KfK 2638 Mai 1978

Monte-Carlo-Rechnungen zur Simulation von Channelling-Experimenten an V₃Si-Einkristallen

R. Kaufmann Institut für Angewandte Kernphysik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE GMBH

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Angewandte Kernphysik

KfK 2638

Monte-Carlo-Rechnungen zur Simulation von Channelling-Experimenten an $V_3 \mbox{Si-Einkristallen}^{\ast}$

Rainer Kaufmann

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

^{*} Von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe genehmigte Diplomarbeit

•

ZUSAMMENFASSUNG

Die Ergebnisse von Channelling-Untersuchungen an Einkristallen des Al5-Strukturtyps, wie z.B. an V₃Si lassen sich nur in unzureichender Weise mit analytischen Modellrechnungen vergleichen. Deshalb wurde in dieser Arbeit der Channelling-Prozess in einem Monte-Carlo-Programm unter Verwendung des Binären-Stoß-Modells simuliert.

Das Binäre-Stoß-Modell beinhaltet die Verfolgung der Trajektorien geladener Teilchen durch Berechnung der gleichzeitigen Stöße eines Ions mit allen Targetatomen der unmittelbaren Umgebung in Impulsnäherung. Als Atom-Ion-Wechselwirkungspotential wurde die Molière-Näherung des Thomas-Fermi-Potentials verwendet. Gleichzeitig wurde die Ablenkung der Ionen durch freie Stöße mit Elektronen berücksichtigt. Die thermischen Schwingungen der Targetatome wurden durch normalverteilte Auslenkungen simuliert, wobei die anisotrope Schwingungsform der V-Atome durch ein Rotationsellipsoid beschrieben wurde. Der elektronische Energieverlust wurde aus Stößen mit gebundenen Elektronen, mit freien Elektronen und aus der Anregung von Plasmonen berechnet. Die Rückstreuwahrscheinlichkeit wurde bei jedem Stoß eines Ions mit einem Targetatom als Produkt aus Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Targetatoms und Rutherfordwirkungsquerschnitt berechnet. Der Einfluß amorpher Oberflächenschichten auf den Channelling-Prozess wurde durch Aufweiten des einfallenden Teilchenstrahls simuliert.

Die berechneten Werte für die minimale Ausbeute, χ_{\min} , und den kritischen Winkel, $\psi_{1/2}$, waren in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Experimenten mit 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen. Die Gitterstörungen nach Bestrahlung mit einer Fluenz von 6 \cdot 10¹⁶-⁴He⁺/cm² der Energie 300 keV ließen sich im Durchschußbereich durch normalverteilte statische Verlagerungen der V-Atome von im Mittel 0.05 Å erklären. Die laterale Defektstruktur nach Bestrahlung mit einer Fluenz von 1.5 \cdot 10¹⁶-⁴He⁺/cm² der Energie 50 keV ließ sich am Ende der Reichweite durch ein Rechteckprofil mit 50 % Verlagerungen der V-Atome von maximal 0.5 Å simulieren.

Monte-Carlo-Calculations for the Simulation of Channelling-Experiments with V₃Si-Single-Crystals

Abstract

The results of channelling-investigations on single-crystals of Al5-type structure, like e.g. V_3 Si, are not directly comparable to analytical model-calculations. Therefore the channelling-process was simulated in a Monte-Carlo-program on the basis of the binary-collision-model.

The trajectories of charged particles are evaluated by calculating the simultaneous collisions of an ion with all directly surrounding target-atoms in momentum-approximation. The Molière-approximation of the Thomas-Fermi-potential was used for describing the ion-atom-interaction. Deflections of the ions by free collisions with electrons were also included. Thermal vibrations of the target-atoms were simulated by normally distributed displacements; the anisotropic vibrations of the V-atoms were described by a rotational ellipsoid. The electronic energyloss due to collisions with bound electrons, with free electrons and due to plasma excitations was calculated. The backscattering probability was calculated from the product of the position probability density of the target-atoms and the Rutherford cross section. The influence of amorphous surface layers was simulated by additional spread of the incident particle beam.

The calculated values for the minimum yield, χ_{\min} , and the critical angle, $\psi_{1/2}$, were in good agreement with the results of experiments with 2 MeV-⁴He⁺-particles. The lattice damage in the range of 2000 Å at the surface after an irradiation with a fluence of 6 $\cdot 10^{16}$ -⁴He⁺/cm² at 300 KeV could be explained by normally distributed static displacements of the V-atoms with a mean value of 0.05 Å. The transverse damage structure after an irradiation with a fluence of 1.5 $\cdot 10^{16}$ -⁴He⁺/cm² at 50 KeV could be simulated by a step profile of 50 % displacements of the V-atoms with a maximum value of 0.5 Å at the depth of the projected range.

INHALTSVERZEICHNIS

1.	Einleitung
2.	Beschreibung der experimentellen Verfahrensweise2
	2.1 Die Channelling-Meßmethode2
	2.1.1 Allgemeine Beschreibung des Channelling-Effekts2
	2.1.2 Anwendung des Channelling-Effekts bei Rückstreuexperimenten. 5
	2.1.3 Anwendung des Channelling-Effekts bei Kernreaktionen 10
	2.2 Meßapparatur
3.	Theoretische Modelle zur Beschreibung des Channelling- Effekts
	3.1 Das Kontinuumsmodell
	3.1.1 Allgemeine Grundlagen
	3.1.2 Beschränkungen des Modells im Vergleich mit dem Experiment. 18
	3.2 Das Binäre-Stoß-Model1
	3.2.1 Allgemeine Grundlagen18
	3.2.2 Verwirklichung durch die Monte-Carlo-Methode
	3.2.3 Berechnung der Trajektorien eingeschossener Teilchen in V ₂ Si.21
	3.2.3.1 Beschreibung der Funktion der Streueinheit21
	3.2.3.2 Berechnung des Ablenkwinkels bei einem binären Stoß 24
	3.2.3.3 Berechnung des Energieverlusts
	3.2.3.4 Thermische Schwingungen der Atome
	3.2.4 Berechnung der Rückstreuausbeute
	3.2.4.1 Theoretischer Ansatz
	3.2.4.2 Durchführung in der Rechnung
4.	Vergleich der Modellrechnungen für den realen Kristall mit
	DEM EXPERIMENT 36
	4.1 Test des Programms für Vanadium- und Molybdän-Einkristalle
	4.2 Diskussion der Ergebnisse für V ₃ Si
	4.2.1 Untersuchung der Fluß- und Energieverteilungen
	4.2.2 Vergleich der tiefenabhängigen Parameter χ_{min} und $\psi_{1/2}$ für das V-Untergitter41
	4.2.3 Vergleich der Parameter χ_{min} und $\psi_{1/2}$ für das Si-Untergitter.49
	4.2.4 Untersuchung des Schwingungsverhaltens der V-Atome

 5.1 Untersuchung der Schädigung mit 300 keV-⁴He⁺-Teilchen im Durch- schußbereich	5.	ergleich der Modellrechnungen für den geschädigten	57
 5.1 Untersuchung der Schädigung mit 300 keV-⁴He⁺-Teilchen im Durch- schußbereich		RISTALL MIT DEM LAFERIMENT	54
5.2 Untersuchung der Schädigung mit 50 keV- ⁴ He ⁺ -Teilchen		.l Untersuchung der Schädigung mit 300 keV- ⁴ He ⁺ -Teilchen im Durch- schußbereich	54
 5.2.1 Einbau eines Schädigungstiefenprofils		.2 Untersuchung der Schädigung mit 50 keV- ⁴ He ⁺ -Teilchen	56
5.2.2 Vergleich zwischen Theorie und Experiment für verschiedene laterale Defektverteilungen5		5.2.1 Einbau eines Schädigungstiefenprofils	56
laterale Defektverteilungen		5.2.2 Vergleich zwischen Theorie und Experiment für verschiedene	
		laterale Defektverteilungen	57

6. ZUSAMMENFASSUNG UND ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN...... 61

ANHÄNGE

A	Berechnung des statistischen Fehlers der Rückstreuausbeute	63
В	Umrechnung der Eingabewinkel ϕ und θ in die Koordinaten des Kristall-koordinatensystems	66
С	Berechnung des Rückstreuwinkels zwischen momentaner Teilchenbahn- richtung und Detektor	68
D	Erläuterungen zu dem Programm CA15	70
	D.1 Ablaufschema	70
	D.2 Beschreibung der Ein- und Ausgabedaten von CA15	72
	D.3 Programm-Listing	82

Literatur	

1. EINLEITUNG

Bestrahlt man einen einkristallinen Festkörper mit geladenen Teilchen, so beobachtet man eine Beeinflussung der Bahnen dieser Teilchen durch die besondere Anordnung der Atome in niedrigindizierten Kristallrichtungen. Die einfallenden Ionen oder Elektronen werden entlang von Atomketten bzw. Atomebenen geführt. Dieses Phänomen ist allgemein als Channelling-Effekt bekannt. Es stellt sich so eine, gegenüber der Bewegung im amorphen Festkörper, geänderte Verteilung des Orts und der Energie der Teilchen ein, die zu einer Änderung der Ausbeute von stoßparameter- und energieabhängigen Prozessen, wie Rutherford-Rückstreuung, Kernreaktionen, Röntgenemission u.ä. führen /1/.

Die Bahnen der geführten Teilchen werden durch Abweichungen vom idealen Aufbau des Kristalls sehr stark beeinflußt. Deshalb kann dieser Effekt z.B. zur Gitterplatzbestimmung von Fremdatomen, zum Studium von Oberflächenschichten, zur Bestimmung der Größe der thermischen Schwingungsamplituden, aber auch zur Untersuchung von Defektstrukturen benützt werden.

Im Falle von V_3 Si ist insbesondere die Untersuchung von Defektstrukturen von großem Interesse, da diese Verbindung einen Vertreter der für die Anwendung interessanten Klasse der Hochtemperatursupraleiter mit Al5-Struktur darstellt, in denen die bisher höchsten Übergangstemperaturen zur Supraleitung, T_c, gemessen wurden (z.B. Nb₃Ge mit 23.2 K /2/), wobei in diesen Verbindungen die Übergangstemperaturen mit Defektstrukturen eng verknüpft sind.

Es zeigt sich nämlich, daß durch Bestrahlung mit Neutronen /3/, leichten Ionen /4/ und schweren Ionen /5/,6/ die Übergangstemperatur T_c drastisch abgesenkt werden kann. Derartige Effekte sind besonders im Hinblick auf die Verwendung supraleitender Spulen in künftigen Fusionsreaktoren von Bedeutung. Obwohl inzwischen selbst Details der Supraleitung in A15-Verbindungen, auch ternärer Art, erklärt werden können /7/, herrscht über die Struktur der Defekte und damit über die Ursachen derart drastischer Absenkungen der Übergangstemperatur trotz verschiedener Modellbetrachtungen bis jetzt noch Unklarheit.

Vorausgegangene Channelling-Untersuchungen an V₃Si haben gezeigt, daß dieser Strukturtyp für solche Art Experimente aufgrund der hohen Symmetrie der Kristallrichtungen [100] und [110] sehr gut geeignet ist. Es stellte sich jedoch heraus, daß zur Interpretation der experimentellen Ergebnisse , wie z.B. zum Vergleich der für den Channelling-Effekt spezifischen Größen χ_{\min} und $\psi_{1/2}$ mit theoretischen Ansätzen, das Kontinuumsmodell nicht mehr ausreicht /8¼/9/. Aus diesem Grunde erwies es sich als notwendig, zur Untersuchung von Defektstrukturen an bestrahlten Einkristallen Simulationsrechnungen vorzunehmen. Ziel dieser Arbeit ist es daher, durch Anwendung des Binären-Stoß-Modells und dessen Verwirklichung in einem Monte-Carlo-Programm, das Channelling-Phänomen für V_3 Si näher zu untersuchen. Zudem sollten Messungen, die von O. Meyer /8/ durchgeführt wurden, mit theoretischen Resultaten verglichen und die Gültigkeit einfacher Punktdefekt-Modelle in geschädigten Kristallen überprüft werden.

2. Beschreibung der experimentellen Verfahrensweise

2.1 Die Channelling-Meßmethode

2.1.1 Allgemeine Beschreibung des Channelling-Effekts

Hinweise auf den Channelling-Effekt erhielt man im Zusammenhang mit Eindringtiefemessungen und -Rechnungen an Einkristallen mit langsamen schweren Ionen /10 -12/. Es ergaben sich bei Einschuß der Ionen in den niedrigindizierten Kristallrichtungen Eindringtiefen, die größer waren als bei statistischer Orientierung der Kristalle (sogenanntem "Random"-Einschuß). Dieser Effekt wurde dadurch erklärt, daß die eingeschossenen Ionen bei Einfall in Richtung einer niedrig indizierten Kristallrichtung eine Flächenbelegung der Kristallatome sehen, die wesentlich niedriger ist als bei willkürlicher Orientierung, da die Atome in Ketten hintereinander zu sehen sind und so die meisten Ionen ungehindert durch den Kristall laufen können.

In Abb. 1 ist diese Kettenanordnung aus der Sicht eines Teilchens unter Channelling-Bedingungen zu sehen. Abb. 2 zeigt in einer zweidimensionalen Anordnung ein Teilchen, das dem Channelling-Effekt unterliegt (a), eines, das an der Oberfläche direkt rückgestreut wird (b) und eines, dessen Bahn statistisch orientiert verläuft (c).

Die Transparenz des Kristalls in bestimmten Kristallrichtungen genügt aber nicht allein, um tatsächlich auch den Channelling-Effekt zu erklären.Wesentlich ist nämlich, daß die Bahnen der Teilchen auch stabil sind und hierfür ist wiederum erforderlich, daß die Kräfte, denen ein geladenes Teilchen während seines Durchtritts durch den Kristall unterliegt, eine Art Führungsmechanismus bewirken. Da dieser Führungsmechanismus durch die Wechselwirkung der Atome mit den eingeschossenen Teilchen ausgebildet wird, müssen die Teilchen bestimmte Bedingungen erfüllen, damit nicht die Vielfach-Kleinwinkelstreuung, durch die die Teilchen gelenkt werden, in Großwinkelstreuung übergeht, nach der keine Korrelation mehr zur ursprünglichen Einfallsrichtung besteht.

Will man dieses Stabilitätskriterium quantitativ formulieren, so legt man am besten folgende Überlegung zugrunde:

- 2 -



Abb. 1 Trajektorie eines geführten Teilchens in einer Diamantstruktur in [110].



Abb. 2 Trajektorien geladener Teilchen in einem zweidimensionalen Kristall in Abhängigkeit des Einschußwinkels und des Eintrittsorts: a: geführtes Teilchen, b: direkt rückgestreutes Teilchen, c: in Random-Richtung laufendes Teilchen.

Ein Teilchen gilt als geführt, solange seine Querenergie nicht den Wert des Atom-Ion-Potentials erreicht, der dem einen Großwinkelstoß verursachenden Stoßparameter entspricht.

Wenn E die Energie der einfallenden Teilchen, ψ den Winkel zwischen der Teilchenbahn und der Richtung der führenden Atomketten darstellen, ergibt sich die Energie der transversalen Komponente der Bewegung zu:

$$\mathbf{E}_{\perp} = \mathbf{E} \, \sin^2 \, \psi \tag{2.1}$$

Es genügt dann, zu fordern, daß $E_{\perp} < E_{c}$ sein soll, wenn E_{c} den einem Großwinkelstoß entsprechenden Potentialwert darstellt, der vom Wechselwirkungspotential der Gitteratome mit den Teilchen und von der Struktur des Kristalls abhängt, sodaß als Stabilitätsbedingung für das Auftreten von Channelling sich ergibt:

$$\psi < \psi_{c} = \left(\frac{E_{c}}{E}\right)^{1/2}$$
, für kleine ψ . (2.2)

Diese Bedingung ist allerdings nur gültig, wenn das Teilchen auch in Kanalmitte eingetreten ist, sonst muß nämlich die transversale Energie nach:

$$E_{\parallel} = E \sin^{2} \psi + E_{o}(x_{o}, y_{o})$$
(2.3)

berechnet werden, wobei $E_0(x_0, y_0)$ die potentielle Energie darstellt, die das Teilchen am Eintrittsort in der Querebene, (x_0, y_0) , erhält. Daraus folgt dann:

$$\psi < \psi_{c} = \left(\frac{E_{c} - E_{o}(x_{o}, y_{o})}{E}\right)^{1/2}$$
(2.4)

Diese kurze Ableitung zeigt aber auch deutlich, daß für das Auftreten des Channelling-Effektes im wesentlichen Eigenschaften der Gitteratome und damit der Kette oder Ebene, in der sie angeordnet sind, verantwortlich sind und weniger die Transparenz der Struktur.

Zum experimentellen Nachweis des Channelling-Effekts kann jeder stoßparameterabhängige Prozess benützt werden. Gemessen wird dabei die Ausbeute einer solchen Reaktion zwischen Projektil und Kristallatom als Funktion des Winkels zwischen Strahlrichtung und der Normalen der Kristalloberfläche.

Die Daten, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet wurden, sind durch Rutherford-Rückstreuung und Kernreaktionen gewonnen worden. Die Grundlagen dieser Methoden werden im Folgenden genauer erläutert.

2.1.2 Anwendung des Channelling-Effektes bei Rückstreuexperimenten

Treffen Ionen auf die Oberfläche eines amorphen Festkörpers, bzw. eines statistisch orientierten Einkristalls, so wird ein Teil der einfallenden Teilchen unmittelbar an der Oberfläche (t = 0) mit der Energie E(t = 0) = $k_{M_2} \cdot E_o$ zurückgestreut, wobei E_o die Energie der Teilchen vor dem Stoß darstellt. k_{M_2} ist ein kinetischer Faktor, der sich aus Energie- und Impulserhaltung beim elastischen Stoß berechnen läßt zu:

$$k_{M_{2}} = \left(\frac{M_{1} \cos \theta_{L} + \sqrt{M_{2}^{2} - M_{1}^{2} \sin^{2} \theta_{L}}}{M_{1} + M_{2}}\right)^{2}$$
(2.5)

 θ_L = Streuwinkel im Laborsystem M₁ = Masse des einfallenden Ions M₂ = Masse des Targetatoms

Die übrigen Ionen dringen in den Festkörper ein und verlieren dabei durch verschiedene Wechselwirkungsprozesse mit den Targetatomen, deren Hüllenelektronen und freien Elektronen einen Teil ihrer Anfangsenergie, sodaß die Energie eines in einer Tiefe t zurückgestreuten Teilchens sich nach dem Verlassen des Festkörpers ergibt zu:

$$E(t) = k_{M_2} \begin{bmatrix} E_0 - \int_0^{t} \frac{dE}{dx} (E) dx \end{bmatrix} - \int_0^{t} \frac{dE}{dx} (E) dx \qquad (2.6)$$

Energie vor dem Rückstreuprozess Energieverlust nach dem Rückstreuprozess beim Herauslaufen

Energie nach dem Rückstreuprozess

 $\frac{dE}{dx}$ (E) = differentieller Energieverlust als Funktion der Energie. θ_1 = Winkel zwischen Oberflächennormalen und einfallendem Strahl. θ_2 = Winkel zwischen Oberflächennormalen und gestreutem Strahl. E₀ = Energie des einfallenden Teilchens im Laborsystem.

Durch die Beziehung (2.6) ist die Energieskala mit einer Tiefenskala verknüpft.

Abb. 3 zeigt die Vorgänge bei dem eben beschriebenen Prozess, wobei die Oberfläche des Targets senkrecht zu der von einfallendem und ausfallendem Strahl aufgespannten Ebene steht.

Bei den in dieser Arbeit verwendeten Rückstreuexperimenten wurden 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen auf V₃Si-Einkristalle geschossen. Unter diesen Bedingungen kann die für den Rückstreuprozess verantwortliche Wechselwirkung aus einem nicht abge-



Abb. 3 Rückstreuanalyse in Oberflächennäherung. E_1 ist die Energie der in einer Tiefe t rückgestreuten Teilchen als Funktion des Winkels θ_1 zwischen einfallendem Strahl und Oberflächennormalen und als Funktion des Rückstreuwinkels θ_L .

$$\theta_{L} = 180^{\circ} - \theta_{1} - \theta_{2}$$

$$E = E_{\circ} - \frac{t}{\cos \theta_{1}} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_{\circ}}$$

$$E_{1} = k_{M_{2}} \cdot E - \frac{t}{\cos \theta_{2}} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{k_{M_{2}}} \cdot E_{\circ}$$

schirmten Coulombpotential berechnet werden. Man erhält dann als differentiellen Streuquerschnitt den Rutherfordwirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E \sin \theta_L}\right)^2 \cdot \frac{\left\{\cos \theta_L + \left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin \theta_L\right)^2\right]^{-1/2}\right\}^2}{\left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin \theta_L\right)^2\right]^{-1/2}} \quad (2.7)$$

- e = Elementarladung
- E = Energie am Streuort
- $\theta_{I_{i}}$ = Streuwinkel im Laborsystem
- Z₁ = Kernladungszahl des einfallenden Teilchens
- Z₂ = Kernladungszahl der Targetatome

Für den gemittelten Streuquerschnitt, σ , ergibt sich:

$$\sigma = \frac{1}{\overline{\Omega}} \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \qquad (2.8)$$

wobei $\overline{\Omega}$ den durch den Detektor aufgespannten Raumwinkel darstellt. Zieht man in Betracht, daß der Streuquerschnitt definiert ist als:

$$\frac{f}{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\text{Anzahl der in den Raumwinkel } \overline{\Omega} \text{ gestreuten Teilchen pro sec.}}{\text{Anzahl der einfallenden Teilchen pro Flächeneinheit und pro sec.}}$$

so ergibt sich in der Oberflächennäherung die Anzahl von rückgestreuten Teilchen pro Energieintervall δE₁ bei senkrechtem Einfall der Teilchen zu:

$$H = Q \cdot \sigma(E_{o}) \cdot \overline{\Omega} \cdot N \cdot \delta x \qquad (2.9)$$

Q = Anzahl der einfallenden Teilchen N = atomare Dichte des Targets δx = der Energieeichung δE_1 entsprechende Targetdicke, verknüft über Gleichung (2.6).

Wie in /13/ ausführlich gezeigt, geht (2.9) über in:

$$H = Q \cdot \sigma(E_{o}) \cdot \overline{\Omega} \cdot \delta E_{1} / [\varepsilon_{o}] \qquad (2.10)$$

$$[\varepsilon_{o}] = k_{M_{2}} \cdot \frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_{o}} + \frac{1}{|\cos \theta_{L}|} \cdot \frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{k_{M_{2}}} E_{o}$$

$$\delta E_{1} = \text{Energieeichung}$$

Bei größerer Tiefe gilt diese Näherung nicht mehr und es ergibt sich /13/:

$$H(E_{1}) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \overline{\Omega} \cdot \frac{\delta(kE)}{[\varepsilon(E)]}$$
(2.11)

$$\delta(kE) \sim \frac{\varepsilon(kE)}{\varepsilon(E_{1})} \cdot \delta E_{1} ; \quad (k \equiv k_{M_{2}})$$

$$E_{1} = \text{Energie im Detektor}$$

$$E = \text{Energie am Streuort}$$

$$\varepsilon(E_{1}) = \frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dx} (E_{1})$$

wie in Abb. 4 veranschaulicht ist. Das Energiespektrum kann also wie folgt berechnet werden:



Abb. 4 Rückstreuausbeute $H(E_1)$ als Funktion der Tiefe t für ein einatomares Target. E ist die Einschußenergie und δE_1 die Energieeichung. $H(E_1) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \overline{\Omega} \cdot \frac{\delta(kE)}{[\varepsilon(E)]}$

$$H(E_{1}) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \overline{\Omega} \cdot \frac{\delta E_{1}}{[\varepsilon(E)]} \cdot \frac{\varepsilon(kE)}{\varepsilon(E_{1})}$$
(2.12)

Die bisherigen Überlegungen haben sich darauf beschränkt, den Rückstreuprozess für elementare Targets darzustellen; beim Beschuß eines mehratomaren Targets mit Ionen erhält man die Überlagerung mehrerer Rückstreuspektren, die entsprechend dem Unterschied in den kinematischen Faktoren auf der Energieskala gegeneinander verschoben sind und deren einzelne Höhen entsprechend der Zusammensetzung der Verbindung und dem unterschiedlichen Streuquerschnitt variieren. Allerdings gilt diese Additivität nur, solange auch die Bragg'sche Regel ihre Gültigkeit behält/13/.

Die dargestellten Ausführungen haben nur für Rückstreuexperimente an amorphen Festkörpern oder einen in statistischer Orientierung auf einen Einkristall fallenden Teilchenstrahl gegolten. Sind dagegen die eingeschossenen Ionen parallel einer niedrigindizierten Kristallrichtung ausgerichtetund die Divergenz des Strahls so gering, daß die in 2.1.1 geforderten Bedingungen für die Stabilität der Bahn eines geführten Teilchens erfüllt sind, so geht die Rückstreuausbeute drastisch zurück, da nun die Gleichverteilung der Stoßparameter nicht mehr gegeben ist. Der Grund hierfür liegt in der starken Strukturierung des ursprünglich homogenen Teilchenflußprofiles mit einem ausgeprägten Maximum an der Stelle des Kanals, wo das Potential der einen Kanal umgebenden Atomketten am geringsten ist ("Flux-peaking"-Effekt) /14/.

Wird die Kanalachse gegen den einfallenden Strahl in kleinen Schritten verkippt, so wird die Anzahl der Teilchen, für die die Channelling-Bedingungen noch erfüllt sind, geringer; das wiederum bedeutet, das Fluß-Maximum wirdimmer mehr ausgeschmiert, die Ortsverteilung der Ionen nähert sich der Gleichverteilung wie bei Random-Einfall und als Folge hiervon nimmt die Rückstreurate zu, wie in Abb.5 gezeigt ist.

Man setzt in das Energiespektrum Fenster, registiert die Zahl der in die entsprechenden Energieintervalle fallenden Teilchen und trägt sie dann in Abhängigkeit des Kippwinkels gegen die Kanalachse auf. So erhält man den für Channelling-Experimente typischen Verlauf der Ausbeute als Funktion des Kippwinkels θ mit einem ausgeprägten Minimum bei $\theta = 0^{\circ}$ (Abb. 6).

Zum Vergleich verschiedener Ausbeutekurven wählt man zwei charakteristische Größen, nämlich die minimale Ausbeute χ_{\min} , bei dem Kippwinkel $\theta = 0^{\circ}$, also ausgerichtetem Kristall, und die Halbwertsbreite der Ausbeutekurve $\psi_{1/2}$. Diese beiden Parameter stellen ein Maß für den Grad der Ausbildung des Channelling-Effektes in einem Kristall dar.

Wird ein mehratomares Target untersucht, so lassen sich jeder Atomsorte getrennt χ_{\min}^{-} und $\psi_{1/2}^{-}$ Werte zuordnen. In diesem Fall stellen sie jedoch nur ein Maß für die Ausbeute des Rückstreuprozesses mit der jeweiligen Atomsorte dar, da



Abb. 5 Rückstreuspektren von 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen an einem V₃Si-Einkristall. Dargestellt sind Spektren bei willkürlicher Orientierung (Random) und bei verschiedenen Winkelnθ zwischen Teilchenstrahlrichtung und Kanalachse ([100]-Richtung). Ebenfalls eingezeichnet sind die zur Aufnahme der winkelabhängigen Ausbeutekurven verwendeten Fenster.



Abb. 6 Winkelabhängige Ausbeutekurven in zwei Kristallrichtungen. Die minimale Ausbeute, χ_{min} , bei $\theta = 0^{\circ}$ und die Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ sind jeweils eingezeichnet.

der Channelling-Effekt durch das Gesamtgitter verursacht wird. Man spricht dabei von der Untersuchung des jeweiligen Untergitters.

Bei dem in dieser Arbeit untersuchten System V_3 Si lassen sich auf diese Weise die Parameter χ_{\min} und $\psi_{1/2}$ in Rückstreuexperimenten nur für das V-Untergitter bestimmen, da unter dem Energiespektrum des leichteren Elementes Si der V-Untergrund erscheint und so die Zahl der an Si-Atomen zurückgestreuten ⁴He⁺-Teilchen quantitativ schwierig zu erfassen ist. Um das Si-Untergitter zu untersuchen, bedarf es einer anderen Methode, die es gestattet, die Ausbeute der mit den Si-Atomen wechselwirkenden Teilchen von der Ausbeute durch die V-Atome zu trennen. Eine solche Methode ist z.B. die Untersuchung mit Kernreaktionen.

2.1.3 Anwendung des Channelling-Effekts bei Kernreaktionen

Diese Untersuchungsmethode wird bevorzugt angewandt, wenn in einem Festkörper Elemente verschiedener Massen vorkommen und das Verhalten der leichteren Targetatome gegenüber geführten Teilchen getrennt beobachtet werden soll.

Bei Anwendung einer Kernreaktion ist es möglich, eine solche Reaktion zu wählen, daß das auslaufende Teilchen eine höhere Energie besitzt als die von der anderen Targetatomsorte elastisch gestreuten Teilchen, sodaß die Trennung im Energiespektrum gut durchführbar ist. Ein Nachteil ist nur, daß die Wirkungsquerschnitte für Kernreaktionen im allgemeinen wesentlich kleiner sind als für Rutherford-Rückstreuung, sodaß entweder mit schlechterer Statistik gemessen werden muß oder bei längeren Meßzeiten die Gefahr der Strahlenschädigung durch den analysierenden Strahl im Einkristall wächst.

Die kinetische Energie der Reaktionsprodukte läßt sich auf Grund der Energie-und Impulserhaltung bei der Reaktion berechnen, wobei der Q-Wert der Reaktion sich aus der Massendifferenz der beteiligten Elemente ergibt /15/.

Bei den Messungen an V_3 Si /16/ wurde die 28 Si(d,p₁₀) 29 Si-Reaktion verwendet /17/, wobei allerdings die Tiefenauflösung sehr begrenzt ist, bedingt durch den geringen Energieverlust der einlaufenden Deuteronen und der auslaufenden Protonen. Aus diesem Grunde konnte nur ein Fenster gesetzt werden und χ_{min} und $\psi_{1/2}$ also nicht tiefenabhängig gemessen werden. Abb. 7 zeigt ein typisches Reaktionsspektrum.



Abb. 7 Kernreaktionsausbeute beim Beschuß von V₃Si mit 1.7 MeV-Deuteronen. Eingezeichnet sind Spektren bei willkürlicher Orientierung (Random) und bei Einschuß in [100] vor und nach Bestrahlung mit 6 · 10¹⁶ He⁺/cm².

2.2 Meßapparatur

Die Messungen wurden am 3 MeV-van de Graaff-Beschleuniger des Instituts vorgenommen. Die Ausrichtung des Kristalls in der Rückstreu- und Channelling-Apparatur wurde mit Hilfe eines Drei-Achsen-Goniometers vorgenommen. Bei der Aufnahme einer Ausbeutekurve wurde stets nur ein Winkel verändert, dessen Anzeige digital in 0.01⁰-Schritten erfolgte.Das mechanische Spiel des Goniometergetriebes beträgt etwa 0.02⁰. Eine ausführliche Beschreibung der Rückstreu- und Channellingapparatur ist bereits in /18/ gegeben worden.

Die Rückstreumessungen wurden mit 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen durchgeführt. Der Fehler in der Bestimmung der Energie liegt bei \pm 5 keV, die Konstanz der Beschleunigungsspannung beträgt \pm 2 kV. Der Strahlquerschnitt auf der Probe beträgt 1 mm², die Divergenz des Strahls ist durch ein Blendensystem auf $\leq 0.02^{\circ}$ beschränkt. Bei den in dieser Arbeit erwähnten Experimenten betrug der Strahlstrom etwa 15 nA, die integrierte Ladung pro Meßpunkt bei Messungen der winkelabhängigen Ausbeutekurven war 2 \cdot 10⁻⁷Cb, die gesamte Ladung pro Rückstreuspektrum war 10⁻⁵ Cb. Der Nachweis der unter einem Winkel von 165[°] rückgestreuten ⁴He⁺-Teilchen erfolgte mit Hilfe eines Siliziumoberflächensperrschichtzählers in einem Raumwinkel von 4.6 msterad.Die Energieauflösung des gesamten Meßsystems beträgt etwa 20 keV.

Bei den Kernreaktionsexperimenten wurde mit 1700 keV-Deuteronen gearbeitet. Zum besseren Nachweis der als Reaktionsprodukt entstehenden Protonen wurde vor den Detektor eine 30 µm-Hostafan-Folie gesetzt, welche die rückgestreuten Deuteronen stoppen und die Energie der Protonen verringern sollte.

3. THEORETISCHE MODELLE ZUR BESCHREIBUNG DES CHANNELLING-EFFEKTS

3.1 Das Kontiuumsmodel

3.1.1 Allgemeine Grundlagen

Ausgangspunkt zur Beschreibung der Bewegung eines geführten Ions im Einkristall sind ganz bestimmte Annahmen, wie sie von Lindhard /l/ beschrieben werden. Zunächst geht man davon aus, daß die Streuwinkel der Ionen bei einem einzelnen Stoß mit einem Gitteratom klein sind.

Weiter kann man annehmen, daß auf die hier betrachteten Teilchen, nämlich 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen die klassische Mechanik anwendbar ist, da die Wellenlänge der Teilchen sehr klein ist. So stellt also die Lokalisierung der Teilchen kein Problem dar. Außerdem kann gezeigt werden, daß die klassische Betrachtungsweise auch bei vielen aufeinander folgenden Stößen mit Kettenatomen ihre Gültigkeit behält. Quantenmechanische Korrekturen sind in /1/ diskutiert.

Beim elastischen Stoß läßt sich der Streuwinkel im Laborsystem aus dem Streuwinkel im Schwerpunktssystem berechen zu:

$$\tan \Theta = \frac{M_2 \sin \overline{\phi}}{M_1 + M_2 \cos \overline{\phi}}$$
(3.1)
 $\Theta =$ Streuwinkel im Laborsystem
 $\overline{\phi} =$ Streuwinkel im Schwerpunktsystem

Für Kleinwinkelstöße und für $M_1 \ll M_2$ gilt dann $\Theta = \overline{\phi}$.

Löst man die Bewegungsgleichung für ein klassisches Teilchen im Zentralfeld, wie es z.B. das abgeschirmte Coulombpotential des Atomkerns darstellt, so kann die relative Impulsänderung, die gleichzeitig den Streuwinkel ergibt, wie folgt berechnet werden:

$$\overline{\phi} = -\frac{1}{M_1} v^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\partial}{\partial s} V(\sqrt{z^2 + s^2})$$
(3.2)

$$v = \text{Geschwindigkeit des Ions}$$

$$s = \text{Stoßparameter}$$

$$V(r) = \text{Atom-Ion-Potential im Abstand r}$$

Nach /l/ kann bei 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen auf V₃Si für V(r) in guter Näherung das Thomas-Fermi-Potential verwendet werden.

Die nächste Annahme geht davon aus, daß alle wesentlichen physikalischen Prozesse, denen ein geführtes Teilchen unterliegt, in der unmittelbaren Nähe der Atome geschehen; infolge der Kleinwinkelstreuung bewegt sich das Teilchen immer entlang einer Reihe von Atomen in der gleichen Kette. Es genügt also, im wesentlichen die Atomketten zu betrachten. Die einzige Ausnahme hiervon sind Resonanzanregungen der freien Elektronen.

Die idealisierte Betrachtungsweise einer perfekten Kette, in der also thermische und Nullpunktsschwingungen vernachlässigt werden, kann sicher nur eine erste Näherung darstellen; es kann aber angenommen werden, daß durch die Vielfachkleinwinkelstreuung einige Folgeeffekte der Schwingungen wieder herausgemittelt werden.

Unter den gerade beschriebenen Voraussetzungen kann nun die sogenannte Kontinuumsnäherung durchgeführt werden, indem man nämlich davon ausgeht, daß die Aufeinanderfolge von vielen Kleinwinkelstößen auch mit Hilfe eines gemittelten Potentials beschrieben werden kann, das folgende Form hat:

$$U(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{d_{r}} V(\sqrt{z^{2} + r^{2}})$$
(3.3)

d_r = Abstand zwischen den Atomen in einer Kette r = Abstand senkrecht zur Kette

Wie man erkennt, ist U(r) über $d_r \cdot \frac{dU(r)}{dr}$ mit der Beschreibung des Einzelstoßes verknüpft.

Für die Näherung, daß der Stoßparameter höchstens gleich dem Thomas-Fermi-Abschirmparameter, a, werden kann, wobei a gegeben ist durch:

$$a = a_0 \cdot 0.8853 \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$
 mit $a_0 = Bohr-Radius$ (3.4)

oder für $Z_1 \ll Z_2$ in der Näherung:

$$a = a_0 \cdot 0.8853 \cdot z_2^{-1/3}$$
 (3.5)

gilt für V(R):

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \phi_0(\frac{R}{a})$$
(3.6)

Setzt man speziell für ϕ_0 die Lindhard-Näherungsfunktion:

$$\phi\left(\frac{R}{a}\right) = 1 - \left[1 + \left(C\frac{a}{R}\right)^2\right]^{-1/2}$$
$$C = \sqrt{3}$$

ein /1/, so ergibt sich für das Kontinuumskettenpotential:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d_r} \xi(\frac{R}{a})$$

$$\xi(\frac{R}{a}) = \ln \left[\frac{(C \cdot a)^2}{R} + 1 \right]$$
(3.7)

mit

Lindhard zeigt, daß die Kontinuumsnäherung gültig ist für Einfallswinkel $\psi < \hat{\psi}$, wobei $\hat{\psi}$ dabei gegeben ist durch:

$$\hat{\psi} = \sqrt{\frac{\hat{E}}{E_0}}$$
 mit $\hat{E} = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d_r}$ (3.8)

solange $\hat{\psi} \lesssim \frac{a}{d_r}$ und bei kleineren Energien für $\psi < \tilde{\psi}$, wobei $\tilde{\psi}$ gegeben ist durch:

$$\tilde{\psi} = \left(\frac{C_a}{\frac{d\sqrt{2}}{r}} \cdot \hat{\psi}\right)^{1/2}$$
(3.9)

Überlagert man nun diese Einzelkettenpotentiale U(r) zu einem Summenpotential, das gebildet wird durch den Beitrag der einen Kanal bildenden Atomketten, so hat man eine Näherung, um die Bewegungsgleichung eines geführten Teilchens zu lösen. Abb. 8 zeigt eine derartige Potentialberechnung für die Einheitszelle von V₃Si, projiziert in [100] und [110].

Âm Beispiel von 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen in V₃Si soll nun die Gültigkeitsgrenze für die Kontinuumsnäherung abgeschätzt werden. Man findet für den kritischen Winkel $\hat{\psi}$ und für die kritische Energie \hat{E} die Werte:





Abb. 8a Kontinuumspotential in [100]. Es wurde die Näherung der Moliére'schen Abschirmfunktion verwendet. Die Potentialwerte sind in eV angegeben.



Abb. 8b Kontinuumspotential in [110]. Es wurde die Näherung der Moliére'schen Abschirmfunktion verwendet. Die Potentialwerte sind in eV angegeben.

Wobei in diesem Fall nur die Wechselwirkung mit den starken V-Ketten betrachtet wurde. Nimmt man nun für das Auftreten des Channelling-Effekts den Grenzwinkel $\overline{\psi} = 2 \cdot \hat{\psi} = 1.92^{\circ}$ an, so entspricht das einer Querenergie von $\overline{E} = 2246$ eV. Der minimale Stoßparameter, den ein Teilchen mit dieser Querenergie in einem Kontinuumspotential nach (3.7) haben kann, beträgt 0.005 Å.

Betrachtet man die Potentiallinien in Abb.8a,8b, so kann man daraus ablesen, wo die sogenannten Kanäle verlaufen. In [100] verläuft eine der für V₃Si typischen V-Ketten in der Mitte der Zelle. Von hier aus fällt das Potential nach außen steil ab, durchläuft ein Minimum und steigt dann zu den V- und Si-Ketten am Rand der Zelle wieder an. Der Kanal besteht also hier in einer Art ringförmigem Schlauch um die V-Kette in der Mitte der Zelle. In [110] stellt man dagegen verschiedene Kanäle mit rechteckförmigem Querschnitt fest.

Anhand der Äquipotentialliniendarstellung läßt sich auch abschätzen, welche Querenergie Teilchen höchstens haben dürfen, damit sie die Potentialschwelle zwischen den Kanälen nicht überschreiten können. Man findet in [100] in Richtung der Diagonalen den Wert $E_{\rm H} = 54$ eV. Dazu gehört ein Winkel $\psi_{\rm H}$ zwischen Teilchenbahn und Atomkette von $\psi_{\rm H} = 0.3^{\circ}$. Dieser Effekt wird als Hyperchannelling bezeichnet.

In der Kontinuumsnäherung läßt sich auch die minimale Ausbeute X_{min} abschätzen, die das Verhältnis der Ausbeute eines stoßparameterabhängigen Prozesses wie Rutherford-Rückstreuung bei Einschuß parallel zur Kanalachse zu der Ausbeute bei "Random"-Einschuß darstellt.

Lindhard gibt für χ_{\min} die Formel:

$$\chi_{\min} = N d_r \pi (u_2^2 + a^2)$$
 (3.10)

N = Dichte der Targetatome u₂ = thermische Schwingungsamplitude senkrecht zur Kette

an /l/, was sich aus einer Abschätzung der effektiven Trefferfläche für die eingeschossenen Teilchen an der Oberfläche ergibt.

Für V₃Si findet man für [100] mit:

N = 7.61
$$\cdot$$
 10²² cm⁻³
u₂ = $\sqrt{2}$ \cdot u₁ = $\sqrt{2}$ \cdot 0.073 Å = 0.103 Å
u₁ = eindimensionale thermische Schwingungsamplitude

den Wert χ_{min} = 0.021, wobei wieder nur die Wechselwirkung der ⁴He⁺-Teilchen mit den starken V-Ketten in Betracht gezogen wurde. Werden die Beiträge der schwachen V-Ketten und der Si-Ketten mitberücksichtigt, dann findet man für χ_{min} den Wert 0.034.

3.2.1 Beschränkungen dieses Modells im Vergleich mit dem Experiment

Der entscheidende Nachteil bei der Anwendung des Kontinuumsmodells ist, daß zwar $\psi_{1/2}$ und χ_{min} grundsätzlich berechnet werden können, jedoch nur für den Spezialfall eines idealen Gitters, wobei besonders Effekte wie elektronischer Energieverlust und damit verbundene Kleinwinkelstreuung an Elektronen nicht berücksichtigt sind, die im realen Kristall neben den thermischen Schwingungen, zu einer Vergrößerung der Querenergie des geführten Teilchens auf seinem Weg durch den Kanal führen.

Diese Zunahme der Querenergie führt dazu, daß das Teilchen mit zunehmender Eindringtiefe eine immer größere Wahrscheinlichkeit besitzt, nicht mehr geführt zu werden; das aber bedeutet wiederum, daß $\psi_{1/2}$ mit zunehmender Tiefe kleiner und χ_{\min} größer wird. Außerdem ist zu beachten, daß Oberflächenschichten (z.B. eine dünne Oxidschicht) bewirken, daß der einfallende Strahl durch diese Schichten aufgestreut wird und so eine große Zahl von Teilchen eine von der Einfallsrichtung abweichende Orientierung und damit auch eine im Mittel größere Querenergie besitzen. Dies kann ebenso eine Verengung von $\psi_{1/2}$ und eine Erhöhung von χ_{\min} zur Folge haben.

All die beschriebenen Effekte können aber mit dem Kontinuumsmodell, besonders für komplizierte Strukturen, nicht erfasst werden, sodaß seine Anwendung begrenzt ist. Man kann zwar versuchen, z.B. die thermischen Schwingungen auch mit diesem Modell zu erfassen, indem man ein temperaturabhängiges Potential verwendet. Hierzu muß aber ein großer mathematischer Aufwand betrieben werden und man hat damit die Tiefenabhängigkeit nicht erfaßt /20/.

Die gerade geschilderten Überlegungen führen nun dazu, sich mit anderen Modellen zu befassen. Der erfolgsversprechendste Weg erscheint dabei die Simulation des Channelling-Prozesses mit Hilfe eines Monte-Carlo-Programms auf der Basis des Binären-Stoß-Modells, da mit ihm all die oben beschriebenen Einflüsse berücksichtigt werden können.

3.2 Das Binäre-Stoß-Modell

3.2.1 Allgemeine Grundlagen

Im Binären-Stoß-Modell werden die Einzelwechselwirkungen der einfallenden Ionen mit den Targetatomen sukzessive berechnet und so der Channelling-Effekt in einem theoretischen Analogon zum Experiment direkt nachvollzogen. Es kann somit in einem idealen Experiment der Ablauf physikalischer Prozesse bewußt verändert werden; so ist es z.B. möglich, die Strahlenergie oder Temperatur des Kristalls vorzugeben und die alleinige Auswirkung dieser Parameteränderung auf den Channelling-Prozess abzuseparieren. Ebenso kann man verschiedene Modellansätze zur Bestimmung des Energieverlustes einbauen oder amorphe Oberflächenschichten simulieren.

Bei der Computer-Simulation geht man dabei wie folgt vor: Die dreidimensionale Struktur des Kristalls wird im Rechner gespeichert und zwar genügt es, wegen der Periodizität des Gitters, eine Einheitszelle zu speichern. Nun werden die gewünschten Teilchen auf diese Struktur geschossen und dabei sukzessive für jedes Teilchen die Wechselwirkung mit dem jeweils nächsten Atom einer Ebene senkrecht zur Kanalachse berechnet, im wesentlichen also der Streuprozess am Atom und der elektronische Energieverlust. Mit diesen berechneten Werten lassen sich dann die Eintrittskoordinaten in die nächste Netzebene ermitteln; wieder wird der Streuprozess berechnet usw. Auf diese Weise erhält man die Trajektorie für jedes eingeschossene Teilchen.

Ebenso lassen sich auch noch andere physikalische Prozesse, wie z.B. Kernreaktionen einbauen und die Wahrscheinlichkeit für den Eintritt dieser Prozesse jeweils berechnen.

3.2.2 Verwirklichung durch die Monte-Carlo-Methode

Die Bezeichnung"Monte-Carlo-Rechnung" ist ein gebräuchlicher Begriff auf dem Gebiet der numerischen Mathematik und besagt, daß zur Lösung eines bestimmten Problems ein nach den Gesetzen einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung arbeitender Zufallsgenerator verwendet wird. Im folgenden soll nun die Anwendung einer Monte-Carlo-Rechnung auf den Channelling-Effekt beschrieben werden. Zur Erläuterung kann dazu auch das Blockdiagramm im Anhang dienen.

Die Problemstellung zielt auf die Berechnung der Orts- und Energieverteilungen der einfallenden Teilchen unter Channelling-Bedingungen ab, da diese Größen die Grundlagen für die Kenntnis aller wesentlichen physikalischen Phänomene bilden, deren Resultate im Experiment registriert werden können, wie die Ausbeute an Rückstreuprozessen oder Kernreaktionen.

Man läßt dazu eine bestimmte Anzahl von Teilchen (bei den hier geschilderten Rechnungen für V₃Si 400 Teilchen in [100]) von der ersten Atomschicht aus starten. Dazu wird diese Fläche matrixartig in kleine Quadrate aufgeteilt und vom Mittelpunkt eines jeden Quadrats aus läuft jeweils ein Ion los, wobei Energie und Impuls eines jeden Teilchens genau festgelegt sind. Ein anderes in dieser Arbeit jedoch nicht benütztes Verfahren besteht darin, den Eintrittsort mit gleichverteilten Zufallszahlen festzulegen. Der Querimpuls der Teilchen wird entsprechend der gewünschten Einschußrichtung durch zweiWinkel ϕ und θ festgelegt. ϕ stellt die Neigung der durch die Kanalachse und die Einschußrichtung aufgespannten Ebene, der sogenannten Kippebene, gegen die xz-Ebene (Abb. 9) des Kristallkoordinatensystems dar. θ bezeichnet den Winkel zwischen Einschußrichtung und Kanalachse, also den eigentlichen Kippwinkel.



Abb. 9 Bedeutung der Einschußwinkel ϕ und θ . ϕ stellt die Neigung der Kippebene gegen die xz-Ebene dar, θ den Winkel zwischen Einschußrichtung und Kanalachse.

Zusätzlich kann noch eine amorphe Oberflächenschicht simuliert werden, indem die Querimpulswerte mit einer entsprechenden Halbwertsbreite (Näheres siehe 4.2.2) normalverteilt gewählt werden.

Die thermischen Schwingungen der Kristallatome werden mit Hilfe eines Zufallsgenerators simuliert. Die Positionen der Atome werden dabei als Gaußverteilung um den idealen Gitterplatz angenommen mit der thermischen Amplitude als Standardabweichung und so für jedes vorbeifliegende Ion neu bestimmt. Mit dem dadurch festgelegten Abstand Atom-Ion wird der Streuprozess berechnet und damit die Eintrittskoordinaten in die nächste Atomschicht bestimmt. Ferner wird die Energie entsprechend dem eingebauten Energieverlustmechanismus verringert.

Verläßt ein Teilchen bei dieser Prozedur die laterale Begrenzung der Einheitszelle, so werden die Koordinaten um einen Gitterparameter zurücktransformiert, sodaß es also weiter im Bereich der Einheitszelle bleibt. So werden nacheinander alle Atomlagen durchlaufen. Die lateralen Orts- und Energieverteilungen der geführten Teilchen werden im gleichen Raster registriert wie es beim Start der Ionen benützt wird, wobei hier allerdings zur Verbesserung der Statistik über mehrere Einheitszellen gemittelt wird. Dazu wird nacheinander für jedes Rasterquadrat die Zahl von Teilchen registriert, die durch dieses Quadrat hindurchlaufen; dadurch ist die Ortsverteilung der Ionen gegeben. Gleichzeitig wird auch deren mittlere Energie bestimmt, womit also die Energieverteilung festliegt.

Die Rückstreuwahrscheinlichkeit wird für jedes Teilchen beim Vorbeiflug an einem Gitteratom berechnet und entsprechend dem in 3.2.4 beschriebenen Verfahren zu einem Gesamtrückstreuspektrum aufsummiert.

3.2.3 Berechnung der Trajektorien eingeschossener Teilchen in V₃Si

3.2.3.1 Beschreibung der Funktion der Streueinheit

Wie bereits erwähnt genügt es, zur Darstellung der Kristallstruktur wegen ihrer Periodizität eine Einheitszelle abzuspeichern und die geführten Teilchen diese immer wieder durchlaufen zu lassen. Verläßt ein Teilchen diese Streuzelle lateral, so lassen sich die Koordinaten infolge der Periodizität so zurücktransformieren, daß das entsprechende Teilchen wieder von der gegenüberliegenden Seite in die Zelle eindringt. In der Programmsprache FORTRAN wurde diese Transformation durch die MOD-Funktion verwirklicht.

In Kristallen des A15-Strukturtyps sind die Positionsparameter der Atome durch die Symmetriebedingungen der kristallographischen Raumgruppe $P4_2/m\overline{3}2/n$ festgelegt. In diesen Verbindungen der Form A_3 B besetzen die A-Atome die Punktlagen 6(c) (1/4, 0, 1/2; 1/2, 1/4, 0; 0, 1/2, 1/4; 3/4, 0, 1/2; 1/2, 3/4, 0; 0, 1/2, 3/4) und die B-Atome die Punktlagen 2(a) (0,0,0; 1/2, 1/2, 1/2) /21/.

Da das Ziel dieser Arbeit war, die Channelling-Untersuchungen für 4 He⁺-Teilchen in V₃Si in den Kristallrichtungen [100] und [110] durchzuführen, wurden zwei verschiedene Streuzellen gewählt und zwar für [100] die kubische Einheitszelle der A15-Struktur. In dieser Richtung folgen die Netzebenen der Atome im Abstand d/4, die Positionen der einzelnen Atome sind in Abb. 10 dargestellt; d ist der Gitterparameter (d = 4.718 Å für V₃Si /19/).

Für [110] wurde ein Parallelepiped verwendet, das die würfelförmige Streuzelle für [100] umhüllt. Hier folgen die Netzebenen im Abstand d $\cdot \sqrt{2}/8$, die Abmessungen und Anordnung der Atome sind auch in Abb. 10 dargestellt.

Zur Veranschaulichung der Funktion der Streuzelle dienen nun folgende Überlegungen: ein He⁺-Teilchen tritt in die zweite Ebene der Streuzelle; Position, Impuls und Energie des Teilchens sind bekannt. Es wird nun an einem Atom dieser



Abb. 10 Unterteilung der Streuzellen für [100] und [110] in einzelne Atomebenen.

Ebene gestreut und daraus nach Ermittlung des Streuwinkelsund des Energieverlustes der Eintrittsort in die nächste Ebene, sowie der neue Impuls und die neue Energie berechnet. Die Berechnung der neuen Orts- und Impulskoordinaten wird wie folgt durchgeführt:

Das He⁺-Teilchen trifft am Ort \vec{x}_{o} mit dem Impuls \vec{p}_{o} in der zweiten Streuebene auf, wie in Abb. 11 dargestellt. Durch den Stoß mit dem Atom im Ursprung des Koordinatensystems wird es in der durch \vec{p}_{o} und \vec{x}_{o} aufgespannten Ebene um $\Delta \vec{p}$ abgelenkt. $\Delta \vec{p}$ ergibt sich dann in der Näherung für kleine Streuwinkel θ und kleine Winkel zwischen \vec{p}_{o} und der z-Achse:

$$\Delta \vec{p} \approx |\Delta \vec{p}| \cdot \frac{\vec{x}_{o}}{|\vec{x}_{o}|} \approx \theta \cdot |\vec{p}_{o}| \cdot \frac{\vec{x}_{o}}{|\vec{x}_{o}|}$$
(3.11)

Der neue Impuls \overrightarrow{p}_1 des He⁺-Teilchens berechnet sich dann zu:

$$\vec{p}_{1} = \vec{p}_{0} + \Delta \vec{p} = \vec{p}_{0} + \theta \cdot |\vec{p}_{0}| \cdot \frac{\vec{x}_{0}}{|\vec{x}_{0}|}$$
(3.12)

Damit läßt sich der Eintrittsort $\dot{\vec{x}}_1$ in die dritte Streuebene ermitteln:

$$\vec{x}_{1} = \vec{x}_{0} + \frac{d}{4} \cdot \frac{\vec{p}_{1}}{p_{0_{z}}} = \vec{x}_{0} + \frac{d}{4} \quad (\frac{\vec{p}_{0}}{p_{0_{z}}} + \frac{\vec{p}_{0}}{p_{0_{z}}} \cdot \frac{\vec{x}_{0}}{|\vec{x}_{0}|} \cdot \theta) \quad (3.13)$$



Abb. 11 Geometrie des Streumechanismus beim Stoß eines einfallenden Teilchens mit einem Gitteratom. Es wurden die 2. und 3. Atomebene der [100]-Streuzelle dargestellt.

In der erwähnten Näherung gilt für $p_{O_Z} : p_{O} \approx |\vec{p}_0| \approx |\vec{p}_1|$ und für den Stoßparameter s : s $\approx |\vec{x}_0|$. Man kann jetzt noch^zrelative Impulse einführen, $p_X^{rel} = \frac{P_X}{|\vec{p}|}$ und $p_y^{rel} = \frac{P_Y}{|\vec{p}|}$ und erhält damit:

$$p_{l_{x}}^{rel} = p_{o_{x}}^{rel} + \theta \cdot \frac{x_{o}}{s}$$
(3.14)

$$p_{l_{v}}^{rel} = p_{o_{v}}^{rel} + \theta \cdot \frac{y_{o}}{s}$$
(3.15)

$$x_1 = x_0 + p_{1_X}^{re1} \cdot \frac{d}{4}$$
 (3.16)

$$y_1 = y_0 + p_1^{rel} \cdot \frac{d}{4}$$
 (3.17)

Zieht man noch thermische Auslenkungen des streuenden Atoms $\dot{\vec{x}}_{th} = (x_{th}, y_{th}, z_{th})$ und Streuung an den gebundenen Elektronen um den Winkel (θ_x, θ_y) in Betracht, so ergibt sich endgültig:

$$p_{l_{x}}^{rel} = p_{o_{x}}^{rel} + \theta \cdot (x_{o} - x_{th}) \cdot \frac{l}{s} + \theta_{x}$$
 (3.18)

$$p_{l_{y}}^{rel} = p_{o_{y}}^{rel} + \theta \cdot (y_{o} - y_{th}) \cdot \frac{1}{s} + \theta_{y}$$
(3.19)

wobei s sich berechnet aus s = $[(x_0 - x_{th})^2 + (y_0 - y_{th})^2]^{1/2}$. Die z-Komponenten der thermischen Schwingungen werden dabei mit dem Argument $z_{th} \ll \frac{d}{4}$ vernachlässigt. Zu erwähnen ist, daß nach /22/ diese Vernachlässigung sich als gültig erwiesen hat.

3.2.3.2 Berechnung des Ablenkwinkels bei einem binären Stoß

Das geführte Ion unterliegt einer Vielzahl von Einzelstößen mit Targetatomen, die im Binären-Stoß-Modell sukzessive berechnet werden müssen. Im eigentlichen Ansatz des Binären-Stoß-Modells werden die Trajektorien der Teilchen so ermittelt, daß die Bahnasymptoten bestimmt werden, d.h. man wendet die Näherung an, daß das Teilchen sich zwischen zwei Atomebenen geradlinig bewegt, in der momentanen Netzebene die Impulsänderung durch den Stoß mit einem Atom erfährt und darauf geradlinig bis zur nächsten Ebene weiterläuft. Diese Näherung ist bei schnellen Ionen durchaus anwendbar, da man sich ausrechnen kann, daß unter Channelling-Bedingungen die Teilchen pro Stoß nur so kleinen Impulsänderungen unterliegen, daß sich der Abstand zur Kette zwischen zwei Stoßebenen nur geringfügig ändert. Es genügt also, für das geführte Ion den Eintrittsort in die betrachtete Ebene zu berechnen und daraus den Stoßparameter zu dem streuenden Atom zu bestimmen; mit diesem Wert erhält man den Streuwinkel; um diesen Winkel wird die Richtung der bisherigen Asymptote korrigiert und daraus kann der Eintrittsort in die nächste Ebene ermittelt werden.

Die Schwierigkeit liegt nun darin, bei mehreren Atomen in einer Ebene zu bestimmen, an welchem gestreut wird. Das eigentliche Binäre-Stoß-Modell sieht nur einen Stoß zu einem bestimmten Zeitpunkt vor und zwar mit dem Argument, daß für kleine Stoßparameter, also große Ablenkwinkel, wegen des starken Abfalls der Wechselwirkungspotentiale als Funktion des Abstands eben nur ein Atom den Hauptbeitragliefert. Zwar kann auch der Fall auftreten, daß mehrere Atome gleich nahe sind. Mit dem gleichen Argument wie oben ist der Fehler jedoch dadurch, daß nur die Streuung an einem Atom betrachtet wird, sehr gering.

Da diese Fallunterscheidung aber für die Al5-Struktur von V₃Si nicht ganz eindeutig getroffen werden kann, wurde das Binäre-Stoß-Modell dahingehend abgeändert, daß pro Ebene nicht nur an einem Atom gestreut wird, sondern an jedem Nachbarn in der Ebene. Es werden also mehrere Stöße zwar hintereinander berechnet, aber die einzelnen Ablenkwinkel addiert, sodaß in Wirklichkeit mehrere Stöße gleichzeitig stattfinden können. Damit hat man im strengen Sinn keinen binären Stoß mehr, man wendet aber eine im Rahmen der Impulsnäherung exakte Prozedur an. Die Berechnung des Ablenkwinkels beim Stoß eines geführten Teilchens mit einem Targetatom wird mit Hilfe der klassischen Streutheorie vorgenommen, indem die Wechselwirkung zweier Teilchen mit abstoßenden Zentralkräften betrachtet wird. Im Schwerpunktssystem kann der Streuwinkel θ bestimmt werden zu /23/:

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{sdR}{R^2} \frac{1}{[1 - v(R) - \frac{s^2}{R}]^{1/2}}; \quad v(R) = \frac{V(R)}{E_r} \quad (3.20)$$

$$V(R) = \text{Potential im Abstand } R$$

$$s = \text{Stoßparameter}$$

$$E_r = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot E$$

$$r_m = \text{Nullstelle des Klammerausdrucks}$$

Analytisch ist dieses Integral nur in Spezialfällen lösbar; es ist deshalb notwendig, einen Näherungsausdruck dafür zu finden und zwar möglichst in Form einer Entwicklung nach Potenzen von v(R), wobei v(R) im Sinn der Störungstheorie die Störung darstellt /24/. So ergibt sich:

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \theta_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-2s}{2^n n! E_r^n} \int_s^{\infty} \frac{dR}{(R^2 - s^2)^{1/2}} \left\{ \frac{d}{dR} \cdot \frac{1}{R} \right\}^n V^n(R) R^{2n-1}$$
(3.21)

Um (3.21) zu berechnen, schreibt man die Formel um in:

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-2}{2^{n} n! E_{r}^{n}} \left\{ \frac{d}{ds} \cdot \frac{1}{s} \right\}^{n} s \int_{0}^{\infty} (\xi^{2} + s^{2})^{n-1} V^{n} (\sqrt{\xi^{2} + s^{2}}) d\xi \qquad (3.22)$$

Vernachlässigt man alle Terme mit $n \ge 2$, so erhält man:

$$\theta = \theta_1 = -\frac{1}{E_r} \frac{d}{ds} \int_{0}^{\infty} V \left(\sqrt{\xi^2 + s^2}\right) d\xi \qquad (3.23)$$

für den Streuwinkel in Impulsnäherung, die also für kleine v(R) gilt, d.h. für kleine Streuwinkel. Man zeigt leicht, daß für sie ferner gilt:

$$\theta_1 = \frac{\Delta p \prod}{p}$$
 mit $p = v \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2}$ (v = Geschwindigkeit des

Teilchens in Vorwärtsrichtung im Laborsystem).

Setzt man nun für die Wechselwirkung die Moliere-Näherung des statistischen Thomas-Fermi-Potentials ein /25/:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(\frac{\mathbf{r}}{a})$$
(3.24)

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \exp(-\beta_i \mathbf{x})$$

$$\alpha_i = \{0.10; 0.55; 0.35\}$$

$$\beta_i = \{6.0; 1.2; 0.3\}$$

so ergibt sich für den Streuwinkel:

$$\theta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a E_r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i K_1 (\beta_i \frac{s}{a})$$

K₁(x) ist hierbei die modifizierte Bessel-Funktion erster Ordnung /26/.

Zur Abschätzung der Genauigkeit der Impulsnäherung kann nach /24/ das zweite Glied der Summe (3.22) verwendet werden und so ergibt sich mit dem Molière-Potential für den relativen Fehler:

$$\frac{\Delta \theta}{\theta} = \frac{\theta_2}{\theta_1} = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \beta_i K_1 (2\beta_i \frac{s}{a})}{a E_r \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \beta_i K_1 (\beta_i \frac{s}{a})}$$
(3.25)

Zur Überprüfung wurden einige Werte von $\frac{\Delta\theta}{\theta}$ für 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen in Vanadium berechnet:

φ[°]	s/a	Δθ/θ [10 ⁻³]
23.0	0.005	1.01
2.0	0.055	0.98
0.2	0.455	0.80
0.07	1.0	0.63
0.02	2.005	0.51

Wie man sieht, ist die Impulsnäherung bei Streuwinkeln um 20⁰ sicher noch ausreichend genau, sodaß dieser Winkel bzw. der dazugehörige Stoßparameter als Abschneidewert gültig sind. Es können demzufolge im Programm Stoßwinkel bis zu 20⁰ noch erfaßt werden.

3.2.3.3 Berechnung des Energieverlustes

Schnelle leichte Ionen übertragen auf ihrem Weg durch den Festkörper Stoßenergie bei jedem der als elastisch angenommenen Streuprozesse mit dem Atom. Ferner wird Energie übertragen in Form inelastischer Stöße, worunter z.B. jegliche Art Wechselwirkung zwischen Ion und Elektronen verstanden wird. Bei den Energien, die in dieser Arbeit betrachtet werden, nämlich etwa 1200-2000 keV, spielen für ⁴He⁺-Teilchen die nuklearen Stöße keine Rolle. Eine Abschätzung zeigt, daß der Bruchteil des nuklearen Energieverlustes bezogen auf den Gesamtenergieverlust kleiner ist als $1 \cdot 10^{-4}$ /27, 28/.

Der elektronische Energieverlust setzt sich aus den Resultaten mehrerer Arten von Wechselwirkung zusammen:

- (i) Stöße mit gebundenen Elektronen
- (ii) Stöße mit Valenz- und Leitungselektronen (als freie Elektronen betrachtet)
- (iii) Anregung von Plasmonen

Der Prozess (i) hängt von der Ortsverteilung der Ionen im Festkörper ab, da hier die lokale Ladungsverteilung eines Atoms eingeht. Die andern beiden Prozesse können als ortsunabhängig angesehen werden, da die freien Elektronen als gleichförmig über den Festkörper verteilt angenommen werden. Der Term (i) wird also unter Channelling-Bedingungen einen anderen Beitrag liefern als unter Random-Bedingungen, da die Ortsverteilung geführter Ionen in Kanalmitte stark überhöht ist, wo die Ladungsverteilung der Elektronen der Gitteratome Null wird.

Der Energieverlust auf Grund von Stößen mit gebundenen Elektronen läßt sich wie folgt darstellen /29/:

$$\left(\frac{dE}{dz}\right)_{\text{geb.}} = \frac{4\pi \ Z_1^2 \ e^4}{mv^2} \cdot NZ_{1 \text{ok.}}^{\text{geb.}} \cdot \ln \frac{2mv^2}{\overline{I}}$$
 (3.26)

- v = Geschwindigkeit der eingeschossenen Ionen
- m = Masse des Elektrons

I = mittlere Anregungsenergie der gebundenen Elektronen
geb.

NZ = lokale Dichte der gebundenen Elektronen

Dieser Term stellt einen mit NZ^{geb.} modifizierten Bethe-Bloch-Ansatz dar /30/. NZ^{geb.} kann für jedes Gitteratom mit dem Thomas-Fermi-Modell berechnet wer-

lok. kann fur jedes Gitteratom mit dem Thomas-Fermi-Modell berechnet wer-

NZ^{geb.}_{1ok.} = $\frac{Z_2^{*}}{4\pi a^3} \cdot \frac{d^2 \Phi \left(\frac{R}{a}\right)}{d\left(\frac{R}{a}\right)^2} \cdot \frac{1}{\frac{R}{a}}; \quad Z_2^{*} = Zahl der gebundenen Elektronen pro Atom (3.27)$

wobei $\Phi(\frac{R}{a})$ die Thomas-Fermi-Abschirmfunktion darstellt.

Da bei Channelling-Berechnungen die mittlere Ladungsdichte als Funktion des Abstandes von der Kette interessiert, ergibt sich für die Molière-sche Näherung nach Mittelung über d/4::

$$\overline{\text{NZ}}_{1\text{ok.}} = \frac{Z_2^{*}}{2\pi \, d/4} \cdot \sum_{i=1}^{3} \frac{\alpha_i \beta_i^{2}}{a^2} \cdot K_0(\beta_i s/a)$$
(3.28)

wobei $K_{o}(x)$ die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung darstellt /26/. \overline{I} in Gleichung (3.26) stellt einen Fitparameter dar, da exakte Berechnungen für schwere Targetatome zu komplex werden. Sein genauer numerischer Wert ist jedoch wegen des geringen Einflusses des elektronischen Energieverlustes auf den Channelling-Prozess nicht entscheidend. \overline{I} wurde bei unseren Berechnungen aus:

$$\bar{I} = 11.2 \cdot Z_{2} eV$$
 (3.29)

ermittelt, wie sich aus einer Arbeit von Chu und Powers/31/ über Ansätze mit Hartree-Fock-Slater-Ladungsverteilungen ergibt.

Die Stöße zwischen einfallenden Ionen und freienElektronen führen zu einem Energieverlustterm, der folgende Form hat /29/:

$$\left(\frac{dE}{dz}\right)_{Val.} = \frac{4\pi \ Z_1^2 \ e^4}{mv^2} \cdot NZ^{Val} \cdot \ln \frac{v}{v_F}$$
(3.30)

Z^{Val.} = Zahl der pro Atom im Mittel abgegebenen freien Elektronen

v_F = Fermigeschwindigkeit NZ^{Val}≒ Dichte der freie Elektronen

 Z^{Val} .wurde für V_3 Si bestimmt aus:

$$z^{Val.} = \frac{3 \cdot z_V^{Val.} + z_{Si}^{Val.}}{4} = \frac{3 \cdot 5 + 4}{4} = 4.75$$

Die Fermigeschwindigkeit läßt sich in der Näherung des freien Elektronengases berechnen zu /32/:
$$v_{\rm F} = (3 \pi^2 n_{\rm e})^{1/3} \hbar/m$$
 (3.31)

 n_{e} = Dichte der freien Elektronen = NZ^{Val} .

Für V_3 Si ergibt sich $n_e = 0.36 \text{ A}^{-3}$ und $v_F = 2.6 \cdot 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{sec}}$

Der Energieverlust durch Plasmonanregung ist gegeben durch /29/:

$$\left(\frac{dE}{dz}\right)_{\text{Plasmon}} = \frac{4\pi \ Z_1^2 \ e^4}{mv^2} \ NZ^{\text{Val}} \ \ln \frac{2m \ vv_F}{\hbar \omega_p}$$
(3.32)
$$\omega_p = \text{Plasmafrequenz}$$

$$\hbar \omega_p = \text{Plasmonenergie}$$

 ω_{p} berechnet sich wiederum im Modell des freien Elektronengases nach /32/:

$$\omega_{\rm p} = \left(\frac{4\pi \ {\rm n}_{\rm e} \ {\rm e}^2}{{\rm m}}\right)^{1/2} \tag{3.33}$$

Für die angegebenen Werte ergibt sich $\omega_p = 3.39 \cdot 10^{16} \text{ Hz}$ und $\hbar\omega_p = 22.2 \text{ eV}$

Inzwischen ist ein experimentell bestimmter Wert der Plasmonenergie verfügbar, nämlich $\hbar\omega_p$ = 2.8 eV /33/; dies zeigt, daß das Modell des freien Elektronengases für V₃Si versagt. Monte-Carlo-Rechnungen mit und ohne Plasmonanteil des elektronischen Energieverlustes haben jedoch gezeigt, daß dieser Term keinen wesentlichen Einfluß auf den Channelling-Prozess und die Rückstreuausbeute hat.

Die drei Energieverlustterme lassen sich zusammenfassen zu:

$$\left(\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dz}}\right)_{\mathrm{inel}} = \frac{4\pi \ \mathrm{Z}_{1}^{2} \ \mathrm{e}^{4}}{\mathrm{mv}^{2}} \left[\mathrm{NZ}_{\mathrm{lok}}^{\mathrm{geb}} \cdot \ln \frac{2\mathrm{mv}^{2}}{\mathrm{\overline{I}}} + \mathrm{NZ}^{\mathrm{Val}} \cdot \ln \frac{2\mathrm{mv}^{2}}{\mathrm{\widetilde{I}}\omega}_{\mathrm{p}} \right]$$
(3.34)

Die Berechnung des stoßparameterabhängigen Anteils des elektronischen Energieverlustes im Programm geht ähnlich der Berechnung des Stoßwinkels vor sich. Denn für jedes Atom einer Streuebene wird dieser Anteil gesondert berechnet und die einzelnen Beiträge aufsummiert. Für den Energieverlust, dem ein Teilchen nach dem Rückstreuprozess auf seinen Weg zum Detektor unterliegt, ist es nicht nötig, den hier dargestellten Ausdruck zu verwenden, da diese Bahnen nun random-orientiert verlaufen. Für den dabei auftretenden Energieverlust wurde ein Polynom fünften Grades von Ziegler und Chu angewandt, dessen Koeffizienten für ⁴He⁺-Teilchen tabelliert sind /28/. Sollten andere Ionen, Z_v, verwendet werden, so wurden die Werte nach /34/:

$$\left(\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dz}}\right)_{\mathrm{Z}_{\mathrm{X}},\mathrm{v}} = \frac{\mathrm{Z}^{2}_{\mathrm{X}}}{\mathrm{Z}^{2}_{\mathrm{He}}} \left(\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dz}}\right)_{\mathrm{Z}_{\mathrm{He}},\mathrm{v}}$$
(3.35)

bei gleicher Geschwindigkeit v berechnet.

In die Formeln sowohl für den Energieverlust als auch für den Stoßwinkel geht die Ladungszahl des einfallenden Teilchens wesentlich ein. Da aber empirische Abschätzungen /35/ mit:

$$(Z_{4}^{*})^{2} = 4 - 3.04 \exp(-1.77 E_{4})$$
 (3.36)

zeigen, daß (Z^{*}₄)² = 3.912 für E₄ = 2 MeV,wurde hier mit Z₄ = 2 gerechnet. Der Gültigkeitsbereich für die He dargestellte Auftrennung des Energieverlustes ist durch die Bedingung:

$$v_{\text{Ion}} \gg Z_1^{2/3} \cdot \frac{e^2}{\hbar} = Z_1^{2/3} \cdot v_{\text{Bohr}}$$
 (3.37)

gegeben, äquivalent zu:

$$E \gg 25 \cdot Z_1^{2/3} \cdot M_1 \text{ keV} \qquad (3.38)$$

Für ⁴He⁺-Teilchen muß also gelten:

$$E \gg 159 \text{ keV}$$

was bei unseren Untersuchungen gewährleistet war.

Durch Stöße mit Elektronen verliert das einfallende Ion aber nicht nur Energie, vielmehr führt der dabei gleichzeitig stattfindende Impulsübertrag in der Querebene zur Auffächerung des Ionenstrahls. Geht man davon aus, daß der Energieübertrag ∆E bei einem freien Stoß den Impulsübertrag /29/:

$$\Delta \mathbf{p} = \sqrt{2\mathbf{m}\Delta\mathbf{E}} \tag{3.39}$$

zur Folge hat, so folgt daraus unmittelbar eine transversale Ablenkung:

$$\langle \Delta \theta^2 \rangle = \frac{m}{M_1} \cdot \frac{\Delta E}{E}$$
 (3.40)

In jeder Raumrichtung getrennt ergibt sich:

$$\langle \Delta \theta_{\mathbf{x}}^2 \rangle = \langle \Delta \theta_{\mathbf{y}}^2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{M}_1} \cdot \frac{\Delta \mathbf{E}}{\mathbf{E}}$$
 (3.41)

wodurch die Verknüpfung mit dem Energieverlust gegeben ist:

$$\frac{\partial^{\langle \theta_{x}^{2 \rangle}}}{\partial z} = \frac{\partial^{\langle \theta_{z}^{2 \rangle}}}{\partial z} = \frac{1}{2} \cdot \frac{m}{M_{1}} \cdot \frac{1}{E} \cdot \frac{\partial E}{\partial z} \Big|_{\text{frei}}$$
(3.42)

Durch $\frac{\partial E}{\partial z} \begin{vmatrix} ist \text{ der Anteil des elektronischen Energieverlusts durch Plasmon-frei anregung ausgeschlossen, da mit ihm keine Impulsänderung in der Querebene verbunden ist.$

3.2.3.4 Thermische Schwingungen der Atome

Das dynamische Verhalten des Kristallgitters ist durch die Auslenkungen der Atome aus ihren Gleichgewichtslagen gekennzeichnet. Diese Verschiebungen stellen wesentliche Abweichungen vom idealen Kristall dar und gehen entscheidend in die Bestimmung der Stoßparameter und damit in die Berechnung der Ablenkwinkel ein. Die Geschwindigkeit der Gitteratome ist um Größenordnungen kleiner als die der eingeschossenen He⁺-Teilchen, wie sich aus:

$$\frac{M_2}{2} V_G^2 = \frac{3}{2} kT$$
; k = Boltzmann-Konstante (3.43)
T = absolute Temperatur
 V_G = Geschwindigkeit des Gitter-
atoms

abschätzen läßt.

Für V-Atome ergibt sich bei T = 293 K $V_G \approx 3.5 \cdot 10^4$ cm/sec, wohingegen die Geschwindigkeit von 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen bei v $\approx 10^9$ cm/sec liegt. Es genügt also, eine statische Momentaufnahme des Gitters zu einem festen Zeitpunkt zu betrachten und mit Hilfe einer Wahrscheinlichkeitsverteilung der thermischen Auslenkungen die momentanen Positionen der Atome festzulegen.

Das Problem ist, die Gleichung:

$$W_{i}(u,\vec{n}) = \langle \delta(u - \vec{u}_{i} \cdot \vec{n}) \rangle \qquad (3.44)$$

zu lösen, wobei $W_i(u, \vec{n})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür darstellt, daß das i-te Atom die momentane Auslenkung u in Richtung des Einheitsvektors \vec{n} hat, wobei die mittlere Auslenkung des Atoms gegeben ist durch \vec{u}_i .

Stellt man für das dreidimensionale Raumgitter unter der Voraussetzung von Zentralkräften mit auf nächste Nachbarn beschränkten Wechselwirkungen die Bewegungsgleichungen auf, so zeigt sich, daß folgender Ansatz zum Erfolg führt /36/:

$$\vec{u}_{i} = \frac{1}{\sqrt{2M_{i}}} \sum_{q,\lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega_{q}}} \sum_{q,\lambda} \vec{e}_{q,\lambda}^{i} \exp i\vec{q}\vec{R}_{i} \{a_{q} + a_{q}^{+}\}$$
(3.45)

$$M_{i} = \text{Masse des i-ten Atoms}$$

$$\vec{q}_{,\lambda}^{\Sigma} = \text{Summe über alle Wellenvektoren } \vec{q} \text{ der ersten}$$

$$\vec{q}_{,\lambda}^{Z} = \text{Dispersions relation}$$

$$\vec{q}_{,\lambda} = \text{Dispersions relation}$$

$$\vec{e}_{q,\lambda}^{i} = \text{Polarisation svektor}$$

$$\vec{R}_{i} = \text{Gleichgewicht slage des i-ten Atoms}$$

$$a_{-\vec{q},\lambda}^{+}; a_{-\vec{q},\lambda} = \text{Phononenerzeugungs- und Vernichtung soperatoren}$$

Einsetzen in die Ausgangsgleichung (3.44), Fourier-Transformation der δ -Funktion und mehrmaliges Umformen /37/ führt zu:

$$W(u,\vec{n}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\Gamma_{+}}} \cdot \exp - \frac{u^{2}}{4\Gamma_{+}} \qquad (3.46)$$

$$\Gamma_{+} = \sum_{q,\lambda} \frac{|\vec{n} e \vec{q}, \lambda|^{2}}{2M_{1} \omega \vec{q}, \lambda} \cdot (\frac{1}{\exp \beta \omega_{+} - 1} + \frac{1}{2})$$

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

mit

Ausmultipliziert ergibt sich:

$$\Gamma_{n} = \sum_{j,j}, \quad x_{j} \stackrel{\rightarrow}{x_{j}}, \quad \Gamma_{j,j}, \quad (3.47)$$

 $\vec{x_j^n} = j - te$ Komponente des Vektors \vec{n} in einem kartesischen Koordinatensystem

$$\Gamma_{j,j'} = \int_{q,\lambda} \frac{e_{j,\lambda,j} e_{j,\lambda,j'}}{2M_{i} \omega_{q,\lambda}} \left(\frac{1}{\exp \beta \omega_{j,\lambda}} + \frac{1}{2} \right)$$

Es ergibt sich also eine Gaußverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichte, zu deren Parametrisierung die Kenntnis der Dispersionsrelation $\omega_{\dot{q},\lambda}$ erforderlich ist. Es kann nun gezeigt werden, daß gilt:

$$\Gamma_{\overrightarrow{n}} = \frac{1}{2} \langle u_{\overrightarrow{i}}^{n}(t) u_{\overrightarrow{i}}^{n}(t) \rangle$$

wobei $\langle u_{i}^{n}(t) u_{i}^{n}(t) \rangle$ das mittlere Schwankungsquadrat in Richtung \dot{n} darstellt.

Da für V_3 Si die Dispersionsrelation $\omega_{\vec{t},\lambda}$ nicht bekannt ist, wurde $\langle u_i u_i \rangle$ aus Röntgenexperimenten verwendet /38/, und in die Gaußfunktion eingesetzt. Wesentlich ist hierbei, daß die V-Atome, wie in diesen Experimenten gezeigt wurde, nicht isotrop schwingen, sondern daß die Schwingungen senkrecht zu den V-Ketten stärker ausgeprägt sind. Deshalb ist das mittlere Schwankungsquadrat über einen symmetrischen Tensor bestimmt /39/, dessen Diagonalelemente nach der Hauptachsentransformation die Quadrate der drei Halbachsen des Schwingungsellipsoids darstellen.

 $\Gamma \rightarrow$ bestimmt sich dann zu:

$$\Gamma_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} U_{ij} x_{i}^{\vec{n}} x_{j}^{\vec{n}}$$
(3.48)

U_{ii}= Schwingungstensor

und die Wahrscheinichkeit, ein Atom \tilde{r} am Ort $\dot{u}^{\tilde{r}} = (u_1, u_2, u_3)$ zu finden, ergibt sich aus:

$$W(\vec{u}^{\vec{r}}) = (2\pi)^{-3/2} (\det U)^{-1/2} \exp \{-\frac{1}{2} (\sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} U_{ij}^{-1} u_{ij})\} (3.49)$$

Sind alle Nichtdiagonalelemente des Tensors gleich Null, was durch Röntgenbeugungsmessungen bestätigt wurde /38/, so kann $W(\overrightarrow{u}^r)$ als Produkt dreier Gaußfunktionen dargestellt werden:

$$W(\vec{u}^{T}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi u_{11}}} e^{-\frac{u_{1}^{2}}{2u_{11}}} - \frac{1}{\sqrt{2\pi u_{22}}} e^{-\frac{u_{2}^{2}}{2u_{22}}} - \frac{1}{\sqrt{2\pi u_{33}}} e^{-\frac{u_{3}^{2}}{2u_{33}}} (3.50)$$

3.2.4 Berechnung der Rückstreuausbeute

3.2.4.1 Theoretischer Ansatz

Im Channelling-Experiment wird als wesentliche Größe die Zahl der rückgestreuten Teilchen als Funktion der Tiefe registriert. Will man experimentelle Ergebnisse mit den theoretischen Modellen vergleichen, so muß man aus der Kenntnis der Trajektorien der geführten Teilchen ebenfalls die Ausbeute der Rückstreuprozesse berechnen. In der allgemeinen Formulierung ergibt sich die gesamte Rückstreuausbeute durch:

$$Y(E_{o}) = \int_{min}^{E_{o}} \int \int \int \int \int V (E,\vec{r}',\theta') \sigma(E,\theta') b(|\vec{r}-\vec{r}'|) f(\vec{r}) d\vec{r}' d\vec{r} d\Omega d\Omega' dE$$

$$(3.51)$$

 $Y(E_{o})$ stellt dabei die Fläche unter einem Rückstreuspektrum dar.

 $W(E,\vec{r'},\theta')$ ist die Zahl der einfallenden Ionen am Ort $\vec{r'}$ im Volumenelement $d\vec{r'}$, im Energieintervall (E,E +dE) und mit einem momentanen Bahnwinkel zur Detektorrichtung im Winkelintervall ($\theta', \theta' + d\theta'$).

 $\sigma(E, \theta')$ bedeutet den Rutherford-Wirkungsquerschnitt bei der Energie E und dem Rückstreuwinkel θ' .

 $b(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ stellt die Wahrscheinlichkeit dar, den richtigen Stoßparameter zu haben, wobei \vec{r} für den Ort des Atoms und \vec{r}' für den Ort des Ions steht. Durch $\sigma(\mathbf{E}, \theta')$ ist zwar der Stoßparameter für einen Stoß unter dem Winkel θ' schon festgelegt, es muß jedoch durch $b(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ die Wahrscheinlichkeit dafür angegeben werden, daß sich im Abstand dieses Stoßparameters vom Atom auch ein Ion befindet.

 $f(\vec{r})$ stellt die Ortsverteilung der Gitteratome dar.

Das Integral $\int \dots d\Omega$ integriert über den endlichen Detektorraumwinkel $\overline{\Omega}$ und das Integral $\int \overline{\Omega} \dots d\Omega'$ berücksichtigt, daß die einfallenden Teilchen zum Zeitpunkt eines Stoßes mit einem Kristallatom jeweils unter ganz verschiedenen Winkeln zum Detektor laufen. Ω_1 umfaßt dabei alle auftretenden Winkel zwischen Teilchenbahnrichtung und Detektor. E_{min} ist die minimale Teilchenenergie, die ausreicht, einen Rückstreuprozess zu machen und in den Detektor zu gelangen. Da der Wirkungsquerschnitt für 2 MeV-He⁺-Teilchen, die mit $\theta_{L} = 165^{\circ}$ in den Raumwinkel $\overline{\Omega} = 4.6 \cdot 10^{-3}$ sterad rückgestreut werden, $\sigma \approx 3 \cdot 10^{-11}$ Å² beträgt, ergibt sich ein linearer Abstand Atom-Ion von $\approx 3.10^{-60}$ (zum Vergleich: der Gitterparameter d beträgt 4.72 Å und der Thomas-Fermi-Abschirmparameter a ≈ 0.16 Å). Es erscheint also gerechtfertigt, b $(|\vec{r} - \vec{r'}|)$ durch die Dirac'sche δ -Funktion zu ersetzen: b $(|\vec{r} - \vec{r'}|) \neq \delta(|\vec{r} - \vec{r'}|)$ Damit ergibt sich:

$$Y(E_{o}) = \int_{min}^{E_{o}} \int \int \int W(E,\vec{r},\theta') \sigma(E,\theta') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega d\Omega' dE \qquad (3.52)$$

$$E_{min} \Omega_{1} \overline{\Omega} V$$

Wenn man nun bedenkt, daß sich θ_{L} auf Grund des endlichen Detektorraumwinkels $\overline{\Omega}$ nur wenig verändert, da $\overline{\Omega}$ sehr klein ist, so läßt sich nach dem Mittelwertsatz die Integration über $\overline{\Omega}$ ausführen, indem man einen mittleren Rückstreuwinkel $\overline{\theta}'$ einführt:

$$Y(E_{o}) = \overline{\Omega} \int_{E_{min}\Omega_{1}}^{E_{o}} \int W(E,\vec{r},\vec{\theta}') \sigma(E,\vec{\theta}') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega' dE \qquad (3.53)$$

Damit läßt sich die Rückstreuausbeute in Abhängigkeit der momentanen Energie E berechnen.

3.2.4.2 Durchführung in der Rechnung

Die Verteilungsfunktion $W(E, \vec{r}, \vec{\Theta}')$ läßt sich aus der Kenntnis der Trajektorien gewinnen und es wäre also prinzipiell möglich, $Y(E_{O})$ zu berechnen oder, wenn nur die Rückstreurate interessiert, $\frac{\partial Y(E_{O})}{\partial E}$, also die Anzahl rückgestreuter Teilchen pro Energieintervall (das eigentliche Rückstreuspektrum):

$$\frac{\partial Y(E)}{\partial E} = \overline{\Omega} \qquad \int \int W(E, \vec{r}, \overline{\Theta}') \sigma(E, \overline{\Theta}') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega' \qquad (3.54)$$

$$\frac{\partial Y(E)}{\partial E} = \Omega_1 \quad V$$

Es besteht allerdings auch die Möglichkeit, ohne explizite Kenntnis von $W(E, \vec{r}, \vec{\theta}')$ sich das Rückstreuspektrum in (3.54) zu verschaffen.

Bei jedem Stoß eines geführten Ions mit einem Gitteratom wird mit Hilfe des Stoßparameters die Wahrscheinlichkeit für einen Rückstreuprozess:

$$P(E,\vec{r}) = \overline{\Omega} \cdot \sigma(E,\overline{\theta}') \cdot f(\vec{r})$$
(3.55)

berechnet, wobei für f(\vec{r}) die in 3.2.3.4 hergeleitete Gauß-Funktion der Wahrscheinlichkeitsdichte für Gitteratome eingesetzt wird. Diese Rückstreuwahrscheinlichkeiten werden im entsprechenden Energieintervall (E_k, E_k +dE) und dem entsprechenden Tiefenintervall abgespeichert und aufsummiert, wobei E_k sich als Energie nach dem Stoß ergibt: $E_k = k \cdot E$ (k = kinematischer Faktor).

Die Umrechnung in das mit dem Experiment vergleichbare Rückstreuspektrum erfolgt hinterher, indem die endgültige Austrittsenergie nach Abzug des Energieverlustes beim Weg vom Stoßort zum Detektor bestimmt wird. Da die rückgestreuten Teilchen nicht dem Channelling-Prozess unterliegen, braucht zur Berechnung des Energieverlustes nicht der in 3.2.3 beschriebene stoßparameterabhängige Ausdruck verwendet werden, sondern es genügt, eine für polykristalline Targets gültige Formel anzuwenden. Hierwurde ein Polynom fünften Grades benutzt, dessen Koeffizienten durch Anpassung an gemessene energieabhängige Energieverlustkurven gewonnen wurden /28/. Die tabellierten Werte sind für He⁺-Teilchen angegeben, lassen sich aber leicht für andere Ionen umrechnen, wie in 3.2.3.3 gezeigt wurde.

4. Vergleich der Modellrechnungen für den realen Kristall mit dem Experiment

4.1 Test des Programms für Vanadium und Molybdän Einkristalle

Vor der Anwendung auf komplizierte Strukturen wurde das Binäre-Stoß-Modell an einem einfachen Strukturtyp getestet, sowie das Programm auf Fehler überprüft. Zum Vergleich wurden experimentelle Resultate von Systemen herangezogen, für die die für die Theorie wesentlichen Parameter wie thermische Schwingungsamplituden und Energieverlustwerte sehr gut bekannt sind.

Es wurden hierfür die Übergangsmetalle V und Mo gewählt, weil die krz-Struktur in [100]-Richtung programmtechnisch nicht sehr aufwendig zu realisieren ist und weil für die beiden Elemente sehr gute Vergleichsmessungen zur Verfügung standen /40/.

Zum Vergleich zwischen Theorie und Experiment dienten die Größen χ_{\min} und $\psi_{1/2}$ und zwar als Funktion der Eindringtiefe, wie schon in 2.1.2 beschrieben. Dabei werden die theoretischen Werte genauso gewonnen wie die experimentellen, indem man nämlich die Rückstreuspektren bei verschiedenen Kippwinkeln berechnet und dabei in die Energiespektren bei Energiewerten, die der gewünschten Tiefe entsprechen, Fenster setzt.

Die berechneten Energieverlustwerte stimmen ohne jegliche Anpassung für den Random-Fall gut mit den Werten von /28/ überein.

Das Random-Spektrum wurde berechnet, indem die Richtung des einfallenden Strahls gegen [100]-Richtung des Kristalls um θ = 15[°] verkippt wurde und dabei die Kippebene ϕ (siehe Anhang B) während der Rechnung um $\pi/2$ gedreht wurde.

Zur Berechnung der winkelabhängigen Ausbeutekurven wurde $\phi = 5^{\circ}$ gewählt; Bezugsebene ist hierbei die x z -Ebene des Kristallkoordinatensystems (siehe Anhang B).

Ergebnisse für Vanadium:

Als thermische Schwingungsamplitude wurde der für Raumtemperatur angegebene Wert von 0.085 Å verwendet /21/. Zur Analyse wurden 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen verwendet.

Kanalzahl	Tiefe[A]	X _{min} .	$\chi_{min.}^{Theor.}$	$\psi_{1/2}^{\text{Exp.}}$ [Grad]	$\psi_{1/2}^{\text{Theor.}}$ [Grad]
376 ± 8	410 ± 275	0.04 ± 0.005	0.023 ± 0.004	0.63 ± 0.02	0.75 ± 0.02
350	1300		0.021		0.70
330	2000	0.048	0.021	0.57	0.67

Die Fehlerangaben bei den experimentellen Werten für χ_{\min} entsprechen dem statistischen Zählratenfehler sowie für $\psi_{1/2}$ der Ablesegenauigkeit der Winkel-angaben.

Die Werte von $\chi_{\min}^{\text{Theor.}}$ liegen doch beträchlich unter den Werten von $\chi_{\min}^{\text{Exp.}}$, während $\psi_{1/2}$ in der Rechnung um etwa 0.1° größer ist. Gründe für solche Abweichungen können darin liegen, daß in der Rechnung noch keine amorphe Oberflächenschicht simuliert wurde. Bei Annahme einer Schichtdicke von etwa 20 Å, was einer Strahlaufweitung von 0.1° entspricht, nahmen die berechneten Werte von χ_{\min} um 0.5 % zu und $\psi_{1/2}$ nahm um 0.03° ab.

Der Hauptgrund für die Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment in $\psi_{1/2}$ liegt wohl darin, daß die Kippebene beim Experiment nicht bekannt war und dieser Effekt gerade bei krz-Strukturen nicht zu vernachlässigen ist. Verschiedene Messungen haben gezeigt, daß Abweichungen bis zu 10 % in $\psi_{1/2}$ nicht ungewöhnlich sind /41/.

Ergebnisse für Molybdän:

Die verwendete thermische Schwingungsamplitude betrug 0.05 Å /21/. Zur Rückstreuung wurden 2 MeV- 4 He $^{+}$ -Teilchen verwendet.

Kanalzah1	Tiefe [Å]	Exp. X _{min.}	$\chi_{\min}^{\text{Theor.}}$	$\psi_{1/2}^{\text{Exp.}}$ [Grad]	$\psi_{1/2}^{\text{Theor.}}$ Grad
432 ± 8	510 ± 230	0.015 ± 0.005	0.012 ± 0.006	1.07 ± 0.02	1.20 ± 0.02
388 ± 8	1770 ± 230	0.019 ± 0.005	0.017 ± 0.007	1.00	1.11

Für Mo ist die Übereinstimmung in χ_{\min} ausgezeichnet. Bei den $\psi_{1/2}$ -Werten zeigen sich Abweichungen von etwa 0.1°. Als Ursache dürfte die bei den Ergebnissen für V schon erwähnte Tatsache gelten, daß auch hier die Kippebene nicht bekannt war. Eine Strahlaufweitung durch eine Oberflächenschicht von 20 Å zeigte in der Rechnung eine Abnahme in $\psi_{1/2}$ von etwa 0.03°, während bei χ_{\min} kein Einfluß durch die Strahlaufweitung festgestellt werden konnte.

Die Tiefenabhängigkeit von $\psi_{1/2}$ stellt sich sowohl im Experiment als auch in der Rechnung als sehr stark heraus, wobei die Abnahme von $\psi_{1/2}$ mit steigender Tiefe auch quantitativ in der Rechnung richtig wiedergegeben wird.

Diese Tests mit den krz-Strukturen V und Mo haben im wesentlichen eine Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ergeben. Dies zeigt, daß die physikalischen Prozesse beim Channelling-Effekt durch das Binäre-Stoß-Modell richtig beschrieben werden. Allerdings haben diese ersten Untersuchungen auch ergeben, daß der Einfluß des Kippwinkels bei krz-Strukturen nicht zu vernachlässigen ist und für genaue quantitative Vergleiche unbedingt im Experiment zu bestimmen ist. Als erste Testläufe sind die Ergebnisse jedoch durchaus genügend.

4.2 Diskussion der Ergebnisse für V₃Si

4.2.1 Jntersuchung der Fluß- und Energieverteilungen

Schießt man lateral gleichverteilte Ionen auf einen amorphen Festkörper, so wird sich im Target in lateraler Richtung ebenfalls eine Gleichverteilung einstellen; dasselbe geschieht, wenn man den Strahl in willkürlicher Orientierung auf einen Einkristall richtet. Änderungen in der Flußverteilung ergeben sich erst, wenn der einfallende Ionenstrahl parallel zu einer niedrig indizierten Kristallrichtung oder -ebene ausgerichtet ist. Es stellt sich dann nämlich ein Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit geführter Teilchen an den Stellen des Kanals ein, an denen das geringste Potential herrscht, also vorwiegend in Kanalmitte und ein Minimum an Orten eines Potentialmaximums /42/. Die Auswirkungen dieses sogenannten "Flux-peaking"-Effekts wurden schon in 2.1.1. erläutert.

In Abb. 12 sind Flußverteilungen von He⁺-Teilchen für V₃Si in [100]-Richtung gezeigt. Die Profile wurden entlang einer Ebene registriert, die von den [100]-Flächendiagonalen gebildet wird. Die Verteilungen sind jeweils über 100 Einheitszellengemittelt und für verschiedene Tiefen aufgenommen. Zur Veranschaulichung dient Abb. 8.

Wie erwartet, bilden sich Maxima der Flußverteilung für niedrige Potentialwerte, während die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Stelle der starken V-Ketten Null wird. Die zwei Nebenminima rühren davon her, daß an den Stellen der Einheitszelle das Potential relative Maxima bildet, also eine Art Sattelpunkt darstellt. Allerdings verschwindet hier der Fluß nicht völlig. Klar sichtbar wird auch in Abb. 12, daß der Fluß in einer Tiefe von 1180 Å zwar schon deutlich ausgebildet ist, jedoch seine volle Höhe erst bei 3000 Å erreicht hat. An den Ecken der Einheitszelle sind dagegen Oszillationen sichtbar.



Abb. 12 Flußverteilung geführter Teilchen für [100] in verschiedenen Tiefen. Die Profile wurden jeweils entlang der Flächendiagonalen der Streuebene registriert und über 100 Einheitszellen gemittelt. Der Fehlerbalken entspricht der Statistik von 400 einlaufenden Teilchen.

Zu erwähnen ist noch, daß die Verteilungen nicht linear in Richtung der Diagonalen normiert sind, sondern in Bezug auf die ganze Fläche der projizierten Einheitszelle.

Abb. 13 zeigt die Energieverteilungen in den gleichen Tiefen. Gemittelt wurde wieder über 100 Einheitszellen. Die gestrichelten Linien zeigen die für den Random-Fall jeweils nach der Bragg'schen Regel /13/ berechnete Energie mit Energieverlustwerten für die Einzelelemente nach Ziegler und Chu /28/.

Man erkennt deutlich die stark verminderte Energie an der Stelle der starken V-Ketten, was auf besonders hohen Energieverlust in der Nähe der Atomketten zurückzuführen ist. Dies wird auch unmittelbar verständlich, wenn man bedenkt, daß die erhöhte Dichte der Rumpfelektronen in Kettennähe den Energieverlustbeitrag durch Stöße mit diesen gebundenen Elektronen erhöht. Ebenso ist klar, daß in Kanalmitte, wo nur die Beiträge der Stöße mit freien Elektronen und der Plasmonanregung ins Gewicht fallen, die Energie der geführtenTeilchen höher ist als im Random-Fall.

Diese Unterschiede werden umso ausgeprägter, je größer die Eindringtiefe der einfallenden Teilchen ist. Wesentlich ist auch, daß an der Stelle des Potentialsattelpunktes ein relatives Energieminimum in größerer Tiefe ausgeprägt wird. Dies deutet darauf hin, daß der Beitrag der Rumpfelektronen von mehreren Atomen



Abb. 13 Energieverteilung geführter Teilchen für [100] in verschiedenen Tiefen. Die Profile wurden entlang der Flächendiagonalen der Streuzellen registriert und über 100 Einheitszellen gemittelt. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Energie von in Random-Richtung einfallenden Teilchen in der selben Tiefe.

- 40 -

ausreicht, um einen gegenüber der Umgebung doch merklich höheren Energieverlust zu verursachen, obwohl er in solcher Entfernung von den Ketten schon sehr schwach ist.

Zu erwähnen ist noch, daß diese Untersuchungen der Flußprofile wie auch die folgenden Rechnungen zur Untersuchung der beiden Parameter χ_{\min} und $\psi_{1/2}$ durchgeführt wurden, indem als Form der thermischen Schwingungen der V-Atome ein Rotationsellipsoid nach /38/ angenommen wurde. Die numerischen Werte der thermischen Schwingungsamplituden betragen hierbei:

$$\sqrt{u_{11}} = 0.067 \text{ Å}$$

 $\sqrt{u_{22}} = 0.076 \text{ Å}$

Die Schwingungsform der Si-Atome wird als isotrop angenommen. Die Schwingungsamplitude beträgt:

$$\sqrt{u^2} = 0.075 \text{ Å}.$$

Eingehende Untersuchungen des thermischen Schwingungsverhaltens sind in 4.2.4 aufgeführt.

4.2.2 Vergleich der tiefenabhängigen Parameter χ_{min} und $\psi_{1/2}$ für das V-Untergitter

Der Schwerpunkt der theoretischen Untersuchungen des Channeling-Effekts in V_3 Si lag im Vergleich mit Rückstreuergebnissen aus Experimenten, die von O. Meyer /16/ und L.R. Testardi et al. /43/ durchgeführt wurden.

Es handelt sich hierbei um Rückstreuexperimente, die mit Hilfe von 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen an V₃Si-Einkristallen in den Kristallrichtungen [100] und [110] durchgeführt wurden. Zum Vergleich zwischen Theorie und Experiment wurden die beiden Größen χ_{min} und $\psi_{1/2}$ aus winkelabhängigen Ausbeutekurven bestimmt.

Diese Art von Experimenten wurde mit dem Monte-Carlo-Programm simuliert und die Ausbeutekurven zusammen mit den experimentellen Daten aufgetragen. Die Ergebnisse sind in Abb. 14 dargestellt; die Kreise in der Abbildung stellen die experimentellen Werte dar, wobei die statistischen Fehler so klein sind, daß sie in die Größenordnung der Kreise fallen. Die durchgezogenen Linien stellen die theoretischen Resultate dar. Die Tiefe des Energiefensters lag bei etwa 470 Å, die Fensterbreite war 500 Å. Der Vergleich zeigt, daß die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment sehr gut ist. Für [100] verläuft die theoretische Ausbeutekurve ab 0.8° etwas steiler als die experimentelle Kurve; in [110] liegen die mit der Monte-Carlo-Methode berechneten Werte im Bereich von 0.0° bis 0.4° über den experimentellen.



Abb. 14 Theoretische und experimentelle winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110], registriert in einer Tiefe von 470 Å. Die Fensterbreite betrug 500 Å.

Genauer sind die Abweichungen in den Abbildungen 15 a,b und 16 a,b dargestellt. Abb. 15a zeigt χ_{\min} als Funktion der Tiefe für [100]. Im Experiment wurden Fenster gesetzt bei 470 und 1810 Å, in der Rechnung wurden 5 Fenster in verschiedenen Tiefen gewählt. Die horizontalen Balken zeigen die eingestellte Fensterbreite. Die vertikalen Balken der theoretischen Werte geben die nach AnhangA bestimmten statistischen Fehler an. Der Kreis bei der Tiefe 0 stellt den zur Oberfläche extrapolierten Wert nach /43/ dar. Der Zusatz $\Delta \Psi = 0.0^{\circ}$ in der Symbolerläuterung bedeutet, daß in den Anfangsbedingungen die effektive Strahldivergenz mit 0[°] angenommen wurde, oder anders ausgedrückt, daß die amorphe Oberflächenschicht des realen Kristalls vernachlässigt wurde. Der Maßstab für χ_{\min} wurde sehr stark gedehnt, um die Abweichungen zu verdeutlichen.

Diese Darstellung zeigt eine Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment innerhalb der Fehlergrenzen. Daß der Wert des ersten Fensters etwasniedriger liegt, ist vermutlich auf die fehlende Oberflächenschicht in der Rechnung zurückzuführen.

In Abb. 15b ist nun der Unterschied nach Rechnung mit einer Strahldivergenz von 0.1[°] dargestellt. Dabei wurden die Einschußrichtungen der einzelnen Teilchen um die ideale Einschußrichtung mit einer Standardabweichung von 0.1[°] in zwei aufeinander senkrecht stehenden Ebenen normalverteilt angenommen.

Diese Strahlaufweitung durch eine amorphe Oberflächenschicht wurde gefunden, als mit dem Monte-Carlo-Programm eine amorphe Schicht von etwa 20 Å simuliert wurde. Die Simulation geschah wie bei der Bestimmung des Random-Rückstreuspektrums durch Verkippen der [100]-Kristallachse um 15⁰ gegen die Strahlrichtung und





Drehung der Kippebene während der Rechnung um $\pi/2$. Die Teilchen wurden parallel eingeschossen und nach Durchlaufen der Schicht die Abweichung von der ursprünglichen Einfallsrichtung registriert. Als Ergebnis der Rechnung mit aufgeweitetem Strahl ist zu sehen, daß der Punkt des ersten Fensters jetzt höher gerückt ist, die übrigen Werte zeigen im Rahmen der statistischen Genauigkeit keine wesentlichen Abweichungen. Abb. 16a zeigt den Vergleich zwischen Theorie und Experiment für [110]. Die Symbole haben die gleiche Bedeutung wie in 15a.

Der von L.R. Testardi et al. angegebene /43/, extrapolierte Wert von χ_{\min} liegt über den von O. Meyer /16/ gemessenen Werten. Die berechneten Daten stimmen mit beiden Experimenten im Rahmen der Fehlergenauigkeit überein. Die Tatsache, daß der χ_{\min} -Wert bei 1800 Å um einiges unter dem experimentellen liegt, ist vermutlich, wie man an der Lage der anderen theoretischen Punkte sieht, rein statistisch bedingt.

Die Ergebnisse unter Berücksichtigung der Simulation einer Oberflächenschicht sind in Abb. 16b aufgetragen. Der oberflächennächste Werte für χ_{min} ist angestiegen, die übrigen Werte haben sich nur geringfügig geändert.

Insgesamt läßt sich sagen, daß eine ausgleichende Gerade durch die χ_{\min} -Werte bei $\Delta \psi = 0.1^{\circ}$ etwa 1 % über der Geraden durch die χ_{\min} -Punkte bei $\Delta \psi = 0.0^{\circ}$ verlaufen würde. Das wiederum bedeutet, daß eine Oberflächenschicht von etwa 20 Å Dicke die experimentellen Ergebnisse nicht wesentlich verfälschen kann. Zum Vergleich mit dem realen Kristall können durchaus Resultate einer Simulations-rechnung ohne Oberflächenschicht hinzugezogen werden. Diese Tatsache stärkt das Vertrauen in die Anwendung der Channelling-Meßmethode.

Vergleichsdaten für $\psi_{1/2}$ in [100] sind in Abb. 17a gegeben. Es wurde $\psi_{1/2}$ in verschiedenen Tiefen aus den entsprechenden Ausbeutekurven bestimmt und mit den beiden experimentellen Werten verglichen. Der senkrechte Fehlerbalken mit einem Wert von 0.02° entspricht etwa der im Rahmen des statistischen Fehlers möglichen Genauigkeit bei der Bestimmung von $\psi_{1/2}$ durch Interpolation der diskreten Werte der theoretischen Ausbeutekurven. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ist auf den ersten 2000 Å zufriedenstellend. Erst in größerer Tiefe weichendie berechneten Werte nach oben ab. Die Ursachen für dieses Phänomen liegen wohl in der Tatsache, daß die geführten Teilchen durch Defekte im realen Kristall eine zusätzliche Erhöhung der Querenergie erfahren, was zu einer rascheren Abnahme in $\psi_{1/2}$ führt.

In Abb. 17b sind die Resultate beiÄnderung der anfänglichen Querenergie durch eine effektive Strahldivergenz von $\Delta \psi = 0.1^{\circ}$ dargestellt. Man sieht, daß insgesamt eine sehr schwache Abnahme von $\psi_{1/2}$ stattfindet; d.h., daß von sehr dünnen Oberflächenschichten $\psi_{1/2}$ kaum beeinflußt wird. Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung zum Verhalten von χ_{min} .

Die winkelabhängige Ausbeute wurde auch für [110] gerechnet und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Die Resultate sind in Abb. 18 a,b dar-





gestellt. In Abb. 18a sind die Ergebnisse der Rechnung ohne Oberflächenschicht zusammen mit experimentellen Daten aufgetragen. Die theoretischen Werte liegen im Bereich der ersten 2000 Å über den experimentellen Werten, jedoch innerhalb



Abb. 17 Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ für [100] in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ zusammen mit Simulationsergebnissen bei nicht aufgeweitetem Strahl ($\Delta \Psi = 0.0^{\circ}$) dargestellt. Im unteren Bild sind die Unterschiede bei Rechnung mit und ohne Strahlaufweitung durch eine Oberflächenschicht von 20 Å dargestellt.

der Fehlerangaben; für größere Tiefen ist die Abweichung wie für [100] etwas größer. Es bestätigt sich also auch für [110], daß $\psi_{1/2}$ nach der Rechnung schwächer mit der Tiefe abnimmt als im Experiment.

Abb.18b zeigt wieder die Untersuchung der Auswirkung einer Oberflächenschicht auf die Größe von $\psi_{1/2}$. Das Diagramm zeigt, daß für [110] der Einfluß der Aufstreuung des He-Strahls durch die dünne amorphe Schicht im gerechneten Tiefenbereich zu vernachlässigen ist.

Im Unterschied zu den Untersuchungen an krz-Strukturen zeigt sich in V_3 Si offensichtlich, daß die Tiefenabhängigkeit von $\psi_{1/2}$ sehr viel schwächer ausgeprägt ist alsbeim idealen Kristall und daß sich die Auswirkung der amorphen Oberflächenschicht auf $\psi_{1/2}$ ebenfalls als weitaus schwächer herausstellt.

Ein weiterer Diskussionspunkt ist der Einfluß der Kippebene auf $\psi_{1/2}$, der bei der Untersuchung der krz-Strukturen als Hauptgrund für die Abweichung zwischen Theorie und Experiment angegeben wurde. Daraufhin wurden für V_3 Si Rechnungen zur Bestimmung der winkelabhängigen Ausbeutekurven bei verschiedenen Kippebenen durchgeführt. Gefunden wurden für [100] und [110] maximale Änderungen in $\psi_{1/2}$ von 0.03°, wobei die Extremwerte von $\psi_{1/2}$ nur geliefert wurden, wenn die Kippebene mit einem planarem Kanal zusammenfiel oder unter sehr kleinem Winkel gegen diesen Kanal verkippt war. Bei anderen Kippebenen ergab sich im Rahmen der Fehlergenauigkeit keine Abweichung in $\psi_{1/2}$. Die Form der winkelabhängigen Ausbeutekurven gibt Ausschluß darüber, ob die Kippebene mit einem planarem Kanal zusammenfällt.

Für die Rechnungen in [100] wurde die Kippebene $\phi = 30^{\circ}$ gewählt, in [110] $\phi = 5^{\circ}$; die Bezugsebene ist wieder die xz -Ebene des Kristallkoordinatensystems (siehe Anhang B).

Als Abweichung vom ursprünglichen Binären-Stoß-Modell wurden bei dem in dieser Arbeit verwendeten Monte-Carlo-Programm die Trajektorien und Rückstreuwahrscheinlichkeiten durch Wechselwirkung der eingeschossenen Teilchen mit allen den Kanal umgebenden Atomen einer Netzebene berechnet. Eine Vergleichsrechnung, wobei nur die Wechselwirkung mit dem jeweils nächsten Atom in einer Ebene berechnet wurde, zeigte den wesentlichen Einfluß dieser Methode. $\psi_{1/2}$ war nämlich nach dieser Rechnung um 0.03° , χ_{min} um 0.5 % angewachsen. Damit ist erwiesen, daß der Einfluß der umliegenden Atome nicht vernachlässigt werden darf.



Abb. 18 Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ für [110] in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ zusammen mit Simulationsergebnissen bei nicht aufgeweitetem Strahl ($\Delta \psi = 0.0^{\circ}$) dargestellt. Im unteren Bild sind die Unterschiede bei Rechnung mit und ohne Strahlaufweitung durch eine Oberflächenschicht von 20 Å dargestellt.

4.2.3 Vergleich der Parameter χ_{min} und $\psi_{1/2}$ für das Si-Untergitter

Die experimentellen Schwierigkeiten bei der Untersuchung des Si-Untergitters wurden schon in 2.1.3 besprochen. Die Rechnung kann im Vergleich dazu das Problem, die Ausbeute der Rückstreuprozesse der He⁺-Teilchen mit den Si-Atomen von denen mit den V-Atomen zu trennen, umgehen, indem die berechneten Rückstreuwahrscheinlichkeiten getrennt abgespeichert werden. Auf diese Weise können durch Simulation einer Rückstreurechnung Vergleiche mit Ergebnissen von Kernreaktionen gezogen werden.

Es muß dabei allerdings gewährleistet sein, daß die Energieabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte sich nicht stark unterscheiden. Da der elektronische Energieverlust bei Deuteronen sehr klein ist, kann dies bei der Rechnung über 2000 Å als gegeben angesehen werden. Natürlich müssen Ionensorte und Einschußenergie den experimentellen Werten entsprechen.

Im Experiment wurde die ²⁸Si(d,p₁₀)²⁹Si-Kernreaktion verwendet. Die Einschußenergie betrug 1700 keV. Das Energiefenster zur Bestimmung der winkelabhängigen Ausbeutekurven sitzt in der Nähe der Oberfläche und mittelt über einige Tausend Å (siehe Abb. 7). Eine genaue Energieeichung wurde nicht durchgeführt; deshalb lassen sich keineexakten Werte angeben.

Im Monte-Carlo-Programm wurde ein Rückstreuexperiment mit 1700 keV – Deuteronen simuliert und über die ersten 2000 Å gemittelt. Die Ergebnisse sind in der nachstehenden Tabelle gelistet, sowie in Abb. 19 dargestellt.

	$\chi^{exp.}_{min.}$	theor. X _{min}	$\psi_{1/2}^{\text{exp.}}$ [Grad]	$\psi_{1/2}^{\text{theor.}}$ [Grad]
[100]	0.09 ± 0.01	0.069 ± 0.013	0.35 ± 0.01	0.36 ± 0.02
[110]	0.18 ± 0.01	0.089 ± 0.015	0.29 ± 0.01	0.31 ± 0.02

Die Übereinstimmung der Halbwertsbreiten der winkelabhängigen Ausbeutekurven $\Psi_{1/2}$ ist in beiden Kristallrichtungen sehr gut; die minimalen Ausbeuten χ_{\min} dagegen zeigen in [110] doch eine beträchtliche Abweichung, während die Werte für [100] innerhalb der Fehlergrenzen übereinstimmen.

Der Unterschied kann jedoch durch die Tatsache erklärt werden, daß bei den theoretischen Werten keine Oberflächenschicht impliziert ist. Im Gegensatz zu den Rechnungen für ⁴He⁺-Teilchen bei der Untersuchung des V-Untergitters und auch im Gegensatz zu den Rechnungen für V und Mo, hat sich gezeigt, daß eine amorphe Oberflächenschicht bei der Untersuchung des Si-Untergitters mit Deuteronen großen Einfluß auf die Ergebnisse für χ_{min} ausübt. Rechnungen mit einem auf 0.05⁰ aufgeweiteten Deuteronenstrahl haben ergeben, daß χ_{\min} unter diesen Bedingungen in [100] auf 0.10 und in [110] auf 0.12 ansteigt; $\psi_{1/2}$ zeigt dagegen in [100] keine Änderung und sinkt in [110] auf 0.30° ab. Auf 0.05° aufgeweitet wird der Strahl durch eine amorphe Schicht, die etwa eine Dicke von 20 Å besitzt, was durchaus realistisch ist.

Da die Erfahrung zeigt, daß ein Wert nahe 0.09 nur bei sehr sorgfältiger Oberflächenpräparation zu erreichen ist, kann wohl davon ausgegangen werden, daß in [100] eine Messung mit sehr dünner Oberflächenschicht tatsächlich gelungen ist, während bei den [110]-Messungen die amorphen Schichten immer größere Dicken aufwiesen.

Man muß natürlich auch die Tatsache in Betracht ziehen, daß im Experiment die Tiefe, über die mit dem Energiefenster gemittelt wird, nicht genau angegeben werden kann. Das wäre auch ein Grund, weshalb χ_{\min} im Experiment größer sein könnte als in der Rechnung. $\psi_{1/2}$ braucht davon nicht beeinflußt zu werden, wenn die Tiefenabhängigkeit bei Deuteronen so schwach ist wie diejenige von ⁴He⁺-Teilchen.

Auf Grund dieser Untersuchung zeigt sich aber auch, daß Schlüsse auf Grund von Messungen der minimalen Ausbeute χ_{\min} zumindest für Untersuchungen des Si-Untergitters mit Hilfe von (d,p)-Kernreaktionen sehr kritisch zu betrachten sind. Dagegen scheinen die $\psi_{1/2}$ -Werte auch bei unterschiedlicher Probenpräparation relativ verläßliche Aussagen zu ermöglichen.



Abb. 19 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110] für das Si-Untergitter. In der Rechnung wurde über 2000 Å hinter der Oberfläche gemittelt.

4.2.4 Untersuchung des Schwingungsverhältens der V-Atome

Bei den bisherigen Rechnungen wurde als Modell der thermischen Schwingungen der V-Atome das anisotrope Schwingungsellipsoid aus Röntgenbeugungsmessungen nach /38/ verwendet. Die Schwingungen der Si-Atome wurden als isotrop angenommen. Da die Röntgenbeugungsmessungen das einzige Indiz für ein derartiges Schwingungsverhalten darstellen, wurden Monte-Carlo-Rechnungen durchgeführt, um die Auswirkungen der geschilderten Anisotropie auf den Channelling-Effekt in V₃Si zu untersuchen. Außerdem sollte durch Simulationsrechnungen im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen geklärt werden, ob ein derartiges Verhalten mit genügender Sicherheit bestätigt werden kann.

Dazu wurde zunächst eine mittlere isotrope Schwingungsamplitude für V berechnet:

$$\sqrt{\langle u^2 \rangle} = \sqrt{(u_{11} + 2u_{22})/3}$$

Nach /38/ ergibt sich <u²>=0.073 Å. Mit diesem Wert wurde eine winkelabhängige Ausbeutekurve simuliert. Abb. 20 zeigt die Ergebnisse der Rechnungen mit isotroper Schwingung der V-Atome im Vergleich zur Rechnung mit anisotropem Schwingungsverhalten und dem Experiment.

In [100]-Richtung zeigt sich kein Unterschied zwischen den beiden gerechneten Kurven, in [110] dagegen ist für $\psi_{1/2}$ eine Abweichung von etwa 0.04[°] sichtbar; $\psi_{1/2}$ ist bei der isotropen Rechnung kleiner geworden. Für kleine Kippwinkel ($\Theta < 0.3^{\circ}$) stimmen die beiden Kurven überein.

Man sieht deutlich, daß man sich doch an der Grenze der eindeutig nachweisbaren Effekte bewegt, wenn man auf Grund von Channelling-Messungen in Verbindung mit Monte-Carlo-Rechnungen sichere Aussagen über das Vorhandensein von anisotropen Schwingungsamplituden treffen will. Auf Grund der Resultate in [100] allein läßt sich keine Aussage machen, erst das Hinzuziehen der Ergebnisse in [110] macht den Schluß möglich, daß die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment besser ist, wenn die thermischen Schwingungen für die V-Atome als anisotrop angesetzt werden. Die Tatsache, daß der Effekt in [110] sichtbar ist und in [100] nicht, ist vermutlich darauf zurückzuführen, daß die Abstände derAtome in der Kette für [110] größer sind als in [100]. Das wiederum bedeutet, daß die Flußverteilung in der Mitte des Kanalsin [110] nicht so stark überhöht ist wie in [100], die geführten Teilchen kommen näher an die Atomketten heran und spüren so eher Veränderungen im Schwingungsverhalten der Atome.

Allerdings muß hier auch diskutiert werden, daß die experimentell bestimmten Amplituden durch Röntgenbeugung nicht mit denen durch Neutronenstreuung übereinstimmen, daß also die bisher verwendeten Werte keineswegs als gesichert angenommen werden können. An polykristallinem V₃Si wurden Phononenzustandsdichtemessungen mit Hilfe von Neutronenstreuexperimenten durchgeführt /44/ und daraus die mittleren Verschiebungsquadrate der Atome bestimmt. Die Auswertung dieser Messungen ist jedoch nicht eindeutig, da unter den V-Moden sich noch ein Untergrund von niederenergetischen Si-Moden befindet und so die Aufteilung nach den einzelnen Moden vom verwendeten Modell abhängt.

Die neuesten Rechnungen mit Hilfe eines theoretischen Modells zur Subtraktion der Si-Moden haben folgende Ergebnisse geliefert /45/:

$$\sqrt{\langle u_{v}^{2} \rangle} = 0.063 \text{ Å}$$

 $\sqrt{\langle u_{Si}^{2} \rangle} = 0.085 \text{ Å}$

die doch erheblich von den Werten der Röntgenbeugungsexperimente abweichen.

Auf Grund der bisher dargestellten Resultate der Monte-Carlo-Rechnungen läßt sich zwar aussagen, daß die von den Röntgenexperimenten gelieferten Schwingungsamplituden Simulationsergebnisse sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment liefern; es ließ sich bisher jedoch keine Aussage darüber machen, wie empfindlich sich die Wahl der thermischen Schwingungsamplitude auf die Ergebnisse der Rechnung auswirkt.

Diese Überlegungen haben Monte-Carlo-Simulationen mit den Amplituden nach /45/ gerechtfertigt, wobei zusätzlich die mittlere Schwingungsamplitude der V-Atome mit dem Anisotropiefaktor von /38/, $\frac{u_{11}}{u_{22}}$ = 0.79, auf die Diagonalelemente



Abb. 20 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Die durchgezogene Linie stellt die Ergebnisse der Rechnung mit anisotroper V-Schwingungsamplitude dar, die gestrichelte Linie die Ergebnisse der Rechnung mit isotroper V-Schwingungsamplitude.

des anisotropen Schwingungstensors aufgeteilt wurde. Damit ergab sich

$$\sqrt{u_{22}^{V}} = 0.066 \text{ Å}$$

 $\sqrt{u_{11}^{V}} = 0.058 \text{ Å}$

Die Ergebnisse der Simulation mit diesen Werten sind in Abb. 21 dargestellt.

Die Werte für χ_{\min} liegen in beiden Richtungen unter den mit den Amplituden aus Röntgenbeugungsmessungen berechneten Ergebnissen. Allerdings liegen diese Abweichungen im Bereich der Fehlerbalken. Die Unterschiede in $\psi_{1/2}$ liegen in [100] bei etwa 0.06° und in [110] bei etwa 0.08° , wobei die Amplituden aus den Neutronenstreudaten die größeren Werte für $\psi_{1/2}$ liefern, wie zu erwarten war. In Abb. 21 ist auch zu sehen, daß die Neutronenstreudaten in [100] bessere Übereinstimmung mit dem Experiment liefern für Kippwinkel $\Theta > 0.9^{\circ}$, da die mit Röntgenbeugungsamplituden berechneten Werte eine steilere Kurvenform aufweisen als die experimentellen Daten. Der Grund hierfür ist aber wohl darin zu finden, daß die experimentelle Kurve für größere Kippwinkel durch z.B. eine Mosaikverteilung des Kristalls abgeflacht ist /46/.

Der geschilderte Vergleich läßt den Schluß zu, daß die thermischen Schwingungsamplituden aus Röntgenbeugungsmessungen die Wirklichkeit besser beschreiben als diejenigen aus Neutronenstreuexperimenten. Der Grund für die Abweichung der verschiedenen Amplituden liegt wahrscheinlich nur in der Schwierigkeit der Auswertung bei Neutronenstreuexperimenten.



Abb. 21 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Die durchgezogene Linie stellt die Ergebnisse der Rechnung mit den thermischen Schwingungsamplituden aus Röntgenbeugungsexperimenten dar /38/, die gestrichelte Linie die Ergebnisse mit den Amplituden aus Neutronenstreuexperimenten /45/.

Es kann nicht ausgeschlossen werden, daß Korrelationen der thermischen Auslenkungen der Atome in V₃Si das Schwingungsverhalten beeinflussen. Da jedoch bis jetzt keine quantitativen Angaben über diesen Effekt verfügbar sind, konnten keine Untersuchungen über die Auswirkung auf den Channelling-Prozess durchgeführt werden.

5. Vergleich der Modellrechnungen für den geschädigten Kristall mit dem Experiment

5.1 Untersuchung der Schädigung mit 300 keV-⁴He⁺-Teilchen im Durchschußbereich

Eine der attraktivsten Anwendungen des Monte-Carlo-Programms ist die Untersuchung des Einflusses von Defekten auf den Channelling-Effekt. Defektanalysen sind gerade in V₃Si von großem Interesse, da Hochtemperatursupraleiter mit Al5-Struktur sehr empfindlich auf Bestrahlung reagieren; es ist jedoch nicht bekannt, von welcher Struktur die Gitterschäden sind. Aus diesen Gründen wurde versucht, einfache Punktdefektmodelle in das Programm einzubauen, um so erste Aussagen über mögliche Defekte im realen Kristall zu gewinnen.

Von O. Meyer durchgeführte Messungen an einem mit 300 keV-⁴He⁺-Teilchen bestrahlten V₃Si-Einkristall zeigten ein Ansteigen von χ_{\min} und eine Abnahme von $\psi_{1/2}$ als Funktion der Bestrahlungsfluenz bis zum Erreichen von Sättigungswerten /47/. Die Fluenzen reichten von 9 \cdot 10¹⁵ He⁺/cm² bis 1.2 \cdot 10¹⁷ He⁺/cm². Der Anstieg von χ_{\min} in [100] betrug 1.7 % bei einem Ausgangswert von 2.3 % in einer Tiefe von 470 Å. Dieser Wert war von 4 \cdot 10¹⁶ bis 1.2 \cdot 10¹⁷ He⁺/cm² konstant. Die Abnahme in $\psi_{1/2}$ betrug 0.08° von 0.72° auf den Sättigungswert 0.64°.

Als Defektmodell für die Computersimulation wurden normalverteilte statische Auslenkungen mit einer mittleren Auslenkung von 0.05 Å nach den drei Raumrichtungen angenommen.

Bei der Rechnung wurde aus dem gleichen Grund wie bei den thermischen Schwingungen die Auslenkung in Kettenrichtung vernachlässigt, sodaß also nur die Auslenkungen senkrecht dazu realisiert wurden.

Abb. 22 zeigt die winkelabhängigen Ausbeutekurven jeweils vor und nach der Bestrahlung für Experiment und Monte-Carlo-Rechnung. Die numerischen Werte sind in folgender Tabelle angegeben:

	Experiment /47/		Monte-Carlo-Rechnung	
	X _{min}	$\psi_{1/2}$ [Grad]	X _{min}	$\psi_{1/2}$ [Grad]
[100]				
ungeschädigt	C.023 ± 0.004	0.72 ± 0.01	0.010±0.008	0.70±0.02
geschädigt	0.040±0.005	0.64 ± 0.01	0.021 ± 0.01	0.63 ± 0.02
[110]				
ungeschädigt	0.035 ± 0.005	0.52 ± 0.01	0.036±0.016	0.54 ± 0.02
geschädigt	0.065±0.005	0.44 ± 0.01	0.058 ± 0.018	0.46±0.02

Die Werte für $\psi_{1/2}$ stimmen innerhalb der Fehlergenauigkeit zwischen Theorie und Experiment ziemlich gut überein. Die Resultate für χ_{min} zeigen größere Abweichungen. Der Grund hierfür liegt wohl in der Tatsache, daß die Oberflächenschicht des Kristalls nach Bestrahlung auf etwa 60 - 80 Å angewachsen war. Die Rechnungen dagegen wurden für einen Kristall ohne Oberflächenschicht durchgeführt.

Der Vergleich der Monte-Carlo-Ergebnisse nach Simulation der verlagerten Atome mit den Meßresultaten nach Bestrahlung zeigt, daß das angenommene Defektmodell Übereinstimmung liefert. Die Rechnung läßt jedoch keine Aussage über die Eindeutigkeit des Modells zu.



Abb. 22 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Es sind experimentelle Ergebnisse vor und nach Bestrahlung mit 300 keV-4 · 10¹⁶-⁴He⁺/cm² /47/ sowie theoretische Resultate bei perfektem Kristall und nach Einbau eines Defektmodells von normalverteilten statischen Verlagerungen von im Mittel 0.05 Å dargestellt.

5.2 Untersuchung der Schädigung mit 50 keV-4He+-Teilchen

5.2.1 Einbau eines Schädigung-Tiefenprofils

In 5.1 wurden Kristalldefekte untersucht, die beim Durchschuß hochenergetischer Teilchen entstehen, es konnten aber keine Aussagen über den Bereich getroffen werden, in dem die Teilchen zur Ruhe kommen. Um auch Aussagen über die Defektstruktur in diesem Bereich machen zu können, wurde folgendes Experiment durchgeführt, dessen Prinzip von E. Rimini /48/ beschrieben wurde:

Zunächst wurden Channelling-Rückstreuspektren am ungeschädigten V_3 Si-Einkristall bei den Kippwinkeln $\theta = 0.0^{\circ}$, 0.2° , 0.4° , 0.6° durchgeführt. Danach wurde der Kristall mit 1.5 $\cdot 10^{16}$ ⁴He⁺-Ionen/cm² der Energie 50 keV in Random-Richtung beschossen und anschließend wieder Rückstreuspektren bei denselben Kippwinkeln aufgenommen. Die Resultate sind in Abb. 23 dargestellt.

In den Channelling-Rückstreuspektren hat sich in einer Tiefe von etwa 2000 Å ein deutlicher Peak herausgebildet. Die Fläche dieses Peaks wächst bei Verkippung der Einschußrichtung gegen die Kanalachse an. Nach /48/ kann man nun bei Kenntnis der Fluß- und Energieverteilung der geführten Teilchen im Kanal aus der Veränderung der Peakfläche Rückschlüsse auf die Defektverteilung im Kristall ziehen.



Abb. 23 Experimentelle Rückstreuspektren vor und nach Bestrahlung mit 50 keV 1.5 · 10¹⁶-⁴He⁺/cm². Es sind sowohl das Random-Spektrum als auch Spektren unter verschiedenen Kippwinkeln zur [100]-Richtung dargestellt.

Eine rein qualitative Aussage ist aufgrund folgender Überlegung möglich:

Die Flußverteilung wird mit zunehmender Verkippung der Einschußrichtung gegen die Kanalachse immer mehr ausgeschmiert; d.h. es verlaufen immer mehr Teilchenbahnen in der Nähe der Atomketten. Wächst nun mit zunehmender Verkippung die Zahl der an verlagerten Atomen rückgestreuten Teilchen an, so kann man daraus schließen, daß die verlagerten Atome sich bevorzugt in Kettennähe befinden.

Die Computersimulation ermöglicht es nun, ein Defektmodell vorzugeben und danach das unter dieser Annahme berechnete Rückstreuspektrum direkt mit dem gemessenen Spektrum zu vergleichen. Dazu wurde in das Monte-Carlo-Programm ein Profil eingebaut, das die Anzahl von verlagerten Atomen in Abhängigkeit der Tiefe angibt. Dieses Schädigungstiefenprofil wurde mit einem Programm von D.K. Brice /49/ berechnet. Die Form dieses Profils ist in Abb. 24 dargestellt.



Abb. 24 Schädigungstiefenprofil nach D.K. Brice /40/ für 50 keV-⁴He⁺-Ionen in V₃Si.

5.2.2 Vergleich zwischen Theorie und Experiment für verschiedene laterale Defektverteilungen

Die eigentliche Defektstruktur besteht in der Art der Verlagerung der Kettenatome in den Kanal hinein, im weiteren als laterale Defektverteilung bezeichnet.

Als einfachste Art der Verlagerung kann man sich einzeln verlagerte Atome vorstellen, die willkürlich quer über den Kanal verteilt sind. Diese laterale Defektverteilung wurde in das Simulationsprogramm eingebaut, wobei die absolute Höhe der Tiefenverteilung auf 10 % Verlagerungen im Maximum der Verteilung normiert wurde; das bedeutet, daß bei der Tiefe, an der das Maximum des Tiefenprofils der Schädigungsrate sich befand, 10 % aller Gitteratome quer über den Kanal verteilt waren.

Mit dieser Defektstruktur wurden nun analog zum Experiment Rückstreuspektren bei axialem und bei verkipptem Einschuß berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 25 dargestellt.



Abb. 25 Experimentelle und theoretische Rückstreuspektren unter verschiedenen Kippwinkeln zur [100]-Richtung. Die experimentellen Daten wurden nach Bestrahlung mit 50 keV - 1.5 · 10¹⁶-⁴He⁺-/cm² erhalten, die theoretischen Daten bei Annahme eines lateralen Defektprofils von 10 % Random-verlagerten Atomen.

Man sieht, daß bei axialem Einschuß ($\theta = 0.0^{\circ}$) das theoretische Spektrum recht gut mit dem experimentellen Spektrum übereinstimmt, wobei noch wichtig zu erwähnen ist, daß in der Monte-Carlo-Rechnung nur bis zu einer Tiefe von etwa 5000 Å gerechnet wurde. Die Gültigkeit des Modells läßt sich jedoch nur bei verkipptem Einschuß überprüfen. Hierbei zeigt sich deutlich, daß das Modell der gleichverteilten Defekte der Wirklichkeit nicht entspricht, wie schon die Überlegung bezüglich der Flußverteilung ergeben hatte. Der Defektpeak gewinnt nicht, wie im experimentellen Fall, bei zunehmender Verkippung der Einschußrichtung an Fläche, sondern verschwindet immer mehr in der Dechannelling-Rate.

Aufgrund dieses Ergebnisses wurde die laterale Defektverteilung so abgeändert, daß die Wahrscheinlichkeit für eine relativ geringe Verlagerung vom idealen Gitterplatz weg größer ist als für eine große Verlagerung.

Realisiert wurde diese Wahrscheinlichkeitsverteilung durch eine statische Rechteckverteilung, deren maximale Auslenkung 0.5 Å betrug; das Maximum der Tiefenverteilung wurde mit 50 % Verlagerungen angenommen.

Die Ergebnisse der Rechnung sind in Abb. 25 dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ist zufriedenstellend. Der wesentliche Effekt, die Zunahme des Defektpeaks bei zunehmender Verkippung wird in der Rechnung wiedergegeben. Die absolute Höhe der theoretischenSpektren stimmt nicht mit der der experimentellen überein.

Dies liegt zum einen daran, daß der für dieses Bestrahlungsexperiment verwendete Kristall auf Grund von bereits vorhandenen Defekten schon vor der Schädigung Abweichungen in den experimentellen Rückstreuspektren von den theoretischen Daten zeigte. Zum anderen sind die beiden Parameter des Defektmodells, die Breite der Rechteckverteilung und absolute Anzahl der Verlagerungen nicht optimiert worden. Für eine erste Untersuchung genügt die Übereinstimmung jedoch.

Aufgrund dieser Untersuchungen läßt sich die Aussage treffen, daß das oben beschriebene Modell die von 50 keV-⁴He⁺-Teilchen am Ende ihrer Reichweite in V₃Si verursachte Schädigungsstruktur beschreibt. Die Eindeutigkeit der Defektstruktur kann auf diese Weise jedoch nicht bewiesen werden und ist auch nicht zu erwarten.



Abb. 26 Experimentelle und theoretische Rückstreuspektren unter verschiedenen Kippwinkeln zur [100]-Richtung. Die experimentellen Daten wurden nach Bestrahlung mit 50 keV-1.5 $10^{16}-^{4}$ He⁺/cm² erhalten, die theoretischen Daten bei Annahme eines lateralen Defektprofils von 50 % Random-verlagerten Atomen in einem Bereich von <u>+</u>0.5 Å um die V-Ketten.

6. ZUSAMMENFASSUNG UND ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN

Das Ziel dieser Arbeit war es, eine Werkzeug zu schaffen, das in Verbindung mit Experimenten die Möglichkeit bietet, die physikalischen Vorgänge bei der Untersuchung des Channelling-Effektes besser zu verstehen. Insbesondere sollten die Einflüsse der Änderungen verschiedener Parameter untersucht werden, die dem Experimentator nicht ohne weiteres zugänglich sind, wie z.B. die thermischen Schwingungsamplituden oder die Dicke von amorphen Oberflächenschichten. Vor allem aber sollten kristallographische Strukturtypen miteinbezogen werden, für die keine analytische Theorien mehr gültig sind oder zumindest genügend brauchbare Näherungen mehr darstellen.

Dazu wurde der Channelling-Prozess in V₃Si mit Hilfe eines Binären-Stoß-Modells nachvollzogen. Die Einheitszelle der Al5-Struktur wurde in einzelne Atomschichten aufgeteilt. In einem Monte-Carlo-Programm wurden die Trajektorien von 2 Mey-⁴He⁺-Teilchen durch Streuung an allen einen Kanal umgebenden Atomen einer Schicht berechnet. Die Ablenkwinkel der 4 He $^{+}$ -Teilchen wurden in Impulsnäherung mit Hilfe der Molière'schen Näherung des Thomas-Fermi-Potentials bestimmt. Der elektronische Energieverlust wurde aus Stößen mit gebundenen Elektronen, aus Stößen mit freien Elektronen und infolge Plasmonanregung berechnet. Die thermischen Schwingungen der Gitteratome wurden durch einen Zufallsgenerator berücksichtigt, der normalverteilte Auslenkungen liefert. Hierbei wurden die aus Röntgenbeugungsmessungen /38/ bestimmten thermischen Schwingungsamplituden verwendet. Die Rückstreuwahrscheinlichkeit wurde bei jedem Stoß Ion-Atom als Produkt der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der Gitteratome, die durch eine Gaußfunktion mit der thermischen Schwingungsamplitude als Standardabweichung gegeben ist, und dem Rutherfordwirkungsquerschnitt berechnet.

Zunächst wurde das Binäre-Stoß-Modell auf die krz-Strukturen V und Mo angewandt. Es wurden die beiden tiefenabhängigen Größen χ_{min} und $\psi_{1/2}$ aus Rückstreuspektren von 2 MeV-⁴He⁺-Teilchen mit experimentellen Ergebnissen /40/ verglichen.

Bei der A15-Verbindung V₃Si wurden die Fluß- und Energieverteilungen in Abhängigkeit der Tiefe untersucht. Die für die beiden Untergitter getrennt bestimmten Werte von χ_{min} und $\psi_{1/2}$ wurden mit experimentellen Ergebnissen /16/ verglichen. Es wurden ferner die Auswirkung der Anisotropie der thermischen Schwingungen der V-Atome auf die Rückstreuausbeute sowie die Unterschiede in den winkelabhängigen Ausbeutekurven bei Einsetzen der aus Neutronenstreumessungen bestimmten thermischen Schwingungsamplituden /45/ untersucht.

- 61 -

Die Strahlenschädigung von 300 keV- 4 He ${}^{+}$ -Ionen /47/ im Durchschußbereich konnte mit einem Defektmodell, welches normalverteilte statische Verlagerungen von im Mittel 0.05 Å annimmt erklärt werden.

Zur Simulation von Gitterschäden, die durch eine Dosis von 50 keV $1.5 \cdot 10^{16}$ $4_{\text{He}^+/\text{cm}^2}$ am Ende ihrer Reichweite verursacht werden, wurde ein Defektmodell herangezogen, welches 50 % gleichwerteilte verlagerte Atome mit einer maximalen Verlagerung von 0.5 Å annimmt.

Die hier dargestellten Ergebnisse lassen den Schluß zu, daß die verwendeten Näherungen im Rahmen der experimentellen und rechnerischen Ungenauigkeiten durchaus brauchbare Resultate liefern, die durch analytische Theorien nicht erreichbar sind. Trotzdem kann diese Arbeit über die Computer-Simulation des Channelling-Effekts in V₃Si nur ein Beginn in diesem Strukturtyp sein, da wesentliche Eigenschaften dieser Verbindung wie Größe und Anisotropie der thermischen Schwingungen, Plasmafrequenz, Korrelation der Schwingungen einzelner Atome untereinander, um nur einige zu nennen, nicht oder nicht genügend genau bekannt sind. Damit ist aber die Möglichkeit aufgezeigt, Aussagen über die Zielrichtung zukünftig geplanter Experimente zu treffen und auf diese Weise wirksame Unterstützung bei der Planung von Untersuchungen zu bieten.

A BERECHNUNG DES STATISTISCHEN FEHLERS DER RÜCKSTREUAUSBEUTE

Das Rückstreuenergiespektrum ergibt sich durch Summation der berechneten Rückstreuwahrscheinlichkeiten und wird auf die Zahl der im Experiment eingeschossenen Teilchen normiert, um die absoluten Höhen vergleichen zu können. Da die experimentell bestimmte Ladungszahl /18/ aber aufgrund der für das Goniometer nicht völlig durchführbaren Sekundärelektronenunterdrückung nicht die wirklich eingeschossene Ladung darstellt, wird mit Hilfe eines Programms zur analytischen Berechnung von Random-Rückstreuspektren /50/ die tatsächlich eingeschossene Ladung von He⁺-Teilchen bestimmt und die mit dem Monte-Carlo-Programm gewonnenen Rückstreuwahrscheinlichkeiten mit diesem Wert multipliziert. Diese Eichung wird einmal durchgeführt und genügt dann für die unter gleichen Bedingungen durchgeführten Messungen. Zur Bestimmung von χ_{min} und $\psi_{1/2}$ ist die Eichung überflüssig, da diese Werte auf das Random-Spektrum normiert sind.

Aufgrund dieser geschilderten Methode ist es unmöglich, zur Abschätzung des statistischen Fehlers die Zahl von Rückstreuereignissen pro Kanal des gerechneten Spektrums hinzuzuziehen, sondern man muß gemäß einer anderen Überlegung vorgehen.

Ausgangspunkt ist die Tatsache, daß zur Berechnung des statistischen Fehlers nur die Zahl von Teilchen herangezogen werden darf, die in der Simulation tatsächlich zur Rückstreuung beitragen. Diese Zahl läßt sich aber wie folgt abschätzen:

Angenommen, es durchlaufen n_o Teilchen die Einheitszelle von V₃Si gleichverteilt (also Random-Fall). Die Gesamtfläche der 4 hintereinander durchlaufenden Atomschichten beträgt $F_o = 4d^2$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Gitteratome in der Querebene am Ort (x,y) ist durch das Produkt zweier Gaußfunktionen gegeben (3.2.3.4); als Abschneideparameter für die Berechnung wurde in einer Dimension der Wert $x_{crit} = 4\sqrt{\langle u^2 \rangle}$ gewählt, wobei $\langle u^2 \rangle$ das mittlere Schwankungsquadrat der thermischen Schwingungen darstellt. An der Stelle $x = x_{crit}$ ist die eindimensionale Aufenthaltswahrscheinlichkeit um den Faktor 3·10⁻⁴ abgeschwächt.

Da pro Einheitszelle 6 V-Atome zu finden sind, ist die effektive Stoßfläche:

$$F_{s} = \pi \cdot 6 \cdot 16 \cdot \langle u^{2} \rangle \cdot \frac{1}{8}$$
 (A.1)

wobei der Faktor $\frac{1}{8}$ sich durch Ersetzen der Gaußfunktion durch ein Rechteckprofil ergibt. Letzteres ist notwendig, da die Teilchen entsprechend dem Abstand vom Atom unterschiedlich zu wichten wären. Pro Einheitszelle tragen also:

$$n_{s} = n_{o} \cdot \frac{F_{s}}{F_{o}}$$
(A.2)

Teilchen zur Rückstreuung bei. Die pro Kanal des Energieanalysators registrierte Zahl von Rückstreuereignissen beträgt also:

$$H = \delta E_{1} \cdot \frac{1}{\left(\frac{dE}{dx}\right)} \cdot \frac{1}{d} \cdot n_{o} \cdot \frac{F_{s}}{F_{o}}$$
(A.3)

 δE_1 = Energieeichung des Analysators in keV/Kanal

Der statistische Fehler wird zu:

$$\frac{\Delta H}{H} = \frac{\sqrt{H}}{H}$$
(A.4)

Beträgt die Breite des Energiefensters (siehe 2.1.2) w Kanäle, so ergibt sich als Fehler für den Randomwert einer winkelabhängigen Ausbeutekurve $H_{u} = w \cdot H$:

$$\frac{\Delta H}{H}_{W} = \frac{\sqrt{WH}}{W^{\bullet}H}$$
(A.5)

Mit den gewählten Werten von: :

$$\delta E_1 = 3.4 \text{ keV/Kanal}$$

 $\frac{dE}{dx} = 60 \text{ eV/A}$
 $d = 4.718 \text{ A}$
 $n_0 = 400 \text{ Teilchen}$
 $\langle u^2 \rangle = 0.0053 \text{ A}^2$
 $w = 16$

findet man

$$n_s ≈ 1$$

H ≈ 12
 $\frac{\Delta H}{H} ≈ 30 \%$
 $\frac{\Delta H}{H_w} ≈ 7 \%$

Die statistischen Fehler für unter Channelling-Bedingungen aufgenommenen Rückstreu-
spektren lassen sich nur sehr schwierig direkt berechnen, da der Teilchenfluß nicht mehr gleichverteilt ist, was die wesentliche Annahme für die Fehlerrechnung war. Die Anzahl von Rückstreuereignissen pro Energiefenster läßt sich nur über die registrierten Randomwerte zurückrechnen. Für χ_{min} = 0.02 ergibt sich so

$$\left(\frac{\overset{\Delta H}{H}}{\overset{W}{H}}\right)_{\text{Channelling}} \approx 50 \%$$

und

$$\frac{\Delta \chi_{\min}}{\chi_{\min}} = \left(\frac{\frac{\Delta H}{W}}{H}\right)_{\text{Channelling}} + \left(\frac{\frac{\Delta H}{W}}{H}\right)_{\text{Random}} \approx 57 \%$$

1

Die Fehler für die Spektren bei Einschuß mit einem Kippwinkel $\theta \neq 0^{\circ}$ werden analog über das Randomspektrum berechnet.

B <u>Umrechnung der Eingabewinkel φ und θ in die Koordinaten des</u> Kristallkoordinatensystems

Die gesamte Rechnung wird in dem mit der Einheitszelle festliegenden Koordinatensystem durchgeführt, das auch in Abb. 11 eingezeichnet wurde. Dabei fällt die z-Achse zusammen mit der Kanalrichtung, x- und y-Achse stehen jeweils senkrecht dazu und wurden der Übersichtlichkeit wegen parallel zu den Kanten der kubusförmigen Einheitszelle ausgerichtet. Der Winkel ϕ legt nun in diesem Koordinatensystem die Kippebene fest, die als x'z'-Ebene eines neuen Koordinatensystems aufgefaßt werden kann, wobei die z'-Achse parallel der z-Achse liegt. Das x'y'z'-System geht also durch Drehung um die z-Achse um den Winkel ϕ aus dem xyz-System hervor.

Der einfallende Ionenstrahl liegt nun in der x'z'-Ebene um den Kippwinkel θ gegen die z'-Achse geneigt, die Detektorrichtung befindet sich ebenfalls in dieser Ebene um den Winkel (θ + 165[°]) gegen die z'-Achse geneigt, wie in Abb. 27 dargestellt ist. Der einfallende Strahl kann im x'y'z'-System durch den Vektor:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tan \theta \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (B.1)

beschrieben werden. Im xyz-System des Kristalls läßt sich der Strahlvektor /51/ berechnen zu:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & o \\ \sin \phi & \cos \phi & o \\ o & o & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tan \theta \\ o \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi \cdot \tan \theta \\ \sin \phi \cdot \tan \theta \\ 1 \end{pmatrix}$$
(B.2)

Die Winkel in der xz-Ebene, α_x , und der yz-Ebene, α_y , zwischen Strahl und z-Achse ergaben sich aus:

$$\alpha_{x} = \arctan (\cos \phi \cdot \tan \theta)$$
 (B.3)

$$\alpha_{y} = \arctan (\sin \phi \cdot \tan \theta)$$
 (B.4)

Damit sind die für die Rechnung benötigten Anfangsquerimpulse festgelegt. Es gilt nämlich:

$$p_{x_{o}}^{rel} \equiv \alpha_{x}$$
 (B.5)

$$P_{y_0}^{re1} \equiv \alpha_y \tag{B.6}$$



Abb. 27 Geometrie des Detektors im Eingabekoordinatensystem

.

C Berechnung des Rückstreuwinkels zwischen momentaner Teilchen-Bahnrichtung und Detektor

Die Teilchenbahnrichtung ist im Koordinatensystem des Kristalls nach Anhang B gegeben durch den Vektor \vec{T} :

$$\vec{T} = \begin{pmatrix} T \\ T^{X} \\ T^{Y} \\ T^{Y} \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^{X} \\ \alpha^{Y} \\ 1 \end{pmatrix}$$
(C.1)

bei kleinen Winkeln α_x , α_y . Die Richtung zum Detektor ist in dem mit der Kippebene verbundenen Koordinatensystem festgelegt durch den Vektor \vec{D}' :

$$\vec{D}' = \begin{pmatrix} D'_{x} \\ D'_{y} \\ D'_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tan (\theta + 165^{\circ}) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(C.2)

Der Vektor \vec{T} wird in einen Vektor \vec{T} ' des x'y'z'-Systems transformiert durch:

$$\vec{T}' = \begin{pmatrix} T'_{x} \\ T'_{y} \\ T'_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{x} \\ \alpha_{y} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi \cdot \alpha_{x} + \sin\phi \cdot \alpha_{y} \\ -\sin\phi \cdot \alpha_{x} + \cos\phi \cdot \alpha_{y} \\ 1 \end{pmatrix} (C.3)$$

Der Winkel ξ zwischen den beiden Vektoren kann nun nach /51/ berechnet werden zu:

$$\cos \xi = 1_{T}, 1_{D}, + m_{T}, m_{D}, + n_{T}, n_{D},$$
(C.4)

wobei 1, m, n die Richtungscosinus der Vektoren \vec{T} ' und \vec{D} ' darstellen. Die Richtungscosinus des Vektors \vec{D} ' sind nach Abb. 27 gegeben durch:

$$1_{\rm p} = \cos (\theta + 165^{\circ} - 90^{\circ})$$
 (C.5)

$$m_{\rm D}^{\rm r} = 0$$
 (C.6)

$$n_{D'} = \cos (\theta + 165^{\circ})$$
 (C.7)

Die Richtungscosinus des Vektors \vec{T}' lauten nach Abb. 28:

$$1_{T'} = \frac{T'_{X}}{|\vec{T}'|}$$
(C.8)

$$m_{T}' = \frac{T'}{|\vec{T}'|}$$
(C.9)

$$n_{T'} = \frac{T'_{z}}{|\vec{T}'|} \qquad |\vec{T}'| = (T'_{x} + T'_{y} + T'_{z})^{1/2} \quad (C.10)$$

Damit berechnet sich der Rückstreuwinkel ξ nach:

$$\xi = \arccos\left(\cos\left\{\theta + 165^{\circ} - 90^{\circ}\right\} \cdot \frac{\mathbf{T}'_{\mathbf{x}}}{|\mathbf{T}'|} + \cos\left\{\theta + 165^{\circ}\right\} \cdot \frac{\mathbf{T}'_{\mathbf{z}}}{|\mathbf{T}'|}\right)$$
(C.11)



Abb. 28 Geometrie zur Berechnung des momentanen Rückstreuwinkels



- 70 -



D.2 BESCHREIBUNG DER EIN- UND AUSGABEDATEN VON CA15

Das Programm CA15 dient zur Simulation von winkelabhängigen Rückstreuausbeutekurven in A15-Verbindungen der Form A₃B, wobei für jeden Punkt der Ausbeutekurve ein durch einen vorgegebenen Parametersatz bestimmtes Rückstreuspektrum berechnet wird. Als erste Eingabevariable muß deshalb die Anzahl von zu berechnenden Datensätzen vorgegeben werden.

Allgemeine Organisation der Eingabedaten

.

FORTRAN		
Name	Format	Bedeutung
NDATA	12	Anzahl der zu rechnenden Datensätze
NX	I4	Anzahl der Rasterpunkte in x-Richtung (maximal 60)
NY	14	Anzahl der Rasterpunkte in y-Richtung (maximal 60)
MEAN	14	Anzahl der Einheitszellen, über die bei der Berechnung der Flußverteilung gemittelt wird
NLAY	14	Zu berechnende Eindringtiefe / MEAN
Α	F10.2	Gitterparameter
PART	4A4	Name des einfallenden Teilchens
ZPART	F10.2	Ladung des einfallenden Teilchens
FMPART	F10.5	Masse des einfallenden Teilchens
CRYST	4A4	Bezeichnung des Einkristalls
ZV	F10.2	Ordnungszahl des A-Atoms
FMV	F10.2	Masse des A-Atoms
ZSI	F10.2	Ordnungszahl des B-Atoms
FMSI	F10.2	Masse des B-Atoms
RHOAT	E10.3	Atomare Dichte in Atome / cm ³
TEMP	F10.2	Temperatur des Kristalls in K
ISEC	12	Steuervariable; 1 : Berechnung der 100 -Richtung 2 : Berechnung der 110 -Richtung
THV 1	F10.5	Thermische Schwingungsamplitude der A-Atome: $\sqrt{u_{11}}$
THV2	F10.5	Thermische Schwingungsamplitude der A-Atome: $\sqrt{u_{22}}$
THSI	F10.5	Thermische Schwingungsamplitude der B-Atome
Q	F10.2	Eingeschossene Gesamtladung in 10 ⁻⁷ Cb
ORIGIN	F10.2	Unterdrückter Nullpunkt der Energieeichung in keV
FWHM	F10.2	Experimentelle Auflösung; (muß gerade sein)
WIDTH	F10.2	Energieeichung in keV pro Kanal
BANGLE	F10.2	Rückstreuwinkel in Grad

OMECA	F10 5	Detektorroumwinkel in Sterad
UMEGA		Mittloro Aprogunggonorgie der A-Atome in AV
EXCIIV	F10.2	Mittlere Anregungsenergie der R-Atome in eV
EACTIS DI CMEN	F10.2	Placesenergie der Verbindung in ov
FLOPEN	F10.2	Angehl der freien Flektrenen pro A-Atom
ZVALI	F10.2	Anzahl der freien Elektronen pro A-Atom
ZVALZ	F10.2	Anzahl der freien Elektronen pro B-Alom
EPCOV(1)	E10.3	
(2)	E10.3	
	E10.3	Energieverlustkoeffizienten der A-Atome
(4)	E10.3	
··· (5)	E10.3	
(6)	E10.3	
EPCOSI(1)	E10.3	
(2)	E10.5	
(3)	E10.3	Energieverlustkoeffizienten der B-Atome
··· (4)	E10.3	
(5)	E10.3	
(O)	E10.3	J Nighal awa Factleower day Kinashara in Crad
rn1 TurmA	F10.5	winkel zur restlegung der Kippebene in Grad
DEDCT	F10.5	Rippwinkel o in Grad
DEPSI	F10.3	Strantdivergenz in Grad
EU IUIIND 1	F10.5	Anrangsenergie
	14 E10 2	
	F10.3	
	F10.3	
KANDZ	F10.3	
	F10.5	Ranalhummer } der fünf Energiefenster
KANDS	F10.3	
	F10.5	
TUTND5	F10.3	
RAND5	F10.3	
ТШТЛТИ	та	Fensterbreite in Kanälen (gerade Zahl)
DPLCM	F10 5	Maximale Verlagerung von der Kette in Å
DPTMEA	F10.2	Projizierte Reichweite der ⁴ He ⁺ -Teilchen bei der
	110.2	Strahlenschädigung
PERC	F10.2	Zahl der verlagerten Atome in %

NUMEX	Il	Nummer des expe wenn O eingegeb einem experimen	rimentellen Spektrums auf File 3; en wird, findet kein Vergleich mit tellen Spektrum statt.
FMULT	F10.3	Skalierungsfakt dener Ladung an	or, um die Höhen von Spektren verschie- zugleichen.
ROTAT	L1	Logische Variab	le; T : Kippebene wird gedreht zur Simu- lation eines Random-Spektrums
NOFLUX	L1	** **	T : Fluß-Ausgabe wird unterdrückt
NODOCU	L1	17 17	T : Ausgabe der Anfangs- und End- koordinaten wird unterdrückt
NOSPEC	L1	11 11	T : Plot-Ausgabe des Rückstreuspek- trums wird unterdrückt
SISC	L1	17 11	T : Es wird nur ein Streuereignis pro Atomschicht berechnet
NEGLEC	L1	11 11	T : Teilchen, deren Querenergie unter einer festgelegten Schwelle liegt, werden nicht weiterverfolgt.
ENDT	F10.3	Zeitvorgabe; be rechnung der Tr Ausgabe der bis	i Überschreiten des Wertes wird die Be- ajektorien abgebrochen und nur noch die dahin berechneten Werte durchgeführt.

Die Ausgabe des Programms CA15 besteht zunächst in einem Kontrollausdruck, in dem nahezu alle Eingabeparameter gelistet werden. Weiter können bei Bedarf die Anfangs-und Endkoordinaten, Ort, Querimpuls und Energie der Teilchen ausgedruckt werden. Die wesentlichen Ausgabedaten sind die Rückstreuspektren und die entsprechenden in den Energiefenstern registrierten Zählraten. Auf Wunsch können auch Fluß- und Energieverteilungen ausgedruckt und geplottet werden. Wird NDATA >1 gesetzt, so erscheint als Plotausgabe für jedes Energiefenster die entsprechende winkelabhängige Ausbeutekurve.

- 74 -

Mit dem Datensatz:

1	NDATA
20	NA
20	NT
100	MEAN
11	NLAY
4.718	A
ALPHA - PARTICLE	PART
2.	ZPART
4-0026	EMPART
100 - 100	CRYST
73	7 V
2J• 50 94	ENV
14	751
14.	
28.09	FMS1
7.618E+22	RHUAT
293.	TEMP
1	ISEC
0.067	THVI
0.076	THV2
0.075	THSI
52.	0
94.6	ORIGIN
7	FLHM
3.84	LIDTH
3.84	
107.	BANGLE
0.00456	UMEGA
258.	EXCLEV
157.	EXCITS
22.2	PLSMEN
5.	ZVALI
4.	ZVALZ
6-245E+01	EPCOV(1)
9-597F-02	EPCOV(2)
	EPCOV(2)
4 0105-00	EPCOVIAN
4-0185-08	
-9-8536-12	EPCOVISI
1.664t-16	EPCUVIO
5.797E+01	EPCOSI(1)
5.659E-02	EPCOSI(2)
-7.766E-05	EPCGSI(3)
3.641E-08	EPCOSI(4)
-7.624E-12	EPCOSI(5)
5-9955-16	EPCOSI(6)
30.	PHI
0.4	THE TA
0.4	DEDGI
2000	60
2000.	
341	LAINDI
2211.	RANUI
320	IWINDS
2411.	RAND2
298	IWIND3
2429.	RAND3
280	IWIND4
2569.	RAND4
260	INT ND 5
2011	PAND5
14	TLIDIU
10	
0.	OFLUM
2300.	UFIREA
50.	PERC
3	NUMEX
2.	FMULT
F	RUTAT
т	NOFLUX
r	NODOCU
F	NOSPEC
F	SISC
E	NEGLEC
F 36	ENDT
67.	ENUI

erhält man folgende Druckausgabe:

.

	č			-		Ľ	~			č					C	U	ĥ	Î	17																						
F	0	R		T	н	E		с	C	M	P	ι	T	E	R		-	s	I	M	L	L	A	T	1	C	N		c	F	с	۲	4	N	k	£	L	1	٨	Ģ	
B	Y		۵		M	с	D	I	F	1	E	C		•	e	1	N	A	R	Y		с	С	L	L	I	s	I	с	N	-	-	M	c	C	£	ι				

SINGLE CRYSTAL	: V351 - 166	ATCMIC NUMBERS :	REST MASSES :	MEAN EXCITATION ENERGY :
		23.	56.54	258.C EV
		14.	28.09	157.C EV

LATTICE CENSTANT : 4.71E ANGSTRCEM ATOMIC DENSITY : C.762E+23 ATOMS / CM ** 3 PLASMEN ENERGY : 22.2 EV VALENCE ELECTRENS : 4.75 PER ATEM

*

EXFERIMENTAL CCNCITICNS :

INCIDENT ICN	: ALPFA	- PARTICLE				
ATOMIC NUMBER	: 2.					
REST MASS	: 4.					
ION ENERGY	: 20	00. KEV				
CHARGE	: 5	2.0				
BEAP DIVERGENCE	: 0	.0 CEGREE	s			
CRYSTAL TEMP.	: 2	93. KELVIN				
THERMAL VIERATIC	N APPLITUD	ES :	V (U11	.) = (6.067	ANGSTREEM V (U22) : C.G76 ANGSTREEM
			12	: (0.075	ANGSTREEM
BEAM INCIDENCE	: PI TI	HI = Heta =	30.00 C	EGREES		(PHI RGTATED : F)

.

	, ,			
	-	CHAI	NELS	
CHANNEL WIDTH	: 3 . 64	KEV	/ CHANNEL	
SUPPR. CRIGIN	: 54.6	V KEV		
BACKSCATT. ANGLE	E: 165.0	DEGI	EES	
CETECTCR ANGLE	: C.456E-C2	STEI	AC	
MINDOM SETTINGS	(CH.NC.) :		HINDON WIDTH (CH.1 :
			16	
990 100 100 100 100 100 100 100 100 100			101	
260			16	
P R C G R A M P A F	8 A F E T E R	 S		
	"" 网络海峡市村 网络马利斯	8 8 8		
NUMBER OF PARTIC	CLES	••	400 = 20	• 20
NUMBER CF UNIT (CELLS / ŁAYER		160	
NUMBER OF LØYER!	10		11	

RANDCM VALLE :

2211. 2411. 2425. 2565. 2611.

PERCENTAGE :

0.0 ANGSTROEM 2300. Angstrgem

••

MEAN CEPTH

MEAN CISPLACEMENT :

20-0 1

5190. ANGSTRCEM

..

CCRRESPCNCING DEPTH

PAXIMUM OF THE CISTRIBUTION FUNCTION : 2.6670

NG GF CALCLLATED LAYERS : 11 CPU-TIME USED : 1087. SECCNDS

.

MAX. CHANNEL NUMBER : 356

٥.	C.	0.	0.	C.	0.	0.	٥.	с.	C .
0.	0.	0.	0.	с.	۲.	0.	с.	٤.	Ĺ.
0.	с.	0.	C.	C .	с.	٥.	ί.	G.	Č.
٥.	C.	0.	0.	Ċ.	C .	0.	Č.	ċ.	ċ.
٥.	0.	٤.	C.	с.	۲.	ε.	Ċ.	C.	Ġ.
0.	· 0.	0.	0.	C.	۲.	ο.	ί.	Ĺ.	ċ.
Ú.	0.	0.	۲.	с.	с.	L _	٤.	٤.	ć.
C.	G.	0.	C.	c.	ζ.	G.	C .	G.	Ċ.
0.	C.	с.	Ó.	Ó.	ί.	0.	0.	C.	G.
٥.	Ċ.	ċ.	ċ.	0.	ί.	C.	Ċ.	6	6.
0.	0 •	C.	ů.	Č.	Ĺ.	0 .	Č.	Č.	Č.
0 .	ċ.	0.	0_	Č.	Ċ.	0.	Č.	Č.	Č.
0.	45.	4.	0_	7.	16.	11.	72.	86.	12.
68.	37.	114.	36.	37.	165.	93	240	182.	207.
265.	90.	151.	155.	220.	148.	217.	117.	41.	56.
26.	112.	122.	231	135.	261.	262.	335	243.	247.
272.	164.	136-	147.	50.	102-	£1.	263.	125.	122.
255.	171.	107.	103.	121	64.	189.	75.	41.	36
75.	33.	45.	64.	40.	55.	45.	116-	155.	205.
219	356-	381.	195.	140.	117.	278.	138.	317.	205
447.	386.	336.	625-	195.	318.	326.	830	241	388.
169.	496.	476.	1005.	564	756.	4(6.	1.11.	515.	£C7.
979.	981	697.	764	1131.	1112.	562.	564.	585.	858-
476.	666.	673.	846.	714	784-	956.	984.	560-	944
740	877	832.	808.	623.	627.	464 -	755-	557.	784.
585.	667	6C4.	752.	652.	471.	854.	616-	4.5	712.
436	347	637	871	576	472.	555.	731.	5(()	487.
458	404	288	221	360.	332.	247.	504-	531.	477.
501	467	495	157	121	100	594	714.	267.	524 -
449	322	101	228	222	636.	419	204	474.	356.
206	699	377	335	564.	316.	280.	166.	45(.	536.
2030	62C	432	221.	171-	F2.	42.	64-	255	192.
2270	320	302	265	152	82.	54.	56.	85.	68-
17	147	162	207	30	226	125.	148.	175.	250 -
208	144	00	2010	148	22	178	114	45.	112.
200.	100.	· · · ·	2000	128	164	133	.	6.	
	13.	12.	2,10.			·	č.	Č.	0.
<u>,</u>	· ·			č.		0.	Č.		č.
U .		· ·	0.		č.	č.	č.	č.	
0.			Ŭ.	.		č	č.	C	с. С.
0.	0.	0.	0.	×.	v -	0	č.	č	
0.	U •	ų.	0.	· ·	č.		6.	.	G -
0.	0.		0.		č.	0	C .	0.	6.
0.	ų.		0		č.	č.	Č.	с. С.	
0.	0.		0.		č	0		0.	
0.	v.	<u>.</u>	0.	0.	C .	0 -	Č-	Č.	Č-
0.	.			с. С	6 .	0-	С.	с. С.	0
0.	U •	u •			с.	0.	0.		
0.	L.	¥•	· ·		č.	č.	č.	Č.	č
0.	· · ·		0	с. С	с. С.	0.	6.	<u> </u>	Č.
u.	0.	0.	0	с. С		.	<u>.</u>	<u> </u>	
u -	.	U.	¥•	u -	t.	· ·	••	••	••
U.	U .								

•

EACKSCATTERING SPECTRUP - SPECTHED

· 0.	0.	с.	C.	Q.,	٢.	ũ.	Ċ.	C .	Ć.
0.	0.	с.	0.	Q.	ć.	0.	Ċ.	č.	
0.	0.	0.	٥.	Ū.	č.	č.	Č.	č.	č.
0.	0.	٥.	٥.	Ō.	Č.	6 -	č.	6.	6.
0.	Ö.	0.	٥.	0.	i.	0.	Ĉ.	6.	6.
0.	ċ.	C.	0.	Č.	č.	ů.	č.	č.	č.
0.	٥.	٥.	C.	0.	Č.	6.	G .	0.	6 -
0.	G.	Ö.	Č.	Č.	ζ.	0.	č.	(-	6.
0.	C .	Ċ.	0.	ć.	č.	0.	С.		6-
Ō.	0 .	C.	0.	0.	Č.	0.	G .	(.	6.
0.	C.	<u> </u>	C.	<u> </u>	C	6.		с. С.	0.
0.	0.	0.	0.	<u>.</u>		0.	Č.		6
0.	45.	4.	6.	7.	18-	11.	72.	84	15
68.	37.	114.	36.	37.	105.	57.	240	182.	267
265-	90.	151.	159-	220-	145.	217	117	41	54
26-	112.	122.	231	135.	261.	267	276	543	247
212	164.	136-	147-	50-	102-	81.	203	126	125
255.	171.	107.	103.	121.	64.	185	75.	41	34
75.	33.	45.	64-	40.	55	45	118.	156.	265
219	356.	381.	195	140.	117.	278	175.	317.	205
447.	386.	334.	625.	195.	318-	326.	870	341	366
149.	496.	476.	1005-	564	750	406-	1011	516.	5(7
676.	991	467	754.	1131.	1112.	562	F64	586	906
436.	666-	673.	846.	714.	786.	956.	584	560.	944
769.	A77.	833.	806.	627.	627.	444	765	567	764
585.	667	594	752	652.	421.	864	616	4(6	712
438.	347.	637.	871.	576.	422.	556	731	500	487
408	406	286	221	340	995	247	564	531	417
501	457	496	167	121	100	554	214	247	534
649	222	101	226	177	420	416	204	474	364
200	2220	277	226	544	216	117.	304.	414.	536.
2030	426	437	333.	204.	510.	286.	100.	436.	336-
229.	227.	432.	221.	1/1+	CZ -	42.	04.	255.	193.
17	147	162	2950	30	226	176	36.	176	260-
208	146	00	2010	, 30-	220.	120	100.	112.	2364
76	13	40	264	128	154	122			112.
	13.	-2-	2,00	120.		13.3.	ç.		.
0.	с. С	č.		č.	č.	č.	0.	· · ·	
0.	· ·		0	<u> </u>	···	.	ů.	.	ç.
0.	č.	č •	č.	Č.	· · ·	č.	.	.	ç.
č.	č.	0		č.	č.	0	Č.		.
Ŭ.	с. С		0	G .		6	č.		č.
ů. 0	č.	ç.	.	.	č.	č	Č.		
0.				č•	č •	0	C	.	
0.			0.	C .	C .		.	с. С.	C •
ŏ.	č.	č.	0			č.	č.		č.
.	.		.	č.		<u>.</u>	. .	· ·	č•
.	Č.	· ·		<u>.</u>	· ·	<u>.</u>	· ·	Ļ.	ų.,
<u>.</u>		· ·	0.		· ·		.	· ·	Ç.
0.	L.		0.		.	0.			
ų.	.	0.	0.	<u>.</u>	.	. .	Ľ.	ų.	
0.	ų.	U •	U+	U •		0.			
0.									
h INDOh	SETTINGS (CH	-NC.) :	WINDOW N	NIGTH (CF.) :	:	CCUNTS /	CHANNEL :	NCFPAL 12	EC VALLE
	- / -					• / •			
	341			10		140	-	0.0	(C)
	320			10		219	•	Ú.U	50
	298			10		384	•	<u>.</u>	50
	280			10		35	•		16
	260			16		614	t .	Ú•2	12

.

79 —

EXPERIMENTAL PACKSCATIERING SPECTRUM

4064.	3876.	3750.	3876.	3836.	3652.	3678.	3574.	3574.	3466.
3422.	3482.	3314.	3314.	3390.	3322.	3152.	3196.	3120.	3306.
3368.	3180.	3076.	2894.	2546.	2914.	2756.	2832.	2766.	2942.
2684.	2786.	2752.	2750.	2720.	2766.	2822.	2686.	2624.	2618.
2534.	2550.	2504.	2534.	2436.	2560.	2366.	2496 .	2354.	2432.
2428.	2542	2366.	2314	2394.	2282.	2384.	2384	2346.	2266.
2300.	2204	2244.	2290-	2238.	2130-	2174-	2194.	2144	2210.
2116-	2090.	2140-	2142	2040.	2078-	2024	1970	2046	1640
1912.	2012.	2014	1604	26.80	1977	1670	1620	1657	1,000
1928.	1604	2020	1074	1944	1800	1050	1920.	1762.	1900.
1404	1760	1730	1950+	1940	1700	1700	1992.	1600	1040.
1474	1034	1404	1640	1480	1440	1460	1012+	1072.	1/02.
1414	1734	1670	1040-	1500.	1002-	1002.	1162-	1160	1000-
1010.	1636+	1570-	1030+	1056.	1072.	4010.	1004.	1462.	1348.
1042.	1020.	1004.	1968.	1430.	1010.	1522 -	14/6.	1466.	1036.
1450.	1494.	15/2.	1482.	1368.	1522.	1412.	1486-	1348.	1464.
1900-	1420.	1448.	1360.	1464.	1356-	1422.	1445.	1418.	1336.
1358.	1352.	1296.	1320.	1368.	1366.	1350.	1360.	1214.	1330-
1366-	1282.	1230.	1250-	1238-	1248.	1234.	1192.	1194.	1262.
1272.	1208.	1204.	1196.	1176.	1188.	1204.	1140.	1136.	1254.
1202.	1292.	1176.	1272.	1182.	1118.	1200.	1176.	1116.	1112.
1180.	1072.	1104.	1116.	1042.	1046.	1010.	1060-	1026.	107C.
1054.	1022.	1024.	992.	1140-	1140.	1036.	554.	1092.	\$56.
1034.	884.	546.	926.	952	932 .	\$56 .	572.	\$74.	1662.
920 .	942.	878.	870.	876 -	902.	888.	93 6 .	876.	872.
874.	846.	830.	808.	786.	864.	826.	736.	764.	838 .
762.	776.	676.	116.	774.	820.	764.	766.	642.	650.
752.	684.	646.	686.	756.	730.	752.	658.	676.	626.
650.	592.	546.	524.	530.	568.	484.	594.	662.	50E.
544.	592.	522.	526.	500.	524.	5ić.	464.	484.	432.
508.	476.	434.	418.	460.	472.	412-	472.	412.	468.
416-	466-	370.	430.	360.	358.	376.	434.	366.	382.
316.	376.	354.	342.	332.	284.	312.	346.	344.	296.
354.	316-	260-	340.	364	334.	244 -	242.	248.	260
26.9	224	238.	240	194 -	224.	240 -	268.	214.	204
244	166	210	178	1.64	170-	158.	176-	160.	200-
104	144	202	244	240	330	320	262	214	116.
100 .	10	2020		200.		0.	0.		
50.	10-	7.	0.	ů.		2	č		4.
v •	U •		0.	0.	2	č-	č.	2.	0.
U •	7.				<u>.</u>	0.			с. /
.	U •	ų.	.	<u>.</u>		.	č.		6.
0.	U •	<u>.</u>	0.	v.	.	u •			2
0.	.	U.	U .	.	.	0.	<u>.</u>	· · ·	č •
2-	0.	U.	<u>u</u> .	u .	0.	0-	.	<u>.</u>	.
0.	0.	C .	U.	u .	ų.	.	<u> </u>	ų.	د.
0.	0.	Ç.	0 .	U .	U .	.	· · ·	. .	ų.
0.	C-	Ç.	0.	d .	u.	.	L.	ų.	Ļ.
0.	0.	C .	0.	0 .	C •	0.	<u> </u>	ų.	Ļ.
2.	0.	۲.	0.	C •	0.	0.	Ç.	ų.	u .
2.	0-	0.	0.	0 -	0.	0.	<u> </u> .	<u>.</u>	ų.
0.	0.	0.	C .	Ç.	Ç.	0.	<u> </u>	.	ų.,
0.	0.	0.	0.	2.	G.	G.	u .	6	u .
C.	0.								
WINDOW SE	TTINGS (CH.NO.)	:	WINDON WIDTH	(CH.) :		COUNTS / CHANN	EL :	NCRMALIZED	VALLE :
				2		267		0 003	
	341		4	4		2414		(-12)	
	520			4		430.		6.177	
	230			4		534		0.209	
	280			4		751		(.257	
	200		4			121+		6.231	

CORRECTED CHARGE : 122.5

- 80



EACKSCATTERING ENERGY SPECTRUM

- 81 -

D.3 PROGRAMM-LISTING

			C	FMSI	(F10.2):	REST MASS OF B	00000600
		00000010	C C	внпат	(E10.3):		00000610
		00000030	č	K D G A I	(11045).	ATOMIC DEUSITY (ATOMS / CP ++ 5)	000000630
_		00600040	C	ТЕМР	(F10.2):	TEMPERATURE (KELVIN)	00000640
MONTE	CARLO – PROGRAM	00000050	C				00000650
****32***	======================================	00000060	ç	ISEC	(11) :	MUST BE 1 TO CALCULATE THE 100 - DIRECTION	CN00C03660
F N R T	Η Ε. Ο Η Ρ Η Τ.Ε. Ε. Α. ΣΙΝΗΙΑΤΙΟΝ	00000070	Ċ			AND 2 TO CALCULATE THE ITO - DIRECTION	00000670
		00000090	č	ΤΗΥΙ	(F10.5):	THERMAL VIBRATIONAL AMPLITUDE	000000690
		00000100	Ċ			IN THE A - CHAIN - DIRECTION (SCRT(U11)) OUCOOTCO
OF CH	ANNELLING	00000110	С				00000710
********	3 = 1 = 3 = 3 = 2 = 2 = 3 = 3 = 3 = 3 = 3 = 3	00000120	C	T H V 2	(F10.5):	THERMAL VIBRATIONAL AMPLITUDE	00000720
	15 - STNGLE (RYSTAIS (A3R)	00000130	c c			PERPENDICULAR TO THE A - CHAIN (SQRT(U22)	100000130
3=3=3====		00000150	č	тнут	(E10.5):	THERMAL VIBRATIONAL AMPLITUDE FOR B	00000740
		00000160	č				00000760
N I T H	DAMAGE PROFILES OF STATIC	00J001 70	С	0	(F10.2):	CHARGE FOR FITTED RANDOM SPECTRUM	06600770
	***************************************	06000180	C				00060780
	C DISDUACENENTS INCLUDED	00000190	C	ORIGIN	(F10.2):	SUPPRESSED ORIGIN IN KEV	00000790
		00000200	č		1510 21.	ELUN DE EVDEDIMENTAL ADDANCEMENT	20000810
		00000220	č		() 104275	(MUST BE ODD)	000000000000000000000000000000000000000
		00000230	č				00600830
		00000240	С	WIDTH	(F10.2):	CHANNEL WIDTH (KEV / CHANNEL)	00600840
		00000250	C				00000850
UAIA	UKGANIZATIUN:	00000260	C r	BANGLE	(+10.2):	BACKSCATTERING ANGLE (DEGREES)	00000860
		00000290	č	OMEGA	(E10.5):	DETECTOR ANGLE (STERAD)	00000370
		00000290	č	• • • • •			00000890
		00000300	С	FXCITV	(F10.2):	MEAN EXCITATION ENERGY OF A (EV)	00000900
NDATA	(I2) : NUMBER OF DIFFERENT DATASETS	00000310	C	. .			00000910
	(MUST PRECEDE THE FIRST DATASET)	00000320	C C	EXCLIS	(F10.2):	MEAN EXCITATION ENERGY OF B (EV)	00000920
NY	(14) : NATRIX DIMENSION IN X - DIRECTION	00000340	č		(E)0.2);	PLASMON ENERGY OF THE COMPOUND (EV)	66600930
	MAXIMUM : 60	00000350	č				00000950
		00000360	С	ZVALI	(F10.2):	NUMBER OF VALENCE ELECTRONS PER A - ATOM	00000960
NY	<pre>(14) : MATRIX DIMENSION IN Y - DIRECTION</pre>	000003 70	C				00000970
	MAXIMUM : 60	00000380	ç	ZVALZ	(F10.2):	NUMBER OF VALENCE ELECTRONS PER B - ATOP	00000980
	(14) : NUNBER OF UNIT CELLS PER LAYER	00000340	ř	ΕΡΓΩΥ	(610-3):	ENERGY LOSS CREEFICIENTS FOR A LA VALUE	526000000
7 C A N	(14) · NORDER OF ORTI CEES FER ENTER	00000410	č				00001010
NLAY	(I4) : NUMBER OF LAYERS	06660420	č	FPCCSI	(E10.3):	ENERGY LOSS COEFFICIENTS FOR B (6 VALUES	\$)00001020
		00000430	C				00001030
A	(F10.2): LATTICE CONSTANT	00000440	ç	рні	(F10.3):	ANGLE DETERMINING THE TILT PLANE	00001040
	(444) · NAME OF INCIDENT DADTICLE	00000450	C C			IN THE CRYSTAL - SYSTEM	00001050
PARI	(444) . NAME OF INCIDENT PARTICLE	00000470	č	ТНЕТА	(F10.3):	TILT ANGLE BETWEEN BEAM AND	00001070
ZPART	(F10.2): ATOMIC NUMBER OF INCIDENT ION	00000480	č			CRYSTAL - AXIS	00001080
		00000490	C				00001090
FMPART	(F10.5): REST MASS OF INCICENT ION	00000500	C	DEPSI	(F10.3):	BEAM DIVERGENCE	00001100
.	(A COMETAL NAME AND ODIENTATION	00000510	Ċ	E 0	(5)0 3).	INCIDENT ION ENERGY (KEV)	00001110
LRYST	(444) = UKTSTAL NAME AND UKTENTATION	00000520	ř	E U	(10.)1:	THOTOCHT LOW ENERGY (VEV)	00001120
zv	(F10.2): ATOMIC NUMBER OF A	00000540	č	IWIND1	(14) :	CH.ND. OF WINDCH NO. 1	00001140
- •		00000550	Ċ				00001150
FMV	(F10.2): REST MASS OF A	00000560	C	R A N D 1	(F10.3):	RANDOM VALUE FOR WINDOW 1	00001160
		00000570	c				00001170
2 S I	(F10.2): ATOMIC NUMBER OF B	00000580	C C	ININD2	(14) :	CM.NU. UP WINDUN NU. Z	00001180
		0000000000	L				00001190

.

-- 83 --

R	A	Ν	D	2		(F10.3):	RANDOM VALUE FOR WINDOW 2 00	001200		
				_	-			00	001210		
I.		1	N	υ	د	[[4]	:	CH.NC. OF WINDOW NO. 3 00	C01220		
~		•••	~	-			• •	00	001230		
ĸ	P	N	υ	2		(110+3	1:	RANDUM VALUE FUR WINDOW 3 00	601240		
т	L	Ŧ		•		1145			001250	_	
1		1	N	υ	4	1147	ē	CHANDA OF WINDOW NUL 4 00	001260	ç	
n		a.	•						001270 (С	
'n	"	IN .	U	Τ.		1110-3		KANDUF VALUE FUK KINDUW 4 DU	001280	~	
r	ъ		N	0	6	(14)			001290	Č	
•					·	(14)	•		001300	L	
R	۵	N	Ċ	5		(E10.3	1 -		(01320		
			•	-					001320		
T	ы.	T	n	т	н	(34)	:	NINDON WIDTH (EVEN CHANNEL NUMBER) 00	601340		
•		•	•	•	••	••••	-		001350		
0	Ρ	Ł	С	м		(F10.5):	MEAN STATIC DISPLACEMENT OF THE DISORDEREDUO	001360		
-		-	-				•	ATOMS IN ANGSTREEM 00	001370		
								00	601380		
D	Ρ	т	м	E	Α	(F10.2):	MEAN DEPTH OF THE DAMAGE REGION 00	001390		
								00	001400		
Р	Ε	R	С			(F10.2):	PERCENTAGE OF THE DISORDERED ATOMS AT THE OO	001410		
								MAXIMUM OF THE DEPTH PROFILE 00	001420		
								00	C01430		
N	U	M	Е	х		(11)	:	NUMBER OF EXPERIMENTAL SPECTRUM ON FILE 3 00	001440		
								(MUST BE 0, IF NC COMPARISON WITH 00	001450		
								AN EXPERIMENTAL SPECTRUM IS WANTED) 00	001460		
								00	001470		
F	м	U	L	т		(F10.3):	SCALING FACTOR TO ADJUST THE HEIGHT OF THEOD	001480		
								EXPERIMENTAL SPECTRA WITH DIFFERENT 00	001490		
								CHARGES ÚO	001500 0	С	
								00	001510		
Ł	O	T	۵	Ť		([1]	:	LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00	001520	С	
								ROTATE PHI (RANDOM SIMULATION) OD	001530	-	
	~	-							001540 0	c c	
N	U	۲	L	U		((1)	•	LUGILAL VARIABLE, MUSI BE INUE IU OU	001550 0	c c	
								SUPPRESS FLUX UUIPUI		c r	
	~	2	0	r		(1.1.)	-		001570 0	L.	
N	U	U	U	C	U	([])	•	CUDDDESS DADT DE THE DOTATED DUTDUT	001580	~	
								SUPPRESS PART OF THE PRIMIED COTPOL	001590	C	
N	n	s	ρ	F	r	(11)		LOGICAL VARIABLE. MUST BE TRUE TO SUPPRESSOO	001610		
	C.	5	•	-	č		•	THE PLOTS OF THE BACKSCATTERING SPECTRA 00	001620		
								00	001630		
s	I	s	С			(L1)	:	LOGICAL VARIABLE. MUST BE TRUE TO 00	001640	С	
								CALCULATE ONE BINARY COLLISION PER PLANE OD	001650		
								00	001660 (C	
N	Ε	G	L	E	С	(L1)	:	LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO CHECK OO	001670		
								THE INITIAL TRANSVERSE ENERGY OU	001680 0	C	
								00	001690		
E	N	D	Т			(F10.3):	TIME PARAMETER OF THE JOB CARD MINUS 00	001700		
								ESTIMATED RUN TIME FOR ONE LAYER 00	001710 (С	
								00	001720		
								00	001730	_	
								00	C01740	C	
								00	001750	-	10
								00	001760 0	6	
11	IF	151		N 1	XM/	1160,6	014	PYFA1(60,60) 00	001770	~	
110	IE	121	[0]	N)	(M A 1	160,60	i •)	MAI(60+60) 00	001780 0	Ļ	
DI	4F I	NS 1	1 0 1	N I	EMAI	[[60.60)	00	1001790		

DIMENSION FLOST(60,60), EDST(60,60)	00001860
DIMENSION NTEXT(15), NTEXT1(15), NTEXT2(15), NTEXT3(15)	00001810
DIMENSION NTEXT4(15). NTEXT5(15)	00001820
DIMENSION CRITX(100), CRITY1(100), CRITY2(100), CRITY3(100)	00001830
DIMENSION CRITY4(100), CRITY5(100)	00001860
	00001840
STICKSTON ASTINGTY FLERICY	00001850
	00001860
CONNON VETNOV TETNOT TETNOS TETNOS TETNOS	00001870
COMMON FWINDF ININDI, ININD2, IWIND3, IWIND5	00001880
	00001890
	33061900
DATA FLDS1/3600*0.0/ EDS1/3600*0.0/	00001910
DATA NTEXTL/' ','ANGU','LAR ','SCAN',' ',	00001920
1 WIND', ON 1', ', ', ', ', ',	00001930
2	00001940
DATA NTEXT2/* ***ANGU***LAR ***SCAN*** **	00001950
1 *WIND','Ch 2',' ',' ',' ',	00001960
2 * *** *** *** */	00601970
DATA NTEXT3/* ',*ANGU',*LAR ',*SCAN',* ',	00001980
1 'NIND'.'ON 3'.' '.' '.' '.	00001990
2 1 1,1 1,1 1,1 1/	00002000
DATA NTEXT4/' '.'ANGU'.'LAR '.'SCAN'.' '.	00002010
1 'WIND''' Ob 4''' ''''''''''''''''''''''''''''	00002020
	00002020
DATA NTEXTS/1 F. LANGUL-FLAR 1. ISCANT. 1	00002040
	00002040
	00002050
DATA NEY/JEA 117. NEY/JEA 117	00002080
DATA EV/1 DE1/2 EV/4 0511/	00002070
	00002080
UATA ASTMD/ 1 + 2 + 3 /	00002090
	00002100
REWIND 4	03002110
	00002120
READ (5+2000) NDATA	00002130
	00002140
PROCESSING OF DIFFERENT DATASETS	00002150
=======================================	00002160
	00602170
DO 10 I = 1,NDATA	00002180
	00002190
READ (5,1000) NX	00002200
READ (5.1000) NY	00002210
READ (5,1000) MEAN	00002220
READ (5-1000) NLAY	00002230
	00002240
TUN = 11	00002250
	00002260
REWIND 2	00002270
	00002280
CALL VOT (DYNAT, DWAT, YNAT, YNAT, ENAT, ELDST, EDST, NY, NY,	00002200
CALL ANT TRAMATOR THAT A CAMATOR FATOLEMATOR COSTOLOSIONADITY	00002290
	00002300
	00002310
END FLE 7	00002320
CNU FILE IUN	00002330
	00002340
LU CUNIINUE	00002350
	00002360
END FILE 4	00002370
	00002380
IF (NDATA .EQ. 1) GOTO 20	00002390

- 84 -

~				_			
c c		00002400		3	YA •	DY,YE,NFY,NNY)	00003000
Ľ	PLUIS OF ANGULAR SCANS	00032410	С				00003010
L		00002420		DO 130 I	I = 1,15		00003020
C		00002430		NTEXT(I)	[] = NTEXT	3(1)	00003030
	REWIND 4	00002440	1	L30 CONTINUE	JE		00003040
	PI = 4.0 * ATAN (1.0)	00002450	С				00603050
C		00002460	-	CALL PLO	LOTRT (CRI	TX.CRITY3.NDATA.NT.NP.INTA.NPA.IND7.XMAX.XMIN.SX.	00003060
	WRITE (6.1010) IWINDI. IWIND2. IWIND3. IWIND4. IWIND5	00002470		1	VMΔ	Y. YHIN. SY.NIFYT. IDDLCT.	00003070
С		00002480		2	¥A.	DY. YE. NEY. NNY.	0000000000
•	DO 100 T # 1-NDATA	00002400		2	va.	DATALTHEATHAT	00003080
r		00002500	~	5	14.	DISTERNETSINNTS	00003090
C C	PEAD (4) CONTYIN	00002500	L				00003100
	NEAD (4) CNITA(1)	03002510		00 140 1	L = 1+12		00003110
	KEAD (4) CRITI(I)	00002520	_	NIEXI(1)	IJ = NIEXI	4(1)	00003120
	READ (4) CRITZ(1)	00002530	1	140 CONTINUE	JE		00003130
	READ (4) CRITY3(1)	00002540	С				00003140
	READ (4) CRITY4(I)	00C0255 0		CALL PLO	LOTRT (CRI	TX,CRITY4,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,	00003150
	READ (4) CRITY5(I)	00002560		1	YMA	X, YMIN, SY, NTEXT, IDPLOT,	00003160
С		00002570		2	XA.	DX.XE.NFX.NNX,	00003170
С		00002580		3	YA.	DY.YE.NFY.NNY)	00003180
	WRITE (6,1020) CRITX(I), CRITY1(I), CRITY2(I), CRITY3(I),	00002590	С				00003190
	1 $CRITY4(1)$, $CRITY5(1)$	00002600		DO 150 I	I = 1.15		00003200
C		00002610		NTEXT(1)	I = NTEXT	5(1)	00003210
Ŭ 10		00002620	1		15		00003220
r 10		00002620	<u>ر</u>				000000220
c		00002030	L		OTOT (CDI	TH COTTUE NOATA NT NO INTA NOA THE? MAN WHEN CH	00003250
		00002640		LALL PLU		TAGERITTO HUDATAGNIGNEGINTAGINEAGINEZGAMAAGAMINGSAG	00003240
	$TMAX = I_{\bullet}D$	00002650		1	YMA	X YMIN SY WIEXI UPLLI	00003250
		00002660		Z	XA,	DX+XE+NFX+NNX+	00003260
	YMIN = 0.0	00002670		3	YA,	DY,YE,NFY,NNY)	00003270
	NT = 1	00002680	с				00003280
	NP = 3	00002690	С				00003290
	INTA = 2	00002 700	С	LINE	NEPLOT OF	THE ANGULAR SCAN	00003300
	NPA = 1	00002710	c	= = = =	********	=======================================	00003310
	INDZ = 2	00002720	С				00003320
	SX = (XMAX - XMIN) / (100.0 + 10.0)	00002730	c				00003330
	SY = (YMAX - YMIN) / (100.0 + 10.0)	00002740		TH = 0			00003340
		00002750		TV = 0			60003350
		00002760		18 = - 5	5		00003360
		00002770		IV = - 5	5		00003370
		00002780		1 4 - 128	20		33303380
		00002700		14 - 120			0000000000
		00002190			· •		00003390
	$\mathbf{T}\mathbf{A} = \mathbf{T}\mathbf{T}\mathbf{N}$	00002800					00003400
	DY = 0.1	00002810		XV = 0.0	•0		00003410
	YE = YMAX	00002820		DH = 2.0	.0		00003420
	NNY = 5	00002830		DV = 1.5	. 5		00003430
	DO 110 I = 1.15	00002840		KH = 1			00003440
	NTEXT(I) = NTEXTI(I)	00002850		KV = 1			00003450
11	J CONTINUE	00002860		IG = 0			00003460
С		00002870		Ih = 6			00003470
	CALL PLOTRT (CRITX+CRITY1+NDATA+NT+NP+INTA+NPA+INDZ+XMAX+XMIN+SX+	00002880		IC = 0			00003480
	1 YMAX, YMIN, SY, NTEXT, IDPLOT.	00002890		NB = 3			00003490
		00002900		MLEN(1)	= NDATA		00003500
		00002910		MLEN(2)	= NDATA		00003510
c		00002920		MLEN(3)			00003520
e.	DD 120 T + 1-15	00002930	r				00003530
	DU 120 1 - 1913	00002950		LOTTE 14	6.10201		00003540
	NTEALLI - NTEAL2111	00002950	<u>د</u>	PATIE (D			00003550
12	/ CUNTINUE	00002950	L,	CALL MUD			00003530
C		00002960		LALL KUR	JEAR (THA)	N 1 1 NO DU KU EU	00003560
	CALL PLUIRT (CRITX, CRITYZ, NDATA, NT, NP, INTA, NPA, INDZ, XMAX, XMIN, SX,	00002970		1	1V+J		00003570
	1 YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLCT,	00002980		2	16.1	W.IL. NB.ASTFE.MLEN.	00003580
	2 XA, DX, XE, NFX, NNX,	00002990		3	CRIT	X+CRIIY1+CRITX+CRITY2+CRITX+CRITY3}	00003590

	3	
C	00003600	
20 CONTINUE	00003610	
c	00003620	C
C	00003630	č
C FORMAT – SPECIFICATIONS	00003640	č
	00003650	č
C	00603660	ř
r	00003670	ř
1000 FORMAT (14)	00003680	ř
1010 FORMAT (111//T15-TANGULAR SCAN :1/	00003690	č
		ř
	00003710	č
	00003720	C.
	T107-14/00003730	
	1.00003750	
	00003760	
1020 EDDWAT (101-120-510 2 142-510 2 158 510 2 172-510 2-	00003770	
	00003770	
	00003780	
1030 FORMAT (11) 1200 A N G U L A K S C A K 7/7	00003790	
2000 FURMAT (12)	00003800	
	00003810	
r T	00003820	
STOP	00003830	
END	00003840	

SUBRCUTINE XQT (PXMAT,PYMAT,XMAT,YMAT,EMAT,FLDST,EDST,	00003850
1 NX+NY+MEAN+NLAY-IUN)	00003860
	00603870
E = = = =	60063883
	00003880
	00003890
	UUOC3900
\$	00003910
SUBROUTINE PERFORMING THE CALCULATIONS OF THE TRAJECTORIES	00063920
AND THE BACKSCATTERING SPECTRA AND	00003930
CREANIZING THE LO BROCESSES	00003060
	000003940
	00003950
	00003960
DIMENSION PXMAT(NY+NX), PYMAT(NY+NX)	00003970
DIMENSION XMAT(NY.NX), YMAT(NY.NX)	00003980
DIMENSION EMAT(NY-NX)	00003990
DINENSION DECH(100-3)	00004000
	0.0004000
	00004010
DIMENSION FLOSI(NY+NX)	00004020
DIMENSION EDST(NY.NX)	00004030
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00004040
OIMENSION PLX(512), PLF(512), PLE(512)	00004050
DIMENSION PNORM (12000)	00004060
$\frac{1}{10000000000000000000000000000000000$	00004000
	00004070
DIMENSION (HVBSI(12000)	00004080
DIMENSION POPLC(2200), PUNIF(2200)	00004090
DIMENSION XCD(100), YCO(100)	00004100
DIMFNSION NV(20)	00004110
DIMENSION NTEXT(15)	00004120
DIMENSION NTEXTI(15)	00604130
	00004140
	00004140
DIMENSION NIEXI3(15)	00004150
DIMENSION ASYMB(2). MLEN(2)	00004160
DIMENSION HEXP(512), HSMO(512), HETH(512), HINT(512)	00004170
DIMENSION HGT(100)	00004180
DIMENSION HETEX(100)	00004190
DIMENSION SDECH(3) - ESDECH(3)	00004200
	00004210
	00004210
DIMENSION NOUROISS	00004220
DIMENSION CHNOM(512)	00004230
DIMENSION CRYST(4), PART(4)	00004240
DIMENSION AX(512), AY(512)	00004250
	00004260
	00004270
	00004280
REALTO DATES JINE	00004200
LUGICAL RUTAT	00004290
LOGICAL NOFLUX	00004300
LOGICAL NODOCU	00004310
LOGICAL NOSPEC	00004320
	00004330
	00004340
	00004350
	00004970
	00004360
LUMMUN /WVAL/ (A. SILV, SILSI, PNURM, INVEVI, INVEV2, INVESI, SIS	00004370
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, AZ, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,	00004380
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00004390
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF	00004400
COMMON /SCA1/ XSCAT1(6) + YSCAT1(6)	00004410
CONMON (SCA3/ XSCAT3(6), XSCAT3(6)	00004420
	00004430
COMMON / 20821/ Y2C1211314 12C121131	00004430

c c

C C - 86 -

	CONNON (CC122) VCCT22/21 VCCT22/21	00004440	~				
		00004440	ř	TNDILT			00005040
	COMMON /SCA22/ ASCI22(2) TSCI22(2)	00004450	č		3 1 A I E F E N I S		00005050
	COMMON /SCA25/ XSC124(3)(130124(3)	000004400	č				00005080
		00004480	ř				00005090
		00004490	U U	READ (5.1010)	۵		00005090
	COMMON /SCR29/ XSCT29131, VSCT296(3)	00004500		READ (5.1013)			00005100
	COMMON / FPCO/ FPCO/(6), FPCO/(6)	00004510		READ (5-1010)	7PART		00005110
	COMMON /TEST/ PHILIM. THV). THV2. THSI. EQ. BS. RESOLE. RESOLD.	00004520		READ (5.1030)	EMPART		00005120
	1 FKEV. FKES. SREL. PHI2. PHI02. ELIM. U2V. U2S. THV4	500004530		READ (5.1013)	(CRYST(1).1=1.4)		00005130
	COMMON /BVAL/ Q. WIDTH. BANGLE. CRIGIN. CHEGA. PHI. THETA. PROP.	UCC04540		READ (5.1010)	ZV		00005140
	1 FMV. FMSI. FMPART. FWHM. NUM. DEPHI. ZVALI. ZVAL2.	00004550		READ (5,1010)	FMV		00005150
	2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, ROTAT	00004560		READ (5.1010)	Z S I		03005160
	COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, EETHES	00004570		READ (5.1010)	FMSI		00005170
	COMMON /WIND/ IWIND1, IWIND2, IWIND3, IWIND4, IWIND5	00004580		READ (5.1020)	RHOAT		00005180
	COMMON /MOLP/ ALFA(3). BETA(3)	00004590		READ (5.1010)	TEMP		00005150
c		00004600		READ (5.1043)	ISEC		00035200
C		00004610		READ (5.1030)	THV1		00005210
С		00004620		READ (5.1030)	THV2		00005220
	DATA FH/' OF0'/, FV/' OF0'/	00004630		READ (5,1030)	THSI		00005230
	DATA FHF/' OF2'/	00004640		READ (5,1010)	0		00065240
	DATA NFX1/13 1/, NFX2/1F4-11/	00004650		READ (5.1010)	UKIGIN		00005250
	DATA NEVI/ 14 1/ NEV2/13 1/ NEV3/14 1/	00004660		READ (5.1010)			00005260
	DATA ASYMB/1*1,1+1/	00004670		READ (5+1010)			00005270
	DATA CFCH/300+0.0/, EDECH/300+0.0/	00004680		READ (5,1010)	OMECA		00005280
	HALA FUL/10040-07	00004890		READ (5,1010)	EYCITV		000005200
	$[A_1A_1A_5] = [A_1A_1A_5] = $	00004710		READ (5,1010)	EXCITS		00005310
	DATA PLA/312+0+0/4 FLF/312+0+0/4 FLF/312+0+0/	00004720		READ (5.1010)	PISMEN		00005320
		00004730		READ (5.1010)	ZVAL 1		00005330
		00004740		READ (5.1010)	ZVAL 2		00005340
	DATA AX/51/2+0.0/. AY/51/2+0.0/	00004750		READ (5.1020)	EPCOV(1)		00005350
	DATA HGTEX/100+0.0/	00004760		READ (5,1020)	EPCOV(2)	r.	00665360
	DATA NTEXT1/1 '.'BACK'.'SCAT'.'TERI'.'NG E'.'NERG'.'Y SP'.	00004770		READ (5,1020)	EPCOV(3)		00005370
	1 'ECTR'.'UM '.'IN C'.'OUNT','S / '.'CHAN'.'NEL ',	00C04 780		READ (5,1020)	EPCOV(4)		00005380
	2 • •/	00004790		READ (5,1020)	EPCOV(5)		00005390
	DATA NTEXT2/1 ','FLUX',' PRO','FILE',' AVE','RAGE','C OV',	00004800		READ (5,1020)	EPCOV(6)		00005400
	1 'ER ', '472 ', 'ANGS', 'TROE', 'M ', ' ', ' ',	00004810		REAC (5,1020)	EPCCSI(1)		00005410
	2 ' '/	00004820		READ (5.1020)	EPCOSI(2)		0005420
	DATA NTEXT3/' ','ENER','GY P','ROFI','LE A','VERA','GED ',	00004830		READ (5.1020)	EPCOSI(3)		00005430
	1 'OVER',' 47','2 AN','GSTR','DEM ',' ',' ',	00004840		READ (5+1020)			00005440
	2 • • /	00004850		RFAD (5.1020)			00005450
C		00004880		READ (5+1020)			00005480
С		00004870		READ (5+1040)	771 Tueta		00005470
	00 1011 K = 1.150	00004880		PEAD (5+1040)			00005460
	$D0 \ 10 \ 2 \ 1 = 1 \cdot 150$	00004890		READ (5,1040)	FO		000005500
		00004900		READ (5.3640)			00005510
101		00004920		READ (5-1040)	RANDI		00005520
	Continge	00004930		READ (5.3640)	IWIND2		00005530
ř		00004940		READ (5.1040)	RAND2		00005540
č	COEFFICIENTS FOR THE MOLIERE - PCTENTIAL	00004950		READ (5.3640)	ININD3		00005550
č		00004960		READ (5,1040)	RAND3		00005560
č		00004970		READ (5+3640)	I h I ND4		00005570
-	ALFA(1) = 0.1	00004980		READ (5.1040)	RAND4		00005580
	ALFA(2) = 0.55	00004990		READ (5+3640)	IWIND5		00005590
	ALFA(3) = 0.35	00005000		READ (5.1040)	RANDS		00005600
	BETA(1) = 6.0	00005010		READ (5.3640)	INIDTH		00005610
	BETA(2) = 1.2	00005020		READ (5.1030)			00005620
	BETA(3) = 0.3	00005030		KEAU (5.1010)	UPIELA		000000000

--- ·

87

RFAD (5+1010) PERC	00005640		THEV = 7PART + 7V + RYD + 2.0 + AHYD / ATEV	00006240
READ (5+1041) NUMEX	00005650		THEST = $7PART + 7ST + PVD + 2.0 + AHVD / ATEST$	00006250
READ (5-1040) FMULT	00005660	r	THEST - LIART - EST - RID - 200 - RIDDY AT ST	00006250
READ (5.1042) BOTAT	00005670	C	00 = 0	00006280
READ (5.1042) NOELUX	00005680		$0 - 0 \pm 4.255 \pm 11$	00000270
	00005690	r		00008280
	00005890	L	OUT - 04T + DT / 100 0	00006290
	00005700		PHI = PHI + PI / 100 a C	00008300
NEAU (3+1042) 3130	00005710		$HEIA = HEIA \neq PI \neq 180.0$	00006310
READ (J-1042) REGLEC	00005720		DEPSI = DEPSI + PI / 180.0	00006320
READ (5+1040) END)	00005730		CUSPHI = CUS (PHI)	00006330
	00005740		SINPHI = SIN (PHI)	00006340
	0000575 0	С		00006350
PI = 4.0 * ATAN(1.0)	00005760	С		00006360
AHYD = 0.529	-00005 770		ENDT = ENDT * 60.0	00006370
RHT = RHOAT	00005 780	C		00006380
RHOAT = RHOAT / 1.0E24	00005790	С		00006390
NUM = NX * NY	UOCO5800	С	CALCULATION OF THE START VALUES	00006400
RNX = FLOAT(NX)	00005810	С	======================================	00006410
RNY = FLOAT(NY)	00005820	Ċ		00006420
EMIN = 500 a	00005830	-	CALL START (DEPSI-PXMAT-PYMAT-XMAT-YMAT-	00006430
$A2 = A / 2 \cdot 0$	00005840		1 ENAT.NX.NY.FO)	06606440
A4 = A / 4 = 0	00005850	r		00006450
	00005860	ř		00006460
$A_{1} = A_{1} + A_{2} + A_{3}$	00005870	č		00006470
A = SW(1 + 2 + 0) + A	00005870	L	DCLING 1	00006470
$ASWZ = ASW / Z \bullet U$	00005880		KEWINU I	00008480
	00005890		READ (1) PAMAT	00068490
ASOB = ASO / 8.0	00005900		REAU LLI PYMAI	00006500
ASO15 = 1.5 * ASO	00005910		READ (1) XMAT	00006510
RYD = 0.0136	00005920		READ (1) YMAT	00006520
THV45 = 1.0 / (COS {PI / 4.0) * SQRT (1.0 / (THV1 * THV1)	00C05930		READ (1) EMAT	00006530
1 + 1.0 / (THV2 * THV2)))	00005940		READ (1) TA	00006540
ZVAL = 3. * ZVAL1 / 4. + ZVAL2 / 4.	00005 950		READ (1) SILV, SILSI	00006550
	00005960	C		00006560
MASS UNIT IN KEV / C ** 2	00005970	С	CALCULATION OF THE RANDOM VALUES	00006570
	UQUQ5980	С	***************************************	00006580
	00005990	с		00006590
0_{1}	00006000		S = 1.0	00006600
	00006010		AM = 0.0	00006610
SPEED DE LIGHT IN CM / SEC	00006020		$1 \times 0 = 563245897$	00006620
	00006030	r		00006630
	00006040	U	nn = 3000 f = 1.12000	00006640
C_{1}	00006040		$CALL GAUSS (TYD_S_AM_V)$	00006650
$CLIGHI = 3.00 \times 10$	0000000000		DNDPW/TY - V	00006660
	00000000		TUVEN1/17 - 7 0	00006670
UCSQ ≠ UCSQ ¥ FMPART	00006070		$\frac{1}{1}$	00006070
	00006080		IHVBV2(I) = 0.0	00008880
V - FERMI IN CM / SEC	00006090		1HV0SI(1) = 0.0	00006640
	00006100		IF (IHVI .EU. 0.0) GCTU 3000	00006700
	00006110		CALL GAUSS (IXO.THVI.AM.V)	00006710
VFERMI = 2.6E+8	00006120		THVRV1(I) = V	00006720
FMELEC = 5.4859E-4	000061 30		CALL GAUSS (IXO,THV2,AM,V)	00006730
ELSCAT = FMELEC / (2. * FMPART)	00006140		THV8V2(I) = V	00006740
DEPHI = PI / (2.0 * FLOAT (NUM))	00006150		CALL GAUSS (IXO,THSI,AN,V)	00006750
PHILIM = 20.0 * PI / 180.0	00006160		THVBSI(I) = V	00006760
U2V = THV2 * SORT (2.0)	00006170	3000	CONTINUE	00006770
U2S = THSI + SORT (2.0)	00006180	c		00006780
RESOLE # WINTH	00006190	-	IX0 = 1506561	00006790
	00006200		IX = 200453	00006800
ESOD - 1.44E-7	00006210		00.5280.1 = 1.2200	00006810
LJWN - 1877E-2 ATCV - 0.0003 + AUVN / 70 ++ /1 /2 1	00006220		CALL RANDIL (TX-TY-YRAND)	00006820
AIFV = 0.0073 + ANIV / LV ++ (1./3.)	00000220		TY + TV	00000820
ATESI = 0.0053 = AHYD / ZSI == (1./3.)	00006230		17 - 11	000000000000000000000000000000000000000

•

c c

CCCC CCCC

с С С С

- 88 -

	PUNIF(1) = XRANU	00006840	C			00007440
	CALL GAUSS (IXU)SAAMAVI	00006850			IF (INVI .EG. 0.0) GUIU 3820	00007450
6200	POPLITI = V	00006860			FRULI = LFART + LV + ESUR	00007460
r 9200	CONTINUE	00006870			SCRIT1 = 5 A ± THV2	00007470
č		00006890			$SCRITZ = 5.0 \times THST$	00007460
U		0000000000				00007490
С		00006910			UCRIT2 = 0.0	00007510
č		00006920			DO 3700 I = 1.3	00007520
č	CUTPUT OF CONTROL VALUES	00006930			BSREL1 = - BETA(I) * SCRIT1 / ATEV	00007530
Ċ		00006940			BSREL2 = - BETA(I) + SCRIT2 / ATFSI	00007540
Ċ		00006950			IF (BSREL1 .LT100.0) GCTC 3700	00007550
Ċ		00006960			UCRIT1 = UCRIT1 + ALFA(I) * EXP (BSREL1)	00007560
	WRITE (6,1410) DATE, TIME	00006970			IF (BSREL2 .LT100.0) G0TO 3700	00007570
	WRITE (6,1170)	00006980			UCRIT2 = UCRIT2 + ALFA(I) + EXP (BSREL2)	00007580
	WRITE (6,1171) (CRYST(I).I=1,4), ZV, FMV, EXCITV, ZSI, FMSI,	00006990	3	100	CONTINUE	00007590
	1 EXCITS	00007000			UCRIT1 = UCRIT1 * FMCL1 / SCPIT1	00007600
	PSX = PH1 * 180+0 / PI	00007010			UCRIT2 = UCRIT2 * FMCL2 / SCRIT2	00007610
	PSY = THETA * 180.0 / PI	00007020			WRITE (6.3840) UCRIT1. UCRIT2	00007620
	DPS = DEPSI * 180.0 / PI	00007030	С			00007630
	WRITE (6.1172) A. RHT, PLSMEN, ZVAL	000 07040			IF (ISEC .EQ. 2) GOTO 5300	00007640
	WRITE (6,1173) (PART(I),I=1,4), ZPART, FMPART, EO, QQ,	0000 7050	С			00007650
	1 DPS, TEMP, THVL, THV2, THSI, PSX, ROTAT, PSY	00007060	С		1 0 0 - DIRECTION	00007660
	WRITE (6.1174) FWHM, WIDTH, ORIGIN, BANGLE, CMEGA,	00007070	C		***************************************	00007670
	1 IWIND1, IWIDTH, RAND1, IWIND2, IWIDTH, RAND2,	00007080	С			00007680
	2 IWIND3, IWIDTH, RAND3, IWIND4, IWIDTH, RAND4,	00007090			DO 3710 L = 1.NX	00007690
	3 ININDS, INIDTH, RANDS	00007100			$\frac{1}{10} \frac{3}{10} K = 1 \text{ NY}$	00007700
	WRITE (6.1190)	00007110			$P_{XK} = P_{XRAT(K+L)}$	00007710
	AVRG = A + FLOAT (MEAN)	00007120			PYKEL = PYMATIK+LJ	00007720
	DEPTH = A * NLAY * MEAN	00007130			A = AMAT(K+L) V = VMAT(V +)	00007730
	IF (ISEC .EQ. 2) AVRG = ASQ + FLUAN (FEAN)	00007140			T = TMATINE) C = CMATINE ()	00007740
	IF (ISEC .EQ. 2) DEPIH = ASQ = NLAY = MEAN	00007150			E - EMAILAILI Det - Adége II a / côrt (dydei + dydei - dydei + dydei - 1 ail	00007750
	BRITE (6.1195) NUM, NA, NY, MEAN, NLAY, LEPTH	00007180			FSI - ARGUS II.00 / SWRI LFARE, * FAREL * FIREL * FIREL * L007) EDGIS - E # DGI # DGI	00007780
~	WRITE 10,52933 UPLCM, UPIREA, PERC	00007170				00007780
L C		00007180			103701 = 1.4	00007790
L	e_{x}	00007200				00007800
	EXCITE = EXCITE / 1000 0	00007210			S = SORT (1X - XSCATI(1)) * (X - XSCATI(1)) +	00007810
	excises - excises / 100000	00007220		1	(Y - YSCATI(I)) + (Y - YSCATI(I))	00007820
	FLSMEN = FLSMEN + 100000	00007230		-	SREL = S / ATFV	00007830
	EPO = EPO + ENPART + RHOAT / EMELEC	00007240			DO 3730 M = 1.3	00007840
	RETHEV = 4-0 * EMELEC / (EMPART * EXCITV)	00007250			BESREL = - BETA(M) + SREL	00007850
	BETHES = 4.0 + FMELEC / (FMPART + EXCITS)	00007260			IF (BESREL .LT100.0) GOTC 3730	0007860
	PLASMO = 4.0 * FMELEC / (FMPART * PLSMEN)	00007270			V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)	00007870
	BANGLE = BANGLE * PI / 180.0	00007280	3	730	CONTINUE	00007880
	FL1 = COS (THETA + BANGLE - PI / 2.0)	00007290			VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S	00007890
	FNI = COS (THETA + BANGLE)	0000 7300	3	1720	CONTINUE	00007900
	COSTHE = COS (THETA)	0000 7310			DO 3740 I = 5,6	00007910
С		00007320			V2 = 0.0	00007920
С		00007 330		_	S = SORT ((X - XSCATI(I)) + (X - XSCATI(I)) +	00007930
	CALL KINFCT (FMV,FKFV)	. 00007340		1	(Y - YSCATL(I)) * (Y - YSCATL(I)))	00007940
	CALL KINFCT (FMSI.FKFS)	00007350			SKEL = 5 / AIFSI	00007950
	ELIM ⇒ FKFV ≠ EO	00007360			UU JIJU M 4 193 Decoci — _ Detaim) + (Dei	00007900
	IMP = O	00007370			DESNEL DETAINT - SNEL TE (RESPEL IT -100 0) COTO 3750	20007990
С		00007380			$V_2 = V_2 + A(FA(W) + FYD + RESOFT)$	00007900
	IF (.NUT. NEGLEC) GOTO 3820	00007390	7	760	TE - TE T ALTAINT T CAP I DEGREE 7 CONTINUE	00008000
C	THE TATION TO DESTING TO LETH WITH TOALCHEDED FURDOW	00007400		1.30	VCIN = VCIN + V2 * FNGI2 / C	60066010
C	LIMITATION TO PARTICLES WITH HIGH TRANSVERSE ENERGY	00007430	2	740	CONTINUE	00008020
C		00007420	5		VSUM ± VSUM + EPST2	00008030
C		00001450				

С IF (VSUM .GT. UCRITI) GOTE 3710 ç VSUM = 0.0DO 3760 I = 1.4V1 = 0.0S = SQRT ((X - XSCAT3(I)) + (X - XSCAT3(I)) +1 (Y - YSCAT3(I)) + (Y - YSCAT3(I)))SREL = S / ATEV DO 3770 M = 1.3 BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. -100.0) GOTO 3770 V1 = V1 + ALFA(M) + EXP (BESREL)3770 CONTINUE VSUM = VSUM + VI * FMCL1 / S 3760 CONTINUE DO 3780 I = 5.6 V2 = 0.0S = SQRT ((X - XSCAT3(I)) + (X - XSCAT3(I)) +(Y - YSCAT3(I)) + (Y - YSCAT3(I)))1 SREL = S / ATFSI DO 3790 M = 1.3 BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. -100.0) GOTO 3790 V2 = V2 + ALFA(M) + EXP (BESREL)3790 CONTINUE VSUM = VSUM + V2 * FMOL2 / S 3780 CONTINUE VSUM = VSUM + EPSI2 С IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTO 3710 С VSUM = 0.0V1 = 0.0 $S = SORT \{X + X + Y + Y\}$ SREL = S / ATEV DO 3800 M = 1.3BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. -100.0) GOTO 3800 V1 = V1 + ALFA(M) + EXP (BESREL)3800 CONTINUE VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S VSUM = VSUM + EPSI2 С IF (VSUM .GT. UCRITI) GOTO 3710 С EMAT(K.L) = 0.0 IMP = IMP + 1С 3710 CONTINUE С С GOTO 5310 5300 CONTINUE С 1 1 0 - DIRECTION С ***==== С C 00 5320 L = 1.NX 00 5320 K = 1.NY

00008040		PXREL = PXMAT(K+L)	00008640
06608050		PYREL = PYMAT(K.L)	00008650
00008060		$X = XMAT(K_{\bullet}L)$	00008660
00008070		$Y = YMAT(K_{\bullet}L)$	00008670
00008080		$E = EMAT(K_{\bullet}L)$	00008680
00008090		PSI = ARCOS (1.0 / SORT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00008690
00008100		EPSI2 = E * PSI * PSI	00008700
00006110		VSUM = 0.0	00008710
00008120		DO 5330 I = 1.5	00008720
00008130		V2 = 0.0	00008730
00008140		S = SORT ((X - XSCT2)(T)) + (X - XSCT2)(T)) +	00008740
00008150	1	[Y - YSCT21(T)] + (Y - YSCT21(T))	00008750
00008160	-	SRFI = S / ATEST	00008760
00008170		DI = 5340 M = 1.3	00008770
00008180		AFSREI = - BETAIN) * SREI	00008780
00008190		E = E = 1 = -100.00 GOTO 5340	00008790
00008200			000008800
00000200	5740		0000000000
00000220	5340		0000000000
00000220	5330		000008820
00008230	1550		000008840
00000240	r	430M - 430M + E4312	000008940
00008250	L		200008860
00008280	~	IF LASUR -GI- UCKIIZI GUIU 3320	00000887
00008270	C		600008870
00008280			000008880
00008290			000000000
00008300			22228010
00008310		S = SURI ([A - ASU[22[1]] + (A - ASU[22[1]]) + (A - ASU[22[1])) + (A	20008910
00008320	1	(f - fsc(22(1)) + (f - fsc(22(1))))	00008920
00008330		SREL = S / AIFV	00008930
00008340		DU 5360 M = 1.3	00008940
00008350		BESREL = - BETA(M) * SREL	00008950
00008360		IF (BESREL .LT 100.0) GDTC 5360	00008960
00008370		VI = VI + ALFA(P) = EXP (BESREL)	00008970
00008380	5360	CONTINUE	00008980
00008390		VSUM = VSUM + VI # FPGLI / S	00008990
00008400	5350	CONTINUE	00009000
00008410	-	VSUM = VSUM + EPSI2	00009010
00008420	С		00009020
00008430	_	IF (VSUM .GT. UCRITI) GUTC 5320	00009030
00008440	С		00009040
00008450		VSUM = 0.0	00009050
00008460		DO 5370 I = 1.2	00009060
000C8470		$v_1 = 0.0$	00009070
0 0C08480		S = SORT ((X - XSCT23(I)) + (X - XSCT23(I)) +	00009080
00008490	1	(Y - YSCT23(1)) * (Y - YSCT23(1))	00009090
000085 00		SREL = S / ATFV	00009100
00008 510		DO 5380 M = 1.3	00009110
000085 20		BESREL = BETA(M) * SREL	00009120
00008530		IF (BESREL .LT 100.0) GOTC 5380	00009130
000085 40		V1 = V1 + ALFA(M) + EXP (BESREL)	00009140
00008550	5380	CONTINUE	00009150
00008560		VSUM = VSUM + V1 * FMCL1 / S	00009160
000085 70	5370	CONTINUE	00009170
000085 80		VSUM = VSUM + EPSI2	00009180
00008590	С		00009190
00008600		IF (VSUM .GT. UCRITL) GOTO 5320	00009200
00008610	C		00009210
00608620		VSUM = 0.0	00009220
00008630		DO 5390 I = 1.3	00009230

V1 = 0.0S = SORT ((X -/XSCT24(I)) * (X - XSCT24(I)) + (Y - YSCT24(1)) + (Y - YSCT24(1)))1 SREL = S / ATEV D0 5400 M = 1.3BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5400 V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL) 5400 CONTINUE VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S 5390 CONTINUE VSUM = VSUM + EPSI2 С IF (VSUM .GT. UCRITI) GOTO 5320 С VSUM = 0.0 DD 5410 I = 1.4 $V_{2} = 0.0$ S = SORT ((X - XSCT25(1)) + (X - XSCT25(1)) +(Y - YSCT25(1)) * (Y - YSCT25(1))) 1 SRFL = S / ATFSI DO 5420 M = 1.3 BESREL = - BETA(M) * SREL IF (PESREL .LT. - 100.0) GOTC 5420 V2 = V2 + ALFA(M) + EXP (BESREL)5420 CONTINUE VSUM = VSUM + V2 * FHOL2 / S 5410 CONTINUE VSUM = VSUM + EPSI2 С IF (VSUM .GT. UCRIT2) GOTO 5320 С VSUM ≠ 0.0 DG 5430 I = 1.3 V1 = 0.0S = SQRT ([X - XSCT26(]]) * (X - XSCT26(])) + (Y - YSCT26(1)) * (Y - YSCT26(1)))1 SREL = S / ATEV DO 5440 M = 1.3BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5440 V1 = V1 + ALFA(M) + EXP (BESREL)5440 CONTINUE VSUM = VSUM + VL * FMCL1 / S 5430 CONTINUE VSUM = VSUM + EPSI2 С IF (VSUM .GT. UCRITI) GOTO 5320. С VSUM = 0.0 DO 5450 I = 1.2V1 = 0.0S = SORT ((X - XSCT27(I)) * (X - XSCT27(I)) + (Y - YSCT27(1)) + (Y - YSCT27(1)))1 SREL = S / ATFV D0 5460 M = 1.3BESREL = - BETA(M) * SREL IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5460 V1 = V1 + ALFA(M) + EXP (BESREL)5460 CONTINUE

00009240		VSUM = VSUM + V1 + FN011 / 5	00009840
00009250	5450	CONTINUE	0000000000
00009260	2420		030009850
00000270	r		00009800
00009290	C	LE LUSUM CT LUCATTLA COTO 5220	00009870
00009280	~	IF 1030F .GT. UCKITT/ GUTU 5520	00009880
00009290	L		00009890
00009300		VSUM = 1.0	00009900
00009310		0054701 = 1.5	00009910
00009320		VI = 0.0	JOCC9920
00009330		S = SORT ((X - XSCT28(I)) + (X - XSCT28(I)) +	00009930
00009340		$1 \qquad (Y - YSCT28(1)) + (Y - YSCT28(1)))$	00C09940
00609350		SRFL = S / ATFV	00009950
00009360		DN 5480 M = 1,3	00009960
00009370		BESREL = - BETA(M) * SREL	00009970
00009380		IF (BESREL .LT 100.0) GOTO 5480	00009980
00009 390		V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)	00009990
00009 400	5480	CONTINUE	00010000
U0009410		VSUM ≠ VSUM + VI ≭ FMOLI / S	00010010
000 0 9420	5470	CONTINUE	00010020
00009430		VSUM = VSUM + EPSI2	00010030
00009440	С		00010040
00009450		IF (VSUM .GT. UCRITI) GGTG 5320	00010050
00009460	С		00010060
00009470		$EMAT(K \cdot L) = 0.0$	00010070
00009480		IMP = IMP + 1	00010080
00009490	C		00010090
00009500	5 3 2 0	CONTINUE	00010100
00009510	c		00010110
00009520	5310	CONTINUE	00010120
00009530	c		00010130
00009540		WRITE (6.38)0) IMP	00010140
00009550	c		00010150
00009560	3820	CONTINUE	00010160
00009570	2020		00010170
00009580	c		33313180
00009590	ř		00010100
00009390	č	OUTDUT OF THE STADT VALUES	00010190
000030610	č		00010200
00009810	č		00010210
00009620	č		00010220
00009830	L		00010230
00009640			00010240
00009650		BALLE (0)LOGOU	00010250
00009000		LOTTE (4.1070)	00010280
00009670		RAILE (0110/0)	00010270
00009680		HELIE (041000) FIMAL LDITE (4.1040)	00010280
00009690		NATE (4 1050) VNAT	00010290
00009700		REITE 100 10007 AMAI	00010300
00009710			00010310
00009720		WKI1E (0,1000) THAT	00010520
00009730		REIE 1011001 . Note (4 1050) ENAT	00010330
00009740	~	PRIIC (001000) EMAI	00010340
00009750	L C	NKIIC (DELLU)	00010350
00009760	L C	NKIIE (0+1020) IA	00010360
00009770	C	WKIIE (6.1120)	00010370
00009780	c	WRITE (6.1050) SILV	00010380
00009790	C	WRITE (6.1130)	00010390
00009800	C	WRITE (6.1050) SILSI	00010400
00009810	C	WRITE (6+1140)	00010410
00009820	С	WRITE (6.1050) PNORM	00010420
00009830	C	WRITE (6,1150)	00010430

- 91 -

C	WRITE (6,1050) THVBV1	00010440	С		00011040
С	WRITE (6,1160)	00010450		IF (E.EQ.0.0) GOTO 3010	00011050
C	WRITE (6+1050) /THVBSI	00010460		IF (E.LT.EMIN) GOTO 3130	00011060
С		00016 470	С		00011070
4550	CONTINUE	00010480		$EMAT(L \cdot K) = 0 \cdot 0$	00011080
С		00010 490	С		00011090
С		00010500	Ċ		00011100
С		00010510		CALL RANDU (IXO,IYO,XRAND)	00011110
С	CALCULATION OF THE TRAJECTORIES	00010520		IXO = IYO	00011120
С		00010530		IGAUSS = IFIX (10000.0 * XRAND) + 1	00011130
C		00010540		IEQ = IEQ1	00011140
C		00010550	С		00011150
	CALL STRUCT (A)	00010560	č		00011160
	CALL DAMGPR (DAMAX)	00010570	•	CALL SCATE (X.Y.PXREL, PYREL, E.IGAUSS, IEQ. IDEPTH.	00011170
С		00010580		1 63040-63050-63045-630551	00011180
•	IX0 = 672381545	00010590	r		00011190
	AEGIN = 7EIT(0)	00010600	č		00011200
	FIMAX = 0.0	00010610	ç	X = ANOD (X + SIGN (A2, X) = A)	00011210
C		00010620		X = X - SIGN (A2, X)	00011220
č		00010630		Y = ANOD (Y + SIGN (A2,Y) - A)	00011230
ř	100 - DIRECTION	00010640		$\mathbf{Y} = \mathbf{Y} = \mathbf{SIGN} \left[\mathbf{A}_2, \mathbf{Y} \right]$	00011240
Č		00010650		Y = Y = 310H (HZ = 15 - 1)	00011250
č		00010660		$A_{2}(0) = A_{1}(0) + A_{2}(0) + A_{3}(0) $	00011260
č		00010600		FSUD = AHUD (T + AID + A)	00011270
č		00010670		$\frac{1}{1} = \frac{1}{1} + \frac{1}$	00011290
L		00010680		LINIT - IFIA (KNE - FOOT/INTY INTY) + 1 A	00011200
~		00010890		CLUSI(INTY INTA) + CLUSI(INTY INTA) + C	00011290
L	20 2020 L - 1 NLAX	00010700		$EDSI(IN(T_{0}IN(X) \neq EDSI(IN(T_{0}IN(X) \neq E)))$	00011310
~	JU JUZU J = I MLAY	00010710	~	6010 5000	00011320
L		00010720	L C		00011320
		00010730		0 ID - I	00011350
	$UU 3U25 J2 = I \cdot NX$	00010740	304	U = J	00011340
	$\begin{array}{c} \text{DU} 3\text{D25} \text{JI} = 1 \text{ I NY} \end{array}$	00010750		$DECH(ID_{F}I) = DECH(ID_{F}I) + I_{F}U$	00011350
	FLOST(J1,J2) = 0.0	00010760		$EDECH(IU_{\bullet}I) = EDECH(IU_{\bullet}I) + E$	00011380
	EDST(J1, J2) = 0.0	00010770		EMATILIKI # 0.0	00011370
3025	CONTINUE	00010780		GUTU 3130	00011380
С		00010790	C		00011340
	DO 3030 I = 1.MEAN	00010800	C		00011400
	DPTH = (J - 1) * MEAN * A + 1 * A	00010810	304	5 1F (J.GI.I) GUIU 3040	00011410
	DPTH = DPTH - A / 2.0	00010820		SDECH(I) = SDECP(I) + I.0	00011420
	IDEPTH = IFIX (OPTH / RESOLD + 0.5)	00010830		ESDECH(1) = ESDECH(1) + E	00011430
	PHIT = PHI	00010840		$EMAT(L_{\bullet}K) = 0.0$	00011440
	CALL DISTFU (DPTH.DPTMEA.DAMAX.DISTR)	00010850		GOTO 3130	00011450
	PRDP = PERC / 100. * DISTR	00010860	C	•	00011460
С		00010870	C		00011470
	CALL RANDU (IXC.IYO.XRAND)	000108 80	305	O ID = J	00011480
	$I \times Q = I Y Q$	000108 90		$DECH(ID_{0}3) = DECH(ID_{0}3) + 1.0$	00011490
	IEQ1 = IFIX (2000.0 * XRAND) + 1	00010900		EDECH(ID,3) = EDECH(ID,3) + E	00011500
С		00010910		EMAT(L,K) = 0.0	00011510
	DO 3010 K = $1.NX$	00010920		GOTO 3130	00011520
	DO 3010 L = 1.NY	00010930	C		00011530
С		00010940	C		00011540
	IF (.NOT. ROTAT) GOTO 4540	000109 50	305	5 IF (J.GT.1) GOTO 3050	00011550
	PHIT ≠ PHIT + DEPHI	00010960		SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0	00011560
	COSPHI = COS (PHIT)	00010970		ESDECH(3) = ESDECH(3) + E	00011570
	SINPHI = SIN (PHIT)	00010980		$EMAT(L_{*}K) = 0.0$	00011580
4540	X = XMAT(L,K)	00010990		GOTO 3130	00011590
	$Y = YMAT(L_{F}K)$	00011000	С		00011600
	$PXREL = PXMAT(L \cdot K)$	00011010	С		00011610
	PYREL = PYMAT(L,K)	00011020	306	O CONTINUE	00011620
	E = EMAT(L.K)	00011030	С		00011630

C	
~	CALL SCAT2 (X.Y.PXREL, PYREL, E, IGAUSS, IEQ, IDEPTH, 63070, 63075)
c	
-	X = AMOD (X + SIGN(A2,X), A)
	X = X - SIGN(A2.X)
	$Y = AMUD \{Y + SIGN \{A2,Y\}, A\}$
	XSUB = AMOD (X + A15 + A)
	YSUB = AMOD (Y + A15 + A)
	INTX = IFIX (RNX + XSUB / A) + 1
	$FIDST(INTY, INTX) = FIDST(INTY, INTX) + 1_0$
	EDST(INTY, INTX) = EDST(INTY, INTX) + E
-	GOTO 3080
C C	
3070	ID = J
	DECH(ID,2) = DECH(ID,2) + 1.0
	EDECH(ID,2) = EDECH(ID,2) + E
	GOTO 3130
С	
C	15 (1 CT 1) COTO 2073
3075	SDECH(2) = SDECH(2) + 1.0
	ESDECH(2) = ESDECH(2) + E
	EMAT(L,K) = 0.0
с	6010 5150
C	
3080	CONTINJE
Ċ	
	CALL SCAT3 (X, Y, PXRFL, PYREL, E, IGAUSS, IEQ, IDEPTH,
r	1 63090+63100+63095+63105)
č	
	$X = AMOD \left\{ X + SIGN \left\{ A2, X \right\}, A \right\}$
	X = X → SIGN (A2+X) Y = AMOD (Y + SIGN (A2+Y) + A)
	Y = Y - SIGN (A2, Y)
	XSUB = AMOD (X + A15 + A)
	$YSUB \neq AMOD \{Y + A15 + A\}$ $INTY = 1FTY (BNY + YSUB / A) + 1$
	INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
	FLDST(INTY, INTX) = FLDST(INTY, INTX) + 1.C
	EDST(INTY,INTX) = EDSI(INTY,INIX) + E
С	
C	
3090	IV = J DECH(ID.)) = DECH(ID.)) + 1.0
	EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
	EMAT(L.K) = 0.0
3005	GUTU 3130 TE (1.GT.1) GDTO 3090
3039	SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
	ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
	EMATILSKJ = 0.0

00011660		6010 3130	00012240
00011650	r	6010 5130	00012240
00011650	č		00012290
00011680	2100		00012260
00011670	3100	IU = J	00012270
00011660		$D \in O(1045) = D \in O(1045) \neq 1.6$	00012280
00011890		EDECH(10,3) = EDECH(10,3) + E	00012290
03011700			00012300
00011710		GUTU 3130	00012310
00011720	C		00012320
00011730	C		00012330
00011 740	3105	IF (J.GT.1) GOTO 3100	00012340
00011 750		SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0	00012350
00011 760		ESDECH(3) = ESDECH(3) + E	00012360
00011770		$EMAT(L \cdot K) = O \cdot O$	00012370
00011780		GOTC 3130	00012380
00011790	С		00012390
000118 00	С		00012400
00011810	3110	CONTINUE	00012410
00011820	c		00012420
00011830	č		00012430
00011840	•	CALL SCAT2 (X.Y.PXREL.PYREL.F.IGAUSS.IEO.IDEPTH.63120.63122)	00012440
00011850	c		00012450
00011860	ř		00012460
00011870	ι.	$Y = AHOD \{Y \in SLCN \{A2, Y\} = A\}$	00012400
00011860		A = APUU LA = SION LA24AI + AJ	00012470
00011800		A = A = 5100 (A25A)	00012480
00011890		Y = AMUU [Y + SLON [A2] Y] + P	00012490
00011900		T = T - SIGN (AZett)	00012500
30011910		XSUB = AMUD (X + AIS + A)	00012510
00011920		$YSUB = AMUD \{Y + AI5, A\}$	00012520
00011930		1NIX = IFIX (KNX = XSUB / A) + 1	00012530
00011940		INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1	00012540
JJ0119 50		FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.C	00012550
00011 960		EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E	00012560
000119 70		GOTO 3125	00012570
00011980	с		00C12580
00011990	С		00012590
00012000	3120	ID = J	00012600
00012010		DECH(ID,2) = DECH(ID,2) + 1.0	00012610
00012020		$EDECH(ID_{2}) = EDECH(ID_{2}) + F$	00012620
00012030		EMAT(L,K) = 0.0	00012630
00012040		GOTO 3130	00012640
00012050	C		00012650
00012060	č		00012660
00012070	1122	IE (J_GT_L) GOTO 3120	00012670
00012080		SDECH(2) = SDECH(2) + 1.0	00012680
00012090		FSDECH(2) = FSDECH(2) + F	00012690
00012100		$E A \Delta T \{1, k\} = 0.0$	00012700
00012100			00012710
00012110	r		00012720
00012120	č		00012720
00012130	5175	CONTINUE	00012740
00012140	~ JIZ)		00012750
00012150	5		00012730
00012160	C C		00012760
00012170	L		00012770
00012180	_	IF (E.LI.EMIN) GUIU 3130	00012780
00012190	С		00012790
00012200	С		00012800
00012210		PXMAT(L+K) = PXREL	00012810
00012220		PYMAT(L K) = PYREL	00012820
00012230		XMAT(L,K) = X	00012830

	YMAT(L+K) = Y	00012840	с	
	EMAT(L+K) = F	00012850		11 - 1
3130	CONTINUE	00012050		11 = 1
		00012880		00 5025 JZ
L		00012870		DO 5025 J1 -
С		00012880		FLDSTLIL
3010	CONTINUE	60012890		EDCT(11 13)
<i>c </i>		00012090		EUSTIJ1.J21
L		00012900	5025	CONTINUE
3030	CONTINUE	00012910	с	
c		00012920		DD 5030 I -
ř		00012920		00 0030 1 -
L.		00015330		DPTH = [J =
C	CHANGE TO PERCENTAGE OF NORMALIZED FLUX	00012940		DPTH = DPTH
C	=======================================	00012950		IDEPTH - IE
ć		00012060		
C C		00012980	_	PHII = PHI
	$DU 32IU K = I_{\bullet}NX$	00012970	C	
	DO 3210 L = $1.NY$	00012980		CALL RANDU
	$IE (ELDST(1+K) = GT_{0}(0+0) EDST(1+K) = EDST(1+K) / ELDST(1+K)$	00012990		$I_{YO} = I_{YO}$
	(1) Contraction (1) Contrac	00012990		140 - 170
	$PEUST(L_{K}) = PEUST(L_{K}) / (4.0 + PEAK + NKUM / NUM) + 100.0$	00013000		IEQI = IFIX
	IF (FLDST(L.K) .GT. FLMAX) FLMAX = FLDST(L.K)	00013010	С	
С		00013020		DD = 5010 K =
2210	CONTINUE	00013030		
3210	CONTINUE	00013030	_	DO 2010 L =
C		00013040	С	
С		00013050		IF (ANOTA RE
ř	OUTRUS OF AND FOST ON TADE AND TSTUD	00013060		BUTT - OUTT
	SOFFET OF FEDST AND EDST ON TAFE AND ISTEID	00013000		PHII - PHII
L	F3E1E5122491F6663FFFEEE22X621163224252424	00013070		COSPHI = COS
C		00013080		SINPHI = SIN
r		00013090	5040	CONTINUE
Ũ	UNITE FINAL FLORE	00013000	2040	CONTINUE
	WRITE (TUN/ FLUST	00013100	L	
	WRITE (IUN) EDST	00013110		$X = XMAT(L_{*})$
	WRITE (2) FLOST	00013120		Y = YMATIL
	URITE (2) EDST	00013130		DYDEL - DYN
-	HPATE (2) EDDI	00013130		PAREL - PARA
С		00013140		PYREL = PYN
C		00013150		E = EMAT(L.H
	DIGE - ZEIT (ACCIN)	00013160	r	
		00015100	C C	
	IF (DIFF.GI.ENDI) GUIU 3021	00013170		IF (E .EQ. (
с		00013180		IF (E .LT. E
ŕ		00013190	r	
		00013170	C	
3020	CONTINUE	00013200		EMAILLYKJ =
С		00013210	С	
3021	CONTINUE	00013220		CALL RANDU
r		00013230		IXO = IXO
L L		00013230		1.0 - 1.0
C		00013240		1GAUSS = 1FI
с	END OF THE CHANNELING PROCESS	00013250	Ç	
ŕ		00013260		1E0 = 1E01
č		00013270	~	
L		00013270	L	
С		00013280		CALL SCAT21
	DIFE = ZEIT (BEGIN)	00013290	C	
		00013300	ř	
	NRITE (0, 3022) JJ, DIFF	00013300	C	
	DEPTH = JJ * MEAN * A	00013310		X = AMOD(X)
	NLAY = JJ	00013320		X = X - SIGN
r		00013330		Y = AMOD (Y)
C	ACTA (200	00010000		
	GUTU 5230	00013340		$\mathbf{r} = \mathbf{r} - SIGN$
С		00013350		XSUB = AMOD
с		00013360		YSUB = AMOD
ř		00013370		INTY = IFTY
L.	TIU - DIRECTION	00010010		
С		00013380		INIY = IFIX
c		00013390		FLDST(INTY.I
ř		00013400		FOST INTY-IN
		00013410		COTO 50/0
5000		00013410		9010 2060
С		00013420	С	
-	DD 5020 L = 1-NIAY	00013430	r	
	DD JOZO J - IINCAI	00013430	•	

60	0		
	-	· · · ·	00013440
U		1 = 1	00013450
50		$DO_{5025} I_2 = 1.02$	6.000.00000
			00013460
0		$DO 2025 JI = I_{PNY}$	00013470
30		FLDST(J) = 0.0	00012680
0.0			00013480
		$cost(j_1, j_2) = 0.0$	00013490
00	5025	CONTINUE	00013500
Å.	c		00013300
	L.		00013510
20		DO 5030 I = 1.MEAN	0.0013620
10			00013920
		$DPIH = \{J = I\} \neq MEAN \neq ASQ + I \neq ASQ$	00013530
+0		DPTH = DPTH - ASQ2	00013540
50		IDERTH - LETY (DOTU (OFCOLD : A C)	00013340
		10EFID = IFIX (UPID / RESULD + 0.5)	00013550
50		PHIT = PHI	00013560
70	c		00015500
	C.		00013570
30		CALL RANDU (IXO.IYO.XRAND)	00013580
20			00015500
		120 - 110	00013590
00		IEQ1 = IFIX (2000.0 * XRAND) + 1	00013600
0	r	· · · · · · ·	00015000
	U U		00013010
20		DO 5010 K = 1.NX	00013620
30		$DO_{5010} I = 1.0 Y$	00012(20
	-		00013630
•O	Ç		00013640
50		IE (NOT, ROTAT) COTO 5040	00013650
		IF (NOT KUTATI GUL JU40	00013650
50		PHIT = PHIT + DEPHI	00013660
70		COSPHI - COS (PHIT)	00013000
		COSPHI - COS (PHII)	00013670
30		SINPHI = SIN (PHIT)	00013680
20	5040	CONTINUE	
	2040	CONTINCE	00013690
00	С		00013700
0		Y = YWAT(1 - K)	00012710
			00013110
20		$Y = YMAT(L_{*}K)$	00013720
10		PYREI = PYNAT(I,K)	00013733
			00013130
•O		PYREL = PYNAT(L.K)	00013740
50		E = EMAT(L_K)	00013750
	•	E - CORTERN	00013130
0	ι,		00013760
70		IE (E., EQ. 0.0) COTO 5010	20012770
			00013110
10		IF (E .LT. EMIN) GUTO 5130	00013783
20	r		00013700
	•		00013/90
10		EMATLL+KJ = U_U	00013800
0	c		00013810
	•		00013810
0		CALL RANDO (IRO,IYJ, RAND)	00013820
30		IXO = IXO	00013830
0		TCAUSS - TETY (10000 0 + VDANDA - 1	00019090
FU		IGAUSS = IFIX (IUCUUUU + XRAND) + I	00013840
50	С		00013850
. n		150 - 1501	00013030
		ica - teat	00013860
70	С		00013870
		CALL COATSI AN M RADEL RUDGE C TOANGO TOA TOESTU COACA AGAGA	
		CALL SCATZE TATTAPARELAPTRELAPTRELAPTICAUSSATESATUEPTHASSUSUASSOS	00013880
20	C		00013890
10	ŕ		00010000
10	C		00013900
ιο .		X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 + X) + ASQ)	00013910
20		$\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{S}\mathbf{I}\mathbf{G}\mathbf{N}$ (ASO2 - \mathbf{X})	00013030
		A = A = 310H (A302 + A)	00013920
10		$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{M}\mathbf{U}\mathbf{D}$ ($\mathbf{Y} + \mathbf{S}\mathbf{I}\mathbf{G}\mathbf{N}$ (A2 , \mathbf{Y}) , A)	00013930
10		Y = Y - SIGN (A2 - Y)	000120/0
			00013940
>0		xsub = amuu (x + asq15 + asq)	00013950
<u>ا</u>		VSHB = ANOD (Y + A15 - A)	200120/0
		THE THE TARA TARA TARA T	00013400
10		INIX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1	00013970
10		TNTY = TETX (RNY * VSUA / A) + 1	00013000
			00013980
10		FLUSILINITOINTXJ = FLUST(INTYOINTX) + 1.C	00013990
00		FOST(INTY,INTX) = FOST(INTY,INTX) + F	00014000
		COTO FRANCIAL - EVENILATINAL * E	00014000
0		GUTU 2060	00014010
20	r		00014020
	ž		00014020
1 U	C		00014030

```
5050 \text{ ID} = J
                                                                          00014040 C
      DECH(ID_{3}) = DECH(ID_{3}) + 1.0
                                                                          00014050
                                                                                   C
      EDECH(IC.3) = EDECH(ID.3) + E
                                                                          00014060
                                                                                     5090 ID = J
      GOTO 5130
                                                                          00014070
                                                                                           DECH(ID.1) = DECH(ID.1) + 1.0
С
                                                                                           EDECH(ID+1) = EDECH(ID+1) + E
                                                                          00014080
C
                                                                          00014090
                                                                                          GOTO 5130
 5055 IF (J .GT. 1) GOTO 5050
                                                                          00014100
                                                                                    С
      SOECH(3) = SOECH(3) + 1.0
                                                                          00014110
                                                                                    C.
      ESDECH(3) = ESDECH(3) + E
                                                                          00014120
                                                                                     5095 IF (J .GT. 1) GOTO 5090
      GOTO 5130
                                                                          00014130
                                                                                           SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
¢
                                                                                          ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
                                                                          00014140
C
                                                                          00014150
                                                                                          GOTO 5130
 5060 CONTINUE
                                                                          00014160
                                                                                    C.
C
                                                                          00014170
                                                                                    C
С
                                                                          00014180
                                                                                     5100 CONTINUE
      CALL SCAT22 (X.Y.PXREL, PYREL, E, IGAUSS, IEC, IDEPTH, 65070, 65075)
                                                                          00014190
                                                                                    С
                                                                          00014200
                                                                                    С
C
                                                                          00014210
                                                                                          CALL SCAT24 (X.Y.PXREL.PYREL.E.IGAUSS, IEC. IDEPTH. 65110, 65115)
      X = AMOD (X + SIGN (ASQ2, X), ASQ)
                                                                          00014220 C
      X = X - SIGN [ASQ2 , X]
                                                                          00014230
                                                                                    С
      Y = AMOD \{Y + SIGN \{A2, Y\}, A\}
                                                                          00014240
                                                                                          X = AMOD \{X + SIGN \{ASO2 + X\} + ASC\}
      Y = Y - SIGN (A2, Y)
                                                                          00014250
                                                                                          X = X - SIGN (ASQ2, X)
      XSUB = AMDD (X + ASO15 + ASO)
                                                                          00014260
                                                                                          Y = AMOD (Y + SIGN (A2 + Y) + A)
      YSUB = AMOD (Y + A15 + A)
                                                                          00014270
                                                                                          Y = Y - SIGN (A2 + Y)
      INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
                                                                          00014280
                                                                                          XSUB = AMOD (X + ASO15 + ASO)
      INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
                                                                          00014290
                                                                                          YSUB = AMOD (Y + A15 + A)
      FLDST(INTY.INTX) = FLDST(INTY.INTX) + 1.C
                                                                          00014300
                                                                                          INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
      EDST(INTY, INTX) = EDST(INTY, INTX) + E
                                                                          00014310
                                                                                          INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
      GCT0 5080
                                                                         00014320
                                                                                          FLDST(INTY.INTX) = FLDST(INTY.INTX) + 1.0
С
                                                                          00014330
                                                                                          EDST(INTY.INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
C
                                                                          00014340
                                                                                          GOTO 5120
 5070 ID = J
                                                                          00014350
                                                                                    c
      DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
                                                                          00014360
                                                                                    С
      EDECH(ID_{1}) = EDECH(ID_{1}) + E
                                                                          00014370
                                                                                     5110 ID = J
      GOTO 5130
                                                                          00014380
                                                                                          DECH(ID_{1}) = DECH(ID_{1}) + 1.0
С
                                                                          00014390
                                                                                          EDECH(ID_{1}) = EDECH(ID_{1}) + E
С
                                                                          00014400
                                                                                          GOTO 5130
                                                                          00014410
 5075 IF (J .GT. 1) GOTO 5070
                                                                                   <u>с</u>
      SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
                                                                          00014420
                                                                                    С
      ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
                                                                                     5115 IF (J .GT. 1) GOTO 5110
                                                                          00014430
      GOTO 5130
                                                                          00014440
                                                                                          SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
                                                                          00014450
С
                                                                                          ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
                                                                          00014460
C.
                                                                                          GOTO 5130
 5080 CONTINUE
                                                                          00014470
                                                                                    C
                                                                          00014480
С
                                                                                    С
С
                                                                          00014490
                                                                                     5120 CONTINUE
      CALL SCAT23 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH, 65090, 65095)
                                                                          00014500 C
                                                                          00014510 C
С
                                                                          00014520
                                                                                          CALL SCAT25 (X.Y.PXREL.PYREL.E.IGAUSS.IEC.IDEPTH.65140.65145)
£
                                                                          00014530 C
      X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 + X) + ASQ)
      x = x - SIGN (ASO2, X)
                                                                          00014540 C
                                                                                          X = AMOD \{X + SIGN \{ASQ2, X\}, ASQ\}
      Y = AMOD (Y + SIGN (A2 + Y) + A)
                                                                          00014550
      Y = Y - SIGN (A2 + Y)
                                                                          00014560
                                                                                          x = x - SIGN (ASQ2, x)
      XSUB = AMOD (X + ASQ15 + ASQ)
                                                                          00014570
                                                                                          Y = AMOD (Y + SIGN (A2 + Y) + A)
      YSUB = AMOD (Y + A15 + A)
                                                                          00014580
                                                                                          Y = Y - SIGN (A2 + Y)
      INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
                                                                          00014590
                                                                                          XSUB = AMOD (X + ASO15 + ASO)
      INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
                                                                          00014600
                                                                                          YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
                                                                          00014610
      FLDST(INTY.INTX) = FLDST(INTY.INTX) + 1.C
                                                                                          INTX = IFIX (RNX + XSUB / ASC) + 1
                                                                         00014620
                                                                                          INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
      EDST(INTY, INTX) = EDST(INTY, INTX) + E
                                                                          00014630
                                                                                          FLDST(INTY, INTX) = FLDST(INTY, INTX) + 1.0
      GOTO 5100
```

- 95 -

00014640

00014650

00014660

00014670

00014680

00014690

00014700

00014710

00014720

00014730

00014740

00014750

00014760

00014770

00014780

00014790

00014800

00014810

00014820

00014830

00014840

00014850

00014860

J0014870

00014880

00014890

00014900

00014910

00614920

00014930

00014940

00014950

00014960

00014970

00014980

00014990

00015000

00015010

00015020

00015030

00015040

00015050

00015060

00015070

00015080

00015090

00015100

06015110

00015120

00015130

00015140

60015150

00015160

00015170

00015180

00015190

00015200

00015210

00015220

00015230

	EDST(INTY.INTX) = EDST(INTY.INTX) + E	00015240		INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
r	GUTU 5150	00015250		FLDST(INTY, INTX) = FLDST(INTY, INTX) + 1.C
č		00015260		EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
5140	ID a J	00015270	~	6010 5190
2110	DECH(10.3) = DECH(10.3) + 1.0	00015280	č	
	EDECH(ID.3) = EDECH(ID.3) + E	00015300	5180	
	GOTO 5130	00015310	7100	$DECH(ID_{*}I) = DECH(ID_{*}I) + 1.0$
C		00015320		EOECH(ID.1) = EDECH(ID.1) + F
С		00015330		GOT0 5130
5145	IF (J .GT. 1) GOTO 5140	00015340	C	
	SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0	00015350	C	
	ESDECHIJI = ESDECHIJI + E	00015360	5185	IF (J .GT. 1) GOTO 5180
r		00015370		SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
č		00015390		COTO 5120
Š150	CONTINUE	00015400	с	6010 3130
C		00015410	č	
С		00015420	5190	CONTINUE
	CALL SCAT26 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,65160,65165)	00015430	с	
C		00015440	С	
C		00015450	-	CALL SCAT28 [X, Y, PXREL, PYRFL, E, IGAUSS, IEC, IDEPTH, 65200, 65205]
	X # AMUU (X + SIGN (ASU2 + X) + ASU) Y = Y = SIGN (ASO2 - Y)	00015460	C	
	x = x = 316N (A302 + x) $y = ANOD (y + STON (A2 + y) = A)$	00015490	L	
	Y = Y - SIGN (A2 - Y)	00015490		X = AMUU (X + SIGN (ASU2 + X) + ASU) X = X = SIGN (ASU2 + X)
	XSUB = AMOD (X + ASQ15 + ASQ)	00015500		$Y = \Delta M \Omega \Omega \left\{ Y + S I G N \left\{ A 2 + Y \right\} = \Delta \right\}$
	YSUB = AMOD (Y + A15 + A)	00015510		Y = Y - SIGN (A2 + Y)
	INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1	00015520		XSUB = AMOD (X + ASQ15 + ASQ)
	INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1	00015530		$YSUB = AMOD \{Y + A15, A\}$
	FLDST(INTY, INTX) = FLDST(INTY, INTX) + 1.0	00015540		INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
	EDST(INTY, INTX) = EDST(INTY, INTX) + E	00015550		INTY = IFIX (RNY + YSUB / A) + 1
~	GUTU 5170	00015560		FLDST(INTY, INTX) = FLDST(INTY, INTX) + 1.C
ι c		00015580		$EUSILINIY_{0}(N X) = EUSILINIY_{0}(N X) + E$
5160	TO = .1	00015590	r	
	$DECH(ID_{1}) = DECH(ID_{1}) + 1.0$	00015600	č	
	EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E	00015610	5200	ID = J
	GOTO 5130	00015620		DECH(10,1) = DECH(10,1) + 1.0
С		00015630		EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
C		00015640		GOTO 5130
5165	IF (J .GT. I) GUTU 5160	00015650	C	
	SUECH(1) = SUECH(1) + E ESDECH(1) = FSDECH(1) + E	00015670	5205	IE () CT 1) CTT 5200
		00015680	5205	SDECH(1) ± SDECH(1) + 1.0
С		00015690		ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
č		00015700		GOTO 5130
5170	CONTINUE	00015710	С	
С		00015720	C	
С		00015730	5210	CONTINUE
-	CALL SCAT27 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEC,IDEPIH,65180,65185)	00015740	ç	
L C		00015750	r r	
L.	x = AMOD (x + SIGN (ASQ2 + x) + ASQ)	00015770		IE (E LT. ENIN) GOTO 5130
	X = X - SIGN (ASO2 + X)	00015780	С	
	Y = AMOD (Y + SIGN (A2 + Y) + A)	00015790	C	
	Y = Y - SIGN (A2 + Y)	000 15800		PXMAT(L.K) = PXREL
	XSUB = ANOD (X + ASQ15 + ASQ)	00015810		PYMAT(L,K) = PYREL
	YSUB = AHOD (Y + A15 + A)	00015820		XMAT(L,K) = X
	INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1	00015830		YMAI(L.K) = Y

10 – D

96 |

	$EMAT(L_{\bullet}K) = E$	00016440	С		00017040
5130	CONTINUE	00016450	С	CALCULATION OF THE BACKSCATTERING ENERGY SPECTRA	00017050
C		00016 460	c	71711111111111111111111111111111111111	00017060
С		00016 470	С		00017070
5010	CONTINUE	00016480	Ċ		00017080
C		00016490		CALL BCKSCT (HETH.HINT.HSMO.MAXCH.MINCH)	00017090
5030	CONTINUE	00016500	с		00017100
C		00016510	ř	NUTPUT OF THE SPECTRA ON TARE	00017110
č	CHANGE TO PERCENTAGE OF NORMALIZED FLUX	00016520	ř		00017120
ř		00016530	č		00017120
ř		00016540	L	LDITE (THN) HETH	00017150
C	DD 5220 K = 1.NY	00016550		WRITE LIUND DETR	00017140
	DO = 220 h = 140h	00016560			00017150
	$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right]$	00014570	~	WRITE (ION) HOHO	00017160
	$\frac{1}{1} \left[\frac{1}{1} \left$	00016590	L		00017170
	$F[US1(L_1K] = F[US1(L_1K]) / (0.0 + MAX + KKUH / KUH) + 100.0$	00016580		ENU FILE 2	00017180
	IF (FLUSILLIK) .GI. FLMAXI FLMAX = FLUSILLIKI	00010590	L.		00017190
5220	CONTINUE	00016600	С		00017200
Ç		00016610		INSPL = 0	00017210
C		00016620		DD 5250 I = $1,512$	00017220
C	OUTPUT OF FLDST AND EDST CN TAPE AND TSTLIB	00016630		AY(I) = 0.0	00017230
С	***************************************	00016640		IF (HINT(I) .EQ. 0.0) GOTO 5250	00017240
С		00016650		INSPL = INSPL + 1	00017250
С		00016660		AX(INSPL) = I	00017260
	WRITE (IUN) FLDST	000166 70		AY(INSPL) = HINT(I)	00017270
	WRITE (IUN) EDST	00016680	5250	O CONTINUE	00617280
	WRITE (2) FLDST	00016690	C		00017290
	WRITE (2) EDST	00016700	Ċ	CALCULATION OF THE SCAN VALUES	00017360
c		00016710	č	3:5:2323################################	00017310
ř		00016720	č		00017320
÷	DIEF = ZFIT (BEGIN)	00016730	•	SWIND1 = 0.0	00017330
	LE COLEE CT. ENDI GOTO 5021	00016740		SKIND2 = 0.0	00017340
c		00016750			00017350
č		00016760		SKINDS = 0.0	00017350
L.	CONTINUE	00016770			00017380
5020	CONTINCE	00016790			00011310
L		00016780		LL = IWINDI = IWIDIP / 2	00017380
5021	CONTINUE	00016900		LUI = ININDI + INIDIP / 2	00011390
C		00016600		LLZ = IWINDZ - IWIDIH / Z	00017400
С		00016810		UZ = IWINDZ + IWIDIH / Z	00017410
С	END OF THE CHANNELING PROCESS	00016820		LL3 = 1WIND3 - 1WIDTH / 2	00017420
C	EEEEEE	00016830		LU3 = IWIND3 + IWIDTH / 2	00017430
С		00015840		LL4 = IWIND4 - IWIDTH / Z	00017440
С		00016850		LU4 = IWIND4 + IWIDTH / 2	00017450
	DIFF = ZEIT (BEGIN)	00016860		LL5 = TWIND5 - IWIDTH / 2	00017460
	WRITE (6,3022) JJ. DIFF	00016870		LU5 = IWIND5 + IWIDTH / 2	00617470
	DEPTH = JJ = MEAN = ASQ	00016880	С		UU017480
	LL = YAJN	00016890		DO 3600 I = LL1•LU1	00017490
С		000169 00		SWIND1 = SWIND1 + HETH(I)	00017500
ċ		00016910	3600	O CONTINUE	00017510
5230	CONTINUE	00016920		DD 3610 I = LL2.LU2	00017520
r		00016930		SWIND2 = SWIND2 + HETH(I)	00017530
-	00, 3200, J = 1.100	00016940	3610	D CONTINUE	00017540
	D0 3200 J1 = 1.3	00016950		NO 3650 I = LL3.LU3	00017550
	IF (DECH(J+J1) -GT, 0.0) EDECH(J+J1) = EDECH(J+J1) / DECH(J+J1)	00016960		SWIND3 = SWIND3 + HETH(1)	00017560
3200		00016970	3650	CONTINUE	00017570
- 520U	, continct	00016980		DO 3601 [= 114.114	00017580
č		00016990		SUINDA = SUINDA + HETH(1)	00017590
L.	00, 3201, 1 - 1.3	00017000	260	I CONTINUE	00017600
	UU = J = 1 + 2	00017010	500	DO 3602 1 - 115-115	00017610
	IF [SUPERIJ].01.0.01 ESUPERIJI = ESUPERIJI / SUPERIJI	00017020		00 J002 I - LEJILUJ CLINDE - CUINDE A UETU(I)	00017620
3201		00017020		2 CONTINUE - 201007 - DEIDII	00017620
С		00011030	360	2 CUNTINUE	0001/030

	ShIND1 = SWIND1 / (IhIDTH + 1.0)	00017640	С		00018240
	SkIND2 = SkIND2' / (IkIDTH + 1.0)	00017650	ċ		00010250
	SWIND3 = SWIND3 / (IWIDTH + 1.0)	00017660	- 7/	830 CONTINUE	00018250
	ShIND4 = ShIND4 / (IhIDTH + 1.0)	00017670			00018280
	SWIND5 = SWIND5 / (IWIDTH + 1.0)	00017680			00018270
r		00017600			00018280
C C	PUTADI - SUTADI / PAADI	00017890			00018290
	$R_{\rm H} R_{\rm H} D_{\rm H} = 3 R_{\rm H} R_{\rm H} D_{\rm H} / R_{\rm H} D_{\rm H$	00017700		JVR = -5	00018300
	RWINUZ = SWINUZ / RANUZ	00017710		LH =128	00018310
	$R_{\rm M} I N U 3 = S M I N D 3 / R A N D 3$	00017720		LV ∓ 58	00018320
	RWIND4 = SWIND4 / RAND4	00017730		XH = 0.0	00018330
	RWIND5 = SWIND5 / RAND5	0001 7740		XVR = 0.0	00018340
	THDEG = THETA * 180.0 / PI	00017750		DH = 0.0	00018350
С		00017760		DVB = 4095.0	00018360
	WRITE (6,3620)	00017770		DVF = FLMAX	00018370
	WRITE (6.3630) IWIND1. IWIDTH. SWIND1. RWIND1. IWIND2. IWIDTH.	00017780		KH = 1	00018380
	SWIND2. REIND2. INTND3. INIDTH. SEIND3. REIND3.	00017790			00018380
	LEINDA, ILIDIH, SEINDA, REINDA, ILINDS, FEIDIH.	00017800			00018390
		00017810			00018400
r		00017010			00018410
č	OUTDUT DE THE SCAN MALKES ON TOTALS	00017820			00018420
č	GUTPOT OF THE SCAN VALUES ON ISTLIB	00017830		JVE = -5	00018430
L		00017840		XVE = 1700.0	00018440
C		00017850		DVE = EO	00018450
	WRITE (4) THDEG	30017860		N = 1	00018460
	WRITE (4) RWIND1	00017870		NB = 2	00018470
	WRITE (4) RWIND2	00017880	С		04018480
	WRITE (4) RWIND3	00017890	с		00018490
	WRITE (4) RWIND4	00017900	ċ		00018500
	WRITE (4) RWINDS	00017910	č	LINEPLAT OF THE BACKSCATTERING ENERGY SPECTRA	00018510
r		00017920	ř		00010570
ř		00017930	č		00018520
č		00017940	ř		00018530
Č	OUTOUT OF THE END COODENATES	00017940	L		00018540
Ĺ	UUTPOT OF THE END COURDINATES	00017950			00018550
L A		00017960		IF (NOMEX .EQ. 0) GUIO 4620	00018560
С		00017970		DO 4100 I = 1.NUMEX	00618570
	IF (NODOCU) GOTO 4560	00017980		READ (3) IDO	UQ018580
	WRITE (6.3220)	00017990		READ (3) NWORD	00018590
	WRITE (6.3230) PXMAT	30018000		REAC (3) HEXP	00018600
	WRITE (6+3240)	00018010	41	100 CONTINUE	00018610
	WRITE (6+3230) PYMAT	00018020		DO 4600 I = 1.512	00018620
	bRITE (6.3250)	00018030		HEXP(I) = HEXP(I) * FMULT	00018630
	BRITE (6-3230) XMAT	00018040	44	600 CONTINUE	00018640
		00018050		BITE (6.4610)	00018650
	WATE (4.33A) WAT	00018060			00018660
	WRITE (C43C3U) THAI	00019070			00018670
	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}$	00018070			00018670
	REITE 16,3230J EMAI	00018080		SRIND2 = 0.0	00018680
4560	CONFINUE	00018090			00018690
	SCOU = 0.0	00018100		ShIND4 = 0.0	00018700
	COU = 0.0	00018110		SWIND5 = 0.0	00018710
	DO 4000 K = $1 \cdot NX$	00018120		DO 4570 I = LL1.LU1	00018720
	DD 4010 I = $1 \cdot NY$	00018130		SWINDI = SWINDI + HEXP(I)	00018730
	SCOU = SCOU + EMAT(I.K)	00018140	- 4 !	570 CONTINUE	00018740
	IF (EMAT(I.K) _GT. 0.0) COU = COU + 1.0	00018150		DO 4580 I = LL2,LU2	00018750
4010	CONTINUE	00019160		SWIND2 = SWIND2 + HEXP(I)	00018760
4000	CONTINUE	00018170	4 5	580 CONTINUE	00018770
	IF (COU . EQ. 0.0) GOTO 3830	00018180		DD 3660 I = LL3.LU3	00018780
		00018190		SWIND3 = SWIND3 + HEXPII)	00018790
	ECHAN = (EC - SCOU) / DEPTH = 1000 O = COSTHE	00018200	34	660 CONTINUE	00018800
	LOTAR - LEO - SECOT / DEPTH - LOOGO - COSTIL	00018210			00018810
~	WRITE LOUTUEUF EURAN	00010210		CLINDA - CLINDA A HEYDII)	00010010
L		00010220		391097 - 39109 T ACAPILI 531 CONTINUE	00018820
C		00010230		STI CONTINUE	00018830

-- 98 ---

1	DO 4572 I = LL5.LU5	00018840	c	PLOT HE THE BACKSCATTERING ENERGY SPECTORM	00010640	
	SWIND5 = SWIND5 + HEXP(I)	00018850	č		00019440	
4572 (CONTINUE	00018860	C		00019450	
	SWIND1 = SWIND1 / (IWIDTH + 1.0)	00018870	С		00019470	
	SWIND2 = SWIND2 / (IWIDTH + 1.0)	00013880		IF (NCSPEC) GOTO 3670	00019480	
	SWIND3 = SWIND3 / (IWIDTH + 1.0)	00 018890		DO 4500 I = 1.512	00019490	
	S = ND4 = SWIND4 / (IWIDTH + 1.0)	00018900		CHNUM(I) = I	00019500	
-	SWIND5 = SWIND5 / (IWIDTH + 1.0)	00018910	4500	CONTINUE	00019510	
C		00018920		NCH = 512	00019520	
	RWIND1 = SWIND1 / RAND1	00018930		NT = 1	06619530	
	KWIND2 - SWIND2 / KAND2 DVIND3 - SVIND2 / DAND3	00018940		NP = 9	00019540	
	RHINDS - SHINDS / KANUS Dutnick - Cutnick / Dánck	00018950			00019550	
	DEINDS = SEINDS / DANDS	00010900			00019560	
c '	REINDS - SHINDS / RENDS	00018990		INUZ = Z	00019570	
U	SRITE (6.3620)	00018980		$A^{\text{MAX}} = 212 \cdot 0$	00019580	
1	RITE (6.3630) ININDI. INIDIE. SHINDI. RAINDI. THIND2. INIDIH.	00019000		$SX = \{Y AX = Y T Y f f f f f f f f f$	00019590	
1	SWIND2, RWIND2, IWIND3, IWIDTH, SWIND3, RWIND3,	00019010		$YMAX = 4096_{-0}$	00019600	
2	ININDA, INIDTH, SWINDA, RWINDA, IWINDS, IWIDTH,	00019020		YMIN = 0.0	00019610	
3	SWIND5, RWIND5	00019030		$SY = (YMAX - YMIN) / (100_0 + 16_c)$	00019820	
С		00019040		IDPLOT = 1	00019640	
	SUM01 = 0.0	00619050		XA = 0.0	00019650	
	SUM02 = 0.0	00019060		DX = 10.0	00019660	
	MINCH = MINCH + 10	00019070		XE = 500.0	00019670	
_	IF (MINCH .GT. MAXCH) GOTO 4620	00619080		NFX = NFX1	00019680	
C		00019090		NNX = 5	00019690	
	DU 4730 I = MINCH.MAXCH	00019100		YA = 0.0	00019700	
	SUMQI = SUMQI + HEXP(I)	00019110		DY = 100.0	00019710	1
4770	SUMUZ = SUMUZ + HSMULLY	00019120		YE = YMAX	00019720	
4150	$\Delta f \Omega P = \Delta \Omega \pm S I M \Omega 1 / S I M \Omega 2$	00019130		NET = NETL	00019730	9
	WRITE (6.4740) 000RR	00019150		PO(4510 + 1-15)	00019740	Ψ
с		00019160		00 4510 1 - 1415 NTEXT(1) = NTEXT(()	00019750	
4620	CONTINUE	00019170	4510		00019780	
	D0 4590 I = 1,100	00019180		IF (NUMEX	00619780	
	HGT(I) = 0.0	00019190		CALL PLOTRT (CHNUM, HEXP, NCH, NT, NP, INTA, NPA, INDZ, XMAX, XMIN, SX.	00019790	
	HGTEX(I) = 0.0	00619200		1 YMAX.YMIN.SY.NTEXT.IDPLCT.	00019800	
4590	CONTINUE	00019210		2 XA+DX+XE+NFX+NNX+	00019810	
С		00019220		3 YA+DY+YE+NFY+NNY)	00019820	
	00 3540 I = 1,100	00019230		NT = 1	00019830	
	PLX(I) = (I - I) * 5.0 + 2.5	00019240			00019840	
	DU 3541 K = 1.5	00019250		GDT0 4640	00019850	
	KI = (I - I) + 0 + K	00019260	4630	1 ND z = z	00019860	
	TE (NUMEY EQ. 0) COTO 2541	00019270	4040	NY FI.	00019870	
	$\mathbf{M} = \mathbf{M} + $	00019200		CALL FLOIR) IMAGANG INJELGUNIGERGENTAGERAGINUZGAMANGAMINGSAG VMAY-WHIN CV.NTCVT TPOLOT	00019880	
3541	CONTINUE	00019300			00019890	
3341	HGT(1) = HGT(1) / 5.0	00019310			00019930	
	HGTEX(I) = HGTEX(I) / 5.0	00019320	c		06019920	
3540	CONTINUE	00019330	č		00019930	
	MLEN(1) = INSPL	00019340	3670	CONTINUE	00019940	
	MLEN(2) = 100	00019350		DD 3325 I = 1.NX	00019950	
	WRITE (6,3316)	00019360		PLX(I) = -(NX-1.)/(2.*NX)+(I-1.)/NX	00019960	
	CALL KURVE (IH.JH.LH.XH.DH.KH.FH.	00019370		PLX(I) = PLX(I) + ASC	00019970	
1	IV,JVR,LV,XVR,DVB,KV,FV,	00019380	3325	CONTINUE	00019980	
2	IG, IH, IC, NB, ASYMB, MLEN,	00019390		MLEN(1) = NX	00019990	
3	AX+AY+PLX+HGTEX)	00019400	C		00020000	
	WRITE (6.3318)	00619410	~	IF (NUFLUX) GUIU 5260	00023010	
C		00019420	C	DEVIND 2	00020020	
L		00019430		REWIND Z	00020030	

	DO 3320 J = 1.NLAY	00020040		YA = 0.0		AAAAAAAAAAAAA
	READ (2) FLDST	00020050		DY = 10.0		00020640
	READ (2) EDST	00020060		YE = FLMAX		00020650
C		00020070		NEY = NEY2		00020660
С		00020080		NNV = 5		00025670
С	LINEPLOT OF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES	00020090		00 4520 1 -	1 15	00020680
C		00020100				00020690
č		00020100			NIEXIZII)	00020700
ř		00020110	4 :	520 CONTINUE		00020710
ç	$\mathbf{r}_{2} = \mathbf{r}_{2} \mathbf{r}_{3} \mathbf{r}_{3} \mathbf{r}_{2} \mathbf{r}_{3}$	00020120		CALL PLOTRY	(PLX,PLF,NX,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,	00020720
	12 = 1711 (NT / 2.0)	00020130		1	YMAX,YMIN,SY,NTEXT,ICPLCT,	00020730
	DU 3330 I = 1, NX	00020140		2	XA • DX • XE • NF X • NN X •	00020740
	IF (ISEC .EQ. 1) GDTO 5240	00020150		3	YA, DY, YE, NEY, NNY)	00020750
	PLF(I) = FLDST(I2,I)	00020160		YMAX = EO		00020750
	PLE(I) = EDST(I2.I)	00020170		YMIN = 1700	• 0	00020780
	GOTO 3330	00020180		SY = (YMAX	- YMIN) / 1000-0	00020770
524	O PLF(I) = FLDST(I,I)	00020190		YA = YMIN		00020780
	PLE(I) = EDST(I.()	00020200		VE - VMAY		00020790
333	O CONTINUE	00020210				00020800
с		00020220		NFT = NFT3		00020810
•	LDITE 14.32141	00020220		00 4530 1 4	1.15	0C020820
	WALLE LOOPIES	00020230		N(EX)(I) = I	NTEXT3(T)	00020830
	CALL NURVE (IN-JA-LA-AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA	00020240	4 9	530 CONTINUE		00020840
		00020250		CALL PLOTRT	{PLX+PLE+NX+NT+NP+INTA+NPA+INDZ,XMAX+XMIN,SX,	00020850
	2 IG, IW, IC, N, ASYMB, MLEN,	00020260		1	YMAX, YMIN, SY, NTEXT, IDPLOT,	00020860
	3 PLX.PLF)	00020270		2	XA • DX • XE • NF X • NN X •	00020870
С		00020280		3	YA.DY.YE.NEY.NNY)	00020880
	WRITE (6.3335)	00020290	С			30020880
	DPTH = J * MEAN * A - MEAN * A / 2.0	00020300	Ċ			00020890
	IF (ISEC .EQ. 2) DPTH = J = MEAN = ASQ - MEAN = ASQ2	00020310	ँवव	20 CONTINUE		00020900
	BRITE (6.3336) DPTH. AVRG	00020320	r			00020413
r		00020330	ř			00020920
•	WRITE (4,3314)	00020340	ິຄາ			00020930
		00020340	~ ~ ~	OUNTINOE		00020940
		00020350	L c			00020950
		00020380	L			ŨOC20960
	2 IG, IW, IC, N, ASTHO, PLEN,	00020370	C	001901 0	DF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES	00020970
	3 PLX,PLE)	00020380	Ç			Ú0020980
C		00020390	C			00020990
	WRITE (6.3337)	00020400	С			00021000
	WRITE (6.3336) DPTH, AVRG	00020410		IF (NGDOCU)	GOTO 5270	00021010
С		00020420	С			00021020
С		00020430		REWIND 2		00021030
С	PLOT OF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES	00020440	с			00021040
С		00020450		DD 3380 J =	I-NLAY.	00021040
Ċ		00020460	c			00021050
ř		00020470	Ũ	9640 (2) ELC	NCT.	00021080
C	NT = 1	00020680		DEAD (2) FLU		00021070
		00020400	~	READ (2) EDS		00021080
	$NF_{-} = J$	00020490	L			00021090
	NPA = 1	00020500		WKI IE 16, 334	(U) J	00021100
	INDZ = 2	00020510		WRITE 16+335	50) FLDST	00021110
	XMAX = 4.0	00020520		WRITE (6,336	50) J	00021120
	XMIN = -4.0	00020530		WRITE (6.337	70) EDST	03021130
	SX = (XMAX - XMIN) / (100.0 * 10.0)	00020540	33	BO CONTINUE		00021140
	YMAX = FLMAX	00020550	С			00021150
	YMIN = 0.0	00020560	52	70 CONTINUE		00021160
	SY = (YMAX - YMIN) / (100.0 * 10.0)	00020570	С			00021170
	IDPLOT = J	00020580	с			00021100
	XA = XMIN	00020590	-	RETURN		00021100
	0X = 1.0	00020600	С			00021190
	YE = YMAY	00020610	č	5 O D M	AT SPECTELCATIONS	00021200
	NEY - NEYO	00020620	ř			00021210
	NFA = NFAG NNM = 1	00020020	č	41324IIS		00021220
		00020830	L			00021230
1010	FORMAT	(F10.2)	00021240	7	T50,'THETA =',T58,F10.2,' DEGREES'//)	00021840
------	----------	---	------------------	---	---	-----------
1013	FORMAT	(4A4)	00021250	1174 FORMAT	(1H1////	00021850
1020	FORMAT	(E10.3)	00021260	1	T19, "PARAMETERS OF EXPERIMENTAL"	•Ú0021860
1030	FORMAT	(F10.5)	00021270	2	'SETUP'/	00021870
1040	FORMAT	(F10.3)	00021280	3	T19, *====================================	,00021880
1041	FORMAT	(11)	00021290	4	'========='///	03021890
1042	FORMAT	([1])	00021300	5	T25,'FWHM : ',F10.0,' CHANNELS'//	00021900
1043	FORMAT	(11)	00021310	6	T25, CHANNEL WIDTH : '.F10.2.' KEV / CHANNEL'//	00021910
1050	FORMAT	(10F13.4)	00021320	7	T25. SUPPR. CRIGIN : '.F10.1.' KEV'//	00021920
1060	FORMAT	(1H1+T15+'P X M A T'///)	00021330	8	T25. BACKSCATT. ANGLE : '.F10.1.' DEGREES'//	00021930
1070	FORMAT	(1H1-T15-P Y M A T'///)	00021340	9	T25. DETECTOR ANGLE : '.FID.3.' STERAD!//	00021940
1080	FORMAT	(1H1-T15-'X M A T'////)	00021350	Å	T25. WINDER SETTINGS (CH.NO.) : 1. T60.	00021950
1090	FORMAT	(1H).T15.YV N & TY///)	00021360	B	WINDOW WINTE (CH.) : T95. T85. VALUE : 1/	00021950
1100	ENDMAT	(1H1-T15-IE N A T!///)	00021370	č	5//135.14.17(.14.195.51) 0)/////)	00021970
1110	FORMAT		00021380	1190 FORMAT	(T19.10 B C G D A N D A D A N E T E D S +1/	00021990
1120	EORMAT	(101.T15.15 T V!///)	00021390	1		00021980
1120	FORMAT	(1) + 1 + 2 + 2 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1	00021400	1195 609847		00021990
1150	FORMAT	(101) (120) (201) (101) $(101$	00021400	1		00022000
1140	FURMAT		00021420	,	177 - 7.91777	00022010
1150	FURMAT		00021420	1	THE INVERTER OF LANERS / LATER : '#10//	00022020
1160	FURMAL	(IHI, 115, 1 H V 8 S I'////)	100021430	2	1231 NUMBER UP LATERS 7 110//	00022030
1170	FURMAI		00021440	2	IZD CURRESPUNDING DEPIN : '+F/.U+	00022040
	1	• ************************************	00021450	4	ANGSIKUEM ///J	00022050
	2	T15, ***, 1110, ***/115, ***, 1110, ***/	00021460	1410 FURMAT	(IHI, 190, DATE : ', A6, '/', 5, 114E : ', A6//)	00022060
	3	T15•'*'•3X•'MONTE CARLE - PRUGRAM'•	00021470	SUZZ FURMAT	THO////IZU. NU UF CALCULATED LAYERS : 16//	00022070
	4	T110,"*"/	00021480	1	T20, 'CPU-TIME USED :', F12.0, ' SECONDS')	00022080
	5	T15,"**, T110,"*"/ T15,"*", T110,"*"/	00021490	3220 FORMAT	11H1+T15+'P X M A T'//)	00022090
	6	T15• ***•3X• *FOR THE COMPUTER - *•	00021500	3230 FORMAT	(10X, 10F12.4)	00022100
	7'S I	IMULATICN OF CHANNELING", T110,"*"/	00021510	3240 FORMAT	(1H1,T15,"P Y M A T"///)	00022110
	9	T15,"*** T110,"*"/ T15,"*** T110,"*"/	00021520	3250 FORMAT	(1H1,T15,"X M A T"///)	00022120
	9	T15, ***, 3X, *BY A MODIFIED "BINARY*,	00021530	3260 FORMAT	(1H1,T15,'Y M A T'//)	00ú22130
	Δ	" COLLISION " - MCDEL", T110,"*"/	00021540	3270 FORMAT	(1H1,T15,"E M AT"///)	00022140
	8	T15,***, T110,***/ T15,***, T110,***/	0002155 0	3316 FORMAT	(1H1)	00022150
	с	T15, ************************************	00021560	3318 FORMAT	(T20, 'BACKSCATTERING ENERGY SPECTRUM')	00022160
	ò	· ************************************	00021570	3335 FORMAT	(T20, 'FLUX - PRCFILE')	00022170
1171	FORMAT	ITI9. SINGLE CRYSTAL : '.4A4.	00021580	3336 FORMAT	(T20, 'RECORDED AT A DEPTH OF ', F6.C, ' ANGSTRCEM',	00022180
	1	T60. 'ATOMIC NUMBERS :'.	00021590	1	<pre>: AVERAGED OVER ',F6.0,' ANGSTROEM')</pre>	00022190
	ī	TBO. REST MASSES : . TIOO. MEAN EXCITATION ENERGY : /	00021600	3337 FORMAT	(T20, 'ENERGY - PRCFILE')	00022200
	1	T4].'=======!/	00021610	3340 FORMAT	(1H1,T10,"FLUX - PROFILE"//	00022210
	2	2(T60.F1C.0.T80.F10.2.T100.F10.1.* EV*//)//)	00021620	1	T20, J = I4///)	00022220
1172	FORMAT	IT19. LATTICE CONSTANT :	00021630	3350 FORMAT	(10X,10F12.0)	00022230
1112	1	TI9. ATOMIC DENSITY :	00021640	3360 FORMAT	(1H1.T10, ENERGY - PROFILE!//	00022240
	2		00021650	1	T20, 'J = ', I4///)	00022250
	2	TIG. PLASNON ENERGY : . FLO. 1. FV!//	00021660	3370 FORMAT	(10X+10F12+1)	00022260
	5	TIG. IVALENCE ELECTRONS : **E10.2.* PER ATOM*/////	00021670	3620 FORMAT	(1HO.T15.'WINDOW SETTINGS (CH.NO.) :'.T50.	00022270
1172		ITIG. IE Y DE RIMENTAL CONDITIONS :"/	00021680	1	'WINDOW WIDTH (CH.) :'. T85. 'COUNTS / CHANNEL :'.	00022280
11/5	FURMAL		00021690	2	TI10. INDRMALIZED VALUE : 1//)	00022290
	1		00021700	3630 FORMAT	(T25-14-T60-14-T65-E10-0-T110-E10-3)	00022300
	2	TTE LATONTC NUMBER - 1.54 0//	00021710	3640 FORMAT	(14)	03022310
	3	The state in the second secon	00021720	3810 FORMAT	(101.T25.INUMBER OF NEGLECTED PARTICLES :1.10)	00022320
	*	TOP FREDI MADO + 110+077	00021730	3840 FORMAT	('0'.T25.'LIMIT. POT. VALUES (KEV) :'.F1C.3.5X.F10.3)	00022330
	2	1220 TUN ENERGY + 1,510 1//	00021740	4020 EDRMAT	(1HQ. AVERAGED DE / DX DE THE INCIDENT PARTICLE : .	00022340
	2	1270 TURAKUC + 1971U+1// Tos instan Diversións + 1.510 7.1 DECRES///	00021750	1	FIG.0.1 EV / ANGSTROEM!)	00022350
	8	IZDATORAN UIVERGENCE - TAFIGARA CONCEDITA	00021760	4610 FORMAT	(111-TIS-'EXPERIMENTAL BACKSCATTERING SPECTRUM!///)	00622360
	9	IZDOVEKTSIAL IEMPO I 'OFLUOUO' NELVIN'//	00021770	4740 E00#47	(IOLAICORRECTED CHARGE : LAFID.1)	00022370
	A	IZ5, THERMAL VIBRATILN AFFLITUDES FT,	00021790	5305 EODWAT	TIG.ID A N A C F P P O F T L F II/	00022380
	8	T65+TV (ULL) : T+F7+3+T ANGSIKUEFT+	00021100	1 I I I I I I I I I I I I I I I I I I I	11279 U R H R U C F R U C L L L + "/ T10.1+===================================	00022300
	B	T95. V (U22) : '.F7.3.' ANGSTRUEP'//	00021799	2	1179 - GENERAL DICOLACEMENT + 1.610 2.1 ANCCIDENT//	00022370
	с	T65,'SI : ',F7.3,' ANGSTROEM'//	00021800	2	1209 THEAN DIGTLALEMENT : THEIDGLAST ANGETROFILL	00022400
	6	T25,'BEAM INCIDENCE : ',T50,'PHI =',T58,F10.2,	00021810	3	IZD & THEAN UEVIN : "ANGSI KUEM"//	00022410
	7	• DEGREES'.	00021820	, ,	12De PERLENIAGE : "eFIU.le" %")	00022420
	7	T90,"(PHI ROTATED : "+L1+" }"/	00021830	C		00022430
				END		00022440

				GOTO 2110	00023040
	SUBROUTINE START (DEPSI,PXMAT,PYMAT,XMAT,YMAT,EMAT,NX,NY	00022450	2100	$XMAT(L_K) = XMAT(L_K) + ASQ$	00023050
	1 •E0)	00022460		$YMAT(L \cdot K) = YMAT(L \cdot K) * A$	00023060
C		00022470	2110	CONTINUE	00023070
с	Bararra	00022480	c		00023080
С	S T A R T	00022490	-	IE (DEPSI al E. 0.0) 6010 2010	00023090
Ċ		00022490	r		00023100
č		00022500	C	CALL CAUSE (TYO DEDCT AN V)	00023110
ř		00022510	2610	$ \begin{array}{c} LALL & GAU33 & LAU9UEF31 \\ BVM^{AU1} & I & ECTAU9 & I \\ \end{array} $	00023110
ř	DELATIVE MOMENTUM AND COODDINATES AC DELLAS TUS TADULATED	00022520	2010	FAMALLERY - FILINA T V	00023120
č	NALINE OF THE FORDER LOOK AND THE CONTRACT AS MELL AS THE TABULATED	00022530	L		00023130
č	VALUES OF THE ENERGY LUSS AND THE SLATTERING ANGLE	00022540	~	IF (DEPSI .LE. 0.0) GUIG 2020	00023140
ç		00022550	L		00023150
L		00022560		CALL GAUSS (IXO, DEPSI, AM, V)	00023160
	JIMENSION PAMAI(NY,NX), PYPAT(NY,NX)	00022570	2020	PYMAT(L,K) = PSIINY + V	00023170
	DIMENSION XMAT(NY+NX)+ YMAT(NY+NX)	00022580	С		00023180
	DIMENSION EMATINY, NX)	00 C22590		$EMAT(L \cdot K) = EO$	00023190
	DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)	00022600	С		00023200
	DIMENSION THVBSI(12000)	00022610	2000	CONTINUE	00023210
	DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00022620	С		00023220
	DIMENSION SILV(4000), SILSI(4000)	00022630	С	CALCULATION OF THE ENERGY LOSS AND THE SCATTERING ANGLE	00023230
	DIMENSION TA(4000)	00022640	с	¥÷₽\$₽\$₽₽₽\$₽₽\$₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽₽	UJ023240
	DIMENSION ALFA(3), BETA(3)	00022650	С		00023250
	DIMENSION FTA(3), FSILV(3), FSILSI(3)	00ú2266U		DO 2030 L = $1,3$	00023260
С		00022670		FTA(L) = ALFA(L) + BETA(L)	00023270
	LOGICAL ROTAT	00022680		FSILV(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFV *ATFV)	60023280
	LOGICAL SISC	00022690		FSILSI(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFSI * ATFSI)	00023290
С		00022700	2030	CONTINUE	00023300
č		00022710	6		00023310
-	COMMON / NVAL / TA. SILV. SILSI. PNGRM. THVPV1. THVPV2. THVASI. SIS	CU0022720	č		00023320
	COMMON / GVAL / PI. ATEV. ATESI. A. A2. A4. RHOAT. PSIINY. PSIINY.	00022730	5	DD 2040 = 1.4000	00023330
	1 70APT. 7V. 7ST. THEV. THEST, FIGHT FILMAN VERMIN	00022750	r		00023340
		00022740	C	STA = 0.0	00023350
	CONMON (BVAL) O. LIDTH, BANGLE, OBIGIN, CHECK, DUCTA, DDDD	00022730			00023360
	I SERVICE ALL AN ALL AND LARGE AND ALL	00022780		3310 - 0.0	00023370
	CORNEL STANDUT ELL CALLA CTALLA LVALLA	00022770		SPEI = EIOAT (I) / 200	00023380
	CONMON /NOID/ ALEA SEA	00022780	r	SKEL - FLUAT TET / 200.	00023300
~	CUMPUN /HULF/ ALFA, CCIA	00022790	L	00 2050 4 - 1 3	000233600
L A		00022800	~	DU 2050 K = 1.5	00023400
Ĺ		00022810	ι		00023410
L		00022820		XSKEL = BETAIRT + SKEL	00023420
	A = 0.0	00022830		CALL BESK (XSKEL) (KSIA) IER)	00023430
	V = 0.0	00022840		CALL BESK (XSREL UKSSIL IEK)	00023440
	PHIT = PHI	00022850		STA = STA + FTA[K] + FSTA	00023450
	PI2 = 2.0 * PI	00022860		SSILV = SSILV + FSILV(R) + RSSIL	00023460
	IXO = 150656729	00022870		SSILSI = SSILSI + FSILSI(K) = RSSIL	00023470
С		00022880	С		00023480
С	CAŁCULATION OF THE COORDINATES AND THE RELATIVE MOMENTUM	00022890	2050	CONTINUE	00023490
С	x_x3===x============x==x==x==x==x========	00022900	с		00023500
С		00022910		TA(L) = STA	00023510
	DD 2000 K = $1.NX$	000229 20		SILV(L) = ZV / (2. * PI * A4) * SSILV	00023520
	DD 2000 L = 1.NY	00022930		IF (ISEC .EQ. 2) SILV(L) = $ZV / (2. * PI * ASQ8) * SSILV$	00023530
С		00022940		IF (ISEC .EQ. 2) SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * ASQ8) * SSILSI	00023540
·	IF (.NDT. ROTAT) GOTO 2060	00022950		SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * A4) * SSILSI	00023550
	PHIT = PHIT + DEPHI	00022960		SILV(L) = SILV(L) / RHOAT	00023560
206	D PSIINX = ATAN (COS (PHIT) + TAN (THETA))	00622970		SILSI(L) = SILSI(L) / RHOAT	00023570
	PSTINY = ATAN (SIN (PHIT) + TAN (THETA))	00022980	с		00023580
	x = x = x = x = x = x = x = x = x = x =	00022990	2040	CONTINUE	00023590
	$YMAT(1-K) = \{NY = 1, 1, 2, 2, 3, NY\} = \{K = 1, 1, 2, NY\}$	00023000	c		06023600
	$\mathbf{F} = \mathbf{F} = $	00023010	č	OUTPUT OF THE CALCULATED VALUES ON TSTLIB	00023610
		00023020	č		00023620
	ANALLEROJ – ANALLEROJ – A Vulti u – Vulti V. 4 A	00023020	č		00023630
	TMAILLENJ - TMAILLENJ - A	00023030	L.		00000000

.

	REWIND 1	00023640	
С		00023650	SUB
	WRITE (1) PXMAT	00023660 r	500
	WRITE (1) PYMAT	00023670 C	
	WRITE (1) XMAT	00023680 C	
	WRITE (1) YMAT	00023690 C	
	WRITE (1) EMAT	00C23700 C	
•	WRITE (1) TA ·	00023710 C	
	WRITE (1) SILV, SILSI	00023720 c	
	END FILE 1	00023730 c	
С		00023740 C	
С		60023750 C	
	RETURN	00023760 c	
¢		00023770	DIM
С		00023780	DIM
	END	00023790	DIM
			DIM

0002	3650 3660 c	SUBROUTINE SCAT1 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*,*,*)	00023800
0002	3670 C		00023810
0002	3680 c		00023820
0002	3690 0		00023830
0002	3700 0		00023840
0002	3710 0	SCATTERING BROCESS IN THE EIRST HONOLAYER	00023850
0002	3720 č	FOULVALENT TO SCATTEDING DOCCESS IN THE	00023870
0002	3730 C	ETET MONOLAVED	00023010
0002	3740 C		00023890
Gü02	3750 r		00023900
0002	3760 c		00023910
0002	3770	DIMENSION TA (4000). STI V (4000). STI ST (4000)	00023920
0002	3780	DIMENSION PNORM(12000)	00023930
0002	3790	DIMENSION THYBRI(12000). THYBR/2(12000)	00023940
		DIMENSION THYDRI (12000)	00023950
		DIMENSION POPLE(2200), PUNIE(2200)	00023960
		DIMENSION PASCAT(6)	00023970
		DINENSION PYSCAT(6)	00023980
		DIMENSION DEL(6)	00023990
		DIMENSION BS(150-150)	00024000
	C		00024010
	č		00024020
	•	REAL*8 PZ	00024030
		LOGICAL ROTAT	00024040
		LOGICAL SISC	00024050
	с		00024060
	ċ		00024070
		COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVBV2, THVBSI, SISC	00024080
		COMMON /GVAL/ PI. ATFV. ATFSI. A. A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,	00024090
		1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00024100
		2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF	00024110
		COMMON /SCA1/ XSCAT1(6), YSCAT1(6)	00024120
		COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EQ, BS, RESOLE, RESOLD,	00024130
		1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV45	500024140
		CCMMCN /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PROP,	00024150
		1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,	00024160
		2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT	00024170
		COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMC, BETHEV, BETHES	00024180
	С		00024190
	c		00024200
	С		00024210
		VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)	00024220
		SILPL = EPO / E + ZVAL + ALOG (PLASME * E) + A4	00024230
		SILVAL = EPO / E + ZVAL + ALOG (VEL / VFERMIJ + A4	00024240
•		CPH = (1.0 / SORT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00024250
		IF (SISC) GOTO 3000	00024260
		SILBOU = EPO / E \neq Alog (Bethev \neq E) \neq A4	00024270
		SCRIT = $4.0 \times 1HV2$	00024280
	-	INTE = IFIX ([ELIM - FKFV # E] / RESULE + 1.5)	00024290
	C		00024300
-	C	CLATTEDING ON THE LEAK N - DOLG	00024310
	C C	SLATIEKING BY THE WEAK V - KUWS	00024320
	L C		00024350
	C C		00024340
	L	DD 3200 I - 1 4	00024330
	•	UU 22UU I = 104	00024300
	L		00024310
		Drit - Driim	VVV2730V

- 103 -

	IE (PUNTE/IEO) ST. PROPA OPIC - 0.0	00034380			
	$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	00024390	~		
	DX = X = UPEC + PUPECTENT = DDLC + DDDLC(TEA)	00024400	Ç		00024990
	DA = A = THVEVAL(IGAUSS) = DFLC + FDFLC(IEC)	00024410	C		00025000
		00024420	C		00025010
		00024430		DO 2250 I = 5,6	00025020
	DPLC = DPLCM	00024440	С		00025030
	IF (PUNIFILEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0	00024450		DPLC = DPLCM	00025040
	DY1 = Y - DPLC + PDPLC(IEQ)	00024 460		IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0	00025050
	DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEC)	00024470		DXI = X - OPLC * POPLC(IEQ) - XSCATI(I)	00025060
	IGAUSS = IGAUSS + 1	00024480		DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DP(C * PDP(C(IEC)))	00025070
	IEO = IEO + 1	00024490		IGAUSS = IGAUSS + 1	00025080
	S = SORT((DX-XSCAT1(I))*(DX-XSCAT1(I)) +	00024500		IEO = IEO + 1	00025090
	$1 \qquad (DY-YSCATI(I))*(DY-YSCATI(I)))$	00024510		DPLC = DPLCM	00025100
	IE (IDEPTH - GT - 150) GOTO 2221	00024520		$T = \{ 0 \mid 0 \mid 0 \mid 0 \}$ of $P = 0 0$	00025110
	IF (INTE -GT- 150) GDT0 2221	00024530		$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	00025110
	SX = DXI - XS(ATI(I))	000245560		DT = T = DFC + FOFCCTLET = DCALL(T)	00025120
	SY = DYI = VSCATI(I)	00024540		DT = T = TAVDSTILGAUSST = DPLC + PDPLC(TECT)	00025150
	SI = DII = TSCATITI	00024990		IGAUSS = IGAUSS + I	00025140
	30 = 3401 + 34 + 34 + 31 + 31	00024560		IEU = IEU + I	00025150
	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}$	00024570		S = SQRJ ((DX-XSCATI(1))*(DX+XSCATI(1)) +	00025160
	$PRBL = I \cdot U / (2 \cdot U + PI + (HVI + (HV2)))$	00024580		[(DY-YSCAT1(1))*(DY-YSCAT1(1))]	00025170
	PRBL = PRBL + EXP (- SX + SX / (2.0 + THV1 + THV1)) +	00024590		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2261	00025180
	L = EXP (-SY + SY / (2.0 + THV2 + THV2))	00024600		IF (INTE .GT. 150) GCTO 2261	00025190
	CALL SIGMA (ZV+FMV+SGMV+PXREL+PYREL)	00024610		SB = SQRT (DX1 + DX1 + DY1 + DY1)	00025200
	PZ = PRBL * SGNV * OMEGA / (E * E)	00024620		IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2261	00025210
	PZ = P7. * Q / NUM	00024630		PRBL = 1.0 / (PI + U2S + U2S)	00025220
	BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ	00024640		PRBL = PRBL * EXP {- SB * SB / (U2S * U2S})	00025230
2221	SREL = S / ATFV	00024650		CALL SIGMA (ZSI.FMSI.SGMS.PXREL.PYREL)	00025240
с		00024660		PZ = PRBL * SGMS * DNEGA / (E * E)	00025250
	IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3	00024670		P7 = P7 + Q / NIM	00025260
	IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220	00024680		BS(INTE, IDEPTH) = BS(INTE, IDEPTH) + P7	00025270
C		00024690	2261		00025280
•	1995 - TETY (200 0 + SPEL)	00024700	r 200		00025290
		00024710	L.	TE ESSEL LE O DOST DETURN 4	00025300
		00024720			00025310
		00024720	~	IF ISKEL .GI. 20.01 GUIU 2200	00025330
~		00024730	L		00025520
L		00024740		ISKEL = IFIX (2000 + SKEL)	00025350
2220		00024750		SIHFIA = THESI + TALISKEL) / E	00025340
_	DEL(1) = 3.0	00024760		DEL(1) = SILBOU = SILSI(ISKEL)	00025550
С		00024770		G010 2270	00025360
2230	CONTINUE	00024780	Ç		00025370
	SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(T) + SILVAL / CPH) / E)	00024790	С		00025380
	PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00024800	2260	0 STHETA = 0.0	00025390
	IGAUSS = IGAUSS + 1	00024810		$DEL(I) = O_{\bullet}O$	00025400
	PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCATL(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00024820	С		00025410
	IGAUSS = IGAUSS + 1	00024830	С		00025420
	PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +	00024840	2270	0 CONTINUE	00025430
	$1 \qquad PYSCAT(I) + PYSCAT(I) + 1.01)$	00024850		SCA = SQRT (ELSCAT + (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)	00025440
С		00024860		PXSCAT(I) = STHETA * (OX - XSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00025450
-	IF (PHIL .GT. PHILIN) RETURN 1	00024870		IGAUSS = IGAUSS + 1	00025460
c		00024880		PYSCAT(1) = STHETA * (DY - YSCAT1(1)) / S + PNDRM(IGAUSS) * SCA	00025470
ř		00024890		IGAUSS = IGAUSS + 1	00025480
2200		00024900		PHTI = ARCOS (1-0) / SORT (PXSCAT(T) + PXSCAT(T) +	0025490
r 200		00024910		$\mathbf{y} = \mathbf{y} = $	00025500
ř		00024920	r		00025510
č		00024930	L	TE (PHT)	00025520
L	STIROUL - EDO / E + ALOC (RETHES + E) + 44	00024930	r	IT CENTE OUT FAILING RETORN 2	00025530
	SILDUV - EFU / E F ALUU (BEINES F E/ F AF	00024940			00025540
	36K11 - MOV M 1831 1975 - 1614 (1614 - 6466 + 6) / Desõié + 1 6)	00024930	~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~	U CONTINUE	00025550
-	INIE = IFIX ((CLIM - FRES # C) / RESULE # 1.5)	00024960	L A		00023550
C		00024970	Ç		00025580
C	SCATTERING BY THE SI - RUWS	00024980		SUM1 = 0.0	00025570
				SUH2 = 0.0	00020080

~	SUM3 = 0.0
2280	DD 2280 I = 1.6 SUM1 = SUM1 + DEL(I) SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I) SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I) CONTINUE
c	PXREL = PXREL + SUM2 PYREL = PYREL + SUM3 DFLE = SUM1 + SILPL / CPH E = E - DELE X = X + A4 * PXREL Y = Y + A4 * PYREL
c c	RETURN
c c c	
с с с с	SCATTERING BY ONE ATOM PER PLANE
3000	CONTINUE IF (X .LT. 0.0) GOTO 3010 IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3020 DX = X - THVBV1(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1 DX - X - THVBV1(IGAUSS)
,	DT = T = HVD22[[GAUSS] [GAUSS = IGAUSS + 1 IEQ = IEQ + 1 S1 = SORT((DX-XSCAT1(2))*(DX-XSCAT1(2)) + (DY-YSCAT1(2))*(DY-YSCAT1(2))
	DX = X - THVBSI(IGAUSS) $IGAUSS = IGAUSS + 1$ $DY = Y - THVBSI(IGAUSS)$ $IGAUSS = IGAUSS + 1$
1	IEQ = IEQ + 1 S2 = SQRT((DX-XSCAT1(6))*(DX-XSCAT1(6)) + L (DY-YSCAT1(6))*(DY-YSCAT1(6))) S22 = ZSI / ZV * S2
C	1AT = 6 IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030 IAT = 2 GOTO 3040
с 3020	DX = X - THVRV1(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1 DY = Y - THVRV2(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1
	<pre>IEO = 1EO + 1 S1 = SORT((DX-XSCAT1(4))*(DX-XSCAT1(4)) + 1 (DY-YSCAT1(4))*(DY-YSCAT1(4))) DX = X - THVBSI(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1 DY = Y - THVBSI(IGAUSS)</pre>

00025590		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026190
00025600		IEQ = IEQ + 1	00026200
00025610		S2 = SQRT((DX-XSCAT1(6))*(DX-XSCAT1(6)) +	00026210
00025620		1 (DY-YSCAT1(6))*(DY-YSCAT1(6)))	00026220
00025630		S22 = ZSI / ZV * S2	00026230
00025640	С		00026240
00025650	-	IAT = 6	00026250
00025660		IE (S1 .GT. S22) GOTE 3030	00026260
00025670		1AT = 4	0.0026200
00025690			00020210
00025400	~	3010 3040	00020200
00025830	5.000	CONTINUE	00026290
00025700	3010		00026300
00025710			00026310
00025720		DX = X - IHARAI(IGAR22)	00026320
00025730		IGAUSS = IGAUSS + I	00026330
00025740		DY = Y - THVBV2(IGAUSS)	00026340
00025750		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026350
03025760		IEQ = IEQ + 1	00026360
00025 770		S1 = SORT((DX-XSCAT1(1))*(DX-XSCAT1(1)) +	00026370
00025780		1 (DY-YSCAT1(1))*(DY-YSCAT1(1)))	00026380
00025790		DX = X - THVBSI([GAUSS]	00026390
00025800		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026400
00025810		DY = Y - THV8SI(IGAUSS)	00026410
00025820		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026420
00025830		IFO = IFO + 1	00026430
00025840		S2 = SORT((D) - xSCAT((S)) + (D) - xSCAT((S)) +	00026440
00025850		(DY-YSCAT)(5)) + (DY-YSCAT)(5))	00026450
00025860		$(27) = 7(1 / 7) \pm (2)$	00026460
00025870	r	322 = 2317 24 = 32	00026470
00025890	L	1AT - 5	00026470
00025880			00020480
00025890		IF (SI .GI. SZZ) GUIU SUSU	00028490
00025900		A = 1	00126500
00025910	-	GUTU 3040	00026510
00025920	С		00026520
00025930	3050	DX = X - THVBV1(IGAUSS)	00026530
00025940		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026540
000259 50		DY = Y - THVBV2(IGAUSS)	00026550
00025960		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026560
00025970		IEQ = IEQ + 1	U0026570
00025980		S1 = SQRT((DX-XSCATL(3))*(DX-XSCATL(3)) +	00026580
00025990		1 (DY-YSCAT1(3))*(DY-YSCAT1(3)))	00026590
00026000		DX = X - THVBSI(IGAUSS)	00026600
00026010		IGAUSS = IGAUSS + 1	00026610
00026020		DY = Y - THVRSI(IGAUSS)	00026620
00626030		$T_{GAUSS} = T_{GAUSS} + 1$	00026630
0.0026040		160 = 160 + 1	00026640
00026050		$S_{2} = SORT((DY - Y SC AT) (S)) * (DY - Y SC AT) (S)) + (S) = ($	00026650
06026050		1 / / / / / / / / / / / / / / / / / / /	000266660
00020000		1 - 10 - 10 - 10 - 10 - 10 - 10 - 10 -	00026670
00028070	~	522 - 231 / 24 - 32	00026680
00026080	L	1. .	00020000
00026090		LAI = 0	00026690
00026100		IF (S1 .61. S22) GUIC 3030	00026700
00026110		IAI = 3	00026710
00026120	C		00026720
00026130	C	SCATTERING BY A V − ATOM	00026730
000261 40	С		00026740
00026150	С		00026750
00026160	3040	CONTINUE	00026760
00026170		SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4	00026770
000261 80		SCRIT = $4.0 \times THV2$	00026780

INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5) IF (IDEPTH .GT., 150) GOTE 31CO IF (INTE .GT. 150) GOTO 3100 SX = X - XSCAT1(IAT)SY = Y - YSCAT1(IAT) $SB = SQRT \{SX \neq SX + SY \neq SY\}$ IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 3100 PRBL = 1.0 / (2.0 + PI + THV1 + THV2)PRBL = PRBL * EXP (- SX * SX / (2.0 * THV1 * THV1)) * EXP (- SY * SY / (2.0 * THV2 * THV2)) 1 CALL SIGMA (ZV,FMV,SGMV,PXREL,PYREL) PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E) PZ = PZ + Q / NUM BS(INTE, IDEPTH) = BS(INTE, IDEPTH) + PZ 3100 SREL = S1 / ATFV С IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3 IF (SREL .GT. 20.0) GOTC 3110 С ISREL = IFIX (200.0 * SREL) STHETA = THEV * TA(ISREL) / E DELE = SILBOU * SILV(ISREL) GOTC 3120 С 3110 STHETA = 0.0 DELE = 0.03120 CONTINUE SCA = SORT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E) PX = STHETA * (DX - XSCAT1(IAT)) / S1 + PNORM(IGAUSS) * SCA IGAUSS = IGAUSS + 1PY = STHETA * (DY - YSCAT1(IAT)) / S1 + PNORM(IGAUSS) * SCA IGAUSS = IGAUSS + 1PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX + PX + PY + 1.0)) С IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1 С GOTO 3300 С С SCATTERING BY A SI - ATCM С С 3030 CONTINUE SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHES * E) * A4 SCRIT = $4.0 \pm \text{THSI}$ INTE = IFIX ((ELIM - FKFS * E) / RESCLE + 1.5) IF (IDEPTH .GT. 150) GOTG 3200 IF (INTE .GT. 150) GOTO 3200 SX = X - XSCATI(IAT)SY = Y - YSCAT1(IAT)SB = SORT (SX + SX + SY + SY)IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 3200 PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S) PRBL \pm PRBL \pm EXP (- SB \pm SB / (U2S \pm U2S)) CALL SIGMA (ZSI.FMSI.SGMS.PXREL.PYREL) PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E) $PZ = PZ \neq 0 / NUM$ BS(INTE, IDEPTH) = BS(INTE, IDEPTH) + PZ

00027220

00027230

00027240 00027250

00027260

00027270

00027280

00027290

06627300

00027310

00027320

00027330

00027340

00027350

00027360

00027370

00027380

С

C

С

00026790 3200 SREL = S2 / ATESI 00027390 00026800 C 00027400 00026810 IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4 00627410 00026820 IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 3210 00027420 00026830 С 00027430 ISREL = IFIX (200.0 * SREL) 00026840 00027440 00026850 STHETA = THESI + TALISREL) / F 00027450 00026860 DELE = SILBOU = SILSI(ISREL) 00027460 00026870 GOTC 3220 00027470 00026880 С 00027480 00026890 С 00027490 00026900 3210 STHETA = 0.0 00027500 00026910 DELE = 0.003027510 00026920 С 00027520 00026930 С 00027530 00026940 3220 CONTINUE 00027540 00026950 SCA = SQRT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E) 00027550 PX = STHETA * (DX - XSCATL(IAT)) / S2 + PNORM(IGAUSS) * SCA 00026960 00027560 00026970 IGAUSS = IGAUSS + 1 00027570 PY = STHETA * (DY - YSCATL(IAT)) / S2 + PNCRM(IGAUSS) * SCA 00026980 00027580 00026990 IGAUSS = IGAUSS + 100027590 00027000 PHIL = ARCOS [1.0 / SORT (PX * PX + PY * PY + 1.0)] 00027600 00027010 С 00027610 00027020 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2 00027620 00027030 С 00027630 J0027040 3300 PXREL = PXREL + PX00027640 00027050 PYREL = PYREL + PY00627650 00027060 E = E - DELE - SILPL / CPH 00027660 00027070 X = X + A4 * PXREL00027670 00027080 Y = Y + A4 + PYREL00027680 00027090 С 00027690 00027100 C 00027700 00027110 RETURN 03027710 00027120 С 00027720 00027130 END 00027730 00027140 J0027150 00027160 Ú0Ú27170 00027180 00027190 00027200 00027210

SUBJOUTINE SCAT 2 (XY-PAREL, PAREL, P						
C		SUBROUTINE SCAT2 (X.Y.PXREL.PYREL.E.IGAUSS,IEQ.IDEPTH.*.*)	00027 740		DY1 = Y - DPLC * PDPLC(IEC)	00628330
C Sciar2 0003740 Totals 1, solar 1, s	C		00027750		DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEQ)	00028340
2 3.1.4.1.4 0.0027700 10 10.2.874.1.4 0.002880 2 Starteline Paccess in the section Robel with, Fourier Moollavies 0.002880 5.1.5.50F (10.0.4001, stl) 0.002880 2 Fourier Moollavies 0.002880 Fourier Moollavies 0.002880 2 Fourier Moollavies 0.002880 Fourier Moollavies 0.002880 0 0.002880 Fourier Moollavies 0.002880 Fourier Moollavies 0.002880 <td< td=""><td>l r</td><td></td><td>00027760</td><td></td><td>IGAUSS = IGAUSS + 1</td><td>00028350</td></td<>	l r		00027760		IGAUSS = IGAUSS + 1	00028350
C C	č	S C A I 2	00027770		IEQ = IEQ + 1	00028360
C SCATTERING PARCESS IN THE SECON WARK. 00027800 IF FIDPH 6.1.100 GOT 2421 0002840 FUURT MOULART TO SCATTERING PARCESS IN THE 00027810 IF FINTE GOT 2421 0002840 FUURT MOULART TO SCATTERING PARCESS IN THE 00027810 IF FINTE GOT 2421 0002840 FUURT MOULART TO SCATTERING PARCESS IN THE 00027810 IF FINTE GOT 2421 0002840 DIRENSION TAGGOOL, SILVIADOL, S	ř		00027780		2 = 2001 (DAT + DAT + DAT + DAT 2 = 2001 (DAT + DA + DAT + DAT	00028370
C = E001VALENT TO SCATTERING PROCESS IN THE TWO CONCEPTS TO THE INTE OF LSD (200 2/21) 0002/201 00002/201 0002/201 0002/201 0002/201 0002/201 0002/201 0002/201 0002/	č	SCATTERING PROCESS IN THE SECOND NONDLAYER.	00027800		SI = SURT (UXI + UXI + UTI + UTI) IE (IDEPTH CT 150) CDTO 2621	00028380
C F00#FM MONDAVER 00027820 00027830 00027830 00027870 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002800 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002780 0002800 0002800 0002800 0002800 0002800 0002800 000000 000000 000000 000000 0000000 0000	č	FOULVALENT TO SCATTERING PROCESS IN THE	00027810		IF (INTE GT 150) GOTO 2421	00028390
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C	č	FOURTH MONOLAYER	00027820		$IF (SI _GL, SCRIT) GCTO 2421$	00028410
C 00027860 PMEL = PARL = SPRL	С		00027830		PRBL = 1.0 / (PI * U2V * U2V)	00028420
C 0027850 CLL SIGNA (TV. PRV.SGW, PXREL) PVEL) 0022450 DIMENSION TAIAGOOL, SILVIA000L, SILVIA001 00027450 P1 = PXR = SGW + 0PKR / (E E E) 0002450 DIMENSION TAMUNILIZZDI, THWEYZI120001 00027400 SILVIET, DPT, NUM 0002450 DIMENSION TAMUNILIZZDI, THWEYZI120001 00027400 742 SREE S / ATFW 0002450 DIMENSION FUNCTION THWEYZI120001 00027400 742 SREE S / ATFW 00022450 DIMENSION SILVIA000L, SILVIA000L, SILVIA000L 00027400 742 SREE S / ATFW 0002250 DIMENSION FUNCTION FUNCTI	C		00027840		PRBL = PRBL * EXP (- S1 * S1 / (U2V * U2V))	00028430
DHMENSION TARAGODY, SILVIACODI, SILVIACODI, OUD27460 PZ = PRM = SOM * O *EGA / E * E1 D022450 DIMENSION TARAGON, SILVIACODI, TUNEYZI20001 00027460 PZ = PRM = SOM * O *EGA / E * E1 D022450 DIMENSION TUNEYZI20001 00027460 PZ = PRM = SOM * O *EGA / E * E1 D022450 DIMENSION TUNEYZI20001 00027400 00027400 00027400 00027400 DIMENSION TUNEYZI2001 00027400 00027400 00027400 00027400 DIMENSION TUNEYZI2001 00027400 00027400 00027400 00027400 00027400 DIMENSION STLVIKA STLV, STLV, STLVIKA	С		00027850		CALL SIGMA (ZV.FMV.SGMV.PXREL.PYREL)	00028440
DHEMSION PNDR41120001 D022470 PZ = PZ + 0 / NUH D022470 CO22470 DIMEMSION PNDL(22001) D022470 CO22470		DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00027860		PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)	00028450
DHENSION THV9VIL2000; COC27800 BSINTE.IDEPTHI = BSINTE.IDEPTHI + P2 COC27800 DHENSION THV9VIL2000; COC27800 221 SKEL = 5 / ATV COC2880 DHENSION BSIISO.1501 C F (SEEL - LT, O.DOS) RETURN 2 COC2880 DHENSION BSIISO.1501 C F (SEEL - LT, O.DOS) RETURN 2 COC2880 DHENSION BSIISO.1501 C F (SEEL - LT, O.DOS) RETURN 2 COC2880 DOBCETCO C F (SEEL - LT, CLO) COT C240 COC2880 DOBCETCO COC27900 C C COC2880 COMPON /WAL / TA, SILV, SILST, PNDAM, TWPUL, TWASZ, TWASZ, TSILW, SILW SILW COC27900 C COC28900 C COMPON /WAL / TA, SILV, SILST, PNDAM, TWPUL, TWASZ, TW		DIMENSION PNORM(12000)	0002 7870		PZ = PZ * Q / NUM	00028460
Differsion FUNESTI 22001, PONIF [22001] 0027890 C DIFFERSION FORCESTS PONIF [22001] 0027890 C DIFFERSION FORCESTS PONIF [22001] 0027890 C REAL #8 P2 (00027890 C LOGICAL ADTAT 00027890 C LOGICAL ADTAT 00027890 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVESI, SISCOC2790 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, USS, VFEMH, 0002800 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, USS, VFEMH, 0002800 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, USS, VFEMH, 0002800 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILM, THVI, THVI, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILE, TOHTH, SANGLE, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILE, TOHTH, SANGLE, PHILM, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILM, SINUT, SINUT, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C COMMON /FST/ PHILM, SINUT, SINUT, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C C CHMM /FSSI/ CPD, ZALK, PARAM, PHIL, PHIOZ, ELMM, UZY, UZS, THV450028040 C C C C C C C C C C C C C C C C C C		DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)	00027880		BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ	00028470
D DERNSILIN POPLCE2001, PUNFE22001, 00027900 C F F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0022800 DIMENSION #SIISO.1501 (1150.150) 00027910 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0022800 D00227920 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D00227920 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D0022850 D00227920 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 C C C C C DOMON / KVAL / TA. SILV. SILSI. PNOW, THVEVI, THVEVZ, THVESI, SISCO202010 D F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002850 D0022790 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D0022850 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D0022850 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D0022850 C F (SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D F (SREL J.T. 2000) SILV(ISREL J. 0.005) RETURN 2 0002800 D F (SREL J.T. 1000) SILV(ISREL J. 0.005) RETURN 2 0002800 D (SREL SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D (SREL SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D (SREL SREL J.T. 0.005) RETURN 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.005) SCA SOULD 2 0002800 D F (SREL SREL J.T. 0.0050800 D F (SREL SREL SREL SREL SREL SREL SREL SREL		DIMENSION THVBSI(12000)	00027890	2421	L SREL = S / ATFV	00028480
UNRENSION BOILSD.ISDI UDIGATION 14 (SRL LI. D.008) RETURN 2 00022300 REALES PZ 00027930 C 000221930 REALES PZ 00027930 SIREL = IFLX (200.0 COT 2420 00022350 LOGICAL SISC 00027930 SIREL = IFLX (200.0 SREL) / E 00022350 LOGICAL SISC 00027930 SIREL = IFLX (200.0 SREL) / E 00022350 COMMON /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVEVZ, THVBSI, SISCOC27900 C 00022360 COMMON /KAL/ PI, ATFN, ATFSI, A, A2, A4, ANDAT, PSILN, 0002800 2420 SINETA = THEV + TAISSEL) / E 00022850 COMMON /KAL/ PI, ATFN, ATFSI, A, A2, A4, ANDAT, PSILN, 0002800 C420 SINETA = 0.0 00022850 COMMON /KAL/ PI, ATFN, ATFSI, A, A2, A4, ANDAT, PSILN, 0002800 C420 SINETA = 0.0 00022850 COMMON /TEST, AG, ASO-A SOA, THEN, DUCA, PONT, PANI, 0002800 C420 SINETA = 0.0 00022860 COMMON /FSAL/, GA, LIGTN, BANCE, DUCIA, PONT, PANI, 0002800 C420 SINETA = 1.0 00022860 COMMON /FSAL/ EPO, 1/41, FRIPAT, FHWR, NUM, DEPHI, 2VALI, 2VAL, 0002800 C430 CONTINUE 00022860 COMMON /FSAL/ EPO, 1/41, SINSH, SINS, 0002800 C440 SINGA(164025) * SCA 00022860 COMMON /FSAL/ EPO, 1/41, SINS		DIMENSION POPLE(2200), PUNIF(2200)	00027900	С		00028490
C U00027900 COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: LGGICAL ROTAT U00027900 COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ TA: SILV: SILSI. PNOPM, THVEYI, THVB/2, THVBSI, SILV: COMMON /SVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2; A4; RHOAT, PSILNY, PSILNY, O0028000 2 ASG, ASG2, ASG4, ASG6, ISEC, DACCM, PDALC, PUNIF CA220 COMMON /STSI/ PHILIN; THVI: THVE, THSI, ESGAT, U0028010 COMMON /FSI/ PHILIN; THVI: THVE, THSI, ESGAT, U0028010 COMMON /FSI/ PHILN; THVI, THVI, FU, PHI, CJ, BS, RESOLO, U0028010 COMMON /FSI/ PHILN; THVI, THVI, FU, PHI, CJ, BS, RESOLO, U0028000 COMMON /FSI/ PHILN; THVI, FU, PHI, CJ, BS, RESOLO, U0028000 COMMON /FSI/ PHILN; THVI, FNI, FNI, PHIN, PUPHI, ZVALI,	~	DIMENSION BS(150,150)	00027910		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00028500
C REAL # 9 P1 00022500 LOGICAL ROTAT 00027950 C ISREL = IFLX (20.0 + SREL) 00022500 LOGICAL SISC 00027970 0027950 C 00027970 C COMMON / KVAL / TA. SILV, SILSI, PADAM, THUEVI, THUBV2, THUBV3, SILSIGG27990 C 00027950 C COMMON / FART, 7.4. SILV, SILSI, PADAM, THUEVI, THUBV2, THUBV3, SILSGG27990 C 00022850 C COMMON / FART, 7.4. SILV, SILSI, PADAM, THUEVI, THUBV2, THUBV3, SILSGG27990 C 00022850 C COMMON / FART, 7.4. SILV, SILSI, PADAM, ARGAN YEV, THUSSI, SILSGG27990 C 00022850 C COMMON / FART, 7.4. ASQN, ASQN, SEC, PALCAM, PDPC, PUNIF (M) 00023000 1 AFART, 7.4. ASQN, ASQN, SEC, PALCAM, PDPC, PUNIF (M) 00023000 1 FARY, FKKS, SEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF (M) 00023000 C COMMON / FEST, PHI, FKI, FKI, FKI, FKI, FKI, FKI, FKI, FK	č		00027920	~	IF ISKEL +61+ 20+0) 6010 2420	00028510
LOGICAL SISC LOGICAL SISC LOGICAL SISC COMMON /WAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG COTC 2430 O0027970 COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG COTC 2430 COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG CONCERNS COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG CONCERNS COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG CONCERNS COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI, TWOY2, TYONG CONCERNS COMMON /KVAL/ TA. SILV. SILV. SILV. THVEVI, TWOY2, TYONG CONCERNS COMMON /KTEST PHILING TWVI/THVS/SILV. SILV. SILV. SILV. CSG, YEERI, GOUZADO COMMON /FEST PHILING TWVI/THVS/SILV. SILV. SILV. SILV. SILV. SILV. CSG, YEERI, GOUZADO COMMON /FEST PHILING TWVI/THVS/SILV. SILV. SI	L		00027930	L	150 EL - 1514 1300 0 + 50 EL L	00028520
LÓGICAL SISC LÓGICAL SISC LÓ			00027950		STHETA = THEV & TAITSPELY	00028540
C COUNCY AND ALL TAS SILVS TO CONTRACT TO CONTRACT AND C C CONTRACT AND C C COUNTY AND C C C C C C C C C C C C C C C C C C C			00027960			00028550
C 000229960 C 000229960 COMMON /WVAL/ FA, SILV, SILSI, PNORM, THYEVI, THYBY, THYBY, THYBY, SISCOGC27990 C 00022800 COMMON /WVAL/ FA, ATF, A, A2, A4, RHDAT, PSILNX, PSILNY, 00028000 2420 SHETA = 0.0 000228500 1 DAART, 2V, 2SI, THEV, THRSI, ELSCAT, UCS, VFERHI, 00028010 2420 SHETA = 0.0 00028600 2 ASG, ASO2, ASO4, ASOB, TSEC, DPCM, PDPL, PUNIF 00028000 2420 CONTINUE 00028600 COMMON /FEST/ PHILIN, THVI, THYJ, EN, ELS, ELSCAT, PUNIC, UCS, VFERH, 00028060 2430 CONTINUE 00028600 00028600 COMMON /FEST/ PHILIN, THVI, THYJ, CHAL, PDPL, CHELH, UZY, UZS, THY450008040 2430 CONTINUE 00028600 00028600 COMMON /FEST/ PHILIN, THVI, THYJ, CHELH, UZY, UZS, THY4500028040 2430 CONTINUE 00028600 00028600 COMMON /FEST/ PHO, SINPHI, FLL, FAL, FAL, WIT, ZVALL, ZVAL2, ONCARDA 00228000 PY = STHETA = 0X / S = PNCAMIGAUSSI * SCA 00028600 COMMON /FEST/ PHO, ZVAL, PLASMG, BEHEV, BETHES 00028100 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028600 COMMON /FEST/ PHIL, FAL, FAL, FALA 0002810 PYREL = PXREL + PY 00028100 OPY = STHETA = 0Y / S = PNCAMIGAUSSI * SCA 00028600 C 00028100 PY = STHETA + 0Y / S = PNCAMIGAUSSI * SCA 0002	с		00027970		GDTC 2430	00028560
COMMEN /WAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVEVI, THVEV2, THVESI, SISCO27950 COMMEN /GAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHGT, PSILNY, DOG28000 2 ASS, ASSQ, ASG, ASG, BEC, DPLCH, PDPLC, PUNF COMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EG, BS, RESOLE, RESOLD, GOG28010 CAMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EG, BS, RESOLE, RESOLD, GOG28030 CAMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EG, BS, RESOLE, RESOLD, GOG28050 CAMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EG, BS, RESOLE, RESOLD, GOG28050 CAMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, FG, BS, RESOLE, RESOLD, GOG28050 CAMMEN /FST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, FG, BS, RESOLE, THV550028050 CAMMEN /FST/ PHAL, SHLP, H12, PHIL2, FLIK, ZLV2, GOG28050 CAMMEN /FST/ PHAT, FHVM, NUP, DEPTH, ZVALL, ZVAL2, GOG28050 CAMMEN /FST/ PHAT, FHVM, NUP, GETHEX COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, NUP, GETHEX COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, NUP, GETHEX COMMEN /FST, FARAT, FHVM, NUP, GETHEX COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGTA COMMEN /FST/ FARAT, FHVM, AGTA COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGTA COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGTA COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGTA COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, FST, FARAT, AGG /FLASON COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGG /FLASON FTA COMMEN /FST/ FPAT, FHVM, AGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO / F = ZVAL * ALGG /FLASON FTA SILVAL = FOO /	č		00027980	C		00028570
COMMEN /GAL/ P1, ATFS1, A, A2, A4, RHOAT, PSTINN, PSTINN, D0028000 2420 STHETA = 0.0 0028500 1 CPART, 2V, 2ST, THEST, HEST, HUST, USCS, VERNI, 00028010 0LE = 0.0 0C 2 ASO, ASO2, ASO4, ASO8, ISEC, DPLCH, PUNIF 0028020 C 00028030 C COMMEN /TEST/ FHIIM, THVI, THV2, THS1, EO, BS, RESOLE, RESOLD, NO028030 C 1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV50028040 2430 CONTINUE 00028050 1 FKV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV50028040 2430 CONTINUE 00028050 2 COSPHI, SINH, CLI, PHI, THETA, PROP, 0028050 SC = SORT (ELSCAT + (DFLE + SILVAL / CPH) / E) 00028050 2 COSPHI, SINH, FLI, FHN, NUP, OEPHI, ZVALL, ZVAL2, 00028060 PX = STHETA + 0X / S + PNCRHIGAUSSI * SCA 00028660 2 COSPHI, SINH, FLI, FHN, NUP, OEPHI, ZVAL1, ZVAL2, 00028060 PX = SINHETA + 0X / S + PNCRHIGAUSSI * SCA 00028660 COMMEN /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 00028090 PY = SINHETA + 0Y / S + PNCRHIGAUSSI * SCA 00028660 C COMMEN /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 00028100 ICAUSS = IGAUSS + 1 00028100 PYREL = PYREL + PY 00028100 ICAUSS = IGAUSS + 1 00028100 C SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALGC (PLASMC * E) * A4 00028100 C SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALGC (VEL / VERN) * A4 00028130 C SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALGC (VEL / VERN) * A4 00028130 C INTE = IFXX (IEL PXREL + PYREL + PYREL + 1.5) 00028140 C INTE = IFXX (IEL PXREL * PYREL + PYREL + 1.5) 0002810 Y = Y + A4 + PXREL 00028200 C 00028200 C	-	COMMON /WVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THV&VI. THV&V2. THVBSI. SI	SC00C27990	č		00028580
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSG, VFERNI, 00028010 DELE = 0.0 00028000 2 ASG, ASG, ASGA, ASGA, STAGA, ST		COMMON / GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,	00028000	2420	STHETA = 0.0	00028590
2 ASG, ASO2, ASO4, ASO8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF G022802 C COMMON 7TEST/ PHILM, THV1, THV2, THSI, ECH, BS, RESOLE, RESOLD, OU22803 C 1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV450028040 2 GOMMON / AVAL/ Q, NIDTH, BANGLE, DRICIN, OMEGA, PHI, TMETA, PRDP, G0228050 1 FMV, FMSI, FPPARI, FWH, NUP, DEPHI, ZVALI, ZVAL2, OU028050 2 COSPHI, SILMPHI FLI, FNI, RTAT COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMG, BETHEV, BETHES 0 CO28090 C COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMG, BETHEV, BETHES 0 CO28090 C COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMG, BETHEV, BETHES 0 CO28090 C COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMG, BETHEV, BETHES 0 CO28090 C COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMG, BETHEV, BETHES 0 CO28090 C COMMON / EPSI/ EPO, ZVAL, ALOG (PLASMC * E) * A4 0 CO28100 SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (IPLASMC * E) * A4 0 CO28100 SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFEMI) * A4 0 CO28100 C C COMMON / EPSI/ EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFEMI) * A4 0 CO28100 C C C C C C C C C C C C C C C C C C C		1 ZPART, ZV. ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00028010		DFLE = 0.0	00028600
COMMON //EST/ PHILIM, THVI, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLE, 00228030 1 FKV, FKS, SREL, PHIZ, PHI02, ELIM, UZY, UZS, THV4500028040 2 COMMON /9VAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, GMEGA, PHI, THETA, PROP, GO228050 2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT 00028070 2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT 00028070 COMMON /EPSI/ ED0, ZVAL, PLASMO, BETHEV BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, BETHEV, BETHES 0C628080 COMMON /EPSI/ ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, *E) * A4 00028100 SILPL = ED0 / E + ZVAL * ALOG (PLASMO, *E) * A4 00028100 SILPL = ED0 / E + ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4 00028100 COMMON /EPSI / ED0 / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4 00028100 COMMON /EPSI / ED0 / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4 00028100 COMMON /EPSI / ED0 / E * ZVAL * ALOG (DETHEV * E) * A4 00028100 COMMON /EPSI / ED7 / E * ALOG SILP / CPH SILNCU = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4 00028100 COMMON /EPSI / ENCL * PYREL * PYREL * PYREL * DVREL * L0) 00028100 COMMON /EPSI / ENCL * PYREL * PYREL * PYREL * PYREL * PYREL * OC02810 COMMON /EPSI / ENCL * PYREL * PYREL * PYREL * PYREL * PYREL * PYREL 00028210 C 00028200 C 00028200		2 ASQ. ASQ2. ASQ4. ASQ8. ISEC. DPLCM. PDPLC. PUNIF	00028020	С		00028610
1 FKFV; FKFS; SREL, PH12, PH102, ELIM, UZV, UZS, THV450028050 2430 CONTINUE 00028301 1 FMV, FKSI, FMPART, FWHM, NUP, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2, 00028050 SCA = SORT (ELSCAT * (DFLE + SILVAL / CPH / E) 00028630 2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RETAT 00028070 PX = STHETA * DX / S + PNCRMIGAUSSI * SCA 00028650 2 COSPHI, SINPHI, FNI, FNI, RETAT 00028070 PX = STHETA * DX / S + PNCRMIGAUSSI * SCA 00028600 2 COSPHI, SINPHI, FNI, RETAT 00028070 PX = STHETA * DX / S + PNCRMIGAUSSI * SCA 00028600 2 COSPHI, SINPHI, FNI, RETAT 00028010 FREL + PX 00028100 00028100 2 COSONO 00028100 PY = STHETA * DX / S + PNCRMIGAUSSI * SCA 00028100 3 00028100 PY EL = PYREL + PY 00028100 00028100 00028100 00028100 IGAUSS + I 00028100 00028100 00028100 00028100 C 00028100 VE = SORT (PX EL * PXREL * PXREL * PXREL * A 00028150 C 00028100 00028100 00		COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,	00028030	С		00028620
COMMON / BVAL/ 0, w107H, BANGLE, ORIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PROP, GC228050 SCA = SORT (ELSCAT + 10FLE + SILVAL/ / CPH / E) G0028650 1 FMV, FMSI, FMPANT, H, RTHM, NUP, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2, G0028050 PX = STHETA * 10 / X / S + PNCRWIGAUSS) * SCA G0028650 2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT G0028070 PXREL = PXREL + PX G0028650 COMMON /EPSI/ EP0, ZVAL, PLASMU, BETHEVS G0028000 PY = STHETA * 0Y / S + PNCRWIGAUSS) * SCA G0028860 C G0028100 GO28100 PYREL = PXREL + PX G0028650 C G0028100 GO28100 PYREL = PXREL + PY G0028650 SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALCG (PLASMC * E) * A4 G0028100 PHIL # ARCOS (I.O / SORT (PX * PX + PY * PY + 1.0)) G002870 SILRGU = EPO / E * ZVAL * ALCG (VEL / VFERMI) * A4 G0028130 C G0028150 C G0028170 X = X + A4 * PXREL G0028750 SILRGU = EPO / E * ALGG (BETHEV * E) * A4 G0028160 F = E - DELE - SILPL / CPH G0028770 G0028170 X = X + A4 * PXREL G0028770 SILRGU = FIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) G0028100 Y = Y + A4 * PXREL G0028770 G0028780 G0028780 G0028780 G0028780 G0022870 G0022870 G0022870 </td <td></td> <td>1 FKFV. FKFS. SREL. PHI2. PHI02. ELIM, U2V, U2S, THV</td> <td>4500028040</td> <td>2430</td> <td>CONTINUE</td> <td>00028630</td>		1 FKFV. FKFS. SREL. PHI2. PHI02. ELIM, U2V, U2S, THV	4500028040	2430	CONTINUE	00028630
1 FHV: FPSI, FMPAR, FLIFN, NOP, DEPH, ZVALI, ZVALZ, OU028060 PX = SIRFIA * DX / S + PNCRMITGADSS] * SLA 00028500 2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, FNI, FNI, FXT 00028000 PX = SIRFIA * DX / S + PNCRMITGADSS] * SLA 00028850 COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES 00228000 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028860 C 00028100 PYREL = PYREL + PY 00028800 C 00028100 PYREL = PYREL + PY 00028810 SILPL = EPO / E + ZVAL * ALCG (PLASMC * E) * A4 00028100 C 00028100 SILVAL = EPO / E + ZVAL * ALCG (IVEL / VFERMI) * A4 00028100 C 00028100 SILVAL = EPO / E + ZVAL * ALCG (IVEL / VFERMI) * A4 00028100 C 00028100 SILVAL = FO / E + ZVAL * ALCG (IVEL / VFERMI) * A4 00028100 C 00028170 SILVAL = FO / E + ZVAL * ALCG (IVEL / VFERMI) * A4 00028100 C 00028170 SILVAL = FO / E + ZVAL * ALCG (IVEL / VFERMI) * A4 00028100 F = E - DELE - SILPL / CPH 00028750 SCRIT = A,0 * THV2 / RESCLE + 1.5) 00028100 C 00028760 C 00028100 C 00028100 C 00028870 C		COMMON /BVAL/ O. WIDTH, BANGLE, ORIGIN, GMEGA, PHI, THETA, PROP.	00028050		SCA = SQRT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E)	00028640
2 CUMPL: SINPH: FLI; FN; KLIAT OUQ28070 PAREL = PAREL + PA OUQ28070 COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMU, BETHEV, BETHES OUQ28000 IGAUSS = IGAUSS + 1 OUQ28670 C OUQ28100 PYREL = PYREL + PY OUQ28070 VEL = SORT. (2.0 * E / UCSO) OUQ28100 IGAUSS = IGAUSS + 1 OUQ2870 SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 OUQ28100 C OUQ28100 SILRGU = EPO / E * ZVAL * ALOG (BETHEV * E) * A4 OUQ28100 C OUQ28100 SILRGU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 OUQ28100 C OUQ28100 SILRGU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 OUQ28100 C OUQ28100 SILRGU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 OUQ28100 C OUQ28100 INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) GO028170 X = X + A4 * PXREL OUQ2870 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OUQ28200 C OUQ28200 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OUQ28200 C OUQ28200 C OUQ28200 C OUQ28200 OUQ28200 OUQ28200 C OUQ28220 C OUQ28220 <t< td=""><td></td><td>1 FMV, FMSI, FMPARI, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVALZ,</td><td>00028060</td><td></td><td>PX = STHETA # UX / S + PNURMLIGAUSS] # SLA</td><td>00028650</td></t<>		1 FMV, FMSI, FMPARI, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVALZ,	00028060		PX = STHETA # UX / S + PNURMLIGAUSS] # SLA	00028650
CUMAUM /EPSI/ PDU, 2VAL, PLASHU, BEINEY, BEINEY		2 CUSPHIN SINPHIN FLIN RUAN	00028070		PAREL = PAREL + PA	00028680
C 00028000 PYREL = PYREL + PY 0002800 VEL = SQRT[2.0 * E / UCS0] 00028100 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028700 SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASNC * E) * A4 00028100 PHIL = ARCOS (I.O / SQRT (PX * PX + PY * PY + PY + 1.0)) 00028700 SILAGU = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERNI) * A4 00028140 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1 00028740 SILAGU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 00028160 F = E - DELE - SILPL / CPH 00028740 SILAGU = EPO / E * ALOG (DETHEV * E) * A4 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028760 SILAGU = EPO / E * ALOG (DETHEV * E) * A4 00028160 F = E - DELE - SILPL / CPH 00028760 SILAGU = EPO / E * ALOG (DETHEV * E) / RESCLE + 1.5) 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028760 SCATTE A.O. / SQRT (PXREL * PYREL * PYREL * 1.0)) 00028100 Y = Y + A4 * PYREL 00028760 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 00028210 RETURN 000288100 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 000282200 00028260 00028800 C 00028210 RETURN 00028260 00028800 00028800 C 000282200 C 000	c	CUMMUN /EPSI/ EPU, ZVAL, PLASMU, BEIMEV, BEIMES	00028080		10AUSS = 10AUSS + 1 04 - STHETA ± 04 / 5 + 0MC0M(10AUSS) ± 50A	00028680
C 00028100 100028120 00028120 00028120 SILPL = EP0 / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00028120 PHIL = ARCOS (1.0 / SORT (PX * PX + PY * PY + 1.0)) 00028720 SILVAL = EP0 / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00028130 C 00028720 SILVAL = EP0 / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00028150 C 00028720 SILVAL = EP0 / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 00028150 C 00028720 SCRIT = A.O * THV2 00028740 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028740 INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028760 C 00028100 Y = Y + A* = PXREL 00028760 00028770 C 00028100 Y = X + A4 * PXREL 00028770 00028770 00028100 C 00028100 Y = X + A4 * PXREL 00028770 00028100 C 00028210 RETURN 00028770 00028200 C 00028210 RETURN 00028870 00028200 C 0002820 00028210 00028800 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 00028200 00028200 <td>č</td> <td></td> <td>00028090</td> <td></td> <td>PABEI = PABEI + PA</td> <td>00028690</td>	č		00028090		PABEI = PABEI + PA	00028690
VEL = SQRT. (2.0 * E / UCSQ) 00028120 PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX * PX + PY * PY + 1.0)) 00028110 SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00028130 C 00028120 SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4 00028130 C 00028170 SILAGU = EPO / E * ZVAL * ALOG (BETHEV * E) * A4 00028150 C 00028740 SCRIT = A.0 * THV2 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028170 INT = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028170 C 00028100 Y = Y + A4 * PYREL 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028170 C 00028100 C 00028100 Y = Y + A4 * PYREL 00028170 C 00028100 C 00028170 X = X + A4 * PYREL 00028170 C 00028100 C 00028100 C 00028170 C 00028100 C 00028100 C 00028170 C 00028100 C 00028100 C 00028210 00028210 C 00028200 C 00028200 C 00028830 00028830	č		00028110		IGAUSS = IGAUSS + 1	00028700
SILPL = EPO / E * 2VAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00022130 C 00022120 SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00022130 C 00022170 SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4 00028140 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN I 00028740 SCRIT = 4.0 * THV2 00028150 C 00028760 00028760 SCRIT = 4.0 * THV2 00028150 C 00028760 00028760 SCRIT = 4.0 * THV2 COSSITO X = X + A4 * PXREL 00028760 00028760 CPH = (1.0 / SORT (PXREL * PXREL * PYREL * PYREL * 1.0)) 00028180 Y = Y + A4 * PYREL 00028760 C 00028190 C 00028190 C 00028760 C 00028190 C 00028190 C 00028760 C 00028190 C 00028190 C 00028760 C 00028200 C 00028810 RETURN 00028810 C 00028200 C 00028200 C 00028810 C 00028200 C 00028200 C 00028800 C 00028200 C 00028200	Ũ	$VE1 = SORT_{1}(2_0 + E \neq UCSO)$	00028120		PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX * PX + PY * PY + 1.0))	00028710
SILVAL = EPO / E * ZVAL * AICG (VEL / VFENI) * A4 OUO28140 IF (PHIL.GT. PHILIM) RETURN 1 OUO28730 SILNECU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4 OUO28150 C OUO28740 SCRIT = A.O * THV2 OUO28160 F = E - DELE - SILPL / CPH OU028760 INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) OC028170 X = X + A4 * PXREL OU028760 C PH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL + PYREL + 1.0)) OU028180 Y = Y + A4 * PYREL OU028760 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OU028210 RETURN OU028870 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OU028220 C OU0288190 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OU028210 RETURN OU0288190 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS OU028220 OU028220 OU028230 C DPLC = DPLCM OU028240 END OU028830 C DYL = DPLCM OU028260 OU028270 OU028830 DX = x - THV8V2(IGAUSS) - DPLC * OLO OU028270 OU028270 OU028820 DX = x - THV8V2(IGAUSS) - DPLC * POPLC(IEQ) OU028270 OU028270 OU028820 DYL = x - DPLC * PDPLC(IEQ) OU028270 OU028300 OU028		SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4	00028130	с		00028720
SILRCU = EPO / E * ALGG (BETHEV * E) * A4 00028150 C 00028740 SCRIT = 4.0 * THV2 00028160 F = E - DELE - SILPL / CPH 00028760 INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) 00028100 Y = Y + A4 * PXREL 0002870 C 00028190 C 0002870 C 00028190 C 0002870 C 00028100 Y = Y + A4 * PYREL 0002870 C 00028190 C 0002870 C 00028190 C 00028190 C 00028190 C 00028190 C 00028200 C 00028190 C 00028210 RETURN 0002800 C 0002820 C 0002800 C 00028210 RETURN 0002800 C 00028200 C 0002800 C 00028200 C 00028200 C 00028200 C 00028200 DPLC = DPLCM 00028200 00028270 00028270 DX1 = X - DPLC * PODPLC(IEQ) 00028270 000282800 00028270		SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALCG (VEL / VFERMI) * A4	00028140		IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1	03028730
SCRIT = 4.0 * THV2 00028760 00028760 00028760 INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) 00028170 X = X + A4 * PXREL 00028760 C 00028190 C 00028760 C 00028100 C 00028190 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 00028210 RETURN 00028800 C 00028200 C 00028200 C 00028800 C 00028200 C 00028200 C 00028820 C 00028240 END 00028820 00028820 DPLC = DPLCM 00028260 00028260 00028260 00028820 DX = X - THV8D2(IGAUSS) - DPLC * POPLC(IEQ) 00028260 00028260 00028260 IEQ = IEO + 1 00028260 00028260 00028260 00028260 IEQ = IEO + 1 00028260 000282800 000282800 0028280		SILRCU = $EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4$	00028150	С		00028740
INTE = IFIX (IELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5) 00028170 X = X + A4 * PXREL 0002870 C 00028180 Y = Y + A4 * PYREL 0002870 C 00028190 00028190 00028780 C 00028100 C 00028780 C 00028100 C 00028780 C 00028200 C 00028780 C 00028200 C 00028800 C 00028200 C 00028200 C 00028200 END 00028830 DPLC = DPLCM 00028250 00028260 00028270 DX = x - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 00028270 00028270 DX = x - THVBV2(IGAUSS) + 1 00028270 000282800 000282800 IEQ = IEO + 1 <		SCRIT = $4.0 \times \text{THV}2$	000281 60		F = E - DELE - SILPL / CPH	00028750
CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL * PYREL * PYREL * 1.0)) 00028180 Y = Y + A4 * PYREL G0028770 C 00028190 00028190 00028190 0002870 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 00028210 RETURN 00028800 C scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028200 C 00028100 C scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028200 C 00028200 C scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028200 C 00028200 C scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028200 00028200 00028800 C scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028200 C 00028820 C scattering process by THE STRONG V - ROWS scattering process by THE STRONG V - ROWS 00028820 C scattering process by THE STRONG V - ROWS		INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5)	00028170		X = X + A4 * PXREL	00028760
C 00028190 C 00028190 C 00028790 C SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS 00028200 C 00028800 C second 00028200 C 00028800 DPLC = DPLCM second 00028250 00028820 00028820 DX = X - DPLC # PDPLC (IEQ) second 00028260 00028260 00028820 DX = X - THYBV2/IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) second 00028290 second second IEQ = IEQ + 1 second second second second second second DPLC = SPLCM second second <td></td> <td>CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))</td> <td>00028180</td> <td></td> <td>$Y = Y + A4 \neq PYREL$</td> <td>60028770</td>		CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00028180		$Y = Y + A4 \neq PYREL$	60028770
C 00028200 C 00028200 00028200 00028200 C scattering process by the strong v - ROWS 00028200 RETURN 00028800 C 00028200 C 00028800 00028800 C 00028200 C 00028800 00028800 C 00028200 C 00028800 00028800 DPLC = DPLCM 00028260 END 00028830 DX1 = x - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 00028270 00028280 DX = x - THV8V2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028290 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 00028300 00028300 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028300 00028300 00028300 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028300 00028300 IEQ = IEQ + 1 00028300 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 00028320 00028320 IEQ = IEQ + IEQ	C		00028190	C		00028780
C SLATTERING PROCESS BY THE STRUNG V - RUNS O0028210 RETURN 00028200 C 00028200 C 00028200 00028820 C 00028240 END 00028800 00028800 DPLC = DPLCM 00028260 00028270 00028280 00028280 DX = X - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 00028280 00028280 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 00028290 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 00028300 00028300 DPLC = DPLCM 00028300 00028300 00028300 IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320 00028320	ç		00028200	C	0.5 Y (10.1)	00028790
C 00028220 C 00028200 C 00028820 C 00028240 END 00028830 DPLC = DPLCM 00028250 00028260 DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 00028280 DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028290 16028300 IEQ = IEQ + 1 00028290 00028300 DPLC = DPLCM 00028290 00028300 IEQ = IEQ + 1 00028300 00028310 DPLC = DPLCM 00028310 00028320	c	SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - RUWS	00028210	~	RETURN	00028800
C 00028240 END 00028830 DPLC = DPLCM 00028240 END 00028830 IF (PUNIF(IEQ).GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028260 00028270 DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 00028290 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 00028310 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ).GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320	Č		00028220	с. С		00028820
DPLC = DPLCM 00028250 IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028260 DX1 = x - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 Dx = x - THV8V2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320	L C		00028250	ι	END	00028830
IF (PUNIF(IEQ).GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028260 DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 DX = X - THV8V2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEO + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ).GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320	L		00020240		CND	00020050
DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028270 DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) -GT- PRDP) DPLC = 0.0 00028320		IE (PUNIE(IEG) _GT_ PRDP) DP1C = 0.0	00028260			
DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ) 00028280 IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320		DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ)	00028270			
IGAUSS = IGAUSS + 1 00028290 IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320		DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00028280			
IEQ = IEQ + 1 00028300 DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) _GT_ PRDP) DPLC = 0.0 0J028320		IGAUSS = IGAUSS + 1	00028290			
DPLC = DPLCM 00028310 IF (PUNIF(IEQ) .gt. PRDP) DPLC = 0.0 00028320		IEQ = IEQ + 1	00028300			
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0 00028320		DPLC = DPLCM	00028310			
		IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0	000283 20			

SUBROUTINE SCATA (Y.Y. PYDEL, BYDEL, E. TCAUSS, TEA, IDEATH + + + +	00000040		DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEC)	00629430
Sounder The Sents that IF AREL FIREL FE I GAUSSI LEW I DEPTING + 5 + 5 + 5 + 5	00028840		IEO = IEO + I	00029440
	00028850		DPLC = DPLCM	00029450
	00028860		IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0	00029460
	00028870		IGAUSS = IGAUSS + 1	00029470
	00028880		DY1 = Y - DPLC + PDPLC(IEQ)	06629480
	00028890		DY = Y - THVBV1(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00029490
SCATTERING PROCESS IN THE THIRD MONOLAYER	00028900		IGAUSS = IGAUSS + 1	00029500
	00028910		IEQ = IEQ + 1	00C29510
	00028920		S = SQRT ((DX-XSCAT3(I))*(DX-XSCAT3(I)) +	00029520
· · · · · ·	00028 930	1	(DY-YSCAT3(1))*(DY-YSCAT3(1)))	ÜÜ029530
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00028940		IF (IDEPTH .GT. 150) GCTC 2221	00029540
DIMENSION PNORM(12000)	0002895 0		IF (INTE .GT. 150) GOTO 2221	00029550
DIMENSION THVBVL(12000), THVBV2(12000)	00028960		SX = DX1 - XSCAT3(1)	00029560
DIMENSION THVBSI(12000)	00028970		SY = DY1 - YSCAT3(I)	00029570
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00028 980		SB = SQRT (SX + SX + SY + SY)	00029580
DIMENSION PXSCAT(6)	00028990		IF (SB .GT. SCRIT) GOTC 2221	00029590
DIMENSION PYSCAT(6)	00029000		PRBI = 1.0 / (2.0 * PT * THV2 * THV1)	00029600
DIMENSION DEL(6)	00029010		PRI = PRI + EYP (= SY + SY / (2.0 + THV2 + THV2)) +	00029610
DIMENSION BS(150, 150)	00029020	1	$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} + \frac{1}$	00029620
	00029030	-	CALL STORY (7) = ST + ST + (2) = (1) + (00029020
	00029040		CALL SIGMA (2**FM*)SGM**FAREL*FIREL; $D_2 = D_2 G_1 + S_0 M_2 + O_1 C_1 + C_1$	00029830
	00029040		PZ = PROL + SGMV + UPEGA / (E + E)	00029840
	00029090			00029650
	00029080		BS(INIE, IDEPIH) = BS(INIE, IDEPIH) + PZ	00029660
	00029070	2221	SREL = S / ATFV	00029670
	00029080	С		00029680
	00029090		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3	00029690
CUMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNGRM, THVBVI, THVBV2, THVBSI, SI	SC00029100		IF (SREL .GT. 20.0)GOTO 2220	00329700
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,	00029110	С		00029710
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00629120		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00029720
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF	00029130		STHETA = THEV * TA(ISREL) / E	00029730
COMMON /SCA3/ XSCAT3(6), YSCAT3(6)	00029140		DEL(I) ≠ SILBOU * SILV(ISREL)	00029740
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,	00029150		GOTO 2230	00C29750
1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV	4500029160	С		00029760
COMMON /BVAL/ Q. WIDTH. BANGLE. ORIGIN. CMEGA. PHI. THETA. PRDP.	00029170	2220	STHETA = 0.0	00029770
1 FMV. FMSI. FMPART, FWHM. NUM. DEPHI. ZVALI. ZVAL2.	00029180		$DEL(I) = O_{\bullet}O$	00029780
2 COSPHI. SINPHI. FLI. FNI. RCTAT	00029190	r		00029790
COMMON /EPSI/ EPO. ZVAL. PLASMO. BETHEV. BETHES	00029200	2230	CONTINUE	00029800
	00029210	2230	CONTINUE	00029810
	00029220		SOR = SORT (LESCH) + (DELETE - SECRET) / S + DROPHIGAUSS) + SCA	00029820
	00029230		TABLAT(1) = 3 TRETA + 10A = ASCATS(1)773 + TRERATEDOSS7 + 3CA	06029830
VEL - SOFT 12 0 + E / UCSOL	00029250		104033 = 104033 + 1 $000041111 = 00041100 = 00041101 / 0 = 000041041001 \pm 004$	000270840
VEL = SQAT (X2+0) + E / 0CSQ)	00029240		PTSCATELY - SIMETA + (D) - TSCATS(17) / S + FRURMLIGAUSS/ + SCA	000230950
SILFL = EFU / E + ZVAL + ALUG IFLASMU + EF + A+	00029290		1GAUSS = IGAUSS + I	00029890
SILVAL = EPU / E + ZVAL + ALCG (VEL / VFERMI) + A+	00029280		PHIL = ARCUS (1.0 / SWR (PASCATCH) + PASCATCH) +	00029880
$CPH = \{1.07 \text{ SQR}\} \{PXREL * PXREL * PTREL * PTREL * 1.073$	00029270	_ 1	PYSCAT(1) + PYSCAT(1) + 1.0)	00029870
IF (SISC) GOID 3000	00029280	С		00029880
SILBOU = EPO / E = ALOG (BETHEV = E) = A4	00029290		IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1	00029890
SCRIT = $4.0 \times \text{THV2}$	00029300	с		00029900
INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5)	00029310	С		00029910
	00029 320	2200	CONTINUE	00029920
	00029330	с		00029930
SCATTERING BY THE WEAK V - RCWS	00029340	С		00029940
#=====================================	000293 50	С		00029950
	00029360	-	SILBCU = EPO / E + ALOG (BETHES + E) + A4	00029960
	00029370		SCRIT = 4.0 = THSI	00029970
DO 2200 I = 1.4	00029380		INTE = IFIX ((ELIM - FKFS + E) / RESOLE + 1.5)	00029980
	00029390	C		00029990
DPLC = DPLCM	00029400	č	SCATTERING BY THE SI - ROWS	00030000
$TE (PUNE(IEQ) = GT_{e} PRDP) DPLC = 0.0$	00029410	č		00030010
$\alpha = \alpha =$	00029420	č		00030020
UNI - X - UFLC + FUELCLIEW/	00027720	L		00000020

с с с с с с с с с с с с

с с с

000000000

C C

с с

С

.

0 0.0000000 SUM1 = SUM	c		00030030		DD 2200 I - 1 4	00030430
c 000000000000000000000000000000000000	•		00030030		00.2200.1 - 100	00030630
OPCC = DPCC 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = PREC + SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = PREC + SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = PREC + SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = PREC + SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = PREC + SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 000000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1) 00000000 PREC = SUGS = FYECT(1) 00000000 SUGS = SUGS = FYECT(1)	r		00030040		SUND - SUND + OVECATION	00030640
iii fundifile consistent consistent consistent consistent consistent xx = x = Polk = PPA(LEB) - Xx(x110) consistent	e.	רוסיר ב הפורא	00030050		SUM2 = SUM2 + PASCAT(1)	00030650
is * x = 0xC * DPD:(TIEG) * XSCATS(1) 00000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 00000000 0000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000 00000000		IF (PUNIE(TED) GT, PROP) DP(-0.0	00030080	220	50m5 - 50m5 + FISCAT(1) 0 CONTINUE	00030680
NX = X = TWUST (LALUSS) = OPLC = DPLC = POPLC(IEC) 000000000000000000000000000000000000		$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	00030370	r 220	CUNTINUE	00030670
Transs Transs Constraint		3A - A = 0FLO + FUFL((1ew) - ASCAIS(1))	00030080	L		00030880
TEO = TEO + 1.0 CONDUCT		$D_A = A = 1000311100033 = 0000 + 000011000$	00030090		PAREL = PAREL + SUM2	00030890
OPEC = OPEC = OPEC =<			00030100		PTKEL = PTKEL + SUM3	00030700
Dif Pupulifilion Constrain Constrain <thconstrain< th=""></thconstrain<>			00030110		DELE = SUMI + SILPL / LPH	00030710
St VV - DRC - NUMBER (LANSE) - DPLC + ROPLCHEQ) 00000110 V + X + A + PMEL 00000110 0000010 D = Y + Y + A + PMEL 0000010 0000000 0000000 0000000 IGAUSS + IGAUSS + 1 0000010 00000000 0000000 00000000		$\frac{1}{16} \frac{1}{16} \frac$	00030120		t = t - Utlt	00030720
b * * * - Trives rights 0000100 0000100 0000100 0000000 160 * 160 * 160 * 1 0000000 0		$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	00030130		X = X + A4 = PAKEL	
UP = 1 = 100 + 11 0000100 RETURN 00000100 I = 00 + 11 00000100 RETURN 00000100 S = SORT (100 + x5CAT3(11) + 10 + x5CAT3(11)) 00000100 0000000 0000000 I = 100 + 11 - x1000 000 2241 00000000 0000000 0000000 0000000 I = 100 + 10 + 100 - 100 - 2241 00000000 0000000 0000000 0000000 I = 100 + 101 + 208 + 1025 00000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 0000000 000000000 000000000 00000000		ST = T = DPLC + PDPL([IEW] = TS(A(3)[1])	00030140	-	Y = Y + A4 = PTREL	00030740
TEODS TO I = 1 CONSTRUCT CONSTRUCT <thconstruct< th=""></thconstruct<>		DT = T = TAVBSTITGAUSST = DPLC * PDPLCTTECT	00030150	C		00030750
Size state RETURN D0033/10 RETURN D0033/10 1 007562731111407-552473111)1 0033200 C 0033200 1 1075627311110 0003200 C 0033200 1 1107562711110 0003200 C 0033200 1 110756271110 0003200 C 0033200 1 1107562711110 0003200 C 0033200 1 110757271110 00032200 C 0033200 1 110757271110 00032200 C 0033200 1 110757471100 00032200 C 0033200 1 110757471000 0005200 C 00032000 1 110757471000 0005200 C 00032000 1 1111710000 0005200 C 00032000 C 1 00032000 C 00032000 C 00032000 1 1111111100000000000000000000000000000		IGAUSS = IGAUSS + I	00030160	C		00030760
s * SUM 004-XLA*31111*(04-XLA*3111)* 00330180 C 00330180 C 1 F 1002070 00030210 C 00030210 C 00030210 1 F 1002070 00030210 C C 00030210 C C C </td <td></td> <td></td> <td>00030170</td> <td></td> <td>RETURN</td> <td>00330770</td>			00030170		RETURN	00330770
1 F 1000000000000000000000000000000000000		S = SURI ((UX-XSCAI3(I)) + (UX-XSCAI3(I)) +	00030180	C		00030780
IF 100714 00030200 C 00030200 C IF 130 5001 5571 00030210 C 00030210 C IF 138 -57.55411 00030210 C 00030210 C 00030210 PR01 -10.7/F1 VID VID 00030220 C 00030220 C 00030200 PR01 -10.7/F1 VID VID 00030220 C 00030200 C C 00030300 C C 00030300 C C C C C C C C C		$1 \qquad (DY-YSCAT3(1)) = (DY-YSCAT3(1)) $	00030190	C		00030790
if if individue 1201 wild 2261 0033210 C 0033210 C if is is if is			00030200	C		00030800
SP = JUNIT. 128* 33 4 007 00030220 C SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 0003020 PR0L = PR0L * 100 / FUT U28 * U251 0003020 C SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 0003020 PR0L = PR0L * EXP (- 58 * 58 / U28 * U25) 0003020 C SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 00030250 C 0003020 C SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 00030250 C SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 0003020 C 0003020 PZ = PR0L * SLATTERING BY CHE ATOM PER PLANE 0003020 C 0003020 C Z261 SREL = PR1K * SGMS * 0PEGA / LE * E1 0003020 GAUSS = 10000000000000000000000000000000000		IF (INTE .GI. 150) GUIU 2261	00030210	C		00033810
IF 16 0.003020 C SALTENING BY CINE ALON PP PLANE 00030640 PREL 0.0030640 0.003020 C SALTENING BY CINE PP PLANE 00030640 CALL SIGN (125 + W25) / (U25 + U25)) 0003020 C 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030200 00030300 00030200 00030300 00		SR = SR(1)(2X + 2X + 2A)	00030220	C		00030820
PMRL = 1.0, / P1 * U25 * U25) C0030240 C C 00030450 PMRL = 1.0, / P1 * U25 * U25) C0030250 C C 00030450 PX = P3RL * 52M * C = 50 * SB / (U25 * U25) C0030250 C C 00030450 PX = P3RL * 52M * OPEGA / XR + PKEL) C0030250 C C 00030450 PX = P7 * 0 / NUM C 00030200 IF (X + LT - 0.0) GOTO 3010 00030300 DSIINTE: IDEPTHI > BSIINTE: IDEPTHI > PZ C0030300 DX = X - TNWV21IGAUSSI 00030400 C C C CO030300 DX = X - TNWV11IGAUSSI 00030400 C C C CO030300 DX = X - TNWV11IGAUSSI 00030300 C IF ISREL .0.1 - 0.005 RETURN 4 CO030300 C C C STMETA = THESI * TA(ISREL) / E CO030300 I (DV = YCAT3131) * (DV = XSCAT3131) + (IF (SB .GT. SCRIT) GDTO 2261	00030230	C	SCATTERING BY ONE ATOM PER PLANE	00030830
PR8L = PR4L * EXP (- S8 * S8 / LQ2S + U2S) 00030260 C 00030260 C CALL SIGMA ISI-PR5LSGMC, PYRELPYREL 00030270 3000 CDNTINUE 00030200 C PR = SGMS 0 DEGA / LE * E) 00030200 DF (X + T. 0.0) GOTO 3010 00030200 DSI INTE, IOEPTHI = BSIINTE, IOEPTHI + PZ 00030200 DX * X - THVBX2(IGAUSS) 00030300 2261 SREL = S / ATESI 00030300 DX * X - THVBX2(IGAUSS) 00030300 C 00030300 DY * Y - THVBX(IGAUSS) 00030390 C 00030300 DY * Y - THVBX(IGAUSS) 00030390 C 00030300 DS = SGMI(IDX-SGL73(3))+(DX-SGL73(3))+ 00030490 SINETE = FFLX (200.0 + SREL) 00030300 L = Y + T + THVSL (IGAUSS) 00030490 SINETE = FFLX (200.0 + SREL) 00030300 L = Y + T + THVSL (IGAUSS) 00030490 DEL IN SILSUENCH > TALISTEL Y 00030300 L = Y + T + THVSL + TALISTEL Y 00030490 DEL IN SILSUENCH > TALISTEL Y 00030300 L = Y + T + THVSL + SLAUX / CMI / SLAUX / SLAUX / CMI /		PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)	000302 40	С		00030840
CALL SIGMS 1251 FPST, SOMS, PWEEL, YWEEL) 00030200 C 00030200 0000 CONTINUE 00030200 0000 CONTINUE 351 INTE, IOEPTHI = BSI INTE, IOEPTHI + PZ 00030200 IF (Y, ILT, 0.0) GOTO 3020 00030200 2261 SREL = J (A IFST 00030200 IF (Y, ILT, 0.0) GOTO 3020 00030300 C 00030200 DY = THV851 (GAUSS) 00030300 C 00030200 DY = Y - HV8021 (GAUSS) 00030300 C 0003020 DY = Y - HV8021 (GAUSS) 00030300 C 0003020 DY = Y - HV8021 (GAUSS) 00030300 C 0003020 DY = Y - HV8021 (GAUSS) 00030300 C 0003020 DY = Y - HV8021 (GAUSS) 00030300 DEL IFIX (GAUSS + SEL) 00030300 IE0 = I 00030300 0003020 STHETA = THESI * TALISELI / E 00030300 ICAUSS + ICAUSS + I 00030300 C 00030400 IGAUSS + ICAUSS + I 00030300 C 00030400 ICAUSS + ICAUSS + I 00030300 C 00030400 IE0 + I 00030400 IE0 + I 00030400 C 00010200 S2 = SORT (ICAUSS		PR6L = PR6L * EXP (- S8 * S8 / (U2S * U2S))	000302 50	С		00030850
P2 = PRAL * SOAS * OMEGA / LE * E) 00030220 3000 CONTINUE 0003020 0003020 LT * 0.01 GOTO 3010 0030800 2261 SRL = 5 / AFSI 0003020 LF (1, 1, 1, 0, 0) GOTO 3020 00030900 00030900 C IF (SRL , LT - 0.005) RETURN 4 00030300 DV = Y - THV9VI (IGAUSS) 00030900 C IF (SRL , LT - 0.005) RETURN 4 00030300 DV = Y - THV9VI (IGAUSS) 00030900 C IF (SRL , LT - 0.005) RETURN 4 00030300 DV = Y - THV9VI (IGAUSS) 00030900 C STMETA : THESI (200.0 + SREL) 00030300 SI = SOAT((DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))*(D		CALL SIGMA (ZSI+FMSI+SGMS+PXREL+PYREL)	000302 60	С		00030860
P2 = P2 + P2 + P2 + P / NUM 00030280 IF (Y .LT. 0.0 GOTO 3010 00030800 2261 SRE1 = S / ATESI 00030300 F (Y .LT. 0.0 GOTO 3020 00030800 2261 SRE1 = S / ATESI 00030300 F (Y .LT. 0.0 GOTO 3020 00030800 C F (SEL .LT. 0.05) RETURN 4 00030300 00030300 00030300 00030300 C IF (SEL .LT. 0.05) RETURN 4 00030300 00030300 160/SS = 160/SS + 1 0003090 C ISREL = IFIX (200.0 + SREL) 00030300 160/SS = 160/SS + 1 0003090 S SHET = TAT(SREL / E 00030300 10/SS = 160/SS + 1 0003090 OE (111 = SILBOU + SILSI(ISREL) 00030300 10 × SCAT3(3))*(Dx + SCAT3(3)) 00030390 C 0003090 DY + Y = THV851(IGAUSS) 00030390 0003090 C 0003090 DY + Y = THV851(IGAUSS) 00030300 00030400 00030400 C 0003090 DY + Y = THV851(IGAUSS) 00030300 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 00030400 000030400 00030400 0000304		PZ = PRBL * SGMS * DMEGA / (E * E)	00030270	300	O CONTINUE	00030870
BS[INTE_IDEPTH] = BS(INTE_IDEPTH] + PZ 00030200 IF (Y .LT. 0.0105020 00030300 2261 SREL _LT. 0.005) RETURN 4 00030300 DX * T-WBV2(IGAUSS) 00030300 C IF (SREL _LT. 0.005) RETURN 4 00030300 DX * T-WBV2(IGAUSS) 00030300 C IF (SREL _GT. 20.01 GOTO 2260 00030300 IGAUSS * IGAUSS + 1 00030300 C SELEN 00030300 IGAUSS * IGAUSS + 1 00030300 SHEITA = THESI (JOO.0 + SEEL) 00030300 IGAUSS * IGAUSS + 1 00030300 DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL) / E 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030400 DOT 2270 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030400 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030400 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030100 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003100 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000		PZ ≠ PZ ≠ Q / NUM	00030280		IF (X .LT. 0.0) GOTO 3010	03030880
2221 SRE! = 5 / ATFS1 00030300 0X = X = THYBY2(IGAUSS) 00030301 C IF (SREL_LT, 0.005) RETURN 4 00030300 10X = X = THYBY2(IGAUSS) 00030300 C IF (SREL_LT, 0.005) RETURN 4 00030300 10X = Y = THYBY1(IGAUSS) 00030300 C IF (SREL_LT, 0.005) RETURN 4 00030300 10X = Y = THYBY1(IGAUSS) 00030300 C ISREL = IFIX (200.0 + SREL) 00030300 ISRET = THYS(IY) 00030300 SHETA = THESI TA (ISREL) / E 00030300 ISRET = THYS(IX) 00030300 GOTO 2270 00030300 ISRET = THYS(IX) 00030300 C 00030300 ISRET = THYS(IX) 00030300 C 00030300 ISRET = THYS(IX) 00030300 GOTO 2270 00030300 ISRET = THYS(IX) 00030300 C 00030400 ICAUSS = ICAUSS + 1 00030300 Del(I) = 0.0 00030400 IEGO = IEO + 1 00031400 C 00030400 IEGO = IEO + 1 00031400 00031400 C 00030400 IEGO = IEO + 1 00031400		BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ	00030 290		IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3020	00030890
C 00030310 (CAUSS = IGAUSS + 1) 00030302 IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4 00030320 Dr = Y - THWBV1(IGAUSS) 00030302 IF (SREL .GT. 20.0) # SREL) 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 000303040 ISREL = IFIX (20.0 # SREL) / E 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 000303040 STHETA = THESI * TAI(ISREL / E 00030300 DX = X - THWBV1(IGAUSS) 00030309 DEL 11 # SILBOU * SILSI(ISREL) 00030300 DX = X - IGAUSS + 1 00030309 DEL 12 # SILBOU * SILSI(ISREL) 00030300 DX = X - IGAUSS + 1 00030309 C 00030300 DY = Y - THWSI(IGAUSS) 00030309 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030309 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030400 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003100 DEL [1] = 0.0 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003100 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400	2261	SREL ≠ S / ATFSI	00030 300		DX = X - THVBV2(IGAUSS)	00030900
IF ISREL.LT. 0.0051 RETURN 4 00030320 DY = Y - THYBVII(IGAUSS) 00030390 C 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030390 STHETA = THESI * TALISREL) / E 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030390 DDE[I] = SILBOU * SILSI(ISREL) 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030390 GOTO 2270 00030300 DX = X - THYBSII(GAUSS) 00030300 C 00030300 DX = X - THYBSII(GAUSS) 00030300 C 00030300 DX = X - THYBSII(GAUSS) 00030300 GOTO 2270 00030300 DX = X - THYBSII(GAUSS) 00030300 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030300 DEL(1) = 0.0 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 DEL(1) = 0.0 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031000 C 00030400 IS2 = ZISI / ZW SCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) 00031000 C 00030400 IS2 = ZISI / ZW SCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) 00031000 C 00030400 IAT = 5 00031000 00031000 SZE = ZISI / ZW S	С		0003031 0		IGAUSS = IGAUSS + 1	00030910
IF (SREL .GT - 20.0) GOTO 2240 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030930 C 00030300 IE0 = IE0 + 1 00030930 STHETA = THESIX + TA(ISREL) / E 00030360 IE0 = IE0 + 1 00030930 OEL [1] = SLLBOU + SILSI(ISREL) 00030360 IOY - YCAT3(3)) + (DX - YCAT3(3)) 00030970 OC 2270 00030300 DX = X - THV8SI(IGAUSS) 00030970 C 00030300 DY = Y - THV8SI(IGAUSS) 00030970 C 00030300 DY = Y - THV8SI(IGAUSS) 00030970 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030970 DEL (1) = 0.0 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030970 DEL (1) = 0.0 00030400 ICAUSS = IGAUSS + 1 00030100 C 00030420 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5)) + (DX-XSCAT3(5)) + 00031070 C 00030440 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5)) + (DX-XSCAT3(5)) + 00031070 C 00030440 IAT = 5 00031040 IAT = 5 C 00030440 IAT = 5 00031070 00031070 IGAUSS = IFAUSS + 1 00030400 IAT = 3 00031070 00031070		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4	00030 320		DY = Y - THVBV1(IGAUSS)	00030920
C 00630340 IE0 = IE0 + 1 00030940 STHETA = THESI * TALISREL) / E 00030350 SI = SRFI(10X-XSCAT3(3))*(0X-XSCAT3(3)) 00030950 GOTO 2270 00030360 I (0Y-YSCAT3(3))*(0Y-YSCAT3(3)) 00030970 GOTO 2270 00030300 IGAUSS + I 00030970 C 00030940 IGAUSS + I 00030970 C 00030400 IGAUSS + I 0003100 C 00030400 IE0 + I 00030400 C 00030400 IE0 + I 0003100 C 00030450 S2 = SRT(ICX-SCAT3(5))*(DX-SCAT3(5)) 0003100 C 00030450 S2 = SRT(ICX-SCAT3(5))*(DX-SCAT3(5)) 00031070 C 00030450 S2 = SRT(ICX-SCAT3(5))*(DX-SCAT3(5)) 0003100 C 00030450 IE0 + I IX + S2 00031070 <td></td> <td>IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2260</td> <td>00030330</td> <td></td> <td>IGAUSS = IGAUSS + 1</td> <td>00030930</td>		IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2260	000303 30		IGAUSS = IGAUSS + 1	00030930
ISREL = IFIX (200.0 * SREL) 00030350 S1 = SQRTI(DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3)) * 00303660 DEL (1) = SILBOU * SILSI(ISREL) 00030360 I (DY-YSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3)) 00303660 GOTO 2270 00030360 DX = X - THV8SI(IGAUSS) 00030360 0X = X - THV8SI(IGAUSS) 00030660 C 00030400 IE4AUSS = IGAUSS + 1 00031600 00030400 0X = X - THV8SI(IGAUSS) 00031600 C 00030400 IE0A = 1E0 + 1 00030400 00030400 0X = X - THV8SI(IGAUSS) 00031020 C 00030400 IE0 = 1E0 + 1 00030400 00030400 00030400 00031020 C 00030400 S2 = SORT(IDX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) 00031030 00031030 C 00030400 S2 = ZSI / ZV * S2 00031040 00031040 SZ = ZSI / ZV * S2 00030400 IF = 5 00031040 00031040 SZ = SORT (ILSCAT * (DEL(1) + SILVAL / CPH) / E) 00030400 IAT = 5 00031040 0031040 SZ = SORT (ELSCAT * IOP - YSCAT3(1)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030400 IAT = 5 00031040 00031040 0031040 0031040 0031040 0031040	C		00030340		IEO = IEO + 1	00030940
STHETA = THESI * TA(ISREL) / E 00030360 1 (DY-YSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3))) 00030960 GOTO 2270 00030300 DX = X = THVBS(I(GAUSS) 00030970 GOTO 2270 00030300 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030970 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00030970 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00030970 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00031070 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00031070 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00031070 DEL (I) = 0.0 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00031070 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS) 00031070 C 00030970 DY = THVBS(I(GAUSS)) 00031070 C 00030970 I (DY = YSCAT3(3)) 00031030 C 00030970 IX = THVBS(I(FAUSS) 00031070 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 (DEL (I) + SILVAL / CPH) / E) 00030470 IF (IS 1.0T. S22) GOTC 3030 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 (DOT - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) + SCA 00030470 IAT = 5 00031070<		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00030350		S1 = SQRT((DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3)) +	00030950
DEL(1) = SIL80U * SILSI(ISREL) 00030370 DX = X = THVBSI(IGAUSS) 00030390 0030390 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030390 00030400		STHETA = THESI * TA(ISREL) / E	00030360		1 (DY-YSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3)))	00030960
GOTO 2270 00030380 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030390 00 y = y - THV851(IGAUSS) 00031090 C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031010 2260 STHETA = 0.0 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031020 DEL(1) = 0.0 00030420 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))+(DX-XSCAT3(5))+(DX-XSCAT3(5))+ 00031020 C 00030400 IC2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))+(DX-YSCAT3(5))+(DX-YSCAT3(5))+ 00031030 C 00030400 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))+(DX-YSCAT3(5))+ 00031030 C 00030400 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))+(DX-YSCAT3(5))+ 00031030 C 00030400 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))+(DX-YSCAT3(5))+ 00031030 C 00030400 IAT = 5 00031040 SCA = SQRT (ELSCAT + (DEL(1) + SILVAL / CPH) / E) 00030400 GOTO 3040 GOTO 3040 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031060 IAT = 5 00031060 00031060 PXSCAT(I) = STHETA + (DY - YSCAT3(1)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030400 GOTO 3040 00031000 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00030500 C 00030500 C C 00030500 IF (PHIL .GT. PHILIM) RE		DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)	00030 370		DX = X - THVBSI(IGAUSS)	00030970
C 0030390 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00030900 2260 STHETA = 0.0 0030400 IEG0 = IE0 + 1 0003100 DEL(I) = 0.0 00030400 IEG0 = IE0 + 1 0003100 002 00030400 IEG0 = IE0 + 1 0003100 00030400 S2 = SGRT(IDX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5))) 00031040 C 00030440 S2 = ZSI / ZV * S2 00031040 C 00030450 C 00031040 SCA = SGRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030450 C 00031040 PYSCATII) = STHETA * (DX - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030460 IAT = 5 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 000 - YSCAT3(I) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOT 03040 00031040 PYSCATII) = STHETA * (DY - YSCAT3(I) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOT 03040 0003100 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 GOT 03040 GOT 03040 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031070 00031100 PYSCAT(I) = PYSCAT(I) + PXSCAT(I) + 0.003500 C 00031100 00031100 I = PYSCAT(I) + PYSCAT(I) + 0.0031150		GDTO 2270	00030380		IGAUSS = IGAUSS + 1	00030980
C 00030400 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031010 2260 STHETA = 0.0 00030420 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) + 00031020 C 00030420 S2 = SQRT(IDX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) + 00031020 C 00030420 S2 = ZSI / ZV * S2 00031020 C 00030440 S22 = ZSI / ZV * S2 00031020 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030440 S22 = ZSI / ZV * S2 00031020 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030470 IF (S1.GT. S22) GOTC 3030 00031020 VSCAT(I) = STHETA * (DV - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030470 IF (S1.GT. S22) GOTC 3030 00031020 MCISS = IGAUSS + 1 00030490 GOTO 3040 GOTO 3040 00031020 VSCAT(I) = STHETA * (DV - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOTO 3040 0003100 VPSCAT(I) = STHETA * (DV - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOTO 3040 00031020 I (DV - YSCAT3(I) + PXSCAT(I) + 00030500 C 00030500 000 0003120 C 00030500 I = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031120 00031120 00031120 <	С		00030390		DY = Y - THVBSI(IGAUSS)	00030990
2260 STHETA = 0.0 00030420 IE0 = 1E0 + 1 00031020 DEL(1) = 0.0 00030420 S2 = SQRT(IDX=XSCAT3(5))*(DX=XSCAT3(5))+ 00031030 C 00030420 S2 = ZSI / ZV * S2 00031040 2270 CONTINUE 00030420 S2 = ZSI / ZV * S2 00031040 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(1) + SILVAL / CPH) / E) 00030460 IAT = 5 00031070 PXSCAT(1) = STHETA * (OX - XSCAT3(1)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030460 IAT = 3 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 (DY - YSCAT3(I) + YSCAT(I) * DY SCAT(I) * SCA 00030460 IAT = 3 00031070 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030500 C 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031020 00031020 PYSCAT(I) * STHETA * (DY - YSCAT(I) * PXSCAT(I) * DXSCAT(I) * DXSCAT(С		00030400		IGAUSS = IGAUSS + 1	00031000
DEL (1) = 0.0 00030420 S2 = SQRT(1(DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5))*(2260	STHETA = 0.0	00030410		IEQ = IEQ + 1	00031010
C 00030430 1 (DV-YSCAT3(5))*(DV-YSCAT3(5))*(DV-YSCAT3(5))) 00031040 2270 CGNTINUE 00030460 S22 = ZSI / ZV * S2 00031040 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(1) + SILVAL / CPH) / E) 00030460 IAT = 5 00031040 PXSCATI(I) = STHETA * (DX - XSCAT3(1)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030460 IAT = 5 00031040 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030460 IAT = 3 00031040 PYSCATI(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030460 IAT = 3 00031080 00030490 GOTO 3040 IAT = 3 00031040 00031080 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031080 00031100 PMIL = ARCOS (1.0 / SORT (PXSCAT(1) * PXSCAT(1) + 00030500 C 00031120 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030500 C 00031120 C 00030500 C 00030500 C 00031140 C 00030500 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 00031120 C 00030500 IEQ = IEQ + 1 00031140 00031140 C 00030500 IEQ = IEQ + 1 00031160 000		$DEL(\mathbf{I}) = 0 \cdot 0$	00030420		S2 = SQRT((DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) +	00031020
C 00030440 522 = ZSI / ZV * 52 00031050 2270 CONTINUE 00030460 IAT = 5 00031050 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030460 IAT = 5 00031050 PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030470 IF (S1.GT. S22) GDTC 3030 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031070 00031070 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GDTO 3040 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031070 00031070 PYSCAT(I) * STHETA * (DY - YSCAT(I) * PXSCAT(I) * 00030500 C 00031070 I PYSCAT(I) * PYSCAT(I) * PXSCAT(I) * 00030500 C 00031100 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) * L.0)) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 0 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031160 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) * L.0)) 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 0 00030550 IE0 = IE0 + 1 00031160 00031160 2250 CONTINUE 00030560 SI = SCRT(ICDX-SSCAT3(4))*(DX-SSCAT3(4))	С		00030430		1 (DY-YSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5)))	00031030
2270 CGNTINUE 00030450 C 00031350 SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030460 IAT = 5 00030670 PXSCAT(I) = STHETA * (DY - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030470 IF (S1.GT.S22) GOTC 3030 00031080 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030480 IAT = 3 00031080 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030500 C 0003100 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031120 PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0) 00030550 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030500 C 00030500 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0) 00030550 IEO = IGAUSS + 1 00031120 C 00030500 OV = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031120 C 00030570 IEO = IEO + 1 00031150 2250 CDNTINUE 00030570 1 (OY-YSCAT3(4))+(OY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030580 DX = X -	С		00030440		S22 = ZSI / ZV * S2	00031040
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E) 00030460 IAT = 5 00031070 PXSCAT[I] = STHETA * (DX - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030470 IF (S1.GT.S22) GDTC 3030 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031070 STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GDTD 3040 00031070 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GDTD 3040 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031070 00031070 PHIL = ARCOS (1.0 / SORT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030500 C 00031070 00031070 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031100 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0) 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031130 C 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031130 C 00030550 IEO = IEO + 1 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 </td <td>2270</td> <td>CONTINUE</td> <td>00030450</td> <td>С</td> <td></td> <td>00031050</td>	2270	CONTINUE	00030450	С		00031050
PXSCATI[] = STHETA * (DX - XSCAT3[1]) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030470 IF (S1.6T.S22) GDTC 3030 00031070 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030480 IAT = 3 00031070 PYSCATI[] = STHETA * (DY - YSCAT3[1]) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030480 GDTO 3040 00031080 PYSCAT[] = STHETA * (DY - YSCAT3[1]) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GDTO 3040 00031070 PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030500 C 00031120 1 PYSCAT(I] * PYSCAT(I) + 1.01) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030530 DY = Y - THYBV2(IGAUSS) 0003140 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030550 IEO = IEO + 1 0003150 0003150 C 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030580 DX = X - THYBXI(IGAUSS)		SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)	000304 60		IAT = 5	00031060
IGAUSS = IGAUSS + 1 00030480 IAT = 3 00031080 PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOTO 3040 GOTO 3040 00031090 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031010 00031100 PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030500 C 0003110 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0) 00030500 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030500 DY = Y - THVBV2(IGAUSS) 00031140 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031140 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031160 C 00030500 IEO = IEO + 1 00031160 C 00030500 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) + 00031160 C 00030500 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031160 C 00030500 DX = X - THVBS1(IGAUSS) 00031160		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00030470		IF (S1 .GT. S22) GOTC 3030	00031070
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNDRM(IGAUSS) * SCA 00030490 GOTO 3040 00031090 IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 00030500 00030500 00030510 00031100 PHIL = ARCOS (I.0 / SORT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 1.0)) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030500 DY = Y - THVBV2(IGAUSS) 00031120 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031120 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031120 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031120 C 00030550 IEO = IEO + 1 00031140 C 00030560 S1 = SORT((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) + 00031170 C 00030570 1 (DY - YSCAT3(4))*(DX - YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030570 1 (DY - YSCAT3(4))*(DY - YSCAT3(4)) + 00031180 C 00030570 1 (DY - YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030570 1 (DY - YSCAT3(4)) + 00031180 C 00030570 1 (DY - YSCAT3(4)) + 00031170 SUM1 = 0.0 0.0 <		IGAUSS = IGAUSS + 1	00030480		IAT = 3	00031080
IGAUSS = IGAUSS + 1 00030500 C 00031100 PHIL = ARCOS (1.0 / SORT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 00030510 3020 DX = X - THVBV2(IGAUSS) 00031100 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.01) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003120 C 00030500 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 00031130 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003140 C 00030550 IE0 = IE0 + 1 00031160 2250 CONTINUE 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) + 00031160 C 00030560 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031170 C 00030570 I (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030580 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031170 C 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030600 IE0 = IE0 + 1 00031200 C 00030620 IE0 = IE0 + 1 00031200		PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00030490		GOTO 3040	00031090
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) + 50030510 3020 DX = X - THVBV2(IGAUSS) 60031120 1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.01) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 60031120 C 00030530 DY = Y - THVBV1(IGAUSS) 60031140 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 60031140 C 00030550 IE0 = IE0 + 1 60031160 2250 CONTINUE 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4)) + (DX-XSCAT3(4)) + 6003170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + (DY-YSCAT3(4)) + 6003170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + (DY-YSCAT3(4)) + 6003170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + (DY-YSCAT3(4)) + 6003170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + 6003170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + 60031180 SUM1 = 0.0 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 60031200 SUM2 = 0.0 0.0 00030600 DY = Y - THV8SI(IGAUSS) 60031220 SUM3 = 0.0 0.0 00030600 IE0 = IE0 + 1 60031220 <td></td> <td>IGAUSS = IGAUSS + 1</td> <td>00030500</td> <td>С</td> <td></td> <td>00031100</td>		IGAUSS = IGAUSS + 1	00030500	С		00031100
1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.01) 00030520 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031120 C 00030530 DY = Y - THVBVI(IGAUSS) 00031130 C 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 0003140 C 00030550 IE0 = IE0 + 1 00031150 2250 CONTINUE 00030560 S1 = SORT((DX-XSCAT3(4)) + (DX-XSCAT3(4)) + 0003160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))+(DY-YSCAT3(4)) + 00031170 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))+(DY-YSCAT3(4)) + 00031180 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + 00031180 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4)) + 00031180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031180 SUM2 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM3 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 C 00030600 IEQ = IEQ + 1 00031200		PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +	00030510	302	0 DX = X - THVBV2(IGAUSS)	00031110
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))	00030520		IGAUSS = IGAUSS + 1	00031120
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2 00030540 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031140 C 00030550 IEO = IEO + 1 00031160 2250 CONTINUE 00030560 S1 = SQRT((1DX-XSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4))* 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4))* 00031170 C 00030580 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 C 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030620 IEQ = IEQ + 1 00031200	С		J003U530		DY = Y - THVBV1(IGAUSS)	00031130
C 00030550 IEO = IEO + 1 00031150 2250 CONTINUE 00030560 S1 = SORT((DX-XSCAT3(4))+(DX-XSCAT3(4))+ 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))+(DY-YSCAT3(4)) 00031170 C 00030580 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031180 SUM1 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM2 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEO = IEO + 1 00031220		IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2	00030540		IGAUSS = IGAUSS + 1	00031140
2250 CONTINUE 00030560 S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) + 00031160 C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4))) 00031170 C 00030580 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031210 SUM3 = 0.0 00030620 IEQ = IEQ + 1 00031220	С		00030550		IEO = IEO + 1	00031150
C 00030570 1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4))) 00031170 C 00030580 DX = X - THV8SI(IGAUSS) 0003180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THV8SI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEQ = IEQ + 1 00031220	2250	CONTINUE	00030560		S1 = SQRT((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) +	00031160
C 00030580 DX = X - THVBSI(IGAUSS) 00031180 SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEQ = IEQ + L 00031220	С		000305 70		1 (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)))	00031170
SUM1 = 0.0 00030590 IGAUSS = IGAUSS + 1 00031200 SUM2 = 0.0 00030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEQ = IEQ + L 00031220	C		00030580		DX = X - THVBSI(IGAUSS)	00031180
SUM2 = 0.0 O0030600 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) 00031200 SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEQ = IEQ + L 00031220		SUM1 = 0.0	00030590		IGAUSS = IGAUSS + 1	00031190
SUM3 = 0.0 00030610 IGAUSS = IGAUSS + L 00031210 C 00030620 IEQ = IEQ + 1 00031220		SUM2 = 0.0	00030600		DY = Y - THVBSI(IGAUSS)	00031200
C 00030620 IEQ = IEQ + 1 00031220		SUM3 = 0.0	00030610		IGAUSS = IGAUSS + L	00031210
	C		00030620		1EQ = 1EQ + 1	00031220

S2 = SQRT((DX-XSCAT3(6))*(DX-XSCAT3(6)) + 1 (DY-YSCAT3(6))*(DY-YSCAT3(6))) S22 = ZSI / ZV '* S2 C٠ IAT = 6 IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030 IAT = 4GOTO 3040 С 3010 CONTINUE IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3050 DX = X - THVBV2(IGAUSS)IGAUSS = IGAUSS + 1DY = Y - THVBV1(IGAUSS)IGAUSS = IGAUSS + 1 IEQ = IEQ + 1S1 = SORT((DX-XSCAT3(1))*(DX-XSCAT3(1)) + 1 (DY-YSCAT3(1))*(DY-YSCAT3(1))) DX = X - THVBSI(IGAUSS)IGAUSS = IGAUSS + 1 $DY = Y - THV8SI{IGAUSS}$ IGAUSS = IGAUSS + 1 IFO = IEO + 1S2 = SQRT((DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) +1 (DY-YSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5))) S22 = ZSI / ZV * S2 С IAT = 5 IF (S1 .GT. S22) GOTC 3030 IAT = 1GOTO 3040 С 3050 DX = X - THVBV2(IGAUSS)IGAUSS = IGAUSS + 1DY = Y - THVBV1(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1IEO = IEO + 1S1 = SQRT((DX-XSCAT3(2))*(DX-XSCAT3(2)) +1 (DY-YSCAT3(2))*(DY-YSCAT3(2))) DX = X - THVBSI(IGAUSS)IGAUSS = IGAUSS + 1 DY = Y - THVBSI(IGAUSS) IGAUSS = IGAUSS + 1IEQ = IEQ + IS2 = SORT((DX-XSCAT3(6))*(DX-XSCAT3(6)) +1 (DY-YSCAT3(6))*(DY-YSCAT3(6))) S22 = ZSI / ZV * S2 C IAT = 6IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030 IAT = 2c С SCATTERING BY A V - ATCM č С 3040 CUNTINUE SILBOU = EPO / E + ALOG (BETHEV + E) + A4 SCRIT = 4.0 * THV2INTE = IFIX ((ELIM - FKEV * E) / RESCLE + 1.5) IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 3100

00031230		IE (INTE .GT. 150) GOTO 3100	00031830
00031240			00031840
00031250		$S_{X} = X = XSCATS(1)$	00031950
00031260		ST = T	00031840
00031270		30 - 3001 (30 + 30 + 31 + 31)	00031870
00031280		$17 135 \bullet 01 \bullet 3CR11 GC10 3100$	00031880
00031280		PRBL = 1.07 (2.00 + P1 + 1072 + 1071)	00031880
00031290		PRDL = PRDL + EXP (- SX + SX / (2.0 + 1HV2 + 1HV2)) +	00031890
00031300		$I = EXP \left[- SY + SY \right] \left[2 \cdot 0 + \left[HVI + HVI \right] \right]$	00031900
00031310		CALL SIGMA (ZV.FMV.SGMV.PXREL,PYREL)	00031410
00031320		PZ = PRBL + SGMV + DMEGA / (E + E)	00031920
00031330		PZ = PZ * Q / NUM	00031930
00031340		BS(INTE+IDEPTH) = BS(INTE+IDEPTH) + PZ	00031940
00031350	3100	SREL = S1 / ATFV	00031950
00031 360	C		00031960
00031370		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3	00031970
00031380		IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 311C	00031980
00031390	C		00631990
00031400	-	ISREI = IFIX (200.0 + SREI)	00032000
00031410		STHETA = THEV * TA(ISREL) / F	00032010
00031420			00032020
00031430			00032020
00031440	~	6010 5120	00032030
00031453	L C		00032040
00031450	L		00032050
00031460	3110	STHETA = 0.0	00032060
00031470		DELE = 0.0	00032075
00031480	С		00032080
00031490	C		00032090
00031500	3120	CONTINUE	00032100
00031510		SCA = SQRT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E)	00032110
00031520		PX = STHETA + (DX - XSCAT3(IAT)) / S1 + PNORM(IGAUSS) + SCA	00032120
00031530		$IGAUSS \neq IGAUSS + 1$	00032130
00031540		PY = STHETA * (DY - YSCAT3(IAT)) / S1 + PNCRM(IGAUSS) * SCA	00032140
00031550		IGAUSS = IGAUSS + 1	00032150
00031560		PHII = APCIIS (1.0) / SOPT (PX + PX + PY + 1.0))	00032160
00031570	c		00032170
00031580	C.	TE (DUTI OF DUTITN) SETURN 1	00032180
00031500	~	IF (FRIC .OF. FRICIP) REFORM I	00032190
00031390	L	COTO 22/0	000002200
00031600	-	6010 3300	00032200
00031610	C .		00032210
00031620	C	SCATTERING BY A SI - AILM	00032220
00031630	C		00032230
00031640	С		00032240
00031650	3C30	CONTINUE	00032250
00031660		SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHES * E) * A4	00032260
000316 70		SCRIT = $4_{\bullet}0 + THSI$	00032270
00031680		INTE = IFIX ((ELIM - FKFS * E) / RESCLE + 1.5)	00032280
00031690		(F (IDEPTH .GT. 150) GOTO 3200	00032290
00031700		IF (INTE .GT. 150) GCTC 3200	00032300
00031710		SX = X - XSCAT3(IAT)	00032310
00031720		SY = Y - YSCAT3(IAT)	00032320
00031730		SB = SORT (SX + SX + SY + SY)	00032330
00031740		SB = SORT (SX + SX + SY + SY)	00032340
00031750		PRAI = 1.0 / (PI + U2S)	00032350
00031760		1000 = 1007 (71 + 020 + 0207 0001 = 1007 (71 + 020 + 0207	00032360
00031770		CALL STONA (7CT.ENCT.CONC.DYDEL.DYDEL)	00032370
00031700		LALL SLUMA (LSI)FMSI)SUMSUFARELOFIKEL)	00032390
00031780		PL = PRDL + 3683 + UPE6A / (C + C)	0.0032300
00021/80		$P_{\ell} = P_{\ell} + U / NUH$	00032690
00031800		HSLINIE+IDEPIH) = BSLINIE+IUEPTH) + PZ	00032400
00031810	3200	SREL = S2 / ATESI	00032410
000318 20	С		00032420

```
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4
                                                                       00032430
      IF (SREL .GT. 20.0) GOTC 3210
                                                                       00032440
С
                                                                       00032450
      ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
                                                                       00032460
      STHETA = THESI * TA(ISREL) / E
                                                                       00032470
      DELE = SILBOU * SILSI(ISREL)
                                                                       00032480
      GCTO 3220
                                                                       00632490
С
                                                                       00032500
С
                                                                       00032510
 3210 STHETA = 0.0
                                                                       00032520
     DELE = 0.0
                                                                       00032530
С
                                                                       00032540
С
                                                                       00032550
 3220 CONTINUE
                                                                       00032560
      SCA = SORT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E)
                                                                       00032570
      PX = STHETA * (DX - XSCAT3(IAT)) / S2 + PNORM(IGAUSS) * SCA
                                                                       00032580
      IGAUSS = IGAUSS + 1
                                                                       00032590
      PY = STHETA * (DY - YSCAT3(IAT)) / S2 + PNCRM(IGAUSS) * SCA
                                                                       00032600
      IGAUSS = IGAUSS + 1
                                                                       00032610
      PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX + PX + PY + PY + 1.0))
                                                                       00032620
C
                                                                       00032630
      IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2
                                                                       00032640
С
                                                                       00032650
 3300 PXREL = PXREL + PX
                                                                       00032660
      PYREL = PYREL + PY
                                                                       00032670
      E = E - DFLE - SILPL / CPH
                                                                       00032680
     X = X + A4 * PXREL
                                                                       JJ032690
      Y = Y + A4 * PYREL
                                                                       00032700
                                                                       00032710
С
Ĉ
                                                                       00032720
      RETURN
                                                                       00032730
C.
                                                                       00032740
      END
                                                                       00032750
```

÷

			DY = Y = THVAST(TCAUSEL - DRUC + DDRUC(TEC))	
SUBROUTINE SCAT21 (X.Y.PXREL.PYREL.E.IGAUSS.IEG.IDEPTH.#.#)	00032760		CAUSS = ICAUSS + 1	00033350
	00032770		IEQ = IEQ + 1	000333370
======== '	00032780		S = SQRT((DX-XSCT2)(1))*(DX-XSCT2)(1)) +	00033380
S C A T 2 L	00032790		$1 \qquad (DY - YSCT2)(1) + (DY - YSCT2)(1))$	00033390
	00032800		IF (IDEPTH -GT. 150) GOTO 2221	00033400
	00032810			00033410
SCATTERING PROCESS IN THE FIRST MONOLAYER.	00032820			00033410
	00032830			60033420
	00032860		$DRI = 1 \land / (DT + U2) \land$	00033430
	00032850		$r_{\rm NDL} = 100 / 4r1 + 023 + 023 / (026 + 026))$	00033440
DIMENSION TALAGOOD STLV(4000) STLS(4000)	00032850		PRDL = PRDL + EAP (- 30 + 30 / (023 + 023))	00033450
DIMENSION PROPRIADOR	00032880		DALL SIGMA (251)FMS1;SGMS(FXREL)FYREL)	00033460
	00032870		PZ = PRBL + SGHS + UPEGA / (E + E)	00033470
DIMENSION THYBYILIZOUD, THYBYZLIZOUD	00032880		PZ = PZ + D / NUM	00033480
DIMENSION INVESTIGATION	00032890		BS[INTE, IDEPTH] = BS[INTE, IDEPTH] + PZ	00033490
DIMENSION POPLE(2200), PONIF(2200)	00032900	2221	SKEL = S / AIFSI	00633500
DIMENSION PXSCAT(6)	00032910	C		00033510
DIMENSION PYSCAT(6)	00032920		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00033520
DIMENSION DEL(6)	00032 930		IF (SREL .GT. 20.0) GCTC 2220	00033530
DIMENSION BS(150,150)	00032940	с		00033540
	U0032950		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00033550
	00032960		STHETA = THESI * TA(ISREL) / E	00033560
REAL*8 PZ	000329 70		DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)	00033570
LOGICAL ROTAT	00032980		GOTO 2230	00033580
LOGICAL SISC	00032990	С		00033590
	00033000	2220	STHETA = 0.0	00033600
	00033010		$DEL(\mathbf{I}) = 0 \cdot 0$	00033610
COMMON / EVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI. THVEV2. THVESI. ST	15000033020	C		00033620
COMMON / GVAL/ PL. ATEV. ATESI. A. AZ. A4. RHCAT. PSIINY. PSIINY	. 00033030	2230	CONTINUE	00033630
7 PAPT, 7V, 7ST, THEY, THEST, ELSCAT, HCSO, VEENIL	00033040		SCA = SORT (FISCAT * (DEI(T) + STAVAL / (PH) / E)	000033660
	00033050		PXS(AT(1) = STHETA * (DX + XS(T2)(1)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00033650
COMMON /SCADI VSCTDIEL, VSCTDIEL, VSCTDIEL	00033040			00033440
COMMON / SCALI / ASCILICITY ISCILLOF	0.0033070		$DVSCTTTT = STUETA \pm (DV = VSCT2)(T1) / S \pm DNOPN(TCANSS) \pm CCA$	000000000
COMMON /IESI/ PHILIMS INVIS INVIS INSIS EUS DAS RESULTS RESULTS	V4500033070		r_{A}	00033690
I FREV, FRES, SREL, FRIZ, FRIZ, ELIM, UZV, UZS, IM	000033080		10A035 - 10A035 + 1 $BUT = ABCRC (1) A (CART (BYCCAT(1)) + BYCCAT(1))$	00033000
CUMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, URIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PRUP	, 00033090		PHIL = AKCUS (1.07 SURT (PASCAT(1) + PASCAT(1) + PAS	00033690
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVAL2	, 00033100	~	$I \qquad PTSLAT(I) \neq PTSLAT(I) + I = 011$	00033700
Z COSPHI, SINPHI, FLL, FNL, RCTAT	00033110	ι		00033710
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES	00033120	•	IF (PHIC .GI. PHILIM) RETURN I	00033720
	00033130	C		00633730
	00033140	C		00033740
	00033150	2200	CONTINUE	00033750
VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)	00033160	С		00033760
SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * ASQ8	00033170	С		00033770
SILVAL = EPO / F * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * ASQ8	00033180		SUM1 = 0.0	00033780
CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00033190		SUM2 = 0.0	00033790
SILBOU = EPO / E + ALOG (BETHES + E) + ASOB	00033200		SUM3 = 0.0	00033800
SCRIT = 4_0 + THSI	00033210	с		00033810
TATE = TETY ([E] M = EKES * E) / RESOLE + 1.5)	00033220		DD 2280 I = 1.5	00033820
	00033230		SUM = SUM + DEL(T)	00033830
	00033240		SIIM2 = SIIM2 + PXSCAT(T)	00033840
SCATTEDING BY SI - BOLS	00033250		SOM2 = SOM2 + DYS(AT(1))	00033850
	00033260	2280		00033860
	00033280	~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~	CONTINUE	00033870
	00033270	C		00033000
	00033280		FAREL - FAREL F SUME DVDCI - DVDCI - CIMO	00033880
UU 2200 I = 1+7	00033290		FINEL - FINEL T 3000 DELE - SUNI A STIDI / CDU	00033000
	00033300		UELE = SUMI = SILFL / CPH	00033900
SX = X + DPLC + PDPLC(IEC) - XSCT21(I)	00033310			00033910
DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00033320		A = A + ASUB = PAREL	00033920
IGAUSS = IGAUSS + 1	00033330	_	Y = Y + ASQ8 * PYREL	00033930
SY = Y - DPLC * PDPLC(IEQ) - YSCT21(I)	00633340	C		00033940
		С		00033950
			RETURN	00033960
		С		00033970
			END	00033980

END

112 -

с с

C C

с с с

000000

с

.

SUBROUTINE SCAT22 (X.Y.PXREL.PYREL.E.ICAUSS.IEC.INERTH.A.*)	00033000		DT = T = TRADV2(TGAUSS) = DPLC + PDPLC(TEQ)	00034580
	00033990		1GAUSS = 1GAUSS + 1	00034590
	00034000		150 - 150 - 1 5 - 50PT((0)-956T22(())+(0)-956T22(()) +	00034600
SCAT22	00034020	1	$\frac{1}{10} = \frac{1}{10} \frac{1}{10}$	00034610
	00034020	-		00034620
	00034040			00034660
SCATTERING PROCESS IN THE SEC. MONDIAYER.	00034050		$ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\$	00034640
	00034040		30 - 3001 (38 - 38 - 31 - 31) 15 (50 - 67 (6011) (60 - 32)	00034650
	00034030		$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	00034680
	00034010		TROL = 100 / 1200 = FL = 1843 = 1842 = 1842 = 1842 = 18445 = 18445 = 18445	00034670
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILV(4000)	00034080	1	rrdl - rrdl + car (- 3a + 3a / (2a) + (rr4) + (rr4)) +	00034680
DIMENSION PHORPHIL2000	00034090	1	CALL STONA 174 ST / 12-0 4 1042 4 104211	00034690
DIMENSION THVBVI(12000), THVBV2(12000)	00034110		CALL SIGMA (24)FR430004FAREL;FIREL; D7 - D081 + SCMV + OMECA / / E + El	00034700
DIMENSION THVBSIII20001 (1100212000)	00034110		FL = FROL + SONV + UMEGA / (F + E) $RT = RT + O / RUM$	00034710
	00034120		FL - FL - W / NUM BC(INTE INEGIU) - BC(INTE INEGIU) + 87	00034720
DIMENSION DESCATION	00034150	2221	r_{1} (intering = 0.1 intering + F2	00034730
DIMENSION PASCAT(6)	00034140	c 2221	SREL = 5 / AIFV	00034740
DIMENSION DEL (6)	00034150	L	TE (SPEL LT & OPEL BETURN 2	00034750
DIMENSION BS(150, 150)	00034180		IF ISREL +LI+ U+UUJ/ RETURN 2 TE ISBEL (T 20 A) RETURN 2220	00034780
	00034170	<i>c</i>	IF TSREE .01. 20.07 GUTU 2220	00034770
	00034100	L	15051 - TETY (300 0 + 5051)	00034780
	00034190		ISREL = IFIA (2000) + SREL)	00034190
	00034200		SIDELA = (DEV + TALLSREL) / E	00034800
	00034210	-		00034810
	00034220	~	6010 2230	00034820
	00034230	5.220		00034850
COMMON /WVAL/ TA. STLV. STLSI. DNOM. THVDV1. THVDV2. THVDSI. ST	00034240	2220		00034840
COMMON /WAR/ IA, SILVA SILVA ATEC, A AZ AA DUDAT DETINY DETINY	00034250	c	DEL(1) = 0.0	00034850
TOAM UN TOTALT FIT ALTER ALTER AT AL ALTER ALTER ALTER ALTERATE FOLLOW FOR ALTERATE	00034280	1 220	CONTINUE	00034880
$\frac{1}{2} \qquad \qquad \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j$	00034270	2230	CONTINUE C_{A}	00034870
CONNON (CC122) VCC122)	00034280		SUA = SURI (ELSUA) + (DELLI) + SILVAL / (PT) / E) Dycating = STHETA + (Dy = VSCT32/11) / SI DNOM(ICANSE) + SCA	00034880
COMMON /SCH22/ ASCH22(S), ISCH22(S)	00034290		PASCALLI = SINETA + IDA = ASCIZZIIII / S + PNURMILGAUSSI + SCATCAUSE = TCAUSE + 1	00034890
COMPUN /1631/ PHILIP, THAT, THAT, THST, CU, B34 KESULE, KESULU,	00034300		10A035 = 10A035 + 1 000000000000000000000000000000000000	00034900
COMMON (DVAL) O STORY FRESS SKELS FRIZS FRIZS FRIZS ELIM, UZY, UZS; 184	4500054510		PTSCATCI = SINCTA + (DT - TSCI22(17) / S + PNURMITGAUSS) + SCATCAUSCI = TSCI22(17) / S + PNURMITGAUSS) + SCA	00034910
COMMON / BVAL/ 00 BID INS DANGLES UNIGINS LAEGAS FRIS INCLAS PRUPS	00034320		IGAUSS * IGAUSS + I Duti = Adros + I Sout (Dyscatit) + Dyscatit) +	00034920
COSDUL STROUT - CIT - CIT - CALLY ZVALLY ZVALLY	00034350	,	PHIL = ARCUS (1.60 / SQRI (FASCATTI) + FASCATTI) +	00034950
COMMON (EDST) EDS STOPPIN FLIN FRI RELAN	00034340	· ·	PTSCATTI = PTSCATT = TSCATT	00034950
COMMUN / FF31/ FF0, ZVAL, FLASHU, BEIHEV, EEIFES	00034350	L	TE (OUT) OF DHTETME DETION 1	00034960
	00034380	r	IF (FAIL -GI- FAILIFF RETORN I	00034970
	00034370	č		00034980
VEI = SOPT / 2 A + E / UCSA)	00034380	1 200		00034990
$v \in V + Suri (2 * 0 + E + 0 + C + 0 + A + A + C + P + A + A + A + A + A + A + A + A + A$	00034390	c 2200	CONTINUE	00034990
SILPL - EPU / E - ZVAL - ALUG LPLASHU - EJ - ASUG SILVAL - EDG / E - ZVAL - ALUG LPLASHU - EJ - ASUG	00034400	C C		00035010
SILVAL = CFO / C = ZVAL = ALUG (VEL / VFENIL) = ASUG	00034410	L	STATE - 2.0	00035020
CTI = CI = CO / SWI (TAREL + TAREL + TIREL + TREL + 1.077)	00034420			00035030
S(E) = C + T + A = C + E + A = C + C + C + C + C + A = C + C + C + C + C + C + C + C + C + C	00034450			00035040
SURTI = 400 + 1001 INTE = 1ETV (TELTM = EVEV + E) (DECOLE + 1 E)	00034440	r	30m3 - 0.0	00035050
INTE - IFIA (TELIM - FREV + E) / RESULE + 1.5/	00034450	L	NO 2240 1 - 1.3	00035060
	00034430			00035070
SCATTEDING BY V - DOWS	00034470		SUME - SUME - DELLE	00035080
SCATTERING DI V - NUNS	00034480			00035090
	00034500	2280		00035100
	00034510	r 2200 -		00035110
DC = 2200 I = 1.3	00034520	L.	PYREL = PYREL + SUM2	00035120
00 2200 I - IVJ	00034520		DYREF = DYREF + SIN3	00035130
$SY = Y = DD(C \pm DD(C(TEO) = YSCT22/T)$	00034540		DELE = SINI + STUPI / CPH	00035140
DY = X = The S + Three (CALES) = DDL C + PDDL(()FD)	00034550			00035150
$D_A = A$ (1044) + FROM (10403) = DEC + FORECTER)	00034540		Y = Y + ASOR * PYRFI	00035160
104033 - 104033 T 1 SV - V - ADIC & DADIC(15A) - VSCT22(1)	00034530		$\mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{ASOR} + \mathbf{PVREI}$	00035170
ST = T = DEG = FOREGIEUT = ISGIEFIET	00034340	r	I - I'' HORD''' INCC	00035190
		с с		00035190
		L	DE TIION	00035200
		r		00035210
		L	END	00035220

с С

C C

с с с

с с с с с с с с

С

- 113 -

SUBROUTINE SCAT23 (Y.Y.PYDEL, BYDEL, E. TCAUSS, TEO, TOEDTH, *.*)	00036330		DT = T - (HVBVILIGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEG)	00035820
	00035230		IGAUSS = IGAUSS + I	00035830
	00035240			00035840
S C A T 2 3	00035250		S = SURT((DX - XSC123(1)) + (DX - XSC123(1)) +	00035850
	00035280		1 (UV-YSC123(1))*(DY-YSCT23(1)))	00035860
	00035270		IF (IDEPIH .GT. 150) GDTO 2221	00035870
	00035280		IF (INTE .GT. 150) GCTO 2221	00035880
SCATTERING PROCESS IN THE THIRD FUNULATER.	00035290		SB = SORT (SX * SX + SY * SY)	00035890
	00035300		IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221	00035900
	00035310		PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV2 * THV1)	00635910
	00035320		PRBL = PRBL * EXP (- SX * SX / (2.0 * THV2 * THV2)) *	00035920
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(400C)	00035330		1 EXP (- SY * SY / (2.0 * THV1 * THV1))	06635930
DIMENSION PNORM(12000)	00035340		CALL SIGMA (ZV.FMV,SGMV,PXREL,PYREL)	00035940
D[MENSION THVBV1(12000), THVEV2(12000)	00035350		PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)	00035950
DIMENSION THVBSI(12000)	00035360		PZ = PZ * Q / NUM	00035960
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00035370		BS(INTE.IDEPTH) = BS(INTE.IDEPTH) + P7	00035970
DIMENSION PXSCAT(6)	60035380	2221	SREL = S / ATFV	0000000000
DIMENSION PYSCAT(6)	00035390	c		00035980
DIMENSION DEL(6)	00035400		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00035990
DIMENSION BS(150,150)	00035410		IF (SBEL -GT. 20-0) GOTC 2220	00036000
	00035420	с		00036010
	00035430		$ISREL = IEIX (200_0 + SREL)$	00036020
RFAI*8 P7	00035440		STHETA = THEV + TATTOPIC + C	10036030
	00035450			00036040
	00035460			00036050
	0.0035470	r	6016-2250	00036060
	00035470	້າງງາດ		00036070
COMMON /UVAL/ TA. CTLV. STICT. BECOM. TUVEVI: TUVEVO, TUVEST. CT	00035400	2220		00036080
COMMON /WVAL/ IAV SILVY SILSIY FRENY INVOLY INVOLY INVOLY (FRENY DELINY	00035500	~		00036090
CUMMUN / GVAL/ FIT AIFYT AIFSIT AF AZT AM RUAIT FSIINAF FSIINT	00035500	Č	CONTINUE	00036100
	00035510	2230		00036110
2 ASU ASU2 ASU2 ASU3 ISEL UPLUM, PUPLU, PUNIF	00035520		SLA = SURI (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)	00036120
CUMMUN /SCA23/ XSL123(2), YSC123(2)	00035530		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT23(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00036130
COMMON /TEST/ PHILIM, THVI, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,	00035540		IGAUSS = IGAUSS + 1	00036140
I FREV. FRES. SREL, PHIZ, PHIOZ, ELIM, UZV, UZS, TH	4500035550		PYSCAT([] = STHETA * (DY - YSCT23(]) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00036150
COMMON /BVAL/ O. KIDTH, BANGLE, GRIGIN, CHEGA, PHI, THETA, PROP	00035560		IGAUSS = IGAUSS + 1	0J036160
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVAL2,	00035570		PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) + PXSCAT(I) +	00036170
2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT	00035580		$1 \qquad \qquad PYSCAT(I) \ \ \ \ PYSCAT(I) \ \ + \ 1.0))$	00036180
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES	00035590	с		00036190
	00035600		IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1	00036200
	00035610	с		00036210
	00035620	c		00036220
VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)	00035630	2200	CONTINUE	00036230
SILPL = EPO / E * ZVAL * ALCG (PLASMC * E) * ASQB	00035640	С		00036240
SIIVAL = EPO / E + ZVAL + ALOG (VEL / VFERMI) + ASQ8	00035650	С		00036250
CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00035660		SUM1 = 0.0	00036260
SILBOU = FPO / E * ALOG (BETHEV * E) * ASQB	00035670		SUM2 = 0.0	00036270
SCRIT = 4.0 + THV1	00035680		SUM3 = 0.0	00036290
INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5)	00035690	С		00036280
	00035700		DO 2280 I = 1.2	00036290
	00035710		SUM1 = S(M1 + DEL(T))	00030300
SCATTERING BY V - RCLS	00035720			00036310
	00035730			00036320
	00035740	2280		00036330
	00035750	r	CONTINUE	00036340
	00035760	Ç		00036350
00 2200 1 - 1+2	00035770		TAREL - FAREL T JUNZ	03036360
CY = Y = OP(C + POP(C(TEO) = YC(T22(T)))	00035770		FIREL - FIREL 7 SUMS DELE - CUMI A STUDI / COM	00036370
SX = X = UPLC + PUPLC(IEQ) = ASCIZS(I)	00035760			00036380
UN = N = INVERTIGAUSSI = UPLC + PUPLCIIEGI	00035900			00036390
IGAUSS = IGAUSS + I	00035800		A = A + ASUC + PAREL	00036400
ST = T - UPLC = PUPLULLECT - TSC123(I)	00032810	~	1 = 1 + 4000 + MIKFF	00036410
		U .		00036420
		C		00036430
			KEIUKN	00036440
		C		00036450
			ENU	00036460

•

с с

c c

C C C

с

114 -

			DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00037060
SUBRUUTINE SCATZ4 (X,Y,PXKEL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)	00036470		IGAUSS = IGAUSS + 1	00037070
1311111111	00036490		150 - 160 + 1 S = SORT/(DX-XSCT24/I))=(DX-XSCT24/I)) +	00037080
S C A T 2 4	00036500		$1 \qquad (DY - YSCT24(1)) + (DY - YSCT24(1)))$	00037100
	00036510		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00037110
***************************************	00036520		IF (INTE .GT. 150) GCTO 2221	00037120
SCATTERING PROCESS IN THE FOURTH MCNOLAYER.	00036530		SB = SQRT (SX + SX + SY + SY)	00037130
	00036540		LF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221	00037140
	00036550		PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV45 * THV2)	00637150
	00036560		PRBL = PRBL * EXP (- SX * SX / (2.0 * THV45 * THV45)) *	00037160
DIMENSIUN 1A(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00036570		1 EXP (- SY * SY / (2.0 * THV2 * THV2))	30037170
DIMENSION THURHIIZUUU) DIMENSION THURHIIZUUU)	00036580		LALL SIGMA (ZV+FMV+SGMV+PXREL+PYREL)	00037180
DIMENSION THVBST(12000), THVBV2(12000)	00036600		PZ = PROL = SUMV = UMCUA / LE = EJ D7 = D7 = 0 / NUM	00037190
DIMENSION POPICI22003, PUNIE/22003	00036610		PL - PL + W / NOM RS(INTE_IDEDTH) = RS(INTE_IDEDTH) + D7	00037200
DIMENSION PXSCAT(6)	00036620	2221	SRFI = S / ATEV	00037220
DIMENSION PYSCAT(6)	00036630	c		00037230
DIMENSION DEL(6)	00036640	-	IF (SREL .LT. U.005) RETURN 2	00037240
DIMENSION BS(150+150)	00036650		IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220	00037250
	00036660	C		00037260
	00036670		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	60037270
REAL+8 PZ	00036680		STHETA = THEV + TA(ISREL) / E	00037280
	00036690		DEL(I) = SILBOU = SILV(ISREL)	00037290
	00036700	~	GUIC 2230	00037300
	00036710	5220		00037310
COMMON / NAI / TA. SILV. SILSI. PNORM. THVRVI. THVRV2. THVRSI. SI	SCU0036730	2220	DFL(1) = 0.0	00031320
COMMEN /GVAL/ PI. ATFV. ATFSI. A. A2. A4. RHCAT. PSIINX. PSIINY.	00036740	С		00037340
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00036750	2230	CONTINUE	00037350
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PCPLC, PUNIF	00036760		SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / F)	00037360
COMMON /SCA24/ XSCT24(3), YSCT24(3)	00036770		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT24(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00037370
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,	00036780		IGAUSS = IGAUSS + 1	00037380
L FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHID2, ELIM, U2V, U2S, THV	4500036790		PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCT24(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00037390
COMMON /BVAL/ O, MIDTH, BANGLE, URIGIN, LMEGA, PHI, IMETA, PRUP,	00036800		IGAUSS = IGAUSS + 1	00037400
COCOULS CINOULS ELL ELL STAT	00036810		$PHIL = AKLUS \{1.00 / SUKI [PASLAI(1] = PASLAI(1] = PASLAI(1] = PASLAI(1) = P$	00037410
COMMON /EDST/ EDG 7VAL DIASON, BETHEV, BETHES	00036830	r	$\mathbf{I} \qquad \qquad$	00037420
	00036840	U	IF (PHIL .GT. PHILIN) RETURN 1	00037440
	00036850	с		00037450
	00036860	Ċ		00037460
VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)	00036870	2200	CONTINUE	00037470
SILPL = EPO / E = ZVAL = ALOG (PLASMC = E) = ASQ8	00036880	С		00037480
SILVAL = EPO / E + ZVAL + ALOG (VEL / VFERMI) + ASQ8	00036890	C		00037490
CPH = (1.3 / SORT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00036900		SUM1 = 0.0	00037500
SILGUU = EPU / E * ALUG (BEIMEV * E) * ASUB	00036910		SUM2 = 0.0	00037510
SURII = 4.0 + INVI INTE - TETY (/ELIM - EKEV + E) / RESOLE + 1.5)	00036920	r		00037520
INTE - IFIA (IELIA - FATA + E) / RESULE + 1.5)	00036940	L	NO 2280 I = 1.3	00037540
	00036950		SUM1 = SUM1 + DEL(I)	00037550
SCATTERING BY V - RCWS	00036960		SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)	00037560
	00036970		SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)	00037570
	00036980	2280	CONTINUE	00037580
	00036990	С		00037590
DO 2200 I = $1,3$	00037000		PXREL = PXREL + SUM2	00037600
	00037010		PYREL = PYREL + SUM3	00037610
SX = X = DPLC = PDPLC(1EV) = XSCT24(1)	00037020		UFLE = SUAL + SILPL / UPM	00037620
DA F A - IHV4D F PNUKMIIGAUSSI - UPLU F PUPLUILUI TCANSS - TCANSS - 1	00037030		C - C - UCLC Y = Y + ASAG + DYDEL	00037630
[URUSS = [URUSS +] SV = V = ND[[] ± DND[[]]FN] = VCT724[1]	00037040		A = A T AJVO T PAREL V = V + ASOR # PVRF1	00037650
31 - 1 - UFLG + FUFLGLIGWI - 136124(1)	00031030	c	1 - 1 T AGEO T FINLL	00037660
		č		00037670
		-	RETURN	00037680
		c		00037690
			END	00037700

с С

C C

с с с

000000

С

- 115 --

			$\partial Y = Y - THVBSI(IGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEC)$	00038300
SUBROUTINE SCAT25 (X.Y.PXREL.PYREL.E.IGAUSS.IEQ.IDEPTH.*.*)	00037710		IGAUSS = IGAUSS + 1	00038310
	00037720		IEQ = IEQ + 1	00038320
	00037730		S = SQRT((DX-XSCT25(I))*(DX-XSCT25(I)) +	00038330
S C A T 2 5	00037740		1 (DY-YSCT25(I))*(DY-YSCT25(I)))	00038340
	00037750		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00038350
\$21 = 32 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 =	00037760		IF (INTE .GT. 150) GOTO 2221	00038360
SCATTERING PROCESS IN THE FIFTH MONOLAYER.	00037770		SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)	00038370
	00037780		IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221	00038380
	00037790		PRBL = 1.0 / (PI + U2S + U2S)	00038390
	00037800		PKBL = PRBL = EXP (- SB = SB / (U2S = U2S))	00038400
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00037810		CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)	00038410
DIMENSION PNORM(12000)	00037820		PZ = PRBL * SGMS * DMEGA / (E * E)	00038420
DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)	00037830		PZ = PZ + Q / NUM	00038430
DIMENSION THVBSI(12000)	00037840		BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ	00038440
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00037850	2221	SREL = S / ATFSI	00038450
DIMENSION PXSCAT(6)	00037860	C		00038460
DIMENSION PYSCAT(6)	00037870		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00038470
DIMENSION DEL(6)	00037880		IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220	00038480
DIMENSION BS(150,150)	00037890	С		00038490
	0003 790 0		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00038500
	00C37910		STHETA = THESI + TA(ISREL) / E	00038510
REAL*8 PZ	00037920		DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)	00038520
LOGICAL ROTAT	00037930		GOTO 2230	00038530
LOGICAL SISC	00037940	ε		00038540
	00037950	2220	SIHEIA = 0.0	00038550
	0003 7960		$DEL(I) \neq 0.0$	00038560
COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SI	SCU0C37970	6	6047 March 1	00038570
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,	00037980	2230		00038580
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSO, VFERMI,	00037990		SCA = SQRT TELSCAT * (DELTI) + STUVAL / CPHJ / E)	00038590
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, POPLC, PUNIF	00038000		PASLAT(I) = SIMETA + (UX - ASCIZZIII) / S + PN0KM(IGAUSS) + SCA	00038600
COMMON /SCA25/ XSCT25(4), YSCT25(4)	00038010		IGAUSS = IGAUSS + I	00038610
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,	00038020		PTSLAT(1) = STHETA + (DT - TSLT25(1)) / S + PNURM(TGAUSS) + SLA	00038620
1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV	4500038030		IGAUSS = IGAUSS + I	00038650
COMMON /BVAL/ O. WIDTH, BANGLE, ORIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PRDP,	00038040		PHIL = ARUUS (1.0 / SQR1 (PASCAT(1) + PASCAT(1) + PA	00038640
1 FMV. FMSI. FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALL, ZVALZ,	00038050	c	$I \qquad \qquad$	00038650
2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RUTAT	00038060	L	TE CONTL OT DUTITNE DETION 1	00038670
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES	00038070	r	IF (FFIL .GI. FRILIR) NEIGRA I	00038680
	00038080	ř		00038690
	00038090	2200	CONTINUE	00038700
	00038100	r 200		00038710
VEL = SURI (2+0 \neq E / ULSU)	00038110	č		00034720
SILPL = EPO / E = ZVAL = ALUG (PLASMU + E) = ASWO	00030120	Ū	SUM1 = 0.0	00038730
SILVAL = EPU / E + ZVAL + ALUG (VEL / VFERMI) + ASQO COM (I A CODT (DYOR) + DYOR) + DYORE) + I (I)	00038140		S(M2 = 0.0)	00038740
$CPH = \{1.00 / SWR\} \{PAREL + PAREL + PIREL + PIREL + I.0000$	00038140		SUN3 = 0.0	00038750
SILEUU = $CO + THEI CO COMPANY CONTRACTOR C$	00038160	с		00038760
SUKI) = 400 * 1831 NUTE - 1514 (1814 - 5455 * 517 8560)5 + 1 51	00038170	-	DO 2280 I = 1.4	00038770
INTE - IFIA (TELIM - FRF3 + EJ.) RESULE + 1.5)	00038180		SUM1 = SUM1 + DEL(I)	00038780
	00038190		SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)	00038790
CLATTEDING BY CT - DELS	00038200		SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)	00038800
	00038210	2280	CONTINUE	00038810
	00038220	С		00038820
	00038230		PXREL = PXREL + SUM2	00038830
DD 2200 I = 1.4	00038240		PYREL = PYREL + SUN3	00038840
	00038250		DELE = SUM1 + SILPL / CPH	00038850
SX = X - DPLC + PDPLC(IEQ) - XSCT25(I)	00038260		E = E - DELE	00038860
DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00038270		X = X + ASQ8 + PXREL	00038870
IGAUSS = IGAUSS + 1	00038280		Y = Y + ASQ8 * PYREL	00038880
SY = Y - DPLC + PDPLC(IEQ) - YSCT25(1)	00038290	С	*	00038890
		C		00038900
			RETURN	00038910
		C		00038920
			END	00038930

END

116

c c

C C

C C C

000000

с

			DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC + PDPLC(IEC)	00039530
SURRUUTINE SCAT26 (X+Y+PXREL+PYREL+E+IGAUSS+IEQ+IDEPTH++++)	00038940		IGAUSS = IGAUSS + 1	00039540
	00038950		IEO = IEO + 1	00039550
	0003896 0		S = SORT((DX-XSCT26(I))*(DX-XSCT26(I)) +	00039560
SCAT26	00038970	1	[DY-YSCT26(1))*(DY-YSCT26(1)))	00039570
	000389 80		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00039580
***************************************	000389 90		IF (INTE .GT. 150) GCTO 2221	00039590
SCATTERING PROCESS IN THE SIXTH MONOLAYER.	00039000		SB = SQRT (SX + SX + SY + SY)	00039600
	00039010		IF (SB .GT. SCRIT) GCTO 2221	00039610
	00039020		PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV45 * THV2)	00039620
	00039030		PRBI = PRBL * FXP (- SX * SX / (2.0 * THV45 * THV45)) *	00039630
DIMENSION TA(4000). SILV(4000). SILSI(4000)	00039040	,	EXP (-SY + SY / (2.0 + THV2 + THV2))	00039640
DIMENSION PNORM(12000)	00039050		CALL STONA (74-ENV-SONV-PYDEL-DYDEL)	00039650
DIMENSION THV8V1(12000), THV8V2(12000)	00039060		$D7 = D081 \pm SCMV \pm OMECA / (E \pm E)$	00030660
	00039070		$r_{L} = r_{L} r_{L} = 3 \text{ or } r_{L} = 3 \text{ or } r_{L} = 1 o$	00039660
DIMENSION PODICIZZON, DUNTE(2200)	00039010		FL - FC - V / NUM Brithte Ideatus - Brithte Ideatus - D7	00039870
	00039080		$D_{1} = 0$ (ATEN	00039660
	00039090	2221	SREL = 5 / AIFV	00039690
	00039100	L		00039700
DIMENSION DEL(6)	00039110		IF ISREL .LT. 0.005) RETURN 2	00039710
DIMENSION HS(150,150)	00039120		IF (SREL .GT. 20.0) GUTU 2220	00039720
	00039130	С		00039730
	000391 40		(SREL = IFIX (200.0 * SREL))	00039740
REAL*8 PZ	00039150		STHETA = THEV * TA(ISREL) / E	00039750
LOGICAL ROTAT	00 039160		DEL(I) = SILBOU * SILV(ISREL)	00C39760
LOGICAL SISC	000391 70		GDTO 2230	00039770
	0U039180	С		00039780
	000391 90	2220	STHETA = 0.0	00039790
COMMON /WVAL/ TA. SILV. SILSI. PNORM. THVEVI. THVBV2. THVBSI. SIS	C00039200		DEL(1) = 0.0	00039800
COMMON / GVAL/ PI. ATFV. ATFSI. A. A2. A4. RHOAT. PSIINX. PSIINY.	00039210	С		00039810
1 ZPART. ZV. ZSI. THEV. THESI. ELSCAT. UCSO. VEERMI.	00039220	2230	CONTINUE	00039820
2 ASO, ASO2, ASO4, ASO8, ISEC, DPLCM, POPIC, PUNIE	00039230		SCA = SORT (ELSCAT * (DEL(T) + ST(VAL / CPH) / E)	00039830
COMMON /SCA26/ XSCT26(3), YSCT26(3)	00039240		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT26(I)) / S + PNDRM(IGAUSS) * SCA	00039840
COMMON / TEST/ BUT IN. THV1. THV2. THS1. ED. BS. DESDIE. DESDID.	00039250		TABLES + TABLES + 1	00039850
CENTRY FILLING THEY THEY THEY LOG BAY RESOLUTION AND A THEY AND A	500039260		$\frac{1}{1} = \frac{1}{1} = \frac{1}$	00039860
CONMON (BYAL A. LIDTU BANGE, FOTOIN, FNECA, BUT, THETA, BODD,	00039270		$TCALCC = TCALCC \pm 1$	00030870
COMMON 75VALZ WE WIDING DANGLES UNIGING CHECKS FILS INCLAS FRUIS	00039210		104035 - 104035 + 1	00039870
1 PRVS PROIS PRANTS FROMS NORS DEFILS ZVALLS ZVALLS	00039280		$\begin{array}{c} PRIC + ARCUS(1 \circ I + SWR)(I + ASCA)(1) + F + ASCA(1) + ASCA(1) + F + ASCA(1) + ASCA(1) + F + ASCA$	00033880
2 CONTRACTOR FILL FRIE RELAT	00039290	~	$\mathbf{L} = \mathbf{P} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{C} \mathbf{A} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{F} \mathbf{I} \mathbf{S} \mathbf{C} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} I$	00039890
COMMON /EPSI/ EPO+ ZVAL+ PLASHU+ BETHEV+ BETHES	00039300	L		00039900
	00039310		IF (PHIL .GI. PHILIM) KEIOKN I	00039910
	00039320	C		00039920
	00039330	C		00039930
vel = SQRT (2.0 + E / UCSC)	00039340	2200	CONTINUE	00039940
SILPL = EPO / E + ZVAL + ALOG (PLASMC + E) + ASQB	00039350	с		00039950
SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * ASQ8	00039360	С		00039960
CPH = {1.0 / SORT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0)}	00039370		SUM1 = 0.0	00039970
SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * ASQ8	00039380		SUM2 = 0.0	00039980
SCRIT = $4.0 \times \text{THV}$	00039390		SUM 3 = 0.0	00039990
INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5)	00039400	С		00040000
	00(39410		DO 2280 I = 1.3	00040010
	00039420		SUM1 = SUM1 + DEL(I)	00040020
SCATTERING BY V - ROLS	00039430		SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)	00040030
	00039440		SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)	00040040
	00039450	2280	CONTINUE	00040050
	00039460	r		00040060
00.2200 t = 1.3	00039470	•	PYREL = PYREL + SUM2	00040070
	00039480		PYREL # PYREL + SUM3	00040080
$s_{1} = s_{2} = 001 c_{1} + 0001 c_{1}(150) = 350736(1)$	00039490		DELE = CIN1 + CI D1 / CPH	00040090
3A = A = 0FLC = FUFLCIECT = ASCIENT $SY = Y = TUVE = DNDMITCALEST = ASCE = DDSCITENT$	00030500		E + E _ DELE	00040100
DA = A = (DA42 + PNURHIGAUSS) = UPLU + PUPLUIEWI	00039510		C - L - ULLE V - V + ASAA + DYDEL	00040110
IGAUSS = IGAUSS + I	00039510		A T ASUG T FAREL	00040130
SY = Y - UPLC + PUPLC(1EQ) - YSC(20(1))	00039520		T = T + ASUS + PTKEL	00040120
		C		00040130
		C		00040140
		_	RETURN	00040150
		C		00040160
			END	00040170

с с с с с с с с

С

C C C

с С

C C

			DY = Y - THVBV1(IGAUSS) - OPIC + POPIC(IEC)	00040770
SUBROUTINE SCAT27 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)	00040180		IGAUSS = IGAUSS + 1	00040780
,	00040190		$IEQ \neq IEQ + 1$	00040790
==========	00040200		S = SORT((DX-XSCT27(1))*(DX-XSCT27(1)) +	00040800
S C A T 2 7	00040210	`	1 (DY-YSCT27(1))*(DY-YSCT27(1)))	00040810
	00040220		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00040820
	00040230		IF (INTE .GT. 150) GCTO 2221	00040830
SCATTERING PROCESS IN THE SEV. MONDLAYER.	00040240		SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)	00040840
	00040250		IF (SB .GT. SCRIT) GCTO 2221	00040850
	00040260		PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV2 * THV1)	00040860
	00040270		PRBL = PRBL * EXP (- SX * SX / (2.0 * THV2 * THV2)) *	00040870
DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)	00040280	1	1 = EXP (-SY + SY / (2.0 + THV1 + THV1))	00040880
DIMENSION PNORM (12000)	00040290		CALL SIGMA (ZV.FMV.SGMV.PXREL.PYREL)	00040890
DIMENSION THV8V1(120C0), THV8V2(12000)	00040300		PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)	06040900
DIMENSION THVBSI(12000)	00040310		$PZ = PZ \neq Q / NUM$	00040910
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00040320		$BS(INTE \cdot (DEPTH) = BS(INTE \cdot IDEPTH) + PZ$	00040920
DIMENSION PXSCAT(6)	00040330	2221	SREL = S / ATFV	00040930
DIMENSION PYSCAT(6)	00040340	с		00040940
DIMENSION DEL(6)	00040350		IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00040950
DIMENSION BS(150,150)	00040360		IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220	00040960
	00040370	С		00040970
	00040380		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00040980
REAL*8 PZ	00040390		STHETA = THEV * TA(ISREI) / E	00040990
LOGICAL ROTAT	00040400		DEL(I) = SILBOU * SILV(ISREL)	00041000
LOGICAL SISC	00040410		GOTO 2230	00041010
	00040420	с		00641020
	00040430	2220	STHETA = 0.0	00041030
COMMON /WVAL/ TA. SILV. SILSI. PNCRM. THVEV1. THVEV2. THVBSI. SI	SC00040440		DEL(I) = 0.0	00041040
COMMON / GVAL / PI. ATEV. ATESI. A. A2. A4. RHCAT. PSIINX. PSIINY.	00040450	с		00041050
ZPART. ZV. ZSI. THEV. THESI. ELSCAT. UCSO. VEERMI	00040460	2230	CONTINUE	00041060
ASO. ASO2. ASO4. ASO8. ISEC. DPLCM. PDPLC. PUNIF	00040470		SCA = SORT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)	00041070
COMMEN /SCA27/ XSCT27(2). YSCT27(2)	00040480		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT27(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00041080
COMMON /TEST/ PHILIM. THV1. THV2. THS1. FO. BS. RESOLE. RESOLD.	00040490		IGAUSS = IGAUSS + 1	00041090
FKEV. FKES. SREL. PHI2. PHI02. ELIM. U2V. U2S. TH	4500040500		PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCT27(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00041100
COMMON / RVAL / D. WIDTH. BANGLE. ORIGIN. OMEGA. PHI. THETA. PROP.	00040510		IGAUSS = IGAUSS + 1	00641110
1 EMV. EMSI. EMPART. FWHM. NUM. DEPHI. ZVALI. ZVAL2.	00040520		PHIL = ARCOS [1.0 / SORT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +	00041120
COSPHI. SINPHI. FLI. FNI. RCTAT	00040530	1	PYSCAT(I) + PYSCAT(I) + 1.0)	00041130
COMMON / FPSI/ FPO. ZVAL. PLASMO. BETHEV. BETHES	00040540	С		00041140
	00040550		IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1	00041150
	00040560	С		00041160
	00040570	С		00041170
VEL = SORT (2.0 * E / UCSO)	00040580	2200	CONTINUE	00041180
SILPL = EPO / E * ZVAL * ALCG (PLASMC * E) * ASQ8	00040590	с		00041190
STEVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * ASQ8	00040600	С		00041200
CPH = (1.0 / SORT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))	00040610		SUM1 = 0.0	00041210
SILBDU = EPO / F + ALCG (BETHEV + E) + ASG8	00040620		SUM2 = 0.0	00041220
SCRIT = 4.0 + THVI	00040630		SUM3 = 0.0	00041230
INTE = IFIX ((ELIM \rightarrow FKEV * E) / RESOLE + 1.5)	00040640	С		00041240
	00040650		DO 2280 I = $1,2$	00041250
	00040660		SUM1 = SUM1 + DEL(I)	00041260
SCATTERING BY V - RCbS	00040670		SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)	00041270
	00040680		SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)	00041280
	00040690	2280	CONTINUE	00041290
	00040700	C		ŨŨ041300
DD 2200 I = 1.2	00040710		PXREL = PXREL + SUM2	00041310
·····	00040720		PYREL = PYREL + SUM3	00041320
SX = X - DPLC + PDPLC(IEQ) - XSCT27(I)	00040730		DELE = SUM1 + SILPL / CPH	00041330
DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEC)	00040740		E = E - DELE	00041340
IGAUSS = IGAUSS + 1	00040750		X = X + ASOB + PXREL	00041350
SY = Y - DPLC + POPLC(IEQ) - YSCT27(I)	00040760		Y = Y + ASQ8 + PYREL	00041360
		С		00041370
		č		00041380
		-	RETURN	00041390
		C		00041400
		-	END	00041410

с с

с с

c c c

000000

С

•

- 118 --

			DT = T - THVBV2(TGAUSS) - DP(C + PDP(C(TEC)))	00042010
SUBRUUTINE SCATZE (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)	00041420		IGAUSS = IGAUSS + 1	00042020
	00041430		IEQ = IEQ + 1	00042030
	00041440		S = SQRT((DX-XSCT28(I))*(DX-XSCT28(I)) +	00042040
S C A T 2 B	00041450		1 (DY-YSCT28(I))*(DY-YSCT28(I)))	00042050
	00041460		IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00042060
	00041470		IF (INTE .GT. 150) GCTD 2221	00042070
SCATTERING PROCESS IN THE FIGHTH MONDLAYER.	00041490		SB = SOBT (SX + SX + SY + SY)	00042080
STATISTICAL STATE AND A STATE	00041480			00042000
	00041490		$1^{\circ} 130 + 61^{\circ} 3000 + 01^{\circ} 2221$	00042090
	00041500		PPDL = 1.07 (2.07 P1 + 10.45 + 10.27)	00042100
	00041510		PRBL = PRBL + EXP (- SX + SX / (2.0 + THV45 + THV45)) +	00042110
DIMENSION TA(4300), SILV(4000), SILSI(4000)	00041520		$L^{-} = EXP (-SY + SY / (2.0 + THV2 + THV2))$	00042120
DIMENSION PNDRM(12000)	00041530		CALL SIGMA (ZV+FMV+SGMV+PXREL+PYREL)	00042130
DIMENSION THV8V1(12000). THV8V2(12000)	00041540		PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (F * E)	00042140
DIMENSION THYBSI(12000)	00041550		PZ = PZ + Q / NUM	00042150
DIMENSION POPL (12200) PUNIE (2200)	00041540		$AS(INTE_IDEPTH) = AS(INTE_IDEPTH) + P7$	00042160
ATMENSION DYSCATICA	00041580	2221	SDET = S / ATEV	00042170
	00041570	· · · · ·	SREE - 5 / ATT	00042170
	00041580	L		00042180
DIMENSION DEC(6)	00041590		IF (SREL .LI. J. JUDJ) RETURN 2	00042190
DIMENSION BS(150,150)	00041600		IF (SREL .GT. 20.0) GDTU 2220	00042200
	00041610	С		00042210
	00041620		ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00042220
REAL #8 PZ	00041630		STHETA = THEV * TA(ISREL) / E	00042230
	00041640		DEL(I) = SILBOU * SILV(ISREL)	00042240
	00041650		6010 2230	00042250
	00041030	r		00042260
	00041880	~ ~ ~ ~ ~		00042200
	00041670	2220		00042210
CUMMUN /RVAL/ 1A, SILV, SILVI, PNURF, IHVBVI, IHVBV2, IHVBSI, SI	00041680			00042280
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,	00041690	ι		03642290
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,	00041700	2230	CONTINUE	00042300
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF	00041710		SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPHI / E)	00042310
COMMON /SCA28/ XSCT28(3), YSCT28(3)	00041720		PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT28(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00042320
COMMON /TEST/ PHILLIM. THV1. THV2. THSI. FO. BS. RESOLE. RESOLD.	00041730		IGAUSS = IGAUSS + 1	00042330
1 EKEV. EKES. SPEL. DHT2. DHT02. ELTM. H2V. H2S. THV	500041740		PYSCAT(1) = STHETA + (DY - YSCT28(1)) / S + PNORM(IGAUSS) + SCA	00042340
COMMON / BVAL/ O. LIDTH. BANGLE. OBIGIN. CHECK. BUT. THETA. DOD.	00041750		IGAUSS = IGAUSS + 1	00042350
COMMUN / BVAL/ 44 WIDTHS DANGLES UNIGINS CHECKS FILS INCIAS FROFS	00041750		= A C A C A C A C A C A C A C A C A C A	00042360
I FRV, FRSI, FRFAR, NUF, UEPHI, ZVALI, ZVALZ,	00041760		FITC = ARCOS (100) SURF (FASCAT(1) + FASCAT(1) + ARCOS (100) SURF (FASCAT(1) + ARCOS (100) SURF (FASCAT (1) + ARCOS	00042370
2 CUSPHI, SINPHI, FLI, FNI, FLIAT	00041770	•	I PISCATULY + PISCATULY + 1.077	00042370
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES	00041780	C		00042380
	00041790		IF (PHIL .GI. PHILIM) KEIURN I	00042393
	00041800	С		00042400
	00041810	С		00042410
VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)	00041820	2200	CONTINUE	00042420
STUPL = FPO / E + ZVAL + ALCG (PLASHC + E) + ASO8	00041830	С		00042430
STIVAL = EPO / E + TVAL + ALCG (VEL / VEERNT) + ASOR	0.0041840	c		ŮŨO4244 0
c_{0} = c_{1} c_{1} c_{2} c_{1} c_{2} c_{1} c_{2} c_{1} c_{2} c_{1} c_{2} $c_$	00041850	-	SUM1 = 0-0	00042450
CPH = 11.07 SWALLFAREL $+$ PAREL $+$ PTREL $+$ PTREL $+$ 1.077	00041830			00042460
SILHOU = EPU / E + ALUG (EETHEV + E) + ASCO	00041880			00042400
SCRIT = 4.0 * THVI	00041870	-	SUH5 = 0.0	00042410
INTE = IFIX {(ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5)	00041880	L		00042480
	000418 90		DO 2280 I = 1.3	00042490
	00041900		SUM1 = SUM1 + DEL(I)	00042500
SCATTERING BY V - ROWS	00041910		SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)	00042510
	00041920		SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)	00042520
	00041930	2280	CONTINUE	00042530
	00041940	r		00042540
	00041050	-	PYPEI = PYPEI + SUM2	00042550
00 2200 1 + 103	00041950			00042560
	00041400		THE - THE FOUND (FU	00042570
SX = X - DPLC * PDPLC(IEC) - XSCT28(I)	00041410		DELE - JUML Y JILFL / UFM	00042510
DX = X - THV45 * PNORM(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00041980			00042580
IGAUSS = IGAUSS + 1	000419 90		X = X + ASQ8 # PXREL	00042590
SY = Y - DPLC * POPLC(IEQ) - YSCT28(I)	00042000		Y = Y + ASQ8 + PYREL	00042600
-		C		00042610
		č		00042620
			RETION	00042630
•		~	RE LYNA	00042640
		L		00042650
			ENU	00072030

C C

c c

C C C

C C C C C C C

с

- 119 --

SUBROUTIN	E PLOTRT (X,Y,N,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,	00042660		FUNCTION EPV (E)	00043010
1	YMAX, YMIN, SY, NTEXT, IDPLOT,	00042670	C		00043020
2	XA, DX, XE, NFX, NX,	00042680	Ľ		00043030
3	YA.DY.YE.NFY.NY]	00042690	C	EPV	0J043040
		00042700	L.		00043050
		00042710	C		00043060
	13823	00042720	C	ENERGY LOSS WITH POLYNOM OF FIFTH ORDER,	J0043J70
PLC	TRT	00042730	С	DESCRIBED BY CHU AND ZIEGLER	00043080
	23322	00042740	С	RESULT IN (KEV / ANGSTROEM)	00043090
*****		00042750	С	=+=====================================	00043100
SUBRO	UTINE FOR 2 D - PLOTS	00042760	С		00043110
=====	231422314182188213	00042770		DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)	00043120
		00042780		DIMENSION EPCOV(6), EPCOSI(6)	00043130
		00042790		COMMON /EPCO/ EPCOV, EPCOSI	00043140
DIMENSION	X(N). Y(N)	00042800		COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,	00043150
OTHENSTON	NTEXT(15)	00042810		1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSO, VEERMI.	00043160
01010100		00042820		2 ASQ. ASQ2. ASQ4. ASQ8. ISEC. DPLCM. PDPLC. PUNTE	00043170
NPC ± 2		00042830		COMMON /BVAL/ 9. WIDTH. BANGLE. CRIGIN. EMEGA. PHI. THETA. PROP.	00043180
		00042840		1 ENV. EMSI. EMPART. ENT. NUN. DEPHI. 7VALL. 7VAL2.	00043190
NEGA - J		00042850		2 COSPHIA SINPHIA FLIA FNIA BETAT	00043200
	-	00042860	C		00043210
	2	00042870	-	$FF = 4_{-1}026 / FMPART + F$	00043220
NPSX = 5		00042010		EPV = EP(nV(1) + EE*(EP(nV(2) + E*(EE*(EP(nV(2) + EE*(EP(nV(2) + E*(EE*(EP(nV(2) + EE*(EP(nV(2) + EE*(EP(nV(2) + EE*(EP(nV(2) + EE*(EP(nV(2) + EE*(EF*(EF*(EF*(EF*(EF*(EF*(EF*(EF*(EF*(00043220
NLGY = 5		00042800		$1 \qquad + FE = \{F \in [0, 1]\} + FE = FE \cap [0, 1] + FE = [F \cap [0, 1]] + FE = [F \cap [0, 1]] + FE = FE \cap [0, 1] + FE \cap [0, $	00043250
NSCY = 3		00042090		EV = EV + EV + 2000	00043240
NUDY = 5	_	00042900		ErV = TrV = RIGAL = 300 T / 6000	00043230
NPSY = -	5	00042910	r	LIV - LIANI Y LIANI / YOU Y LIV	00045280
NTXN = 0		00042920	C	DETUDA	00043270
		00042930			00043280
CALL PLOT	A (X,Y,N,NT,NP,NPG,INTA,NPA,INUZ,XMAX,XMIN,SX,	00042940		END	00043290
1	YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,	00042950			
2	NLGX+ XA+ DX+ XE+NFX+NSCX+NUCX+NPSX+NX+	00042960			
3	NLGY, YA, DY, YE, NFY, NSCY, NUGY, NPSY, NY, NTXN]	00042970		FUNCTION EPS (E)	00043300
		00042980	С		00043310
RETURN		00042990	č	=====	00043320
END		00043000	č	F P S	00043330
			ř		00043340
			ř		00043350
			ř	ENERGY LOSS WITH DOLYNOM DE EITH CROER	00043360
			č		00043370
			č	DESCRIPTION AND TREATER	00043380
			č		00043390
			č		00043400
			č		00043410
			L	DIMENSION DODLE (22001 - DUNIE (22001	00043420
				DIMENSION FUELCIZZOUI, FUNIFIZZUUI	00043420
				DIMENSIUN EPCUV(6), EPCUSI(6)	00043450
				CUMPUN /EPCU/ EPCUSI	00043440
	•			CUMMUN / GVAL/ PI, ATPY, ATPSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINA, PSIINA, PSIINA,	00043430
				$1 \qquad \qquad$	00043480
				2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCA, PDPLC, PUNIP	00043470
				CUMMUN /BVAL/ U. WIDIM, BANGLE, UKIGIN, LMEGA, PMI, IMETA, PRUP,	00043480
				I FMV. FMSI. FFPARI. FWHP. NUP. UEPHI. ZVALI. ZVALZ.	00043490
				Z COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, KUTAI	00043500
			С		00043510
				EE = 4.0026 / FMPART * E	00043520
				EPS = EPCOSI(1)+EE*(EPCOSI(2)+EE*(EPCOSI(3)+EE*(EPCOSI(4)	00043530
				1 +EE*(EPCOSI(5)+EE*EPCCSI(6))))	00043540
				EPS = EPS * RHOAT * 10. / 4000.	00043550
				EPS = ZPART + ZPART / 4.0 + EPS	00043560
			С		00043570
				RETURN	00043580
				END	00043590

С

С

С

			350	2 DELTAZ = WIDTH / (EPV (E) + EPS (E)) + CCSAN	00044190
	SUBROUTINE BCKSCT (HETH.HINT.HSMO.MAXCH.MINCH)	00043600		Z = Z - DELTAZ	00044200
Ç		00043610		IF (Z .LT. 0.0) GOTO 3503	00044210
c		00043620		E = E - WIDTH	00044220
C	вскост	00043630		GOTO 3502	00044230
C C		00043640	350	3 INTE = IFIX (0.5 + (E - CRIGIN) / WIDTH)	00044240
		00043650		IF (INTE .GT. 512) GCTO 3501	00044250
c c	EVALUATION OF THE ENERGY SPECIKA	00043660		HETH(INTE) = HETH(INTE) + PZ	00044260
č		00043670	350	1 CONTINUE	00044270
č		00043680	350	O CONTINUE	00044280
L	DIMENSION REFIED 1501	00043690	C		00044290
	DIMENSION BSAIDUTUU	00043700	C		00044330
	DIMENSION REPUISION	00043710	C	OUTPUT OF CONTRUL INFORMATION	00644310
		00043720	ç	222232232222222222222222222222222222222	00044320
		00043730	C		00044330
		00043740	L C		00044340
	DIMENSION AV(512), AV(512) D(512)	00043750	ι	10175 1/ 25201	00044350
	$\begin{array}{c} \textbf{OTMENSION} \textbf{AC(512)} \textbf{AC(512)} \textbf{C(512)} \textbf{OTMENSION} \textbf{AC(512)} \textbf{C(512)} $	00043760		WK11E (6,372U)	00044380
	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}$	00043770		10 5510 1 = 10512	00044310
	DIMENSION 26(5)47, 22(5)47, 25(5)47, 24(5)47, 25(5)47	00043780		11 = 512 = 1 + 1	00044380
		00043190		IF (HE/H(11) .L1. 1.00-10) GUIU 3310	00044390
	DIMENSION TOTAL (1), AVED(1), SO(1), UNIN(1), UNAV(1)	00043800		WKIIE (093311) 11	00044400
r	STREASTER TOTAL CONTRACTOR SUCCESS OF ANTING ANALY	00043810	253		00044410
C		00043820	321		0004420
c		00043860	301	WOTTE (4 3530) HETH	(1)2666660
°	COMMON /BVAL/ Q. SIDIH. BANGLE. ORIGIN. EMEGA. PHI. THETA.	00043850		WRITE (6,3550) HEIN	00044450
	ENV. ENV. ENV. ENV. ENPLOY CHURCH CHURCH INTE THE HAY	00043860		NRIIE (0900000 NAVCH - 11	00044450
	2 COSPHY, SINPHY, FLI, FNI, RETAT	00043870	c	MAACH - II	00044400
	COMMON /GVAL/ PL. ATEV. ATESI. A. AZ. A4. RHCAT. PSIINY. PSIINY.	00043880	č		00044480
	1 TPART. ZV. ZSI. THEV. THESI. ELSCAT. UCSO. VEERMI.	00043890	ř	INTERPOLATING AND SMOOTHING	00044490
	2 ASQ. ASQ2. ASQ4. ASQ8. ISEC	00043900	č		04644500
	COMMON /EPCO/ EPCOV(6). EPCOSI(6)	00043910	ř	BY SPIINE FITS	00044510
	COMMON /TEST/ PHILIM. THV1. THV2. THSI. FO. BS. RESOLE. RESOLD.	00043920	č		00044520
	1 FKEV. FKES. SREL. PHI2. PHI02. FLIM. U2V. U2S. THV4	500043930	č		00044530
с		00043940	č		00044540
-	DATA [UR/13+1/	00043950	Ũ	DELNUM = SORT (ELOAT (NUM)) / ELOAT (NUM)	00044550
	DATA 1UL/10+1/	00043960		00 3600 I = 1.15	00044560
	DATA P/512*1.0/	00043970		Sh(1) = 1.0	00044570
C		00043980	360	OCONTINUE	00044580
С		00043990	-	IFWHM = IFIX (FWHM)	00044590
С		00044000		IFW = IFWHM - 1	00044600
С	CHANGE OF THE ENERGY AT THE BACKSCATTERING DEPTH	00044010	C		00044610
С		00044020	c		00044620
С	INTO THE ENERGY MEASURED BY THE DETECTOR	00044030		IXG = 0	00044630
С		00044040		I = 513	00044640
С		00044050	400	0 I = I - 1	00044650
С		00044060		IF (HETH(I) .GT. 0.0) GOTO 4010	00044660
	DO 3540 I = $1,512$	00044070		IF (I .GT. 1) GOTO 4000	00044670
	$HETH(\mathbf{I}) = 0.0$	00044080		GOTO 4050	00044680
	0. ف = 0.0	00044090	401	0 I X G = I X G + 1	00044690
	HSMO(I) = 0.0	00044100		IUR(IXG) = I	00044700
3540	CONTINUE	00044110	404	0 I = I - 1	00044710
	COSAN = ABS (COS (PI - BANGLE - THETA))	00044120		IF (HETH(I) .EQ. 0.0) GOTO 4030	00044720
	00 3500 K = 1,150	00044130		IF (I .GT. 1) GOTO 4040	00044730
	$00 \ 3501 \ I = 1,150$	00044140		GOTO 4050	00044740
	PZ = BS(I,K)	00044150	403	0 IUL(IXG) = I + 1	00044750
	IF (PZ .EQ. 0.0) GOTC 3501	00044160		IF (IUL(IXG) .GE. (IUR(IXG)-IFWHM)) IXG = IXG - 1	00044760
	E = ELIM - (FLOAT (I) - 1.0) + RESOLE	00044170		IF (I .EQ. 1) GOTO 4050	00044770
	Z = FLOAT (K) * RESOLD - RESOLD / 2.0	00044180		GOTO 40CO	00044780

4050 CONTINUE 00044790 IF (IXG .EQ. 0) GOTO 4100 00044800 С UUU44810 C IXC = 100044820 4220 LIMSPL = IUR(IXC) - IUL(IXC) + 1 00044830 NSD = 000044840 NSDR = 100044850 С 00044860 DO 4200 I = 1.LIMSPL 00044870 INDEX = IUL(IXC) + I - 1 00044880 AX(I) = INDEX06044890 AY(I) = HETH(INDEX) 00044900 NSD = NSD + 100044910 AAY(NSD) = HETH(INDEX)00044920 IF (I .EQ. LIMSPL) GCTO 4201 00044930 IF (NSD .LT. IFWHM) GOTO 4200 00044940 С 00044950 CALL TALLY (AAY, Sh, TOTAL, AVER, SD, VMIN, VMAX, NSD, 1, IER) 00044960 С 00044970 INX = INDEX - (IFWHM - 1) / 2 00044980 HINT(INX) = AVER(1)00044990 С 00045000 DO 4202 II = NSDR.I 00645010 P(II) = DELNUM * AVER(1)00045020 4202 CONTINUE 00045030 С 00045040 NSDR = I + 100045050 NSD = 000045060 4200 CONTINUE 00045070 00045080 4201 IF (NSD .EQ. 1) GOTO 4204 С 00045090 CALL TALLY (AAY, SH, TCTAL, AVER, SD, VMIN, VMAX, NSD, 1, IER) **ÚÚ045100** 00045110 С INX = INDEX - NSD / 2 00045120 HINT(INX) = AVER(1) 00045130 С 00045140 DO 4203 II = NSDR.LIMSPL 00045150 P(II) = DELNUM + AVER(1) 00045160 4203 CONTINUE 00045170 С 00045180 GOTO 4205 00045190 С 00045200 4204 CONTINUE 00045210 HINT(INDEX) = HETH(INDEX) 00045220 00045230 P(LIMSPL) = DELNUM * AVER(1) 00045240 С 4205 CONTINUE 00045250 SPLSUM = FLOAT (LIMSPL) 00045260 00045270 С С 00045280 CALL SMCOTH (LIMSPL+AX,AY+P+SPLSUM+AC+BC+CC+DC+Z1+Z2+Z3+Z4+Z5+ 00045290 1 26.27) 00045300 С 00045310 00045320 С 00045330 DO 4320 I = 1.LIMSPL 00045340 INDEX = IUL(IXC) + I - 100045350 HSMO(INDEX) = AC(I)00045360 4320 CONTINUE С 00045370 IXC = IXC + 100045380

C C C C C C C C C C C C C C	IF (IXC .LE. IXG) GOTO 4220 CONTINUE WRITE (6.3530) HSMO MINCH = IUL(1) RETURN F O R M A T - S P E C I F I C A T I C N S TORMAT (1H0.T30.MAX. CHANNEL NUMBER :'.II0///) FORMAT (1H0.T30.MAX. CHANNEL NUMBER :'.II0///) FORMAT (1H1.T15.MACKSCATTERING SPECTRUM - NOT SMOCTHED'///) FORMAT (1H1.T15.MACKSCATTERING SPECTRUM - SMOCTHED'///) END	00045390 00045400 00045410 00045420 00045430 00045450 00045450 00045460 00045460 00045540 00045510 00045510 00045550 00045550 00045550 00045570 00045580
CCCCCCC C CC	SUBROUTINE KINFCT (FM2,FKFACT) K I N F C T EVALUATION OF THE KINEMATIC FACTORS COMMON /BVAL/ Q. NIDTH. BANGLE, ORIGIN. CMEGA, PHI, THETA, PRDP, FMV. FMSI, FMPART, FNHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVAL2, COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT FKFACT = SORT (FM2*FM2 - FMPART*FMPART * (SIN (BANGLE))**2.0) FKFACT = (FKFACT * FMPART * COS (BANGLE)) / (FMPART + FM2) FKFACT = FKFACT * FKFACT RETURN END	00045590 00045600 00045620 00045640 00045650 00045670 00045700 00045710 00045710 00045710 00045730 00045730 00045750 00045740 00045780 00045780 00045800

SUBROUTINE SIGMA (Z2,FM2,SGM,PXREL,PYREL)	00045820		SUBROUTINE DAMGPR (DAMAX)	00046370
	00045830	С		00046380
*=****	00045840	С		00046390
S L G M A	00045850	С	DANG PR	00046400
111111111111111111111111111111111111111	00045860	Ċ		00046410
3553#\$2\$866\$35555################################	00045870	č		000464420
EVALUATION OF THE RUTHERFORD CROSS SECTION	00045880	č	SEARCH FOR THE MAXIMUM OF THE DAMAGE PROFILE	00046630
RESULT IN (KEV ** 2 A ** 2)	00045890	č		00046460
╴╡┇╙ ╕┹ ┟⋧┲ ╕ ╊╊╀╴╴╝╓╴╴╛╓╴╴╛╴╸╸╸╸╸╸╸╸╸╸	00045900	č	······································	000464660
	00045910	-	DIMENSION DAN(10)	000464660
LCGICAL ROTAT	00045920			00040480
	00045930		DAMAX = 0.0	00046470
COMMON /BVAL/ Q. HIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PROP.	00045940		PD = 10 + z = 1 - 101	00046480
1 FMV. FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVALI, ZVAL2.	00045950		IF $(DAM(I) - GT - DAMAX) - DAMAX = DAM(T)$	000464500
2 COSPHI, SINPHI, FLI, FNI, RCTAT	00045960		10 CONTINUE	00046500
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,	00045970		WRITE (6.30) DAMAX	00046520
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERNI,	00045980		30 FORMAT ("OMAXIMUM OF THE DISTRIBUTION FUNCTION : "-F10-4)	00046530
2 ASO, ASO2, ASO4, ASO8, ISEC, DPLCH, PDPLC, PUNIF	00045990	C		00040550
	00046000		RETURN	00040340
	00046010		END	00046550
CALL COTRAN (PXREL+PYREL+THETAR)	00046020			00048380
SGM2 = SQRT (1.0 - (FMPART / FM2 + SIN (THETAR)) ++ 2.0)	00046030			
SGM1 = (COS (THETAR) + SGM2) ** 2.0	00046040			
SGM = ZPART * Z2 * 1.44E-2 / (2.0 * (SIN (THETAR)) ** 2.0)	00046050			
SGM = SGM + SGM	00046060			
SGM = SGM + SGM1 / SGN2	00646070			
	00046080			
	00046090			
RETURN	00046100			
END	00046110			

С

с с

с с

0000000000

С

с с ,

SUBROUTINE COTRAN (PXREL, PYREL, THETAR)	00046120	SUBROUTINE DISTFU (DPTH, OPTMEA, DAMAX, DISTR)	00046570
	00046130	C	00046580
	00046140	C ====================================	00046590
	00046150	C DISTFU	00046600
	00046160	C =========	00046610
	00046170		00046620
CALCULATION OF THE REAL BACKSCATTERING ANGLE	00046180	C EVALUATION OF THE DAMAGE DENSITY	00046630
=======================================	00046190		00046640
	JOC46200	C	00046650
	00046210	DIMENSION DAM(101)	00066660
LOGICAL ROTAT	00046220	COMMON /DAMG/ DAM	00046670
	ú 004 6230	IND = IFIX (DPTH / DPTNEA \neq 100.) / 2 + 1	00046680
COMMON /BVAL/ Q. WIDTH, BANGLE, ORIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PROP,	00046240	IF (IND .GT. 101) GCTC 10	00046690
1 FMV. FMSI, FMPART, FWHM. NUN. DEPHI, ZVALL, ZVAL2.	00046250	DISTR = DAM(IND) / DAMAX	00046700
2 COSPHI. SINPHI. FLI. FNI. RCTAT	00046260	BETURN	00046710
	00046270		0.0046720
	00046280		00046720
XBAR = COSPHI + PXRFI + SINPHI + PYRFI	00046290	BETIIN	00048750
YRAR = - SINDHI * PYRFI + COSCHI * PYRFI	00046300		00046740
DIAG = SORT (XRAR*XRAR + YRAR*YRAR + 1.0)	00046310		00048750
FI = YBAR / DIAG	00046320		
	00046320		
FN = 1 + 0 f DIMG	00046350		
ATTION - ARGUS (FLTFLI T FNTFNI)	00046340		
	00046350		
ENU	00046360		

	SUBDOUTINE STRUCT (A)	000//3/0			
r	SUBRUCTINE STRUCT (A)	00046760		xSCT21(4) = - ASQ2	00047350
č		60046770		XSCT21(5) = 4502	00047360
L A		00046780		YSCT21(1) = A2	00047370
Ĺ	STRUCT	00046790		YSCT21(2) = A2	00047380
C		00046800		YSCT21(3) = 0.	00047390
С		00046810		YSCT21(4) = - A2	00047400
С	STORAGE OF THE CRYSTALLOGRAPHIC STRUCTURE	00046820		YS(T21(5) = - A2	0.007410
С		00046830	c	$130121(7) = \mu_{L}$	00047410
C		00046840	C	X66 T 33/ 1) - 4600	00047420
C		00046850		ASU(22(1)) = ASU8	00047430
-	COMMON /SCAI/ XSCATI(6), XSCATI(6)	00046860		XSU122123 = 3. = ASU8	00047440
		00040880		XSC122(3) = ASO8	00047450
		00048670		YSCT22(1) = A2	JÛ047460
	CUMMUN /SCA21/ XSC121(5)+ YSC121(5)	00046880		YSCT22(2) = 0.	00047470
	CUMMUN /SCA22/ XSC122(3)+ YSC122(3)	00046890		YSCT22(3) = -A2	00047480
	COMMON /SCA23/ XSCT23[2], YSCT23[2]	03046900	С		00047490
	COMMON /SCA24/ XSCT24[3], YSCT24[3]	00046910		XSCT23(1) = - ASO4	00047500
	COMMON /SCA25/ XSCT25(4), YSCT25(4)	00046920		XSCT23(2) = - ASO4	00047510
	COMMON /SCA26/ XSCT26(3), YSCT26(3)	00046930		VS(T23(1) = A4	00047520
	COMMON /SCA27/ XSCT27(2), YSCT27(2)	00046940		$V((1)^2) = 44$	00047520
	COMMON /SCA28/ XSCT28(3) - YSCT28(3)	00046950	~	130123(2) = - 44	00047550
C		000000000	ι		00047540
ř		00040900		XSC124(I) = 3 + ASU8	06047550
ι.		00046970		XSCT24(2) = ASO8	00047560
	$AZ = A / Z \bullet$	00046980		XSCT24(3) = 3. * ASQ8	00047570
	A4 = A / 4.	00046990		YSCT24(1) = A2	00047580
	ASQ = A + SQRT (2.)	00C47000		YSCT24(2) = 0.	00047590
	ASQ2 = ASQ / 2.	00047010		YSCT24(3) = - A2	00047600
	ASO4 = ASO / 4.	00047020	C		0.047610
	ASQ8 = ASQ / 8.	00047030	•	XSCT25(1) = 0.	06347620
Ċ		00047040		YSCT25(2) = - ASO2	00047620
ċ		00047050		$x_{5}(x_{5}(x_{5})) = -x_{5}(x_{5})$	00047630
	YSCATI(1) = - 0.6	00047060			00047840
	A = A + A + A + A + A + A + A + A + A +	00047080		KSC125(4) = 0.	00047650
	A = A + A + A + A + A + A + A + A + A +	00047070		YSCT25(1) = A2	00047660
	$x_{SCATTOT} = - a_{4}$	00047080		YSCT25(2) = 0.	00047670
	XSCATI(4) = A4	00047090		YSCT25(3) = 0.	00047680
	xscat1(5) = -A2	00047100		YSCT25(4) = - A2	00047690
	XSCAT1(6) = A2	00047110	C		00047700
	YSCATI(1) = A2	00047120		XSCT26(1) = -3. + ASQ8	00047710
	YSCATI(2) = A2	00047130		XSCT26(2) = - ASOR	00047720
	YSCAT1(3) = -A2	00047140		X5CT26(3) = -3 + 4508	00047730
	$YSCATI(4) = - \Delta 2$	00047150		V(CT24(1) - A2	00047740
	YSCATI(5) = 0	00047160		$V_{2}^{(1)} = A_{2}^{(1)}$	20047740
	VSCATI(6) = 0	00047170		$f_{3}(120(2) = 0.$	00047750
~	15CATIL67 - 0.	00047190		+5(120(3) = -A2	00047760
ι.		00047180	C		00047770
	XSCATS(1) = -A2	00047190		XSCT27(1) = AS04	UUC47780
	XSCAT3(2) = -A2	00047200		XSCT27(2) = ASQ4	00047790
	xscat3(3) = A2	00047210		YSCT27(1) = A4	00047800
	XSCAT3(4) = A2	00047220		$YSCT27(2) = - \Delta4$	00047810
	xscat3(5) = 0.	00047230	с		00047820
	xscat3(6) = 0.	00047240		XSCT28(1) = - ASO8	00047830
	YSCAT3(1) = A4	00047250		XSCT28(2) = -3. + ASO8	00047840
	YSCAT3(2) = -A4	00047260		XSCT28(3) = - ASOR	00047850
	$YSCAT3(3) = \Delta 4$	00047270		VSCT2R(1) = A2	30047620
	VSCAT3(4) = - A4	00047280		$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	00047880
		00047290		TSUIZOUZI = U.	00047870
		00047290		$Y_{2}(128(3) = -A2$	00047880
-	TOLAIDIOI = - AZ	00047300	C		00047890
C		00047310	С		00047900
	XSCTZILLI = - ASQZ	00047320		RETURN	00047910
	XSCT21(2) = ASQ2	00047330		END	00047920
	XSCT21(3) = 0.	00047340			

- 124 --

	BLOCK DATA	00047930			
С		00047940			
С	~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~	00047950			
C.	STORAGE OF THE DAMAGE DEPTH PROFILE	00047960			
С	=======================================	00047970			
с		CU047980			
с		0004 7990			
Ċ		00048000			
	COMMON /DAMG/ DAM(101)	00048010			
	DATA DAM/.5750.7529.8561.8847.9013.5189.9377.9583.9814.	00048020			
	11.010.1.052.1.113.1.186.1.254.1.307.1.358.1.416.1.485.1.565.1.656	6.00048030			
	21.756.1.863.1.975.2.087.2.197.2.300.2.396.2.483.2.566.2.630.2.650	0.00048040			
	32-743-2-786-2-821-2-846-2-862-2-867-2-863-2-848-2-823-2-789-2-747	7-00648050			
	42-697-2-640-2-577-2-509-2-436-2-359-2-279-2-197-2-113-2-028-1-941	1-00048060			
	51, 855, 1, 768, 1, 682, 1, 596, 1, 512, 1, 428, 1, 346, 1, 266, 1, 188, 1, 111, 1, 038	8-00048070			
	6.9662	7.00048080			
	7 3715, 3351, 3015, 2704, 2419, 2158, 1920, 1703, 1506, 1329, 1169	9-00048090			
		00048110			
r	7.02.004.01104.01434.01217	00040120			
C	END	00048120			
	END	00040130			

- 125 -

LITERATUR

- /1/ J. Lindhard; Mat. Fys. Medd. 34, no. 14 (1965)
- /2/ L.R. Testardi, J.H. Wernick and W.A. Royer; Sol. State Comm. 15, 1 (1974)
- /3/ A.R. Sweedler, D. Cox, D.G. Schweitzer and G.W. Webb; IEEE Transactions on Magnetics, Vol. MAG-11, no. 2 (1975), p. 163
- /4/ J.M. Poate, R.C. Dynes, L.R. Testardi and R.H. Hammond; Phys. Rev. Lett.37, 1308 (1976)
- /5/ B. Besslein, G. Ischenko, S. Klaumünzer, P. Müller, H. Neumüller, K.Schmelz and H. Adrian; Phys. Lett. 53A, 49 (1975)
- /6/ O. Meyer, H. Mann and E. Phrilingos in Application of Ion Beams to Metals;
 Ed. S.T. Picraux, E.P. EerNisse and F.L. Vock, Plenum Press N.Y.(1974)p.15
- /7/ P. Horsch and H. Rietschel; Z. Phys. B27, 153 (1977)
- /8/ O. Meyer; J. Nucl. Mat. 73, 183 (1978)
- /9/ D.S. Gemmell and R.L. Mikkelsen; Phys. Rev. B6, 1613 (1972)
- /10/ G.R. Piercy, F. Brown, J.A. Davies and M.McCargo; Phys. Rev. Lett. 10, 399 (1963)
- /11/ M.T. Robinson and O.S. Oen; App1. Phys. Lett. 2, 30 (1963); Phys. Rev. 132, 2385 (1963)
- /12/ H.O. Lutz and R. Sizmann; Phys. Lett. 5, 113 (1963)
- /13/ Ion Beam Handbook for Material Analysis; Ed. J.W. Mayer and E. Rimini, Academic Press 1977
- /14/ D.S. Gemmel; Rev. Mod. Phys. 46, 129 (1974)
- /15/ T. Mayer Kuckuk: Physik der Atomkerne; G. Teubner, Stuttgart 1974
- /16/ O. Meyer; Nucl. Instr. and Meth. 149, 377 (1978)
- /17/ J.M. Lombaard, pers. Mitteilung
- /18/ K.G. Langguth: Herstellung von supraleitendem Vanadiumkarbid durch Ionenimplantation; KFK 2476
- /19/ <u>Handbook of Chemistry and Physics</u>; 50th Edition (1969-1970) Ed. R.C. Weast, Cleveland, Ohio: Chemical Rubber Co.

- /20/ C. Erginsoy; Phys. Rev. Lett. 15, 360 (1965)
- /21/ International Tables for X-Ray-Crystallography; Vol. I, p. 334; Birmingham, Kynoch Press (1968)
- /22/ H.D. Carstanjen: Bestimmung der Zwischengitterpositionen von Deuterium in Niob nach der Channeling-Methode; Dissertation Universität München 1973
- /23/ H. Goldstein: <u>Classical Mechanics</u>; Cambridge Mass., Addison-Wesley Publ. Comp. Inc. 1956
- /24/ Chr. Lehmann and G. Leibfried; Z. Phys. 172, 465 (1963)
- /25/ G. Moliere; Z. Naturforsch. 2A, 142 (1947)
- /26/ M. Abramowitz and I.A. Segun: <u>Handbook of Mathematical Functions</u>, Dover Publ. New York 1968
- /27/ J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott; Mat. Fys. Medd. 33, no.14(1963)
- /28/ J.F. Ziegler and W.K. Chu; Atomic Data and Nuclear Data Tables 13, 463 (1974)
- /29/ D.van Vliet; Harwell Report AERE-R 6395 (1970)
- /30/ M.S. Livingston and H.A. Bethe; Rev. Mod. Phys. 9, 245 (1937)
- /31/ W.K. Chu and D. Powers; Phys. Rev. <u>B</u>4, 10 (1971)
- /32/ C. Kittel: <u>Einführung in die Festkörperphysik</u>; R. Oldenbourg, München, Wien 1973
- /33/ L.R. Testardi; Verhandlungen DPG (VI) 13, 339 (1978)
- /34/ W.K. Chu: Energy Loss of Charged Particles; IBM Technical Report TR 22.2078
- /35/ P. Ward, J.S. Forster, H.R. Andrews, F.V. Mitchell, G.C. Ball, W.G. Davies and G.J. Costa; AECL-5313 Chalk River, Canada 1976
- /36/ W. Ludwig: <u>Festkörperphysik I, II</u>; Akademische Verlagsgesellschaft Frankfurt/Main 1970
- /37/ H. Winter, pers. Mitteilung
- /38/ J.L. Staudenmann, P. Coppens and J. Muller; Sol. State Comm. 19, 29 (1976)
- /39/ D.W.J. Cruickshank; Acta Cryst. 9, 747 (1956)
- /40/ G. Linker, pers. Mitteilung
- /41/ U. Andersen and E. Uggerhøj; Can. J. Phys. <u>46</u>, 517 (1968)
- /42/ D. van Vliet; Rad. Eff. 10, 137 (1971)

- /43/ L.R. Testardi; J.M. Poate, W. Weber, W.M. Augustyniak and J.H. Barrett; Phys. Rev. Lett. 39, 716 (1977)
- /44/ P. Schweiss, B. Renker, E. Schneider and W. Reichardt in Superconductivity in d- and f-Band Metals, 2nd Rochester Conference, ed. D.M. Douglass, Plenum Press, N.Y. 1976, p. 189
- /45/ P. Schweiss, pers. Mitteilung
- /46/ J.H. Barrett, Phys. Rev. B3, 1527 (1971)
- /47/ O. Meyer and B. Seeber; Sol. State Comm. 22, 603 (1977)
- /48/ B. Baeri, S.U. Campisano, G. Ciavola, G. Foti and E. Rimini; Nucl. Inst. and Meth. 132, 237 (1976)
- /49/ M. Conrad: Der Einfluß von Sauerstoff auf Zusammensetzung und Supraleitung aufgedampfter Nb₃Ge-Schichten; Diplomarbeit Universität Karlsruhe, Januar 1978
- /50/ D.K. Brice; Sandia Laboratories Research Report SAND75-0622, Juli 1977
- /51/ I.N. Bronstein and K.A. Semendjajew: Taschenbuch der Mathematik;
 13. Auflage; Harri Deutsch, Zürich und Frankfurt/Main (1973)

Die vorliegende Arbeit entstand am Institut für Angewandte Kernphysik I des Kernforschungszentrums Karlsruhe. Allen Institutsmitgliedern, die mir in vielfältiger Weise ihre Hilfsbereitschaft bewiesen haben, möchte ich herzlich danken.

Mein Dank gilt besonders den Herren Professoren H. Rietschel und W. Buckel für ihre Bereitschaft, diese Arbeit kritisch zu beurteilen.

Herrn Dr. O. Meyer schulde ich Dank für die Möglichkeit, in seiner Gruppe tätig zu sein, sowie für seine tatkräftige Zusammenarbeit beim Vergleich der Monte-Carlo-Rechnungen mit experimentellen Ergebnissen.

Meinen aufrichtigen Dank möchte ich Herrn Dr. H.D. Carstanjen von der Universität München aussprechen. Ohne die Unterstützung durch seine Erfahrung auf dem Gebiet des Channelling und seine aktive Mithilfe beim Aufbau des Programms wäre die Durchführung dieser Arbeit in der jetzigen Form nicht möglich gewesen.

Ein ganz besonders herzliches Dankeschön sei den Herren Dipl.-Phys. G. Linker und Dr. P. Ziemann gesagt für ihre stete Bereitschaft zur Diskussion. Ihr physikalisches Gespür half manche der auf dem gewählten Kurs angetroffenen Klippen zu umschiffen.

Herrn Dr. H. Winter möchte ich danken für seine spontane Mithilfe beim Lösen theoretischer Probleme.

Mein Dank gilt auch Herrn Dr. E.L. Haase für die Initiierung meiner Beschäftigung mit dem Channelling-Phänomen sowie für seine Unterstützung bei Experimenten.

Nicht zuletzt möchte ich Frau J. Steigleder, Frau B. Lingenfelder und Herrn H. John danken, die sich um das ansprechende Äußere dieser Arbeit bemüht haben.