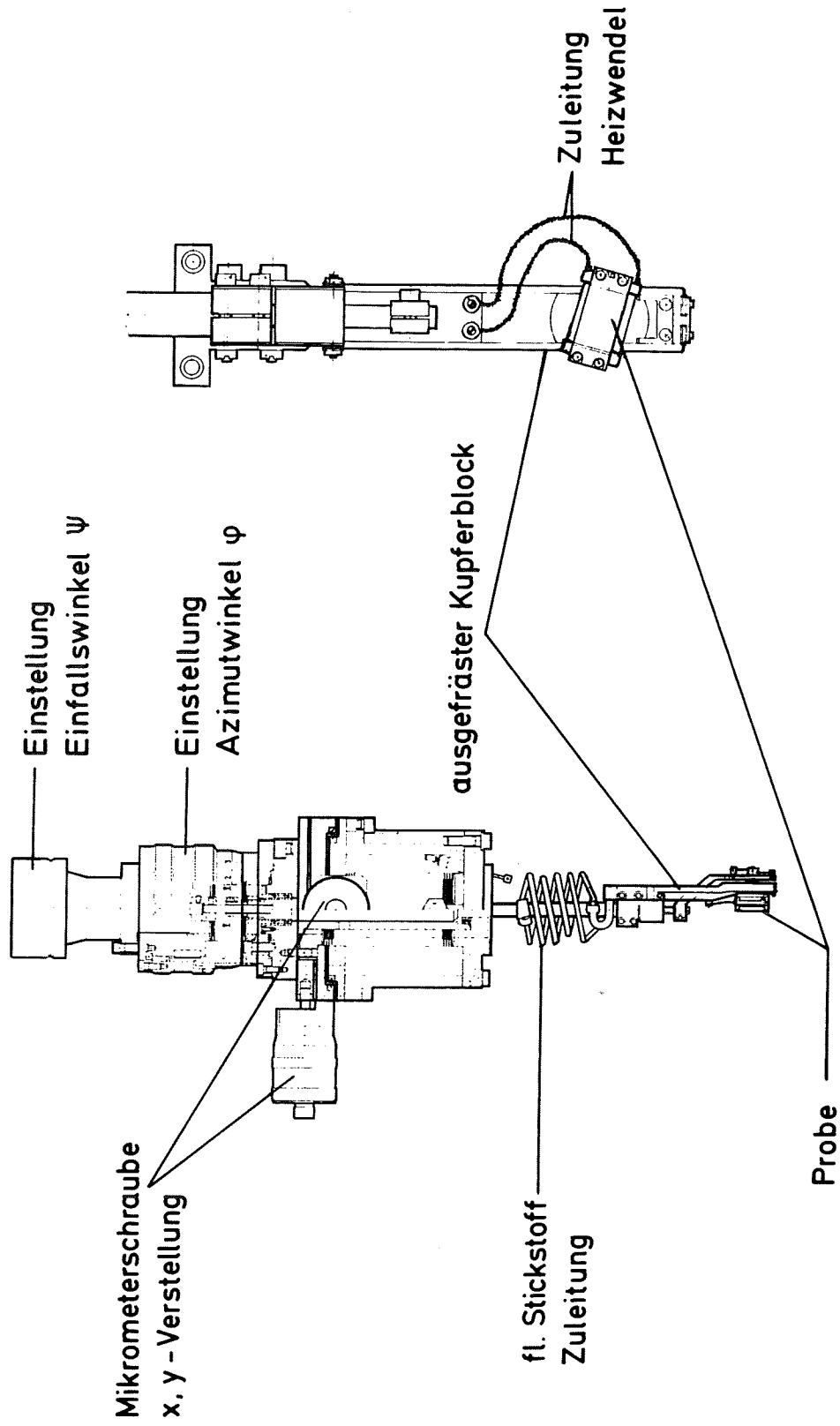


Abb. 2.4: Seitenansicht des Manipulators und Vorderansicht des Probenhalters als Detail

und die Eichungsungenauigkeit der Probe auf diese Fläche durch Autofokussierung ergeben eine Unsicherheit des Nullpunktes in  $\Psi$  von  $\pm 1.5^\circ$ . Die azimutale Winkeleinstellung  $\varphi$  über einen Bereich von  $100^\circ$  wird mittels einer Kupferzahnstange über ein Edelstahlzahnrad auf die vergoldete horizontale Achse der Probenhalterung übertragen. Die Verschiedenartigkeit der verwendeten Materialien stellt die Leichtgängigkeit der sich berührenden Teile sicher. Insbesondere Gold ist als "Schmiermittel" im Vakuum geeignet.

Die quantitative Bestimmung des Azimuts  $\varphi$  wurde durch Photographieren und Ausmessen des Winkels am Photo mit einer Genauigkeit von  $\pm 0.5^\circ$  durchgeführt. LEED-Bildaufnahmen ergaben, daß die  $[110]$ -Richtung innerhalb der Meßgenauigkeit von  $\pm 1^\circ$ , die durch die Winkeltreue des LEED-Bildes auf dem Schirm gegeben ist, mit der makroskopischen kurzen Kante des Kupferkristalls übereinstimmt. Diese Ungenauigkeit ist gleichzeitig der Fehler des Nullpunktes des Winkels .

Die Kühlung des Manipulators erfolgt durch flüssigen Stickstoff, der durch eine flexible Stahlröhre bis zu dem massiven Kupferblock gelangt, in dem die horizontale Achse des Probenhalters gelagert ist. Die Kühlungskanäle im Inneren dieses Kupferblocks wurden aus dem Vollen gefräst und anschließend durch galvanisches Auftragen einer Kupferschicht nach außen vakuumdicht verschlossen. So ist es möglich, flüssigen Stickstoff unter Druck durch die Kanäle hindurchzupressen, da an deren Ende eine zweite Edelstahlröhre das Entweichen des Stickstoffs als Gas oder als überschüssige Flüssigkeit sicherstellt.

Die elektrische Isolation der Probe wird durch Verwendung von Saphir erreicht, der gleichzeitig eine gute Wärmeleitfähigkeit bei niedrigen Temperaturen besitzt, so daß die Kühlwirkung des oben erwähnten Kupferkopfes des Manipulators voll genutzt werden kann ( $T_{\min} \sim 95 \text{ K}$ ). Bei hohen Temperaturen hingegen sorgt die abnehmende Wärmeleitung des Edelsteins für geringe Wärmeverluste der Probe beim Heizen. Die Heizwendel ist unmittelbar hinter der Probe durch eine Fassung aus Agalmatolit, einem Keramikmaterial, elektrisch isoliert befestigt.

Zur Temperaturmessung wurde an der Probe ein Nickelchrom-Nickel-Thermoelement angebracht, dessen zwei Schenkel wahlweise auch zur Probenstrommessung beziehungsweise zum Anlegen einer Spannung (z.B. für die Heizung an die Probe) genutzt werden können.

## 2.2 Sonden, Probe, Messung und Auswertung

### 2.2.1 Die Sonden und die Probe

Wie in Abschnitt 3.1.1 näher beschrieben, enthalten die Mehrfachstreuophänomene die wesentliche Information über die Struktur der Oberfläche und somit auch über deren Störung durch thermische Unordnung. Die Bedeutung der Mehrfachstreuanteile an der gesamten Intensität eines Streuspektrums nimmt mit dem kleinsten Abstand des Ions vom Streuzentrum in der Oberfläche zu. Da dieser kleinste Abstand über das Potential zwischen gestreutem Ion und streuendem Atom mit deren Kernladungszahlen verknüpft ist, kommt der Wahl der zu verwendenden Ionen eine große Bedeutung zu, wenn man die Temperaturabhängigkeit von ISS beobachten möchte.

Bei einer Ionenenergie von 1 keV beträgt der kleinste Abstand  $S_0$  zum streuenden Kupferatom bei einem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  für  $\text{Ne}^+$  ( $Z = 10$ ,  $A = 20$ ) und  $\text{Na}^+$  ( $Z = 11$ ,  $A = 23$ )  $\sim 0.6 \text{ \AA}$ . Dieser Abstand stellt offenbar ein Optimum zur Untersuchung von Temperaturabhängigkeiten bei der Streuung niederenergetischer Ionen an Einkristallen mit der Gitterkonstante  $d \sim 3 \text{ \AA}$  dar, wie man auch an anderen Arbeiten mit unterschiedlichen Parametern sehen kann: Streuwinkel  $\vartheta = 30^\circ$ , Sonden: 6 keV Argon /10/, 10 keV Krypton /11/. Die Verwendung kleinerer Massen bei kleinerer Energie begrenzt jedoch die Schäden an der Oberfläche.

Das unterschiedliche Neutralisationsverhalten (siehe Abschn. 3.2) von Alkali ( $\text{Na}^+$ )- und Edelgasionen ( $\text{Ne}^+$ ) macht den Vergleich der beiden Sonden aus zwei Gründen interessant: Einmal bedarf es bei Natriumionen bei gleicher Signalstärke deutlich geringerer Fluenzen, zum anderen sind bei den beiden Ionensorten zwei unterschiedliche Neutralisationsmechanismen maßgebend.

In der Praxis bedeutet dieses unterschiedliche Neutralisationsverhalten: Die Energiespektren der Alkaliionen sind komplexe Gebilde mit einer breiten Energieverteilung, bei denen sich die Intensitäten verschiedener Streueignisse schwer analysierbar überlappen. Bei den Edelgasen bestehen die Energiespektren aus wenigen Intensitätsmaxima, die aufgrund ihrer Energielage eindeutig bestimmten Streuprozessen zuzuordnen sind, deren Intensität jedoch nicht die Intensitätsverhältnisse dieser Streuprozesse wiedergeben. Die Schwierigkeiten /20/, die die Verwendung jeder Sonde für sich allein mit sich bringt, können durch Vergleich der Ergebnisse beider Ionensorten /17, 21-24/ gelöst werden. Dies ist erforderlich, wenn auf die zusätzliche Information, die in der Mehrfachstreuung steckt, nicht verzichtet werden kann.

Als Probe erschien die (110)-Fläche des kubischen flächenzentrierten Kupferkristalls, wie sie in Abb. 2.5 dargestellt ist, besonders geeignet. Zum einen ist es möglich, bei einer Volumen-Debyetemperatur  $\theta_D = 325$  K bei den gegebenen apparativen Möglichkeiten einen Temperaturbereich von  $1/3 \theta_D \lesssim T \lesssim 2 \theta_D$  zu überstreichen, zum anderen

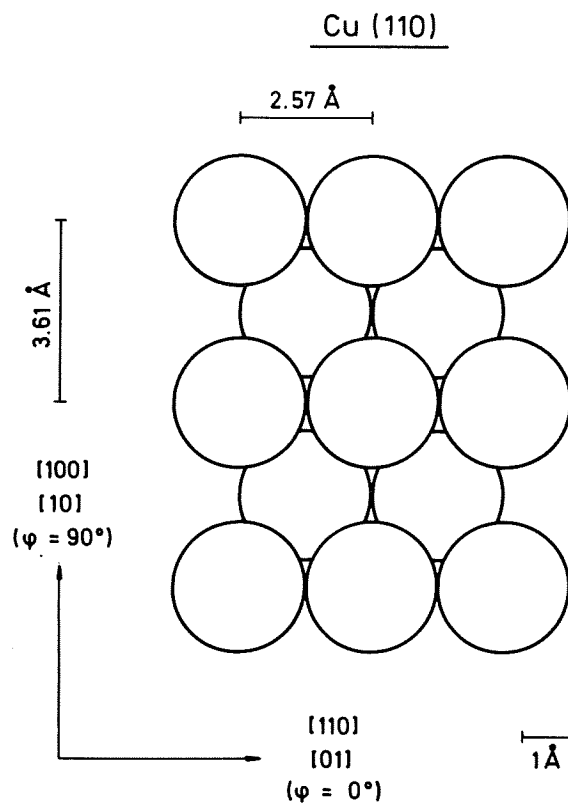


Abb. 2.5: (110)-Fläche des k.f.z.-Kristalls Kupfer

ermöglicht die starke Asymmetrie dieser Fläche bei Variation des Azimuts  $\varphi$  die unterschiedlichsten Schnitte der Streuebene mit der Oberflächenstruktur. Als edles Metall zeigt Kupfer ( $Z = 29$ ,  $A = 63.5$ ) zusätzlich den Vorteil gegenüber Nickel, daß es unter UHV-Bedingungen sehr leicht sauber zu halten ist.

Abbildung 2.6 verdeutlicht die ISS-Streugeometrie im Verhältnis zur (110)-Oberfläche und definiert den Einfallswinkel  $\Psi$ , den Streuwinkel  $\vartheta$ , den Ausfallswinkel  $(\vartheta - \Psi)$  und den Azimutwinkel  $\varphi$ .

### 2.2.2 Probenpräparation

Die Probe liegt in Form eines handelsüblichen Cu-Einkristalls vor, der die Maße  $20 \times 10 \times 5 \text{ mm}^3$  besitzt. Er war vom Hersteller so geschnitten worden, daß die (110)-Fläche grob mit der makroskopischen Fläche übereinstimmt, die die Maße  $20 \times 10 \text{ mm}^2$  hat. Um diese Übereinstimmung für die experimentellen Anforderungen zu verbessern, wurde die Probe auf eine Halterung aufgeklebt und mit Hilfe von Lauebildern auf ein halbes Grad genau parallel zur (110)-Fläche aus-

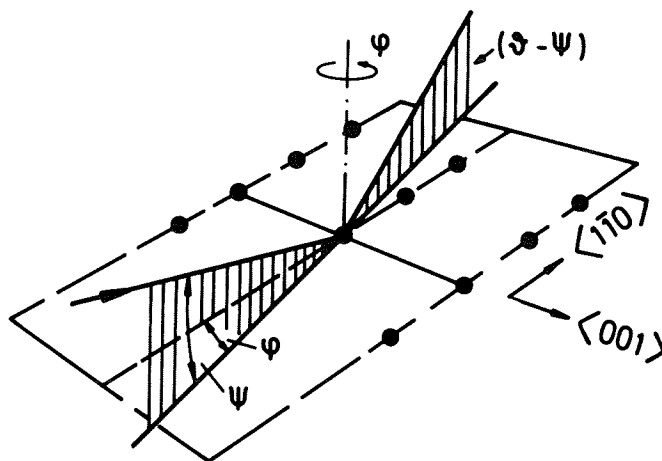


Abb. 2.6: ISS-Streugeometrie auf einer (110)-Oberfläche: Einfallswinkel  $\Psi$ , Streuwinkel im Laborsystem  $\vartheta$ , Ausfallswinkel  $(\vartheta - \Psi)$ , Azimutwinkel  $\varphi$  ( $\varphi = 0^\circ$  in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung)



gerichtet. Anschließend wurde die so orientierte Probe mit Hilfe der Halterung auf einer Polierscheibe mit Diamantpaste geglättet. Der Vorgang wurde mehrmals mit immer kleinerer Diamantstaubkörnung bis zu  $1\ \mu\text{m}$  wiederholt, nicht ohne den Kristall und alle Teile, die mit ihm in Berührung kamen, zwischen den einzelnen Polierschritten sorgfältig zu reinigen. Als letzter Schritt unter atmosphärischem Druck wurde die Orientierung nochmals durch eine Laueaufnahme kontrolliert, um sicherzustellen, daß sich diese durch das Polieren nicht verändert hat.

Nachdem die Probe auf den Manipulator montiert und in die Vakuumkammer eingebaut worden war, wurde sie zusammen mit der restlichen Apparatur bei 450 K ausgeheizt. Danach stellte sich die Aufgabe, Verunreinigungen zu entfernen und Oberflächendefekte auszuheilen. Zur Reinigung der Oberfläche durch Zerstäuben wird die gleiche Edelgasionenquelle benutzt, die auch den Analysestrahl liefert. Jedoch wird zu diesem Zweck ein  $1\ \text{keV}\ \text{Ne}^+$ -Strahl, wie in 2.1.1 beschrieben, auf "breit" gestellt, um eine größere Fläche von Verunreinigungen zu befreien.

Durch Fokussierung des Ionenstrahls konnte der Zustand der Probenoberfläche auf ihre chemische Zusammensetzung und ihre Oberflächengüte jederzeit überprüft werden. Hat man durch Zerstäuben erreicht, daß die Cu-Einfachstreuintensität um einen Faktor 10 aus dem Untergrund hervorrage, so kann man das Verhältnis durch abwechselndes Heizen auf bis zu 650 K und Zerstäuben weiter verbessern, bis man einen Faktor von  $\sim 100$  erreicht. Dieses Ergebnis ist nicht weiter zu verbessern.

Die hervorragende Sauberkeit wird durch ISS-Spektren mit  $\text{He}^+$  als Sonde bestätigt, da hier der Untergrund nur  $\sim 1/1000$  der Kupferintensität ausmacht. Dies zeigt, daß die Probe von leichteren Adsorbaten frei ist. Die richtige Periodizität des Oberflächengitters konnte in diesem Zustand der Probe durch die deutlich sichtbare (110)-Struktur des LEED-Bildes gezeigt werden.

### 2.2.3 Meßablauf

Die Rohdaten liegen bei ISS in Form von Energiespektren vor. Da diese gewöhnlich bei nicht stationärer Temperatur aufgenommen werden mußten, - die Probentemperatur läßt sich nur bei Raumtemperatur und bei ca. 100 K stabil halten - war es von entscheidender Bedeutung, die Zeit zur Aufnahme eines Spektrums so klein wie möglich zu halten, um das Temperaturintervall  $\Delta T$  während der Aufzeichnung der Intensitätsverteilung zu minimieren. Dasselbe gilt in verstärktem Maße für die  $\text{Ne}^+$ -Spektren, bei denen auf geringe Fluenzen zu achten war. Außerdem mußte die Wiederholung des Meßvorgangs schnell und unkompliziert möglich sein, um die Temperaturintervalle zwischen den Messungen beliebig der Abkühlgeschwindigkeit der Probe anpassen zu können. Zu diesem Zweck war die Datenerfassung durch einen einfachen Schreiber am besten geeignet, bei dem die Anzahl der Impulse pro Sekunde des Zählers auf y-Koordinate und die Kondensatorspannung des Energieanalysators auf die x-Koordinate gegeben wurde.

Alle Messungen der Streuintensität in Abhängigkeit von der Temperatur wurden auf folgende Weise durchgeführt:

Nachdem die Probe auf die weiter oben beschriebene Weise präpariert worden war, wurde sie auf ca. 600 K erhitzt, und es wurden während des Abkühlens in geeigneten Zeitintervallen (entsprechend der Größenordnung  $\Delta T \sim 100$  K) Spektren aufgenommen. Unterhalb von 400 K wurde der Manipulator mit flüssigem Stickstoff gekühlt, so daß die Abkühlung bis ca. 100 K mit einer Rate von ungefähr 0.1 K/s fortgesetzt werden konnte. Die Aufnahme von Spektren wurde, wie schon beschrieben, bis zu dieser tiefsten Temperatur fortgesetzt.

### 2.2.4 Auswertung der Daten

Die Energiespektren, deren Erzeugung in Abschnitt 2.2.3 beschrieben ist, wurden so ausgewertet, daß die Höhe der verschiedenen Intensitätsmaxima als Maß für die Streuintensität in einer Umgebung  $\Delta E = c \cdot E$  um die Energielage E als Vergleichsgröße der Streuung her-

angezogen wurde. Die Gründe hierfür sind in Abschnitt 3.1.2 am Beispiel der Einfachstreuung ausgeführt. Um zu einer vom Primärstrom  $J_0$  unabhängigen Größe zu gelangen, wurde die Höhe im Intensitätsmaximum auf diesen normiert. Da der Primärstrom nicht direkt meßbar ist, wird er über den Probenstrom  $J_p$  ermittelt. Der Zusammenhang wird wie folgt hergestellt:

$$J_p = J_0(1 - P R + \gamma) \quad (2.1)$$

P: Überlebenswahrscheinlichkeit als Ion

R: reflektierte Teilchen

$\gamma$ : Sekundärelektronenausbeute.

Betrachtet man die Streuung von Edelgasionen, so kann der Anteil der reflektierten Teilchen im extremsten Fall ( $\Psi = 15^\circ$ ,  $\varphi = 0^\circ$ ) zwar ca. 80 % betragen, da davon aber nur ein sehr geringer Teil (< 1 %) als Ion die Oberfläche verläßt, tragen sie nur in zu vernachlässigendem Umfang zum Probenstrom bei. Durch Anlegen einer Gegenspannung an der Probe konnte Englert /17/  $\gamma$  für 1 keV Ionen zu ca. 10 % ermitteln, wobei sich kaum eine  $\Psi$ -Abhängigkeit ergab. Diese absolute Ungenauigkeit der Probenstrommessung wurde in Kauf genommen, da bei den vorliegenden, stark schwankenden Isolationswiderständen der Probe im  $10^{10} \Omega$ -Bereich ein permanentes Gegenfeld Fehler der gleichen Größenordnung hervorgerufen hätte.

Bei der Streuung von  $\text{Na}^+$ -Ionen ist der Probenstrom deutlich vom Einfallswinkel abhängig, da die Überlebenswahrscheinlichkeit P ca. 78 % beträgt (siehe Abschn. 3.2.2), so daß der Probenstrom  $I_p$  bis zu einem Faktor  $\sim 0.4$  kleiner ausfallen kann als der tatsächliche Primärstrom ( $R = \sim 80\%$  für  $\Psi = 15^\circ$ ,  $\varphi = 0^\circ$ ). Deswegen wurde hier vom Probenstrom bei senkrechtem Einfall ( $\Psi = 90^\circ$ ) ausgegangen, der nur noch einer geringen Korrektur von 1.05 bedarf, um den Primärstrom zu ermitteln. Der hierfür benötigte Wert für  $R = 0.066$  wurde mit Hilfe von MARLOWE ermittelt (siehe Abschn. 3.1.3). In Abb. 2.7 sieht man das Verhältnis des Probenstroms zum Probenstrom senkrecht zur Oberfläche  $I_p(\Psi, \varphi)/I_p(\Psi = 90^\circ)$  für zwei Einfalls- und vier

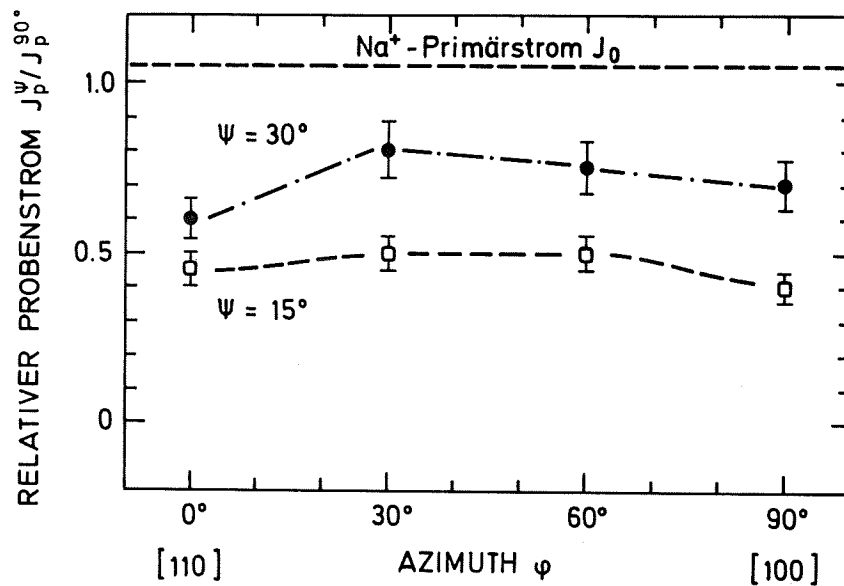


Abb. 2.7: Relativer Probenstrom in Abhängigkeit von Azimut und Einfallswinkel bezogen auf den Probenstrom  $J_p^{90^\circ}$

Azimutwinkel bei 1 keV  $\text{Na}^+$ -Ionen auf Cu(110). Das Verhältnis stellt für diesen Fall im wesentlichen den Anteil der nicht reflektierten Teilchen ( $1-R$ ) dar (siehe Gl. (2.1)). Es wurde zur Eichung der Spektren auf den Primärstrom  $J_0$  benutzt. Der eingezeichnete Primärstrom wurde über Gl. (2.1) berechnet. Die sich ergebende Korrektur ist durch  $P^1)$  und  $R^2)$  mit großen Fehlern behaftet, so daß es sich hierbei nur um eine Abschätzung handeln kann, deren absoluter Fehler nicht größer als die Korrektur selbst anzunehmen ist. Der Sekundärelektroneneinfluß kann mit Hilfe der  $\text{Ne}^+$ -Werte nur abgeschätzt werden, da die geringen Ströme keine Gegenspannungsversuche erlaubten.

- 1)  $P$  entspricht dem Wert für die gemessenen ISS-Spektren; um den wahren Wert zu bekommen, müßte man über alle reflektierten Teilchen in Austrittswinkel und Energie integrieren.
- 2)  $R$  hängt maßgeblich von der Eindringtiefe ab, von der ab das Teilchen als implantiert, als zu  $J_p$  beitragend, zu betrachten ist.

Dinanzi a me non fur cose create  
se non eterne, ed io eterno duro:  
lasciate ogni speranza, voi ch' entrate.

Vor mir war nichts Erschaffenes zu gewahren  
Als Ewiges, und auch ich bin ewiger Dauer.  
Laßt, die ihr eingeht, alle Hoffnung fahren!

/114/

### 3. PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN

#### 3.1 Grundlagen der Ionenstreuung

Die Streuung niederenergetischer Ionen (ISS) dient in ihrer Anwendung als Standardmethode in erster Linie der Analyse der Oberflächenzusammensetzung. Diese Analysenmethode ist extrem oberflächenempfindlich: je nach Masse, chemischer Eigenschaft und Energie der verwendeten Sondenionen bleibt die Empfindlichkeit aufgrund von Neutralisation und Abschattung auf ein oder zwei Atomlagen beschränkt. Als Sonde wird ein Strahl von Edelgas- oder Alkaliionen mit einer Energie von 200 bis 2000 eV auf die Probe gerichtet. Die Probe kann aus einem kristallinen oder amorphen, chemisch reinen Material mit oder ohne Adsorbat, oder auch aus einer chemischen Verbindung bestehen. Vorzugsweise sollte die Probe leitend sein, da sich sonst Schwierigkeiten durch Aufladungseffekte ergeben, die die Potentiale, die zu einer definierten Strahlführung notwendig sind, verändern können. Gegebenenfalls sind der Oberfläche die zu ihrer Neutralisation notwendigen Elektronen durch geeignete Maßnahmen anzubieten.

Die Meßgröße bei ISS ist die winkel- und energieaufgelöste Intensität der an der Oberfläche gestreuten Ionen. Zunächst wird vom Zustandekommen der Winkel- und Energieverteilung die Rede sein.

##### 3.1.1 Kinematik

Wenn man die mechanische Wechselwirkung eines Ions mit einer Festkörperoberfläche betrachtet, so gibt es zwei einfache Modelle, die die zwei Grenzfälle dieser Wechselwirkung beschreiben. In den Grenzen gelten diese Modelle exakt. Es zeigt sich jedoch, daß diese Modelle außerhalb ihres Geltungsbereichs wichtige Aspekte des experimentellen Befundes beschreiben.

Modell I: Das Ion sieht die gesamte Oberfläche des Festkörpers, so daß der Impulsübertrag bei der Streuung von annähernd unendlich vielen Atomen aufgenommen wird. Die Masse dieser Atome ist sehr groß

gegen die Masse des Ions, d.h. der Impulsübertrag kann vernachlässigt werden. Wir erhalten Reflektion im Sinne der klassischen Mechanik und Optik: Einfallswinkel ist gleich Austrittswinkel, die Energie des Ions bleibt erhalten. Dieser Fall ist gegeben, wenn die Wellenlänge  $\lambda_{iz} = 2\pi/k$ , die zum Impuls  $p_z = \hbar k$  des Ions senkrecht zur Oberfläche gehört, groß ist gegen den Gitterabstand  $d$  der Oberflächenatome. (Beispiel:  $H^+$ ,  $\lambda = 10 \text{ \AA} \Rightarrow v \cong 4 \times 10^4 \text{ cm/s}$  oder  $E \cong 0.001 \text{ eV}$ .) In die Überlegung geht nur die Senkrechtkomponente des Impulses ein, da nur er während der Wechselwirkung verändert wird, also nach dem Stoß Informationen über die Oberfläche erhalten kann. Diesen Sachverhalt kennt man aus der Optik, wo von einem Gitter, für dessen Konstante  $Z \gg \lambda$  gilt, bei streifendem Lichteinfall ein Beugungsbild beobachtet werden kann, das bei senkrechtem Lichteinfall durch die Wellenlänge  $\lambda'_z = \lambda / \cos \theta$  ( $\theta$ : Einfallswinkel zur Normalen) entstehen würde /25/. Dieser Fall tritt jedoch bei ISS nicht auf.

Modell II: Das Ion sieht nur jeweils ein Atom in der Oberfläche. Da die Wechselwirkungszeit ( $\sim 10^{-15} \text{ s}$ ) mit diesem Atom deutlich kürzer ist als die typische Gitterschwingungszeit ( $\sim 10^{-13} \text{ s}$ ), kann man die Streuung des Ions an demselben behandeln wie die an einem freien Massenpunkt. Dieser Grenzfall ist gegeben, wenn die Wellenlänge  $\lambda_{iz} = 2\pi/k$  des gestreuten Ions (Beispiel:  $1 \text{ keV Ne}^+ \Rightarrow v \cong 10^7 \text{ cm/s}$  oder  $\lambda_i \cong 2 \times 10^{-3} \text{ \AA}$ ) klein gegen den Gitterabstand der Oberfläche ist. Betrachtet man den Streuprozess als elastischen Zweierstoß zwischen zwei Körpern, wobei die Energie des Probenatoms vor dem Stoß gleich null sei, so liefern Energie- und Impulssatz /26/ für dieses Modell folgende Beziehung für die Energie des Ions nach dem Stoß:

$$E_1 = E_0 F(A, \vartheta) \quad (3.1)$$

$$F(A, \vartheta) = \frac{1}{(1+A)^2} \left[ \cos \vartheta \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \vartheta} \right]^2 \quad (3.2)$$

$A = M_{\text{Probe}}/M_{\text{ION}}$ : Massenverhältnis

$E_0$ : Primärenergie

$\vartheta$ : Streuwinkel.



Gleichung (3.2) enthält den elastischen Energieverlust beim Einfachstoß. Im Gegensatz zu Modell I läßt sich kein bestimmter Streuwinkel bei gegebenem Einfallswinkel angeben, da er nur vom Stoßparameter des Ions bezüglich des Probenatoms abhängt. Der ist jedoch für diesen Grenzfall beliebig, so daß auch der Streuwinkel beliebig ist. Folglich hat man in allen Richtungen des Raumes Streuung zu erwarten. Für den vom Festkörper erfüllten Halbraum bedeutet das, daß es zu weiteren Stößen kommen kann, für die wiederum Gl. (3.1) gilt. So ergibt sich für die Energie nach dem n-ten Stoß folgender Ausdruck:

$$E_n = E_0 \prod_{i=1}^n F(A, \vartheta_i) \quad (3.3)$$

$\vartheta_i$ : i-ter Streuwinkel  
 $F(A, \vartheta_i)$  wie in Gl. (3.2).

Obwohl die in Modell II geforderte Bedingung ( $\lambda_{iz} \ll d$ ) - außer für sehr kleine Einfallswinkel ( $\sim 1^\circ$ ) der Ionen auf die Oberfläche - für ISS erfüllt ist, stellt dieses Modell doch nur eine Näherung dar, da es sich bei der Ion-Atomwechselwirkung nicht um die harter Kugeln handelt, die einem optischen Gitter entsprechen würde, sondern um weitreichende abgeschirmte Coulombpotentiale.

Um die einzelnen Atome der Oberfläche auflösen zu können, muß man zusätzlich fordern, daß die Wechselwirkung entlang der Trajektorie jeweils immer von einem Atom dominiert wird. Im Falle des Einfachstoßes ist diese Forderung erfüllt, wenn das Ion an seinem Umkehrpunkt dem nächsten Atom wesentlich näher ist als dem übernächsten (siehe Abb. 3.1). Es folgt:

$$S_0 \ll d \quad (3.4)$$

$S_0$ : Punkt der nächsten Annäherung an den Streuer  
 $d$ : Abstand der Atome.

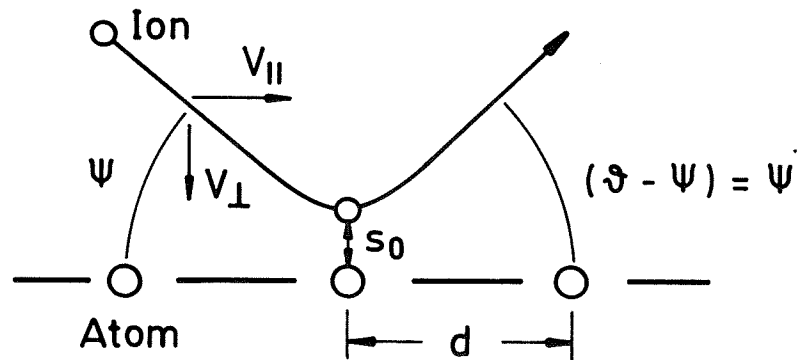


Abb. 3.1: Schematische Darstellung des Einfachstoßes mit Einfallswinkel  $\psi$  gleich Ausfallswinkel  $(\vartheta - \psi)$  ( $v_{||}$ : Geschwindigkeit parallel zur Oberfläche  $v_{\perp}$ : Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche)

Für kleine  $S_0$  ( $< 0.1 \text{ \AA}$ ) und nicht zu kleine Einfallswinkel  $\psi$  ( $> 30^\circ$ ) würde man aufgrund des Coulombpotentials (siehe Abschnitt 3.1.3) erwarten:

$$S_0 \sim 1/v_{\perp}^2$$

$v_{\perp}$ : Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche.

In der Regel ist die Abschirmung nicht zu vernachlässigen, das zeigt Abb. 3.2, in der der Punkt der nächsten Annäherung an das streuende Atom  $S_0$  gegen  $1/v_{f\perp}$  nach dem Stoß aufgetragen ist (siehe Abschn. 3.1.3, /27/). Die vollen Punkte zeigen die Werte für Neon, gestreut an Kupfer bei festen Winkeln  $\vartheta = 60^\circ$ ; es wurde die Energie  $E_0$  variiert. Die offenen Punkte beziehen sich auf 1 keV Natrium gestreut an Kupfer; es wurde der Streuwinkel  $\vartheta$  variiert. Man sieht, wie sich die Abhängigkeit von  $1/v_{f\perp}$  durch die Abschirmung immer mehr abschwächt. Bei Veränderung des Streuwinkels ist der Effekt noch stärker, da sich hier auch die Form der Trajektorien verändert. Man beachte jedoch, daß bei  $E_0 = 1 \text{ keV}$  und

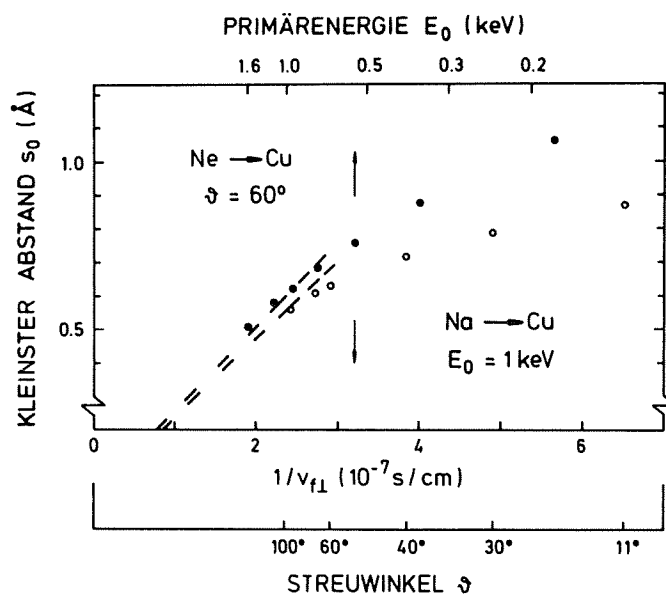


Abb. 3.2: Der kleinste Abstand des Projektils bzw. der Punkt der nächsten Annäherung an das streuende Atom in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche. Für Neonprojekte wurde die Energie, für Natriumprojekte der Streuwinkel variiert. Die Geometrie entspricht Abb. 3.1. Die zwei gestrichelten Geraden gehen durch den Ursprung  $1/v_{\perp} = 0$  (siehe Abschn. 3.1.3 /27/).

$\vartheta = 60^\circ$   $s_0$  in der Größenordnung von  $0.6 \text{ \AA}$  liegt und sich annähernd wie  $1/v_{\perp}$  verhält. Bedingung (3.4) ist nicht besonders gut erfüllt, so daß erhebliche Abweichungen von Modell II bezüglich der gestreuten Intensitätsverteilung zu erwarten sind.

Im Gegensatz dazu ist die Energielage der Einfachstreuintensität durch Modell II ausreichend gut beschrieben, da die Gültigkeit von Gl. (3.1) über einen großen Energie-, Winkel- und Massenbereich experimentell überprüft worden ist. Es wurde eine Übereinstimmung besser als ein Prozent gefunden /1, 3, 28, 29/.

### 3.1.1.1 Beschränkung des Streuwinkels und Mehrfachstreuung

Bei schwereren Ionen wie Neon oder Natrium treten Mehrfachstreuereignisse deutlich in Erscheinung, so daß - wie oben angedeutet - die Beschreibung der spektralen Energielage der Streu-

intensität durch den elastischen Zweierstoß nicht ausreicht. Wichtige Aspekte der Mehrfachstreuung erhält man durch numerische Rechnung am Modell der Streuung von Ionen an einer starren linearen Kette.

E. Taglauer und W. Heiland haben diese Rechnung für 600 eV  $\text{Ne}^+$  Ionen auf einer Ni(110)-Oberfläche vorgenommen /30/. Das einfache Modell sah vor, daß der konstante Abstand  $d$  der Atome in der Kette der gewünschten Azimutrichtung angepaßt werden konnte. Auf diese Kette fallen die Ionen im Winkel  $\psi$  ein und erleiden eine unterschiedliche Anzahl von Zweikörperstößen. Als Wechselwirkungspotential wurde das Born-Mayer-Potential benutzt. Das Ergebnis ist in Abb. 3.3 zu sehen. Die strichpunktierte Linie entspricht dem Energieverlauf der rückgestreuten Ionen nach dem Zweierstoßmodell in Abhängigkeit vom Streuwinkel gemäß Gl. (3.1). Zusätzlich wurde vom Verfasser dieser Verlauf für die Mehrfachstreuung nach Gl. (3.3) für  $n = 2$  und  $\vartheta_1 = \vartheta_2$ , also dem symmetrischen Doppelstoß, eingezeichnet. Aus Gl. (3.3) folgt in diesem Fall:

$$E_2 = E_0 F^2 \left( \frac{\vartheta}{2}, A \right) \quad (3.5)$$

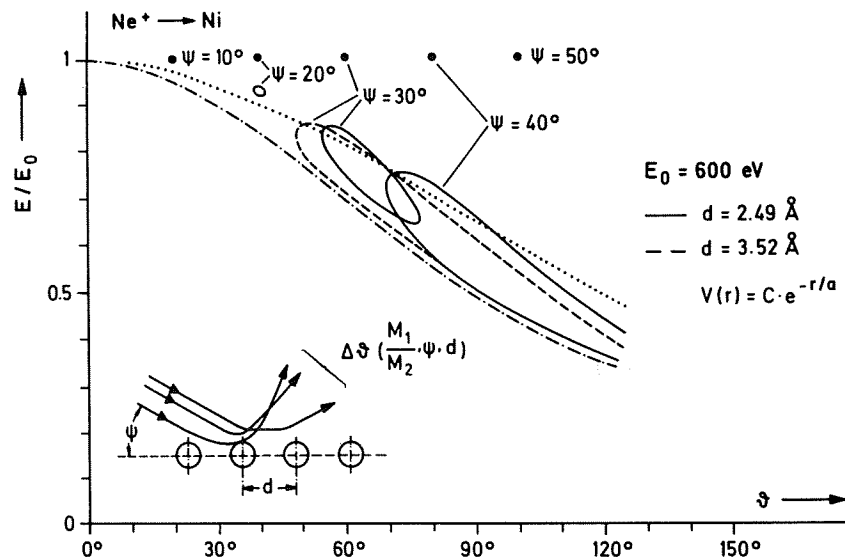


Abb. 3.3: Ergebnis der numerischen Rechnungen zum "Ketteneffekt". Die strichpunktierte Linie entspricht dem einfachen Zweierstoß (Gl. 3.1), die punktierte Linie dem symmetrischen Doppelstoß (Gl. 3.5) und die fetten Punkte entsprechen dem Modell I aus Abschn. 3.1.1. Die verschiedenen Schleifen gelten für verschiedene Einfallswinkel und Atomabstände /30/.

Dieser Ausdruck stellt den oberen Grenzwert für alle  $E_2$  aus Gl. (3.3) mit beliebigen  $\vartheta_1$  und  $\vartheta_2$  bei festem Gesamtstreuwinkel  $\vartheta = \vartheta_1 + \vartheta_2$  dar. Da es einer eingehenden Analyse unter Berücksichtigung der Gitter- und Sondenparameter bedarf, welche  $\vartheta_1/\vartheta_2$ -Kombinationen zugänglich sind, soll dieser Grenzwert zusammen mit  $E_1$  aus Gl. (3.1) in Abb. 3.3 für Modell II aus dem vorangehenden Abschnitt stehen. Außerdem wurde das Ergebnis für Modell I aus demselben Abschnitt hinzugefügt. Dieser einer normalen Spiegelung entsprechende Fall ergibt für jeden Einfallswinkel einen Punkt beim Streuwinkel doppelter Größe und bei  $E_0$ , da kein elastischer Energieverlust auftritt.

Die Rechnung von Taglauer und Heiland ergab eine Reihe von Schleifen, die sie in der Abb. 3.3 für den Einfallswinkel  $\Psi = 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ$  eingezeichnet haben. Man sieht, daß die Kurven des Zweierstoßes und der symmetrischen Doppelstreuung näherungsweise diese Schleifen einhüllen. Im Unterschied zu ihren Einhüllenden zeigen die Schleifen, daß die möglichen Streuwinkel bei festem Einfallswinkel  $\Psi$  beschränkt sind. Unterhalb des kleinsten zugänglichen Streuwinkels werden die gestreuten Ionen vom nachfolgenden Nachbarn des streuenden Atoms in der Kette blockiert. Oberhalb des größten zugänglichen Streuwinkels liegen die zu diesem Streuwinkel gehörenden Stoßparameter im Schatten des linken Nachbarn.

Im Zwischenbereich gibt es zwei Streuklassen bei zwei verschiedenen Energien, denen sich Streueignisse zuordnen lassen, die entweder durch einen oder zwei Stöße dominiert werden, zu denen noch einige Kleinwinkelstöße hinzukommen (Abb. 3.4). Für eine starre Kette ergibt sich also ein Spektrum aus zwei schmalen Linien, wie sie einem einfachen bzw. doppelten Zweierstoß an Einzelatomen entsprechen, deren Energielage jedoch etwas nach höheren Energien verschoben ist. Diese Verschiebung ist in Abhängigkeit vom Punkt der nächsten Annäherung und vom Gitterabstand mehr oder weniger deutlich. Poelsema et al. /8/ sprechen bei diesen zwei Arten von Stoßsequenzen von "quasi-single" (QS) und "quasi-double" (QD) Stößen. Daß sich die zwei Äste der QS- und der QD-Streuung an den Rändern schließen, liegt an der zunehmenden Ungleichheit von Einfalls- und

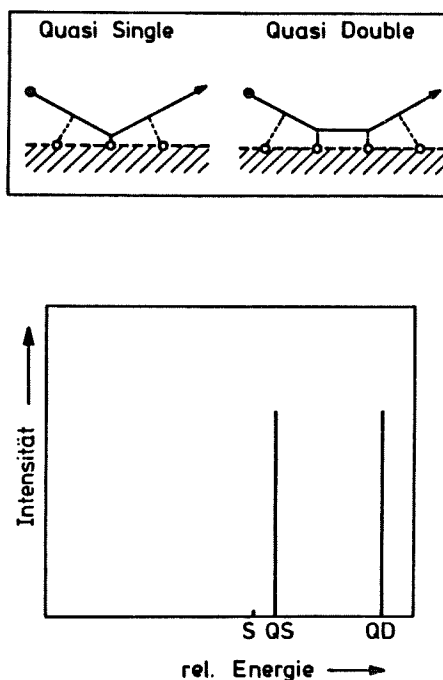


Abb. 3.4: Skizze einer "quasi-single" und einer "quasi-double" Stoßsequenz an einer starren Kette und die dazugehörige Energieverteilung der spiegelreflektierten Teilchen /8/.

Austrittswinkel, die die Einfachstreuung immer "quasier" und die Doppelstreuung immer asymmetrischer ( $\vartheta_i \ll \vartheta_j$ , siehe Gl. 3.3) werden läßt. So entarten beide Streuklassen (QS, QD) bis zur Ununterscheidbarkeit und tragen bei einer mittleren Energie zur Intensität bei.

Schließlich bestätigt Abb. 3.3 die Aussage von Ungleichung (3.4). Wäre sie in vollem Umfang erfüllt, müßten alle Schleifen mit den zwei einhüllenden Kurven zusammenfallen. Diese Übereinstimmung ist bei ca.  $0.7 \text{ \AA}$  für die nächste Annäherung von  $600 \text{ eV Ne}^+$  Ionen an das Nickelatom bei einem Streuwinkel von  $60^\circ$  nicht zu erwarten ( $d_{\text{Nickel}} = 2.5; 3.5 \text{ \AA}$ ). Deutlich ist zu sehen, wie die Schleifen sich mit verkleinerndem Einfallswinkel  $\Psi$  von der Form der Einhüllenden weg entwickeln, um bei sehr kleinem  $\Psi$  mit den Punkten, die für Modell I stehen, zusammenzufallen. Dasselbe ist nach Ungleichung (3.4) für kleinere  $d$  zu erwarten. Die gestrichelte Schleife deutet den entgegengesetzten Trend für größere Gitterabstände ( $d = 3.5 \text{ \AA}$ ) an.

Dieser Sachverhalt konnte von Taglauer und Heiland in derselben Veröffentlichung /30/ experimentell bestätigt werden. Die quantitativen Abweichungen konnten durch Störungen der idealen Kristalloberfläche erklärt werden.

Da man diese Grenzen der zugänglichen Streuparameter auch gerne ohne komplizierte Simulationsrechnungen bestimmen möchte, benutzt man hierzu ein weiteres Modell, den Schattenkegel.

### 3.1.1.2 Der Schattenkegel

Die im vorangehenden Abschnitt erwähnte Abschattung an den Rändern des für einen Einfallswinkel erlaubten Streuwinkelbereichs lassen sich durch das Konzept des Schattenkegels /29/ beschreiben (Abb. 3.5).

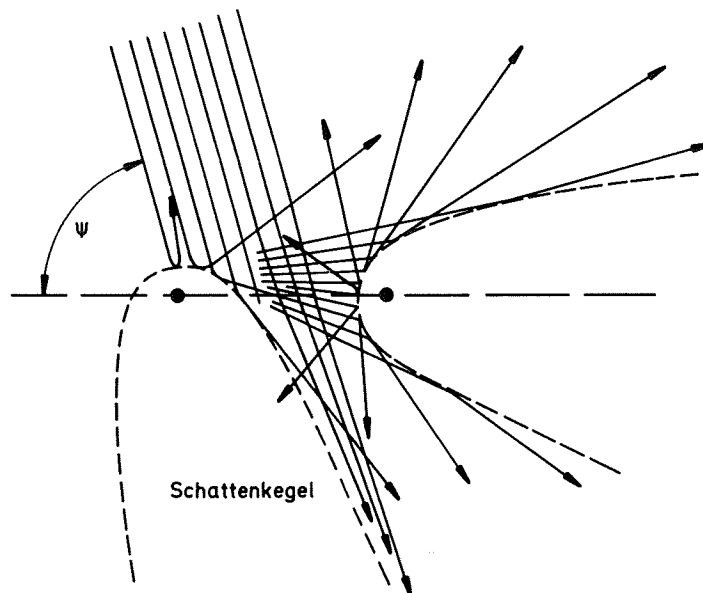


Abb. 3.5: Abschattung durch streuende Oberflächenatome /108/.

Dieser Begriff beschreibt eine dreidimensionale parabolähnliche Fläche, die ihren Scheitel kurz vor dem streuenden Atom hat und hinter ihm den gesamten ionenfreien Raum umhüllt. Die Achse dieses rotationssymmetrischen Gebildes verläuft in Richtung der ursprünglichen Einfallsrichtung der Ionen durch das Zentrum des abschattenden Atoms. Zwangsläufig führt die Verdrängung der Ionen aus dem Raum innerhalb des Kegels zu einem erhöhten Ionenfluß außerhalb desselben. Insbesondere gilt dies für den Bereich unmittelbar außerhalb der Kegelfläche, je weiter sie vom Scheitel entfernt ist /29/. Schematisch ist der gesamte Sachverhalt in Abb. 3.6 zusammengefaßt. Die Dimensionen und Form des Schattenkegels werden von der Wechselwirkung zwischen Atom und Projektil bestimmt. In seine Gestalt gehen also das Wechselwirkungspotential der Stoßpartner, deren Massen und deren Relativbewegung ein.

Das Bild des Schattenkegels ist hervorragend dazu geeignet, um zu ermitteln, bei welchem Einfallswinkel die Streuung in einen bestimmten Winkel möglich ist. Liegt in einer starren Atomreihe der Ort

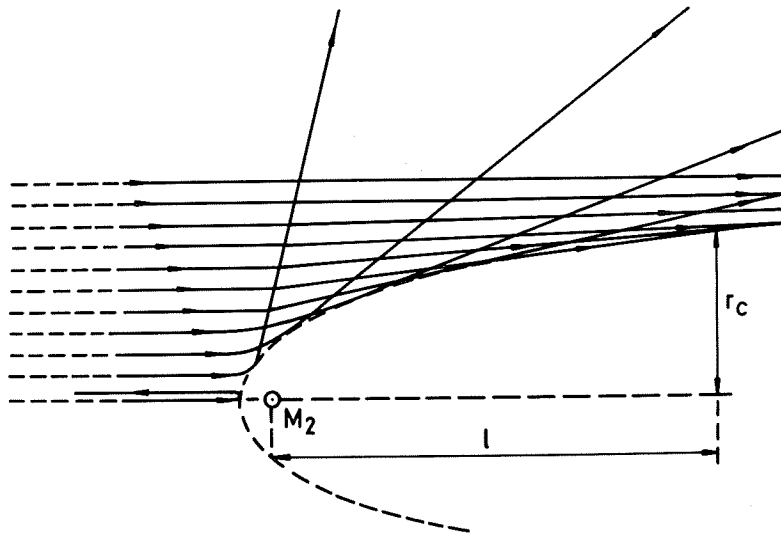


Abb. 3.6: Entstehung des Schattenkegels an einem streuenden Atom der Masse  $M_2$ . Der Schattenkegelradius  $r_c$  gibt die Größe des Schattens im Abstand  $l$  hinter dem Atom an /29/.



der nächsten Annäherung an das streuende Atom genau in der Fläche des Schattenkegels des Nachbaratoms, so ist der Einfallswinkel gleich dem kritischen Winkel  $\psi_c$ . Ist der Einfallswinkel größer als  $\psi_c$ , ist Streuung beobachtbar, sonst nicht. Um die Begrenzung des Streuwinkels durch das Abblocken der schon gestreuten Teilchen ebenfalls zu ermitteln, reicht es, die Bewegungsrichtung des Projektils in Gedanken umzukehren. Unter Berücksichtigung der verringerten Energie des Projektils nach dem Stoß läßt sich auf diese Weise der kritische Austrittswinkel  $(\vartheta-\psi)_c$  zu jedem Streuwinkel  $\vartheta$  bestimmen.

Der Schattenkegel ist ein hilfreiches Konzept zur Oberflächenstrukturanalyse durch ICISS, einer Spezialisierung von ISS mit einem Streuwinkel in der Nähe von  $180^\circ$ . Aono und Mitarbeiter haben durch Bestimmung des kritischen Winkels  $\psi_c$  in verschiedenen Kristallrichtungen von TiC(111) und (001) den Schattenkegelradius von 1 keV  $\text{He}^+$  auf Ti in den entsprechenden unterschiedlichen Abständen vom Streuzentrum ermittelt /31/. Niehus und Comsa haben auf ähnliche Weise den experimentellen Schattenkegel für 2 keV  $\text{Na}^+$  auf Cu(110) mit Hilfe von ICISS ausgemessen /20/. Durch den Vergleich mit Schattenkegeln, die aufgrund verschiedener Potentialansätze (Bohr, Born-Mayer, Thomas-Fermi-Sommerfeld und Thomas-Fermi-Molière; siehe auch Abschn. 3.1.3) gerechnet wurden, kommt Aono zu dem Schluß, daß das Thomas-Fermi-Potential mit einer skalierten Abschirmkonstanten eine gute Beschreibung der Ion-Atom-Wechselwirkung im Energiebereich von ISS darstellt.

Um die Planung und Analyse von Experimenten, für die der Schattenkegel nützlich sein kann, zu unterstützen, hat Oen /32/ einen universellen Ausdruck für den Schattenkegel unter Verwendung des Molière-Streupotentials und der Impulsnäherung berechnet. Er hat gezeigt, daß das Verhältnis des Molière-Schattenkegelradius  $r_c$  zum Coulomb-Schattenkegelradius  $2\sqrt{bT}$  eine Funktion eines einzigen dimensionlosen Parameters  $bI/a^2$  ist. Hier sind  $b = Z_1Z_2e^2/E$ ,  $a$  die Abschirmlänge und  $I$  der Abstand hinter dem Atom. Die folgenden empirischen Ausdrücke geben dieses Verhältnis mit einer Genauigkeit, die besser als 1 % ist, wieder

$$\frac{r_c}{2\sqrt{bl}} = \begin{cases} 1.0 - 0.12\alpha + 0.01\alpha^2 & 0 \leq \alpha \leq 4.5 \\ 0.924 - 0.182 \ln \alpha + 0.0008\alpha & 4.5 \leq \alpha \leq 100 \end{cases} \quad (3.6)$$

wobei  $\alpha = \frac{2\sqrt{bl}}{a}$

und überstreichen einen weiten Bereich von Ion-Atomkombinationen und Ionenenergien. Da diese von Oen /32/ angegebenen Ausdrücke leicht zu programmieren sind, wurden sie benutzt, um den theoretischen Schattenkegel für 1 keV Ne<sup>+</sup> auf Cu zu berechnen (Abb. 3.7).

### 3.1.2 Die Streuintensität der Einfachstreuung

Die Verteilung der Streuintensität in der Energie und im Streuwinkel bedingt durch Einfach- und Mehrfachstreuung sind Gegenstand der vorangehenden Abschnitte gewesen. Hier soll von dem Zustandekommen der Streuintensität im Maximum für die Einfachstreuung (siehe Gl. 3.1) die Rede sein ohne Berücksichtigung der Einflüsse durch Abschattung und Flußüberhöhung.

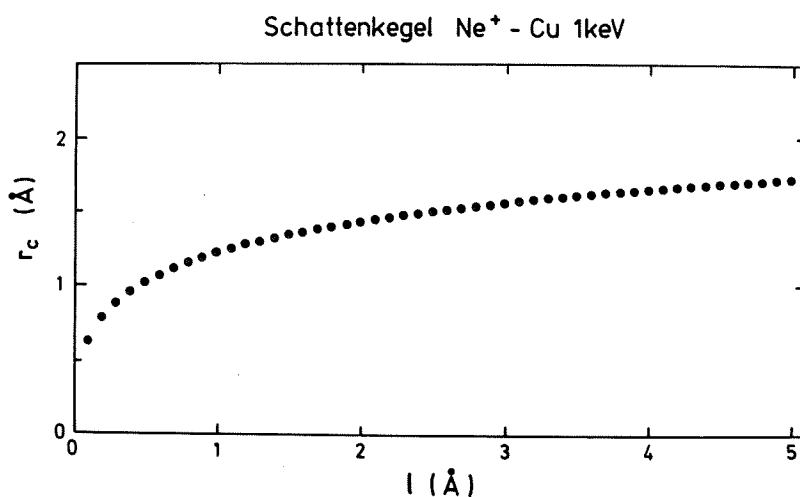


Abb. 3.7: Der Schattenkegel von 1 keV Ne auf Cu nach Oen /32/ (Näherung; siehe Gl. 3.6).

Die Zählrate  $I_i$  in diesem Intensitätsmaximum ist der Oberflächendichte  $n_i$  der zugehörigen Atomsorte  $i$  proportional sowie dem differentiellen Wirkungsquerschnitt  $(d\sigma/d\Omega)_i(E_0, \vartheta)$ , der durch das Streupotential bestimmt ist. Die Wahrscheinlichkeit  $P_i$ , daß das Ion den Stoß als Ion überlebt, ist von den Neutralisationsmechanismen abhängig, denen das Ion auf seiner Trajektorie in der Nähe der Festkörperoberfläche unterworfen ist. Außerdem tragen der Primärstrom  $J_0$ , der Detektor-Raumwinkel  $\Delta\Omega$  und das Produkt  $(T \cdot F)$  zweier apparaturtypischer Größen, die noch genauer diskutiert werden, zur Intensität bei /17/:

$$I_i = T(E_1) F(\Psi, \vartheta) J_0 n_i \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_i (E_0, \vartheta) \Delta\Omega P_i (E_0, \vartheta, \Psi, \varphi) \quad (3.7)$$

Die winkelabhängige Größe  $F(\Psi, \vartheta)$  gibt das Verhältnis zwischen der Primärintensität, die die Probe erreicht, und dem Anteil der gestreuten Intensität, die tatsächlich von der Spektrometerakzeptanz erfaßt wird, wieder. Die genaue Form des zweidimensionalen Strahlprofils ist nicht exakt bestimmbar, so daß eine genaue Angabe über  $F(\Psi, \vartheta)$  im allgemeinen nicht möglich ist. Da jedoch in der Regel der kleine Halbmesser der Akzeptanzellipse wesentlich größer gewählt wird als der der Primärstrahlellipse auf der Probe, kann  $F(\Psi, \vartheta)$  fast immer gleich eins gesetzt werden (siehe Abschn. 2.1.1). Die Apparaturkonstante  $T(E_1)$ , die die Transmission des Spektrometers und Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors enthält, ist ein Maß für die Streueignisse in eine Umgebung  $\Delta E$  um die Energie  $E_1$  nach der Streuung. Bei Verwendung eines elektrostatischen Analysators, für den  $\Delta E/E = \text{const.}$  gilt, ist die Energiebreite  $\Delta E$  der Durchgangsenergie  $E_1$  aus Gl. (3.1) proportional. Das Integral über die experimentelle Energieverteilung bei der Einfachstreuintensität  $E_1$  stellt eine Faltung der physikalischen Energieverteilung  $S(E)$ , die durch die Energieunschärfe des Primärstrahls und die Unschärfe des Energieverlustes bei der Streuung  $\Delta E_1(\Delta \vartheta)$  hervorgerufen wird, mit der Spektrometerfunktion der Breite  $\Delta E(E_1)$  dar.

Unter der Voraussetzung, daß die Breite der experimentellen Verteilung im wesentlichen durch  $S(E)$  bestimmt wird, ist sowohl die maximale experimentelle Intensität bei der Energie  $E_1$ , wie auch das

Integral über die experimentelle Verteilung der Spektrometerrauflösung  $\Delta E(E_1)$  proportional. Daraus folgt, daß im allgemeinen weder das Integral über die gemessene Verteilung noch dessen Maximum ein gutes Maß für die Streuintensität darstellen. Hat jedoch  $S(E)$  wie bei der Apparatur SORBAS eine Breite, die linear von  $E_0$  (bzw.  $E_1$ ) abhängt, so geben die Maxima dieser experimentellen Verteilung bei festem Streuwinkel  $\vartheta$  und festen Projektil- und Probenmassen  $m_i, m_p$  die richtigen Streuintensitätsverhältnisse wieder, da das mit der Energie größer werdende Spektrometerfenster aus der im gleichen Maße breiter werdenden Intensitätsverteilung  $S(E)$  immer den gleichen Teil um die Energie  $E_1$  herauschneidet.

Für alle in dieser Arbeit verwendeten Messungen sind die oben aufgeführten Bedingungen erfüllt. Deswegen wurde die Höhe der Intensitätsmaxima verglichen. Die Integrale über die experimentellen Verteilungen hingegen sind zusätzlich mit der Breite des Spektrometers  $\Delta E(E_1)$  gewichtet und wären deswegen für einen direkten Vergleich ungeeignet.

### 3.1.3 Potentiale und Rechenprogramme

Im Verlauf dieser Arbeit wurde ein Rechenprogramm benutzt, um entweder Größen wie die Energie nach der Streuung  $E_1$  in einen gegebenen Winkel  $\vartheta$ , den Streuquerschnitt  $d\sigma/d\Omega$ , den Stoßparameter  $p$  oder den Punkt der nächsten Annäherung  $S_0$  für diesen Winkel zu berechnen /27/. Darüber hinaus kamen Simulationsprogramme zur Anwendung, die für eine Streuanordnung Auskunft über die sich ergebenden Energieverteilungen und die relative Intensität der verschiedenen Spektren ohne Berücksichtigung der Neutralisationseinflüsse geben können.

Allen Rechnungen ist gemeinsam, daß der Stoß von zwei Teilchen im Laborsystem (LS) auf die klassische Streuung eines Teilchens an einem beliebigen Zentralfeld  $V(r)$  im Schwerpunktsystem (SS) zurückgeführt wird /26/. Die Trajektorien im LS werden hierbei durch ihre Asymptoten genähert.

Zur Durchführung der Rechnungen werden außer den experimentellen Parametern wie Primärenergie  $E_0$ , Streuwinkel  $\vartheta$  sowie Massen von Projektil und Probe noch die Angabe des zentralen Streupotentials  $V(r)$  benötigt. Ein abgeschirmtes Coulombpotential beschreibt die Wechselwirkung des Ions mit dem Probenatom. Die allgemeine Potentialform lautet:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \frac{1}{(r/a)} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (3.8)$$

$Z_1, Z_2$  stehen für die Kernladungszahlen von Projektil und Probe,  $\phi(r/a)$  für eine Abschirmfunktion und  $a$  für die Abschirmlänge. Für zwei verschiedene Atomsorten folgt für  $a$  nach Firsov /33/

$$a_F [\text{Å}] = 0.468(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^{-3/2} \quad (3.9)$$

Die Abschirmfunktion  $\Phi(x)$  beruht auf der Vorstellung, daß die Ladung der Kerne durch die sie umgebenden Elektronen abgeschirmt wird (Thomas-Fermi-Modell). Unter Verwendung der analytischen Abschirmfunktion nach Molière /34/ führt dieser Ansatz auf das häufig verwendete Thomas-Fermi-Molière-Potential (TFM), das aufgrund der Interpolation verschiedener Ansätze für Stoßparameter unter  $1 \text{ Å}$  eine besonders realistische Wiedergabe der Wechselwirkung erwarten läßt:

$$\Phi_{TFM}(x) = 0.35 e^{-0.3x} + 0.55 e^{-1.2x} + 0.10 e^{-6.0x} \quad (3.10)$$

Dieses Potential findet in dieser Arbeit bei allen Berechnungen von Streugrößen sowie Simulationsrechnungen Anwendung, da sich dessen Leistungsfähigkeit für das Verständnis von ISS in zahlreichen Arbeiten erwiesen hat /7, 17, 21, 31, 35/ (siehe auch Abschnitt 3.1.1.2).

Für Stoßparameter  $> 1 \text{ Å}$  stellt das von der Coulombpotentialform abweichende Born-Mayer-Potential eine Beschreibung des Wechselwirkungspotentials  $V(r)$  dar:

$$V(r) = A \exp(-r/a) \quad (3.11)$$

Dieses Potential fand in dem Modell, das die Mehrfachstreuereffekte von ISS anhand einer linearen Atomkette simuliert, aus Zitat /30/ in Abschnitt 3.1.1.1 Anwendung. Die Potentialparameter C und a wurden von den Autoren von Abrahamson /36/ übernommen, sie benutzten  $C = 6436.3 \text{ eV}$ ,  $a = 0.27223 \text{ \AA}$ .

Ausgehend vom Kettenmodell war zur Simulation von Streuintensitäten die Erweiterung auf dreidimensionale Trajektorien unerlässlich. Das Monte-Carlo-Programm MARLOWE /37/ simuliert den Festkörper einschließlich thermischer Schwingungen und berücksichtigt Apparaturdaten wie Analysatorauflösung und Winkelunschärfe, sowie elektronische Energieverluste /38/. Die zuverlässige Berechnung von ISS-Spektren mit MARLOWE wird durch den enormen Zeitaufwand für statistisch gesicherte Daten sowie durch aufwendige Trajektorienselektion erschwert. Im Vergleich dazu bietet das hier im Rahmen einer Zusammenarbeit mit D.P. Jackson /35/ verwendete Monte-Carlo-Programm ARGUS Vorteile. Es verwendet das TFM-Streupotential und weist alle oben aufgeführten Eigenschaften auf. Ein besonderer Vorzug ist seine Schnelligkeit, die auf extremer Rechenökonomie beruht und die Verwendung von  $10^6$  Primärteilchen ermöglicht, die so auch bei geringer Streuintensität noch zuverlässige Streuspektren liefern. Darüber hinaus ermöglicht es dieses Programm, die Streuintensität, die an den ersten zwei Atomlagen entsteht, in Trajektorienklassen einzuteilen, so daß Mehrfachstreuung, Fokussierungseffekte und Neutralisationsmechanismen einer genaueren Analyse unterzogen werden können /17/.

### 3.2 Der Ladungszustand gestreuter Ionen

Edelgase und Alkalimetalle unterscheiden sich grundlegend in ihren Ionisierungsenergien. Experimentell spiegelt sich dieser Sachverhalt in der Überlebenswahrscheinlichkeit P der einfach positiv geladenen Ionen von vergleichbarer Kernladung und Masse der beiden Spezies nach der Streuung an der Oberfläche wider. Während die Überlebenswahrscheinlichkeit der Alkaliionen von der Trajektorie unabhängig ist - dieser Sachverhalt äußert sich sowohl in der Unabhängigkeit

von P von der energetischen Lage der rückgestreuten Ionen innerhalb eines Energiespektrums, als auch in der Unabhängigkeit von P vom Azimutwinkel  $\theta$ , zeigt sich bei Edelgasionen eine starke Abhängigkeit von P von der Flugbahn relativ zur Oberflächenstruktur. Vergleicht man die Überlebenswahrscheinlichkeit bezüglich der Einfachstreuung, so ergeben sich je nach Streukonfiguration, Primärenergie und Stoßpartner für die Alkaliionen Werte von 60 % bis 100 %, für die Edelgasionen jedoch nur von 1 % bis 10 %.

Dieser Umstand wurde von mehreren Autoren sowohl bei  $\text{Li}^+$  und  $\text{He}^+$  gestreut an Ni(110) (sauber und mit 0 Adsorption) /21, 24/, als auch im Vergleich von  $\text{Na}^+$  und  $\text{Ne}^+$  gestreut an Cu(100) /39, 40/ eingehend untersucht. Diese gravierenden Unterschiede lassen darauf schließen, daß der für Edelgasionen maßgebliche Neutralisationsmechanismus grundsätzlich verschieden von dem der Alkaliionen ist /41, 42/.

Die Ladungsaustauschprozesse, die zwischen einer Metalloberfläche und einem Ion bzw. Atom in ihrer Nähe möglich sind, sind in Abb. 3.8 zusammengefaßt /17/. Ist die effektive Ionisierungsenergie  $E_i^e$  des Projektils, die bei der Neutralisierung frei wird, größer als die Austrittsarbeit  $\phi$  ( $2\phi$  bezogen auf die Ionisierungsenergie  $E_i$ ), so kann die gewonnene Energie an ein Augerelektron, das das Metall verläßt, abgegeben werden (AN). Befinden sich leere Ionenniveaus im Bereich der Leitungsbandelektronen, so können diese durch Tunneln besetzt werden. Der umgekehrte Prozeß ist natürlich genauso möglich; man spricht hier von Resonanzneutralisation (RN) bzw. Resonanzionisation (RI). Ist der energetische Unterschied von Metallrumpfniveaus und dem Grundzustand des Projektils nur gering, kommt es zu quasiresonanter Neutralisation (qRN). Dieser stark lokalisierte Übergang äußert sich in einer Ionenausbeute, die mit der Ionenenergie oszilliert. Einzelheiten sind der Arbeit über Blei als Probenmaterial von Zartner /43, 44/ und anderen Arbeiten /45, 46, 47/ zu entnehmen.

Betrachtet man die Ionisierungsenergie  $E_i$  für die Edelgase bzw. Alkaliatome und die Austrittsarbeit  $\phi$  für Metalle /42/, so kann

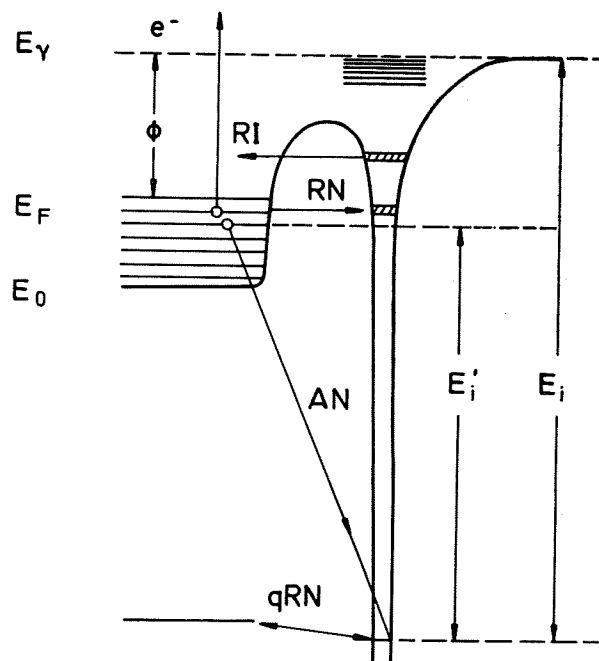


Abb. 3.8: Schema der Ladungsaustauschprozesse zwischen einem Edelgas-Atom oder -Ion und einer Metalloberfläche

- (AN) Augerneutralisation mit Emission eines zweiten Elektrons
- (RN,RI) Resonanz-Neutralisation und -Ionisation durch angeregte Zustände unterhalb und oberhalb der Fermikante
- (qRN) quasiresonante Neutralisation mit einem Rumpfniveau des Oberflächenatoms
- ( $\phi$ ) Austrittsarbeit des Metalls
- ( $E_i$ ) Ionisierungsenergie des Projektils
- ( $E'_i$ ) effektive Ionisierungsenergie

man eine Zuordnung für die oben erwähnten elektronischen Übergänge versuchen. Die in dieser Arbeit verwendete Projektil-Probenkombination Ne ( $E_i = 21.6$  eV), Na ( $E_i = 5.1$  eV) auf Cu ( $\phi = 4.5 - 5.4$  eV) haben diesbezüglich typische Werte. Es ist unschwer zu sehen, daß für Alkaliionen auf Metallen nur Resonanzübergänge in Frage kommen, da die zu besetzenden Niveaus knapp über oder unter der Fermikante



des Metalls liegen. Die Lage des Grundzustands der Edelgase bzgl. des Leitungsbands der Metalle erfüllt die Bedingung für einen Augerübergang, und es könnten höchstens Resonanzübergänge zu angeregten Zuständen in Frage kommen. Abgesehen von Wasserstoff, dessen elektronische Wechselwirkung mit Metallen stark von der schwerer Ionen abweichen mag /48/ und für das es erste Anstrengungen gibt, den Ladungsaustauschmechanismus ausgehend von ersten Prinzipien zu beschreiben /49/, wird der Augerübergang mit den Edelgasionen und der Resonanzübergang mit den Alkaliionen in Verbindung gebracht. Zur Beschreibung der Übergänge bedient man sich semiklassischer Modelle.

### 3.2.1 Die Augerneutralisation

Das erste Augerneutralisationsmodell geht auf Hagstrum zurück /50/. Hagstrum's Überlegungen bezogen sich auf Ionen mit einer Energie kleiner als 100 eV. Es handelt sich um eine eindimensionale Theorie, in der als Raumkoordinate nur die z-Komponente senkrecht zur Oberfläche vorkommt.

Im Matrixelement  $H_{fi}$  für den Übergang treten die Wellenfunktionen besetzter Leitungsbandzustände  $u_M$  und die konjugierte Wellenfunktion  $u_G^*$  des Elektrons im Grundzustand des neutralisierten Atoms auf. Diese Terme haben die Form  $\exp(-\lambda s)$  mit  $\lambda = (2 m \eta / \hbar^2)^{1/2}$ . Für das Atom gilt  $\eta = E_i$ , für das Metall liegt  $\eta$  im Bereich  $\phi < \eta < E_0$ . Für große Abstände ( $s > 0.7 \text{ \AA}$ ) des Projektils von der Metalloberfläche liefert der Exponentialausdruck für den Edelgasgrundzustand kleine Beiträge. Vernachlässigt man diese, kann man die Abhängigkeit des Matrixelements vom Abstand  $s$  von der Oberfläche durch eine Übergangsrates  $R_t(s)$  beschreiben:

$$R_t(s) = A \exp(-as) \quad (3.12)$$

wobei

$$a = 2\lambda_M$$
$$\phi < \frac{\hbar^2 \lambda_M^2}{2m} < E_0$$

A : freie Konstante zur Anpassung

Durch Integration über den gesamten Weg des Projektils erhält man die Wahrscheinlichkeit, daß ein einfallendes Ion die Metalloberfläche ( $s = 0$ ) geladen erreicht, bzw. daß ein auslaufendes Ion den Detektor geladen erreicht:

$$dP_0(s, v_{\perp}) = -P_0(s, v_{\perp})R_t(s)ds \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} P_0^{ein}(0, v_{\perp}) &= P_0^{aus}(\infty, v_{\perp}) = e^{-A/av_{\perp}} \\ &= e^{-v_0/v_{\perp}} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$v_{\perp}$ : Geschwindigkeit des Ions senkrecht zur Oberfläche

$$v_0 = \frac{A}{a} = \int_{\infty}^0 A e^{-as} ds = \int_{\infty}^0 R_t(s) ds \quad (3.15)$$

$R_t(s)$ : Gleichung (3.12)

Der Ausdruck 3.14 ermöglicht die Auswertung experimenteller Ergebnisse durch Variation von  $v_{\perp}$  zur Bestimmung von  $v_0$ . Die Werte für die typische Geschwindigkeit  $v_0$  zeigen jedoch nicht nur eine deutliche Abhängigkeit von der Proben-Ionenkombination, sondern auch von der Streugeometrie /17, 51, 52/. Darüber hinaus finden MacDonald und O'Connor /53, 54/ durch Variation von  $v_{\perp}$  bei konstanter Primärenergie eine Energieabhängigkeit von  $v_0$  für  $\text{He}^+$  und  $\text{Ne}^+$  auf Ag und Ni. Eine solche Abhängigkeit ist auch für das System He-Cu gemessen worden /55/. Zusammen mit der prinzipiellen Unmöglichkeit, die Abhängigkeit der Neutralisation von der Struktur der Oberfläche beschreiben zu können, ist dieser Tatbestand ein deutlicher Hinweis, daß die in diesem Modell gemachten Annahmen für eine allgemeine Beschreibung der Augerneutralisation bei ISS nicht ausreichend sind.

Das Modell von van der Weg und Biermann wurde zur Beschreibung des Ladungszustandes höherenergetischer Ionen  $60 \text{ keV} \leq E_0 \leq 90 \text{ keV}$  herangezogen /56/. In diesem Fall ist der Umkehrpunkt des Projektils so nahe am Kernort, daß die Oberfläche in keinem Fall als homogene Fläche angenommen werden kann und außerdem zusätzliche Reionisation

"beim Stoß" berücksichtigt werden muß. Die hochgeladenen Ionen, die die Oberfläche nach dem Stoß verlassen, sind einem ähnlichen Mechanismus unterworfen, wie von Hagstrum vorgeschlagen, nur, daß hier jedes Oberflächenatom mit einer eigenen Übergangsrate zur Neutralisierung beiträgt. Inspiriert durch dieses Ergebnis, wählten van der Veen und Haak einen interatomaren Ansatz zur Berechnung der Streuung von 300 eV  $\text{Ar}^+$ -Ionen an einem Ni-Einkristall /57/. Hierbei wurde Gl. (3.13) durch (3.16) ersetzt.

$$\frac{d}{dt} \ln P_0(t) = -A \sum_{i=1}^N \exp(-ar_i) \quad (3.16)$$

$r_i = f(t)$ : Abstand zwischen Atom  $i$  und dem Ion  
 $N$ : Zahl der Oberflächenatome .

Kishinevsky et al. wandten dieses interatomare Modell an, um die Überlebenswahrscheinlichkeit einfachgeladener Ionen in spezifischen Streurichtungen auszuwerten /58/. Für die Elektronenübergangsrate  $R_t(r)$  benutzten sie jedoch einen Ausdruck, der berücksichtigt, daß bei höheren Energien die gestreuten Ionen nicht nur den äußeren exponentiellen Bereich der Festkörperelektronen durchlaufen:

$$\begin{aligned} R_t(r) &= A_M & r \leq r_a \\ &= A_M \exp[-a(r - r_a)] & r \geq r_a \end{aligned} \quad (3.17)$$

$r$ : Abstand Ion-Oberflächenatom  
 $r_a$ : fester Abstand, der die Gestalt von  $R_t(r)$  festlegt.

Die Überlebenswahrscheinlichkeit der Ionen im Detektor  $P_0(\infty, v)$  läßt sich mit dieser Übergangsrate für das interatomare Modell (Gl. 3.16) wie folgt beschreiben:

$$P_0(\infty, v) = \exp\left(-\frac{B}{v}\right) \quad (3.18)$$

wobei  $B$  von der Übergangsrate  $R_t(r)$  und den verschiedenen kleinsten Abständen von den  $N$  Oberflächenatomen  $r_{0,i}$  ( $i=1\dots N$ ) bzw. der Trajektorie relativ zur Oberflächenstruktur abhängt; ansonsten ist die Struktur der Beziehung mit Gl. (3.14) identisch.

Wie zu erwarten, bestätigen zahlreiche Experimente, daß sowohl das "Kontinuum"-Modell (Gl. 3.13) als auch das interatomare Modell (Gl. 3.16) die gemessene Ionenintensität gleich gut beschreiben, solange die Struktur der Oberfläche nur schwachen Einfluß auf die Neutralisation des Ions hat. In der Regel wird man für jedes Oberflächen-Projektillpaar im einzelnen ermitteln müssen, bei welchen Ein- und Ausfallswinkeln, welchem Azimut und welchen Energien die atomare Struktur der Oberfläche berücksichtigt werden muß /17, 21, 24, 41, 59, 60, 61, 62/.

Eine weitere Frage ist, ob in die Ionenausbeute nach der Streuung die Neutralisation entlang der gesamten Trajektorie eingeht oder ob die Reionisation während des Stoßes dafür sorgt, daß nur die Neutralisation entlang der Austrittstrajektorie den Ladungszustand gestreuter Projektile bestimmt. Für Streuereignisse ohne Reionisation erwartet man eine annähernde Symmetrie der Streuintensität um den Einfallswinkel  $\Psi = \vartheta/2$  bei festem Streuwinkel  $\vartheta$ , bzw. eine starke Abhängigkeit des Ladungszustandes der Projektile nach der Streuung von der Ladung der Primärteilchen. Beides wird für niedrigere Primärenergien gefunden, während bei höheren Energien eine starke Asymmetrie um den Einfallswinkel  $\Psi = \vartheta/2$  gefunden wird und die Ionenausbeute nach dem Stoß von der Ladung der Primärteilchen unabhängig wird /40, 60, 61/. Für das in dieser Arbeit verwendete Projektillpaar  $\text{Ne}^+ - \text{Cu}$  spielt Reionisation bei einem Streuwinkel von  $30^\circ$  unterhalb 6 keV keine Rolle. Oberhalb von 10 keV ist sie allein für den Ladungszustand des Projektils zum Zeitpunkt des Stoßes verantwortlich. Bei Energien zwischen 6-10 keV stellt man einen stetigen Übergang vom einen zum anderen Verhalten fest. Dieser Energiebereich entspricht Werten für den Abstand der nächsten Annäherung beim Stoß von 0.3 bis 0.24 Å. Ähnliche Werte werden auch für andere Systeme angegeben /63, 64/. Dieser Abstand liegt für die in dieser Arbeit vorgestellten Messungen mit ca. 0.6 Å deutlich in einem Bereich, in dem die Neutralisation entlang der gesamten Trajektorie beiträgt. Aus der Gesamtheit der Messungen und Modelle kann man den Schluß ziehen, daß für ISS die Neutralisation der Edelgasionen einem Exponentialgesetz folgt. Welche Gestalt dieses exponentielle Verhalten

genau hat, hängt davon ab, welche Phänomene auf Grund der gewählten Parameter vernachlässigt werden können.

### 3.2.2 Die Resonanzneutralisation

Wie schon erwähnt, liegen die Ionisationsenergien der Alkalimetalle knapp über oder unter den Austrittsarbeiten typischer Metalle /42/. Um die Besetzungswahrscheinlichkeit des Grundniveaus eines an einer Metallprobe gestreuten Alkaliobjekts zu ermitteln, geht man von einem Modell aus, das die statische Elektronenkonfiguration eines im Abstand  $s$  adsorbierten Alkaliions beschreibt /65/. Hierbei ist die Elektronenniveauanhebung durch das Bildkraftpotential des Ions bei Annäherung an die Oberfläche von Bedeutung. Die Verschiebung der Ionisationsenergie ist in erster Näherung gegeben durch  $\Delta E = (3.6/s)$  eV, wobei der Abstand des Projektils von der Oberfläche  $s$  in Å zu nehmen ist. Abbildung 3.9 zeigt die Anhebung um  $\Delta E$  des Valenzniveaus bei Abnahme des Alkali-Metalloberflächenabstands. Genauere Rechnungen sind in /66/ und /67/ durchgeführt worden. Darüber hinaus ist eine Verbreiterung des Niveaus zu beobachten, da eine Übergangsrate  $w(s)$  eine endliche Lebensdauer des Besetzungszustandes bedeutet. Diese vom Oberflächenabstand abhängige Lebensdauer impliziert eine endliche Bandbreite  $\Gamma(s)$  des Valenzniveaus, die durch  $\Gamma(s) = \hbar w(s)$  gegeben ist. Für Abstände in der Größenordnung von 4 Å kann die Übergangsrate durch

$$w(s) = w_0 \exp(-as) \quad (3.19)$$

genähert werden /67/.

Im Gleichgewichtszustand bestimmt die Energielage der Zustandsdichte  $\rho(E, s)$  des Valenzniveaus im Verhältnis zum Leitungsband des Metalls ( $\phi < E < V_0 - \phi$ ) den Besetzungszustand  $n(s)$  des ersteren, wobei das Maximum der lorentzförmigen Zustandsdichte mit der Halbwertsbreite  $\Gamma(s)$  bei  $E_i^! = E_i - \Delta E$  liegt /68/. Die in der Abb. 3.9 schraffierte Fläche berechnet sich also wie folgt /39, 69/:

$$n(s) = \int_{-\phi - E_f}^0 f(E) \rho(E, s) dE \quad (3.20)$$

Die Zustandsdichte der Elektronen im Metall  $f(E)$  ist natürlich eine Funktion der Temperatur. Die Temperaturabhängigkeit von  $n(s)$  ist in /68/ ausgewertet worden. Man erkennt, daß  $n(s)$  für die relevanten Abstände  $s$  ( $\sim 4 \text{ \AA}$ ) unterhalb von 500 K wenig von dem Ergebnis für  $T = 0\text{K}$  abweicht, bei dem sich alle Elektronen im Grundzustand befinden. Deswegen ist es möglich, für diese Temperaturen  $f(E)$  gleich der Fermi-Dirac-Verteilung bei  $T = 0\text{K}$  zu setzen /39, 67, 69/.

Im Falle eines Alkaliions, das sich einer Festkörperoberfläche nähert, um sie wieder zu verlassen, kann der positive Ladungsanteil  $n^+$  nach der Streuung geschrieben werden als /67/

$$\eta^+ = 1 - \int_{s(t=-\infty)}^{s(t=\infty)} n(s)F(s) ds \quad (3.21).$$

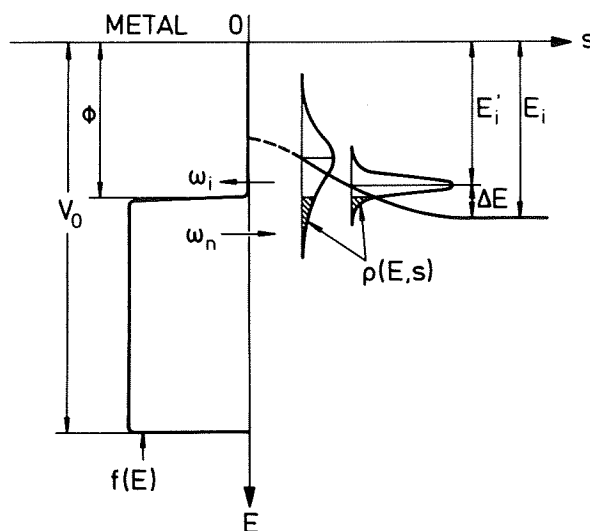


Abb. 3.9: Schematische Darstellung der Resonanzneutralisation und -ionisation für Alkaliionen nach Algra /39, 69/. Übergangsbreitere und bildkraftverschobene Ionenniveaus in Wechselwirkung mit Leitungsbandelektronen. Die schraffierte Fläche ist der Überlapp aus Zustandsdichte  $\rho$  und der Besetzungswahrscheinlichkeit  $f(E)$  und gibt den Anteil der neutralen Teilchen beim Abstand  $s$ ,  $n(s)$ , an (s.a. Text).

wobei  $F(s)$  das Gewicht darstellt, mit dem der Gleichgewichtsbesetzungszustand  $n(s)$  entlang der Trajektorie  $-\infty < s < \infty$  in den Endzustand eingeht. Die Umladungsprozesse finden in der Nähe des Streuzentrums innerhalb von Zeiten der Größenordnung  $10^{-18}$  bis  $10^{-16}$  s statt. Die typische Zeit für den Streuvorgang von  $\sim 10^{-15}$  s ist dagegen langsam, so daß  $F(s)$  bis zu einem gewissen Abstand  $s$  nach dem Stoß vernachlässigbar klein ist. Darauf folgt ein Bereich  $\Delta s^*$ , in dem  $F(s)$  den Hauptbeitrag liefert. Für noch größere Abstände  $s$  wird die Zahl der Übergänge so klein, daß  $F(s)$  wiederum keinen Beitrag mehr liefert. Nähert man die Funktion  $F(s)$  durch die Deltafunktion  $\delta(s-s^*)$  im Abstand  $s^*$ , in dem der Elektronenzustand eingefroren wird, so liefert Gl. 3.21

$$\eta^+ \simeq 1 - n(s^*) \quad (3.22)$$

$n(s)$ : siehe Gl. (3.20)

In der Literatur wird dieser "Einfrierabstand" (freezing distance)  $s^*$  mit  $w(s^*) = a \cdot v_{\perp}$  angegeben /67/, wobei  $v_{\perp}$  die Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche nach dem Stoß bezeichnet. Daraus ergibt sich mit Gl. 3.19 für den Abstand  $s^*$ :

$$s^*(v_{\perp}) = \frac{1}{a} \ln \frac{w_0}{av_{\perp}} \quad (3.23)$$

Dieser Ausdruck stellt also einen Zusammenhang her zwischen der Projektilgeschwindigkeit  $v_{\perp}$ , der Übergangsrate  $w_0 e^{-as}$  und dem Abstand  $s^*$ , von dem ab die gestreuten Teilchen ihren Ladungszustand bis zu unendlich großen Abständen beibehalten. Dieser Ladungszustand läßt sich also mit Hilfe von  $s^*$  direkt auf den Ladungszustand des statischen Falls aus Gl. 3.21 zurückführen.

Die Gültigkeit dieser Theorie, die ursprünglich für niedrigere Energien entwickelt worden war, konnte von A.J. Algra et al. /39, 69/ auch für Alkaliionen mit einigen keV nachgewiesen werden, indem er den Ionenanteil bei der Streuung von  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$  und  $\text{K}^+$  mit Primärenergien im Bereich von 1,5 bis 10 keV an Cu(100) gemessen hat. In ähnlicher Weise hat W. Englert gezeigt, daß diese Theorie mit den vergleichenden Messungen von 600 eV  $\text{He}^+$  und  $\text{Li}^+$  auf Ni(110) (sauber und 0-bedeckt) und den dazugehörigen numerischen Rechnungen konsistent ist /17, 21/.

Folgt man der oben skizzierten Theorie, so läßt sich die Überlebenswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Na}^+}$  für 1 keV  $\text{Na}^+$  gestreut an Kupfer bei einem Ausfallswinkel ( $\vartheta - \Psi$ ) von  $30^\circ$  wie folgt ermitteln. Nach dem Modell oben hängt der Ladungszustand nur von der senkrechten Komponente  $v_{\perp}$  der Geschwindigkeit ab, mit der das Projektil die Oberfläche verläßt. In die Geometrie von A.J. Algra übertragen, entspricht  $v_{\perp}$  in dieser Arbeit seiner Messung von 2 - 3 keV  $\text{Na}^+ \rightarrow \text{Cu}(100)$  für einen Ausfallswinkel von  $15^\circ / 39, 69^\circ$ , für die ein  $\eta^+$  von  $(78 \pm 1) \%$  angegeben wird. Eine Überlebenswahrscheinlichkeit von  $P_{\text{Na}} \simeq 78 \%$  wird demzufolge im weiteren Verlauf der Arbeit für die hier verwendete Streugeometrie und die Cu(110)-Fläche übernommen.

### 3.3 Mechanische und thermische Eigenschaften der Kristalle

Um die mechanischen und thermischen Eigenschaften von Kristalloberflächen zu beschreiben, geht man von den gleichen Modellen aus wie sie auch für die Kristalle im allgemeinen Verwendung finden. Da die im Volumen herrschenden periodischen Randbedingungen in der Grenzfläche zwischen Kristall und Vakuum nicht gelten, sind hier geeignete Veränderungen vorzunehmen. Zunächst soll von diesen Kristalleigenschaften im allgemeinen die Rede sein. Im Prinzip lassen sie sich exakt im Rahmen der Gittertheorie lösen /70/. Diese Theorie führt auf ein System gekoppelter linearer Differentialgleichungen zweiten Grades. Die Dimension dieses Systems ist durch die Anzahl  $N$  der Atome im Gitter und die Raumkoordinaten zu  $3N$  bestimmt.

Der Exponentialansatz für eine ebene dreidimensionale Welle führt auf die Säkulargleichung für die Berechnung der drei Frequenzen  $\omega_s(\vec{k})$  für einen Wellenvektor  $\vec{k}$ :

$$|t_{ii} - \delta_{ii} M \omega^2| = 0 \quad (3.24)$$

wobei: 
$$t_{ii}(\vec{k}) = \sum_{\vec{h}} \Phi_{ii}^{\vec{h}} \exp(-i\vec{k}\vec{R}^{\vec{h}}) \quad (3.25)$$

( $t_{ij}$  ist eine reelle symmetrische Matrix).



In der Praxis müssen unter Annahme von Federkräften zwischen den Atomen für ein Periodizitätsvolumen von etwa 1000 bis 10000 Teilchen die  $\vec{k}$ -Werte bestimmt werden und für diese die Säkulärgleichung numerisch gelöst werden. Da die Dichte der Eigenschwingungen im  $k$ -Raum konstant ist, läßt sich auf diese Weise auch die Zustandsdichte  $Z(\omega)$  bestimmen.

In der quantenmechanischen Beschreibung werden den Koordinaten und Impulsen der einzelnen Atome entsprechende Operatoren zugeordnet. Der Hamilton-Operator von  $3N$  unabhängigen linearen Oszillatoren liefert für den Kristall folgende Energieeigenwerte:

$$E_{\dots N_s^{\vec{k}} \dots} = \sum_{\vec{k}, s} \hbar \omega_s(\vec{k}) \left( N_s^{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.26)$$

Bis auf den Summand  $1/2$  entspricht Gl. (3.26) dem klassischen Ergebnis. Er berücksichtigt die Nullpunktsenergie, die vergleichbar mit der thermischen Energie  $3NkT$  bei Zimmertemperatur ist. Dasselbe gilt auch für den Mittelwert des Amplitudenquadrats der Schwingung bei  $T = 0K$ , verglichen mit dem bei Zimmertemperatur, da zwischen dem Erwartungswert  $(\alpha_s^{\vec{k}})^2$  des Amplitudenquadrats und der Energie des Oszillators folgender Zusammenhang besteht:

$$\overline{E_{\text{Pot}}} = \frac{1}{2} \epsilon(\omega_s(\vec{k}), T)$$

$\epsilon(\omega_s, T)$ : Energie des Oszillators

$$\frac{M}{2} \omega_s^2(\vec{k}) \overline{(\alpha_s^{\vec{k}})^2} = \frac{1}{2} \epsilon(\omega_s(\vec{k}), T)$$

$$\overline{(\alpha_s^{\vec{k}})^2} = \frac{\epsilon(\omega_s(\vec{k}), T)}{M \omega_s^2(\vec{k})} \quad (3.27)$$

Ferner weiß man aus der Quantenmechanik, daß die thermische Verteilung der Amplitude eines einzelnen Oszillators eine Gauss-Verteilung ist.

$$w(\alpha_s^{\vec{k}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\alpha_s^{\vec{k}})^2}} \exp \left[ -(\alpha_s^{\vec{k}})^2 / 2 (\alpha_s^{\vec{k}})^2 \right] \quad (3.28)$$

$w(\alpha_s^{\vec{k}})$  ist also die Wahrscheinlichkeit, die Amplitude  $\alpha_s^{\vec{k}}$  bei einem mittleren Amplitudenquadrat  $(\alpha_s^{\vec{k}})^2$  zu finden.

Wegen des sehr großen numerischen Aufwands, der zur Lösung der Säkulargleichung (3.24) nötig ist, geht man häufig von der Gittertheorie zur Elastizitätstheorie über. Diese Beschreibung des Kristalls als Kontinuum mit konstanter Massendichte  $\rho$  im unverzerrten Gleichgewichtszustand ist gerechtfertigt, wenn Verrückungen benachbarter Gitterbausteine nahezu gleich sind, d.h. die Wellenlänge groß gegen den Gitterabstand ist. Es ist also eine Näherung für kleine Frequenzen. In einem elastisch isotropen Körper muß der elastische Tensor  $C$  gegen jede Drehung invariant sein, so daß er sich auf zwei unabhängige elastische Konstanten  $c_{11}$ ,  $c_{44}$  reduziert, wobei  $c_{11} = c_{12} + 2c_{44}$  gilt. Die Schallgeschwindigkeiten longitudinaler ( $c_l$ ) und transversaler Wellen ( $c_t$ ) werden in /70/ angegeben.

$$\begin{aligned} c_l &= \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}} \\ c_t &= \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Das elastische Spektrum kann man wie bei den Gitterschwingungen berechnen. Legt man ein würfelförmiges Periodizitätsvolumen  $V = L^3$  zugrunde, so werden durch die Forderung der Periode  $L$  in den drei Achsenrichtungen  $\vec{k}$ -Werte ausgesondert

$$k_i = \frac{2\pi}{L} m_i \quad m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.30)$$

Die  $\vec{k}$ -Werte sind im Gegensatz zur Gittertheorie nicht beschränkt. Die Zahl der nach der Bedingung (3.30) möglichen  $\vec{k}$ -Werte in einer Kugelschale  $(k, k + dk)$  ist  $(\frac{L}{2\pi})^3 4\pi k^2 dk$ . Für die longitudinalen Wellen ist  $\omega = c_l k$  für die transversalen  $\omega = c_t k$ . Im ganzen wird also das elastische Spektrum

$$Z_{el}(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left[ \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right] \omega^2 d\omega \quad (3.31)$$

Die Proportionalität des elastischen Spektrums zu  $\omega^2$  gilt auch bei anisotropen Medien, die Proportionalitätskonstante muß aber numerisch berechnet werden.

Die erste Aussage über das Spektrum der Schwingungen eines einfachen festen Körpers stammt von Einstein/70/. Er nahm an, daß im wesentlichen nur eine Frequenz im Spektrum vorkommt. Das Spektrum ist monochromatisch; es enthält nur eine einzige Frequenz  $\omega_E$ :

$$Z_E(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E) \quad (3.32)$$

Obwohl dieser Ansatz sicher nicht richtig ist, kann man doch in manchen Fällen Teile des Spektrums durch einen solchen Einstein-Term näherungsweise beschreiben. Insbesondere läßt sich das Gitterspektrum durch eine Kombination von Einstein- und Debyetermen realistisch darstellen. Der nächste einfache Ansatz für  $Z(\omega)$  stammt von Debye und ist Gegenstand des folgenden Abschnitts.

### 3.3.1 Die quadratische Schwankung im Debye-Modell

Der Ansatz von Debye zur Beschreibung der thermischen Bewegung in einem Festkörper beruht auf folgender Annahme. Aus den elastischen Konstanten kann man die Form des Spektrums bei kleinen Frequenzen bestimmen. Die Zustandsdichte ist dem Quadrat der Frequenz  $\omega^2$  proportional (s. Gl. 3.29). Debye nahm an, daß man das elastische Spektrum auch zu höheren Frequenzen hin näherungsweise extrapolieren kann. Da man aber weiß, daß im ganzen  $3N$  Frequenzen vorhanden

sind, so muß das Spektrum bei der Frequenz  $\omega_D$  abgeschnitten werden, bis zu der die Gesamtzahl der Frequenzen  $3N$  beträgt /70/:

$$Z_D(\omega) = \begin{cases} 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3} & \text{für } 0 \leq \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.33)$$

wobei die Zustandsdichte  $Z_D$  wie oben gefordert der Bedingung genügt:

$$\int_0^{\omega_D} Z_D(\omega) d\omega = 3N \quad (3.34)$$

Zur Verfeinerung der Debye'schen Theorie kann man transversale und longitudinale Wellen getrennt behandeln und jedem Anteil eine eigene Abschneidefrequenz  $\omega_D^l$  und  $\omega_D^t$  so zuordnen, daß in dem einen Zweig des Spektrums gerade  $N$  und im anderen  $2N$  Frequenzen erfaßt werden.

Um Auskunft über den Einfluß der Temperatur auf die Bewegung der einzelnen Atome zu erhalten, geht man zweckmäßigerweise auf die Zerlegung der Verschiebung nach stehenden Wellen zurück. Auf diesem Wege leitet Leibfried im Handbuch der Physik /70/ den Zusammenhang zwischen dem mittleren Schwankungsquadrat  $(\vec{S}^{\vec{h}} - \vec{S}^0)^2$  zwischen zwei beliebigen Atomen im Festkörper und dem mittleren Amplitudenquadrat  $(\alpha_S^{\vec{k}})^2$  eines Oszillators her:

$$\overline{(\vec{S}^{\vec{h}} - \vec{S}^0)^2} = \frac{8}{N} \sum_{k_x > 0} \sum_s \overline{(\alpha_s^{\vec{k}})^2} \sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{R}^{\vec{h}}}{2} \quad (3.35)$$

Setzt man in diesen Ausdruck Gl. (3.27) ein, ersetzt man  $\sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{R}^{\vec{h}}}{2}$  durch  $1/2$  und die Summe durch eine Integration über das Frequenzspektrum  $Z(\omega)$ , so ergibt sich folgende Abschätzung\*:

$$\overline{(\vec{S}^{\vec{h}} - \vec{S}^0)^2} = \frac{2}{MN} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon(\omega, T)}{\omega^2} Z(\omega) d\omega \quad (3.36)$$

\* wegen der Summe nur über  $k_x > 0$  tritt ein weiterer Faktor  $\frac{1}{2}$  auf.

Setzt man hier das Debye'sche Spektrum (Gl. 3.33) ein, so folgt:

$$\overline{(\vec{S}^h - \vec{S}^0)^2} = \frac{18}{M\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \epsilon(\omega, T) d\omega \quad (3.37)$$

In den Grenzen hoher und sehr tiefer Temperaturen bekommt man

$$\overline{(\vec{S}^h - \vec{S}^0)^2} = \begin{cases} \frac{18}{M\omega_D^2} kT & \text{für hohe Temperaturen} \\ \frac{18}{M\omega_D^2} \frac{\hbar\omega_D}{4} = \frac{18}{M\omega_D^2} \frac{k\theta_D}{4} & \text{für } T = 0 \end{cases} \quad (3.38)$$

wobei die Debyetemperatur  $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k}$ .

Dieser Ausdruck stellt den Zusammenhang zwischen der dreidimensionalen Schwankung benachbarter Atome und der Debyetemperatur her. Die einzelnen Komponenten  $\Delta\sigma_x$ ,  $\Delta\sigma_y$ ,  $\Delta\sigma_z$  sind unabhängig und für kubische Gitter gleich. Deswegen gilt

$$\overline{\Delta\sigma_i^2} = \frac{1}{3} \overline{(\vec{S}^h - \vec{S}^0)^2} . \quad (3.39)$$

### 3.3.2 Thermische Bewegung an der Oberfläche

Der Ausdruck für die quadratische Schwankung im Debye-Modell kann formal auch für die Schwingungen an der Oberfläche beibehalten werden, wobei die verschiedenen Debye-Frequenzen  $\omega_{Di}$  bzw. Debye-Temperaturen  $\theta_{Di}$  der einzelnen Komponenten  $\overline{\Delta\sigma_i^2}$  ein Maß für die verschiedenen Federkonstanten an der Oberfläche sind. Die Elastizitätstheorie liefert für ein isotropes kubisches flächenzentriertes (k.f.z.) Gitter unter Vernachlässigung des longitudinalen Anteils folgenden Zusammenhang mit dem isotropen Schubmodul  $G = c_{44}$  /70/ (siehe auch Gl. 3.31 und 3.33):

$$\omega_D^2 = 19 \frac{Gd}{M} \quad (3.40)$$

G: Gitterabstand

M: Masse des Atoms

mit Gl. (3.38) und (3.39)

$$\overline{\Delta\sigma_i^2} \propto G_i^{-1} \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.41)$$

(siehe auch /71/)

Oben hatten wir gesehen, daß für das Volumen des Festkörpers  $\Delta\sigma_V^2 = \Delta\sigma_{Vi}^2 \propto G_{Vi}^{-1} = G_V^{-1}$  gilt. Um die verschiedenen Schwingungsamplituden an der Oberfläche auf einfache Weise abschätzen zu können, muß man die Anzahl der vorhandenen Bindungen abzählen und ihren Beitrag zur Federkonstante entsprechend wichten.

$$G_i = \sum_{n=1}^N k \cos \beta_{ni} \quad (3.42)$$

N : Anzahl der Bindungen

k : Federkonstante einer Bindung parallel (||) zu dieser

$\beta_{ni}$ : Winkel, den die i-te Bewegungsrichtung mit der n-ten Bindungsrichtung einschließt.

Bei Beschränkung auf die nächsten Nachbarn gibt es im Volumen des flächenzentrierten Gitters 12 Bindungen (Abbildung 3.10). Bei Schwingungen in der [110]-Richtung gibt es 2 Bindungen mit  $\beta = 0$  ( $\cong 2 k$ ), 8 Bindungen mit  $\beta = 60^\circ$  ( $\cong 4 k$ ) und 2 Bindungen mit  $\beta = 90^\circ$  ( $\cong 0 k$ ). Die Schwingung in die  $[1\bar{1}0]$ -Richtung ist topologisch äquivalent, die in [001]-Richtung beansprucht 8 Bindungen unter einem Winkel  $\beta = 45^\circ$  ( $\cong 5.6 k$ ) und 4 Bindungen unter  $90^\circ$  ( $\cong 0 k$ ). Das einfachste Modell liefert also tatsächlich einen isotropen Schubmodul  $G_V \cong 6 k$ . Auf der (110)-Oberfläche entfallen 5 Bindungen (Abb. 3.10), daraus folgen 3 unterschiedliche  $G_i$  für die genannten Bewegungsrichtungen. Das Ergebnis ist für die drei Bewegungsrichtungen in Tabelle I zusammengefaßt.

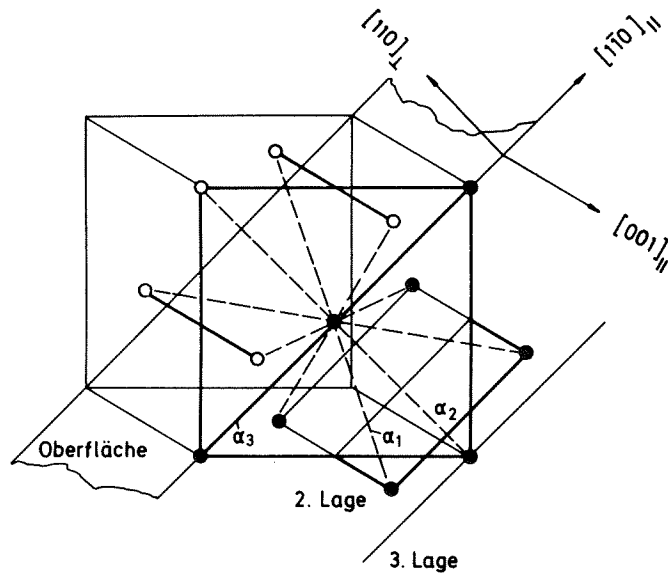


Abb. 3.10: Wechselwirkung eines Atoms in der (110)-Fläche mit seinen 12 Nachbarn. Die Bindung  $\alpha_1$  schließt mit der Fläche einen Winkel von  $30^\circ$  ein und wirkt auf 4 Atome der nächst tieferen Lage,  $\alpha_2$  steht senkrecht auf der Fläche und verbindet das Atom mit einem in der dritten Lage, und  $\alpha_3$  ist parallel zur Fläche. Die 5 Atome, die fehlen, wenn die (110)-Fläche die Oberfläche ist, sind als offene Punkte dargestellt /81/.

Tabelle I: Anzahl der Bindungen  $N_\beta$ , die mit der Bewegungsrichtung den Winkel  $\beta$  einschließen, für die drei Richtungen auf der (110)-Oberfläche eines k.f.z.-Gitters und die entsprechenden Federkonstanten sowie deren Summe  $G_i$ .

Zahl der Bindungen $N_\beta$	Bewegungsrichtung		
	$[110]_\perp$	$[1\bar{1}0]_{  }$	$[001]_{  }$
$N_{0^\circ}$	1 ( $\cong 1 k$ )	2 ( $\cong 2 k$ )	0
$N_{45^\circ}$	0	0	4 ( $\cong 2,8 k$ )
$N_{60^\circ}$	4 ( $\cong 2 k$ )	4 ( $\cong 2 k$ )	0
$N_{90^\circ}$	2 ( $\cong 0 k$ )	1 ( $\cong 0 k$ )	3 ( $\cong 0 k$ )
$G_i$ ( $i = 1,2,3$ )	3 k	4 k	2.8 k

Aus den Gleichungen (3.41) und (3.42) folgt das Verhältnis der Schwankungsquadrate an der Oberfläche zu dem im Volumen:

$$\frac{\overline{\Delta\sigma_i^2}}{\overline{\Delta\sigma_V^2}} = \frac{G_V}{G_i} \quad (3.43)$$

So lassen sich die  $\overline{\Delta\sigma_i^2}/\overline{\Delta\sigma_V^2}$  für ein k.f.z.-Gitter auf der (110)-Fläche angeben. Die Werte aus Gl. 3.43 mit den  $G_i$  aus Tab. I stehen in der ersten Zeile von Tabelle II.

Tabelle II: Berechnete und experimentelle Werte für  $\overline{\Delta\sigma_i^2}/\overline{\Delta\sigma_V^2}$  aus der (110)-Fläche von k.f.z.-Gittern

Bewegungsrichtung		[110] <sub>⊥</sub>	[1 $\bar{1}$ 0] <sub>∥</sub>	[001] <sub>∥</sub>
Rechnung	Diese Arbeit (k.f.z.)	2.0	1.5	2.14
	C.H.W. /72/ (Ni)	2.0	1.6	2.15
	R.T.Z. /73/ (Ni)	2.05	1.24	2.37
	T.D. /74/ (Cu)	1.92	Mittel - 1.77 - wert	
Messung	Ni(110) /75/	3.14	1.58 <sup>1)</sup>	3.8 <sup>2)</sup>
	Pt(110) /76/	4.78	-	-

1) Es wurde  $Q_D$  [1 $\bar{1}$ 0] = 310 K aus /75/ benutzt;  
C.H.W. zitieren MacRae (330 K) aus anderer Quelle;

2) Anders als in /75/ wurde der Unterschied der Messung in [001]<sub>∥</sub> zu der in [110]<sub>⊥</sub> aus /75/ berücksichtigt.

Die hier vorgenommene Abschätzung führt zu einer überraschend guten Übereinstimmung mit den Rechnungen von Clark, Hermann und Wallis (C.H.W.) /72/, die den exakten elastischen Tensor unter Benutzung eines harmonischen Potentials numerisch ausgewertet haben. Das Modell berücksichtigt nächste Nachbarwechselwirkung mit Zentralkräften in einem Kristall mit 20 Atomlagen. Rovida, Torrini und Zanazzi (R.T.Z.) /73/ benutzten ebenfalls die harmonische Näherung, für die sie die



elastischen Konstanten aus einem Morse-Potential für n-Nachbarn bestimmten. Die Ergebnisse weichen etwas stärker ab. Man sieht außerdem, daß die theoretischen Werte nur qualitativ mit den Messungen übereinstimmen. Die Abweichungen sind für Nickel, das von MacRae /75/ untersucht wurde, weniger deutlich als für Platin, (siehe Lyon und Somorjai in Referenz /76/). Eine bessere Übereinstimmung wäre auch überraschend, da die Oberfläche nur durch die entfallenden Bindungen berücksichtigt wurde, die elastischen Konstanten der verbleibenden Bindungen aber denen im Volumen in allen Rechnungen gleichgesetzt wurden. Es gibt jedoch keinen Grund dafür, daß dies so sein sollte. Das Problem ist von Feuchtwang allgemein diskutiert worden /77/. In der Tat findet man deutliche Veränderungen des Bindungscharakters der Atome aus der ersten Atomlage gegenüber dem Rest des Festkörpers in der Form von Rekonstruktion und Relaxation. Eine besonders geringe Bindung der Oberflächenatome wird bei Platin gefunden, das leicht rekonstruiert /78/ (siehe auch Tabelle II). Das unterschiedliche Verhalten gegenüber anderen vergleichbaren Metallen (Cu etc.) kann durch den Verlauf der Dispersionskurven bei Verringerung der Oberflächenkonstanten erklärt werden /78, 79/. Häufiger findet man die Relaxation, deren Vorzeichen jedoch keine direkten Rückschlüsse auf die Art der Veränderung der Kraftkonstanten zuläßt. Eine Veränderung des Ruhepunktes der Oberflächenatome sagt nämlich nur etwas über die Lage des Minimums des Potentials, das ein Atom in der Oberfläche sieht, aus. Über den Gradienten des Potentials um die Ruhelage herum ist damit nichts bekannt. Annahmen über die Potentiale, die - wie in den Referenzen /71, 73/ geschehen - eine einfache Verbindung zwischen Auslenkungen und Ruhelage herstellen, scheinen problematisch. In der Tat finden Frenken et al. /80/ an der sauberen Ni(001)-Fläche eine Relaxation von -3.2 % und um 50 % erhöhte Schwingungsamplituden ( $\sigma_1 = 0.12 \text{ \AA}$ )\*, während an der sauerstoffbedeckten Fläche die Relaxation +5.2 % ausmacht und die Schwingungsamplituden unwesentlich zunehmen ( $\sigma_1 = 0.13 \text{ \AA}$ ). Deswegen erscheint es sinnvoll, die Anpassung der elastischen Konstanten über den Vergleich mit den experimentellen

---

\* Dabei scheint die lineare Schwankung für das Volumen in /80/ mit  $\sigma_1 = 0.08 \text{ \AA}$  bei 370 K etwas groß.

Schwankungsquadraten und nicht über die Betrachtung der Relaxation vorzunehmen. Dieser Weg wurde von C.H.W. in /81/ beschrieben. Das Ergebnis ist für die entsprechende Konstantenwahl ( $\alpha_1/\alpha = \alpha_2/\alpha = 0.5$ ;  $\alpha_3/\alpha = 2.2$ ;  $\alpha$ : siehe Abb. 3.10) in Tabelle III aufgeführt.

Das gleiche wurde für die Abschätzung nach den Gleichungen 3.42 und 3.43 unter Berücksichtigung der Veränderung der Winkel  $\beta_{ni}$  durch eine Kontraktion von 7 % des Monolagenabstands /82/ getan. Es ergibt sich die gleiche Verringerung der Kraftkonstanten mit Komponenten senkrecht zur Oberfläche ( $k' = 0.5 k$ ). Die Vergrößerung dieser Konstanten parallel zur Oberfläche, die zu Bindungen mit ungestörter Symmetrie gehören, ist weniger ausgeprägt ( $k_{||} = 1.4 k$ ). Das Ergebnis für  $\frac{\Delta\sigma_i^2}{\Delta\sigma_V^2}$  ist in Tabelle III enthalten.

Tabelle III: Werte für  $\frac{\sigma_i^2}{\sigma_V^2}$  an der (110)-Fläche von k.f.z.-Gittern, jedoch mit Anpassung der elastischen Konstanten für die Rechnungen.

Bewegungsrichtung	[110] <sub>⊥</sub>	[1 $\bar{1}$ 0] <sub>  </sub>	[001] <sub>  </sub>
Diese Arbeit (k.f.z.)	4.14 (+ 32 %)	1.56 (- 1 %)	4.1 (+ 8 %)
Rechnung C.H.W. /81/ (Ni)	3.33 (+ 6 %)	1.53 (- 3 %)	3.53 (-7 %)
R.T.Z. /73/ (Ni)	3.22 (+ 3 %)	1.32 (-16 %)	3.50 (-8 %)
(über Relaxation)			
Jackson /71/ (Cu)	3.06 (- 3 %)	1.22 (-23 %)	3.41 (-10 %)
Messung /75/ Ni(110)	3.14	1.58	3.80

Obwohl R.T.Z. /73/ und Jackson /71/ bei ihrer Ermittlung der Kraftkonstanten von einer unrealistischen positiven Relaxation von + 14 % /73/ bzw. + 15 % /83/ ausgehen, wurde deren Ergebnis der Vollständigkeit halber in Tabelle III mit aufgenommen. Tatsächlich haben neue Messungen an Cu(110) die Schlußfolgerung nahegelegt, daß an dieser Oberfläche eine oszillatorische Relaxation der Atomlagen vorliegt,

die den Abstand der zwei ersten Lagen um -8.5 % (LEED) bzw. -5.3 % (HEIS) /82/ verkürzt. Dennoch sind alle Werte in vernünftiger quantitativer Übereinstimmung. Es fällt jedoch auf, daß der Unterschied zwischen erster und dritter Spalte bei den Rechnungen kleiner ist als bei der Messung. Wie der Autor selber anmerkt, sind seine Meßwerte mit einer Unsicherheit behaftet, da selbst bei der von ihm verwendeten niedrigen Spannung (35-40 V) die zweite und die dritte Atomlage einen nennenswerten Beitrag zur LEED-Intensität leisten (in Ref. /84/ wurde ein Anstieg von  $\langle \sigma_z \rangle$  um 25 % bei Verringerung der Elektronenenergie von 40 eV auf 10 eV festgestellt). Die Messungen für die  $[1\bar{1}0]$  und die  $[001]$ -Richtung scheinen insofern zuverlässiger, als sie mit streifendem Winkel für die Winkelhalbierende des einfallenden und des ausfallenden Elektronenstrahls bezüglich der Kristalloberfläche gewonnen wurden. Unter der Annahme, daß diese Geometrie die Eindringtiefe der Elektronen gegenüber der senkrechten Anordnung für die Messung in  $[110]$ -Richtung verringert, ist auch für die Schwingungen senkrecht zur Oberfläche ein  $\frac{\Delta\sigma_z^2}{\Delta\sigma_V^2}$  in der Nähe von 4 zu erwarten.

### 3.3.3 Niederenergetische Ionenstreuung und thermische Bewegung an der Oberfläche

Die Abhängigkeit der Mehrfachstreuung von ISS und damit auch der Beschränkung des Streuwinkels  $\vartheta$  bei festem Einfallswinkel von der Struktur der streuenden Oberfläche wurde in Abschn. 3.1.1.1 am Beispiel einer starren Atomkette dargestellt. Es ist offensichtlich, daß die Störung der Ordnung der Oberfläche durch thermische Bewegung sich ebenfalls in der Mehrfachstreuung widerspiegelt und dazu beiträgt, daß Modellrechnungen an einer starren Kette erheblich von den Messungen abweichen /28, 85/. Die augenfälligsten Unterschiede beobachtet man bezüglich der Streuintensität. Zum einen fehlt bei den Messungen das Intensitätsmaximum beim größten erreichbaren Streuwinkel  $\vartheta_{\max}$ , zum anderen fällt die Intensität außerhalb des erlaubten Streuwinkelbereichs  $\Delta\vartheta$  nicht auf null, sondern sie vermindert sich in der Nähe der Streuwinkel  $\vartheta_{\min}$  und  $\vartheta_{\max}$  auf ungefähr 50 % /86/. Diese Abweichungen lassen sich durch Berücksichtigung der thermischen Bewegung qualitativ korrigieren /7, 8/.

Im Rahmen einer Simulation eines dreidimensionalen Gitters, das inelastische Verluste berücksichtigt (MARLOWE), konnten Heiland, Taglauer und Robinson die Intensität in den Hauptmaxima des Energiespektrums (Einfachstreuung) als Funktion des Streuwinkels durch rechnerische Anpassung der Debyetemperatur und der Abschirmlänge an das Meßergebnis annähern. Um diesen Vergleich in absoluten Zahlen anstellen zu können, wurde die Anpassung für das Verhältnis der Intensitäten bezüglich der Streuung entlang einer dichtgepackten Oberflächenrichtung zu der in eine weniger dichte Richtung vorgenommen. Dieses Verhältnis ist nicht nur von Apparaturkonstanten unabhängig, sondern auch vom Streuquerschnitt als Funktion von Streuwinkel und Energie. Außerdem werden die Neutralisationseinflüsse stark vermindert, da dieses Intensitätsverhältnis für verschiedene Streuebenen an der Oberfläche nur noch Information über die unterschiedliche geometrische Anordnung der Atome enthält. Es bleibt jedoch die gleichzeitige Abhängigkeit vom Streupotential, vom Grad der thermischen Unordnung und von der Anwesenheit von Fehlstellen, die einer vollen quantitativen Auswertung entgegensteht. Innerhalb dieser Ungewißheit und ohne Berücksichtigung von Korrelationen finden die Autoren für  $\text{Ne}^+$ -Streuung an Ni(111) und Ag(100) Debye-Temperaturen, die um einen Faktor 2 bis 4 unter dem Volumenwert liegen /7/.

Poelsema, Verheij und Boers (PVB) /8/ zeigen, daß sich die wesentlichen Einflüsse der thermischen Bewegung auf die Energie- und Ortsverteilung von niederenergetischen Ionen für Niedrigindexrichtungen an einer linearen Kette studieren lassen. Für die Streuung von 6 keV Ar von einer Cu(100)-Kette wird sogar nur eine zweidimensionale Schwingungssimulation benötigt. Die Ergebnisse dieser Rechnung werden von den Autoren anhand von qualitativen Betrachtungen diskutiert. Die qualitative Beschreibung des Einflusses der thermischen Schwingung auf die Form der Energiespektren soll hier wiedergegeben werden, weil sie entscheidend zum physikalischen Verständnis gemessener ISS-Spektren beiträgt.

Die in Abschnitt 3.1.1.1 zitierte Simulation sagt zwei mögliche Energien für die Streuung in einen Winkel  $\vartheta$  voraus, solange dieser

innerhalb eines gewissen Bereichs um die Spiegelreflexion herum liegt ( $\Psi = 1/2 \vartheta$ ). Diese zwei Energien lassen sich der Quasi-einfach- (QS) und Quasidoppelstreuung (QD) zuordnen.

Die Veränderungen, die sich durch thermische Bewegung der Atomkette ergeben, sind in Abb. 3.11 schematisch dargestellt. Die erste Zeile zeigt die Trajektorie und das Spektrum für die Doppelstreuung (QD) bei  $T = 0$  (starre Kette) unter der Annahme, daß sich die Ablenkung gleichmäßig auf beide Stöße verteilt. Durch Auslenkungen der beiden

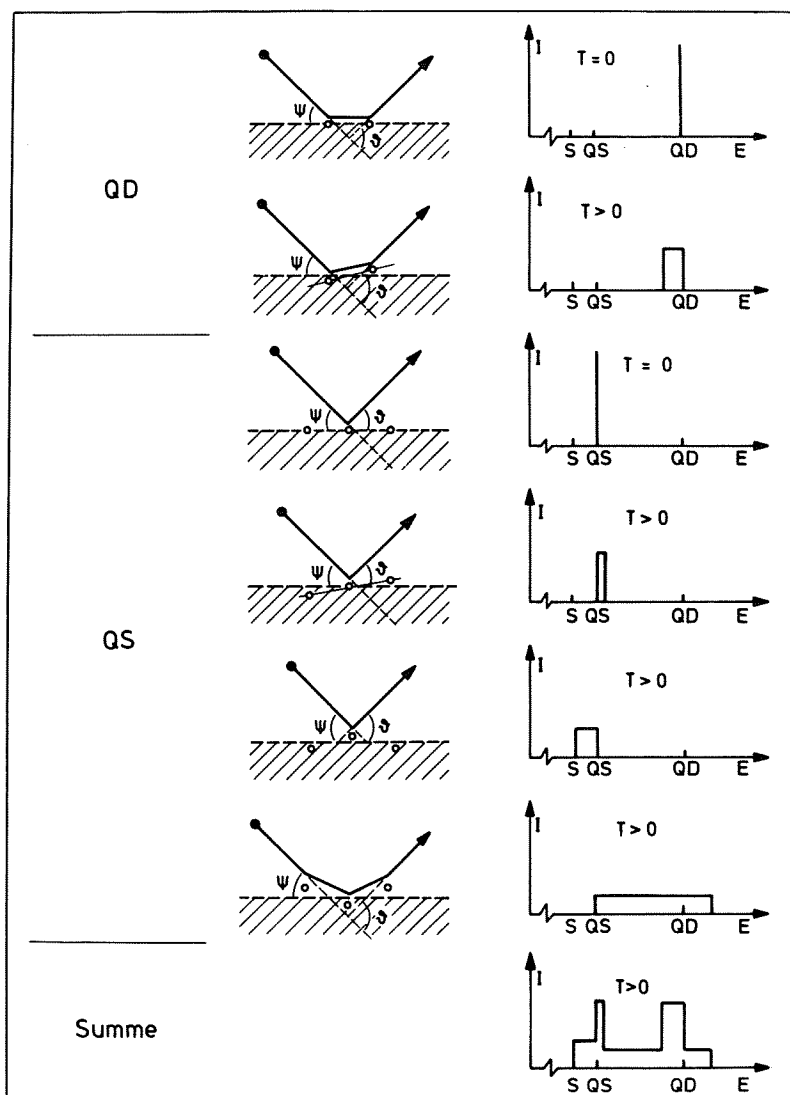


Abb. 3.11: Schematischer Überblick bezüglich der Wirkung der thermischen Bewegung auf die Form der Energieverteilung spiegelreflektierter Teilchen: Wirkung auf die Doppelstreuung (QD), auf die Einfachstreuung (QS) und das Energiespektrum bei einer höheren Temperatur /8/.

Atome bei  $T > 0$  erfährt die Doppelstreulinie eine Verbreiterung nach kleineren Energien, die den Asymmetrien der verschiedenen statistisch auftretenden Veränderungen des lokalen Einfallswinkels  $\psi_a$  entspricht (Zeile 2). Die QS-Linie in Zeile 3 kann auf verschiedene Arten durch Auslenkungen gestört werden. In Zeile 4 wird die Atomkonfiguration einer Doppelstreuung ähnlich, so daß sich die Linie zu höheren Energien hin verbreitert. Schwingt das streuende Atom aus der Ebene seiner Nachbarn heraus, verbreitert sich die Streuintensität bis zur theoretischen Zweierstoßenergie hin, schwingt es in die Ebene hinein, sind alle spektralen Lagen bis zur Energie des symmetrischen Dreifachstoßes möglich (Zeile 5 und 6). So ergibt sich für  $T > 0$  in der Summe ein Spektrum, wie es ganz unten in Abb. 3.11 zu sehen ist /8/.

Ferner haben die Autoren die Abhängigkeit der Energiespektren und der Winkelverteilung der reflektierten Teilchen vom Wechselwirkungspotential, von der Temperatur und möglichen Korrelationen am Beispiel der oben erwähnten Simulation von 6 keV Ar gestreut an einer Cu(100)-Kette untersucht /9/. Die Abhängigkeiten von den thermischen Schwankungen und von der Abschirmlänge des Potentials führen zu ähnlichen Veränderungen in den Streuergebnissen, die für das gewählte System bei Streuwinkeln von  $20^\circ$  bis  $30^\circ$  am ausgeprägtesten sind. Das Auftreten der Quasidreifachstreuung bei einer bestimmten höheren Temperatur hingegen ist weitgehend potentialunabhängig, so daß hier Aussagen über die Schwingungsamplituden möglich werden. Außerdem ist diese Streuklasse auch auf Korrelationen empfindlich, während das übrige Spektrum nur von relativen Schwankungen nächster Nachbarn abhängt. Der Vergleich mit den Messungen an einer Cu(100)-Fläche in [100]- und [110]-Richtung ist durch Ladungsaustauschprozesse erschwert, die die Energieverteilung der Ionen stark beeinflussen. Jedoch finden Poelsema et al. für die Doppelstreuung den berechneten Intensitätsverlauf oberhalb 400 K, in [110]-Richtung sogar für den gesamten Meßbereich ( $> 200$  K). Die mangelhafte Übereinstimmung bei niedrigen Temperaturen erklären die Autoren durch Oberflächenschäden, die nicht mehr ausheilen. Der Temperaturverlauf der Einfachstreuintensität konnte durch das verwendete Modell nicht wiedergegeben werden,

da zu große Unsicherheit bezüglich der Potentiale und der Streuklassen, die zum Spektrum bei der QS-Energie beitragen (trajektorienabhängige Neutralisation), bestand.

In einer weiteren Arbeit liefern die Autoren eine erste Abschätzung für die Debye-Temperatur senkrecht zur Oberfläche  $\theta_{DZ}$ . Sie wurde durch den Vergleich der Streuung von 10 keV  $Kr^+$ -Ionen an einer Cu(100)-Fläche mit den entsprechenden Rechensimulationen gewonnen. Durch Auswertung des Auftretens der Dreifachstreuung (QT), die wie weiter oben erwähnt weitgehend potential- und neutralisationsunabhängig ist, wurde die Oberflächen-Debye-Temperatur zu  $\theta_{DZ} = 240 \text{ K} (\pm 10 \%)$  ermittelt /87/. Eine genauere Analyse /11/ zeigte, daß die gemessene QT-Intensität proportional zu  $\sqrt{T}$  gefunden wurde und die parameterunabhängige Nullstelle der sich ergebenden Geraden erbrachte einen geringfügig kleineren Wert für das mittlere Schwankungsquadrat  $\overline{\sigma_z^2}$ . Die daraus ermittelte Debyetemperatur  $\theta_{DZ} = 147 \text{ K} (\pm 6 \%)^*$  wurde jedoch erheblich kleiner angegeben, da die Funktion  $\sigma^2 (\theta_D^{-2})$  um den Faktor 3 unterschiedlich gewählt wurde. In allen Fällen wurde das Debye-Modell in der Hochtemperaturgrenze benutzt. Die Schwingungen sind unkorreliert angenommen und ihre Auslenkungen genügen einer Gaußverteilung. In einer weiteren Arbeit /13/ stellen Poelsema und Boers eine neue Methode für die Berechnung von Ionenstreuung an Einkristallen vor. Sie benutzt ein (halb)analytisches Drei- bzw. Zweiatommodell, um Energie- und Winkelverteilung der reflektierten Teilchen darzustellen. Interessant sind hierbei die allgemeinen Aussagen, die diesem Modell für die Intensität für QS- und QD-Intensitäten entnommen wurden:

Im Falle spiegelnder Reflexion wird für die Intensität der Doppelstreuung eine Proportionalität zu  $\overline{\sigma^2}^{-1/2}$  gefunden, d.h. sie geht mit  $T^{-1/2}$ . Die gleiche Abhängigkeit von der Temperatur fanden die Autoren auch beim Auftragen der berechneten Einfachstreuintensität für 6 keV Ar an einer Cu[100]-Kette, obwohl dieses Verhalten aus den verwendeten Gleichungen nicht ersichtlich war.

---

\* Eine korrekte Auswertung von  $\overline{\sigma^2}$  ergibt  $\theta_{DZ} = 255 \text{ K} (\pm 6 \%)$  und entspricht den Auswertungen in [310]-Richtung (siehe weiter unten).

Walter und Martin (WM) haben den Intensitätsverlauf der Doppel- und Dreifachstreuung als Funktion der Temperatur unter besonderer Berücksichtigung der Korrelationen ebenfalls mit Zwei- und Dreiatommodellen sowie numerisch mit einem Kettenmodell untersucht /14, 15/. Auch sie finden eine QD-Intensität proportional zu  $T^{-1/2}$ . Die Berücksichtigung, bzw. Nichtberücksichtigung von Korrelationen bei der Doppelstreuung ändert nach diesem Modell nichts an der T-Abhängigkeit, sondern führt lediglich zu einem Faktor 1.4 in der Debye-Temperatur. Im Gegensatz zu PVB finden WM unter Annahme eines Dreiatommodells für die QT-Streuung ein lineares Verhalten unter der Bedingung  $T \gg \theta_D$ , wenn man  $\ln(\text{QT-Intensität}) + \ln(T)$  gegen  $1/T$  aufträgt. Die Auswertung der Debye-Temperatur wurde gestützt auf diese Art von Auftragung unter Verwendung der Messungen von PVB /11/ durchgeführt. Es werden für die drei Oberflächen-Richtungen unterschiedliche Werte gefunden. Bei Mittelung der Ergebnisse über zwei Energielagen der QT-Streuung (es besteht Unsicherheit über die energetische Lage der Streuintensität) ergeben sich folgende Werte für die Debye-Temperatur,

- in [110]-Richtung  $(252 \pm 13)\text{K}$  bzw.  $(187 \pm 10)\text{K}$ ,
- in [100]-Richtung  $(290 \pm 4)\text{K}$  bzw.  $(249 \pm 4)\text{K}$ ,
- in [310]-Richtung  $(242 \pm 10)\text{K}$  bzw.  $(218 \pm 10)\text{K}$

unter Annahme unkorrelierter bzw. korrelierter Schwingungen. Bei "naiver" Betrachtungsweise erscheinen die Verhältnisse der jeweils ersten Werte zueinander durchaus vernünftig: Eine Auswertung gerade der QT-Streuung ohne Berücksichtigung der Korrelationen würde nur dann Übereinstimmung in allen drei Oberflächenrichtungen erwarten lassen, wenn die Korrelationen der drei Atomtripel gleich wären, was als Zufall anzusehen wäre. In allen anderen Fällen müßte man die drei unterschiedlichen Werte als Hinweis für die unterschiedlichen relativen thermischen Schwankungen zwischen den Atomen in den drei Oberflächenrichtungen ansehen. Die Zunahme dieser Schwankungen von [100] über [110] zu [310] ist für höhere Frequenzen unmittelbar einsichtig, da bei den Grenzschwingungen des flächenzentrierten Gitters die "Federn" zu den übernächsten Nachbarn nicht beansprucht werden und die nächsten Nachbarn gegenphasig schwingen /70/. Dieser Tatbestand drückt sich auch in den Spektren für die Zustandsdichte und



für die Korrelationsdichte an der Oberfläche in einer Arbeit von Armand /88/ aus. Da die korrelierten Schwankungen die spektrale Dichte im Bereich kleiner Frequenzen widerspiegelt, könnte es sich hier um einen Hinweis dafür handeln, daß die tatsächlichen Grenzschwingungen eine niedrigere Frequenz haben als die in Armands Modell. Dies wäre ein weiterer Anhaltspunkt für kleinere Federkonstanten an der Oberfläche. In [310]-Richtung kann man eine qualitativ ähnliche Abhängigkeit der Relativbewegungen der Oberflächenatome von den Korrelationen erwarten wie in [110]-Richtung, da es sich hierbei um Ketten von um eine Oberflächenzelle verschobene nächste Nachbarn handelt. Der kleinere Wert für  $\theta_{DZ}$  deutet einen geringeren Unterschied zwischen relativen und absoluten Auslenkungen an, was bei größerem Abstand der Atome zu erwarten ist /12, 89/. Die drei Werte für die Oberflächen-Debye-Temperatur, die unter Berücksichtigung korrelierter Schwingung gewonnen wurden und an zweiter Stelle stehen, stimmen nicht überein. Übereinstimmung wäre jedoch bei ausführlicher Auswertung der Abhängigkeit der Korrelation von Gitterrichtungen, Abstand, Polarisierung und Schwingungsfrequenzen unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeit, mit der diese Frequenzen beitragen, zu erwarten.

Leider haben die Autoren selber /15/ im Vergleich des Dreiatommodells mit Kettensimulationen eine Abhängigkeit der Ergebnisse vom Potentialparameter C gefunden, die im Falle der Simulationen der [110]-Kette so stark ist, daß die Anwendung des Dreiatommodells in dieser Oberflächenrichtung unzuverlässig erscheint. Der Grund für das unterschiedliche Verhalten der Simulation gegenüber der [100]-Richtung bleibt unklar. Für die [310]-Richtung - das Ergebnis für  $\theta_{DZ}$  ist ziemlich ähnlich dem für [110] - wurde die Übereinstimmung der Modelle und deren Abhängigkeit vom Parameter C nicht untersucht. Diese Untersuchung wäre besonders interessant gewesen, da bei der zweidimensionalen Simulation in der dichtgepackten [110]-Richtung ein erhöhter Anteil von atypischen Streueignissen hoher Multiplizität zu erwarten ist, die in der Messung nicht zu erscheinen brauchen, da sie in der dreidimensionalen Messung die Streuebene verlassen oder durch eine erhöhte Neutralisationswahrscheinlichkeit

unterdrückt werden. Es ist also denkbar, daß ein gutes Dreiatommodell einem zweidimensionalen Kettenmodell, das alle gestreuten Teilchen in die Streuebene und damit in den Detektor zwingt, vorzuziehen ist, insbesondere dann, wenn die Streuklassen nicht getrennt erfaßt werden.

Ein solches Dreiatommodell ist von Poelsema und Boers vorgestellt worden /13/. Die Autoren (PVB) gehen in einer weiteren Arbeit ausführlich auf die Grenzen des Modells und die Potentialabhängigkeit der Auswertung der QT-Streuung ein /16/. Dabei unterscheiden sie drei Fälle, wobei zwei für die Auswertung geeignet sind, während der dritte zu niedrige Debye-Temperaturen ergibt. Die erneute Auswertung der Messungen von PVB aus Zitat /11/ legt die Interpretation nahe, daß es sich in allen drei Oberflächenrichtungen um den Grenzfall ( $d \cong -3 \cos(\vartheta_t/6)(dp/d\vartheta)_{\vartheta_t/3}$  /16/ handelt, bei dem die QT-Streuung zwar nicht gut aufgelöst ist, die Energielage der Streuung aber nicht kritisch in die Ergebnisse eingeht, so daß man mit richtigen Ergebnissen für  $\theta_{DZ}$  rechnen kann. Danach ergeben sich für die Debye-Temperaturen ohne Berücksichtigung von Korrelation folgende Werte:

in [110]-Richtung 244 K,  
in [110]-Richtung 279 K  
und in [310]-Richtung 238 K.

Sie sind in hervorragender Übereinstimmung mit den weiter oben zitierten Ergebnissen von Walker und Martin /15/ sowie den früheren Auswertungen von PVB /11, 87/ und können also in gleicher Weise interpretiert werden. Die Kritik von PVB an ihren eigenen Ergebnissen beruht im wesentlichen darauf, daß in der [110]-Richtung die graphische Darstellung der Auswertung sich nicht durch Simulation reproduzieren läßt und daß in der [310]-Richtung der Graph für die experimentellen Werte verglichen mit dem in [110] nicht das erwartete Bild zeigt. Was die Schwierigkeiten angeht, mit zweidimensionalen Kettenmodellen die dreidimensionale Streuung von Edelgasionen zu reproduzieren, sei ebenfalls auf weiter oben verwiesen. Hier kommt noch hinzu, daß zur Simulation für die [110]-Richtung der größere  $\theta_{DZ}$ -Wert der [110]-Richtung verwendet wurde. Ein niedrigerer Wert könnte die gerechneten Kurven den gemessenen annähern, da dies einer Temperaturerhöhung bei

festen  $\theta_{DZ}$  entspräche, die die Auflösung der schlechtaufgelösten QT-Streuung nach PVB verbessert /16/. Zur Beurteilung des Graphen für die [310]-Richtung fehlt der Versuch, ihn zu berechnen, denn der Gitterabstand ist zwar größer als für die [110]-Richtung, was eine bessere Auflösung der QT-Streuung erwarten läßt, doch ist die Vergleichbarkeit mit Rechnungen in [100]-Richtung dadurch beeinträchtigt, daß dies gleichzeitig einer effektiven Temperaturverringering entspricht, die die Auflösung der besser aufgelösten QT-Streuung wiederum negativ beeinflusst /16/. Diese effektive Temperatursenkung der Kette führt wahrscheinlich auch zur Verschiebung zu höheren Energien, die jedoch auch für die QD-Streuung gilt, so daß beide Streuintensitäten besser auf den theoretischen Energiewerten liegen (thermische Bewegung verschiebt die Streuintensität einer Streuklasse zu niedrigeren Energien - Abschnitt 4.3.1.3). So besteht eine große Neigung des Lesers, den verschiedenen  $\theta_{DZ}$  aus /15/ und /16/ eine physikalische Bedeutung beizumessen, obwohl die Einwände der Autoren (PVB und WM) bestehen bleiben. So stellt sich die Aufgabe, zur Untersuchung der thermischen Bewegung von Oberflächen mit ISS eine Methode zu finden, die ohne Annahme über den Potentialparameter C auskommt, die Einflüsse der Neutralisation einer Analyse zugänglich macht und die Störung des Meßsignals durch ioneninduzierte Kristallfehler möglichst vermeidet. Endlich sollten solche Messungen mit dreidimensionalen Simulationsrechnungen verglichen werden, die die einzelnen Streuklassen getrennt zu erfassen in der Lage sind.

### 3.4 Schäden durch niederenergetische Ionenstreuung auf Einkristalloberflächen

Ioneninduzierte Schäden durch niederenergetische Ionen wurden von Heiland und Taglauer mit LEED und ISS bei Zimmertemperatur untersucht /90/. Zum Beschuß und zur Streuung an der Ni(110)-Fläche diente ein  $\text{Ar}^+$ -Strahl von 1 keV. Die Streuung an einem ungestörten Kristall ist hauptsächlich durch Mehrfachstreuereignisse bestimmt. Das Auftreten von Oberflächenfehlern bewirkt demzufolge Veränderungen in den Energiespektren, die Einfachstreuung nimmt zu, die Mehrfachstreuung nimmt ab. Die Veränderungen werden jedoch bei den verwendeten

Flußdichten erst bei Fluenzen  $> 10^{15}$  Ionen/cm<sup>2</sup> erkennbar. Die atomaren Gitterfehler gehen bei  $10^{16}$  Ionen/cm<sup>2</sup> in die Sättigung, während ausgedehntere Fehlerstrukturen (Stufen, Facetten), die von den LEED-Ergebnissen nahegelegt werden, mit der Fluenz weiter zunehmen.

Das Anwachsen der Einfachstreuung mit der Fluenz wurde von Verheij et al. genauer untersucht /91, 92/. Sie benutzten eine Geometrie, die auf absteigende Stufen besonders empfindlich ist und für eine ideale starre Oberfläche keine Streuung zuläßt: der Streuwinkel ist nur wenig größer als der Einfallswinkel  $\Psi$  ( $\theta = 30^\circ$ ,  $\Psi = 24^\circ$ ). Eine Nickel(110)-Fläche wurde mit Edelgasionen einer Energie von 3 - 30 keV beschossen. Die Streuintensität kann durch die folgende Funktion beschrieben werden

$$N = N_0 \sqrt{1 - \exp(-D/D_0)} \quad (3.44)$$

in der  $D$  die Fluenz,  $N_0$  die Schadenstreuintensität in der Sättigung und  $D_0$  die charakteristische Fluenz darstellt. Es wurde keine Abhängigkeit von  $N_0$  von der Masse und der Energie der Projektile sowie von der Oberflächenrichtung und der Temperatur der Probe gefunden.  $D_0$  hingegen ist temperatur-, energie-, masse- und flußdichteabhängig. Der Zusammenhang in Gl. 3.44 läßt sich im Rahmen eines Keim- und Wachstumsmodells für Fehlstellenkrater /93/ verstehen. Die Zahl der Stufenatome ist dann proportional zum Umfang der Krater, d.h. proportional zur Wurzel der Anzahl  $n$  der Fehlstellen ( $N \sim n^{1/2}$ ). Für  $n$  kann ein entsprechender Zusammenhang abgeleitet werden /92, 94/.

$$n = n_0 [1 - \exp(-D/D_0)] \quad (3.45)$$

wobei  $n_0$  die Zahl der Fehlstellen bei Sättigung ist. Der Parameter  $D_0$  setzt sich aus der Zerstäubungsrate und der Rekombinationsgeschwindigkeit der Fehlstellen zusammen. Für 10 keV Ne<sup>+</sup> auf Ni(110) finden die Autoren /92/ im Intervall von 328 bis 373 K charakteristische Fluenzen von  $5.3 \times 10^{15}$  bis  $1.6 \times 10^{18}$  Ionen/cm<sup>2</sup>. Die Dichte der Krater  $N_s$  nimmt mit der Temperatur exponentiell ab.

$$N_e \sim J^{1/\alpha} \exp(E_m/\beta kT) \quad (3.46)$$

$E_m$ : Wanderungsenergie der Fehlstellen

Die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  hängen von der Art der auftretenden Keimbildungs- und Kraterwachstumsprozesse ab. Bei einer temperaturunabhängigen Streuintensität  $N_0$  in der Sättigung ergibt sich eine Zunahme der Kraterdichte mit der Temperatur. Die Autoren /92/ merken jedoch an, daß Gl. 3.46 nur näherungsweise in einem begrenzten Temperaturintervall gilt. Auf der Hochtemperaturseite sind Abweichungen zu erwarten, wenn die Größenordnung der thermisch aktivierten Defekte die der zerstäubungsinduzierten erreicht. Bei niedrigen Temperaturen würde man erwarten können, daß  $N_s$  unabhängig von  $T$  wird, wenn die Keimbildung vor allem direkt durch Ionenbeschuß geschieht. Das letztere Verhalten wurde in der Tat von Cherns /95/ unter 290 K gefunden, die durchschnittliche experimentelle Kraterdichte  $N_e$  beträgt hierbei ca.  $10^{12}$  Krater/cm<sup>2</sup>, wie in Abb. (3.12) zu sehen ist.

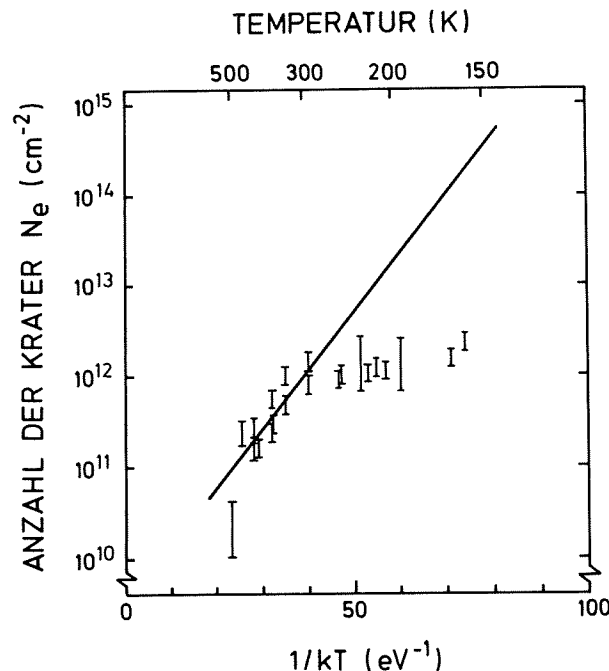


Abb. 3.12: Anzahl der Krater an einer Goldoberfläche in Abhängigkeit von der Temperatur: bei niedrigen Temperaturen ist die durchschnittliche experimentelle Kraterdichte bei diesem Beispiel konstant, sonst folgt sie Gl. 3.46 (durchgezogene Gerade) /95/.

La gloria di colui che tutto move,  
per l'universo penetra, e risplende  
in una parte più, e meno altrove.

Nel ciel che più della sua luce prende  
fu'io, e vidi cose che ridire  
nè sa, nè può chi di lassù discende;  
...

Veramente quant'io del regno santo  
nella mia mente potei far tesoro,  
sarà ora materia del mio canto.

Die Glorie Dessen, der bewegt das Ganze,  
Durchdringt das All; und diesem Teile spendet  
Sie Licht in stärkerm, dem in schwächerm Glanze.

Im Himmel, dem das meiste Licht Er sendet,  
War ich und sah, was nicht vermag zu sagen  
Noch weiß, wer je von dort sich heimgewendet.

...

...  
Doch was zu sammeln nur vermocht mein Denken  
An Schätzen aus dem heiligen Reich: dem Sange  
Soll es als Inhalt mein Gedächtnis schenken.

## 4. ERGEBNISSE

### 4.1 Simulationsrechnungen zur Abhängigkeit der Streuintensität von der Temperatur (MARLOWE)

Wie im Rahmen der Diskussion der physikalischen Grundlagen deutlich wurde, wirkt die thermische Bewegung auf ISS als quasi-statische Unordnung, die sich auf die Streuintensität der verschiedenen Streuklassen auswirkt. Nachdem die Art und Energie der Sonden wie in Abschn. 2.2.1 beschrieben gewählt worden war, wurde mit Hilfe einer Streusimulation durch das Programm MARLOWE (siehe Abschn. 3.1.3) untersucht, wie sich die Wahl weiterer Parameter auf die Temperaturabhängigkeit der Streuintensität auswirkt. Um möglichst viele Parametervariationen durchführen zu können, wurde auf kurze Rechenzeit Wert gelegt. So erklärt sich die geringe Zahl von 1000 Primärteilchen, die es nicht ermöglichten, aufgrund der schlechten Statistik noch Streuintensitätsmaxima zu differenzieren. Deswegen wurden die Streuereignisse integriert über das jeweilige Energiespektrum als Vergleichsgröße herangezogen.

Die Rechnungen wurden für 1 keV Na auf Cu(110) für Temperaturen  $T = 100$  K und 300 K und Debye-Temperaturen  $\theta_D = 160$  K und 320 K durchgeführt. Die Streuwinkel wurden zwischen  $\vartheta = 20^\circ$  und  $95^\circ$ , die Einfallswinkel zwischen  $\psi = 15^\circ$  und  $40^\circ$ , und der Azimut zwischen  $\varphi = 0^\circ$  und  $90^\circ$  variiert. Der Kristall war 3 Lagen dick angesetzt. Für jeweils eine Rechnung wurde die Richtung des Primärstrahls relativ zur Oberfläche festgelegt und die reflektierte Intensität mit einer Auflösung von  $5^\circ$  9-mal in  $5^\circ$ -Schritten um den Winkel für spiegelnde Reflektion herum berechnet. In Abb. 4.1 ist das Ergebnis für den Einfallswinkel  $\psi = 15^\circ$  für drei Azimutalwinkel und zwei Temperaturen zu sehen. Man erkennt, daß die Intensität wie erwartet beim Spiegelwinkel  $\vartheta = 2 \psi$  ein Maximum besitzt, das um so ausgeprägter ist, je dichtgepackter die Kristallrichtung der Streuebene ist. Erhöhte thermische Bewegung verschmiert die ausgeprägte Struktur der Streuintensität in  $\vartheta$ , in der sich die Kristallstruktur spiegelt. Dabei ist die Intensitätsabnahme mit der Temperatur um die Maxima herum absolut am größten, während die relative Intensitäts-



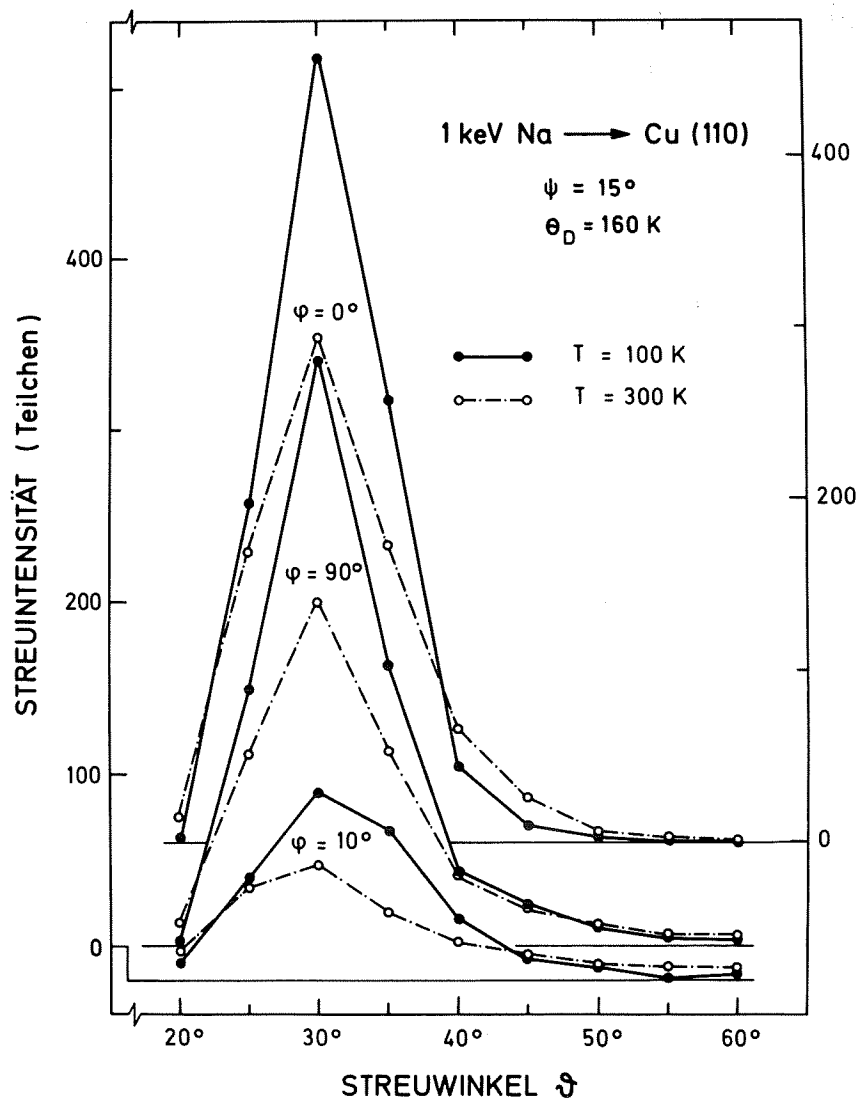


Abb. 4.1: Streuintensitätsverteilung aller reflektierten Na-Teilchen bezüglich des Streuwinkels für 3 Azimute und 2 Temperaturen (MARLOWE-Simulation mit 1000 Primärteilchen).

zunahme in den Minima am größten ist. Man beachte, daß demzufolge die Streuintensität, die in der Streuebene verbleibt, mit der Temperatur abnimmt bzw. das "off-plane-scattering" mit der thermischen Unordnung zunimmt. Aus Kurven wie in Abb. 4.1 lassen sich für jeden der sechs ausgewählten Einfallswinkel  $\Psi$  dreidimensionale Flächen im Azimut-Streuwinkel-Streuintensitätsraum zusammensetzen, die die Struktur und thermische Unordnung der Einkristalloberfläche wiedergeben. Qualitativ besitzen sie eine ähnliche Gestalt wie jene in Abb. 4.2, sie sind jedoch für kleine Einfallswinkel ( $\Psi < 30^\circ$ ) stärker strukturiert und werden für große Einfallswinkel ( $\Psi \geq 40^\circ$ ) fast eben. Um die Information zu verdichten und einer einfacheren Interpretation zugänglich zu machen - bei konstantem Streuwinkel bleiben der Streuquerschnitt und die Energie nach dem Stoß und somit auch die Schattenkegel konstant - wurden diese sechs Flächen pro Temperatur in zwei Flächen für  $T = 100 \text{ K}$  und  $300 \text{ K}$  im Azimut-Einfallswinkel-Streuintensitätsraum für einen festen Streuwinkel umgezeichnet (siehe auch die Photogramme von Bronckers et al. /96, 97, 98/).

Abbildung 4.2 zeigt diese Flächen für einen Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$ . Auch hier werden bei größerer thermischer Unordnung die Berge abgesenkt und die Täler aufgefüllt, d.h. die Schärfe der Kristallstruktur spiegelt sich deutlich in deren Abbild, der Streuintensität. Wie erwartet, sind die Flächen annähernd symmetrisch um den Einfallswinkel  $\Psi = 30^\circ = \vartheta/2$ . Die Abweichungen in der Intensität werden durch die Zunahme der Wahrscheinlichkeit für Streuung außerhalb der Streuebene mit zunehmendem  $\Psi$  hervorgerufen. Die Verschiebung der Intensitätsmaxima werden durch die unterschiedlichen Radien der Schattenkegel vor und nach dem Stoß hervorgerufen, die durch den bei einem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  deutlichen Energieverlust (25 %) zustandekommen.

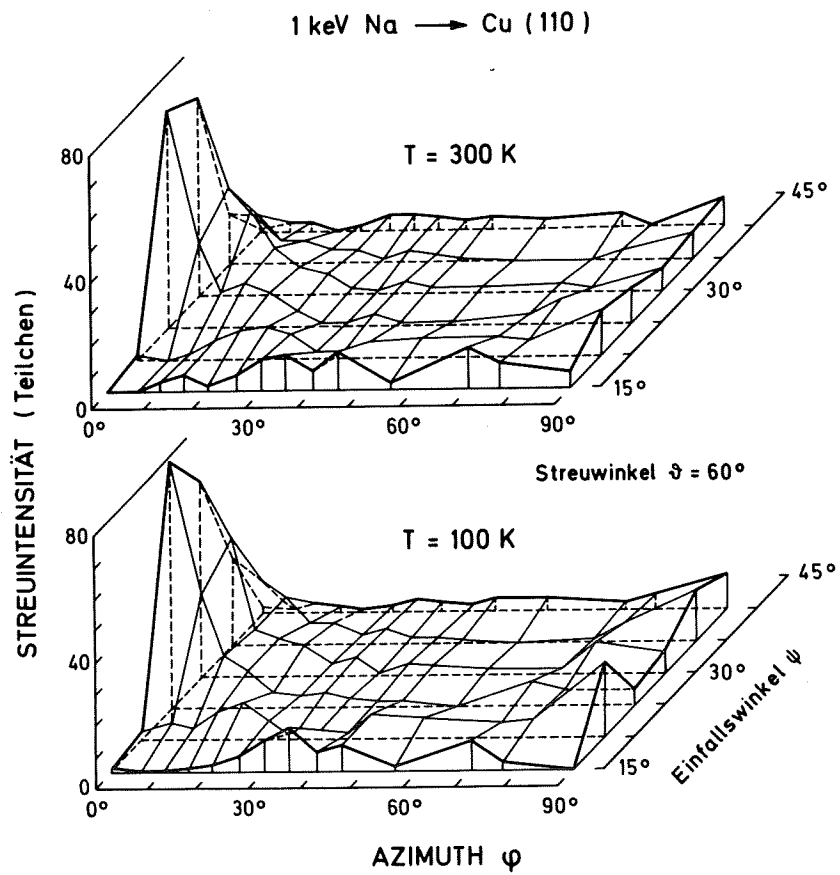


Abb. 4.2: Streuintensitätsverteilung aller reflektierten Na-Teilchen in Abhängigkeit vom Azimut- und Einfallswinkel bei festem Streuwinkel und 2 Temperaturen ( $\theta_D = 320$  K; MARLOWE-Simulation mit 1000 Primärteilchen).

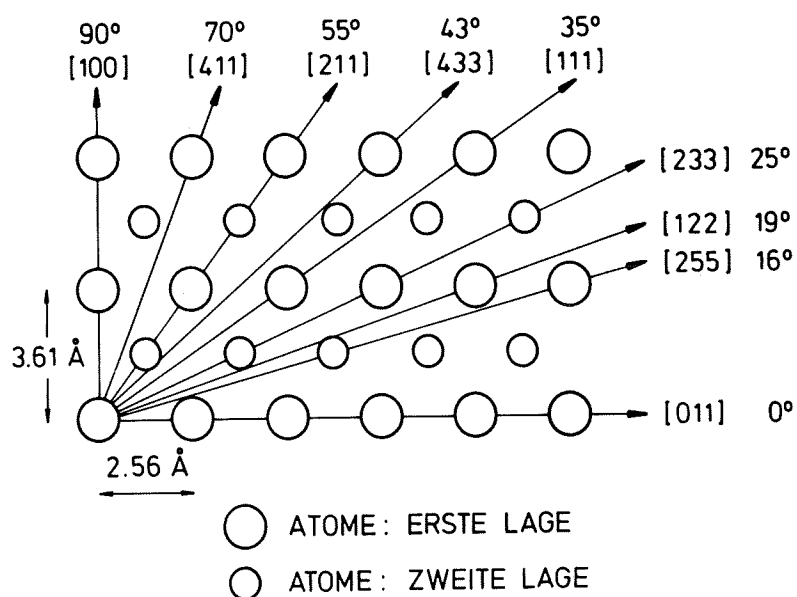


Abb. 4.3: Eine schematische Darstellung der Geometrie der ersten und zweiten Atomlage einer Cu(110)-Oberfläche. Die wichtigsten Oberflächenrichtungen sind mit dem dazugehörigen Azimut  $\psi$  angegeben (nach R.P.N. Bronckers /97/).

Betrachtet man das Bild für  $T = 100$  K, so ist die dichtest gepackte Richtung [011] ( $\psi = 0^\circ$ ;  $d = 2,56 \text{ \AA}$ , siehe Abb. 4.3) sofort an der hohen absoluten Intensität und dem Maximum der Streuintensität bedingt durch die Flußerhöhung am Schattenkegelrand bei  $\psi = 25^\circ$  zu erkennen. In [100]-Richtung ( $\psi = 90^\circ$ ;  $d = 3,62 \text{ \AA}$ ) ist die Intensität erheblich kleiner, und es werden zwei Intensitätsmaxima bei  $\psi = 20^\circ$  und  $35^\circ$  sichtbar, die zur Flußerhöhung bei der einlaufenden bzw. der auslaufenden Trajektorie gehören. Ebenfalls ein Maximum bei  $\psi = 20^\circ$  erkennt man für  $\psi = 55^\circ$  [211] ( $d = 4,43 \text{ \AA}$ ), für  $\psi = 43^\circ$  und für  $\psi = 19^\circ$ . In diesen letzten zwei Rechnungen ist das nächste Kettenatom zwar für diesen Einfallswinkel zu weit entfernt ( $d \sim 10,6 \text{ \AA}$ ), um erhöhten Fluß erzeugen zu können, dennoch tritt das Maximum bei  $\psi = 19^\circ$  auf. Dieser Sachverhalt läßt sich dadurch erklären, daß in diesen Richtungen das Ion auf halbem Wege zwischen den nächsten Nachbarn nahe genug zwischen zwei Atomen hindurchläuft, so daß man hier ein "virtuelles Atom" zur Kette gehörig zählen muß. In der [433]-Richtung handelt es sich um zwei Atome in der Nachbarkette der 1. Lage und in der [122]-Richtung

um zwei Atome in der Nachbarkette der 2. Lage. Beim Einfallswinkel  $\Psi = 15^\circ$  erkennt man erwartungsgemäß Maxima bei  $\varphi = 35^\circ$ ,  $43^\circ$ ,  $70^\circ$  ( $[111]$ ,  $[433]$ ,  $[411]$ ), in denen der nächste Nachbar entsprechend  $6,3 \text{ \AA}$ ,  $10,6 \text{ \AA}$  und  $7,7 \text{ \AA}$  entfernt ist. Betrachtet man die Abb. 4.2 für  $T = 300 \text{ K}$ , so fallen nicht nur die allgemeine Ein- ebnung der Strukturen, sondern auch qualitative Veränderungen gegen- über der Simulation für  $T = 100 \text{ K}$  auf. Es treten nämlich zusätzlich Maxima bei  $\Psi = 15^\circ$  und  $\varphi = 16^\circ$  ( $[255]$ ;  $d = 6.8 \text{ \AA}$ ) und bei  $\Psi = 20^\circ$  und  $\varphi = 25^\circ$  ( $[233]$ ;  $d = 4.4 \text{ \AA}$ ) auf. Die angegebenen Abstände zwischen den Kettenatomen kommen dann zustande, wenn man die Atome der 2. Lage mit zur Kette zählt, d.h. bei zunehmender thermischer Unordnung tragen diese um  $1.28 \text{ \AA}$  nach unten verschobenen Atome mehr und mehr zur Kette bei. Im Gegensatz hierzu verlieren die "virtuellen Atome", die man sich bei dichtem Vorbeiflug zwischen zwei Atomen zur Kette gehörig denken kann, an Bedeutung, wie man am Verschwinden der Maxima bei  $\Psi = 20^\circ$  und  $\varphi = 19^\circ$   $[122]$  bzw.  $\varphi = 43^\circ$   $[433]$  sehen kann, während das Maximum bei  $\Psi = 15^\circ$  in  $[433]$ -Richtung, was dem tatsächlichen atomaren Abstand entspricht, sogar zunimmt.

Es wäre sicherlich eine interessante Aufgabe, zum Vergleich ent- sprechende Flächen im Azimut-Einfallswinkel-Streuintensitätsraum in Abhängigkeit von der Temperatur experimentell zu erzeugen, da sich im Vergleich mit Abb. 4.2 sämtliche Abweichungen der physikali- schen Oberfläche bezüglich der geometrischen Struktur und der thermischen Bewegung vom gerechneten Modell prinzipiell ermitteln ließen. Im Rahmen dieser Arbeit wollen wir uns im wesentlichen auf die Untersuchung einfacher Kristallrichtungen ( $[011]$ ,  $[100]$ ) beschränken, da sich hier die Struktur der Oberfläche in der Streu- intensität als Funktion des Einfallswinkels und der Temperatur am deutlichsten zeigt und die qualitative Abhängigkeit der Intensität von diesen Parametern im Rahmen des Kettenmodells, der Abschattung, der Ionenflußerhöhung am Schattenkegelrand und der thermischen Un- ordnung unmittelbar zu verstehen ist. Außerdem ist in einfachen Oberflächenrichtungen der kritische Einfallswinkel ( $\Psi_c \geq 14^\circ$ ) aufgrund der kleinen atomaren Abstände ( $d \leq 3.6 \text{ \AA}$ ) größer als in den anderen Richtungen. Daraus ergibt sich der experimentelle Vorteil, daß der zu variierende Einfallswinkelbereich begrenzt gehalten werden kann,

so daß die Intensitätsveränderungen, die sich aufgrund der trajektorienabhängigen Neutralisation oder aus der Abhängigkeit der Transmission der Apparatur ergeben können, möglichst klein gehalten werden.

#### 4.2 Erzeugung und Ausheilen von Ioneninduzierten Oberflächenschäden als Funktion der Temperatur

Wie im vorangehenden Abschnitt festgestellt wurde, bietet sich die dichtgepackte [110]-Richtung zur Untersuchung der Temperatureffekte bei ISS an. Da hier die Streuintensität bei einem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  hauptsächlich um einen Einfallswinkel  $\psi = 30^\circ$  herum anfällt (siehe Abb. 4.2), kann man davon ausgehen, daß bei  $\psi = 15^\circ$  die Abschattung in einer idealen Atomkette total ist und die dennoch auftretende Streuintensität ausschließlich durch die thermische Störung der atomaren Ordnung an der Oberfläche verursacht ist. Da diese Streugeometrie auch besonders empfindlich auf andere Unregelmäßigkeiten der idealen Oberflächenstruktur ist /99, 100/, eignet sie sich ebenso gut, um Oberflächenschäden zu erfassen, die durch die Streuung niederenergetischer Ionen selbst hervorgerufen werden und die eigentliche Temperaturabhängigkeit der Streuintensität stören können. Zu diesem Zweck wurde ein typischer 1 keV  $\text{Ne}^+$ -Primärstrahl von 3 nA und einem Durchmesser von 1 mm benutzt. Bei einem Einfallswinkel  $\psi = 15^\circ$  beträgt die bestrahlte Fläche auf der Probe folglich  $\sim 3 \text{ mm}^2$ , was einer Teilchenstromdichte von  $\sim 6.2 \times 10^{11}$  Ionen  $\cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  entspricht. Die Fluenz pro Energiespektrum beträgt somit typisch  $3 \cdot 10^{14}$  Ionen  $\cdot \text{cm}^{-2}$ . Zwei der so erzeugten Spektren sind in Abb. 4.4 für Probertemperaturen von 280 K und 93 K dargestellt. Es fällt auf, daß die Streuintensität bei der niedrigen Temperatur größer ist und leicht zu niedrigeren Energien verschoben ist. Beides spricht für einen überragenden Einfluß von Oberflächenschäden auf die Streuintensität, da man bei Abnahme der thermischen Unordnung einen gegenteiligen Trend erwarten würde (siehe Abschnitt 3.3.3, Abb. 3.11, /8/ und Abb. 4.1).

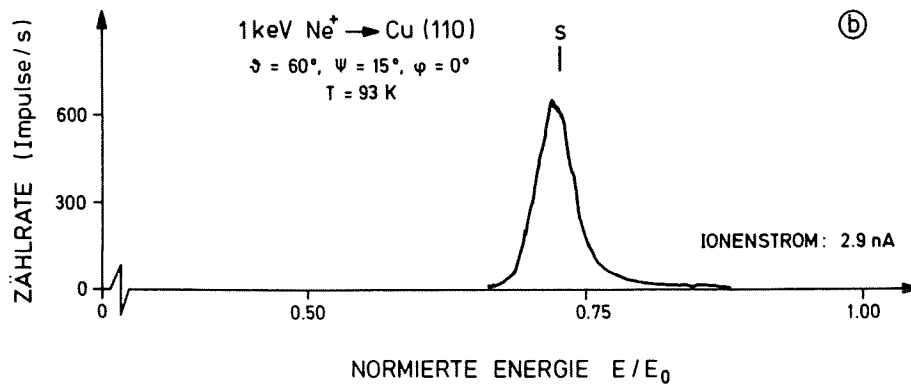
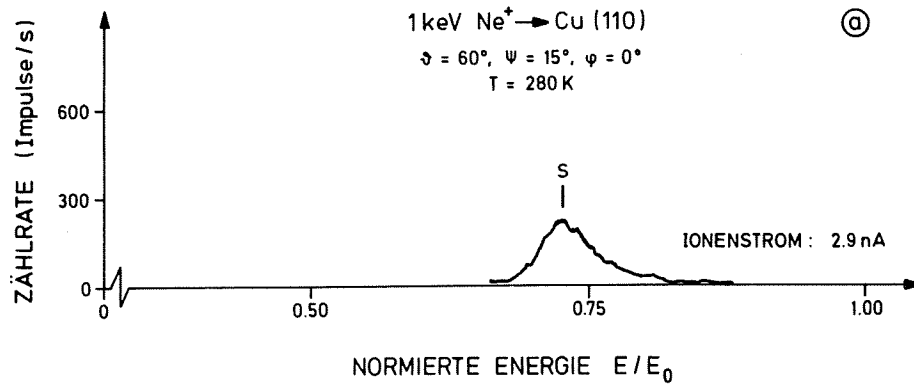


Abb. 4.4: Energiespektren für 1 keV Neonionen:  $\vartheta$  ist der Streuwinkel im Laborsystem,  $\psi$  der Einfallswinkel von der Oberfläche aus gezählt, und der Azimut  $\varphi = 0^\circ$  entspricht der Streuung entlang der [110]-Richtung (siehe Abb. 2.6). S gibt die Energie des einfachen Zweierstoßes (Gl. 3.1) an (a ohne, b mit Schäden in der Sättigung an der Oberfläche).

Die Temperaturabhängigkeit des Streumaximums aus Abb. 4.4 ist in Abb. 4.5 dargestellt. Oberhalb 250 K ist der erwartete langsame Anstieg der Zählrate mit zunehmender thermischer Unordnung sichtbar, während zu niedrigen Temperaturen hin die Intensität rasch ansteigt. Hierbei handelt es sich um Streuung an atomaren Stufen, deren Zahl aufgrund der sich verringern den Beweglichkeit der Oberflächenatome anwächst. Die Zählrate entspricht der maximal möglichen Anzahl von Stufenatomen bei der jeweiligen Temperatur, da die Kurve in beiden Temperaturrichtungen durchlaufen werden kann. Um diese Ergebnisse abzusichern, wurde die Zählrate in Abhängigkeit

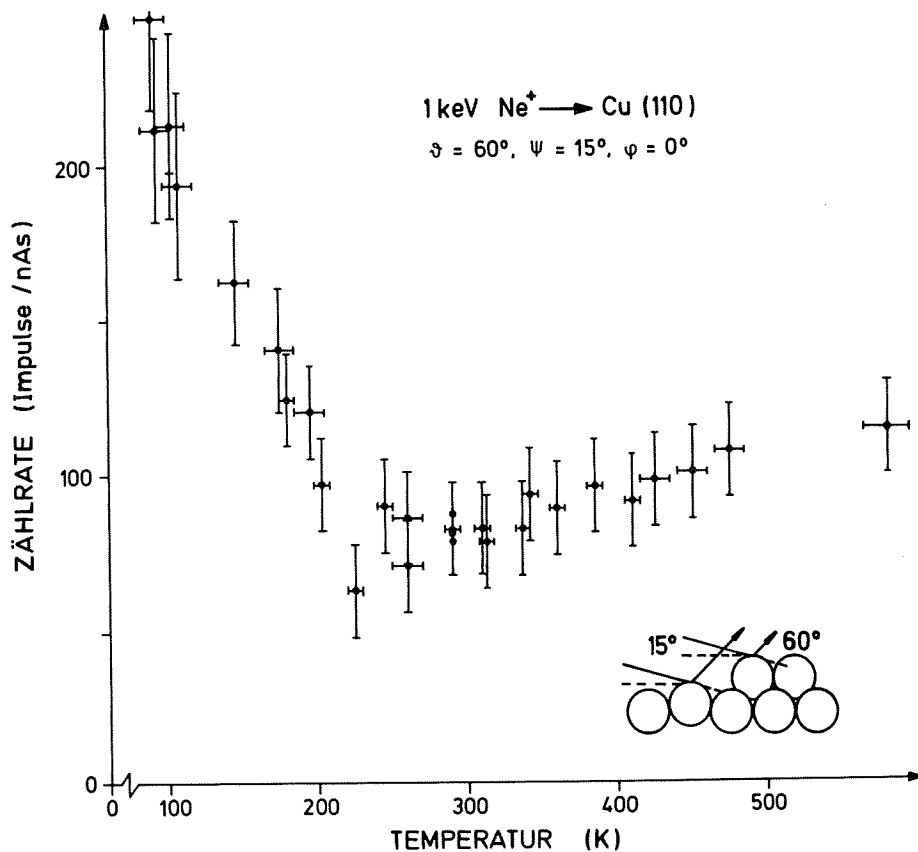


Abb. 4.5: Temperaturabhängigkeit des Streuintensitätsmaximums aus Abbildung 4.4. Für  $T < 250$  K nehmen die Schäden zu, für  $T > 250$  die thermische Unordnung: beides verringert die Abschattung (Schema).



von der Fluenz bei 100 K ermittelt. Wie Abb. 4.6 zeigt, folgt die Zählrate in Abhängigkeit von der Fluenz einem Exponentialgesetz, wie man es nach Gl. (3.44) bzw. (3.45) aus Abschnitt 3.4 erwartet. Um entscheiden zu können, welcher der beiden Gleichungen die Zählrate  $I$  in Abb. 4.6 folgt, wurden dieselben Daten in geeigneter Weise halblogarithmisch aufgetragen. Den Kreuzen mit Fehlerbalken in Abb. 4.7 liegt die lineare, den Punkten die quadratische Auftragung der Daten zugrunde. Da die Kreuze besser auf einer Geraden liegen als die Punkte, die genau die Abweichung zeigen, die man erhält, wenn man die lineare Funktion  $y = (1 - e^{-x})$  quadratisch aufträgt (Abb. 4.8), kann man davon ausgehen, daß die ioneninduzierten Oberflächendefekte bei 100 K keine zweidimensionalen Krater bilden, da die Streuintensität der Zahl der erzeugten Fehlstellen proportional ist. Es liegen also atomare Oberflächenschäden vor. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit Abb. 3.12, in der man an der Geraden, die für die exponentielle Abnahme der Anzahl der Krater mit der Temperatur steht, sehen kann, daß bei niedrigen Temperaturen die Kraterdichte der Atomdichte an der Oberfläche gleich wird, so daß der Begriff des Kraters sinnlos wird und man

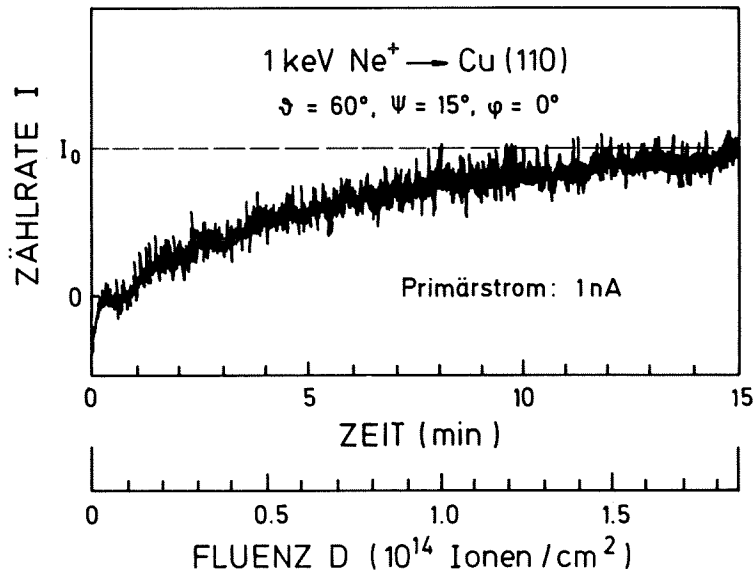


Abb. 4.6: Zählrate im Streuintensitätsmaximum in Abhängigkeit von der Fluenz bei 100 K (Abb. 4.4 b)

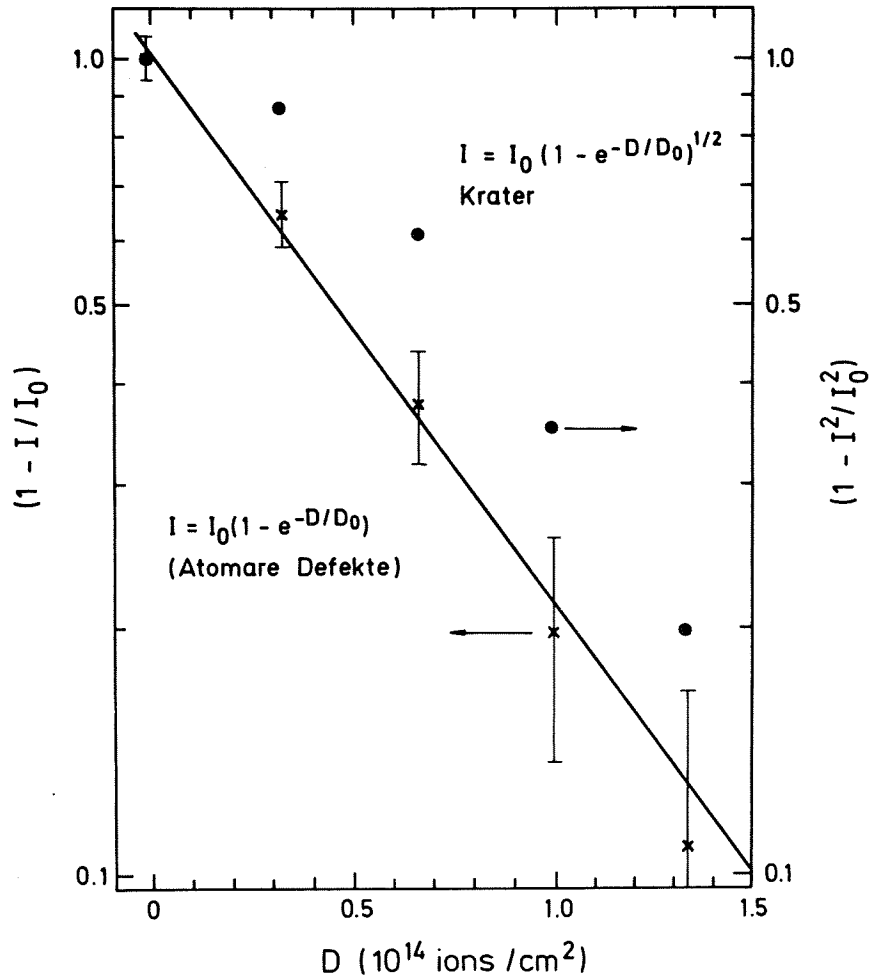
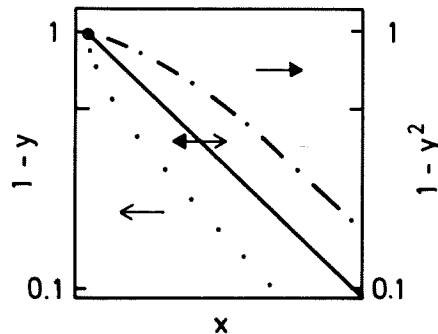


Abb. 4.7: Logarithmische Auftragung der Zählrate aus Abb. 4.6 nach Gl. (3.44) ●, bzw. (3.45) ×

Abb. 4.8:

Vier Möglichkeiten, die Funktionen  $y = 1 - e^{-x}$  ( $\leftrightarrow$ ) bzw.  $y = \sqrt{1 - e^{-x}}$  ( $\leftrightarrow$ ) aufzutragen: die erste linear und die zweite quadratisch (—), die erste quadratisch (---), und die zweite linear (.....)



nur noch von atomaren Defekten sprechen kann. Daß die Kraterdichte in diesem Fall nicht bei einer bestimmten Temperatur konstant wird, kann durch eine geringere Keimbildung durch direkten Beschuß erklärt werden, da bei den hier vorgestellten Messungen die Teilchenstromdichte mit  $\approx 6.2 \times 10^{11}$  Ionen $\cdot$ cm $^{-2}\cdot$ s $^{-1}$  eine Größenordnung kleiner ist als bei Verheij et al. /92/. Ob es sich beim Anstieg der Sättigungszählrate unterhalb 250 K in Abb. 4.4 um einen allmählichen Übergang zu immer mehr Kratern mit immer kleineren Radien handelt, oder ob bei einer bestimmten Temperatur ein Phasenübergang zu atomaren Defekten stattfindet, kann ohne genauere Untersuchungen der Fluenzabhängigkeit der Streuung bei Zwischenwerten der Temperatur nicht entschieden werden.

Eine atomare Aufrauung durch Ionenbeschuß von Wolfram-Oberflächen wurde auch von Vernickel mit dem Feldelektronenmikroskop beobachtet. Dabei bleibt die Kristallstruktur der Oberflächenschicht auch nach längerem Ionenbeschuß in ihren Grundzügen erhalten /101/.

Abbildung 4.7 ermöglicht außerdem eine Aussage über die charakteristische Fluenz für 1 keV Ne $^{+}$  auf Cu bei 100 K, die mit  $D_0 = 6.5 \cdot 10^{13}$  Ionen $\cdot$ cm $^{-2}$  zwei bis sechs Größenordnungen unter den Werten liegt, die bei höheren Temperaturen gefunden wurden, und die dort gefundene Abnahme der charakteristischen Fluenz mit der Temperatur auch für niedrigere Temperaturen bestätigt (siehe Abschnitt 3.4) /92/. Bei einer Fluenz von ungefähr  $2 \cdot 10^{14}$  Ionen/cm $^2$  tritt Sättigung ein. Eine Vorstellung, wie die Oberfläche in der Sättigung aussieht, kann man aufgrund von Intensitätsüberlegungen entwickeln. Die unterschiedlichen Neutralisationswahrscheinlichkeiten für die zwei Einfallswinkel  $\Psi = 15^\circ, 30^\circ$  bei  $\varphi = 0^\circ$  (Überlebenswahrscheinlichkeit:  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 30^\circ) = 3.5\%$ ,  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 15^\circ) = 2.4\%$ ; siehe Abschnitt 4.3.1.6) brauchen nicht berücksichtigt zu werden, da bei der Streuung an den Stufenatomen bei  $\Psi = 15^\circ$  die Nachbarn auf der Seite der einlaufenden Trajektorie fehlen, so daß die Neutralisation für diese Art von Streuung besser durch die Ergebnisse in  $\varphi = 60^\circ$  ( $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 15^\circ) = 3.7\%$ ) abgeschätzt werden kann. Für diese Streugeometrie, in der die Neutralisationseinflüsse

der Nachbarn vernachlässigt werden können, ist  $P_{\text{Ne}^+}$  innerhalb der hier erzielbaren Genauigkeit gleich mit der Überlebenswahrscheinlichkeit für  $\Psi = 30^\circ$  und  $\varphi = 0^\circ$  (siehe Abschn. 4.3.1.6). Die Zählrate an einer Monolage beträgt  $425 \pm 50$  Impulse/nAs (siehe Abschnitt 4.3.1.2). Bei 100 K beträgt die Zählrate in der Sättigung  $(250 \pm 30)$  Impulse/nAs (Abb. 4.5); davon sind etwa 2/3 fluenzabhängig, wie man aus Abb. 4.6 entnimmt: das entspricht  $(170 \pm 20)$  Impulsen/nAs oder der Streuung von ungefähr 0.4 Monolagen. Das ist nur möglich, wenn in jeder der Atomreihen der [110]-Fläche, die in der Streuebene liegen, 2 von 5 Atomen fehlen (siehe Abb. 4.9), d.h. die Sättigung tritt auf nach der Zerstäubung von etwa 0.4 Monolagen bzw. einer Fluenz von  $2 \times 10^{14}$  Ionen/cm<sup>2</sup> (0.2 Monolagen). Daraus ergibt sich der durchaus realistische Wert von zwei zerstäubten Cu-Atomen pro einfallendes Ne<sup>+</sup>-Ion.

Zu einem ähnlichen Ergebnis kommt man auch aufgrund theoretischer Überlegungen, wenn man von der Differentialgleichung für die zeitliche Änderung der Leerstellen aus Zitat /92/ ausgeht und dabei die Oberflächenwanderung vernachlässigt, d.h. den temperaturabhängigen Term gleich null setzt.

$$\frac{dn_v}{dt} = J \left( 1 - \frac{n_v \sigma}{n_0} \right) = 0 \quad (4.1)$$

In der Sättigung ist die Änderung der Leerstellen  $dn_v/dt = 0$ . Dies vermittelt einen Zusammenhang zwischen der Leerstellenerzeugungsrate  $J$ , der Zahl von Leerstellen  $n_v$  und der Zahl von Atomplätzen pro Flächeneinheit  $n_0$ , sowie einer geometrischen Konstanten  $\sigma$ . Setzt man  $\sigma \simeq 2$ , da die Entfernung der zwei Nachbarn einer Leerstelle in der Streuebene die Zahl der effektiven Leerstellen nicht erhöht, so erhält man für die Zahl der Leerstellen  $n_v \simeq n_0/2$  oder ungefähr 1/2 Monolage.

In Abb. 4.9 sind zwei mögliche Oberflächenzustände in der Schadensättigung bei 100 K dargestellt, die mit den Messungen in Einklang sind. Auf der linken Seite handelt es sich um ein Modell, das Abweichungen von der Idealstruktur des Kristalls nur in der 1. Lage

zuläßt, während sich auf der rechten Seite die Störungen über zwei Atomlagen erstrecken. Unter der in /92/ gemachten Annahme, daß die Leerstellen - Adatomrekombination schnell erfolgt, ist letzteres jedoch unwahrscheinlich. Durch das Experiment gesichert ist für beide Varianten nur die atomare Ordnung in der Streuebene, d.h. entlang der [110]-Richtung. Die Ordnung in [100]-Richtung ist in der Abbildung willkürlich gewählt. Auskunft hierüber würde man von entsprechenden Messungen mit der Streuebene in der [100]-Richtung erwarten. Messungen mit einer solchen Streuanordnung erbrachten nicht die erwartete Zunahme der Streuintensität durch die Oberflächenschäden, so daß eine quantitative Auswertung nicht sinnvoll erschien. Daß der Effekt im Vergleich zur [110]-Richtung so viel schwächer ausfällt, könnte auf eine spezielle Ordnung in der [100]-Richtung hinweisen, zum Beispiel, daß sich hier Leerstellen bevorzugt aneinanderreihen. Wahrscheinlicher aber ist, daß in dieser Kristallrichtung bei den gewählten Parametern die Vorstellung von Einfachstreuereignissen an Oberflächenketten nicht ausreicht, da deren Streuintensität durch Fokussierung auf die zweite Atomlage stark überlagert ist. Die Störung des Signals durch dieses Phänomen wird im Rahmen der Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung weiter unten genauer behandelt.

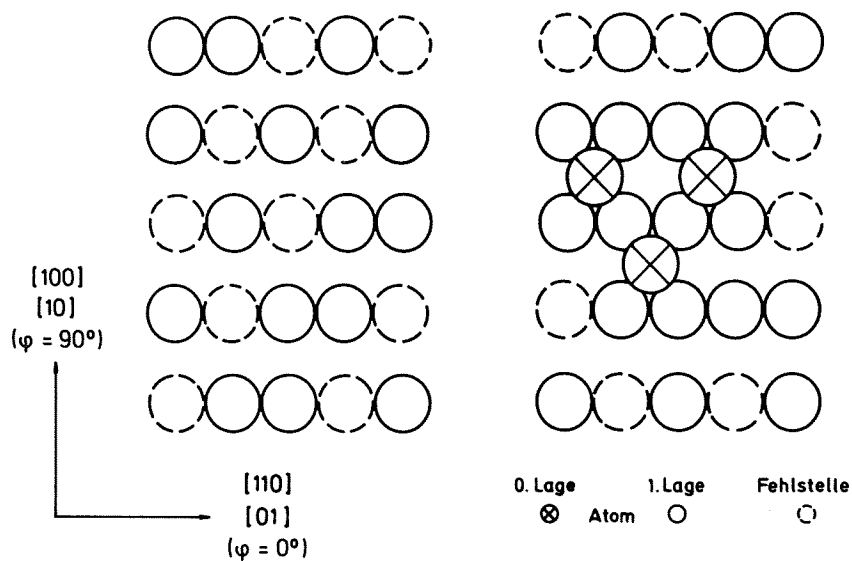


Abb. 4.9: Schematische Darstellung von zwei möglichen Oberflächenzuständen in der Schadensättigung bei 100 K: zweilagige Struktur links, dreilagige Struktur rechts.

### 4.3 Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung

#### 4.3.1 Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung bei der Quasi-Einfachstreuenergie

In Abschnitt 4.2 wurde festgestellt, daß für Messungen mit der Streugeometrie ( $\vartheta = 60^\circ$ ,  $\psi = 15^\circ$ ,  $\varphi = 0$ ), bei der für eine starre Kette keine Streuintensität erwartet wird, eine geringe, mit der Temperatur ansteigende Intensität gefunden wird, soweit die mit sinkender Temperatur abnehmenden Auslenkungen der Atome aus der Ruhelage nicht durch ioneninduzierte Gitterschäden überdeckt werden. Hier soll nun der Versuch unternommen werden, die Abhängigkeit der Intensität von den Schwingungsamplituden der Atome quantitativ zu erfassen. Das soll mit Hilfe eines einfachen Modells für die Streuung von  $\text{Ne}^+$ -Ionen geschehen, da aufgrund des Neutralisationsverhaltens die Intensität der entlang einer dichtgepackten Oberflächenrichtung gestreuten Edelgasionen der Einfachstreuintensität entlang einer schwingenden Kette gestreuter Teilchen am nächsten kommt [21, 102]. Die Streuung der Alkali-Ionen hingegen bedarf aufgrund der komplexen Überlagerung von Streuklassen einer Monte-Carlo-Simulation der Streuung an der gesamten Oberfläche, um den Intensitätsverlauf zu erklären.

##### 4.3.1.1 Zweiatommodell für die $\text{Ne}^+$ -Streuung an dichtgepackten Ketten

In Abschn. 3.1.1.2 wurde der Schattenkegel als geeignetes Mittel vorgestellt, den Parameterbereich zu quantifizieren, in dem Streuung in einem bestimmten Winkel möglich bzw. nicht möglich ist. Für einen festen Streuwinkel  $\vartheta$  kann man bei einer starren Kette drei Fälle unterscheiden, wie der Schattenkegel des Nachbaratoms zum Punkt der nächsten Annäherung des tatsächlich die Ablenkung um den Winkel  $\vartheta$  erzeugenden Atoms steht. Diese drei Fälle werden in Abb. 4.10 veranschaulicht. Im Falle A verläuft der Schattenkegel des Nachbaratoms unterhalb des streuenden Atoms, so daß jedes Oberflächenatom ungehindert zur Streuintensität beiträgt. Man erhält also Streuintensität, die einer Monolage entspricht. Im Falle B

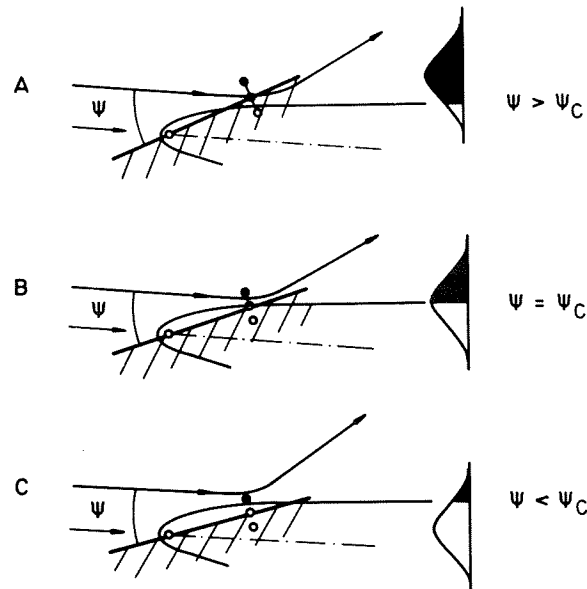


Abb. 4.10: Zweiatommodell für  $\text{Ne}^+$ -Streuung entlang einer Oberflächenkette. Die drei verschiedenen Positionen des streuenden Atoms: A im Mittel außerhalb, B am Rand und C innerhalb des Schattenkegels. Position B definiert den kritischen Einfallswinkel  $\psi_c$  ( $\sigma_0 = 0$ ).

geht der Schattenkegel genau durch den Punkt der nächsten Annäherung an das streuende Atom. Diese Geometrie definiert den kritischen Winkel  $\psi_c$ , bei dem für ein starres Gitter die Intensität, die eine Monolage erzeugt, auf Null absinkt. Im Falle C liegt der Punkt der nächsten Annäherung im Schatten des Nachbaratoms: es ist keine Streuung zu erwarten. Da ein realer Kristall sich niemals ganz in Ruhe befindet (Nullpunkts-Schwingung), treten diese drei Fälle nur in verschmierter Form auf. Der Grad der Verschmierung ist von der Form der thermischen Verteilung der Auslenkungen bzw. der Temperatur und den elastischen Eigenschaften des Festkörpers abhängig. Diese Verteilungen sind auf der rechten Seite von Abb. 4.10 angedeutet. Unter Vernachlässigung der Flußerhöhung am Rand des Schattenkegels, d.h. unter der Annahme einer konstanten Ionenflußdichte außerhalb des Schattenkegels, bezeichnen die schwarzen Flächen den Anteil der streuenden Atome, die weißen

Flächen den Anteil der übrigen Atome, bezogen auf deren Gesamtzahl. Man sieht, daß im Falle A große relative Auslenkungen der Atome notwendig sind, um den Punkt der nächsten Annäherung in den Schattenkegel zu bringen. Je breiter die Amplitudenverteilung ist, um so weniger Atome tragen zur Streuung bei; hier wird die Intensität mit der Temperatur abnehmen. Im Falle B wird die Verteilung durch den Schattenkegel genau halbiert, so daß die Breite der Amplitudenverteilung keine Rolle spielt. Die Streuintensität wird temperaturunabhängig und entspricht genau 1/2 Monolage. Im Falle C tragen nur die Atome zur Streuintensität bei, die aus dem Schatten ihres Nachbarn heraustreten, d.h. je breiter die Verteilung wird, um so mehr Atompaaire tragen zur Streuung bei, die Streuintensität nimmt mit der Temperatur zu. Wertet man die entsprechenden schwarzen und weißen Flächen der Amplitudenverteilungen als Funktion der Temperatur für eine gegebene Geometrie aus, so erhält man unmittelbar den Temperaturverlauf der Streuintensität normiert auf eine Monolage Streuung, wenn man alle Fokussierungs- und Neutralisationseinflüsse zunächst nicht berücksichtigt. Diese Auswertung soll im Rahmen der Debye-Theorie skizziert werden.

#### 4.3.1.1.1 Wahrscheinlichkeit der Streuung an einem Oberflächenatom im Debyemodell

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Oberflächenatom aus dem Schatten seines Nachbarn tritt, ist die Summe über die streuenden Atome geteilt durch die Summe aller Atome:

$$W(\sigma_0) = \sum_{\sigma > \sigma_0} w(\sigma) / \sum_{\sigma} w(\sigma) = \int_{\sigma_0}^{\infty} w(\sigma) d\sigma / \int_{-\infty}^{\infty} w(\sigma) d\sigma \quad (4.2)$$

Die Auslenkung  $\sigma$  bezüglich des Nachbaratoms ist positiv in Richtung der Oberflächennormale gewählt. Sie ist von der Verschiebung eines Atoms in Normalkoordinaten linearabhängig, deswegen genügt die thermische Verteilung von  $\sigma$  wie die der Normalkoordinaten einer Gauß-Verteilung (siehe Gl. 3.28). Die thermische Verteilung der



Auslenkungen des streuenden Atoms bezüglich seines Nachbarn kann also geschrieben werden:

$$w(\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{\Delta\sigma^2}}} \exp[-\sigma^2/2 \overline{\Delta\sigma^2}] \quad (4.3)$$

Ohne Berücksichtigung von Korrelationen erhält man das mittlere Schwankungsquadrat  $\overline{\Delta\sigma^2}$  zwischen zwei Atomen in einer Raumdimension aus den Gleichungen (3.38) und (3.39):

$$\overline{\Delta\sigma^2} = \frac{1}{3} \frac{18kT}{Mk\Theta_{DZ}^2} \quad \text{für } T \gg \frac{\Theta_{DZ}}{4} \quad (4.4)$$

M : Masse des schwingenden Atoms

$\Theta_{DZ}$ : Debye-Temperatur senkrecht zur Oberfläche.

Die tiefste Lage des streuenden Atoms, die zur Streuintensität beitragen kann, bestimmt die untere Integrationsgrenze  $\sigma_0$  in Gl. (4.2). Sie kann aufgrund von geometrischen Überlegungen bestimmt werden (siehe Abb. 4.11). Bei einem gegebenen Einfallswinkel  $\Psi$  berechnet sich die tiefste Lage bezüglich des Schattenkegels, in der der Streuwinkel  $\vartheta$  erzeugt werden kann, wie folgt:

$$r_c = d \sin \Psi + (S_0 + \sigma_0) \cos \Psi \quad (4.5a)$$

setzt man  $\cos \Psi = 1$

$$\sigma_0 = r_c - d \sin \Psi - S_0 \quad (4.5b)$$

$r_c$  : Schattenkegelradius

d : Abstand der zwei Atome

$S_0$  : Abstand der nächsten Annäherung  
bei Streuung um den Winkel  $\vartheta$

Mit Gl. (4.3) läßt sich die Wahrscheinlichkeit, daß ein Atom zur Streuung beiträgt, wie folgt beschreiben:

$$W(\sigma_0^2, \overline{\Delta\sigma^2}) = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \Phi \left( \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{\overline{\Delta\sigma^2}}} \right) & \sigma_0 < 0 \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \Phi \left( \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{\overline{\Delta\sigma^2}}} \right) & \sigma_0 > 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

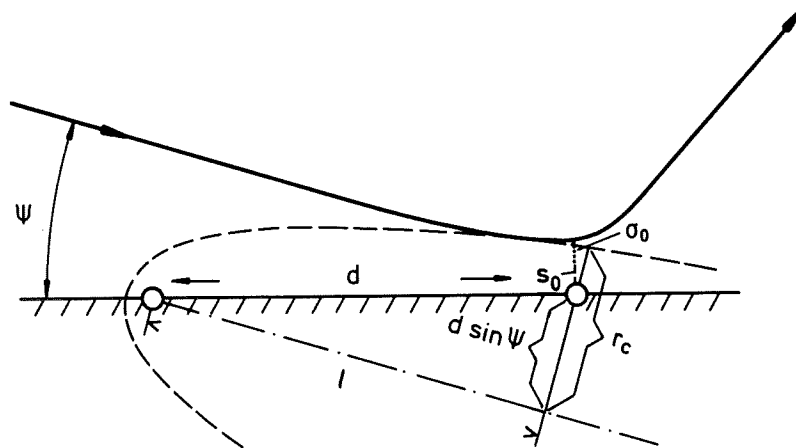


Abb. 4.11: Streuendes Atom im Schattenkegel des Nachbarn: Schattenkegelradius  $r_c$  im Abstand  $l$  (Abb. 3.6), kleinster Abstand vom Streuer  $S_0$  (Abb. 3.1) und tiefste Lage  $\sigma_0$  des Streuers, die zu einer Ablenkung um den Winkel  $\psi$  führt.

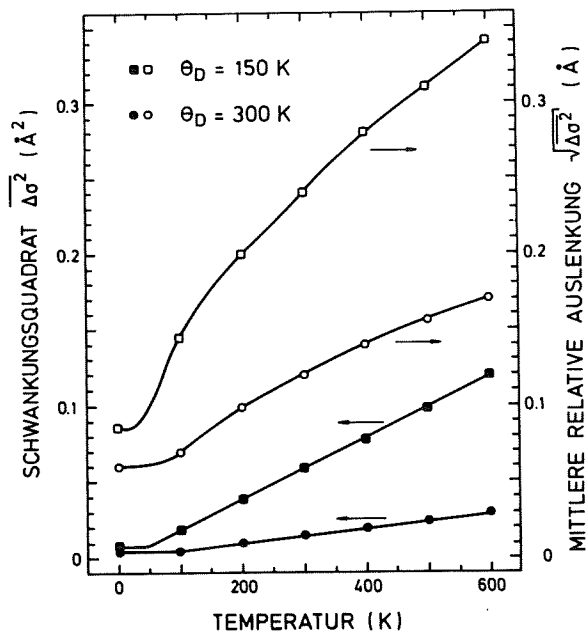


Abb. 4.12: Schwankungsquadrat und mittlere relative Auslenkung nach Gl. (3.39) mit (3.38) bzw. (4.4) für Kupfer: Im vorliegenden Fall ist  $\overline{\Delta\sigma^2} = \overline{\Delta\sigma_1^2}$ .

Die Funktion  $\Phi$  ist die normierte Fehlerfunktion, die über das Schwankungsquadrat (Gl. 4.4) mit der Temperatur und der Debye-Temperatur verknüpft ist. Die Auswertung von Gl. (4.4) für eine Debye-Temperatur von 150 und 300 K bzw. die dazugehörigen mittleren relativen Auslenkungen sind in Abb. 4.12 als Funktion der Temperatur dargestellt.

Berechnet man  $W(\sigma_0^2, \overline{\Delta\sigma_2^2})$  für verschiedene Einfallswinkel und Temperaturen bei festem Streuwinkel und fester Debye-Temperatur, so erhält man eine Kurvenschar wie in Abb. 4.13. Deutlich sind die drei Fälle aus Abb. 4.10 zu erkennen: für  $\Psi > \Psi_C$  haben die Kurven eine negative Steigung, für  $\Psi = \Psi_C$  ist die Streuintensität konstant bei 1/2 Monolage und für  $\Psi < \Psi_C$  haben die Kurven eine positive Steigung. Über die Unabhängigkeit der Streuung von der Temperatur beim kritischen Winkel  $\Psi_C$  lassen sich Meßergebnisse auf die Theorie normieren, so daß nur noch die Debye-Temperatur als einziger freier Parameter verbleibt. Durch Anpassung der übrigen Kurven ( $\Psi \gtrless \Psi_C$ )

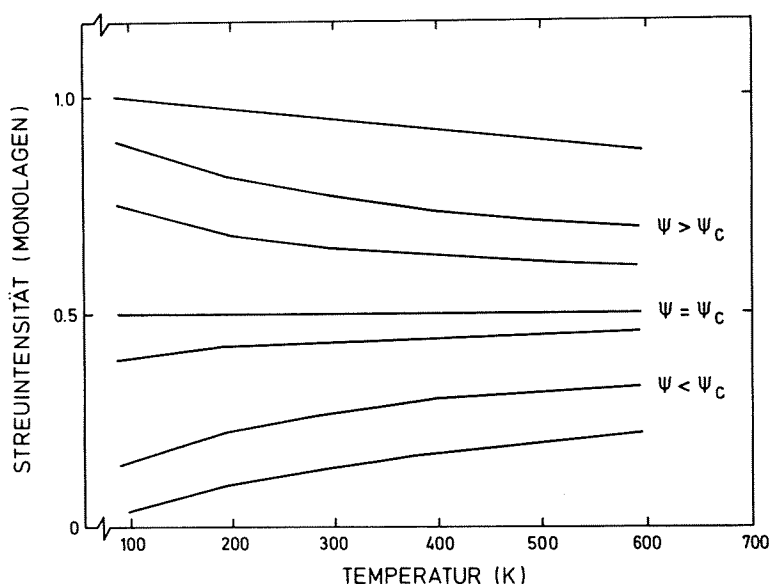


Abb.4.13: Anteil einer Monolage, die nach dem Zweiatommodell zur Streuung beiträgt, in Abhängigkeit von der Temperatur. Der qualitative Verlauf der Kurven spiegelt die drei Fälle aus Abb. 4.10 für sieben unterschiedliche Einfallswinkel  $\psi$  wieder.

läßt sich dann die Debye-Temperatur senkrecht zur Oberfläche bestimmen. Hierbei ist wichtig anzumerken, daß zu dieser Analyse prinzipiell keine Kenntnisse über das Streupotential notwendig sind, obwohl es implizit in  $\sigma_0$  über  $r_c$  und  $S_0$  enthalten ist. Da nämlich mit dieser Methode der kritische Winkel  $\Psi_c$  experimentell bestimmbar ist, lassen sich beide Größen wie folgt eliminieren: in erster Näherung kann  $r_c(\Psi)$  konstant gesetzt werden, so daß für  $\Psi_c$  bzw.  $\sigma_0 = 0$  aus (4.5b) folgt:

$$r_c = d \sin \Psi + S_0 \quad (4.7)$$

Setzt man Gl. (4.7) in Gl. (4.5b) ein, so folgt

$$\sigma_0 = d(\sin \Psi_c - \sin \Psi) \quad (4.8)$$

#### 4.3.1.2 Streuung von 1 keV Ne<sup>+</sup>-Ionen entlang der [110]-Richtung als Funktion von T und $\Psi$

Um die starken Ioneninduzierten Oberflächenschäden bei niedrigen Temperaturen aus Abschn. 4.2 zu vermeiden, wurde der Primärstrom der 1 keV Ne<sup>+</sup>-Ionen für die folgenden Messungen auf 0.3 nA reduziert. Indem das Energiefenster zusätzlich auf einen kleinen Bereich um das Streumaximum beschränkt wurde, konnte auf diese Weise die Fluenz pro Spektrum typisch auf  $3.7 \cdot 10^{12}$  Ionen/cm<sup>2</sup> begrenzt werden. Dieser Wert ist klein gegen die charakteristische Fluenz  $D_0 = 6.5 \cdot 10^{13}$  Ionen/cm<sup>2</sup> aus Abschnitt 4.2.

In Abb. 4.14 ist die Höhe des Streuintensitätsmaximums bei der Einfachstreuung von Ne<sup>+</sup>-Spektren (Abb. 4.4 und 4.18) in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Einfallswinkel aufgetragen. Beim Einfallswinkel  $\Psi = 21^\circ$  ist die Streuintensität temperaturunabhängig, d.h. die thermische Verteilung der streuenden Atome

wird von Schattenkegeln der Nachbarn halbiert ( $\sigma_0 = 0$ ). Also ist der kritische Winkel  $\Psi_c = 21^\circ$ . Mit Hilfe von Gl. (4.5a) läßt sich das verwendete Potential, durch das sowohl der Schattenkegelradius  $r_c$  (Abschn. 3.1.1.2), als auch der Abstand der nächsten Annäherung  $S_0$  (Abschn. 3.1.3) gewonnen wurde, überprüfen:

$$d \sin \Psi_c = r_c - S_0 \cos \Psi_c \quad (4.9)$$

Beide Seiten der Gleichungen stimmen mit dem Wert  $0.91 \text{ \AA}$  ( $d = 2,56 \text{ \AA}$ ,  $r_c(21^\circ) = 1.49 \text{ \AA}$ ,  $S_0 = 0.62 \text{ \AA}$ ) bis auf zwei Stellen hervorragend überein, so daß zur Berechnung der übrigen Kurven in Abb. 4.14 die Werte für  $r_c$  aus Abb. 3.7 entnommen wurden. Die beste Anpassung an die Meßpunkte erhält man durch die Verwendung einer Debye-Temperatur von  $\theta_{DZ} = (150 \pm 30) \text{ K}$  in Gl. (4.4). Die gestrichelte Kurve zeigt das Ergebnis der Rechnung, wenn die Volumen-Debye-Temperatur  $\theta_D = 325 \text{ K}$  für einen Einfallswinkel  $\Psi = 15^\circ$  gewählt wird. Die Abweichung ist auf Grund des kleineren absoluten Fehlers bei diesem Winkel besonders gut aufgelöst. Mit zunehmender Streuintensität wird die Empfindlichkeit der Messung durch die Zunahme der absoluten Fehler immer geringer. Die Abweichungen bei kleinen  $\Psi$  und niedrigen Temperaturen könnten auf Abweichungen des realen Kristalls von der idealen Struktur zurückzuführen sein. Bei  $\Psi > 21^\circ$  wird eine zusätzliche Struktur im Verlauf der Meßpunkte sichtbar, die sich in den Kurven nicht widerspiegelt. Sie könnte in der Dreidimensionalität der thermischen Bewegung begründet sein, die das Modell nicht berücksichtigt. Innerhalb der Meßfehler beschreibt das Modell jedoch die Meßpunkte, obwohl die Flußerhöhung am Schattenkegelrand und die trajektorienabhängige Neutralisation nicht berücksichtigt werden. Die Frage, ob diese Effekte tatsächlich klein sind oder sich gegenseitig kompensieren, kann an dieser Stelle noch nicht beantwortet werden.

Die Daten aus Abb. 4.14 lassen sich auch in einer anderen anschaulichen Weise darstellen, und zwar, wenn man die Zählrate gegen den Einfallswinkel aufträgt und die Temperatur als Parameter wählt.

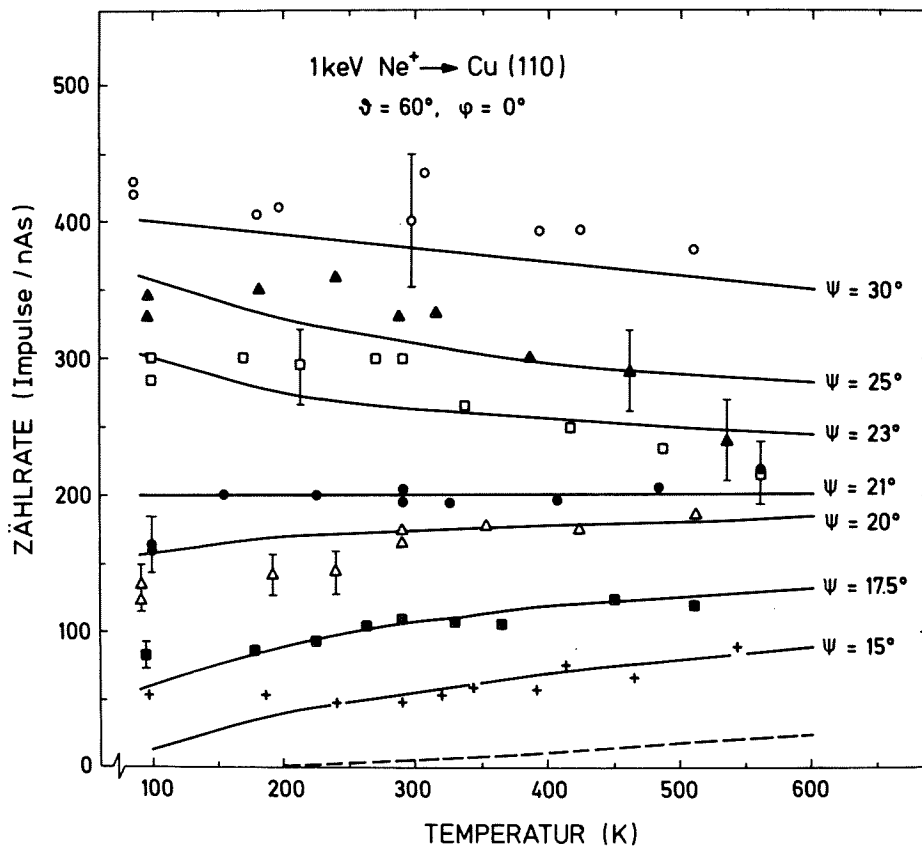


Abb. 4.14: Temperaturabhängigkeit des Maximums der  $\text{Ne}^+$ -Einfachstreuung (siehe Abb. 4.4a; 4.18). Die Winkel sind wie in Abb. 4.4 definiert. Die Kurvenschar steht für das Zwei-atommodell mit  $\theta_{DZ} = 150 \pm 30$  K:  $\psi_C = 21^\circ$  (siehe Abb. 4.13). Die unterbrochene Kurve steht für  $\theta_D = 325$  K und  $\psi = 15^\circ$ .

In Abb. 4.15 ist dies für zwei Rechenbeispiele und die Messung geschehen. Dem Modell liegt, wie schon erwähnt, die Annahme zu Grunde, daß der Ionenfluß außerhalb des Schattenkegels homogen ist und so durch eine Stufenfunktion beschrieben werden kann. Sie spiegelt sich in dem Verlauf der Streuintensität mit dem Einfallswinkel an einem starren Kristall wider, deren Stufe genau beim kritischen Winkel  $\psi_C$  liegt. Beim realen Kristall ist diese Stufe je nach Temperatur und Debye-Temperatur mehr oder weniger geglättet. Hierbei ist zu beachten, daß der Fall  $T = 0$  K sich qualitativ nicht

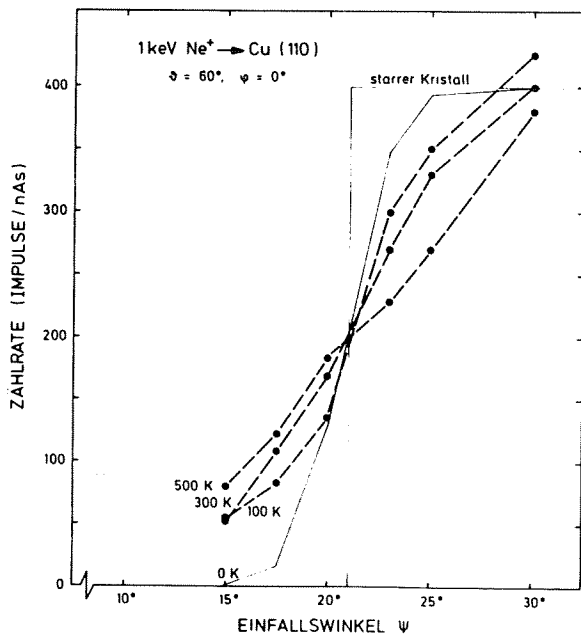
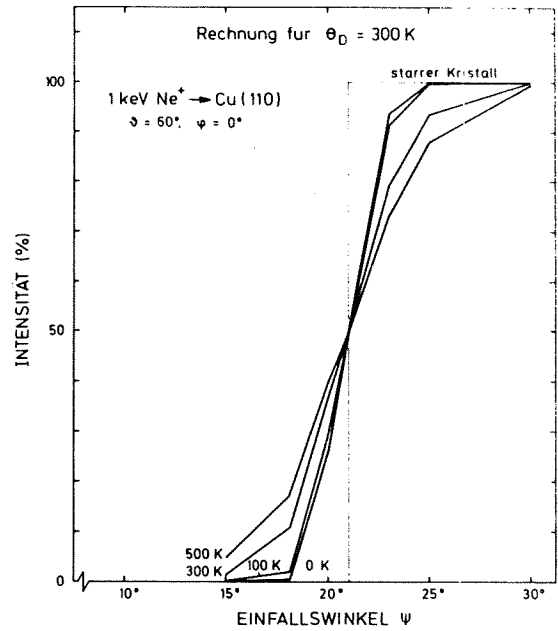
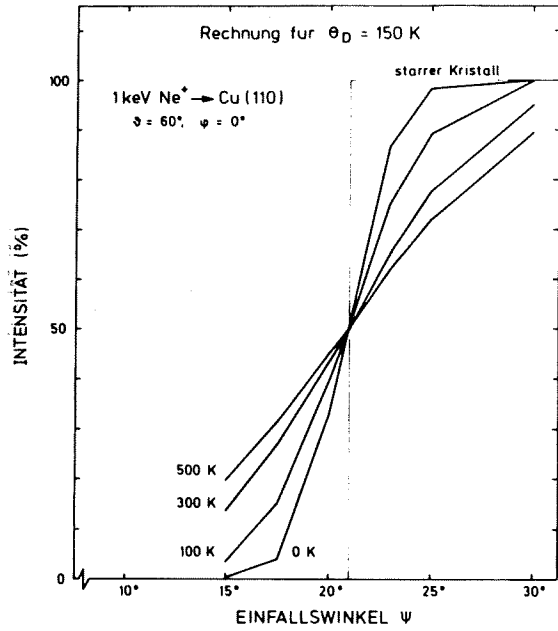


Abb. 4.15:

Einfallswinkelabhängigkeit des Maximums der  $\text{Ne}^+$ -Einfachstreuung aus Abb. 4.14 mit der Temperatur als Parameter: das Zweiatommodell oben, die Messung unten.  $\theta_D = \theta_{DZ}$  aus Abschn.4.3.1.1.

deutlich von den übrigen Temperaturen unterscheidet. Auch hier zeigt sich, daß die Messung mit der Rechnung mit verminderter Debye-Temperatur ( $\theta_{DZ} = 150$  K) recht gut übereinstimmt. Da sich alle Kurven genau am kritischen Winkel  $\psi_c$  schneiden, ergibt sich hieraus eine andere Möglichkeit, diesen experimentell zu bestimmen, auch wenn kein Meßpunkt für  $\psi_c$  selbst vorliegt. Diese Methode dürfte vor allem in jenen Fällen von besonderer Bedeutung sein, in denen die Kurven in Abb. 4.15 durch Flußvariationen und Neutralisationseinflüsse stark verzerrt sind, so daß der kritische Winkel  $\psi_c$  nicht mehr notwendigerweise bei der halben Anfangsintensität ( $\psi = 30^\circ$ ) liegt.

#### 4.3.1.3 Vergleich der Streuintensität bei der Quasi-Einfachstreuenergie aus den Messungen und den Simulationsrechnungen (ARGUS)

Die Simulationsrechnungen für die Energiespektren bei verschiedenen Temperaturen wurden mit Hilfe des Monte-Carlo-Programms ARGUS (Abschn. 3.1.3) durchgeführt /103/. Anders als in früheren Rechnungen wurde davon ausgegangen, daß die Atome in der ersten Oberflächenlage nicht isotrop schwingen, so daß die Oberflächen-Debye-Temperatur senkrecht zur Oberfläche  $\theta_{DZ}$  unabhängig eingestellt werden konnte. Für alle anderen thermischen Bewegungen des Kristalls wurde die Volumen-Debye-Temperatur  $\theta_D = 343$  K benutzt. Die Schwingungen wurden unkorreliert angenommen. Die Oberflächen-Debye-Temperatur  $\theta_{DZ} = 150$  K wurde als Ergebnis des Zweiatom-Modells aus Abschn. 4.3.1.2 übernommen. Der Einfachheit halber wurden alle Spektren nur für Natriumteilchen gerechnet. Der Vergleich mit den  $\text{Ne}^+$ -Messungen wurde durch geeignete Auswahl der Streuklassen aus diesen Spektren, die sich aus trajektorienabhängiger Neutralisation ergibt, und durch Anpassung der elastischen Energieverluste durchgeführt. Deswegen soll der Vergleich der gemessenen und der gerechneten Energiespektren zunächst an einem Beispiel für Natriumionen vorgenommen werden.

In Abb. 4.16 ist ein Energiespektrum von 1 keV  $\text{Na}^+$ -Ionen gestreut entlang der dichtgepackten [110]-Richtung ( $\psi = 0^\circ$ ) für einen Streu-



winkel  $\vartheta = 60^\circ$ , einen Einfallswinkel  $\Psi = 30^\circ$  und eine Temperatur  $T = 300$  K zu sehen. Die Streuintensität ist über einen ziemlich breiten Energiebereich verteilt, in dem zwei Maxima zu erkennen sind. Das eine Maximum bei niedriger Energie liegt etwas oberhalb des einfachen Zweierstoßes (S), das zweite knapp unterhalb der Energie (D) eines symmetrischen doppelten Zweierstoßes ( $\vartheta_i = \frac{\vartheta}{2}$ ; Abschn. 3.1.1). Wie es aufgrund des Neutralisationsverhaltens der Alkaliionen zu erwarten ist (Abschn. 3.2), gibt das mit ARGUS simulierte Energiespektrum der Summe aller reflektierten Teilchen in Abb. 4.17 die Form des experimentellen Spektrums (Abb. 4.16) recht gut wieder. Die Abweichungen können auf die Energie- und Winkelauflösung des Detektors zurückzuführen sein, die aus statistischen Gründen etwa doppelt so groß ( $\Delta E/E = \pm 2\%$ ,  $\Delta \vartheta = \pm 5\%$ ) wie im Experiment gewählt worden sind. Außerdem wurden in der Rechnung alle reflektierten Teilchen unterhalb  $0.6 E_0$  abgeschnitten. Der Hauptbeitrag zur Streuung kommt von Ionen, die sowohl Ablenkungen an der ersten, als auch an der zweiten Atomlage erfahren haben. Alle diese Streueignisse werden unter der Bezeichnung "Zick-Zack II" zusammengefaßt. Diese Streuklasse zeigt zwei Maxima: das erste oberhalb der Zweierstoßenergie (S) ist wahrscheinlich auf eine Hauptablenkung in der zweiten Atomlage und weitere kleine Ablenkungen an den benachbarten Ketten der ersten Lage zurückzuführen (siehe auch "Quasi-Einfachstreuung" in Abschn. 3.1.1.1), das zweite bei der Energie der symmetrischen Doppelstreuung D scheint durch zwei etwa gleich große Ablenkungen in der ersten und zweiten Atomlage verursacht zu sein. Streueignisse mit Trajektorien, die die Streuebene verlassen, zwischen Atomen der ersten Lage allein (Zick-Zack I) sind ohne Bedeutung für Oberflächenrichtungen mit niedrigem Index. Auch sind reflektierte Teilchen, die mit tieferen Atomlagen wechselwirken (Lage III-V) für das Spektrum nicht ausschlaggebend, da sie nur einen strukturlosen Untergrund in der Größenordnung des experimentellen Fehlers erzeugen. Wiederum wichtig für die Gestalt des Spektrums sind die Streueignisse entlang der Oberflächenketten der ersten und der zweiten Atomlage, deren Trajektorien die Streuebene nicht verlassen. Der Beitrag der zwei Atomlagen ist sehr ähnlich und ist innerhalb jeder Lage jeweils zwei verschiedenen Klassen zuzuordnen: der Einfachstreuung (Einfach I, II) und der

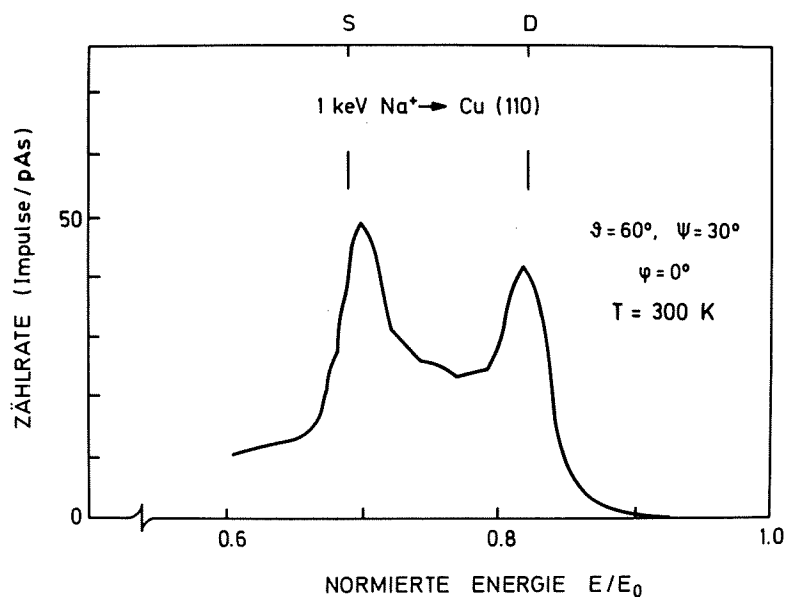


Abb. 4.16: Energiespektrum für 1 keV Natriumionen mit der Streuebene in der dichtgepackten [110]-Oberflächenrichtung: Die Winkel sind wie in Abb. 4.4 definiert. S steht für den einfachen Zweierstoß (Gl. 3.1) und D für die symmetrische Doppelstreuung (Gl. 3.5)

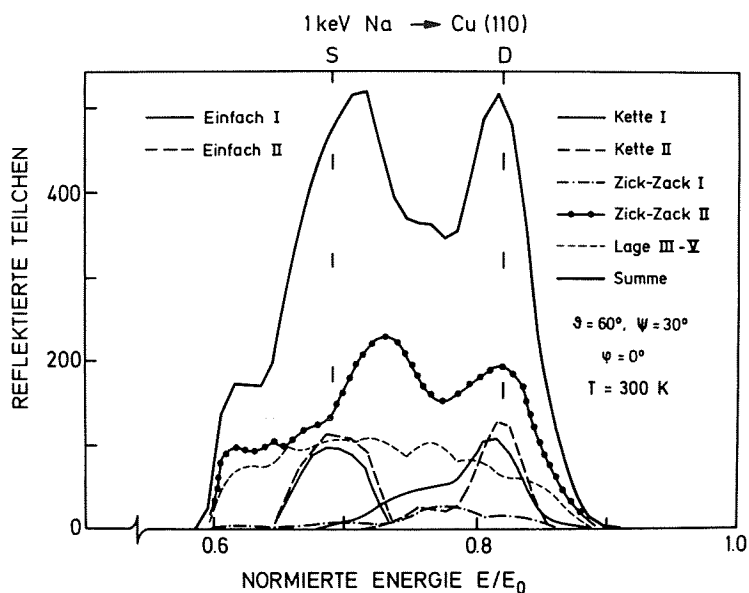


Abb. 4.17: Energiespektrum für 1 keV Natriumteilchen simuliert mit ARGUS-Rechnungen für die Streugeometrie von Abb. 4.16: Oberflächen-Debye-Temperatur senkrecht zur (110)-Fläche  $\theta_{DZ} = 150$  K. Die reflektierten Teilchen wurden nur oberhalb  $0.6 E_0$  berücksichtigt. ( $10^6$  Primärteilchen) S (Einfach) und D (Kette) wie in Abb. 4.16

Doppelstreuung (Kette I, II). Die kleinen Unterschiede in den Beiträgen der beiden Atomlagen erklären sich durch die größere thermische Unordnung in der ersten Lage, die eine geringe Intensität bei der Einfachstreuung I (siehe Abb. 4.14 und 4.21;  $\Psi = 30^\circ$ ) und eine Verschiebung zu niedrigeren Energien bei der Kette I-Klasse bewirkt (Abschn. 3.3.3 bzw. /8/).

In Abb. 4.18 ist ein Energiespektrum für  $\text{Ne}^+$ -Ionen mit den gleichen Parametern wie oben zu sehen. Im Gegensatz zum  $\text{Na}^+$ -Spektrum in Abb. 4.16 fällt hier im wesentlichen die gesamte Streuintensität als Einfachstreuung an. Die Doppelstreuung ist um etwa einen Faktor 10 gedämpft und die absoluten Zählraten um einen Faktor 100 bis 1000 je nach Energielage geringer. Wie schon erwähnt, kommt die Edelgasionenstreuung der Streuung an Oberflächenketten am nächsten /21, 102/, deswegen sollte sich ein  $\text{Ne}^+$ -Spektrum aus den Streuteilen der Oberflächenketten eines  $\text{Na}^+$ -Spektrums aufbauen lassen. Dieser Versuch ist in Abb. 4.19 unternommen worden: Die feinen Linien geben die Streuklassen, Einfach I und Kette I, aus Abb. 4.17 für das andere

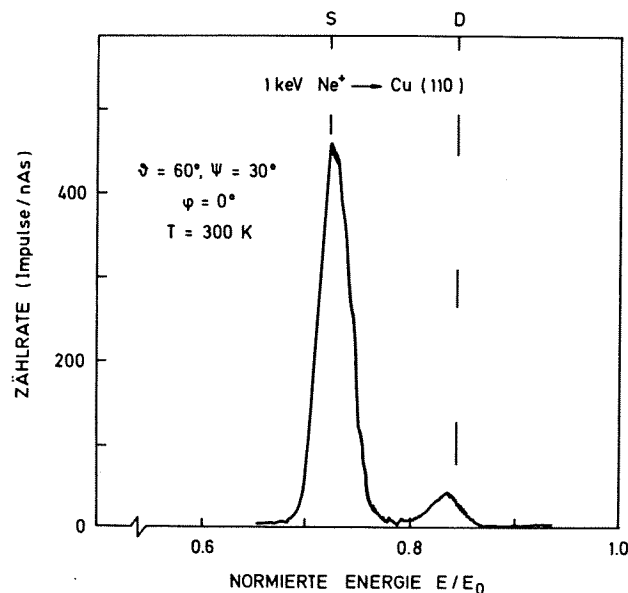


Abb. 4.18: Energiespektrum für 1 keV Neonionen mit der Streugeometrie aus Abb. 4.16.

Massenverhältnis in der Energielage korrigiert wieder. Die starken Linien geben die reflektierten Teilchen ihrer unterschiedlichen Ionenüberlebenswahrscheinlichkeit nach gewichtet wieder. Die Wahrscheinlichkeit  $P(d)$  (Gl. 4.19), die gegenüber der Einfachstreuung verlängerte Trajektorie als Ion zu überleben, hängt vom Abstand  $d$  der Oberflächenatome in der Streuebene und der Projektilgeschwindigkeit ab. Mit der Konstanten  $A = (0.56 \pm 0.2) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ , die ein Maß für die Neutralisation pro Zeiteinheit in der Nähe der Oberflächenatome ist, ergibt sich der Stauchungsfaktor  $P(2.56 \text{ \AA}) = (21 \pm 9) \%$  für die Doppelstreuung in Abb. 4.19 (siehe Abschn. 4.3.1.6, 4.3.2). Betrachtet man das Ergebnis für die untere Grenze von  $P(d)$ , so ist es in hervorragender Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum in Abb. 4.18. Außerdem rechtfertigt diese Analyse die Identifikation des Hauptstreumaximums der Neonionenstreuung mit Einfachstößen der ersten Atomlagen (Einfach I). Für kleinere Einfallswinkel ändert sich qualitativ nichts, außer daß die Intensitäten der beiden Streuklassen energetisch näher zusammenrücken. Wie man aus Abb. 4.20 sieht, kann selbst bei einem Einfallswinkel  $\psi = 15^\circ$  das Maximum der Streuintensität mit dem der Einfach I-Streuung gleichgesetzt werden. Die gute Übereinstimmung mit gemessenen spektralen Verteilungen sieht man aus dem Vergleich mit Abb. 4.4a.

Also wurden für drei Einfallswinkel  $\psi$  und fünf Temperaturen ( $100 \text{ K} \leq T \leq 500 \text{ K}$ ) Na-Spektren wie in Abb. 4.17 berechnet und die Höhe des Einfach I-Maximums mit dem Ergebnis der  $\text{Ne}^+$ -Messung und des Zweiatommodells in Abb. 4.14 verglichen. Die vollen Quadrate in Abb. 4.21 stehen für die Simulation mit erhöhter thermischer Bewegung senkrecht zur Oberfläche ( $\theta_{\text{DZ}} = 150 \text{ K}$ ), während die offenen Quadrate das Ergebnis der isotropen Simulation für  $\psi = 15^\circ$  darstellen. Der Temperaturverlauf wird durch die Simulation gut reproduziert, besonders für  $\psi = 30^\circ$ . Für diesen Einfallswinkel wird sogar die oben erwähnte Struktur der Messung wiedergegeben, die im Zweiatommodell fehlt. Für  $\psi = 15^\circ$  liegt die Simulationsrechnung genau auf dem Ergebnis des Zweiatommodells, was den Schluß nahelegt, daß die Abweichungen der Messung auf Störungen der Ordnung des realen Kristalls zurückzuführen sind. Auch ARGUS liefert eine deutliche Ab-

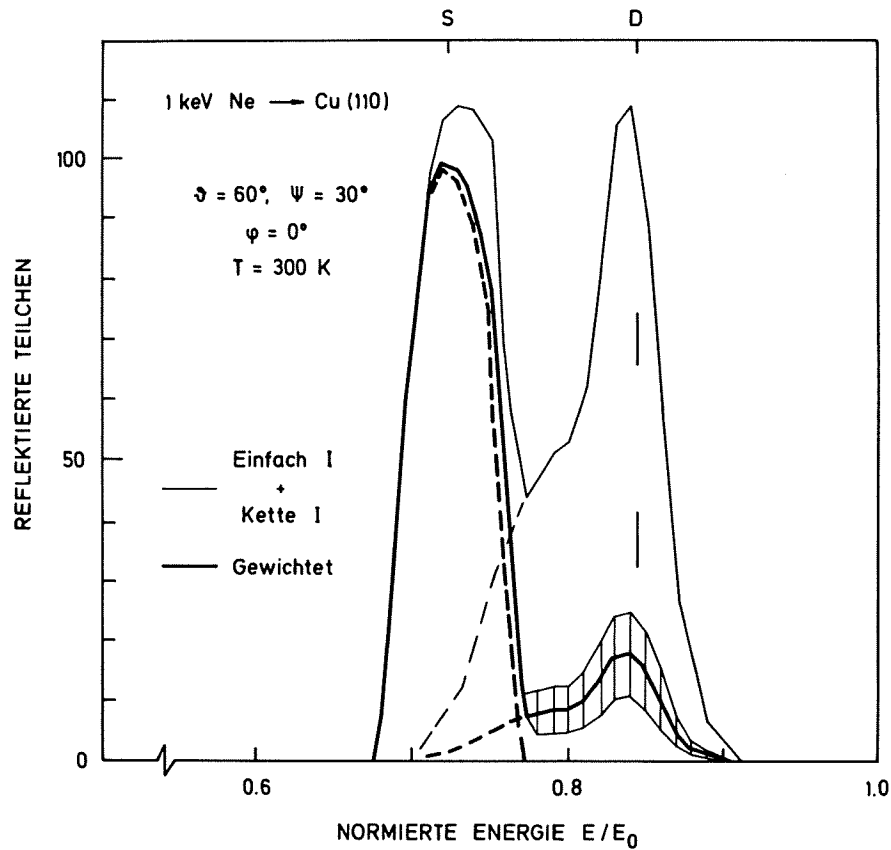


Abb. 4.19: Energiespektrum für 1 keV Neonteilchen für die Streugeometrie von Abb. 4.18: Die Streuklassen, Einfach I und Kette I, sind der Na-Simulation (Abb. 4.17) entnommen und für die Ne-Masse in der Energie korrigiert. Die Wichtung ergibt sich aus den unterschiedlichen Ionenüberlebenswahrscheinlichkeiten der Streuklassen (siehe Text - Abschn. 4.3.1.3 und 4.3.2).

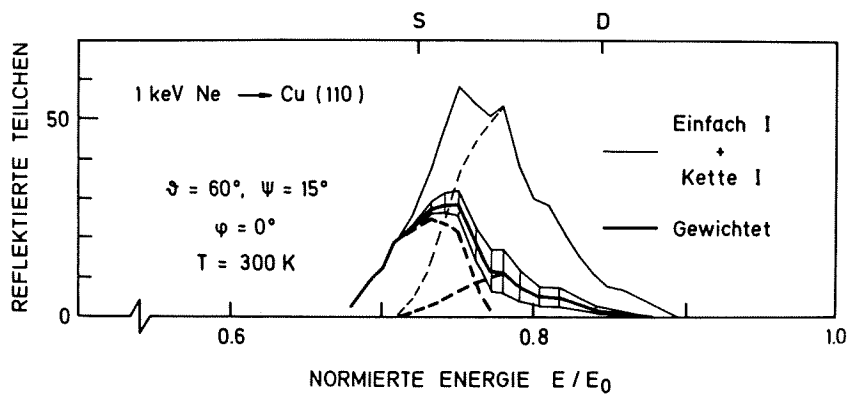


Abb. 4.20: Energiespektrum für 1 keV Neonteilchen für die Streugeometrie von Abb. 4.4: Die Zahl der reflektierten Teilchen wurde analog zu Abb. 4.19 ermittelt.

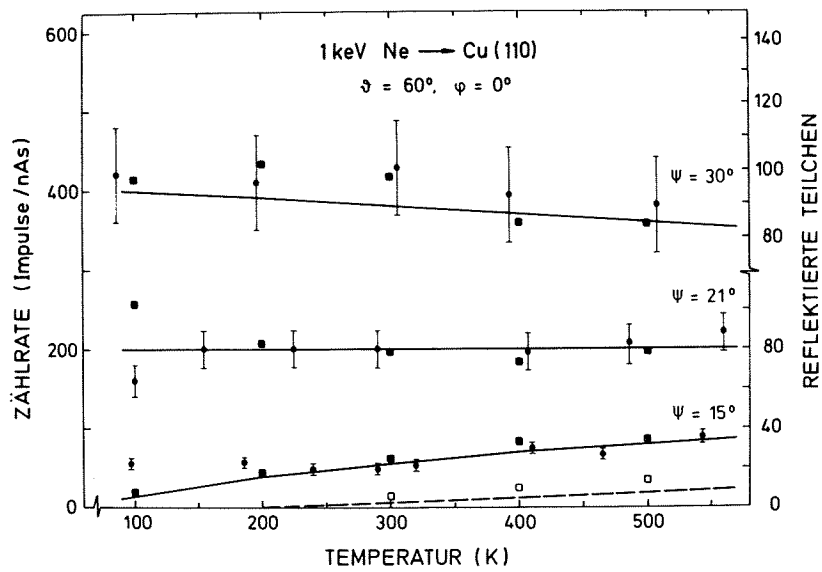


Abb. 4.21: Temperaturabhängigkeit des Maximums der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung aus Abb. 4.14 für dreitypische Einfallswinkel  $\Psi$ . Die vollen Quadrate geben die Intensität der Ne-Teilchen im Maximum der Einfach I-Streuung aus den ARGUS-Simulationen wieder (Abb. 4.17; 4.19; 4.20):  $\theta_{DZ} = 150$  K. Die offenen Quadrate ergeben sich bei der Simulation mit isotropen Schwingungen für  $\Psi = 15^\circ$ . Man beachte die unterschiedliche Skala für (Ne steht für Atome und Ionen.)

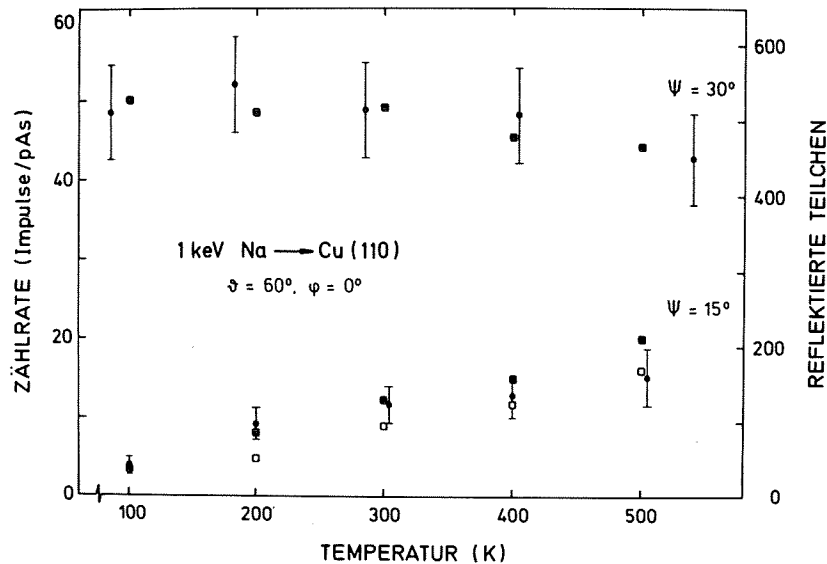


Abb. 4.22: Temperaturabhängigkeit des Maximums der Na<sup>+</sup>-Streuung nahe der Einfachstreuenergie (Abb. 4.16): Punkte mit Fehlerbalken. Die vollen Quadrate geben die Intensität der Na-Teilchen im Maximum der Summe aller Streuklassen (ARGUS) nahe S (Einfachstreuenergie) wieder (Abb. 4.17; 4.23):  $\theta_{DZ} = 150$  K. Die offenen Quadrate ergeben sich bei der Simulation mit isotropen thermischen Schwingungen für  $\Psi = 15^\circ$  (Abb. 4.24). Man beachte eine Skala für  $\Psi \leq \Psi_C$ . (Na steht für Atome und Ionen.)

weichung für die isotrope Simulation, die jedoch bei gleicher Skalierung wie die übrigen Kurven deutlich oberhalb des Ergebnisses des Zweiatommodells liegt. Der Grund könnte darin liegen, daß ARGUS die dreidimensionale thermische Unordnung berücksichtigt, die sich bei der isotropen Rechnung, in der die Normalbewegung nicht überwiegt, stärker auswirkt. Die Anpassung an die Messung führt zu verschiedenen Skalen bezüglich der reflektierten Teilchen für die Einfallswinkel  $\Psi \leq \Psi_c$  und  $\Psi > \Psi_c$ . Die Flußerhöhung am Schattenkegelrand, die beim Zweiatommodell nicht berücksichtigt worden war, kann diesen Unterschied erklären. In der Messung kann dieser Effekt innerhalb der Meßgenauigkeit durch die trajektorienabhängige Neutralisation wieder wettgemacht werden /24/. Diese Erklärung wird durch den Vergleich der  $\text{Na}^+$ -Zählrate im Maximum nahe der Einfachstreuenergie (Abb. 4.16) mit den reflektierten Teilchen im entsprechenden Maximum der Summe aller Streuklassen aus der ARGUS-Simulation (Abb. 4.17) gestützt. In Abb. 4.22 wurden die vollen Quadrate der Rechnung an die Messung für  $\Psi = 30^\circ$  angepaßt. Die Übereinstimmung für  $\Psi = 15^\circ$  ergibt sich daraus zwanglos. Obwohl die Summe aller Streuklassen auf keinen Fall im Rahmen eines Zweiatommodells zu verstehen ist, ließen sich die Kurven für dieses analytische Modell (Abb. 4.21) mit hervorragender Übereinstimmung auf die gerechneten und gemessenen Punkte in Abb. 4.22 legen, wobei bei der Normierung genau der Kehrwert (= 1.7) des Faktors zwischen den Skalen (für  $\Psi = 15^\circ$  und  $30^\circ$ ) von Abb. 4.21 auftritt. Die isotrope Simulation (offene Quadrate) liefert innerhalb des Meßfehlers das gleiche Ergebnis. Die Intensität der  $\text{Na}^+$ -Streuung ist also auf die Bewegung senkrecht zur Oberfläche nicht besonders empfindlich.

Diese Feststellung gilt nicht für die spektrale Verteilung. In Abb. 4.23 werden gemessene (Kurven) und gerechnete Spektren (Histogramme für  $T = 100 \text{ K}$ ,  $300 \text{ K}$ ,  $500 \text{ K}$ ) verglichen. Die Rechnung wurde nur für die Messung bei  $T = 290 \text{ K}$  angepaßt. Obwohl nur die Debye-Temperatur senkrecht zur Oberfläche ( $\theta_{\text{DZ}} = 150 \text{ K}$ ) von dem Volumenwert abweicht, bekommt man eine vernünftige Übereinstimmung. Das gestrichelte Histogramm deutet die gerechnete Streuintensität ohne die Anteile aus Lage III-V an. Die isotrope Rechnung in Abb. 4.24 zeigt eine wesentlich schlechtere Übereinstimmung. Die Anpassung wurde von Abb. 4.23 übernommen. Das gestrichelte Histogramm zeigt, daß eine Änderung der Anpassung für  $T = 290 \text{ K}$  das Ergebnis nicht verbessert.

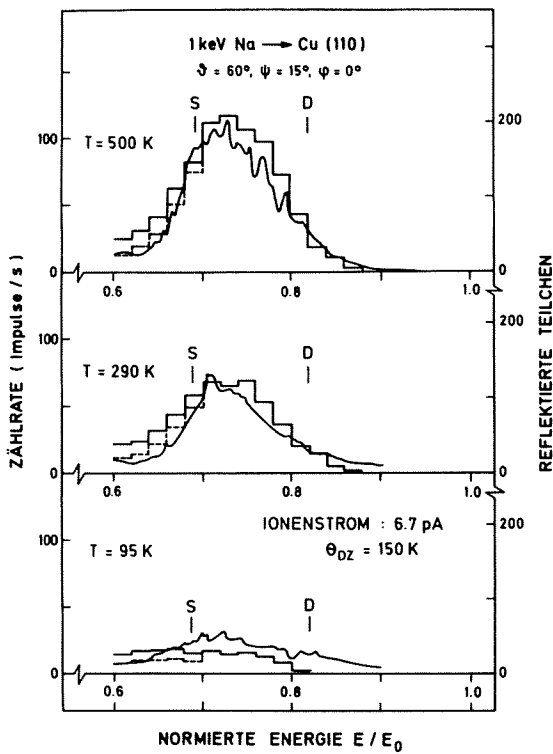


Abb. 4.23:

Temperaturabhängigkeit des Energiespektrums für 1 keV Natriumionen für die Streugeometrie von Abb. 4.4. Die Histogramme zeigen die gerechnete Energieverteilung der Natriumteilchen (ARGUS; analog der Summe in Abb.4.17):  $\theta_{DZ} = 150$  K. Die unterbrochenen Linien deuten das Spektrum ohne die Streuung an 3. bis 5. Atomlage an (siehe auch 4.22).

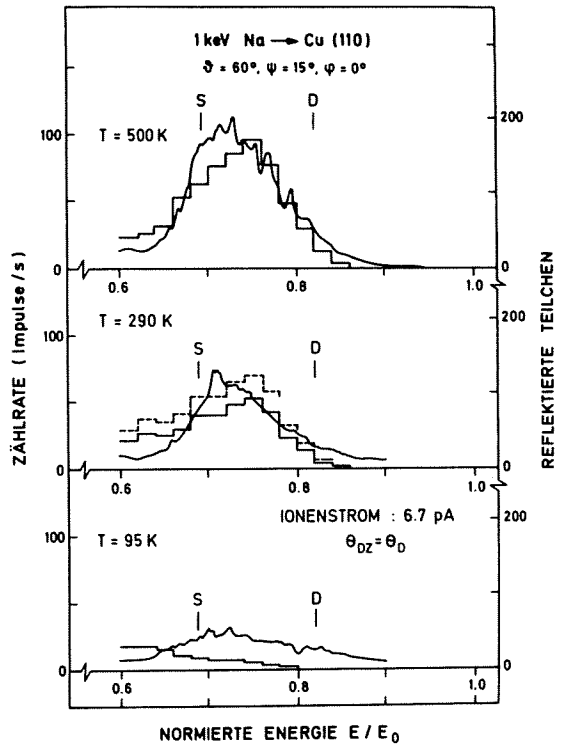


Abb. 4.24:

Temperaturabhängigkeit des Energiespektrums für 1 keV Natriumionen wie in Abb. 4.23. Die Histogramme zeigen jedoch die Energieverteilung der ARGUS-Rechnungen mit isotropen thermischen Schwingungen ( $\theta_D = 345$  K). Die Normierung ist aus Abb. 4.23 übernommen. Die unterbrochenen Linien zeigen, daß eine andere Normierung die schlechtere Übereinstimmung nicht verbessert.



#### 4.3.1.3.1 Bestimmung der Überlebenswahrscheinlichkeit von $\text{Ne}^+$ mit Hilfe der Simulationsrechnungen

Vorausgesetzt, daß die in Abschn. 4.3.1.3 gemachten Annahmen über die Flußerhöhung am Schattenkegelrand und die Trajektorienabhängigkeit der Neutralisation zutreffen, läßt sich aus den dort angegebenen Daten die Überlebenswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi)$  von  $\text{Ne}^+$ -Einfachstreuung für die drei dort simulierten Streugeometrien bestimmen. Abbildungen 4.21 und 4.22 stellen jeweils zwischen den Zählraten  $I_{\text{Ne}^+}$  bzw.  $I_{\text{Na}^+}$  der gemessenen Ionen ( $\text{Ne}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ) und der Anzahl der reflektierten Teilchen ( $R_{\text{Ne}}$ ,  $R_{\text{Na}}$ ) eine Beziehung her. Unter Verwendung des Literaturwertes  $P_{\text{Na}^+} \simeq 78\%$  für die Überlebenswahrscheinlichkeit von Natriumionen auf Kupfer (siehe Abschn. 3.2.2) kann  $P_{\text{Ne}^+}$  wie folgt abgeschätzt werden:

$$P_{\text{Ne}^+} = \frac{I_{\text{Ne}^+} R_{\text{Na}} P_{\text{Na}^+}}{R_{\text{Ne}} I_{\text{Na}^+}} \quad (4.10)$$

Um mögliche Störungen durch eine geometrieabhängige Transmission der Apparatur auszuschließen, wurde für diese Rechnung die Anpassung für  $\Psi = 15^\circ$  in Abb. 4.22 nochmals gesondert vorgenommen. Dadurch wurde  $R_{\text{Na}}(15^\circ)$  um ca. 16 % größer. Aus Gl. (4.10) ergibt sich auf diese Weise für diese drei Fälle:

$$\begin{aligned} P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 30^\circ; \varphi = 0^\circ) &= (3,5 \pm 0,5) \% \\ P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 15^\circ, 21^\circ; \varphi = 0^\circ) &= (2,4 \pm 0,4) \% \end{aligned}$$

(Die Werte für  $P_{\text{Ne}^+}$  sind in Tabelle IV zusammengefaßt.)

Diese Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit denen einer anderen Methode, die im Abschnitt über die Neutralisation einfachgestreuter Neonionen 4.3.1.6 vorgestellt wird. Bildet man das Verhältnis der beiden Werte  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 30^\circ)/P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 15^\circ, 21^\circ) \simeq 1,5$ , so erhält man ein Maß für den erhöhten Fluß, den ein streuendes Atom gemittelt über alle  $\sigma \geq \sigma_0$  unter einem Einfallswinkel  $\Psi \leq \Psi_c$  sieht ( $\sigma$ : Abschn. 4.3.1.1).

4.3.1.4 Streuung von 1 keV Ne<sup>+</sup>-Ionen entlang der [100]-Richtung als Funktion von T und  $\Psi$ .

Um das oben vorgestellte Zweiatommodell zu überprüfen, wurde die Höhe des Streuintensitätsmaximums bei der Einfachstreuenergie von Ne<sup>+</sup>-Spektren auch für die [100]-Richtung für verschiedene Einfallswinkel und Temperaturen ermittelt. Aus Abb. 4.25 geht hervor, daß sich qualitativ das erwartete Ergebnis einstellt (siehe Abb. 4.14). Eine

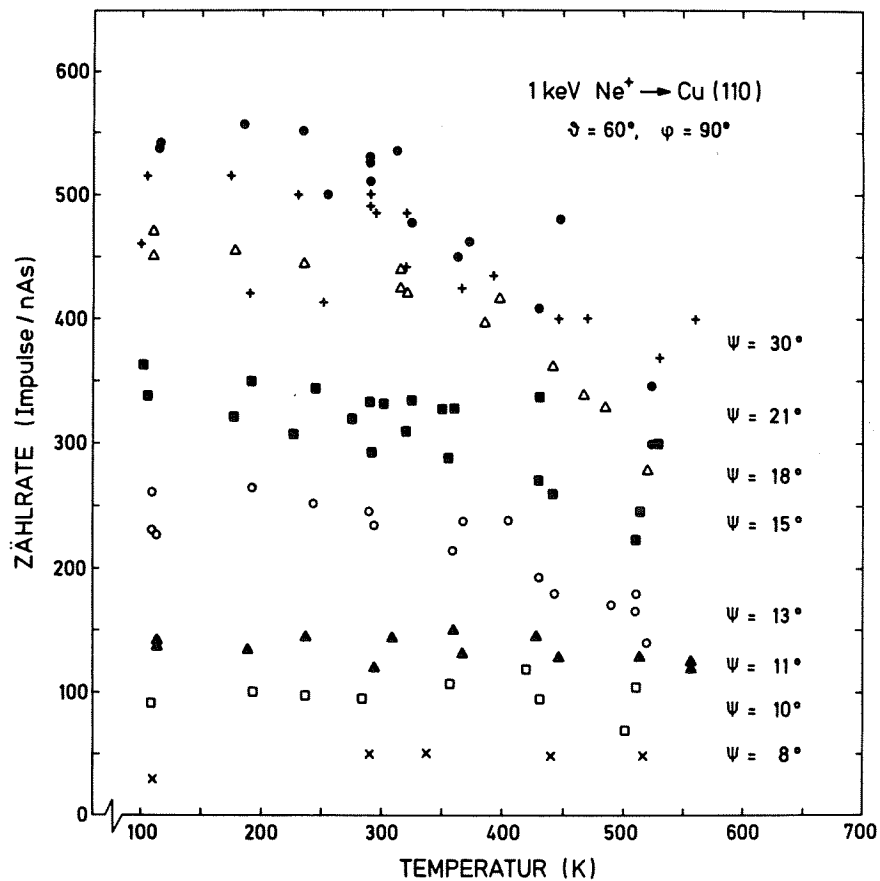


Abb. 4.25: Temperaturabhängigkeit des Maximums der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung (wie in Abb. 4.14, jedoch mit der Streuebene in der [100]-Oberflächenrichtung ( $\psi = 90^\circ$ )). Das qualitative Verhalten ist ähnlich wie in Abb. 4.14.

genaue Untersuchung der Zählraten ergibt jedoch deutliche Abweichungen von den analytischen Rechnungen. Während bei 500 K die Übereinstimmung gut ist, liegt die Zählrate mit abnehmender Temperatur für alle Einfallswinkel deutlich höher als vom Modell vorausgesagt. Der Effekt ist unterschiedlich groß, so daß die Zählrate unterhalb von 300 K für  $\psi = 21^\circ$  sogar größer wird als die für  $\psi = 30^\circ$ . Eine konstante Zählrate findet man erst für  $\psi = 11^\circ$ , obwohl man den kritischen Winkel bei  $\psi_c = 16^\circ$  erwarten würde. Trägt man die Zählrate gegen den Einfallswinkel - wie in Abb. 4.26 - auf, wird das Versagen des Zweiatommodells (Abb. 4.27) noch offensichtlicher. Besonders interessant ist das Ergebnis, wenn man die Differenz von Modell und Messung wie in Abb. 4.28 darstellt. Der Verlauf der Zählrate erinnert an die Flußerhöhungseffekte am Schattenkegelrand wenig oberhalb des kritischen Winkels /31, 96, 98/. Das Maximum der Zählrate liegt hier jedoch unterhalb  $\psi_c$ , wie es auch schon von Bronckers in [100]-Richtung anders als in [110]-Richtung gefunden wurde /96, 98/. Die Intensitätsverteilung gestreuter  $O^-$ -Ionen zeigt, daß diese Intensität zum Großteil von Streuung aus der zweiten Atomlage stammt /97, 98/. In der Tat liegen in [100]-Richtung die drei Atomketten, die die Oberflächenhalbkanäle bilden, besonders nahe beieinander. Die zwei Oberflächenketten haben einen Abstand von  $2.56 \text{ \AA}$  und der Abstand der beiden zu der dritten aus der zweiten Lage beträgt  $1.81 \text{ \AA}$ . Der Schattenkegelradius beträgt in einem Abstand von  $2.22 \text{ \AA}$  bis  $5.64 \text{ \AA}$  (nächster Nachbar bis drittnächster Nachbar) hinter den streuenden Atomen nach Abb. 3.7 zwischen  $1.4$  und  $1.8 \text{ \AA}$ . Die Schattenkegel der verschiedenen Ketten durchdringen sich also stark. Dadurch ist mit starken Wechselwirkungen zwischen den Streuereignissen in den verschiedenen Ketten zu rechnen, die zu Anomalien im Streusignal, z.B. wie Fokussierung /97, 89/ führen können. Ist die zusätzlich entstehende Streuintensität von der Einhaltung des Abstands eines Atompaars aus verschiedenen Atomketten abhängig, so ist diese Streuintensität der Wahrscheinlichkeit proportional, daß der Abstand der Ruhelage tatsächlich vorliegt. Diese Wahrscheinlichkeit ist, da die thermische Verteilung der relativen Auslenkungen zweier Atome eine Gaußverteilung ist (siehe Gl. 4.3), der Wurzel des quadratischen Schwankungsquadrats umgekehrt proportional:  $I \sim \overline{\Delta\sigma^2}^{-1/2}$ .

Aus Gl. 4.4 folgt, daß diese Intensität also mit  $\theta_D/\sqrt{T}$  geht. Das Maximum der Zählrate bei  $\psi = 15^\circ$  in Abb. 4.28 zeigt in etwa eine Proportionalität mit  $T^{-1/2}$ .

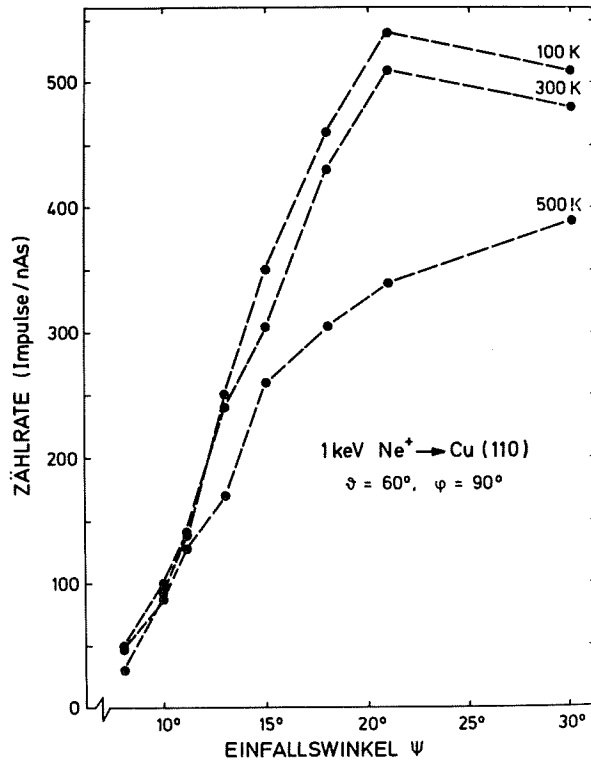


Abb. 4.26:

Einfallswinkelabhängigkeit des Maximums der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung aus Abb. 4.25 mit der Temperatur als Parameter

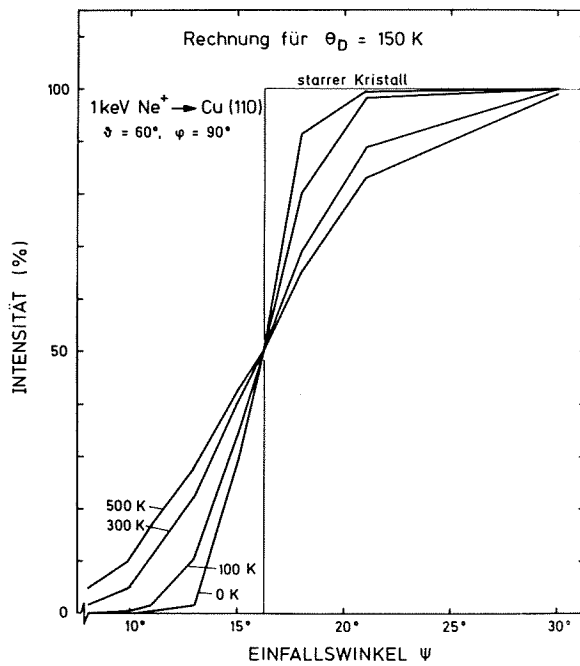


Abb. 4.27:

Einfallswinkelabhängigkeit des Maximums der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung nach dem Zweiatommodell mit der Streuebene in der [100]-Oberflächenrichtung ( $\varphi = 90^\circ$ ) mit der Temperatur als Parameter:  $\theta_D = \theta_{DZ}$  aus Abschn. 4.3.1.1

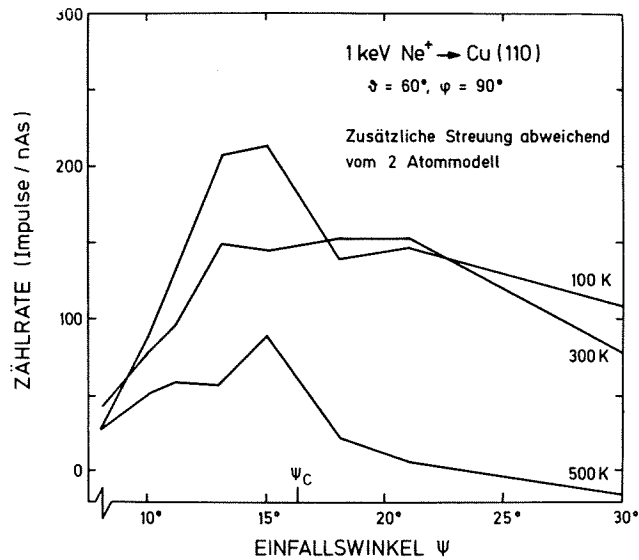


Abb. 4.28: Einfallswinkelabhängigkeit der Differenz zwischen Abb. 4.26 und Abb. 4.27 mit der Temperatur als Parameter.

#### 4.3.1.4.1 Weitere Informationen über die Streuung von Ne<sup>+</sup>- und Na<sup>+</sup>-Ionen in der [100]-Richtung aus den ARGUS-Rechnungen

In Abb. 4.29 ist ein Energiespektrum von Natriumionen gestreut entlang der [100]-Richtung ( $\varphi = 90^\circ$ ) für einen Streuwinkel  $\theta = 60^\circ$ , einen Einfallswinkel  $\psi = 30^\circ$  und eine Temperatur  $T = 300$  K zu sehen. Qualitativ ist die Form des Spektrums ähnlich wie für  $\varphi = 0^\circ$  (Abb.4.16). Es besteht jedoch fast ausschließlich aus den Intensitätsmaxima bei der Energie des einfachen Zweierstoßes (S) und des symmetrisch doppelten Zweierstoßes (D). Das mit ARGUS simulierte Spektrum in Abb. 4.30 (wie Abb. 4.17) gibt das gemessene Spektrum gut wieder. Auch das Verhältnis der Zählrate zur Zahl der reflektierten Teilchen der beiden Spektren ist bis auf 5 % gleich wie in  $\varphi = 0^\circ$  nur das zweite Maximum (bei D) ist in der Rechnung um  $\sim 50$  % höher. Betrachtet man die Streuklassen im einzelnen, so sieht man, daß die "Zick-Zack II" fast die gesamte Streuintensität liefern und von ihrer energetischen

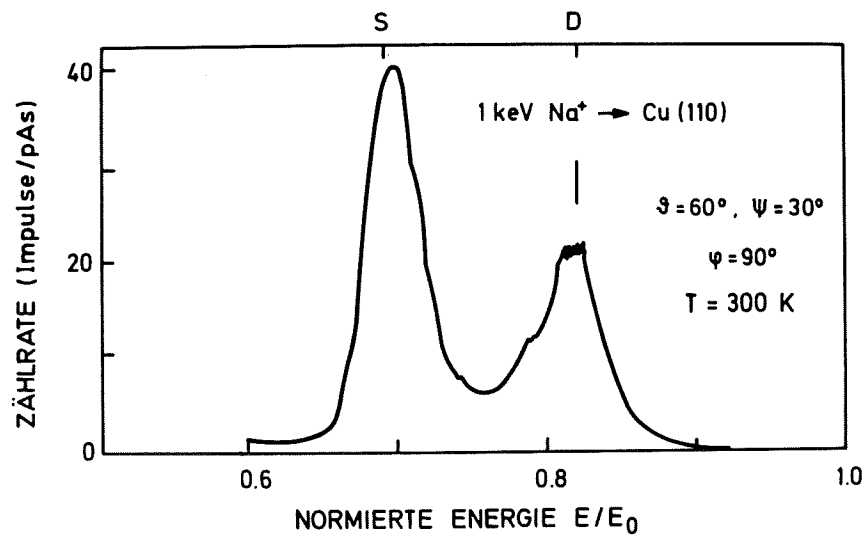


Abb. 4.29: Energiespektrum für 1 keV Natriumionen mit der Streuebene in der [100]-Oberflächenrichtung: S und D wie in Abb. 4.16

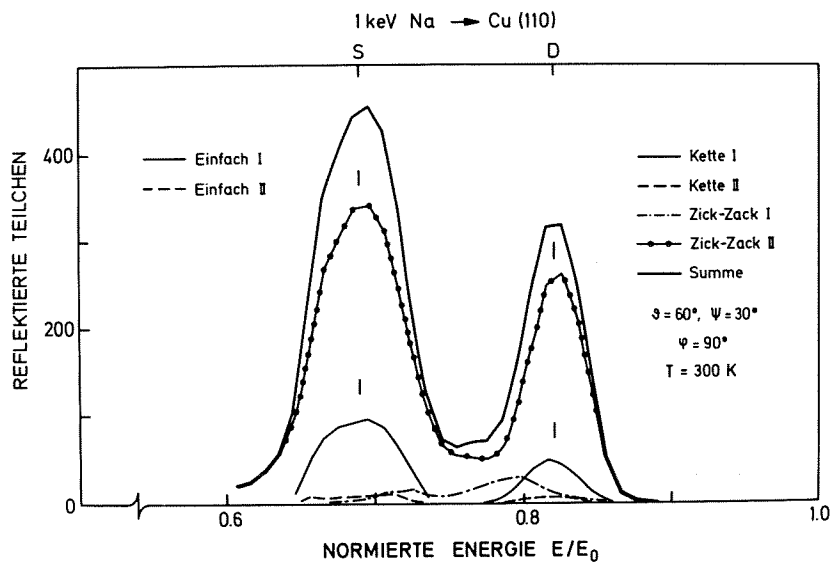


Abb. 4.30: Energiespektrum für 1 keV Natriumteilchen simuliert mit ARGUS-Rechnungen für die Streugeometrie von Abb. 4.29:  $\theta_{DZ} = 150 \text{ K}$  (siehe auch Abb. 4.17)

Lage her der Einfach- und der Doppelstreuung ähnlich sind. Die Einfachstreuung I ist sehr ähnlich der in  $\varphi = 0^\circ$ . Die Doppelstreuung (Kette I) ist nur halb so stark und liegt bei höheren Energien, beides ist durch den größeren Atomabstand plausibel (für  $d_2 > d_1 \Rightarrow \Delta\sigma/d_2 < \Delta\sigma/d_1$ ). Es fällt auf, daß die Streuung an der zweiten Lage (Einfach II, Kette II) fast völlig entfällt: die Atome in der zweiten Lage werden von denen in der ersten abgeschattet (Kettenabstand der ersten Lage 2.56 Å; 2 x Schattenkegelradius beim nächsten Atom der zweiten Lage ( $\approx 1.4 \text{ Å} \times 2 = 2.8 \text{ Å}$ )). Dringen doch Ionen zur zweiten Lage vor, so erleiden sie notwendigerweise eine schwache Ablenkung in der ersten Lage und fallen in die Klasse Zick-Zack II. So erklärt sich die oben erwähnte Energielage dieser Streuklasse.

Auch für diesen Azimut wurde die Höhe des Einfach I-Maximums mit dem Ergebnis der  $\text{Ne}^+$ -Messung in Abb. 4.25, der ARGUS-Rechnung und dem des Zweiatommodells für vier Einfallswinkel und fünf Temperaturen verglichen. Die Skalierungen wurden von dem Ergebnis  $\varphi = 0^\circ$  (Abb. 4.21) übernommen, um in der richtigen Größenordnung zu liegen. Die Punkte mit den Fehlerbalken in Abb. 4.31 stehen wieder für die Messung, die Quadrate für die Simulation (Einfach I) und die durchgezogenen Kurven für das Zweiatommodell. Für die zwei Einfallswinkel  $\psi = 30^\circ$ ,  $15^\circ$  läßt sich die Messung im wesentlichen durch die Einfachstreuung I erklären. Mit abnehmendem  $\psi$  wird die Übereinstimmung für niedrige Temperaturen immer schlechter und nähert sich mehr dem Zweiatommodell an. Es ist schwierig, die verschiedenen Diskrepanzen zu erklären. Das andere Temperaturverhalten der Einfachstreuung I gegenüber  $\varphi = 0^\circ$  läßt sich so deuten, daß diese Streuklasse für  $\varphi = 90^\circ$  streukinetisch einen anderen Charakter hat, der durch ein Zweiatommodell nicht ausreichend beschrieben ist. Da nämlich der Simulationscode ARGUS nur Streueignisse erkennt, die eine Ablenkung größer als  $5^\circ$  bewirken, ist die Klassifizierung nicht fein genug, um kleine Ablenkungen durch Atome benachbarter Ketten, die die einfachgestreuten Ionen in der Streuebene halten, die sonst der Detektoröffnung entgehen würden, zu erfassen. Dort, wo die "Einfach I" die Messung nicht ausreichend erklären, müßten wahrscheinlich weitere Streueignisse

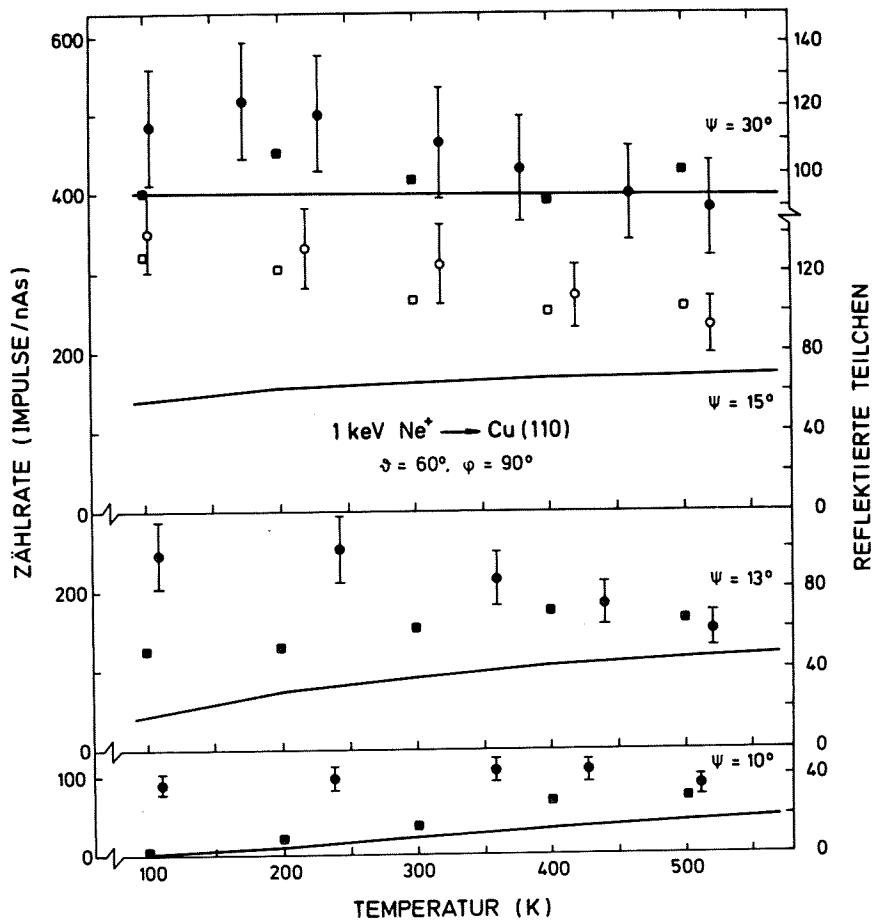


Abb. 4.31: Temperaturabhängigkeit des Maximums der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung aus Abb. 4.25 für vier ausgewählte Einfallswinkel  $\psi$ : Punkte mit Fehlerbalken. Die Quadrate geben die Intensität der Ne-Teilchen im Maximum der Einfachstreuung aus den ARGUS-Simulationen wieder (Abb. 4.30). Die Kurven stehen für das Zweiatommodell (Abb. 4.27):  $\theta_{DZ} = 150$  K. (Ne steht für Atome und Ionen.)

hinzugenommen werden, die mit der Temperatur abnehmen. Sie sind jedoch auf Grund der oben erwähnten "zu groben" Einteilung schwer zu identifizieren. Immerhin zeigen die Zick-Zack II für  $\psi = 15^\circ$  und  $30^\circ$  ein Verhalten, das annähernd linear in  $1/\sqrt{T}$  ist. Bei einem Einfallswinkel  $\psi = 15^\circ$  treten die "Einfach II" wieder auf, sie gehen sogar eher mit  $1/T$ . Diese Tatsache läßt sich so verstehen, daß ein Ion



beim Vordringen zur 2. Lage nur dann keine zusätzliche Ablenkung erfährt, wenn es dabei ein symmetrisches Potential sieht, d.h. das linke und das rechte Atom aus den Oberflächenketten den Ruheabstand zum streuenden Atom hat. Bei dem noch kleineren Einfallswinkel  $\psi = 13^\circ$  ist die Einfachstreuung aus der 2. Lage jedoch nur noch linear mit der Temperatur ab ( $R(T) = - aT + b$ ).

Die quantitative Auswertung der Messungen in [100]-Richtung ist mit den bis jetzt vorgestellten Werkzeugen, Zweiatommodell und ARGUS-Code, in dem hier gewählten Parameterbereich noch nicht möglich. Weiteres Nachdenken über das Problem scheint jedoch lohnend, da die Ermittlung von  $\theta_{DZ}$  in einer zweiten Oberflächenrichtung Aufschluß über mögliche Korrelationen bei der Bewegung der Oberflächenatome senkrecht zur Oberfläche geben könnte. Außerdem enthalten die oben vorgestellten Messungen verstärkt Informationen über die Geometrie der ersten Lage im Verhältnis zur zweiten Lage und insbesondere auch über die thermische Unordnung in [110]-Richtung, also parallel zur Oberfläche. Die recht gute Übereinstimmung von Messung und Simulation für  $\psi = 15^\circ, 30^\circ$  in Abb. 4.31 legen jedoch den Schluß nahe, daß die Debye-Temperatur in [110]-Richtung nur geringfügig von der im Volumen abweicht, wenn man voraussetzt, daß  $\theta_{DZ}$  mit 150 K richtig gewählt wurde.

#### 4.3.1.5 Einige Energiespektren für "willkürliche" Oberflächenrichtungen

Um die Gültigkeit der vorgestellten Analysemethoden auch für Azimutwinkel, die nicht parallel zu den Oberflächenketten verlaufen, zu beleuchten, sollen einige experimentelle und berechnete  $Ne^+$ - und  $Na^+$ -Spektren für "willkürliche" Oberflächenrichtungen vorgestellt werden. Da aufgrund des fehlenden Kettencharakters dieser Richtungen die Atome erst bei sehr kleinen Einfalls- bzw. Ausfallswinkeln in die Reichweite der Schattenkegel ihrer Nachbarn kommen, konnte in der verwendeten Geometrie keine nennenswerte Temperaturabhängigkeit gefunden werden. Also beschränkt sich die Betrachtung auf eine Temperatur.

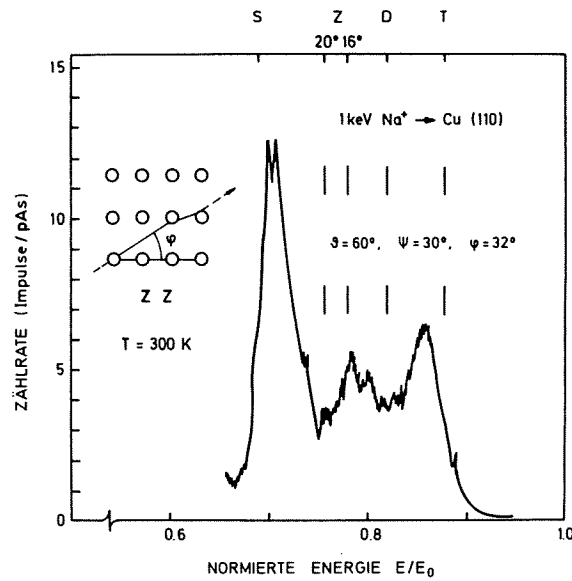


Abb. 4.32: Energiespektrum für 1 keV Natriumionen mit der Streuebene in eine "willkürliche" Oberflächenrichtung; Z steht für Streuereignisse wie in Schema ZZ:  $20^\circ$  und  $16^\circ$  ist die Ablenkung aus der Streuebene (siehe Text). T steht für die symmetrische Dreifachstreuung S, D,  $\theta$  und  $\psi$  wie in Abb. 4.16.

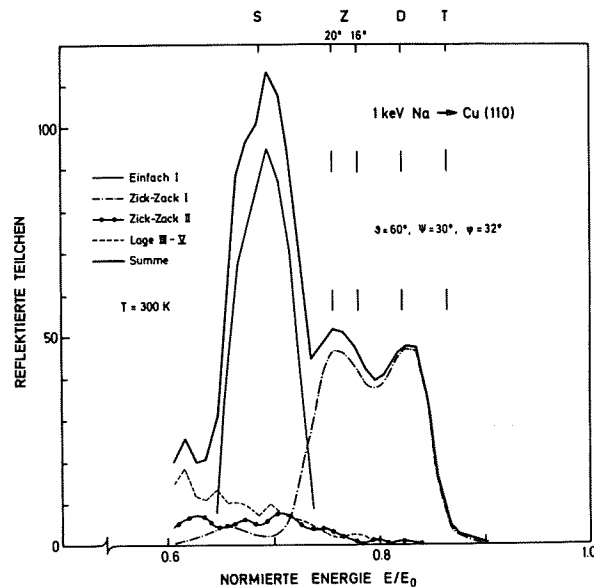


Abb. 4.33: Energiespektrum für 1 keV Natriumteilchen simuliert mit ARGUS-Rechnungen für die Streugeometrie von Abb. 4.32:  $\theta_{DZ} = 150$  K (siehe auch Abb. 4.17)

In Abb. 4.32 wird ein Energiespektrum von 1 keV  $\text{Na}^+$ -Ionen mit der Streuebene entlang dem Azimut  $\varphi = 32^\circ$ , für einen Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$ , einen Einfallswinkel  $\Psi = 30^\circ$  und eine Temperatur  $T = 300$  K gezeigt. Wie man aus Abb. 4.33 (simuliert wie Abb. 4.17) sieht, kommt der wesentliche Beitrag der reflektierten Teilchen von den Streuklassen Einfach I und Zick-Zack I. Das Intensitätsmaximum in der Nähe der Energien, die mit Z gekennzeichnet sind, kann durch Dreifachstreuereignisse erklärt werden, deren Trajektorien einer symmetrischen Doppelstreuung mit dem ersten und dem dritten Atom ( $\vartheta_i \approx \vartheta_j \approx 30^\circ$ ) gleichen, wenn diese Trajektorien in die Streuebene projiziert werden (siehe Schema ZZ in Abb. 4.32). Zusätzlich kommt es zu einer doppelten Ablenkung in der Oberflächenebene durch das zweite und dritte Atom (die durchgezogene Linie des Schemas zeigt die Trajektorie in der Oberflächenebene). Die mit Z- $20^\circ$  und Z- $16^\circ$  gekennzeichneten Energien zeigen die Energie eines Na-Teilchens nach drei solchen Zweierstößen, wenn die Auslenkung aus der Streuebene  $20^\circ$  bzw.  $16^\circ$  beträgt (durchgezogene Linie im Schema). Die Tatsache, daß diese Ablenkung im Experiment kleiner ( $16^\circ$ , Abb. 4.32) zu sein scheint als in der Simulation ( $20^\circ$ , Abb. 4.33), könnte ein Hinweis sein, daß die thermische Unordnung in der Oberflächenebene, die die Wahrscheinlichkeit der geraden Ausrichtung der drei Atome erhöht, durch das Simulationsprogramm unterschätzt wird, da in der Oberflächenebene die Debye-Temperatur anders als senkrecht zu ihr ( $\theta_{DZ} = 150$  K) dem Volumenwert ( $\theta_D = 343$  K) gleichgesetzt wurde. Für die Bewegung in  $[100]$ -Richtung einer k.f.z. (110)-Oberfläche kann man jedoch eine ähnliche Debye-Temperatur wie für die senkrecht zur Oberfläche erwarten (siehe Abschn. 3.3.2). Es ist zu vermuten, daß die erheblichen Abweichungen zwischen experimentellen und simulierten Spektren, die man findet, wenn man bei diesem Azimut den Einfallswinkel verringert ( $\Psi = 15^\circ$ ), auf die gleiche Weise zu erklären ist: bei hohen Temperaturen ( $T = 500$  K) stimmen die Spektren qualitativ überein, während bei niedrigeren Temperaturen ( $T < 300$  K) anders als im Experiment die Simulation zunehmend mehr Intensität für die Zick-Zack I als für die Einfach I liefert (keine Abbildung). Das Maximum der Zick-Zack I-Streuklasse bei höheren Energien in den Abbildungen 4.32 und 4.33 ist höchstwahrscheinlich auf Streuereignisse zurückzuführen,

die einer Dreifachstreuung unter Einbeziehung der dritten Atomreihe im Schema ZZ ähnlich sind und zusätzlich eine vergleichbare Ablenkung außerhalb der Streuebene erfahren wie die bei dem Maximum, das mit Z gekennzeichnet ist. Abgesehen von der auch hier besseren Auflösung der Maxima im Experiment sind diese Spektren ebenfalls in vernünftiger Übereinstimmung (siehe Abschn. 4.3.1.3). Diese Übereinstimmung zwischen Messungen und ARGUS-Code wird dadurch unterstrichen, daß das Verhältnis der gemessenen Zählrate zur Zahl der reflektierten Teilchen innerhalb des Meßfehlers mit dem für andere Geometrien gefundenen Verhältnis übereinstimmt (siehe Abb. 4.16, 4.17, 4.29, 4.30).

Die oben gemachten Annahmen über die Natur der Zick-Zack I-Streuintensität in den Abbildungen 4.32 und 4.33 wird durch die Betrachtung der entsprechenden Ne-Spektren erhärtet. Wie man in Abb. 4.34 sieht, ist im gemessenen Neonspektrum nur das Z-Maximum schwach sichtbar. Es zeigt, daß das höherenergetische Maximum von Teilchen erzeugt wird, die einen erheblich längeren Weg in der Oberflächenebene zurücklegen als die, die die sichtbare Intensität erzeugen. Das Spektrum in Abb. 4.35 wurde auf die gleiche Weise wie das in Abb. 4.19 aufgebaut: die feinen Linien geben die Streuklassen, Einfach I und Zick-Zack I aus Abb. 4.33 mit korrigierter Energielage wieder. Die starken Linien berücksichtigen die unterschiedlichen Überlebenswahrscheinlichkeiten. Für die Trajektorie im Schema ZZ aus Abb. 4.32 wurde die Strecke in der Oberflächenebene  $d$  auf ca.  $7 \text{ \AA}$  abgeschätzt. Für das erste Maximum der Zick-Zack I-Intensität ergibt sich also der Stauchungsfaktor  $P(7 \text{ \AA}) = (1.4 \pm 1.6 / 1.1) \%$  (Gl. 4.19), für das zweite Maximum, für das Streuung an der dritten Kette angenommen wurde,  $P(14 \text{ \AA}) = P^2(7 \text{ \AA}) = (2.0 \pm 7.0 / 1.9) \cdot 10^{-2} \%$  (siehe Abschn. 4.3.1.3, 4.3.1.6, 4.3.2). Wie man in Abb. 4.35 sieht, stimmt in diesem Fall das Ergebnis für die obere Grenze von  $P(d)$  gut mit der Messung in Abb. 4.34 überein. Diese Abweichung nach oben ist nicht überraschend, da  $A = (0.56 \pm 0.2 / 0.1) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$  nur innerhalb eines Abstands von  $1.5 \text{ \AA}$  um die Atome bzw. für die dichtgepackte (110)-Richtung ermittelt wurde (Abschn. 4.3.1.6). Wertet man die Zählraten und die reflektierten Teilchen im Maximum der Einfachstreuung aus den Abbildungen 4.32, 4.33, 4.34 und 4.35 in Gl. (4.10) aus, so erhält man die Überlebenswahrscheinlichkeit für die  $\text{Ne}^+$ -Einfachstreuung  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 30^\circ, \varphi = 32^\circ) = (4.2 \pm 0.6) \%$ . (Dieser Wert ist zum Vergleich in Tabelle IV nochmals aufgeführt.)

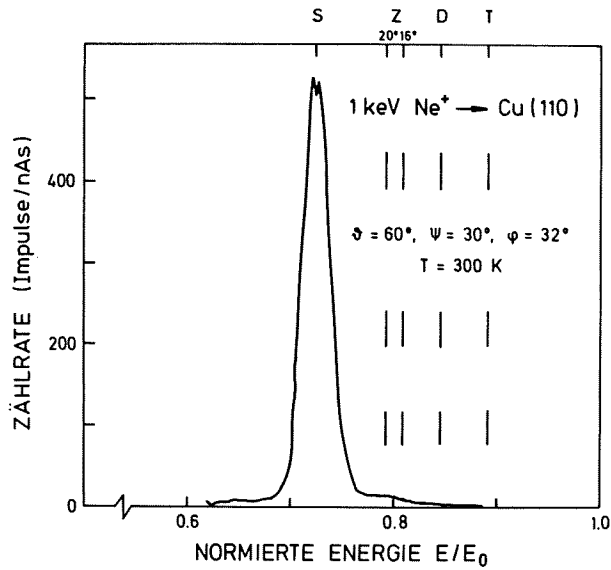


Abb. 4.34: Energiespektrum für 1 keV Neonionen für die Streugeometrie von Abb. 4.32

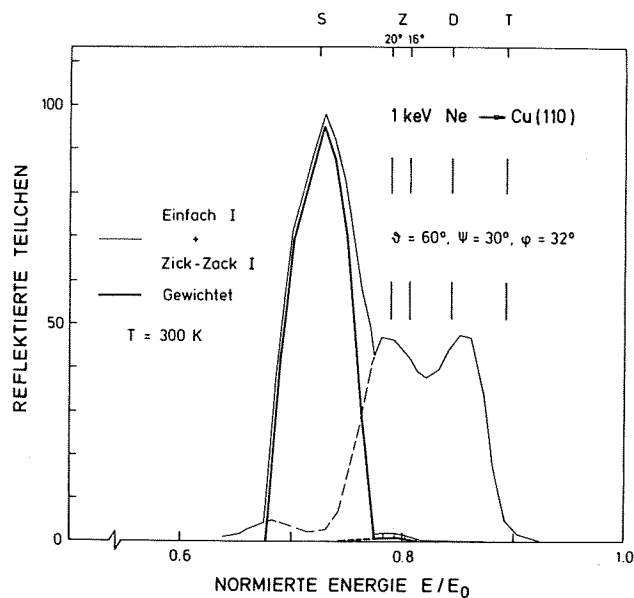


Abb. 4.35: Energiespektrum für 1 keV Neonteilchen für die Streugeometrie von Abb. 4.34: Die Streuklassen, Einfach I und Zick-Zack I, sind der Na-Simulation (Abb. 4.33) entnommen und analog zu Abb. 4.19 verwendet (siehe Textabschn. 4.3.1.5 und 4.3.2).

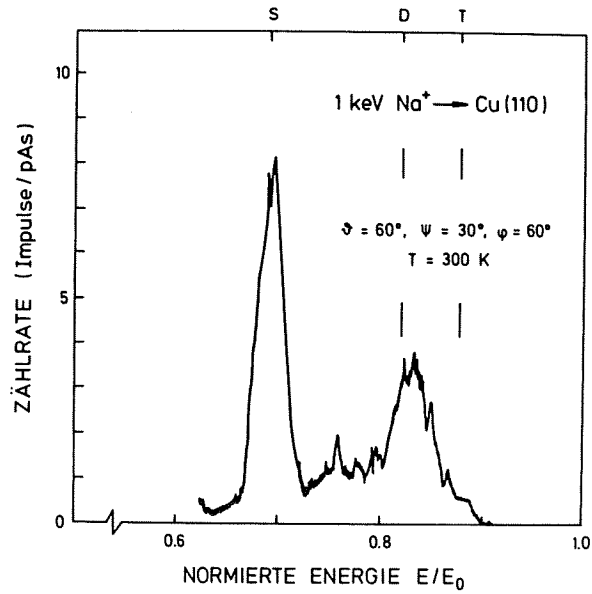


Abb. 4.36: Energiespektrum für 1 keV Natriumionen mit der Streuebene in die Oberflächenrichtung mit der geringsten Mehrfachstreuung: S, D, T, ϑ und ψ wie in Abb. 4.32.

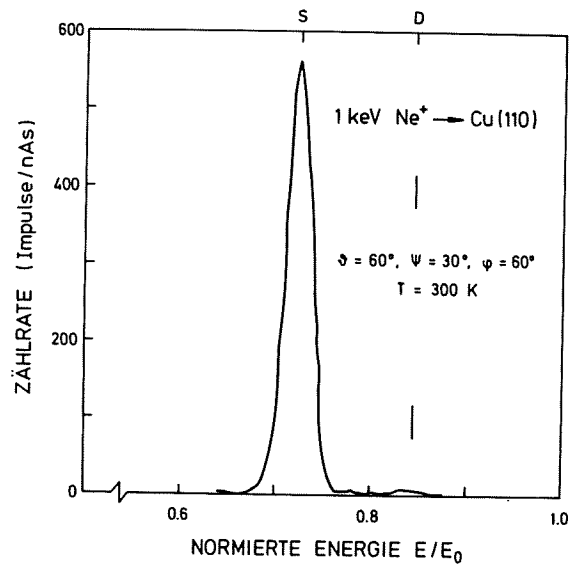


Abb. 4.37: Energiespektrum für 1 keV Neonionen für die Streugeometrie von Abb. 4.36.

In Abb. 4.33 sieht man, daß die Mehrfachstreuung bei der Energie der Einfachstreuung in "willkürliche" Oberflächenrichtungen praktisch vernachlässigbar ist. Diese Mehrfachstreuanteile haben auf einer k.f.z.(110)-Oberfläche ihr Minimum bei  $\varphi \cong 60^\circ / 104^\circ$ . Tatsächlich hat das  $\text{Na}^+$ -Intensitätsmaximum bei der Einfachstreuenergie S ein Minimum bei dem Azimut  $\varphi = 60^\circ$  (Abb. 4.36, vergl. Abb. 4.16, 4.29, 4.32). Die Zählrate im Maximum beträgt  $\sim(7.6 \pm 1.1)$  Impulse/pAs in Abb. 4.36 (Zählrate für  $\Psi = 15^\circ$ : 9.7 Impulse/pAs; ohne Abbildung). Die Zahl der reflektierten Teilchen im Einfach I-Maximum liegt je nach Azimut bei der Simulationsrechnung zwischen 95 - 98 (Abb. 4.17, 4.30, 4.33). Das Verhältnis der Zählrate zu den reflektierten Teilchen schwankt bei diesen Beispielen zwischen 0.089 und 0.101 Impulsen/pAs, so daß diese Zahl der Teilchen im Einfach I-Maximum einer Zählrate von 8.5 bis 9.9 Impulsen/pAs entspricht. Das bedeutet, daß für den Azimut  $\varphi = 60^\circ$  innerhalb des Meßfehlers von  $\pm 15\%$  die gesamte  $\text{Na}^+$ -Intensität bei der Energie S der Einfach I-Streuung zuzuschreiben ist. Also kann die Überlebenswahrscheinlichkeit für die Einfachstreuung von  $\text{Ne}^+$  durch direktes Vergleichen der Abbildungen 4.36 und 4.37 über Gl. (4.10) mit  $R_{\text{Na}} = R_{\text{Ne}}$  berechnet werden. Man erhält  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 30^\circ, \varphi = 60^\circ) = (5.8 \pm 0.9)\%$  und  $P_{\text{Ne}^+}(\Psi = 15^\circ, \varphi = 60^\circ) = (3.7 \pm 0.6)\%$  für die nicht dargestellten Spektren, die mit dem kleineren Einfallswinkel  $\Psi = 15^\circ$  bei gleichem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  erzeugt wurden. (Auch diese Werte sind zum Vergleich in Tab. IV nochmals aufgeführt.)

#### 4.3.1.6 Bestimmung der Überlebenswahrscheinlichkeit der einfach gestreuten $\text{Ne}^+$ -Ionen mit Hilfe eines "Hagstrum"-ähnlichen Neutralisationsmodells

Aus den weiter oben durchgeführten Vergleichen zwischen den  $\text{Ne}^+$ - und  $\text{Na}^+$ -Zählraten im Maximum in der Nähe der Einfachstreuenergie hatten sich Aussagen über die Überlebenswahrscheinlichkeit der einfachgestreuten  $\text{Ne}^+$ -Ionen (Abschn. 4.3.1.3.1, 4.3.1.5) ergeben. Um diese Ergebnisse zu testen, wurden Messungen vorgenommen, die durch Variation der Primärenergie ( $400 \text{ eV} \lesssim E_0 \lesssim 1200 \text{ eV}$ ) bei zwei Ein-

fallswinkeln über die Auswertung mit einem "Hagstrum"-ähnlichen Neutralisationsmodell die notwendige Information liefern (Abschn. 3.2.1).

Da Reionisation von Neonatomen auf Kupfer, wie weiter oben (Abschnitt 3.2.1) festgestellt, nur für Abstände  $S < 0.3 \text{ \AA}$  gefunden wird, ist bei den hier verwendeten Energien (kleinster Abstand für  $\vartheta = 60^\circ$ :  $0.9 \text{ \AA} \gtrsim S_0 \gtrsim 0.6 \text{ \AA}$ ) die Neutralisation entlang der gesamten Trajektorie zu berücksichtigen. Ferner werden in der Literatur für die Konstante  $a$  im Exponenten der Elektronenübergangsrate  $R_t$  (Abschn. 3.2.1) für verschiedene Ion-Substrat-Kombinationen Werte zwischen 1 und  $5 \text{ \AA}^{-1}$  angegeben /50, 58, 62, 64, 105/. Sie entsprechen charakteristischen Abfallängen zwischen 0,2 und  $1 \text{ \AA}$ . Bei den oben angegebenen kleinsten Abständen ist klar, daß diese Abstände im Neutralisationsmodell weder selbst noch ihre Variation mit der Energie vernachlässigt werden können. Die Tatsache, daß die meisten Messungen von Modellen, die  $S_0 = 0$  setzen, zumindest qualitativ beschrieben werden, zeigt, daß in diesen Fällen der Umkehrpunkt der Trajektorien sich in einem Gebiet befindet, in dem die Elektronenübergangsrate  $R_t$  eine langsam veränderliche Funktion vom Abstand  $S$  von der Oberfläche ist (siehe Abb. 4.40, Gl. (4.11) und /17, 62, 106, 107/). Deswegen wurde bei der Übergangsrate einer Form wie in Gl. (3.17) gegenüber Gl. (3.12) der Vorzug gegeben (siehe auch Abb. 4 in /66/). Kishinevsky et al. haben die Überlebenswahrscheinlichkeit berechnet, indem sie Gl. (3.17) für jedes Oberflächenatom summiert und entlang der Teilchentrajektorie integriert haben. Im folgenden werden geeignete Näherungen eingeführt, um diese Summenbildung zu vermeiden und einen einfachen analytischen Ausdruck für die Überlebenswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Ne}^+}$  zu erhalten.

Für den Azimut  $\varphi = 60^\circ$ , in dem die Energievariation durchgeführt wurde, kam folgendes Modell zur Anwendung: Wie aus Abschnitt 4.3.1.5 bekannt ist, kann man bei diesem Azimut die gesamte Streuintensität auf Stoßprozesse mit Einzelatomen zurückführen, da die Atome in der Streuebene sehr große Abstände ( $d \cong 20 \text{ \AA}$ ) haben. In der Nähe der Oberfläche ( $S \lesssim S_a$ ) trägt nur die Übergangsrate des streuenden Atoms zur Summe bei. Für große Abstände ergibt die Summe über die radial-



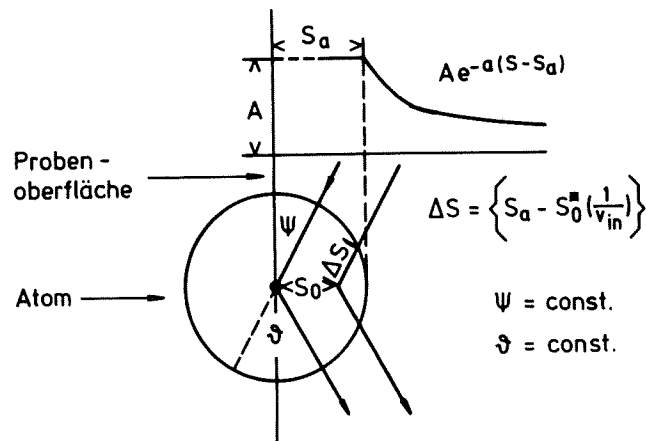


Abb. 4.38: Skizze der Elektronenübergangsrate an einem Oberflächenatom.  $S_a$  gibt den Bereich konstanter Übergangsrate an,  $S_0$  ist der Abstand bei der nächsten Annäherung des Projektils an das Atom (Abb. 3.2),  $S$  ist im Text erklärt, und  $2 \Delta S$  ist der Teil der Trajektorie innerhalb des Gebiets konstanter Übergangsrate, in der  $P$  von der absoluten Geschwindigkeit abhängt. Außerhalb dieses Gebietes wird der Einfluß der übrigen Oberflächen durch eine eindimensionale exponentielle Abhängigkeit berücksichtigt, deswegen ist die Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche ein gutes Maß für  $P$ , siehe Gl. (4.12)+(4.13): Modell für  $\psi = 60^\circ$ .

abhängigen Übergangsrate der Oberflächenatome eine eindimensionale Abhängigkeit von der Oberfläche (Hagstrum). Nähert man die Übergangsrate entlang der Trajektorie durch diese zwei Grenzfälle und führt den Übergang von dem einen zum anderen im Abstand  $S_a$  vom streuenden Atom durch, so erhält man das Modell in Abb. 4.38. Für nicht zu kleine Abstände  $S^*$  vom streuenden Atom, bei denen - wie weiter oben erwähnt - die Wechselwirkung zwischen Projektil und Streuer so groß wird, daß Augerprozesse zur Beschreibung der Elektronen-Übergänge nicht mehr ausreichen (Reionisation etc.), wird in einem Gebiet  $S^* \lesssim S_a$  eine konstante Übergangsrate  $R_t = A$  angenommen, während sie vom Rand dieses Gebietes an exponentiell abfällt. Die Variable  $S$  ist der Abstand zu einer zur Oberfläche parallelen Ebene, die durch den Schnittpunkt der Trajektorie mit dem Rand des Gebiets  $S^* \leq S_a$  geht, verlängert um die Strecke  $S_a$ . Gibt es keinen Schnittpunkt, so wird diese Ebene in den Punkt des Gebietsrandes gelegt, der dem Umkehrpunkt am nächsten ist. Über den kleinsten Abstand des Projektils  $S_0$  und den Gebietsradius  $S_a$  läßt sich die Strecke  $2 \Delta S$  bestimmen,

während der das Ion das Gebiet konstanter Übergangsrate durchläuft. Der effektive kleinste Abstand  $S^*(1/v_{in})$  ergibt sich rein formal aus der Differenz ( $S_a - \Delta S$ ); er wird weiter unten benötigt. Die Überlebenswahrscheinlichkeit eines Neonions ergibt sich durch Integration längs der Trajektorie:

$$P_{Ne+} = \exp(-v_0/v_{in}) \quad (4.11)$$

wobei

$$v_0 = A \left\{ \left( 1 + \frac{v_{in}}{v_f} \right) [S_a - S_0^*(1/v_{in}, \vartheta)] + \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{\sin \Psi} + \frac{v_{in}}{v_f \sin(\vartheta - \Psi)} \right] \right\} \quad \text{für } S_0 \leq S_a \quad (4.12)$$

oder

$$v_0 = \exp \left\{ -a \left[ S_0 \left( \frac{1}{v_{in}}, \vartheta \right) - S_a \right] \right\} \times \frac{A}{a} \left[ \frac{1}{\sin \Psi} + \frac{v_{in}}{v_f \sin(\vartheta - \Psi)} \right] \quad \text{für } S_0 \geq S_a \quad (4.13)$$

- $v_{in}$  : Geschwindigkeit vor dem Stoß
- $v_f$  : Geschwindigkeit nach dem Stoß
- $S_0$  : Kleinster Abstand der Trajektorie des Ions zum streuenden Atom.

Man findet also ein  $v_0$ , das nicht mehr konstant ist, sondern über  $S_0^*(1/v_{in})$  bzw.  $S_0(1/v_{in})$  von der Geschwindigkeit abhängt. Gleichung (4.13), in die  $S_0(1/v_{in})$  exponentiell eingeht, wird hier nicht weiter betrachtet, da - wie schon am Beginn dieses Abschnittes erwähnt - ein solches Verhalten nicht beobachtet wurde. Der zweite konstante Term in Gl. (4.12) liefert im Exponenten die übliche Abhängigkeit von der Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche (Gl. 3.14).

Um Gleichung (4.11) zur Auswertung von Meßdaten benutzen zu können, ist insbesondere deren Extrapolation zu  $1/v_{in} = 0$  notwendig. Die Diskussion von (4.11) setzt Kenntnisse über die Eigenschaften der Funktion  $S^*(1/v_{in})$  voraus. In Abb. 4.39 sind Werte von  $S^*(1/v_{in})$  für drei verschiedene  $S_a$  aufgetragen. Sie wurden durch eine geo-

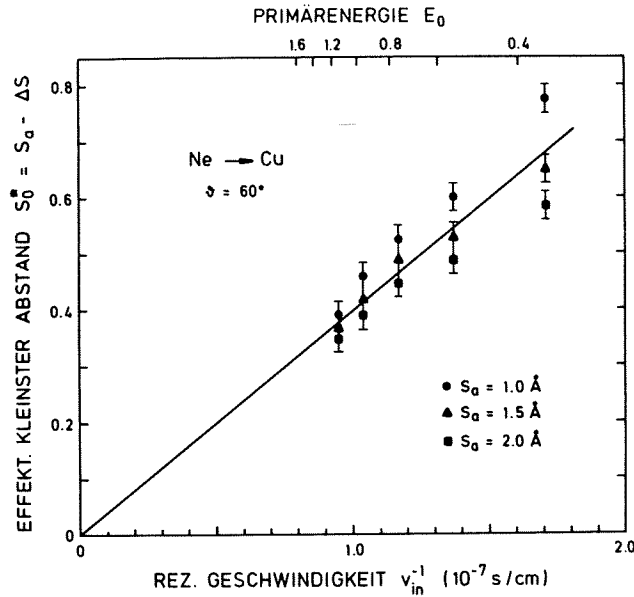


Abb. 4.39: Effektiver Abstand bei der nächsten Annäherung des Projektils (Ne) an das Atom in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit von Ne für verschiedene  $S_a$  (siehe Abb. 4.38).

metrische Darstellung wie in Abb. 4.38 graphisch gewonnen. Die dazugehörigen kleinsten Abstände  $S_0$  sind aus Abb. 3.2 zu entnehmen und wurden numerisch berechnet. Man sieht, daß die Funktion  $S_0^*(1/v_{in})$  im Intervall, in dem die primäre Energie  $E_0$  variiert wurde, annähernd linear in  $1/v_{in}$  ist. Also ist der Exponent von  $P_{Ne^+}$  (Gl. 4.11 für  $S_0 \leq S_a$ ) ein quadratisches Polynom in  $1/v_{in}$  und für  $P_{Ne^+}$  läßt sich die Gleichung für die Tangente an jeden Punkt  $v_{inx}$  angeben (Abb. 4.40):

$$\begin{aligned} \ln P^* \left( \frac{1}{v_{in}} \right) = & -A \left\{ \left( 1 + \frac{v_{in}}{v_f} \right) \left[ S_a - 2 S_0^* \left( \frac{1}{v_{inx}}, \vartheta \right) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{\sin \Psi} + \frac{1}{\sin(\vartheta - \Psi)} \frac{v_{in}}{v_f} \right] \right\} \left( \frac{1}{v_{in}} \right) - \quad (4.14) \\ & - A \left( 1 + \frac{v_{in}}{v_f} \right) S_0^* \left( \frac{1}{v_{inx}}, \vartheta \right) \frac{1}{v_{inx}} \end{aligned}$$

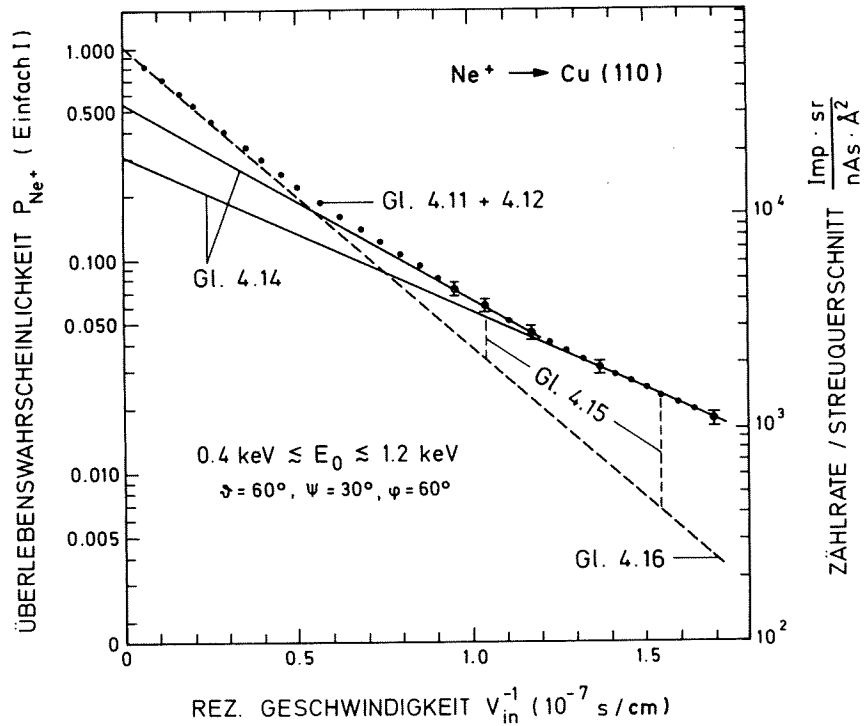


Abb. 4.40: Zählrate normiert auf den Streuquerschnitt als Funktion von  $v_{in}^{-1}$ : Die Punkte mit Fehlerbalken sind Meßpunkte. Die übrigen Punkte beschreiben das Modell nach Gl. (4.11)+(4.12). (Andere Gleichungen siehe auch Text.)

Deren Schnittpunkt mit der Ordinate ist folglich bei

$$\ln P^*(0) = -A \left( 1 + \frac{v_{in}}{v_f} \right) S^* \left( \frac{1}{v_{inx}} \right) \frac{1}{v_{inx}} \quad (4.15)$$

Legt man zwei Tangenten an die Meßpunkte wie in Abb. 4.40, so ist damit  $A$  und  $P_{\text{Ne}^+}(0) = 1$  bestimmt. Vergleicht man die Gleichungen (4.11) für  $S_0 \leq S_a$  und (4.14), so kann man

$$\ln P^0 \left( \frac{1}{v_{\text{in}}} \right) = -A \left\{ \left( 1 + \frac{v_{\text{in}}}{v_f} \right) S_a + \frac{1}{a} \left[ \frac{1}{\sin \Psi} + \frac{1}{\sin(\vartheta - \Psi)} \frac{v_{\text{in}}}{v_f} \right] \right\} \frac{1}{v_{\text{in}}} \quad (4.16)$$

(wie Gl. (4.11) + (4.12) mit  $S^*(1/v_{\text{in}}) = 0$ )

im Punkt  $v_{\text{inx}}^{-1}$  bestimmen. Da ein weiterer Punkt von Gl. (4.16) wegen  $\ln P_{\text{Ne}^+}(0) = \ln P^0(0)$  schon bekannt ist, ist damit auch  $\ln P^0(1/v_{\text{in}})$  bestimmt.

Tatsächlich sieht man in Abb. 4.40, daß die Differenz zwischen den Gleichungen (4.11) ( $S_0 \leq S_a$ ) und (4.16) in  $v_{\text{inx}}^{-1}$  gleich dem Achsen-schnitt der jeweiligen Tangenten ist (Gl. 4.15). Die Berücksichtigung der Geschwindigkeitsabhängigkeit des Umkehrpunktes des Ions stellt eine kleine Korrektur dar, wie man an der geringen Krümmung von Gl. (4.11) in Abb. 4.40 sieht. Der logarithmische Maßstab führt jedoch zu einem Faktor 2-3 im Achsen-schnitt der verschiedenen Tangenten. Erst für reziproke Geschwindigkeiten  $v_{\text{in}}^{-1} < 1 \cdot 10^{-7}$  s/cm bzw.  $S_0^* < 0.4 \text{ \AA}$  führt die lineare Näherung zum richtigen Ergebnis. Für die  $\text{He}^+$ -Streuung im gleichen Energie- und Winkelbereich ist diese Bedingung erfüllt /17/.

Ein ähnliches Bild ergibt sich, wenn man die Zählrate/Streuer-schnitt statt für  $\Psi = 30^\circ$  für  $\Psi = 15^\circ$  aufträgt. Allerdings liegt bei diesem Einfallswinkel  $P_{\text{Ne}^+}(0) = 1$  bei  $7.5 \cdot 10^4 \text{ Imp} \cdot \text{sr/nAs} \text{ \AA}^2$  statt bei  $6.0 \cdot 10^4 \text{ Imp} \cdot \text{sr/nAs} \text{ \AA}^2$  und die Meßwerte im gleichen Energie-intervall zwischen  $3.6 \cdot 10^3$  und  $0.6 \cdot 10^3 \text{ Imp} \cdot \text{sr/nAs} \text{ \AA}^2$  statt zwischen  $4.5 \cdot 10^3$  und  $1.0 \cdot 10^3 \text{ Imp} \cdot \text{sr/nAs} \text{ \AA}^2$ . Hierin spiegelt sich - wie schon beim Vergleich der  $\text{Na}^+$ - und  $\text{Ne}^+$ -Intensitäten in Abschnitt 4.3.1.5 - die Tatsache wider, daß sogar für  $\varphi = 60^\circ$  die Anzahl der gestreuten Teilchen mit abnehmenden  $\Psi$  zunimmt, während die  $\text{Ne}^+$ -Zählrate sich verringert. Das Verhältnis der Ordinaten-schnitte für die beiden  $\Psi$  ist sogar genau gleich dem Verhältnis der entsprechenden  $\text{Na}^+$ -Zählraten (Abschn. 4.3.1.5).

Die verschiedenen Steigungen von Gl. (4.16) für zwei verschiedene Einfallswinkel ermöglichen die Bestimmung von  $a$  und  $S_a$ . Da  $S_a$  schon zu Beginn der Auswertung benötigt wird, um  $S_0^*(1/v_{in})$  zu bestimmen, kann man einen geeigneten Startwert ( $1 \text{ \AA} \lesssim S_a \lesssim 2 \text{ \AA}$ ) wählen und die Bestimmung aller Konstanten so lange wiederholen, bis  $S_a$  nur noch geringfügig schwankt ( $\Delta S_a = 0.2 \text{ \AA}$ ). Dieses Verfahren ist möglich, da  $S_0^*(1/v_{in})$  nur schwach von  $S_a$  abhängt (Abb. 4.39).

Wertet man die Zählraten von  $\text{Ne}^+$  in  $\varphi = 60^\circ$  für  $\Psi = 15^\circ$  und  $30^\circ$  im Primärenergieintervall von 0.4 bis 1.2 keV auf die oben beschriebene Art aus, so erhält man die Konstanten

$$A = (0.56 \pm 0.2) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$S_a = (1.5 \pm 0.5) \text{ \AA}$$

$$a = (1.8 \pm 0.5) \text{ \AA}^{-1}$$

Die Fehler ergeben sich im wesentlichen aus der Ungenauigkeit, die der Bestimmung der Tangenten in Abb. 4.40 anhaftet. Stünde eine wesentlich größere Anzahl von Meßpunkten in einem größeren Geschwindigkeitsintervall zur Verfügung, ließe sich der Fehler über ein entsprechendes Anpassungsprogramm deutlich senken. Die Konstante  $A$  liegt deutlich niedriger als die meisten Literaturwerte /50, 58, 62, 105/. Der Radius des Gebietes konstanter Übergangsrates  $S_a$  liegt wie erwartet in der Größenordnung der Summe des Neonatomradius und des Kupferionenradius ( $1.4 - 1.7 \text{ \AA}$ ) und ist somit größer als alle kleinsten Abstände in Abb. 3.2. Auch  $a \approx 2 \text{ \AA}^{-1}$  stimmt mit den üblichen Abschätzungen überein /50, 58, 62/. Setzt man diese Konstanten in Gl. (4.11) ( $S_0 \leq S_a$ ) für 1 keV  $\text{Ne}^+$  ( $\vartheta = 60^\circ$ ), so erhält man:

$$P_{\text{Ne}^+} (\Psi = 30^\circ, \varphi = 60^\circ) = (6.2 \pm 2.0) \%$$

$$P_{\text{Ne}^+} (\Psi = 15^\circ, \varphi = 60^\circ) = (4.2 \pm 1.4) \%$$

Um die bei dem Azimut  $\varphi = 60^\circ$  gewonnenen Werte von  $A$ ,  $S_a$  und  $a$  in  $\varphi = 0^\circ$  für 1 keV  $\text{Ne}^+$  auswerten zu können, muß man ein anderes geometrisches Modell für die Elektronenübergangsrates zugrunde legen. In der dichtgepackten [110]-Richtung ist die Näherung, die in der Umgebung des streuenden Atoms die Wechselwirkung mit übrigen Oberflächenatomen vernachlässigt, nicht geeignet. Vielmehr ist in dieser Oberflächenrichtung wegen des geringen Atomabstandes eine Näherung angebracht, in der innerhalb eines Streifens entlang der Oberfläche eine konstante Elektronenübergangsrates angenommen wird. Wie man aus Abb. 4.41 sieht, ist in diesem Fall die Übergangsrates  $R_t$  eine eindimensionale Funktion des Abstandes  $S$  von der Oberfläche, und die Überlebenswahrscheinlichkeit hängt nur von der Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche ab, so daß Gl. (4.12) sich wie folgt vereinfacht:

$$v_0 = A \left[ (S'_a - S_0) + \frac{1}{a} \right] \left[ \frac{1}{\sin \Psi} + \frac{1}{\sin(\vartheta - \Psi)} \frac{v_{in}}{v_f} \right] \quad (4.17)$$

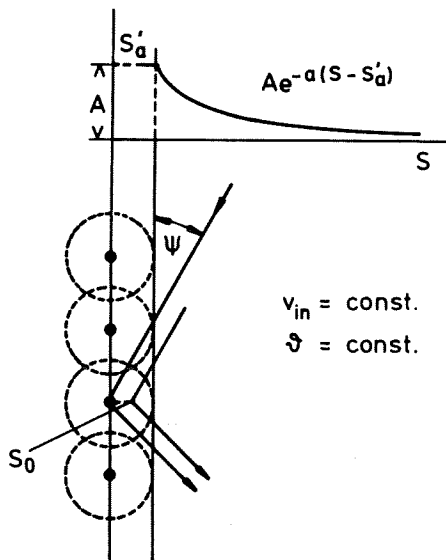


Abb. 4.41:

Skizze der Elektronenübergangsrates an einer dichten Oberflächenkette.  $S'_a$  gibt die Breite des Streifens konstanter Übergangsrates an.  $S_0$  hat die bekannte Bedeutung (Abb. 3.2; 4.39).  $S$  ist der Abstand des Projektils von der Oberfläche. Der Atomabstand ist so klein, daß die Übergangsrates als eine eindimensionale Funktion des Abstands von der Oberfläche beschrieben werden kann, deswegen hängt  $P$  allein von der Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche ab (siehe Gl. (4.17)): Modell für  $\varphi = 0^\circ$

Der kleinste Abstand des Projektils  $S_0$  erscheint direkt in dieser Gleichung und kann in dieser Auswertung als Konstante betrachtet werden, da  $v_{in}$  konstant gehalten wird. Die Überlebenswahrscheinlichkeit (Gl. 4.11 mit Gl. 4.17) wurde für die Einfallswinkel  $\psi = 15^\circ, 21^\circ$  und  $30^\circ$  ausgewertet. Die Konstanten  $A$  und  $a$  wurden unverändert übernommen (siehe  $\varphi = 60^\circ$ ). Die Breite des Streifens in Abb. 4.41  $S'_a = 1.38 \text{ \AA}$  wurde ermittelt, indem die halbe Fläche der Kreise der des Streifens gleichgesetzt wurde. Das Ergebnis ist in Tabelle IV zusammen mit allen anderen Ergebnissen für  $P_{Ne+}$  aus den Abschnitten 4.3.1.3.1, 4.3.1.5 und 4.3.1.6 aufgeführt. Für  $P_{Ne+}$  ( $\varphi = 0^\circ, \psi = 15^\circ$ ) liefert Gl. (4.11) mit (4.17) den Wert  $(1.5 \pm 0.5) \%$ . Der Wert in Tabelle IV berücksichtigt, daß das Maximum der thermischen Verteilung der zur Streuung beitragenden Atome aufgrund der Abschattung um ca.  $0.25 \text{ \AA}$  gegenüber seinem Nachbarn verschoben ist. Verschiebt man das streuende Atom in Abb. 4.41 um diesen Betrag aus der Oberfläche heraus, so bleibt von  $P_{Ne+}$  ( $\psi = 15^\circ, \varphi = 0^\circ$ ) =  $P_{Ne+}$  ( $\psi = 15^\circ, \varphi = 60^\circ$ )  $\cdot P_{Ne+}$  (Nachbarn) der Anteil  $P_{Ne+}$  ( $\psi = 15^\circ, \varphi = 60^\circ$ ) (siehe Abb. 4.38) erhalten. Die Trajektorie im Streifen aber außerhalb des Kreises um das streuende Atom verringert sich auf das 0.45-fache gegenüber der Ruhelage des Atoms. Reduziert man den Exponenten von  $P_{Ne+}$  (Nachbarn) um diesen Faktor, so erhält man den korrigierten Wert in Tabelle IV.

Wie man sieht, scheint die gute Übereinstimmung der Absolutwerte der zwei Spalten aufgrund der großen absoluten Fehler zufällig zu sein. Der Fehler in der Winkelabhängigkeit von  $P_{Ne+}$  ist dagegen sehr viel kleiner, da die Werte in den zwei Spalten dem gleichen Trend folgen. Es zeigt sich, wie gut die Neutralisationsmodelle im Prinzip sind. Diese Tatsache wurde ausgenutzt, um die Abhängigkeit von  $P_{Ne+}$  von  $\psi$  in  $\varphi = 0^\circ$  in Abb. 4.42 darzustellen. Die vollen Punkte sind aus Tabelle IV (Gl. 4.10) entnommen. Die offenen Punkte sind mit Hilfe der Gleichungen (4.11) und (4.17) interpoliert. Zum Vergleich sind auch die zwei Werte für  $\varphi = 60^\circ$  mit eingezeichnet. Man sieht, daß  $P_{Ne+}$  nur für Winkel  $\psi \geq \psi_c$  der Winkelabhängigkeit von Gl. (4.17) folgt. Für  $\psi \leq \psi_c$  wird  $P_{Ne+}$  in Übereinstimmung mit Abb. IV.70 in /108/ durch die Abschattung, wie oben gezeigt wurde, konstant (siehe auch Abschn. 4.3.1.4 und Abb. 4.21).



Tabelle IV: Überlebenswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Ne}^+}$  von 1 keV  $\text{Ne}^+$  (Einfach I) auf Cu(110) bei konstantem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  in Abhängigkeit vom Azimut  $\varphi$  und dem Einfallswinkel  $\psi$ . (Unbedeutende Abweichungen in Nucl.Instr.Meth. sind auf größere Rundungsfehler zurückzuführen.)

$\varphi$	$\psi$	$P_{\text{Ne}^+}$ Gleichung (4.10)	$P_{\text{Ne}^+}$ Gleichungen (4.11), (4.12), (4.17)
0°	30°	(3.5 $\pm$ 0.5) %	(3.6 $\pm$ 1.2) %
	21°	(2.4 $\pm$ 0.4) %	(2.8 $\pm$ 0.9) %
	15°	(2.4 $\pm$ 0.4) %	(2.6 $\pm$ 0.9) %
32°	30°	(4.2 $\pm$ 0.6) %	-
60°	30°	(5.8 $\pm$ 0.9) %	(6.2 $\pm$ 2.1) %
	15°	(3.7 $\pm$ 0.6) %	(4.2 $\pm$ 1.4) %

Da Tabelle IV die Interpretation aus Abschn. 4.3.1.3 von Abb. 4.14 bestätigt, daß das Zweiatommodell die  $\text{Ne}^+$ -Zählraten deswegen beschreibt, weil sich Flußerhöhung am Schattenkegelrand und Neutralisation in ihrer Wirkung aufheben, ist der Kehrwert der Neutralisation ein Maß für den Ionenfluß, den das streuende Atom gemittelt über die thermische Verteilung sieht. Die Streuung bei einem Azimut  $\varphi = 60^\circ$  und einem Einfallswinkel  $\psi = 30^\circ$  entspricht, wie weiter oben festgestellt wurde (Abschn.4.3.1.5), fast ideal der Streuung an einzelnen Atomen. Deswegen wurde dieser Kehrwert über die Zählraten bei  $\psi = 30^\circ$  und den Wert bei  $\varphi = 60^\circ$  normiert als Funktion von  $\psi$  aufgetragen (Abb. 4.43). Der über die thermische Verteilung gemittelte Ionenfluß auf ein streuendes Atom bei  $\varphi = 60^\circ$  und  $\psi = 15^\circ$  in Abb. 4.43 wurde auf die gleiche Weise ermittelt. Wie man sieht, steigt der Ionenfluß mit fallendem Einfallswinkel für  $\varphi = 0^\circ$  bis zum kritischen Winkel stark an. Unterhalb des kritischen Winkels ist der Ionenfluß innerhalb der Meßgenauigkeit konstant. Da das Maximum der ther-

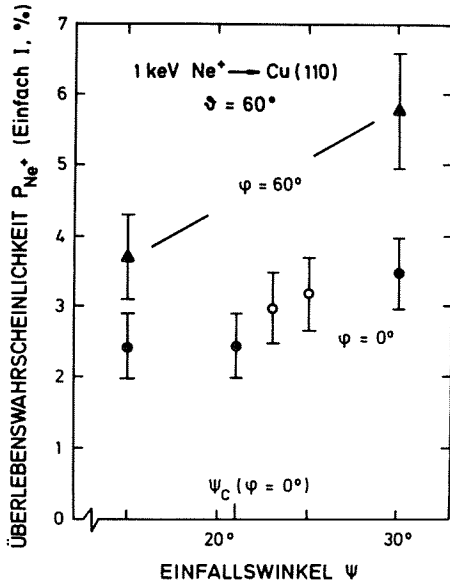


Abb. 4.42:

Einfallswinkelabhängigkeit der Überlebenswahrscheinlichkeit bei der Einfachstreuung von 1 keV Neonionen für zwei Azimutwinkel. Die Abschätzung für  $\psi \leq \psi_c$  führt zur Abweichung von dem Neutralisationsmodell für  $\varphi = 0^\circ$  (Abschn. 4.3.1.6; siehe auch Abb. 4.21). Die vollen Punkte sind aus Tabelle IV, die offenen Punkte sind mit Gl. (4.17) interpoliert.

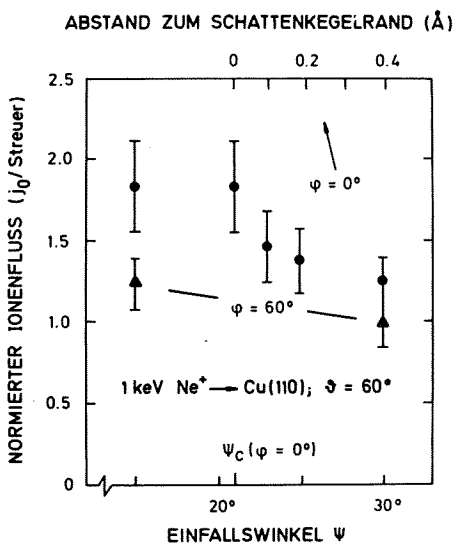


Abb. 4.43:

Einfallswinkelabhängigkeit des mittleren Ionenflusses auf ein streuendes Atom für zwei Azimutwinkel: Die Werte wurden aus der reziproken Überlebenswahrscheinlichkeit gewonnen (Abb. 4.42; siehe Text). Für  $\varphi = 0$  ist der Abstand des Maximums der thermischen Verteilung zum Schattenkegelrand eingezeichnet.

mischen Verteilung am stärksten zu diesem gemittelten Ionenfluß beiträgt, kann man den Anstieg des Flusses in Abb. 4.43 als Maß für das Flußprofil außerhalb des Schattenkegels betrachten. Die Skala, die den Abstand des Maximums der thermischen Verteilung zum Schattenkegelrand angibt, liefert den Maßstab für die Breite des Profils. Liegt das Maximum der Verteilung bei negativen Abständen also innerhalb des Schattenkegels, bleibt das für die Streuung effektive Maximum am Schattenkegelrand stehen. So erklärt sich das Ergebnis für  $\Psi < \Psi_c$  (Abb. 4.21). Für  $\varphi = 60^\circ$  sieht man, daß der Schattenkegelrand in diesem Einfallswinkelintervall noch weit entfernt ist, da der Ionenfluß bei  $\Psi = 15^\circ$  erst den Wert erreicht, bei dem er für  $\varphi = 0^\circ$  bei  $\Psi = 30^\circ$  startet.

Wie man sieht, kann je nach Wahl der Parameter der Beitrag von Neutralisation und Ionenfluß zur Streuintensität sehr unterschiedlich sein. Deswegen muß bei der Interpretation von Zählraten der Einfachstreuung von Edelgasionen immer berücksichtigt werden, daß diese mindestens das Produkt der drei Abhängigkeiten in den Abbildungen 4.15, 4.42 und 4.43 sind. Die Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung ist also nicht ohne weiteres direkt zugänglich.

#### 4.3.2 Abhängigkeit der Streuintensität von der thermischen Unordnung bei der Quasi-Doppelstreuenergie

Im gesamten Abschnitt 4.3.1 war ausschließlich das Zustandekommen der Streuintensität in der Nähe der Einfachstreuenergie Gegenstand der Betrachtung. An dieser Stelle soll nun kurz auf die Doppelstreuung eingegangen werden. Am Energiespektrum für 1 keV  $\text{Ne}^+$  auf Cu(110) ( $\vartheta = 60^\circ$ ,  $\Psi = 30^\circ$ ,  $\varphi = 0^\circ$ ) in Abb. 4.18 ist ein Streuintensitätsmaximum bei der Doppelstreuenergie D erkennbar. Die Höhe dieses Maximums wurde zusammen mit dem entsprechenden Maximum für  $\text{Na}^+$  (Abb. 4.16) als Funktion der Temperatur in Abb. 4.44 aufgetragen (Punkte mit Fehlerbalken). Man beachte den Faktor  $10^3$  in der Zählrate zwischen den Natrium- und Neonionen. An die Zählraten wurde die zugehörige Anzahl der reflektierten Teilchen aus der Abb. 4.17 angepaßt: für  $\text{Ne}^+$  das Maximum der Kette I, für  $\text{Na}^+$  das Maximum der Summe bei Energie D

(volle Quadrate). Die offenen Quadrate deuten die Abweichung an, die sich ergäbe, wenn man die Normierung aus Abb. 4.22 übernähme. Selbst mit dieser Anpassung wäre die Übereinstimmung gut. Die andere Skalierung mit den vollen Quadraten wurde jedoch benutzt, um das Ergebnis nach Gl. (4.10) auszuwerten. Es ergibt sich hierbei die Überlebenswahrscheinlichkeit für die in der Oberflächenkette doppelt gestreuten  $\text{Ne}^+$ -Ionen  $P_{\text{Ne}+2}(\psi = 30^\circ, \varphi = 0^\circ) = (0.37 \pm 0.06) \%$ .

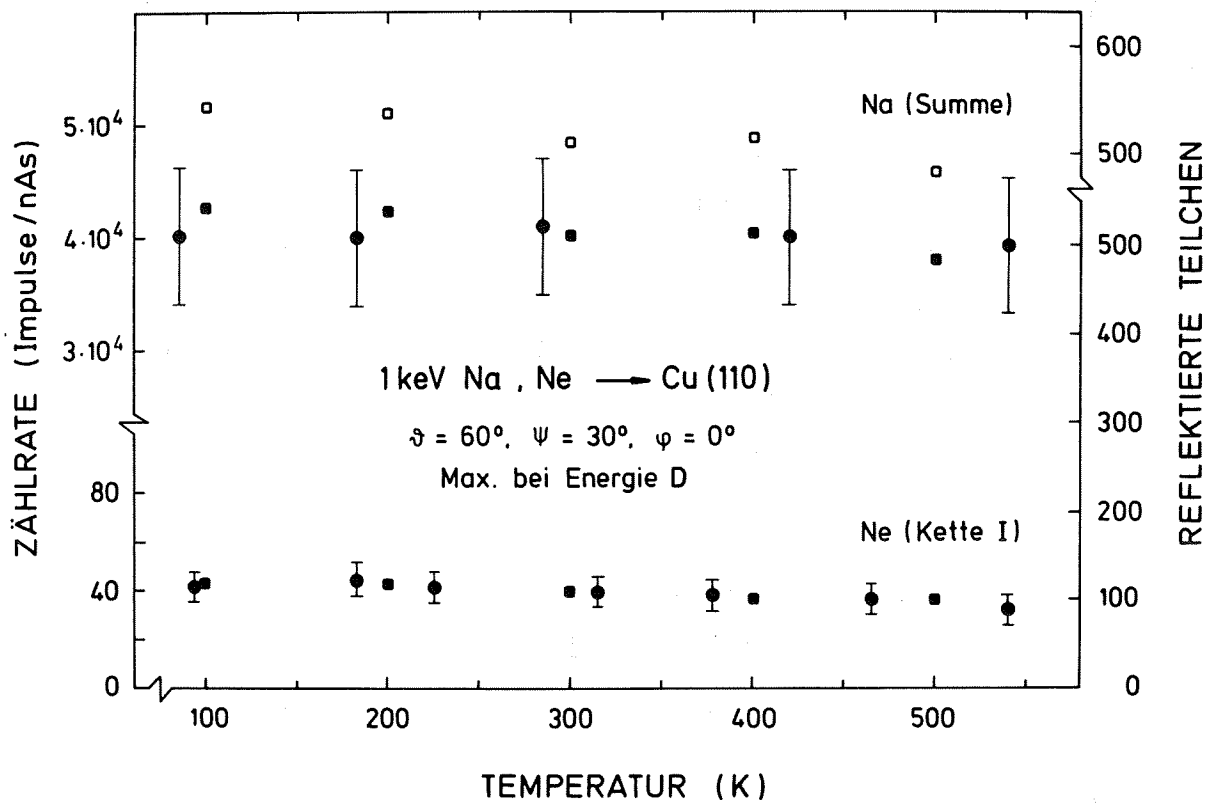


Abb. 4.44: Temperaturabhängigkeit des Maximums der  $\text{Ne}^+$ -,  $\text{Na}^+$ -Streuung nahe der Doppelstreueenergie. (D; siehe Abb. 4.16 ; 4.18): Punkte mit Fehlerbalken. Die vollen Quadrate geben die Intensität der Ne-, Na-Teilchen im Maximum der Kette I-Streuung bzw. der Summe aller Streuklassen (ARGUS) nahe D wieder (Abb. 4.17; 4.19). Die offenen Punkte zeigen die Abweichung der Normierung von Abb. 4.22. (Ne, Na steht für Teilchen und Ionen.)

Dieses Ergebnis läßt sich mit Hilfe des in Abschn. 4.3.1.6 behandelten Neutralisationsmodells überprüfen. Die bei der Doppelstreuung zurückgelegte Trajektorie unterscheidet sich von der in Abb. 4.41 dargestellten im wesentlichen durch ein zusätzliches, zur Oberfläche paralleles Stück der Länge eines Atomabstandes  $d$ , so daß man wie folgt abschätzen kann:

$$P_{Ne+2}(\Psi, \varphi) = P_{Ne+} P(d) \quad (4.18)$$

wobei 
$$P(d) = \exp\left(-\frac{Ad}{v_D}\right) \quad (4.19)$$

$v_D$ : Geschwindigkeit zwischen den Stößen.

Mit  $P_{Ne+}(\Psi = 30^\circ, \varphi = 0^\circ)$  aus der ersten Spalte von Tab. IV und  $A = (0.56 \pm 0.2) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$  (Abschn. 4.3.1.6) und  $d = 2.56 \text{ \AA}$  erhält man aus Gl. (4.18)  $P_{Ne+2}(\Psi = 30^\circ, \varphi = 0^\circ) = (0.74 \pm 0.4) \%$ .

Dieses Ergebnis stimmt mit seiner unteren Grenze mit dem Wert oben (aus Gl. 4.10) überein. Da die Konstante  $A$  nicht exakt genug bestimmt ist, lassen sich daraus keine physikalischen Schlüsse ziehen. Im Prinzip ließe sich jedoch auf diese Weise überprüfen, ob das Neutralisationsmodell in Abschn. 4.3.1.6 dahingehend verfeinert werden muß, daß die Übergangsrate für  $S^* < S_a$  nicht ganz konstant ist und z.B. mit abnehmendem  $S^*$  langsam abnimmt.

Bei aller Übereinstimmung der Ergebnisse fällt jedoch auf, daß die Höhen der Streuintensitätsmaxima in Abb. 4.44 nicht der  $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit folgen, die in der Literatur vorausgesagt und in Abschn. 3.3.3 zitiert wurde. Leider stehen für die Doppelstreuung von  $Ne^+$  in  $\varphi = 90^\circ$  aufgrund der geringen Intensität (- die Kette I-Maxima haben nur die halbe Intensität verglichen mit  $\varphi = 0^\circ$  - siehe Abb. 4.30 -, und die Neutralisation liefert aufgrund des größeren Atomabstands ( $d = 3.61 \text{ \AA}$ ) einen weiteren Faktor  $\sim 1/2$  -) keine auswertbaren Ergebnisse zur Verfügung. Zieht man jedoch die Simulationsergebnisse der Kette I-Streuklasse (ARGUS) zum Vergleich heran, so erhält man im wesentlichen das gleiche Ergebnis wie in Abb. 4.44, jedoch mit um ca. 50 % kleineren Absolut-

werten. Nur die Summe aller Streuklassen bei D zeigt annähernd ein Verhalten wie  $T^{-1/2}$ . Wie man in Abb. 4.30 leicht sieht, rührt dieses Verhalten aber von den Zick-Zack II-Prozessen her und gilt - wie weiter oben schon erwähnt wurde - genauso für das Maximum bei der Energie S (Abschn. 4.3.1.4.1). Diese Temperaturabhängigkeit hat also nichts mit einer genuinen Doppelstreuung zu tun und ist weit davon entfernt, durch ein Kettenmodell oder ein einfaches Zweiatommodell erklärbar zu sein. Auf das Zusammenwirken von drei Oberflächenketten in dieser Geometrie ( $\varphi = 90^\circ$ ) wurde in Abschn. 4.3.1.4 eingegangen.

Die allgemeine Aussage über die  $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit der Doppelstreuung beruht auf Zweiatommodellen: Es wird angenommen, daß das Maximum der Streuintensität von Atompaaaren erzeugt wird, die sich in der Ruhelage befinden, da die thermische Verteilung dort ihr Maximum hat /13, 15/.

Um herauszufinden, ob diese einfache Argumentation ausreichend ist, betrachtet man sich am besten das Zustandekommen der Doppelstreuung zunächst im statischen Fall genauer. In Abb. 4.45 ist die Geometrie eines solchen Streueignisses dargestellt und die Forderung, die man an die Stoßparameter und die Winkel stellen muß, um überhaupt ein Doppelstreuereignis erhalten zu können. Es ergibt sich eine Gleichung zwischen den zwei Stoßparametern  $p_1$  und  $p_2$ , dem ersten Streuwinkel  $\vartheta_1$  und dem Atomabstand  $d$ .

$$p_2 = p_1 \cos \vartheta_1 - d \sin(\Psi - \vartheta_1) \quad (4.20)$$

Der zweite Streuwinkel  $\vartheta_2$  ist durch den Gesamtstreuwinkel

$$\vartheta = \vartheta_1 + \vartheta_2 \quad (4.21)$$

bestimmt. Formt man Gl. (4.20) in geeigneter Weise um,

$$p_2 - p_1 \cos \vartheta_1 = -d \sin(\Psi - \vartheta_1) \quad (4.22)$$

so läßt sie sich graphisch lösen. Die Stoßparameter wurden numerisch ermittelt (siehe Abschn. 3.1.3 /27/). Das Ergebnis in Abb. 4.46 für

DOPPELSTREUUNG

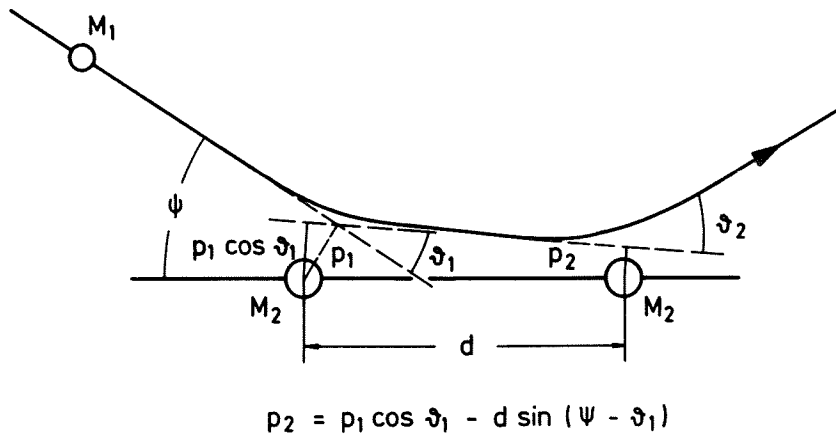


Abb. 4.45: Schematische Darstellung der Doppelstreuung und der Zusammenhang zwischen den Stoßparametern, den Streuwinkeln, dem Einfallswinkel und dem Gitterabstand.

Natrium auf Kupfer bei einem Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$  und einem Atomabstand  $d = 2.56 \text{ \AA}$  (Cu(110),  $\varphi = 0^\circ$ ), gilt ebenso für Neon. Die Punkte repräsentieren die linke Seite von Gl. (4.22), die zwei durchgezogenen Geraden die rechte. Der Fehler der linken Seite ergibt sich, wenn man eine Detektorakzeptanz von  $\pm 2^\circ$  annimmt. Die Breite des Streifens berücksichtigt ein drittes Streuereignis mit einem Winkel kleiner  $2^\circ$ . Unter diesen Annahmen ist Gl. (4.20) für  $30^\circ \leq \vartheta_1 \leq 38^\circ$  erfüllbar. Man erwartet jedoch das Streuintensitätsmaximum nicht in der Mitte des Intervals, sondern in der Nähe von  $30^\circ$ , da hier die Doppelstreuenergie ein Maximum hat bzw.  $dE_2/d\vartheta_1 = 0$  (Nebenbedingung  $\vartheta = \vartheta_1 + \vartheta_2 = \text{const}$ ). In der Tat liegen die Streuereignisse für  $28^\circ \leq \vartheta_1 \leq 32^\circ$  innerhalb  $0.0006 E_0$ , die für  $22^\circ \leq \vartheta_1 \leq 38^\circ$  innerhalb  $0.0100 E_0$  und die für  $16^\circ \leq \vartheta_1 \leq 44^\circ$  innerhalb  $0.0300 E_0$ .

Außerdem hat die rechte Seite von Gl. (4.22) auch eine Energiebreite (drittes Streuereignis). Der obere Rand ist gegenüber dem unteren zu höheren Energien verschoben, so daß selbst bei  $\vartheta_1 = 16^\circ$  die Intensität

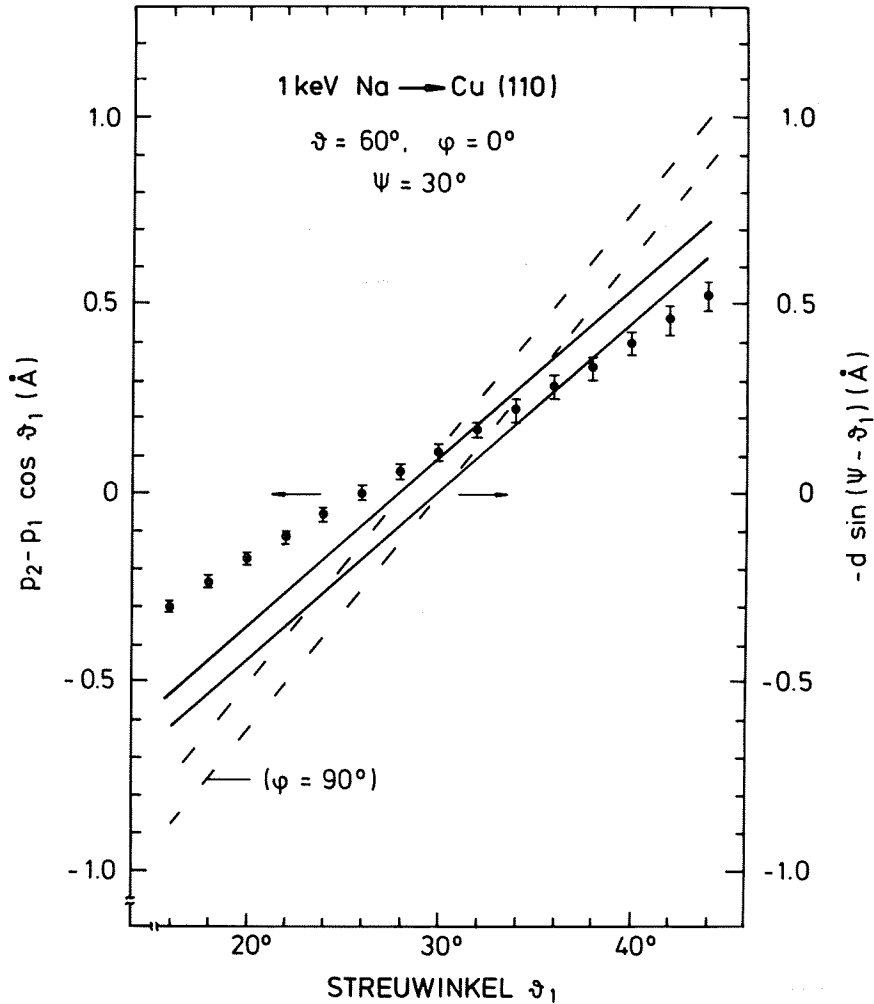


Abb. 4.46: Abhängigkeit der beiden Seiten von Gl. (4.22) vom ersten Streuwinkel  $\vartheta_1$  (siehe Abb. 4.45). Die Fehler der rechten Seite entsprechen einer Detektorakzeptanz von  $\pm 2^\circ$ . Das Intervall zwischen den durchgezogenen Geraden ( $\varphi = 0^\circ$ ;  $d = 2.56 \text{ \AA}$ ) berücksichtigt ein drittes Streueignis mit einem Winkel von maximal  $2^\circ$ . Die unterbrochenen Geraden deuten die Abhängigkeit vom Abstand der Atome in der Kette an ( $\varphi = 90^\circ$ ;  $d = 3.61 \text{ \AA}$ ). Die Stoßparameter wurden für 1 keV Na-Teilchen ( $\vartheta = 60^\circ$ ) numerisch ermittelt [27].



zum Maximum in der Nähe von Energie D beiträgt. Auch sieht man zwar die Asymmetrie des Schnittpunktes an der Form der Energieverteilung, nicht aber an dessen Maximum (Abb. 4.17 und 4.19; siehe Kette II wegen geringerer thermischer Unordnung). Die unterbrochenen Geraden deuten das Ergebnis für einen Atomabstand  $d = 3.61 \text{ \AA}$  ( $\varphi = 90^\circ$ ) an. Der Überlapp ist schärfer und symmetrischer. Die entsprechende Streuintensität spiegelt diesen Sachverhalt wider (Abb. 4.30, Kette I).

Möchte man untersuchen, was geschieht, wenn die thermische Unordnung hinzukommt, so sieht man in Abb. 4.45, daß man zu  $p_2$  die relative Verschiebung  $\Delta\sigma$  hinzufügen muß (Abschn. 4.3.1.1.1), d.h. die linke Seite in Gl. (4.22) wird durch  $p_2 - p_1 \cos \vartheta_1 \pm \overline{\Delta\sigma}$  ersetzt (wegen  $\overline{\Delta\sigma}$  siehe Abb. 4.12). Man sieht sofort, daß sich bei einer Verdoppelung der mittleren Verschiebung zwar die Häufigkeit der Ereignisse nahe der Ruhelage halbiert, der Bereich des Überlapps sich aber fast verdoppelt (Abb. 4.47). Und es kommt zum Ausgleich von verlorengegangenen Ereignissen nicht nur an den Rändern der Energieverteilung, sondern aufgrund der oben erwähnten Asymmetrie auch in der Nähe des Maximums.

Damit dieser Effekt nicht eintritt, muß man fordern, daß sich die linke und die rechte Seite von Gl. (4.22) nicht schneiden, sondern parallel verlaufen. Man findet diesen Fall zum Beispiel für 6 keV Argon auf Cu(110) für  $\vartheta = 30^\circ$ ,  $\Psi = 15^\circ$  und  $\varphi = 45^\circ$  bzw.  $d = 2.56 \text{ \AA}$ . (Für  $\varphi = 0^\circ, 90^\circ$  bzw.  $d = 3.61 \text{ \AA}$  ist die rechte Seite von Gl. (4.22) steiler, Abb. 4.46). Wie man aus Abb. 4.48 sieht, vergrößert die Verdoppelung der mittleren Verschiebung den Überlapp der beiden Gleichungsseiten nicht. Dieser Fall ist auch der einzige, für den die erwartete starke Abhängigkeit von der Temperatur für die echte Doppelstreuung (Edelgas) über ein größeres Temperaturintervall gefunden wurde (siehe Abschn. 3.3.3, /10/).

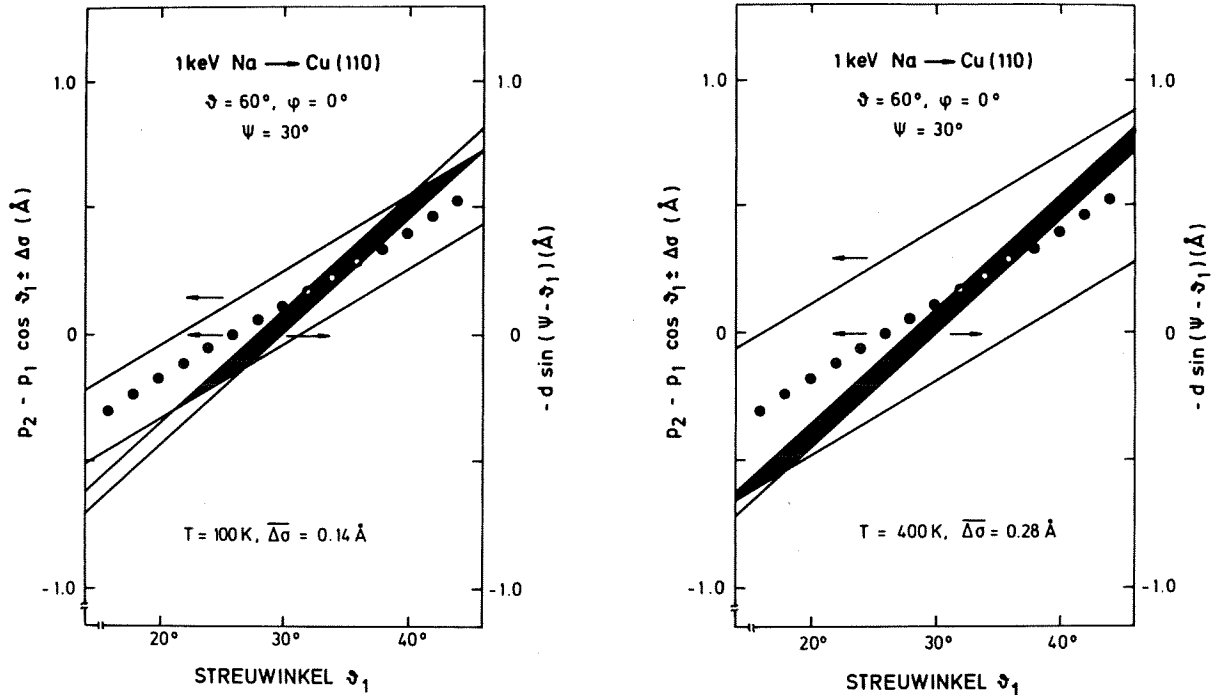


Abb. 4.47: Abhängigkeit der beiden Seiten von Gl. (4.22) vom ersten Streuwinkel  $\vartheta_1$  unter Vernachlässigung des Fehlers in  $p_2$  und der Hinzunahme von relativen Auslenkungen der Atome (s. Abb. 4.46): Die mittlere relative lineare Verschiebung  $\overline{\Delta\sigma}$  ist näherungsweise parallel zu  $p_2$  angenommen (Abb. 4.45). Die zwei Werte für die mittlere Verschiebung (Abb. 4.12;  $\theta_D = 150$ ) zeigen die Temperaturabhängigkeit des Überlapps (schwarzer Streifen) der beiden Seiten von Gl. (4.22)  $\pm \overline{\Delta\sigma}$  (siehe Text).

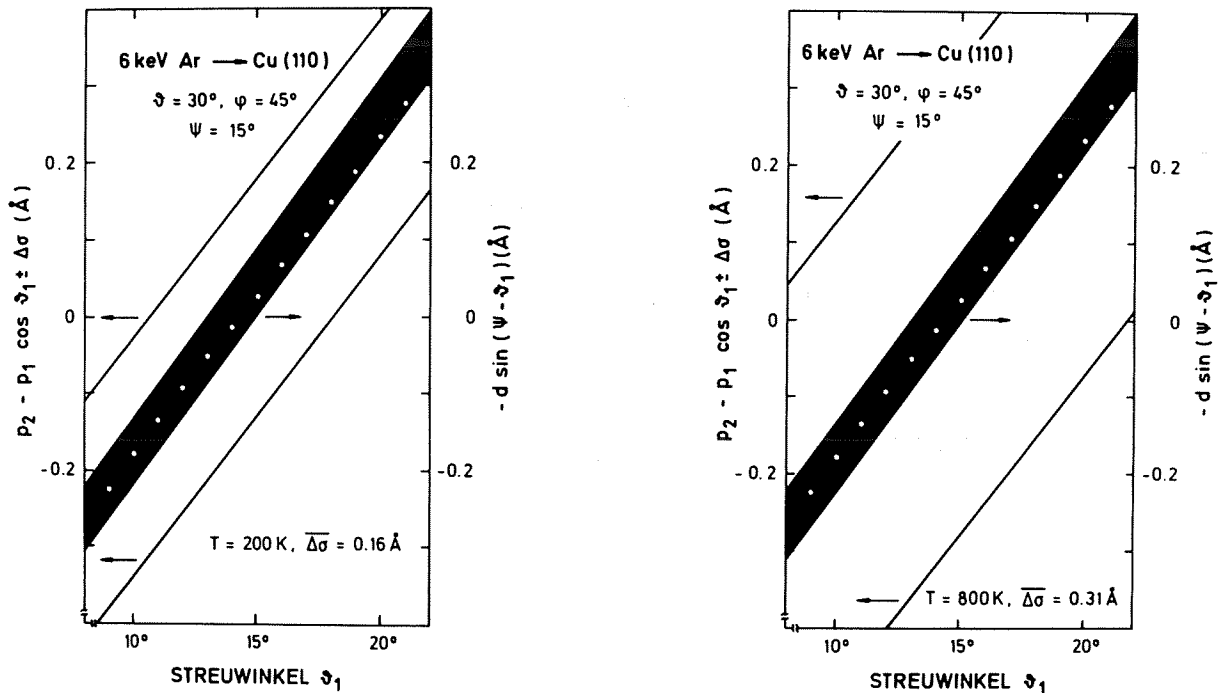


Abb. 4.48: Abhängigkeit der beiden Seiten von Gl. (4.22) vom ersten Streuwinkel  $\vartheta_1$ , wie in Abb. 4.47, jedoch für 6 keV Ar auf Cu(110);  $\vartheta = 30^\circ$ ,  $\psi = 15^\circ$  und  $\varphi = 45^\circ$  ( $d = 2.56$ ; siehe /10/).  $\overline{\Delta\sigma}$  liegt das in /10/ verwendete  $\theta_{DZ} = 192$  K (nach der dort um  $\sqrt{3}$  unterschiedlichen Definition 111 K) zugrunde. Auch andere  $\theta_{DZ}$  würden an der Temperaturunabhängigkeit der schwarzen Fläche nichts ändern.

#### 4.3.3 Diskussion der Ergebnisse bezüglich der Streuintensität von der schadenfreien Oberfläche

Aus dem Zweiatommodell für die  $\text{Ne}^+$ -Streuung an dichtgepackten Oberflächenketten wurde eine Oberflächen-Debye-Temperatur  $\theta_{\text{DZ}} = (150 \pm 30)\text{K}$  für die Schwingungen senkrecht zur  $\text{Cu}(110)$ -Oberfläche gewonnen. Diese Abweichung von ungefähr einem Faktor zwei zwischen Oberflächen- und Volumen-Debye-Temperatur ( $\sim 329\text{K}$ ) ist auch auf einigen k.f.z. Kristalloberflächen mit LEED-Untersuchungen gefunden worden /75, 76, 83/. Das gleiche Ergebnis wird durch entsprechende Interpretation der RHEED-Ergebnisse an  $\text{PbTe}(111)$  gewonnen /109/. Die theoretischen Modelle, die nur die fehlenden Bindungen an der Oberfläche berücksichtigen, lassen einen Faktor von ungefähr 1.4 erwarten (siehe Abschn. 3.3.2 und /88/). Eine solche Annahme scheint nicht im Widerspruch zu den Ergebnissen von thermischen Heliumstreuexperimenten zu stehen /110/, da aber bei dieser Methode die Debye-Temperatur nicht direkt gemessen wird, erfordert die Auswertung dieser Messungen die weitere Entwicklung einer geeigneten Theorie /89/. Ähnliches gilt für die Messung der Phononendispersion durch inelastische Elektronenstreuung /111/, da Zweifel an der eindeutigen Zuordnung der Frequenzen in der Brillouinzone geäußert wurden /112/ und da bei den relativ hohen Primärenergien (180-322 eV; vergl. /84/) die Oberflächenempfindlichkeit (Begrenzung auf die erste Atomlage) in Frage gestellt ist. Im Falle von Streuanteilen aus der zweiten Atomlage scheint diese Messung eine Aufspaltung der Oberflächendispersionskurve nicht auflösen zu können /111/. Eine theoretische Untersuchung der thermischen Schwingungen unter Berücksichtigung von verminderten elastischen Konstanten an der Oberfläche und insbesondere deren Einfluß auf die absoluten und relativen korrelierten Verschiebungen zwischen den verschiedenen Atomen an der Oberfläche könnte eine Auswertung ermöglichen, die die verschiedenen experimentellen Ergebnisse in Einklang bringt /78, 79, 81/.

Von diesen weiterführenden Überlegungen abgesehen ist  $\theta_{\text{DZ}} = 150\text{K}$  ein Maß für die mittlere relative Schwankung zwischen nächsten Nachbarn auf der  $\text{Cu}(110)$ -Oberfläche in  $[110]$ -Richtung für die Bewegung senkrecht zur Oberfläche (Abschn. 4.3.1.2). Darüber hinaus zeigen

die Simulationsrechnungen (ARGUS), daß dieser Wert für  $\theta_{DZ}$  im Rahmen eines Modells mit unkorrelierten Schwingungen die Energieverteilung der Natriumspektren auch für andere Oberflächenrichtungen im dargestellten Parameterbereich erklärt (Abschn. 4.3.1.3; 4.3.1.4.1; 4.3.1.5). Das gleiche gilt für die Neonspektren, wenn man ein geeignetes Neutralisationsmodell zugrunde legt, das die Trajektorienabhängigkeit der Überlebenswahrscheinlichkeit der  $Ne^+$ -Ionen berücksichtigt (Abschn. 4.3.1.3; 4.3.1.5; 4.3.1.6; 4.3.2). Es liefert auf konsistente Weise Überlebenswahrscheinlichkeiten  $P_{Ne}$  von 2 % bis 6 % für die Einfachstreuung I bzw. Werte kleiner als 1 % für alle übrigen Streuklassen.  $P_{Ne}$  hängt also stark von den Streuparametern (Einfallswinkel  $\Psi$ , Oberflächenrichtung der Streuebene) und der Streuklasse ab. Zum Vergleich läßt sich der Literaturwert /40/ für 5 keV  $Ne^+$  auf Cu(100) in [100]-Richtung ( $\theta = 30^\circ$ ,  $\Psi = 15^\circ$ ) für die Einfachstreuung heranziehen; er beträgt 4.5 % und liegt somit genau zwischen den Ergebnissen in dieser Arbeit (3,5 % - 6 %) für 1 keV  $Ne^+$  auf Cu(110) ( $\theta = 60^\circ$ ,  $\Psi = 30^\circ$ ,  $\varphi = 0^\circ, 60^\circ$ ). Dieser Übereinstimmung kommt eine besondere Bedeutung zu, da in beiden Fällen die Geschwindigkeit senkrecht zur Oberfläche fast gleich ist.

veder voleva come si convenne  
l'imgo al cerchio, e come vi s'indova;  
ma non eran da ciò le proprie penne:  
se non che la mia mente fu percossa  
da un fulgore in che sua voglia venne.  
All'alta fantasia qui mancò possa;  
ma già volgeva il mio disio e 'l velle,  
sì come ruota ch'igualmente è mossa,  
l'amor che move il sole e l'altre stelle.

Ich wollte, wie sich Kreis und Bild bedingen,  
Erkennen, und die Bild- und Kreisvereinigung.  
Doch dazu reichten nicht die eigenen Schwingen,  
Wenn nicht ein Blitzstrahl meinen Geist durchdrungen,  
Um darin die Erfüllung ihm zu bringen.  
Hier ward der Flug der Fantasie bezwungen:  
Doch lenkte mir schon Wunsch und Willen gerne,  
Gleichmäßig wie ein Rad wird umgeschwungen,  
Die Liebe, die auch Sonne schwingt und Sterne.

## 5. ZUSAMMENFASSUNG

---

Der Einfluß der thermischen Schwingungen auf die Streuung von niederenergetischen Ionen (ISS) wurde im Experiment und durch numerische Simulation der Streuintensität in Abhängigkeit von der Temperatur an einer Cu(110)-Oberfläche untersucht.

Die MARLOWE-Simulationsrechnungen für die über das Energiespektrum integrierte Streuintensität von 1 keV Natriumteilchen (Streuwinkel  $\vartheta = 60^\circ$ ) an einer Cu(110)-Oberfläche zeigen folgendes:

Die gesamte Geometrie der Oberfläche ist im Prinzip in dieser Streuintensität enthalten, wenn man diese als Funktion des Azimutalwinkels in der Streuebene und des Einfallswinkels des Primärstrahls bestimmt. Die mit der Temperatur zunehmende Verschmierung der Oberflächengeometrie spiegelt sich in der Winkelverteilung der Streuintensität.

Unterhalb 250 K wird beim Beschuß mit 1 keV Neonionen eine mit abnehmender Temperatur zunehmende Rauigkeit der Cu(110)-Oberfläche festgestellt. Bei 100 K wird eine charakteristische Fluenz von  $6.5 \cdot 10^{13}$  Teilchen/cm<sup>2</sup> für die Erzeugung der Oberflächenschäden gefunden. Die Fluenzabhängigkeit der Streuintensität im Nachbarschatten entlang der [110]-Oberflächenkette zeigt bei 100 K, daß es sich hierbei um Punktdefekte und nicht um Defektinseln handelt.

Die Intensität der Ne<sup>+</sup>-Einfachstreuung als Funktion von Temperatur und Einfallswinkel kann für  $\varphi = 0^\circ$  (Streuebene parallel zur [110]-Kette) durch ein einfaches analytisches Zweiatommodell beschrieben werden. Daraus ergibt sich eine Oberflächen-Debye-Temperatur für unkorrelierte Schwingungen senkrecht zur Oberfläche von  $\theta_{DZ} = (150 \pm 30)$  K, die als Maß für die relative Schwankung nächster Nachbarn in der [110]-Richtung der Oberfläche betrachtet werden sollte. Vorkenntnisse über das Streupotential sind hierfür nicht erforderlich.

Der so gewonnene Wert für  $\theta_{DZ}$  ermöglicht die Simulation der  $\text{Na}^+$ -Spektren durch ARGUS-Rechnungen nicht nur für  $\varphi = 0^\circ$  ([110]-Richtung), sondern auch für andere Azimutwinkel. Für  $\text{Na}^+$  sind die Streuintensitäten weit weniger auf  $\theta_{DZ}$  empfindlich als die spektrale Energieverteilung. Die Übereinstimmung zwischen experimentellen und theoretischen Spektren ist im untersuchten Parameterbereich sehr gut.

Die Simulation mit dem ARGUS-Code ermöglicht die Analyse der Energiespektren nach der Trajektorienart. Diese Aufteilung der Gesamtintensität in die verschiedenen Streuklassen verdeutlicht die Beiträge dieser Klassen zu den  $\text{Ne}^+$ -Spektren. Die Temperaturabhängigkeit der Intensität der Einfachstreuung ist in guter Übereinstimmung mit dem Zweiatommodell. Der Vergleich der  $\text{Ne}^+$ - und  $\text{Na}^+$ -Messungen mit den Rechnungen (Zweiatommodell, ARGUS) gibt zusätzliche Informationen über Flußerhöhung am streuenden Atom und die trajektorienabhängige Neutralisation von  $\text{Ne}^+$  auf Kupfer.

Die Überlebenswahrscheinlichkeit  $P_{\text{Ne}^+}$  der  $\text{Ne}^+$ -Einfachstreuung, wie sie sich aus dem Vergleich oben ergibt, kann durch einen Ansatz reproduziert werden, in den die Projektilgeschwindigkeit sowie die Winkel der Trajektorien exponentiell eingehen. Wesentlicher Inhalt dieses Ansatzes ist, daß die Neutralisationswahrscheinlichkeit innerhalb eines Abstands  $S_a$  von den Oberflächenatomen ortsunabhängig ist und außerhalb exponentiell mit dem Abstand abnimmt. Die Anpassung an die experimentellen Ergebnisse liefert drei Konstanten  $A = (0.56 \pm 0.2) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $S_a = (1.5 \pm 0.5 \text{ \AA})$  und  $a = (1.8 \pm 0.5) \text{ \AA}^{-1}$  in der Gl. (4.11) (mit Gl. (4.12) bzw. Gl. (4.17) mit  $S_a' = 1.38 \text{ \AA}$ ), die die Elektronenübergangsraten zwischen Neonion und Kupferatom in der Oberfläche charakterisieren und, soweit überprüft, nicht parameterabhängig sind. Bei genauerer Bestimmung der Konstanten durch größere Datensätze und geeigneter Wahl der Integrationsgrenzen wird die Überprüfung der zugrundeliegenden Elektronenübergangsraten  $R_t$  an der Oberfläche möglich.



Die  $\text{Ne}^+$ -Doppelstreuung für  $\varphi = 0$  läßt sich im Rahmen der so gewonnenen Erkenntnisse erklären. Die unerwartet geringe Temperaturabhängigkeit dieser Streuklasse läßt sich durch die Analyse einer zweifachen Streusequenz verstehen.

Es konnte gezeigt werden, daß das mit einem einfachen Ansatz gewonnene Verhältnis der mittleren Schwankungen der Atome an der Oberfläche zu der im Volumen mit den Ergebnissen komplizierter Ansätze aus der Literatur übereinstimmt (Abschn. 3.3.2). Dieser Ansatz beschreibt die elastische Wechselwirkung eines Atoms mit dem Restgitter durch Federn, die in den Bindungsrichtungen der nächsten Nachbarn an einem festen Gerüst befestigt sind.

Die sich ergebenden Verhältnisse der mittleren Schwankungen konnten - wie erwähnt - experimentell für die Bewegung senkrecht zur Oberfläche in [110]-Richtung für nächste Nachbarn gewonnen werden. Es ist ungeklärt, ob der experimentell gewonnene Wert ( $\overline{\Delta\sigma_z}/\overline{\Delta\sigma_v} \sim 2$ ) auf veränderte elastische Konstanten und unkorrelierte Schwingungen zurückzuführen ist, oder ob bestimmte Korrelationen an der Oberfläche bei noch zu ermittelnden elastischen Konstanten diese großen relativen Schwankungen benachbarter Atome erzeugen. Die unabhängige Bestimmung der relativen Schwankungen für andere Oberflächenrichtungen auch auf anderen Kupfereinkristallflächen würde eine Aussage über Korrelationen an der Oberfläche ermöglichen. Zusätzliche Information über die Unordnung in der Cu(110)-Oberfläche scheint in der Streuintensität in  $\varphi = 90^\circ$  (|| [100]-Kette) enthalten zu sein. Zur quantitativen Analyse der Temperaturabhängigkeit der Streuung in dieser Oberflächenrichtung sind zusätzliche experimentelle und theoretische Arbeiten erforderlich.

6. LITERATURVERZEICHNIS

- /1/ E. Taglauer, W. Heiland, Appl.Phys. 9 (1976) 261  
E. Taglauer, Appl.Phys. 38 (1985) 161
- /2/ J.A. Van den Berg, D.G. Armour, Vacuum 31 (1981) 259
- /3/ D.P. Smith, J. Appl.Phys. 18 (1967) 340
- /4/ G.J.A. Hellings, H. Ottevanger, S.W. Boelens,  
C.L.C.M. Knibbeler, H.H. Brongersma, Surf.Sci. 162 (1985) 913
- /5/ E.S. Parilis, N.Yu.Turaev, Sov.Phys.Dokl. 10 (1965) 212
- /6/ L.K. Verheij, A.L. Boers, in: Atomic Collisions in Solids, Vol. 2,  
Eds. S. Datz, B.R. Appleton, C.D. Moak (Plenum, New York, 1975) S. 583
- /7/ W. Heiland, E. Taglauer, M.T. Robinson, Nucl.Instr.Methods  
132 (1976) 655
- /8/ B. Poelsema, L.K. Verheij, A.L. Boers, Surf.Sci. 56 (1976) 445
- /9/ B. Poelsema, L.K. Verheij, A.L. Boers, Surf.Sci. 60 (1976) 485
- /10/ B. Poelsema, L.K. Verheij, A.L. Boers, Surf.Sci. 64 (1977) 537
- /11/ B. Poelsema, L.K. Verheij, A.L. Boers, Nucl.Instr.Meth.  
132 (1976) 623
- /12/ D.P. Jackson, J.H. Barrett, Comput.Phys.Comm. 13 (1977) 157
- /13/ B. Poelsema, A.L. Boers, Rad.Eff. 41 (1979) 229
- /14/ D.J. Martin, Surf.Sci. 97 (1980) 586
- /15/ R.P. Walker, D.J. Martin, Surf.Sci. 118 (1982) 659
- /16/ B. Poelsema, L.K. Verheij, A.L. Boers, Surf.Sci. 133 (1983) 344
- /17/ W. Englert, Doktorarbeit TU München, 1983
- /18/ E. Taglauer, W. Melchior, F. Schuster, W. Heiland,  
J. Phys. E8 (1975) 768
- /19/ M. Grundner, W. Heiland, E. Taglauer, IPP-Report 9/8 (1973)
- /20/ H. Niehus, G. Comsa, Surf.Sci. 140 (1984) 18
- /21/ E. Taglauer, W. Englert, W. Heiland, D.P. Jackson,  
Phys.Rev.Lett. 45 (1980) 740
- /22/ W. Englert, E. Taglauer, Nucl.Instr.Meth. 194 (1982) 663
- /23/ W. Englert, E. Taglauer, Surf.Sci. 117 (1982) 124
- /24/ W. Englert, E. Taglauer, Phys.Script. T6 (1983) 38
- /25/ B.M. Jaworski, A.A. Detlaf, deutsch: F. Chap, Physik griffbereit,  
F. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1972, S. 599

- /26/ L.D. Landau, E.M. Lifschitz, Theoretische Physik, Bd. 1 Mechanik, (Akademie-Verlag, Berlin 1970)
- /27/ W. Englert, private Mitteilung
- /28/ W. Heiland, H.G. Schäffler, E. Taglauer, Atomic Collision in Solids, Vol. 2, Edited by S. Datz, B.R. Appleton et al., Plenum Press, New York (1979) 599
- /29/ A.G.J. de Wit, R.P.N. Bronckers, J.M. Fluit, Surf.Sci. 82 (1979) 177
- /30/ E. Taglauer, W. Heiland, Surf.Sci. 33 (1972) 27
- /31/ M. Aono, Y. Hou, R. Souda, Ch. Oshima, S. Otani, Y. Ishizowa, K. Matsuda, R. Shimizu, Jap.Journ.of Appl.Phys. Vol. 21 No. 11 (1982) L 670
- /32/ O.S. Oen, Surf.Sci. 131 (1983) L 407
- /33/ O.B. Firsov, Sov.Phys. JETP 9 (1959) 1076  
D.S. Karpuzov, Appl.Phys. 24 (1981) 121
- /34/ G. Molière, Z.Naturf. 2A (1947) 133
- /35/ D.P. Jackson, W. Heiland, E. Taglauer, Phys.Rev. B 24 (1981) 4198
- /36/ A.A. Abrahamson, Phys.Rev. 178 (1969) 76
- /37/ M.T. Robinson, I.A. Torrens, Phys.Rev. B 9 (1974) 5008
- /38/ O.S. Oen, M.T. Robinson, Nucl.Instr.Meth. 132 (1976) 647
- /39/ A.J. Algra, E. van Loenen, E.P.Th.M. Suurmeyer, A.L. Boers, Radiation Effects 60 (1982) 173
- /40/ S.B. Luitjens, A.J. Algra, E.P.Ph.M. Suurmeyer, A.L. Boers, Surf.Sci. 99 (1980) 631
- /41/ D.P. Woodruff, Nucl.Instr.Meth. 194 (1982) 639
- /42/ A.L. Boers, Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res. B 2 (1984) 353
- /43/ A. Zartner, E. Taglauer, W. Heiland, Phys.Rev.Lett. 40 (1978) 1259
- /44/ A. Zartner, IPP-Report 9/31 (1979)
- /45/ M.C. Cross, Inelastic Ion-Surface Collisions (1977)  
Eds. N.H. Tolk et al., Academic Press New York,  
T.W. Rush, R.L. Erickson, S. 73
- /46/ J.C. Tully, N.H. Tolk, siehe /45/ (1977) 105
- /47/ R.C. Erickson, D.P. Smith, Phys.Rev.Lett. 34 (1975) 297
- /48/ W. Eckstein in: Inelastic Particle-Surface Collisions, Eds. E. Taglauer and W. Heiland, Springer Series in Chemical Physics 17 (Springer Verlag, Berlin, 1981), S. 157
- /49/ R.J. Snowdon, Nucl.Instr.Meth. Phys.Rev. B 2 (1984) 540

- /50/ H.D. Hagstrum, Phys.Rev. 96 (1954) 336
- /51/ W. Englert, Diplomarbeit TU München (1978)
- /52/ H.H. Brongersma, T.H. Buck, Nucl.Instr.Meth. 149 (1978) 569
- /53/ R.J. MacDonald, D.J. O'Connor, Surf.Sci. 124 (1983) 423
- /54/ R.J. MacDonald, D.J. O'Connor, Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res.  
B 2 (1984) 418
- /55/ L.K. Verheij, B. Poelsema, A.L. Boers, Radiat.Effects 34 (1977) 163
- /56/ W.F. van der Weg, D.J. Bierman, Physica 44 (1969) 177
- /57/ A. van Veen, J. Haak, Phys.Lett. 40A (1972) 378
- /58/ L.M. Kishinevsky, E.S. Parilis, V.K. Verleger, Radiation Effects  
29 (1976) 215
- /59/ D.J. Godfrey, D.P. Woodruff, Surf.Sci. 89 (1979) 76
- /60/ S.B. Luitjens, A.J. Algra, E.P.Th.M. Suurmeyer, A.L. Boers,  
Surf. Sci. 100 (1980) 315
- /61/ S.B. Luitjens, A.J. Algra, E.P.Th. Suurmeyer, A.L. Boers,  
Surf. Sci. 99 (1980) 652
- /62/ D.P. Woodruff, Surf.Sci. 116 (1982) L 219
- /63/ T.M. Buck, G.H. Wheathy, L.R. Verheij, Surf.Sci. 90 (1979) 635
- /64/ A. Richard, H. Eschenbacher, Nucl.Instr.Meth. in Phys. Res.  
B 2 (1984) 444
- /65/ J.W. Gadzuk, Surf.Sci. 6 (1967) 133
- /66/ M. Remy, J.Chem.Phys. 53 (1970) 2487
- /67/ E.G. Overbosch, B. Rasser, A.D. Tenner, J. Los, Surf.Sci. 93  
(1980) 310
- /68/ B. Rasser, M. Remy, Surf.Sci. 93 (1980) 223
- /69/ A.J. Algra, Doktorarbeit Rijksuniversiteit te Groningen (1981)
- /70/ G. Leibfried, Handbuch d. Physik, B. VII, T. 1, Herausgeb.:  
S. Flügge, Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg (1955)  
S. 260 ff
- /71/ D.P. Jackson, Surf.Sci. 43 (1974) 431
- /72/ B.C. Clark, R. Herman, R.F. Wallis, Phys.Rev. 139 (1965) A 860
- /73/ G. Rovida, M. Torrini, E. Zanazzi, Chem.Phys.Lett. 3 (1969) 20
- /74/ G. Trégliã, M.-C. Desjonquères, Surf.Sci. 162 (1985) 126
- /75/ A.U. MacRae, Surf.Sci. 2 (1964) 522
- /76/ H.B. Lyon, G.J. Somorjai, J.Chem.Phys. 44 (1966) 3707
- /77/ T.E. Feuchtwang, Phys.Rev. 155 (1967) 715, 731

- /78/ J.G. Sanz, G. Armand, Surf.Sci. 118 (1982) 291
- /79/ D. Castiel, L. Dobrzynski, D. Spanjaard, Surf.Sci. 59 (1976) 252
- /80/ J.W.M. Frencken, R.G. Smeenk, J.F. van der Veen, Surf.Sci. 135  
(1983) 147
- /81/ R.F. Wallis, B.C. Clark, R. Herman, Phys.Rev. 167 (1968) 652
- /82/ D.L. Adams, H.B. Nielsen, J.N. Andersen, I. Stensgaard,  
R. Feidenhans'l, J.E. Sørensen, Phys.Rev.Lett. 49 (1982) 669
- /83/ D.P. Jackson, Can.J.of Phys. 49 (1971) 2093
- /84/ R.M. Goodman, H.H. Farrell, G.A. Somorjai, J.Chem.Phys. 48 (1968)  
1046
- /85/ W. Heiland, H.G. Schäffler, E. Taglauer, Surf.Sci. 35 (1973) 381
- /86/ W. Heiland, E. Taglauer, Nucl.Instr.Meth. 132 (1976) 535
- /87/ L.K. Verheij, B. Poelsema, A.L. Boers, Phys.Lett. 53A (1975) 381
- /88/ G. Armand, J. de Phys. 38 (1977) 989
- /89/ J. Lapujoulade, Surf.Sci. 134 (1983) L 529
- /90/ W. Heiland, E. Taglauer, Rad.Eff. 19 (1973) 1
- /91/ L.K. Verheij, E. van Loenen, J.A. van den Berg, D.G. Armour,  
Nucl.Instr.Meth. 168 (1980) 595
- /92/ L.K. Verheij, J.A. van den Berg, D.G. Armour, Surf.Sci. 122  
(1982) 216
- /93/ L.K. Verheij, Surf.Sci. 114 (1982) 667
- /94/ R.L. Jacobson, G.K. Wehner, J.Appl.Phys. 36 (1965) 2674
- /95/ D. Cherns, Phil.Mag. 36 (1977) 1429
- /96/ R.P.N. Bronckers, A.G.J. deWit, Surf.Sci. 104 (1981) 384
- /97/ R.P.N. Bronckers, A.G.J. deWit, Surf.Sci. 112 (1981) 111
- /98/ R.P.N. Bronckers, Doctorarbeit Rijksuniversiteit te Utrecht 1981
- /99/ S.B. Luitjens, Th.R. Verbeek, A.J. Algra, A.L. Boers,  
Surf.Sci. 76 (1978) L 609
- /100/ G. Engelmann und E. Taglauer, Nucl.Instr.Meth. Phys.Res. B 2  
(1984)
- /101/ H. Vernickel, IPP-Report 2/40 Juni 1965
- /102/ T.M. Buck, I. Stensgaard, G.H. Wheatley, Nucl.Instr. and Meth.  
170 (1980) 519
- /103/ D.P. Jackson, private Mitteilung  
G. Engelmann, E. Taglauer, D.P. Jackson, Surf.Sci. 162 (1985) 921;  
XI. ICACS 85, Nucl.Instr. and Meth. B (1986) im Druck

- /104/ D.P. Jackson, W. Heiland and E. Taglauer, Phys.Rev. B 24 (1981) 4198
- /105/ H. Eschenbacher, A. Richard, Nucl.Instr.Meth. Phys. Res. B 2  
(1984) 411
- /106/ E. Taglauer and W. Heiland, Surf.Sci. 47 (1975) 234
- /107/ P. Bertrand, F. Delannay, C. Bulens, J.M. Streydio, Surf.Sci.  
68 (1977) 108
- /108/ T. von dem Hagen, Doktorarbeit TU Clausthal, 1982
- /109/ V. Benz, K.G. Weil, Surf.Sci. 91 (1980) 629
- /110/ J. Lapujoulade, J. Perreau, A. Kara, Surf.Sci. 129 (1983) 59
- /111/ S. Lehwald, J.M. Szeftel, H. Ibach, T.S. Rahman,  
D.L. Mills, Phys.Rev.Lett. 50 (1983) 518
- /112/ J.E. Black, D.A. Campbell, R.F. Wallis, Surf.Sci. 105 (1981) 629
- /113/ D. Alighieri, Divina Commedia, Inferno (1300-1321) Canto I
- /114/ D. Alighieri, Divina Commedia, Inferno (1300-1321) Canto III
- /115/ D. Alighieri, Divina Commedia, Paradiso (1300-1321) Canto I
- /116/ D. Alighieri, Divina Commedia, Paradiso (1300-1321) Canto XXXIII

## DANKSAGUNG

Herrn Professor Menzel danke ich dafür, daß er gerne bereit war, das Thema dieser Arbeit zu vertreten, und für das Interesse, mit dem er das Entstehen derselben begleitet hat.

Die Fragestellung der Arbeit verdanke ich Herrn Dr. Taglauer, der es mir ermöglichte, den Spaß an der Physik zu entdecken und mir auch das Rüstzeug mitgab, das den wirklichen Physiker ausmacht. Für die Geduld, die er so mancher Exzentrizität entgegenbrachte, bin ich ihm dankbar.

Herrn Gehringer und Herrn Schuster danke ich sehr für die Hilfe, deren hoher technischer Stand entscheidend zur Durchführung der Messungen beigetragen hat.

Vielmals bedanken möchte ich mich auch bei Frau Hirschinger für die sorgfältige Verfertigung der unerschämte zahlreichen Zeichnungen, die auch der Photostelle zu schaffen machten.

Frau Daube gebührt kräftig Dank für die Anfertigung der leserlichen Form dieser Arbeit, nebst vielen Korrekturen.

Herrn Dr. Englert danke ich für die Hilfe beim Einstieg in die Ionenstreuung und beim Streichen von SORBAS. Von philosophischen über physikalische Diskussionen, bis hin zur letzten sauberen Fassung dieser Schrift sei sein Beitrag gewürdigt, sowie der von Frau Baretzky und Frau Margraf, die der von Haus aus guten Atmosphäre die Menschlichkeit hinzufügten, die reinen Männergeschäften fremd ist.

Allen Mitdoktoranden und allen Mitarbeitern des Bereichs Oberflächenphysik danke ich für ihre kollegiale Zusammenarbeit.

Nicht zuletzt sei unser aller Papa Planck dafür bedankt, daß bei ihm anscheinend Wissenschaft noch möglich ist.





