

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK

GARCHING BEI MÜNCHEN

Ladungsaustausch von Heliumionen
an freien und adsorbierten Pb-Atomen

Oscillatory Ion Yields of He^+
Scattered from Atomic and Solid
Pb-Targets

A. ZARTNER

IPP 9/31

August 1979

*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.*

IPP 9/31

A. ZARTNER

Oscillatory Ion Yields
of He^+ Scattered from
Atomic and Solid
Pb Targets

August 1979

Abstract

Ion yields of He^+ scattered from atomic and solid Pb in the energy range from 200 to 2000 eV into a large scattering angle are reported. The beam results show an oscillatory structure of the ion yield as function of the energy which is comparable to the same effects observed for a solid target. Thus the atomic nature of the quasi-resonant charge exchange is confirmed. The data also give evidence for solid-state effects influencing the oscillations of the ion yield.

A theoretical model, describing the binary interaction between projectile and target atom by the formation of a quasimolecule, allows a more detailed interpretation of the experimental results. According to this model, the characteristic frequency of the oscillations is a consequence of the quasisonant electron transfer between the Pb(5d) level and the He(1s) level, whereas the amplitudes depend essentially on the influence of the Auger-neutralisation processes.

August 1979

Zusammenfassung

Vorliegende Arbeit ist ein Beitrag zum Verständnis der Prozesse, die zur Neutralisation von niederenergetischen (100-2000 eV) He^+ -Ionen an Festkörperoberflächen führen und die besonders bei Blei deutliche Oszillationen in der Ionenausbeute als Funktion der Projektilenergie bewirken. Durch den Vergleich der Ionenausbeuten für adsorbiertes Pb auf verschiedenen Substraten und für einen Pb-Atomstrahl ist es gelungen, den atomaren Charakter des Ladungsaustausches bei der Streuung am Festkörper experimentell zu zeigen.

Mit einem theoretischen Modell, in dem die binäre Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetatom durch die Bildung eines Quasimoleküls beschrieben wird, können die experimentellen Resultate eingehender interpretiert werden. Die Frequenz der Oszillationen ist demnach durch den quasi-resonanten Elektronentransfer zwischen dem $\text{Pb}(5d)$ und dem $\text{He}(1s)$ -Zustand bestimmt, während die Auger-Neutralisation maßgeblich auf die Amplitude der Oszillationen wirkt.

Ladungsaustausch von Heliumionen an freien und adsorbierten Pb-Atomen

<u>Inhalt:</u>	<u>Seite</u>
1. <u>EINLEITUNG</u>	1
2. <u>Allgemeine Grundlagen</u>	4
2.1. Streuung von Ionen an Oberflächen	4
2.2. Modelle des Ladungsaustauschs	9
3. <u>EXPERIMENTELLER TEIL</u>	18
3.1. Aufbau der Apparatur und Meßmethode	18
3.2. Targetbehandlung	23
3.3. Atomstrahlofen	24
3.4. Elektronische Steuerung und Datenerfassung	32
3.5. Datenverarbeitung	36
4. <u>MESSERGEBNISSE</u>	37
4.1. 1. Experiment mit dünnen Schichten	37
4.2. 2. Experiment mit Atomstrahl	45
4.3. 3. Experiment mit verschiedenen Substraten	53
4.4. Ergänzungen: ($^3\text{He}^+$ -Messungen, Neutralteilchen, Sekundärelektronen)	69
4.5. Fehlerbetrachtung	71
5. <u>THEORETISCHER TEIL</u>	74
6. <u>INTERPRETATION</u>	90
6.1. Die Frequenz der Oszillationen	92
6.2. Die Funktion A_1 und A_2 (Auger-Effekt)	100
6.3. Die Oszillationen des Substrates	104
7. <u>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK</u>	110
8. <u>LITERATURVERZEICHNIS</u>	113
9. <u>ANHANG</u>	116

Ladungsaustausch von Heliumionen an freien und adsorbierten Pb-Atomen

1. EINLEITUNG

Zwei physikalische Phänomene kennzeichnen die Streuung niederenergetischer Edelgasionen an Festkörperoberflächen: der klassische Zweierstoß und der Ladungsaustausch zwischen Target und Projektil.

Während der klassische Aspekt als weitgehend verstanden gilt und den Einsatz von ISS (Ion-Scattering-Spectrometry) zur Massenanalyse der obersten Atomlage / 1 / und zur Abschätzung von Adsorptionsverhältnissen / 2 / ermöglicht, sind die Kenntnisse der quantenmechanischen Prozesse, die zur Neutralisation des Projektilions führen, bisher gering. Im "adiabatischen" Modell nach Hagstrum / 3 /, das voraussetzt, daß zwischen der Kernbewegung des Projektils und dem Elektronensystem kein Energieaustausch stattfindet, wird die Wechselwirkung des Ions mit dem Leitungsband betrachtet und die Neutralisation durch Augerübergänge gedeutet. Dieses Modell reicht zwar zum qualitativen Verständnis der experimentellen Ergebnisse für einige Projektil-Target-Kombinationen (z.B. ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Ag}$) aus, in denen die Wahrscheinlichkeit P_i , daß das Projektil nach dem Stoß am Target ionisiert bleibt monoton mit der Projektilgeschwindigkeit steigt.

Im Rahmen dieses Modells hingegen nicht erklärbar sind die starken Oszillationen von P_i , die bei der Streuung von niederenergetischen Edelgasionen ($E_0 < 2000 \text{ eV}$) an verschiedenen Festkörpertargets auftreten. Erickson und Smith wiesen diesen Effekt 1975 zum ersten Mal bei der Streuung von ${}^4\text{He}^+$ an Pb nach / 4 / und gaben als mögliche Erklärung einen quasiresonanten Ladungsaustausch zwischen dem Pb(5d) und dem He(1s)-Zustand an. Dieses Modell diente bereits früher zur Deutung ähnlicher Os-

zillationen, die bei der Ionenstreuung an freien Atomen im Bereich höherer Projektilenergien ($E_0 > 2000 \text{ eV}$) z.B. ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{He}$ / 5 / beobachtet wurden. Die theoretische Grundlage dieser Interpretation beruhte auf einem "nichtadiabatischen Modell", in dem eine Stoßparametermethode zu guter Übereinstimmung mit den Experimenten führte / 6 /.

Auf diese "nichtadiabatischen Modelle" wurde zurückgegriffen, um auch die Oszillationen bei der Streuung an Festkörperoberflächen zu deuten / 7 / / 8 /. Die Schwierigkeit bei diesem Vorgehen ist, die Wechselwirkung mit den Leitungsbandelektronen richtig zu erfassen und den Hamilton-Operator und einige Parameter in geeigneter Weise festzulegen.

Für diese Arbeit wurde zur Aufgabe gestellt, den Einfluß beider Modelle (adiabatisch-nichtadiabatisch) auf den Ladungsaustausch experimentell abzugrenzen und nachzuprüfen, inwieweit die Oszillationen als "atomarer Effekt" verstanden werden können und wie stark der "festkörperspezifische" Beitrag, z.B. Auger-Neutralisation und quasiresonanter Ladungsaustausch zwischen dem Leitungsband des Targets und angeregten He-Niveaus ist. Weiterführende Fragen zielen danach, in welcher Richtung die Modelle modifiziert werden müssen, um eine bessere theoretische Beschreibung des Ladungsaustauschs zu erhalten, ferner, ob mit Hilfe des Ladungsaustauschs, dem inelastischen Teil der Ion-Target-Wechselwirkung, auch Aussagen über die elektronische Struktur der obersten Atomlage möglich sind.

Als "oszillierende" Targetkomponente diente Blei, da die Resonanzbedingung für He(1s) und Pb(5d) gut erfüllt ist und eine hohe Massenzahl sich als günstig erwies (ISS-Methode).

Im ersten Experiment (4.1) wird Pb in dünnen Schichten auf polykristalline Ni-Substrate, die selbst keine Oszillationen zeigen, aufgedampft und die Änderung im Verlauf des Ladungsaustauschs beim Übergang von Pb-bulk (mehrere Atomlagen Pb auf Ni) zum isolierten Pb-Atom auf dem Substrat ($\approx 1/20$ Monolage Pb auf Ni) beobachtet.

Im zweiten Experiment (4.2) werden die Oszillationen, unter den selben Streubedingungen wie im ersten, an einem Pb-Atomstrahl gemessen und der binäre Charakter der Projektil-Atom-Wechselwirkung untersucht.

Im dritten Experiment (4.3) wird Pb auf Substrate mit unterschiedlicher Bandstruktur gedampft und der ISS-Rückstreupeak für beide Targetkomponenten, Substrat und Pb-Adsorbat, gleichzeitig verfolgt.

Weitere begleitende Experimente (4.4) dienen zur Klärung spezieller Probleme wie: Streuung des $^3\text{He}^+$ -Isotops am massiven Pb-Target, der Neutralteilchen-Nachweis und die Sekundärelektronenemission.

2. ALLGEMEINE GRUNDLAGEN

2.1. Streuung von Ionen an Oberflächen

Beim "Rutherford-Back-Scattering" (RBS), der ältesten Methode, die Zusammensetzung einer Festkörperoberfläche tiefenaufgelöst zu bestimmen, werden leichte Ionen hoher Energie (${}^4\text{He}^+$, 2 MeV) als Sonden verwendet. Ihre Wechselwirkung mit dem Target läßt sich in guter Näherung durch eine Folge von elastischen Kernstößen und inelastischen Prozessen mit der Elektronenhülle beschreiben. Da der elastische Streuquerschnitt für hohe Energien klein ist (≈ 10 barn), dringen die meisten Ionen tief in die Festkörperoberfläche ein, bis ein Kernstoß ihre Richtung ändert (Abb. 1a). Aus der Energieverteilung der rückgestreuten Teilchen läßt sich die Masse des Streuzentrums über die Kinematik des klassischen Zweierstoßes bestimmen. Der Energieverlust durch inelastische Prozesse gibt Aufschluß über die Tiefenlage des Streuzentrums. Da einerseits Effekte des Ladungsaustauschs erst bei Projektilenergien unterhalb 100 keV stark an Bedeutung gewinnen und andererseits Detektoren (Oberflächensperrschichtzähler) entwickelt wurden, mit denen der energieaufgelöste Nachweis sowohl von geladenen als auch von neutralen hochenergetischen Teilchen gelingt, ist RBS heute eine Standardmethode zur quantitativen Analyse der tieferen Oberflächenschichten. In der Nähe der Grenzfläche kann mit dieser Methode jedoch nur eine Tiefenauflösung von ≈ 5 nm erreicht werden / 9 /.

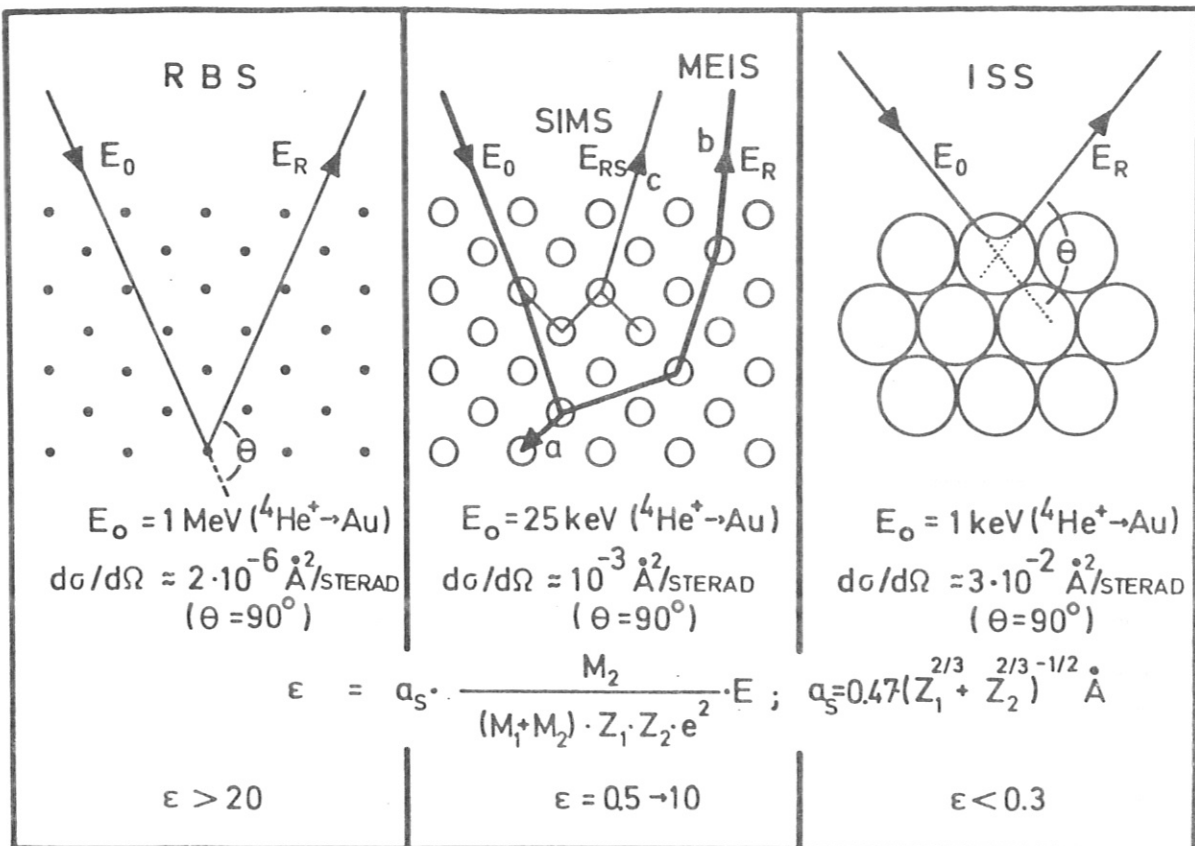


Abb.1 Schematische Darstellung der Ionenstreuung in verschiedenen Projektilenergiebereichen (nach /10/) RBS ... Rutherford-Back-Scattering (hohe Projektilenergie) MEIS ... Medium-Energy-Ion-Scattering (mittlere Projektilenergie) SIMS ... Secondary-Ion-Mass-Spectrometry, ISS ... Ion-Scattering-Spectrometry (niedrige Projektilenergie). Die unterschiedlichen differentiellen Streuquerschnitte $d\sigma/d\Omega$ sind durch Kreise um die Streuzentren angedeutet. Eine genauere Klassifizierungsmöglichkeit bietet nach Lindhard /11/ die "reduzierte Energie" ϵ . (E ... Projektilenergie vor dem Stoß; M_1, M_2 ... Massen-zahlen des Projektil- bzw. Targetatoms; Z_1, Z_2 ... Kernladungszahl des Projektils bzw. Targets) Der ISS-Bereich z.B. ist durch $\epsilon < 0.3$ charakterisiert.

Ende der 50iger Jahre entstanden zwei neue Techniken, die eine empfindlichere Analyse der Grenzfläche zulassen: SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry) und ISS (Ion Scattering Spectrometry).

Ionen im Energiebereich 1 keV ... 20 keV dienen bei SIMS dazu, Teilchen aus der Targetoberfläche herauszuschlagen (Zerstäubung), deren Energie und Masse man analysieren kann, wenn sie geladen sind /12/. Abb. 1b zeigt den Effekt der Ionenzerstäubung schematisch:

Der zunehmende Streuquerschnitt bei niedrigerer Energie des einfallenden Ions führt zu einer Serie von Stößen mit Targetatomen, die ihrerseits wieder eine Kaskade von Stößen erzeugen. Einige Kaskaden brechen an der Grenzfläche ab. Ist der Energieübertrag an ein Targetatom innerhalb einer gewissen Tiefe (escape depth $\approx 10^{-9}$ m) größer als dessen Oberflächenbindungsenergie, kann es die Oberfläche verlassen. Während die Zerstäubung durch Ionen heute als hinreichend verstanden gilt /13/), sind die Kenntnisse über die Sekundärionenemission, verbunden mit verschiedenen Ladungsaustauschprozessen und elementaren Anregungen an der Oberfläche, noch unbefriedigend /14/. Deshalb ist es bisher noch nicht gelungen, Vorteile, die nur die SIMS-Technik bietet /15/, für die quantitative Oberflächenanalyse generell nutzbar zu machen.

In guter Näherung läßt sich die Streuung niederenergetischer He^+ -Ionen im Energiebereich 100 eV 2000 eV an Festkörperoberflächen (ISS) durch elastische Stöße an abgeschirmten Coulombpotentialen klassisch beschreiben. Verglichen mit RBS im MeV-Bereich ist der Streuquerschnitt um den Faktor $10^3 - 10^4$ größer, sodaß die He^+ -Ionen im Mittel nicht weiter als 1-2 Monolagen in die Oberfläche eindringen, bevor sie abgelenkt werden (Abb. 1c). Für einen bestimmten Streuwinkel zeigt die Energieverteilung dieser rückgestreuten Ionen charakteristische Peaks, die über die Zusammensetzung der obersten Atomschicht qualitativ Aufschluß geben / 1 /. Die Winkelabhängigkeit der Adsorbat-Substrat-Signale erlaubt, die Position adsorbierter Gase abzuschätzen / 2 /.

Die Energie der Teilchen nach dem elastischen Zweierstoß folgt aus dem Energie- und Impulssatz.

$$(2.1.1.) \quad E_1 = E_0 \cdot \left[\frac{1}{1+A} (\cos \theta + \sqrt{A^2 - \sin^2 \theta}) \right]^2$$

E_1 = Energie der Teilchen nach dem binären Stoß

E_0 = Energie der Teilchen vor dem Stoß < 2 keV

$$A = \frac{M_2}{M_1} \quad \begin{array}{l} M_2 \\ M_1 \end{array} = \begin{array}{l} \text{Masse des Targetatoms} \\ \text{Masse des Projektils} \end{array} \quad M_2 > M_1$$

θ = Streuwinkel im Laborsystem.

Die Anwendbarkeit des Zweierstoßmodells für leichte Ionen wurde bereits ausführlich diskutiert /16/. Für He^+ -Ionen ist die Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit diesem Modell besonders gut. Wegen erheblicher experimenteller Schwierigkeiten, die Energieverteilung der Neutralteilchen unterhalb 1 keV mit der erforderlichen Genauigkeit zu messen /17/, muß man sich bei der Untersuchung von Ladungsaustauschprozessen in diesem Energiebereich auf die Information durch die rückgestreuten Ionen beschränken. Die Peakhöhe Y_i^+ für die i -te Targetkomponente bietet im Rahmen des binären Stoßmodells den Zugang zur Untersuchung der elektronischen Wechselwirkung zwischen Projektil und Target. Sie ist proportional dem Produkt aus der Anzahl der Atome der Sorte i pro cm^2 auf der Oberfläche (N_i), dem differentiellen Streuquerschnitt $(\frac{d\sigma}{d\Omega})_i$ und der Wahrscheinlichkeit P_i . P_i ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Projektil nach dem Stoß an der Komponente i ionisiert bleibt.

$$(2.1.2.) Y_i^+(E_0, \theta) = K \cdot N_i \cdot \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_i(E_0, \theta) \cdot P_i(E_0, \theta)$$

$K =$ apparativ bestimmte Konstante

Verschiedene klassische Berechnungen des differentiellen Streuquerschnitts mit abgeschirmten Coulombpotentialen /18/ und Computersimulationen /19/ wurden bereits früher durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten, daß $d\sigma/d\Omega$ mit steigender Primärenergie (E_0) monoton fällt. Zur Auswertung von P_i nach (2.1.2) mit den experimentellen

Werten Y_i^+ und N_i wurde $(d\sigma/d\Omega)_i$ in dieser Arbeit mit dem Thomas-Fermi-Molière-Potential

$$(2.1.3) \quad V_i(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_i \cdot e^2}{r} \cdot \phi\left(\frac{r}{a}\right)$$

berechnet. /18/. Mit

$$(2.1.4) \quad \phi\left(\frac{r}{a}\right) = 0.35 \exp\left(-0.3 \frac{r}{a}\right) + 0.55 \exp\left(-1.2 \frac{r}{a}\right) + 0.1 \exp\left(-6 \frac{r}{a}\right)$$

(empirische Funktion)

und

$$(2.1.5) \quad a = 0.8853 \cdot a_0 \cdot (Z_1^{1/2} + Z_i^{1/2})^{-2/3}$$

(Abschirmlänge nach Firsov /20/)

r = Abstand der Kerne

a_0 = Bohr'scher Radius

Z_1 = Ordnungszahl des Projektils

Z_i = Ordnungszahl der i-ten Targetkomponente.

2.2. Modelle des Ladungsaustauschs

Die "inelastischen Effekte", der bis heute wenig verstandene Aspekt der Wechselwirkung Ion-Festkörperoberfläche, sind Gegenstand neuerer Untersuchungen. Sie umfassen die Wechselwirkung des Ions mit der elektronischen Struktur der Oberfläche, z.B. ioneninduzierte Emission von Elektronen /21/ und Photonen /22/ sowie Anregung und Neutralisation des einfallenden Ions /23/.

Bei ISS-Experimenten werden die meisten der einfallenden Ionen am Target neutralisiert. Nur wenige Prozent be-

halten nach der Streuung ihren Ladungszustand bei. Die Frage, ob die Neutralisation an der Oberfläche oder im Volumen des Targets stattfindet, ist bei der Suche nach geeigneten Modellen von großer Bedeutung. Für Helium als Projektilion gibt es experimentelle Hinweise, daß der Ladungszustand auch durch Prozesse tiefer im Festkörper bestimmt wird, bei niedrigeren Energien ($E_0 < 2 \text{ keV}$) der Haupteffekt aber an der Oberfläche stattfindet (vergl. Anhang S.116) /24/. An ausgeprägten "Oberflächenpeaks" in der Energieverteilung der rückgestreuten Ionen und Neutralteilchen wird die Neutralisation an der Oberfläche deutlich. Diese Peaks treten auf, wenn Ionen elastisch an einem Targetatom gestreut wurden (Abb. 2).

Zwei Modelle charakterisieren den Ladungsaustausch an Metalloberflächen und erlauben von theoretischer Seite weitere Aussagen über $P_i(E_0, \theta)$. Im ersten Modell wird die Wechselwirkung des Ions mit dem Leitungsband betrachtet und die Neutralisation durch Auger-Prozesse gedeutet (Abb. 3).

Nach Hagstrum / 3 / ist die "Auger-Neutralisation" (AN) möglich, wenn die effektive Ionisierungsenergie E_i des Projektils größer als die Austrittsarbeit ϕ des Metalls ist. Bei diesem Zwei-Elektronenprozeß kann ein Elektron aus dem Leitungsband (1) direkt in den Grundzustand des Projektils tunneln, während ein zweites Elektron (2) mit der selben "Neutralisationsenergie" aus seinem Niveau im Leitungsband angeregt wird. Eine notwendige Bedingung dafür, daß (2) als "Sekundärelektron"

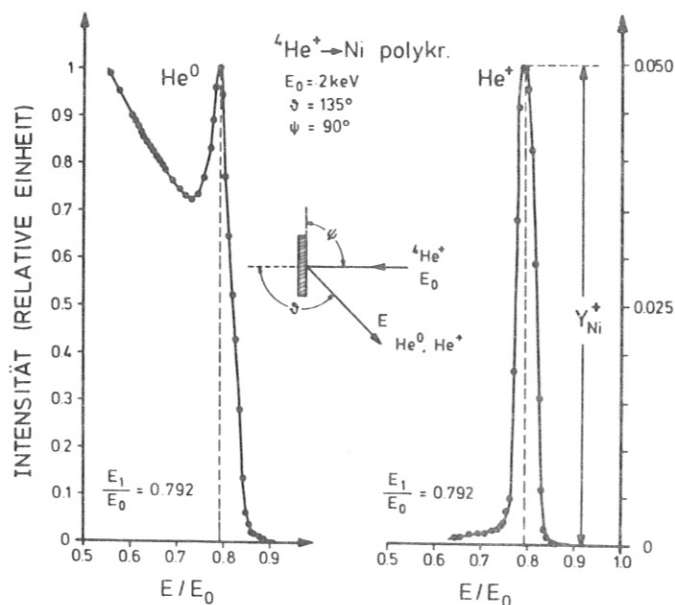


Abb. 2 Energieverteilung bei der Rückstreuung von ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Ni}$ (nach /24/).

Links: rückgestreute neutrale Projektile (He^0)
 Rechts: rückgestreute He^+ -Ionen. Das Peakmaximum Y_{Ni}^+ beträgt etwa 5 % der Höhe des Oberflächenpeaks für die neutralen Projektile.

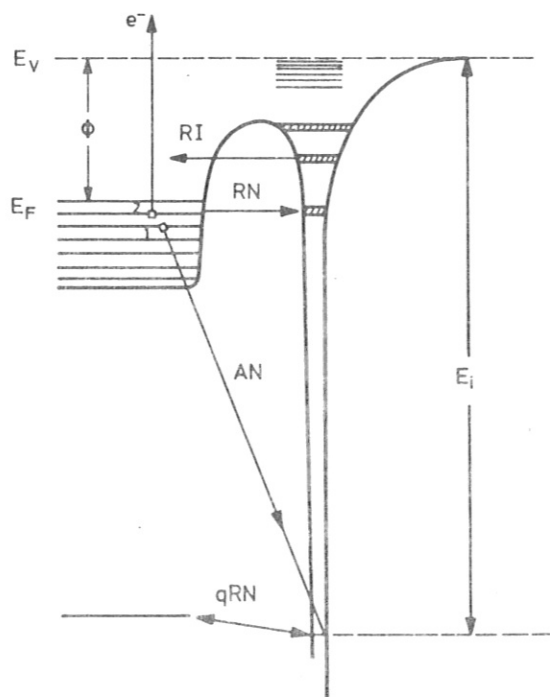


Abb. 3: Schema der Ladungsaustauschprozesse zwischen einem Edelgas-Atom oder Ion und einer Festkörperoberfläche. AN = Auger-Neutralisation mit Anregung (Emission) eines zweiten Elektrons. RN = Resonanz-Neutralisation in angeregte Zustände, RI = Resonanz-Ionisation aus angeregten Zuständen des Atoms. qRN = quasiresonante Neutralisation aus einem Rumpfniveau eines Festkörperatoms. ϕ = Austrittsarbeit (nach /25/).

emittiert wird, ist: $E_i > 2\phi$.

Ebenso können Elektronen, die in angeregte Niveaus eines neutralen Atoms gelangt sind, in leere Zustände des Metalls oberhalb des Fermi-niveaus übergehen (Resonanz-Ionisation RI).

Besitzt das einfallende Ion ein freies angeregtes Niveau unterhalb der Fermienergie E_F des Metalls, ist auch ein Zweistufenprozeß möglich:

Ein Elektron (1) aus dem Leitungsband tunnelt in einen angeregten Atomzustand der gleichen Energie (Resonanzneutralisation RN) und fällt anschließend in das Grundniveau, wobei wiederum ein zweites Elektron (2) aus dem Metall emittiert werden kann.

Berechnungen von Hagstrum nach diesem Modell führen über Ratengleichungen zu dem Ergebnis, daß $P_i(E_0, \Theta)$ monoton mit zunehmender Projektilgeschwindigkeit anwächst.

$$(2.2.1) \quad P_i \sim \exp(-a/v_{\perp})$$

a ... abschätzbare Konstante ($\approx 10^5 - 10^6$ m/sec)
 v_{\perp} ... Geschwindigkeitskomponente des einfallenden Ions senkrecht zur Oberfläche.

Dividiert man die experimentell bestimmte Ionenausbeute Y^+ (vergl. 2.1.2, S. 8) durch den differentiellen Streuquerschnitt und trägt sie über $1/v$ auf, wird die Auger-Neutralisation in einer idealisierten Geraden deutlich (Abb. 4).

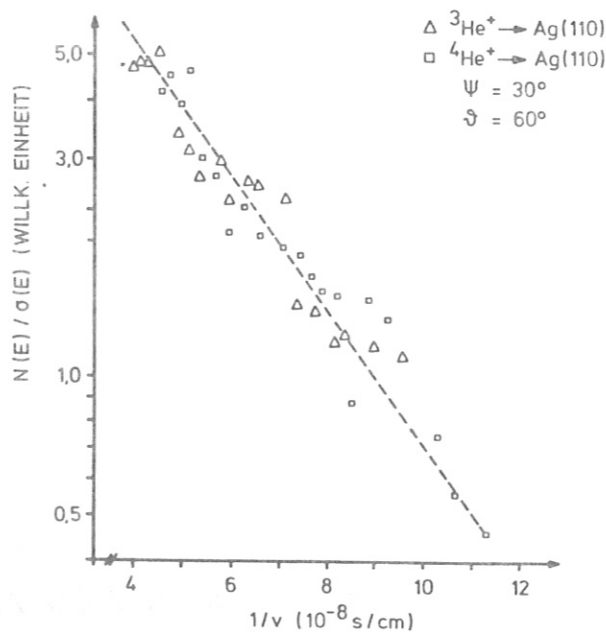


Abb. 4

Ionenausbeute normalisiert durch den Streuquerschnitt für $\text{He}^+ \rightarrow \text{Ag}(110)$ als Funktion der reziproken Ionen-Geschwindigkeit, (nach / 26 /).

Ein Beispiel, in dem Y^+ direkt als Funktion der Projektilenergie E_0 dargestellt ist, zeigt Abb. 5a.

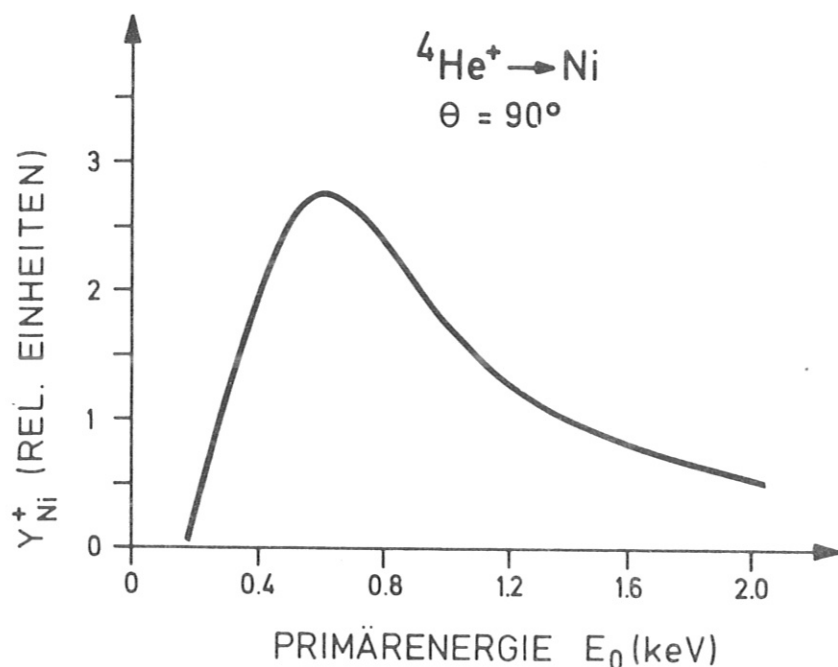


Abb. 5a

Die Ionenausbeute Y_{Ni}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0 (eigene Messung). Der Verlauf der Ionenausbeute in dieser Darstellung ist typisch für die Streuung von ${}^4\text{He}^+$ an Al, Si, Ni, Cu, Ag, Au. Man vergleiche diese Darstellung mit Abb. 4.

Deutliche Oszillationen treten aber bei der Streuung z.B. von ${}^4\text{He}^+$ an Pb auf, deren Deutung durch ein zweites Modell vorgeschlagen wird / 27 /:

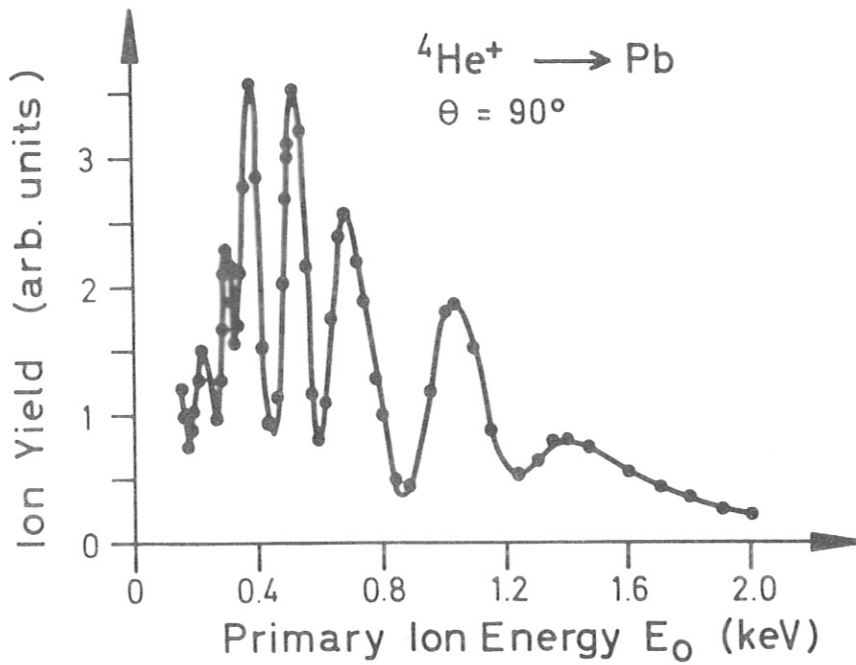


Abb. 5 b Die Oszillationen in der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ nach Erickson und Smith, die 1975 diesen Effekt entdeckten / 4 /.

In diesem Modell wird der Wechselwirkung des Ions mit den energetisch tiefer liegenden, lokalisierten Metall-elektronen Rechnung getragen. Als "quasiresonante Neutralisation" (qRN in Abb. 3) bezeichnet man Tunnelprozesse in den Atomgrundzustand aus Metallniveaus, die sich energetisch nur um wenige eV vom Grundzustand des Projektils unterscheiden.

Ein qualitatives Bild des Prozesses läßt sich durch eine Zwei-Zustandsnäherung gewinnen.

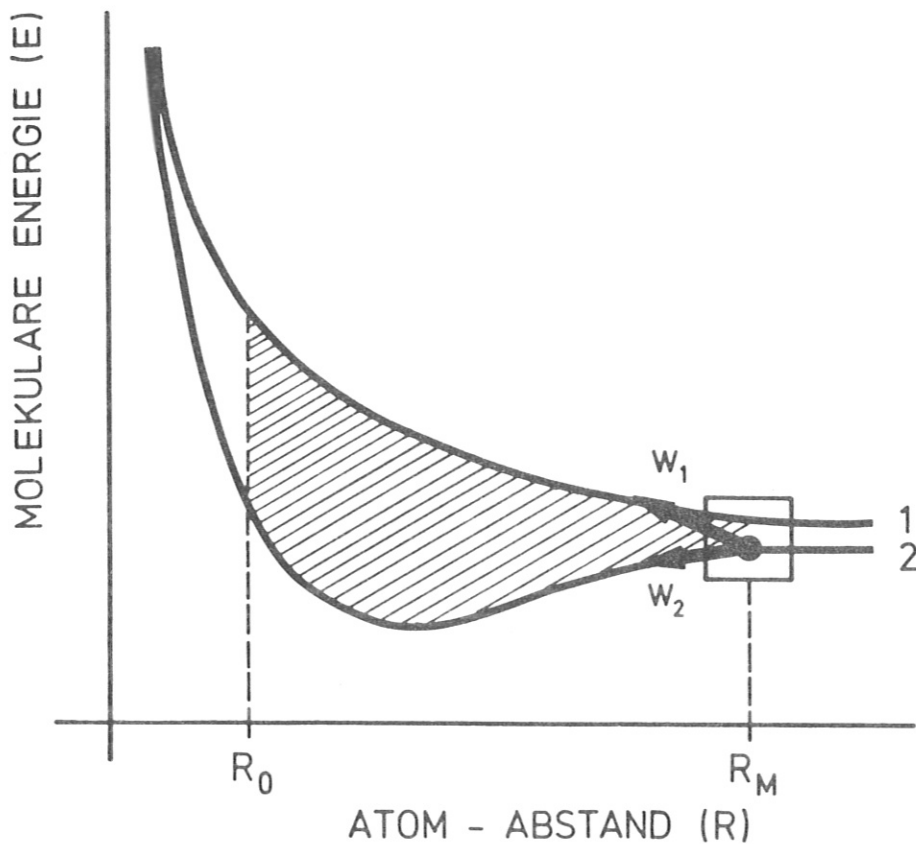


Abb. 6 Schema zur quasisresonanten Neutralisation (oszillatorische Neutralisation). Die schraffierte Fläche entspricht δ in 2.2.2 und 2.2.3 (nach / 27 /).

Abb. 6 zeigt schematisch den Verlauf des molekularen Potentials zwischen einem Metallatom und dem Projektil (He) mit dem Abstand der beiden Kerne (R). Mit 1 und 2 ist der Potentialverlauf für He im neutralen bzw. im ionisierten Zustand gekennzeichnet. Die Bewegung des He-Kerns wird halbklassisch betrachtet. Ferner wird angenommen, daß ein "quasisresonanter" Elektronenübergang im Wechselwirkungsbereich (R_M) stattfinden kann. Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang bei R_M von 2 nach 1 sei W_1 . W_2 bezeichnet die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das System im Zustand 2 bleibt ($W_2 = 1 - W_1$). Der He-Kern nähert sich dem Targetkern bis zum klassischen Umkehrpunkt (R_0), läuft zurück und passiert R_M zum zweiten Mal.

Nach dem Stoß ($R \rightarrow \infty$) ist die Wahrscheinlichkeit W , daß das Projektil neutralisiert wurde: $W = 2 \cdot W_1 \cdot (1 - W_1)$. Ansätze zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit W_1 auf der Basis einer Zwei-Zustandsnäherung finden sich in /28/ (1932). Berücksichtigt man die unterschiedlichen Phasen der Wellenfunktionen, ergibt sich für P_1 eine mit der Geschwindigkeit des Projektils oszillierende Funktion /29/ (1963).

$$(2.2.2) P_1 = A \cdot \sin^2 \left(\frac{\delta}{2} - B \right)$$

A = langsam veränderliche Funktion der reziproken Projektilgeschwindigkeit

B = konstant $\approx \frac{\pi}{4} / 30 /$

mit:

$$(2.2.3) \delta = \frac{1}{\hbar \cdot v} \int_{R_0}^{\infty} (E_1(R) - E_2(R)) dR$$

v = Projektilgeschwindigkeit

Weitere Experimente bestätigten den Einfluß des quasi-resonanten Ladungsaustauschs, wobei der oszillatorische Verlauf in der Ionenausbeute nur an solchen Elementen gefunden wurde, die ein Energieniveau (3d, 4d, 5d) in der Nähe des He(1s)-Niveaus haben (vergl. Abb.7).

Je besser diese Resonanzbedingung erfüllt ist, umso ausgeprägter zeigen sich die Oszillationen.

Für höhere Projektilgeschwindigkeiten konnte z.B. am System ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Ga}$ gezeigt werden, daß das Integral in 2.2.3 einen nahezu konstanten Wert ergibt und die Frequenz der Oszillationen nur noch von

$1/v$ abhängt, bei niedrigeren Projektilgeschwindigkeiten jedoch diese Näherung versagt (${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$) /32 /.

Die Struktur der Oszillationen ist ferner von der elektronischen Umgebung des "oszillierenden" Targetatoms abhängig. Dieser chemische Effekt wurde an Systemen beobachtet, in dem sich das oszillierende Atom (Ga, In, Pb) in verschiedenen chemischen Verbindungen befand /33/, /34/, /35/.

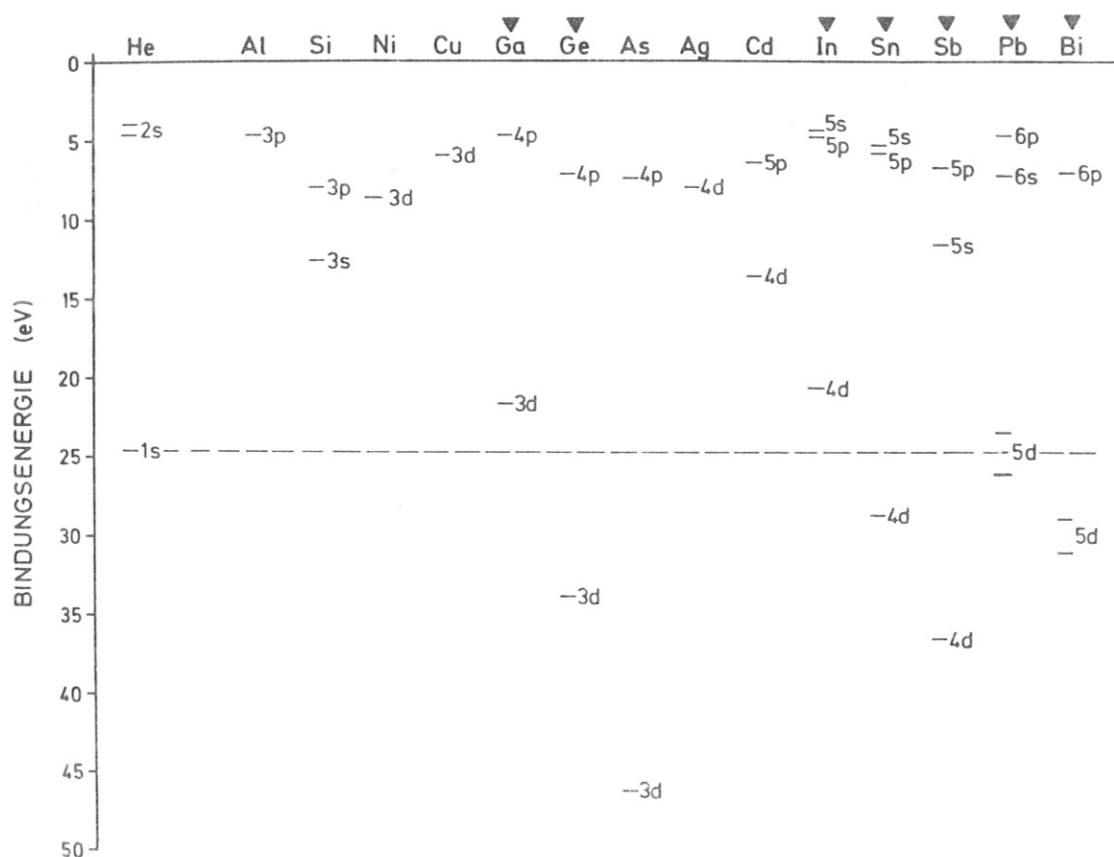


Abb.7 Energieniveaus einiger Elemente verglichen mit dem He(1s)-Niveau (nach /31/). Die mit ▼ bezeichneten Elemente zeigen Oszillationen. Al, Si, Ni, Cu oszillieren nicht. Auf diese Substrate wurde in dieser Arbeit Pb adsorbiert.

Neutralisation mit nachfolgendem Strahlungsübergang ist um den Faktor 10^6 unwahrscheinlicher als die bisher angedeuteten Prozesse RI, RN, AN, qRN (Abb. 3, S. 11). Die Strahlungsübergänge werden in dieser Arbeit nicht weiter betrachtet, (vergl. Shekhter 1937 /36/).

3. EXPERIMENTELLER TEIL:

3.1. Aufbau der Apparatur und Meßmethode

Die Anordnung der verwendeten ISS-Apparatur zeigt Abb.8; sie ist in /37/ bereits ausführlich beschrieben worden.

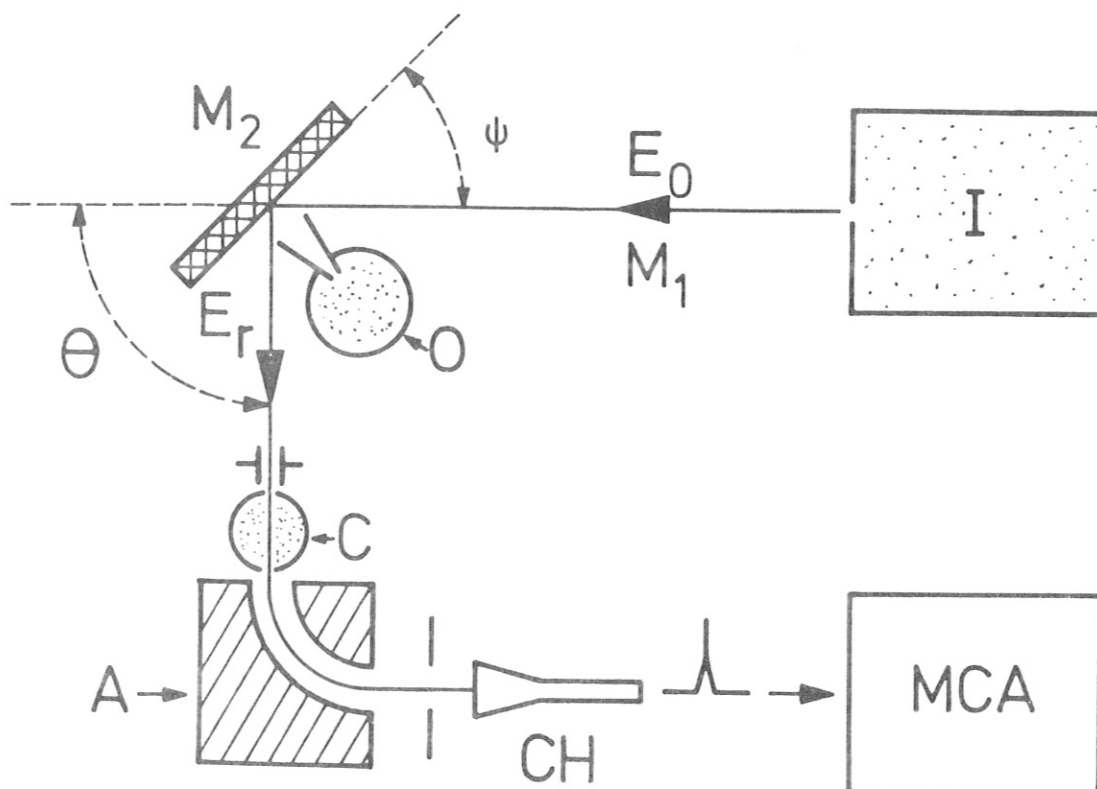


Abb.8 Aufbau der ISS-Apparatur (schematisch)

- I..... Ionenquelle
- M_1 Projektilmassenzahl
- E_0 Primärenergie der Ionen
- ψ^0 Einfallswinkel
- θ Streuwinkel
- M_2 Massenzahl eines Targetatoms
- E_r Energieverteilung der um θ gestreuten Ionen
- O^r Pb-Aufdampfanlage mit schwenkbarer Abdeckung
- C stripping-Zelle mit Ablenkplatten
- A 90° -Energieanalysator
- CH ... Ionendetektor (Spiraltron)
- MCA... Vielkanalanalysator

Aus einer Elektronenstoßionenquelle /38/ treffen Edelgasionen (${}^4\text{He}^+$) im Winkel ψ mit der Energie E_0 , einstellbar zwischen 100 eV - 2000 eV, auf ein Target der Größe 10 mm x 4 mm. Die um den Winkel θ gestreuten Ionen werden energieanalysiert (A) und mit einem Spiraltron (SEM 4219) nachgewiesen (CH). In dieser Apparatur ist der Streuwinkel θ fest vorgegeben ($\theta = 90^\circ$). Das Target ist an einem justierbaren Manipulator befestigt und im Bereich $0^\circ < \psi < 90^\circ$ drehbar. Die Spiraltronimpulse werden von einem Vielkanalanalysator (DIDAC 8000) in Kanäle, entsprechend der Lage des Analysator-Energiefensters ($10 \text{ eV} < E_r < 2000 \text{ eV}$) eingezählt. Tastet man mit dem Analysator, einem 90° Kugelkondensator, den Bereich von E_r bei konstanter Primärenergie E_0 ab, entsteht ein ISS-Spektrum (Abb. 9). Aus der Lage der Peakmaxima (E_1) lassen sich die Massenzahlen der verschiedenen Targetkomponenten nach Formel (2.1.1) bestimmen.

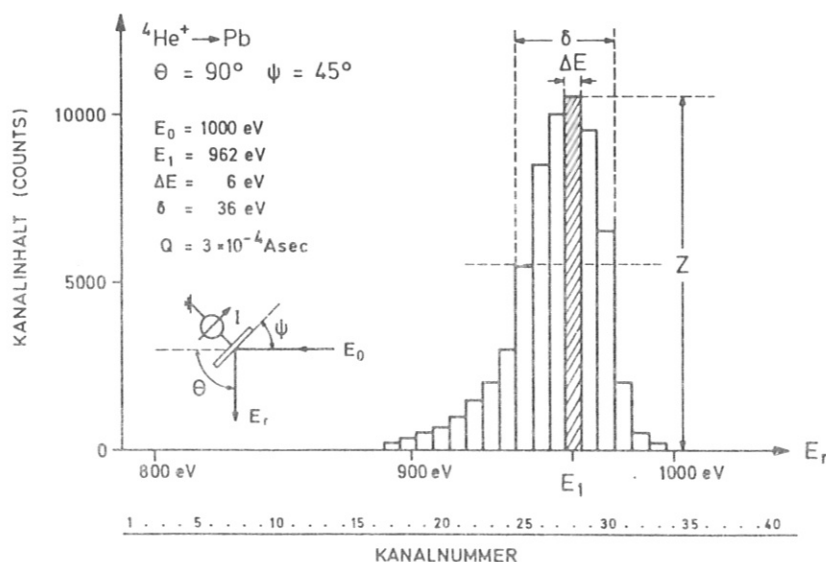


Abb. 9 ISS-Spektrum im Vielkanalanalysator

$E_1/E_0 = 0.962$ für ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$, $\theta = 90^\circ$

- δ Peakhalbwertsbreite
- ΔE Energiefenster eines Kanals
- Z Kanalinhalt des Peakmaximums
- I Targetstrom
- Q aufs Target geschossene Ladungsmenge

Für $\theta = 90^\circ$ gilt:

$$(3.1.1) \quad E_1 = E_0 \cdot \frac{(M_2 - M_1)}{(M_2 + M_1)}$$

M_2 Massenzahl einer Targetkomponente
 M_1 Massenzahl des Projektils

Die Genauigkeit der Massenanalyse $\Delta M_2/M_2$ und das Massenauflösungsvermögen sind durch die Breite der Rückstreupeaks $\delta = \Delta (E_1/E_0)$ festgelegt.

$$(3.1.2) \quad \frac{\Delta M_2}{M_2} = \frac{(M_1 + M_2)^2}{2 \cdot M_1 \cdot M_2} \cdot \Delta \left(\frac{E_1}{E_0} \right)$$

$\Delta(E_1/E_0)$ hängt von der Energieverteilung des Primärstrahles, der Streugeometrie (Abb. 10), dem Energiefenster des Analysators ΔE , der Gültigkeit des elastischen Stoßmodells und der Wahrscheinlichkeit P_i (2.2) ab.

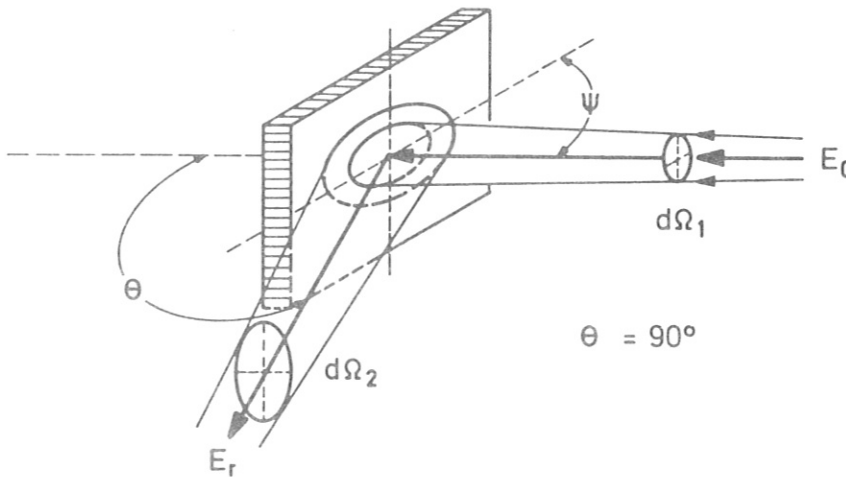


Abb. 10 Die Streugeometrie bei Experimenten mit massivem Target

$d\Omega_1$... Raumwinkel des Ionenstrahls $\approx 2.8 \cdot 10^{-4}$ sterad

$d\Omega_2$... Analysatorraumwinkel $\approx 6 \cdot 10^{-4}$ sterad
 Der Beschußfleck am Target (5.6 mm^2) liegt innerhalb des vom Analysator eingesehenen Bereichs. Die Ionenstromdichte im Beschußfleck beträgt $\approx 2 \cdot 10^{-5} \text{ A/cm}^2$.

Für diese Apparatur beträgt $\frac{\Delta(E_1/E_0)}{E_1/E_0} \approx 2\% \dots 3\%$ (4.5 S. 71). In Abb. 11 ist die Peakposition in Abhängigkeit der Targetmassenzahl M_2 dargestellt.

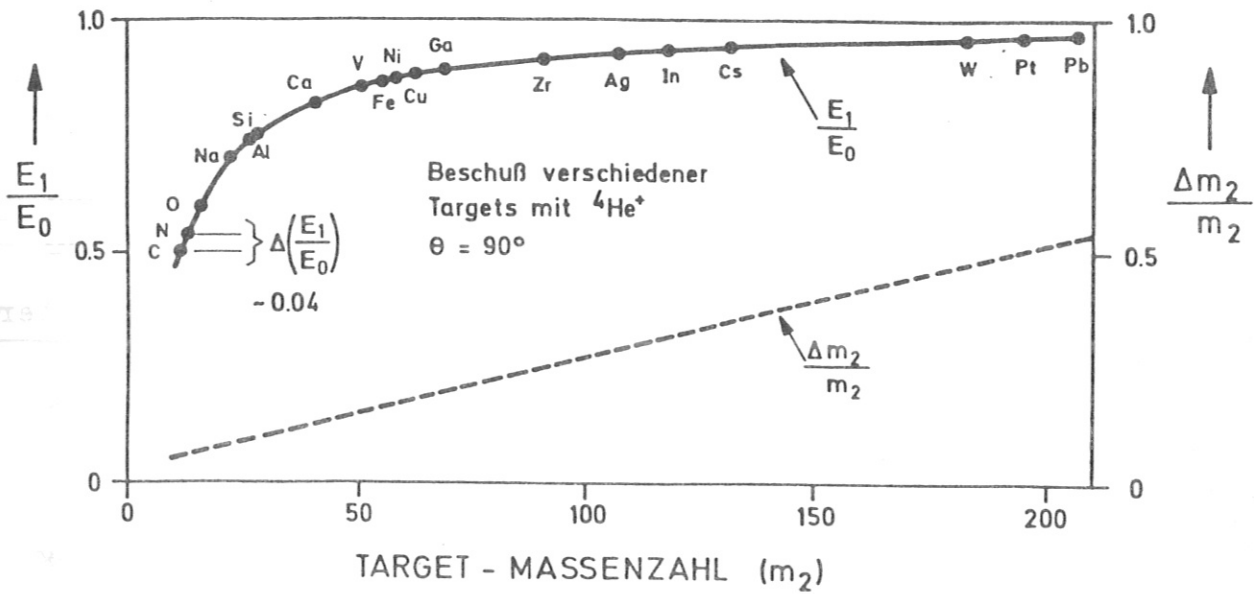


Abb. 11 Peakposition und relativer Fehler $\Delta M_2/M_2$ (3.1.2) bei der Massenanalyse (nach eigenen Messungen und nach 3.1.1)

Eine geeignete Targetzusammensetzung (z.B. Pb auf Ni) erlaubt demnach, den Rückstreupeak von Pb und den des Substrates (Ni) aufgelöst zu verfolgen und gleichzeitig das Target nach eventuell auftretenden Verunreinigungen (im UHV sind Kombinationen aus C, N, O-Atomen häufig) zu kontrollieren.

Die zweite Meßgröße ist die Zahl der rückgestreuten Ionen Z im Energiefenster ΔE des Analysators an der durch (3.1.1) definierten Stelle E_1 (Abb. 9). Eine Normierung bezüglich der aufs Target geschossenen Ladung und der Energiebreite ΔE führt zur Ionenausbeute Y_1^+ in 2.1.2. (S. 8).

$$(3.1.3) \quad Y_i^+ = \frac{\text{Zahl der Streuereignisse } Z_i \text{ im Intervall } \Delta E}{\text{geschossene Ladung} \cdot \text{Energiebreite } \Delta E} \frac{\text{Counts}}{\text{Asec}}$$

Die Konstante k in 2.2.2 ergibt sich aus dem verwendeten Analysator-Detektor-System.

$$(3.1.4) \quad k = T \cdot D \cdot d \Omega_2$$

T = Transmittanz des Analysators

D = Nachweiswahrscheinlichkeit im Detektor

$d \Omega_2$ = Analysator-Raumwinkel

Sie beträgt in dieser Anordnung: $k = 6,06 \cdot 10^{-4} \frac{\text{counts} \cdot \text{sterad}}{\text{Asec}}$

In den folgenden Experimenten werden die Ionenausbeuten Y_{Pb}^+ und Y_{Substrat}^+ für verschiedene Substrate (Al, Si, Ni, Cu) in Abhängigkeit der Primärenergie E_0 und der Bleibedeckung N_{Pb} bestimmt.

In der Peakhalbwertsbreite (δ in Abb. 9) und in der Peakverbreiterung auf der niederenergetischen Seite für $E_r < E_1$ sind weitere Informationen über den Streuprozess enthalten /39/. Sie werden ebenfalls erfaßt.

Ein durch eine Glühwendel geheizter Ofen (50 mm \varnothing , 80 mm hoch) gestattet das Aufdampfen von Pb auf das Target in situ. Aufdampfraten zwischen $1 \cdot 10^{11} \dots 1 \cdot 10^{13} \frac{\text{Pb-Atome}}{\text{cm}^2 \cdot \text{sec}}$ am Ort des Targets können durch Variieren der Ofentemperatur ($600 \text{ K} < T < 700 \text{ K}$) eingestellt werden. Der Ofen ist so angebracht, daß während des Aufdampfens eine Analyse der Targetzusammensetzung mit ISS möglich ist. Von außen kann über eine Drehdurchführung eine Abdeckung vor den Ofen geschwenkt und so der Aufdampfvorgang gesteuert werden.

Vor dem Analysator befinden sich zwei Ablenkplatten und eine Gaszelle. Mit diesem Zusatz kann der Anteil der nach dem Stoß am Target neutralen He-Teilchen bestimmt werden. Bei dieser Messung werden die rückgestreuten He⁺-Ionen mit den Ablenkplatten vom neutralen He getrennt. Durch Stoß mit Gasatomen in der Gaszelle /17/ ($1.3 \cdot 10^{-6}$ bar N₂) können Umladungen (stripping) stattfinden und die nachionisierten He-Atome anschließend energieanalysiert und im Detektor nachgewiesen werden.

Die gesamte UHV-Apparatur besteht aus Edelstahl und ist bis 550 K ausheizbar. Sie wird von einer Ionenzerstäuberpumpe ($400 \frac{1}{\text{sec}}$) und einer Turbomolekularpumpe ($450 \frac{1}{\text{sec}}$) gepumpt. Nach dem Ausheizen erreicht man einen Druck von $\approx 3 \cdot 10^{-13}$ bar im Targetraum. Der Druck des zu ionisierenden Gases in der Ionenquelle beträgt $\approx 2 \cdot 10^{-8}$ bar während des Betriebes. Sie wird von einer zweiten Turbomolekularpumpe ($220 \frac{1}{\text{sec}}$) gepumpt.

3.2. Targetbehandlung

Als Substrate wurden 1 mm dicke polykristalline Scheibchen aus Al, Ni und Cu mit einer Reinheit von 99.999 % verwendet. Das Si-Substrat war ein Einkristallstück ((111)-Fläche) mit n-Phosphor-Dotierung ($N_D \approx 10^{15} / \text{cm}^3$). Durch die Dotierung wird eine Leitfähigkeit von $\approx 0.2 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ erreicht und damit ein unerwünschtes Aufladen des Targets beim Ionenbeschuss vermieden. Die Substrate wurden mit Diamantpulver auf 1μ poliert und anschließend mit einem Mikroskop (Ölimmersion) geprüft. Einige Proben wurden zusätzlich mit einem Elektronenmikroskop (REM, Institut Klingele) mit 15 nm Auflösung untersucht (Anhang S. 117).

Bis zu diesem Bereich konnten keine Krater oder poröse Strukturen festgestellt werden. Vor dem Einbau ins UHV-Gefäß wurden die Substrate chemisch entfettet und anschließend im UHV bei 550 K ausgeheizt. Durch Beschuß mit Ar^+ -Ionen ($500 < E_0 < 2000$ eV) wurde die noch vorhandene Oxidschicht entfernt (sputter-cleaning). Nach dieser Präparation konnte mit ISS kein Anteil von Fremdatomen (mit $M_2 > 12$) auf der Targetoberfläche mehr festgestellt werden. Die Verunreinigung der Oberfläche z.B. mit Sauerstoffatomen ist dann kleiner als $5 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Fremdatome}}{\text{Substratatom}}$ und die mit Schwefel kleiner als $10^{-3} / 40 /$.

Das Blei im Aufdampfofen war 99.999 % reines Pulver, das unter H_2 -Atmosphäre in einen Molybdänzylinder eingeschmolzen und ausgeglüht wurde. Im UHV-System wurde das Blei im Ofen - bei eingefahrener Abdeckung - nochmals ausgeglüht ($T \approx 1100$ K). Die Kontrolle mit ISS während der Aufdampfvorgänge ergab keine Hinweise auf Verunreinigungen im Bleidampf.

In einem Begleitexperiment wurde die Aufdampfrate in Abhängigkeit der Betriebstemperatur des Ofens ($600 \text{ K} < T < 700 \text{ K}$) mit einer Schwingquarzwaage (KRONOS thickness-monitor QM 321) auf ± 1 % geeicht. Zusätzlich wurden Kontrollen mit Rutherford-Rückstreuung (RBS) vorgenommen /41/. Die Übereinstimmung der beiden Methoden lag innerhalb der Fehlergrenzen (± 10 %).

3.3. Atomstrahlofen

Die physikalische Forderung an den Atomstrahlofen war, im Streuvolumen einen reinen Pb-Strahl mit einer mittleren Dichte von $\approx 10^{19}$ Pb-Atomen pro m^3 zu erzeugen. Mehrere

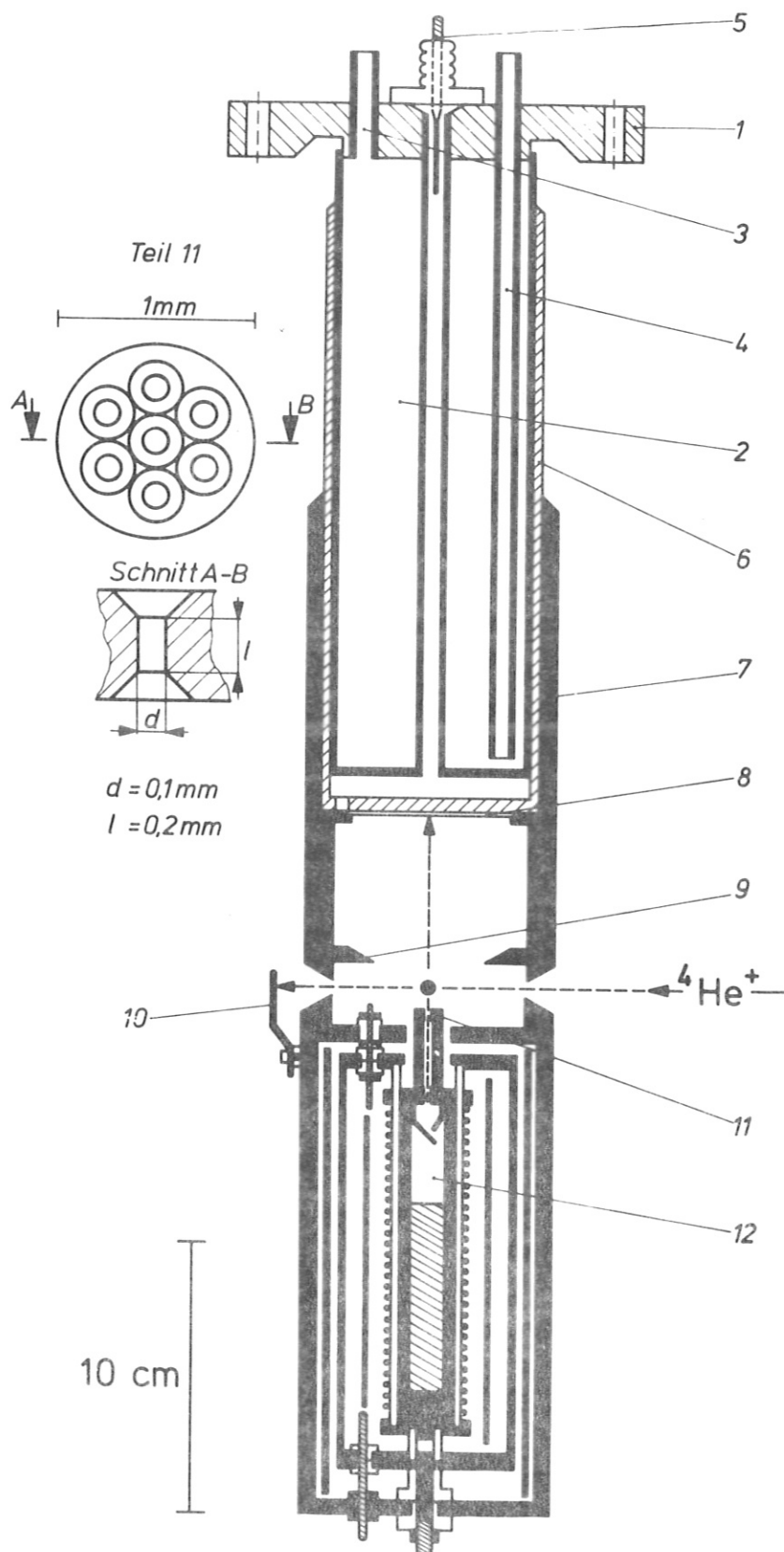


Abb. 12 Der Aufbau des Atomstrahlofens (schematisch)

- | | |
|---------|--|
| 1 ... | 6-Zoll-CF-Flansch |
| 2 ... | Kühlflüssigkeit |
| 3,4 ... | Rohrdurchführungen |
| 5 ... | Stromdurchführung f. Heizwendel |
| 6,7 ... | justierbare Cu-Teile |
| 8,9 ... | Position der Meßfolien |
| 10 ... | isoliert angebrachter Auffänger zur Messung
des Ionenstromes (Ladung) |
| 11 ... | Pb-Atomstrahldüse mit Kondensatabscheidern |
| 12 | Heizwendel mit Molybdänzylinder und Pb-Vorrat |

Versuche waren zur Verwirklichung unter den von der ISS-Apparatur gestellten Randbedingungen notwendig. Schwierigkeiten ergaben sich aus dem Kühlungsproblem und bei der Suche nach der optimalen Ofentemperatur und Düsengeometrie, die zu einem stabilen Betrieb des Ofens mit möglichst geringen Dichteschwankungen im Streuvolumen über mehrere Stunden Meßzeit hinweg führen.

Der ganze Ofen hängt an einem 6-Zoll-CF-Flansch (Abb.12) und wird beim "Atomstrahl"-Experiment anstelle des Targetmanipulators eingebaut. Der obere Teil des Ofens ist aus Edelstahl gefertigt und dient zur Aufnahme des Kühlmittels (Wasser oder flüssiger Stickstoff). Ein dickwandiges Kupferteil führt die Wärme nach oben ab. Drei Strahlungsschutzbleche umgeben den Molybdänzylinder mit aufgesetzter Düse und die Heizwendel. 99.999 % reines Bleipulver wurde unter H_2 -Atmosphäre in den Zylinder eingeschmolzen und ausgeglüht. Durch ein kleines Loch kann die Düse während des Betriebs beobachtet und ihre Temperatur mit einem Pyrometer gemessen werden.

Für die Düse (Abb. 12) erzielt man bei 1250 K Betriebstemperatur die besten Resultate. Damit ergeben sich folgende gaskinetische Daten:

Düsentemperatur: $T_D = 1250 \pm 10 \text{ K}$ (gemessen)

Gasdruck des Bleis: $p = 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ bar}$ (nach /42/)

mittlere thermische
Geschwindigkeit: $\bar{v} = \sqrt{\frac{8 \cdot K \cdot T_D}{\pi \cdot m_{Pb}}} = 357 \text{ m/sec}$

mittlere kinetische Energie:

$$\overline{E} = \frac{m_{\text{Pb}} \cdot \overline{v}^2}{2} = 0.14 \text{ eV}$$

Dichte im Ofen:

$$n_0 = p/k \cdot T = 9.04 \cdot 10^{21} \frac{\text{Pb-Atome}}{\text{m}^3}$$

mittlere freie Weglänge im Ofen:

$$\lambda = k \cdot T / (4\pi \cdot \sqrt{2} \cdot p \cdot r^2)$$

r ... gaskinetisch wirksamer Radius der Pb-Atome
 $\approx 1.75 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
 $= 2.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}$

Der Durchmesser eines Düsenlochs (d) ist $1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ und erfüllt die "Atomstrahlbedingungen" $d < \lambda$. Aus der Streugeometrie (Abb. 13) und den gaskinetischen Daten läßt sich die mittlere Anzahl N_S der Pb-Atome im Streuvolumen abschätzen.

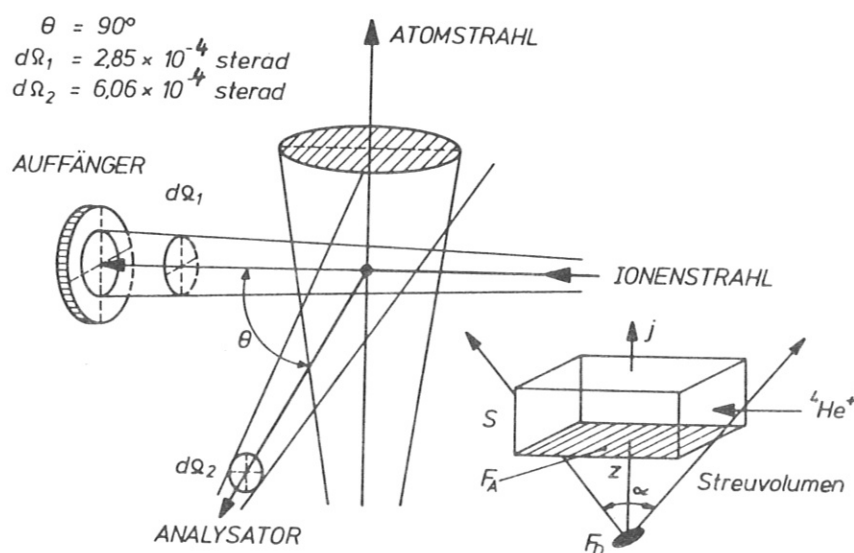


Abb. 13 Die Streugeometrie beim Atomstrahl-Experiment. Zur Abschätzung der Teilchenzahl N_S wurde das Streuvolumen durch einen Quader (Grundfläche: F_A , Höhe: S) idealisiert. F_D ... Düsenquerschnitt, Z ... Abstand der Düse vom ${}^4\text{He}^+$ -Strahl, j ... Teilchenstromdichte des Pb-Atomstrahls

$$N_S = j_Z \cdot F_A \cdot \frac{S}{V} = \frac{n_0 \cdot F_D \cdot F_A \cdot S}{4 \pi \cdot z^2} \quad (3.3.1)$$

$$\text{mit } j_Z = F_D \cdot n_0 \cdot \frac{\bar{v}}{4 \pi \cdot z^2} \quad (3.3.2)$$

$$\begin{aligned} F_A &= 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \\ F_D &= 7 \pi \cdot \left(\frac{d}{2}\right)^2 = 2.2 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \\ n_0 &= 9.04 \cdot 10^{21} \text{ Pb-Atome/m}^3 \\ S &= 2 \cdot 10^{-3} \text{ m} \\ Z &= 3 \cdot 10^{-3} \text{ m} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F_A \\ F_D \\ n_0 \\ S \\ Z \end{aligned}} \right\} \begin{aligned} j_Z &= 6.3 \cdot 10^{21} \frac{\text{Pb-Atome}}{\text{sec} \cdot \text{m}^2} \\ N_S &= (3.5 \pm 0.4) \cdot 10^{11} \\ &\quad \text{Pb-Atome} \end{aligned}$$

Die gesamte aus dem Ofen emittierte Teilchenzahl pro sec. ist $N = \frac{1}{4} \cdot n_0 \cdot \bar{v} \cdot F_D \approx 1.8 \cdot 10^{17} \text{ Pb-Atome/sec./43}$ / Daraus errechnet sich ein Bleiverbrauch von 0.3 g/h. Das Wägen von dünnen Al-Streifen in Position 9 in Abb. 12 vor und nach einem Testlauf mit einer Mikrowaage ergab angenähert eine COS-Verteilung für die Strahlintensität im Winkelbereich $0^\circ < \alpha < 65^\circ$. Ebenso wurde die Gewichtszunahme eines Al-Streifens an der gut gekühlten Position 8 nach 6 h Testlauf bestimmt und die Abschätzung (3.3.2) und (3.3.1) nachgeprüft. Der experimentelle Wert für j_8 an der Stelle 8 war $5.33 \cdot 10^{-6} \frac{\text{kg}}{\text{sec} \cdot \text{m}^2}$ und auf den Abstand z zurückgerechnet $j_Z = 2.9 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{sec} \cdot \text{m}^2} = 8.4 \cdot 10^{21}$

$\frac{\text{Pb-Atome}}{\text{sec} \cdot \text{m}^2}$. Mit (3.3.1) erhält man $N_S = (4.7 \pm 0.7) \cdot 10^{11}$

Pb-Atome im Streuvolumen.

Da Bleidampf sehr gut an gekühlten Flächen kondensiert, wurden die Pumpen der UHV-Apparatur nicht zusätzlich belastet und die Messungen am Atomstrahl konnten bei einem Restgasdruck von $\approx 10^{-10}$ bar durchgeführt werden.

Besondere Bedeutung für das zweite Experiment, in dem die Neutralisation von $^4\text{He}^+$ -Ionen bei der Streuung an freien Pb-Atomen untersucht werden soll, kommt der unerwünschten Bildung von Dimeren und Clustern höherer Ordnung im Pb-Strahl zu. Die Wahrscheinlichkeit der Kondensation im Strahl, d.h. der Dimerenbildung, steigt mit abnehmender Strahltemperatur. Da hohe Machzahlen bei gasdynamischer Strömung, wie sie durch adiabatische Expansion des Gases in einer Laval-Düse erreicht werden können, eine Erniedrigung der Strahltemperatur bedeuten, wurde hier ein gewöhnlicher Atomstrahl (Knudsenzahl $K_n > 1$) angestrebt und längere Meßzeiten, bedingt durch eine geringere Teilchendichte im Streuvolumen, in Kauf genommen.

Einen ersten Hinweis dafür, daß bei den gewählten Betriebsbedingungen die Kondensation im Atomstrahl klein ist, liefert der Vergleich der Dissoziationsenergie von Pb_2 $\Delta H_0 = (0.8 \pm 0.2) \text{ eV} / 44$ / mit der mittleren kinetischen Energie $\bar{E} = \frac{m \cdot \bar{v}^2}{2} = 0.14 \text{ eV}$ eines Pb-Atoms und die Abschätzung der relativen Dampfdrucke von Pb und Pb_2 . Für die Dissoziation in der Gasphase



kann die Gleichgewichtsbedingung durch die Partialdrucke dargestellt werden, wobei k_p

$$(3.3.4) \quad \frac{p(\text{Pb}) \cdot p(\text{Pb})}{p(\text{Pb}_2)} = k_p$$

mit der Dissoziationsenergie ΔH über die Clausius-Clapeyron-Gleichung verknüpft ist.

$$(3.3.5) \quad \frac{d \ln k_p}{d(1/T)} = - \frac{\Delta H}{R}$$

Eine Abschätzung von k_p , in atm gemessen, liefert

(3.3.6) /44/

$$\begin{aligned}
 \ln k_p &= - \frac{\Delta H_0}{R \cdot T} && \dots - 7.453 \\
 &+ \ln \left(\mu_A^{3/2} \frac{\sigma}{10^{40} \cdot I} \left(\frac{T}{100} \right)^{3/2} \right) && \dots + 3.78 \\
 &+ \ln \left(1 - e^{-\Theta_V/T} \right) && \dots - 0.52 \\
 &+ \ln \left(\frac{v_A \cdot v_B}{V_{AB}} \right) && \dots + 0.69 \\
 &+ 6.94 && \dots + 6.94 \\
 \ln k_p &= && 3.44 \\
 k_p &= && 31.19 \text{ atm}
 \end{aligned}$$

Dabei wurden folgende Werte eingesetzt:

Ofentemperatur:	$T = 1250 \text{ K}$
Dissoziationsenergie:	$H = 77.45 \text{ kJ/mol /44/}$
Gaskonstante:	$R = 8.314 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$
reduzierte Masse	$\mu_A = M_{Pb}/2$
in atomaren Einheiten:	$= 103.595$
Symmetriefaktor:	$\sigma = 2$ (für gleiche Kernmassen)
Trägheitsmoment:	$I = 2m_{Pb}r^2 = 2.12 \cdot 10^{-37} \text{ gcm}^2$ $r = 1.75 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$
charakteristischer Vibrationsanteil:	$m_{Pb} = 3.46 \cdot 10^{-22} \text{ g}$ $\Theta_V \approx 1128 \text{ K}$
statistisches Gewicht:	$v_A \cdot v_B / v_{AB} = 2$

Mit der Annahme, daß $p(\text{Pb})$ ungefähr gleich dem Gasdruck im Ofen ist (bei 1250 K $\approx 1.32 \times 10^{-3}$ atm) erhält man mit (3.3.4):

$$\frac{p(\text{Pb}_2)}{p(\text{Pb})} \approx \frac{p(\text{Pb})}{k_p} = 4.23 \times 10^{-5}$$

Dies bedeutet, daß in diesem Atomstrahl die Dimerenbildung vernachlässigbar klein ist.

Experimentell wird dieser Wert von Honig /45/ bestätigt. Mit massenspektrometrischen Methoden stellt er einen Wert $p(\text{Pb}_2^+) / p(\text{Pb}^+) = 3 \times 10^{-5}$ bei 800 K Ofentemperatur fest.

3.4. Elektronische Steuerung und Datenerfassung

Für die Aufnahme von 5000 ISS-Spektren im Rahmen dieser Arbeit erwies sich die automatische Steuerung und Datenerfassung als nützlich (Abb. 14).

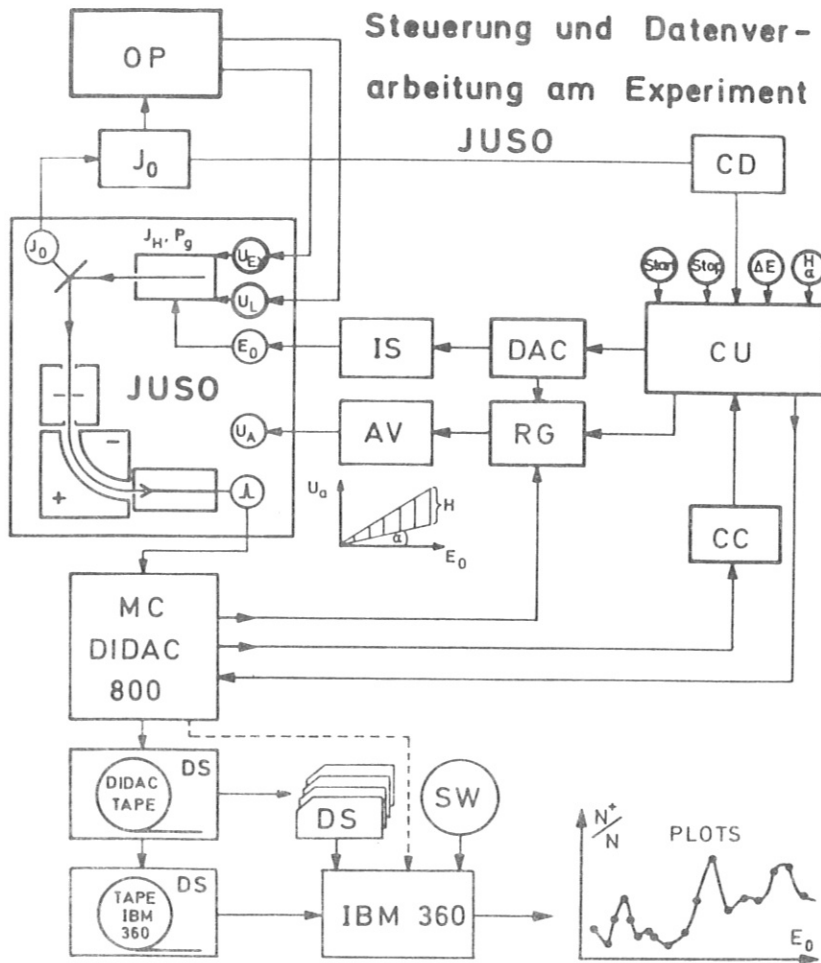


Abb. 14

CU ...	Prozessor
DAC ...	12 bit Digital-Analogkonverter
IS ...	Hochspannung (Ionenquelle)
RG ...	Rampengenerator
AV ...	Analysatorspannung
CC ...	Kontrollzähler
J ₀ ...	Elektrometer
OP ...	Optimiser
CD ...	digital current integrator
MC ...	Vielkanalanalysator
DS ...	Datenträger
SW ...	software (Fortran)

Steuerparameter (Input)

Ionenquelle: U_{EX}, U_L, E_0

Analysator: U_A

Meßdaten (Output)

Targetstrom J_0

Detektorsignale als $f(U_A)$

feste Parameter

Heizstrom J_H d. Ionenquelle

He-Gasdruck i. d. Ionenquelle P_g

Die Information über den Streuprozeß in Abhängigkeit der Ionen-Primärenergie $100 \text{ eV} < E_0 < 2000 \text{ eV}$ für ein in situ präpariertes Target mit einer bestimmten Pb-Bedeckung ist in einer Serie von 60 ISS-Spektren enthalten. Den Ablauf einer solchen Meßserie steuert und überwacht ein Prozessor (CU). Vor jedem neuen Spektrum einer Serie wählt er die Ionen-Primärenergie E_0 . Die passende Spannung, erzeugt von einem 12 bit Digital-Analog-Wandler (DAC) und einem Hochspannungsnetzteil (IS), liegt dann an der Ionenquelle an. Nach dem "Start" des neuen Spektrums werden die Kanäle (MC) mit 100 ms/Kanal durchlaufen und die Detektorimpulse aufaddiert. Über einen Rampengenerator (RG) und ein doppelpoliges Netzgerät (AV) liegt die zu jedem Kanal gehörende Spannung U_A am Analysator an. Der Spannungshub (H) ist in der (CU) so vorprogrammiert, daß die Spektren im Vielkanalanalysator (MC) bei verschiedenen Primärenergien E_0 nicht gegeneinander verschoben werden. Die Peakmaxima der ISS-Spektren sind dann unabhängig von E_0 immer in denselben Kanälen. Ein Elektrometer (KEITHLEY 602) kontrolliert den auf das Target treffenden Ionenstrom (I_0). Bei der verwendeten Elektronenstoßionenquelle /38/ hängt I_0 vom Gasdruck des zu ionisierenden Gases (P_g) dem Heizstrom (J_H), der Primärenergie (E_0) und den Spannungen an der Einzellinse (U_{EX} , U_L) ab. Für ${}^4\text{He}^+$ sind Stromdichten von $0.1 \mu\text{A/cm}^2$ (bei 100 eV) bis $100 \mu\text{A/cm}^2$ (bei 2000 eV) am Target erreichbar. Ein digital current integrator CD (ORTEC 439) stellt die auf das Target einfallende Ladung fest. Die Meßzeit für ein Spektrum ist durch I_0 und der in der (CU) vorgegebenen Gesamtladung bestimmt. Typische Meßzeiten für eine Serie (60 Spektren) betragen zwischen 3 h und 8 h für Festkörpertarget-Experimente und $\approx 30 \text{ h}$ für Experimente am Pb-Atomstrahl. J_H und P_g werden auf einen festen Wert eingestellt und

die Parameter U_{EX} , U_L über einen Optimisator (OP) so nachgeregelt, daß I_0 immer maximal wird. Die Wirkung des Optimisators auf die Verkürzung der Meßzeit einer Serie zeigt Abb. 15. Gleichzeitig wird mit dieser Regelung erreicht, daß der Beschußfleck über den ganzen Energiebereich innerhalb der vom Analysator eingesehenen Targetfläche bleibt (s. Abb. 10, S. 20).

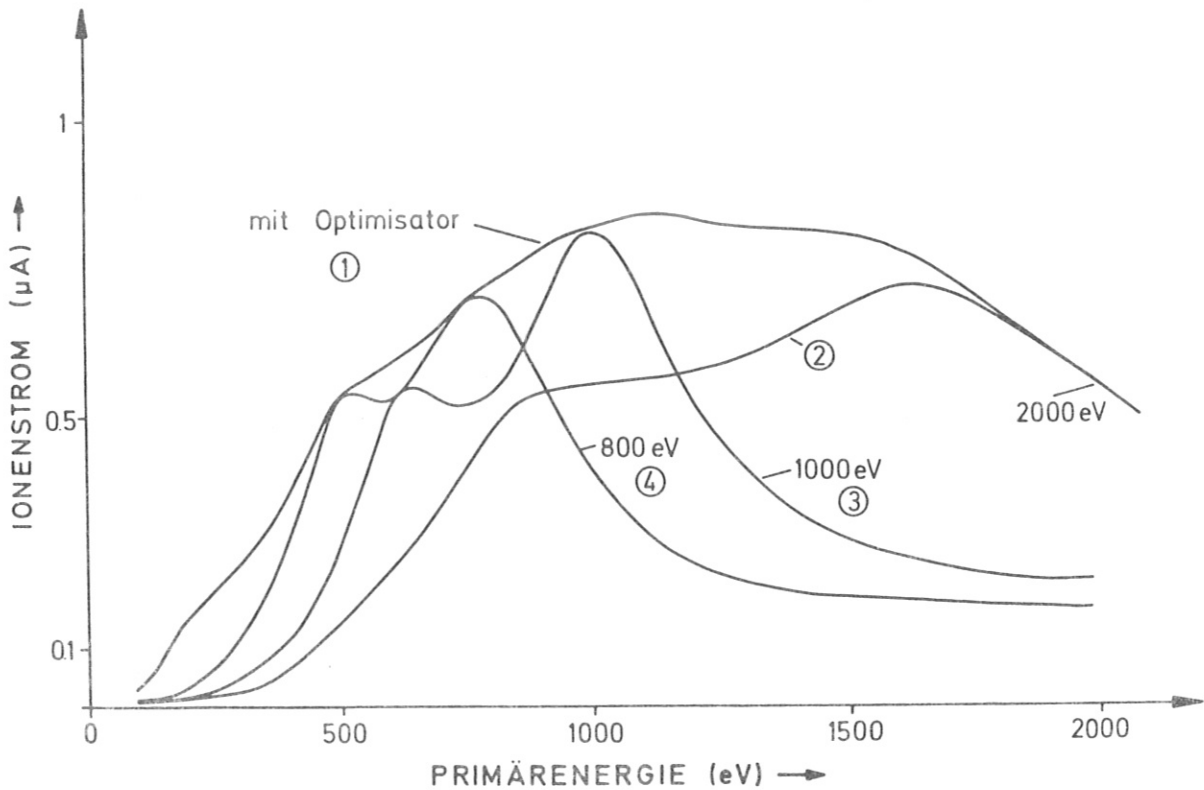


Abb. 15 Der ${}^4\text{He}^+$ -Ionenstrom als Funktion der Primärenergie E_0 .
 In Kurve 2,3,4 waren die Parameter U_{EX} , U_L fest eingestellt, und zwar so, daß der Ionenstrom jeweils bei 800 eV bzw. 1000 eV und 2000 eV maximal wurde. In Kurve 1 wurden U_{EX} , U_L vom Optimisator für jeden E_0 -Wert nachgeregelt. Beim automatischen Betrieb der Anlage verkürzt diese Regelung vor allem im Bereich $E_0 < 1000$ eV die Meßzeit für eine ganze Serie erheblich (Zeitersparnis 4-5 h)

Ein Beispiel für das "Stromgebirge" als Funktion von U_{EXT} , U_L zeigt Abb. 16.

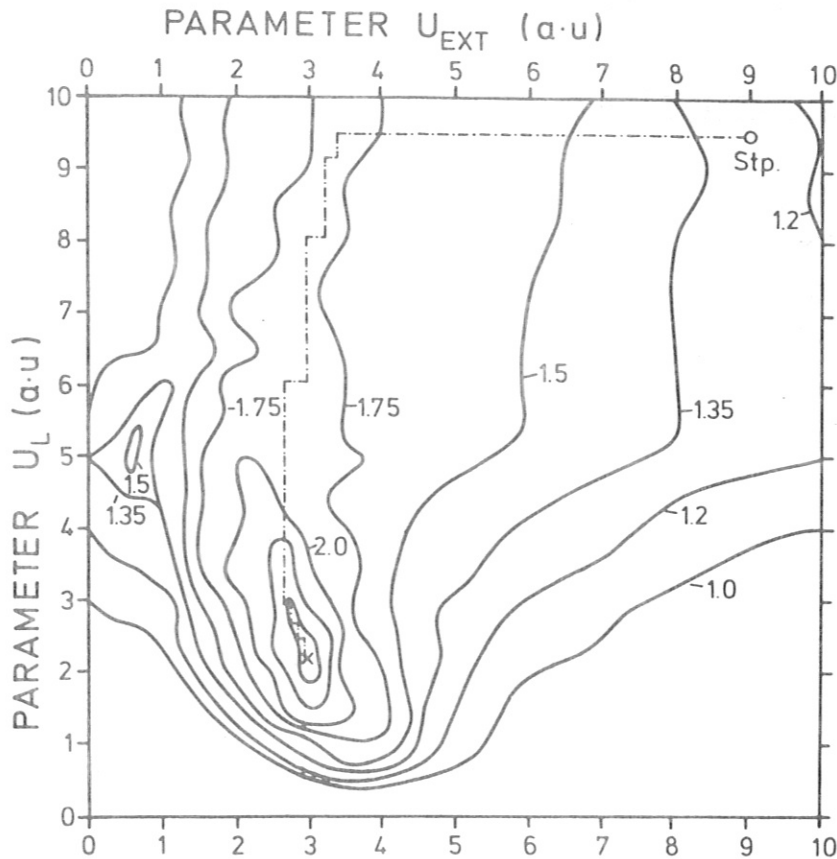


Abb. 16 Die Gütefunktion $I_0 = f(U_{EXT}, U_L)$ bei konstanten Heizstrom $I_H = 4$ A, He-Gasdruck $P_g = 2 \cdot 10^{-8}$ bar und konstanter Primärenergie $E_0 = 1000$ eV.

Der Optimisator beginnt am Startpunkt (Stp) und findet den optimalen Parametersatz bereits nach 14 Schritten (≈ 20 sec). Nach diesem Regelvorgang startet die CU (Abb. 14, S. 32) ein neues ISS-Spektrum mit $E_0 = 1000$ eV.

Jedes Spektrum wird von einem Bandgerät (DIDAC TAPE) aufgezeichnet, mit einem "descriptor" versehen und an die Rechenanlage (IBM 360) übertragen. Die Datenübertragung ist auf drei Wegen möglich: Herstellen eines Kartenstapels mit einer Lochkartenmaschine, umkopieren der Daten vom

Didac-tape auf ein IBM-Band und direkte Übertragung (on-line) auf Platte.

3.5. Datenverarbeitung

Mehrere Auswerte- und Plotprogramme (in FORTRAN) wurden geschrieben (SW). Sie ermöglichen eine schnelle Analyse der gewonnenen Daten in 6 Abschnitten:

- Substraktion des "Untergrundes" in den Spektren, wenn vorhanden.
- Normierung jedes Spektrums nach (3.1.3., S. 22).
- Plot der Ionenausbeuten Y_i^+ als $f(E_0)$ für eine Serie und jede Targetkomponente i .
- Vergleich mehrerer Serien miteinander (Peakform und Ionenausbeute).
- Plot der Wahrscheinlichkeit P_i nach (2.1.2 - 2.1.5, S. 8) als $F(E_0)$.
- Vergleich der experimentellen Werte P_i mit verschiedenen Modellen des Ladungsaustauschs (vergl. 2.2, S. 9).

4. MESSERGEBNISSE

4.1. 1. Experiment mit dünnen Schichten

Wenn die Wechselwirkung eines einfallenden ${}^4\text{He}^+$ -Ions mit der Pb - 6p, 6s - Bandstruktur nach dem auf S. 12 charakterisierten Modell zum Elektronenaustausch beiträgt, so sollten auch Änderungen in dem oszillatorischen Verlauf der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ beim Übergang vom massiven Pb-Target zu dünnen Schichten mit mehreren Atomlagen Pb auf einem geeigneten Substrat und schließlich zu Bedeckungen unterhalb einer Atomlage, mit einzelnen, "isolierten" Pb-Atomen auf dem Substrat, meßbar sein.

In diesem Experiment wurden die Ionenausbeuten Y_{Pb}^+ als Funktion der Energie E_0 der Projektilionen (${}^4\text{He}^+$) im Bereich $100 \text{ eV} < E_0 < 2000 \text{ eV}$ an einem massiven Pb-Target (Reinheit 99.999 %), an dünnen Pb-Schichten (Schichtdicke 200 nm ... 20 nm) und an Pb-Bedeckungen $< 10^{15}$ Pb-Atome/cm² auf polykristallinen Ni-Substraten untersucht. Der quantitative Aspekt der ISS-Messungen wurde besonders beachtet und der lineare Zusammenhang zwischen Ionenausbeute Y_{Pb}^+ und Pb-Bedeckung N_{Pb} (2.1.2, S. 8) nachgeprüft. Dazu wurden Vergleichsmessungen mit der Rutherford-Rückstreumethode (RBS) am 2 MeV-Beschleuniger /41 / durchgeführt.

Nickel wurde als Substratmaterial gewählt, da es selbst keine "Oszillationen" zeigt (vergl. Abb. 7, S. 17) und der ISS-Rückstreupeak gut getrennt von dem des Bleis zu verfolgen ist (vergl. Abb. 11, S. 21). Es kann erwartet werden, daß auf metallischen Substraten (z.B. Ni, Cu) sich atomare, stabile Strukturen ausbilden. /46/ /47/.

Drei Methoden zur Targetpräparation für Pb-Bedeckungen

unterhalb einer Monolage (m.l.), entsprechend $\approx 9.4 \times 10^{14}$ Pb-Atome/cm² (eine dichtest gepackte Pb-Atomlage angenommen / 48 /), wurden erprobt:

- Beschuß des Ni-Substrates mit Pb-Ionen aus einem lasererzeugten Plasma / 49 /
- Aufdampfen in situ mit dem Pb-Ofen (Abb. 8, S. 18).
- Herstellen von dünnen Pb-Filmen in einer UHV-Aufdampfanlage mit einem Schwingquarz-"thickness-monitor". Anschließend Einbau in die ISS-Apparatur und langsames Abtragen von Pb durch Ar⁺-Beschuß (sputtering).

Die in diesem Abschnitt beschriebenen Meßergebnisse an dünnen Pb-Schichten entstanden mit Substraten, die nach der dritten Methode präpariert wurden.

Abbildung 17 (1) zeigt die an dem massiven Pb-Target gemessenen Oszillationen. Jeder Meßpunkt entstand aus einem ISS-Spektrum. Deutliche Maxima entstehen bei $E_0 = 187$ eV, 288 eV, 363 eV, 500 eV, 688 eV, 1050 eV und Minima bei $E_0 = 225$ eV, 319 eV, 431 eV, 575 eV, 862 eV, 1213 eV.

Sechs kleinere Peaks zeigen sich über dem letzten, breiten Anstieg und Abfall für $1250 \text{ eV} < E_0 < 2000 \text{ eV}$. Die Messungen am massiven Pb-Target wurden mehrmals wiederholt. Vor jeder Serie wurde ein sputter-cleaning mit Ar⁺-Ionen durchgeführt. Die Messungen ergaben eine gute Reproduzierbarkeit für die Position der Maxima und Minima bei den bestimmten Energiewerten E_0 . Der relative Abszissenfehler war kleiner 1.5 %. Die relativen Abweichungen in der Ordinate (Y_{Pb}^+) zwischen den einzelnen

Serien waren kleiner 6 % und lagen über dem statistischen Fehler ($\sqrt{Z}/Z \approx 1\%$) für jeden Meßpunkt.

Die Messungen an dünnen Pb-Schichten auf Ni-Substraten mit Schichtdicken von 200 nm bis 20 nm, bestimmt durch Vergleichsmessungen mit dem "thickness-monitor" (KRONOS QM 321) in der Aufdampfanlage, ergaben keine Abweichung gegenüber den am massiven Pb-Target gewonnenen Ergebnissen. Die dünnsten Schichten, die in der Aufdampfanlage hergestellt werden konnten, ohne daß sich bei der anschließenden ISS-Analyse "Löcher" in der Pb-Schicht zeigten (kein Ni-Peak im ISS-Spektrum), waren Belegungen von $\approx 4.7 \times 10^{16}$ Pb-Atomen/cm². Unter der Voraussetzung einer gleichmäßig dicht gepackten Belegung waren diese Schichten ≈ 15 nm dick. Dünnere Schichten wurden durch Sputtern mit Ar⁺-Ionen unter flachem Einfallswinkel in der ISS-Apparatur hergestellt und gleichzeitig adsorbierte Gase (z.B. Sauerstoff) entfernt. Der Sputtervorgang wurde mehrmals unterbrochen und mit ⁴He⁺ die Reinheit des Targets (C,O-Verunreinigungen) und das langsame Anwachsen des Ni-Peaks kontrolliert. Bei einer bestimmten Ni-Peakhöhe wurde das Ar⁺-Sputtern abgebrochen und eine Meßreihe mit ⁴He⁺ durchgeführt (2,3,4,5,6 in Abb. 17 und 18). Nach dieser Serie wurde an einem Meßpunkt ($E_0 = 1050$ eV) nochmals ein ⁴He⁺-ISS-Spektrum aufgenommen, um den Einfluß der Zerstäubung durch ⁴He⁺-Ionen während der Meßserie abschätzen zu können. Anschließend erfolgte der Ausbau des Targets und die Analyse mit RBS am 2 MeV-Beschleuniger. Die absoluten Pb-Bedeckungen (Pb-Atome/cm²) konnten mit Hilfe eines Eich-targets /41/ mit einer Genauigkeit von 10 % 25 %, je nach Pb-Belegung, ermittelt werden.

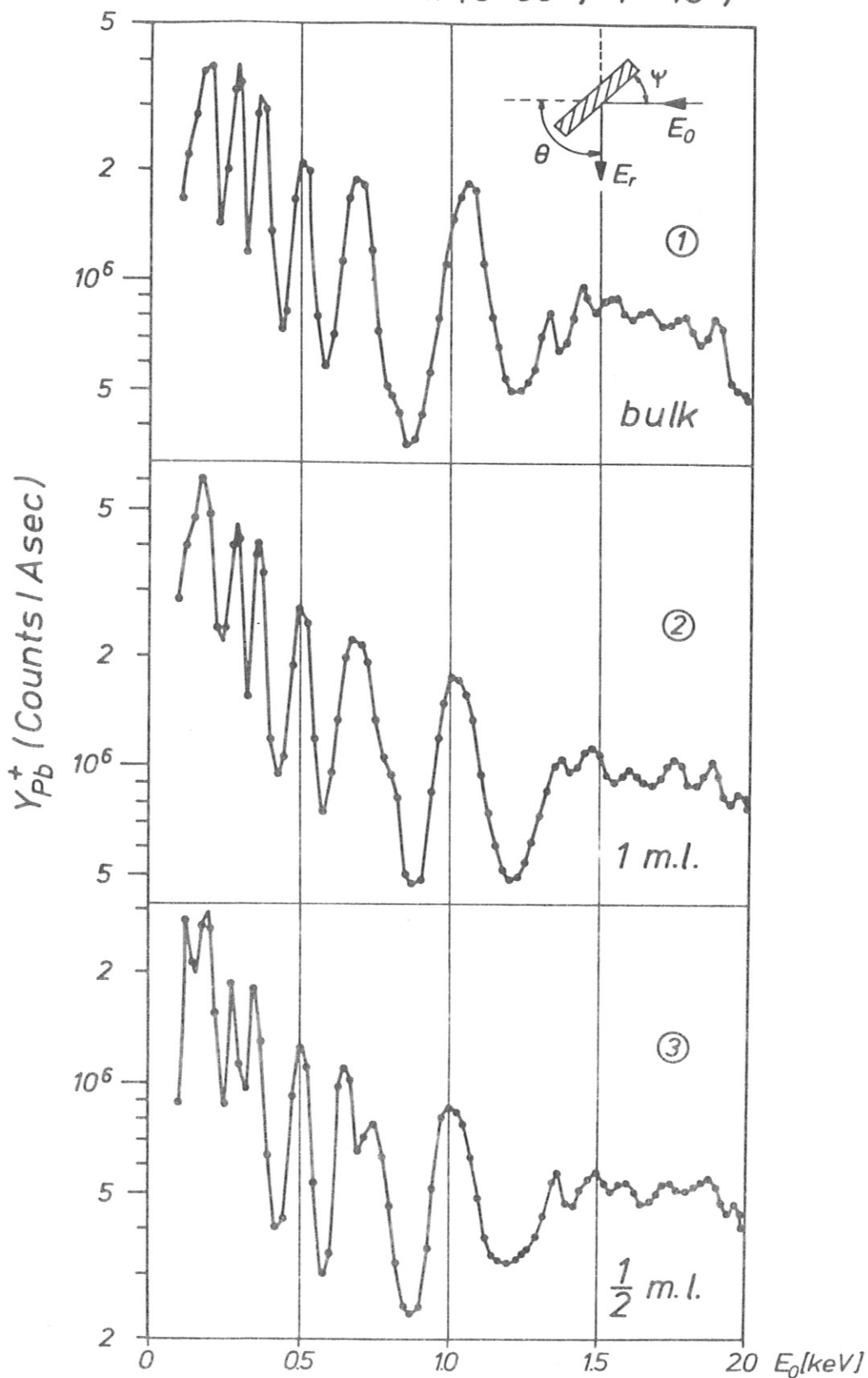
${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$ auf Ni ($\theta = 90^\circ$; $\psi = 45^\circ$)


Abb. 17 Die Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Primärenergie E_0 (halblogarithmisch)

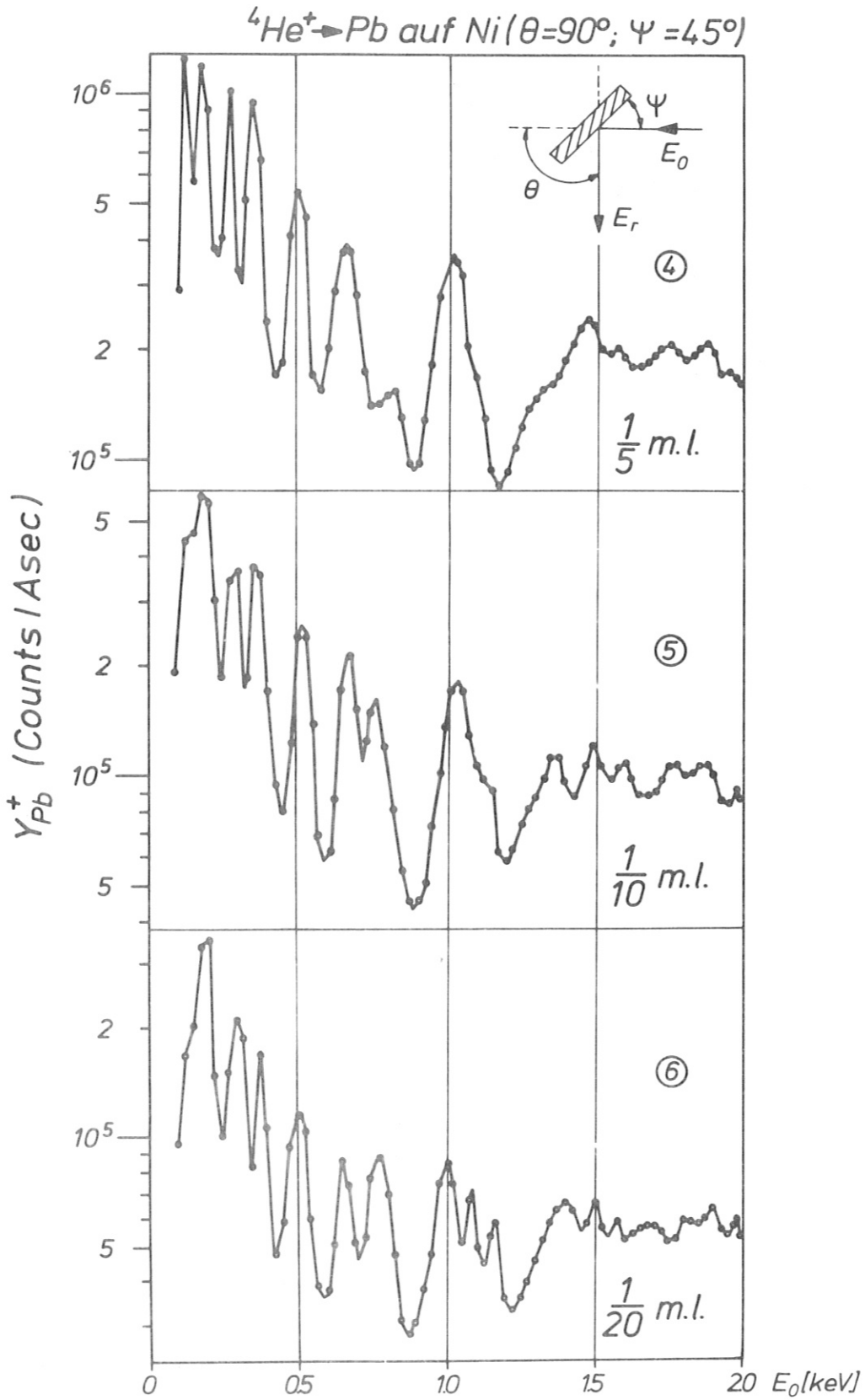


Abb. 18 Die Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Primärenergie E_0 (halblogarithmisch)

In 2,3,4,5,6 in Abb. 17 und 18 sind die Ergebnisse der ISS-Meßserien einiger Pb-Ni-Targets dargestellt. Änderungen in den Oszillationen, verglichen mit dem massiven Pb-Target, waren erst bei Bedeckungen < 1 m.l. zu beobachten.

Obwohl der oszillatorische Effekt im Ganzen unverändert bis zu Pb-Belegungen von 4×10^{13} Pb-Atomen/cm² = 1/20 m.l. (6, Abb. 18) bestehen bleibt, treten an einigen Stellen zusätzliche Strukturen, zunehmend mit fallender Pb-Bedeckung auf.

Die Analyse solch geringer Pb - Mengen auf dem Substrat erfordert einerseits eine hohe Ionendosis für jedes ISS - Spektrum, andererseits muß gewährleistet sein, daß die Zerstäubungseffekte innerhalb einer Meßserie (60 Spektren) klein bleiben. Aus diesem Grund ergab sich

1/20 m.l. Pb auf Ni als praktisch erreichbare untere Grenze für die Untersuchung der Oszillationen.

Für das Target Nr. 6 (Abb. 18) wurde die ⁴He⁺-Dosis pro ISS-Spektrum so gewählt, daß die feinen Strukturen noch mit hinreichender Meßgenauigkeit ($\sqrt{Z}/Z \approx 10\%$) aufgelöst werden konnten und der Vergleichstest nach der Meßserie bei $E_0 = 1000$ eV eine Abweichung $\approx 15\%$ ergab.

Eine erste quantitative Betrachtung galt der Frage, ob das Pb-Signal in den ISS-Spektren linear mit abnehmender Pb-Bedeckung (für Bedeckungen < 1 m.l.) fällt. Dazu wurden die experimentellen RBS-Werte für die Targets 2 bis 6 mit den absoluten Werten der normierten Pb-Peakhöhen Y_{Pb}^+ für bestimmte Primärenergien E_0 verglichen und in ein logarithmisches Koordinatensystem eingetragen (Abb. 19).

Im Falle der linearen Abhängigkeit ($Y_{Pb}^+ \sim N_{Pb}$, vergl. 2.1.2, S. 8) sollte die Verbindung der einzelnen Punkte

eine Gerade mit der Steigung 45° sein. Für die Y_{Pb}^+ -Werte bei Primärenergien der $^4\text{He}^+$ -Projektilionen, wo sich die Struktur der Oszillationen nicht mit dem Pb-Bedeckungsgrad ändert, z.B. für $E_0 = 500$ eV (Maximum), $E_0 = 900$ eV (Minimum) und $E_0 = 1020$ eV (Maximum) kann die Linearität bestätigt werden.

Diese Linearität beantwortet zum Teil auch die Frage nach der "Inselbildung" des Bleis auf dem Ni-Substrat und erlaubt den Schluß, daß Pb-"Inseln", falls sie existieren, eine 2-dimensionale Struktur haben müssen.

Perdereau, Szymerska /46/ und Bauer, Poppa /47/ beobachteten mit LEED (Low Energy Electron Diffraction) und AES (Auger Electron Spectroscopy) stabile Pb - Strukturen auf metallischen Substraten (z.B. Ni, Cu). Einige Pb - Strukturen für Pb - Bedeckungen kleiner $1/2$ m.l. blieben sogar bis 900 K stabil. Es kann deshalb angenommen werden, daß auch in diesem Experiment die Oszillationen bis zu einer Struktur von "isolierten" Pb - Atomen auf dem Ni - Substrat ($1/20$ m.l.) verfolgt werden konnten.

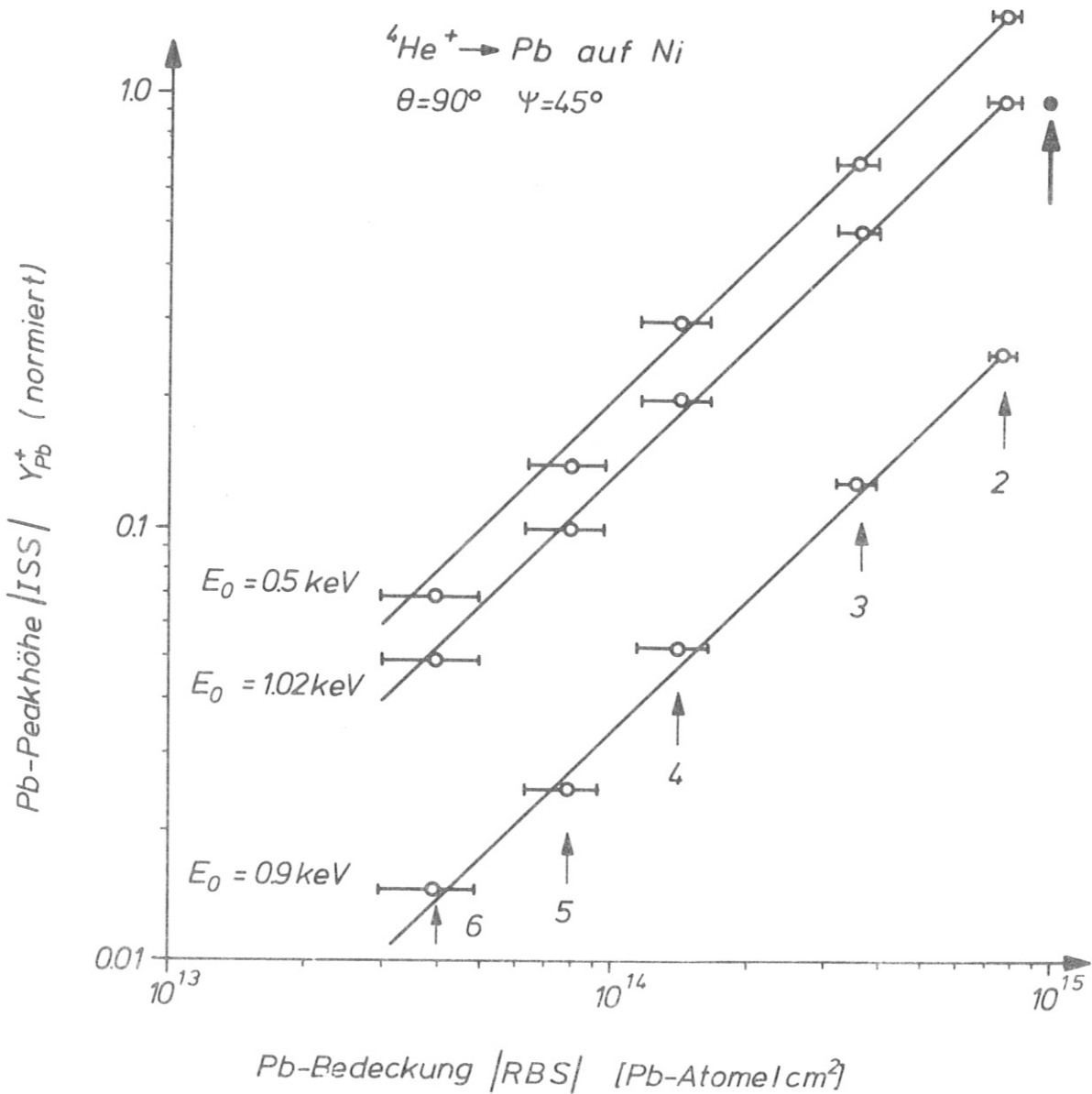


Abb. 19

Vergleich der RBS-Ergebnisse für die Targets 2,3,4,5,6 (Abb. 17, Abb. 18) mit den entsprechenden ISS-Ionenausbeuten (Y_{Pb}^+) bei $E_0 = 0.5$ keV, $E_0 = 1.02$ keV (Maxima) und bei $E_0 = 0.9$ keV (Minimum). Der Punkt mit dem Pfeil deutet eine perfekte, dichtgepackte Monolage Pb auf Ni $\approx 9 \cdot 10^{14}$ Pb-Atome/cm² an. Seine Ordinate wurde = 1 gesetzt. Die Ionenausbeuten wurden so skaliert, daß Y_{Pb}^+ beim Target Nr. 2 für $E_0 = 1.02$ keV ebenfalls = 1 wird.

Zu diesem Punkt werden weitere Meßergebnisse, Vergleiche der ISS-Substratsignale mit denen des Bleis für Pb-Bedeckungen unterhalb 1 Monolage, für das in situ-Aufdampfverfahren im Abschnitt 4.3, S. 53 vorgestellt.

4.2. 2. Experiment mit Atomstrahl

Die Ergebnisse im letzten Abschnitt (4.1) deuten auf den atomaren Charakter der Oszillationen und unterstützen die Annahme, daß der Elektronenaustausch nur zwischen den Stoßpartnern, Targetatom (Pb) und Projektilion (${}^4\text{He}^+$), stattfindet. Ein experimenteller Vergleich der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0 zwischen Oberflächenstreuung (4.1) und der Streuung an freien Pb-Atomen ist bisher noch nicht durchgeführt worden.

In diesem Abschnitt werden Meßergebnisse für ein "crossed-beam"-Experiment beschrieben, bei dem ${}^4\text{He}^+$ -Ionen an einem Pb-Atomstrahl (vergl. 3.3) gestreut wurden.

Die Energieverteilung der an den Pb-Atomen im Strahl gestreuten ${}^4\text{He}^+$ -Ionen wurde unter ähnlichen Streubedingungen ($\theta = 90^\circ$, vergl. Abb. 13, S. 27) gemessen. Reproduzierbare Ergebnisse von Meßserien im Bereich $250 \text{ eV} < E_0 < 1000 \text{ eV}$ liegen vor. Eine Ausdehnung dieses Bereiches zu kleineren Projektilenergien scheiterte bisher am zu geringen ${}^4\text{He}^+$ -Ionenstrom (I_0 , Abb. 15, S. 34) den die Elektronenstoßionenquelle für $E_0 < 250 \text{ eV}$ nur liefern kann, und den daraus folgenden langen Meßzeiten pro Rückstreupektrum. Bei höheren Primärenergien ($E_0 > 1000 \text{ eV}$) traten ähnliche Schwierigkeiten auf, da das Absinken des differentiellen Streuquerschnitts $d\sigma/d\Omega$ mit steigender Energie E_0 (vergl. Abb. 46, S. 92) ebenfalls zu einer Verlängerung der Meßzeit zwingt.

In dem Energiebereich $250 \text{ eV} < E_0 < 1000 \text{ eV}$ konnten auch bei der Streuung am Pb-Atomstrahl deutliche Oszillationen nachgewiesen werden (Abb.20).

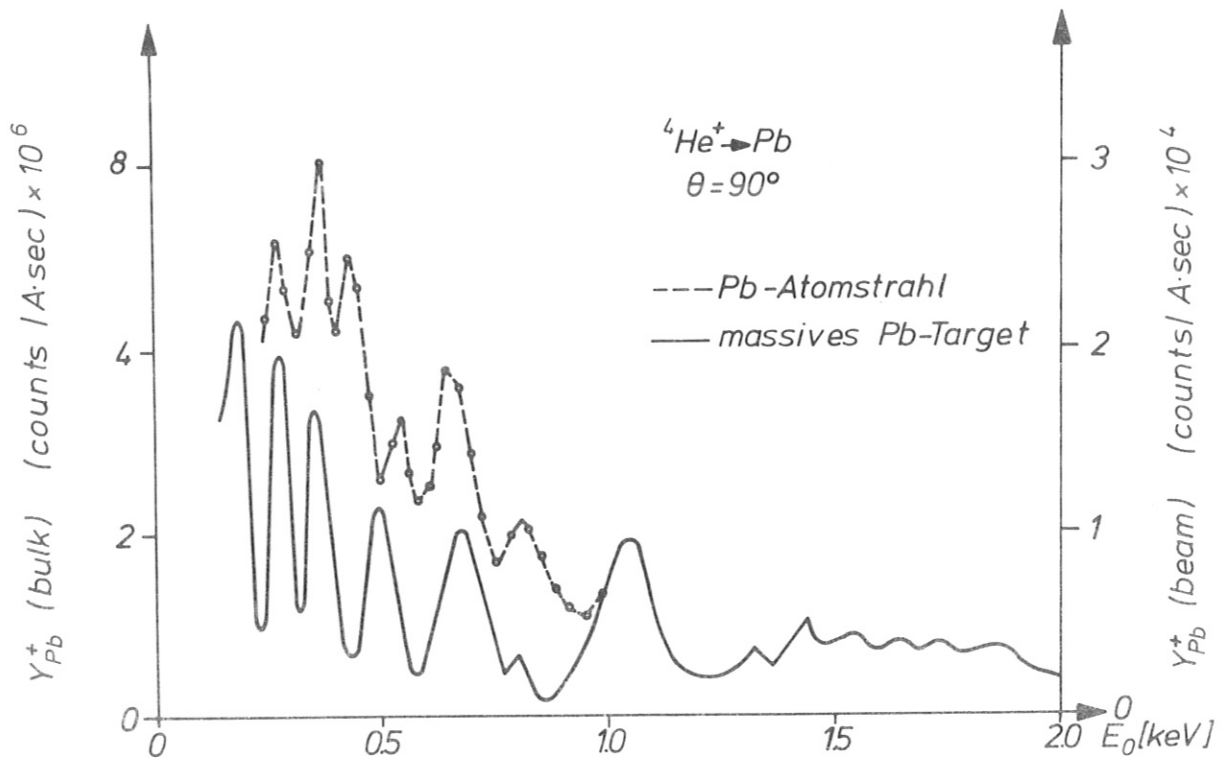


Abb. 20

Vergleich der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Primärenergie E_0 am massiven Pb-Target (linke Skala "bulk") mit den Resultaten für den Pb-Atomstrahl (rechte Skala "beam")

Der statistische Fehler in der Ordinate (Y_{Pb}^+) jedes Meßpunktes war kleiner 5 % (\sqrt{Z}/Z). Die pro Spektrum geschossene Ladung wurde mit einem Auffänger (Abb. 12, S. 25) nach der gleichen Methode wie bei den Festkörpertarget-Experimenten gemessen (Abb. 14, S. 32) und ebenso die Normierung nach 3.1.3, S. 22, durchgeführt. Um den gleichmäßigen Betrieb des Atomstrahls überwachen zu können, wurde nach 5 Spektren bei verschiedenen Energien E_0 immer ein Vergleichsspektrum bei $E_0 = 1000$ eV aufgenommen. Die Abweichungen der Pb-Peakhöhen in den Vergleichsspektren voneinander entsprachen dem statistischen Fehler (≈ 5 %). Eine nahezu konstante Dichte der Pb-Atome im Streuvolumen über die gesamte Meßzeit einer Serie (30 Meßpunkte) hinweg kann deshalb angenommen werden.

In Abb. 20 sind die Ergebnisse einer Meßreihe in linearem Maßstab eingetragen (rechte Skala: Y_{Pb}^+ -beam) und den Ergebnissen für ein massives Pb-Target (vergl. 4.1) gegenübergestellt (linke Skala: Y_{Pb}^+ -bulk).

Beim Vergleich der Energieverteilung rückgestreuter $^4\text{He}^+$ -Ionen zwischen Oberflächenstreuung (massives Pb-Target) und Streuung an freien Pb-Atomen (Atomstrahlexperiment) bei jeweils derselben Projektilenergie E_0 fällt auf, daß die Energieverteilung für $E_r/E_0 < 0.962$ bei der Streuung am Atomstrahl langsamer abklingt als bei der Streuung am massiven Pb-Target. Vier Beispiele hierzu sind in Abb. 21 zusammengestellt.

Dieser Effekt trat im ersten Experiment (4.1) - auch bei niedrigen Pb-Bedeckungen - nicht auf.

Die Peakmaxima liegen immer sehr gut bei dem theoretischen Wert $E_1/E_0 = 0.962$, den das Zweierstoßmodell (vergl. 3.1.1), S. 20) liefert. Die leichte Peakverbreiterung für $E_r/E_0 <$

0.962 ist ein Maß für den erhöhten Fehler im Streuwinkel Θ , der durch die Streugeometrie beim Atomstrahl-Experiment bestimmt ist und in 4.5 abgeschätzt wird.

Die Peakverbreiterungen für $E_r/E_0 < 0.962$ übertreffen diesen apparativ bedingten Fehler deutlich. Sie geben einen Hinweis auf inelastische Neutralisationsprozesse bei der Oberflächenstreuung (Auger-Neutralisation, vergl. Abb. 3 , S. 7).

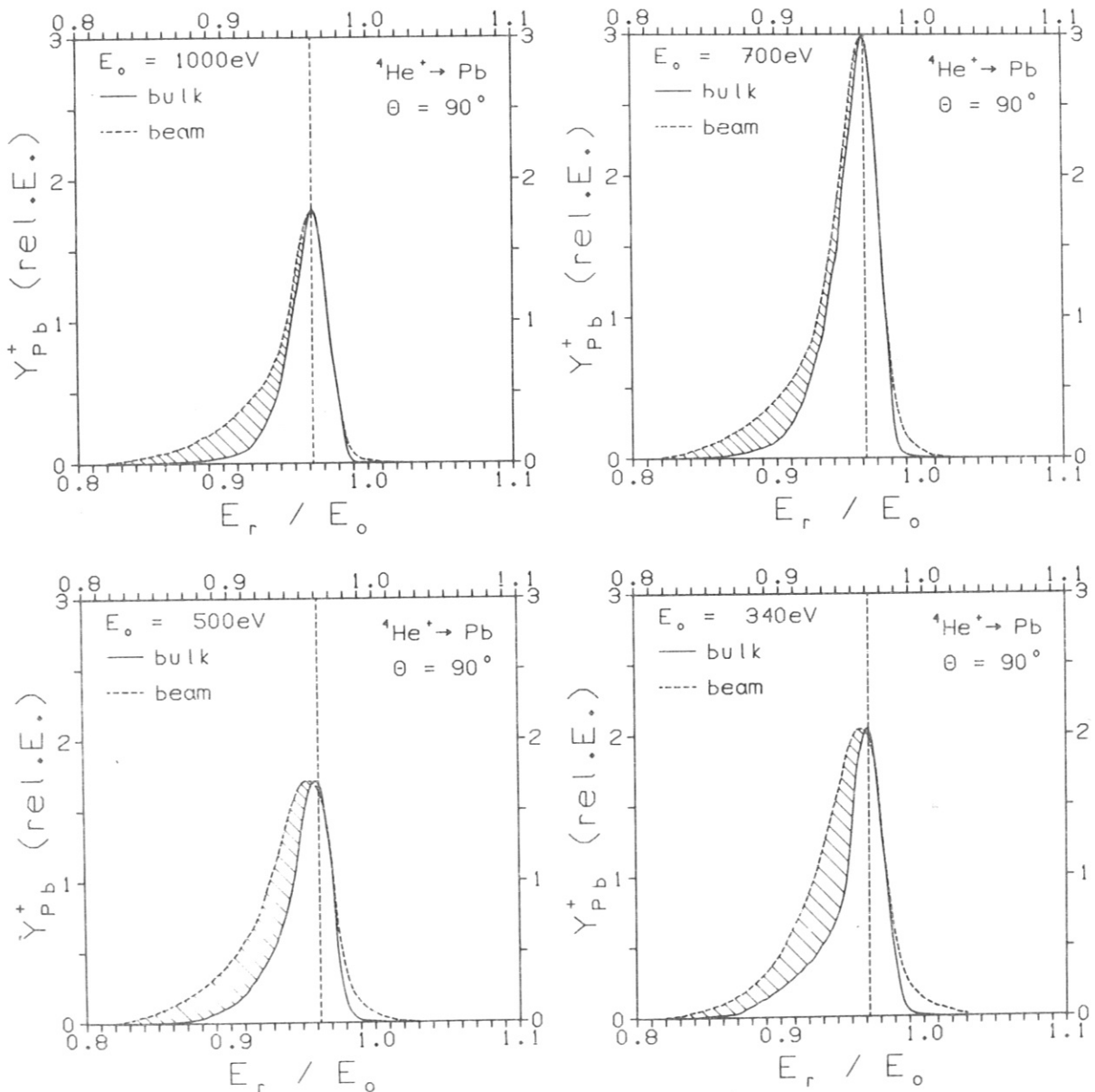


Abb. 21

Vergleich der ISS-Spektren bei verschiedenen Primärenergien E_0 zwischen massivem Pb-Target (bulk) und Pb-Atomstrahl (beam). Y_{Pb}^+ (beam) ist so skaliert, daß die Peakhöhe mit dem bulk-Resultat übereinstimmt. Der Unterschied auf der inelastischen Seite ($E_r/E_0 < 0.962$) ist schraffiert.

Die Peakintegrale nach Abb. 21 wurden ausgewertet und sind in Abb. 22 als Funktion der Projektilenergie dargestellt. In derselben Abbildung ist die Differenz zwischen den beiden Peakintegralen (in Abb. 21 schraffiert) eingezeichnet. Die Unterschiede in den Neutralisationsprozessen auf der inelastischen Seite ($E_r/E_0 < 0.962$) für Oberflächenstreuung und Streuung an freiem Pb-Atom nehmen demnach mit wachsender Projektilenergie ab.

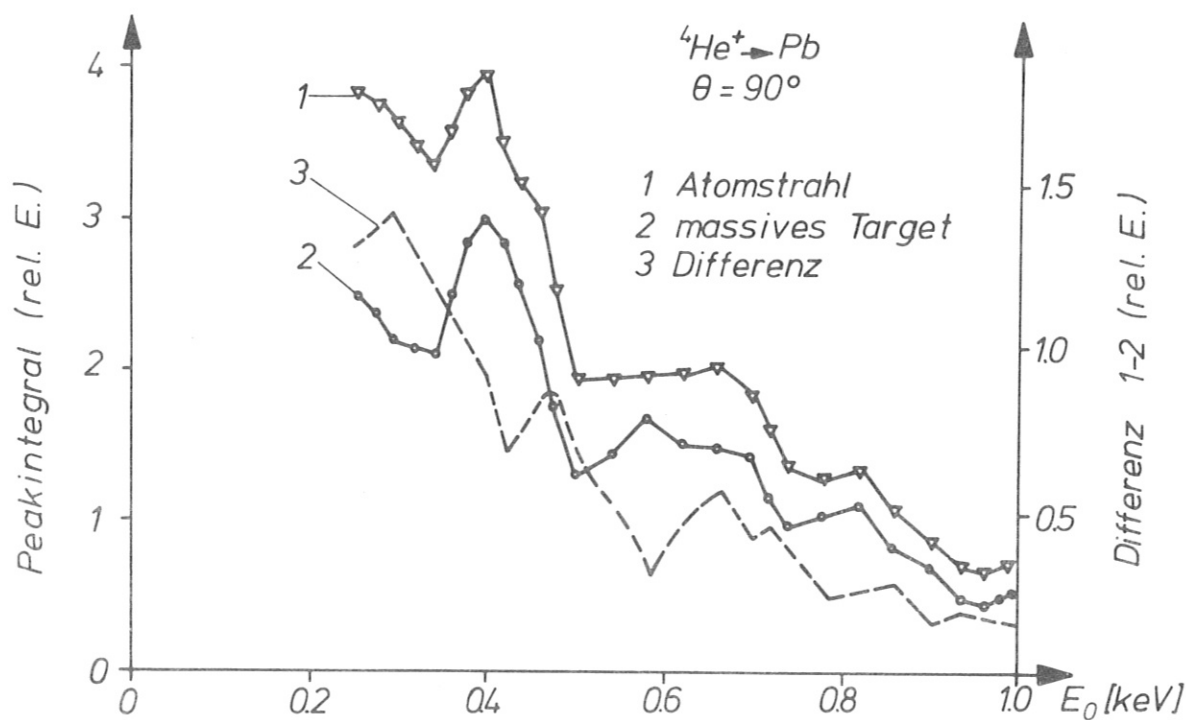


Abb. 22

Auswertung der ISS-Peakintegrale für das massive Pb-Target und den Pb-Atomstrahl (linke Skala). Für die Differenz (3) gilt die rechte Skala.

Einen zusammenfassenden Überblick der Meßergebnisse aus 4.1 und 4.2 gibt Abb. 23. Hier ist die Ordinate (Ionen- ausbeute Y_{Pb}^+) logarithmisch über E_0 aufgetragen und die Oszillationen, gemessen an zwei Ni-Substraten mit geringer

Pb-Bedeckung (1/3 m.l. und 1/10 m.l.) und am Pb-Atomstrahl, sind einander gegenübergestellt.

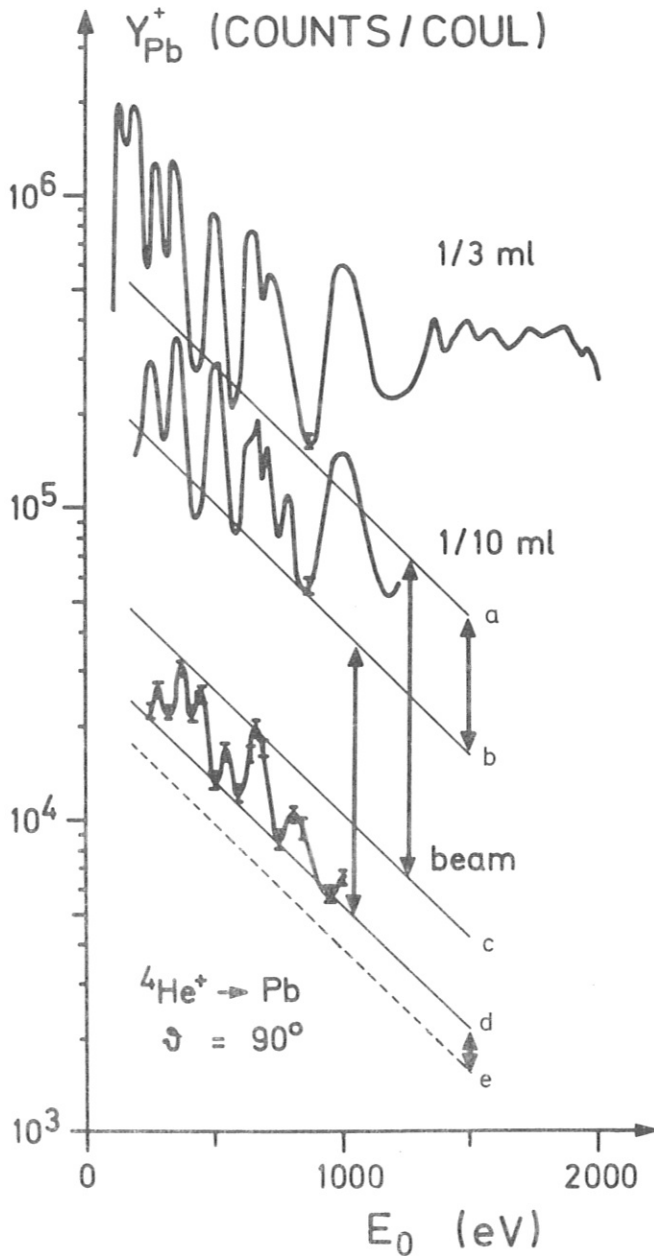


Abb. 23

Halblogarithmische Darstellung der Y_{Pb}^+ Oszillationen als Funktion der Projektilenergie E_0 .

Die Amplituden beim Pb-Atomstrahl (beam) sind kleiner als die Amplituden bei den Pb-Ni-Targets

Auffallend ist, daß die Oszillationen am Pb-Atomstrahl nur etwa $3/4$ so groß sind wie am massiven Pb-Target oder an den Pb-Ni-Targets.

In 4.1 konnte die Linearität $Y_{Pb}^+ \sim N_{Pb}$ bei bestimmten Projektilenergien E_0 durch Vergleichsmessungen mit RBS bestätigt werden. Im Folgenden wird abgeschätzt, ob diese Linearität auch auf das Atomstrahlexperiment extrapoliert werden kann, wenn mit der absoluten Zahl der Pb-Streuzentren gerechnet wird:

Beim Atomstrahl ist dies die Zahl der Pb-Atome N_S im Streuvolumen. Nach der Abschätzung und der Messung in 3.3, S. 28, kann $N_S = 4 \times 10^{11}$ Pb-Atome angenommen werden. Für dünne Pb-Belegungen auf dem Ni-Substrat ergibt sich diese Zahl direkt aus der RBS-Analyse und der Kenntnis der Targetfläche, die vom Ionenstrahl getroffen wird (vergl. Abb. 10, S. 20). Für die Pb-Belegung (Nr. 5 in Abb. 19) entsprechend $\approx 1/10$ Monolage Pb ist $N_S = 8 \times 10^{13}$ Pb-Atome/cm² \times 0.056 cm² = 4.5×10^{12} Pb-Atome. Der Quotient aus der Ionenausbeute und der absoluten Zahl der Streuzentren (Y_{Pb}^+/N_S) sollte für Meßpunkte gleicher Energie E_0 bei Atomstrahl- und Festkörpertargetexperiment identisch sein, wenn $Y_{Pb}^+ \sim N_S$ gilt. Für einige Maxima beim Atomstrahlexperiment kann man $Y_{Pb}^+ \sim N_S$ bestätigt finden, so z.B. bei $E_0 = 360$ eV:

Experiment:	Y_{Pb}^+ Counts/Coul	N_S Pb-Atome	Y_{Pb}^+/N_S Counts/Coul. Pb-Atome	keine Abweichung $Y_{Pb}^+ \sim N_S$
Atomstrahl	3.2×10^4	4×10^{11}	8×10^{-8}	
1/10 m.l.	3.6×10^5	4.5×10^{12}	8×10^{-8}	

Die Minima sind jedoch beim Atomstrahl deutlich angehoben, z.B. bei $E_0 = 570$ eV:

Experiment:	Y_{Pb}^+ Counts/Coul	N_S Pb-Atome	Y_{Pb}^+/N_S Counts/Coul. Pb-Atome	Anhebung d. Minimums beim Atom- strahl um + 27 % gegenüber
Atomstrahl	1.1×10^4	4×10^{11}	2.75×10^{-8}	
1/10 m.l.	9×10^4	4.5×10^{12}	2×10^{-8}	$Y_{Pb}^+ \sim N_S$

In Abb. 23 ist dieser Effekt durch die Geraden (a-e) angedeutet. Während sich die Gerade c, die die Lage der Maxima beim Atomstrahlexperiment charakterisieren soll, in guter Näherung nach $Y_{Pb}^+ \sim N_S$ aus der Geraden a, der charakteristischen Lage der Maxima beim Festkörpertarget-Experiment (1/10 m.l.), ermitteln läßt, ist der Abstand b-d für die Minima kleiner als nach $Y_{Pb}^+ \sim N_S$ zu erwarten wäre (b-e). Für die Minima bedeutet dies, daß die Wahrscheinlichkeit für ein ${}^4\text{He}^+$ -Ion, bei der Streuung an einem freien Pb-Atom der Neutralisation zu entkommen, größer ist als bei der Oberflächenstreuung.

Der Unterschied d-e in Abb. 23 beträgt $\approx 25\%$ des Gesamteffektes für Festkörpertarget-Experimente a-b und entspricht dem Unterschied in den Peakintegralen nach Abb. 22.

Im Abschnitt 6.2 wird auf diesen Effekt näher eingegangen und die Deutung durch einen unterschiedlichen Beitrag der "Auger-Neutralisation" bei der Streuung am freien Pb-Atom und bei der Oberflächenstreuung vorgeschlagen.

4.3. Drittes Experiment mit verschiedenen Substraten

Wie die letzten beiden Abschnitte zeigen, ist der oszillatorische Verlauf der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0 sowohl bei der Oberflächenstreuung bis zu Pb-Belegungen $\leq 1/20$ m.l. auf dem Ni-Substrat (4.1) als auch bei der Streuung an freien Pb-Atomen (4.2) nachweisbar.

Die Meßergebnisse in 4.1 und 4.2 deuten einerseits darauf hin, daß die energetisch tiefer liegenden Pb(5d)-Elektronen maßgeblich an dem Elektronenaustausch beteiligt sind, andererseits geben die zusätzlichen Strukturen, zunehmend mit fallender Pb-Bedeckung bei der Oberflächenstreuung (S. 41) sowie die Unterschiede zwischen Oberflächenstreuung und Streuung an freien Pb-Atomen (S. 46) Anlaß, den Einfluß der Elektronen im Leitungsband auf die Oszillationen näher zu untersuchen.

In diesem Experiment wurde in situ auf verschiedene Substrate unterschiedlicher Bandstruktur mit dem auf S. 22 beschriebenen Ofen Pb gedampft und gleichzeitig beide ISS-Signale, Y_{Substrat}^+ und Y_{Pb}^+ , als Funktion der Projektilenergie E_0 aufgezeichnet. Verglichen mit dem ersten Experiment, in dem nur der Pb-Rückstreupeak verfolgt wurde, erfordern diese Messungen bei gleichem statistischem Fehler die doppelte Ionendosis pro ISS-Spektrum. Um die störenden Zerstäubungseffekte klein zu halten, wurde hier der Primärenergiebereich auf $100 \text{ eV} < E_0 < 1000 \text{ eV}$ beschränkt, in dem die wichtigsten Details der Y_{Pb}^+ -Oszillationen liegen.

Als Substrate wurden hochreine, polykristalline Scheiben aus Al, Cu, Ni und ein schwach n-Phosphor dotierter Si (111)-Kristall ($N_D \approx 10^{15}/\text{cm}^3$) verwendet. Die Wahl der Substrate ergab sich aus den Forderungen, daß die Substrate selbst keine Oszillationen zeigen sollen, ihre ISS-Rückstreupeaks gut von dem Pb-Peak aufgelöst werden

können (vergl. Abb. 11 , S. 21 $M_2 < 90$), ihre Bandstruktur unterschiedlich ist (vergl. Anhang Abb. 61 S. 118) und daß sie im UHV gut präparierbar sind (Ausheizen und sputtercleaning).

Aluminium gilt als Vertreter eines "einfachen" Metalls, seine Zustandsdichte im 3 s/p-Band läßt sich gut mit dem Modell des freien Elektronengases beschreiben. Nickel und Kupfer haben annähernd die gleiche 3d-Bandstruktur, nur liegt beim Kupfer die Fermigrenze im 4s-Band. Beim Silizium Einkristall sind das Leitungs- und das Valenzband getrennt. Die gap-Breite beträgt für diese Dotierung ($N_D \approx 10^{15}/\text{cm}^3$) etwa 0.8 eV.

Ni als Substrat:

Auch bei den in-situ-Aufdampfexperimenten mit Ni-Substraten findet man den linearen Zusammenhang $Y_{\text{Pb}}^+ \sim N_{\text{Pb}}$ für Pb-Belegungen < 1 m.l. bestätigt (vergl. 4.1, S. 37).

Ein typisches Meßergebnis zeigt Abb. 24. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wurde die Abdeckung vor dem Ofen weggeschwenkt (vergl. Abb. 8, S. 18) und mit konstanter Rate Pb auf das Ni-Substrat gedampft. In jeder Minute wurde ein ISS-Spektrum im Bereich $0.5 < E_r/E_0 < 1.0$ aufgenommen. Nach einer kurzen Anlaufphase nimmt der Rückstreupeak des Substrates linear ab und der Pb-Peak linear bis zu einem "Sättigungspunkt" zu. Weitere Aufdampfversuche mit anschließender RBS-Analyse ergaben, daß dieser Sättigungspunkt bei einer Pb-Bedeckung von 10^{15} Pb-Atomen/ cm^2 (etwa 1 m.l.) erreicht wird, der dann als Eichmarke für die quantitative Oberflächenanalyse mit ISS gut verwendet werden kann.

Die stetige Abnahme des Substratpeaks bis auf Null in Abb. 24 läßt auf eine gleichmäßige Pb-Belegung schließen

und zeigt, daß beim System Pb auf Ni keine Inselbildung bis zu einer Pb-Belegung von 3×10^{15} Pb-Atomen/cm² (etwa 3 m.l.) auftritt.

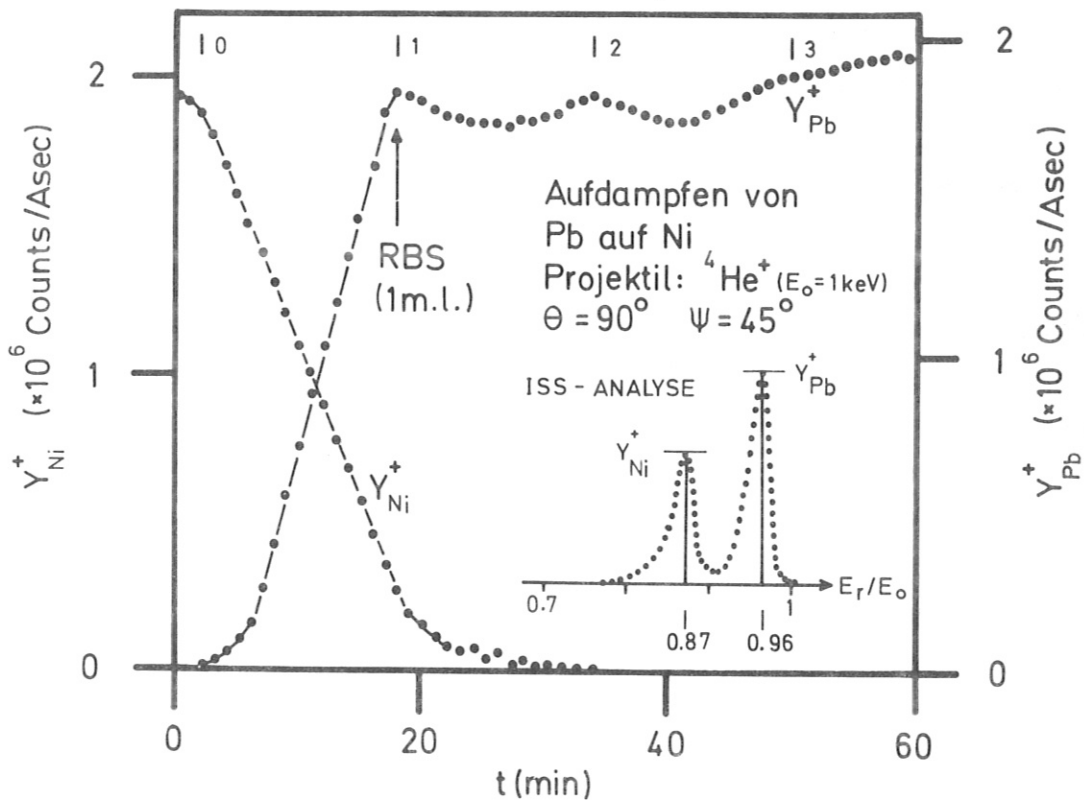


Abb. 24

Aufdampfen von Pb auf ein reines polykristallines Ni-Substrat. Bei der ISS-Analyse wurde der Substratpeak (Y_{Ni}^+) und der Pb-Peak (Y_{Pb}^+) gleichzeitig verfolgt. Die RBS-Analyse für Targets, die bis zum "Sättigungspunkt" (Pfeil) bedampft wurden, ergab eine Pb-Belegung von $\approx 10^{15}$ Pb-Atome/cm² (etwa 1 Monolage). Unter der Voraussetzung, daß Pb mit konstanter Rate aufgedampft wurde, läßt sich eine in Pb-Monolagen geeichte Skala (m.l.) einzeichnen.

Die typischen Pb-Inseln auf Ni, die in REM-Aufnahmen bei ≈ 20 nm Pb-Schichtdicke deutlich zu sehen sind (vergl. Anhang Abb. 60 , S.117), scheinen sich demnach erst ab einer Pb-Bedeckung von mehreren Monolagen auszubilden.

Mit Hilfe der Erfahrungen aus den Aufdampfversuchen gelang es, in situ Ni-Substrate mit Pb-Bedeckungen zwischen $1/20$ m.l. und 1 m.l. zu präparieren. Der Vergleich der Ionenausbeuten Y_{Pb}^+ für die in situ präparierten Ni-Substrate mit den Ergebnissen aus 4.1 ergab gute Übereinstimmung.

Überraschend war das Ergebnis für die Ionenausbeuten des Substrats Y_{Ni}^+ (Abb. 25). Während Y_{Ni}^+ für ein sauberes Ni-Target einen strukturlosen Verlauf zeigt, (gepunkte Kurve in Abb. 25) entstehen deutliche Oszillationen, wenn man Pb auf Ni dampft. Die Struktur der Oszillationen für Y_{Ni}^+ , die Amplitude und die Lage der Maxima und Minima sind - im Gegensatz zu Y_{Pb}^+ - stark vom Pb-Bedeckungsgrad abhängig.

Dieser Effekt ist bisher noch nicht beobachtet worden. Er wird hier erstmals beschrieben und seine Deutung in Abschnitt 6.3 durch ein Mehrfachstreuomodell vorgeschlagen.

Besonders deutlich ist dieser Effekt am Ni-Substrat bei etwa $1/2$ m.l. Pb-Bedeckung (Abb. 25). Er konnte an mehreren in situ präparierten Ni-Substraten gut reproduziert werden. Für $1/2$ m.l. Pb-Bedeckung ist der Effekt der Oszillationen von Y_{Ni}^+ vergleichbar mit dem von Y_{Pb}^+

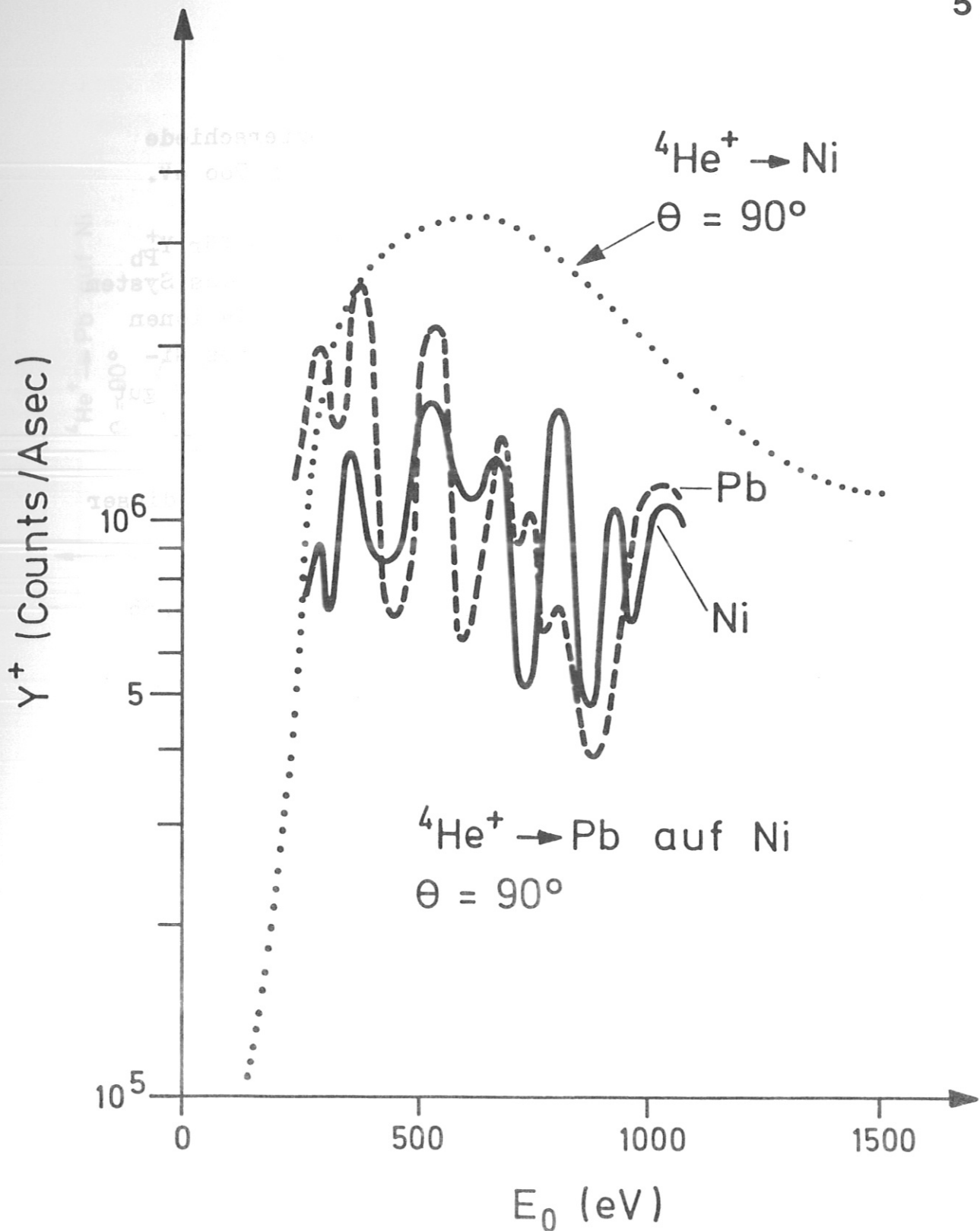


Abb. 25

Y_{Pb}^+ und Y_{Ni}^+ als Funktion der Primärenergie E_0 .

Auf das Ni-Substrat wurde in situ etwa eine halbe Monolage Pb gedampft. Der Verlauf der Ionenausbeute für das reine Ni-Substrat ist gepunktet eingezeichnet.

(Maximum 800 eV/Minimum 750 eV \approx 4). Unterschiede zwischen Y_{Ni}^+ und Y_{Pb}^+ ergeben sich für $E_0 < 700$ eV.

In Abb. 26 und Abb. 27 sind die Meßergebnisse für Y_{Pb}^+ bzw. Y_{Ni}^+ in Abhängigkeit der Pb-Bedeckung für das System Pb auf Ni dargestellt. Die Änderung der Oszillationen für Y_{Ni}^+ und der Übergang zur Kurve 5 (ein reines Ni-Target) bei fallender Pb-Bedeckung sind in Abb. 27 gut erkennbar.

Auch für die anderen Substrate (Si, Al, Cu) wurde dieser Effekt systematisch in der Reihenfolge

- in situ-Aufdampfexperimente analog Abb. 24, S. 55
- RBS-Analyse zur Eichung im Sättigungspunkt
- ISS-Analyse des Zweistoffsystems bei verschiedenen Pb-Belegungen

untersucht.

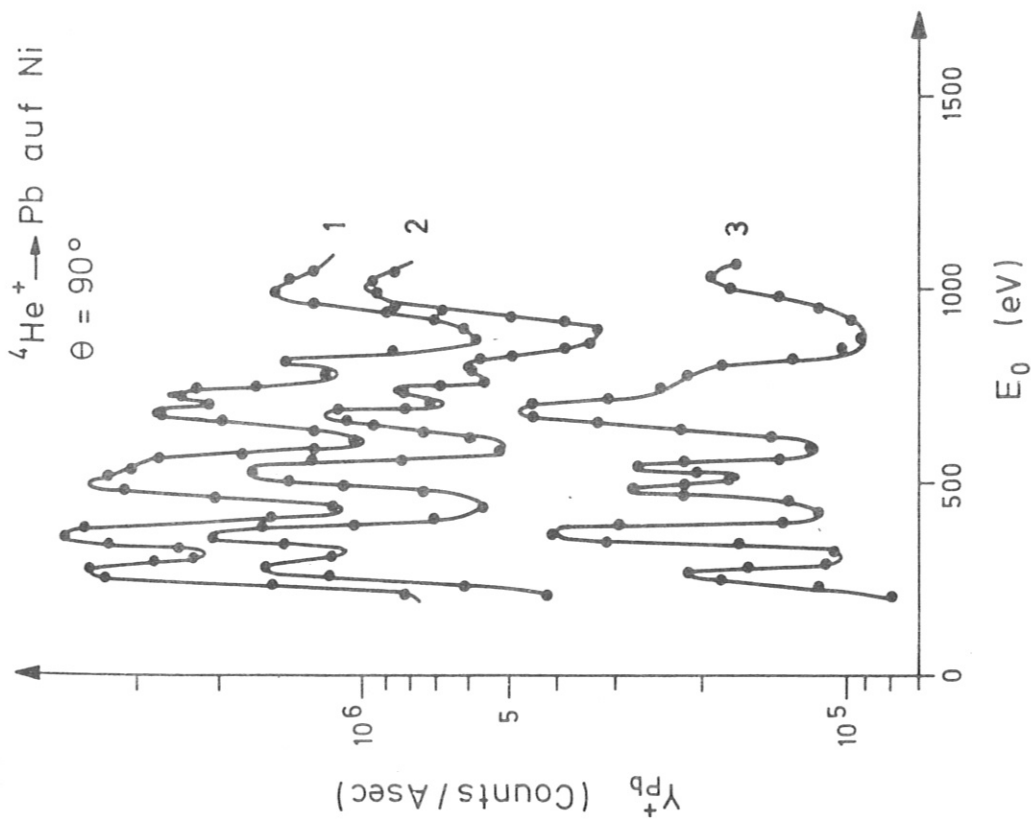


Abb. 26 Y_{Pb^+} als Funktion der Primärenergie E_0 für verschiedene Pb - Bedeckungen (1 m.l. entspricht 1 Monolage Pb auf Ni $\approx 9 \cdot 10^{14}$ Pb-Atome/cm²)
1..0,8 m.l.Pb auf Ni 2..0,5 m.l.Pb auf Ni
3..0,1 m.l.Pb auf Ni

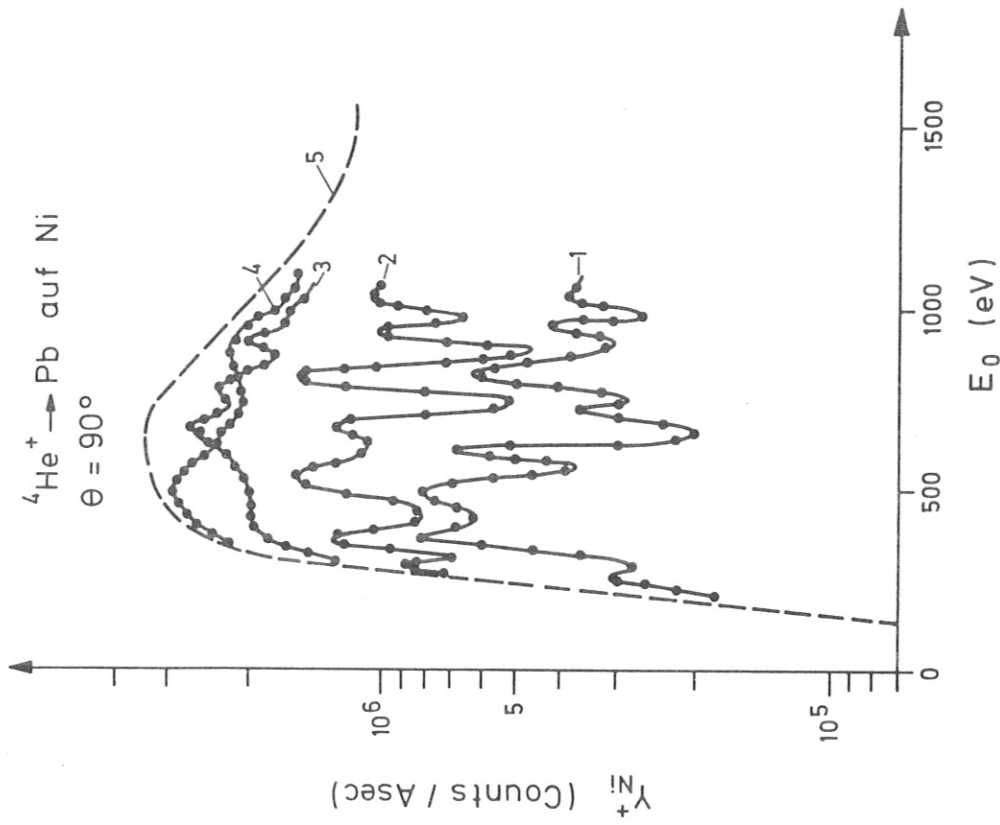


Abb. 27 Y_{Ni^+} als Funktion der Primärenergie E_0 für verschiedene Pb - Bedeckungen.
1..0,8 m.l.Pb auf Ni 2..0,5 m.l.Pb auf Ni
3..0,1 m.l.Pb auf Ni 4..0,05m.l.Pb auf Ni
5.....reines Ni - Target

Si (111) als Substrat:

Aufdampfexperimente mit Si als Substrat (Abb. 28) legen nahe, daß sich inselartige Pb-Strukturen bereits bei kleineren Pb-Bedeckungsgraden als bei Ni-Substrat bilden. Zwar steigt Y_{Pb}^+ bis zum Sättigungspunkt (mit RBS wurden 10^{15} Pb-Atome/cm², etwa 1 m.l., ermittelt) weitgehend linear an, doch sinkt Y_{Si}^+ in diesem Bereich nicht auf Null ab. Weiteres Aufdampfen von Pb führt zu einem Absinken von Y_{Pb}^+ und ist ein Hinweis, daß sich Pb-Atome auf der Si-Oberfläche zusammenziehen und bestimmte Strukturen bilden, oder aber sich der metallische Charakter der Oberfläche durch zusätzliche Auger - Neutralisation bemerkbar macht.

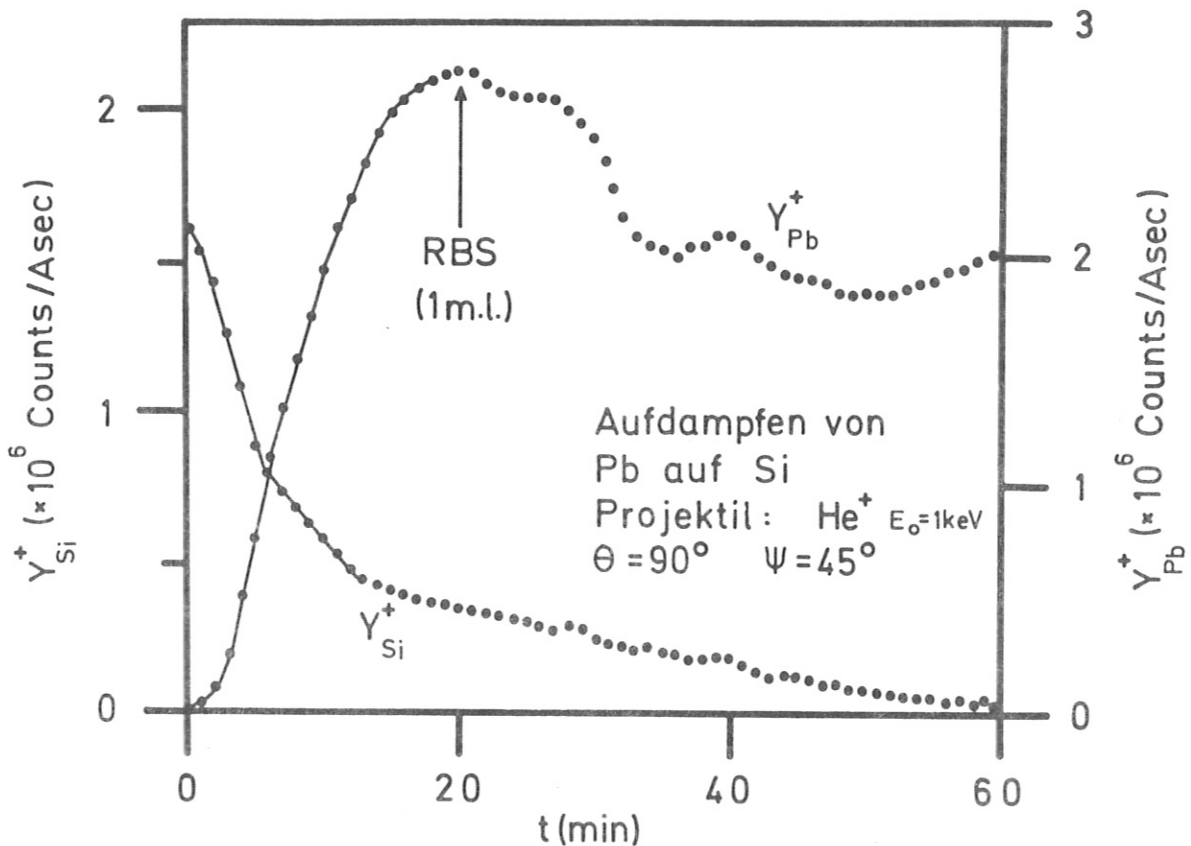


Abb. 28

Aufdampfen von Pb auf einen reinen Si-Einkristall (111). Bei einem bis zum Sättigungspunkt mit Pb bedampften Target wurde anschließend eine RBS-Analyse durchgeführt, nach der sich eine Pb-Bedeckung von $\approx 10^{15}$ Pb-Atome/cm² (etwa 1 Monolage) ergab. Die Ionenausbeute Y_{Pb}^+ ist jedoch größer als beim massiven Pb - Target (im Sättigungspunkt) oder bei der Adsorption von Pb auf Ni (Abb. 24, S.55). Das Absinken von Y_{Pb}^+ kann als Hinweis dafür angesehen werden, daß die Oberfläche zunehmend metallischen Charakter annimmt. (Auger - Neutralisation)

Abb. 29 zeigt die ISS-Analyse während eines Aufdampf-
vorgangs bei der ${}^4\text{He}^+$ -Ionen der Energie $E_0 = 700 \text{ eV}$
eingesetzt wurden.

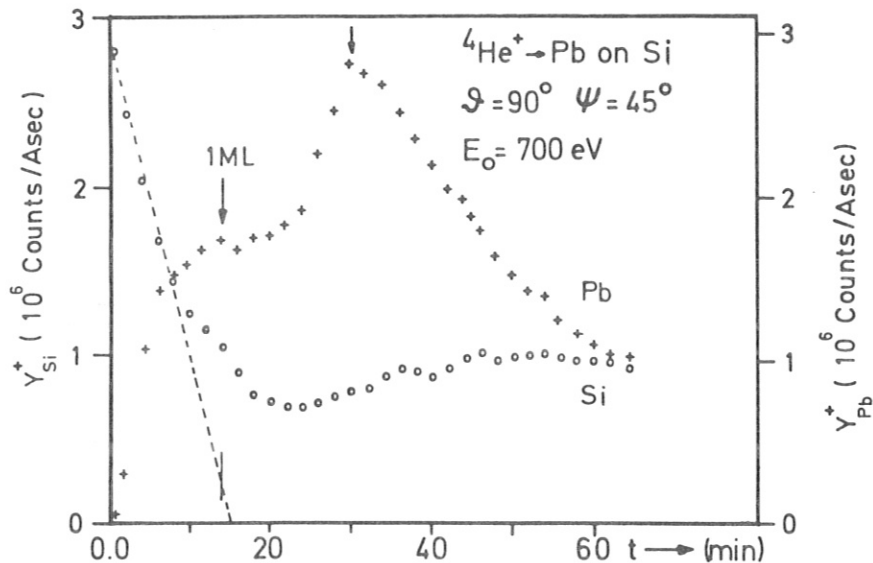


Abb. 29

Aufdampfen von Pb
auf Si und ISS-
Analyse mit ${}^4\text{He}^+$
bei $E_0 = 700 \text{ eV}$.

Der Verlauf von Y_{Si}^+ und Y_{Pb}^+ während des darauffolgenden
Zerstäubens als Funktion der aufs Target geschossenen
Ladung ist in Abb. 30 dargestellt. Offensichtlich ent-
stehen beim Zerstäuben ähnliche Pb-Strukturen, die durch
die 2 Maxima in Y_{Pb}^+ charakterisiert sind. Y_{Si}^+ nimmt
jedoch beim Zerstäuben stetig zu, d.h. die Pb-Inseln
werden gleichmässig abgetragen.

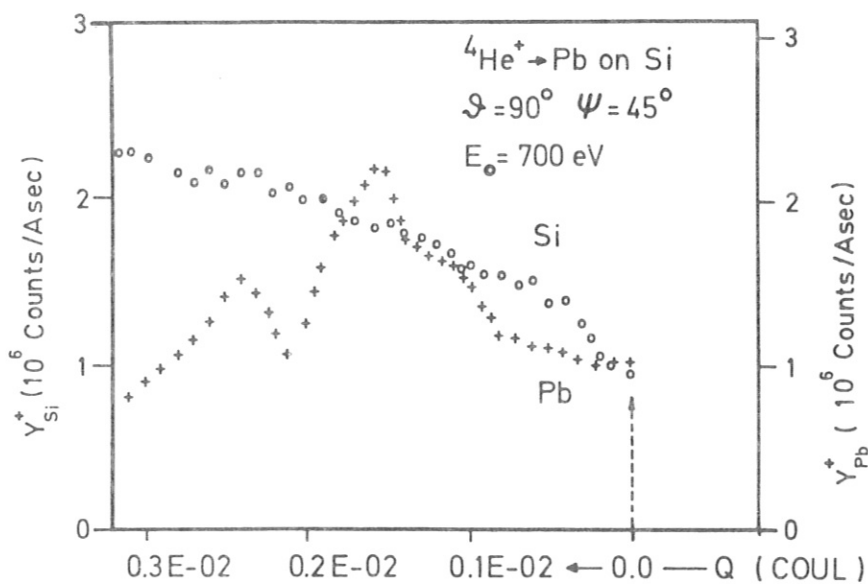


Abb. 30

Zerstäuben des prä-
parierten Targets
(Abb. 29) durch ${}^4\text{He}^+$
-Ionen in Abhängig-
keit der Ionendosis.
Die ISS-Analyse wurde
ebenfalls mit ${}^4\text{He}^+$
bei $E_0 = 700 \text{ eV}$ durch-
geführt.

Die ISS-Analyse für Pb-Belegungen $< 1 \text{ m.l.}$ auf dem
Si-Substrat ist in Abb. 31 (für Y_{Pb}^+) und in Abb. 32
(für Y_{Si}^+) wiedergegeben.

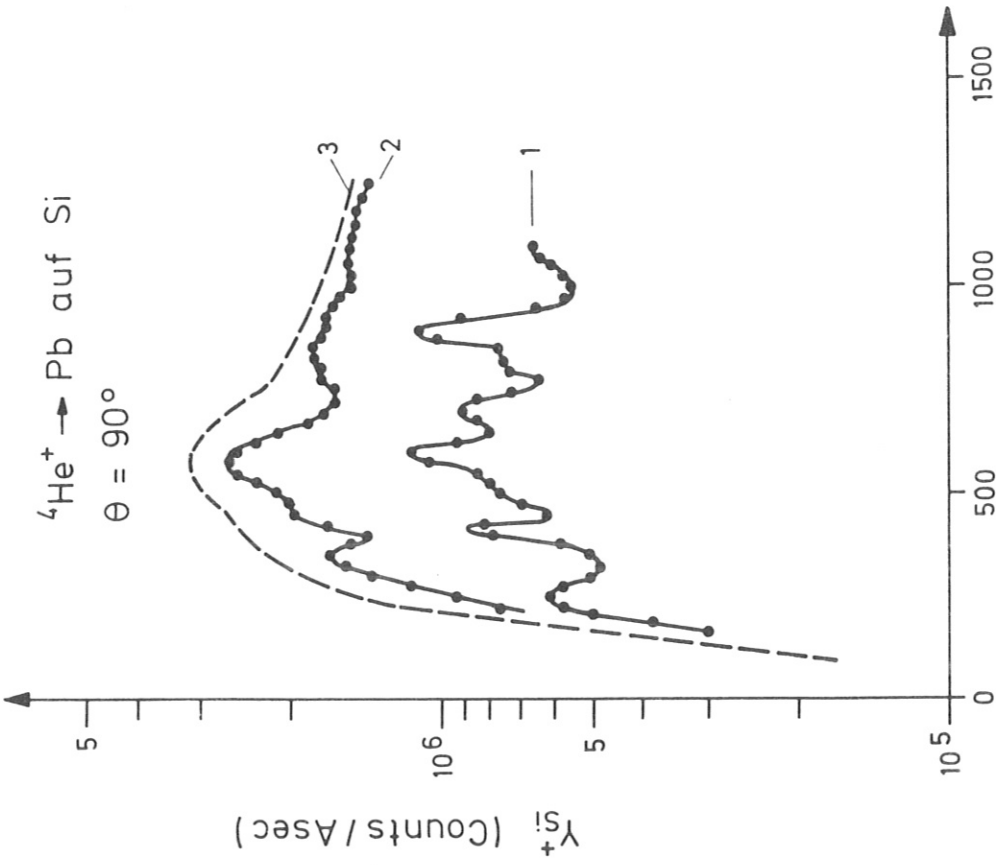


Abb. 32

Y_{Si}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0

- 1 ... 1/2 Monolage Pb auf Si
- 2 ... 1/10 Monolage Pb auf Si
- 3 ... reines Si-Substrat

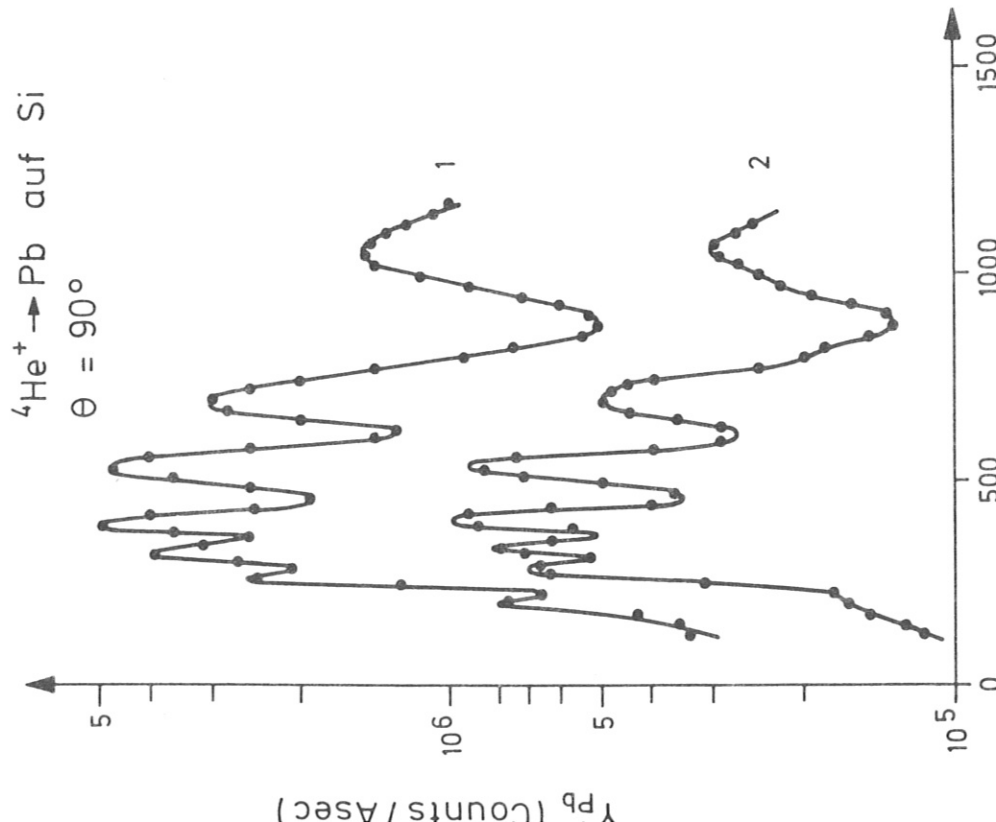


Abb. 31

Y_{Pb}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0

- 1 ... 1/2 Monolage Pb auf Si
- 2 ... 1/10 Monolage Pb auf Si

Al als Substrat:

Auch hier geben Aufdampfexperimente (Abb. 33) Hinweise für inselartige Pb-Strukturen auf der Substratoberfläche. Das Substratsignal Y_{Al}^+ sinkt nicht ganz auf Null ab und Y_{Pb}^+ zeigt bei ≈ 2 m.l. Pb-Bedeckung ein kleines Minimum.

Das Ergebnis der ISS-Analyse für Pb-Bedeckungen < 1 m.l. auf dem Al-Substrat geht aus Abb. 34 (Y_{Pb}^+) und Abb. 35 (Y_{Al}^+) hervor.

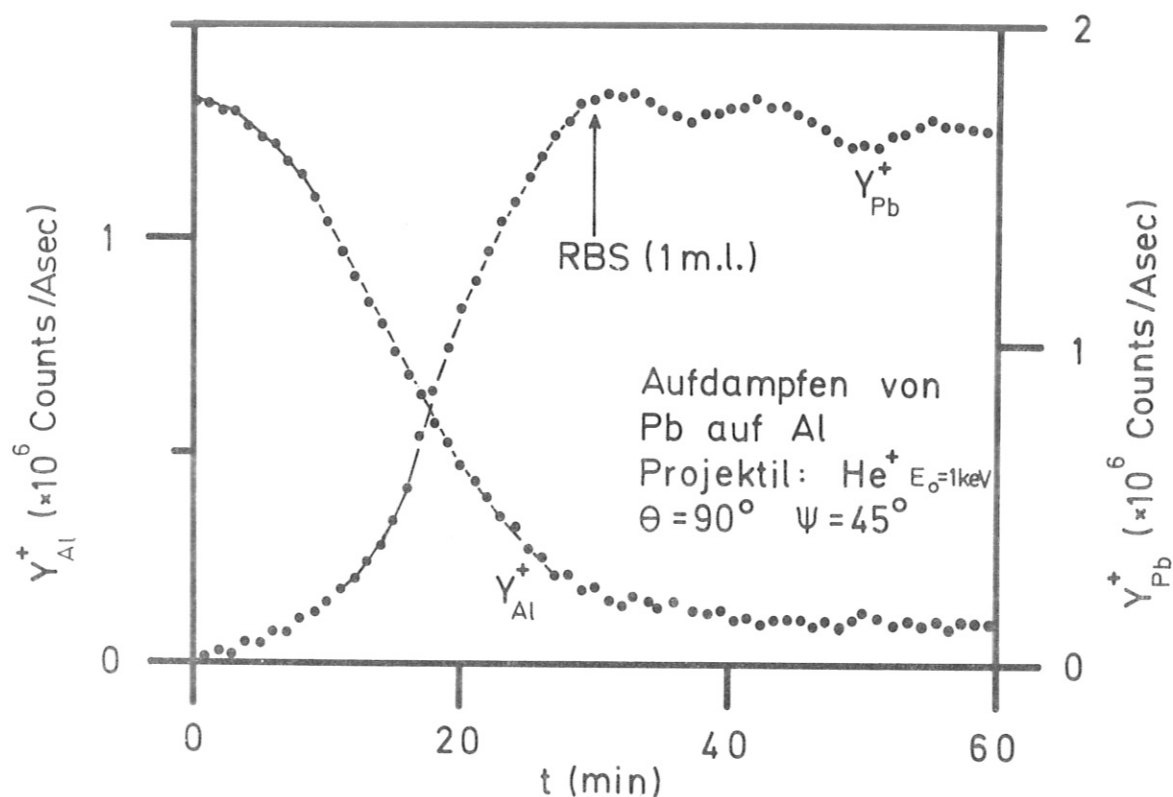


Abb. 33

Aufdampfen von Pb auf ein reines polykristallines Al-Substrat.

Der Sättigungspunkt (Pfeil) wurde mit der RBS-Methode bestimmt. In diesem Punkt ist etwa 1 Monolage Pb auf Al erreicht.

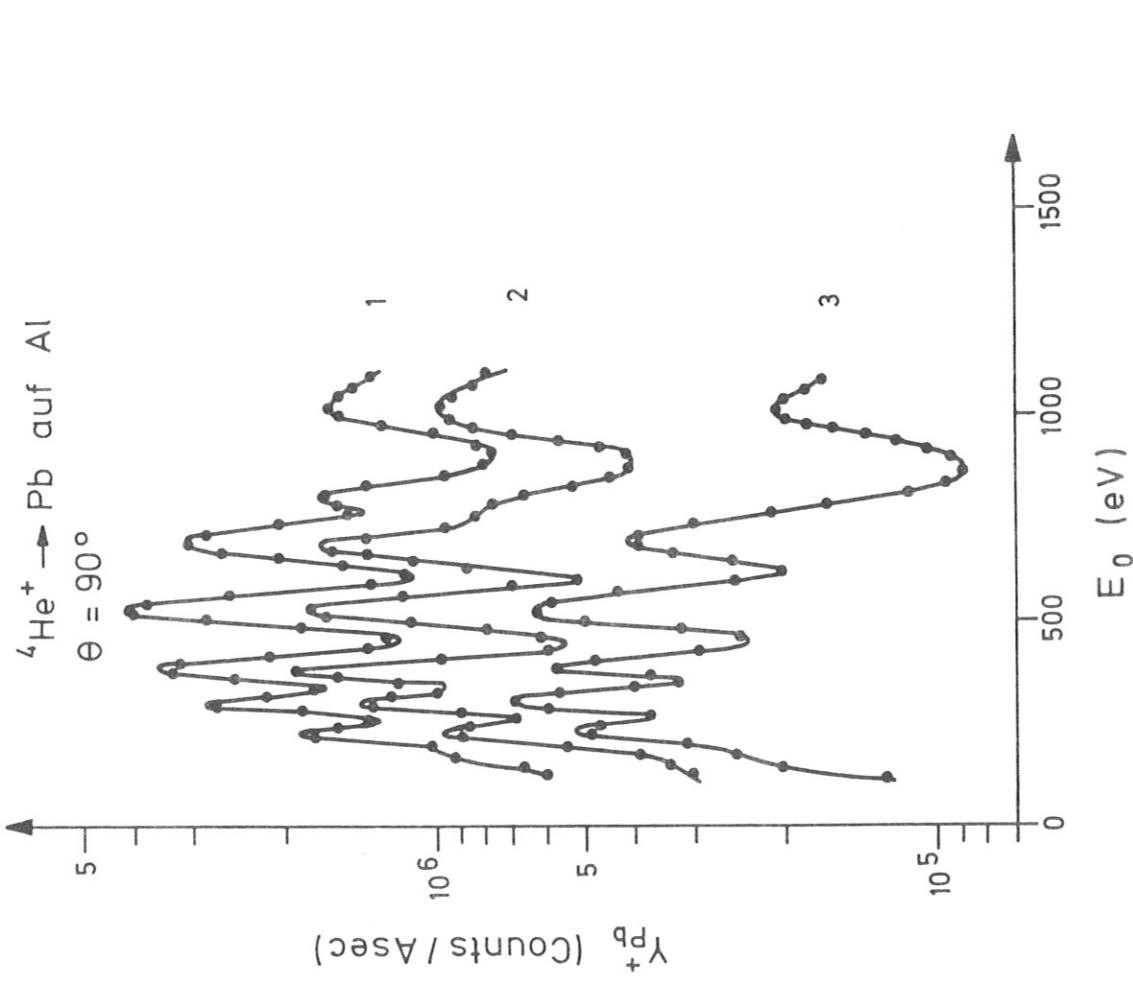


Abb. 34 Y_{Pb^+} als Funktion der Projektilenergie E_0
 1..0,8 m.l. Pb auf Al 2..0,5 m.l. Pb auf Al
 3..0,1 m.l. Pb auf Al

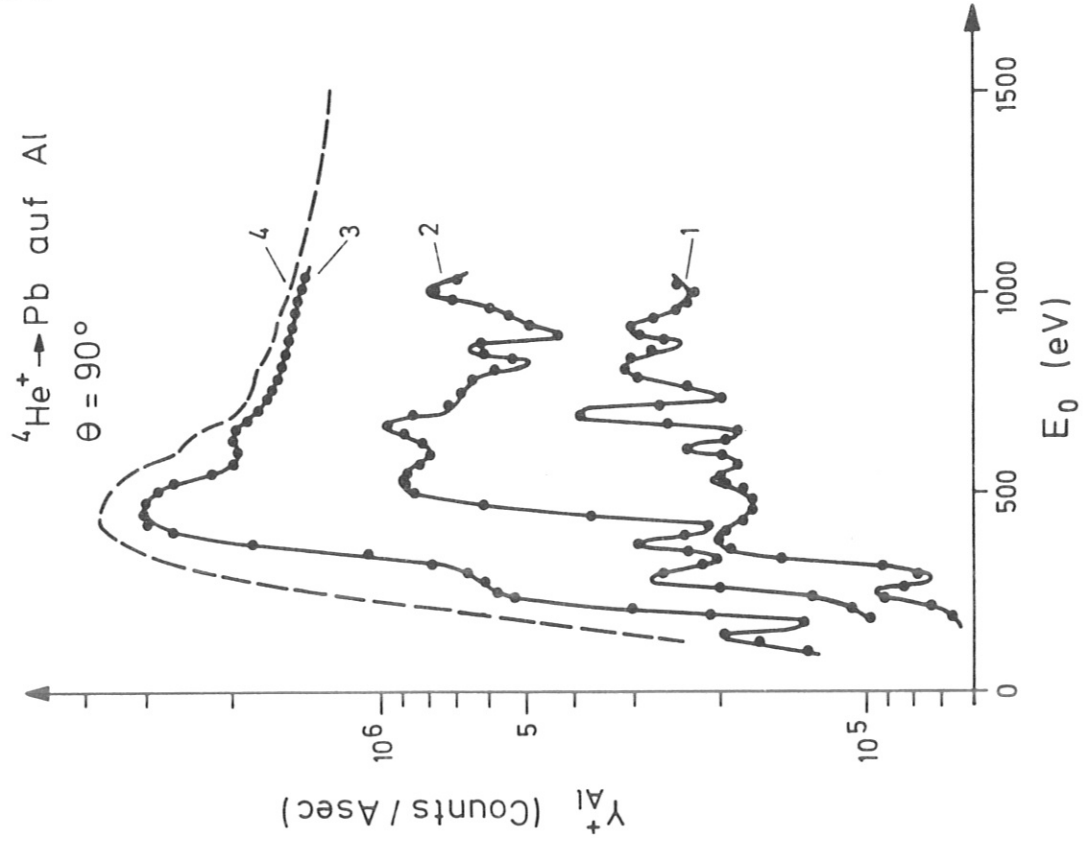


Abb. 35 Y_{Al^+} als Funktion der Primärenergie E_0
 1..0,8 m.l. Pb auf Al 2..0,5 m.l. Pb auf Al
 3..0,1 m.l. Pb auf Al 4..reines Al-Substrat

Cu als Substrat:

Die Ergebnisse der Aufdampfexperimente für Cu als Substrat gleichen denen für Ni-Substrate (Abb.36). Hier gibt es - wie bei Ni - keine Hinweise auf inselartige Pb-Strukturen.

Das Resultat der ISS-Analyse für Pb-Bedeckungen < 1 m.l. ist aus Abb. 37 (Y_{Pb}^+) und Abb. 38 (Y_{Cu}^+) ersichtlich.

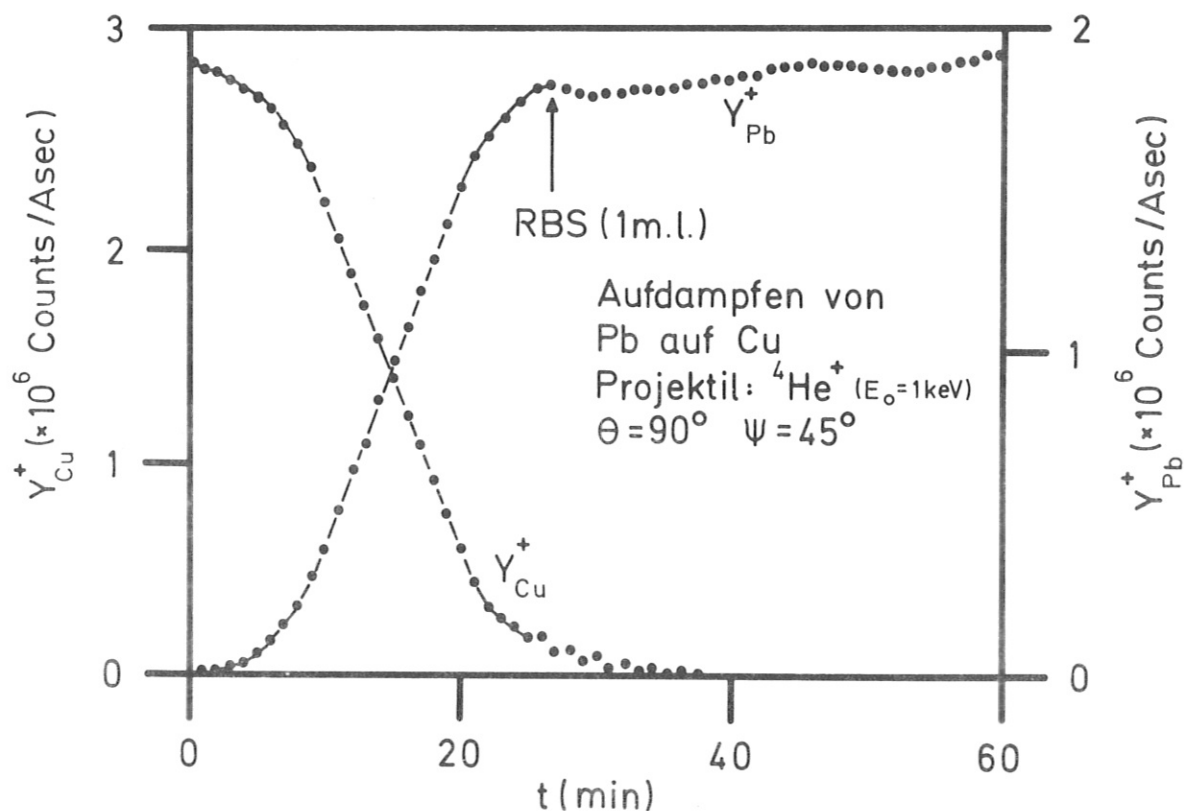


Abb. 36 Aufdampfen von Pb auf ein reines, polykristallines Cu-Substrat

Der Sättigungspunkt (Pfeil) wurde mit der RBS-Methode bestimmt. In diesem Punkt ist etwa 1 Monolage Pb auf Cu erreicht.

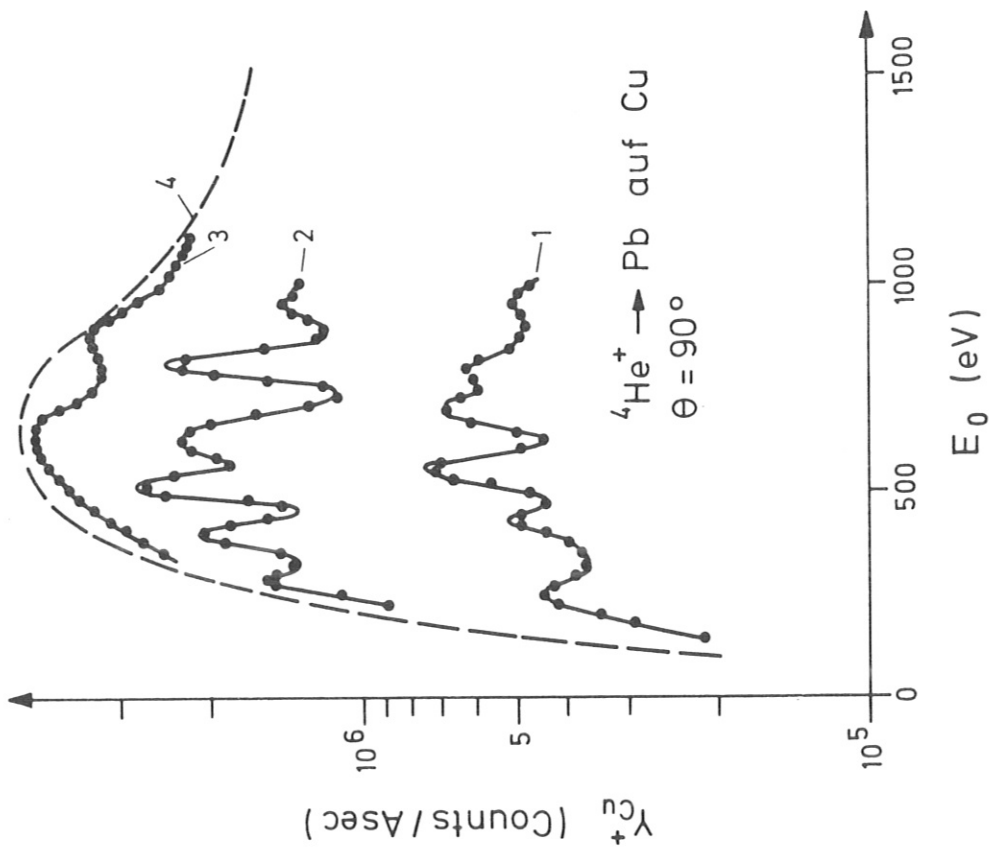


Abb. 38 Y_{Cu^+} als Funktion der Primärenergie E_0
 1..0,8 m.l. Pb auf Cu 2..0,5 m.l. Pb auf Cu
 3..0,1 m.l. Pb auf Cu 4..reines Cu-Substrat

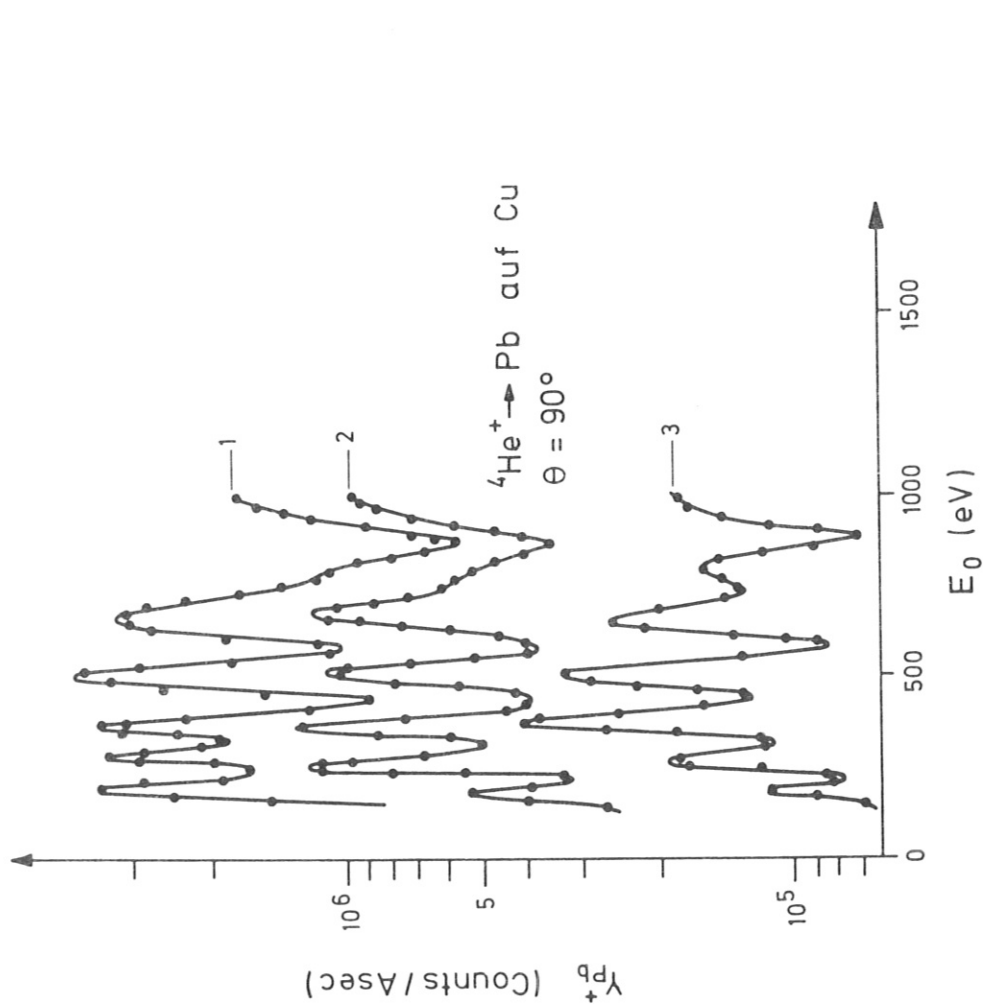


Abb. 37 Y_{Pb^+} als Funktion der Projektilenergie E_0
 1..0,8 m.l. Pb auf Cu 2..0,5 m.l. Pb auf Cu
 3..0,1 m.l. Pb auf Cu

Zusammengefaßt ergeben die Experimente folgendes

Bild von den Oszillationen in der Ionenausbeute

Y_{Pb}^+ bei der Streuung ${}^4\text{He}^+ \longrightarrow \text{Pb}$:

Die Form der Oszillationen $Y_{\text{Pb}}^+ = f(E_0)$ ist weitgehend unabhängig von der Pb-Bedeckung auf dem Substrat und für die absoluten Werte Y_{Pb}^+ gilt für $N_{\text{Pb}} < 10^{15}$ Pb-Atome/cm (≈ 1 m.l.) in guter Näherung $Y_{\text{Pb}}^+ \sim N_{\text{Pb}}$ (vergl. 4.1). Wie man aus Abb. 39 entnehmen kann, ändern sich die Y_{Pb}^+ -Oszillationen auch nicht wesentlich, wenn man Pb auf Substrate mit unterschiedlicher Bandstruktur dampft.

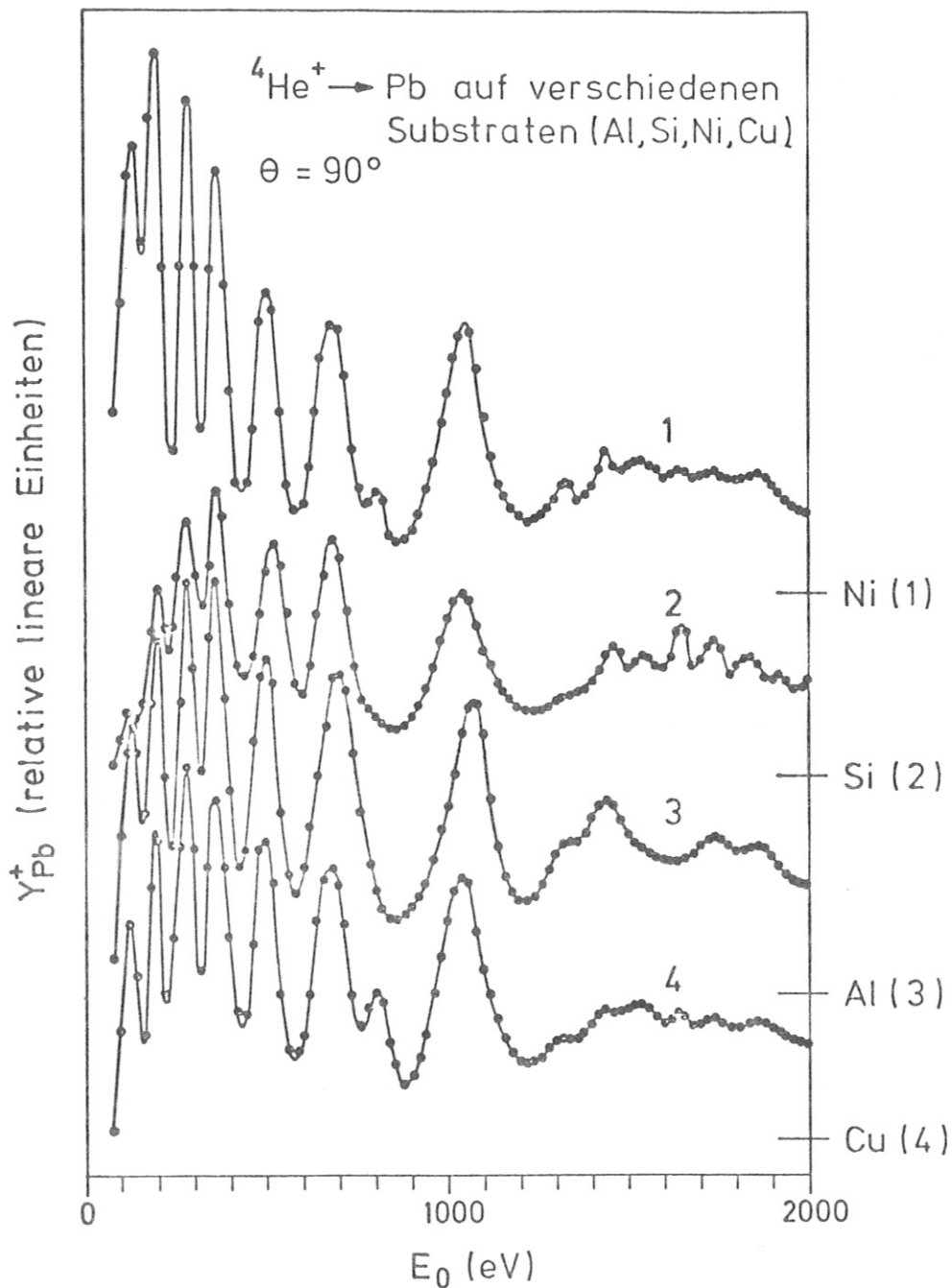


Abb. 39 Die Ionenausbeute Y_{Pb}^+ als Funktion der Projektilenergie E_0 bei verschiedenen Substraten (Al, Si, Ni, Cu), die in situ mit $\approx 1/2$ Monolage Pb bedampft wurden.

Bei geringen Pb-Bedeckungen ($N_{\text{Pb}} \approx 10^{14}$ Pb-Atome/cm²) entstehen zusätzliche Maxima und Minima, d.h. die "charakteristische Frequenz" (vergl. S. 74) wird, wie auch beim Atomstrahlexperiment (S. 94), größer. In Abschnitt 5 wird dieser Frequenzterm berechnet und im Abschnitt 6 mit den experimentellen Werten verglichen. Der Vergleich zeigt, daß die Y_{Pb}^+ -Oszillationen als "atomarer" Effekt verstanden werden können, in dem der quasiresonante Ladungsaustausch zwischen dem Pb (5d) und dem He(1s)-Niveau (vergl. S. 11) die dominante Rolle spielt.

Neu ist die Tatsache, daß auch der ISS-Substratpeak (Y_{Al}^+ , Y_{Si}^+ , Y_{Ni}^+ , Y_{Cu}^+) ausgeprägte Oszillationen zeigt, wenn Pb auf das Substrat gedampft wird. Die Meßergebnisse in diesem Abschnitt zeigen, daß der Effekt vom Substratmaterial und sehr stark vom Pb- Bedeckungsgrad abhängt.

Während die Oszillationen des Substrats bei Pb-Belegungen von $\approx 1/2$ m.l. weitgehend den Oszillationen von Y_{Pb}^+ folgen, ändert sich die Lage der Maxima und Minima beim Übergang zu geringeren Pb-Bedeckungen. Die Amplitude der Oszillationen fällt mit dem Pb-Bedeckungsgrad, und Y_{Substrat}^+ geht in die Kurve für das reine Substrat über.

Im Abschnitt 6 wird versucht, diesen festkörperspezifischen Effekt qualitativ mit einem Mehrfachstreumodell zu deuten und abzuschätzen, inwieweit dieser Effekt zur Charakterisierung der elektronischen Struktur der Oberfläche und der Adsorptionsverhältnisse herangezogen werden kann.

Experiment mit ${}^3\text{He}^+$:

Im theoretischen Teil (Abschnitt 5) und zur Auswertung des Frequenzterms in Abschnitt 6.1 wird die Kernbewegung beim Zweierstoß klassisch berechnet. Um experimentell nachprüfen zu können, ob dieses Vorgehen gerechtfertigt ist, wurde ein Experiment mit ${}^3\text{He}^+$ als Projektilion durchgeführt.

Das ${}^3\text{He}$ -Isotop besitzt (bis auf die Hyperfeinstruktur) dieselbe elektronische Struktur wie ${}^4\text{He}^+$. Der Unterschied in der Kernmasse (25 %) hingegen führt nach dem klassischen Modell bei gleicher Primärenergie E_0 und bei gleichem Streuwinkel θ zu deutlich verschiedenen Trajektorien. Wie in Abb. 40 zu sehen ist, wirken diese Unterschiede auch auf die Gestalt der Y_{Pb}^+ -Oszillationen, wenn die Ionenausbeute gegen die Energie E_0 aufgetragen wird. Berücksichtigt man aber die unterschiedlichen Trajektorien und stellt Y_{Pb}^+ bei der Streuung der ${}^3\text{He}^+$ bzw. ${}^4\text{He}^+$ -Ionen als Funktion des Abstands R_0 zwischen Projektil- und Targetkern im klassischen Umkehrpunkt dar, gleichen sich beide Kurven soweit, daß die klassischen Annahmen bestätigt werden können (vergl. Abb. 51 S. 99).

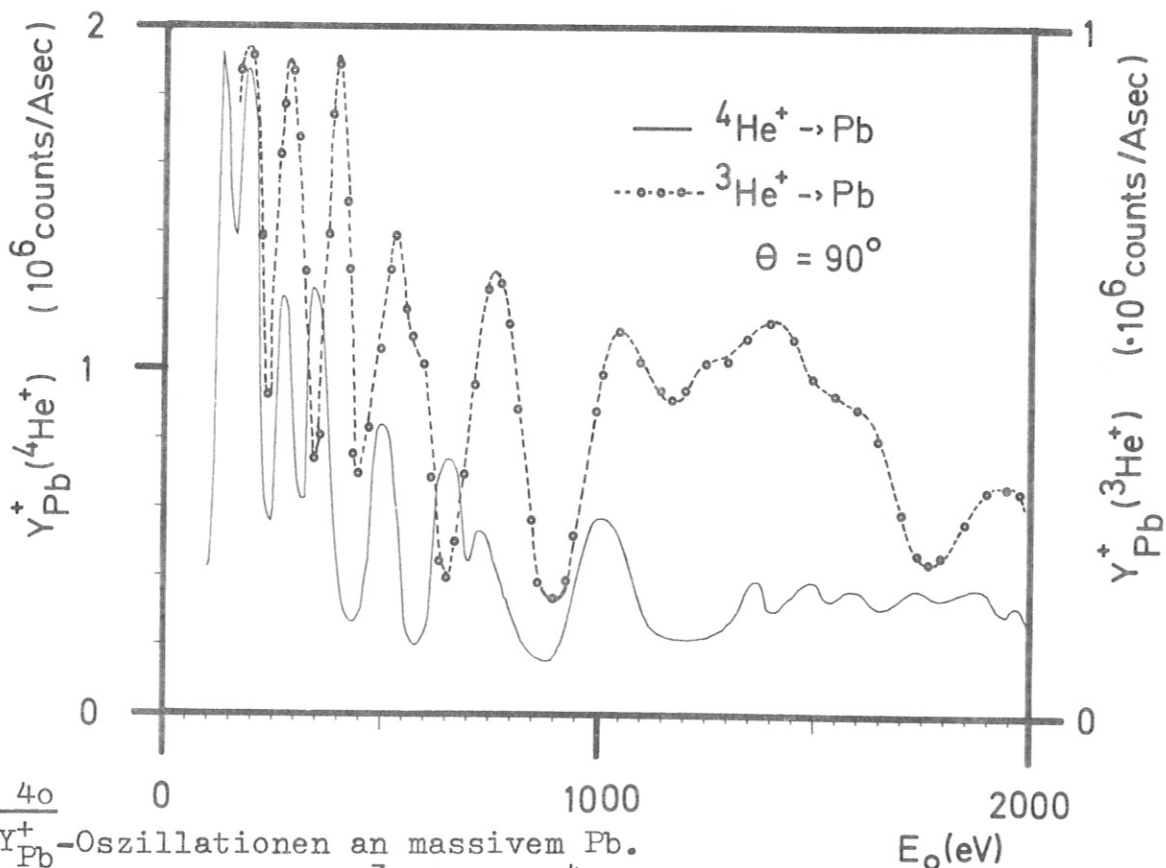


Abb. 40

Die Y_{Pb}^+ -Oszillationen an massivem Pb.
 Als Projektilion wurde ${}^3\text{He}^+$ bzw. ${}^4\text{He}^+$ verwendet.

Messung der Neutralteilchen:

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auch versucht, die Energieverteilung der vom Target neutral rückgestreuten Projektile (^4He) experimentell zu bestimmen. Dazu wurde eine Gaszelle eingesetzt (vergl. Abb. 8, S.18) und das bereits in anderen Arbeiten beschriebene "Stripping-Verfahren" / 17 / angewandt.

Obwohl der Nachweis von neutralem He im Energiebereich $500 \text{ eV} < E_1 < 2000 \text{ eV}$ gelang, scheiterten die Experimente bei niedrigen Pb-Bedeckungen auf dem Substrat. Der kleine Wirkungsquerschnitt für "stripping" von neutralem He in Stickstoff zwingt zu sehr langen Meßzeiten beim Neutralteilchennachweis und damit zu hohen Ionenbeschußdosen am Target. Abschätzungen ergaben, daß nach einem Neutralteilchenspektrum ($E_0 = 1000 \text{ eV}$) bei einem statistischen Fehler (\sqrt{Z}/Z) von $\approx 10\%$ etwa $1/2$ Monolage Pb durch Zerstäubung vom Target abgetragen wird.

Am massiven Pb-Target wurden innerhalb der Meßgenauigkeit bei der Stripping-Methode ($\pm 10\%$) keine Oszillationen in den Neutralteilchenspektren beobachtet.

Messung der Sekundärelektronen

Über ioneninduzierte Elektronenemission aus Festkörperoberflächen sind bereits zahlreiche Arbeiten veröffentlicht worden /21/.

In diesem Experiment sollte untersucht werden, ob die ausgeprägten Y_{Pb}^+ -Oszillationen auch zu Oszillationen in der Sekundärelektronenausbeute führen.

Für jeden Energiewert E_0 ($300 \text{ eV} < E_0 < 2000 \text{ eV}$) wurde der Targetstrom einmal ohne Gegenspannung ($J_1 = J_{\text{ion}} +$

J_{elektron}) und einmal mit Gegenspannung ($U_{\text{Target}} = + 50 \text{ V}$), wobei die Elektronenemission unterdrückt wird, ($J_2 = J_{\text{ion}}$) gemessen. Das Resultat, $(J_1 - J_2)/J_2$ als Funktion von E_0 , ist in Abb. 41 dargestellt und zeigt innerhalb der Meßgenauigkeit einen mit E_0 monoton steigenden Verlauf.

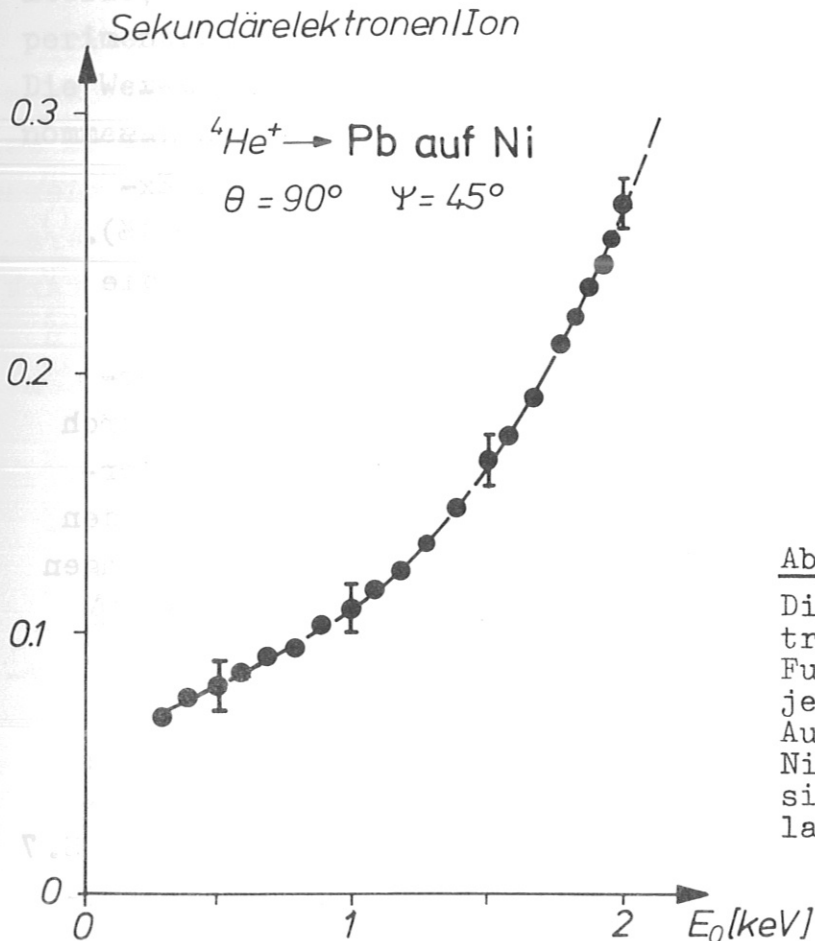


Abb. 41

Die Sekundärelektronenausbeute als Funktion der Projektilenergie E_0 . Auf das polykristalline Ni-Substrat wurde in situ etwa 1/2 Monolage Pb aufgedampft.

4.5. Fehlerbetrachtung

In 3.1 wurde die Meßmethode beschrieben, nach der man punktweise die normierte Ionenausbeute Y_i^+ als Funktion der Projektilenergie E_0 erhält.

Die in diese Darstellung (vergl. z.B. Abb. 17, S. 40) wesentlich eingehenden Fehler sind in folgendem Abschnitt zusammengefaßt.

Der systematische Fehler in der Abszisse (E_0) ist durch die Bauart der Ionenquelle bestimmt. Nach /38/ beträgt $\Delta E_0/E_0 \approx 1.5\%$.

Komplizierter ist der Ordinatenfehler ($\Delta Y_i^+ / Y_i^+$) zusammengesetzt. Experimentell bestimmbare systematische Fehler liegen in der Ladungsmessung und der Energiebreite ΔE (vergl. 3.1.3, S. 22). Zur Ungenauigkeit des digital current-integrator ($\pm 1\%$, Abb. 14, S. 32) kommt der Beitrag durch unterschiedliche Sekundärelektronenemission (Abb. 41) der sich aber durch "Hochlegen" des Targets unterdrücken läßt. Der statistische Fehler \sqrt{Z}/Z in der Zählrate Z (Abb. 9, S. 19) ist für die meisten Experimente in dieser Arbeit vernachlässigbar ($\approx 1\%$). Ebenso tragen die Nachweiswahrscheinlichkeit und die Totzeit des Detektors nicht zum Fehler bei. Schwer erfaßbar sind hingegen die systematischen Ordinatenfehler, die durch Zerstäubungseffekte und durch unterschiedliche Rauigkeit der Targetoberfläche hervorgerufen werden. Ihr Einfluß bestimmt wesentlich den relativen Fehler $\Delta Y_i^+ / Y_i^+$, der durch Vergleichsmessungen lediglich abgeschätzt werden kann (Reproduzierbarkeit $\approx 10\%$).

Bei der Auswertung der Peakhalbwertsbreite (Abb. 9, S. 19) ist der Einfluß der Streugeometrie zu berücksichtigen. Durch Differenzieren des Ausdrucks 2.1.1, S. 7 erhält man 4.5.1 und schließlich 4.5.2 für den relativen Fehler

$$\left| \Delta (E_r / E_o) / (E_r / E_o) \right|_{\theta} .$$

Der Spezialfall $\theta = 90^\circ$ führt zu 4.5.3. Unter Berücksichtigung der Unsicherheit in der Primärenergie E_0 ($\Delta E_0/E_0 = 1.5\%$) und dem Energieauflösungsvermögen des Analysators ($\Delta E_1/E_1 = 1\%$) kann die Peakverbreiterung bei unterschiedlicher Streugeometrie, z.B. beim Atomstrahlexperiment und beim Experiment am massiven Pb-Target, abgeschätzt werden (5.5.4) Die Werte für $\Delta\theta$ sind Abb.62 (Anhang S.118) entnommen.

$$\frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{1}{1+A} \cdot (\cos\theta + \sqrt{A^2 - \sin^2\theta}) \right]^2 \quad A = \frac{M_2}{M_1} \quad M_2 > M_1$$

$$\frac{\Delta(E_1/E_0)}{\Delta\theta} = \left[\frac{-2}{(1+A)^2} \cdot (\cos\theta + \sqrt{A^2 - \sin^2\theta}) \right] \cdot \left[\sin\theta + \frac{\sin\theta \cdot \cos\theta}{\sqrt{A^2 - \sin^2\theta}} \right]$$

$$\left| \frac{\Delta(E_1/E_0)}{E_1/E_0} \right|_{\theta} = \frac{\frac{2 \cdot \sin\theta \cdot \cos\theta}{\sqrt{A^2 - \sin^2\theta}} + 2 \cdot \sin\theta}{\cos\theta + \sqrt{A^2 - \sin^2\theta}} \cdot \Delta\theta$$

$$= \frac{2}{\sqrt{A^2 - 1}} \cdot \Delta\theta \quad (\theta = 90^\circ)$$

$$\frac{\Delta(E_1/E_0)}{E_1/E_0} = \sqrt{\left(\frac{\Delta E_1}{E_1}\right)^2 + \left(\frac{\Delta E_0}{E_0}\right)^2 + \frac{4 \cdot \Delta\theta^2}{(A^2 - 1)90^\circ}} = \begin{cases} 1.86\% \text{ massives Pb} \\ 2.11\% \text{ Atomstrahl} \end{cases}$$

5. Theoretischer Teil:

Rechnungen zur quantenmechanischen Deutung der Oszillationen haben bereits verschiedene Autoren durchgeführt. (Vergl. / 6 /, zur Streuung von ${}^4\text{He}^+$ an He und / 7 /, / 8 /, zur Streuung von ${}^4\text{He}^+$ am massiven Pb-Target).

Das Konzept der bisherigen Rechnungen ist, die zeitabhängige Schrödingergleichung im Rahmen einer Zweizustandsnäherung (vergl. S.14) zu lösen. Für die Streuung am Festkörpertarget ergibt sich bei diesem Vorgehen unter anderem die Schwierigkeit, den Hamilton-Operator und einige Parameter in geeigneter Weise festzulegen. Meist müssen stark vereinfachende Annahmen hinzugenommen werden. Obwohl in einigen Fällen (/ 7 /) eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden konnte, scheint dieses Verfahren zur Deutung der unterschiedlichen Meßergebnisse bei der Streuung am Pb-Atomstrahl (4.2) und am Pb-Festkörpertarget (4.1) in einer einheitlichen Form weniger geeignet. Vorteilhafter ist der Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit einem einfacheren, aber "parameterfreien" theoretischen Modell.

Das oszillatorische Verhalten der Wahrscheinlichkeit P_i , daß das Projektil (${}^4\text{He}^+$) nach dem Stoß an einem Pb-Atom ionisiert bleibt, läßt sich nach den bereits zitierten Arbeiten formal durch (5.1) beschreiben. A_1 und A_2 sind bei gegebenen Streubedingungen Funktionen der Projektilgeschwindigkeit. Der "Frequenzterm" A_3 ist durch (5.2) definiert. (Vergl. Abb. 6, S. 15).

$$(5.1) \quad P_i = A_1 + A_2 \cdot \sin^2(A_3)$$

$$(5.2) \quad A_3 = 1/\hbar v \cdot \int_{R_0}^{\infty} \Delta E(R) dR - \beta$$

Ziel dieses Abschnitts ist die Berechnung von ΔE als Funktion des Abstandes R der beiden Kerne (Projektile und Pb-Atom). Klassische Rechnungen für die Streuung am abgeschirmten Coulombpotential, deren Gültigkeit experimentell bestätigt ist (vergl. S. 8), ergeben den Umkehrpunkt R_0 als Funktion der Projektilenergie E_0 für den speziellen Streuwinkel $\theta = 90^\circ$.

Mit diesem Ergebnis läßt sich der "Frequenzterm" A_3 nach 5.2 auswerten und dem experimentellen Befund (Lage der Maxima und Minima in Abb. 17,18,20) gegenüberstellen.

Auf die Funktionen A_1 und A_2 wird im Abschnitt 6.2 näher eingegangen.

Folgende Modellvorstellungen liegen der Berechnung von $\Delta E(R)$ zugrunde:

- der quasiresonante Ladungsaustausch zwischen dem Pb(5d) und dem He(1b)-Zustand spielt die dominante Rolle bei der Neutralisation
- während des Stoßes ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$ bildet sich ein "Quasimolekül" wobei eine Wechselwirkung nur zwischen den beiden Zuständen Pb(5d) und He(1s) stattfindet. (Die anderen Pb-Elektronen liegen energetisch weit entfernt und tragen nicht zur Wechselwirkung bei). (Abb. 42).

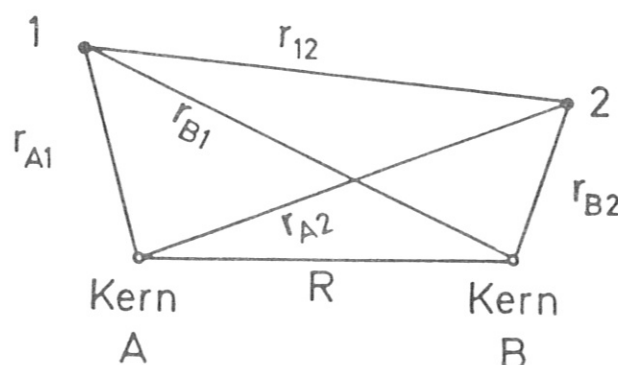


Abb. 42 Das Zweizentrenmodell (nach Dawydow / 50 /).

Nach der Methode von Heitler-London erhält man den Zusammenhang (5.3) von $\Delta E(R)$ mit dem Überlappintegral S , dem Coulombintegral Q und der Austauschenergie A , der z.B. in Dawydow /50/ S. 478 und Haug /51/, S.198 näher beschrieben ist.

$$(5.3) \quad \Delta E(R) = \frac{2 \cdot (A - S^2 Q)}{(1 - S^4)}$$

S : Überlapp - Integral
 Q : Coulomb - Integral
 A : Austauschenergie

$$S = \int \psi_A(1) \cdot \psi_B(1) d\tau \quad (5.4)$$

$$Q = \int \psi_A^2(1) \cdot \psi_B^2(2) \cdot \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} \right) d\tau + \frac{e^2}{R} \quad (5.5)$$

$$= \frac{e^2}{R} - \int \psi_A^2(1) \frac{e^2}{r_{B1}} d\tau_1 - \int \psi_B^2(2) \frac{e^2}{r_{A2}} d\tau_2 + \int \psi_A^2(1) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_B^2(2) d\tau$$

$$A = \int \psi_A(1) \cdot \psi_B(2) \cdot \left(\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} \right) \cdot \psi_B(2) \cdot \psi_A(1) d\tau \quad (5.6)$$

$$= \frac{e^2 \cdot S^2}{R} + \int \psi_A(1) \psi_B(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_B(2) \psi_A(1) d\tau - S \cdot \int \psi_A(1) \frac{e^2}{r_{B1}} \psi_A(1) d\tau_1 - S \cdot \int \psi_B(2) \frac{e^2}{r_{A2}} \psi_B(2) d\tau_2$$

Das Einsetzen von 5.5. und 5.6 in 5.3 führt zu 5.7.

Zur Auswertung der Integrale in 5.7 benötigt man noch geeignete Wellenfunktionen für ψ_A und ψ_B .

In diesem Abschnitt wird $\Delta E(R)$ mit Slater-Funktionen und mit angepaßten Wasserstoff-Wellenfunktionen berechnet.

(5.7)

$$\Delta E(R) = \frac{2}{(1-S^4)}$$

$$\begin{aligned} & \left(S^2 \int \psi_B^2 \frac{e^2}{r_{A2}} d\tau_2 \right. \\ & + S^2 \int \psi_A^2 \frac{e^2}{r_{B1}} d\tau_1 \\ & - S \int \psi_B \frac{e^2}{r_{A2}} \psi_A d\tau_2 \\ & - S \int \psi_A \frac{e^2}{r_{B1}} \psi_B d\tau_1 \\ & - S^2 \int \psi_A^2 \frac{e^2}{r_{12}} \psi_B^2 d\tau \\ & \left. + \int \psi_A \psi_B \frac{e^2}{r_{12}} \psi_B \psi_A d\tau \right) \end{aligned}$$

Ergebnis für Slater-Funktionen:

Nach der Vorschrift z.B. in Preuss /52/ lassen sich die Wellenfunktionen $\Psi_{Pb(5d)}$ und $\Psi_{He(1s)}$ folgendermaßen aufbauen:

(5.8)

$$\Psi(5d\sigma) = \sqrt{\frac{\alpha^9}{252 \cdot \pi}} \cdot r_1^3 \cdot e^{-\alpha r_1} (3 \cos^2 \theta_1 - 1)$$

$$\Psi(5d\pi') = \sqrt{\frac{\alpha^9}{21 \cdot \pi}} \cdot r_1^3 \cdot e^{-\alpha r_1} \sin \theta_1 \cos \theta_1 \sin \varphi_1$$

$$\Psi(5d\pi) = -\sqrt{\frac{\alpha^9}{21 \cdot \pi}} \cdot r_1^3 \cdot e^{-\alpha r_1} \sin \theta_1 \cos \theta_1 \cos \varphi_1$$

$$\Psi(5d\delta') = -\sqrt{\frac{\alpha^9}{21 \cdot \pi}} \cdot r_1^3 \cdot e^{-\alpha r_1} \sin^2 \theta_1 \sin(2\varphi_1)$$

$$\Psi(5d\delta) = \sqrt{\frac{\alpha^9}{21 \cdot \pi}} \cdot r_1^3 \cdot e^{-\alpha r_1} \sin^2 \theta_1 \cos(2\varphi_1)$$

(5.9)

$$\Psi(1s) = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}} \cdot e^{-\beta r_2}$$

Für Pb(5d) erhält man 5 Anteile für die Quantenzahlen $m = 0$ (σ), $+1$ (π), -1 (π'), $+2$ (δ), -2 (δ').

Wie man sofort sieht, fallen alle Anteile mit $m \neq 0$ bei der Integration über ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) weg, so daß weiterhin nur $\Psi(5d\sigma)$ berücksichtigt werden muß. Die Konstanten α und β sind die effektiven Abschirmzahlen, die durch die Quantenzahlen n , l , m bestimmt sind und gut abgeschätzt werden können /53/.

Die Integrale in 5.7 lassen sich am einfachsten in elliptischen Koordinaten, die dem Zweizentrenproblem besonders gut angepaßt sind, lösen.

Transformation in elliptische Koordinaten:

$$r_a = \frac{R}{2} (\mu + \nu)$$

$$r_b = \frac{R}{2} (\mu - \nu)$$

$$d\tau = \left(\frac{R}{2}\right)^3 (\mu^2 - \nu^2) d\mu d\nu d\varphi$$

$$r_a \cos\theta_a = \frac{R}{2} (1 + \mu\nu)$$

$$r_b \cos\theta_b = \frac{R}{2} (1 - \mu\nu)$$

Integrationsgrenzen:

$$1 \leq \mu < \infty$$

$$-1 \leq \nu \leq +1$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Auf diese Weise ergibt sich für den Überlapp S. 5.11.

$$A = \sqrt{\frac{\alpha^9}{252 \pi}} \quad B = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}$$

$$(5.11) \quad S = \int \psi_A(l) \cdot \psi_B(l) d\tau =$$

$$\left(\frac{R}{2}\right)^6 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \cdot \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \cdot \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P(\mu, v)$$

$$P(\mu, v) = (-\mu^5 + 3\mu^5 v^2 + 3\mu^4 v + 3\mu^4 v^3 + 3\mu^3 + 4\mu^3 v^2 - 3\mu^3 v^4 + 3\mu^2 v - 4\mu^2 v^3 - 3\mu^2 v^5 - 3\mu v^2 - 3\mu v^4 - 3v^3 - v^5)$$

Mit Hilfe elementarer Integrale von Exponentialfunktionen /54/ kann man 5.12 durch vollständige Induktion beweisen. Das bestimmte Doppelintegral 5.11 mit dem Polynom $P(\mu, v)$ läßt sich dann gliedweise exakt berechnen.

$$(5.12)$$

$$\int_1^\infty d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-a\mu} \cdot e^{-bv} \cdot \mu^n \cdot v^m =$$

$$e^{-a} \cdot \sum_{l=0}^n \frac{n!}{(n-l)! \cdot a^{(l+1)}} \cdot \left\{ e^{+b} \cdot \sum_{l=0}^m \frac{(-1)^l \cdot m!}{(m-l)! \cdot b^{(l+1)}} - e^{-b} \cdot \sum_{l=0}^m \frac{(-1)^m \cdot m!}{(m-l)! \cdot b^{(l+1)}} \right\}$$

$$m, n \in \mathbb{N} \quad a, b \in \mathbb{R} \quad a > 0 \\ m, n \geq 0$$

Die Integrale, die man nach dieser Methode ebenfalls exakt berechnen kann, sind unter 5.13, 5.14, 5.15, 5.16 aufgeführt.

$$(5.13) \int \psi_A(1) \frac{1}{r_{B1}} \psi_B(1) d\tau_1 =$$

$$\left(\frac{R}{2}\right)^5 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P(\mu, v)$$

$$P(\mu, v) = (-\mu^4 + 3\mu^4 v^2 + 2\mu^3 v + 6\mu^3 v^3 + 3\mu^2 + 6\mu^2 v^2 + 3\mu^2 v^4 + 6\mu v + 2\mu v^3 + 3v^2 - v^4)$$

$$(5.14) \int \psi_B(2) \frac{1}{r_{A2}} \psi_A(2) d\tau_2 =$$

$$\left(\frac{R}{2}\right)^5 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P(\mu, v)$$

$$P(\mu, v) = (-\mu^4 + 3\mu^4 v^2 + 4\mu^3 v - 3\mu^2 v^4 + 3\mu^2 - 4\mu v^3 - 3v^2 + v^4)$$

$$(5.15) \quad \int_A^2 \Psi(1) \frac{1}{r_{B1}} d\tau_1 =$$

$$\left(\frac{R}{2}\right)^8 \cdot 2\pi \cdot A \cdot \int_1^2 d\mu \int_{-1}^{\infty} dv e^{-\mu \cdot R \cdot \alpha} \cdot e^{-v \cdot R \cdot \alpha} \cdot P(\mu, v)$$

$$\begin{aligned} P(\mu, v) = & 27\mu \cdot v^2 + 18\mu \cdot v^4 - 5\mu \cdot v^6 \\ & + 27\mu^2 \cdot v - 60\mu^2 \cdot v^3 + 15\mu^2 \cdot v^5 - 6\mu^2 \cdot v^7 \\ & + 9\mu^3 + 60\mu^3 \cdot v^2 + 77\mu^3 \cdot v^4 + 6\mu^3 \cdot v^6 \\ & + 18\mu^4 \cdot v + 77\mu^4 \cdot v^3 + 48\mu^4 \cdot v^5 + 9\mu^4 \cdot v^7 \\ & - 6\mu^5 + 15\mu^5 \cdot v^2 + 48\mu^5 \cdot v^4 + 27\mu^5 \cdot v^6 \\ & - 5\mu^6 \cdot v + 6\mu^6 \cdot v^3 + 27\mu^6 \cdot v^5 \\ & + 1\mu^7 - 6\mu^7 \cdot v^2 + 9\mu^7 \cdot v^4 \\ & + 9v^3 - 6v^5 + 1v^7 \end{aligned}$$

$$(5.16) \quad \int_B^2 \Psi(2) \frac{1}{r_{A2}} d\tau_2 =$$

$$= \left(\frac{R}{2}\right)^2 \cdot 2\pi \cdot B \cdot \int_1^2 d\mu \int_{-1}^{\infty} dv e^{-\mu \cdot R \cdot \beta} \cdot e^{+v \cdot R \cdot \beta} \cdot (\mu - v)$$

$$= \frac{1}{R} - e^{-2 \cdot \beta \cdot R} \cdot \left(\frac{1}{R} + \beta\right)$$

Große Schwierigkeiten bereiten die beiden noch verbleibenden Terme mit $1/r_{12}$, die der mittleren Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen und dem gemischten Beitrag zur Austauschenergie Rechnung tragen. Für das Wasserstoffmolekül (Grundzustand $1s$) lassen sich diese beiden komplizierten Terme mit der sechsfachen Integration mit speziellen Kunstgriffen /53/ noch lösen. Für $Pb(5d)$ und $He(1s)$ ist dies nicht mehr möglich. Ein angenäherter Lösungsweg wäre, die speziellen Wellenfunktionen (Slater- oder Wasserstoff-Funktionen) wiederum mit Gausschen Wellenfunktionen aufzubauen, ein in der Molekülphysik übliches Verfahren /55/. Diese langwierigen Rechnungen sind z.Z. noch nicht abgeschlossen und Gegenstand einer weiterführenden Untersuchung.

Zur Auswertung des Frequenzterms A_3 in 1. Näherung werden ab hier diese beiden Terme weggelassen. Eine gewisse Rechtfertigung dafür, daß dieser Beitrag zu $\Delta E(R)$ für $R > a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ m klein ist, sich möglicherweise sogar aufhebt, findet sich unter /53/.

Ergebnis für angepaßte Wasserstoff-Wellenfunktionen:

Wie mit den Slater-Funktionen kann man auch einen Ansatz mit wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen verursachen, die nach der Vorschrift z.B. in Bethe/Salpeter /56/ aufgebaut werden können. Die Wellenfunktionen für He(1s) sind bei beiden Ansätzen identisch (vergl. 5.18 und 5.9).

Auch hier fallen die Anteile für $m \neq 0$ bei der Integration über Ψ weg, so daß nur $\Psi_{Pb(5d\sigma)}$ berücksichtigt werden muß. Ebenso wie bei den Slaterfunktionen lassen sich hier die einzelnen Terme (bis auf die beiden Terme mit $\frac{1}{r_{12}}$ exakt mit Hilfe von 5.12 berechnen. Die Resultate sind unter 5.19, 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 aufgeführt.

Entwicklung von $\Psi_{Pb(5d)}$ und $\Psi_{He(1s)}$ nach angepaßten Wasserstoff-Funktionen:

$$\begin{aligned}
 (5.17) \quad \Psi(5d\sigma) &= \frac{1}{3} \cdot \sqrt{\frac{\alpha^7}{70\pi}} r_1^2 e^{-\alpha r_1} (21 - 14\alpha r_1 + 2\alpha^2 r_1^2) \cdot (3\cos^2\theta_1 - 1) \\
 \Psi(5d\pi'_1) &= \frac{2}{3} \cdot \sqrt{\frac{3\alpha^7}{70\pi}} r_1^2 e^{-\alpha r_1} (21 - 14\alpha r_1 + 2\alpha^2 r_1^2) \cdot \sin\theta_1 \cdot \cos\theta_1 \cdot \sin\varphi_1 \\
 \Psi(5d\pi) &= \frac{2}{3} \cdot \sqrt{\frac{3\alpha^7}{70\pi}} r_1^2 e^{-\alpha r_1} (21 - 14\alpha r_1 + 2\alpha^2 r_1^2) \cdot \sin\theta_1 \cdot \cos\theta_1 \cdot \cos\varphi_1 \\
 \Psi(5d\delta'_1) &= \frac{1}{3} \cdot \sqrt{\frac{3\alpha^7}{70\pi}} r_1^2 e^{-\alpha r_1} (21 - 14\alpha r_1 + 2\alpha^2 r_1^2) \cdot \sin^2\theta_1 \cdot \sin(2\varphi_1) \\
 \Psi(5d\delta) &= \frac{1}{3} \cdot \sqrt{\frac{3\alpha^7}{70\pi}} r_1^2 e^{-\alpha r_1} (21 - 14\alpha r_1 + 2\alpha^2 r_1^2) \cdot \sin^2\theta_1 \cdot \cos(2\varphi_1)
 \end{aligned}$$

$$(5.18) \quad \Psi(1s) = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}} \cdot e^{-\beta r_2}$$

$$(5.19) \quad A = \sqrt{\frac{\alpha^7}{630\pi}} \quad B = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}$$

$$S = \int \psi_A(1) \cdot \psi_B(1) d\tau = \left(\frac{R}{2}\right)^5 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot (J_1 + J_2 + J_3)$$

$$J_1 = 21 \cdot \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^+ dv e^{-\mu \cdot \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \cdot \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P_1(\mu, v)$$

$$P_1(\mu, v) = (-4\mu \cdot v^3 + 3\mu^2 - 3\mu^2 \cdot v^4 + 4\mu^3 \cdot v - 1\mu^4 + 3\mu^4 \cdot v^2 - 3v^2 + 1v^4)$$

$$J_2 = -14 \cdot \left(\frac{R}{2}\right) \cdot \alpha \cdot \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^+ dv e^{-\mu \cdot \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \cdot \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P_2(\mu, v)$$

$$P_2(\mu, v) = (-3\mu \cdot v^2 - 3\mu \cdot v^4 + 3\mu^2 \cdot v - 4\mu^2 \cdot v^3 - 3\mu^2 \cdot v^5 + 3\mu^3 + 4\mu^3 \cdot v^2 - 3\mu^3 \cdot v^4 + 3\mu^4 \cdot v + 3\mu^4 \cdot v^3 - 1\mu^5 + 3\mu^5 \cdot v^2 - 3v^3 + 1v^5)$$

$$J_3 = 2 \cdot \left(\frac{R}{2}\right)^2 \cdot \alpha^2 \cdot \int_1^\infty d\mu \int_{-1}^+ dv e^{-\mu \cdot \frac{R}{2}(\alpha+\beta)} \cdot e^{-v \cdot \frac{R}{2}(\alpha-\beta)} \cdot P_3(\mu, v)$$

$$P_3(\mu, v) = (-6\mu \cdot v^3 - 2\mu \cdot v^5 - 7\mu^2 \cdot v^4 - 3\mu^2 \cdot v^6 + 6\mu^3 \cdot v - 6\mu^3 \cdot v^5 + 3\mu^4 + 7\mu^4 \cdot v^2 + 2\mu^5 \cdot v + 6\mu^5 \cdot v^3 - 1\mu^6 + 3\mu^6 \cdot v^2 - 3v^4 + 1v^6)$$

$$(5.21) \int_B \psi(2) \frac{1}{\Gamma_{A2}} d\tau_2 = \left(\frac{R}{2}\right)^4 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot (J_1 + J_2 + J_3) \quad (5.20)$$

$$J_1 = 21 \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_1(\mu, v)$$

$$P_1(\mu, v) = (3\mu - 5\mu^2 v + 5\mu^2 v^2 - 3\mu^3 v - 1\mu^3 + 3\mu^3 v^2 - 3v + 1v^3)$$

$$J_2 = -14 \cdot \left(\frac{R}{2}\right) \cdot \alpha \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_2(\mu, v)$$

$$P_2(\mu, v) = (-2\mu^3 v + 3\mu^2 - 3\mu^2 v^4 + 4\mu^3 v - 1\mu^4 + 3\mu^4 v^2 - 3v^2 + 1v^4)$$

$$J_3 = 2 \cdot \left(\frac{R}{2}\right)^2 \cdot \alpha^2 \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_3(\mu, v)$$

$$P_3(\mu, v) = (-3\mu^2 v^2 - 1\mu^4 v + 3\mu^2 v - 2\mu^2 v^2 - 3\mu^2 v^5 + 3\mu^3 + 4\mu^3 v - 3\mu^3 v^4 + 3\mu^4 v^3 - 1\mu^5 + 3\mu^5 v^2 - 3v^3 + 1v^5)$$

$$\int_A \psi(1) \frac{1}{\Gamma_{B1}} d\tau_1 = \left(\frac{R}{2}\right)^4 \cdot 2\pi \cdot A \cdot B \cdot (J_1 + J_2 + J_3)$$

$$J_1 = 21 \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_1(\mu, v)$$

$$P_1(\mu, v) = (3\mu + 3\mu^2 v + 3\mu^2 v^2 - 3\mu^3 v - 1\mu^3 + 3\mu^3 v^2 - 3v - 1v^3)$$

$$J_2 = -14 \cdot \left(\frac{R}{2}\right) \cdot \alpha \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_2(\mu, v)$$

$$P_2(\mu, v) = (6\mu^2 v + 2\mu^3 v + 3\mu^2 + 6\mu^2 v^2 + 3\mu^2 v^4 + 2\mu^3 v + 6\mu^3 v - 1\mu^4 + 3\mu^4 v^2 - 3v^2 - 1v^4)$$

$$J_3 = 2 \cdot \left(\frac{R}{2}\right)^2 \cdot \alpha^2 \cdot \int_1^{\infty} d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \frac{R}{2}(\alpha + \beta)} \cdot e^{-v \frac{R}{2}(\alpha - \beta)} \cdot P_3(\mu, v)$$

$$P_3(\mu, v) = (9\mu^2 v^2 + 1\mu^4 v + 9\mu^2 v + 8\mu^2 v^3 + 3\mu^2 v^5 + 3\mu^3 + 8\mu^3 v + 9\mu^3 v^4 + 1\mu^4 v + 9\mu^4 v^3 - 1\mu^5 + 3\mu^5 v^2 + 3v^3 - 1v^5)$$

(5.22)

$$\int_{\Lambda} \frac{\psi(1)}{E_1} dt_1 = \left(\frac{R}{2}\right)^2 2\pi A \cdot (J_1 + J_2 + J_3 + J_4 + J_5)$$

$$J_1 = 441 \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} d\mu dv e^{-\mu\alpha R} e^{-v\alpha R} P_1(\mu, v)$$

$$P_1(\mu, v) = (9\mu + 18\mu \cdot v^2 - 7\mu \cdot v^4 + 18\mu^2 \cdot v + 28\mu^2 \cdot v^3 - 6\mu^2 \cdot v^5 - 6\mu^3 + 28\mu^3 \cdot v^2 + 18\mu^3 \cdot v^4 - 7\mu^4 \cdot v + 18\mu^4 \cdot v^3 + 9\mu^4 \cdot v^5 + 1\mu^5 - 6\mu^5 \cdot v^2 + 9\mu^5 \cdot v^4 + 9v - 6v^3 + 1v^5)$$

$$J_2 = -588 \left(\frac{R}{2}\right)^2 \alpha \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} d\mu dv e^{-\mu\alpha R} e^{-v\alpha R} P_2(\mu, v)$$

$$P_2(\mu, v) = (18\mu \cdot v + 12\mu \cdot v^3 - 6\mu \cdot v^5 + 9\mu^2 + 36\mu^2 \cdot v^2 + 21\mu^2 \cdot v^4 - 6\mu^2 \cdot v^6 + 12\mu^3 \cdot v + 56\mu^3 \cdot v^3 + 12\mu^3 \cdot v^5 - 6\mu^4 + 21\mu^4 \cdot v^2 + 36\mu^4 \cdot v^4 + 9\mu^4 \cdot v^6 - 6\mu^5 \cdot v + 12\mu^5 \cdot v^3 + 18\mu^5 \cdot v^5 + 1\mu^6 - 6\mu^6 \cdot v^2 + 9\mu^6 \cdot v^4 + 9v^2 - 6v^4 + 1v^6)$$

$$J_3 = 280 \left(\frac{R}{2}\right)^2 \alpha^2 \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} d\mu dv e^{-\mu\alpha R} e^{-v\alpha R} P_3(\mu, v)$$

$$P_3(\mu, v) = (+27\mu \cdot v^2 + 6\mu \cdot v^4 - 5\mu \cdot v^6 + 27\mu^2 \cdot v + 48\mu^2 \cdot v^3 + 15\mu^2 \cdot v^5 - 6\mu^2 \cdot v^7 + 9\mu^3 + 48\mu^3 \cdot v^2 + 77\mu^3 \cdot v^4 + 6\mu^3 \cdot v^6 + 6\mu^4 \cdot v + 77\mu^4 \cdot v^3 + 48\mu^4 \cdot v^5 + 9\mu^4 \cdot v^7 - 6\mu^5 + 15\mu^5 \cdot v^2 + 48\mu^5 \cdot v^4 + 27\mu^5 \cdot v^6 + 5\mu^5 \cdot v^8 + 6\mu^6 \cdot v^3 + 27\mu^6 \cdot v^5 + 1\mu^7 - 6\mu^7 \cdot v^2 + 9\mu^7 \cdot v^4 + 9v^2 - 6v^4 + 1v^6)$$

$$J_4 = -56 \left(\frac{R}{2}\right)^3 \alpha^3 \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} d\mu dv e^{-\mu\alpha R} e^{-v\alpha R} P_4(\mu, v)$$

$$P_4(\mu, v) = (36\mu \cdot v^3 - 4\mu \cdot v^7 + 54\mu^2 \cdot v^2 + 10\mu^2 \cdot v^6 - 6\mu^2 \cdot v^8 + 36\mu^3 \cdot v + 96\mu^3 \cdot v^3 + 92\mu^3 \cdot v^5 + 9\mu^4 + 54\mu^4 \cdot v + 154\mu^4 \cdot v^3 + 54\mu^4 \cdot v^5 + 9\mu^4 \cdot v^7 + 92\mu^5 \cdot v^2 + 96\mu^5 \cdot v^4 + 36\mu^5 \cdot v^6 - 6\mu^6 + 20\mu^6 \cdot v^2 + 54\mu^6 \cdot v^4 + 54\mu^6 \cdot v^6 + 6\mu^7 + 36\mu^7 \cdot v^2 + 54\mu^7 \cdot v^4 + 1\mu^8 - 6\mu^8 \cdot v^2 + 9\mu^8 \cdot v^4 + 9\mu^8 \cdot v^6 - 6v^2 + 6v^4 + 1v^6)$$

$$J_5 = 4 \left(\frac{R}{2}\right)^4 \alpha^4 \int_{-1}^{\infty} \int_{-1}^{\infty} d\mu dv e^{-\mu\alpha R} e^{-v\alpha R} P_5(\mu, v)$$

$$P_5(\mu, v) = (45\mu \cdot v^4 - 6\mu \cdot v^6 - 3\mu \cdot v^8 + 90\mu^2 \cdot v^3 + 54\mu^2 \cdot v^5 + 6\mu^2 \cdot v^7 - 6\mu^2 \cdot v^9 + 90\mu^3 \cdot v^2 + 150\mu^3 \cdot v^4 + 102\mu^3 \cdot v^6 - 6\mu^3 \cdot v^8 + 45\mu^4 \cdot v + 150\mu^4 \cdot v^3 + 246\mu^4 \cdot v^5 + 54\mu^4 \cdot v^7 + 9\mu^4 \cdot v^9 + 9\mu^5 + 54\mu^5 \cdot v^2 + 246\mu^5 \cdot v^4 + 150\mu^5 \cdot v^6 + 45\mu^5 \cdot v^8 - 6\mu^6 \cdot v + 112\mu^6 \cdot v^3 + 150\mu^6 \cdot v^5 + 90\mu^6 \cdot v^7 - 6\mu^7 + 26\mu^7 \cdot v^2 + 54\mu^7 \cdot v^4 + 90\mu^7 \cdot v^6 + 7\mu^8 - 6\mu^8 \cdot v^2 + 45\mu^8 \cdot v^4 + 1\mu^9 - 6\mu^9 \cdot v^2 + 9\mu^9 \cdot v^4 + 9v^2 + 1v^4 + 1v^6)$$

$$\begin{aligned}
 (5.23) \quad \int_B^2 \frac{1}{r_{A2}} d\tau_2 &= \\
 &= \left(\frac{R}{2}\right)^2 \cdot 2\pi \cdot B \cdot \int_1^2 d\mu \int_{-1}^{+1} dv e^{-\mu \cdot R \cdot \beta} \cdot e^{+v \cdot R \cdot \beta} \cdot (\mu - v) \\
 &= \frac{1}{R} - e^{-2 \cdot \beta \cdot R} \cdot \left(\frac{1}{R} + \beta\right)
 \end{aligned}$$

Damit ist $\Delta E(R)$ in 1. Näherung ganz auf analytischem Weg bestimmt. Nur 2 Parameter (α, β) gehen in die Rechnung ein, wobei man β (für He) sehr gut und α (für Pb) gut abschätzen kann. Zum Plot der einzelnen Resultate wurde ein Programm in Fortran geschrieben. Abb. 43, Abb. 44 und Abb. 45 geben einige Ergebnisse wieder. In Abb. 43 und Abb. 44 sind zunächst die radialen Wahrscheinlichkeitsdichten für die verwendeten Wellenfunktionen Ψ (He 1s) bzw. Ψ (Pb5d) dargestellt und können mit dem nach einer self-consistent-field Hartree-Fock-Slater-Rechnung erzielten Resultat verglichen werden. (aus "atomic structure calculations" Herman/Skillman /57/). Als effektive Kernladungszahlen wurden Z_{eff} (Pb) = 3.9 und Z_{eff} (He) = 1.7 eingesetzt.

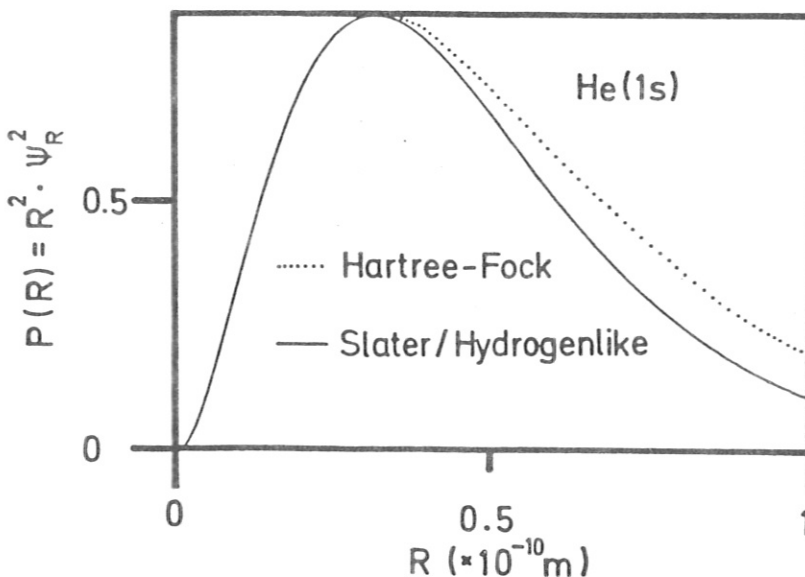


Abb.43

Die normierte radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $P(R)$ für He1s nach /57/ (Hartree-Fock), nach dem Slater- und nach dem Wasserstoffansatz.

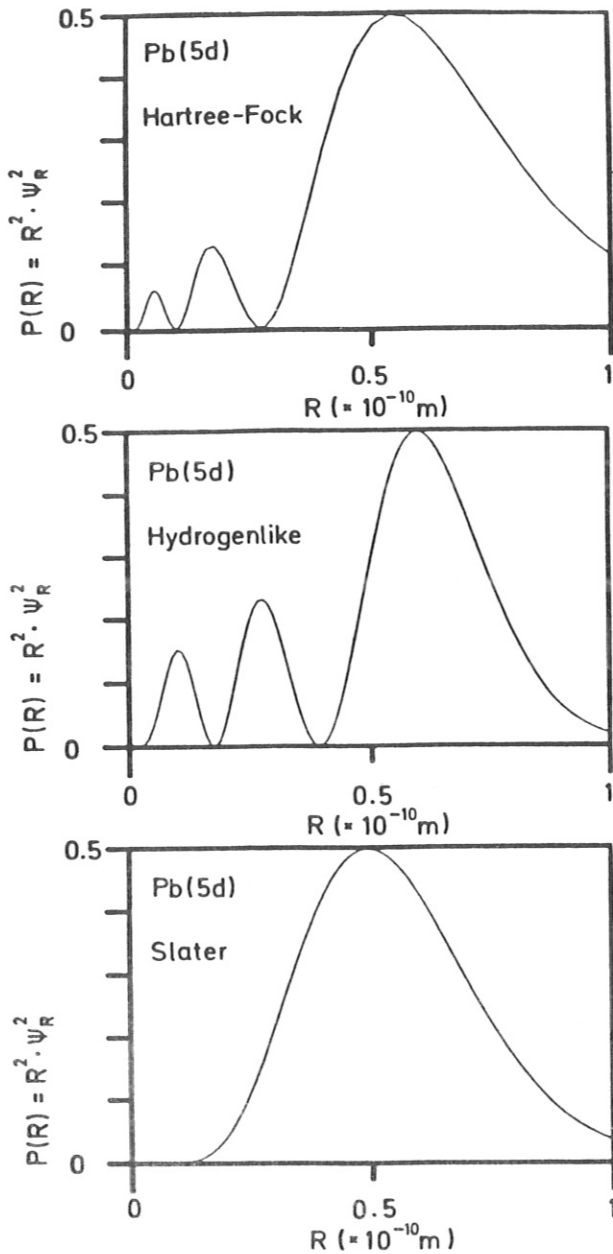


Abb. 44

Die normierte radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $P(R)$ für $Pb5d$ nach /57/ (Hartree-Fock), nach dem Wasserstoff- und nach dem Slateransatz.

Zur ersten Überprüfung der Rechnung können die Resultate für den Überlapp S herangezogen werden (Abb. 45). S muß positiv, aber kleiner 1 sein und für großes R gegen Null gehen.

Das endgültige Ergebnis für $\Delta E(R)$ nach 5.7 für Slater-Funktionen und für angepaßte Wasserstoff-Wellenfunktionen zeigt Abb. 45.

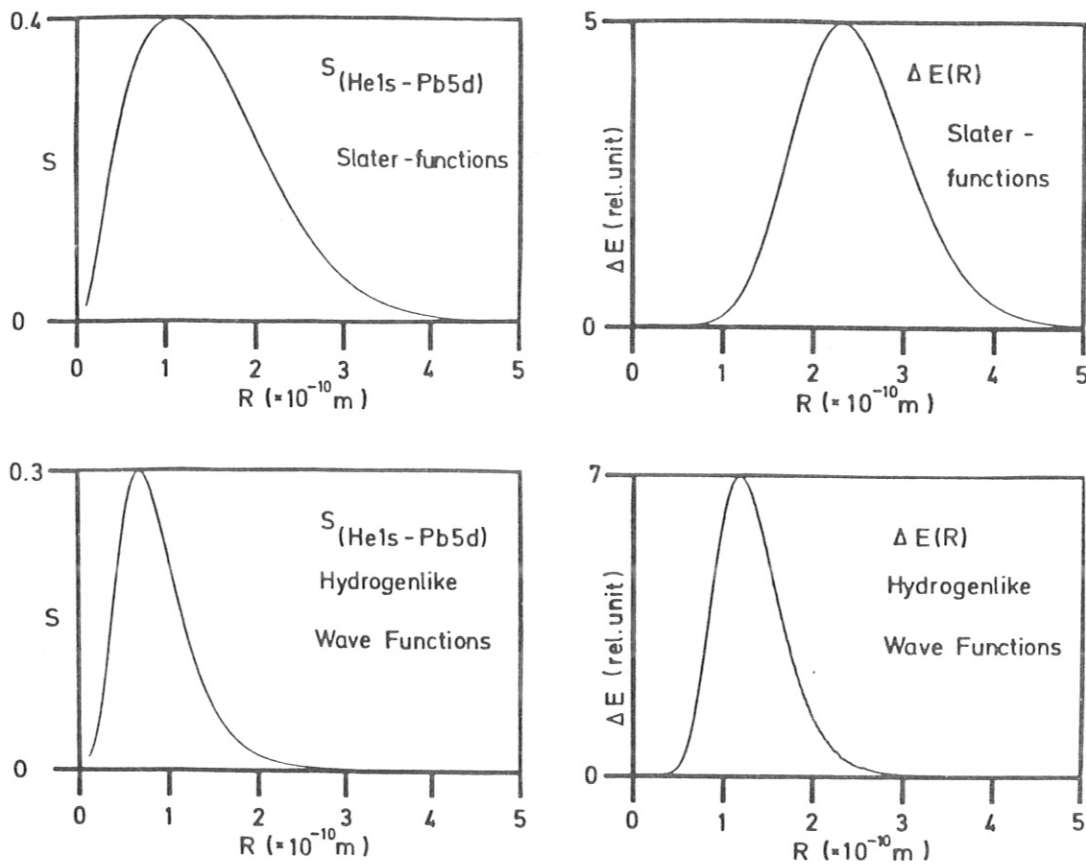


Abb. 45 linke Hälfte: das Überlappintegral nach dem Slateransatz (vergl. 5.11) und nach den angepassten Wasserstoff-Wellenfunktionen (vergl. 5.19) als Funktion des Abstandes zwischen Projektil- und Targetkern.

rechte Hälfte: die Austauschenergie $\Delta E(R)$ zwischen He1s und Pb 5d als Funktion des Kernabstandes. Der absolute Wert von ΔE im Maximum liegt zwischen 8 und 9 eV / 7 /.

Mit diesem Ergebnis und mit der Kenntnis der klassischen Trajektorie (vergl. S. 8) erhält man über 5.2 den Frequenzterm A_3 , der den direkten Vergleich mit den experimentellen Daten ermöglicht.

Dieser Vergleich wird im nächsten Abschnitt vorgestellt und diskutiert.

6. Interpretation

Einleitend seien die experimentellen Befunde aus dieser Arbeit, deren Interpretation Ziel dieses Abschnitts ist, nochmals kurz zusammengefaßt. Um das experimentelle Bild vom oszillatorischen Verlauf des Ladungsaustausches bei der niederenergetischen Oberflächenstreuung abzurunden, folgen einige Ergebnisse aus anderen Arbeiten.

Diese Arbeit:

- a) Die Oszillationen für Y_{Pb}^+ sind sowohl bei der Streuung am massiven Pb-Target als auch bei niedriger Pb-Bedeckung (bis $\approx 1/20$ m.l.) auf verschiedenen Substraten und am Pb-Atomstrahl zu finden. (Vergl. 4.1 und 4.2) .
- b) Die charakteristische Frequenz der Oszillationen ist beim Atomstrahlexperiment größer als beim Experiment am massiven Pb-Target. Die Frequenz für niedrige Pb-Bedeckungen liegt zwischen diesen beiden Werten, zunehmend mit fallendem Pb-Bedeckungsgrad. Dies bedeutet, daß die Frequenz umso größer ist, je "isolierter" die Pb-Atome auf der Substratoberfläche adsorbiert sind.
- c) Die empirische Beziehung 2.1.2. (S. 8) $Y_{\text{Pb}}^+ \sim N_{\text{Pb}}$ wurde überprüft und kann für Pb-Bedeckungen von 1 m.l. bis $1/20$ m.l. bestätigt werden. (Vergl. Abb. 19, S. 44). Eine Abschätzung zeigt (S. 28 und S. 51), daß 2.1.2. auch für den Pb-Atomstrahl gilt, wenn man N_{Pb} mit der Zahl der Streuzentren im Streuvolumen deutet und sich auf die Maxima beschränkt.
- d) Die Amplitude der Oszillationen am Atomstrahl ist kleiner als am massiven Pb-Target. Die Minima sind um 25 % angehoben. (Abb. 23, S. 50). Die ISS-Peakform ist gegenüber dem massiven Pb-Target auf der

- niederenergetischen Seite verbreitert (25 %-Effekt, Abb. 21, S.48). Dieser Effekt nimmt mit wachsender Projektilenergie (E_0) ab. (Abb. 22, S. 49).
- e) Dampft man Blei auf Substrate mit unterschiedlicher Bandstruktur, ändert sich das oszillatorische Verhalten von Y_{Pb}^+ nur wenig (vergl. 4.3).
- f) Ein neuer Effekt ist, daß auch der Substratpeak (Y^+ Substrat) bei Pb-Bedeckungen < 1 m.l. deutliche Oszillationen zeigt. Dieser Effekt wird von der Art des Substrats beeinflußt und ist stark vom Pb-Bedeckungsgrad abhängig. (Frequenz und Amplitude).

Andere Arbeiten:

- g) Die Abhängigkeit der Y_{Pb}^+ -Oszillationen vom Einfallswinkel ψ und vom Streuwinkel θ ist am massiven Pb-Target untersucht worden. Der Effekt ist nicht von ψ abhängig. Die experimentellen Ergebnisse für verschiedene Streuwinkel ($20^\circ < \theta < 130^\circ$) lassen sich nach dem im Abschnitt 5 beschriebenen Modell (5.2) S. 74) gut deuten, wenn man die Annahme Projektilgeschwindigkeit $V = \text{const}$ fallen läßt und $V(R)$ für die spezielle Trajektorie klassisch berechnet / 7 /.
- h) Auch an Targets aus verschiedenen chemischen Pb-Verbindungen ($Pb Cl_2$, $Pb (NO_3)_2$) wurden die Y_{Pb}^+ -Oszillationen gefunden / 35 /. Die charakteristische Frequenz ändert sich leicht.

Den Frequenzterm gewinnt man anschaulich aus den experimentellen Werten, wenn man $\omega = A_3/R_0$ einführt. R_0 sei der minimale Kernabstand, d.h. der klassische Umkehrpunkt bei der Streuung von ${}^4\text{He}^+$ an Pb. Aus 5.2 wird dann:

$$(6.1.1) \quad P_i = A_1 + A_2 \cdot \sin^2 (\omega \cdot R_0)$$

Mit Hilfe der Funktionen $R_0(E_0)$ und $d\sigma/d\Omega$ (E_0), die klassisch berechnet wurden, (vergl. Abb. 46) lassen sich die experimentellen Ergebnisse für $Y_{\text{Pb}}^+(E_0)$ (vergl. 4.1 und 4.2) in ein

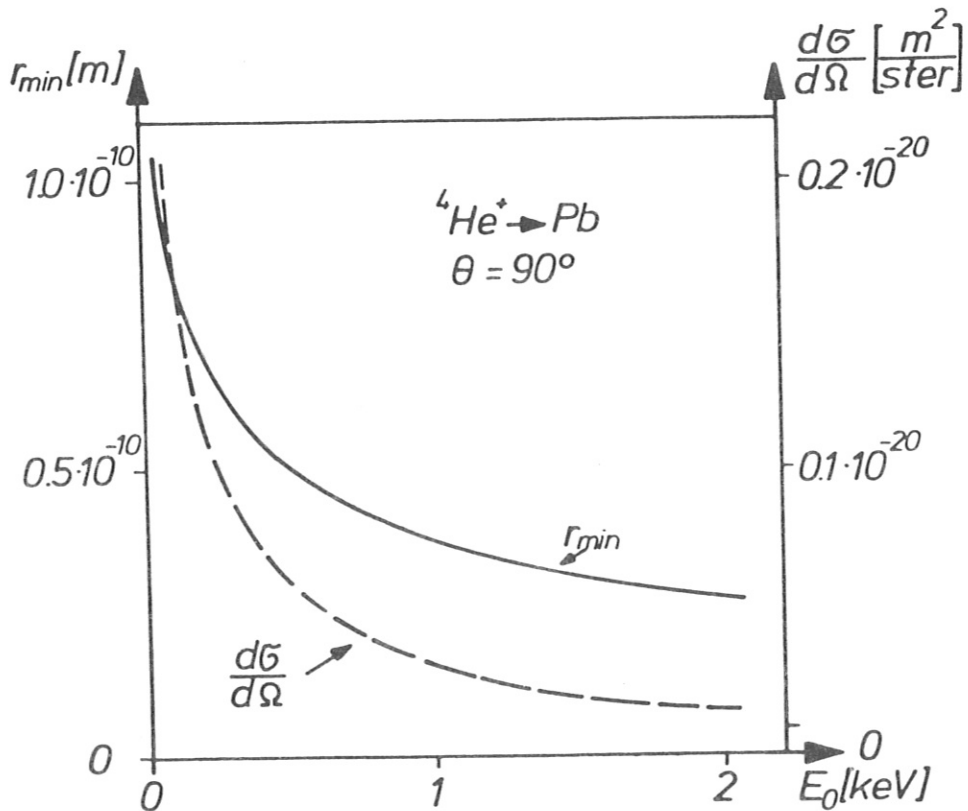


Abb. 46 Die Ergebnisse des Computerprogramms, in dem der binäre Stoß ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$ klassisch mit dem Thomas-Fermi-Molière-Potential /18/ berechnet wurde. Der minimale Kernabstand beim "Umkehrpunkt" und der differentielle Wirkungsquerschnitt für $\theta = 90^\circ$ sind als Funktion der Projektilenergie E_0 dargestellt.

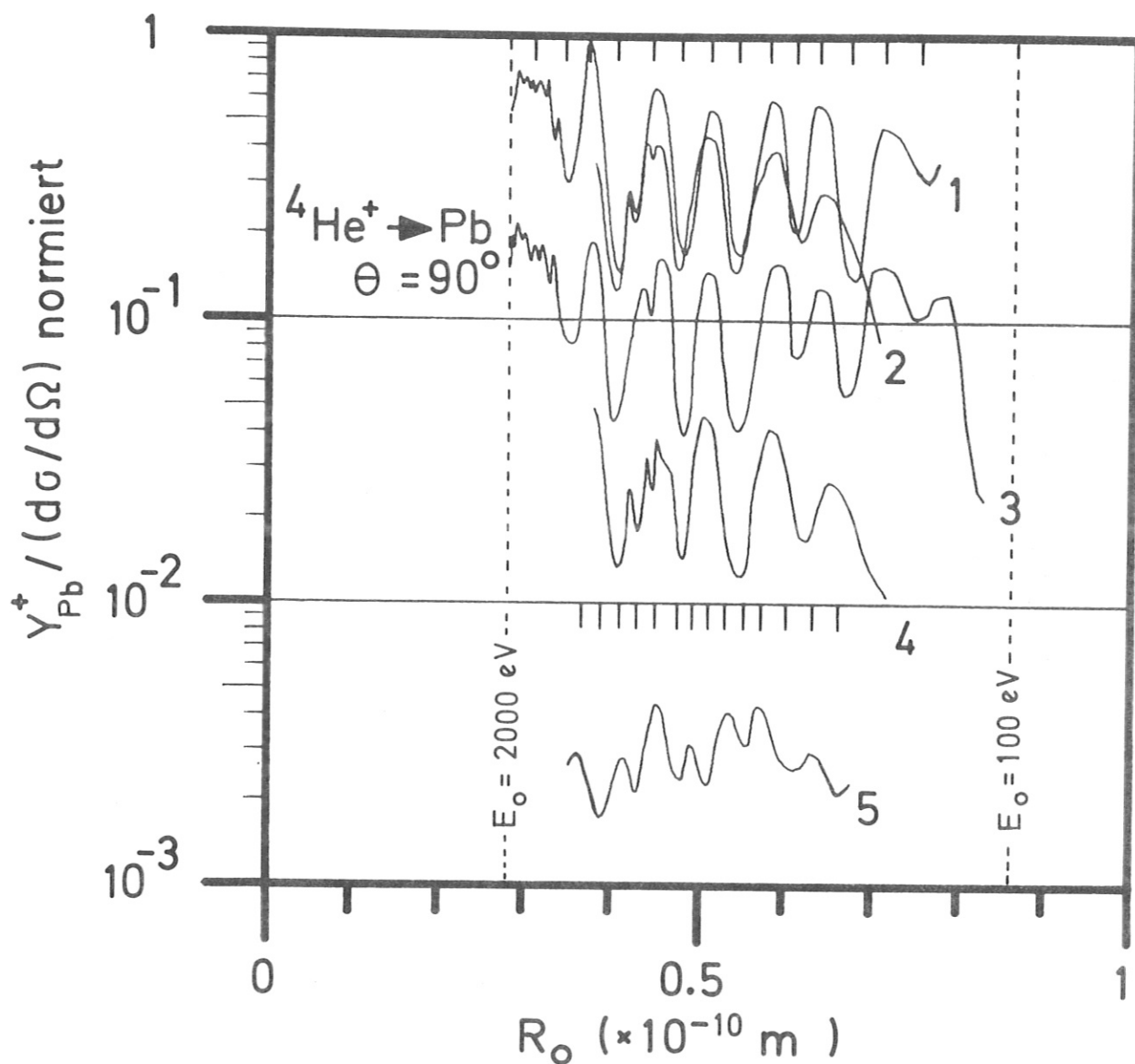


Abb. 47

Die Ionenausbeute (Y_{Pb}^+) normalisiert durch den differentiellen Streuquerschnitt und über R_0 , dem Kernabstand im Umkehrpunkt, aufgetragen.

- 1 ... massives Pb
- 2 ... 0.75 m.l. Pb auf Ni
- 3 ... 0.33 m.l. Pb auf Ni
- 4 ... 0.1 m.l. Pb auf Ni
- 5 ... Pb-Atomstrahl

Der über den elastischen binären Stoß experimentell zugängliche Bereich ($100 \text{ eV} < E_0 < 2000 \text{ eV}$) ist gestrichelt eingezeichnet.

Diese Positionen, von rechts nach links durchnummeriert und über R_0 aufgetragen, liegen in Abb. 48 sehr gut auf Geraden, deren Steigung ein Maß für die Frequenz ist.

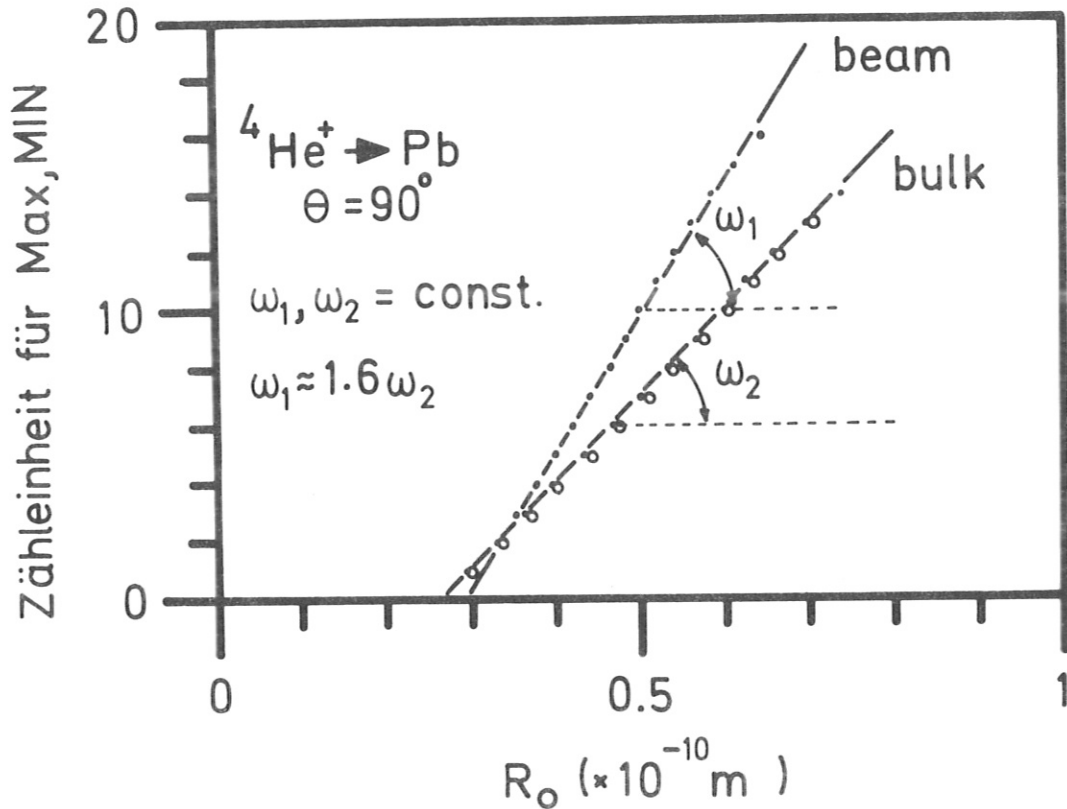


Abb. 48 Die Auswertung des Frequenzterms ω nach Abb. 47 als Funktion von R_0 für das massive Pb-Target (bulk) und für den Pb-Atomstrahl (beam) mit ${}^4\text{He}^+$ als Projektilion. Die Resultate für die ${}^3\text{He}^+$ -Streuung am massiven Pb (vergl. Abb. 51) sind durch Kreise angedeutet. Für die ${}^3\text{He}^+$ und die ${}^4\text{He}^+$ -Streuung erhält man die selbe Frequenz ω_2 .

Der experimentelle Befund ist, daß die Frequenz ω_1 (Atomstrahl "beam") und ω_2 (massives Pb-Target "bulk") im Bereich $0.35 \cdot 10^{-10} \text{ m} < R_0 < 0.75 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ konstante Werte haben und daß $\omega_1 = 1.6 \cdot \omega_2$ gilt. Die Frequenzen für Pb-Bedeckungen $< 1 \text{ m.l.}$ auf verschiedenen Substraten liegen zwischen diesen beiden Werten, zunehmend bei fallendem Pb-Bedeckungsgrad.

Die theoretischen Ergebnisse nach Abschnitt 5 für $\omega(R_0)$ sind in Abb. 49 für Slater-Funktionen und in Abb. 50 für angepaßte Wasserstoff-Funktionen wiedergegeben. Für die "beam"-Rechnung wurde die effektive Kernladungszahl, für Pb ($Z_{\text{eff Pb}} = 3.9$) eingesetzt. In dem vom Experiment zugänglichen R_0 -Bereich, der durch den klassischen Zweierstoß vorgegeben ist, erhält man auch nach der Theorie einen nahezu konstanten Wert für ω .

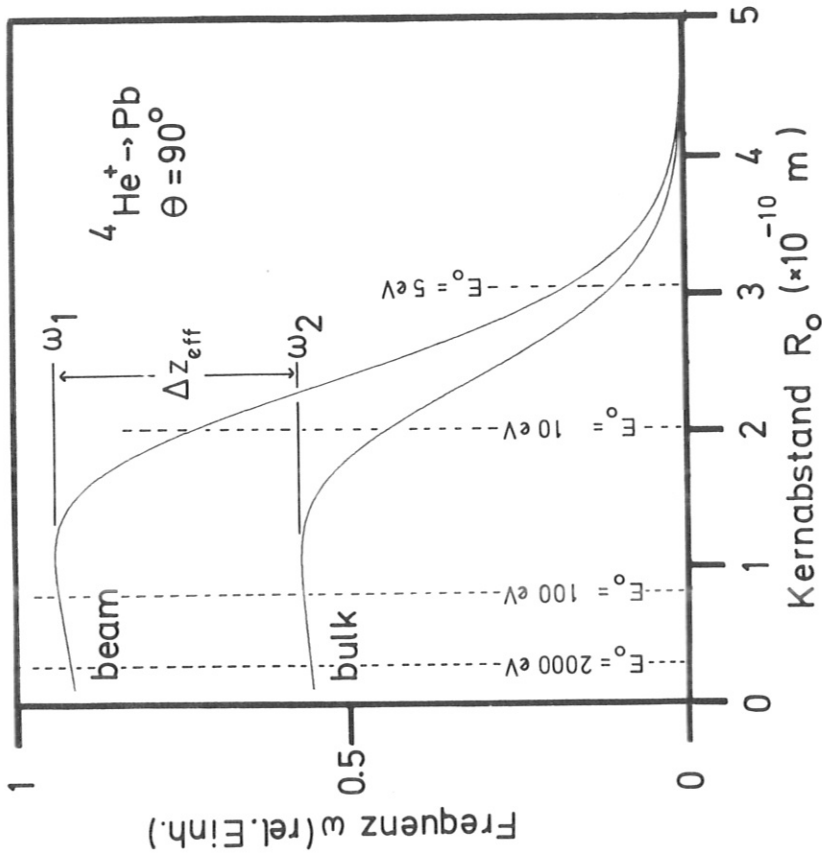


Abb. 49 Der Frequenzterm für massives Pb (ω_2) und für den Pb-Atomstrahl (ω_1) nach dem theoretischen Modell in Abschnitt 5 mit He(1s) und Pb(5d)-Wellenfunktionen, die nach Slater aufgebaut wurden.

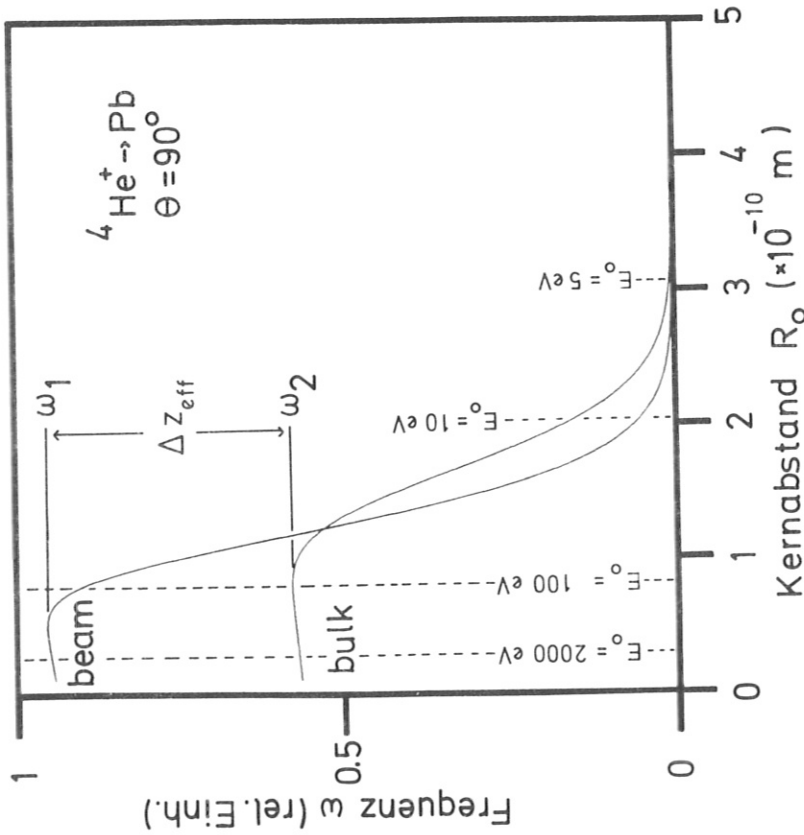


Abb. 50 Der Frequenzterm für massives Pb (ω_2) und für den Pb-Atomstrahl (ω_1) nach dem theoretischen Modell in Abschnitt 5, wobei angepaßte Wasserstoff-Wellenfunktionen für He(1s) und Pb(5d) verwendet wurden.

Im Bereich $1 \cdot 10^{-10} \text{ m} < R_0 < 3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ ändert sich die Frequenz drastisch und strebt gegen Null. In diesem Bereich sind Messungen mittels Zweierstoß für ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$ mit $\theta = 90^\circ$ nicht mehr möglich, da bei der erforderlichen Projektilenergie ($E_0 < 10 \text{ eV}$) fast alle Ionen am Target neutralisiert werden und der energieaufgelöste Nachweis nicht mehr gelingt. Wie in 6.3 noch gezeigt wird, läßt sich die Frequenz im Bereich $R_0 > 10^{-10} \text{ m}$ experimentell durch gezielte Mehrfachstreuung ermitteln.

Das theoretische Modell enthält nur einen Parameter ($Z_{\text{eff Pb}}$), dessen Variation physikalisch nur in einem engen Bereich sinnvoll ist. Für $Z_{\text{eff Pb}} = 3.74$ findet man den experimentellen Befund $\omega_1 = 1.6 \cdot \omega_2$ erfüllt (vergl. Abb. 49 und Abb. 50). Eine geringere effektive Kernladung bedeutet eine größere Abschirmung der Kernladung durch die Elektronen und führt nach dem theoretischen Modell zu einer kleineren charakteristischen Frequenz ω_2 beim massiven Pb-Target (bulk). Die Folgerung $Z_{\text{eff}} (\text{Pb-bulk}) < Z_{\text{eff}} (\text{Pb-beam})$ ist plausibel, da bei der Oberflächenstreuung auch die Elektronen der Nachbaratome wesentlich zur Abschirmung des Streuzentrums beitragen /58/.

Über den einen Parameter (Z_{eff}) bietet die Theorie den Zugang zum qualitativen Verständnis des Frequenzterms A_3 und der unterschiedlichen experimentellen Befunde in Punkt a, und b auf S.90

Auch die Ergebnisse unter Punkt e und h lassen sich durch den Einfluß der speziellen elektronischen Struktur der Oberfläche auf die Größe Z_{eff} des Streuzentrums deuten.

Allerdings gilt das theoretische Modell eines Pb-He-Quasimoleküls und das Verfahren nach Heitler/London nur bis

zu einem gewissen minimalen Abstand der Kerne, entsprechend einem maximalen Wert der Projektilenergie E_0 für jeden Streuwinkel Θ .

Experimentelle Hinweise für das Zusammenbrechen dieses Modells kann man in den zusätzlichen feinen Strukturen der Oszillationen bei $E_0 > 1500$ eV für $\Theta = 90^\circ$ vermuten. (Vergl. Abb. 17, 18 S.40 und Abb. 47 S. 93). Demnach wäre $R_0 \approx 0.3 \cdot 10^{-10}$ m (für $\Theta = 90^\circ$) als untere Gültigkeitsgrenze dieses Modells anzusehen.

In einer ähnlichen Darstellung wie in Abb. 47 wurden die Ergebnisse für die Streuung von ${}^3\text{He}^+$ - und ${}^4\text{He}^+$ -Projektilen an einem Ni-Target mit $1/3$ m.l. Pb-Bedeckung ausgewertet (Vergl. Abb. 40, S.69) und einander gegenübergestellt. (Abb. 51). Analog Abb. 46, S. 92 wurden die Funktionen $R_0(E_0)$ und $d\sigma/d\Omega(R_0)$ für ${}^3\text{He}^+ \longrightarrow \text{Pb}$ mit dem Programm für den elastischen binären Stoß berechnet. Im Rahmen der Genauigkeit der Auswertemethode stimmt die charakteristische Frequenz für beide Fälle (${}^3\text{He}^+$ und ${}^4\text{He}^+$) überein. (Vergl. Abb. 48, S. 94) Bei niedrigen Primärenergien ist eine Phasenverschiebung um $\pi/2$ zu beobachten, die mit der in Abschnitt 5 vorgestellten Theorie allein nicht gedeutet werden kann.

Trotzdem kann der Vergleich in Abb. 51 bzw. Abb. 48 als Argument für die Gültigkeit der klassischen Annahme innerhalb des theoretischen Modells gewertet werden.

Nach bisheriger Interpretation ist die Tatsache, daß bei der niederenergetischen Ionenstreuung an Festkörperoberflächen deutliche Oszillationen im Ladungsaustausch auftreten können eine Konsequenz des quasi-resonanten Elektronentransfers, wobei der atomare Charakter bei der Wechselwirkung Ion-Festkörperoberfläche deutlich wird.

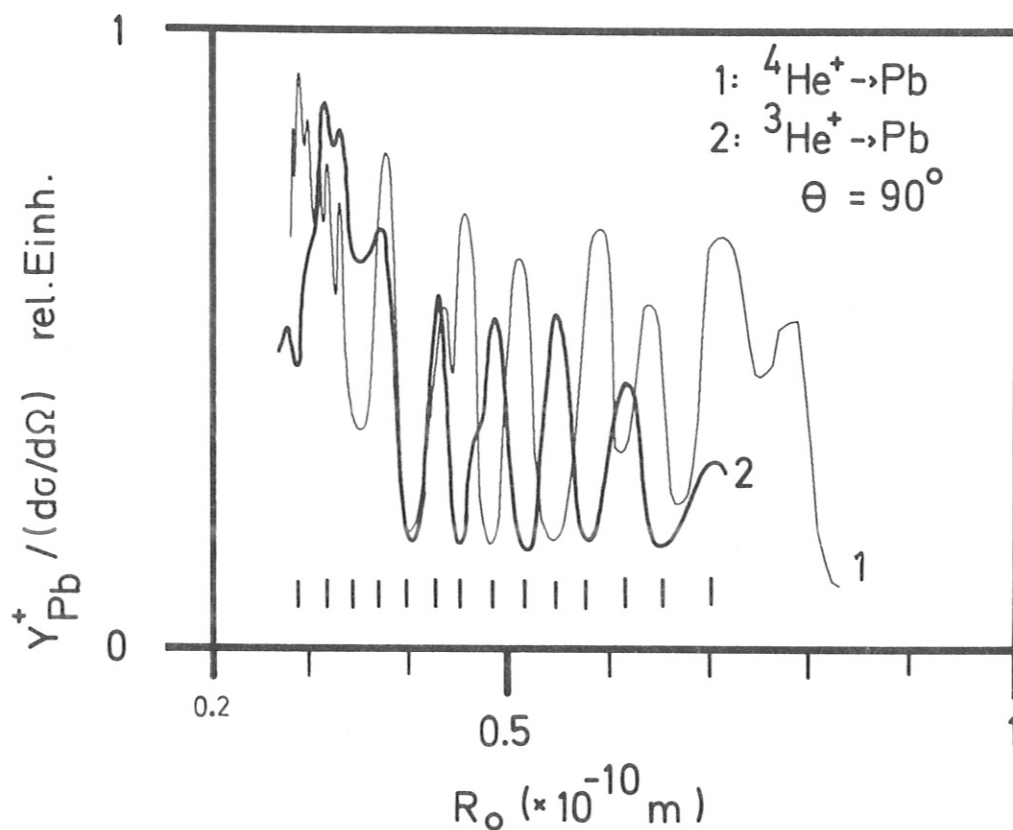


Abb. 51 Die Ionenausbeute (Y_{Pb}^+) normalisiert durch den differentiellen Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ und über R_0 , dem Kernabstand im Umkehrpunkt aufgetragen.

- 1 ... Streuung mit ${}^4\text{He}^+$ -Projektilionen
 2 ... Streuung mit ${}^3\text{He}^+$ -Projektilionen

6.2 Die Funktionen A_1 und A_2 (Auger-Effekt)

Über den "festkörperspezifischen" Beitrag zur Neutralisation, den man nach 5.1, S.74 in den Funktionen A_1 oder A_2 vermutet, kann mit dem atomaren Modell nach Abschnitt 5 keine Information gewonnen werden.

Experimentelle /26/ und theoretische / 3 / Ergebnisse über den Einfluß der Auger-Neutralisation bei der niederenergetischen Ionenstreuung an Oberflächen haben jedoch schon andere Autoren veröffentlicht. Deshalb liegt es nahe, auch hier in den experimentellen Resultaten nach Hinweisen auf die Auger-Neutralisation zu suchen und sie gegebenenfalls den Funktionen A_1 oder A_2 zuzuordnen.

Ein charakteristisches Merkmal der Auger-Neutralisation ist die Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit (vergl. 2.2.1, S.12). Abb. 52 zeigt einige experimentelle Resultate in einer passenden halblogarithmischen Darstellung, wie sie bereits von anderen Autoren (vergl. Abb. 4, S. 12) gewählt wurde. In dieser Darstellung wird der Auger-Effekt in der idealisierten Geraden deutlich.

Nach der Gleichung 5.1 ist die obere Führungskurve (O) der Oszillationen durch $O = A_1 + A_2$ definiert ($\sin^2(A_3) = 1$), während die untere Führungskurve U identisch mit A_1 ist ($\sin^2(A_3) = 0$). Aus der Lage der Minima (Abb. 52) kann man deshalb direkt den ungefähren Verlauf der Funktion A_1 entnehmen. Durch Subtraktion ($O - A_1$) erhält man die Funktion A_2 (Abb. 53), die sich durch eine Gerade idealisieren läßt. Grobe Abweichungen von dieser Geraden treten erst bei Experimenten mit geringer Pb-Bedeckung auf dem Substrat (4) und beim Atomstrahl auf (5).

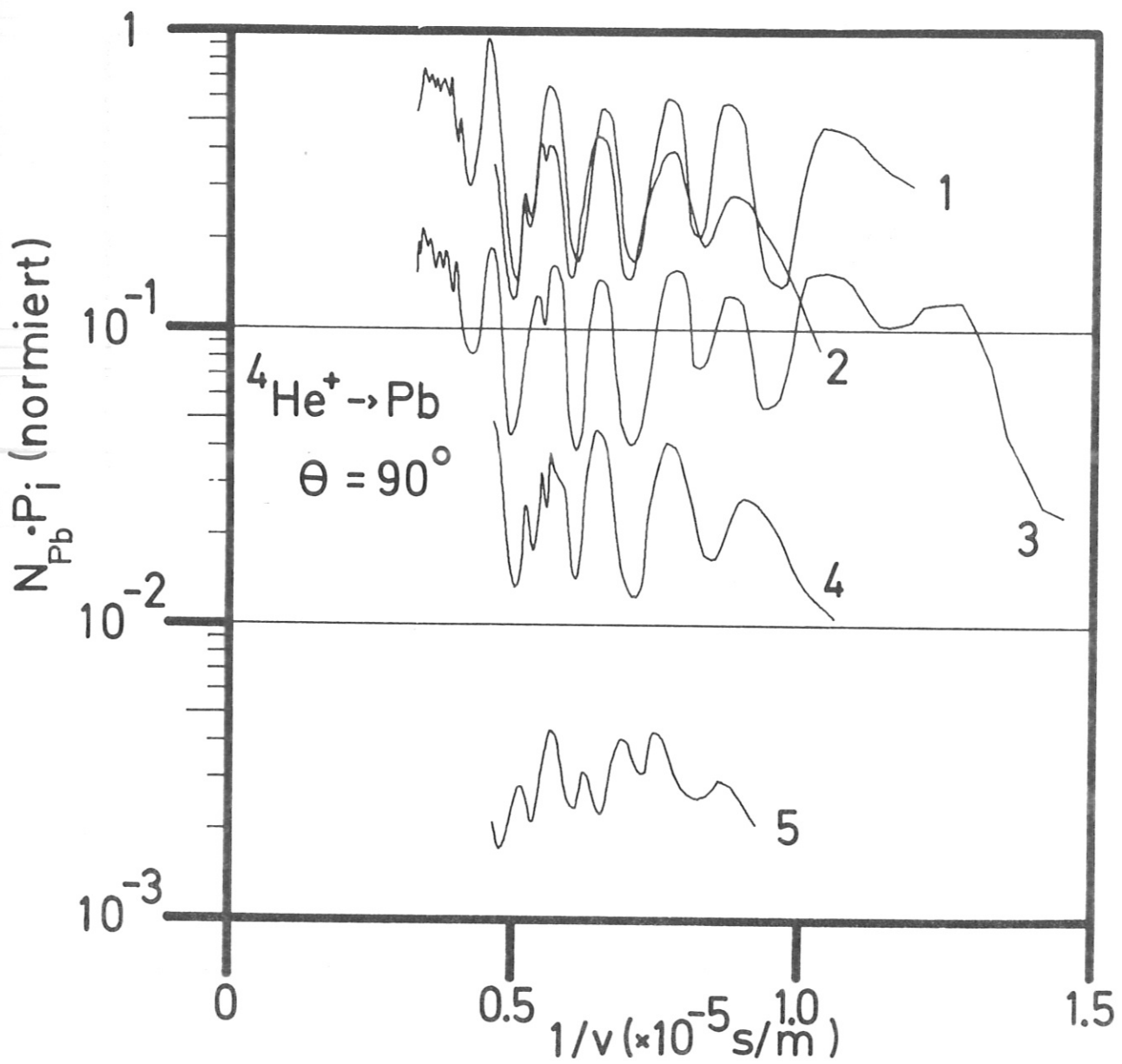


Abb. 52

Die Resultate
 wie in Abb. 47
 jedoch über $1/v$
 aufgetragen
 (v = Projektil-
 geschwindigkeit
 vor dem Stoß)

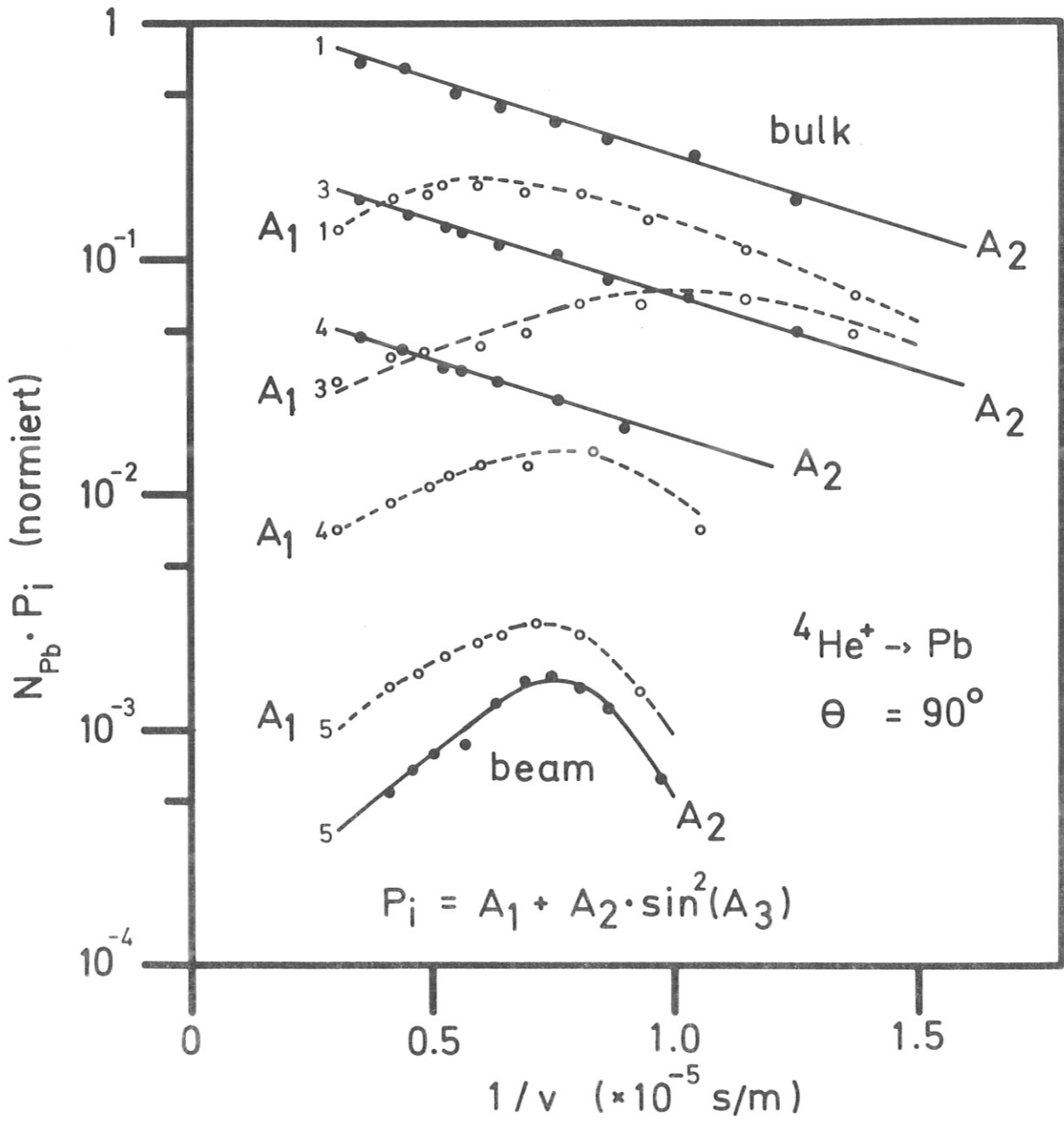


Abb. 53 Die Funktionen A_1 und A_2 über $1/v$ aufgetragen.

- 1 ... massives Pb (bulk)
- 2 ... 0.75 m.l. Pb auf Ni
- 3 ... 0.33 m.l. Pb auf Ni
- 4 ... 0.1 m.l. Pb auf Ni
- 5 ... Pb-Atomstrahl (beam)

Damit ist die Funktion A_2 als Beitrag der Auger-Neutralisation zum Ladungsaustausch zu interpretieren.

$$(6.2.1) \quad A_2 = a_1 \cdot \exp(-a_2/V)$$

Die Konstante a_2 erhält man experimentell aus der Geradensteigung ($a_2 = 2.33 \cdot 10^5$ m/s) und kann sie mit den Werten aus anderen Arbeiten vergleichen. (z. B. /26/, Abb. 4 S. 12 mit $a_2 = 3.3 \cdot 10^5$ m/s)

Aus den Meßergebnissen kann man entnehmen (vergl. Abb. 19, S. 44 und Abb. 52), daß a_1 mit N_{Pb} , der Anzahl der Pb-Atome pro cm^2 auf dem Substrat, identisch ist.

Beim Atomstrahlexperiment zeigt aber A_2 ein grundsätzlich anderes Verhalten. Hier wächst A_2 mit größer werdendem $1/V$, d.h. nimmt mit wachsender Projektilenergie E_0 ab. Ein Trend, der auch in der unterschiedlichen ISS-Peakform auf der inelastischen Seite beobachtet wurde (vergl. Abb. 22, S. 49). Die kleineren Amplituden der Oszillationen am Atomstrahl, verglichen mit den Festkörpertarget-Experimenten, sind folglich auf Unterschiede bei der Auger-Neutralisation (A_2) zurückzuführen.

Zur Interpretation von A_1 lassen sich nur Vermutungen anstellen:

Die Erkenntnis, daß die Frequenz der Oszillationen eine Folge des quasiresonanten Ladungsaustausches zwischen dem Pb(5d) und dem He(1s)-Zustand ist und ihre Amplitude durch die Auger-Neutralisation bestimmt wird, läßt nur

noch ein Weg des Elektronentransfers offen, der 5.1 beeinflussen kann: den bereits auf S. 11 angedeuteten Zweistufenprozeß (Abb. 3).

Bei diesem Prozeß tunnelt ein Elektron aus dem Leitungsband bzw. beim Atomstrahl aus dem 6p (6s)-Niveau in angeregte Zustände des Projektils um schließlich in den Grundzustand zu fallen. Der Elektronenaustausch auf diesem Weg kann sehr viel länger dauern als die beiden anderen direkten Übergänge ins 1s-Niveau ($\tau \approx 10^{-15}$ sec).

In Abb. 3 findet man auch eine anschauliche Deutung von 5.1 auf der Basis einer Wahrscheinlichkeitsbetrachtung:

Ein Ion, das geladen von der Oberfläche rückgestreut wird muß sowohl der Auger-Neutralisation als auch der quasiresonanten Neutralisation (logische "und"-Verknüpfung) entkommen. Die Alternative im Sinn des logischen "oder" ist durch den Zweistufenprozeß (A_1) gegeben.

6.3 Die Oszillationen des Substrats (Y^+ Substrat)

Stellvertretend für die Oszillationen Y^+ Substrat die an allen Substraten (Al, Si, Ni, Cu) gefunden wurden, sei hier der Effekt für das Ni-Substrat diskutiert, bei dem sich die Meßergebnisse am besten reproduzieren ließen.

Die beobachtete empfindliche Abhängigkeit der Frequenz vom Pb-Bedeckungsgrad und die Aussagen des theoretischen Modells (Abb. 49 und Abb. 50) über die starke Frequenzänderung bei $1 \cdot 10^{-10} \text{ m} < R_0 < 3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ führen zu der Vermutung, daß die Oszillationen Y_{Ni}^+ durch Mehr-

fachstreuung (starke Streuung am Ni und darauffolgende schwache Streuung am adsorbierten Pb-Atom) verursacht werden. In Abb. 54 sind die Verhältnisse bei der Einfach- und bei der Mehrfachstreuung angedeutet. Das Maximum des ISS-Ni-Peaks (Y_{Ni}^+) liegt bei $E_r/E_o = 0.872$, dem Wert für den elastischen Zweierstoß nach 2.1.1 S. 7 ($\theta = 90^\circ$). Zu erörtern bleibt, ob auch Ereignisse nach einer Mehrfachstreuung in dieses Maximum fallen können, wobei die Energiebedingung $E_r/E_o = 0.872 \pm 0.015$ $\theta = 90^\circ \pm 1^\circ$ (Winkelauflösung des Spektrometers) erfüllt sein muß.

Ein Programm zur Lösung des 2-dimensionalen Problems wurde geschrieben, das Teile des Programms Marlowe /19/ enthält.

Innerhalb des schraffierten Bereiches (Abb. 55) gibt es keine Lösung, die beide Bedingungen erfüllt.

Es gibt aber Positionen des adsorbierten Pb-Atoms, z.B. bei Position 1 und im rechten Gebiet, für die bei bestimmten Stoßparametern ρ_1 ($He^+ \rightarrow Ni$) für jede Energie $200 \text{ eV} < E_o < 1500 \text{ eV}$ beide Bedingungen erfüllt sind. Der minimale Kernabstand R_o (Umkehrpunkt) bei der zweiten Streuung am Pb für diese speziellen Lagen wird ebenfalls mit dem Programm berechnet und ist in Abb. 55 eingetragen. Bei fallendem Pb-Bedeckungsgrad auf dem Substrat werden sich die Positionen der adsorbierten Pb-Atome relativ zum 1. Streuzentrum (Ni) im Mittel in Richtung des Pfeiles (Abb. 54) verschoben. Dadurch wächst R_o und die Frequenz wird nach Abb. 49 und Abb. 50 kleiner. Die Wahrscheinlichkeit für solch eine spezielle Mehrfachstreuung sinkt jedoch mit dem Pb-Bedeckungsgrad. Deshalb nehmen auch die Amplituden der Oszillationen Y_{Ni}^+ bei fallender Pb-Bedeckung ab und Y_{Ni}^+ geht in die Kurve für ein reines Ni-Substrat über.

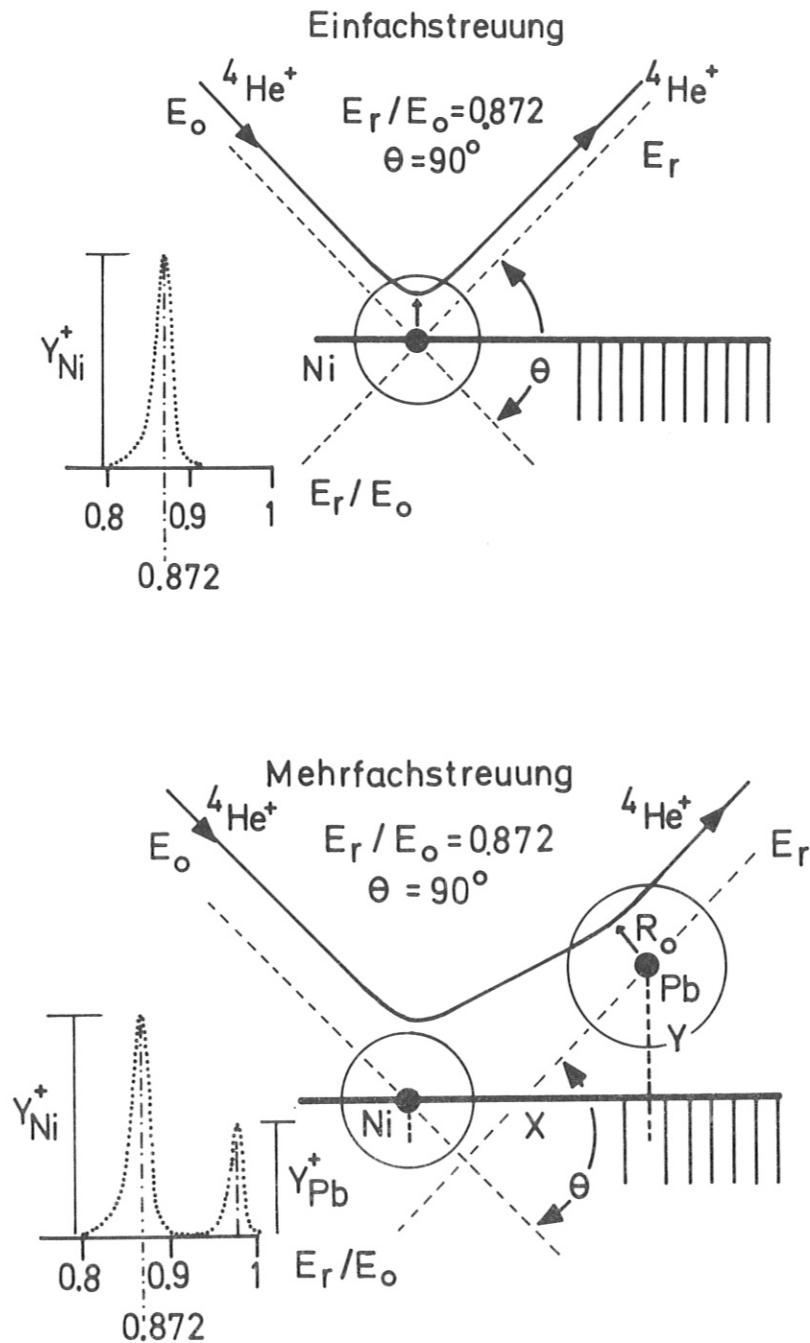


Abb. 54 Schematische Darstellung der Einfach- und der Mehrfachstreuung. Mit einer zweidimensionalen Computersimulation wurden die relativen Positionen (X, Y) des adsorbierten Pb-Atoms gesucht, bei denen sowohl die Energiebedingung ($E_r/E_0 = 0.872 \pm 0.015$) als auch die Streubedingung ($\theta = 90^\circ \pm 1^\circ$) bei der Mehrfachstreuung ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Ni} / \text{Pb}$ erfüllt wird.

Energiebedingung: $E_r / E_o = 0.872 \pm 0.015$

Streubedingung: $\theta = 90^\circ \pm 1^\circ$

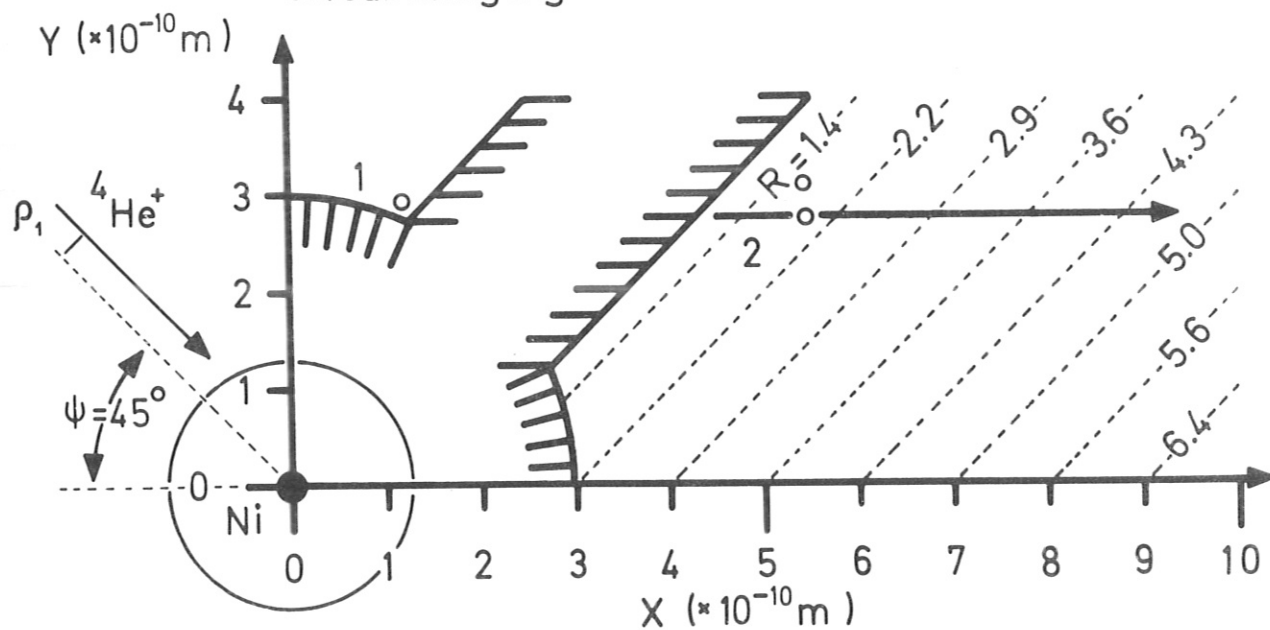
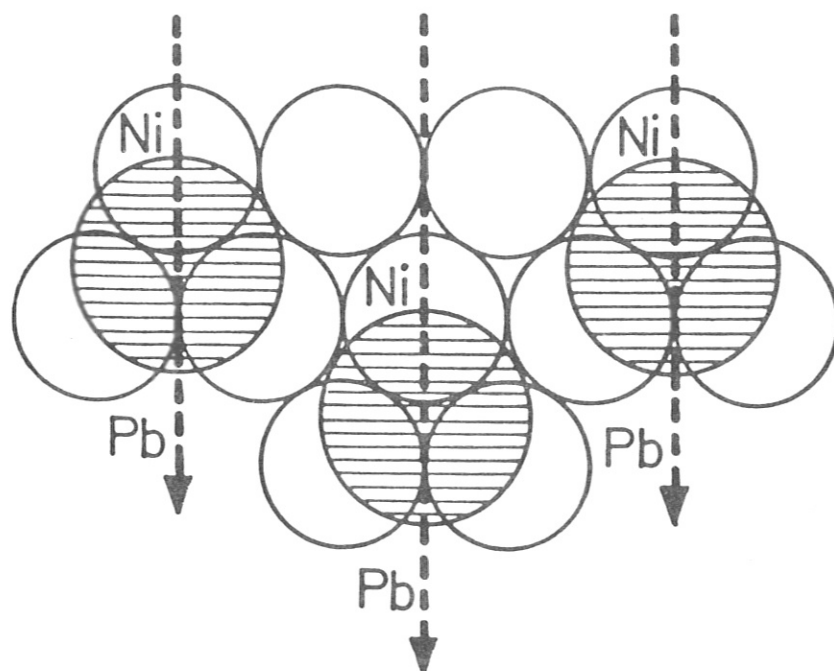


Abb. 55 Das Ergebnis des Simulationsprogramms. Im rechten Gebiet sind die Kernabstände Projektil-Pb-Atom (R_o) beim klassischen Umkehrpunkt für die zweite Streuung am Pb-Atom angegeben. Die Maßeinheit ist 10^{-10} m.

Nach Abb. 25 , S. 57 für ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Pb}$ auf Ni folgt Y_{Ni}^+ ungefähr der Oszillation von Y_{Pb}^+ , d.h. beide Frequenzen sind gleich. Die quantitative Messung der Pb-Belegung mit ISS nach Abb. 24 , S. 55 ergab einen Wert entsprechend 1/2 m.l. Diese Situation ist in Abb. 56 angedeutet, in der die Streuebenen des Projektils durch Pfeile dargestellt sind. Nach Abb. 5 bedeutet dies, daß sich die adsorbierten Pb-Atome in Position 1 relativ zu dem Ni-Atom befinden, an dem die erste Streuung stattfindet.

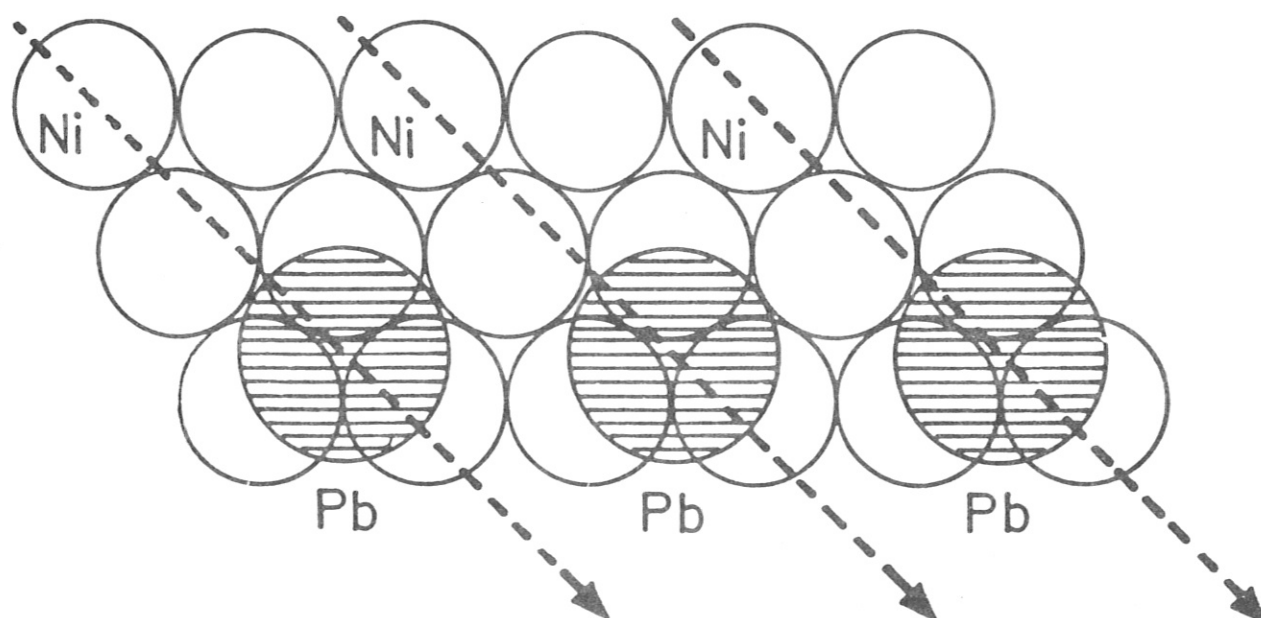
Die Computersimulation ergibt Werte für R_0 , die je nach Primärenergie E_0 des ${}^4\text{He}^+$ -Projektils zwischen $0.5 \cdot 10^{-10}$ m und $0.7 \cdot 10^{-10}$ m liegen. In diesem R_0 -Bereich (vergl. Abb. 49 und Abb. 50) weicht aber die Frequenz noch nicht gegenüber dem Fall ab, wo das Projektil direkt am Pb-Atom streut.

Eine Situation, in der sich beide Frequenzen stark unterscheiden zeigt Abb. 57 und Kurve 3 in Abb. 27 S. 59. Die Pb-Bedeckung betrug ≈ 0.1 m.l. (experimenteller Wert) und die Pb-Atome haben relative Lagen entsprechend der Position 2 in Abb. 55. Hierfür liefert die Computersimulation R_0 -Werte zwischen $1.7 \cdot 10^{-10}$ m und $2.2 \cdot 10^{-10}$ m. Nach den Resultaten des atomaren Modells aber bedeutet dies, daß sich die Frequenz bereits drastisch ändert.



$$\text{Pb-Bedeckung: } \approx \frac{3}{11} \left(\frac{1.75}{1.24} \right)^2 100\% = 54\%$$

Abb. 56 Eine mögliche Situation für die Mehrfachstreuung ${}^4\text{He}^+ \rightarrow \text{Ni}, \text{Pb}$. Die Streuebenen des Projektilions sind gestrichelt gezeichnet. Das adsorbierte Pb-Atom befindet sich in der relativen Position 1 (Abb. 55).



$$\text{Pb-Bedeckung: } \approx \frac{3}{18} \left(\frac{1.75}{1.24} \right)^2 100\% \approx 30\%$$

Abb. 57 Analog Abb. 56. Hier befindet sich das adsorbierte Pb-Atom in der relativen Position 2 (Abb. 55).

7. Zusammenfassung und Ausblick

Vorliegende Arbeit ist ein experimenteller Beitrag zum Verständnis der Prozesse, die zur Neutralisation von niederenergetischen He^+ -Ionen an Festkörperoberflächen führen und die besonders bei Pb-Systemen deutliche Oszillationen in der Ionenausbeute Y_{Pb}^+ bewirken.

Durch den Vergleich der Ergebnisse für verschiedene Pb-Targetsysteme (4.1 und 4.3) und für einen Pb-Atomstrahl (4.2) ist es erstmals gelungen, den atomaren Charakter des Ladungsaustausches bei der Streuung am Festkörper experimentell zu zeigen /59/.

Mit einem theoretischen Modell, in dem die binäre Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetatom durch die Bildung eines Quasimoleküls beschrieben wird (Abschnitt 5), können die experimentellen Resultate eingehender interpretiert werden. Die Frequenz der Oszillationen, die demnach durch den quasiresonanten Elektronentransfer zwischen dem $\text{Pb}(5d)$ und dem $\text{He}(1s)$ -Zustand bestimmt ist, wurde auf einem "parameterfreien" analytischen Weg berechnet. Zusammen mit einer Abschätzung von $Z_{\text{eff}}(\text{Pb})$, der effektiven Kernladungszahl des Pb-Atoms, liefert das theoretische Modell Resultate, die mit den experimentellen Ergebnissen (Pb-Atomstrahl-massives Pb-Target: 6.1) übereinstimmen. Darüber hinaus sind Aussagen über den Frequenzverlauf der Oszillationen im Projektilenergiebereich $E_0 < 100 \text{ eV}$ möglich, der in dieser Arbeit experimentell nicht zugänglich war. Die "festkörperspezifischen" Einflüsse auf die Frequenz der Oszillationen sind gering, z.B. bei unterschiedlicher Bandstruktur der Substrate (4.3) und bei Targets aus ver-

schiedenen chemischen Pb-Verbindungen /35/, können aber über Z_{eff} (Pb) im Rahmen des theoretischen Modells qualitativ richtig verstanden werden.

Auf die Amplitude der Oszillationen hingegen wirkt die "festkörperspezifische" Auger-Neutralisation maßgeblich. Das Modell nach Hagstrum / 3 / beschreibt ihren Verlauf bei der Streuung am Festkörper richtig. Ein ganz anderes Ergebnis hierfür erbrachte aber das Experiment am Pb-Atomstrahl (6.2).

Auch weist der Vergleich der Energieverteilung in den Rückstreuenspektren zwischen Festkörperstreuung und Streuung am Atomstrahl auf eine starke Wechselwirkung des Projektils mit der Bandstruktur der Oberfläche hin (4.2).

Als experimenteller Beitrag zum Problem der quantitativen Oberflächenanalyse mit ISS an einem Substrat-Adsorbatsystem, bei dem die Effekte des Ladungsaustauschs zwischen Target und Projektilion eine komplizierte Rolle spielen, wurde der Vergleich mit der RBS-Methode an verschiedenen Pb-Ni-Targets durchgeführt. Der Vergleich zeigt, daß mit ISS eine quantitative Analyse für Pb-Bedeckungen unterhalb einer Atomlage möglich ist (4.1).

Die Oszillationen des ISS-Substratpeaks, ein neuer Effekt, können auf der Basis eines Mehrfachstreuungsprozesses gut gedeutet werden (6.3). Sie sind der ermutigende Hinweis dafür, daß ISS über gezielte Mehrfachstreuung auch zur Charakterisierung der elektronischen Struktur der Oberfläche eingesetzt werden kann.

In diese Richtung zielt ausblickend der Vorschlag weiterer Experimente: Perdereau und Szymerska /46/ haben gezeigt,

daß sich Pb in geordneten Strukturen auf bestimmten Kristallen auftragen läßt (Epitaxie). Damit bietet sich die Möglichkeit, mit ISS eine gezielte Mehrfachstreuung durchzuführen, und Informationen über die räumliche Verteilung der Valenzelektronen des adsorbierten Pb-Atoms zu gewinnen.

8. LITERATURVERZEICHNIS

- / 1 / E.Taglauer, W.Heiland/ Appl. Phys. 9 (1976) S.261
T.M.Buck in: methods of surface analysis, ed. by
A.W.Czanderna (Elsevier Sc.Pub.Comp. 1975)
- / 2 / W.Heiland, E.Taglauer/Surf.Science 68 (1977) S.96
W.Englert Diplomarbeit TU - München (1978)
- / 3 / H.Hagstrum in: inelastic ion-surface collisions,
ed.by N.H.Tolk et al.(Academic Press,N.Y.1977) S.1
- / 4 / R.L.Erickson,D.P.Smith Phys.Rev.Lett.34,297(1975)
- / 5 / F.P.Ziemba, E.Everhart Phys.Rev.Lett. 2,299(1959)
F.P.Ziemba,G.J.Lockwood,G.H.Morgan,E.Everhart
Phys.Rev.118, 1552 (1960)
G.J.Lockwood,H.F.Helbig,E.Everhart/Phys.Rev.132
2078 (1963)
- / 6 / F.P.Ziemba,A.Russek/Phys.Rev.115,922 (1959)
D.Rapp,W.E.Francis/J.ofChem.Phys.37,2631 (1962)
W.Lichten / Phys.Rev.131,229 (1963)
- / 7 / J.C.Tully / Phys.Rev.B16,4324 (1977)
- / 8 / W.Bloss,D.Hone / Surf.Sci.72, 277 (1978)
- / 9 / J.S.Williams / Nuc.Instr.and Meth.149, 207 (1978)
- /10 / H.Verbeek in: material characterization using ion
beams, ed. by J.P.Thomas(Plenum Corp.1978) S.303
- /11 / J.Lindhard,M.Scharff,H.E.Schiøtt / Kgl.Dan.Vid.
Selsk.Mat.Fys.Medd. 33, No 14 (1963)
- /12 / sputtering by ion bombardment ed. by
R.Behrisch (Springer Verlag 1980)
- /13 / P.Sigmund in: vergl./ 3 / S.121
- /14 / K.Wittmark in: vergl./ 3 / S.153
- /15 / H.Liebl / Jour.of Phys.E:sc.instr.Vol 8 (1975) S.797
- /16 / W.Heiland,E.Taglauer in: the physics of ionized gæses
ed. by R.K.Janev (SPIG.78) 1978
- /17 / H.Verbeek,W.Eckstein,F.E.P.Matschke /Jour.of Phys.E
sc.instr.Vol 10, 944 (1977)
- /18 / M.T.Robinson/ tables of classical scattering integrals
ORNL - 4556 (1970)

- /19 / M.T.Robinson, I.Torrens/Phys.Rev.B9, 5008 (1974)
- /20 / O.B.Firsov / Sov.Phys. JETP 36, 1076 (1959)
- /21 / K.H.Krebs / Fortschr.Phys. 16, 419 (1968)
 H.Oechsner / Phys.Rev.B Vol.17, No.3, 1052 (1978)
 F.M.Probst, E.Lüscher / Phys.Rev.132, 1037 (1963)
 H.Hagstrum / Phys.Rev.104, 317 (1956)
 K.Dettmann in: interaction of energetic charged particles with solids BNL 50336 (1971) S.81
- /22 / C.W.White, E.W.Thomas, W.F.Van der Weg, N.H.Tolk in: vergl. / 3 / S.201
- /23 / W.Heiland, E.Taglauer in: vergl. / 3 / S.27
- /24 / W.Eckstein, V.A.Molchanov, H.Verbeek / nuclear instruments and methods 149 (1978) S.599
- /25 / W.Heiland / Habilitationsschrift: Max Planck Institut für Plasmaphysik Garching (1978)
- /26 / F.Iberl / Diplomarbeit TU - München (1975)
- /27 / J.C.Tully, N.H.Tolk in: vergl. / 3 / S.105
- /28 / Landau / Z.Phys.Sov.Un.2 (1932) 46
 Zener / Proc.Roy.Soc. A, 137 (1932) 696
- /29 / W.Lichten / Phys.Rev. 139, A27 (1965)
- /30 / H.F.Helbig, E.Everhart / Phys.Rev.136, A674 (1964)
- /31 / W.Heiland, E.Taglauer/Nuc.Instr.Meth.132 (1976) 535
- /32 / N.Tolk, J.C.Tully, J.Kraus, C.W.White, S.H.Neff / Phys.Rev.Lett. 36, 747 (1976)
- /33 / T.W.Rusch, R.L.Erickson in: vergl. / 3 / S.73
- /34 / D.Christensen, V.Mossotti, T.Rusch, R.L.Erickson / Chem.Phys.Lett. 44, 8 (1976)
- /35 / D.Christensen, V.Mossotti, T.Rusch, R.L.Erickson / nuclear instruments and methods 149 (1978) 587
- /36 / S.S.Shekhter / J.Exptl.Theor.Phys.(USSR)7, 750(1937)
- /37 / M.Grundner, W.Heiland, E.Taglauer/Appl.Phys.4, (1975)243
- /38 / M.Grundner, W.Heiland, E.Taglauer/IPP-Ber. 1973(9/8)
- /39 / H.Niehus, E.Bauer/Surf.Science 47 (1975) 222
- /40 / E.Taglauer / Appl.Phys.Lett. 24 (1974) 437
 W.Heiland, W.Englert, E.Taglauer/Am.Vac.Soc. Meeting Boston (1977)
- /41 / Herrn B.M.U.Scherzer und Herrn H.von Seefeld sei an dieser Stelle für die Hilfe bei den R.B.S. - Analysen am 2 MeV - Beschleuniger (IPP - Garching) herzlich gedankt.

- /42 / M. von Ardenne: Tabellen zur angewandten Physik
Band 2 (V E B 1964)
- /43 / I.Langmuir/Phys.Rev.Vol.2, No.5 (1913) 229
- /44 / A.G.Gaydon: dissociation energies(Chapman 1968)
- /45 / R.E.Honig/Jour.of Chem.Phys.Vol.21, No.3, 573(1953)
- /46 / J.Perdereau, I.Szymerska/Surf.Sci.32(1972) 247
E.Khoury Nemeh, R.Cinti, A.Nguyen/Surf.Sci.30(1972)697
J.Henrion, G.E.Rhead/Surf.Sci.29(1972)20
G.E.Rhead / J.Vac.Sci.Techn.Vol.13, No.2(1976)603
- /47 / E.Bauer, H.Poppa, G.Todd, F.Bonczek /
J.of Appl.Phys., Vol.45, No.12, (1974)
- /48 / E.Preuss, B.Krahl-Urban, R.Butz: Laue - Atlas
ed. by Kernforschungsanlage Jülich (1974)
- /49 / A.Zartner / Diplomarbeit TU - München 1975
- /50 / A.S.Dawydow: Quantenmechanik (V E B 1972)
- /51 / A.Haug: Theoretische Festkörperphysik Band 1
Verlag Franz Deuticke Wien 1964
- /52 / H.Preuss: Integraltafeln zur Quantenchemie
Band 1 und 2 (Springer Verlag 1956)
- /53 / J.C.Slater: quantum theory of molecules and
solids.Vol.1(McGraw-Hill-Comp.1963)
Jahnke, Emde, Lösch: Tafeln höherer Funktionen
(Teubner Verlag 1960)
- /54 / Bronstein-Semendjajew: Taschenbuch der Mathematik
(Harri Deutsch 1962)
W.Gröbner, N.Hofreiter/Integraltafeln(Springer1973)
- /55 / H.Taketa, S.Huzinaga, K.O-Ohata / Journal of the
physical Soc. of Japan Vol.21, No.11 (1966)
- /56 / H.A.Bethe, E.E.Salpeter: quantum mechanics of
one and two electron atoms (Springer 1957)
L.Pauling, E.B.Wilson: introduction to quantum
mechanics (McGraw-Hill-Comp.1935)
- /57 / F.Herman, S.Skillman: atomic structure calculations
(Prentice Hall 1963)
- /58 / C.Kittel: Einführung i.d.Festkörperphysik (1969)
J.M.Ziman: principles of the theory of solids (1972)
- /59/ A.Zartner, E.Taglauer, W.Heiland/Phys.Rev.Lett.40
No.19 (1978) 1259
- /60 / V.L.Moruzzi, J.F.Janak, A.R.Williams: calculated
electronic properties of metalls
F.McFeely, L.Falicov/Sol.State Comm.Vol.21(1977)343

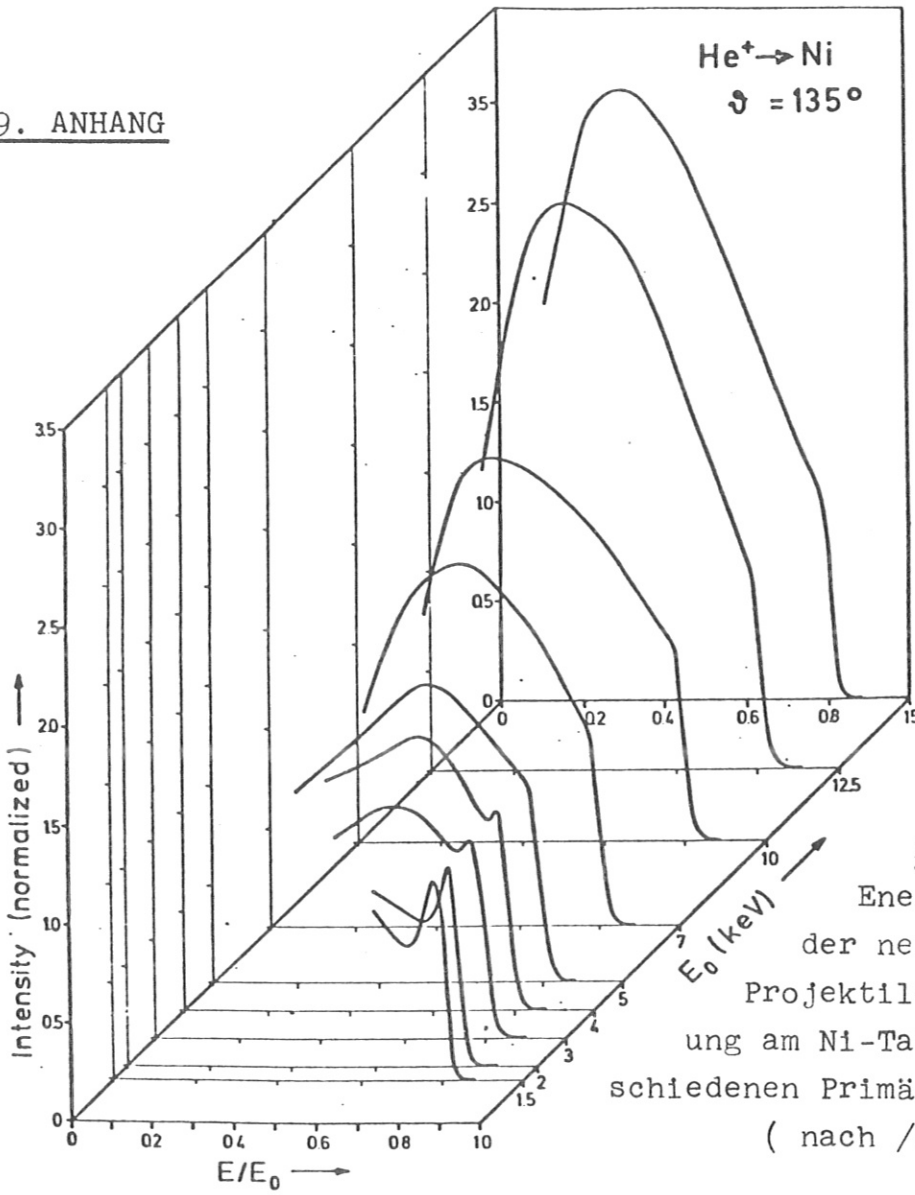


Abb. 58
Energieverteilung
der neutralen He-
Projektilen nach der Streu-
ung am Ni-Target bei ver-
schiedenen Primärenergien E_0 .
(nach /24/)

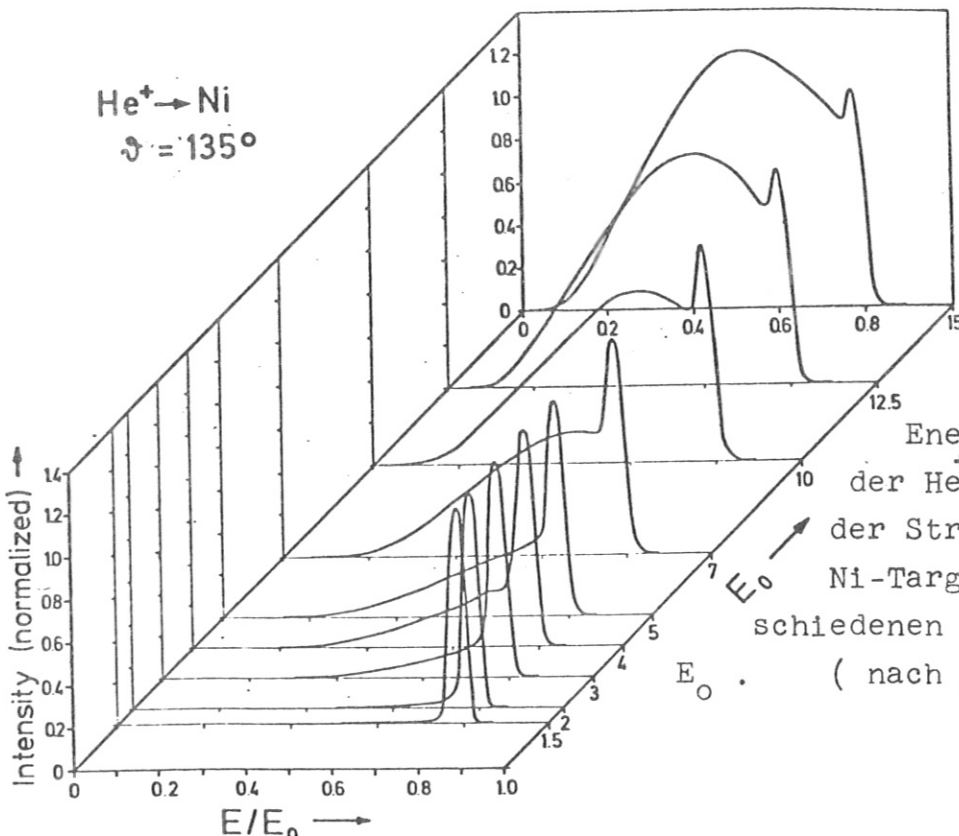
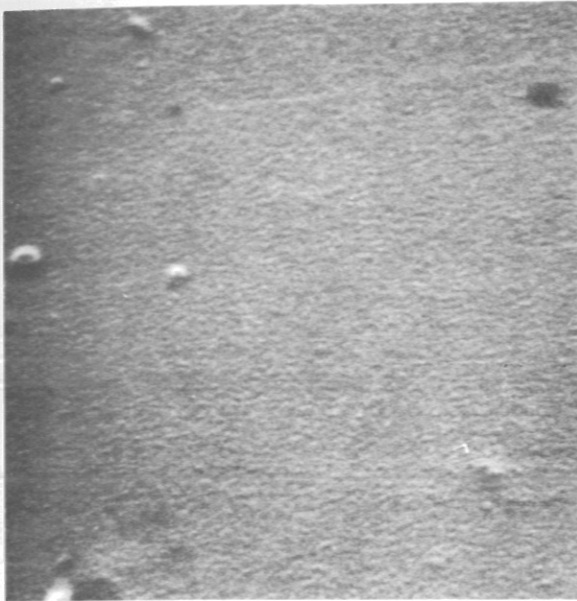


Abb. 59
Energieverteilung
der He⁺-Ionen nach
der Streuung am
Ni-Target bei ver-
schiedenen Primärenergien
 E_0 . (nach /24/)

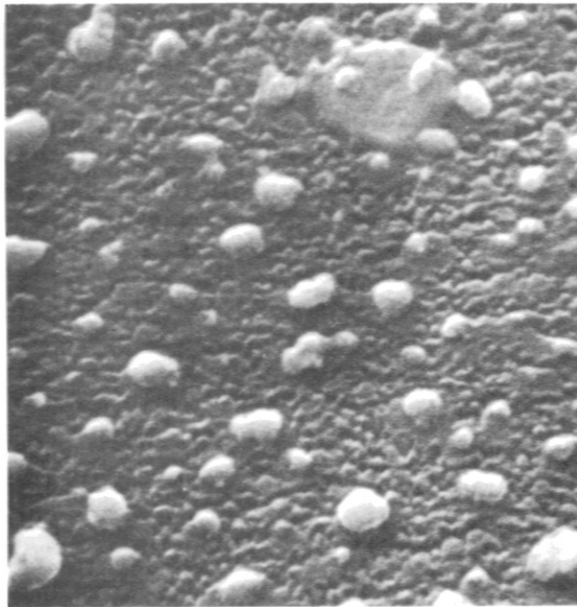
1



2



3



4

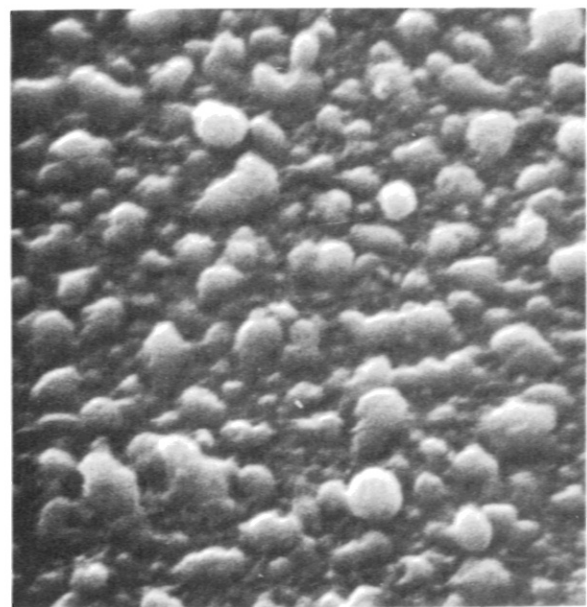


Abb. 60 Elektronenrastermikroskop - Aufnahmen
 (24.000-fach: 1mm im Bild = 30nm im Original) einiger
 Ni-Substrate, auf die unterschiedliche Mengen Pb gedampft
 wurde. $1 \dots 5 \cdot 10^{15}$ Pb-Atome/cm² $2 \dots 2 \cdot 10^{16}$ Pb-Atome/cm²
 $3 \dots 8 \cdot 10^{16}$ Pb-Atome/cm² $4 \dots 2 \cdot 10^{17}$ Pb-Atome/cm²
 Die Entwicklung von Pb - Inseln ist gut zu erkennen. Die
 Pb - Belegungen auf den Substraten in dieser Arbeit waren
 kleiner als 10^{15} Pb-Atome/cm².

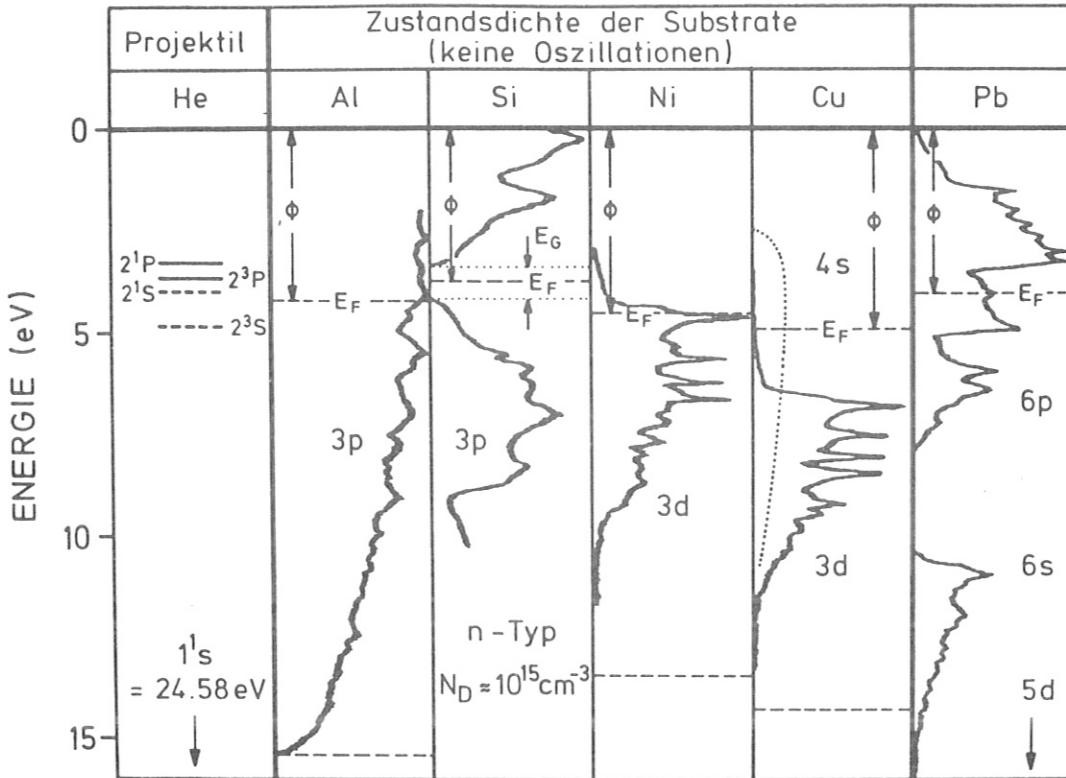


Abb. 61 Die Zustandsdichten der Substrate (Al, Si, Ni, Cu), die keine Oszillationen zeigen, verglichen mit dem "oszillierenden" Pb. Die Energie ist vom Vakuum - Niveau gemessen. (nach / 60 /) Die angeregten Niveaux des He - Projektils (vom Vakuum - Niveau gemessen) sind ebenfalls eingezeichnet.

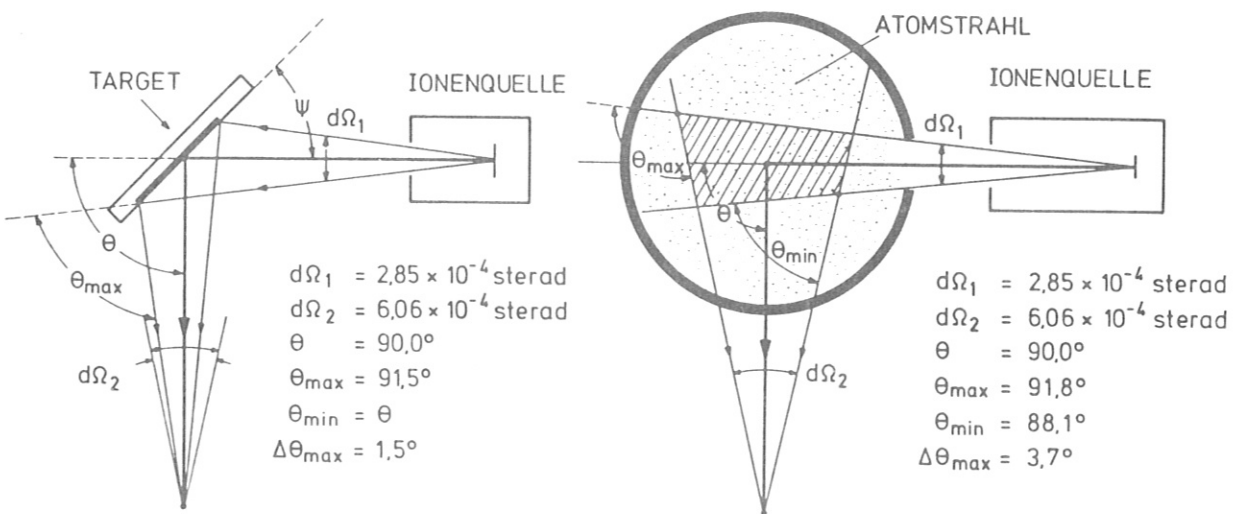


Abb. 62 Die Streugeometrie bei Festkörpertarget-Experimenten und beim Atomstrahl. Die größere Ungenauigkeit im Streuwinkel beim Atomstrahl-Experiment führt zu einer Verbreiterung der ISS - Rückstreupeaks.

Herrn Professor Menzel danke ich für die gute Betreuung und Förderung während dieser Arbeit.

Bei Herrn Vernickel möchte ich mich für die Aufnahme in seine Gruppe und bei allen Mitarbeitern des Projektes für das freundliche Arbeitsklima und das Interesse am Werdegang der Arbeit bedanken.

Viele wertvolle theoretische Hinweise erhielt ich von Herrn Professor Brenig und Herrn Zwiengel.

Besonderen Anteil am Gelingen der praktischen Durchführung hatten Herr Taglauer und Herr Heiland, die mich ausgezeichnet berieten und auch nach drei Jahren nicht müde wurden, mein Wissen über die Dinge der Physik und des Lebens zu bereichern. Dem technischen Können und Geschick von Herrn Hupfloher und Herrn Schuster verdanke ich, daß der Atomstrahlofen so zuverlässig "strahlte" wie Fräulein Hirschinger, die sich für viele meiner Zeichnungen abmühte.

Ein herzlicher Dank gebührt meinen Freunden und Mitdoktoranden, die sich nicht scheuten, mir auch im Biergarten Physik beizubringen.