

Computersimulation des Durchgangs schneller schwerer Ionen durch einkristalline dünne Goldschichten

H. Schmidt * und H. Ewald

II. Physikalisches Institut, Gießen

(Z. Naturforsch. **29a**, 1442–1448 [1974]; eingegangen am 13. August 1974)

Computersimulation of the Penetration of High Energy Heavy Ions through Thin Gold Single Crystals

A Computer program for following the trajectories of high energy ions in a fcc-lattice has been written to study the energy loss of 60 MeV ^{127}I ions channeled between (100)- and (111)-planes of a Au-single crystal. The motion of the ions is treated classically. It is assumed that the ion has only one important interaction at a time as it moves through the lattice. The interaction potential used in the calculation is a screened Coulomb potential with a screening function derived from Thomas-Fermi-theory. The slowing down of the incident ions through inelastic encounters with the atoms of the medium is described by a stopping power function which increases exponentially with the distance from the midplane of the channel walls.

1. Einleitung

Der Weg eines Ions in einem Einkristall wird stark durch die regelmäßige Anordnung der Gitteratome im Kristall beeinflußt. Dieser starke Einfluß des Kristallgitters wurde bisher schon in vielfältiger Weise bei Experimenten beobachtet und zur Untersuchung des Wechselwirkungsmechanismus der Ionen mit den Schichtatomen herangezogen.

Die beiden typischen Effekte, die bei allen Untersuchungen wirksam werden, sind in der Literatur als *channeling*- bzw. *blocking*-Effekt bekannt.

Obwohl der channeling-Effekt bereits kurz nach der Jahrhundertwende (1912) von Stark und Wendt¹ entdeckt wurde, blieb er dennoch Jahrzehnte hindurch vollkommen unbeachtet und wurde erst wieder zu Beginn der sechziger Jahre Gegenstand sowohl experimenteller als auch theoretischer Untersuchungen^{2, 3}. Mit dem Begriff channeling wird die Tatsache bezeichnet, daß ein Ion, das nahezu parallel zu dicht gepackten Atomketten oder Atomebenen in einen Kristall eindringt, bei Annäherung an die Gitterzentren eine Reihe von sehr kleinen Richtungsablenkungen seiner Flugbahn erfährt und dadurch gehindert wird, sich den Atomzentren weiter zu nähern und Stöße mit kleinen Stoßparametern, d. h. mit großen Ablenkwinkeln auszuführen. Dieses Ion kann unter Umständen sehr lange Wegstrecken zwischen zwei Atomebenen zurücklegen, indem es unter

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. Ewald, II. physikalisches Institut der Universität Gießen, D-6300 Gießen.

* Auszug aus der Dissertation D 26.

kleinen Winkeln zwischen ihnen hin und her fliegt, wobei es jeweils mit Atomen aus einer Kristallebene eine Zahl von korrelierten Einzelstößen ausführt.

In den letzten Jahren wurde eine große Reihe von Untersuchungen ausgeführt, um die physikalischen Zusammenhänge zu klären, die für die channeling- und blocking-Effekte verantwortlich sind⁴. Zum anderen war man auch bestrebt, mit diesen Effekten Kristalleigenschaften zu studieren⁵, wie etwa die zwischenatomaren Potentiale, die Verteilung des richtungsabhängigen Abbremsvermögens der Kristalle und darüber hinaus Kristallgitterfehler und Kristallverunreinigungen.

Eine zusammenfassende Theorie über den Durchgang von Ionen durch Einkristalle, die einen großen Teil der experimentellen Daten zu erklären vermag, wurde von Lindhard³ entwickelt. Zu einem Teil der experimentellen Aussagen steht sie jedoch in erheblichem Widerspruch.

Daher sind in den letzten Jahren zunehmend Computerprogramme geschrieben worden, die den Durchgang von Ionen durch Einkristalle simulieren, indem sie die Ionenbahnen durch die Schicht aufgrund von Einzelablenkungen berechnen^{6, 7}. Bei dieser Art der Untersuchungen wachsen bei Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer Zusammenhänge die Schwierigkeiten nicht derart drastisch, wie es bei der Anwendung analytischer Methoden der Fall ist.

Auch in der vorliegenden Arbeit wurde ein derartiges Maschinenprogramm geschrieben, das jedoch über die existierenden Programme hinaus die ortsabhängige Energieabsorption der Teilchen bezüglich



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.

der Kristallebenen noch berücksichtigt. Es konnten damit die von Datz et al.⁸ ausgeführten Experimente simuliert werden, die gerade die Messungen des Energieverlustes gechannelter Teilchen zum Inhalt haben. Diese Messungen wurden bisher nur mit einem vereinfachten Modell von Robinson⁹ theoretisch behandelt.

Im ersten Teil der Arbeit wird das Rechenprogramm entwickelt. Dabei werden zunächst die rein geometrischen Probleme besprochen. Im Anschluß daran werden die physikalischen Gesichtspunkte diskutiert, die bei der Potentialwahl und der richtigen Energieverlustberechnung eine Rolle spielen.

Im zweiten Teil der Arbeit wird dann das Rechenprogramm zur Simulation von Messungen eingesetzt. Hierbei wird schließlich seine endgültige Fassung durch Anpassung der Rechenergebnisse an die Meßergebnisse gewonnen.

2. Das Computermodell

In dem hier benutzten Modell wird angenommen, daß die Teilchenbahn durch eine Anzahl von Einzelablenkungen bestimmt wird. Die einzelnen Ablenkwinkel werden klassisch berechnet. Zwischen den einzelnen Stößen wird die Bahn geradlinig vorausgesetzt. Nach jedem Stoß wird jeweils der Energieverlust durch Elektronenanregung auf dem letzten Wegstück berechnet. Im Falle des channelings wird davon ausgegangen, daß der Energieverlust bei Annäherung an die Atomebenen exponentiell anwächst. Außerdem wird der jeweilige Energieverlust durch den Coulombstoß berücksichtigt. Das Programm hat zunächst die Aufgabe, dasjenige Gitteratom zu berechnen, das von einem eindringenden Ion als erstes getroffen wird. Mit der Annahme, daß die Teilchenbahn aufgrund von Einzelstößen zustande kommt, wird vorausgesetzt, daß die Einflußbereiche der Gitteratome auf die Teilchenbahn sich nicht überlappen. Um die Gitterzentren werden also kugelförmige Wirkungssphären mit dem Radius q_{\max} gedacht, innerhalb derer die Ionenbahnen nur beeinflußt werden können. Damit wird das Problem zunächst zu einer rein geometrischen Aufgabe, die darin besteht, aus einer regelmäßigen Anordnung von Kugeln, diejenige zu finden, die als erste von einer Geraden, gegeben durch die Teilchenbahn, geschnitten wird.

a) Die Geometrie des Problems

Zur Simulation des Experiments werden über ein Wigner-Seitz-Element der Oberfläche zunächst gleich-

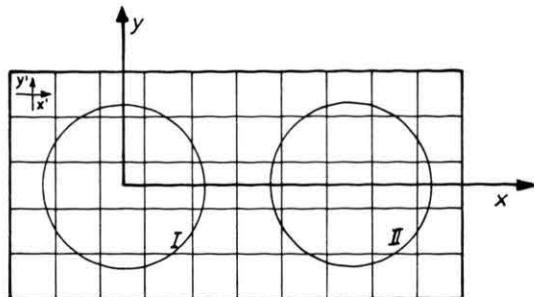


Abb. 1. Repräsentativer Oberflächenausschnitt einer (100)-Oberfläche.

verteilt die Einschußkoordinaten mit Hilfe von Zufallszahlen gewählt. Ein solches Wigner-Seitz-Element ist für eine (100)-Oberfläche eines fcc-Gitters das in Abb. 1 dargestellte Rechteck.

Zur schnellen Gleichverteilung der Einschußkoordinaten wird diese Fläche durch ein Raster aufgeteilt und in den dadurch entstehenden Quadranten mit Hilfe von Zufallszahlen jeweils ein Einschußort bestimmt. So kann schon nach Aufsuchen von nur 50 Einschußorten eine gute Gleichverteilung der Startpunkte der Teilchen erreicht werden.

Das Computerprogramm hat dann die Aufgabe das erste Gitteratom zu berechnen, dessen Wirkungssphäre von dem eindringenden Ion getroffen wird. Dazu wird in die Kristallachsen ein Koordinatensystem gelegt. Die Flugrichtung des Ions in diesem Koordinatensystem wird durch den Azimutwinkel φ und den Polarwinkel ϑ angegeben. Dann werden in den Gitterebenen parallel zur xz-Ebene die eventuellen Streuzentren gesucht. Die für Stöße in Frage kommenden Streuzentren liegen nur in rechteckigen Flächenausschnitten dieser Gitterebenen. Das Rechenprogramm ermittelt aus der Flugrichtung diese Flächenausschnitte und stellt systematisch fest, ob in ihnen ein Gitterzentrum als Streuzentrum in Frage kommt.

In einem Metalleinkristall sind die Atome in einem flächenzentrierten Gitter angeordnet. Dieses Gitter mit einer Gitterkonstanten $2d$ erhält man aus einem vollbesetzten kubischen Gitter mit der Gitterkonstanten d durch Weglassen von bestimmten Zentren. Haben die Atome des kubischen Gitters die Koordinaten (ld, md, nd) , $(l, m, n = 0, 1, 2, 3, \dots)$, so kommen im flächenzentrierten Gitter nur solche vor, deren Koordinatenwerte entweder alle geradzahlige Vielfache von d (ggg-Kombinationen) sind, oder solche, die einen geradzahligen und zwei ungeradzahlige Koordinatenwerte besitzen (guu-Kombinationen).

Ein Streuzentrum ist gefunden, wenn das Ion ein Gitterzentrum unter einem kleineren Abstand als ϱ_{\max} passiert. Ist dies der Fall, so wird mit dem errechneten Stoßparameter ϱ (ϱ = Abstand, unter dem das Ion an dem Streuzentrum vorbeifliegt, wenn kein Kraftzentrum wirkt) die Bahnablenkung ermittelt. Als neuer Ausgangspunkt des Teilchens nach dem Stoß gilt der Schnittpunkt der Asymptoten der Flugbahn vor und nach dem Stoß.

Auf Grund der Symmetrie des Gitters kann nach jedem Stoß durch geeignete Koordinatentransformation immer ein Koordinatensystem gefunden werden, dessen Achsen mit Hauptachsen des Kristalls zusammenfallen und für das die Flugrichtung einen Azimutwinkel zwischen 0° und 45° hat. Es zeigt sich, daß dies eine wesentliche Vereinfachung des Programms darstellt, die nicht nur seine Übersichtlichkeit verbessert, sondern darüber hinaus auch zur Verkürzung der Rechenzeit beiträgt. In diesem Koordinatensystem wird das Streuzentrum in den Ursprung oder in den Punkt $(d, 0, 0)$ gelegt, je nachdem die Kombinationen der Koordinatenwerte des Streuzentrums ggg- oder guu-Kombinationen sind. Für das ursprünglich eingeführte Koordinatensystem werden die Koordinatenwerte der jeweiligen Streuzentren ausgerechnet. Außerdem ist das Programm in der Lage, in diesem Koordinatensystem auch die Flugrichtung des Teilchens beim Verlassen der Schicht anzugeben.

In dem nach dem einzelnen Stoß geltenden Koordinatensystem wird dann das nächste Streuzentrum berechnet. Liegt dieses innerhalb der Schicht, so wird entsprechend weiterverfahren. Andernfalls wird die Rechnung abgebrochen und die für die jeweilige Untersuchung interessierenden Daten des Teilchens werden ausgegeben.

Im beschriebenen Rechenablauf wird vorausgesetzt, daß sich die Wirkungsbereiche der Potentiale, die von Gitterzentren ausgehen, bei der Projektion auf eine (100)-Ebene nicht überschneiden. Das Programm bleibt daher nur solange rechenfähig, solange die maximale Reichweite des Potentials nicht ein Viertel der Gitterkonstanten übersteigt.

Temperaturbewegungen der Gitterzentren und Kristallgitterfehler wurden im Kristallmodell nicht berücksichtigt.

b) Das Potential

Von entscheidender Bedeutung für die Berechnung der Flugbahn eines Ions in einer einkristallinen

Schicht ist das Wechselwirkungspotential. In der vorliegenden Rechnung wurde das Thomas-Fermi-Potential¹⁰ in der Molièreschen Form¹¹ verwandt:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} e_0^2 (0,1 e^{-6r/a} + 0,55 e^{-1,2r/a} + 0,35 e^{-0,3r/a}) \quad (1)$$

mit Z_1 = Kernladungszahl des ankommenden Teilchens, Z_2 = Kernladungszahl des Schichtatoms, e_0 = Elementarladung und a einem Abschirmparameter, der die Abschirmung der Kernladung durch die Hüllelelektronen berücksichtigt. Für a wurde der Firsov-sche Abschirmradius¹² eingesetzt:

$$a = 0,88 a_0 / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}, \quad (2)$$

wobei $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ cm gleich dem ersten Bohrschen Radius ist.

Der Weg eines Ions wird, wie bereits erwähnt, auf Grund von Einzelablenkungen berechnet. Jedes Einzelstreuproblem wird klassisch behandelt und der Ablenkinkel χ im Schwerpunktssystem mit Hilfe des klassischen Streuintegrals¹³

$$\chi/2 = \pi/2 - \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{\varrho/r^2}{\sqrt{1 - (\varrho^2/r^2) - [2V(r)/m_0 v_\infty^2]}} dr \quad (3)$$

berechnet, mit r_{\min} gleich der Wurzel des Radikanden. Mit dem oben angegebenen Potential läßt sich dieses Integral nicht geschlossen integrieren. Für einen schnellen Rechenablauf war jedoch eine geschlossene Integration notwendig. Diese wurde dadurch erreicht, daß das Thomas-Fermi-Potential durch ein abgeschirmtes Coulombpotential

$$\bar{V}(r) = \begin{cases} E_c (a_c/r - 1) & \text{für } r \leq a_c \\ 0 & \text{für } r > a_c \end{cases} \quad (4)$$

ersetzt wurde. Dazu mußte verlangt werden, daß das Coulombpotential das Thomas-Fermi-Potential in dem für eine Ablenkung entscheidenden Bereich in guter Näherung wiedergibt. Diese Forderung wird durch die Potentialanpassung¹⁴ erfüllt, die die beiden Potentiale und ihre Ableitungen in einem vorgegebenen Abstand vom Kraftzentrum gleichsetzt. In den hier vorgelegten Rechnungen wurde die Anpassung im Abstand des jeweiligen Stoßparameters ϱ vom Kraftzentrum durchgeführt, da sich hierbei die geringste Abweichung zwischen dem mit exaktem Potential und dem mit angepaßtem Potential errechneten Ablenkinkel ergab. Mit dieser Anpassung erhält man für die Konstanten in $\bar{V}(r)$:

$$E_c = -[\varrho V'(\varrho) + V(\varrho)], \\ a_c = -\varrho^2 V'(\varrho)/E_c. \quad (5)$$

Der gewünschte Zusammenhang zwischen Streuwinkel χ und dem Stoßparameter q lautet dann nach Auswertung des Streuintegrals:

$$\cos\left(\frac{\chi}{2}\right) = \frac{1+E/2}{\sqrt{1+E+(E a_c/2 Q)^2}}, \quad (6)$$

wobei $E = E_c/E_\infty$ ist und E_∞ die Energie des Ions im Schwerpunktsystem angibt.

c) Die Energieverluste

Es wird angenommen, daß das Ion auf seinem Weg durch die Schicht auf zwei Arten seine Energie verliert. Dies ist einmal der Energieverlust, den ein Ion bei einem elastischen Stoß erfährt und zum anderen der Energieverlust, der durch Elektronenanregung verlorengingeht.

Bei einem zu einem Ablenkwinkel χ führenden Stoß des Ions mit einem Schichtatom wird der Energieverlust durch

$$E = \frac{4 M_1 M_2 E_s}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2(\chi/2) \quad (7)$$

wiedergegeben, dabei ist E_s gleich der Teilchenenergie vor dem Stoß, M_1 die Masse des Ions und M_2 die Masse des Targetatoms. Die Energie, die ein Ion durch Elektronenanregung verliert, wenn es in Zufallsrichtung den Kristall durchsetzt, wurde durch eine modifizierte Bethe-Bloch-Formel nach Izui¹⁵ folgendermaßen berechnet:

$$|dE/dx|_{e,Z} = C_1 \sqrt{E_T} \ln(C_2 \sqrt{E_T}), \quad (8)$$

wobei

$$C_1 \sim N Z_1^{2/3} Z_2^{1/3} / \sqrt{M_1}, \quad C_2 \sim (Z_2^{1/3} \sqrt{M_1})^{-1}.$$

Hierin ist E_T gleich der Energie des Teilchens zu Beginn der jeweiligen Wegstrecke und N die Teilchenzahldichte im durchsetzten Medium. Dieser Energieverlust wird für die jeweils zwischen zwei Einzelstößen geraden Wegstrecken berechnet. Die noch offenen Proportionalitätsfaktoren in der Formel werden dadurch gewonnen, daß die für eine Zufallsrichtung errechneten Energieverluste an experimentelle Werte¹⁶ angepaßt werden.

Werden die Ionen gechannelt, so wird eine Abhängigkeit ihres Energieverlustes durch Elektronenanregung von ihrem Abstand x von der Kanalmitte nach einem Vorschlag von Robinson⁹ berücksichtigt:

$$|dE/dx|_{e,c} = |dE/dx|_{e,Z} [s_0 + s_1 (\cosh\{(b/2)x\} - 1)]. \quad (9)$$

Hierbei gibt $|dE/dx|_{e,Z} s_0$ die Bremskraft des Mediums in der Kanalmitte an. Für b gilt:

$$b = 0,3/a \quad (10)$$

mit dem Firsov'schen Abschirmradius a aus Formel (2).

3. Ergebnisse, Vergleiche mit Experimenten

a) Meßergebnisse

Mit dem beschriebenen Programm wurden Experimente von Datz und Mitarbeitern⁸ simuliert. Diese Experimente zeigen, daß die Energiespektren von 60 MeV ¹²⁷Jodionen nach channeling zwischen (111)- und (100)-Ebenen von Goldeinkristallen dann Strukturen aufweisen, wenn die Energien nur der Teilchen nachgewiesen werden, die den Kristall wieder in ihrer Eintrittsrichtung verlassen. Diese Strukturen werden auf die Transversalschwingungen zurückgeführt, die die Teilchen auf ihrem Weg l durch den Kristall zwischen den Atomebenen ausführen. Je größer die Amplituden dieser Transversalschwingungen sind, um so größer ist der Energieverlust der Teilchen, da sie in Gebiete größerer Elektronenkonzentrationen vorstoßen.

Ist der Detektor so orientiert, daß er nur die Teilchen nachweist, die in ihrer Eintrittsrichtung den Kristall verlassen, so werden in ihm nur solche Teilchen registriert, deren Wellenlängen λ dieser Schwingungen die Bedingung $l = n \lambda$ erfüllen. Somit besitzen die Teilchen, die in dem Detektor nachgewiesen werden, nur diskrete Schwingungsamplituden und damit nur diskrete Energieverluste. Das Ergebnis einer solchen Messung ist in Abb. 2 a wiedergegeben.

Es wurden 60 MeV ¹²⁷Jodionen unter 0,5° zu (111)-Ebenen einer einkristallinen Goldfolie so eingeschossen, daß die Ionenweglängen durch die Folie $l = 7000 \text{ \AA}$ betrugen. Die in der Abbildung wiedergegebenen n -Werte geben die Anzahl der Transversalschwingungen der Ionen an und wurden auf Grund von dem von Robinson⁸ erstellten Modell berechnet.

Werden die Messungen für andere Ionenweglängen ausgeführt, so treten die Energiepeaks aus Abb. 2 a für andere Energiewerte auf. Im Diagramm der Abb. 3 wurden für eine Reihe dieser Messungen die Ergebnisse zusammengefaßt.

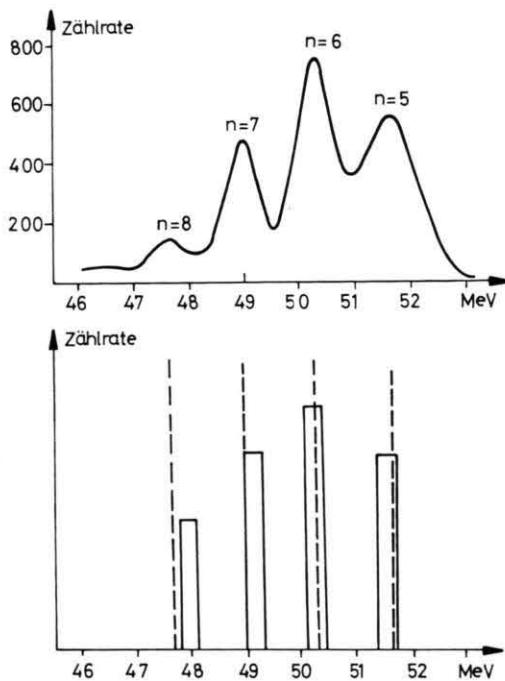


Abb. 2 a. Energiespektrum von 60 MeV ^{127}I -Ionen nach channeling zwischen (111)-Ebenen einer Goldschicht. Die Weglänge der Ionen durch die Schicht betrug 7000 Å.

Abb. 2 b. Ergebnis der Computersimulation des Experiments, dessen Meßergebnisse in Abb. 2 a wiedergegeben sind.

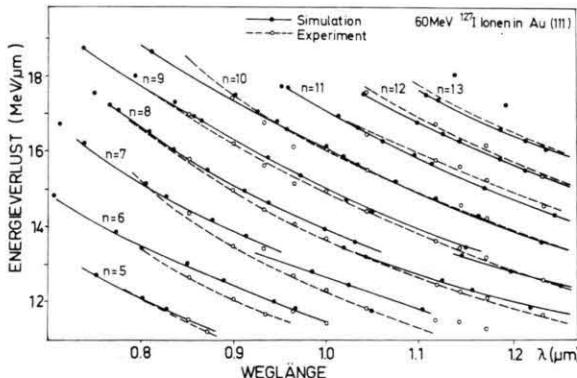


Abb. 3. Energieverlust als Funktion der Weglänge für Ionen, die nach channeling an (111)-Ebenen einer Goldschicht unter der Einschußrichtung den Kristall verlassen. Hierbei gibt λ die Weglänge und n die Anzahl der Oszillationen an.

Für verschiedene Ionengewölgen sind jeweils die Energieverluste pro μm Weglänge für die aufgetretenen Energiepeaks aufgetragen, die dazugehörigen Anzahlen n der Transversalschwingungen angegeben und alle Meßpunkte mit gleichen n -Werten durch Kurven verbunden.

Die Abb. 4 gibt die entsprechenden Ergebnisse für channeling zwischen (100)-Ebenen wieder.

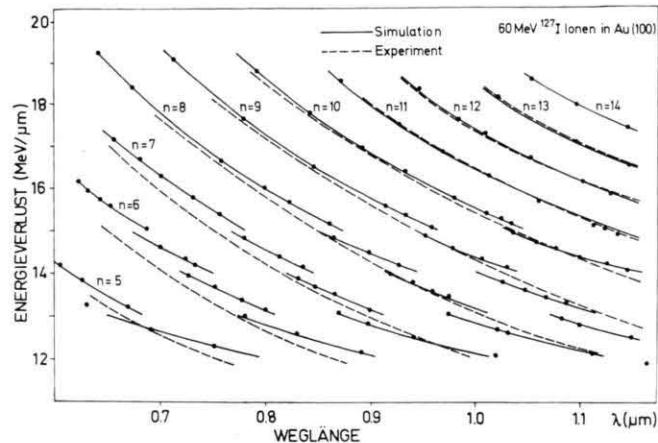


Abb. 4. Energieverlust als Funktion der Weglänge für Ionen, die nach channeling an (100)-Ebenen einer Goldschicht unter der Einschußrichtung den Kristall verlassen.

b) Ergebnisse der Simulation

Zunächst wurde das channeling von 60 MeV ^{127}I -Ionen an (111)-Ebenen einer einkristallinen Goldschicht simuliert. Als Ionenweglänge wurden 7000 Å gewählt, so daß die Rechenergebnisse mit den Meßergebnissen aus Abb. 2 a verglichen werden können. Bei der Simulation wurden nur die Energien der Teilchen zur Ausgabe gebracht, deren Flugrichtungen beim Austritt aus der Schicht sich um weniger als $0,05^\circ$ von den Eintrittsrichtungen unterschieden. In einer Reihe von Rechnungen wurde dann die Anpassung der Rechenergebnisse an die Meßergebnisse erreicht (siehe Abb. 2 b).

Für eine Anpassung können grundsätzlich sowohl die Parameter, die in der Formel für das Potential auftreten, als auch die, die in der Formel für den Energieverlust stehen, variiert werden. In der vorliegenden Arbeit wird die Untersuchung jedoch unter der Annahme ausgeführt, daß sich lediglich die Parameter s_0 und s_1 , die in der Formel für den Energieverlust auftauchen, ändern können. Eine Anpassung unter diesen Voraussetzungen zeigt die Abbildung 2 b. Die Schwingungszahlen n stimmen mit denen, die von Datz et al. angegeben wurden, überein. Für die Parameter s_1 und s_0 ergeben sich die folgenden Beziehungen: $s_1 = s_0$ und $s_0 = 0,425$. Mit der Beziehung $s_1 = s_0$ reduziert sich die Formel (9) auf die Beziehung

$$|dE/dx|_{e,c} = |dE/dx|_{e,Z} s_0 \cosh [(b/2)x]. \quad (11)$$

In der Kanalmitte, d. h. für $x=0$ ist also der Energieverlust durch Elektronenanregung im Vergleich zum polykristallinen Medium um mehr als die Hälfte geringer.

Zur Erstellung eines auf Grund von channeling-Messungen an (111)-Ebenen zustande gekommenen Diagramms nach Abb. 3, werden bei der Simulation die Energieverluste pro Weglänge für die Teilchen immer nur dann zur Ausgabe gebracht, wenn sie jeweils eine Wegstrecke, die einem ganzzahligen Vielfachen einer Wellenlänge entspricht, zurückgelegt haben. Dies ist immer dann der Fall, wenn die Flugrichtung mit der Eintrittsrichtung übereinstimmt und außerdem die Amplitude, die von der Kanalmitte aus berechnet wird, das Vorzeichen der Eintrittsamplitude hat. Schon nach Durchrechnung von nur 50 solchen Teilchenschicksalen ergibt sich ein guter Vergleich zwischen Experiment und Rechnung. Bei diesem Vergleich zeigt sich, daß Formel (11), die den Energieverlust für gechannelte Teilchen wiedergeben soll, nur beschränkt gültig ist. Bleibt der Parameter s_0 im Verlauf der gesamten Rechnung konstant, so stimmen die rechnerisch gefundenen Werte immer nur in einem gewissen Bereich mit den Meßwerten überein. Zu demselben Ergebnis kommt auch Robinson⁸, der allerdings von Lindhards Kontinuumsmodell ausgeht, daß für die Atomebenen ein planares Potential vorsieht, die diskrete Struktur also unberücksichtigt läßt. Eine gute Anpassung der Rechenergebnisse an die Meßergebnisse kann nur dadurch erreicht werden, daß der Parameter s_0 aus Formel (11) für hohe Energieverluste im Vergleich zu niedrigen Energieverlusten größer gewählt wird.

Für hohe Energieverluste mußte für s_0 der Wert 0,425 eingesetzt werden, bei niedrigen Energieverlusten ergab der Wert 0,41 die beste Anpassung. Eine weniger gute Anpassung bei der entsprechenden Simulation wird für das channeling an (100)-Ebenen erreicht (siehe Abbildung 4). Hier muß insgesamt vier mal neu angepaßt werden. Für den Parameter s_0 ergeben sich dabei die folgenden Werte: $s_0 = 0,46$; $s_0 = 0,47$; $s_0 = 0,48$; $s_0 = 0,49$. Diese Ergebnisse zeigen, daß noch wesentlich stärker als bei den entsprechenden Untersuchungen an (111)-Ebenen, Formel (11) für kleine Schwingungsamplituden den Energieverlust zu groß angibt und für große Schwingungsamplituden diesen zu klein berechnet. Bemerkenswert ist noch, daß gegenüber den Rechnungen an (100)-Ebenen der Energieverlust zwischen (111)-Ebenen wesentlich niedriger

ist. Dies ist auf die geringere Elektronenkonzentration zwischen den weiter auseinanderliegenden (111)-Ebenen zurückzuführen.

Die Ergebnisse der vorgelegten Rechnungen belegen, daß mit dem beschriebenen Computermodell der Durchgang von hochenergetischen schweren Ionen durch einkristalline Metallschichten simuliert werden kann. Wenn auch bei den bisher durchgeführten Rechnungen eine völlige Übereinstimmung zwischen den Meß- und den Rechenergebnissen nicht erzielt wurde, so zeigen die Rechnungen doch, daß das Modell im Ansatz vernünftig angelegt ist. Sicher ist noch bei zusätzlicher Berücksichtigung von weiteren, in den Rechenansätzen auftauchenden Parametern im Anpassungsverfahren eine bessere Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung zu erzielen. Naheliegend ist es dabei noch, die Abschirmkonstante a in den Fit-Prozeß einzubeziehen, da die eingesetzte Konstante a nach Firsov für neutrale Stoßpartner abgeleitet wurde.

Bei zusätzlicher Berücksichtigung von weiteren Parametern im Anpassungsverfahren wächst jedoch die Zahl der Kombinationen für die in Frage kommenden Parameterwerte sehr rasch an. In demselben Maße steigt auch die Rechenzeit, die erforderlich ist, um den Einfluß der geänderten Parameterwerte auf die Rechenergebnisse zu untersuchen.

Beim derzeitigen Stand des Modells schienen derartige zeitaufwendige Rechnungen nicht gerechtfertigt. Denn erst nach Berücksichtigung von Temperaturbewegungen und Mosaikstrukturen des Kristallgitters erfüllt das Modell die Voraussetzungen für eine wirkliche Verbesserung der bisherigen Ergebnisse.

4. Zusammenfassung

Es wurde ein Computerprogramm geschrieben, das den Durchgang von geladenen Teilchen durch einkristalline Metallschichten simuliert. Die Bahn der Teilchen wird dabei aufgrund von Einzelstößen mit den Schichtatomen berechnet. Als Wechselwirkungspotential wurde das Thomas-Fermi-Potential in der Moliërschen Form benutzt. Beim Energieverlust der Teilchen wird einmal ein Anteil, der durch Coulombstöße auftritt, berücksichtigt und weiterhin ein Anteil, der auf Elektronenanregung zurückzuführen ist. Zur Simulation von vorliegenden Experimenten von Datz und Mitarbeitern⁸, in denen

der Energieverlust von Jodionen nach Durchgang durch einkristalline Goldschichten gemessen wurde, wird für den Energieverlust durch Elektronenanregung zusätzlich ein exponentieller Anstieg bei Annäherung der Ionen an die Atomebenen des Kristalls berücksichtigt.

Bei geeigneter Wahl der Parameter, die im Ansatz der Energieverlustfunktion auftreten, ergaben die errechneten Energiespektren der Ionen sowohl für das channeling an (111)-Ebenen als auch an

(100)-Ebenen gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Dabei mußte weder das Thomas-Fermi-Potential noch der Firsov'sche Abschirmradius abgeändert werden.

Herrn Dipl.-Phys. Dr. K. Gütter danken wir für wertvolle Ratschläge und Literaturhinweise. Außerdem sind wir der Deutschen Forschungsgemeinschaft zu Dank verpflichtet, daß die umfangreichen Rechnungen an den Rechenanlagen in Marburg und Gießen durchgeführt werden konnten.

- ¹ J. Stark u. G. Wendt, Ann. Physik **38**, 921 [1912].
- ² S. Datz, C. D. Moak u. T. S. Noggle, Phys. Rev. Letters **15**, 254 [1965].
- ³ J. Lindhard, Kgl. Danske Videnskab selskab, Mat.-Fys. Medd. **34**, No. 14 [1965].
- ⁴ S. Datz, C. Erginsoy, G. Leibfried u. H. O. Lutz, Ann. Rev. Nucl. Sci. **17**, 129 [1967].
- ⁵ Atomic Collision Phenomena in Solids, North Holland, Amsterdam 1970.
- ⁶ D. V. Morgan u. D. van Vliet, Can. J. Phys. **46**, 503 [1967].
- ⁷ J. H. Barrett, Phys. Rev. **3B**, 1527 [1971].
- ⁸ S. Datz, C. D. Moak, T. S. Noggle, B. R. Appleton u. H. O. Lutz, Phys. Rev. **179**, 315 [1969].
- ⁹ M. T. Robinson, Phys. Rev. **179**, 327 [1969].
- ¹⁰ P. Gombas, Handbuch der Physik, Springer-Verlag, Berlin 1956, Bd. **36**, S. 109.
- ¹¹ G. Molière, Z. Naturforsch. **2a**, 133 [1947].
- ¹² O. B. Firsov, Soviet Phys.-JETP **5**, 1192 [1957]; **6**, 534 [1958]; **7**, 308 [1958].
- ¹³ C. D. Landau u. E. M. Lifshits, Mechanik, Akademie-Verlag, Berlin 1960.
- ¹⁴ G. Leibfried, Bestrahlungseffekte in Festkörpern, B. G. Teubner, Stuttgart 1965, S. 46 ff.
- ¹⁵ K. Izui, J. Phys. Soc. Japan **22**, 1015 [1967].
- ¹⁶ L. C. Northcliffe u. R. I. Schilling, Nuclear Data Tables **A 7**, 233 [1972].