

Computersimulation der Rückstreuung schneller schwerer Ionen an einkristallinen (001)- und (111̄)-Goldoberflächen

H. Schmidt und K. Güttner

II. Physikalisches Institut, Gießen

(Z. Naturforsch. 31 a, 316–326 [1976]; eingegangen am 16. Februar 1976)

Computer Simulation of the Backscattering of High Energy Ions from (001)- and (111̄)-surfaces of Au-Single Crystals

A computer program for following the trajectories of high energy ions in an fcc-lattice has been written to evaluate the reflection rate of high energy ions with grazing incidence to (001)- and (111̄)-Au-surfaces. The calculation yields a rapid decrease of the reflection rate for penetration directions close to low-index atomic planes. It can be shown that this result is caused by channeling of the ions between the atomic planes.

1. Einleitung

Die in der Literatur vorliegenden Arbeiten zur Erforschung der Wechselwirkung von schweren Ionen mit Einkristallen beschränken sich im hoch-energetischen Bereich meist auf die Untersuchung der transmittierten Teilchen. In seltenen Fällen wurden auch die reflektierten Teilchen studiert^{1–3}. Für Ionen im MeV-Bereich wurden Reflexionsuntersuchungen an Einkristall-Oberflächen lediglich in einem einzigen Falle und nur qualitativ durchgeführt⁴.

Bei manchen Messungen führen Reflexionen von Ionen an Apparaturwänden und Blenden zu einer nicht unwesentlichen Verfälschung der Ergebnisse. Eine genauere Kenntnis der zu erwartenden Reflexionsraten könnte dem Experimentalphysiker hier dienlich sein. Mit aus diesem Grunde hat in den letzten Jahren das Interesse zugenommen, die theoretischen Fragen zu klären, die bei der Untersuchung solcher Wechselwirkungen auftreten.

Zwei wesentliche Effekte, die dabei wirksam werden, der channeling- und der blocking-Effekt, beeinflussen insbesondere auch die Reflexionsraten. Eine genauere theoretische Untersuchung der Rückstreuung von Ionen von Einkristall-Oberflächen unter Berücksichtigung dieser Effekte erscheint daher angebracht und wird in dieser Arbeit unternommen. Ihre Ergebnisse zeigen eine starke Abhängigkeit der Reflexionsraten von der Einschubrichtung und geben einen guten Einblick in die Zusammenhänge, die beim Übergang vom channeling zum dechanneling eine Rolle spielen. Gerade während dieses Übergan-

ges treten gehäuft Stöße mit kleinem Stoßparameter, d. h. mit großen Ablenkungswinkeln, auf, die die Reflexionsraten stark anwachsen lassen. Aus dem Vergleich der theoretischen Erwartungen mit entsprechenden Experimenten ergibt sich hier insbesondere die Möglichkeit, Kenntnisse über die wirksam werdenden Potentiale zu gewinnen.

In den letzten Jahren wurden verschiedentlich Computerprogramme geschrieben, die den Durchgang von Ionen durch Einkristalle simulieren^{5–7}. Es besteht aber weiterhin ein erheblicher Mangel an theoretischen Untersuchungen über die Rückstreuung von Ionen von den Oberflächen von solchen Kristallen.

So wurde für Ionen im MeV-Bereich bisher noch nicht rechnerisch ermittelt, welchen Einfluß das Drehen des Kristalles um die Oberflächennormale, also unter Konstanthaltung des Einschubwinkels zur Oberfläche, auf die Reflexionsraten hat. Mit dieser Arbeit soll diese Lücke geschlossen werden.

Zunächst werden die Reflexionsraten für 60 MeV Jodionen bei nahezu streifendem Einfall (2° zur Oberfläche) auf eine (001)-Ebene einer einkristallinen Goldschicht berechnet. Es wird nachgewiesen, daß die starken Variationen der Reflexionsrate, die sich bei Drehen des Kristalles um die Oberflächennormale ergeben, auf channeling zurückzuführen sind.

Im Anschluß daran werden die gleichen Untersuchungen auch für eine (111̄)-Oberfläche durchgeführt. Danach wird der Einschubwinkel auf 3° zur Oberfläche erhöht und die dafür resultierenden Änderungen der Reflexionsraten ermittelt. Schließlich werden noch einige Untersuchungen über die Eindringtiefen der Ionen in Abhängigkeit von der Kristallorientierung angestellt. Weiterhin kann nachge-

Sonderdruckanforderungen an Dr. K. Güttner, II. Physikalisches Institut der Universität Gießen, Arndtstraße 2, D-6300 Gießen.



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 digitalized 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.

wiesen werden, daß das Absinken der Reflexionsraten auf Grund von channeling selbst für kristallographisch identische channeling-Ebenen unterschiedlich ist und vom Schnittwinkel dieser Ebenen mit der Kristalloberfläche abhängt.

2. Das Computermodell

Das Computermodell wurde bereits in einer früheren Arbeit beschrieben⁸. Es sollen hier die wesentlichen Züge dieses Modelles noch einmal kurz erläutert werden. Es werden zunächst gleichverteilt über einen repräsentativen Oberflächenausschnitt die Eintrittskordinaten der Teilchen gewählt. Dabei wird die statistische Aussage der Rechnung durch Unterteilung des Oberflächenausschnittes verbessert. Abbildung 1a zeigt diese Unterteilung für den Oberflächenausschnitt einer (001)-Oberfläche. Der Oberflächenausschnitt einer (111̄)-Oberfläche, ein Sechseck mit der Seitenlänge $r = 2d/\sqrt{6}$, wird entsprechend Abb. 1b aufgeteilt; hierbei ist $2d$ die Gitterkonstante.

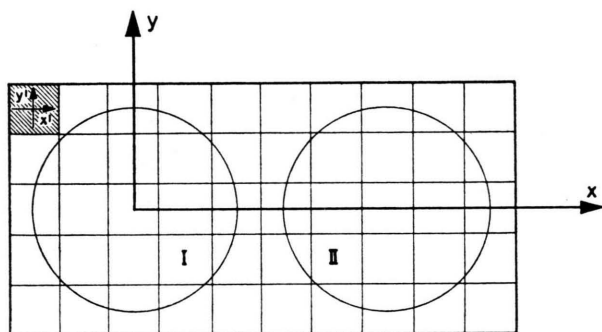


Abb. 1 a. Repräsentativer Oberflächenausschnitt einer (001)-Ebene.

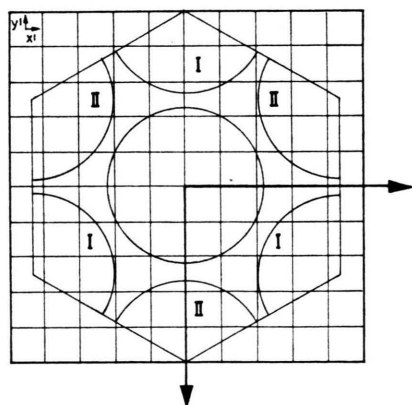


Abb. 1 b. Repräsentativer Oberflächenausschnitt einer (111̄)-Ebene.

Eine gute Gleichverteilung der Koordinaten über die Oberfläche schon nach Wahl weniger Einschußorte wird dadurch erreicht, daß nacheinander in allen Quadranten der Abb. 1 die Einschußkoordinaten statistisch gleichverteilt mit Hilfe von Zufallszahlen gewählt werden.

Ein Rechenlauf wurde für eine (001)-Oberfläche nach Wahl von 50 Einschußorten beendet, bei einer (111̄)-Oberfläche wurden jeweils Teilchenzahlen zwischen 48 und 88 gerechnet, je nachdem, wo die Einschußorte in den Quadranten der Abb. 1 lagen.

Die Teilchenbahn wird auf Grund von Einzelablenkungen berechnet. Dabei wird angenommen, daß zwischen zwei Stößen die Bahn geradlinig verläuft.

Als Wechselwirkungspotential wird ein abgeschirmtes Coulomb-Potential angenommen:

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

hierbei sind E_c und a_c noch zu wählende Konstante. Dieses Potential wird an ein Thomas-Fermi-Potential in der Molierschen Näherung⁹:

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

angepaßt, hierbei ist a eine Abschirmkonstante, die die Abschirmung der Kernladung durch die Elektronenhülle berücksichtigt. Diese wurde in der vorliegenden Rechnung nach Vorschlag von Firsov¹⁰ mit

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

gewählt.

Die Konstanten E_c und a_c aus Formel (1) ergeben sich nach der Anpassung der beiden Potentiale wie folgt:

$$\begin{aligned} E_c &= -[\varrho V'(\varrho) + V(\varrho)] \\ a_c &= -\varrho^2 V'(\varrho)/E_c, \end{aligned} \quad (4)$$

wobei ϱ der Ort der Anpassung ist. Er wurde bei der Rechnung immer im Abstand des jeweiligen Stoßparameters vom Kraftzentrum gewählt. Als maximale Reichweite r_{\max} des Potentials wurde im Falle des channelings der halbe Ebenenabstand der channeling-Ebenen gewählt; danach erhält man für den (111̄)-Kanal $r_{\max} = 0,5771 d$ und für den (100)-Kanal $r_{\max} = 0,5 d$.

Für die Potentialanpassung folgt hieraus, daß der Grenzstoßparameter für den ersten Fall sich zu ϱ_{\max}

$= 0,4591 d$ ergibt, während er im zweiten Fall $Q_{\max} = 0,3872 d$ ist, da bei diesen Werten das angepaßte Potential in den jeweils gewünschten Entfernungen verschwindet.

Fliegt das Teilchen ungechannelt durch die Schicht, so sind die Verhältnisse denen im polykristallinen Material gleich. Hier genügt es, wie einer der Autoren bereits bewiesen hat², mit wesentlich kleineren Stoßparametern zu arbeiten, da die auf die Flugbahn sich wesentlich auswirkenden Ablenkungen mit Stoßparametern unter ca. $0,1 \text{ \AA}$ auftreten.

Für die Teilchen wird auf dem Weg durch die Schicht auf den jeweils geradlinig vorausgesetzten Wegstücken ein Energieverlust durch Elektronenanregung berechnet. Weiterhin wird die Energie, die durch die Coulomb-Stöße verloren geht, berücksichtigt. Einzelheiten hierzu sind aus der erwähnten Veröffentlichung⁸ zu entnehmen.

Das Gitter wird im Verlauf der gesamten Rechnung als absolut starr und ohne Gitterfehler angenommen.

Das Programm ist in der Lage, eine große Zahl von Daten auszugeben. Hierzu gehören etwa die Verteilung der Stoßparameter bzw. der Ablenkwinkel, die Verteilung der Weglängen zwischen den einzelnen Stößen, die Flugrichtung der Teilchen beim Austritt aus der Schicht, die Verteilung der in die Einfallsebene projizierten Austrittswinkel der reflektierten Teilchen, die Verteilung der Eindringtiefen der reflektierten Teilchen usw.

Als besonders günstig für channeling-Untersuchungen erwies sich, die Flugrichtung der Teilchen bezüglich einer beliebig im Kristallgitter liegenden Ebene angeben zu können. Zu dieser Registrierung wird nach jedem Stoß die Projektion der Flugrichtung auf die betreffende Ebenennormalen ausgegeben. Um schnell und übersichtlich festzustellen, ob das Teilchen in Richtung dieser Ebenen gechannelt wird, gibt der Drucker bei einer Projektion größer Null eine Eins aus und im Falle kleiner Null eine Null aus. Im Falle des channeling wird in gleichmäßiger Folge eine Anzahl des Zeichens Null von

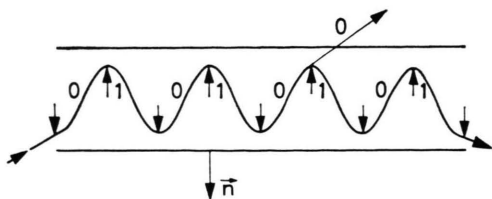


Abb. 2. Die in Abhängigkeit der Flugrichtung ausgegebenen Druckerzeichen.

einer Anzahl des Zeichens Eins abgelöst, wie aus der Abb. 2 zu entnehmen ist. Wird das channeling abgebrochen, so wird auch diese gleichmäßige Zeichenfolge unterbrochen.

3. Ergebnisse, Diskussion der Ergebnisse

3.1. Untersuchungen an der (001)-Oberfläche

3.1.1. Reflexionsraten für Einfallswinkel von 2°

Für die Berechnung der Reflexionsraten werden, wie bereits beschrieben, die Eintrittskordinaten der Teilchen gleichverteilt über einen repräsentativen Oberflächenausschnitt gewählt. Die Strahlneigung zur Oberfläche wird im folgenden konstant gehalten, lediglich die Einfallsebene wird um die Oberflächennormale gedreht.

Zur Charakterisierung der Flugrichtung wird der Azimutalwinkel φ und der Polarwinkel ϑ benutzt. Die dabei verwandten Koordinatenachsen stimmen mit den Hauptachsen des Kristalls überein.

Die x, y -Ebene liegt in der Kristalloberfläche und die z -Achse zeigt in den Kristall hinein. Die Oberfläche des Kristalls ist demnach eine (001)-Ebene. Zur Bezeichnung der Einfallsebene wird der Winkel zwischen Einfallsebene und der in der (001)-Oberfläche liegenden $\langle 100 \rangle$ -Achse herangezogen.

Die Schichtdicke wird zunächst mit 250 Atomlagen angenommen. Ein Teilchen wird dann solange durch die Schicht verfolgt, bis es transmittiert oder reflektiert ist. Sind 50 Teilchen durchgerechnet, so wird zunächst die Reflexionsrate bestimmt. Danach wird mit neuen Zufallszahlen, d. h. mit geänderten Einschußkoordinaten die Rechnung wieder gestartet. Für einen festen Einschußwinkel wurde dies etwa fünf- bis zehnmal wiederholt und das arithmetische Mittel aus diesen Einzelergebnissen als Reflexionsrate angenommen.

Die Abb. 3 gibt einen Überblick über alle erhaltenen Ergebnisse. Die Fehlerbalken in dieser Abbildung geben die mittlere Abweichung der Einzelwerte vom Mittelwert wieder.

Bedingt durch die Symmetrie des Kristalls repräsentiert der betrachtete Winkelbereich von 0° bis 45° bereits das gesamte Winkelintervall zwischen 0° und 360° . Wie man aus der Abbildung 3 entnehmen kann, treten starke Schwankungen der Reflexionsraten in Abhängigkeit des Winkels φ auf. Dabei stellt man fest, daß starke Schwankungen der

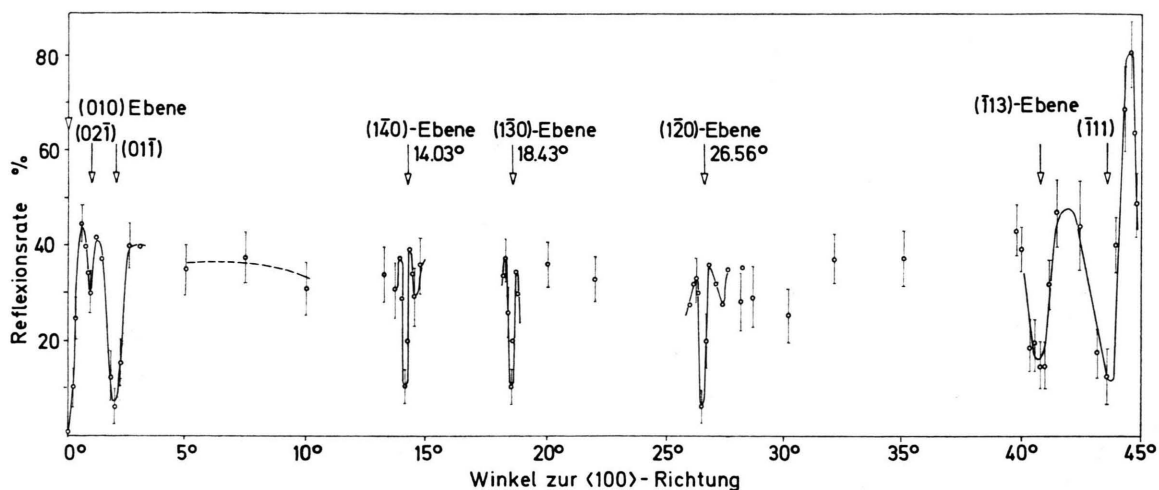


Abb. 3. Reflexionsraten von 60 MeV Jodionen bei einem Einschußwinkel von 2° zur (001)-Oberfläche eines Goldeinkristalls als Funktion des Winkels zwischen Einfallsebene und $\langle 100 \rangle$ -Achse.

Reflexionsraten dort auftreten, wo die Eintrittsebenen der Ionen nahe niedrig indizierter Kristallebenen liegen. Dies ist zunächst einmal der Fall, wenn für den Winkel φ die Beziehung

$$\tan \varphi = n/m \quad (5)$$

gilt (n, m ganze Zahlen). In diesen Richtungen liegen dicht gepackte Atomenebenen im Kristall, und das Absinken der Reflexionsraten, das für die erwähnten Eintrittsrichtungen zu beobachten ist, ist eine Folge des channelings. Dies wurde für jede Einbuchtung (dip) in der Kurve, die die Reflexionsrate in Abhängigkeit des Winkels wiedergibt, durch die bereits oben erwähnte ständige Überprüfung der Flugrichtung der Teilchen nachgewiesen. Für die Richtungen, für die die Reflexionsraten besonders stark absinken, durchsetzen die Teilchen zu einem großen Prozentsatz die Schicht, indem sie, wie aus ihren Flugrichtungen ersichtlich ist, zwischen Kristallebenen hin- und herpendeln.

Neben den erwähnten Einschußrichtungen gibt es noch weitere, für die die Reflexionsraten stark absinken. Hierfür ist das channeling an Ebenen, die die (001)-Oberfläche nicht senkrecht durchsetzen, verantwortlich.

Bei der Betrachtung der dip-Breiten und -Tiefen in den Kurven der Reflexionsraten zeigt sich, daß neben der Dichte der Atompäckung der channeling-Ebene auch ihr Austrittswinkel aus der Kristalloberfläche von Einfluß auf die Reflexionsraten ist. Bei den senkrecht aus der (001)-Oberfläche austretenden Kristallebenen haben die (010)-Ebenen die

größte Atomdichte. In der Reihenfolge der Packungsdichten folgen ihr die (110)-, (120)-, (130)-, (140)- und die (150)-Ebenen; zu diesen Ebenen stehen die Einschüßebenen dann parallel, wenn $\tan \varphi = 1, 1/2, 1/3, 1/4$ und $1/5$ ist, was für $\varphi = 45^\circ, 26,56^\circ, 18,43^\circ, 14,03^\circ$ und $11,31^\circ$ der Fall ist. In gleicher Reihenfolge sinkt auch die Ausprägung der dips in der Kurve der Reflexionsraten.

Eine Besonderheit liegt für Einschüßrichtungen mit Azimutalwinkeln nahe $\varphi = 45^\circ$ vor. Die Einschüßrichtungen liegen in diesem Falle den $\langle 110 \rangle$ -Achsen sehr nahe. In diesen Achsen liegen Atomreihen mit größter Packungsdichte, die aus diesem Grunde auch sehr große Abstände zueinander haben. Die Chance für planares channeling ist daher stark herabgesetzt. Axiales channeling ist auch nicht mehr möglich, da die Flugrichtungen bereits Winkel von über 2° mit den $\langle 110 \rangle$ -Kanälen bilden. Daher hat der dip auch nicht die erwartete Breite. Auffallend ist die besonders hohe Reflexionsrate, die durch die große Zahl der Stöße mit sehr kleinen Stoßparametern hervorgerufen wird. Der Grund hierfür ist in dem axialen dechanneling zu sehen. Neben den erwähnten Winkeln sinkt die Reflexionsrate auch für solche ab, für die die Einfallsebenen unter einem Winkel von $1^\circ, 2^\circ, 40,7^\circ$ und $43,6^\circ$ zur $\langle 100 \rangle$ -Achse stehen. Für diese Winkel ist der Winkelbereich, über den die Reflexionsraten abnehmen, zum Teil noch größer als für die oben erwähnten. Ursache für das Auftreten der dips ist auch hier wieder das channeling. Bei den channeling-Ebenen handelt

es sich respektive der oben genannten Winkel um eine (02 $\bar{1}$)-, (01 $\bar{1}$)-, ($\bar{1}$ 13)- und eine ($\bar{1}$ 11)-Ebene. Aus dem Zeichensatz, der sich aus den Projektionen der Flugrichtungen auf diese Ebenen ergibt, kann explizit nachgewiesen werden, daß das channeling an diesen Ebenen stattfindet.

Zum Verständnis der auffällig breiten dips soll die Abb. 4 dienen. Hier sind zwei Ebenen darge-

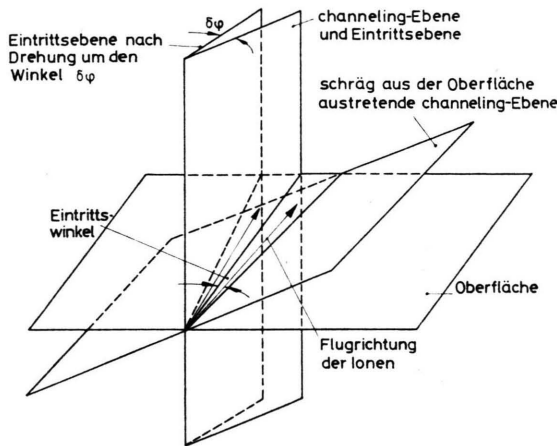


Abb. 4. Einschußrichtung in einer Ebene senkrecht zur Oberfläche und nach Drehung der Einfallsebene um $\delta\varphi$ in einer schräg aus der Oberfläche austretenden Ebene.

stellt, von denen eine schräg und die andere senkrecht aus der Oberfläche austritt. Außerdem sind zwei Einschußrichtungen eingetragen, die in einem Falle in der senkrecht aus der Oberfläche austretenden Ebene liegt und in dem andere Falle nach Drehung der Einfallsebene um den Winkel $\delta\varphi$ in der schräg aus der Oberfläche austretenden Ebene liegt.

Die Flugrichtungen der Ionen stehen Kristallebenen dann parallel, wenn sie auf den Ebenennormalen senkrecht stehen:

$$(\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, \cos \vartheta) \cdot (n_x, n_y, n_z) = 0. \quad (6)$$

Der erste Vektor ist der Einheitsvektor der Flugrichtung in Polarkoordinaten, der zweite Vektor ist der Einheitsvektor des Normalenvektors der channeling-Ebene. Aus der obigen Beziehung folgt:

$$n_x \cos \varphi \sin \vartheta + n_y \sin \varphi \sin \vartheta + n_z \cos \vartheta = 0$$

oder

$$\sin \vartheta (n_x \cos \varphi + n_y \sin \varphi) = -n_z \cos \vartheta. \quad (7)$$

Diese Beziehung ist für die genannten Ebenen dann erfüllt, wenn $\varphi = 1,00^\circ$, $2,00^\circ$, $40,75^\circ$ und $43,58^\circ$ eingesetzt wird.

Weicht der Winkel φ von diesen Werten ab, so steht die Flugrichtung unter einem Winkel α zu der Normalen der channeling-Wand. Der cosinus dieses Winkels α ergibt sich aus der Projektion des Einheitsvektors für die Flugrichtung auf den Einheitsvektor des Normalenvektors der channeling-Ebene.

$$\cos \alpha = n_x \cos \varphi \sin \vartheta + n_y \sin \varphi \sin \vartheta + n_z \cos \vartheta$$

oder

$$\alpha = \arccos(n_x \cos \varphi \sin \vartheta + n_y \sin \varphi \sin \vartheta + n_z \cos \vartheta). \quad (8)$$

Ändert sich der Winkel φ um $\delta\varphi$, so ergibt das für α eine Änderung $\delta\alpha$, die sich nach folgender Beziehung berechnet:

$$\delta\alpha = \left| \frac{d\alpha}{d\varphi} \right| \delta\varphi = \frac{-\sin \vartheta (-n_x \sin \varphi + n_y \cos \varphi)}{1 - [\sin \vartheta (n_x \cos \varphi + n_y \sin \varphi) + n_z \cos \vartheta]^2}. \quad (9)$$

Sobald $|d\alpha/d\varphi|$ kleiner als eins ist, ergibt eine Änderung des Winkels φ eine kleinere Änderung des Winkels α . Da aber für den Abbruch des channelings bei den genannten Ebenen der Winkel α entscheidend ist, kann für einen Bereich $\Delta\varphi$, der wesentlich größer als der kritische Winkel der betreffenden channeling-Ebene ist, der channeling-Effekt sich bemerkbar machen. Dieser Zusammenhang liefert also die Erklärung für die auffallend breiten Minima der Reflexionsraten bei den genannten Winkeln. So ist z. B. für den oben erwähnten Winkel $\varphi = 40,75^\circ$, $|d\alpha/d\varphi| = 0,42$, d. h., daß der Einfluß des channelings sich auf die Reflexionsraten über einen Winkelbereich auswirkt, der mehr als doppelt so breit ist, wie im Falle des senkrechten Durchtritts der Ebenen aus der Oberfläche.

Die bisher erwähnten Ebenen sind sicher nicht die einzigen, für die der channeling-Effekt sich auf die Reflexionsrate auswirkt. Denn bedingt durch die Geometrie des Kristalls treten gerade dort, wo niedrig indizierte Kristallrichtungen in der Oberfläche liegen, auch niedrig indizierte Kristallebenen aus der Oberfläche aus. Aus diesem Grund treten Schwankungen der Reflexionsraten auch gerade verstärkt dort auf, wo die Einschußrichtungen nahe niedrig indizierter Kristallrichtungen liegen. Denn für diese Einschußrichtungen treten bei sich änderndem Winkel φ die Ionen nacheinander immer wieder in Richtung niedrig indizierter Kristallebenen in die Schicht ein. Zur Einsparung der Rechenzeit konnten jedoch

nicht die intensiven Untersuchungen durchgeführt werden, die erforderlich gewesen wären, um alle diese Einflüsse zutage zu fördern.

Wird die Einfallsebene der Teilchen aus einer channeling-Richtung hinausgedreht, so steigen die Reflexionsraten beträchtlich und mitunter erheblich über Werte, die für Zufallsrichtungen errechnet werden. In gleichem Maße werden bei der Stoßparameterverteilung stärker als für Zufallsrichtungen kleine Werte bevorzugt. Bei eingehender Verfolgung der Teilchenschicksale ist für die betreffenden Richtungen festzustellen, daß die Teilchen beim Eindringen in die Schicht wenige Pendelbewegungen mit zunehmender Amplitude zwischen den Atomebenen ausführen, die nahe der Einfallsebene liegen. Schließlich stoßen sie ganz dicht zu den Atomzentren vor und erfahren dadurch schon nach kurzer Wegstrecke durch die Schicht beträchtliche Richtungsablenkungen, die zu der starken Zunahme der Reflexionsraten führen.

Hier ist ein Vergleich mit Kristallmodellen angebracht, die die Potentialverteilung von Atomebenen planar voraussetzen¹¹. Wird die Bewegung mit einem dieser Modelle beschrieben, so ist die Verfolgung des Teilchenweges nach dem Übergang vom channeling zum dechanneling nicht mehr möglich. Bei den hier durchgeführten Rechnungen mit einem diskreten Gittermodell können die Teilchenwege in allen Fällen weiter verfolgt werden.

3.1.2. Reflexionsraten für Einfallswinkel von 3° zur Oberfläche

Die erwähnten Zusammenhänge können zu einem sehr überraschenden Ergebnis führen, wenn der Einschubwinkel zur Oberfläche auf 3° erhöht wird. Hier werden für manche Einfallsebenen trotz stärkerer

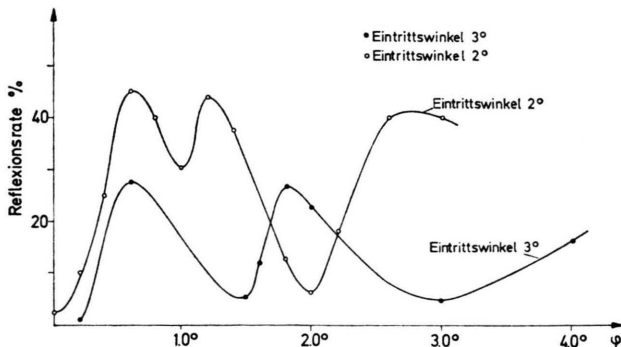


Abb. 5. Reflexionsraten für Einfallswinkel von 2° und 3° zur (001)-Oberfläche.

Neigung des Strahls zur Oberfläche größere Reflexionsraten berechnet. Eine Übersicht über diese Rechnungen mit einem Vergleich mit den entsprechenden für eine Strahlneigung von 2° durchgeführten Rechnungen zeigt die Abbildung 5. Wenn die Reflexionsraten auch für nahezu alle Einschubrichtungen sinken, so ist doch bei einem Azimutalwinkel φ nahe 2° eine Zunahme der Reflexionsrate zu beobachten. Ursache des merkwürdigen Ergebnisses sind die (01 $\bar{1}$)-Ebenen des Kristalls. Die Flugrichtung eines eintretenden Teilchens liegt in Richtung einer (01 $\bar{1}$)-Ebene, wenn die Bedingung

$$(\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, \cos \vartheta) \cdot (0, 1, -1) = 0 \quad (10)$$

erfüllt ist oder die damit gleichwertige Beziehung

$$\sin \varphi = \cot \vartheta \quad (11)$$

gilt. Bei einer Strahlneigung von 2° zur Oberfläche wird diese Bedingung für $\varphi = 2^\circ$ erfüllt, während sie bei einer Strahlneigung von 3° für $\varphi = 3^\circ$ gilt. Die Minima und entsprechend auch die immer daneben liegenden Maxima der Reflexionsraten wandern bei Zunahme der Strahlneigung nach rechts. Hieraus folgt, daß die Maxima der einen Kurve auf die Minima der anderen fallen können und das erwähnte merkwürdige Verhalten der Reflexionsraten verursachen.

3.1.3. Eindringtiefen in Abhängigkeit des Winkels

Das channeling an den verschiedenen Kristallebenen beeinflusst nicht nur die Reflexionsraten, sondern wirkt sich auch sehr stark auf die Eindringtiefen der reflektierten Teilchen aus.

In Abb. 6a sind die Verteilungen der Eindringtiefen für Einschubrichtungen mit $\varphi = 0,2^\circ$, $0,8^\circ$ und $2,0^\circ$ wiedergegeben. Es ist daraus zu erkennen, daß sowohl für die Einschubrichtung mit $\varphi = 0,8^\circ$, für die eine hohe Reflexionsrate errechnet wird, als auch für eine Einschubrichtung mit $\varphi = 2,0^\circ$, für die sich eine sehr niedrige Reflexionsrate ergibt, die Eindringtiefen im Vergleich zur Einschubrichtung mit $\varphi = 0,2^\circ$ in niedrigeren Tiefen liegen.

Scheint dieses Verhalten für die Verteilung mit $\varphi = 0,8^\circ$ noch sehr einsichtig, so ist es für $\varphi = 2,0^\circ$ zunächst sehr überraschend, nimmt man doch an, daß bei niedrigeren Reflexionsraten große Eindringtiefen der reflektierten Teilchen wahrscheinlich sein sollten. Beachtet man jedoch die Tatsache, daß es sich hier um eine channeling-Richtung handelt, für

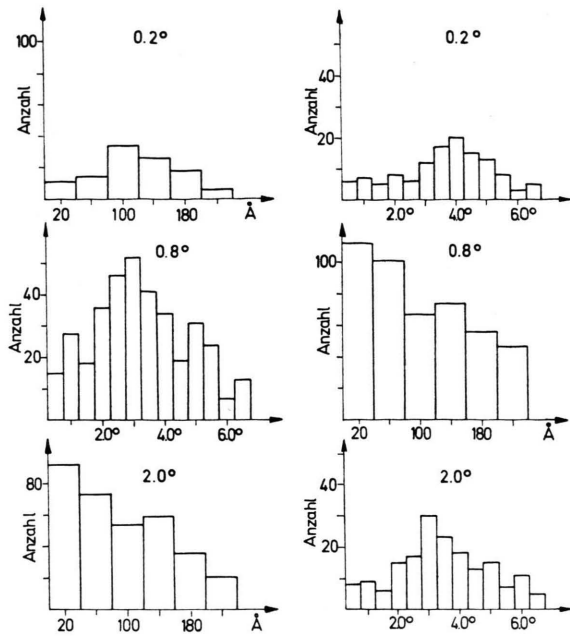


Abb. 6. a) Verteilung der Eindringtiefen, b) Verteilung der projizierten Reflexionswinkel, jeweils als Funktion der Einschußrichtung für eine (001)-Oberfläche und Einschußwinkel 2° .

die die channeling-Ebenen unter einem Winkel von 45° aus der Kristalloberfläche austreten, so erklärt sich der Zusammenhang. Denn durch das channeling an diesen Ebenen werden die Teilchen noch auf längeren Wegstrecken durch die Schicht in der Nähe der Oberfläche gehalten, so daß sie bei der Reflexion infolge dechannelings selbst nach längerer Wegstrecke noch immer aus relativ niedrigen Tiefen die Schicht nach oben verlassen.

3.1.4. Projizierte Reflexionswinkel in Abhängigkeit des Winkels φ

Unter projiziertem Reflexionswinkel soll der in die Einfallsebene projizierte Austrittswinkel der Teilchen verstanden werden. In Abb. 6b sind die Verteilungen von projizierten Austrittswinkeln für die Einschußrichtungen mit $\varphi = 0,2^\circ$, $0,8^\circ$ und $2,0^\circ$ wiedergegeben. Wie aus den entsprechenden Verteilungen für die Eindringtiefen vermutet werden kann, nehmen die Austrittswinkel für zunehmende Eindringtiefen auch zu. So haben die Teilchen bei einer Eintrittsrichtung mit $\varphi = 0,2^\circ$ ihr Maximum in der Verteilung der projizierten Austrittswinkel bei 4° , für die Eintrittsrichtung mit $\varphi = 0,8^\circ$ und 2° liegt das Maximum bei 3° . Allen Winkeln gemein-

sam ist, daß das Maximum bei einem größeren Winkel als dem Eintrittswinkel von 2° liegt.

3.1.5. Berechnung der Reflexionsraten für Schichtdicken von 1000 Å

Für die Winkel $\varphi = 0,2^\circ$, $0,6^\circ$ und 2° wurden die Reflexionsraten für 1000 Å dicke Schichten bestimmt. Die hierbei errechneten Reflexionsraten sind neben denen, die an 500 Å dicken Schichten errechnet wurden, in Tab. 1 eingetragen. In allen Fällen kann eine Zunahme der Reflexionsrate beobachtet werden. Diese Tatsache ist darauf zurückzuführen, daß Teilchen auch noch aus Schichttiefen von mehr als 500 Å reflektiert werden können.

Tab. 1. Reflexionsraten als Funktion der Einschußrichtung.

	500 Å	1000 Å
$0,2^\circ$	$10\% \pm 2\%$	$12\% \pm 2\%$
$0,6^\circ$	$45\% \pm 8\%$	$52\% \pm 8\%$
$2,0^\circ$	$6\% \pm 2\%$	$8\% \pm 2\%$

3.2. Reflexionsraten für Einfallswinkel von 2° zur (111̄)-Oberfläche

Eingehende Reflexionsuntersuchungen wurden auch an einer (111̄)-Oberfläche durchgeführt. Die Schichtdicke war hierbei ebenfalls 250 Atomlagen (504 Å).

Abbildung 7 zeigt, wie in einem gegebenen Koordinatensystem die repräsentative Teilfläche zu dieser Oberfläche gewählt wird. Die Ionen werden in dem in Abb. 7 unterbrochen gezeichneten Sechseck gleichverteilt eingeschossen. Dieses Sechseck liegt in der Entfernung der maximalen Reichweite des Potentials über der (111̄)-Ebene.

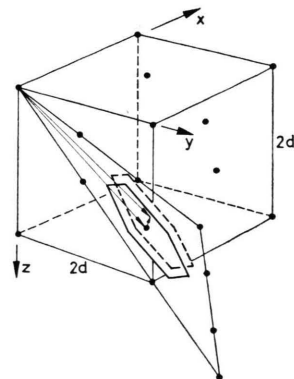


Abb. 7. Die Position der repräsentativen (111̄)-Oberfläche im benutzten Koordinatensystem.

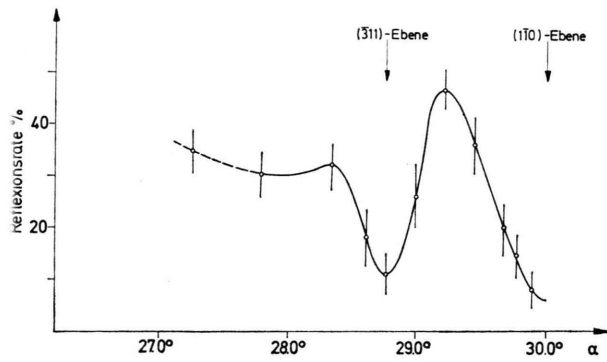


Abb. 8 a

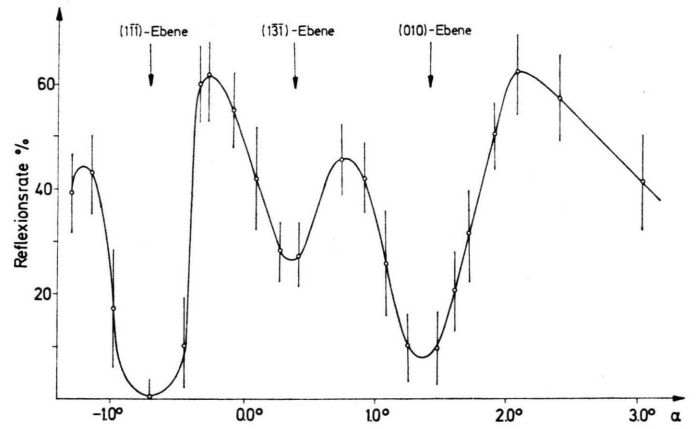


Abb. 8 d

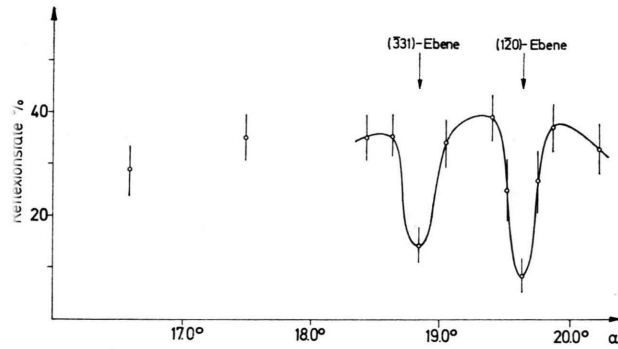


Abb. 8 b

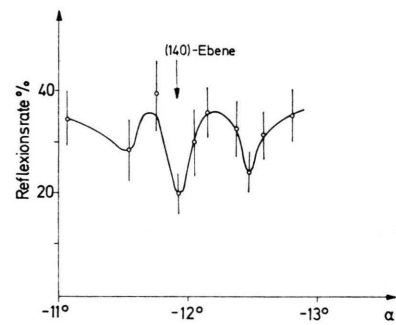


Abb. 8 e

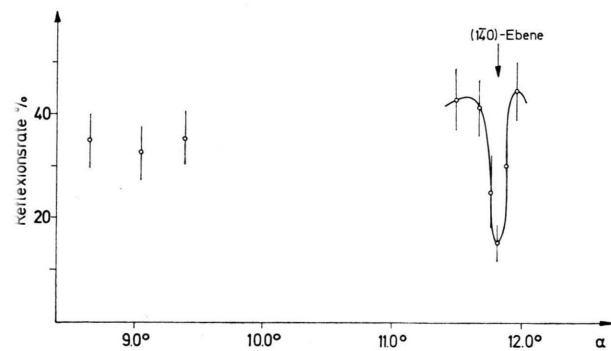


Abb. 8 c

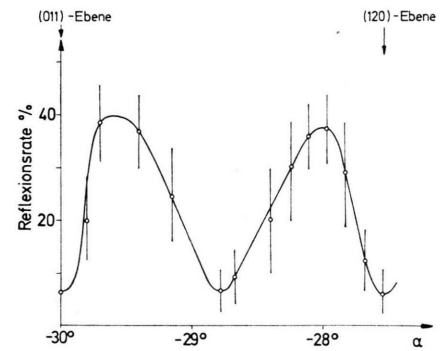


Abb. 8 f

Abb. 8. Reflexionsraten von 60 MeV Jodionen bei einem Einschufwinkel von 2° zur (111)-Oberflähe eines Goldeinkristalls als Funktion des Winkels zwischen Einfallsebene und $\langle 101 \rangle$ -Achse.

Die (11 $\bar{1}$)-Ebene wird für die Rechnung zur Oberfläche, indem ein Schnitt längs dieser Ebene durch den Kristall gelegt wird und alle oberhalb dieses Schnittes liegenden Atome in der Rechnung vernachlässigt werden.

Wie für die (001)-Oberfläche wird auch hier das Reflexionsvermögen über einen Winkelbereich, der Symmetrieelement des gesamten Winkelbereichs ist, untersucht. Wird mit φ der Azimutalwinkel der Flugrichtung im Koordinatensystem der Abb. 7 bezeichnet, so muß der Winkel φ in einem Bereich zwischen $-28,28^\circ$ und 45° variiert werden. Bezogen auf eine Achse in der (11 $\bar{1}$)-Oberfläche überstreicht die Einfallsebene dabei einen Winkelbereich von 60° . Wird mit α der Winkel zwischen der Einfallsebene und der $\langle 101 \rangle$ -Achse bezeichnet, so muß α zwischen -30° und $+30^\circ$ variiert werden.

In Abb. 8 ist das Reflexionsvermögen der (11 $\bar{1}$)-Oberfläche in Abhängigkeit des Winkels α für alle gerechneten Einschubrichtungen wiedergegeben. Dabei repräsentiert wieder jeder eingetragene Punkt den Mittelwert aus jeweils mindestens fünf Rechenläufen und die Länge der Fehlerbalken die mittlere Abweichung zwischen den einzelnen Reflexionsraten. Der Einfluß der Kristallebenen auf die Reflexionsraten ist aus Abb. 9 a–9 c zu entnehmen. Hier sind für einen Winkel α von $1,58^\circ$ (a), $1,74^\circ$ (b) und $1,91^\circ$ (c) die Teilquadrate der repräsentativen Oberfläche schraffiert worden, in denen Eintrittskordinaten liegen, die zu Reflexionen führen. Für die genannten Winkel stehen die Flugrichtungen unter

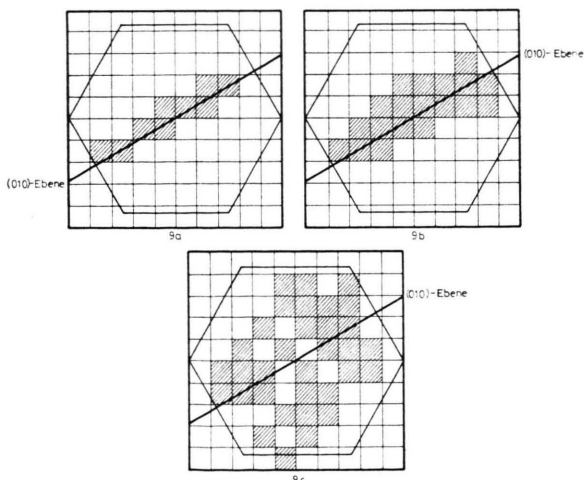


Abb. 9. Repräsentative Oberflächenabschnitte einer (11 $\bar{1}$)-Oberfläche. In den schraffierten Quadraten liegen Eintrittskordinaten von Teilchen, die reflektiert wurden.

einem Winkel von $0,135^\circ$, $0,265^\circ$ und $0,404^\circ$ zur (010)-Ebene. Die Schnittlinie der (010)-Ebene mit dem Oberflächenabschnitt ist ebenfalls eingezeichnet worden. Man sieht, wie von dieser Schnittlinie ausgehend bei zunehmendem Winkel zwischen (010)-Ebene und Eintrittsrichtung sich die Fläche ausbreitet, in der Eintrittskordinaten liegen, die zu Reflexionen führen.

3.3. Der Einfluß des Austrittswinkels der channeling-Ebenen aus den Kristalloberflächen auf die Reflexionsraten

Die Tatsache, daß sowohl durch die (001)-Oberfläche als auch durch die (11 $\bar{1}$)-Oberfläche eine Reihe von channeling-Ebenen treten, die kristallographisch gesehen identische Ebenen darstellen, ermöglicht einige interessante Vergleiche.

So tritt etwa eine (010)-Ebene durch die (001)-Oberfläche unter einem Winkel von 90° , während sie die (11 $\bar{1}$)-Oberfläche unter einem flacheren Winkel von $54,74^\circ$ durchsetzt. Die (120)-Ebene durchsetzt die (001)-Oberfläche ebenfalls unter einem Winkel von 90° , wohingegen die (120)-Ebene die (11 $\bar{1}$)-Oberfläche unter einem Winkel von $39,23^\circ$ schneidet. Geringere Unterschiede treten zwischen dem Durchstoßwinkel der (1 $\bar{4}$ 0)-Ebene (90°) durch die (001)-Oberfläche und dem Durchstoßwinkel der (1 $\bar{4}$ 0)-Ebene durch die (11 $\bar{1}$)-Oberfläche auf ($45,56^\circ$). Die Miller-Indizes beziehen sich hierbei auf das Koordinatensystem der Abbildung 7.

Abbildung 10 zeigt die unterschiedlichen Auswirkungen der betreffenden channeling-Ebenen auf das Reflexionsverhalten. In dieser Abbildung wurden Teile der Abb. 3 und Abb. 8 so übereinandergeschoben, daß Winkel auf der Winkelachse übereinanderliegen, für die die betreffenden Flugrichtungen parallel zu identischen Kristallebenen stehen.

Abbildung 10 zeigt deutlich, daß bei flacherem Durchstoßwinkel der channeling-Ebenen die Einbuchtungen in den Kurven der Reflexionsraten breiter und flacher werden. Die Verbreiterung kommt, wie bereits in Absatz 3.1. erläutert, dadurch zustande, daß bei flacherem Austritt der channeling-Ebenen aus der Kristalloberfläche sich der Winkel zwischen Teilchenstrahl und channeling-Ebene langsamer ändert als der Winkel, unter dem die Einfallsebene in der Oberfläche gedreht wird. Die Abflachung der *dips*, d. h. die Zunahme der Reflexionsraten für exakte channeling-Richtungen treten dadurch auf, daß bei flach aus den Oberflächen aus-

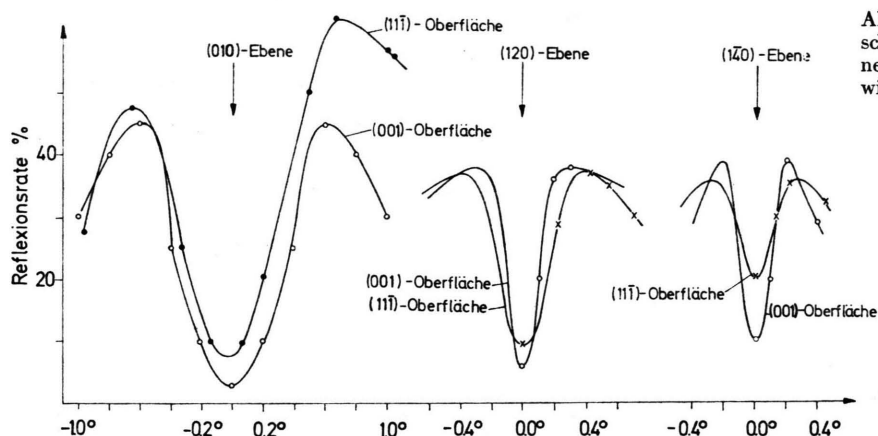


Abb. 10. Reflexionsraten für Einschlußwinkel nahe channeling-Ebenen bei unterschiedlichem Schnittwinkel der channeling-Ebenen mit der Kristalloberfläche.

tretenden channeling-Ebenen die Teilchen durch den channeling-Effekt sich nur langsam von den Oberflächen entfernen. Teilchen, deren Bewegungsform von channeling in dechanneling übergeht, haben selbst nach längerer Wegstrecke durch die Schicht sich nur wenig von der Oberfläche entfernt und besitzen daher immer noch die Chance, die Schicht durch die Oberfläche zu verlassen.

3.4. Reflexionsraten für eine Zufallsrichtung und Vergleich dieser Ergebnisse mit Rechnungen an polykristallinen Schichten

Liegt die Richtung, unter der die Ionen in die einkristalline Schicht eindringen, nicht nahe irgendeiner niedrig indizierten Kristallebene, so spricht man von einer Zufallsrichtung. Für eine solche Richtung treten die Stöße der Ionen mit den Schichtatomen im Gegensatz zu channeling-Richtungen mit sehr unterschiedlichen Stoßparametern auf, d. h., daß aufeinanderfolgende Stoßparameter nicht in irgendeiner Beziehung zueinander stehen. In diesen Fällen sind, wie die Rechnungen zeigen, auf die Reflexionsraten nur die Stöße von Einfluß, die zu großen Winkelablenkungen der Teilchen führen. Die Rechnungen zeigen, daß durch die Vernachlässigung all derjenigen Winkelablenkungen, die durch Stöße mit Stoßparametern größer als $0,1 \text{ \AA}$ auftreten, die Reflexionsraten nicht beeinflußt werden. Dies ist gleichbedeutend mit der Vernachlässigung der Winkelablenkungen, die mit einem Winkel kleiner als $0,291^\circ$ auftreten.

Umgekehrt läßt sich aufgrund der erwähnten Tatsache, daß für Zufallsrichtungen die Stoßparameter oberhalb von $0,1 \text{ \AA}$ keinen Einfluß mehr auf die

Reflexionsraten ausüben, eine channeling-Richtung dadurch erkennen, daß die Reflexionsrate durch Änderung des Grenzstoßparameters geändert wird.

Für die Zufallsrichtungen lassen sich die hier mit einem Kristallmodell ausgeführten Rechnungen mit Monte-Carlo-Rechnungen vergleichen, die polykristallines Targetmaterial voraussetzen². In diesen Rechnungen ist der Durchgang von 69 MeV-Spaltteilchen mit mittlerer Masse und Kernladung durch polykristalline Goldschichten simuliert worden. Dabei ergeben die Rechnungen bei einem Einfallswinkel der Ionen von 2° zur Oberfläche eine Reflexionsrate von 30%, ein Ergebnis, das in guter Übereinstimmung mit den Reflexionsraten steht, die mit dem vorliegenden Modell für Zufallsrichtungen errechnet wurden.

4. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein Computerprogramm eingesetzt, um Reflexionsraten von Jodionen nach streifendem Einfall auf (111)- und (001)-Goldoberflächen zu berechnen. Das Computerprogramm, das den Durchgang hochenergetischer schwerer Ionen durch Metalleinkristalle simuliert, wurde in einer früheren Arbeit⁸ bereits beschrieben und an vorliegenden Experimenten getestet.

Die hier durchgeführten Rechnungen zeigen, daß eine starke Abhängigkeit der Reflexionsraten von den Einschlußrichtungen besteht. Es kann gezeigt werden, daß diese starke Abhängigkeit durch das channeling der Ionen zwischen Kristallebenen der Goldschicht auftritt. Für die Winkelbreite, über die sich der channeling-Effekt bemerkbar macht, ist einmal die Atomdichte in den Kristallebenen von Bedeutung und zum anderen die Winkel, unter denen

diese Ebenen aus der Kristalloberfläche austreten, von Wichtigkeit.

Weiterhin ist das Programm in der Lage, die Verteilung der in die Einfallsebene projizierten Reflexionswinkel und der Eindringtiefen der reflektierten Teilchen zu ermitteln. Es zeigt sich, daß auch die Winkelverteilung und die Eindringtiefen stark von den Einschußrichtungen abhängen.

Die mit dem Gittermodell für Zufallsrichtungen berechneten Reflexionsraten ergeben gute Überein-

stimmung mit Monte-Carlo-Rechnungen, in denen Reflexionsraten für Ionen bei streifendem Einfall auf polykristalline Metallschichten berechnet werden.

Herrn Prof. Dr. H. Ewald danken wir für die Anregung zu dieser Arbeit und sein Interesse bei der Durchführung. Außerdem sind wir der Deutschen Forschungsgemeinschaft zu Dank verpflichtet, daß sie uns auf ihrer Rechenanlage in Gießen ausreichend Rechenzeit für die sehr umfangreichen Rechnungen zur Verfügung gestellt hat.

¹ D. Engelkemeir, Phys. Rev. **146**, 304 [1966].

² K. Güttner, Z. Naturforsch. **26 a**, 1290 [1971].

³ J. Albrecht u. H. Ewald, Z. Naturforsch. **26 a**, 1296 [1971].

⁴ B. W. Farmery, A. D. Marwick u. M. W. Thompson, Atomic Coll. Phen. in Sol., Proc. Int. Conf., Sussex, England, North-Holland, Amsterdam 1970.

⁵ M. T. Robinson u. O. S. Oen, Phys. Rev. **132**, 2385 [1963].

⁶ J. H. Barrett, Phys. Rev. **3**, B 1527 [1972].

⁷ D. K. Hutchence u. S. Hontzeas, Nucl. Instr. and Meth. **116**, 217 [1974].

⁸ H. Schmidt u. H. Ewald, Z. Naturforsch. **29 a**, 1442 [1974].

⁹ G. Molière, Z. Naturforsch. **2 a**, 133 [1947].

¹⁰ O. B. Firsov, Soviet Phys.-JETP **5**, 1192 [1957]; **6**, 534 [1958]; **7**, 308 [1958].

¹¹ M. T. Robinson, Phys. Rev. **179**, 327 [1969].