

- 1) Error in the measurement of the peak intensity  $f_m$  as the function of the external stress  $\sigma$ .
- 2) Error in the determination of the corresponding intensity  $f_{m_0}$  of the strain-free crystal.
- 3) Error in the experimental determination of the dipolar width  $A$ .
- 4) Incorrect assumption of Gaussian line shape for the dipolar and quadrupolar broadening function <sup>12</sup>.

- 1 R. G. SHULMAN, B. J. WYLUDA, and P. W. ANDERSON, Phys. Rev. **107**, 953 [1957].
- 2 V. V. LEMANOV, Soviet Phys. JETP **13**, 543 [1961].
- 3 J. L. MARSH and P. A. CASABELLA, Phys. Rev. **150**, 546 [1966].
- 4 V. L. BOGDANOV and V. V. LEMANOV, Soviet Phys. Sol. State **10**, 159 [1968].
- 5 R. W. ASTRUE and H. O. HOOPER, Phys. Rev. **164**, 1206 [1967].
- 6 Y. A. GRINCHENKO, E. R. DOBROVINSKAYA, and V. L. TRIMAN, Sov. Phys. Sol. State **10**, 341 [1968].

#### Acknowledgements

The authors would like to thank Prof. Dr. M. MEHRING for useful discussions.

- 7 O. KANERT, Phys. Stat. Sol. **32**, 667 [1969].
- 8 B. T. GRAVELY and I. D. MEMORY, Phys. Rev. **3 B**, 3426 [1971].
- 9 O. KANERT and M. MEHRING, Static Quadrupole Effects in Disordered Cubic Solids, Springer-Verlag, Berlin 1971.
- 10 J. H. VAN VLECK, Phys. Rev. **74**, 1168 [1948].
- 11 M. MEHRING and O. KANERT, Rev. Sci. Instrum. **42**, 449 [1965].
- 12 O. KANERT, D. KOTZUR, and M. MEHRING, Phys. Stat. Sol. **36**, 291 [1969].

## Monte-Carlo-Rechnung für die Streuung von keV-Ionen an polykristallinen Stoffen

G. BETZ

II. Institut für Experimentalphysik, Technische Hochschule, Wien

(Z. Naturforsch. **27 a**, 1239–1246 [1972]; eingegangen am 3. Juni 1972)

*Monte-Carlo-Calculation for the Backscattering of keV-ions at Polycrystalline Solids*

Assuming a random distribution of the target atoms and taking account of electronic stopping too, the Monte-Carlo technique, based on a single collision model, was used to simulate the scattering of keV-ions at polycrystalline solids. The reflection coefficient, angular and energy distribution and penetration depth of the reflected particles have been calculated for various ion-target combinations and energies. Furtheron, the angle of incidence of the primary beam was varied. Calculated values of the reflection coefficient and its dependence on angle of incidence are found in good agreement with experimental results. The percentage of particles scattered after a given number of collisions was also investigated.

### I. Einleitung

Die Streuung von keV-Ionen an polykristallinen Festkörperoberflächen hat in den letzten Jahren großes Interesse gefunden, unter anderem auch als Methode zur Oberflächenanalyse<sup>1</sup>. Verschiedene Methoden zur Berechnung der Streuung sehr leichten Ionen an Festkörperoberflächen wurden entwickelt<sup>2–4</sup>.

Ausgehend von der LINDHARD-SCHARFF-SCHIÖTT-Theorie<sup>5</sup> über die Wechselwirkung von energetischen Ionen mit Festkörpern und den Berechnungen von WINTERBON et al.<sup>6</sup> haben BÖTTIGER, DAVIES, SIGMUND und WINTERBON<sup>7</sup> Streukoeffizienten für verschiedene Ion-Targetkombinationen aus Berechnungen über die Abbremsung von Ionen in einem unendlich ausgedehnten, isotropen Medium erhalten.

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. F. P. VIEHBÖCK, II. Institut für Experimentalphysik, Technische Hochschule Wien, A-1040 Wien/Österreich, Karlsplatz 13.

Für die Untersuchung von Streuprozessen erweist sich auch die Monte-Carlo-Methode als sehr geeignet. Sie wurde bereits von verschiedenen Autoren für die Berechnung der Reichweite von Ionen in Festkörpern<sup>8, 9</sup>, für die Berechnung des Zerstäubungskoeffizienten<sup>10, 11</sup> bei Ionenbeschluß und für die Streuung von MeV-Ionen<sup>12</sup> und sehr leichten Ionen<sup>13</sup> an Festkörperoberflächen verwendet.

In der vorliegenden Arbeit wird die Streuung von keV-Ionen an Festkörperoberflächen ebenfalls mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode untersucht. Unter der Annahme einer isotropen Verteilung der Targetatome und Beschränkung auf 2-Teilchenstöße wird die Bahn eines einfallenden Ions im Target gemäß der Monte-Carlo-Methode verfolgt. Neben elastischen Energieverlusten durch Stöße des Primärteilchens mit Targetatomen werden auch kontinuierliche Energieverluste durch Elektronenanregung berücksichtigt. Die berechneten Streukoeffizienten und ihre Abhän-



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

gigkeit von der Energie und dem Einfallswinkel werden mit experimentell ermittelten Werten<sup>7, 14, 15</sup> und anderen theoretischen Berechnungen<sup>7, 15</sup> verglichen. Es wurde weiters die Eindringtiefen-, Energie- und Winkelverteilung der gestreuten Teilchen untersucht und ermittelt, wie groß der Anteil der nach 1, 2 und mehreren Stößen zurückgestreuten Teilchen am totalen Streukoeffizienten ist.

## II. Die Rechenmethode

Es wurde ein Rechenprogramm, basierend auf der Monte-Carlo-Methode, erstellt, welches das einfallende Teilchen auf seinem Weg im Target verfolgt. Folgende Annahmen wurden dabei gemacht:

a) Eine regellose Anordnung der Atome im Target. Dies entspricht einer amorphen Substanz. Diese Annahme kann aber auch als eine gute Wiedergabe der Verhältnisse in einem polykristallinen Target betrachtet werden, sofern es keine Textur aufweist.

b) Beschränkung auf 2-Teilchenstöße. Eine Wechselwirkung des Primärteilchens gleichzeitig mit mehr als einem Targetatom wird nicht betrachtet. Diese Annahme ist für Teilchenenergien, größer als einige hundert Elektronvolt, experimentell gesichert.

c) Der Stoßprozeß selbst wird als elastisch angenommen, d. h. eine inelastische Energieabgabe auf Grund von Elektronenanregung oder Ionisation wird dabei nicht berücksichtigt.

Zwischen zwei Stößen legt das Teilchen seinen Weg ohne Ablenkung, aber mit kontinuierlicher Energieabgabe auf Grund von Elektronenanregung zurück. Für diese inelastische Energieabgabe gilt nach LINDHARD und SCHARFF<sup>16</sup> für Energien  $E$ :

$$E \leqq Z_1^{4/3} A_1 25 \text{ keV}, \quad (1)$$

$$dE/dr = -K E^{1/2}. \quad (2)$$

Dabei sind  $Z_1$  die Ordnungszahl,  $A_1$  das Atomgewicht des einfallenden Ions,  $r$  der zurückgelegte Weg und  $K$  ist eine energieunabhängige Konstante.

Als Wechselwirkungspotential dient das THOMAS-FERMI-Potential<sup>17</sup> mit dem BOHRschen Abschirmradius<sup>18</sup> im Bereich hoher Ionenenergien. Im Bereich niedriger Ionenenergien, wo das T.F.-Potential eine zu große Reichweite besitzt, wurde das BORN-MAYER-Potential<sup>19</sup>:

$$V_{BM}(r) = A e^{-r/a} \quad (3)$$

verwendet. Für die Konstanten  $A$ ,  $a$  werden von SIGMUND und ANDERSON<sup>20</sup> folgende Werte vorge-

schlagen:

$$A = 52 (Z_1 \cdot Z_2)^{1/4} \text{ (eV)}, \quad (4)$$

$$a = 0,219 \text{ \AA}. \quad (5)$$

Dabei sind  $Z_1$ ,  $Z_2$  die Ordnungszahlen des Primärteilchens bzw. des Targetatoms. In dieser Arbeit wird nur der Wert für den Abschirmradius  $a$  gemäß Gl. (5) gewählt. Um einen kontinuierlichen Übergang zwischen dem T.F.-Potential und dem B.M.-Potential zu erhalten, wurde die Konstante  $A$  auf folgende Weise bestimmt: In logarithmischer Darstellung (Abb. 1) ist das B.M.-Potential eine Gerade mit dem Anstieg  $-1/a$ . Die Größe  $A$  wurde nun jeweils so gewählt, daß das B.M.-Potential eine Tangente an das T.F.-Potential bildet. Die auf diese Weise erhaltenen Werte für die Konstante  $A$  sind im allgemeinen größer als gemäß Gleichung (4).

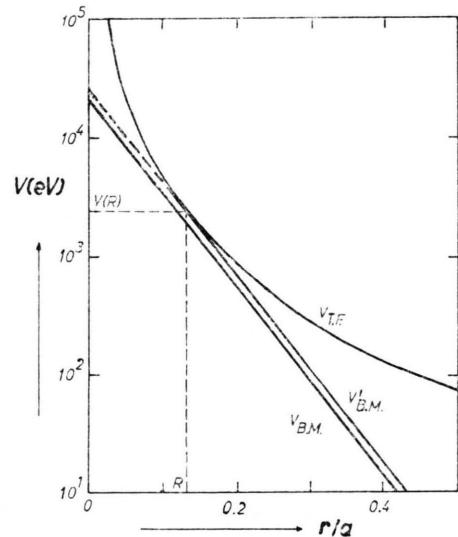


Abb. 1. Vergleich zwischen Thomas-Fermi-Potential  $V_{T.F.}$ , Born-Mayer-Potential  $V_{B.M.}$  und angepaßtem B.M.-Potential  $V'_{B.M.}$ .

Um einen einfachen, geschlossenen Ausdruck für den differentiellen Streuquerschnitt zu erhalten, der darüber hinaus noch geschlossen integriert werden kann, was von Bedeutung für die Winkelauswahl nach der Monte-Carlo-Methode ist, wurde die Methode der Potentialanpassung von LEIBFRIED und OEN<sup>21</sup> verwendet. Dabei wird an das vorgegebene Potential ein abgeschnittenes Coulomb-Potential:

$$V_c(r) = \begin{cases} E_c (a_c/r - 1) & r \leqq a_c, \\ 0 & r > a_c \end{cases} \quad (6)$$

auf folgende Weise angepaßt. Ist  $E_r$  die Relativenergie der beiden Stoßpartner, so erfolgt die Anpas-

sung derart, daß die beiden Potentiale an der Stelle maximaler Annäherung  $R$  bei zentralem Stoß sowohl in der Größe als auch in der 1. Ableitung übereinstimmen:

$$V(R) = E_r, V_c(R) = V(R), V'_c(R) = V'(R). \quad (7)$$

Diese Anpassung wird für jede Relativenergie des Primärteilchens durchgeführt. Dadurch wird das ursprüngliche Potential durch eine Reihe von abgeschnittenen Coulomb-Potentialen angenähert. Das für einen bestimmten Streuprozeß mit der Relativenergie  $E_r$  durch die Anpassung ausgewählte Potential stimmt dabei, in dem für den Streuvorgang wesentlichen Potentialbereich, mit dem ursprünglichen Potential gut überein. Für den differentiellen Streuquerschnitt ergibt sich dann der Ausdruck <sup>22</sup>:

$$\frac{d\sigma}{d\eta} = \frac{\pi}{2} \cdot \left( \frac{E_c \cdot a_c}{2 E_r} \right)^2 \cdot \frac{(1+E_c/2 E_r)^2}{[(1+E_c/E_r) \cdot (1-\eta)/2 + (E_c/2 E_r)^2]^2}. \quad (8)$$

Dabei ist  $\eta$  der Cosinus des Streuwinkels im Schwerpunktssystem und die Größen  $E_c, a_c$  werden gemäß Gl. (7) bestimmt. Darüber hinaus besitzt dieses Potential [Gl. (6)] einen endlichen totalen Streuquerschnitt:

$$\sigma_{\text{tot}} = \pi a_c^2. \quad (9)$$

Damit ist eine mittlere freie Weglänge der Primärteilchen im Target definiert. Weiters ist zu beachten, daß alle aus der Potentialanpassung sich ergebenden Größen und damit auch die mittlere freie Weglänge energieabhängig sind.

Die Energie des Teilchens vor dem  $i$ -ten Stoß ergibt sich zu:

$$E_i = E_{i-1} - \Delta E_{\text{el}} - \Delta E_{\text{inel}}. \quad (10)$$

Dabei ist  $E_{i-1}$  die Energie vor dem  $(i-1)$ -ten Stoß. Der Energieverlust  $\Delta E_{\text{el}}$  des Teilchens beim  $(i-1)$ -ten Stoß ergibt sich aus Energie- und Impulssatz zu:

$$\Delta E_{\text{el}} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \sin^2(\Theta/2). \quad (11)$$

$\Theta$  ist der Streuwinkel im Schwerpunktssystem und  $M_1, M_2$  sind die Massen von Primärteilchen und Targetatom. Für den inelastischen Energieverlust  $\Delta E_{\text{inel}}$  auf dem Weg  $L$  zwischen dem  $(i-1)$ -ten und dem  $i$ -ten Stoß gilt:

$$\Delta E_{\text{inel}} = \int_0^L \left( \frac{dE}{dr} \right) dr \quad (12)$$

mit  $dE/dr$  gemäß Gleichung (2).

Den Weg des Primärteilchens zwischen 2 Stößen erhält man aus der mittleren freien Weglänge gemäß der Monte-Carlo-Methode <sup>12, 23, 24</sup> mit Hilfe von Zufallszahlen. Analog erhält man den Streuwinkel und den Azimuthalwinkel beim Stoß. Die Zufallszahlen liefert ein Zufallszahlengenerator der Rechenmaschine in Form von Pseudozufallszahlen <sup>25</sup>. Um eine Korrelation zwischen den einzelnen Prozessen, wie zurückgelegter Weg zwischen zwei Stößen und Streuwinkel, sicher auszuschließen, wurde für jeden dieser Rechenabläufe ein eigener Zufallszahlengenerator verwendet. Außerdem wurde die erste Zufallszahl eines Zufallszahlengenerators nach Durchlaufen seines Zufallszahlbereiches stets neu bestimmt.

Das Schicksal einer großen Anzahl von Primärteilchen wird nun mit dem Rechenprogramm simuliert. Dabei wird ein einfallendes Teilchen stets bis zu einer vorgegebenen Maximalanzahl von Stößen verfolgt, sofern seine Energie nicht unter eine ebenfalls vorgegebene Minimalenergie von 10 eV fällt. Die folgenden Größen werden dabei gespeichert bzw. berechnet:

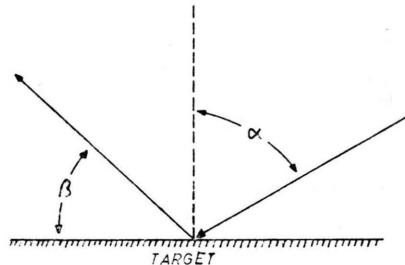


Abb. 2. Definition von Einfallsinkel  $\alpha$  und Emissionswinkel  $\beta$ .

a) Die Zahl der Teilchen, die nach  $1, 2, \dots, N$  Stößen zurückgestreut werden. Aus diesen partiellen Streukoeffizienten  $R_N$  ergibt sich durch Aufsummieren der totale Streukoeffizient  $R$ .

b) Die mittlere Energie  $E_N$  der gestreuten Teilchen für jede Stoßzahl  $N$  und die Energieverteilung für alle gestreuten Primärteilchen. Es ist auch möglich, die Energieverteilung der gestreuten Teilchen in einen beliebig vorgegebenen Raumwinkel zu berechnen.

c) Die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen für jede Stoßzahl und integral. Für schrägen Ioneneinfall wird die Winkelverteilung in der EinfallsEbene gespeichert. Die Definition von Einfallsinkel und Emissionswinkel zeigt Abbildung 2.

d) Die Eindringtiefenverteilung der gestreuten Teilchen.

Im allgemeinen wurden soviele Teilchenbahnen berechnet, bis etwa 3000 bis 5000 reflektierte Teilchen registriert wurden. Der statistische Fehler des Streukoeffizienten  $R$  infolge der endlichen Anzahl berechneter Teilchenbahnen ist dann kleiner als 2%.

### III. Ergebnisse, Vergleiche mit Experimenten

Um theoretisch berechnete Streukoeffizienten mit experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, muß eine Reihe von Bedingungen erfüllt sein.

a) Ein Teil der gestreuten Primärteilchen verläßt das Target als Neutralteilchen. Zum Nachweis muß daher eine Methode verwendet werden, die alle gestreuten Primärteilchen erfaßt. Eine Übersicht von KAMINSKY<sup>26</sup> über die durchgeführten Streuexperimente zeigt, daß in fast allen früheren Messungen nur reflektierte, geladene Teilchen nachgewiesen werden konnten.

b) Der nichtreflektierte Teil der Primärionen bleibt im Target und es kommt zur Sättigung desselben mit Primärteilchen bei einer höheren Beschußdosis. Typische Werte für die Sättigung liegen bei etwa  $10^{17}$  Ionen pro  $\text{cm}^2$  (vgl. <sup>27</sup>). Neben der Streuung am Target bewirkt der Primärstrahl auch eine Zerstäubung der Targetoberfläche. Dabei kommt es neben der Zerstäubung der Targetatome auch zu einer Zerstäubung der eingeschossenen Primärteilchen. Damit ergibt sich eine Überlagerung von gestreuten und zerstäubten Primärteilchen. Die Änderung der Winkelverteilung der emittierten Primärteilchen mit zunehmender Sättigung des Targets wurde von FORMANN, VIEHBÖCK und WOTKE<sup>28</sup> gemessen. Ein direkter Vergleich ist also nur mit einem Experiment mit niedriger totaler Ionenstromdosis möglich.

c) Bei Verwendung polykristalliner Targets dürfen diese keine Textur aufweisen.

#### III.1. Abhängigkeit des Streukoeffizienten von der Energie und dem Einfallswinkel für verschiedene Ion-Targetkombinationen

Die oben angeführten Bedingungen sind in einer Arbeit von BÖTTIGER und DAVIES<sup>14</sup> erfüllt. Es wurde die radioaktive Tracermethode verwendet und die integrale Ionenstromdosis war stets kleiner als  $10^{13}$  Ionen pro  $\text{cm}^2$ .

In Abb. 3 werden die nach der Monte-Carlo-Methode berechneten Streukoeffizienten mit theoreti-

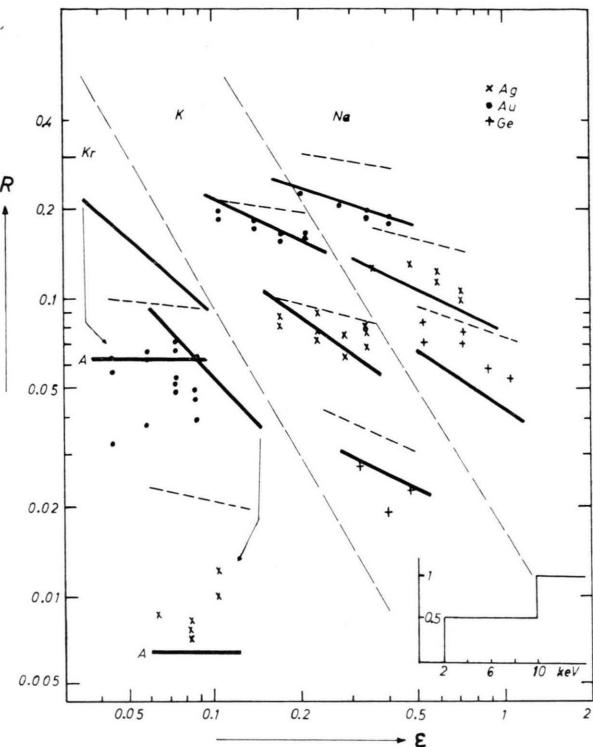


Abb. 3. Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Streukoeffizienten für 30–60 keV  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Kr}^+$  auf Ag, Au, Ge. (x, •, +: gemessene Werte<sup>7</sup>, —: Monte-Carlo-Rechnung, - - -: berechnete Weerte nach BÖTTIGER et al.<sup>7</sup>.) Das Insert zeigt den angenommenen Verlauf der Haftwahrscheinlichkeit für  $\text{Kr}^+$  auf Ag und Au und die mit A bezeichneten Kurven die damit korrigierten Ergebnisse.

schen und experimentellen Werten<sup>7</sup> für 30–60 keV  $^{24}\text{Na}$ -,  $^{42}\text{K}$ -,  $^{85}\text{Kr}$ -Ionen auf Ag, Au und durch Ionenbeschuß zuvor amorphisierte Ge-Targets verglichen. Die Streukoeffizienten sind als Funktion der reduzierten Energie  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \frac{0,8853 a_0}{Z_1 Z_2 e^2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot E \quad (13)$$

aufgetragen. Dabei ist  $a_0$  der Bohrsche Radius. Die ebenfalls eingezeichneten theoretischen Ergebnisse für  $R$  von BÖTTIGER et al.<sup>7</sup> sind aus Berechnungen über die Abbremsung von Teilchen in einem unendlich ausgedehnten, isotropen Medium erhalten worden. Man findet für K- und Na-Ionen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Für  $\text{Kr}^+$  auf Ag und Au ist die Übereinstimmung, sowohl gemäß der Monte-Carlo-Rechnung als auch nach den Berechnungen von BÖTTIGER et al.<sup>7</sup>, wesentlich schlechter. In diesen beiden Fällen zeigen die experimentellen Ergebnisse eine Energieabhängigkeit des Reflexions-

koeffizienten bzw. sogar ein Ansteigen von  $R$  mit der Energie für  $\text{Kr}^+$  auf Ag. Das Verhältnis  $\eta$  des berechneten Streukoeffizienten zum experimentellen Wert beträgt für  $\text{Kr}^+$  auf Au:  $\eta \sim 3$  und für  $\text{Kr}^+$  auf Ag:  $\eta \sim 7$ . Aus den berechneten integralen Energieverteilungen findet man für  $\text{Kr}^+$ -Ag einen höheren Anteil gestreuter Teilchen mit einer Energie unter 2 keV als für  $\text{Kr}^+$ -Au.

Im Experiment<sup>14</sup> wurden die gestreuten Teilchen auf Al-Folien aufgefangen. Dies läßt die Erklärung zu, daß für die Diskrepanz zwischen Berechnung und Experiment die geringe Haftwahrscheinlichkeit von niederenergetischen Edelgasionen<sup>29</sup> an Festkörperoberflächen verantwortlich ist. Aus Messungen<sup>29</sup> ist bekannt, daß die Haftwahrscheinlichkeit von Edelgasionen unter 1–2 keV sehr klein ist und erst für Energien um 10 keV gleich  $1 - R$  wird, wobei aber  $R$  für  $M_2/M_1 \leq 1$  sehr klein ist. Es wurde ein ein-

facher treppenförmiger Verlauf für die Haftwahrscheinlichkeit angenommen (Insert in Abb. 3). Mit dieser Annahme findet man für die Streukoeffizienten die in Abb. 3 eingezeichneten Kurven A, die eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit dem Experiment zeigen.

Einen weiteren Vergleich mit experimentellen Werten bringt die Abb. 4, in der der Streukoeffizient als Funktion des Einfallswinkels für 30 keV Na- und K-Ionen auf Ag und Au mit experimentellen und theoretischen Werten<sup>15</sup> verglichen wird. Auch hier findet man eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Ein Vergleich mit experimentellen Ergebnissen<sup>15</sup> im Bereich hoher Ionenenergien von 200 bis 500 keV für K- und Na-Ionen auf Ag und Au ergibt berechnete Werte, die bis zu einem Faktor 1,5 zu niedrig sind. Es wurden aber dabei in der Rechnung nur Teilchen berücksichtigt, die nach maximal 20 Stößen reflektiert wurden. Eine Untersuchung der partiellen Streukoeffizienten zeigt aber, daß der Anteil der nach 20 und mehr Stößen reflektierten Teilchen noch hoch ist. Dies erklärt die zu niedrigen Werte.

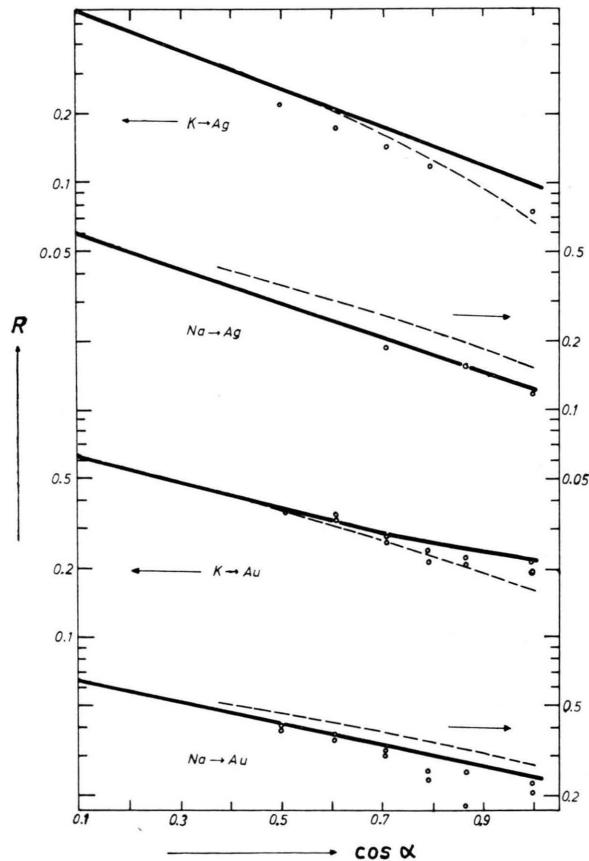


Abb. 4. Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Streukoeffizienten für 30 keV  $\text{K}^+$  und  $\text{Na}^+$  auf Ag und Au in Abhängigkeit vom Einfallswinkel  $\alpha$ . (○: gemessene Werte<sup>15</sup>, —: Monte-Carlo-Rechnung, - - -: berechnete Werte nach BÖTTIGER et al.<sup>15</sup>.)

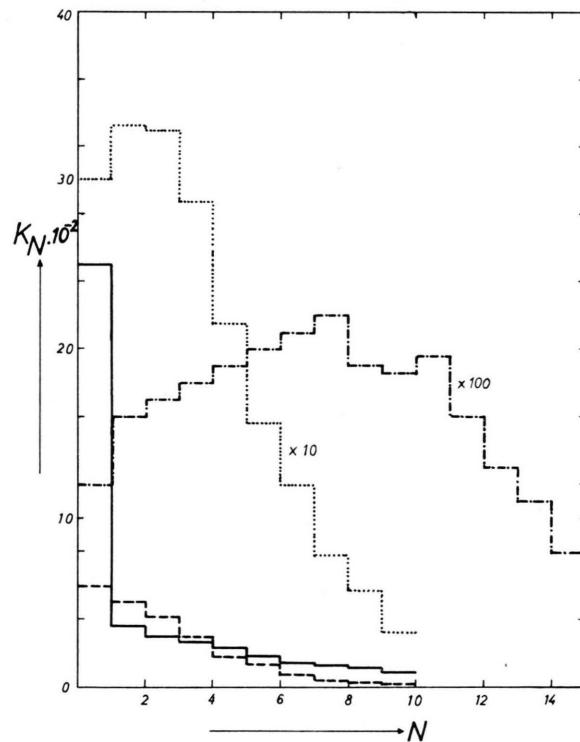


Abb. 5. Abhängigkeit des partiellen Streukoeffizienten  $K_N$  von der Stoßzahl  $N$ . (—: 3 keV  $\text{Na}^+$ -Au, - - -: 30 keV  $\text{Na}^+$ -Au, ·····: 60 keV  $\text{Na}^+$ -Au, - - - -: 370 keV  $\text{Na}^+$ -Au, alle senkrechter Einfall.)

Für 400 keV Na-Ionen auf Au findet man für die partiellen Streukoeffizienten ein breites Maximum bei  $N = 6 - 9$ . Für 60 keV liegt das Maximum bereits bei  $N = 2 - 3$  und für niedrige Primärenergien unter 10 keV verlassen die meisten gestreuten Teilchen bereits nach dem ersten Stoß das Target. Für den Fall  $M_1 \geq M_2$  andererseits findet man auch bei niedrigen Primärenergien keine nach einem Stoß reflektierte Teilchen infolge des Impulserhaltungssatzes. Für schrägen Ioneneinfall verschiebt sich das Maximum von  $K_N$  zu niedrigeren Werten von  $N$ . In Abb. 5 ist für einige Fälle die Abhängigkeit des partiellen Streukoeffizienten von der Stoßzahl aufgetragen.

### III.2. Eindringtiefen-, Energie- und Winkelverteilung der gestreuten Teilchen

Für die Oberflächenanalyse mittels Ionenstreuung ist es wichtig zu wissen, aus welcher Tiefe die gestreuten Teilchen kommen. Für jedes gestreute Atom wurde seine größte Eindringtiefe im Target ermittelt. Die Abb. 6 zeigt für einige Ion-Targetkombinationen und Energien von 3, 30 und 60 keV die Eindringtiefenverteilung. Für 3 keV liegt das Maximum der Verteilung an der Oberfläche und alle reflektierten Teilchen stammen aus den obersten Atomlagen. Für hohe Primärenergien (30 – 60 keV) und  $M_1 < M_2$  dringen die Teilchen viel tiefer ein, z. B. liegt das Maximum der Verteilung für 60 keV Na-Ionen auf Au bei 25 Å, für 30 keV-Protonen auf Ag bei einigen 100 Å. Für  $M_1 \geq M_2$  andererseits kommen die reflektierten Teilchen nur aus den obersten Atomlagen. In diesem Fall zeigt die Energieverteilung, daß infolge des großen Energieübertragungsfaktors [Gl. (11)] nur niederenergetische, reflektierte Teilchen auftreten. Teilchen aus größerer Tiefe können die Oberfläche nicht mehr erreichen.

Die Abb. 7 zeigt für einige Fälle die Energieverteilung aller gestreuten Teilchen. Für  $M_1 \geq M_2$  ergibt die Rechnung nur niederenergetische Teilchen. Damit Rückstreuung erfolgt, muß das Teilchen mehrere Stöße erleiden. Die Energieabgabe ist sehr groß. Für  $M_1 < M_2$  gibt es bereits nach einem Stoß reflektierte Atome und der maximale Energieübertragungsfaktor [Gl. (11)] ist klein. Im letzteren Falle zeigt die Energieverteilung 2 Maxima. Eine genauere Analyse zeigt, daß das niederenergetische Maximum nur aus Teilchen besteht, die nach mehreren Stößen reflektiert wurden, während zum hochenergetischen Maximum zum überwiegenden Teil die nach 1 – 2

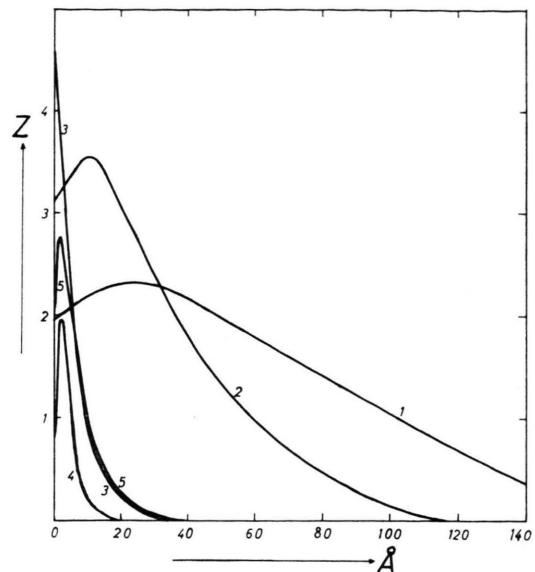


Abb. 6. Eindringtiefenverteilungen: 1: 60 keV  $\text{Na}^+$ –Au, 2: 30 keV  $\text{Na}^+$ –Ag, 3: 3 keV  $\text{Na}^+$ –Au, 4: 3 keV  $\text{Xe}^+$ –Ag, 5: 30 keV  $\text{Kr}^+$ –Ag. Alle senkrechter Einfall, Ordinate in willkürlichen Einheiten.

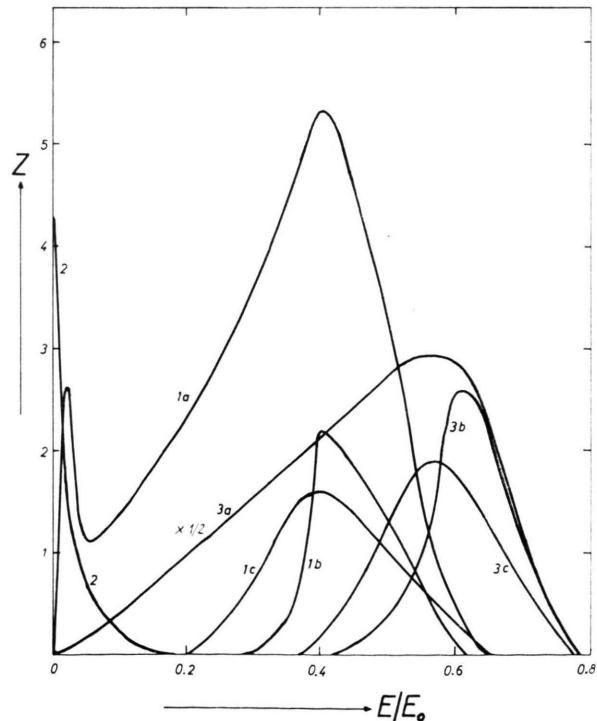


Abb. 7. Energieverteilungen aller gestreuten Teilchen. 1: 30 keV  $\text{Na}^+$ –Ag, a) 1. – 10. Stoß, b) 1. Stoß, c) 2. Stoß. 2: 30 keV  $\text{Kr}^+$ –Ag, alle gestreuten Teilchen. 3: 60 keV  $\text{Na}^+$ –Au, a) 1. – 10. Stoß, b) 1. Stoß, c) 2. Stoß.

Stößen reflektierten Atome beitragen. Für  $M_1 \ll M_2$  ( $\text{Na}^+$  auf Au, 60 keV) zeigt sich nur ein sehr breites Maximum. Für gestreute 30 keV-Protonen auf Ag mit  $E \geq 10$  keV ergibt die Energieverteilung ein kontinuierliches Ansteigen der Zahl der reflektierten Teilchen mit abnehmender Energie in qualitativer Übereinstimmung mit experimentellen Befunden<sup>30</sup>. Es ist zu beachten, daß in den zuletzt erwähnten Fällen die inelastischen Energieverluste zum überwiegenden Teil für die Energieabgabe der Primärteilchen verantwortlich sind.

Die Winkelverteilung bei der Streuung von 30 bis 60 keV-Ionen und senkrechtem Einfall war stets angenähert eine Cosinusverteilung. Die nach dem 1. und 2. Stoß gestreuten Teilchen zeigten eine Übercosinusverteilung, die besonders für  $\text{Kr}^+$  auf Ag ausgeprägt war. Die von BÖTTIGER et al.<sup>14</sup> gemessene

Untercosinusverteilung für 60 keV K-Ionen auf Au wurde nicht gefunden und dürfte auf Mehrfachreflexionen im Auffänger, wie von den Autoren bereits vermutet, zurückzuführen sein. Für 3 keV-Ionen konnte keine einheitliche Tendenz gefunden werden. Für  $\text{Na}^+$  auf Ag ergab die Rechnung eine Untercosinusverteilung und für  $\text{Kr}^+$  auf Ag eine Übercosinusverteilung.

Für schrägen Ioneneinfall ergibt die Rechnung eine, besonders für  $M_1 \geq M_2$  ausgeprägte, Vorwärtsstreuung. Die Abb. 8 zeigt, als Beispiel für schrägen Ionenbeschluß, die Winkelverteilung der nach 1, 2, 4 und 1–10 Stößen gestreuten Teilchen für 10 keV Xe-Ionen auf Cu und einem Einfallswinkel von  $\alpha = 60^\circ$ . Wegen  $M_1 > M_2$  gibt es einen maximalen Streuwinkel für den Stoßprozeß und als Folge keine nach dem 1. Stoß gestreute Teilchen.

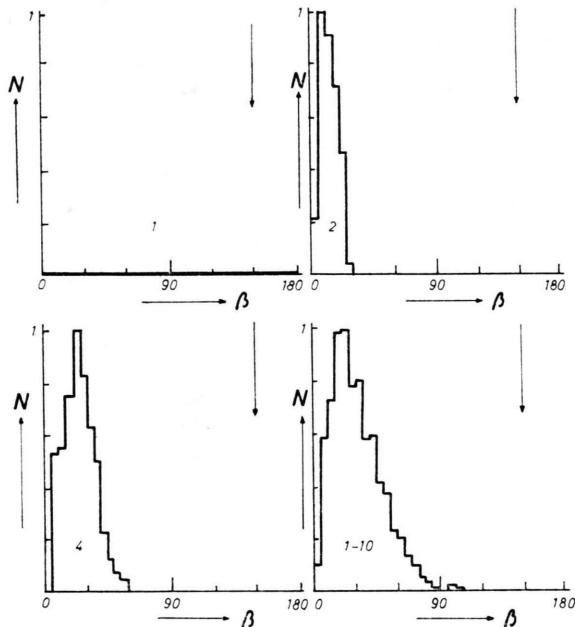


Abb. 8. Normierte Winkelverteilung der nach 1, 2, 4 und 1–10 Stößen gestreuten Teilchen für  $\text{Xe}^+ - \text{Cu}$ , 10 keV,  $\alpha = 60^\circ$ . (Der Pfeil entspricht der Einfallrichtung.)

- <sup>1</sup> D. G. ARMOUR u. G. CARTER, J. Phys. E **5**, 2 [1972].
- <sup>2</sup> A. VAN WIJNGAARDEN, B. MIREMALDI u. W. E. BAYLIS, Can. J. Phys. **49**, 2440 [1971].
- <sup>3</sup> G. M. McCracken u. N. J. FREEMAN, J. Phys. B **2**, 661 [1969].
- <sup>4</sup> T. ISHITANI u. R. SHIMIZU, Jap. J. Appl. Phys. **10**, 821 [1971].
- <sup>5</sup> J. LINDHARD, M. SCHARFF u. H. E. SCHIØTT, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **33**, No. 14 [1963].
- <sup>6</sup> K. B. WINTERBON, P. SIGMUND u. J. B. SANDERS, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **37**, No. 14 [1970].

#### IV. Zusammenfassung

Die Streuung von keV-Ionen an polykristallinen Oberflächen wurde mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode untersucht. Als Wechselwirkungspotential wurde eine Kombination aus Thomas-Fermi-Potential und Born-Mayer-Potential verwendet. Elastische und inelastische Energieverluste der Primärteilchen wurden berücksichtigt. Eine isotrope Verteilung der Targetatome wurde angenommen. Der Vergleich mit experimentell gemessenen Streukoeffizienten zeigt eine befriedigende Übereinstimmung. Daraus kann geschlossen werden, daß die Monte-Carlo-Methode geeignet ist für die Untersuchung der Wechselwirkung von keV-Ionen mit polykristallinen Stoffen.

Herrn Prof. Dr. F. P. VIEHBÖCK danke ich herzlichst für die Anregung zu dieser Arbeit und für zahlreiche fruchtbare Diskussionen. Die Arbeit wurde im Rahmen des Forschungsprojektes Nr. 1195 durchgeführt und dem Fond zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung sei an dieser Stelle für die Unterstützung gedankt.

- <sup>7</sup> J. BÖTTIGER, J. A. DAVIES, P. SIGMUND u. K. B. WINTERBON, Rad. Eff. **11**, 69 [1971].
- <sup>8</sup> O. S. OEN u. M. T. ROBINSON, J. Appl. Phys. **35**, 2515 [1964].
- <sup>9</sup> O. S. OEN, D. K. HOLMES u. M. T. ROBINSON, J. Appl. Phys. **34**, 302 [1963].
- <sup>10</sup> D. T. GOLDMAN, D. E. HARRISON u. R. R. COVEYOU, ORNL-2729, 1959.
- <sup>11</sup> G. BETZ, R. DOBROZEMSKY u. F. P. VIEHBÖCK, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. **6**, 451 [1971].
- <sup>12</sup> K. GÜTTNER, Z. Naturforsch. **26a**, 1290 [1971].

<sup>13</sup> T. ISHITANI u. R. SHIMIZU, Jap. J. Appl. Phys. **11**, 125 [1972].  
<sup>14</sup> J. BÖTTIGER u. J. A. DAVIES, Rad. Eff. **11**, 61 [1971].  
<sup>15</sup> J. BÖTTIGER, H. WOLDER JORGENSEN u. K. B. WINTERBON, Rad. Eff. **11**, 133 [1971].  
<sup>16</sup> J. LINDHARD u. M. SCHARFF, Phys. Rev. **124**, 128 [1961].  
<sup>17</sup> O. B. FIRSOV, Sov. Phys. – JETP **7**, 308 [1958].  
<sup>18</sup> J. LINDHARD, V. NIELSEN u. M. SCHARFF, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **36**, No. 10 [1968].  
<sup>19</sup> M. BORN u. J. E. MAYER, Z. Physik **75**, 1 [1923].  
<sup>20</sup> P. SIGMUND u. H. H. ANDERSEN, Risø Rep. No. 103 [1965].  
<sup>21</sup> G. LEIBFRIED u. O. S. OEN, J. Appl. Phys. **33**, 2257 [1962].  
<sup>22</sup> G. LEIBFRIED, Bestrahlungseffekte in Festkörpern, B. G. Teubner-Verlag, Stuttgart 1965.  
<sup>23</sup> G. BETZ, Dissertation, Universität Wien 1971.  
<sup>24</sup> E. D. CASHWELL u. C. J. EVERET, A Practical Manual on the Monte-Carlo Method for Random Walk Problems, Pergamon-Press, New York 1959.  
<sup>25</sup> M. ABRAMOWITZ u. I. A. SEGUN, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, Inc., New York 1968.  
<sup>26</sup> M. KAMINSKY, Atomic and Ionic Impact Phenomena on Metal Surfaces, Springer-Verlag, Berlin 1965.  
<sup>27</sup> O. ALMEN u. G. BRUCE, Nucl. Instr. Meth. **11**, 257 [1961].  
<sup>28</sup> E. FORMANN, F. P. VIEHBOCK u. H. WOTKE, Can. J. Phys. **46**, 753 [1968].  
<sup>29</sup> F. BROWN u. J. A. DAVIES, Can. J. Phys. **41**, 844 [1963].  
<sup>30</sup> R. BEHRISCH, Can. J. Phys. **46**, 527 [1968].

## Infrarotmessungen zur Ring-Ketten-Struktur des amorphen Selens

H. GOBRECHT, G. WILLERS\*, D. WOBIG und J. ZIRKE

II. Physikalisches Institut, Technische Universität Berlin

(Z. Naturforsch. **27 a**, 1246–1251 [1972]; eingegangen am 15. Juni 1972)

*IR-Studies on the Ring-Chain-Structure of Amorphous Selenium*

The infra-red spectrum of red amorphous selenium has been studied in the region of  $1 \mu\text{m}$  to  $25 \mu\text{m}$ . The formation of  $\text{Se}_8$ -ring molecules as well as polymeric chains  $\text{Se}_n$  has been observed by investigating non-fundamental vibrations. Additional absorption bands at  $7.85 \mu\text{m}$  ( $1274 \text{ cm}^{-1}$ ),  $8.95/9.35 \mu\text{m}$  ( $1117/1070 \text{ cm}^{-1}$ ) and  $12.35 \mu\text{m}$  ( $810 \text{ cm}^{-1}$ ) are reported. They are assigned to multiphonon processes of the type E fundamental of  $\text{Se}_n$  at  $74.1 \mu\text{m}$  ( $135 \text{ cm}^{-1}$ ).

### Einleitung

Durch Vergleich der Infrarot- und Raman-Spektren der kristallinen und der amorphen Selenmodifikationen gelang es LUCOVSKY et al.<sup>1</sup>, Aussagen über die Molekülstruktur des amorphen Selens zu gewinnen. Sie beobachteten im Grundschwingungsspektrum des glasigen Selens die Anregung von Moden, die in guter Näherung entweder dem trigonalen oder dem  $\alpha$ -monoklinen Selen entsprechen (Tab. 1).

Tab. 1. Vergleich der IR-Absorptionsspektren von trigonalem,  $\alpha$ -monoklinem und glasigem Selen<sup>1</sup>,

trigonales Selen $\bar{\nu} [\text{cm}^{-1}]$	$\alpha$ -monoklines Selen $\bar{\nu} [\text{cm}^{-1}]$	glasiges Selen $\bar{\nu} [\text{cm}^{-1}]$	$\lambda [\mu\text{m}]$	Schwingungsform
144	92/97 D	95	105	$\text{Se}_8$ , E <sub>1</sub>
	116/122 D	120	83,4	$\text{Se}_8$ , B <sub>2</sub>
		135	74,1	$\text{Se}_n$ , E
	254	254	39,4	$\text{Se}_8$ , E <sub>1</sub>
		490	20,4	$2 \times \text{Se}_8$ , E <sub>1</sub>
	743		13,5	$3 \times \text{Se}_8$ , E <sub>1</sub>
	983		10,2	$4 \times \text{Se}_8$ , E <sub>1</sub>

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. GOBRECHT, II. Physikalisches Institut der Techn. Universität Berlin, D-1000 Berlin 12, Hardenbergstraße 34.

Durch Vergleich lassen sich die im glasigen Selen gefundenen Absorptionsbändern<sup>2–4</sup> bei  $20,4 \mu\text{m}$  ( $490 \text{ cm}^{-1}$ ),  $13,5 \mu\text{m}$  ( $743 \text{ cm}^{-1}$ ) und  $10,2 \mu\text{m}$  ( $983 \text{ cm}^{-1}$ ) als 2-, 3- und 4-Phononenprozesse der  $\text{Se}_8$ -E<sub>1</sub>-Grundschwingung bei  $39,4 \mu\text{m}$  ( $254 \text{ cm}^{-1}$ ) deuten. Mehrphononenprozesse der einzigen, im glasigen Selen nachgewiesenen infrarotaktiven Kettengrundschwingung, der Typ-E-Mode bei  $74,1 \mu\text{m}$  ( $135 \text{ cm}^{-1}$ ), sind bisher nicht beobachtet worden. Nach dem Vorangegangenen gilt das Vorhandensein von sowohl  $\text{Se}_8$ -Ringen als auch polymeren Ketten von sehr ähnlichem Aufbau wie in den kristallinen Modifikationen als gesichert. Nach einer Theorie von EISENBERG und TOBOLSKY<sup>5</sup> sollen sie sich in ein stark temperaturabhängiges Gleichgewicht setzen.

Kalorische und Röntgen-Messungen<sup>6</sup> ergaben für die in dieser Theorie eingeführte Übergangstemperatur einen Wert von  $30^\circ\text{C}$ . Unterhalb  $30^\circ\text{C}$  sollen danach nur  $\text{Se}_8$ -Ringe vorliegen, die beim Übergang zu Temperaturen über  $30^\circ\text{C}$  aufzubrechen beginnen und mit wachsender Temperatur in zunehmender Anzahl zu Ketten polymerisieren.

\* Jetzt: Staatl. Fachhochschule Lübeck für Technik und See-fahrt.