

Über den Einfluß der Gitterstruktur
und Temperatur auf die Rückstreuung
von Protonen an Kupfer im Energiebe-
reich von 40 bis 120 keV⁺)

On the Influence of Lattice Structure
and Temperature on the Backscattering
of Protons from Copper in the Energy
Range 40 to 120 keV

R. Behrisch

IPP 2/68

Juni 1968



INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK

GARCHING BEI MÜNCHEN

Über den Einfluß der Gitterstruktur
und Temperatur auf die Rückstreuung
von Protonen an Kupfer im Energiebe-
reich von 40 bis 120 keV⁺)

On the Influence of Lattice Structure
and Temperature on the Backscattering
of Protons from Copper in the Energy
Range 40 to 120 keV

R. Behrisch

IPP 2/68

Juni 1968

+) Dissertation TH München Juni 1968

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

June 1968 (in German)

Abstract

This investigation treats the backscattering of protons with energies of 40 to 120 keV from a Cu monocrystal⁺). The energy distribution and angular distribution of the backscattered hydrogen atoms were measured with a silicon surface barrier counter with an energy resolution of 7.5 keV FWHM. Towards low energies the energy distribution of the backscattered hydrogen atoms shows a strong rise. At an angle of incidence of 45° the angular distribution exhibits a maximum for an angle of emergence of 65° if it is measured in a plane not coincident with a shadow direction. Minima are superposed in the close-packed directions. Energy distribution curves calculated from a simple model show a smaller rise towards low energies than the measurements.

The region of the shadow minimum in the $\langle 100 \rangle$ direction was both recorded with a photographic plate and measured with the counter, and diagrams of lines of equal intensity were drawn. Cross section of the $\langle 100 \rangle$ minimum were made parallel to the $\{210\}$ planes. The minima thus obtained become narrower with increasing ion energy. With rising crystal temperature they change from a box shape to a triangular shape. The exact shapes of the minima agree only approximately with calculated curves. The calculations do not take into account the fact that the ions undergo many angular deflections on passing through the lattice.

+) Part of this paper was presented at the Conference on Atomic Collisions & Penetration Studies with Energetic (keV) Ion Beams, 18th - 21st Sept. 1967, Chalk River, Canada [37].

Zusammenfassung

Diese Arbeit behandelt die Rückstreuung von Protonen im Energiebereich von 40 bis 120 keV an einem Cu-Einkristall⁺⁾. Die Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome wurde mit einem Silizium-Oberflächen-Sperrschichtzähler mit einer Energieauflösung von 7,5 keV ausgemessen. Die Energieverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome zeigt einen starken Anstieg zu niedrigen Energien. Für einen Einfallswinkel von 43° relativ zur Oberflächennormalen hat die Winkelverteilung in einer Ebene, die nicht in eine Schattenrichtung fällt, ein Maximum für einen Austrittswinkel von etwa 65° ; in den dicht gepackten Richtungen sind Minima überlagert. Nach einem einfachen Modell berechnete Kurven für die Energieverteilung zeigen zu niedrigen Energien einen kleineren Anstieg als die Messungen. Die Umgebung des in $\langle 100 \rangle$ -Richtung auftretenden Schattenminimums wurde sowohl mit einer Photoplatte aufgenommen, als auch mit dem Zähler ausgemessen und Diagramme mit Linien gleicher Intensität gezeichnet. Durch das $\langle 100 \rangle$ -Minimum wurden Schnitte parallel zu einer $\{210\}$ -Ebene gelegt. Die so erhaltenen Minima werden mit steigender Ionenenergie schmaler. Mit steigender Kristalltemperatur gehen sie von einer Kastenform in eine Dreiecksform über. Die genauen Formen der Minima stimmen mit berechneten Kurven nur ungefähr überein. Bei den Rechnungen ist nicht berücksichtigt, daß die Ionen beim Durchlaufen des Gitters viele kleine Winkelablenkungen erfahren.

⁺⁾ Auszugsweise vorgetragen auf der Tagung über "Atomic Collision and Penetration Studies with Energetic (keV) Ion Beams"
18. - 21. September 1967, Chalk River, Kanada [37]

.....	18
.....	22
.....	22
.....	25
.....	26
.....	28
.....	31

ÜBER DEN EINFLUSS DER GITTERSTRUKTUR UND TEMPERATUR
AUF DIE RÜCKSTREUUNG VON PROTONEN AN KUPFER IM
ENERGIEBEREICH VON 40 BIS 120 KEV

	Seite:
1. EINLEITUNG	
1.1. Historischer Überblick	1
1.2. Der Gitterführungs- und der Schatteneffekt	
1.2.1. Modellvorstellung	1
1.2.2. Der Gitterführungseffekt (channeling)	3
1.2.3. Der Schatteneffekt (shadowing oder blocking)	3
1.3. Aufgabenstellung	4
2. EXPERIMENTE ZUR ENERGIE- UND WINKELVERTEILUNG	
2.1. Die Apparatur	5
2.2. Gemessene Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome	7
2.3. Theoretische Deutung	
2.3.1. Vorbemerkung	9
2.3.2. Das Modell der Rückstreuung in einem Zweierstoß	9
2.3.3. Vergleich mit den Messungen	12
3. DAS <100>-SCHATTENMINIMUM	
3.1. Photographische Aufnahme der Schatten	14
3.2. Diagramm mit Linien gleicher Intensität	14
3.3. Abhängigkeit der Form der Schatten vor der primären Ionenenergie und der Targettemperatur	16
3.4. Theoretische Berechnung der Form der Schattenminima	
3.4.1. Verwendete Modelle	18
3.4.2. Vergleich mit den Messungen	22
3.4.3. Folgerungen aus den Meßergebnissen	22
4. ZUSAMMENFASSENDE DISKUSSION	25
Literatur	26
5. ANHANG	
5.1. Analytische Näherungen zur Berechnung der Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome	28
5.2. Photographien der Apparatur und der Meßanordnung	31

1. Einleitung

1.1. Historischer Überblick

Für Experimente mit Plasmen hoher Temperatur wünscht man sich Gefäßwände, die möglichst viele der auftreffenden Ionen mit voller Energie und geladen zurückstreuen; die übrigen Ionen sollten in der Wand festgehalten werden. Sekundäre Effekte, wie die Zerstäubung des Wandmaterials, sollten möglichst klein sein.

Obwohl die Wechselwirkung energiereicher Ionen mit Festkörperoberflächen seit über 100 Jahren untersucht wird [1, 2], ist besonders die Rückstreuung an Metalloberflächen erst in den letzten Jahren intensiver behandelt worden.

Die ersten Messungen über die Rückstreuung energiereicher Ionen an Metalloberflächen wurden 1909 von GEIGER und MARSDEN [3] veröffentlicht, die Deutung dieser Messungen führte 1911 zum RUTHERFORDSchen Atommodell [4]. Diese und fast alle späteren Untersuchungen verwendeten polykristallines Material als Streuer. Die theoretischen Arbeiten ließen die Gitterstruktur unberücksichtigt; sie rechneten mit einer zufälligen Atomverteilung im Festkörpermaterial, wie sie etwa in einem Gas vorliegt. Ein Einfluß der Gitterstruktur und der Orientierung des Festkörpers auf die Wechselwirkung der einfallenden Ionen mit den Gitteratomen wurde bereits 1912 von STARK und WENDT [5] bei der Festkörperzerstäubung beobachtet. Er blieb jedoch lange unbeachtet, bis er durch Zerstäubungsmessungen von ROL u.a. [6], ALMEN und BRUCE [7] und insbesondere durch Maschinenrechnungen von ROBINSON u.a. [8, 9] wiederentdeckt wurde. Die Einwirkung der Gitterstruktur auf die Bahnen der einfallenden Ionen im Festkörper führt zu zwei komplementären richtungsabhängigen Effekten, die man im Englischen als "channeling effect" (deutsch: Gitterführungseffekt) und "shadowing oder blocking effect" (deutsch: Schatteneffekt) bezeichnet. Beide Effekte bestimmen auch die Rückstreuung von Ionen. Sie sind in den letzten Jahren experimentell und theoretisch oft untersucht worden und bilden bereits die Grundlage einer neuen Untersuchungsmethode der Festkörperphysik, insbesondere zur Lokalisierung von Fremdatomen in und auf einem Kristall und dienen außerdem zur Kristallorientierung [10 bis 16].

Bevor die Aufgabe dieser Arbeit beschrieben wird, werden die Grundlagen des Gitterführungs- und des Schatteneffekts erläutert.

1.2. Der Gitterführungs- und der Schatteneffekt

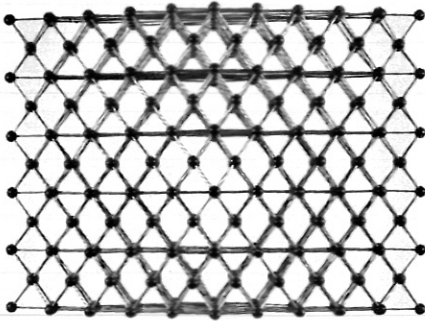
1.2.1. Modellvorstellung

Wie N. BOHR [17] und J. LINDHARD [18, 18a, 19] gezeigt haben, lassen sich die Wege von Ionen in einem Kristall im Energiebereich von einigen keV bis zu einigen MeV durch klassische Bahnen beschreiben. Die Stöße mit Gitteratomen kann man in guter Näherung als elastische Zweierstöße behandeln [17]. Zur Berechnung der Ionenbahnen nimmt man für eine erste Näherung ein ideales Gitter an. Durch thermische Gitterschwingungen, Gitterfehler und den Energieverlust der das Gitter durchlaufenden Ionen an Elektronen werden die Ionenbahnen nur wenig modifiziert.

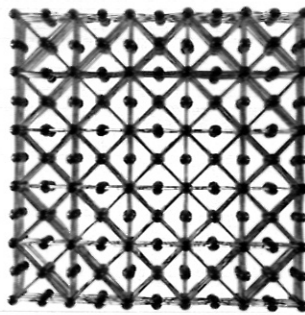
Ein Einkristall ist für die durchlaufenden Ionen in hohem Maße inhomogen und anisotrop. Das heißt, die Bahnen der Ionen hängen von der Richtung ab, unter der die Ionen zum Gitter laufen (Anisotropie) und von dem Ort, von dem sie im Kristall starten (Inhomogenität) [18]. Auch polykristallines Material kann nicht als isotrop mit regellos verteilten Atomen betrachtet werden, da die Reichweiten der Ionenbahnen im allgemeinen wesentlich kürzer sind, als die Ausdehnung einzelner Kristallite.

Die Richtungsabhängigkeit der Ionenbahnen wird besonders deutlich in der Nähe von relativ dicht gepackten Richtungen im Kristall. Hierunter verstehen wir:

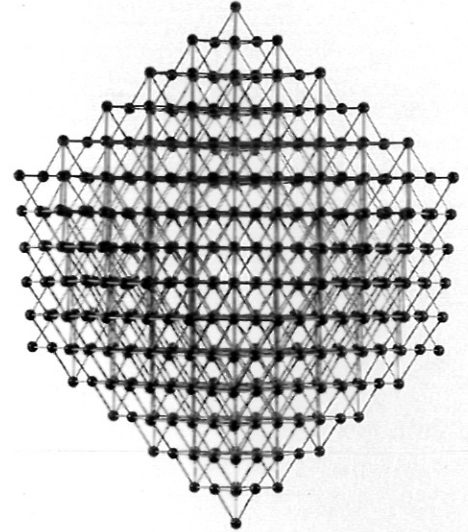
- I. Die Richtungen relativ dicht gepackter Gitterreihen oder Gitterketten (für kfz-Kristalle sind die am dichtesten gepackten Gitterreihen die $\langle 110 \rangle$ -, $\langle 100 \rangle$ -, $\langle 211 \rangle$ - und $\langle 310 \rangle$ -Richtungen). Abb. 1a - c.
- II. Die Richtungen parallel zu relativ dicht gepackten Gitterebenen (für kfz-Kristalle sind die am dichtesten gepackten Gitterebenen die $\{111\}$ -, $\{100\}$ -, $\{110\}$ - und $\{311\}$ -Ebenen). Abb. 1d, e.



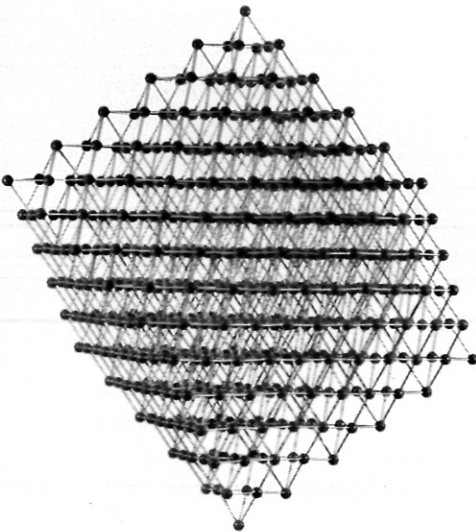
a) $\langle 110 \rangle$ -Richtung



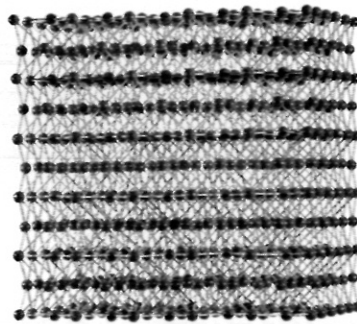
b) $\langle 100 \rangle$ -Richtung



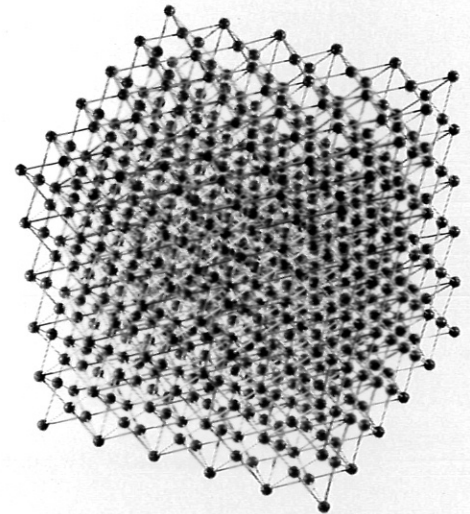
c) $\langle 211 \rangle$ -Richtung



d) $\{111\}$ -Ebene



e) $\{100\}$ -Ebene



f)

Abb. 1: Blick in Richtung dicht gepackter Gitterketten (a, b, c) und parallel zu relativ dicht gepackten Gitterebenen (d, e) sowie Blick außerhalb einer dicht gepackten Gitterrichtung (f).

1.2.2. Der Gitterführungseffekt^{+) [9, 18]}

Ionen, die von Punkten zwischen Gitterketten bzw. Gitterebenen starten und innerhalb eines kleinen Grenzwinkels ψ_c gegen eine der Ketten bzw. Ebenen laufen, werden von diesen in mehreren Kleinwinkelablenkungen in erster Näherung elastisch reflektiert (Abb. 2). Ihr Winkel gegen die Ketten bzw. Ebenenrichtung bleibt erhalten, sie laufen zwischen den Ketten bzw. Ebenen hin und her, ohne zentral mit einem Gitteratom zusammenstoßen zu können. Sie verlieren nur Energie durch Stöße mit Elektronen, aber nicht durch zentrale oder fast zentrale Stöße mit Gitteratomen (Kernstöße). Die vom Gitter geführten Ionen haben eine besonders große Reichweite im Kristall. Experimentell wurde der Gitterführungseffekt durch Reichweitmessungen zuerst von G.R. PIERCY u.a. [22], R.S. NELSON u. a. [23] sowie H. LUTZ und R. SIZMANN [24]

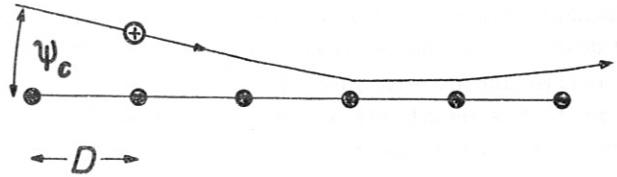


Abb. 2: Reflexion an einer Gitterkette

1963 bestätigt und ist in den letzten Jahren für leichte und schwere Ionen mit Energien von einigen keV bis 60 MeV häufig untersucht worden [25].

1.2.3. Der Schatteneffekt^{++) [18]}

Ionen, die von Punkten auf Gitterketten bzw. Ebenen starten und unter kleinem Winkel gegen die Kette bzw. Ebene laufen, werden durch anschließende Stöße mit den nächsten Atomen der Kette aus der Ketten- bzw. Ebenenrichtung abgelenkt (Abb. 3).

In Ketten- bzw. Ebenenrichtung bildet sich ein Schatten der Breite $2\psi_s$. Die Ionen laufen nur unter Winkeln größer als ψ_s gegen die Ketten bzw. Ebenen weiter. Diese Ionen erreichen Nachbarketten bzw. -ebenen unter diesen großen Winkeln und haben die Möglichkeit, dort Gitteratome unter kleinen Stoßparametern zu treffen und um große Winkel abgelenkt zu werden. Sie verlieren Energie sowohl an Elektronen als auch durch Kernstöße. Ihre Bahnen sind nicht geführt, sondern denen in amorphem Material mit regellos verteilten Atomen vergleichbar. Während dort die Bahnen je-

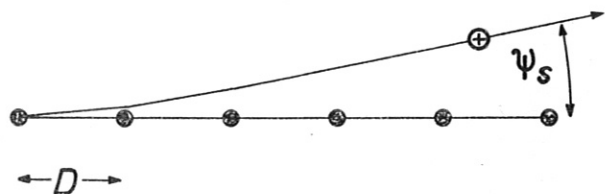


Abb. 3: Schattenbildung in Richtung einer Gitterkette

+) Channeling läßt sich, wie bereits erwähnt, mit Gitterführung übersetzen. Das manchmal gebrauchte Wort "Kanalleitung" [20] ist nicht zutreffend, weil die Bewegung der Ionen im allgemeinen nicht in allseits begrenzten Kanälen, sondern zwischen Atomketten bzw. -ebenen erfolgt. Zwischen 3 bzw. 4 idealen Atomketten existiert jedoch ein lokales Potentialminimum. Nur für Ionen, die sich in diesem Minimum bewegen, könnte man von Kanalleitung sprechen (proper channeling) [18, 20].

++) In der englischen Literatur als shadowing- oder blocking effect bezeichnet.

doch ganz regellos verlaufen, können vom Gitter nicht geführte Ionen in erster Näherung nicht in dicht gepackte Gitterrichtungen gelangen, denn für einen idealen Kristall sind die Grenzwinkel ψ_c für Gitterführung und ψ_s für Schattenbildung ungefähr gleich [18, 26]. Es findet kein Übergang zwischen geführten und nicht geführten Ionenbahnen statt, wenn man von einem sehr kleinen Winkelbereich in der Nähe des Grenzwinkels absieht. Für einen realen Kristall sind diese Übergänge infolge von Gitterfehlern und den thermischen Gitterschwingungen in einen größeren Winkelbereich um den Grenzwinkel möglich.

Experimentell zuerst gefunden wurde der Schatteneffekt von A.F. TULINOV u.a. [27 bis 29] bei Rückstreuung von Protonen an Wolfram-Einkristallen von D.S. GEMMELL und R.E. HOLLAND [30] beim Durchschuß von MeV-Protonen durch dünne Si-Einkristallfolien und von B. DOMEIJ u.a. [31, 32] bei der Emission von α -Teilchen aus Rn- und Po-Atomen, die in das Gitter eines Wolfram-Einkristalls eingebaut waren. Die Rückstreuung ist nur für Ionen auf nicht geführten Bahnen möglich. Deswegen ist sie ein gutes Verfahren zur Untersuchung des Schatteneffekts.

1.3. Aufgabenstellung

Aufgabe dieser Arbeit war es, detailliertere Aussagen über die Rückstreuung von Protonen im Energiebereich von 40 bis 120 keV zu gewinnen. Hier gab es nur Untersuchungen an Wolframeinkristallen mit 5 bis 40 keV [33], 150 bis 500 keV [27], 3 bis 6 MeV [28, 29] und 400 keV bis 1,7 MeV [10, 34 bis 36] Protonen sowie an Siliziumeinkristallen mit 1 MeV Protonen [12]. In den aufgeführten Arbeiten wurden jedoch nur die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Wasserstoffatome in der Umgebung der Schattenminima nachgewiesen.

In der vorliegenden Arbeit sollte ein Kupfer-Einkristall als Targetmaterial verwendet werden. Die Winkel- und Energieverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome war bis zu sehr niedrigen Energien für einen großen Winkelbereich zu bestimmen. Von den in der Winkelverteilung auftretenden Schattenminima war das $\langle 100 \rangle$ -Minimum in Abhängigkeit der primären Ionenenergie, der Energie der reflektierten Wasserstoffatome und der Targettemperatur auszumessen. Die Ergebnisse waren mit theoretischen Arbeiten zu vergleichen.

2. Experimente zur Energie- und Winkelverteilung

2.1. Die Apparatur

Die Rückstreuexperimente sind mit einem kleinen Beschleuniger für leichte Ionen mit UHV in der Targetkammer ausgeführt worden. Dieser Beschleuniger wurde zur Untersuchung der Wechselwirkung von Wasserstoffionen mit Metalloberflächen aufgebaut und an anderer Stelle ausführlich beschrieben [38]⁺). Abb. 4 zeigt eine schematische Zeichnung der Anlage.

Die aus einer HF-Ionenquelle abgesaugten Wasserstoffionen werden in zwei Stufen auf die gewünschte Energie im Bereich von 40 bis 120 keV beschleunigt. Fremdionen werden durch ein magnetisches Sektorfeld ausgeschieden. Die Anlage wird über ein aus drei Quecksilberdiffusionspumpen gebildetes Differentialpumpensystem evakuiert. In der ausheizbaren Targetkammer wird ein Betriebsdruck von $5 \cdot 10^{-8}$ Torr erreicht. Die wesentlichen Restgase sind Quecksilber und Wasserstoff. Das Target ist ein Cu-Einkristall, der vor jeder Meßreihe elektrolytisch poliert wird. Es ist von einem mit flüssigen Stickstoff gekühlten Zylinder umgeben, um den Quecksilberrestgasdruck weiter herabzusetzen (Abbildung im Anhang 5.2.). Der Io-

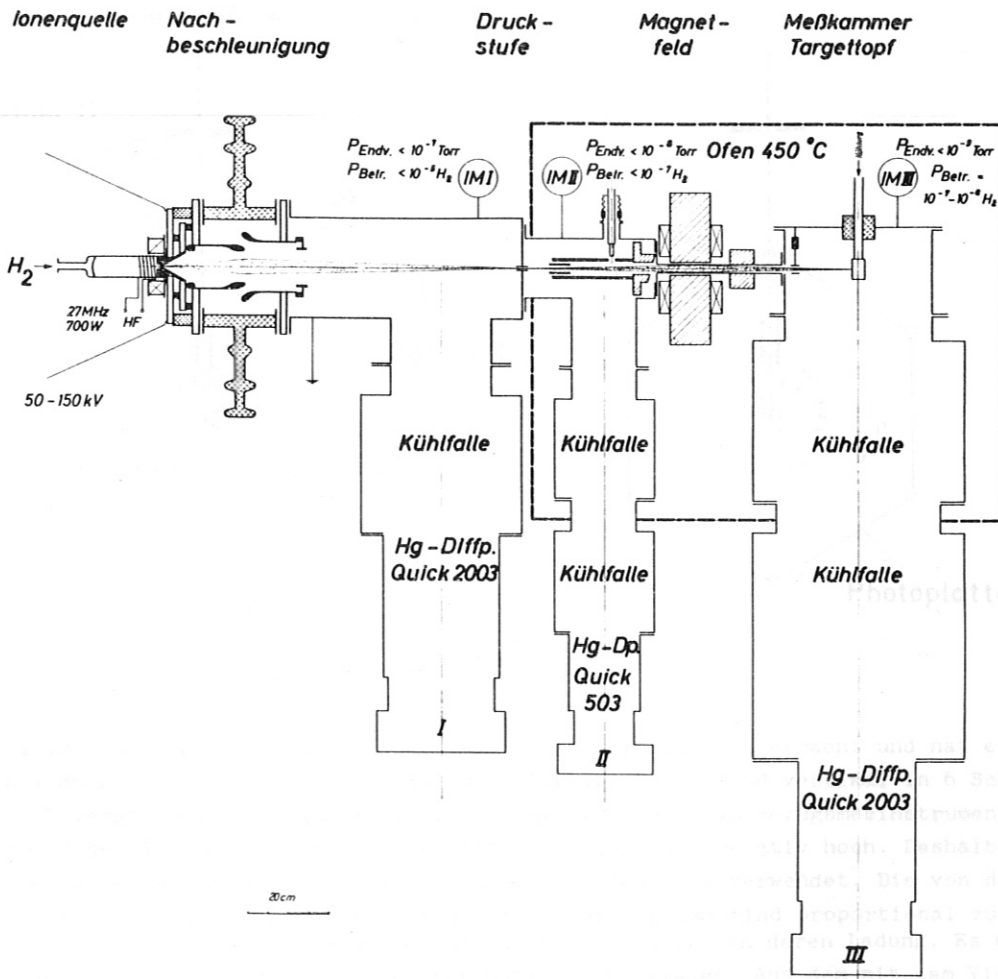


Abb. 4: Schematischer Aufbau des Beschleunigers

nenstrahl wurde für die Messungen durch zwei Blenden auf einen Durchmesser von 0,3 mm und einen Öffnungswinkel von $0,34^\circ$ ausgeblendet (Abb. 5). Der Ionenstrom betrug $1 \cdot 10^{-8}$ A; dies entspricht einer Stromdichte von $15 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. Damit ist die Anzahl der auf die untersuchte Oberfläche auftreffenden Ionen mehr als 15mal größer, als die Anzahl der auftreffenden Restgasatome. Man kann annehmen, daß die Oberfläche während der Messung, mit Ausnahme der eingeschossenen und wieder herausdifferendierenden Wasserstoffatome [39 bis 42] frei von Fremdschichten ist. Dies ergibt sich auch aus dem Energiespektrum der zurückgestreuten Wasserstoffatome. Danach ist die Verunreinigung durch Hg geringer als 1/10 Monoschicht. Der Nachweis der zurückgestreuten Wasserstoffatome erfolgt mit zwei über Kupferlitzen auf -120°C gekühlten Silizium-Oberflächen-Sperrschicht-Zählern der Firma Nucletron, München.

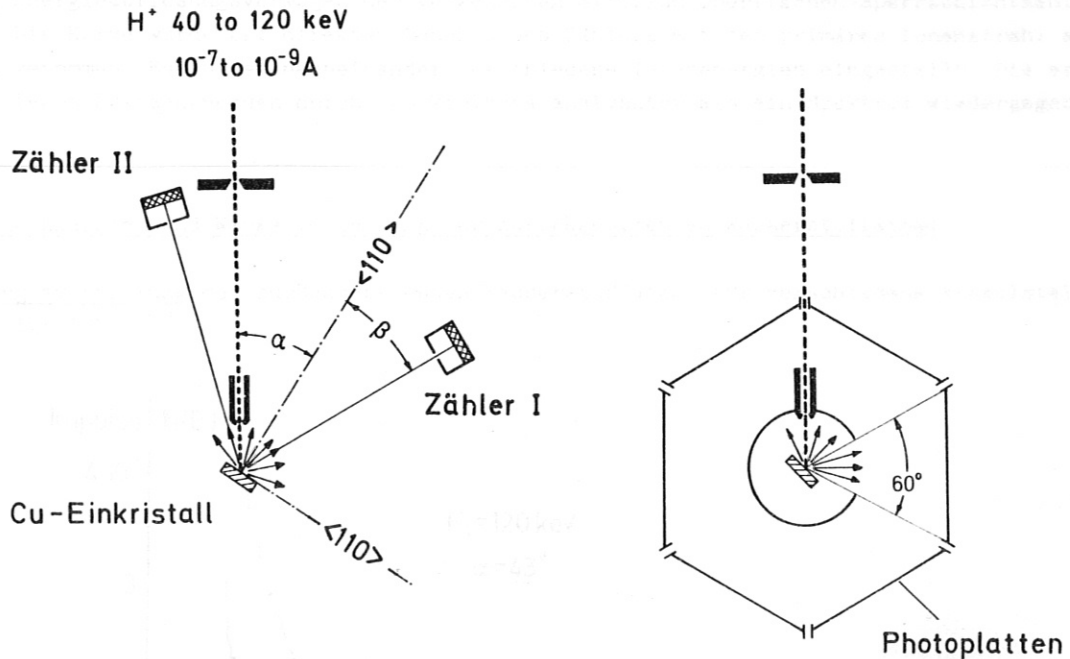


Abb. 5: Die Meßanordnung

Der Zähler I ist in einem Abstand von 13 cm vom Kupfer-Kristall angebracht und hat eine Öffnung von 1 mm \varnothing . Er läßt sich horizontal um beliebige Winkel und vertikal in 6 Schritten um je $1/2^\circ$ verstellen. Der Zähler II steht fest und dient als Bezugsmeßinstrument (Monitor). Während des Auspumpens ist der Quecksilberpartialdruck relativ hoch. Deshalb wurden spezielle Zähler mit Platin anstatt Gold als Frontelektrode verwendet. Die von den Oberflächensperrschichtzählern abgegebenen elektrischen Impulse sind proportional zur Energie der auftreffenden Atome (bzw. Elektronen), aber unabhängig von deren Ladung. Es werden also Ionen und neutrale Atome in gleicher Weise nachgewiesen. Aus dem mit dem Vielkanalanalysator aufgenommenen Impulshöhenspektrum ergibt sich für jede Winkelstellung β die Energieverteilung $N(E_2)$ der gezählten Ionen. Das hier erreichte Energieauflösungsvermögen der Oberflächensperrschichtzähler liegt bei 7,5 keV Halbwertsbreite, die untere Nachweisgrenze bei etwa 20 keV (Abb. 6).

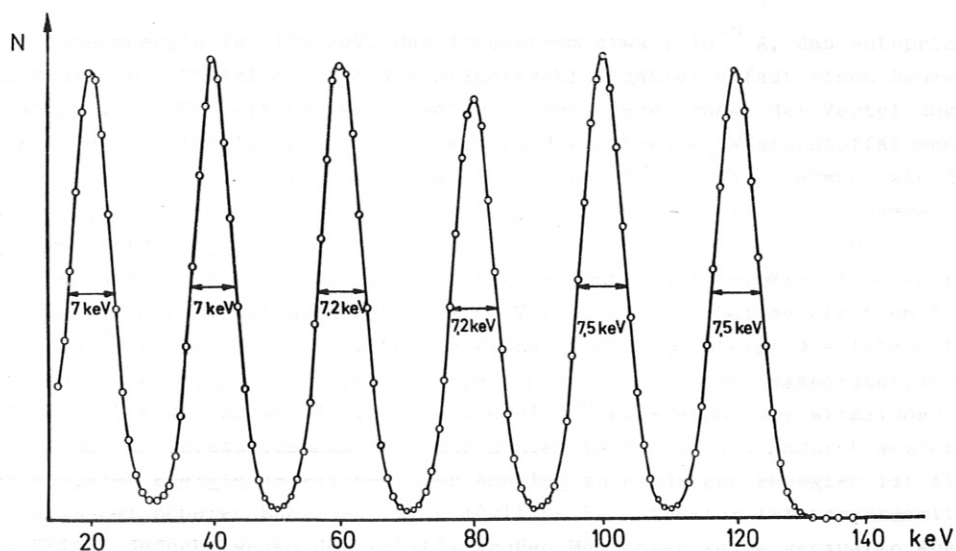


Abb. 6: Energieauflösungsvermögen der verwendeten Silizium-Oberflächen-Sperrschichtzähler. Die Kurve wurde bei direktem Beschuß des Zählers mit dem primären Ionenstrahl aufgenommen. Es wurden nacheinander verschiedene Ionenenergien eingestellt. Die erhaltenen Spitzen werden durch den Vielkanalanalysator als ein Spektrum wiedergegeben.

2.2. Gemessene Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome

Die Energieverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome für verschiedene Winkelstellungen β zeigt Abb. 7⁺⁾ .

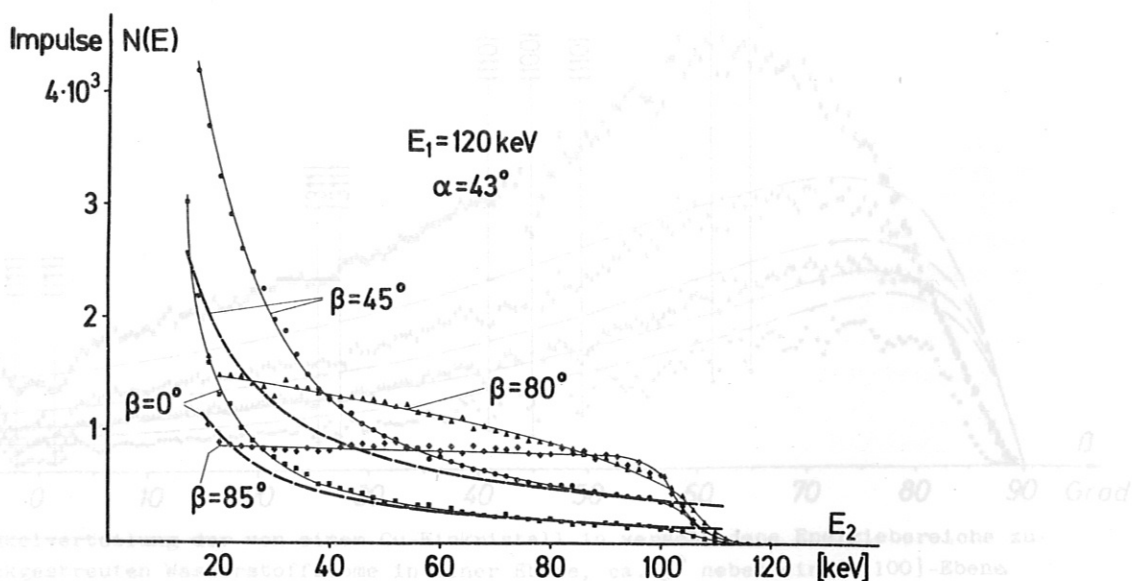


Abb. 7: Energieverteilung der unter verschiedenen Winkeln β zurückgestreuten Wasserstoffatome ($E_1 = 120 \text{ keV}$, $\alpha = 43^\circ$). Die ausgezogenen Linien sind durch die Meßpunkte gelegt worden, die gestrichelten Linien sind nach (9) berechnete Verteilungen.

⁺⁾ In doppelt logarithmischer Auftragung ergeben sich für die Energieverteilungen innerhalb der Fehlergrenzen der Messung Geraden der Steigung $K \approx -1$, so daß sich die Verteilung empirisch durch $N(E) \sim 1/E$ beschreiben läßt [37]. Die genaue theoretische Analyse liefert jedoch einen etwas anderen Zusammenhang. Die empirische Formel trifft wahrscheinlich nur für die speziellen Parameter dieser Messungen zu.

Die primäre Ionenenergie ist 120 keV, der Ionenstrom etwa $1 \cdot 10^{-8}$ A, das entspricht etwa $6 \cdot 10^{10}$ Ionen/sec. Der Silizium-Oberflächen-Sperrschichtzähler erfaßt einen Raumwinkel von $4,65 \cdot 10^{-5}$ sterad. Die Meßzeit beträgt jeweils 25 sec, jeder Punkt der Verteilung entspricht den in ein Energieintervall von 2 keV zurückgestreuten Wasserstoffatomen. Der Einfallswinkel α relativ zur Oberflächennormalen beträgt 43° und fällt ebenso wie die Austrittswinkel β (Abb. 5) nicht mit einer dicht gepackten Gitterrichtung zusammen. Alle einfallenden Ionen werden demnach auf nicht geführten Bahnen im Gitter laufen.

Die höchste beobachtete Energie liegt um einige keV unter der primären Ionenenergie. Zu niedrigeren Energien schließt sich eine glatte Verteilung an. Bei senkrechtem ($\beta = 0^\circ$) und schrägem ($\beta = 45^\circ$) Austritt der weggehenden Wasserstoffatome steigt die Intensität zu niedrigen Energien stark an, während sie für streifenden Austritt der Wasserstoffatome ($\beta = 85^\circ$) konstant bleibt. Die gemessenen Kurven stellen eine Überlagerung der wirklichen Energieverteilungen mit der Energieauflösungskurve der Zähler (Abb. 6) dar. Dadurch erscheint die Stufe bei der höchsten Energie verwaschen. Der Anstieg zu niedrigen Energien ist flacher und beginnt bereits bei höheren Energien. Eine mögliche Feinstruktur ist herausgemittelt. Eine Entfaltung bringt jedoch, wegen der relativ großen Meßfehler keine genaueren Aussagen.

Wie schon erwähnt sind alle zurückgestreuten Wasserstoffatome unabhängig von ihrer Ladung gezählt worden. Aus der Literatur [43] läßt sich entnehmen, daß das Verhältnis geladen/neutral für 120-keV-Wasserstoffatome etwa bei 85/15 liegt und bei 10 keV auf 20/80 sinkt. Die Anzahl der negativ geladenen Wasserstoffatome liegt bei 1 % und steigt zu niedrigen Energien hin an.

Die Winkelverteilung der in verschiedene Energiebereiche zurückgestreuten Wasserstoffatome zeigt Abb. 8.

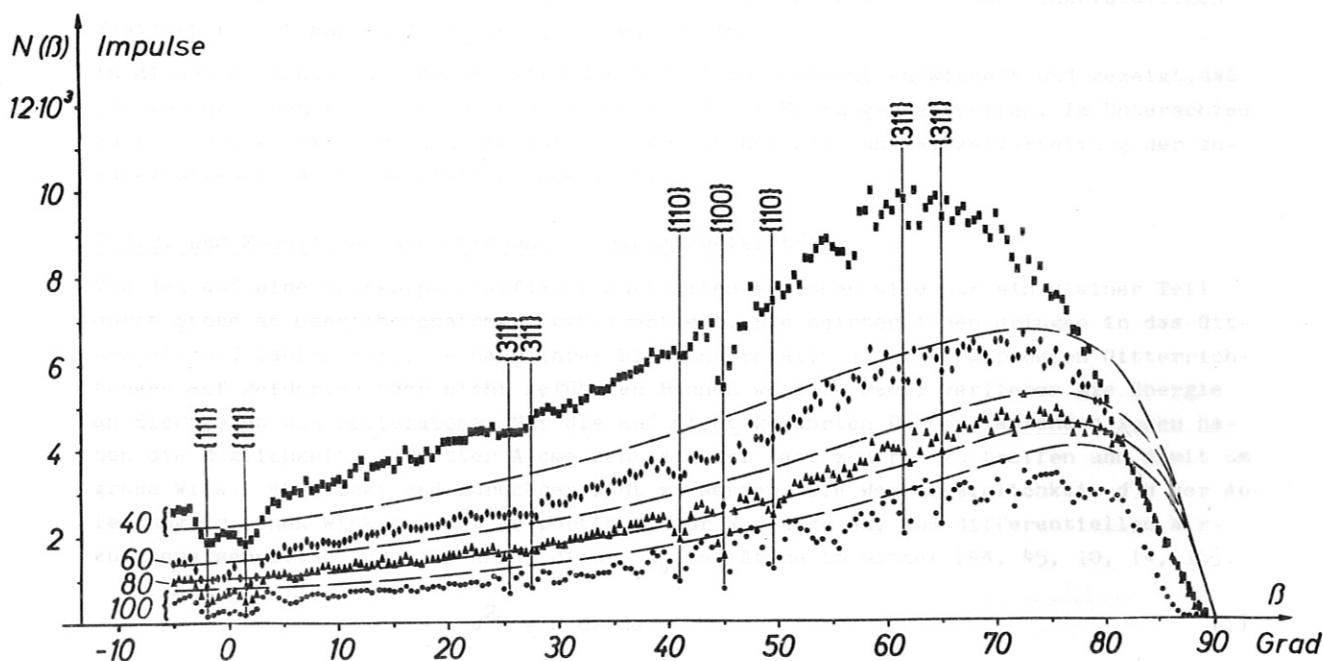


Abb. 8: Winkelverteilung der von einem Cu-Einkristall in verschiedene Energiebereiche zurückgestreuten Wasserstoffatome in einer Ebene, ca. 5° neben einer $\{100\}$ -Ebene ($E_1 = 120$ keV, $\alpha = 43^\circ$)

•: $E_2 = 100 \pm 5$ keV; ▲: $E_2 = 80 \pm 5$ keV; ◆: $E_2 = 60 \pm 5$ keV; ■: $E_2 = 40 \pm 5$ keV.
Die gestrichelten Linien sind nach (9) berechnete Kurven.

Wie bei der Energieverteilungsmessung war die primäre Ionenenergie 120 keV und der Einfallswinkel $\alpha = 43^\circ$. Für jede Kurve wurde ein Energiebereich $\Delta E_2 = 10$ keV genommen. Weder die Einfallrichtung, noch die Ebene in der die Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasser-

stoffatome ausgemessen wurde, fielen mit einer dicht gepackten Richtung im Kristall zusammen.

Die Intensität der zurückgestreuten Wasserstoffatome ist senkrecht zum Target am kleinsten und steigt mit zunehmendem Austrittswinkel β stetig bis zu einem Maximum bei etwa 65° an. Dieses Maximum hat nichts mit spiegelnder Reflexion zu tun. Bildet man für bestimmte Winkelbereiche das Verhältnis der in verschiedene Energiebereiche gestreuten Wasserstoffatome, so ist dies vor dem Maximum etwa konstant. Für $\beta > 65^\circ$ nimmt die Intensität der niederenergetisch zurückgestreuten Wasserstoffatome rascher ab, als die der hochenergetischen.

Dem allgemeinen Verlauf sind Minima überlagert, deren relative Tiefe für die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Atome am größten ist. Diese Minima treten in Richtungen parallel zu dicht gepackten Gitterebenen auf und sind eine Folge des in 1.2.3. beschriebenen Schatteneffektes.

2.3. Theoretische Deutung

2.3.1. Vorbemerkung

Für die Rückstreuung von Ionen an Festkörperoberflächen im Energiebereich von einigen keV bis zu einigen MeV wurde 1951 ein einfaches Modell der Rückstreuung in einem Zweierstoß angegeben [44]. Dabei wurde eine regellose Verteilung der Atome im Festkörper angenommen. Dieses Modell sollte auch für Ionen auf nicht geführten Bahnen gelten. Es ist in der Zwischenzeit für die Rückstreuung an polykristallinen und einkristallinen Festkörpern oft angewandt worden [45, 10, 14, 16].

In diesem Abschnitt der Arbeit wird das Modell noch einmal entwickelt und gezeigt, daß die wesentlichen Annahmen für die Parameter dieser Messungen zutreffen. Im Unterschied zu früheren Arbeiten werden die Formeln für die Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Atome explizit ausgewertet.

2.3.2. Das Modell der Rückstreuung in einem Zweierstoß

Von den auf eine Festkörperoberfläche auftreffenden Ionen wird nur ein kleiner Teil durch Stöße an Oberflächenatomen zurückgestreut. Die meisten Ionen dringen in das Gitter ein und laufen dort, je nach ihrer Richtung relativ zu dicht gepackten Gitterrichtungen auf geführten oder nicht geführten Bahnen weiter. Dabei verlieren sie Energie an Elektronen und Gitteratome. Nur die auf nicht geführten Bahnen laufenden Ionen haben die Möglichkeit, im Gitter Atome zentral oder fast zentral zu treffen und damit um große Winkel abgelenkt und zurückgestreut zu werden. Die Wahrscheinlichkeit d^2W der Ablenkung um einen Winkel ψ ist proportional zur Weglänge dx , zum differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ und zur Anzahldichte N_V der Atome im Gitter [44, 45, 10, 14, 16].

$$d^2W = N_V dx d\sigma \quad (1)$$

Für Wasserstoffionen mit Energien größer als einige keV kann man für Ablenkwinkel $\psi > \psi_c$ den differentiellen Rutherford-Streuquerschnitt annehmen:

$$d\sigma = \frac{b^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\psi}{2}} d\Omega \quad (2)$$

Dabei ist ψ der Ablenkwinkel im Schwerpunktsystem und b die kleinste Entfernung der Stoßpartner bei zentralem Stoß. Es gilt: $b = z_1 z_2 e_o^2 / 4\pi \epsilon_o E$, wobei $z_1 e_o$ und $z_2 e_o$ die Ladungen des einfallenden Ions und des Gitteratoms sind, $E = E_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ die Energie im Schwerpunktsystem und E_1 die Energie des ankommenden Ions im Laborsystem ist.

Für Energien größer als 20 keV ist der totale Rutherford-Streuquerschnitt σ_c für Ablenk-
winkel größer als ein $\psi_{\min} \approx 5^\circ$ sehr klein gegenüber dem Quadrat des Gitterabstandes.
Dabei ist:

$$\sigma_c = \int_0^{2\pi} \int_{\psi_{\min}}^{\pi} d\sigma \quad (3)$$

$$\sigma_c = \frac{\pi b^2}{4} \operatorname{ctg}^2 \frac{\psi_{\min}}{2}$$

Tabelle 1

Für Kupfer ist: $D_{110} = 2,55 \text{ \AA}$; $D_{100} = 3,61 \text{ \AA}$; $N_V = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ Atome/m}^3$
Für Protonen im Kupfer gilt: ($a = 0,143 \text{ \AA}$, definiert auf Seite 20)

E [keV]	b [\AA]	$\sigma_c(\psi_{\min} = 5^\circ) [\text{\AA}^2]$	$\psi_{s,100}(\text{Gl.11})$
120	$3,48 \cdot 10^{-3}$	$2,18 \cdot 10^{-4}$	$3,56^\circ$
80	$5,22 \cdot 10^{-3}$	$4,90 \cdot 10^{-4}$	$4,2^\circ$
40	$1,044 \cdot 10^{-2}$	$1,96 \cdot 10^{-3}$	5°
20	$2,088 \cdot 10^{-2}$	$7,85 \cdot 10^{-3}$	7°
10	$4,18 \cdot 10^{-2}$	$3,14 \cdot 10^{-2}$	10°

Daher erfahren die meisten Ionen beim Durchlaufen des Gitters nur sehr kleine Winkelablenkungen ($< 5^\circ$), sie laufen auf praktisch geraden Bahnen. Nur wenige Ionen werden durch zentrale Stöße mit Gitteratomen zurückgestreut. Da $d\sigma \sim 1/E^2$ ist, nimmt die Wahrscheinlichkeit der Rückstreuung durch die Energieverluste der Ionen im Gitter zu. Von Atomlagen tiefer im Kristall werden mehr Wasserstoffatome zurückgestreut als von Oberflächenatomen.

Von den im Gitter zurückgestreuten Ionen laufen die meisten in erster Näherung auf geraden Bahnen wieder aus dem Kristall hinaus. Die Wahrscheinlichkeit für mehrere große Ablenkwinkel ist für Wasserstoffionen mit einer Energie größer als einige keV im Gegensatz zu schweren Ionen [46, 47] vernachlässigbar klein. Die Kleinwinkelstreuung der Ionen beim Hinauslaufen aus dem Gitter sollte die Winkelverteilung der herauskommenden Wasserstoffatome nicht beeinflussen, denn die Winkelverteilung ändert sich über kleine Winkelbereiche ($< 5^\circ$) nur wenig. Während des Herauslaufens aus dem Kristall werden aus einer bestimmten Richtung im Mittel genauso viele Ionen hinausgestreut, wie hineingestreut werden.

Die Rückstreuung von Wasserstoffatomen nach diesem groben Modell zeigt Abb. 9 schematisch. Aus der Geometrie (Abb. 9) folgt:

$$\cos \gamma = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \cos \varphi \quad (4)$$

Die ankommenden Ionen haben die Energie E_1 . E_1' und E_2' sind die Energien vor und nach dem Stoß mit einem Gitteratom in der Tiefe x ; $\pi - \gamma$ ist der Ablenkwinkel. Für die Energie vor dem Stoß im Gitter E_1' und für die Austrittsenergie E_2 gelten dann, wenn $\bar{S}(E)$ der mittlere Energieverlust der Wasserstoffionen beim Durchlaufen des Gitters ist: [44, 45, 10, 14, 16]

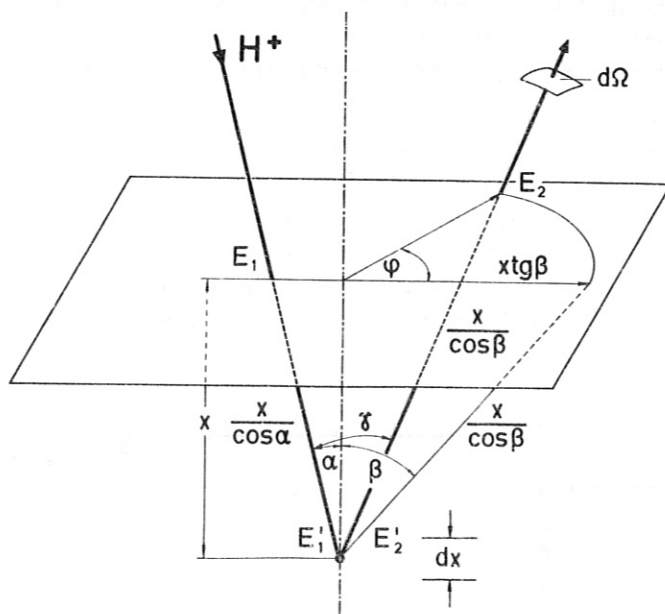


Abb. 9: Rückstreuung von Wasserstoffionen aus der Tiefe x von einem Festkörper (schematisch)

$$E_1'(x) = E_1 - \int_0^{\frac{x}{\cos \alpha}} \bar{S}(E) dx$$

und

$$E_2(x, \alpha, \beta, \varphi) = \left(E_1 - \int_0^{\frac{x}{\cos \alpha}} \bar{S}(E) dx \right) k^2 - \int_0^{\frac{x}{\cos \beta}} \bar{S}(E) dx \quad (6)$$

Hierbei ist k^2 der relative Energieverlust beim Stoß mit einem Gitteratom und Ablenkung um einen Winkel $\pi - \gamma$ im Laborsystem. Dabei ist:

$$k = - \frac{M_1 \cos \gamma}{M_1 + M_2} + \sqrt{\left(\frac{M_1 \cos \gamma}{M_1 + M_2} \right)^2 + \frac{M_1 - M_2}{M_1 + M_2}} \quad (7)$$

Aus der Austrittsenergie E_2 läßt sich nach (6) schließen, in welcher Tiefe x die Rückstreuung stattfand, wenn $\bar{S}(E)$ bekannt ist. Das Tiefenauflösungsvermögen Δx ist nach (6) gegeben durch:

$$\Delta x = \frac{dx}{dE_2(x, \alpha, \beta, \varphi)} \Delta E_2 \quad (8)$$

Es hängt vor allem vom Energieauflösungsvermögen ΔE_2 der Nachweisapparatur ab und beträgt bei diesen Messungen etwa 400 Å.

Die Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome ist dann nach Abb. 9 mit (1), (2), (4), (5) und (6) gegeben durch:

$$N(E_2, \alpha, \beta, \varphi) d\Omega dE_2 = N_v d\sigma(E_1') \frac{dx}{\cos \alpha} \quad (9)$$

In Gleichung (9) geht über Gleichung (5) und (6) wesentlich der differentielle Energieverlust der Ionen beim Durchlaufen des Gitters $S(E) = dE/dx$ ein. Dieser setzt sich aus dem Energieverlust $S_n(E)$ durch Stöße mit Gitteratomen und $S_e(E)$ durch Stöße mit Elektronen zusammen. Da der Energieverlust durch viele Einzelprozesse zustande kommt, ist er keine feste Größe, sondern schwankt etwas um einen mittleren differentiellen Energieverlust $\bar{S}(E)$. Dieser ist noch von der Richtung abhängig, in der die Ionen das Gitter des Festkörpers durchlaufen [18, 23, 25, 32]; für Ionen auf geführten Bahnen ist er besonders klein. Für Protonen beim Durchlaufen von polykristallinen Kupferfolien ist $\bar{S}(E)$ mehrfach experimentell bestimmt worden (Abb. 10) [48, 49, 50]. Dabei wurden jedoch nur solche Wasserstoffatome nachgewiesen, welche die Folie geladen verlassen hatten.

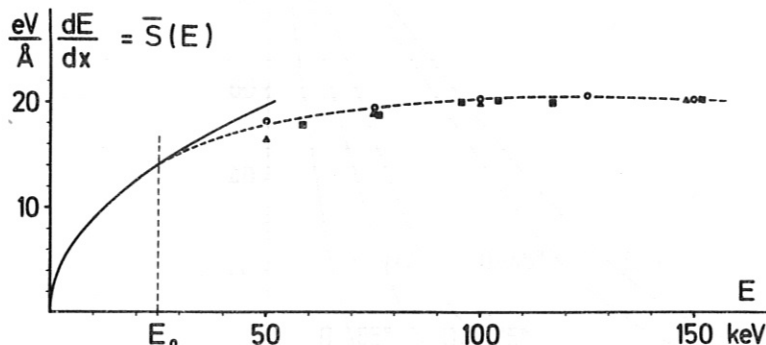


Abb. 10: Mittlerer differentieller Energieverlust $dE/dx = \bar{S}(E)$ von Protonen in polykristallinem Kupfer in Abhängigkeit von der Ionenenergie; ■ S.P. WARSHAW [48]; ▲ D.KHAN [49]; ● M.BADER u.a. [50].
---- an die Meßwerte angepaßt, — berechnet nach J.LINDHARD u.a. (Gleichung 1B im Anhang) [51, 52]

Theoretische Berechnungen des differentiellen Energieverlustes [51 bis 53] zeigen, daß für Protonen im Kupfer für $E > 1$ keV der Energieverlust durch Stöße mit Gitteratomen $\bar{S}_n(E)$ gegenüber dem Energieverlust an Elektronen $\bar{S}_e(E)$ vernachlässigbar klein ist. Für $\bar{S}_e(E)$ sind für niedrige ($E < E_0 = M_1 v_0^2/2$) und sehr hohe ($E \gg E_0$) Ionenenergien analytische Formeln abgeleitet worden [51, 54, 25, 55, 56, 57]. Hierbei ist $v_0 = z_2 e_0^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar$ und damit E_0 die Energie der Elektronen in der 1.Bohrschen Bahn der Gitteratome. Für Protonen in Kupfer ist $E_0 = 25$ keV, das heißt für den hier interessierenden Energie-

bereich gilt keine dieser analytischen Näherungen. Zur Auswertung wurden daher die Gleichungen (5), (6) und (9) mit den Werten der in Abb. 10 angegebenen ausgezogenen Kurve für $\bar{S}(E)$ auf der Rechenmaschine numerisch integriert. (Eine Auswertung mit analytischen Näherungen wird im Anhang 1 wiedergegeben).

2.3.3. Vergleich mit den Messungen

Die berechneten Kurven für die Energie- und Winkelverteilung der an Kupfer zurückgestreuten Wasserstoffatome sind bereits in Abb. 7 und Abb. 8 zu den gemessenen Werten mit eingetragen. Die absoluten Intensitäten stimmen innerhalb der Meßfehler mit den gemessenen Werten überein. Die größte Unsicherheit liegt bei der Strommessung, weil Sekundärelektronen und von Ionenstrahl von den Blenden ausgelöste Elektronen mitgemessen wurden. Aus den Abbildungen 7 und 8 ersieht man, daß der Verlauf der gemessenen Kurven durch die berechnete nur sehr schlecht wiedergegeben wird⁺⁾ . Die Ursache für die Abweichungen konnte nicht geklärt werden. Die im theoretischen Modell angenommenen geraden Ionenbahnen und die Rückstreuung in einem Zweierstoß sind sicherlich gerechtfertigt. Durch die möglicherweise hohe Konzentration von eingeschossenem Wasserstoff an der Beschußstelle, kann vor allem der differentielle Energieverlust $\bar{S}(E)$ andere Werte annehmen, als in Abb. 10. Die großen Abweichungen in der Winkelverteilung für $\beta > 65^\circ$ (Abb. 8) lassen sich damit erklären, daß der Kupfer-Einkristall an der Stelle des dauernden Beschusses eine leichte Vertiefung zeigt.

+)

Neuere Messungen an der gleichen Apparatur mit wesentlich besseren Energieauflösungsvermögen der Zähler zeigen die gleichen Abweichungen.

Abb.11 bringt den Zusammenhang der Gleichung (6) unter Berücksichtigung von Gleichung (5).

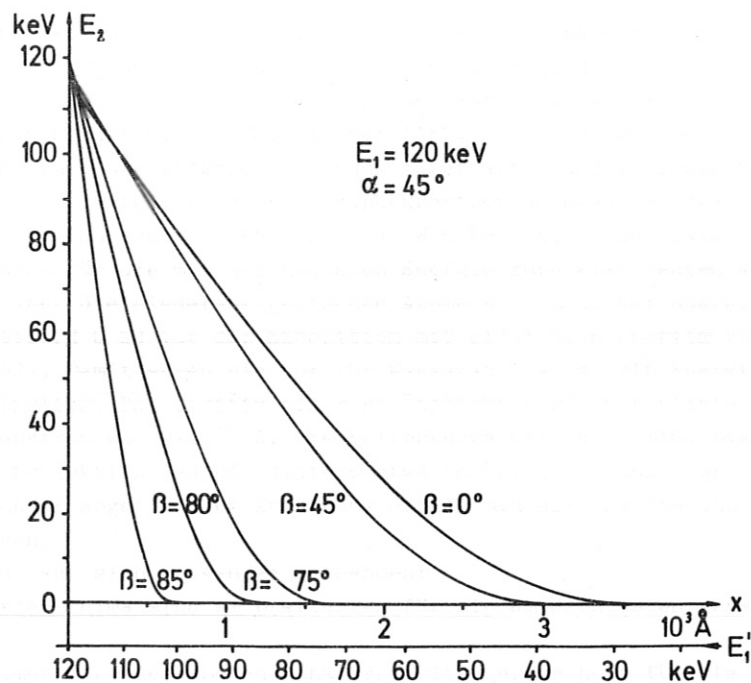


Abb. 11: Energie der zurückgestreuten Wasserstoffatome in Abhängigkeit von der Tiefe x der Rückstreuung bzw. der Energie E_1' , bei der die Rückstreuung erfolgte, für verschiedene Ausfallswinkel β . (Berechnet nach Gleichung (5) und (6). $E_1 = 120 \text{ keV}$; $\alpha = 45^\circ$.)

Man sieht, daß die Wasserstoffionen aus Tiefen bis zu 3000 \AA zurückgestreut werden. Die Rückstreuung erfolgt dort mit einer Energie von etwa 40 keV .

3. Das <100>-Schattenminimum

3.1. Photographische Aufnahme der Schatten

Die durch zentrale oder fast zentrale Stöße an Gitteratomen zurückgestreuten Ionen laufen auf nicht geführten Bahnen und können nicht in dicht gepackte Gitterrichtungen gelangen. In der Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome treten in diesen Richtungen Schatten, d.h. Minima auf (Abb. 8). Um einen Überblick über die möglichen Schatten in einer größeren Umgebung zu erhalten und gleichzeitig die Orientierung des Kristalls zu prüfen, wurden die zurückgestreuten Wasserstoffatome mit Photoplatten nachgewiesen (Meßanordnung siehe Abb. 5). Wie bereits erwähnt, sind die Schattenminima am deutlichsten für die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Wasserstoffatome ausgeprägt. Da aber die niederenergetischen Atome an Intensität überwiegen, wurden die Photoplatten (Ilford Q 2) vor der Exposition mit einem Gelatinefilm von ca. $160 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ beschichtet [27]. Damit waren sie nur für Wasserstoffatome mit Energien größer als etwa 60 keV empfindlich. Das Positiv einer so "belichteten" Photoplatte zeigt Abb. 12. Der primäre Ionenstrom war $2 \cdot 10^{-8}$ A, die Belichtungszeit ca. 5 min. Das Bild stellt eine gnomonische Projektion des kfz-Gitters etwa in [010]-Richtung dar. Durch einen Vergleich mit der darunter abgebildeten Zeichnung erhält man die Indizierung der einzelnen Ebenen und Richtungen.

Aus dem Bild läßt sich folgendes entnehmen:

- I. Die Schattenminima sind am breitesten für die am dichtesten gepackten Gitterrichtungen.
- II. Ein zusammenhängender Ebenen-Schatten tritt gerade noch für die {511}-Ebenen auf. Die <13, 9, 2>-Richtungen sind gerade noch zu erkennen, der Abstand der Atome ist hier etwa 28 \AA (Gitterkonstante des Kupfers: $3,61 \text{ \AA}$).
- III. Die Kettenschatten liegen nicht isoliert, sondern stets im Schnittpunkt von zwei Ebenen-Schatten, sie heben sich aber von diesen deutlich ab.

Es ist schwierig, aus der photographischen Aufnahme mehr als qualitative Aussagen abzuleiten, weil die Breite und der Kontrast der Linien und Punkte sehr stark von der Dicke der überschichteten Gelatineschicht, der Expositionszeit und den Entwicklungsbedingungen abhängt.

3.2. Diagramm mit Linien gleicher Intensität

Für quantitative Aussagen wurde die Intensität der zurückgestreuten Wasserstoffatome in einer zweidimensionalen Umgebung der <100>-Richtung mit dem Oberflächen-Sperrschichtzähler ausgemessen. Der Raster ist $1/2^\circ$. Für jeden Punkt wurde die Energieverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome aufgenommen. Aus diesen Meßwerten wurden über eine Auswertung durch die Rechenmaschine (IBM 7090) Diagramme mit Linien gleicher Intensität für die in die verschiedenen Energiebereiche zurückgestreuten Wasserstoffatome gezeichnet. Eines dieser Bilder ist in Abb. 13 wiedergegeben. Bei den Diagrammen, welche im folgenden ausgewertet wurden, liegt das [010]-Minimum in der Mitte, und nicht, wie in Abb. 13, am Rand.

Wie schon auf der Photoplatte zeigt sich, daß der [010]-Kettenschatten kontinuierlich in die zwei (100)- bzw. (001)- und die zwei ($\bar{1}01$)- bzw. (101)-Ebenenschatten übergeht. Die Überhöhungen zwischen den Ebenenschatten sind nicht symmetrisch, die Maxima sind in Richtung der (100)- bzw. (001)-Ebene verschoben.

Versucht man aus dem Intensitätsschichtlinienbild die Form des <100>-Kettenschattens in einer bestimmten Ebene herauszuzeichnen, so ergeben sich für die verschiedenen Ebenen ganz verschiedene Breiten und verschiedene relative Tiefen der Minima sowie verschiedene

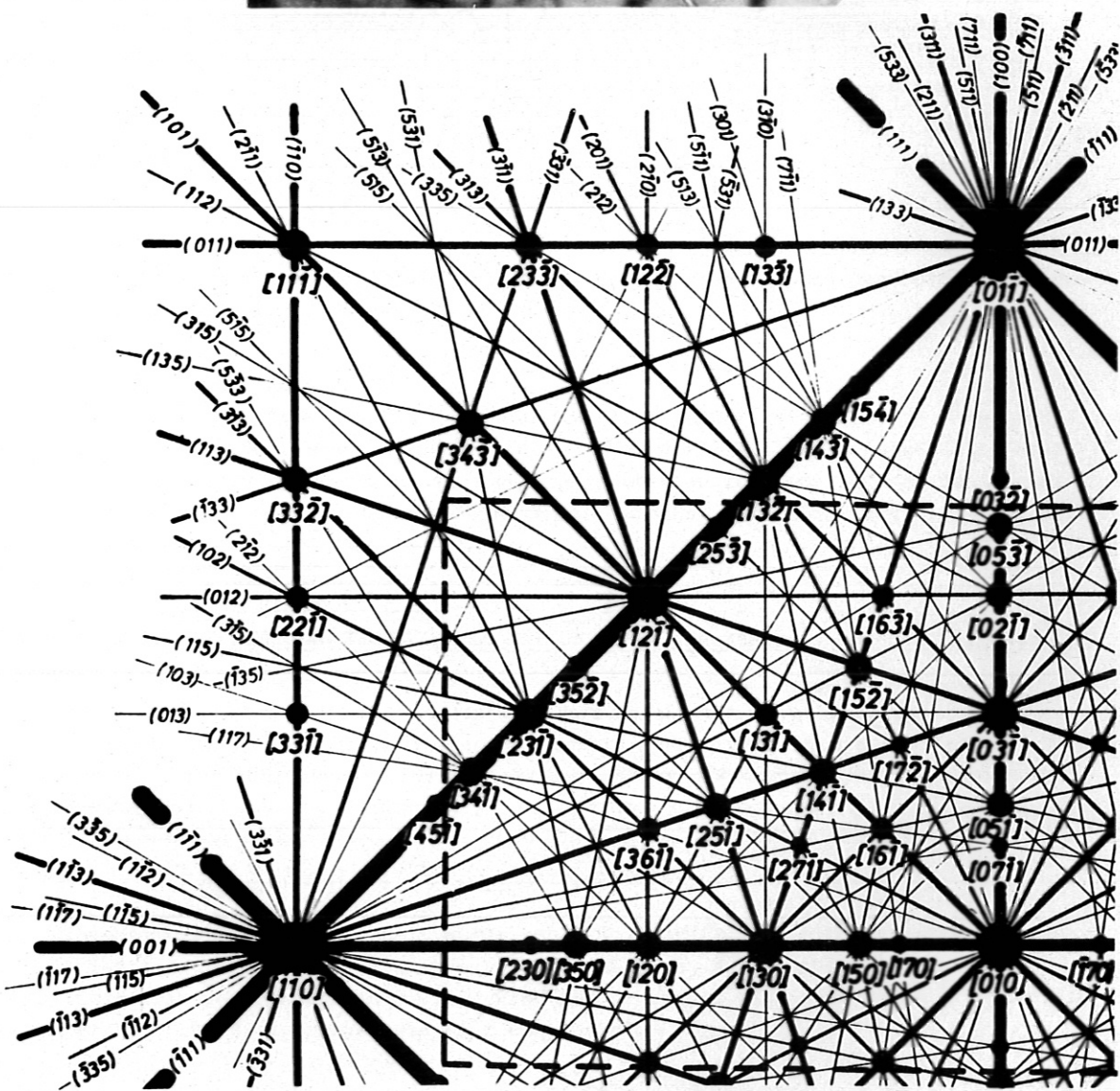
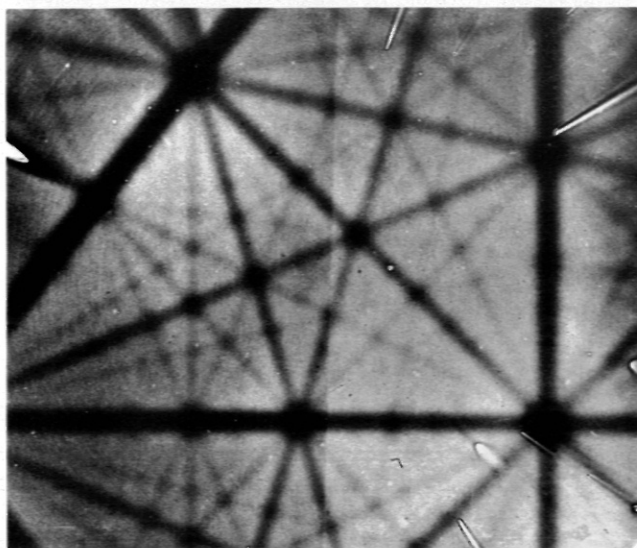


Abb. 12: oben: Photographische Aufnahme der von einem Cu-Einkristall zurückgestreuten Wasserstoffatome. $E_1 = 120$ keV, die Photoplatte war empfindlich für $E > 60^1$ keV. unten: Gnomonische Projektion eines kfc-Gitters in [010]-Richtung. Der Ausschnitt der photographischen Aufnahme ist eingezeichnet.

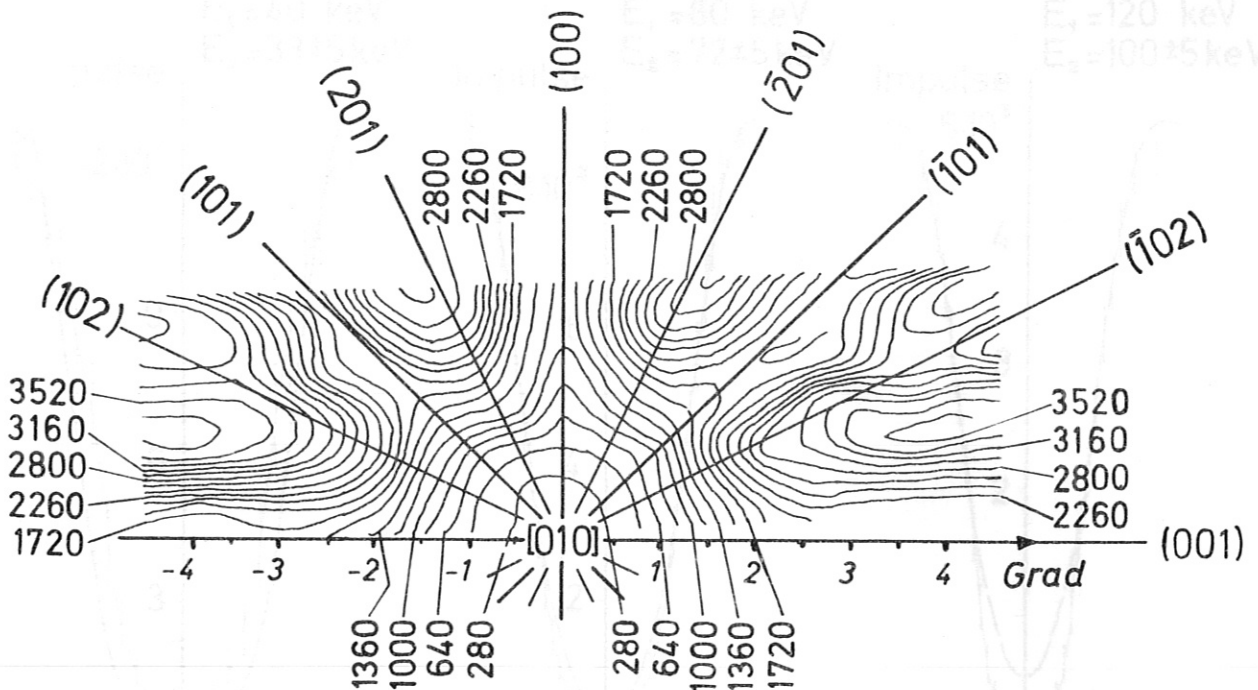


Abb. 13: Diagramm mit Linien gleicher Intensität für die Umgebung des [010]-Schattenminimums. $E_1 = 120 \text{ keV}$, $E_2 = 100 \pm 5 \text{ keV}$.

Überhöhungen an den Rändern⁺).

Um im folgenden die Abhängigkeit der Form des $\langle 100 \rangle$ -Schattenminimums von verschiedenen Parametern zu bestimmen, wurde für diese stets zwei $\{210\}$ -Ebenen ausgewählt. Hier ist der Kettenschatten am besten von den Ebenenschatten isoliert. An den Rändern erhält man etwa 80 % der Intensität des Maximums zwischen den $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Ebenen.

3.3. Abhängigkeit der Form der Schatten von der primären Ionenenergie und der Targettemperatur

Die aus den Diagrammen mit Linien gleicher Intensität herausgezeichneten Formen der $\langle 100 \rangle$ -Schattenminima in zwei $\{210\}$ -Ebenen in Abhängigkeit von der primären Ionenenergie E_1 zeigt Abbildung 14 für die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Wasserstoffatome.

+)

Gleichzeitig mit dieser Arbeit wurde von J.H. BARRETT [58] ein Intensitätsschichtlinienbild für die (p, γ) -Ausbeute beim Einschuss von MeV-Protonen in einen Al-Einkristall in der Umgebung der $\langle 110 \rangle$ -Richtung berechnet. Aus dem Ergebnis wurden die gleichen Schlußfolgerungen wie hier abgeleitet.

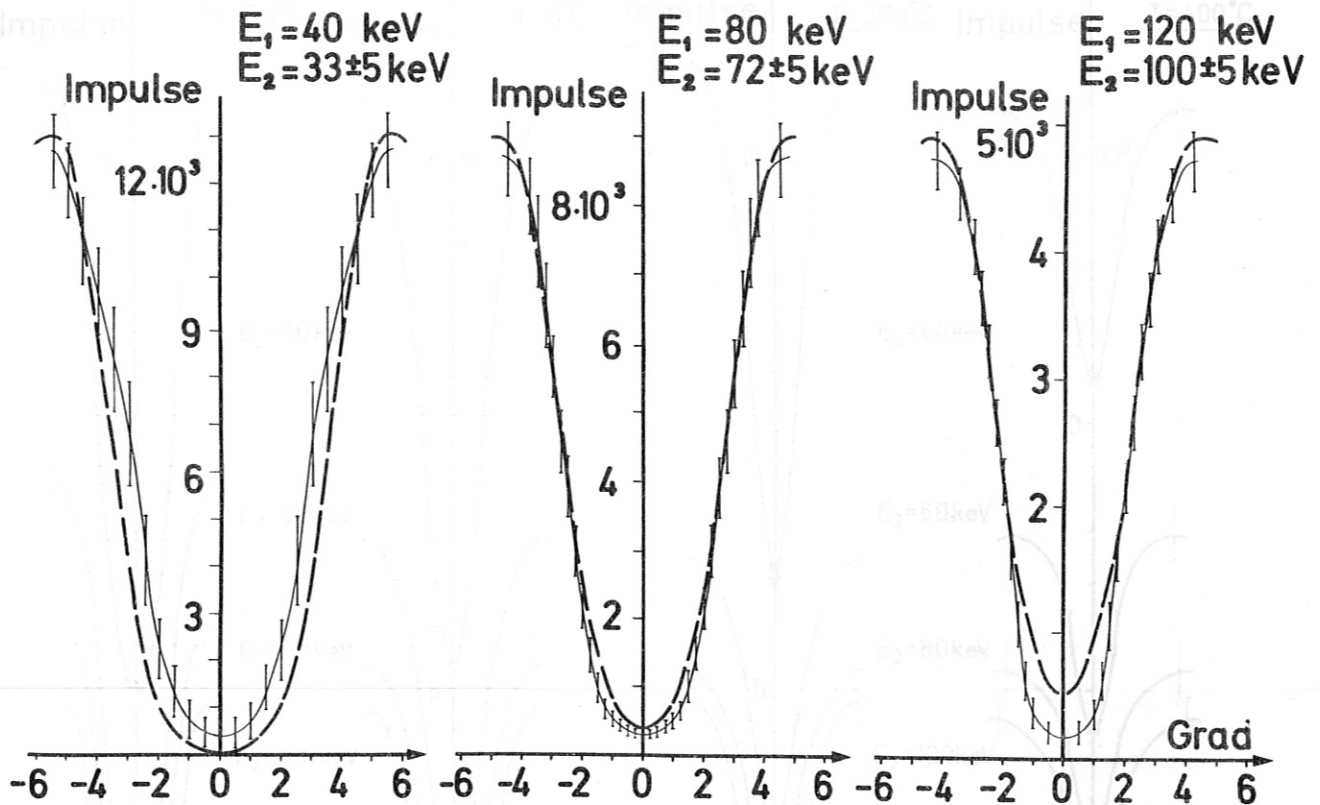


Abb. 14: Form der $\langle 100 \rangle$ -Schattenminima in einer $\{210\}$ -Ebene für drei verschiedene primäre Ionenenergien E_1 . Die ausgezogenen Kurven wurden durch die Meßwerte gelegt, die gestrichelten Kurven sind nach der Theorie von OEN [59] (Gleichung 14) berechnet.

Als Meßfehler wurden die Unterschiede von zwei im Diagramm mit Linien gleicher Intensität enthaltenen $\{210\}$ -Ebenen angenommen. Primärer Ionenstrom und Meßzeiten waren für alle Kurven gleich. Die Minima werden mit steigender Energie schmaler, die Intensität der zurückgestreuten Wasserstoffatome wird kleiner.

Ebenfalls über Diagramme mit Linien gleicher Intensität erhaltene Formen der $\langle 100 \rangle$ -Minima in $\{210\}$ -Ebenen für verschiedene Temperaturen des Kupfer-Kristalls bringt Abb. 15. Die primäre Ionenenergie E_1 war 120 keV, der Ionenstrom $1 \cdot 10^{-8}$ A, die Energiebereiche der zurückgestreuten Wasserstoffatome wie angegeben $E_2 \pm 5$ keV. Die Meßfehler sind jeweils nur im Minimum an den Flanken und im Maximum angegeben; die ausgezogenen Linien wurden durch die Mittelwerte der Meßpunkte gelegt.

Die Schattenminima für die mit hoher Energie zurückgestreuten Wasserstoffatome ($E_2 = 115$ keV, und $E_2 = 100$ keV) sind bei tiefen Temperaturen fast rechteckförmig mit sehr steilen Flanken. Mit steigender Temperatur werden die Flanken flacher, die Minima spitzer. Die Schatten für die mit niedriger Energie ($E_2 = 80$ keV, 60 keV und 40 keV) zurückgestreuten Wasserstoffatome sind schmaler als für hohe Energien; die relative Tiefe des Minimums ist wesentlich kleiner. Mit Ausnahme der Kurven für 115 keV ist die absolute Intensität der in einen Energiebereich $E_2 \pm 5$ keV zurückgestreuten Wasserstoffatome bei allen Temperaturen im Maximum innerhalb der Fehlergrenze gleich, während im Minimum ein deutlicher Anstieg mit der Temperatur zu sehen ist.

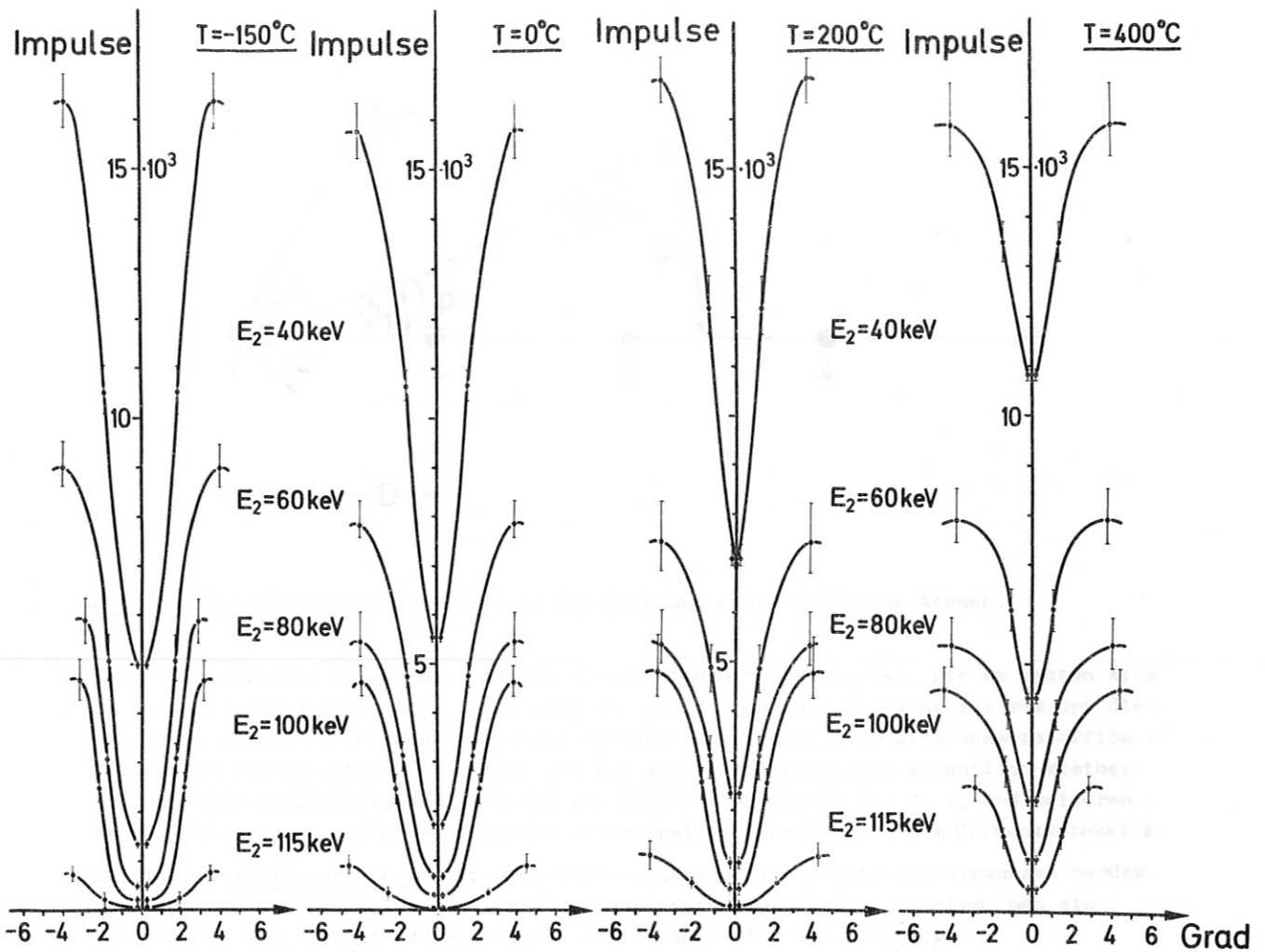


Abb. 15: Form der $\langle 100 \rangle$ -Schattenminima in einer $\{210\}$ -Ebene für verschiedene Temperaturen des Kupferkristalls und verschiedene Energiebereiche $E_2 \pm 5 \text{ keV}$ der zurückgestreuten Wasserstoffatome. Die Meßgenauigkeit wurde nur im Maximum an den Flanken und im Minimum angegeben. $E_1 = 120 \text{ keV}$.

3.4. Theoretische Berechnung der Form der Schattenminima

3.4.1. Verwendete Modelle

Die Form der Schattenminima in Kettenrichtung in Abhängigkeit von der Ionenenergie und der Targettemperatur wurde zuerst von O.S. OEN [59] und später von J.U. ANDERSEN [35, 36] und von L.C. FELDMAN [60] nach dem Modell einer isolierten Atomkette berechnet. Im folgenden wird zuerst eine Abschätzung von ψ_s angegeben und dann die wesentlichen Annahmen der verschiedenen Modelle erläutert. Die Ergebnisse der Rechnungen werden mit den gemessenen Formen der Schattenminima verglichen und die Grenzen der Modelle gezeigt.

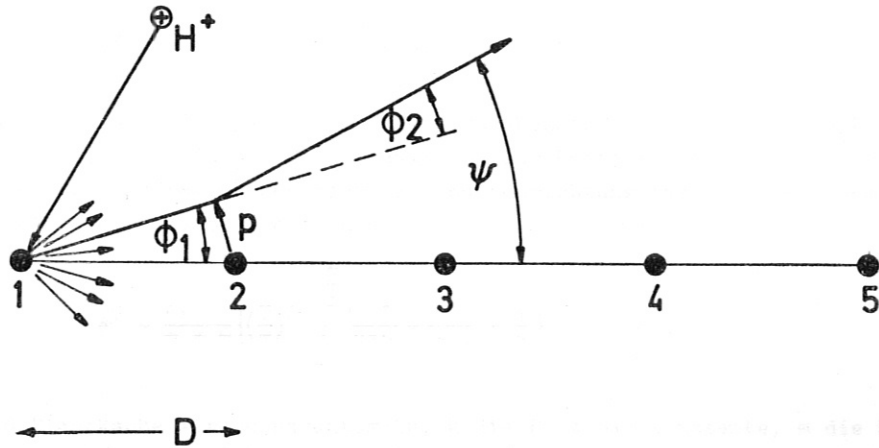


Abb. 16: Entstehung des Schattens in der Richtung einer Kette von Atomen.

Abb. 16 stellt die Atome einer idealen isolierten Gitterkette dar. Die am ersten Atom in Kettenrichtung gestreuten Ionen kann man für die weitere Bewegung als vom Ort dieses Atoms ausgehend betrachten, weil die kleinste Entfernung beim Stoß Wasserstoffion - Gitteratom für Energien über einige keV bei großen Ablenkwinkeln wesentlich kleiner ist, als der Gitterabstand D (Tabelle 1). Durch Ablenkung am 2., 3. .. und weiteren Atomen entsteht in Kettenrichtung ein kreisförmiger Schatten mit dem Öffnungswinkel ψ . Zu einer Abschätzung von ψ_s für eine Kette ohne thermische Gitterschwingungen berücksichtigt man nur die beiden ersten Atome der Kette [59]. Weiterhin nimmt man ein Coulombpotential für die Ablenkung am 2. Atom an⁺). Aus Abb. 16 folgt:

$$\psi = \varphi_1 + \varphi_2(p) \tag{10}$$

Für kleine Winkel gilt:

$$\varphi_1 = \frac{p}{D}; \quad \varphi_2(p) = \frac{b}{p}$$

Damit wird:

$$\psi = \frac{p}{D} + \frac{b}{p} \tag{10a}$$

Der Grenzwinkel ψ_s ist gleich dem Minimum von ψ . Durch Differentiation erhält man:

$$p_{\min} = \sqrt{b \cdot D}; \quad \psi_s = 2\sqrt{\frac{b}{D}} \tag{11}$$

Nach (11) berechnete Werte von ψ_s sind in Tabelle 1 eingetragen.

Ohne thermische Gitterschwingungen ist das Schattenminimum kastenförmig mit senkrechten Flanken und einer Überhöhung an den Rändern. Durch die Temperaturbewegung der Atome wird das Schattenminimum verwaschen, die Flanken werden schräg und das Minimum geht bei genügend hoher Temperatur nicht mehr ganz auf Null. Da die Dauer einer Gitterschwingung wesentlich größer ist, als die Stoßzeiten der Ionen an der Gitterkette, kann man die Ket-

⁺) Berücksichtigt man noch das 3. Atom, so wird der Ablenkwinkel φ_2 um etwa 10 % vergrößert. Da das Coulombpotential für den hier behandelten Energiebereich etwas zu stark ist, laufen die durch die Annahmen gemachten Fehler in entgegengesetzter Richtung und kompensieren sich zum Teil.

te während der Schattenbildung als feststehend mit einer bestimmten Verteilung $P(r)$ der thermischen Auslenkung r der Atome von der idealen Gitterkette ansehen. Die Auslenkungen lassen sich in guter Näherung durch eine Gaussverteilung beschreiben [18, 61]:

$$P(r)r \, dr = c \cdot \frac{2}{\rho^2} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} r \, dr \quad (12)$$

Hierbei ist $c = 1 - \exp(-r_0^2/\rho^2)$ eine Normierungskonstante mit $r_0 = \sqrt{1/\pi N_V D}$ dem mittleren Abstand der Atome in der Ebene senkrecht zur Kettenrichtung. Das mittlere thermische Auslenkungsquadrat ρ^2 senkrecht zur Kettenrichtung läßt sich aus dem Debye - Waller - Faktor [62, 63, 64] berechnen:

$$\rho^2 = \frac{6\hbar}{m k \Theta} \left\{ \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{d\xi}{\exp \xi - 1} + \frac{1}{4} \right\} \quad (13)$$

Wobei \hbar das Plancksche Wirkungsquantum/ 2π , k die Boltzmannkonstante, m die Masse der Gitteratome und Θ die Debye-Temperatur [64] des Kristalls ist (Tabelle 2).

Tabelle 2

Das mittlere thermische Auslenkungsquadrat ρ^2 ist für Cu nach der Debye-Waller-Theorie: ($\Theta_D = 320 \text{ }^\circ\text{K}$ [64] und $a = 0,143 \text{ \AA}$)

T [°K]	T [°C]	ρ^2 [Å ²]
123°	- 150	$6,34 \cdot 10^{-3}$
273°	0	$1,22 \cdot 10^{-2}$
473°	200	$2,05 \cdot 10^{-2}$
673°	400	$2,98 \cdot 10^{-2}$

O.S. OEN [59] berücksichtigt auch zur Berechnung der Abhängigkeit der Form der Schatten von der Temperatur nur die ersten zwei Atome der Kette. Mit (12) ergibt sich für ein beliebiges Wechselwirkungspotential, bei Vernachlässigung von Korrelationen in den Amplituden der Gitterschwingungen, folgende Intensitätsverteilung $F(\psi)$ in Schattenrichtung:

$$F(\psi)\psi \, d\psi = \psi \, d\psi \frac{2D^2}{\rho^2} e^{-\frac{D^2}{\rho^2} \psi^2} \int_0^\infty e^{-\frac{D^2}{\rho^2} \left[\frac{p}{D} + \psi_2(p) \right]^2} I_0 \left(\frac{2D^2}{\rho^2} \psi^2 \left[\frac{p}{D} + \psi_2(p) \right] \right) \frac{p}{D} \, d\left(\frac{p}{D}\right) \quad (14)$$

Hierbei ist I_0 die modifizierte Besselfunktion. Für ein Coulombpotential galt für kleine Ablenkwinkel $\psi_2(p) = b/p$. Für ein exponentiell abgeschirmtes Coulombpotential folgt bei Verwendung der Impulsnäherung [65]

$$\psi_2(p) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{a \cdot E} K_1 \left(\frac{p}{a} \right) \quad (15)$$

Hierbei ist $a = 0,8853 a_0 \left(z_1^{\frac{2}{3}} + z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}$ der Bohrsche Abschirmradius mit $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$; K_1 ist die modifizierte Hankelfunktion.

Für die Parameter dieser Messung wurde Formel (14) mit (13) und (15) ausgewertet, die Ergebnisse sind in Abb. 14 und Abb. 17a eingetragen.

J.U.ANDERSEN [35, 36] betrachtet nach J. LINDHARD [18] die Schattenbildung durch eine unendlich lange ideale Gitterkette. Das Potential der einzelnen Atome der Kette wird durch ein Kettenpotential $U(r)$ angenähert, welches er gleich dem ersten Glied einer Fourierentwicklung des Potentials der Atomkette setzt. Für ein Thomas-Fermi-Potential der einzelnen Kettenatome gibt J. LINDHARD [18] als Kettenpotential folgendes Standardpotential an:

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{D} \left(\ln \frac{3a^2}{r^2} + 1 \right) \quad (16)$$

Die thermischen Gitterschwingungen werden nur durch Schwingungen des ersten Atoms mit doppelter Amplitude nach (12) mit (13) berücksichtigt. Am ersten Atom etwa in Kettenrichtung gestreute Ionen laufen auf geraden Bahnen bis zur Mittelebene zwischen erstem und zweitem Atom, von dort ab werden sie als im Kettenpotential $U(r)$ laufend betrachtet. Ihre Energie senkrecht zur Kette E_{\perp} ist dann gleich: $E_{\perp} = E\varphi_a^2 + U(r_a)$, wobei φ_a der Anfangswinkel gegen die Kettenrichtung ist und r_a der Abstand, den das Ion beim Durchlaufen der Mittelebene von der Kette hat. Nach Verlassen des Bereichs des Kettenpotentials gilt $E_{\perp} = E\psi^2$, die Ionen fliegen unter dem Winkel ψ gegen die Kettenrichtung auf geraden Bahnen weiter. Die Ionen, die die Oberfläche im Bereich des Potentials einer Gitterkette erreichen, erfahren noch einmal eine Ablenkung in Kettenrichtung. Aufgrund dieses Modells mit einer Rechenmaschine berechnete Formen der Schattenminima für verschiedene Kristalltemperaturen zeigt Abb. 17b⁺).

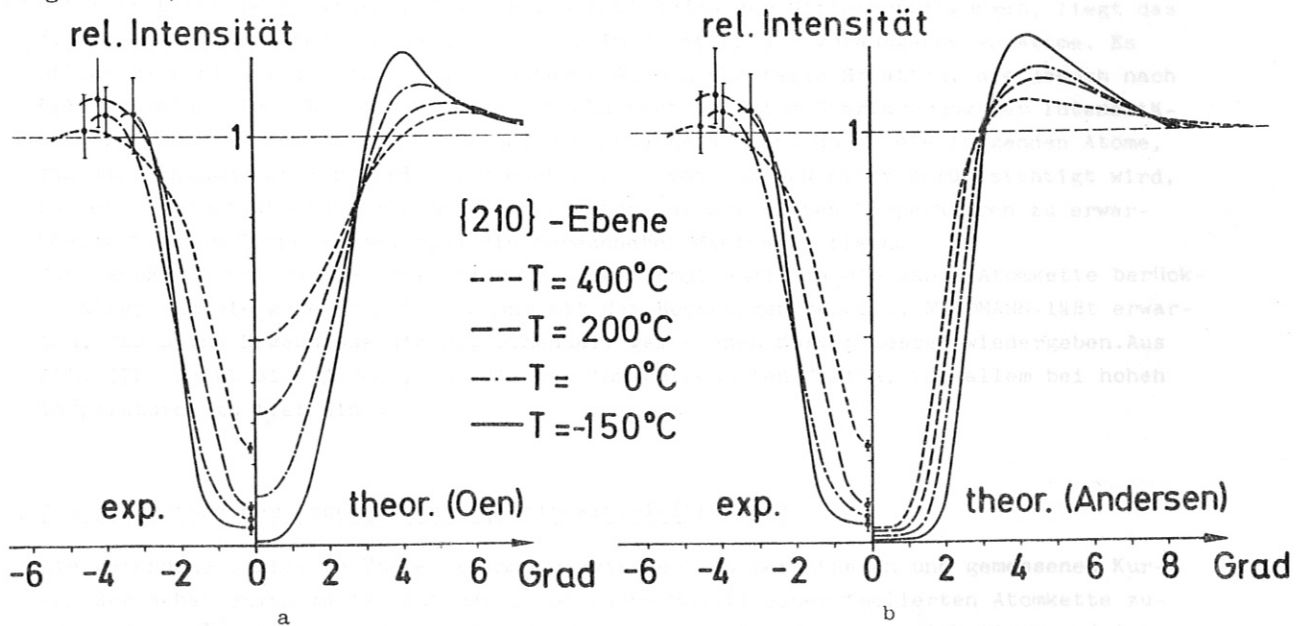


Abb. 17: Vergleich der gemessenen mit berechneten Formen der $\langle 100 \rangle$ -Schattenminima für verschiedene Temperaturen des Kupfereinkristalls. ($E_1 = 120$ keV, $E_2 = 100 \pm 5$ keV).

L.C. FELDMANN [60] hat die Bahnen vieler von einem Gitteratom etwa in Kettenrichtung laufender Ionen explizit über ein Monte-Carlo-Programm auf der Rechenmaschine integriert, wobei die Kettenatome nach einer Gaußverteilung (Gleichung (12) und (13)) von ihrer idealen

+)

Herr Dr. J.U. ANDERSEN, Institute of Physics, University of Aarhus, hat die Parameter dieser Messungen freundlicherweise in sein Maschinenprogramm eingesetzt und mir die Ergebnisse überlassen.

Lage ausgelenkt waren. Seine Ergebnisse stimmen nach seinen Angaben für MeV-Protonen in Si mit denen von J.U. ANDERSEN gut überein.

3.4.2. Vergleich mit den Messungen

Die Messungen ergaben im Gegensatz zu den Rechnungen keinen kreissymmetrischen Schatten in Kettenrichtung. Wie schon erwähnt, wurden zu einem Vergleich mit den Rechnungen die Formen der gemessenen Schatten in {210}-Ebenen ausgewählt. Hier ist der Einfluß von überlagerten Ebenenschatten am kleinsten. Eine Übereinstimmung mit den Rechnungen ist wegen der fehlenden Kreissymmetrie der Schatten nur für das Minimum und die Flanken zu erwarten, jedoch nicht für die Überhöhungen an den Rändern. Es ist außerdem zu beachten, daß die Schattenbildung für die mit verschiedener Energie E_2 zurückgestreuten Ionen in verschiedenen Tiefen des Kristalls und damit bei verschiedenen Energien E_2^1 erfolgt (Abb. 9 und 11). Das wird zu anderen Kurvenformen führen.

Die Abb. 14 und die Abb. 17 zeigten die gemessenen Schattenminima in den {210}-Ebenen für die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Ionen für verschiedene primäre Ionenenergien und verschiedene Targettemperaturen im Vergleich mit berechneten Kurven. Nur die mittleren Breiten der experimentellen und theoretischen Kurven stimmen ungefähr überein. Die genauen Formen der Schattenminima weichen besonders bei hohen Temperaturen beträchtlich voneinander ab.

O.S. OEN hat nur die ersten zwei Atome der Kette zur Schattenbildung berücksichtigt. Bei sehr hohen Temperaturen, d.h. großen Amplituden der Gitterschwingungen, liegt das 3., 4. und weitere Kettenatom nicht immer im Schatten der vorausgehenden Atome. Es bilden sich hinter dem 3., 4. und weiteren Atomen ebenfalls Schatten, die jedoch nach (11) schmaler sind. Bei den Messungen beobachtet man eine Überlagerung der Intensitäten. Bei höheren Temperaturen bewirkt die Schattenbildung durch die folgenden Atome, daß das Minimum spitzer wird. Da dieser Effekt von O.S.OEN nicht berücksichtigt wird, ist eine Übereinstimmung mit den Experimenten nur bei tiefen Temperaturen zu erwarten, bei hohen Temperaturen sind die berechneten Minima zu flach.

J.U. ANDERSEN hat dagegen zur Berechnung der Schattenminima die ganze Atomkette berücksichtigt und die gute Übereinstimmung mit den Rechnungen von L.C. FELDMANN läßt erwarten, daß seine Ergebnisse die experimentell gemessenen Kurven besser wiedergeben. Aus Abb. 17b ergibt sich jedoch, daß die von ihm berechneten Minima, vor allem bei hohen Temperaturen zu tief sind.

3.4.3. Deutung der Meßergebnisse (Klein-Winkel-Streuung)

Die gefundene schlechte Übereinstimmung zwischen den berechneten und gemessenen Kurven der Schattenminima ist auf das zu einfache Modell einer isolierten Atomkette zurückzuführen⁺). Im folgenden werden die Ursache der Abweichungen diskutiert und Aussagen über die Klein-Winkel-Streuung von Ionen beim Durchlaufen von Kristallen abgeleitet.

In einem Kristall liegen die Gitterketten nicht isoliert, sondern es laufen viele Gitterketten in Abständen kleiner oder gleich den Abständen der Atome in der Kette paral-

+)

Die theoretisch berechneten Formen der Schattenminima wurden bis jetzt nur mit Messungen bei höheren Ionenenergien (400 keV bis MeV) verglichen. Obwohl die Minima in verschiedenen Ebenen gemessen wurden, ist die Übereinstimmung mit den Rechnungen stets als sehr gut bezeichnet worden [35, 36, 59, 60]. Das ist wohl darauf zurückzuführen, daß nur bei Zimmertemperatur gemessen wurde.

lei nebeneinander. Nach der Schattenbildung an einer Kette im Kristall müssen die Ionen im allgemeinen zwischen vielen Ketten hindurchlaufen, bevor sie die Oberfläche erreichen und erfahren dabei viele kleine Winkelablenkungen. In den Richtungen, in denen die benachbarten Gitterketten am dichtesten folgen, bilden sich als Schatten hinter einer Kette von Ketten [18] Ebenenschatten aus. Die Klein-Winkel-Streuung beeinflusst die Form der Schattenminima umso stärker, je tiefer die Ionen im Kristall zurückgestreut werden.

Folgendes Bild zeigt, von welcher Tiefe an die Klein-Winkel-Streuung berücksichtigt werden muß: Für die von einem Gitteratom im Kristall zurückgestreuten Ionen treten in sehr vielen Richtungen Schatten auf. Die Anzahl der Schatten steigt mit zunehmender Tiefe im Kristall, so daß sich die Schatten schließlich überlappen. Abb. 18a und b zeigen die möglichen Kettenschatten und deren Breite für Rückstreuung von Wasserstoffionen von 120 keV in einem idealen Kupfergitter 5 und 10 Atomlagen unter der Oberfläche.

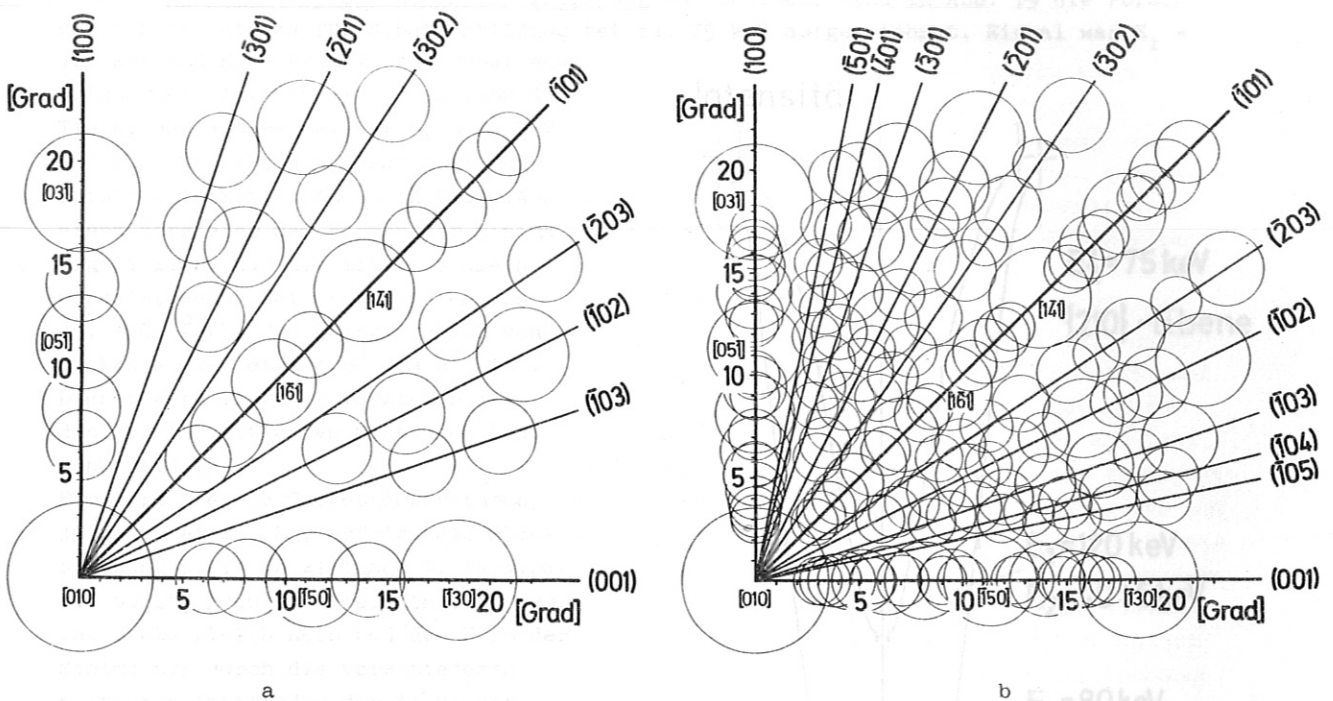


Abb. 18: Mögliche Kettenschatten für Wasserstoffionen von $E_1 = 120$ keV, welche
 a) 5 Atomlagen unter der Oberfläche und
 b) 10 Atomlagen unter der Oberfläche zurückgestreut wurden.
 (Nach Formel (11) ohne thermische Gitterschwingungen berechnet)

Bei 5 Atomlagen, d.h. 18 \AA Tiefe sind die einzelnen Kettenschatten weitgehend getrennt. Sie überlappen sich nur in den $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Ebenen. Bei 10 Atomlagen liegen die möglichen Schatten schon fast vollkommen dicht. Das heißt, für Rückstreuung aus Tiefen größer als 10 Atomlagen werden die Ionenbahnen durch Kleinwinkelstreuung beeinflusst. Es läßt sich zeigen, daß sich die Winkelstreuung von Ionen nach Durchgang durch eine Materieschicht ausreichender Dicke wegen des starken Abfalls der Atompotentiale in zwei Bereiche einteilen läßt [66, 67, 68]. Die meisten Ionen erfahren nur eine kleine Winkelablenkung. Für diese läßt sich die Winkelverteilung eines anfangs parallelen Strahls nach Durchlaufen der Schicht in guter Näherung durch eine Gaußverteilung beschreiben. Zu großen Winkeln hin hat die Gaußverteilung einen "Schwanz", der von sehr wenigen um große Winkel abgelenkten Ionen herrührt. Gemessene Halbwertsbreiten der Winkelablenkung beim Durchgang von 160 keV Protonen durch polykristalline Cu-Folien von 2000 bis 5000 \AA ergeben Werte von ca. $4,5^\circ$ bis 15° [69].

Bei den hier vorliegenden Messungen war das Energieauflösungsvermögen der Oberflächensperrschichtzähler etwa 7,5 keV, d.h., nach Gleichung (7), daß auch für die mit der höchsten Energie zurückgestreuten Wasserstoffatome ungefähr 60 Atomlagen (200 Å) erfaßt wurden. Die Kleinwinkelstreuung ist daher nicht zu vernachlässigen. Zum Vergleich mit den Rechnungen müßten die gemessenen Kurven der Schattenminima noch mit der entsprechenden Gaußverteilung der Kleinwinkelstreuung entfaltet werden. Dabei werden vor allem die Flanken beeinflusst, sie werden steiler und das Minimum wird tiefer. Die Übereinstimmung mit den Rechnungen von J.U. ANDERSEN würde damit verbessert.

Die Kleinwinkelstreuung wirkt sich umso stärker aus, je tiefer die Ionen im Kristall zurückgestreut werden, d.h., umso niedriger E_2 ist. Für kleineres E_2 hat jedoch auch die Schattenbildung bei niedriger Energie stattgefunden, die Schattenminima sollten daher mit abnehmenden E_2 breiter werden. Durch die Kleinwinkelstreuung wird dies jedoch überkompensiert, denn die gemessenen Schattenminima werden mit abnehmenden E_2 schmaler (Abb. 15).

Um eine Aussage über die Kleinwinkelstreuung zu erhalten, sind in Abb. 19 die Formen der Schattenminima für Schattenbildung bei ca. 75 keV aufgezeichnet. Einmal war $E_1 = 120$ keV und $E_2 = 40$ keV, die Schattenbildung erfolgte im Mittel in 1450 Å Tiefe, das andere Mal war $E_1 = 80$ keV und $E_2 = 72$ keV, die Schattenbildung erfolgte im Mittel in 250 Å Tiefe. Aus einem Vergleich der Formen der Minima ergibt sich, daß die mittlere Kleinwinkelstreuung beim Durchlaufen von ca. 1200 Å für das Energiegebiet von 75 bis 40 keV etwa $1,5^\circ$ bis 2° ist. Dieser Wert liegt im Vergleich mit den bereits zitierten Messungen [69] sehr niedrig.

Für verschiedene Targettemperaturen, jedoch gleiches E_2 , erfolgt die Rückstreuung stets in gleicher Tiefe. Damit sollte auch die Kleinwinkelstreuung stets gleich sein und die Form der Minima nur durch die verschiedenen mittleren Amplituden der Atome der schattenbildenden Gitterkette bestimmt werden. Aus Abb. 15 folgt jedoch, daß die Form der Minima von der Targettemperatur wesentlich stärker beeinflusst wird, als die Rechnungen von J.U. ANDERSEN zeigen, bei denen nur der Einfluß der Amplituden der Atome der Gitterkette auf die Schattenbildung berücksichtigt ist. Dies läßt sich deuten, wenn man annimmt, daß die Kleinwinkelstreuung auch für Ionen auf nicht geführten Bahnen noch von der Richtung abhängt, unter der die Ionen durch den Kristall laufen. Für Ionen, die von Gitterplätzen starten ist die Kleinwinkelstreuung in der Umgebung von dicht gepackten Gitterrichtungen besonders klein (Abb. 18), wie auch der oben gefundene Wert ergab. Mit steigender Temperatur verschwindet diese Anisotropie, die Kleinwinkelstreuung wird größer und nähert sich dem Wert für amorphes Material.

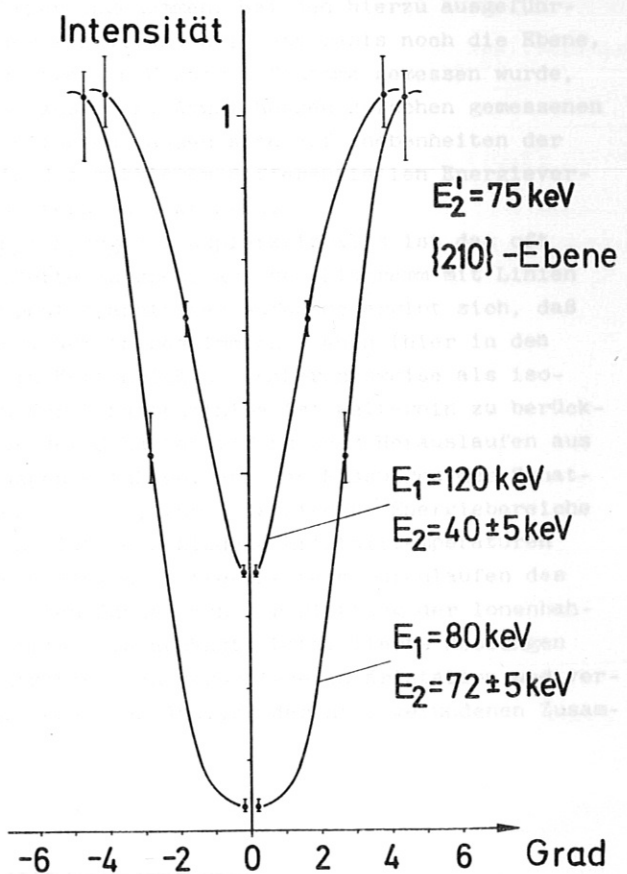


Abb. 19: Formen der gemessenen $\langle 100 \rangle$ -Schattenminima in einer $\{210\}$ -Ebene für Rückstreuung in verschiedenen Tiefen. Für $E_1 = 80$ keV, $E_2 = 72 \pm 5$ keV erfolgte die Rückstreuung im Mittel in 250 Å Tiefe, für $E_1 = 120$ keV, $E_2 = 40 \pm 5$ keV erfolgte die Rückstreuung im Mittel in 1450 Å Tiefe. Die Schattenbildung erfolgte in beiden Fällen etwa bei $E_2' = 75$ keV

4. Zusammenfassende Diskussion

Der Verwendung eines gekühlten Oberflächensperrschichtzählers mit einem Vielkanalanalysator zum Nachweis der von einem Kupfer-Einkristall zurückgestreuten Wasserstoffatome ermöglichte eine sehr genaue Messung der Energie- und Winkelverteilung aller mit Energien über 20 keV zurückgestreuten Wasserstoffatome. Damit wurde es möglich, theoretische Berechnungen sowohl für die globale Energie- und Winkelverteilung in einem größeren Winkelbereich als auch für die Formen der in dicht gepackten Gitterrichtungen auftretenden Schattenminima in Abhängigkeit von der primären Ionenenergie und der Kristalltemperatur experimentell nachzuprüfen. Gegenüber anderen Messungen brachte vor allem die Herstellung eines Diagramms mit Linien gleicher Intensität für die Umgebung der Schattenminima einen großen Fortschritt der wesentlich detaillierteren Aussagen über die Formen der Schattenminima ermöglichte.

Die Energie- und Winkelverteilung von an Kupfer zurückgestreuten Wasserstoffatomen im Energiebereich von 40 bis 120 keV läßt sich durch das einfache Modell der Rückstreuung in einem Zweierstoß recht gut beschreiben. In diesem Modell wird eine wahllose Verteilung der Atome im Festkörper angenommen. Bei den hierzu ausgeführten Messungen fiel weder die Richtung des einfallenden Ionenstrahls noch die Ebene, in der die Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome gemessen wurde, mit einer dicht gepackten Gitterrichtung zusammen. Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Energie- und Winkelverteilungen lassen sich auf Unebenheiten der Oberfläche und auf die ungenaue Kenntnis des mittleren differentiellen Energieverlustes der Ionen beim Durchlaufen des Gitters zurückführen.

Für das Schattenminimum in $\langle 100 \rangle$ -Kettenrichtung des Kupferkristalls ist das oft verwendete Modell einer isolierten Atomkette zu grob. Aus dem Diagramm mit Linien gleicher Intensität wie auch aus einer photographischen Aufnahme ergibt sich, daß die Schattenminima nicht isoliert liegen. Nur in bestimmten Ebenen (hier in den $\{210\}$ -Ebenen) können die Schattenminima in Kettenrichtung näherungsweise als isoliert betrachtet werden. Für die Formen der Schattenminima ist weiterhin zu berücksichtigen, daß die Wasserstoffatome nach der Schattenbildung beim Herauslaufen aus dem Kristall viele kleine Winkelablenkungen erfahren. Aus den Messungen der Schattenminima für verschiedene primäre Ionenenergien, für verschiedene Energiebereiche der zurückgestreuten Wasserstoffatome und für verschiedene Kristalltemperaturen konnte gezeigt werden, daß die mittlere Kleinwinkelstreuung beim Durchlaufen des Kristalls auch für Ionen auf nicht geführten Bahnen von der Richtung der Ionenbahnen im Kristall und der Temperatur des Kristalls abhängt. Detaillierte Messungen mit verbesserten Oberflächensperrschichtzählern an verschiedenen Kristallen und verschiedenen Gitterketten und -ebenen zur genaueren Analyse der hier gefundenen Zusammenhänge werden noch durchgeführt.

Herrn Dr. von Gierke danke ich für die stets wohlwollende Förderung dieser Arbeit. Besonders dankbar bin ich Herrn Priv.-Doz. Dr. E.W. Blauth für seine Unterstützung beim Aufbau der umfangreichen Apparatur und für viele gute Ratschläge bei den Experimenten. Von Herrn Prof. Dr. J. Lindhard, Herrn Dr. J.U. Andersen, Herrn Dr. E. Bøgh und Herrn Dr. O.S. Oen habe ich viele wertvolle Hinweise zur Interpretation der Messungen erhalten. Herrn Dipl.-Phys. B. Scherzer danke ich für zahlreiche Diskussionen, Herrn H. Schmidl für die Hilfe bei den Experimenten. Die Programme für die Rechenmaschine wurden von Herrn D. Seewald, Herrn J. Schneider und Frau V. Welge angefertigt.

L i t e r a t u r

- [1] R.BEHRISCH, *Ergebn.d.exakt.Naturw.* 35, 297 (1964)
- [2] M.KAMINSKY, *Atomic and Ionic Impact Phenomena on Metal Surfaces*, Springer-Verlag (1965)
- [3] H.GEIGER u. E.MARSDEN, *Proc.Roy.Soc.* 82, 495 (1909)
- [4] E.RUTHERFORD, *Phil.Mag.* 21, 669 (1911)
- [5] J.STARK u. G.WENDT, *Ann.d.Phys.* 38, 921 (1912)
- [6] P.K.ROL, J.M.FLUIT, F.P.VIEHBÖCK u. M. DE JONG, *IV Int.Conf.Ion.Phen.Gases*, Uppsala p. 257 (1959)
- [7] O.AL MEN u. G.BRUCE, *Nucl.Instr.and Meth.* 11, 257 (1961)
- [8] M.T.ROBINSON, D.K.HOLMES u. O.S.OEN, *Coll.int.Ie bombardement Ionique*, Bellevue (1961)
- [9] M.T.ROBINSON u. O.S.OEN, *Appl.Phys.Letters* 2, 30 (1963)
Phys.Rev. 132, 2385 (1963)
- [10] E.BØGH u. E.UGGERHØJ, *Phys.Lett.* 17, 116 (1965)
Nucl.Instr.Meth. 38, 216 (1965)
- [11] L.ERIKSSON, J.A.DAVIES, J.DENHARTOG, HJ.MATZKE u. J.L.WHITTON, *Can.Nucl.Techn.* 5, 40 (1966)
- [12] L.ERIKSSON, J.A.DAVIES, J.DENHARTOG, J.W.MAYER, O.J.MARSH u. R.MANKARIOUS, *Appl.Phys.Lett.* 10, 323 (1967)
- [13] HJ.MATZKE u. J.A.DAVIES, *J.Appl.Phys.* 38, 805 (1967)
- [14] J.A.DAVIES, J.DENHARTOG, L.ERIKSSON u. J.W.MAYER, *Can.J.of Phys.* 45, 4037 (1967)
- [15] R.S.NELSON, *Phil.Mag.* 15, 845 (1967)
- [16] E.BØGH, *Proc.of the Int.Conf.on Solid State Phys.Res.with Accelerators*, BNL 50083,76 (1967)
- [17] N.BOHR, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 18, 8 (1948)
- [18] J.LINDHARD, *Phys.Letters* 12, 126 (1964)
Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk 34, 14 (1965)
- [18a] P.LERVIG, J.LINDHARD u. V.NIELSEN, *Nucl.Phys.* A96, 481 (1967)
- [19] J.LINDHARD, V.NIELSEN u. M.SCHARFF, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 36, 10 (1968)
- [20] B.PEGEL, *phys.stat.sol.* 7, K93 (1964)
- [21] C.LEHMANN u. G.LEIBFRIED, *J.Appl.Phys.* 34, 2821 (1963)
- [22] G.R.PIERCY, F.BROWN, J.A.DAVIES u. M.McCARGO, *Phys.Rev.Letters* 10, 399 (1963)
- [23] R.S.NELSON u. M.W.THOMPSON, *Phil.Mag.* 8, 1677 (1963)
- [24] H.LUTZ u. R.SIZMANN, *Phys.Lett.* 5, 113 (1963)
- [25] S.DATZ, C.ERGINSOY, G.LEIBFRIED u. H.O.LUTZ, *Motion of Energetic Particles in Crystals*
Ann.Rev.of Nucl.Sci. (1968)
- [26] E.BØGH u. J.L.WHITTON, *Phys.Rev.Letters* 19, 553 (1967)
- [27] A.F.TULINOV, B.G.AKMETOVA, A.A.PUZANOV u. A.A.BEDNYAKOV, *JETP Letters* 2, 30 (1965)
- [28] A.F.TULINOV, V.S.KULIKAUSKAS u. M.M.MALOV, *Phys.Letters* 18, 304 (1965)
- [29] A.F.TULINOV, *Sov.Phys.Doklady* 10, 463 (1965)
Sov.Phys.Uspekhi 8, 864 (1966)
- [30] D.S.GEMMELL u. R.H.HOLLAND, *Phys.Rev.Lett.* 14, 954 (1965)
- [31] B.DOMEIJ u. K. BJÖRKQVIST, *Phys.Lett.* 14, 127 (1965)
Nucl.Instr.Meth. 38, 207 (1965)
- [32] B.DOMEIJ, *Arkiv for Fysik*, 32, 179 (1966)
- [33] B.G.AKHMETOVA, YU.M.PLETS u. A.F.TULINOV, *Sov.Phys.Lett.* 24, 1108 (1967)
- [34] E.BØGH, *Phys.Rev.Letters* 19, 61 (1967)

- [35] J.U.ANDERSEN, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid Selsk 36, 7 (1967)
- [36] J.U.ANDERSEN u. E.UGGERHØJ, Can.J.of Phys. 46, (1968)
- [37] R.BEHRISCH, Can.J.of Phys. 46 (1968)
- [38] R.BEHRISCH, Vakuum-Technik 10, 250 (1967)
- [39] E.S.BOROVIK, V.P.KATRICH u. G.T.NIKOLAEV, Atomn.Energ. 21, 339 (1966)
- [40] M.KAMINSKY, Adv.in Mass Spectrom. 3, 77 (1966)
- [41] G.M.McCRACKEN u. J.H.C.MAPLE, Brit.J.Appl.Phys. 18, 919 (1967)
- [42] G.M.McCRACKEN, D.K.JEFFERIS u. P.GOLDSMITH, Culham Lab. CLM-P 166 (1968)
- [43] S.K.ALLISON, Rev.Mod.Phys. 30, 1137 (1958)
- [44] A.B.BROWN, C.W.SNYDER, A.W.FOWLER u. C.C.LAURITSEN, Phys.Rev. 82, 159 (1951)
- [45] S.RUBIN, Nucl.Instr.Meth. 5, 177 (1959)
- [46] E.S.PARILIS, VII Int.Conf.on Ioniz.Phen.in Gases, Beograd 1965
- [47] E.S.MASHKOVA, V.A.MOLCHANOV, E.S.PARILIS u. N.J.TURAEV, Phys.Lett. 18, 7 (1965)
- [48] S.D.WARSHAW, Phys.Rev. 76, 1759 (1949)
- [49] D.KAHN, Phys.Rev. 90, 503 (1953)
- [50] M.BADER, R.E.PIXLEY, F.S.MOSER u. W.WHALING, Phys.Rev. 103, 32 (1956)
- [51] J.LINDHARD u. M.SCHARFF, Phys.Rev. 124, 128 (1961)
- [52] J.LINDHARD, M.SCHARFF u. H.E.SCHIØTT, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk 33, no.14 (1963)
- [53] E.BONDERUP, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk 35, no. 17 (1967)
- [54] E.FERMI u. E.TELLER, Phys.Rev. 72, 399 (1947)
- [55] A.BETHE u. J.ASHKIN, Exp.Nucl.Phys. 1, 166 (1953)
- [56] U.FANO, Ann.Rev.Nucl.Sci. 13, 1 (1963)
- [57] C.ERGINSOY, Proc.Int.Conf.Sol.State Phys.Res.with Accelerators, BNL 50083, 30 (1967)
- [58] J.H.BARRETT, Phys.Rev. 166, 219 (1968)
- [59] O.S.OEN, Phys.Lett. 19, 358 (1965)
- [60] L.C.FELDMAN, Ph.D.Thesis, Rutgers University Dez. (1966)
- [61] A.A.MARADUDIN, E.W.MONTROLL u. G.H.WEISS, Sol.State Phys. Suppl. 3 (1963)
- [62] P.DEBYE, Ann.Phys. 43, 49 (1914)
- [63] J.WALLER, Z.f.Phys. 17, 398 (1923)
- [64] K.SAGEL, Tabellen zur Röntgenstrukturanalyse, Seite 81, Springer 1958
- [65] Chr.LEHMANN u. G.LEIBFRIED, Z.f.Phys. 172, 465 (1963)
- [66] E.J.WILLIAMS, Phys.Rev. 58, 292 (1940)
- [67] H.A.BETHE, Phys.Rev. 89, 1256 (1953)
- [68] W.T.SCOTT, Rev.Mod.Phys. 35, 231 (1963)
- [69] A.A.BEDNYAKOV, V.N.DVORETSKII, I.A.SAVENKO u.A.F. TULINOV, Sov.Phys.JETP 46, 1901(1964)
- [70] G.M.McCRACKEN, Techn.Div.Mem. Nr. 77, Culham Lab. (1968)

5. Anhang

5.1. Analytische Näherungen zur Berechnung der Energie- und Winkelverteilung der zurückgestreuten Wasserstoffatome

5.1.1. 50 keV < E < 150 keV

Aus Abb. 10 läßt sich entnehmen, daß für 50 keV < E < 150 keV der mittlere Energieverlust $\bar{S}(E)$ von Protonen in Cu in guter Näherung eine Konstante ist. $\bar{S}(E) = 20 \text{ eV/\AA}$.

Damit ergibt sich für (5), (6), (8) und (9) mit (4) und (7)

$$E_1'(x) = E_1 - \frac{\bar{S}x}{\cos \alpha} \quad (5A)$$

$$E_2(x) = (E_1 - \frac{\bar{S}x}{\cos \alpha})k^2 - \frac{\bar{S}x}{\cos \beta} \quad (6A)$$

$$E_2(E_1') = E_1'k^2 - \frac{\cos \alpha}{\cos \beta}(E_1 - E_1')$$

$$\Delta x = \frac{\cos \alpha \cos \beta}{\bar{S}(k^2 \cos \beta + \cos \alpha)} \Delta E_2 \quad (8A)$$

$$N(E_2, \alpha, \beta, \varphi) = \frac{N_v z_1^2 z_2^2 e_0^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{(k^2 + \frac{\cos \alpha}{\cos \beta})}{(E_2 + E_1 \frac{\cos \alpha}{\cos \beta})^2 \cdot \bar{S} \left(1 + \frac{M_1}{M_2}(1 - \cos^2 \gamma) + \cos \gamma \sqrt{1 - \frac{M_1^2}{M_2^2}(1 - \cos^2 \gamma)}\right)^2} \quad (9A)$$

$$\text{mit } k = -\frac{M_1 \cos \gamma}{M_1 + M_2} + \sqrt{\left(\frac{M_1 \cos \gamma}{M_1 + M_2}\right)^2 + \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1}} \quad (7)$$

$$\text{und } \cos \gamma = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \cos \varphi \quad (4)$$

Formel 9A wurde numerisch für die Parameter dieser Messungen ausgewertet (Abb.20).

5.1.2. E < 25 keV

Für Energien kleiner als 50 keV gibt es noch keine experimentelle Bestimmung des mittleren differentiellen Energieverlustes $\bar{S}(E)$ von Protonen in Kupfer. J. LINDHARD und M. SCHARFF [51] geben für $E < E_0$ folgende Formel an, welche durch Experimente an anderen Materialien auch bestätigt wurde und deren Werte schon in Abb. 10 eingetragen sind.

$$\bar{S}(E) = 2A \sqrt{E} \left[\frac{\text{eV}}{\text{\AA}} \right] \text{ mit: } 2A = \frac{N_v \cdot 2a_0 e_0}{\epsilon_0} \frac{z_1 z_2}{\left(z_1^{\frac{2}{3}} + z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{E_0}} \quad (1B)$$

Hierbei ist $a_0 = 0,529$ der 1. Bohrsche Radius des Wasserstoffatoms und $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ A sec/Vm}$ die Dielektrizitätskonstante des Vakuums.

Damit ergibt sich für (5), (6), (8) und (9) mit (4) und (7):

$$E_1'(x) = (\sqrt{E_1} - \frac{Ax}{\cos \alpha})^2 \quad (5B)$$

$$E_2(x) = (k\sqrt{E_1} - \frac{Akx}{\cos \alpha} - \frac{Ax}{\cos \beta})^2 \quad (6B)$$

$$E_2(E_1') = (k\sqrt{E_1'} - (\sqrt{E_1} - \sqrt{E_1'}) \frac{\cos \alpha}{\cos \beta})^2$$

$$\Delta x = \frac{\cos \alpha \cos \beta}{2A(k \cos \beta + \cos \alpha)} \frac{\Delta E_2}{\sqrt{E_2}} \quad (8B)$$

$$N(E_2, \alpha, \beta, \varphi) = \frac{z_1^{\frac{5}{2}} z_2^{\frac{2}{3}} (z_1^{\frac{2}{3}} + z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}} e_o^2 \sqrt{E_o} (k + \frac{\cos \alpha}{\cos \beta})^3 \cdot W(\psi)}{4\pi \epsilon_o^2 \pi a_o E_2^{\frac{5}{2}} (1 + \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \frac{\cos \alpha}{\cos \beta})^4 (1 + \frac{M_1}{M_2} (1 - \cos^2 \gamma) + \cos \gamma \sqrt{1 - \frac{M_1}{M_2} (1 - \cos^2 \gamma)})^2} \quad (9B)^+$$

Der Faktor $W(\psi)$ in Formel (10A) berücksichtigt den Teilchenverlust durch eine Ablenkung um den Winkel größer als $\psi \approx 90^\circ$ bei einem fast zentralen Stoß der Ionen während des Herauslaufens aus dem Gitter. Es gilt:

$$W(\psi) = \frac{1}{4\pi \epsilon_o} \frac{e_o c t_g^2 \psi}{48 a_o} z_1^{\frac{5}{6}} \cdot z_2^{\frac{2}{3}} (z_1^{\frac{2}{3}} + z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{\sqrt{E_o}}{E_2^{\frac{3}{2}}} \left\{ 1 - \left(\frac{k \frac{\cos \alpha}{\cos \beta}}{1 + \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} \frac{\cos \alpha}{\cos \beta}} \right)^3 \right\} \quad (10B)$$

Numerische Werte zur Formel (9B) sind ebenfalls in Abb. 20 eingetragen.

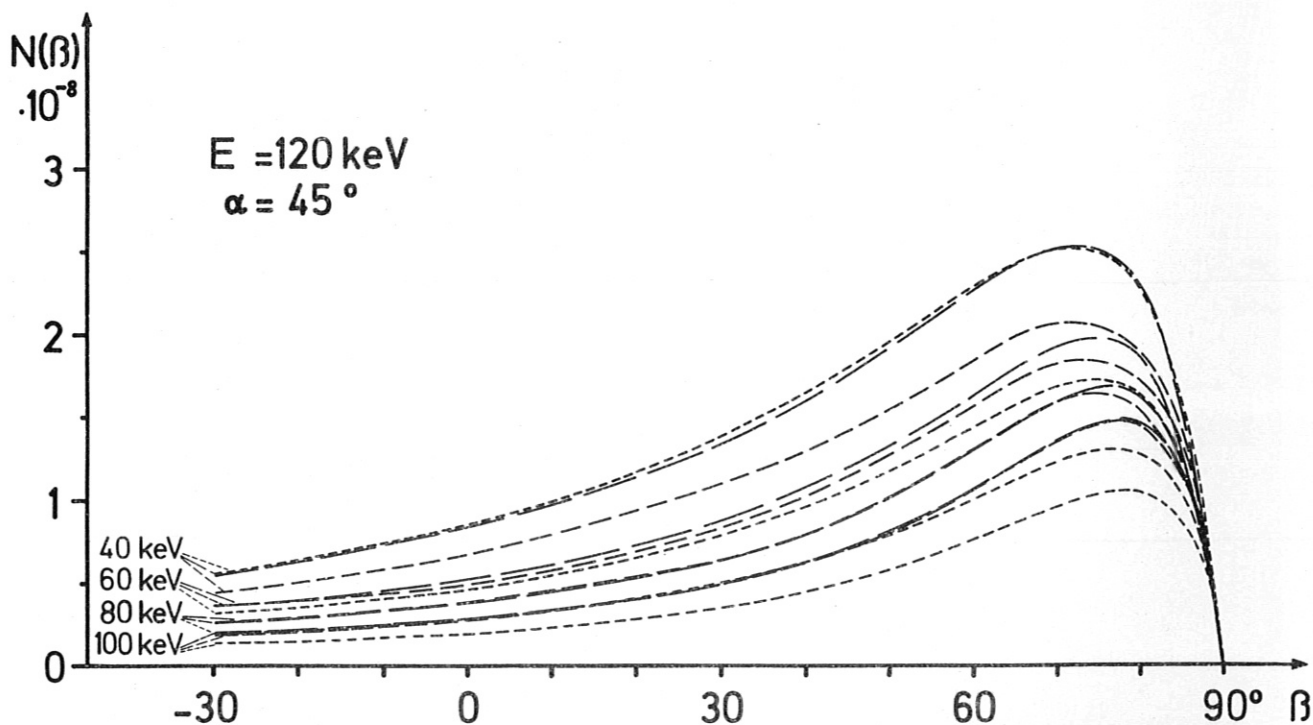
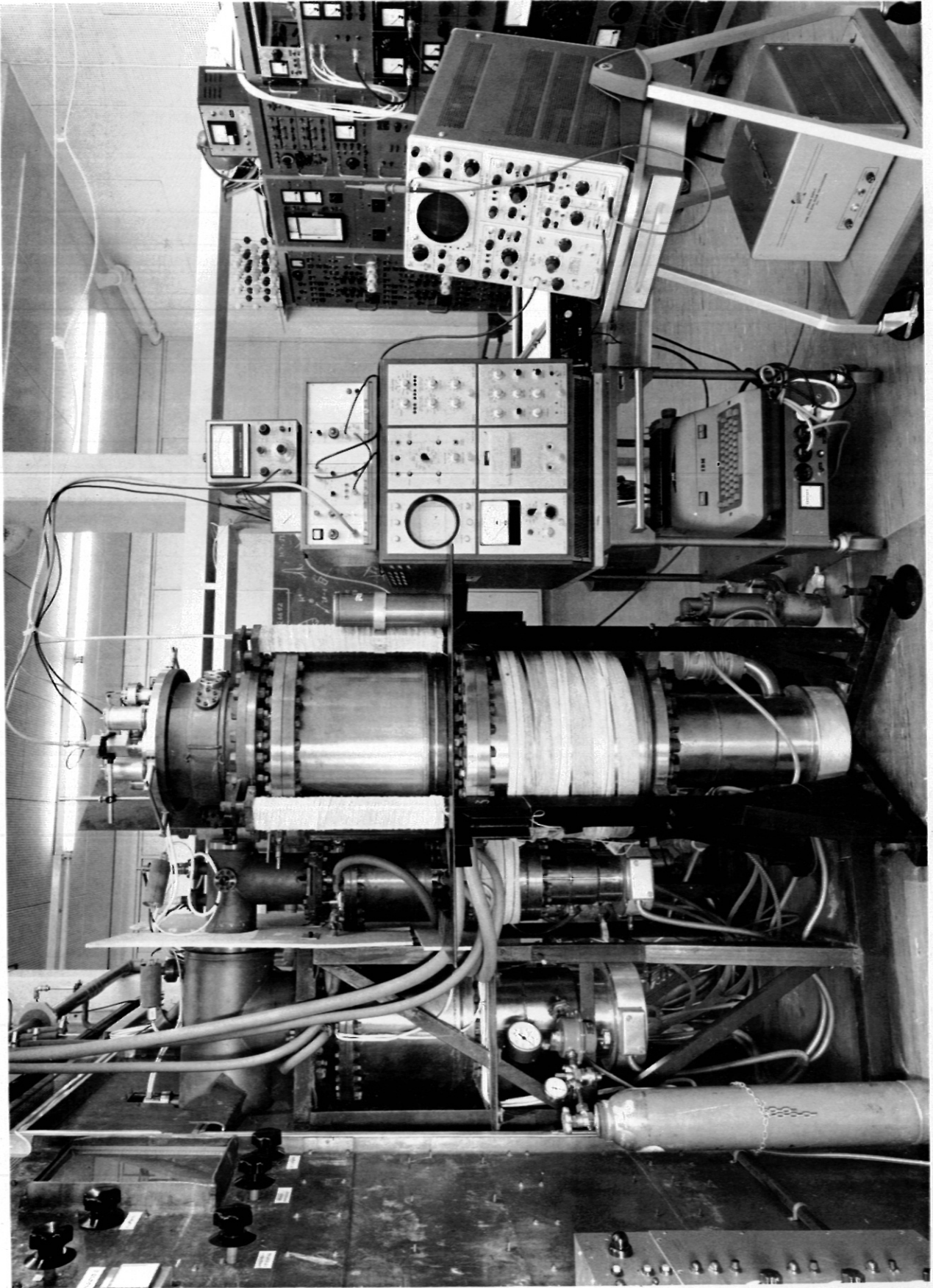


Abb. 20: Vergleich der numerisch berechneten Winkelverteilung der an Kupfer in verschiedene Energiebereiche zurückgestreuten Wasserstoffatome mit den Ergebnissen der Formeln (9A) und (9B). $E_1 = 120 \text{ keV}$, $\alpha = 45^\circ$.
 — numerisch nach (9), $\bar{S}(E)$ aus Abb. 10;
 - - - analytisch nach (9A), $\bar{S}(E) = \text{const.}$;
 - · - · analytisch nach (9B), $\bar{S}(E) \sim \sqrt{E}$.

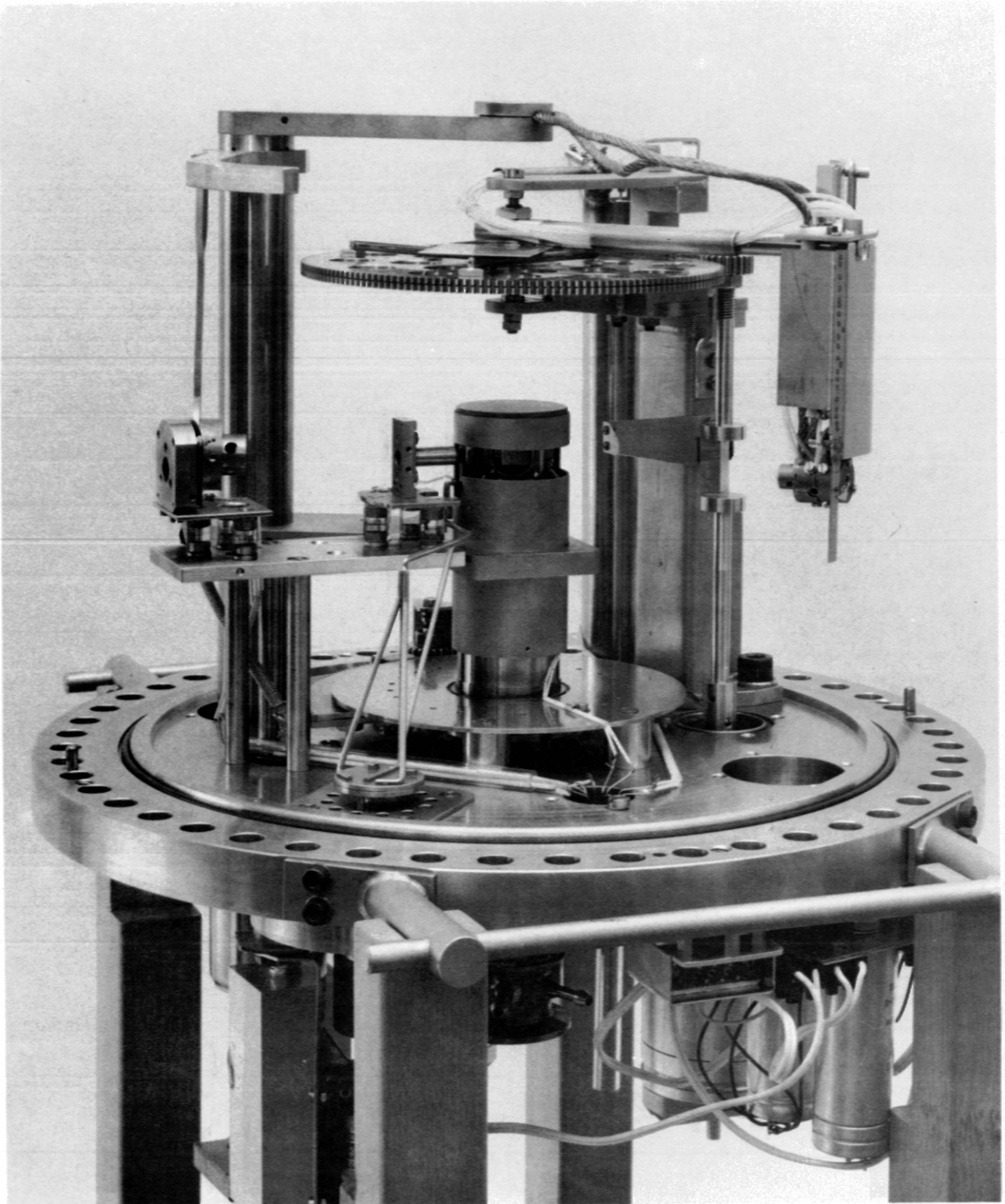
+)

Die Formel (9B) wurde in vereinfachter Form auch von G.McCRACKEN angegeben [70]

Wie erwartet, stimmen die Ergebnisse von Formel (9A) (konstanter mittlerer differentieller Energieverlust) für hohe Energien ($E_2 = 100, 80, 60$ keV) recht gut mit der numerisch berechneten Winkelverteilung überein. Die aus der Formel (9B) (mittlerer differentieller Energieverlust proportional zu \sqrt{E}) berechneten Werte ergeben bei hohen Energien E_2 gegenüber der numerisch berechneten Winkelverteilung zu kleine Intensitäten. Die Kurven nähern sich jedoch zu niedrigen Energien ($E_2 = 40$ keV) einander an.



5.2.1. Anhang: Gesamtansicht der Apparatur



5.2.2. Anhang: Die Meßanordnung