

KfK 2638

Mai 1978

Monte-Carlo-Rechnungen zur Simulation von Channelling- Experimenten an V_3Si -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_3Si -EINKRISTALLEN*

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 V_3Si 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 $6 \cdot 10^{16} \text{ } ^4He^+/\text{cm}^2$ der Energie 300 keV ließen sich im Durchschußbereich durch normalverteilte statische Verlagerungen der V-Atome von im Mittel 0.05 \AA erklären. Die laterale Defektstruktur nach Bestrahlung mit einer Fluenz von $1.5 \cdot 10^{16} \text{ } ^4He^+/\text{cm}^2$ der Energie 50 keV ließ sich am Ende der Reichweite durch ein Rechteckprofil mit 50 % Verlagerungen der V-Atome von maximal 0.5 \AA simulieren.

MONTE-CARLO-CALCULATIONS FOR THE SIMULATION OF CHANNELLING-EXPERIMENTS WITH V_3Si -SINGLE-CRYSTALS

ABSTRACT

The results of channelling-investigations on single-crystals of Al5-type structure, like e.g. V_3Si , 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 energy-loss 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 $6 \cdot 10^{16} \text{ } ^4He^+/\text{cm}^2$ 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 $1.5 \cdot 10^{16} \text{ } ^4He^+/\text{cm}^2$ 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	1
2. BESCHREIBUNG DER EXPERIMENTELLEN VERFAHRENSWEISE.....	2
2.1 Die Channelling-Meßmethode.....	2
2.1.1 Allgemeine Beschreibung des Channelling-Effekts.....	2
2.1.2 Anwendung des Channelling-Effekts bei Rückstreuexperimenten.	5
2.1.3 Anwendung des Channelling-Effekts bei Kernreaktionen.....	10
2.2 Meßapparatur.....	11
3. THEORETISCHE MODELLE ZUR BESCHREIBUNG DES CHANNELLING- EFFEKTS.....	12
3.1 Das Kontinuumsmodell.....	12
3.1.1 Allgemeine Grundlagen.....	12
3.1.2 Beschränkungen des Modells im Vergleich mit dem Experiment.	18
3.2 Das Binäre-Stoß-Modell.....	18
3.2.1 Allgemeine Grundlagen.....	18
3.2.2 Verwirklichung durch die Monte-Carlo-Methode.....	19
3.2.3 Berechnung der Trajektorien eingeschossener Teilchen in V_3Si .	21
3.2.3.1 Beschreibung der Funktion der Streueinheit.....	21
3.2.3.2 Berechnung des Ablenkwinkels bei einem binären Stoß	24
3.2.3.3 Berechnung des Energieverlusts.....	27
3.2.3.4 Thermische Schwingungen der Atome.....	31
3.2.4 Berechnung der Rückstreausbeute.....	34
3.2.4.1 Theoretischer Ansatz.....	34
3.2.4.2 Durchführung in der Rechnung.....	35
4. VERGLEICH DER MODELLRECHNUNGEN FÜR DEN REALEN KRISTALL MIT DEM EXPERIMENT	36
4.1 Test des Programms für Vanadium- und Molybdän-Einkristalle.....	36
4.2 Diskussion der Ergebnisse für V_3Si	38
4.2.1 Untersuchung der Fluß- und Energieverteilungen.....	38
4.2.2 Vergleich der tiefenabhängigen Parameter χ_{\min} und $\psi_{1/2}$ für das V-Untergitter.....	41
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.....	51

5.	VERGLEICH DER MODELLRECHNUNGEN FÜR DEN GESCHÄDIGTEN KRISTALL MIT DEM EXPERIMENT.....	54
5.1	Untersuchung der Schädigung mit 300 keV- $^4\text{He}^+$ -Teilchen im Durchschußbereich.....	54
5.2	Untersuchung der Schädigung mit 50 keV- $^4\text{He}^+$ -Teilchen.....	56
5.2.1	Einbau eines Schädigungstiefenprofils.....	56
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 Rückstreuerausbeute.....	63
B	Umrechnung der Eingabewinkel ϕ und θ in die Koordinaten des Kristallkoordinatensystems.....	66
C	Berechnung des Rückstreu winkels zwischen momentaner Teilchenbahnrichtung 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.....	126

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_3Si ist insbesondere die Untersuchung von Defektstrukturen von großem Interesse, da diese Verbindung einen Vertreter der für die Anwendung interessanten Klasse der Hochtemperatursupraleiter mit A15-Struktur darstellt, in denen die bisher höchsten Übergangstemperaturen zur Supraleitung, T_c , gemessen wurden (z.B. Nb_3Ge 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 V_3Si 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 /8/, /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_3Si 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 Eindringtiefe-messungen und -Rechnungen an Einkristallen mit langsamen schweren Ionen /10 - 12/. Es ergaben sich bei Einschluß 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 Einfallrichtung besteht.

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

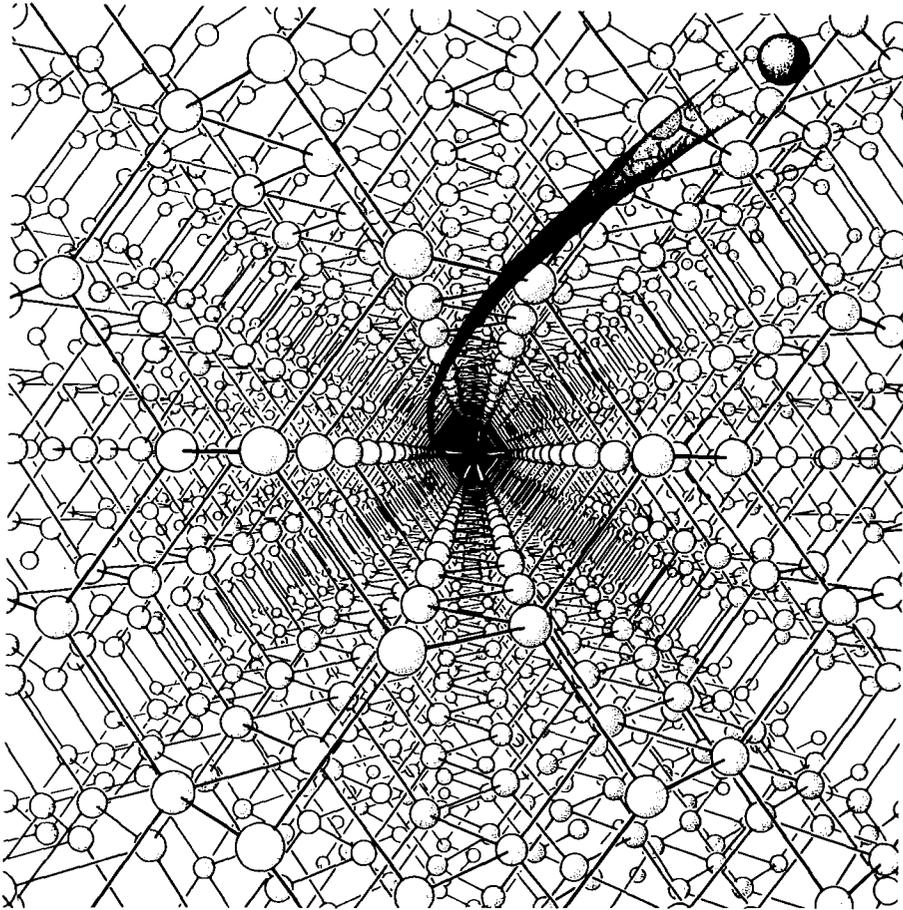


Abb. 1 Trajektorie eines geführten Teilchens in einer Diamantstruktur in $[110]$.

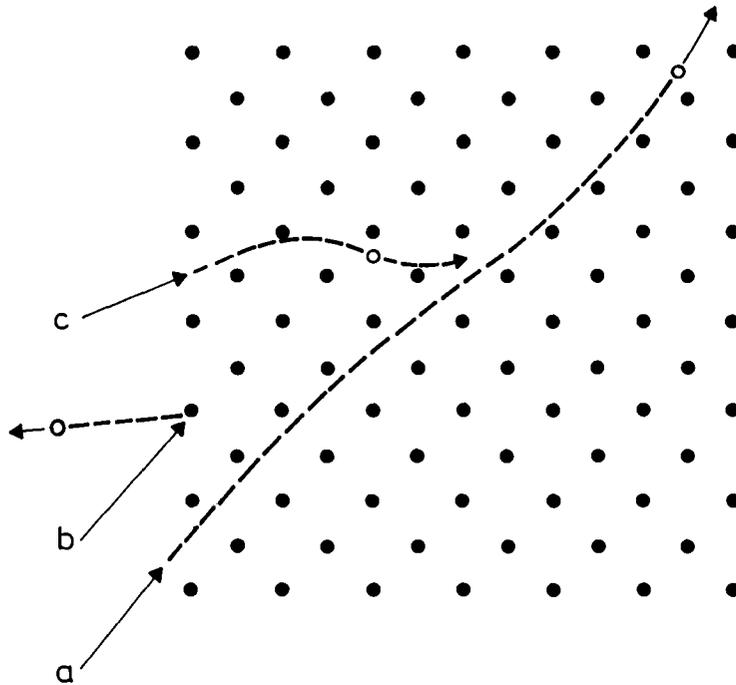


Abb. 2 Trajektorien geladener Teilchen in einem zweidimensionalen Kristall in Abhängigkeit des Einschubwinkels und des Eintrittsorts: a: geführtes Teilchen, b: direkt rückgestreutes Teilchen, c: in Random-Richtung laufendes Teilchen.

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:

$$E_{\perp} = E \sin^2 \psi \quad (2.1)$$

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, so daß als Stabilitätsbedingung für das Auftreten von Channelling sich ergibt:

$$\psi < \psi_c = \left(\frac{E_c}{E}\right)^{1/2}, \text{ für kleine } \psi. \quad (2.2)$$

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

$$E_{\perp} = E \sin^2 \psi + E_o(x_o, y_o) \quad (2.3)$$

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

$$\psi < \psi_c = \left(\frac{E_c - E_o(x_o, y_o)}{E}\right)^{1/2} \quad (2.4)$$

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 Rückstreuxperimenten

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 $E(t = 0) = k_{M_2} \cdot E_0$ zurückgestreut, wobei E_0 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:

$$k_{M_2} = \left(\frac{M_1 \cos \theta_L + \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta_L}}{M_1 + M_2} \right)^2 \quad (2.5)$$

- θ_L = Streuwinkel im Laborsystem
- M_1 = Masse des einfallenden Ions
- M_2 = 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:

$$E(t) = k_{M_2} \left[\underbrace{E_0 - \int_0^t \frac{\cos \theta_1}{dx} (E) dx}_{\text{Energie vor dem Rückstreuprozess}} \right] - \underbrace{\int_0^t \frac{\cos \theta_2}{dx} (E) dx}_{\text{Energieverlust nach dem Rückstreuprozess beim Herauslaufen}} \quad (2.6)$$

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.
- E_0 = 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 Rückstreuxperimenten wurden 2 MeV- $^4\text{He}^+$ -Teilchen auf V_3Si -Einkristalle geschossen. Unter diesen Bedingungen kann die für den Rückstreuprozess verantwortliche Wechselwirkung aus einem nicht abge-

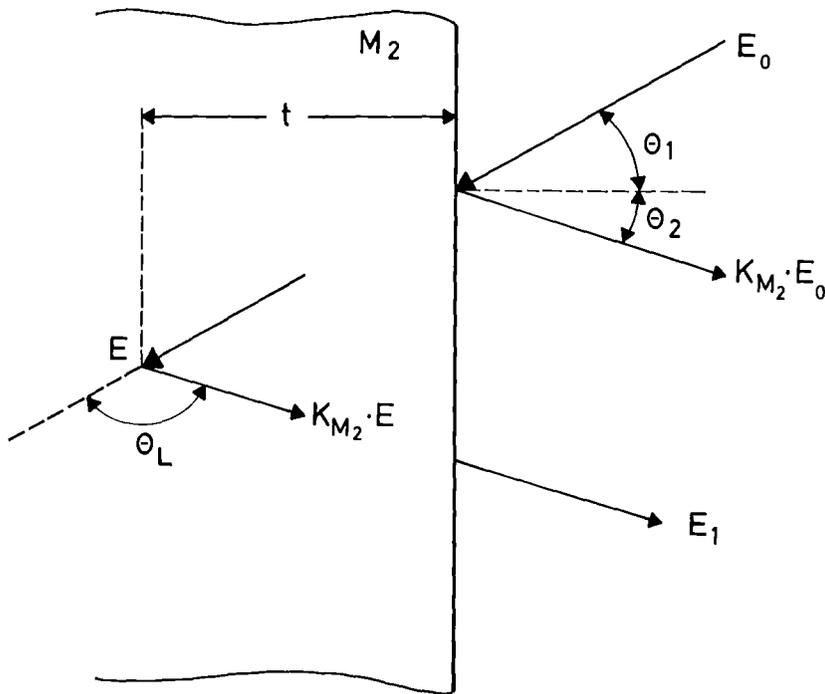


Abb. 3 Rückstreuanalyse in Oberflächennäherung. E_1 ist die Energie der in einer Tiefe t rückgestreuten Teilchen als Funktion des Winkels θ_1 zwischen einfallendem Strahl und Oberflächennormalen und als Funktion des Rückstreuwinkels θ_L .

$$\theta_L = 180^\circ - \theta_1 - \theta_2$$

$$E = E_0 - \frac{t}{\cos \theta_1} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0}$$

$$E_1 = k_{M_2} \cdot E - \frac{t}{\cos \theta_2} \cdot \frac{dE}{dx} \Big|_{k_{M_2} \cdot E_0}$$

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

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

e = Elementarladung

E = Energie am Streuort

θ_L = Streuwinkel im Laborsystem

Z_1 = Kernladungszahl des einfallenden Teilchens

Z_2 = Kernladungszahl der Targetatome

Für den gemittelten Streuquerschnitt, σ , ergibt sich:

$$\sigma = \frac{1}{\bar{\Omega}} \int_{\bar{\Omega}} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (2.8)$$

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

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

so ergibt sich in der Oberflächennäherung die Anzahl von rückgestreuten Teilchen pro Energieintervall δE_1 bei senkrechtem Einfall der Teilchen zu:

$$H = Q \cdot \sigma(E_0) \cdot \bar{\Omega} \cdot N \cdot \delta x \quad (2.9)$$

Q = Anzahl der einfallenden Teilchen

N = atomare Dichte des Targets

δx = der Energieeichung δE_1 entsprechende Targetdicke, verknüpft über Gleichung (2.6).

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

$$H = Q \cdot \sigma(E_0) \cdot \bar{\Omega} \cdot \delta E_1 / [\varepsilon_0] \quad (2.10)$$

$$[\varepsilon_0] = k_{M_2} \cdot \frac{1}{N} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} + \frac{1}{|\cos \theta_L|} \cdot \frac{1}{N} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{k_{M_2} E_0}$$

δE_1 = Energieeichung

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

$$H(E_1) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \bar{\Omega} \cdot \frac{\delta(kE)}{[\varepsilon(E)]} \quad (2.11)$$

$$\delta(kE) \approx \frac{\varepsilon(kE)}{\varepsilon(E_1)} \cdot \delta E_1 \quad ; \quad (k \equiv k_{M_2})$$

E_1 = Energie im Detektor

E = Energie am Streuort

$$\varepsilon(E_1) = \frac{1}{N} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{(E_1)}$$

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

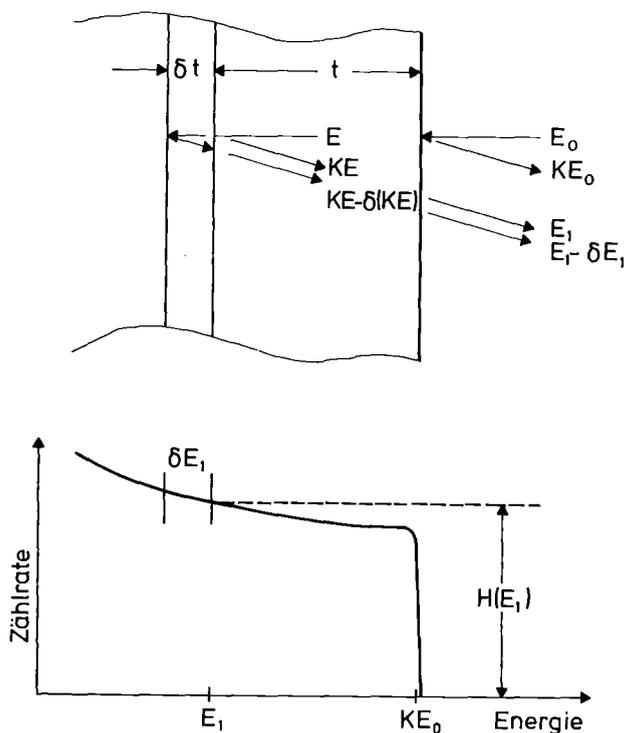


Abb. 4 Rückstreausbeute $H(E_1)$ als Funktion der Tiefe t für ein einatomares Target. E_0 ist die Einschubenergie und δE_1 die Energieeichung.

$$H(E_1) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \bar{\Omega} \cdot \frac{\delta(KE)_1}{[\epsilon(E)]}$$

$$H(E_1) = Q \cdot \sigma(E) \cdot \bar{\Omega} \cdot \frac{\delta E_1}{[\epsilon(E)]} \cdot \frac{\epsilon(kE)}{\epsilon(E_1)} \quad (2.12)$$

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 Rückstreauspektren, 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 Rückstreauxperimente an amorphen Festkörpern oder einen in statistischer Orientierung auf einen Einkristall fallenden Teilchenstrahl gegolten. Sind dagegen die eingeschossenen Ionen parallel einer niedrigindizierten Kristallrichtung ausgerichtet und 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 Rückstreausbeute 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 wird immer mehr ausgeschmiert, die Ortsverteilung der Ionen nähert sich der Gleichverteilung wie bei Random-Einfall und als Folge hiervon nimmt die Rückstreurrate zu, wie in Abb.5 gezeigt ist.

Man setzt in das Energiespektrum Fenster, registriert 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

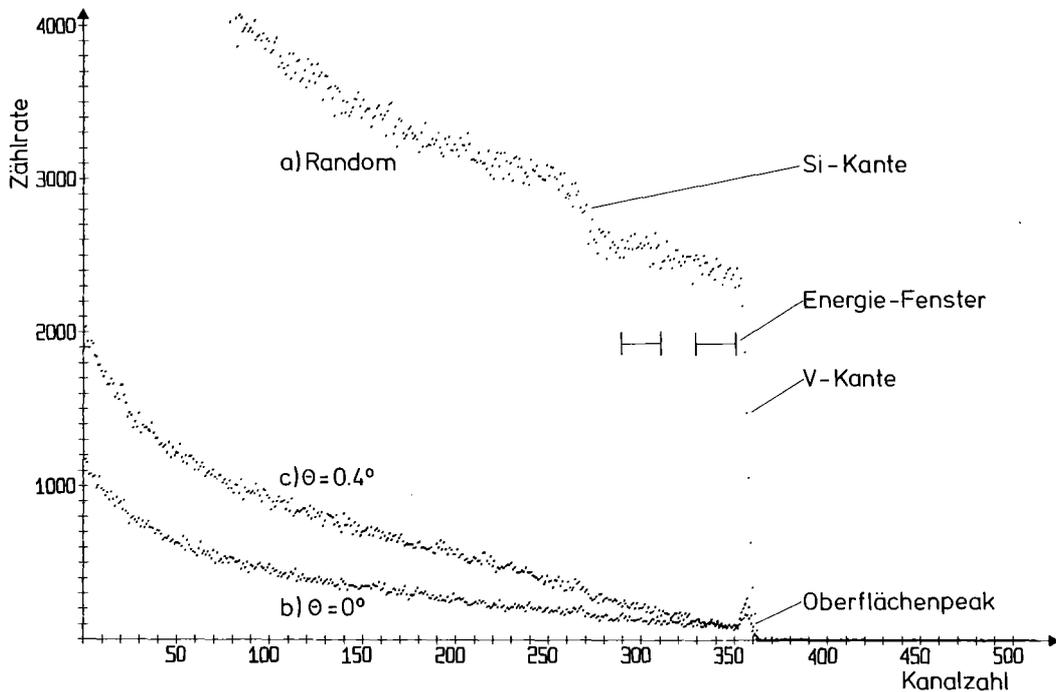


Abb. 5 Rückstreuenspektren von 2 MeV- $^4\text{He}^+$ -Teilchen an einem V_3Si -Einkristall. Dargestellt sind Spektren bei willkürlicher Orientierung (Random) und bei verschiedenen Winkeln θ zwischen Teilchenstrahlrichtung und Kanalachse ([100]-Richtung). Ebenfalls eingezeichnet sind die zur Aufnahme der winkelabhängigen Ausbeutekurven verwendeten Fenster.

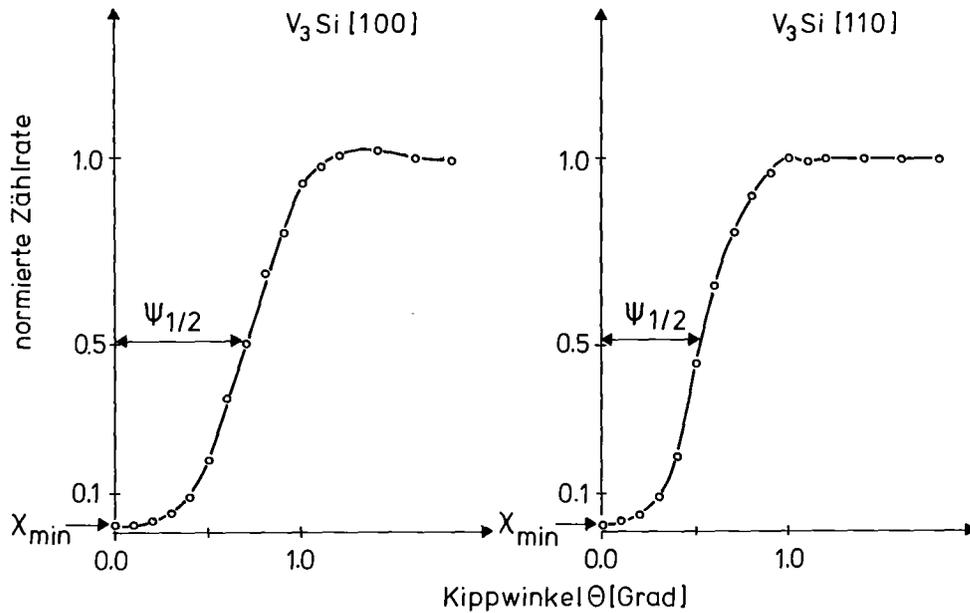


Abb. 6 Winkelabhängige Ausbeutekurven in zwei Kristallrichtungen. Die minimale Ausbeute, χ_{\min} , bei $\theta = 0^\circ$ und die Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ sind jeweils eingezeichnet.

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_3Si 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 Wirkungsquer-

schnitte 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_3Si /16/ wurde die $^{28}Si(d,p_{10})^{29}Si$ -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.

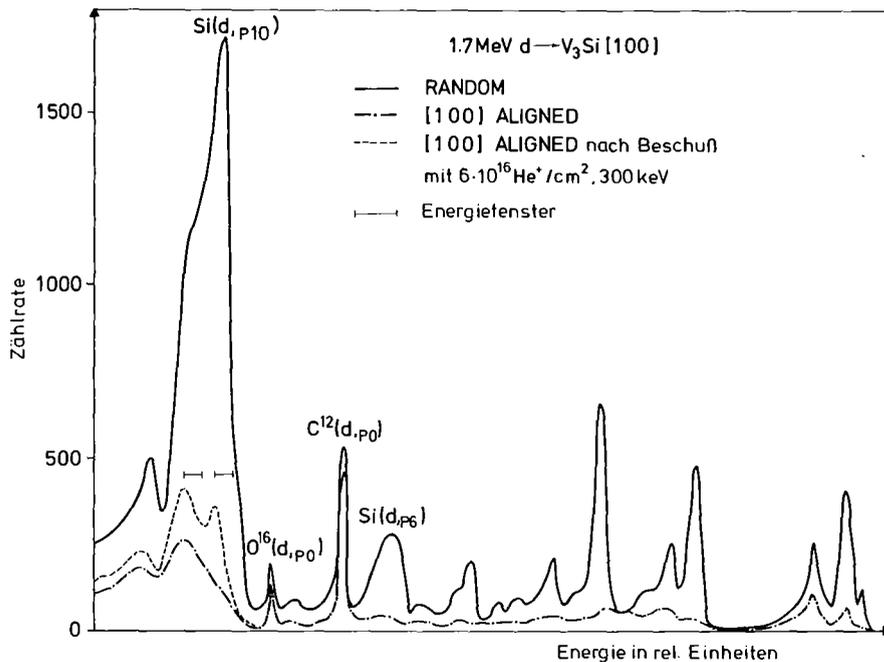


Abb. 7 Kernreaktionsausbeute beim Beschuß von V_3Si mit 1.7 MeV-Deuteronen. Eingezeichnet sind Spektren bei willkürlicher Orientierung (Random) und bei Einschuß in [100] vor und nach Bestrahlung mit $6 \cdot 10^{16} He^+ / cm^2$.

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 0.01° -Schritten erfolgte. Das mechanische Spiel des Goniometergetriebes

beträgt etwa 0.02° . Eine ausführliche Beschreibung der Rückstreu- und Channelling-Apparatur ist bereits in /18/ gegeben worden.

Die Rückstremessungen wurden mit $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen durchgeführt. Der Fehler in der Bestimmung der Energie liegt bei $\pm 5 \text{ keV}$, die Konstanz der Beschleunigungsspannung beträgt $\pm 2 \text{ kV}$. Der Strahlquerschnitt auf der Probe beträgt 1 mm^2 , 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 $2 \cdot 10^{-7} \text{ Cb}$, die gesamte Ladung pro Rückstreuungsspektrum war 10^{-5} Cb . Der Nachweis der unter einem Winkel von 165° rückgestreuten $^4\text{He}^+$ -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 $1700 \text{ keV-Deuteronen}$ gearbeitet. Zum besseren Nachweis der als Reaktionsprodukt entstehenden Protonen wurde vor den Detektor eine $30 \mu\text{m-Hostafan-Folie}$ 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 /1/ 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 $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -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 berechnen zu:

$$\tan \Theta = \frac{M_2 \sin \bar{\phi}}{M_1 + M_2 \cos \bar{\phi}} \quad (3.1)$$

Θ = Streuwinkel im Laborsystem

$\bar{\phi}$ = Streuwinkel im Schwerpunktsystem

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

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:

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

v = Geschwindigkeit des Ions

s = Stoßparameter

$V(r)$ = Atom-Ion-Potential im Abstand r

Nach /1/ kann bei 2 MeV- ${}^4\text{He}^+$ -Teilchen auf $V_3\text{Si}$ 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:

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

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:

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

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

$$a = a_0 \cdot 0.8853 \cdot Z_2^{-1/3} \quad (3.5)$$

gilt für $V(R)$:

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

$\phi_0\left(\frac{R}{a}\right)$ = Thomas-Fermi-Abschirmfunktion eines isolierten Atoms /1/.

R = Abstand Streuzentrum-Ion

Setzt man speziell für ϕ_0 die Lindhard-Näherungsfunktion:

$$\phi_0\left(\frac{R}{a}\right) = 1 - \left[1 + \left(C \frac{a}{R}\right)^2\right]^{-1/2}$$

$$C = \sqrt{3}$$

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

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d_r} \xi\left(\frac{R}{a}\right) \quad (3.7)$$

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

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

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

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

$$\tilde{\psi} = \frac{C a}{d\sqrt{2}} \cdot \hat{\psi}^{1/2} \quad (3.9)$$

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 V_3Si , projiziert in $[100]$ und $[110]$.

Am Beispiel von $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen in V_3Si 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:

$$\hat{E} = 280 \text{ eV}$$

$$\hat{\psi} = 0.96^\circ < \frac{a}{d_r} = 4.0^\circ$$

mit $a = 0.164 \text{ \AA}$
 $d_r = 2.36 \text{ \AA}$ (nach /19/).

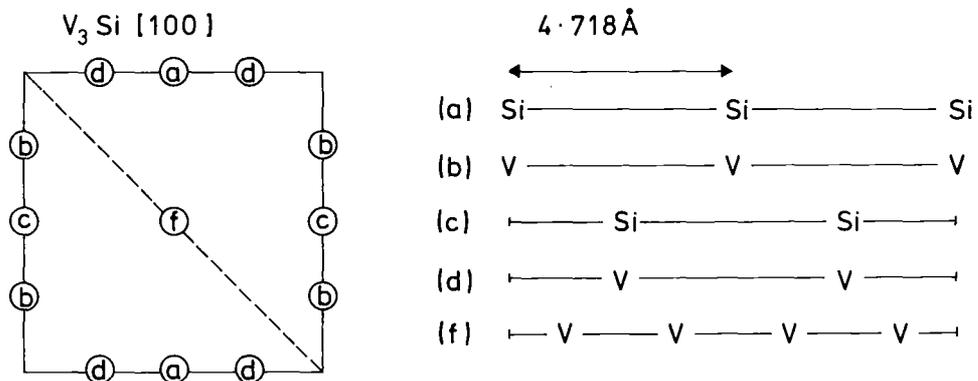
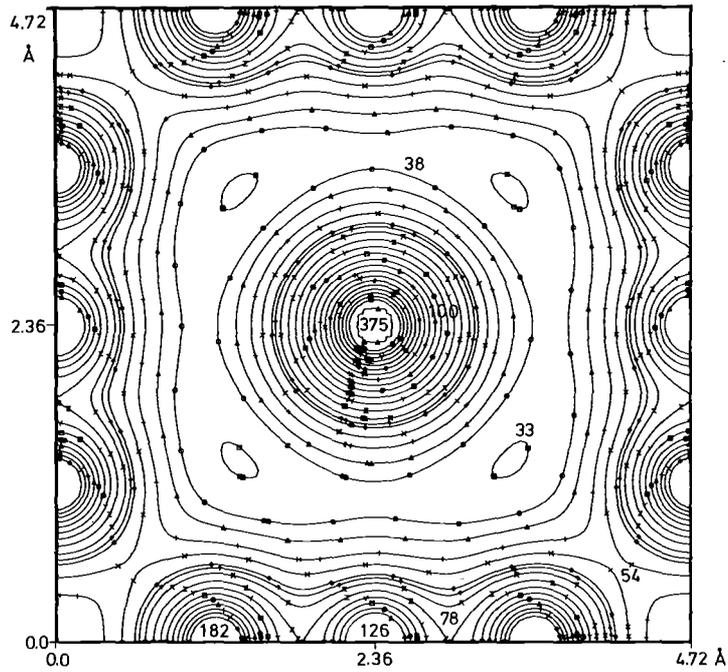


Abb. 8a Kontinuumspotential in $[100]$. Es wurde die Näherung der Molière'schen Abschirmfunktion verwendet. Die Potentialwerte sind in eV angegeben.

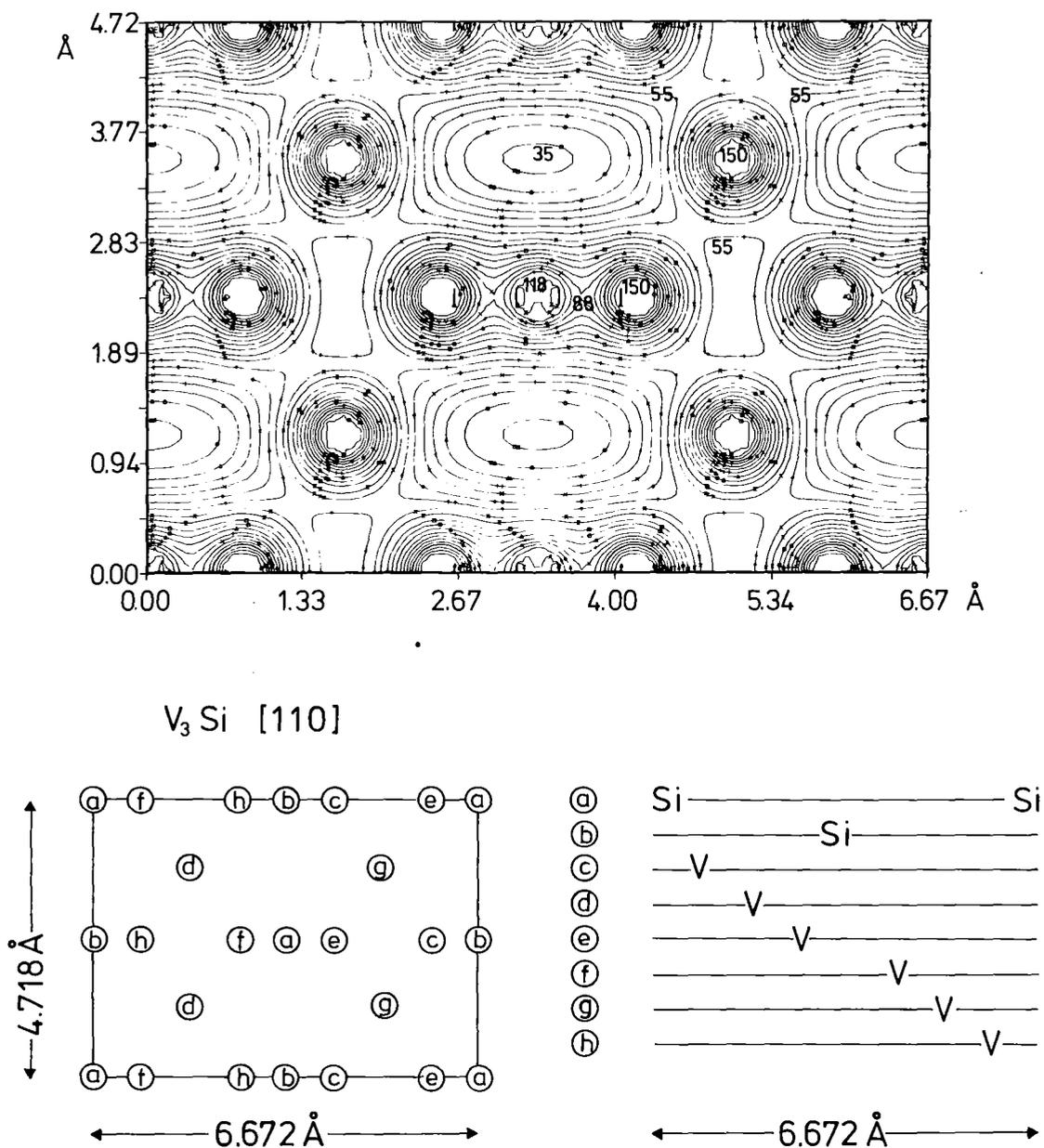


Abb. 8b Kontinuumspotential in [110]. Es wurde die Näherung der Molière'schen Abschirmfunktion verwendet. Die Potentialwerte sind in eV angegeben.

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 $\bar{\psi} = 2 \cdot \hat{\psi} = 1.92^\circ$ an, so entspricht das einer Querenergie von $\bar{E} = 2246$ eV. Der minimale Stoßparameter, den ein Teilchen mit dieser Querenergie in einem Kontinuumspotential nach (3.7) haben kann, beträgt 0.005 \AA .

Betrachtet man die Potentiallinien in Abb.8a,8b, so kann man daraus ablesen, wo die sogenannten Kanäle verlaufen. In [100] verläuft eine der für V_3Si 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 $E_H = 54$ eV. Dazu gehört ein Winkel ψ_H zwischen Teilchenbahn und Atomkette von $\psi_H = 0.3^\circ$. Dieser Effekt wird als Hyperchannelling bezeichnet.

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

Lindhard gibt für χ_{\min} die Formel:

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

N = Dichte der Targetatome

u_2 = thermische Schwingungsamplitude senkrecht zur Kette

an /1/, was sich aus einer Abschätzung der effektiven Trefferfläche für die eingeschossenen Teilchen an der Oberfläche ergibt.

Für V_3Si findet man für [100] mit:

$$N = 7.61 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

$$u_2 = \sqrt{2} \cdot u_1 = \sqrt{2} \cdot 0.073 \text{ \AA} = 0.103 \text{ \AA}$$

u_1 = eindimensionale thermische Schwingungsamplitude

den Wert $\chi_{\min} = 0.021$, wobei wieder nur die Wechselwirkung der $^4\text{He}^+$ -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 Eintrittskordinaten 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 V_3Si 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 zwei Winkel 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.

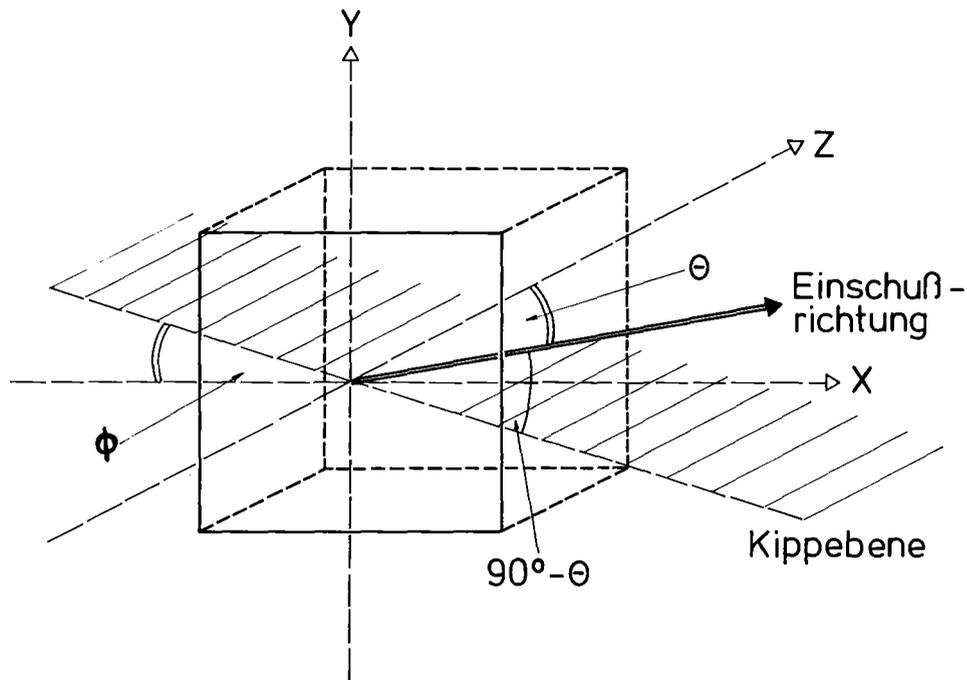


Abb. 9 Bedeutung der Einschußwinkel ϕ und θ . ϕ stellt die Neigung der Kippebene gegen die xz -Ebene dar, θ den Winkel zwischen Einschußrichtung und Kanalachse.

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 Eintrittskordinaten 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 Gesamtrückstreupektrum aufsummiert.

3.2.3 Berechnung der Trajektorien eingeschossener Teilchen in V_3Si

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 Programmiersprache 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 $P4_2/m\bar{3}2/n$ festgelegt. In diesen Verbindungen der Form A_3B 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 ${}^4He^+$ -Teilchen in V_3Si 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 ($d = 4.718 \text{ \AA}$ für V_3Si /19/).

Für $[110]$ wurde ein Parallelepipiped 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

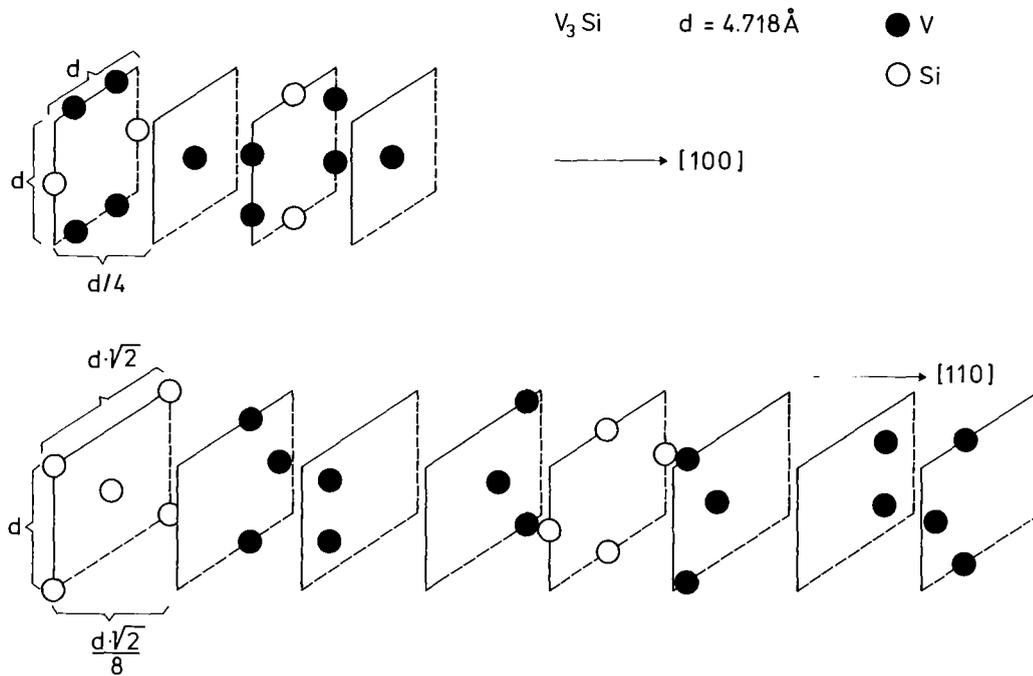


Abb. 10 Unterteilung der Streuzellen für [100] und [110] in einzelne Atomebenen.

Ebene gestreut und daraus nach Ermittlung des Streuwinkels und 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}_0 mit dem Impuls \vec{p}_0 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}_0 und \vec{x}_0 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}_0 und der z-Achse:

$$\Delta\vec{p} \approx |\Delta\vec{p}| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \approx \theta \cdot |\vec{p}_0| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \quad (3.11)$$

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

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_0 + \Delta\vec{p} = \vec{p}_0 + \theta \cdot |\vec{p}_0| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \quad (3.12)$$

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

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \frac{d}{4} \cdot \frac{\vec{p}_1}{p_{0z}} = \vec{x}_0 + \frac{d}{4} \left(\frac{\vec{p}_0}{p_{0z}} + \frac{|\vec{p}_0|}{p_{0z}} \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \cdot \theta \right) \quad (3.13)$$

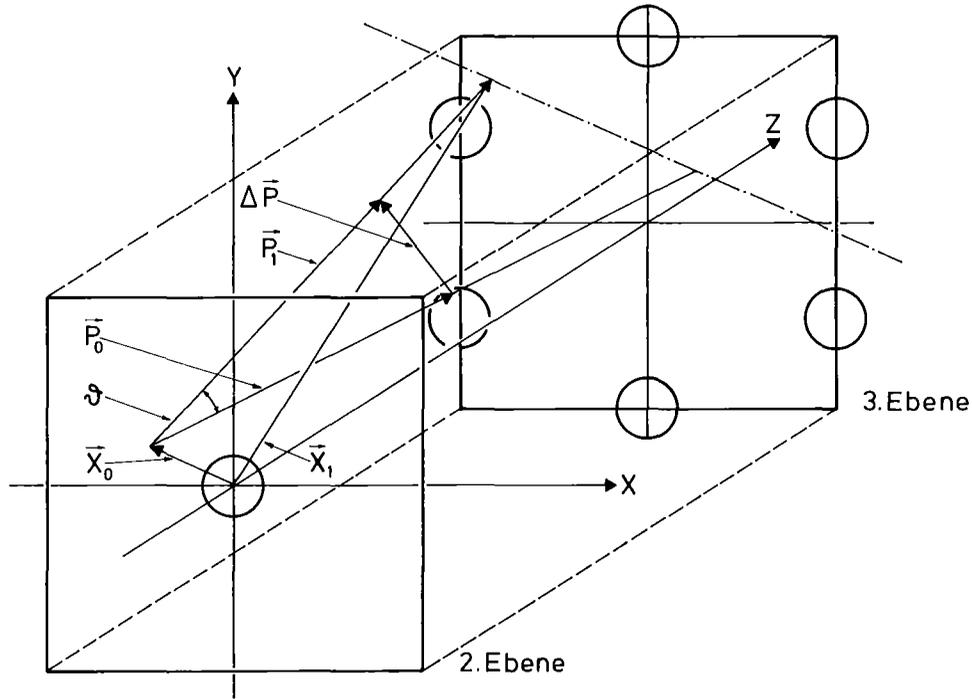


Abb. 11 Geometrie des Streumechanismus beim Stoß eines einfallenden Teilchens mit einem Gitteratom. Es wurden die 2. und 3. Atomebene der [100]-Streuzelle dargestellt.

In der erwähnten Näherung gilt für p_{oz} : $p_o \approx |\vec{p}_o| \approx |\vec{p}_1|$ und für den Stoßparameter s : $s \approx |\vec{x}_o|$. Man kann jetzt noch relative Impulse einführen,

$$p_x^{rel} = \frac{p_x}{|\vec{p}|} \quad \text{und} \quad p_y^{rel} = \frac{p_y}{|\vec{p}|} \quad \text{und erhält damit:}$$

$$p_{1x}^{rel} = p_{ox}^{rel} + \theta \cdot \frac{x_o}{s} \quad (3.14)$$

$$p_{1y}^{rel} = p_{oy}^{rel} + \theta \cdot \frac{y_o}{s} \quad (3.15)$$

$$x_1 = x_o + p_{1x}^{rel} \cdot \frac{d}{4} \quad (3.16)$$

$$y_1 = y_o + p_{1y}^{rel} \cdot \frac{d}{4} \quad (3.17)$$

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

$$p_{1x}^{rel} = p_{ox}^{rel} + \theta \cdot (x_o - x_{th}) \cdot \frac{1}{s} + \theta_x \quad (3.18)$$

$$p_{1y}^{rel} = p_{oy}^{rel} + \theta \cdot (y_o - y_{th}) \cdot \frac{1}{s} + \theta_y \quad (3.19)$$

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 Hauptbeitrag liefert. 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 A15-Struktur von V_3Si 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/:

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

$V(R)$ = Potential im Abstand R

s = Stoßparameter

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

r_m = 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:

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

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

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-2}{2^n n! E_r^n} \left\{ \frac{d}{ds} \cdot \frac{1}{s} \right\}^n s \int_0^{\infty} (\xi^2 + s^2)^{n-1} v^n(\sqrt{\xi^2 + s^2}) d\xi \quad (3.22)$$

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

$$\theta = \theta_1 = -\frac{1}{E_r} \frac{d}{ds} \int_0^{\infty} v(\sqrt{\xi^2 + s^2}) d\xi \quad (3.23)$$

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:

$$\theta_1 = \frac{\Delta p_{\perp}}{p} \quad \text{mit} \quad p = v \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2} \quad (v = \text{Geschwindigkeit des}$$

Teilchens in Vorwärtsrichtung im Laborsystem).

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

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

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

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

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

so ergibt sich für den Streuwinkel:

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

$K_1(x)$ 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:

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

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

$\Phi [^\circ]$	s/a	$\Delta\theta/\theta [10^{-3}]$
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 20° sicher noch ausreichend genau, sodaß dieser Winkel bzw. der dazugehörige Stoßparameter als Abschneidewert gültig sind. Es können demzufolge im Programm Stoßwinkel bis zu 20° 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 ${}^4\text{He}^+$ -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/:

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

v = Geschwindigkeit der eingeschossenen Ionen

m = Masse des Elektrons

\bar{I} = mittlere Anregungsenergie der gebundenen Elektronen

$NZ_{\text{lok.}}^{\text{geb.}}$ = lokale Dichte der gebundenen Elektronen

Dieser Term stellt einen mit $NZ_{\text{lok.}}^{\text{geb.}}$ modifizierten Bethe-Bloch-Ansatz dar /30/.

$NZ_{\text{lok.}}^{\text{geb.}}$ kann für jedes Gitteratom mit dem Thomas-Fermi-Modell berechnet werden nach:

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

wobei $\Phi\left(\frac{R}{a}\right)$ 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 $d/4$:

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

wobei $K_0(x)$ die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung darstellt /26/. \bar{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. \bar{I} wurde bei unseren Berechnungen aus:

$$\bar{I} = 11.2 \cdot Z_2 \text{ eV} \quad (3.29)$$

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 freien Elektronen führen zu einem Energieverlustterm, der folgende Form hat /29/:

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

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

v_F = Fermigeschwindigkeit

$NZ^{\text{Val.}}$ = Dichte der freien Elektronen

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

$$Z^{\text{Val.}} = \frac{3 \cdot Z_V^{\text{Val.}} + Z_{\text{Si}}^{\text{Val.}}}{4} = \frac{3 \cdot 5 + 4}{4} = 4.75$$

Die Fermigeschwindigkeit läßt sich in der Näherung des freien Elektronengases berechnen zu /32/:

$$v_F = (3 \pi^2 n_e)^{1/3} \hbar/m \quad (3.31)$$

$$n_e = \text{Dichte der freien Elektronen} = NZ^{\text{Val.}}$$

Für $V_3\text{Si}$ ergibt sich $n_e = 0.36 \text{ \AA}^{-3}$ und

$$v_F = 2.6 \cdot 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{sec}}$$

Der Energieverlust durch Plasmonanregung ist gegeben durch /29/:

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

$$\omega_p = \text{Plasmafrequenz}$$

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

ω_p berechnet sich wiederum im Modell des freien Elektronengases nach /32/:

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{m}\right)^{1/2} \quad (3.33)$$

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 $\hbar\omega_p = 2.8 \text{ eV}$ /33/; dies zeigt, daß das Modell des freien Elektronengases für $V_3\text{Si}$ 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 Rückstreuerausbeute hat.

Die drei Energieverlustterme lassen sich zusammenfassen zu:

$$\left(\frac{dE}{dz}\right)_{\text{inel}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \left[NZ^{\text{geb.}}_{\text{lok.}} \ln \frac{2mv^2}{\bar{I}} + NZ^{\text{Val.}} \ln \frac{2mv^2}{\hbar\omega_p} \right] \quad (3.34)$$

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 ${}^4\text{He}^+$ -Teilchen tabelliert sind /28/. Sollten andere Ionen, Z_x , verwendet werden, so wurden die Werte nach /34/:

$$\left(\frac{dE}{dz}\right)_{Z_x, v} = \frac{Z_x^2}{Z_{\text{He}}^2} \left(\frac{dE}{dz}\right)_{Z_{\text{He}}, v} \quad (3.35)$$

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:

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

zeigen, daß $(Z_{4\text{He}}^*)^2 = 3.912$ für $E_{4\text{He}} = 2 \text{ MeV}$, wurde hier mit $Z_{4\text{He}} = 2$ gerechnet.

Der Gültigkeitsbereich für die dargestellte Auftrennung des Energieverlustes ist durch die Bedingung:

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

gegeben, äquivalent zu:

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

Für ${}^4\text{He}^+$ -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 ΔE bei einem freien Stoß den Impulsübertrag /29/:

$$\Delta p = \sqrt{2m\Delta E} \quad (3.39)$$

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

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

In jeder Raumrichtung getrennt ergibt sich:

$$\langle \Delta\theta_x^2 \rangle = \langle \Delta\theta_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{m}{M_1} \cdot \frac{\Delta E}{E} \quad (3.41)$$

wodurch die Verknüpfung mit dem Energieverlust gegeben ist:

$$\frac{\partial \langle \theta_x^2 \rangle}{\partial z} = \frac{\partial \langle \theta_y^2 \rangle}{\partial z} = \frac{1}{2} \cdot \frac{m}{M_1} \cdot \frac{1}{E} \cdot \frac{\partial E}{\partial z} \Big|_{\text{frei}} \quad (3.42)$$

Durch $\frac{\partial E}{\partial z} \Big|_{\text{frei}}$ ist der Anteil des elektronischen Energieverlusts durch Plasmonanregung 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:

$$\frac{M_2}{2} V_G^2 = \frac{3}{2} kT \quad ; \quad k = \text{Boltzmann-Konstante} \quad (3.43)$$

T = absolute Temperatur

V_G = Geschwindigkeit des Gitteratoms

abschätzen läßt.

Für V-Atome ergibt sich bei $T = 293 \text{ K}$ $V_G \approx 3.5 \cdot 10^4 \text{ cm/sec}$, wohingegen die Geschwindigkeit von $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen bei $v \approx 10^9 \text{ cm/sec}$ 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:

$$W_i(u, \vec{n}) = \langle \delta(u - \vec{u}_i \cdot \vec{n}) \rangle \quad (3.44)$$

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/:

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

M_i = Masse des i -ten Atoms

$\sum_{\vec{q}, \lambda}$ = Summe über alle Wellenvektoren \vec{q} der ersten Brillouin-Zone und alle Phononenzweige λ .

$\omega_{\vec{q}, \lambda}$ = Dispersionsrelation

$\vec{e}_{\vec{q}, \lambda}^i$ = Polarisationsvektor

\vec{R}_i = Gleichgewichtslage des i -ten Atoms

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

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

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

mit

$$\Gamma_{\vec{n}} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \frac{|\vec{n} \cdot \vec{e}_{\vec{q}, \lambda}^i|^2}{2M_i \omega_{\vec{q}, \lambda}} \cdot \left(\frac{1}{\exp \beta \omega_{\vec{q}, \lambda} - 1} + \frac{1}{2} \right)$$

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

Ausmultipliziert ergibt sich:

$$\Gamma_{\vec{n}} = \sum_{j,j'} \vec{x}_j^{\vec{n}} \vec{x}_{j'}^{\vec{n}} \Gamma_{j,j'} \quad (3.47)$$

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

$$\Gamma_{j,j'} = \sum_{\vec{q},\lambda} \frac{\vec{e}_{\vec{q},\lambda,j}^i \vec{e}_{\vec{q},\lambda,j'}^{i*}}{2M_i \omega_{\vec{q},\lambda}} \left(\frac{1}{\exp \beta \omega_{\vec{q},\lambda} - 1} + \frac{1}{2} \right)$$

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

$$\Gamma_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \langle u_i^{\vec{n}}(t) u_i^{\vec{n}}(t) \rangle$$

wobei $\langle u_i^{\vec{n}}(t) u_i^{\vec{n}}(t) \rangle$ das mittlere Schwankungsquadrat in Richtung \vec{n} darstellt.

Da für V_3Si die Dispersionsrelation $\omega_{\vec{q},\lambda}$ 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.

$\Gamma_{\vec{n}}$ bestimmt sich dann zu:

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

U_{ij} = Schwingungstensor

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

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

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

$$W(\vec{u}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} u_{11}} e^{-\frac{u_1^2}{2u_{11}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi} u_{22}} e^{-\frac{u_2^2}{2u_{22}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi} u_{33}} e^{-\frac{u_3^2}{2u_{33}}} \quad (3.50)$$

3.2.4 Berechnung der Rückstreausbeute

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 Rückstreuungsprozesse berechnen. In der allgemeinen Formulierung ergibt sich die gesamte Rückstreausbeute durch:

$$Y(E_0) = \int_{E_{\min}}^{E_0} \int_{\Omega_1} \int_{\bar{\Omega}} \int_V \int_{V'} W(E, \vec{r}', \theta') \sigma(E, \theta') b(|\vec{r} - \vec{r}'|) f(\vec{r}) d\vec{r}' d\vec{r} d\Omega d\Omega' dE \quad (3.51)$$

$Y(E_0)$ stellt dabei die Fläche unter einem Rückstreupektrum 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 $\sigma(E, \theta')$ 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 $\int_{\bar{\Omega}} \dots d\Omega$ integriert über den endlichen Detektorraumwinkel $\bar{\Omega}$ und das Integral $\int_{\Omega_1} \dots d\Omega'$ 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 Rückstreuungsprozess 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 $\bar{\Omega} = 4.6 \cdot 10^{-3}$ sterad rückgestreut werden, $\sigma \approx 3 \cdot 10^{-11} \text{ \AA}^2$ beträgt, ergibt sich ein linearer Abstand Atom-Ion von $\approx 3 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}$ (zum Vergleich: der Gitterparameter d beträgt 4.72 \AA und der Thomas-Fermi-Abschirmparameter $a \approx 0.16 \text{ \AA}$). Es erscheint also gerechtfertigt, $b(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ durch die Dirac'sche δ -Funktion zu ersetzen: $b(|\vec{r}-\vec{r}'|) \rightarrow \delta(|\vec{r}-\vec{r}'|)$

Damit ergibt sich:

$$Y(E_o) = \int_{E_{\min}}^{E_o} \int_{\Omega_1} \int_{\bar{\Omega}} \int_V W(E, \vec{r}, \theta') \sigma(E, \theta') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega' dE \quad (3.52)$$

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

$$Y(E_o) = \bar{\Omega} \int_{E_{\min}}^{E_o} \int_{\Omega_1} \int_V W(E, \vec{r}, \bar{\theta}') \sigma(E, \bar{\theta}') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega' dE \quad (3.53)$$

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

3.2.4.2 Durchführung in der Rechnung

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

$$\frac{\partial Y(E)}{\partial E} = \bar{\Omega} \int_{\Omega_1} \int_V W(E, \vec{r}, \bar{\theta}') \sigma(E, \bar{\theta}') f(\vec{r}) d\vec{r} d\Omega' \quad (3.54)$$

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

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

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

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. Hier wurde 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 $\theta = 15^\circ$ 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 \AA verwendet /21/. Zur Analyse wurden $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen verwendet.

Kanalzahl	Tiefe [A]	$\chi_{\min.}^{\text{Exp.}}$	$\chi_{\min.}^{\text{Theor.}}$	$\psi_{1/2}^{\text{Exp.}}$ [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 Winkelangaben.

Die Werte von $\chi_{\min.}^{\text{Theor.}}$ liegen doch beträchtlich 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 \AA , was einer Strahlaufweitung von 0.1° entspricht, nahmen die berechneten Werte von $\chi_{\min.}$ 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 $0.05 \text{ \AA} / 21/$. Zur Rückstreuung wurden $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen verwendet.

Kanalzahl	Tiefe [\AA]	Exp. χ_{\min}	Theor. χ_{\min}	Exp. $\psi_{1/2}$ [Grad]	Theor. $\psi_{1/2}$ [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 \AA 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 $V_3\text{Si}$

4.2.1 Untersuchung 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 V_3Si 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 \AA zwar schon deutlich ausgebildet ist, jedoch seine volle Höhe erst bei 3000 \AA erreicht hat. An den Ecken der Einheitszelle sind dagegen Oszillationen sichtbar.

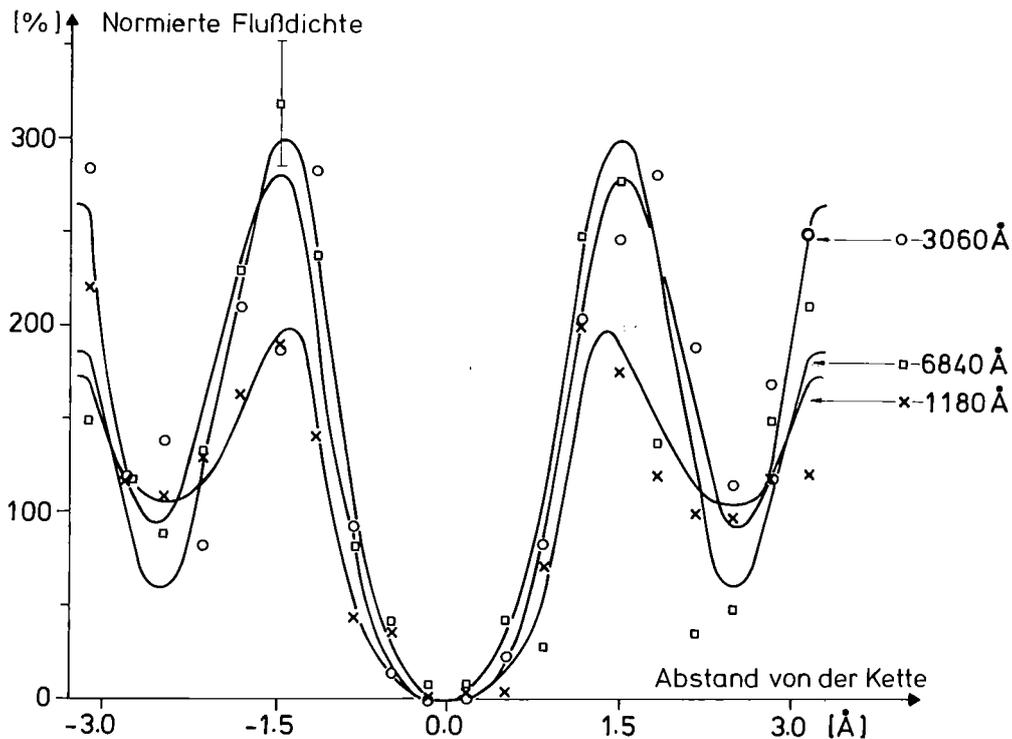


Abb. 12 Flußverteilung geführter Teilchen für $[100]$ in verschiedenen Tiefen. Die Profile wurden jeweils entlang der Flächendiagonalen der Streuebene registriert und über 100 Einheitszellen gemittelt. Der Fehlerbalken entspricht der Statistik von 400 einlaufenden Teilchen.

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 geführten Teilchen 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

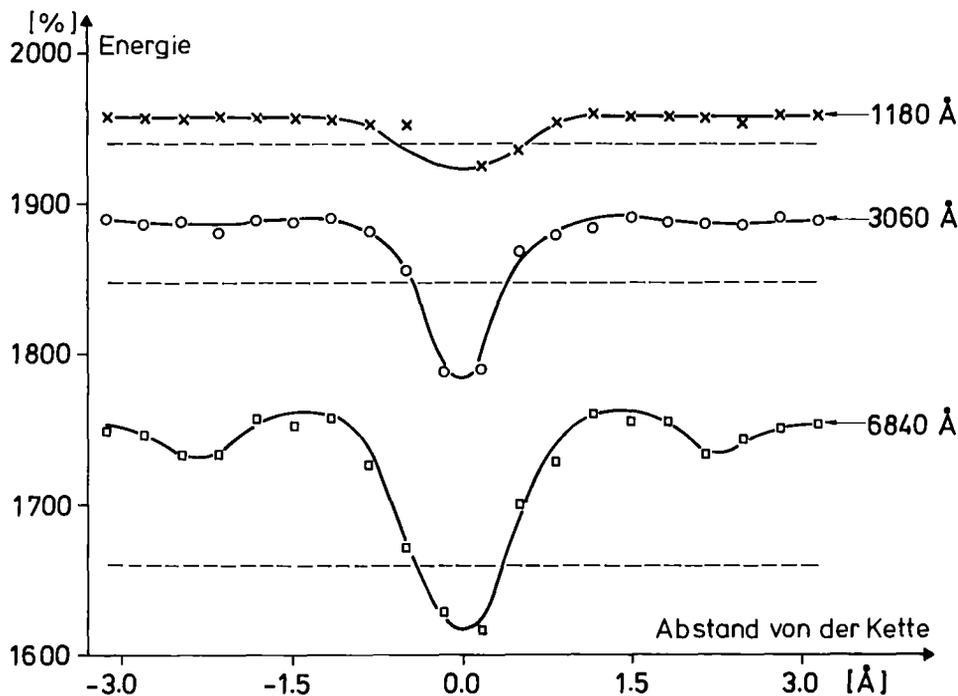


Abb. 13 Energieverteilung geführter Teilchen für [100] in verschiedenen Tiefen. Die Profile wurden entlang der Flächendiagonalen der Streuzellen registriert und über 100 Einheitszellen gemittelt. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Energie von in Random-Richtung einfallenden Teilchen in der selben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

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:

$$\sqrt{u_{11}} = 0.067 \text{ \AA}$$

$$\sqrt{u_{22}} = 0.076 \text{ \AA}$$

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

$$\sqrt{\langle u^2 \rangle} = 0.075 \text{ \AA}.$$

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_3Si 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 Rückstreuxperimente, die mit Hilfe von $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen an V_3Si -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 \AA , die Fensterbreite war 500 \AA . 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.

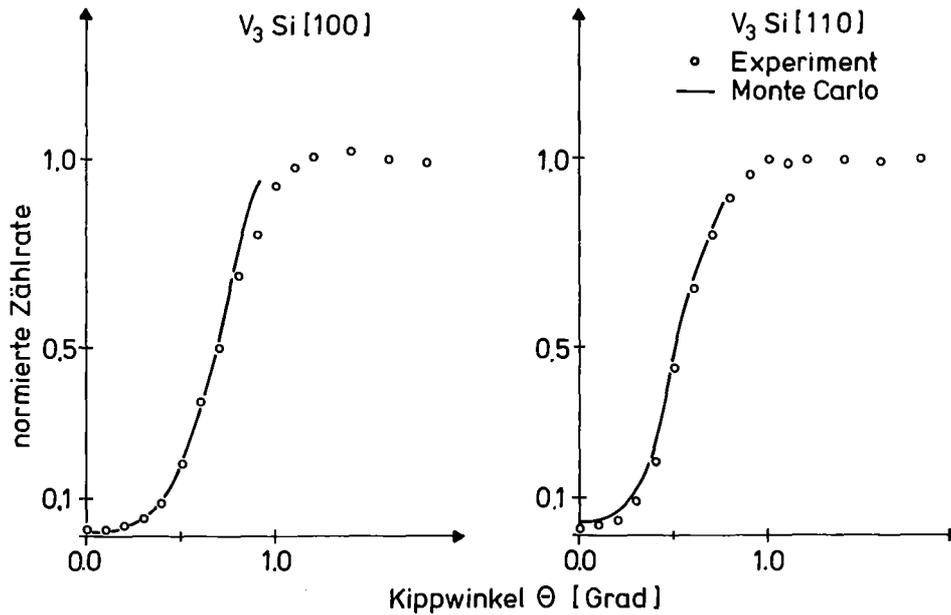


Abb. 14 Theoretische und experimentelle winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110], registriert in einer Tiefe von 470 Å. Die Fensterbreite betrug 500 Å.

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 Anhang A 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 etwas niedriger 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 Einschubrichtungen der einzelnen Teilchen um die ideale Einschubrichtung 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-Rückstreupektrums durch Verkippen der [100]-Kristallachse um 15° gegen die Strahlrichtung und

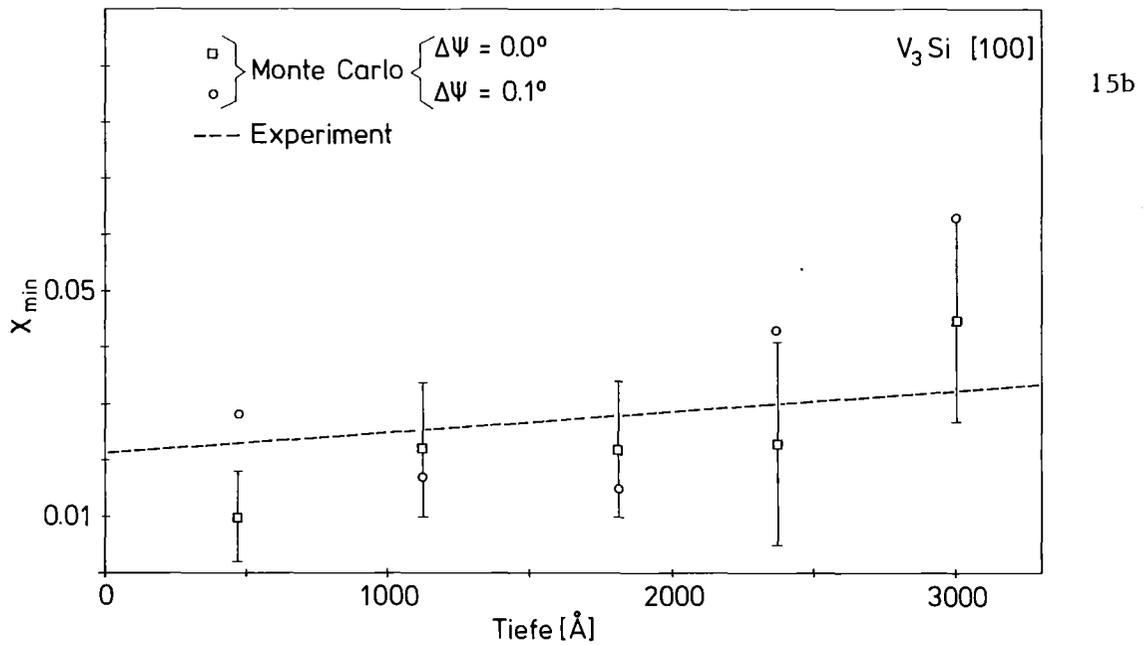
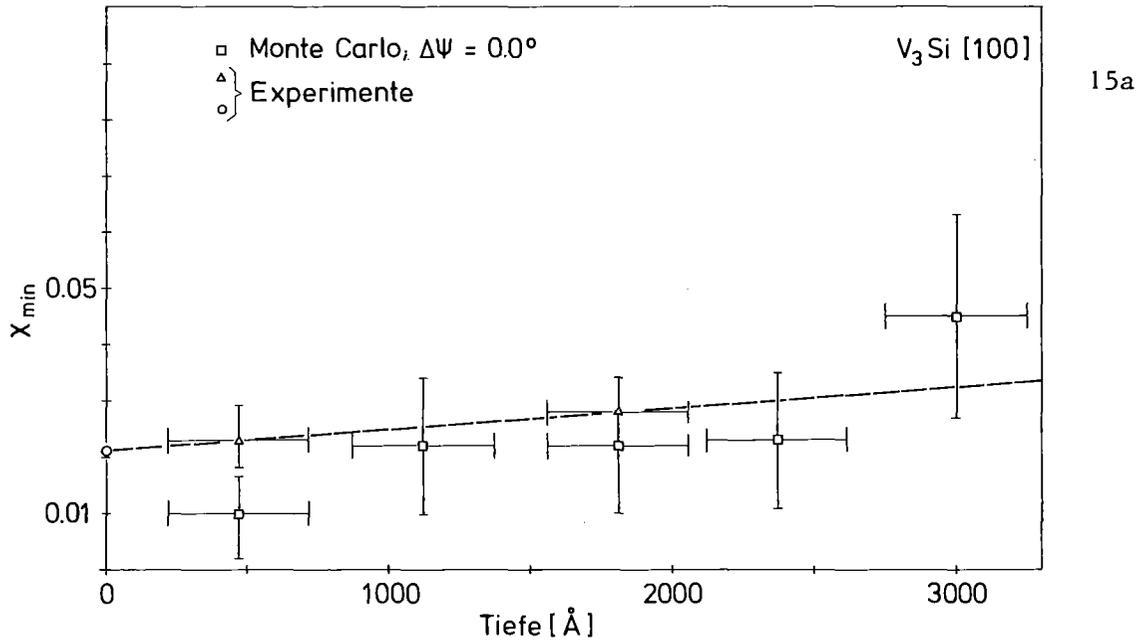


Abb. 15 Minimale Ausbeute χ_{min} für [100] in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ (Δ) und L.R. Testardi et al. /43/ (O) zusammen mit Simulationsergebnissen bei nicht aufgeweitetem Strahl ($\Delta\Psi = 0.0^\circ$) dargestellt. Im unteren Bild sind die Unterschiede bei Rechnung mit und ohne Strahlaufweitung durch eine Oberflächenschicht von 20 \AA dargestellt.

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.

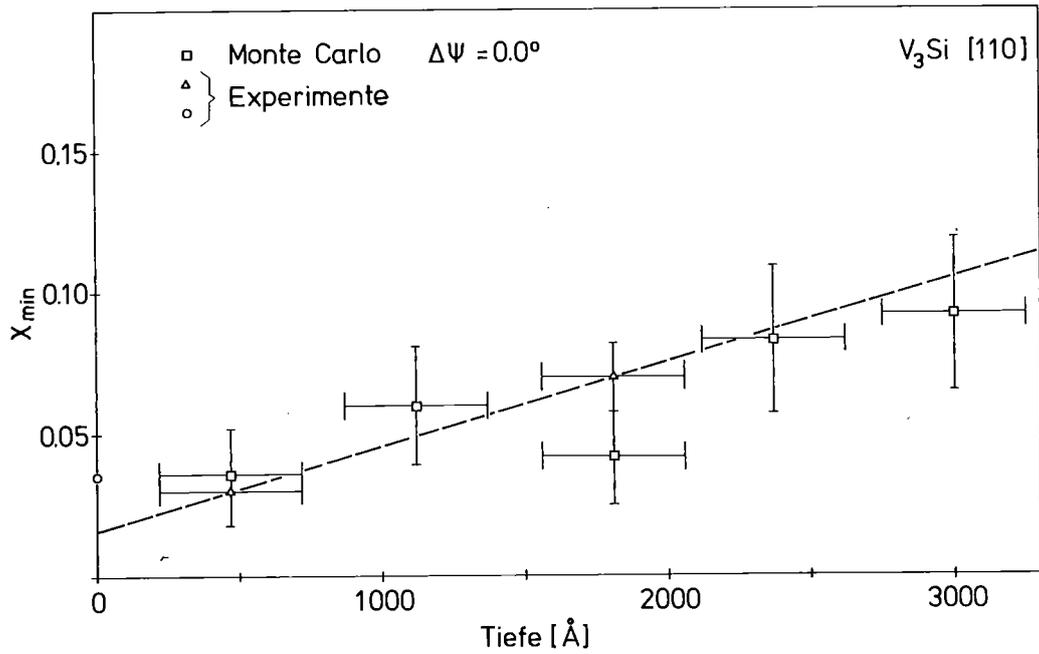
Die Ergebnisse unter Berücksichtigung der Simulation einer Oberflächenschicht sind in Abb. 16b aufgetragen. Der oberflächennächste Werte für χ_{\min} ist angestiegen, die übrigen Werte haben sich nur geringfügig geändert.

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 Simulationsrechnung ohne Oberflächenschicht hinzugezogen werden. Diese Tatsache stärkt das Vertrauen in die Anwendung der Channelling-Meßmethode.

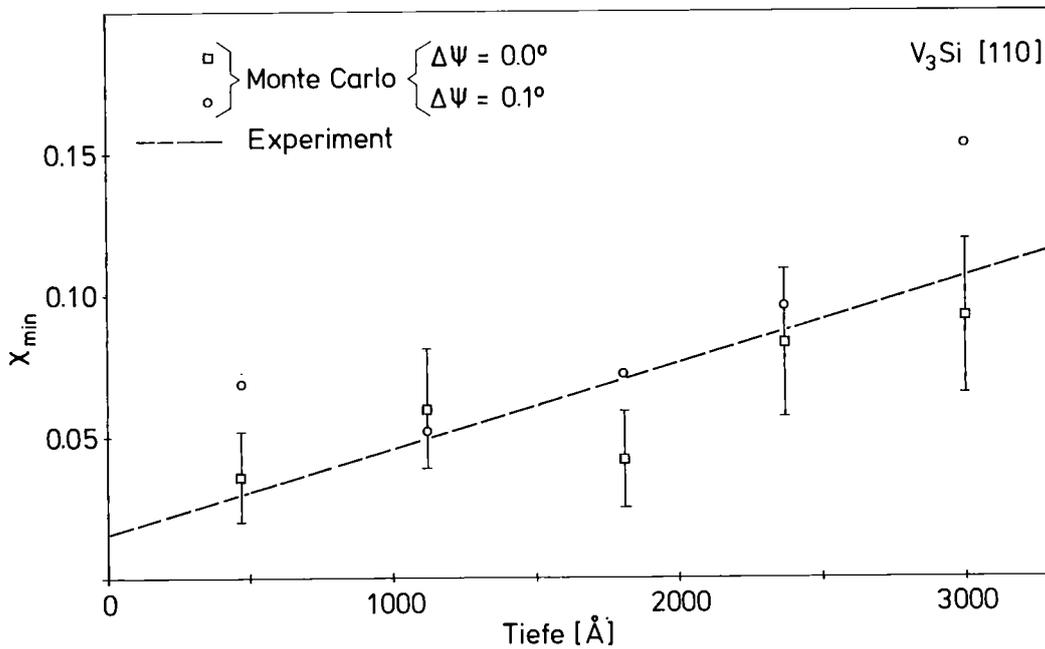
Vergleichsdaten für $\psi_{1/2}$ in [100] sind in Abb. 17a gegeben. Es wurde $\psi_{1/2}$ in verschiedenen Tiefen aus den entsprechenden Ausbeutekurven bestimmt und mit den beiden experimentellen Werten verglichen. Der senkrechte Fehlerbalken mit einem Wert von 0.02° entspricht etwa der im Rahmen des 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 weichen die 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 bei Änderung 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-



16a



16b

Abb. 16 Minimale Ausbeute χ_{min} für $[110]$ in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ (Δ) und L.R. Testardi et al. /43/ (O) 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\AA dargestellt.

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\AA über den experimentellen Werten, jedoch innerhalb

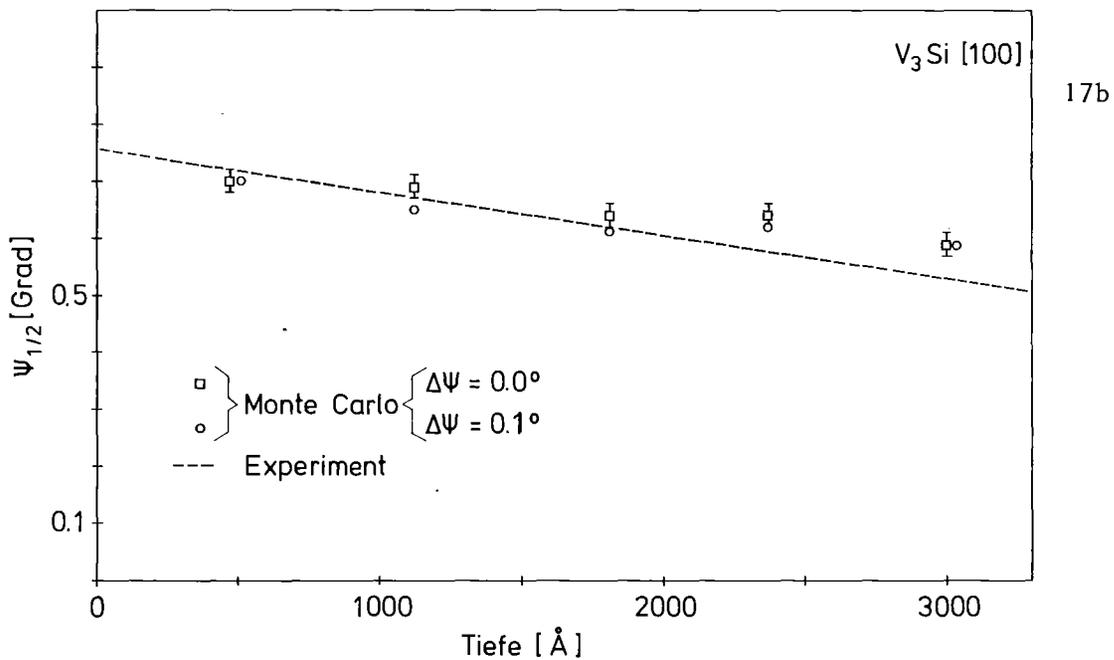
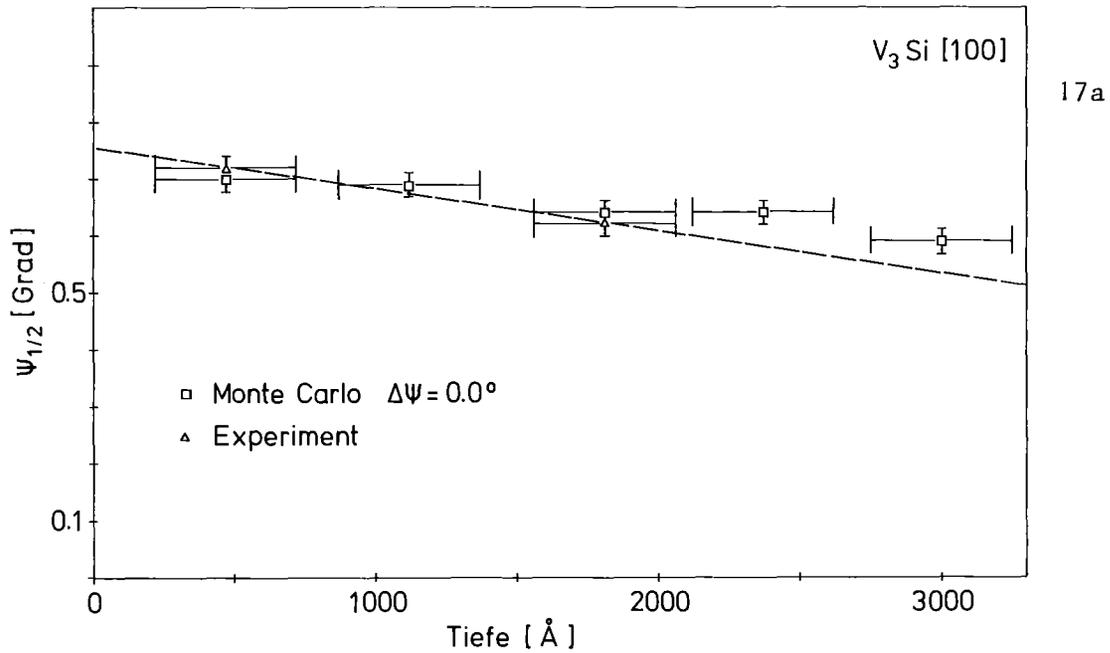


Abb. 17 Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ für [100] in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ zusammen mit Simulationsergebnissen bei nicht aufgeweitetem Strahl ($\Delta\psi = 0.0^\circ$) dargestellt. Im unteren Bild sind die Unterschiede bei Rechnung mit und 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_3Si offensichtlich, daß die Tiefenabhängigkeit von $\psi_{1/2}$ sehr viel schwächer ausgeprägt ist als beim 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_3Si 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 Rückstreuungswahrscheinlichkeiten 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.

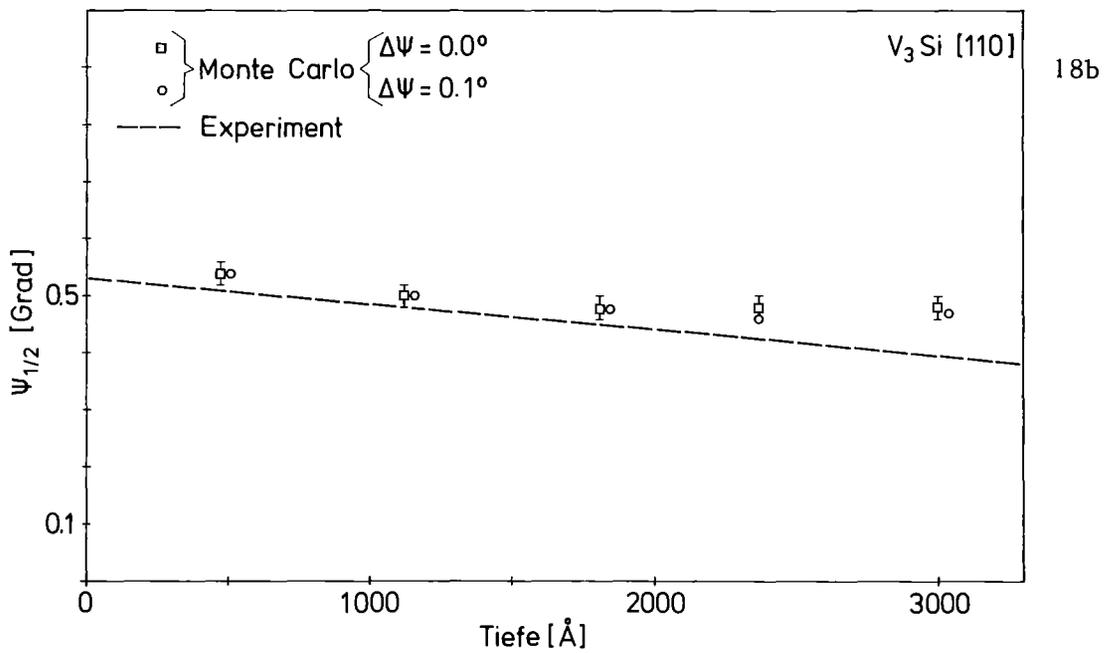
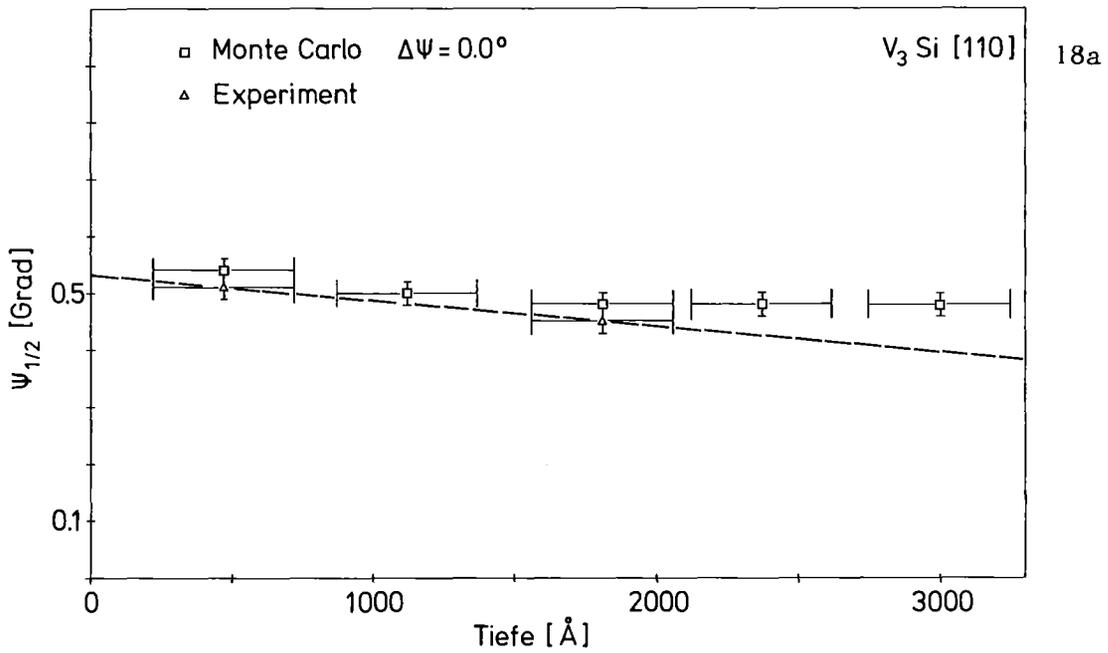


Abb. 18 Halbwertsbreite $\psi_{1/2}$ für [110] in Abhängigkeit der Tiefe. Im oberen Bild sind experimentelle Ergebnisse von O. Meyer /16/ zusammen mit Simulationsergebnissen bei nicht aufgeweitetem Strahl ($\Delta\psi = 0.0^\circ$) dargestellt. Im unteren Bild sind die Unterschiede bei Rechnung mit und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

Im Experiment wurde die $^{28}\text{Si}(d, p_{10})^{29}\text{Si}$ -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 keine exakten 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.

	$\chi_{\min}^{\text{exp.}}$	$\chi_{\min}^{\text{theor.}}$	$\psi_{1/2}^{\text{exp.}}$ [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 $^4\text{He}^+$ -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 0.05° aufge-

weiteten 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 \AA 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 $^4\text{He}^+$ -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.

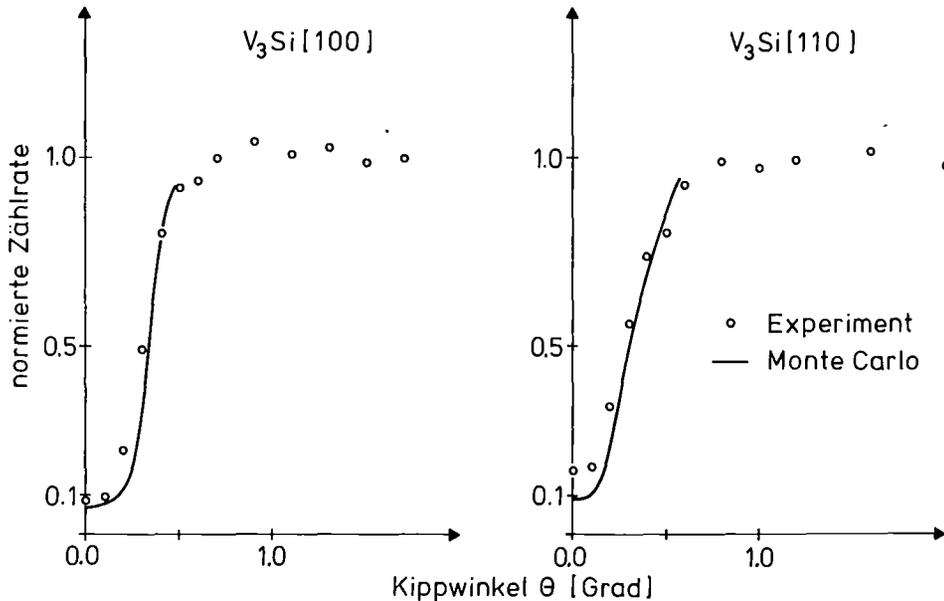


Abb. 19 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110] für das Si-Untergitter. In der Rechnung wurde über 2000 \AA hinter der Oberfläche gemittelt.

4.2.4 Untersuchung des Schwingungsverhaltens 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 V_3Si 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 $\langle u^2 \rangle = 0.073 \text{ \AA}^2$. 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 der Atome in der Kette für [110] größer sind als in [100]. Das wiederum bedeutet, daß die Flußverteilung in der Mitte des Kanals in [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 Neutronen-

streuung übereinstimmen, daß also die bisher verwendeten Werte keineswegs als gesichert angenommen werden können. An polykristallinem V_3Si 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/:

$$\sqrt{\langle u_V^2 \rangle} = 0.063 \text{ \AA}$$

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

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

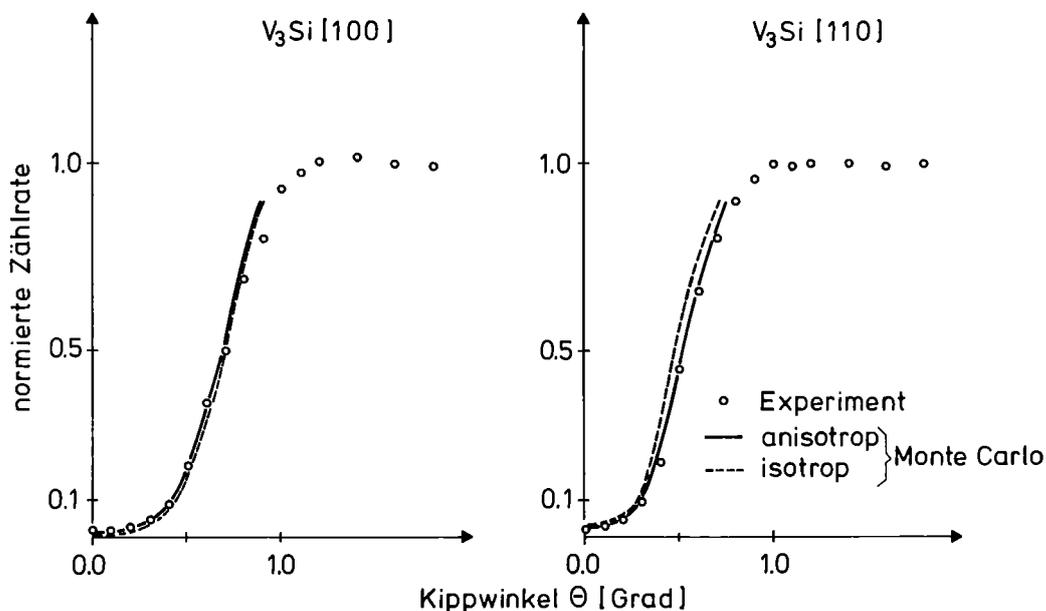


Abb. 20 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Die durchgezogene Linie stellt die Ergebnisse der Rechnung mit anisotroper V-Schwingungsamplitude dar, die gestrichelte Linie die Ergebnisse der Rechnung mit isotroper V-Schwingungsamplitude.

des anisotropen Schwingungstensors aufgeteilt wurde. Damit ergab sich

$$\begin{aligned}\sqrt{u_{22}^v} &= 0.066 \text{ \AA} \\ \sqrt{u_{11}^v} &= 0.058 \text{ \AA}\end{aligned}$$

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 Neutronenstreuxperimenten. Der Grund für die Abweichung der verschiedenen Amplituden liegt wahrscheinlich nur in der Schwierigkeit der Auswertung bei Neutronenstreuxperimenten.

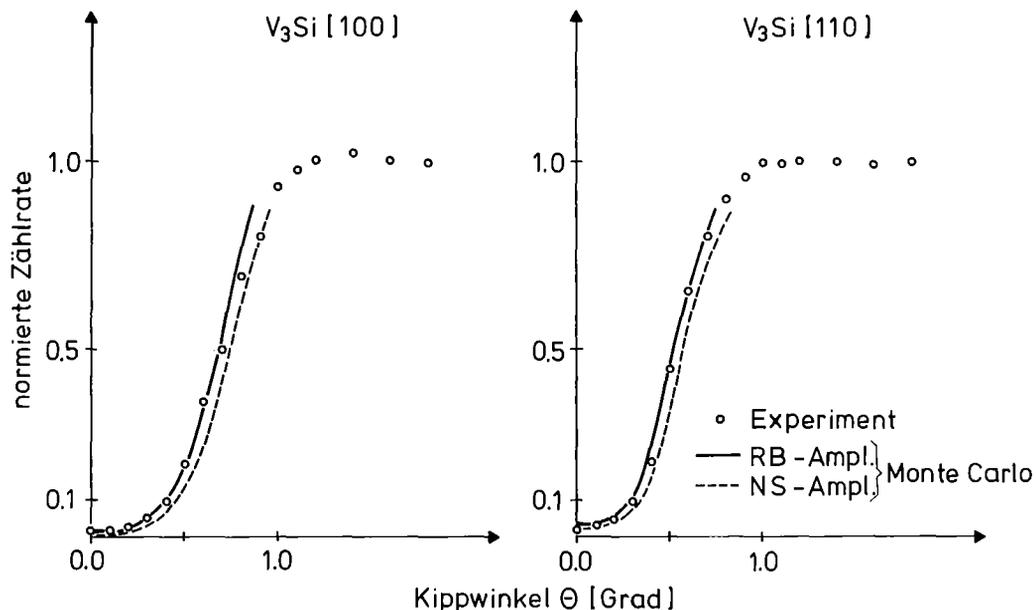


Abb. 21 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Die durchgezogene Linie stellt die Ergebnisse der Rechnung mit den thermischen Schwingungsamplituden aus Röntgenbeugungsexperimenten dar /38/, die gestrichelte Linie die Ergebnisse mit den Amplituden aus Neutronenstreuxperimenten /45/.

Es kann nicht ausgeschlossen werden, daß Korrelationen der thermischen Auslenkungen der Atome in V_3Si 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 V_3Si 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 V_3Si -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 $9 \cdot 10^{15} He^+/cm^2$ bis $1.2 \cdot 10^{17} He^+/cm^2$. 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 $4 \cdot 10^{16}$ bis $1.2 \cdot 10^{17} He^+/cm^2$ 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 \AA 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	
	χ_{\min}	$\psi_{1/2}$ [Grad]	χ_{\min}	$\psi_{1/2}$ [Grad]
[100]				
ungeschädigt	0.023 ± 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.

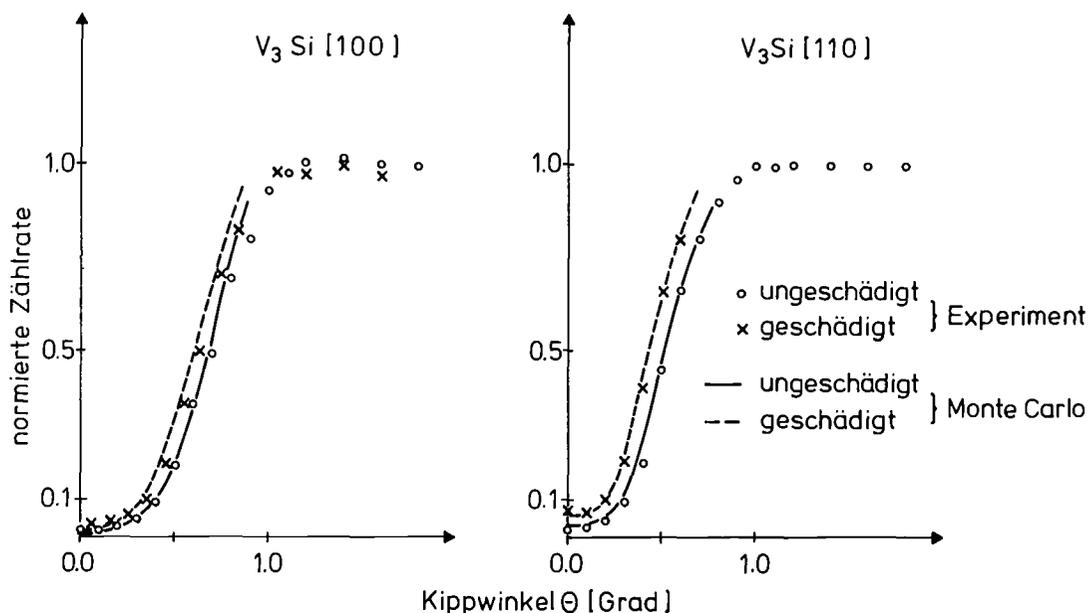


Abb. 22 Winkelabhängige Ausbeutekurven in [100] und [110]. Es sind experimentelle Ergebnisse vor und nach Bestrahlung mit $300 \text{ keV} \cdot 4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ } ^4\text{He}^+$ /47/ sowie theoretische Resultate bei perfektem Kristall und nach Einbau eines Defektmodells von normalverteilten statischen Verlagerungen von im Mittel 0.05 Å dargestellt.

5.2 Untersuchung der Schädigung mit $50 \text{ keV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen

5.2.1 Einbau eines Schädigung-Tiefenprofils

In 5.1 wurden Kristalldefekte untersucht, die beim Durchschuß hoch-energetischer 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-Rückstreuenspektren am ungeschädigten V_3Si -Einkristall bei den Kippwinkeln $\theta = 0.0^\circ, 0.2^\circ, 0.4^\circ, 0.6^\circ$ durchgeführt. Danach wurde der Kristall mit $1.5 \cdot 10^{16} \text{ }^4\text{He}^+$ -Ionen/ cm^2 der Energie 50 keV in Random-Richtung beschossen und anschließend wieder Rückstreuenspektren bei denselben Kippwinkeln aufgenommen. Die Resultate sind in Abb. 23 dargestellt.

In den Channelling-Rückstreuenspektren hat sich in einer Tiefe von etwa 2000 \AA 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.

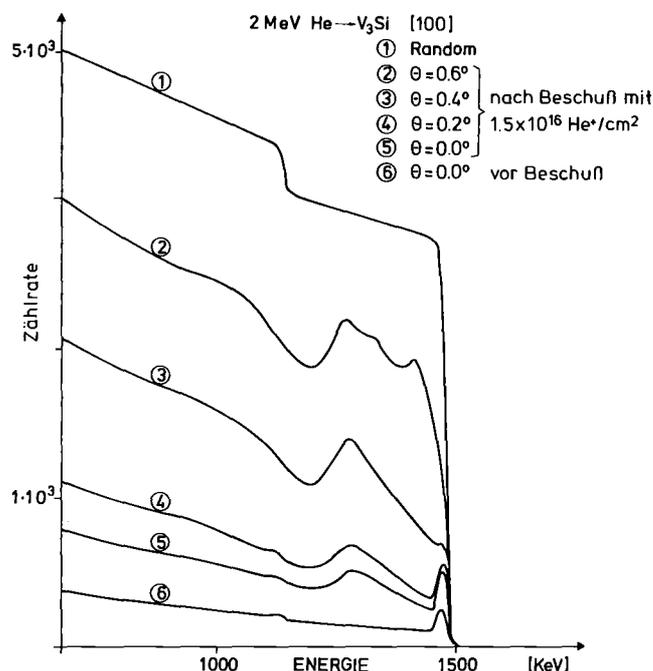


Abb. 23 Experimentelle Rückstreuenspektren vor und nach Bestrahlung mit $50 \text{ keV } 1.5 \cdot 10^{16} \text{ }^4\text{He}^+/\text{cm}^2$. Es sind sowohl das Random-Spektrum als auch Spektren unter verschiedenen Kippwinkeln zur $[100]$ -Richtung dargestellt.

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 Rückstreuungsspektrum 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.

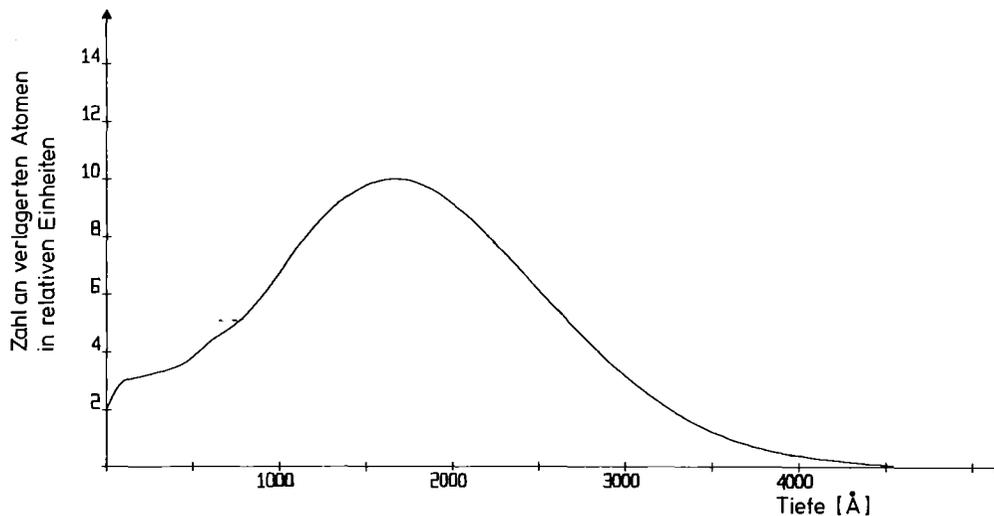


Abb. 24 Schädigungstiefenprofil nach D.K. Brice /40/ für 50 keV- $^4\text{He}^+$ -Ionen in V_3Si .

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 Rückstreu-
spektren bei axialem und bei verkipptem Einschuss berechnet. Die Ergebnisse
sind in Abb. 25 dargestellt.

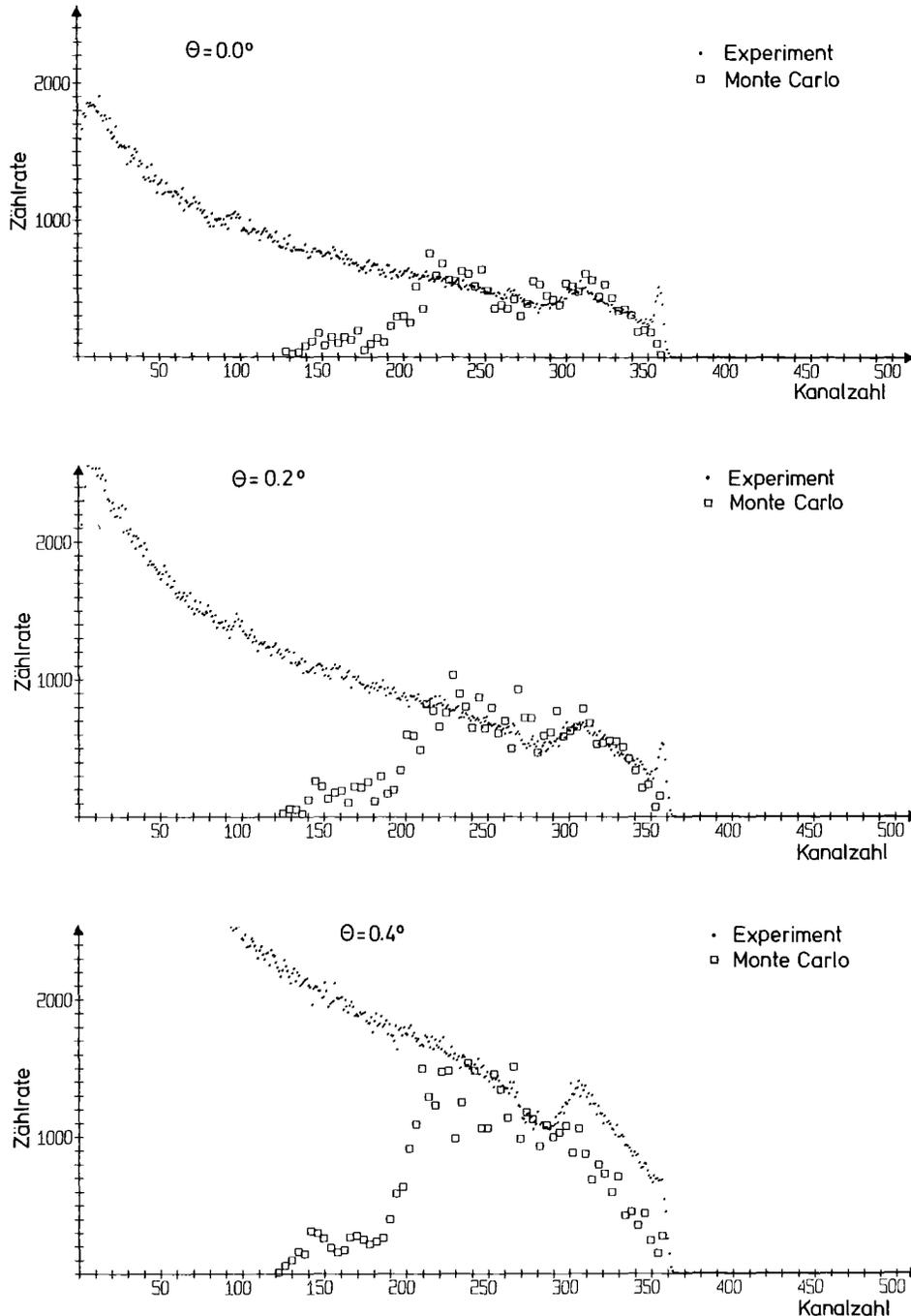


Abb. 25 Experimentelle und theoretische Rückstreu-
spektren unter verschiedenen
Kippwinkeln zur [100]-Richtung. Die experimentellen Daten wurden nach
Bestrahlung mit $50 \text{ keV} - 1.5 \cdot 10^{16} \text{ } ^4\text{He}^+/\text{cm}^2$ erhalten, die theoretischen
Daten bei Annahme eines lateralen Defektprofils von 10 % Random-ver-
lagerten Atomen.

Man sieht, daß bei axialem Einschub ($\theta = 0.0^\circ$) 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 \AA gerechnet wurde. Die Gültigkeit des Modells läßt sich jedoch nur bei verkipptem Einschub 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 Verkipfung der Einschubrichtung 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 \AA 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 Verkipfung wird in der Rechnung wiedergegeben. Die absolute Höhe der theoretischen Spektren 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 Rückstreuenspektren 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 $50 \text{ keV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen am Ende ihrer Reichweite in V_3Si verursachte Schädigungsstruktur beschreibt. Die Eindeutigkeit der Defektstruktur kann auf diese Weise jedoch nicht bewiesen werden und ist auch nicht zu erwarten.

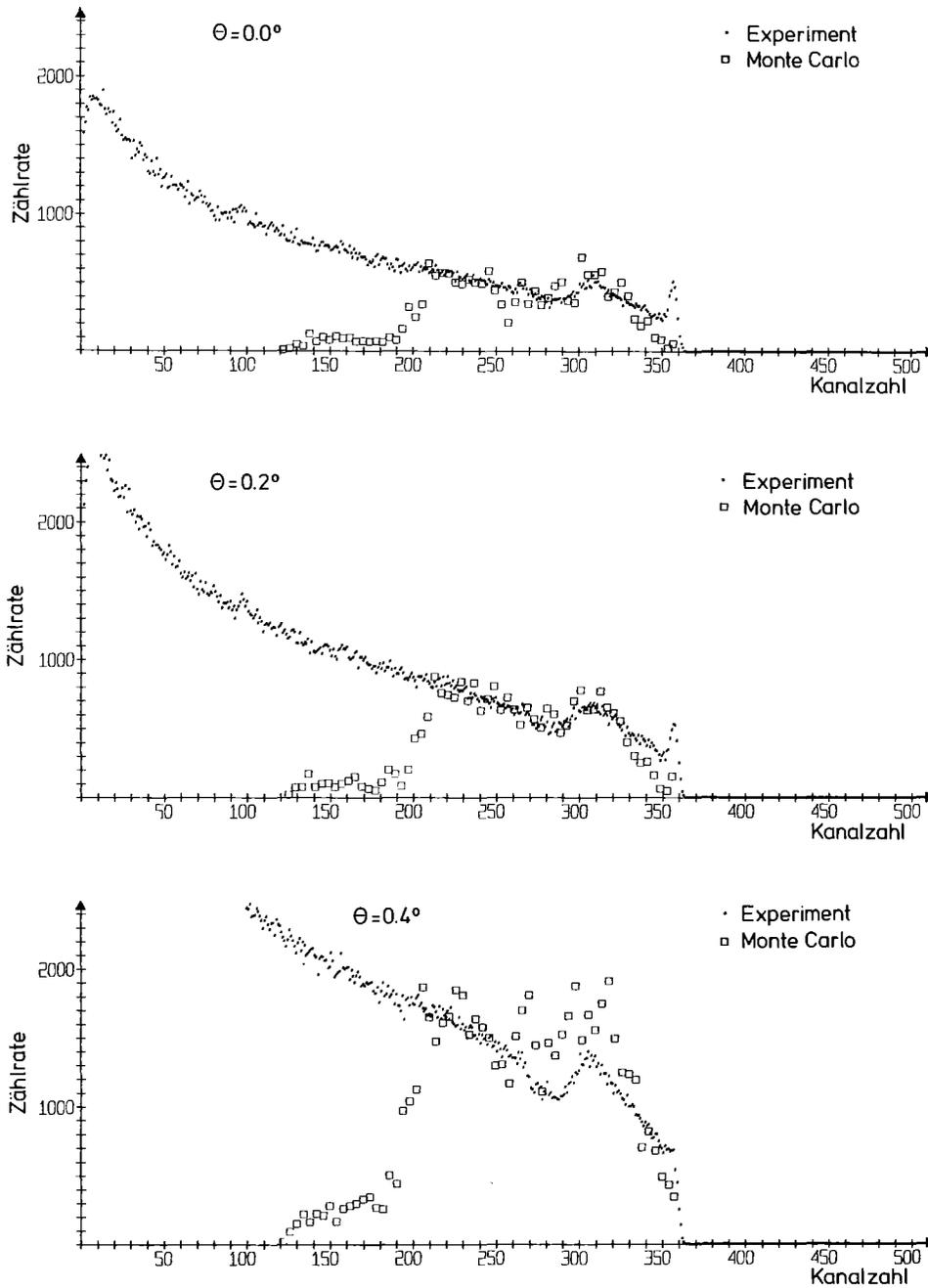


Abb. 26 Experimentelle und theoretische Rückstreuungsspektren unter verschiedenen Kippwinkeln zur $[100]$ -Richtung. Die experimentellen Daten wurden nach Bestrahlung mit $50 \text{ keV} \cdot 1.5 \cdot 10^{16} \text{ } ^4\text{He}^+/\text{cm}^2$ erhalten, die theoretischen Daten bei Annahme eines lateralen Defektprofils von 50 % Random-verlagerten Atomen in einem Bereich von $\pm 0.5 \text{ \AA}$ um die V-Ketten.

6. ZUSAMMENFASSUNG UND ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN

Das Ziel dieser Arbeit war es, ein 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 V_3Si mit Hilfe eines Binären-Stoß-Modells nachvollzogen. Die Einheitszelle der A15-Struktur wurde in einzelne Atomschichten aufgeteilt. In einem Monte-Carlo-Programm wurden die Trajektorien von $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen durch Streuung an allen einen Kanal umgebenden Atomen einer Schicht berechnet. Die Ablenkwinkel der $^4\text{He}^+$ -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 Rückstreuenspektren von $2 \text{ MeV-}^4\text{He}^+$ -Teilchen mit experimentellen Ergebnissen /40/ verglichen.

Bei der A15-Verbindung V_3Si 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 Rückstreausbeute sowie die Unterschiede in den winkelabhängigen Ausbeutekurven bei Einsetzen der aus Neutronenstreuungsmessungen bestimmten thermischen Schwingungsamplituden /45/ untersucht.

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

Zur Simulation von Gitterschäden, die durch eine Dosis von 50 keV $1.5 \cdot 10^{16} \text{ }^4\text{He}^+ / \text{cm}^2$ am Ende ihrer Reichweite verursacht werden, wurde ein Defektmodell herangezogen, welches 50 % gleichverteilte verlagerte Atome mit einer maximalen Verlagerung von 0.5 \AA 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 V_3Si 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-Rückstreuenspektren /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 Rückstreueignissen 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_0 Teilchen die Einheitszelle von V_3Si gleichverteilt (also Random-Fall). Die Gesamtfläche der 4 hintereinander durchlaufenden Atomschichten beträgt $F_0 = 4d^2$. 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 $x_{\text{crit}} = 4\sqrt{\langle u^2 \rangle}$ gewählt, wobei $\langle u^2 \rangle$ das mittlere Schwankungsquadrat der thermischen Schwingungen darstellt. An der Stelle $x = x_{\text{crit}}$ ist die eindimensionale Aufenthaltswahrscheinlichkeit um den Faktor $3 \cdot 10^{-4}$ abgeschwächt.

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

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

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:

$$n_s = n_o \cdot \frac{F_s}{F_o} \quad (\text{A.2})$$

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

$$H = \delta E_1 \cdot \frac{1}{\left(\frac{dE}{dx}\right)} \cdot \frac{1}{d} \cdot n_o \cdot \frac{F_s}{F_o} \quad (\text{A.3})$$

δE_1 = Energieeichung des Analysators in keV/Kanal

Der statistische Fehler wird zu:

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

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

$$\frac{\Delta H_w}{H_w} = \frac{\sqrt{wH}}{w \cdot H} \quad (\text{A.5})$$

Mit den gewählten Werten von: :

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

$$\frac{dE}{dx} = 60 \text{ eV/\AA}$$

$$d = 4.718 \text{ \AA}$$

$$n_o = 400 \text{ Teilchen}$$

$$\langle u^2 \rangle = 0.0053 \text{ \AA}^2$$

$$w = 16$$

findet man

$$n_s \approx 1$$

$$H \approx 12$$

$$\frac{\Delta H}{H} \approx 30 \%$$

$$\frac{\Delta H_w}{H_w} \approx 7 \%$$

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 Rückstreueignissen pro Energiefenster läßt sich nur über die registrierten Randomwerte zurückrechnen. Für $\chi_{\min} = 0.02$ ergibt sich so

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

und

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

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

B UMRECHNUNG DER EINGABEWINKEL ϕ UND θ IN DIE KOORDINATEN DES 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 $(\theta + 165^\circ)$ gegen die z'-Achse geneigt, wie in Abb. 27 dargestellt ist. Der einfallende Strahl kann im x'y'z'-System durch den Vektor:

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

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

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \tan \theta \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi \cdot \tan \theta \\ \sin \phi \cdot \tan \theta \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

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

$$\alpha_x = \arctan (\cos \phi \cdot \tan \theta) \quad (\text{B.3})$$

$$\alpha_y = \arctan (\sin \phi \cdot \tan \theta) \quad (\text{B.4})$$

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

$$p_{x_0}^{\text{rel}} \equiv \alpha_x \quad (\text{B.5})$$

$$p_{y_0}^{\text{rel}} \equiv \alpha_y \quad (\text{B.6})$$

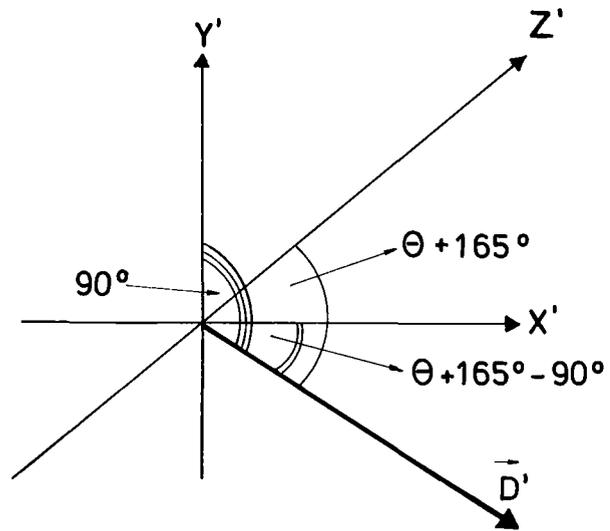


Abb. 27 Geometrie des Detektors im Eingabekoordinatensystem

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} :

$$\vec{T} = \begin{pmatrix} T_x \\ T_y \\ T_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ 1 \end{pmatrix} \quad (C.1)$$

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

$$\vec{D}' = \begin{pmatrix} D'_x \\ D'_y \\ D'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tan(\theta + 165^\circ) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (C.2)$$

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

$$\vec{T}' = \begin{pmatrix} T'_x \\ T'_y \\ T'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi \cdot \alpha_x + \sin\phi \cdot \alpha_y \\ -\sin\phi \cdot \alpha_x + \cos\phi \cdot \alpha_y \\ 1 \end{pmatrix} \quad (C.3)$$

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

$$\cos \xi = l_{T'} l_{D'} + m_{T'} m_{D'} + n_{T'} n_{D'} \quad (C.4)$$

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

$$l_{D'} = \cos(\theta + 165^\circ - 90^\circ) \quad (C.5)$$

$$m_{D'} = 0 \quad (C.6)$$

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

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

$$l_{T'} = \frac{T'_x}{|\vec{T}'|} \quad (C.8)$$

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

$$n_{T'} = \frac{T'_z}{|\vec{T}'|} \quad |\vec{T}'| = (T'^2_x + T'^2_y + T'^2_z)^{1/2} \quad (C.10)$$

Damit berechnet sich der Rückstreuwinkel ξ nach:

$$\xi = \arccos \left(\cos \{ \theta + 165^\circ - 90^\circ \} \cdot \frac{T'_x}{|\vec{T}'|} + \cos \{ \theta + 165^\circ \} \cdot \frac{T'_z}{|\vec{T}'|} \right) \quad (C.11)$$

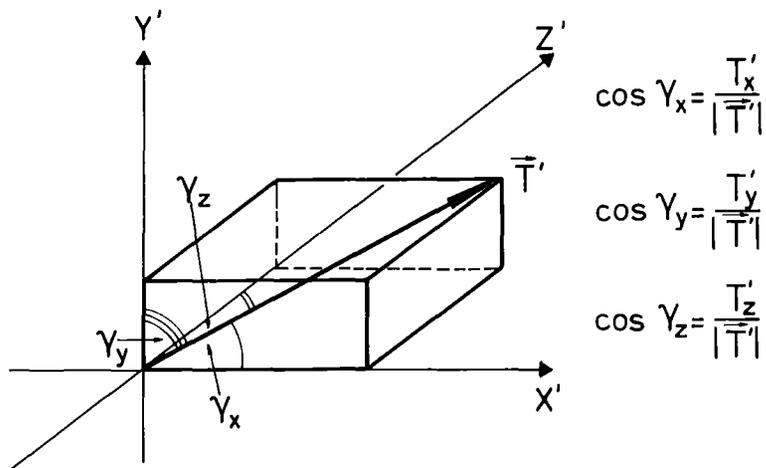
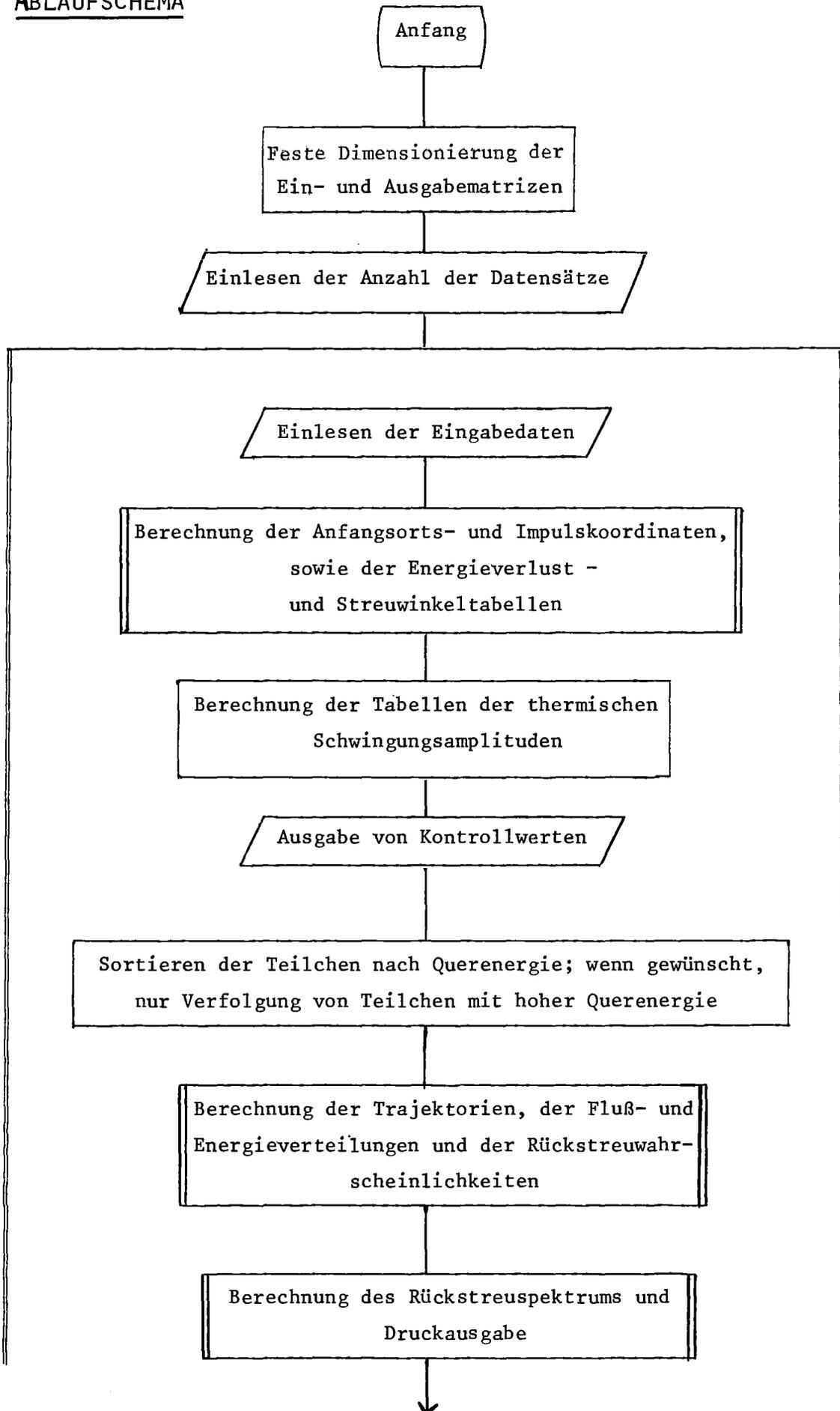
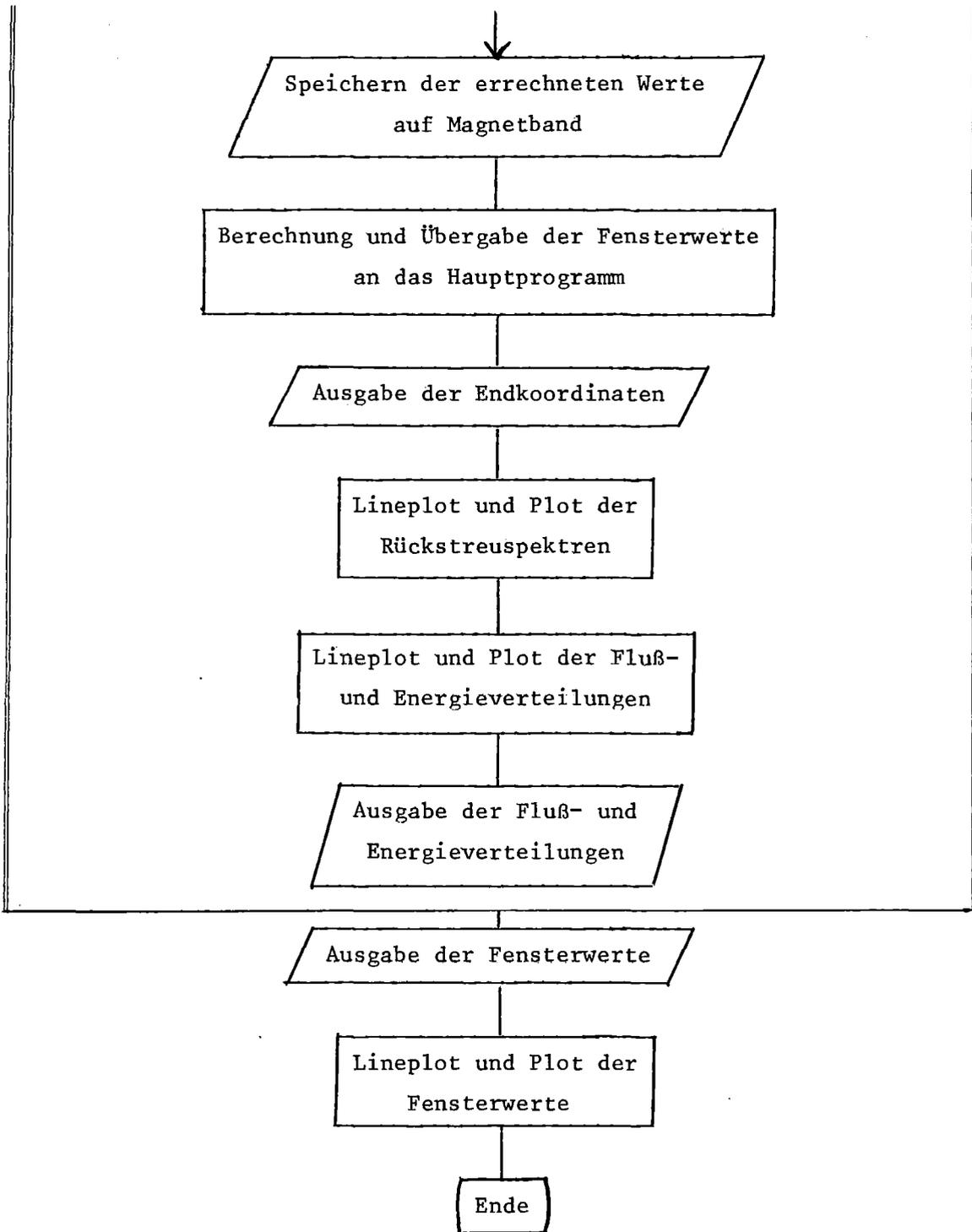


Abb. 28 Geometrie zur Berechnung des momentanen Rückstreuwinkels

D ERLÄUTERUNGEN ZU DEM PROGRAMM CA15

D.1 ABLAUFSHEMA





D.2 BESCHREIBUNG DER EIN- UND AUSGABEDATEN VON CA15

Das Programm CA15 dient zur Simulation von winkelabhängigen Rückstreuerausbeutekurven in A15-Verbindungen der Form A_3B , 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

FORTTRAN Name	Format	Bedeutung
NDATA	I2	Anzahl der zu rechnenden Datensätze
NX	I4	Anzahl der Rasterpunkte in x-Richtung (maximal 60)
NY	I4	Anzahl der Rasterpunkte in y-Richtung (maximal 60)
MEAN	I4	Anzahl der Einheitszellen, über die bei der Berechnung der Flußverteilung gemittelt wird
NLAY	I4	Zu berechnende Eindringtiefe / MEAN
A	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	I2	Steuervariable; 1 : Berechnung der $\begin{bmatrix} 100 \end{bmatrix}$ -Richtung 2 : Berechnung der $\begin{bmatrix} 110 \end{bmatrix}$ -Richtung
THV1	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

OMEGA	F10.5	Detektorraumwinkel in Sterad
EXCITV	F10.2	Mittlere Anregungsenergie der A-Atome in eV
EXCITS	F10.2	Mittlere Anregungsenergie der B-Atome in eV
PLSMEN	F10.2	Plasmonenergie der Verbindung in eV
ZVAL1	F10.2	Anzahl der freien Elektronen pro A-Atom
ZVAL2	F10.2	Anzahl der freien Elektronen pro B-Atom
EPCOV(1)	E10.3	} Energieverlustkoeffizienten der A-Atome
" (2)	E10.3	
" (3)	E10.3	
" (4)	E10.3	
" (5)	E10.3	
" (6)	E10.3	
EPCOSI(1)	E10.3	} Energieverlustkoeffizienten der B-Atome
" (2)	E10.3	
" (3)	E10.3	
" (4)	E10.3	
" (5)	E10.3	
" (6)	E10.3	
PHI	F10.3	Winkel zur Festlegung der Kippebene in Grad
THETA	F10.3	Kippwinkel θ in Grad
DEPSI	F10.3	Strahldivergenz in Grad
EO	F10.3	Anfangsenergie
IWIND1	I4	} Kanalnummer } Randomwert } der fünf Energiefenster
Rand1	F10.3	
IWIND2	F10.3	
RAND2	F10.3	
IWIND3	F10.3	
RAND3	F10.3	
IWIND4	F10.3	
RAND4	F10.3	
IWIND5	F10.3	
RAND5	F10.3	
IWIDTH	I4	Fensterbreite in Kanälen (gerade Zahl)
DPLCM	F10.5	Maximale Verlagerung von der Kette in Å
DPTMEA	F10.2	Projizierte Reichweite der ${}^4\text{He}^+$ -Teilchen bei der Strahlenschädigung
PERC	F10.2	Zahl der verlagerten Atome in %

NUMEX	I1	Nummer des experimentellen Spektrums auf File 3; wenn 0 eingegeben wird, findet kein Vergleich mit einem experimentellen Spektrum statt.
FMULT	F10.3	Skalierungsfaktor, um die Höhen von Spektren verschiedener Ladung anzugleichen.
ROTAT	L1	Logische Variable; T : Kippebene wird gedreht zur Simulation eines Random-Spektrums
NOFLUX	L1	" " T : Fluß-Ausgabe wird unterdrückt
NODOCU	L1	" " T : Ausgabe der Anfangs- und Endkoordinaten wird unterdrückt
NOSPEC	L1	" " T : Plot-Ausgabe des Rückstreupektrums wird unterdrückt
SISC	L1	" " T : Es wird nur ein Streuereignis pro Atomschicht berechnet
NEGLEC	L1	" " T : Teilchen, deren Querenergie unter einer festgelegten Schwelle liegt, werden nicht weiterverfolgt.
ENDT	F10.3	Zeitvorgabe; bei Überschreiten des Wertes wird die Berechnung der Trajektorien abgebrochen und nur noch die Ausgabe der bis 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 Rückstreupektren 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.

Mit dem Datensatz:

1	NDATA	00000010
20	NX	00000020
20	NY	00000030
100	MEAN	00000040
11	NLAY	00000050
4.718	A	00000060
ALPHA - PARTICLE	PART	00000070
2.	ZPART	00000080
4.0026	FMPART	00000090
V3SI - 100	CRYST	00000100
23.	ZV	00000110
50.94	FMV	00000120
14.	ZSI	00000130
28.09	FMSI	00000140
7.618E+22	RHOAT	00000150
293.	TEMP	00000160
1	ISEC	00000170
0.067	THV1	00000180
0.076	THV2	00000190
0.075	THSI	00000200
52.	Q	00000210
94.6	ORIGIN	00000220
7.	FWHM	00000230
3.84	WIDTH	00000240
165.	BANGLE	00000250
0.00456	OMEGA	00000260
258.	EXCITV	00000270
157.	EXCITS	00000280
22.2	PLSMEN	00000290
5.	ZVAL1	00000300
4.	ZVAL2	00000310
6.245E+01	EPCOV(1)	00000320
9.597E-02	EPCOV(2)	00000330
-1.088E-04	EPCOV(3)	00000340
4.818E-08	EPCOV(4)	00000350
-9.853E-12	EPCOV(5)	00000360
7.664E-16	EPCOV(6)	00000370
5.797E+01	EPCOSI(1)	00000380
5.659E-02	EPCOSI(2)	00000390
-7.766E-05	EPCOSI(3)	00000400
3.641E-08	EPCOSI(4)	00000410
-7.624E-12	EPCOSI(5)	00000420
5.995E-16	EPCOSI(6)	00000430
30.	PHI	00000440
0.4	THE TA	00000450
0.	DEPSI	00000460
2000.	EO	00000470
341	IWIND1	00000480
2211.	RAND1	00000490
320	IWIND2	00000500
2411.	RAND2	00000510
298	IWIND3	00000520
2429.	RAND3	00000530
280	IWIND4	00000540
2569.	RAND4	00000550
260	IWIND5	00000560
2811.	RAND5	00000570
16	IWIDTH	00000580
0.	DPLCM	00000590
2300.	OPTMEA	00000600
50.	PERC	00000610
3	NUMEX	00000620
2.	FMULT	00000630
F	ROTAT	00000640
T	NOFLUX	00000650
T	NODOCU	00000660
F	NOSPEC	00000670
F	SISC	00000680
F	NEGLEC	00000690
25.	ENDT	00000700

erhält man folgende Druckausgabe:

```

*****
*
* MC N T E   C A R L C   -   P R O G R A M
*
* F O R   T H E   C O M P U T E R   -   S I M U L A T I O N   O F   C H A N N E L I N G
*
* B Y   A   M O D I F I E D   " B I N A R Y   C O L L I S I O N "   -   M O D E L
*
*****

```

```

SINGLE CRYSTAL : V3SI - 100          ATOMIC NUMBERS :      REST MASSES :      MEAN EXCITATION ENERGY :
                *****
                                23.          50.94          256.0 EV
                                14.          28.09          157.0 EV

```

```

LATTICE CONSTANT : 4.718 ANGSTROM
ATOMIC DENSITY : 0.762E+23 ATOMS / CM ** 3
PLASMA ENERGY : 22.2 EV
VALENCE ELECTRONS : 4.75 PER ATOM

```

=====
EXPERIMENTAL CONDITIONS :
=====

```

INCIDENT ION : ALPHA - PARTICLE
ATOMIC NUMBER : 2.
REST MASS : 4.
ION ENERGY : 2000. KEV
CHARGE : 52.0
BEAM DIVERGENCE : 0.0 DEGREES
CRYSTAL TEMP. : 293. KELVIN
THERMAL VIBRATION AMPLITUDES :      V (U11) : 0.067 ANGSTROM      V (U22) : 0.076 ANGSTROM
                                SI : 0.075 ANGSTROM
BEAM INCIDENCE :      PHI = 30.00 DEGREES      ( PHI ROTATED : F )
                   THETA = 0.40 DEGREES

```

PARAMETERS OF EXPERIMENTAL SETUP

FWHM : 7. CHANNELS
 CHANNEL WIDTH : 3.84 KEV / CHANNEL
 SUPPR. CRIGIN : 54.6 KEV
 BACKSCATT. ANGLE : 165.0 DEGREES
 DETECTOR ANGLE : 0.456E-C2 STERAD
 WINDOW SETTINGS (CH.NC.) : WINDOW WIDTH (CH.) :
 241 16
 220 16
 298 16
 280 16
 260 16
 RANDOM VALUE :
 2211.
 2411.
 2426.
 2565.
 2811.

PROGRAM PARAMETERS

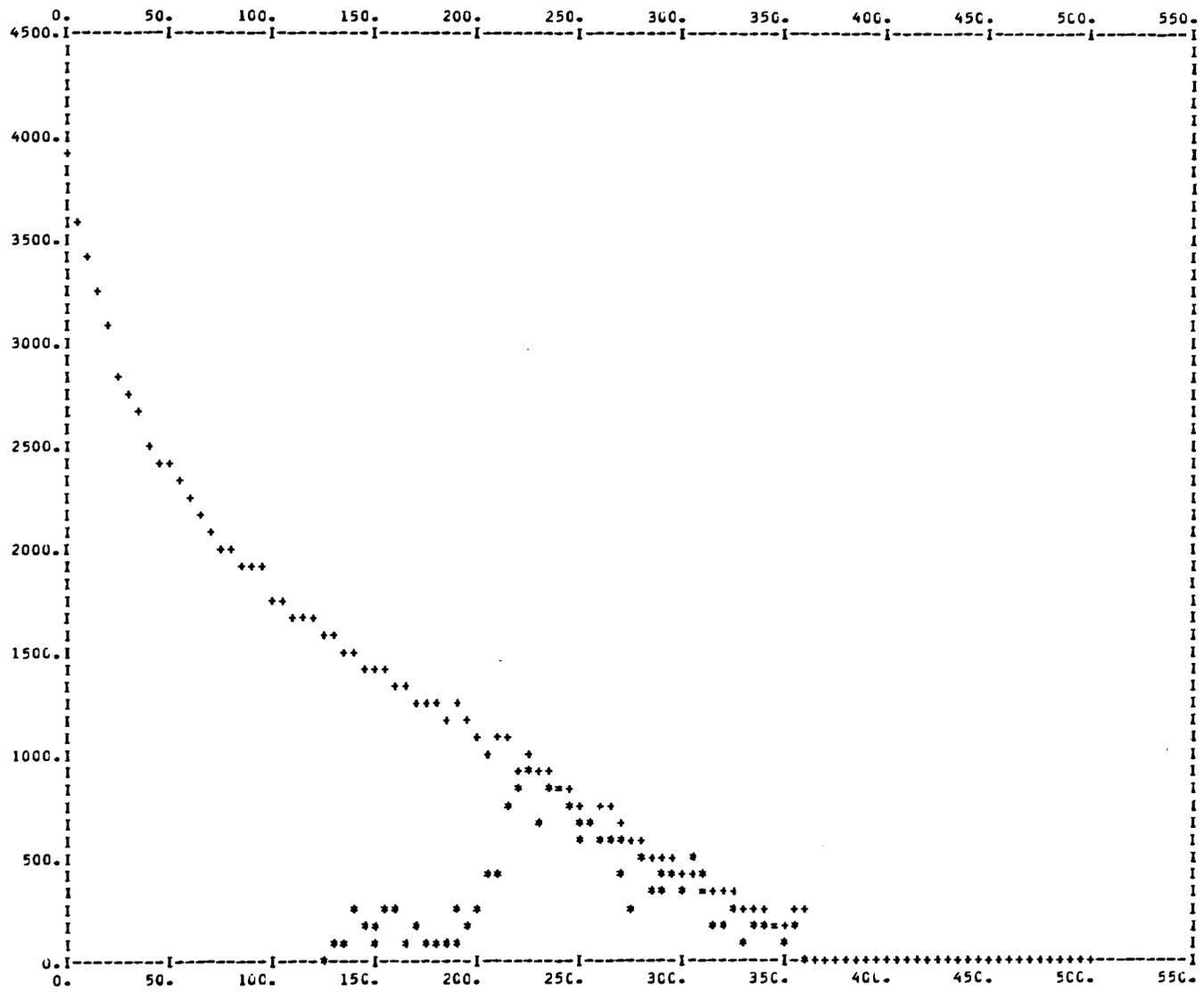
NUMBER OF PARTICLES : 400 = 20 * 20
 NUMBER OF UNIT CELLS / LAYER : 100
 NUMBER OF LAYERS : 11
 CORRESPONDING DEPTH : 5190. ANGSTROM

DAMAGE PROFILE

MEAN DISPLACEMENT : 0.0 ANGSTROM
 MEAN DEPTH : 2300. ANGSTROM
 PERCENTAGE : 50.0 %

MAXIMUM OF THE DISTRIBUTION FUNCTION : 2.667C

NC OF CALCULATED LAYERS : 11
 CPU-TIME USEC : 1087. SECONDS



BACKSCATTERING ENERGY SPECTRUM

D.3 PROGRAMM-LISTING


```

C R A N D 2 (F10.3): RANDOM VALUE FOR WINDOW 2 00001200
C I W I N D 3 (I4) : CH.NO. OF WINDOW NO. 3 00001210
C 00001220
C R A N D 3 (F10.3): RANDOM VALUE FOR WINDOW 3 00001230
C 00001240
C I W I N D 4 (I4) : CH.NO. OF WINDOW NO. 4 00001250
C 00001260
C R A N D 4 (F10.3): RANDOM VALUE FOR WINDOW 4 00001270
C 00001280
C I W I N D 5 (I4) : CH.NO. OF WINDOW NO. 5 00001290
C 00001300
C R A N D 5 (F10.3): RANDOM VALUE FOR WINDOW 5 00001310
C 00001320
C I W I D T H (I4) : WINDOW WIDTH (EVEN CHANNEL NUMBER) 00001330
C 00001340
C D P L C M (F10.5): MEAN STATIC DISPLACEMENT OF THE DISORDERED 00001350
C ATOMS IN ANGSTROM 00001360
C D P T M E A (F10.2): MEAN DEPTH OF THE DAMAGE REGION 00001370
C 00001380
C P E R C (F10.2): PERCENTAGE OF THE DISORDERED ATOMS AT THE 00001390
C MAXIMUM OF THE DEPTH PROFILE 00001400
C N U M E X (I1) : NUMBER OF EXPERIMENTAL SPECTRUM ON FILE 3 00001410
C (MUST BE 0, IF NC COMPARISON WITH 00001420
C AN EXPERIMENTAL SPECTRUM IS WANTED) 00001430
C 00001440
C F M U L T (F10.3): SCALING FACTOR TO ADJUST THE HEIGHT OF THE 00001450
C EXPERIMENTAL SPECTRA WITH DIFFERENT 00001460
C CHARGES 00001470
C R O T A T (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00001480
C ROTATE PHI (RANDOM SIMULATION) 00001490
C 00001500
C N O F L U X (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00001510
C SUPPRESS FLUX OUTPUT 00001520
C 00001530
C N O D O C U (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00001540
C SUPPRESS PART OF THE PRINTED OUTPUT 00001550
C 00001560
C N O S P E C (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00001570
C SUPPRESS THE PLOTS OF THE BACKSCATTERING SPECTRA 00001580
C 00001590
C S I S C (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO 00001600
C CALCULATE ONE BINARY COLLISION PER PLANE 00001610
C 00001620
C N E G L E C (L1) : LOGICAL VARIABLE, MUST BE TRUE TO CHECK 00001630
C THE INITIAL TRANSVERSE ENERGY 00001640
C 00001650
C E N D T (F10.3): TIME PARAMETER OF THE JOB CARD MINUS 00001660
C ESTIMATED RUN TIME FOR ONE LAYER 00001670
C 00001680
C 00001690
C 00001700
C 00001710
C 00001720
C 00001730
C 00001740
C 00001750
C 00001760
C 00001770
C 00001780
C 00001790

```

```

DIMENSION PXMAT(60,60), PYMAT(60,60)
DIMENSION XMAT(60,60), YMAT(60,60)
DIMENSION EMAT(60,60)

```

```

DIMENSION FLDST(60,60), EDST(60,60)
DIMENSION NTEXT(15), NTEXT1(15), NTEXT2(15), NTEXT3(15)
DIMENSION NTEXT4(15), NTEXT5(15)
DIMENSION CRITY(100), CRITY1(100), CRITY2(100), CRITY3(100)
DIMENSION CRITY4(100), CRITY5(100)
DIMENSION ASYMB(3), MLEN(3)

```

```

00001800
00001810
00001820
00001830
00001840
00001850
00001860
00001870
00001880
00001890
00001900
00001910
00001920
00001930
00001940
00001950
00001960
00001970
00001980
00001990
00002000
00002010
00002020
00002030
00002040
00002050
00002060
00002070
00002080
00002090
00002100
00002110
00002120
00002130
00002140
00002150
00002160
00002170
00002180
00002190
00002200
00002210
00002220
00002230
00002240
00002250
00002260
00002270
00002280
00002290
00002300
00002310
00002320
00002330
00002340
00002350
00002360
00002370
00002380
00002390

```

```
COMMON /WIND/ IWIND1, IWIND2, IWIND3, IWIND4, IWIND5
```

```

DATA FLDST/3600*0.0/, EDST/3600*0.0/
DATA NTEXT1/' ','ANGU','LAR','SCAN',' ',' '
1 'WIND','Ch 1',' ',' ',' ',' '
2 ' ',' ',' ',' ',' ',' '
DATA NTEXT2/' ','ANGU','LAR','SCAN',' ',' '
1 'WIND','Ch 2',' ',' ',' ',' '
2 ' ',' ',' ',' ',' ',' '
DATA NTEXT3/' ','ANGU','LAR','SCAN',' ',' '
1 'WIND','Ch 3',' ',' ',' ',' '
2 ' ',' ',' ',' ',' ',' '
DATA NTEXT4/' ','ANGU','LAR','SCAN',' ',' '
1 'WIND','Ch 4',' ',' ',' ',' '
2 ' ',' ',' ',' ',' ',' '
DATA NTEXT5/' ','ANGU','LAR','SCAN',' ',' '
1 'WIND','Ch 5',' ',' ',' ',' '
2 ' ',' ',' ',' ',' ',' '
DATA NFX/'F4.1'/, NFY/'F4.1'/
DATA FH/'OF1'/, FV/'OF1'/
DATA ASYMB/'1','2','3'/

```

```

REWIND 4
READ (5,2000) NDATA
PROCESSING OF DIFFERENT DATASETS
=====
DO 10 I = 1,NDATA
READ (5,1000) NX
READ (5,1000) NY
READ (5,1000) MEAN
READ (5,1000) NLAY
IUN = 11
REWIND 2
CALL XOT (PXMAT,PYMAT,XMAT,YMAT,EMAT,FLDST,EDST,NX,NY,
1 MEAN,NLAY,IUN)
END FILE 5
END FILE IUN
10 CONTINUE
END FILE 4
IF (NDATA .EQ. 1) GOTO 20

```

```

C          PLOTS OF ANGULAR SCANS
C          *****
C          REWIND 4
C          PI = 4.0 * ATAN (1.0)
C          WRITE (6,1010) IwIND1, IwIND2, IwIND3, IwIND4, IwIND5
C          DO 100 I = 1,NDATA
C          READ (4) CRITX(I)
C          READ (4) CRITY1(I)
C          READ (4) CRITY2(I)
C          READ (4) CRITY3(I)
C          READ (4) CRITY4(I)
C          READ (4) CRITY5(I)
C          WRITE (6,1020) CRITX(I), CRITY1(I), CRITY2(I), CRITY3(I),
C          1          CRITY4(I), CRITY5(I)
C          100 CONTINUE
C          XMAX = 2.0
C          YMAX = 1.5
C          XMIN = 0.0
C          YMIN = 0.0
C          NT = 1
C          NP = 3
C          INTA = 2
C          NPA = 1
C          INDZ = 2
C          SX = (XMAX - XMIN) / (100.0 * 10.0)
C          SY = (YMAX - YMIN) / (100.0 * 10.0)
C          IDPLOT = 1
C          XA = XMIN
C          DX = 0.1
C          XE = XMAX
C          NNX = 5
C          YA = YMIN
C          DY = 0.1
C          YE = YMAX
C          NNY = 5
C          DO 110 I = 1,15
C          NTEXT(I) = NTEXT1(I)
C          110 CONTINUE
C          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY1,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          DO 120 I = 1,15
C          NTEXT(I) = NTEXT2(I)
C          120 CONTINUE
C          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY2,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002400          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002410          DO 130 I = 1,15
C          00002420          NTEXT(I) = NTEXT3(I)
C          00002430          130 CONTINUE
C          00002440          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY3,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          00002450          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          00002460          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          00002470          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002480          DO 140 I = 1,15
C          00002490          NTEXT(I) = NTEXT4(I)
C          00002500          140 CONTINUE
C          00002510          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY4,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          00002520          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          00002530          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          00002540          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002550          DO 150 I = 1,15
C          00002560          NTEXT(I) = NTEXT5(I)
C          00002570          150 CONTINUE
C          00002580          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY5,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          00002590          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          00002600          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          00002610          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002620          DO 150 I = 1,15
C          00002630          NTEXT(I) = NTEXT5(I)
C          00002640          150 CONTINUE
C          00002650          CALL PLOTRT (CRITX,CRITY5,NDATA,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
C          00002660          1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
C          00002670          2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
C          00002680          3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C          00002690          LINEPLOT OF THE ANGULAR SCAN
C          00002700          *****
C          00002710
C          00002720
C          00002730
C          00002740          IH = 0
C          00002750          IV = 0
C          00002760          JH = - 5
C          00002770          JV = - 5
C          00002780          LH = 128
C          00002790          LV = 58
C          00002800          XH = 0.0
C          00002810          XV = 0.0
C          00002820          DH = 2.0
C          00002830          DV = 1.5
C          00002840          KH = 1
C          00002850          KV = 1
C          00002860          IG = 0
C          00002870          Iw = 6
C          00002880          IC = 0
C          00002890          NB = 3
C          00002900          MLEN(1) = NDATA
C          00002910          MLEN(2) = NDATA
C          00002920          MLEN(3) = NDATA
C          00002930          WRITE (6,1030)
C          00002940          CALL KURVE (IH,JH,LH,XH,DH,KH,FH,
C          00002950          1          IV,JV,LV,XV,DV,KV,FV,
C          00002960          2          IG,Iw,IC,NB,ASYMB,MLEN,
C          00002970          3          CRITX,CRITY1,CRITX,CRITY2,CRITX,CRITY3)
C          00002980
C          00002990
C          00003000          00003000
C          00003010          00003010
C          00003020          00003020
C          00003030          00003030
C          00003040          00003040
C          00003050          00003050
C          00003060          00003060
C          00003070          00003070
C          00003080          00003080
C          00003090          00003090
C          00003100          00003100
C          00003110          00003110
C          00003120          00003120
C          00003130          00003130
C          00003140          00003140
C          00003150          00003150
C          00003160          00003160
C          00003170          00003170
C          00003180          00003180
C          00003190          00003190
C          00003200          00003200
C          00003210          00003210
C          00003220          00003220
C          00003230          00003230
C          00003240          00003240
C          00003250          00003250
C          00003260          00003260
C          00003270          00003270
C          00003280          00003280
C          00003290          00003290
C          00003300          00003300
C          00003310          00003310
C          00003320          00003320
C          00003330          00003330
C          00003340          00003340
C          00003350          00003350
C          00003360          00003360
C          00003370          00003370
C          00003380          00003380
C          00003390          00003390
C          00003400          00003400
C          00003410          00003410
C          00003420          00003420
C          00003430          00003430
C          00003440          00003440
C          00003450          00003450
C          00003460          00003460
C          00003470          00003470
C          00003480          00003480
C          00003490          00003490
C          00003500          00003500
C          00003510          00003510
C          00003520          00003520
C          00003530          00003530
C          00003540          00003540
C          00003550          00003550
C          00003560          00003560
C          00003570          00003570
C          00003580          00003580
C          00003590          00003590

```



```

COMMON /SCA22/ XSCT22(3), YSCT22(3) 00004440 C
COMMON /SCA23/ XSCT23(2), YSCT23(2) 00004450 C
COMMON /SCA24/ XSCT24(3), YSCT24(3) 00004460 C
COMMON /SCA25/ XSCT25(4), YSCT25(4) 00004470 C
COMMON /SCA26/ XSCT26(3), YSCT26(3) 00004480 C
COMMON /SCA27/ XSCT27(2), YSCT27(2) 00004490
COMMON /SCA28/ XSCT28(3), YSCT28(3) 00004500
COMMON /EPCO/ EPCOV(6), EPCOSI(6) 00004510
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD, 00004520
1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV450004530
COMMON /RVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP, 00004540
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2, 00004550
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, ROTAT 00004560
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETEV, EETES 00004570
COMMON /WIND/ IWIND1, IWIND2, IWIND3, IWIND4, IWIND5 00004580
COMMON /MOLP/ ALFA(3), BETA(3) 00004590
00004600
00004610
00004620
00004630
00004640
00004650
00004660
00004670
00004680
00004690
00004700
00004710
00004720
00004730
00004740
00004750
00004760
00004770
00004780
00004790
00004800
00004810
00004820
00004830
00004840
00004850
00004860
00004870
00004880
00004890
00004900
00004910
00004920
00004930
00004940
00004950
00004960
00004970
00004980
00004990
00005000
00005010
00005020
00005030

```

INPUT STATEMENTS

```

READ (5,1010) A
READ (5,1013) [PART(I),I=1,4]
READ (5,1010) ZPART
READ (5,1030) FMPART
READ (5,1013) (CRYST(I),I=1,4)
READ (5,1010) ZV
READ (5,1010) FMV
READ (5,1010) ZSI
READ (5,1010) FMSI
READ (5,1020) RHOAT
READ (5,1010) TEMP
READ (5,1043) ISEC
READ (5,1030) THV1
READ (5,1030) THV2
READ (5,1030) THSI
READ (5,1010) Q
READ (5,1010) ORIGIN
READ (5,1010) FWHM
READ (5,1010) WIDTH
READ (5,1010) BANGLE
READ (5,1030) OMEGA
READ (5,1010) EXCITV
READ (5,1010) EXCITS
READ (5,1010) PLSMEN
READ (5,1010) ZVAL1
READ (5,1010) ZVAL2
READ (5,1020) EPCOV(1)
READ (5,1020) EPCOV(2)
READ (5,1020) EPCOV(3)
READ (5,1020) EPCOV(4)
READ (5,1020) EPCOV(5)
READ (5,1020) EPCOV(6)
READ (5,1020) EPCOSI(1)
READ (5,1020) EPCOSI(2)
READ (5,1020) EPCOSI(3)
READ (5,1020) EPCOSI(4)
READ (5,1020) EPCOSI(5)
READ (5,1020) EPCOSI(6)
READ (5,1040) PHI
READ (5,1040) THETA
READ (5,1040) DEPSI
READ (5,1040) EO
READ (5,3640) IWIND1
READ (5,1040) RAND1
READ (5,3640) IWIND2
READ (5,1040) RAND2
READ (5,3640) IWIND3
READ (5,1040) RAND3
READ (5,3640) IWIND4
READ (5,1040) RAND4
READ (5,3640) IWIND5
READ (5,1040) RAND5
READ (5,3640) IWINDTH
READ (5,1030) DPLCM
READ (5,1010) DPTMEA

```

```

00005040
00005050
00005060
00005070
00005080
00005090
00005100
00005110
00005120
00005130
00005140
00005150
00005160
00005170
00005180
00005190
00005200
00005210
00005220
00005230
00005240
00005250
00005260
00005270
00005280
00005290
00005300
00005310
00005320
00005330
00005340
00005350
00005360
00005370
00005380
00005390
00005400
00005410
00005420
00005430
00005440
00005450
00005460
00005470
00005480
00005490
00005500
00005510
00005520
00005530
00005540
00005550
00005560
00005570
00005580
00005590
00005600
00005610
00005620
00005630

```

```

DATA FH/' OF0'/, FV/' OF0'/
DATA FHF/' OF2'/
DATA NFX1/'I3 '/, NFX2/'F4-1'/
DATA NFY1/'I4 '/, NFY2/'I3 '/, NFY3/'I4 '/
DATA ASYMB/'*','+'
DATA DFCH/300*0.0/, EDECH/300*0.0/
DATA HGT/100*0.0/
DATA HSMO/512*0.0/, HEXP/512*0.0/, HETH/512*0.0/, HINT/512*0.0/
DATA PLX/512*0.0/, PLF/512*0.0/, PLE/512*0.0/
DATA SDECH/3*0.0/, ESDECH/3*0.0/
DATA NQRD/3*0/
DATA CHNUM/512*0.0/
DATA AX/512*0.0/, AY/512*0.0/
DATA HGTEX/100*0.0/
DATA NTEXT1/' ', 'BACK', 'SCAT', 'TERI', 'NG E', 'NERG', 'Y SP',
1 'ECTR', 'UM ', 'IN C', 'OUNT', 'S / ', 'CHAN', 'NEL ',
2 ' '
DATA NTEXT2/' ', 'FLUX', ' PRO', 'FILE', ' AVE', 'RAGE', 'C OV',
1 'ER ', '472 ', 'ANGS', 'TROE', 'M ', ' ', ' ',
2 ' '
DATA NTEXT3/' ', 'ENER', 'GY P', 'ROFI', 'LE A', 'VERA', 'GED ',
1 'OVER', ' 47', '2 AN', 'GSTR', 'DEM ', ' ', ' ',
2 ' '

```

```

DD 1011 K = 1.150
DD 1012 I = 1.150
BS(I,K) = 0.0
1012 CONTINUE
1011 CONTINUE

```

COEFFICIENTS FOR THE MOLIERE - POTENTIAL

```

ALFA(1) = 0.1
ALFA(2) = 0.55
ALFA(3) = 0.35
BETA(1) = 6.0
BETA(2) = 1.2
BETA(3) = 0.3

```

```

READ (5,1010) PERC
READ (5,1041) NUMEX
READ (5,1040) FMULT
READ (5,1042) ROTAT
READ (5,1042) NOFLUX
READ (5,1042) NODOCU
READ (5,1042) NOSPEC
READ (5,1042) SISC
READ (5,1042) NEGLEC
READ (5,1040) ENDT

C
C
PI = 4.0 * ATAN(1.0)
AHYD = 0.529
RHT = RHOAT
RHOAT = RHOAT / 1.0E24
NUM = NX * NY
RNX = FLOAT(NX)
RNY = FLOAT(NY)
EMIN = 500.0
A2 = A / 2.0
A4 = A / 4.0
A15 = A * 1.5
ASQ = SQRT (2.0) * A
ASQ2 = ASQ / 2.0
ASQ4 = ASQ / 4.0
ASQ8 = ASQ / 8.0
ASQ15 = 1.5 * ASQ
RYD = 0.0136
THV45 = 1.0 / (COS (PI / 4.0) * SQRT (1.0 / (THV1 * THV1)
1 + 1.0 / (THV2 * THV2)))
ZVAL = 3. * ZVAL1 / 4. + ZVAL2 / 4.

C
C
MASS UNIT IN KEV / C ** 2
=====

UMASS = 931481.0

C
C
SPEED OF LIGHT IN CM / SEC
=====

CLIGHT = 3.0E+10
UCSQ = UMASS / (CLIGHT * CLIGHT)
UCSQ = UCSQ * FMPART

C
C
V - FERMI IN CM / SEC
=====

VFERMI = 2.6E+8
FMELEC = 5.4859E-4
ELSCAT = FMELEC / (2. * FMPART)
DEPHI = PI / (2.0 * FLOAT (NUM) )
PHILIM = 20.0 * PI / 180.0
U2V = THV2 * SQRT (2.0)
U2S = THSI * SQRT (2.0)
RESOLE = WIDTH
RESOLD = 50.0
ESQR = 1.44E-2
ATFV = 0.8853 * AHYD / ZV ** (1./3.)
ATFSI = 0.8853 * AHYD / ZSI ** (1./3.)

00005640 THEV = ZPART * ZV * RYD * 2.0 * AHYD / ATFV
00005650 THESI = ZPART * ZSI * RYD * 2.0 * AHYD / ATFSI
00005660 C
00005670 Q0 = 0
00005680 Q = Q * 6.25E+11
00005690 C
00005700 PHI = PHI * PI / 180.0
00005710 THETA = THETA * PI / 180.0
00005720 DEPSI = DEPSI * PI / 180.0
00005730 COSPHI = COS (PHI)
00005740 SINPHI = SIN (PHI)
00005750 C
00005760 C
00005770 ENDT = ENDT * 60.0
00005780 C
00005790 C
00005800 C
00005810 C
00005820 C
00005830 C
00005840 C
00005850 C
00005860 C
00005870 C
00005880 C
00005890 C
00005900 C
00005910 C
00005920 C
00005930 C
00005940 C
00005950 C
00005960 C
00005970 C
00005980 C
00005990 C
00006000 C
00006010 C
00006020 C
00006030 C
00006040 C
00006050 C
00006060 C
00006070 C
00006080 C
00006090 C
00006100 C
00006110 C
00006120 C
00006130 C
00006140 C
00006150 C
00006160 C
00006170 C
00006180 C
00006190 C
00006200 C
00006210 C
00006220 C
00006230 C

THEV = ZPART * ZV * RYD * 2.0 * AHYD / ATFV
THESI = ZPART * ZSI * RYD * 2.0 * AHYD / ATFSI

Q0 = 0
Q = Q * 6.25E+11

PHI = PHI * PI / 180.0
THETA = THETA * PI / 180.0
DEPSI = DEPSI * PI / 180.0
COSPHI = COS (PHI)
SINPHI = SIN (PHI)

ENDT = ENDT * 60.0

CALCULATION OF THE START VALUES
=====

CALL START (DEPSI,PXMAT,PYMAT,XMAT,YMAT,
1 EMAT,NX,NY,EO)

REWIND 1
READ (1) PXMAT
READ (1) PYMAT
READ (1) XMAT
READ (1) YMAT
READ (1) EMAT
READ (1) TA
READ (1) SILV, SILSI

CALCULATION OF THE RANDOM VALUES
=====

S = 1.0
AM = 0.0
IX0 = 563245897

DO 3000 I = 1,12000
CALL GAUSS (IX0,S,AM,V)
PNORM(I) = V
THVBV1(I) = 0.0
THVBV2(I) = 0.0
THVBSI(I) = 0.0
IF (THV1 .EQ. 0.0) GOTO 3000
CALL GAUSS (IX0,THV1,AM,V)
THVRV1(I) = V
CALL GAUSS (IX0,THV2,AM,V)
THVBV2(I) = V
CALL GAUSS (IX0,THSI,AM,V)
THVBSI(I) = V
3000 CONTINUE

IX0 = 1506561
IX = 200453
DO 5280 I = 1,2200
CALL RANDU (IX,IY,XRAND)
IX = IY

```

```

PUNIF(I) = XRAND
CALL GAUSS (IXO,S,AM,V)
PDPLC(I) = V
5280 CONTINUE
C
C
C CALL DATUM (DATE,TIME)
C
C
C      C U T P U T   O F   C O N T R O L   V A L U E S
C      =====
C
WRITE (6,1410) DATE, TIME
WRITE (6,1170)
WRITE (6,1171) (CRYST(I),I=1,4), ZV, FMV, EXCITV, ZSI, FMSI,
1      EXCITS
PSX = PH1 * 180.0 / PI
PSY = THETA * 180.0 / PI
DPS = DEPSI * 180.0 / PI
WRITE (6,1172) A, RHT, PLSMEN, ZVAL
WRITE (6,1173) (PART(I),I=1,4), ZPART, FMPART, EQ, QQ,
1      DPS, TEMP, THV1, THV2, YHSI, PSX, ROTAT, PSY
WRITE (6,1174) FWHM, WIDTH, ORIGIN, BANGLE, CMEGA,
1      IWIND1, IWIDTH, RAND1, IWIND2, IWIDTH, RAND2,
2      IWIND3, IWIDTH, RAND3, IWIND4, IWIDTH, RAND4,
3      IWIND5, IWIDTH, RAND5
WRITE (6,1190)
AVRG = A * FLOAT (MEAN)
DEPTH = A * NLAY * MEAN
IF ( ISEC .EQ. 2) AVRG = ASQ * FLOAT (MEAN)
IF ( ISEC .EQ. 2) DEPTH = ASQ * NLAY * MEAN
WRITE (6,1195) NUM, NX, NY, MEAN, NLAY, DEPTH
WRITE (6,5295) DPLCM, OPTMEA, PERC
C
C
C      EXCITV = EXCITV / 1000.0
C      EXCITS = EXCITS / 1000.0
C      PLSMEN = PLSMEN / 1000.0
C      EPO = 2.0 * PI * ZPART * ZPART * ESQR ** 2.0
C      EPO = EPO * FMPART * RHOAT / FMELEC
C      BETHEV = 4.0 * FMELEC / (FMPART * EXCITV)
C      BETHES = 4.0 * FMELEC / (FMPART * EXCITS)
C      PLASMO = 4.0 * FMELEC / (FMPART * PLSMEN)
C      BANGLE = BANGLE * PI / 180.0
C      FL1 = COS (THETA + BANGLE - PI / 2.0)
C      FN1 = COS (THETA + BANGLE)
C      COSTHE = COS (THETA)
C
C
C      CALL KINFCT (FMV,FKFV)
C      CALL KINFCT (FMSI,FKFS)
C      ELIM = FKFV * EO
C      IMP = 0
C
C      IF (.NOT. NEGLEC) GOTO 3820
C
C
C      LIMITATION TO PARTICLES WITH HIGH TRANSVERSE ENERGY
C      =====

```

```

00006840 C
00006850 IF (THV1 .EQ. 0.0) GOTO 3820
00006860 FMOL1 = ZPART * ZV * ESQR
00006870 FMOL2 = ZPART * ZSI * ESQR
00006880 SCRIT1 = 5.0 * THV2
00006890 SCRIT2 = 5.0 * THSI
00006900 UCRIT1 = 0.0
00006910 UCRIT2 = 0.0
00006920 DO 3700 I = 1,3
00006930 BSREL1 = - BETA(I) * SCRIT1 / ATFV
00006940 BSREL2 = - BETA(I) * SCRIT2 / ATFSI
00006950 IF (BSREL1 .LT. -100.0) GOTO 3700
00006960 UCRIT1 = UCRIT1 + ALFA(I) * EXP ( BSREL1 )
00006970 IF (BSREL2 .LT. -100.0) GOTO 3700
00006980 UCRIT2 = UCRIT2 + ALFA(I) * EXP ( BSREL2 )
00006990 3700 CONTINUE
00007000 UCRIT1 = UCRIT1 * FMOL1 / SCRIT1
00007010 UCRIT2 = UCRIT2 * FMOL2 / SCRIT2
00007020 WRITE (6,3840) UCRIT1, UCRIT2
00007030 C
00007040 IF (ISEC .EQ. 2) GOTO 5300
00007050 C
00007060 1 0 0 - DIRECTION
00007070 C
00007080 C
00007090 DO 3710 L = 1,NX
00007100 DO 3710 K = 1,NY
00007110 PXREL = PXMAT(K,L)
00007120 PYREL = PYMAT(K,L)
00007130 X = XMAT(K,L)
00007140 Y = YMAT(K,L)
00007150 E = EMAT(K,L)
00007160 PSI = ARCOS (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
00007170 EPSI2 = E * PSI * PSI
00007180 VSUM = 0.0
00007190 DO 3720 I = 1,4
00007200 V1 = 0.0
00007210 S = SORT ((X - XSCAT1(I)) * (X - XSCAT1(I)) +
00007220 (Y - YSCAT1(I)) * (Y - YSCAT1(I)))
00007230 SREL = S / ATFV
00007240 DO 3730 M = 1,3
00007250 BESREL = - BETA(M) * SREL
00007260 IF (BESREL .LT. -100.0) GOTO 3730
00007270 V1 = V1 + ALFA(M) * EXP ( BESREL )
00007280 3730 CONTINUE
00007290 VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S
00007300 3720 CONTINUE
00007310 DO 3740 I = 5,6
00007320 V2 = 0.0
00007330 S = SORT ((X - XSCAT1(I)) * (X - XSCAT1(I)) +
00007340 (Y - YSCAT1(I)) * (Y - YSCAT1(I)))
00007350 SREL = S / ATFSI
00007360 DO 3750 M = 1,3
00007370 BESREL = - BETA(M) * SREL
00007380 IF (BESREL .LT. -100.0) GOTO 3750
00007390 V2 = V2 + ALFA(M) * EXP ( BESREL )
00007400 3750 CONTINUE
00007410 VSUM = VSUM + V2 * FMOL2 / S
00007420 3740 CONTINUE
00007430 VSUM = VSUM + EPSI2

```

```

00007440
00007450
00007460
00007470
00007480
00007490
00007500
00007510
00007520
00007530
00007540
00007550
00007560
00007570
00007580
00007590
00007600
00007610
00007620
00007630
00007640
00007650
00007660
00007670
00007680
00007690
00007700
00007710
00007720
00007730
00007740
00007750
00007760
00007770
00007780
00007790
00007800
00007810
00007820
00007830
00007840
00007850
00007860
00007870
00007880
00007890
00007900
00007910
00007920
00007930
00007940
00007950
00007960
00007970
00007980
00007990
00008000
00008010
00008020
00008030

```

```

C      IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 3710
C
VSUM = 0.0
DO 3760 I = 1,4
V1 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCAT3(I)) * (X - XSCAT3(I)) +
1      (Y - YSCAT3(I)) * (Y - YSCAT3(I)))
SREL = S / ATFV
DO 3770 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. -100.0) GOTC 3770
V1 = V1 + ALFA(M) * EXP ( BESREL )
3770 CONTINUE
VSUM = VSUM + V1 * FMCL1 / S
3760 CONTINUE
DO 3780 I = 5,6
V2 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCAT3(I)) * (X - XSCAT3(I)) +
1      (Y - YSCAT3(I)) * (Y - YSCAT3(I)))
SREL = S / ATFSI
DO 3790 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. -100.0) GOTC 3790
V2 = V2 + ALFA(M) * EXP ( BESREL )
3790 CONTINUE
VSUM = VSUM + V2 * FMCL2 / S
3780 CONTINUE
VSUM = VSUM + EPSI2
C
IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 3710
C
VSUM = 0.0
V1 = 0.0
S = SQRT (X * X + Y * Y)
SREL = S / ATFV
DO 3800 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. -100.0) GOTC 3800
V1 = V1 + ALFA(M) * EXP ( BESREL )
3800 CONTINUE
VSUM = VSUM + V1 * FMCL1 / S
VSUM = VSUM + EPSI2
C
IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 3710
C
EMAT(K,L) = 0.0
IMP = IMP + 1
C
3710 CONTINUE
C
GOTO 5310
5300 CONTINUE
C
1 1 0 - DIRECTION
*****
C
DO 5320 L = 1,NX
DO 5320 K = 1,NY

```

```

00008040      PXREL = PXMAT(K,L)
00008050      PYREL = PYMAT(K,L)
00008060      X = XMAT(K,L)
00008070      Y = YMAT(K,L)
00008080      E = EMAT(K,L)
00008090      PSI = ARCCOS (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
00008100      EPSI2 = E * PSI * PSI
00008110      VSUM = 0.0
00008120      DO 5330 I = 1,5
00008130      V2 = 0.0
00008140      S = SQRT ((X - XSCT21(I)) * (X - XSCT21(I)) +
1      (Y - YSCT21(I)) * (Y - YSCT21(I)))
00008150      SREL = S / ATFSI
00008160      DO 5340 M = 1,3
00008170      BESREL = - BETA(M) * SREL
00008180      IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5340
00008190      V2 = V2 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
00008200      5340 CONTINUE
00008210      VSUM = VSUM + V2 * FMCL2 / S
00008220      5330 CONTINUE
00008230      VSUM = VSUM + EPSI2
00008240      C
00008250      IF (VSUM .GT. UCRIT2) GOTC 5320
00008260      C
00008270      VSUM = 0.0
00008280      DO 5350 I = 1,3
00008290      V1 = 0.0
00008300      S = SQRT ((X - XSCT22(I)) * (X - XSCT22(I)) +
1      (Y - YSCT22(I)) * (Y - YSCT22(I)))
00008310      SREL = S / ATFV
00008320      DO 5360 M = 1,3
00008330      BESREL = - BETA(M) * SREL
00008340      IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5360
00008350      V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
00008360      5360 CONTINUE
00008370      VSUM = VSUM + V1 * FMCL1 / S
00008380      5350 CONTINUE
00008390      VSUM = VSUM + EPSI2
00008400      C
00008410      IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 5320
00008420      C
00008430      VSUM = 0.0
00008440      DO 5370 I = 1,2
00008450      V1 = 0.0
00008460      S = SQRT ((X - XSCT23(I)) * (X - XSCT23(I)) +
1      (Y - YSCT23(I)) * (Y - YSCT23(I)))
00008470      SREL = S / ATFV
00008480      DO 5380 M = 1,3
00008490      BESREL = - BETA(M) * SREL
00008500      IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5380
00008510      V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
00008520      5380 CONTINUE
00008530      VSUM = VSUM + V1 * FMCL1 / S
00008540      5370 CONTINUE
00008550      VSUM = VSUM + EPSI2
00008560      C
00008570      IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 5320
00008580      C
00008590      VSUM = 0.0
00008600      DO 5390 I = 1,3
00008610
00008620
00008630

```

```

00008640
00008650
00008660
00008670
00008680
00008690
00008700
00008710
00008720
00008730
00008740
00008750
00008760
00008770
00008780
00008790
00008800
00008810
00008820
00008830
00008840
00008850
00008860
00008870
00008880
00008890
00008900
00008910
00008920
00008930
00008940
00008950
00008960
00008970
00008980
00008990
00009000
00009010
00009020
00009030
00009040
00009050
00009060
00009070
00009080
00009090
00009100
00009110
00009120
00009130
00009140
00009150
00009160
00009170
00009180
00009190
00009200
00009210
00009220
00009230

```

```

V1 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCT24(I)) * (X - XSCT24(I)) +
1 (Y - YSCT24(I)) * (Y - YSCT24(I)))
SREL = S / ATFV
DO 5400 M = 1,3
BFSREL = - 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
C
IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTO 5320
C
VSUM = 0.0
DO 5410 I = 1,4
V2 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCT25(I)) * (X - XSCT25(I)) +
1 (Y - YSCT25(I)) * (Y - YSCT25(I)))
SREL = S / ATFS1
DO 5420 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5420
V2 = V2 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
5420 CONTINUE
VSUM = VSUM + V2 * FMOL2 / S
5410 CONTINUE
VSUM = VSUM + EPSI2
C
IF (VSUM .GT. UCRIT2) GOTO 5320
C
VSUM = 0.0
DO 5430 I = 1,3
V1 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCT26(I)) * (X - XSCT26(I)) +
1 (Y - YSCT26(I)) * (Y - YSCT26(I)))
SREL = S / ATFV
DO 5440 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5440
V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
5440 CONTINUE
VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S
5430 CONTINUE
VSUM = VSUM + EPSI2
C
IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTO 5320.
C
VSUM = 0.0
DO 5450 I = 1,2
V1 = 0.0
S = SQRT ((X - XSCT27(I)) * (X - XSCT27(I)) +
1 (Y - YSCT27(I)) * (Y - YSCT27(I)))
SREL = S / ATFV
DO 5460 M = 1,3
BESREL = - BETA(M) * SREL
IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTC 5460
V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
5460 CONTINUE

```

```

00009240 VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S
00009250 5450 CONTINUE
00009260 VSUM = VSUM + EPSI2
00009270 C
00009280 IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTO 5320
00009290 C
00009300 VSUM = 0.0
00009310 DO 5470 I = 1,3
00009320 V1 = 0.0
00009330 S = SQRT ((X - XSCT28(I)) * (X - XSCT28(I)) +
00009340 1 (Y - YSCT28(I)) * (Y - YSCT28(I)))
00009350 SRFL = S / ATFV
00009360 DO 5480 M = 1,3
00009370 BESREL = - BETA(M) * SREL
00009380 IF (BESREL .LT. - 100.0) GOTO 5480
00009390 V1 = V1 + ALFA(M) * EXP (BESREL)
00009400 5480 CONTINUE
00009410 VSUM = VSUM + V1 * FMOL1 / S
00009420 5470 CONTINUE
00009430 VSUM = VSUM + EPSI2
00009440 C
00009450 IF (VSUM .GT. UCRIT1) GOTC 5320
00009460 C
00009470 EMAT(K,L) = 0.0
00009480 IMP = IMP + 1
00009490 C
00009500 5320 CONTINUE
00009510 C
00009520 5310 CONTINUE
00009530 C
00009540 WRITE (6,3810) IMP
00009550 C
00009560 3820 CONTINUE
00009570 NNUM = NUM - IMP
00009580 C
00009590 C
00009600 C OUTPUT OF THE START VALUES
00009610 C =====
00009620 C
00009630 C
00009640 IF (NDDOCU) GOTO 4550
00009650 WRITE (6,1060)
00009660 WRITE (6,1050) PXMAT
00009670 WRITE (6,1070)
00009680 WRITE (6,1050) PYMAT
00009690 WRITE (6,1080)
00009700 WRITE (6,1050) XMAT
00009710 WRITE (6,1090)
00009720 WRITE (6,1050) YMAT
00009730 WRITE (6,1100)
00009740 WRITE (6,1050) EMAT
00009750 C WRITE (6,1110)
00009760 C WRITE (6,1050) TA
00009770 C WRITE (6,1120)
00009780 C WRITE (6,1050) SILV
00009790 C WRITE (6,1130)
00009800 C WRITE (6,1050) SILSI
00009810 C WRITE (6,1140)
00009820 C WRITE (6,1050) PNORM
00009830 C WRITE (6,1150)

```

```

00009840
00009850
00009860
00009870
00009880
00009890
00009900
00009910
00009920
00009930
00009940
00009950
00009960
00009970
00009980
00009990
00010000
00010010
00010020
00010030
00010040
00010050
00010060
00010070
00010080
00010090
00010100
00010110
00010120
00010130
00010140
00010150
00010160
00010170
00010180
00010190
00010200
00010210
00010220
00010230
00010240
00010250
00010260
00010270
00010280
00010290
00010300
00010310
00010320
00010330
00010340
00010350
00010360
00010370
00010380
00010390
00010400
00010410
00010420
00010430

```

```

C WRITE (6,1050) THVBV1
C WRITE (6,1160)
C WRITE (6,1050) THVRS1
C
4550 CONTINUE
C
C
C
C CALCULATION OF THE TRAJECTORIES
C =====
C
C CALL STRUCT (A)
C CALL DAMGPR (DAMAX)
C
C IX0 = 672381545
C BEGIN = ZEIT (0)
C FLMAX = 0.0
C
C
C 1 0 0 - DIRECTION
C =====
C
C IF (ISEC .EQ. 2) GOTO 5000
C
C DO 3020 J = 1,NLAY
C
C JJ = J
C DO 3025 J2 = 1,NX
C DO 3025 J1 = 1,NY
C FLDST(J1,J2) = 0.0
C EDST(J1,J2) = 0.0
3025 CONTINUE
C
C DO 3030 I = 1,MEAN
C DPTH = (J - 1) * MEAN * A + I * A
C DPTH = DPTH - A / 2.0
C IDEPTH = IFIX (DPTH / RESOLD + 0.5)
C PHIT = PHI
C CALL DISTFU (DPTH,DPTMEA,DAMAX,DISTR)
C PRDP = PERC / 100. * DISTR
C
C CALL RANDU (IX0,IY0,XRAND)
C IX0 = IY0
C IEQ1 = IFIX (2000.0 * XRAND) + 1
C
C DO 3010 K = 1,NX
C DO 3010 L = 1,NY
C
C IF (.NOT. ROTAT) GOTO 4540
C PHIT = PHIT + DEPHI
C COSPHI = COS (PHIT)
C SINPHI = SIN (PHIT)
4540 X = XMAT(L,K)
C Y = YMAT(L,K)
C PXREL = PXMAT(L,K)
C PYREL = PYMAT(L,K)
C E = EMAT(L,K)

```

```

00010440 C
00010450 IF (E.EQ.0.0) GOTO 3010
00010460 IF (E.LT.EMIN) GOTO 3130
00010470 C
00010480 EMAT(L,K) = 0.0
00010490 C
00010500 C
00010510 CALL RANDU (IX0,IY0,XRAND)
00010520 IX0 = IY0
00010530 IGAUSS = IFIX (10000.0 * XRAND) + 1
00010540 IEQ = IEQ1
00010550 C
00010560 C
00010570 CALL SCAT1 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,
00010580 1
00010590 63040,63050,63045,63055)
00010600 C
00010610 X = AMOD (X + SIGN (A2,X) , A)
00010620 X = X - SIGN (A2,X)
00010630 Y = AMOD (Y + SIGN (A2,Y) , A)
00010640 Y = Y - SIGN (A2,Y)
00010650 XSUB = AMOD (X + A15 , A)
00010660 YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
00010670 INTX = IFIX (RNX * XSUB / A) + 1
00010680 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00010690 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
00010700 EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
00010710 GOTO 3060
00010720 C
00010730 C
00010740 3040 ID = J
00010750 DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
00010760 EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
00010770 EMAT(L,K) = 0.0
00010780 GOTO 3130
00010790 C
00010800 C
00010810 3045 IF (J.GT.1) GOTO 3040
00010820 SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
00010830 ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
00010840 EMAT(L,K) = 0.0
00010850 GOTO 3130
00010860 C
00010870 C
00010880 3050 ID = J
00010890 DECH(ID,3) = DECH(ID,3) + 1.0
00010900 FDECH(ID,3) = FDECH(ID,3) + E
00010910 EMAT(L,K) = 0.0
00010920 GOTO 3130
00010930 C
00010940 C
00010950 3055 IF (J.GT.1) GOTO 3050
00010960 SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0
00010970 ESDECH(3) = ESDECH(3) + E
00010980 EMAT(L,K) = 0.0
00010990 GOTO 3130
00011000 C
00011010 C
00011020 3060 CONTINUE
00011030 C

```

```

00011040
00011050
00011060
00011070
00011080
00011090
00011100
00011110
00011120
00011130
00011140
00011150
00011160
00011170
00011180
00011190
00011200
00011210
00011220
00011230
00011240
00011250
00011260
00011270
00011280
00011290
00011300
00011310
00011320
00011330
00011340
00011350
00011360
00011370
00011380
00011390
00011400
00011410
00011420
00011430
00011440
00011450
00011460
00011470
00011480
00011490
00011500
00011510
00011520
00011530
00011540
00011550
00011560
00011570
00011580
00011590
00011600
00011610
00011620
00011630

```

C	CALL SCAT2 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,&3070,&3075)	00011640	GOTO 3130	00012240
C		00011650		00012250
C	X = AMOD (X + SIGN(A2,X) , A)	00011660		00012260
	X = X - SIGN(A2,X)	00011670	3100 ID = J	00012270
	Y = AMOD (Y + SIGN (A2,Y) , A)	00011680	DECH(ID,3) = DECH(ID,3) + 1.0	00012280
	Y = Y - SIGN (A2,Y)	00011690	EDECH(ID,3) = EDECH(ID,3) + E	00012290
	XSUB = AMOD (X + A15 , A)	00011700	EMAT(L,K) = 0.0	00012300
	YSUB = AMOD (Y + A15 , A)	00011710	GOTO 3130	00012310
	INTX = IFIX (RNX * XSUB / A) + 1	00011720		00012320
	INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1	00011730		00012330
	FLODST(INTY,INTX) = FLODST(INTY,INTX) + 1.0	00011740	3105 IF (J.GT.1) GOTO 3100	00012340
	EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E	00011750	SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0	00012350
	GOTO 3080	00011760	ESDECH(3) = ESDECH(3) + E	00012360
		00011770	EMAT(L,K) = 0.0	00012370
		00011780	GOTO 3130	00012380
		00011790		00012390
C		00011800		00012400
C	3070 ID = J	00011810	3110 CONTINUE	00012410
	DECH(ID,2) = DECH(ID,2) + 1.0	00011820		00012420
	EDECH(ID,2) = EDECH(ID,2) + E	00011830		00012430
	EMAT(L,K) = 0.0	00011840		00012440
	GOTO 3130	00011850	CALL SCAT2 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,&3120,&3122)	00012450
		00011860		00012460
C		00011870		00012470
C	3075 IF (J.GT.1) GOTO 3070	00011880	X = AMOD (X + SIGN (A2,X) , A)	00012480
	SDECH(2) = SDECH(2) + 1.0	00011890	X = X - SIGN (A2,X)	00012490
	ESDECH(2) = ESDECH(2) + E	00011900	Y = AMOD (Y + SIGN (A2,Y) , A)	00012500
	EMAT(L,K) = 0.0	00011910	Y = Y - SIGN (A2,Y)	00012510
	GOTO 3130	00011920	XSUB = AMOD (X + A15 , A)	00012520
		00011930	YSUB = AMOD (Y + A15 , A)	00012530
C		00011940	INTX = IFIX (RNX * XSUB / A) + 1	00012540
C	3080 CONTINUE	00011950	INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1	00012550
		00011960	FLODST(INTY,INTX) = FLODST(INTY,INTX) + 1.0	00012560
		00011970	EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E	00012570
		00011980	GOTO 3125	00012580
		00011990		00012590
C	CALL SCAT3 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,	00012000		00012600
	1	00012010	3120 ID = J	00012610
	&3090,&3100,&3095,&3105)	00012020	DECH(ID,2) = DECH(ID,2) + 1.0	00012620
		00012030	EDECH(ID,2) = EDECH(ID,2) + E	00012630
		00012040	EMAT(L,K) = 0.0	00012640
		00012050	GOTO 3130	00012650
		00012060		00012660
		00012070		00012670
		00012080	3122 IF (J.GT.1) GOTO 3120	00012680
		00012090	SDECH(2) = SDECH(2) + 1.0	00012690
		00012100	ESDECH(2) = ESDECH(2) + E	00012700
		00012110	EMAT(L,K) = 0.0	00012710
		00012120	GOTO 3130	00012720
		00012130		00012730
		00012140		00012740
		00012150	3125 CONTINUE	00012750
		00012160		00012760
		00012170		00012770
		00012180		00012780
		00012190	IF (E.LT.EMIN) GOTO 3130	00012790
		00012200		00012800
		00012210		00012810
		00012220	PXMAT(L,K) = PXREL	00012820
		00012230	PYMAT(L,K) = PYREL	00012830
			XMAT(L,K) = X	

```

      YMAT(L,K) = Y
      EMAT(L,K) = E
3130 CONTINUE
C
C
3010 CONTINUE
C
3030 CONTINUE
C
      CHANGE TO PERCENTAGE OF NORMALIZED FLUX
      =====
      DO 3210 K = 1,NX
      DO 3210 L = 1,NY
      IF (FLDST(L,K) .GT. 0.0) EDST(L,K) = EDST(L,K) / FLDST(L,K)
      FLDST(L,K) = FLDST(L,K) / (4.0 * MEAN * NNUM / NUM) * 100.0
      IF (FLDST(L,K) .GT. FLMAX) FLMAX = FLDST(L,K)
C
3210 CONTINUE
C
C
      OUTPUT OF FLDST AND EDST ON TAPE AND TSTLIB
      =====
      WRITE (IUN) FLDST
      WRITE (IUN) EDST
      WRITE (2) FLDST
      WRITE (2) EDST
C
C
      DIFF = ZEIT (BEGIN)
      IF (DIFF.GT.ENDT) GOTO 3021
C
3020 CONTINUE
C
3021 CONTINUE
C
      END OF THE CHANNELING PROCESS
      =====
      DIFF = ZEIT (BEGIN)
      WRITE (6,3022) JJ, DIFF
      DEPTH = JJ * MEAN * A
      NLAY = JJ
C
      GOTO 5230
C
      1 1 0 - DIRECTION
      =====
5000 CONTINUE
C
      DO 5020 J = 1,NLAY

```

```

00012840 C
00012850 C
00012860 DO 5025 J2 = 1,NX
00012870 DO 5025 J1 = 1,NY
00012880 FLDST(J1,J1) = 0.0
00012890 EDST(J1,J2) = 0.0
00012900 5025 CONTINUE
00012910 C
00012920 DO 5030 I = 1,MEAN
00012930 DPTH = (J - 1) * MEAN * ASQ + I * ASQ
00012940 DPTH = DPTH - ASQ2
00012950 IDEPTH = IFIX (DPTH / RESOLD + 0.5)
00012960 PHIT = PHI
C
00012970 CALL RANDU (IXO,IYO,XRAND)
00012980 IXO = IYO
00012990 IEQ1 = IFIX (2000.0 * XRAND) + 1
00013010 C
00013020 DO 5010 K = 1,NX
00013030 DO 5010 L = 1,NY
C
00013050 IF (.NOT. ROTAT) GOTC 5040
00013060 PHIT = PHIT + DEPHI
00013070 COSPHI = COS (PHIT)
00013080 SINPHI = SIN (PHIT)
00013090 5040 CONTINUE
00013100 C
00013110 X = XMAT(L,K)
00013120 Y = YMAT(L,K)
00013130 PXREL = PXMAT(L,K)
00013140 PYREL = PYMAT(L,K)
00013150 E = EMAT(L,K)
C
00013160 IF (E .EQ. 0.0) GCTO 5010
00013170 IF (E .LT. EMIN) GOTO 5130
C
00013200 EMAT(L,K) = 0.0
C
00013210 CALL RANDU (IXO,IYO,XRAND)
00013220 IXO = IYO
00013230 IGAUSS = IFIX (10000.0 * XRAND) + 1
C
00013240 IEQ = IEQ1
C
00013250 CALL SCAT21 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEC,IDEPTH,&5050,&5055)
C
00013260 C
00013270 C
00013280 C
00013290 C
00013300 C
00013310 X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
00013320 X = X - SIGN (ASQ2 , X)
00013330 Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
00013340 Y = Y - SIGN (A2 , Y)
00013350 XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
00013360 YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
00013370 INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1
00013380 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00013390 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
00013400 EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
00013410 GOTO 5060
C
00013420 C
00013430 C

```

```

00013440
00013450
00013460
00013470
00013480
00013490
00013500
00013510
00013520
00013530
00013540
00013550
00013560
00013570
00013580
00013590
00013600
00013610
00013620
00013630
00013640
00013650
00013660
00013670
00013680
00013690
00013700
00013710
00013720
00013730
00013740
00013750
00013760
00013770
00013780
00013790
00013800
00013810
00013820
00013830
00013840
00013850
00013860
00013870
00013880
00013890
00013900
00013910
00013920
00013930
00013940
00013950
00013960
00013970
00013980
00013990
00014000
00014010
00014020
00014030

```

```

5050 ID = J
      DECH(ID,3) = DECH(ID,3) + 1.0
      EDECH(ID,3) = EDECH(ID,3) + E
      GOTO 5130
C
C
5055 IF (J .GT. 1) GOTO 5050
      SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0
      ESDECH(3) = ESDECH(3) + E
      GOTO 5130
C
C
5060 CONTINUE
C
C
      CALL SCAT22 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEG,IDEPTH,65070,65075)
C
C
      X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
      X = X - SIGN (ASQ2 , X)
      Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
      Y = Y - SIGN (A2 , Y)
      XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
      YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
      INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
      INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
      FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
      EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
      GOTO 5080
C
C
5070 ID = J
      DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
      EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
      GOTO 5130
C
C
5075 IF (J .GT. 1) GOTO 5070
      SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
      ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
      GOTO 5130
C
C
5080 CONTINUE
C
C
      CALL SCAT23 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,65090,65095)
C
C
      X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
      X = X - SIGN (ASQ2 , X)
      Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
      Y = Y - SIGN (A2 , Y)
      XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
      YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
      INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
      INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
      FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
      EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
      GOTO 5100

```

```

00014040 C
00014050 C
00014060 5090 ID = J
00014070 DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
00014080 EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
00014090 GOTO 5130
00014100 C
00014110 C
00014120 5095 IF (J .GT. 1) GOTO 5090
00014130 SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
00014140 ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
00014150 GOTO 5130
00014160 C
00014170 C
00014180 5100 CONTINUE
00014190 C
00014200 C
00014210 CALL SCAT24 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEG,IDEPTH,65110,65115)
00014220 C
00014230 C
00014240 X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
00014250 X = X - SIGN (ASQ2 , X)
00014260 Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
00014270 Y = Y - SIGN (A2 , Y)
00014280 XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
00014290 YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
00014300 INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
00014310 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00014320 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
00014330 EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
00014340 GOTO 5120
00014350 C
00014360 C
00014370 5110 ID = J
00014380 DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
00014390 EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
00014400 GOTO 5130
00014410 C
00014420 C
00014430 5115 IF (J .GT. 1) GOTO 5110
00014440 SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
00014450 ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
00014460 GOTO 5130
00014470 C
00014480 C
00014490 5120 CONTINUE
00014500 C
00014510 C
00014520 CALL SCAT25 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,65140,65145)
00014530 C
00014540 C
00014550 X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
00014560 X = X - SIGN (ASQ2 , X)
00014570 Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
00014580 Y = Y - SIGN (A2 , Y)
00014590 XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
00014600 YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
00014610 INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASC) + 1
00014620 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00014630 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0

```

```

00014640
00014650
00014660
00014670
00014680
00014690
00014700
00014710
00014720
00014730
00014740
00014750
00014760
00014770
00014780
00014790
00014800
00014810
00014820
00014830
00014840
00014850
00014860
00014870
00014880
00014890
00014900
00014910
00014920
00014930
00014940
00014950
00014960
00014970
00014980
00014990
00015000
00015010
00015020
00015030
00015040
00015050
00015060
00015070
00015080
00015090
00015100
00015110
00015120
00015130
00015140
00015150
00015160
00015170
00015180
00015190
00015200
00015210
00015220
00015230

```

```

EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
GOTO 5150
C
C
5140 ID = J
DECH(ID,3) = DECH(ID,3) + 1.0
EDECH(ID,3) = EDECH(ID,3) + E
GOTO 5130
C
C
5145 IF (J .GT. 1) GOTO 5140
SDECH(3) = SDECH(3) + 1.0
ESDECH(3) = ESDECH(3) + E
GOTO 5130
C
C
5150 CONTINUE
C
C
CALL SCAT26 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,65160,65165)
C
C
X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
X = X - SIGN (ASQ2 , X)
Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
Y = Y - SIGN (A2 , Y)
XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1
INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
GOTO 5170
C
C
5160 ID = J
DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
GOTO 5130
C
C
5165 IF (J .GT. 1) GOTO 5160
SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
GOTO 5130
C
C
5170 CONTINUE
C
C
CALL SCAT27 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,65180,65185)
C
C
X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
X = X - SIGN (ASQ2 , X)
Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
Y = Y - SIGN (A2 , Y)
XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1

```

```

00015240 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00015250 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
00015260 EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
00015270 GOTO 5190
00015280 C
00015290 C
00015300 5180 ID = J
00015310 DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
00015320 EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
00015330 GOTO 5130
00015340 C
00015350 C
00015360 5185 IF (J .GT. 1) GOTO 5180
00015370 SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
00015380 ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
00015390 GOTO 5130
00015400 C
00015410 C
00015420 5190 CONTINUE
00015430 C
00015440 C
00015450 CALL SCAT28 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEC,IDEPTH,65200,65205)
00015460 C
00015470 C
00015480 X = AMOD (X + SIGN (ASQ2 , X) , ASQ)
00015490 X = X - SIGN (ASQ2 , X)
00015500 Y = AMOD (Y + SIGN (A2 , Y) , A)
00015510 Y = Y - SIGN (A2 , Y)
00015520 XSUB = AMOD (X + ASQ15 , ASQ)
00015530 YSUB = AMOD (Y + A15 , A)
00015540 INTX = IFIX (RNX * XSUB / ASQ) + 1
00015550 INTY = IFIX (RNY * YSUB / A) + 1
00015560 FLDST(INTY,INTX) = FLDST(INTY,INTX) + 1.0
00015570 EDST(INTY,INTX) = EDST(INTY,INTX) + E
00015580 GOTO 5210
00015590 C
00015600 C
00015610 5200 ID = J
00015620 DECH(ID,1) = DECH(ID,1) + 1.0
00015630 EDECH(ID,1) = EDECH(ID,1) + E
00015640 GOTO 5130
00015650 C
00015660 C
00015670 5205 IF (J .GT. 1) GOTO 5200
00015680 SDECH(1) = SDECH(1) + 1.0
00015690 ESDECH(1) = ESDECH(1) + E
00015700 GOTO 5130
00015710 C
00015720 C
00015730 5210 CONTINUE
00015740 C
00015750 C
00015760 C
00015770 IF (E .LT. EMIN) GOTO 5130
00015780 C
00015790 C
00015800 PXMAT(L,K) = PXREL
00015810 PYMAT(L,K) = PYREL
00015820 XMAT(L,K) = X
00015830 YMAT(L,K) = Y

```

```

00015840
00015850
00015860
00015870
00015880
00015890
00015900
00015910
00015920
00015930
00015940
00015950
00015960
00015970
00015980
00015990
00016000
00016010
00016020
00016030
00016040
00016050
00016060
00016070
00016080
00016090
00016100
00016110
00016120
00016130
00016140
00016150
00016160
00016170
00016180
00016190
00016200
00016210
00016220
00016230
00016240
00016250
00016260
00016270
00016280
00016290
00016300
00016310
00016320
00016330
00016340
00016350
00016360
00016370
00016380
00016390
00016400
00016410
00016420
00016430

```

```

EMAT(L,K) = E
5130 CONTINUE
C
C
5010 CONTINUE
C
5030 CONTINUE
C
C CHANGE TO PERCENTAGE OF NORMALIZED FLUX
C *****
C
DO 5220 K = 1,NX
DO 5220 L = 1,NY
IF (FLDST(L,K) .GT. 0.0) EDST(L,K) = EDST(L,K) / FLDST(L,K)
FLDST(L,K) = FLDST(L,K) / (8.0 * MEAN * NNUM / NUM) * 100.0
IF (FLDST(L,K) .GT. FLMAX) FLMAX = FLDST(L,K)
5220 CONTINUE
C
C
C OUTPUT OF FLDST AND EDST ON TAPE AND TSTLIB
C *****
C
WRITE (IUN) FLDST
WRITE (IUN) EDST
WRITE (2) FLDST
WRITE (2) EDST
C
C
C DIFF = ZEIT (BEGIN)
IF (DIFF .GT. ENDT) GOTO 5021
C
C
5020 CONTINUE
C
5021 CONTINUE
C
C
C END OF THE CHANNELING PROCESS
C *****
C
C
C DIFF = ZEIT (BEGIN)
WRITE (6,3022) JJ, DIFF
DEPTH = JJ * MEAN * ASQ
NLAY = JJ
C
C
5230 CONTINUE
C
DO 3200 J = 1,100
DO 3200 J1 = 1,3
IF (DECH(J,J1) .GT. 0.0) EDECH(J,J1) = EDECH(J,J1) / DECH(J,J1)
3200 CONTINUE
C
C
DO 3201 J = 1,3
IF (SDECH(J) .GT. 0.0) ESDECH(J) = ESDECH(J) / SDECH(J)
3201 CONTINUE
C

```

```

00016440 C
00016450 C
00016460 C
00016470 C
00016480 C
00016490 C
00016500 C
00016510 C
00016520 C
00016530 C
00016540 C
00016550 C
00016560 C
00016570 C
00016580 C
00016590 C
00016600 C
00016610 C
00016620 C
00016630 C
00016640 C
00016650 C
00016660 C
00016670 C
00016680 C
00016690 C
00016700 C
00016710 C
00016720 C
00016730 C
00016740 C
00016750 C
00016760 C
00016770 C
00016780 C
00016790 C
00016800 C
00016810 C
00016820 C
00016830 C
00016840 C
00016850 C
00016860 C
00016870 C
00016880 C
00016890 C
00016900 C
00016910 C
00016920 C
00016930 C
00016940 C
00016950 C
00016960 C
00016970 C
00016980 C
00016990 C
00017000 C
00017010 C
00017020 C
00017030 C
C
C
C CALCULATION OF THE BACKSCATTERING ENERGY SPECTRA
C *****
C
C CALL BCKSCT (HETH,HINT,HSMO,MAXCH,MINCH)
C
C OUTPUT OF THE SPECTRA ON TAPE
C *****
C
WRITE (IUN) HETH
WRITE (IUN) HINT
WRITE (IUN) HSMO
C
END FILE 2
C
C
INSPL = 0
DO 5250 I = 1,512
AY(I) = 0.0
IF (HINT(I) .EQ. 0.0) GOTO 5250
INSPL = INSPL + 1
AX(INSPL) = I
AY(INSPL) = HINT(I)
5250 CONTINUE
C
C
C CALCULATION OF THE SCAN VALUES
C *****
C
SWIND1 = 0.0
SWIND2 = 0.0
SWIND3 = 0.0
SWIND4 = 0.0
SWIND5 = 0.0
LL1 = IWIND1 - IWIDTH / 2
LU1 = IWIND1 + IWIDTH / 2
LL2 = IWIND2 - IWIDTH / 2
LU2 = IWIND2 + IWIDTH / 2
LL3 = IWIND3 - IWIDTH / 2
LU3 = IWIND3 + IWIDTH / 2
LL4 = IWIND4 - IWIDTH / 2
LU4 = IWIND4 + IWIDTH / 2
LL5 = IWIND5 - IWIDTH / 2
LU5 = IWIND5 + IWIDTH / 2
C
DO 3600 I = LL1,LU1
SWIND1 = SWIND1 + HETH(I)
3600 CONTINUE
DO 3610 I = LL2,LU2
SWIND2 = SWIND2 + HETH(I)
3610 CONTINUE
DO 3650 I = LL3,LU3
SWIND3 = SWIND3 + HETH(I)
3650 CONTINUE
DO 3601 I = LL4,LU4
SWIND4 = SWIND4 + HETH(I)
3601 CONTINUE
DO 3602 I = LL5,LU5
SWIND5 = SWIND5 + HETH(I)
3602 CONTINUE

```

```

00017040
00017050
00017060
00017070
00017080
00017090
00017100
00017110
00017120
00017130
00017140
00017150
00017160
00017170
00017180
00017190
00017200
00017210
00017220
00017230
00017240
00017250
00017260
00017270
00017280
00017290
00017300
00017310
00017320
00017330
00017340
00017350
00017360
00017370
00017380
00017390
00017400
00017410
00017420
00017430
00017440
00017450
00017460
00017470
00017480
00017490
00017500
00017510
00017520
00017530
00017540
00017550
00017560
00017570
00017580
00017590
00017600
00017610
00017620
00017630

```



```

DO 4572 I = LL5,LU5
SWIND5 = SWIND5 + HEXP(I)
4572 CONTINUE
SWIND1 = SWIND1 / (IWIDTH + 1.0)
SWIND2 = SWIND2 / (IWIDTH + 1.0)
SWIND3 = SWIND3 / (IWIDTH + 1.0)
SWIND4 = SWIND4 / (IWIDTH + 1.0)
SWIND5 = SWIND5 / (IWIDTH + 1.0)
C
RWIND1 = SWIND1 / RAND1
RWIND2 = SWIND2 / RAND2
RWIND3 = SWIND3 / RAND3
RWIND4 = SWIND4 / RAND4
RWIND5 = SWIND5 / RAND5
C
WRITE (6,3620)
WRITE (6,3630) IWIND1, IWIDTH, SWIND1, RWIND1, IWIND2, IWIDTH,
1 SWIND2, RWIND2, IWIND3, IWIDTH, SWIND3, RWIND3,
2 IWIND4, IWIDTH, SWIND4, RWIND4, IWIND5, IWIDTH,
3 SWIND5, RWIND5
C
SUMQ1 = 0.0
SUMQ2 = 0.0
MINCH = MINCH + 10
IF (MINCH .GT. MAXCH) GOTO 4620
C
DO 4730 I = MINCH,MAXCH
SUMQ1 = SUMQ1 + HEXP(I)
SUMQ2 = SUMQ2 + HSMO(I)
4730 CONTINUE
QCORR = QQ * SUMQ1 / SUMQ2
WRITE (6,4740) QCORR
C
4620 CONTINUE
DO 4590 I = 1,100
HGT(I) = 0.0
HGTEX(I) = 0.0
4590 CONTINUE
C
DO 3540 I = 1,100
PLX(I) = (I - 1) * 5.0 + 2.5
DO 3541 K = 1,5
K1 = (I - 1) * 5 + K
HGT(I) = HGT(I) + HSMO(K1)
IF (NUMEX .EQ. 0) GOTO 3541
HGTEX(I) = HGTEX(I) + HEXP(K1)
3541 CONTINUE
HGT(I) = HGT(I) / 5.0
HGTEX(I) = HGTEX(I) / 5.0
3540 CONTINUE
MLEN(1) = INSPL
MLEN(2) = 100
WRITE (6,3316)
CALL KURVE (IH,JH,LH,XH,DH,KH,FH,
1 IV,JVR,LV,XVR,DVB,KV,FV,
2 IG,Ih,IC,NB,ASYMB,MLEN,
3 AX,AY,PLX,HGTEX)
WRITE (6,3318)
C
C

```

```

00018840 C          PLOT OF THE BACKSCATTERING ENERGY SPECTRUM
00018850 C          =====
00018860 C
00018870 C
00018880 IF (NDSPEC) GOTO 3670
00018890 DO 4500 I = 1,512
00018900 CHNUM(I) = I
00018910 4500 CONTINUE
00018920 NCH = 512
00018930 NT = 1
00018940 NP = 9
00018950 INTA = 2
00018960 NPA = 1
00018970 INDZ = 2
00018980 XMAX = 512.0
00018990 XMIN = 0.0
00019000 SX = (XMAX - XMIN) / (100.0 * 15.0)
00019010 YMAX = 4096.0
00019020 YMIN = 0.0
00019030 SY = (YMAX - YMIN) / (100.0 * 10.0)
00019040 IDPLCT = 1
00019050 XA = 0.0
00019060 DX = 10.0
00019070 XE = 500.0
00019080 NFX = NFX1
00019090 NNX = 5
00019100 YA = 0.0
00019110 DY = 100.0
00019120 YE = YMAX
00019130 NFY = NFY1
00019140 NNY = 10
00019150 DO 4510 I = 1,15
00019160 NTEXT(I) = NTEXT1(I)
00019170 4510 CONTINUE
00019180 IF (NUMEX .EQ. 0) GOTO 4630
00019190 CALL PLOTRT (CHNUM,HEXP,NCH,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
00019200 1 YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLCT,
00019210 2 XA,DX,XE,NFX,NNX,
00019220 3 YA,DY,YE,NFY,NNY)
00019230 NT = 1
00019240 INDZ = 0
00019250 GOTO 4640
00019260 4630 INDZ = 2
00019270 4640 NP = 1
00019280 CALL PLOTRT (AX,AY,INSPL,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
00019290 1 YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLCT,
00019300 2 XA,DX,XE,NFX,NNX,
00019310 3 YA,DY,YE,NFY,NNY)
00019320 C
00019330 C
00019340 3670 CONTINUE
00019350 DO 3325 I = 1,NX
00019360 PLX(I) = -(NX-1.)/(2.*NX)+(I-1.)/NX
00019370 PLX(I) = PLX(I) * ASC
00019380 3325 CONTINUE
00019390 MLEN(1) = NX
00019400 C
00019410 IF (NOFLUX) GOTO 5260
00019420 C
00019430 REWIND 2

```

```

00019440
00019450
00019460
00019470
00019480
00019490
00019500
00019510
00019520
00019530
00019540
00019550
00019560
00019570
00019580
00019590
00019600
00019610
00019620
00019630
00019640
00019650
00019660
00019670
00019680
00019690
00019700
00019710
00019720
00019730
00019740
00019750
00019760
00019770
00019780
00019790
00019800
00019810
00019820
00019830
00019840
00019850
00019860
00019870
00019880
00019890
00019900
00019910
00019920
00019930
00019940
00019950
00019960
00019970
00019980
00019990
00020000
00020010
00020020
00020030

```

```

DO 3320 J = 1,NLAY
READ (2) FLDST
READ (2) EDST

C
C
C      LINEPLOT OF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES
C      =====
C
I2 = IFIX (NY / 2.0)
DO 3330 I = 1,NX
IF (ISEC .EQ. 1) GOTO 5240
PLF(I) = FLDST(I2,I)
PLE(I) = EDST(I2,I)
GOTO 3330
5240 PLF(I) = FLDST(I,I)
PLE(I) = EDST(I,I)
3330 CONTINUE

C
WRITE (6,3316)
CALL KURVE (IH,JH,LH,XH,DH,KH,FHF,
1          IV,JVR,LV,XVR,DVF,KV,FV,
2          IG,IV,IC,N,ASYMB,MLEN,
3          PLX,PLF)

C
WRITE (6,3335)
DPTH = J * MEAN * A - MEAN * A / 2.0
IF (ISEC .EQ. 2) DPTH = J * MEAN * ASQ - MEAN * ASQ2
WRITE (6,3336) DPTH, AVRG

C
WRITE (6,3316)
CALL KURVE (IH,JH,LH,XH,DH,KH,FHF,
1          IV,JVE,LV,XVE,DVE,KV,FV,
2          IG,IV,IC,N,ASYMB,MLEN,
3          PLX,PLE)

C
WRITE (6,3337)
WRITE (6,3336) DPTH, AVRG

C
C
C      PLOT OF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES
C      =====
C
NT = 1
NP = 3
NPA = 1
INDZ = 2
XMAX = 4.0
XMIN = - 4.0
SX = (XMAX - XMIN) / (100.0 * 10.0)
YMAX = FLMAX
YMIN = 0.0
SY = (YMAX - YMIN) / (100.0 * 10.0)
IDPLOT = J
XA = XMIN
DX = 1.0
XE = XMAX
NFX = NFX2
NNX = 1

```

```

00020040      YA = 0.0
00020050      DY = 10.0
00020060      YE = FLMAX
00020070      NFY = NFY2
00020080      NNY = 5
00020090      DO 4520 I = 1,15
00020100      NTEXT(I) = NTEXT2(I)
00020110      4520 CONTINUE
00020120      CALL PLOTRT (PLX,PLF,NX,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
00020130      1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
00020140      2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
00020150      3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
00020160      YMAX = E0
00020170      YMIN = 1700.0
00020180      SY = (YMAX - YMIN) / 1000.0
00020190      YA = YMIN
00020200      YE = YMAX
00020210      NFY = NFY3
00020220      DO 4530 I = 1,15
00020230      NTEXT(I) = NTEXT3(I)
00020240      4530 CONTINUE
00020250      CALL PLOTRT (PLX,PLE,NX,NT,NP,INTA,NPA,INDZ,XMAX,XMIN,SX,
00020260      1          YMAX,YMIN,SY,NTEXT,IDPLOT,
00020270      2          XA,DX,XE,NFX,NNX,
00020280      3          YA,DY,YE,NFY,NNY)
C
C
C      3320 CONTINUE
C
C      5260 CONTINUE
C
C
C      OUTPUT OF THE FLUX - AND ENERGY PROFILES
C      =====
C
C      IF (NCOOCU) GOTO 5270
C
C      REWIND 2
C
C      DO 3380 J = 1,NLAY
C
C      READ (2) FLDST
C      READ (2) EDST
C
C      WRITE (6,3340) J
C      WRITE (6,3350) FLDST
C      WRITE (6,3360) J
C      WRITE (6,3370) EDST
C
C      3380 CONTINUE
C
C      5270 CONTINUE
C
C      RETURN
C
C      F O R M A T   S P E C I F I C A T I O N S
C      =====

```

```

00020640
00020650
00020660
00020670
00020680
00020690
00020700
00020710
00020720
00020730
00020740
00020750
00020760
00020770
00020780
00020790
00020800
00020810
00020820
00020830
00020840
00020850
00020860
00020870
00020880
00020890
00020900
00020910
00020920
00020930
00020940
00020950
00020960
00020970
00020980
00020990
00021000
00021010
00021020
00021030
00021040
00021050
00021060
00021070
00021080
00021090
00021100
00021110
00021120
00021130
00021140
00021150
00021160
00021170
00021180
00021190
00021200
00021210
00021220
00021230

```

```

1010 FORMAT (F10.2)
1013 FORMAT (4A4)
1020 FORMAT (E10.3)
1030 FORMAT (F10.5)
1040 FORMAT (F10.3)
1041 FORMAT (I1)
1042 FORMAT (L1)
1043 FORMAT (I1)
1050 FORMAT (10E13.4)
1060 FORMAT (1H1,T15,'P X M A T'////)
1070 FORMAT (1H1,T15,'P Y M A T'////)
1080 FORMAT (1H1,T15,'X M A T'////)
1090 FORMAT (1H1,T15,'Y M A T'////)
1100 FORMAT (1H1,T15,'E M A T'////)
1110 FORMAT (1H1,T15,'T A'////)
1120 FORMAT (1H1,T15,'S I L V'////)
1130 FORMAT (1H1,T15,'S I L S I'////)
1140 FORMAT (1H1,T15,'P N O R M'////)
1150 FORMAT (1H1,T15,'T H V B S'////)
1160 FORMAT (1H1,T15,'T H V B S I'////)
1170 FORMAT (T15,'*****'//
1
,'*****'/
2
T15,'*',T110,'**/T15,'*',T110,'**/
3
T15,'*',3X,'M O N T E C A R L C - P R O G R A M',
4
T110,'**/
5
T15,'*',T110,'**/ T15,'*',T110,'**/
6
T15,'*',3X,'F O R T H E C O M P U T E R - ',
7
'S I M U L A T I C N O F C H A N N E L I N G',T110,'**/
8
T15,'*',T110,'**/ T15,'*',T110,'**/
9
T15,'*',3X,'B Y A M O D I F I E D " B I N A R Y',
A
' C O L L I S I O N " - M C D E L',T110,'**/
B
T15,'*',T110,'**/ T15,'*',T110,'**/
C
T15,'*****'//
D
,'*****'//
1171 FORMAT (T19,'SINGLE CRYSTAL : ',4A4,
1
T60,'ATOMIC NUMBERS : ',
1
T80,'REST MASSES : ',T100,'MEAN EXCITATION ENERGY : '/
1
T41,'*****'/
2
2(T60,F10.0,T80,F10.2,T100,F10.1,' EV'////)
1172 FORMAT (T19,'LATTICE CONSTANT : ',F10.3,' ANGSTROEM'//
1
T19,'ATOMIC DENSITY : ',E10.3,' ATOMS / CM',
2
' * 3'//
3
T19,'PLASMON ENERGY : ',F10.1,' EV'//
4
T19,'VALENCE ELECTRONS : ',F10.2,' PER ATOM'////)
1173 FORMAT (T19,'E X P E R I M E N T A L C C N D I T I O N S : '/
1
T19,'*****'//
2
T25,'INCIDENT ION : ',4A4//
3
T25,'ATOMIC NUMBER : ',F6.0//
4
T25,'REST MASS : ',F6.0//
5
T25,'ION ENERGY : ',F10.0,' KEV'//
5
T25,'CHARGE : ',F10.1//
8
T25,'BEAM DIVERGENCE : ',F10.2,' DEGREES'//
9
T25,'CRYSTAL TEMP. : ',F10.0,' KELVIN'//
A
T25,'THERMAL VIBRATION AMPLITUDES : ',
B
T65,'V (U1) : ',F7.3,' ANGSTROEM',
B
T95,'V (U2) : ',F7.3,' ANGSTROEM'//
C
T65,'SI : ',F7.3,' ANGSTROEM'//
6
T25,'BEAM INCIDENCE : ',T50,'PHI =',T58,F10.2,
7
' DEGREES',
7
T90,'( PHI ROTATED : ',L1,' )'//

```

```

00021240
00021250
00021260
00021270
00021280
00021290
00021300
00021310
00021320
00021330
00021340
00021350
00021360
00021370
00021380
00021390
00021400
00021410
00021420
00021430
00021440
00021450
00021460
00021470
00021480
00021490
00021500
00021510
00021520
00021530
00021540
00021550
00021560
00021570
00021580
00021590
00021600
00021610
00021620
00021630
00021640
00021650
00021660
00021670
00021680
00021690
00021700
00021710
00021720
00021730
00021740
00021750
00021760
00021770
00021780
00021790
00021800
00021810
00021820
00021830
C
7
T50,'THETA =',T58,F10.2,' DEGREES'//)
1174 FORMAT (1H1'////
1
T19,'P A R A M E T E R S O F E X P E R I M E N T A L',
2
' S E T U P'//
3
T19,'*****'//
4
'*****'//
5
T25,'FWHM : ',F10.0,' CHANNELS'//
6
T25,'CHANNEL WIDTH : ',F10.2,' KEV / CHANNEL'//
7
T25,'SUPPR. CRIGIN : ',F10.1,' KEV'//
8
T25,'BACKSCATT. ANGLE : ',F10.1,' DEGREES'//
9
T25,'DETECTOR ANGLE : ',E10.3,' STERAD'//
A
T25,'WINDOW SETTINGS (CH.NO.) : ',T60,
B
'WINDOW WIDTH (CH.) : ',T95,'RANDCM VALUE : '/
C
5(/T35,I4,T7C,I4,T95,F10.0)////)
1190 FORMAT (T19,'P R C G R A M P A R A M E T E R S : '/
1
T19,'*****'//)
1195 FORMAT (T25,'NUMBER OF PARTICLES : ',I6,' =',
1
I4,' *',I4//
1
T25,'NUMBER OF UNIT CELLS / LAYER : ',I6//
2
T25,'NUMBER OF LAYERS : ',I6//
3
T25,'CORRESPONDING DEPTH : ',F7.0,
4
' ANGSTROEM'//)
1410 FORMAT (1H1,T90,'DATE : ',A6,'77',5X,'TIME : ',A6//)
3022 FORMAT (1H0'////T20,'NO OF CALCULATED LAYERS : ',I6//
1
T20,'CPU-TIME USED : ',F12.0,' SECONDS')
3220 FORMAT (1H1,T15,'P X M A T'////)
3230 FORMAT (10X,10F12.4)
3240 FORMAT (1H1,T15,'P Y M A T'////)
3250 FORMAT (1H1,T15,'X M A T'////)
3260 FORMAT (1H1,T15,'Y M A T'////)
3270 FORMAT (1H1,T15,'E M A T'////)
3316 FORMAT (1H1)
3318 FORMAT (T20,'BACKSCATTERING ENERGY SPECTRUM')
3335 FORMAT (T20,'F L U X - P R C F I L E')
3336 FORMAT (T20,'RECORDED AT A DEPTH OF ',F6.0,' ANGSTROEM',
1
' : AVERAGED OVER ',F6.0,' ANGSTROEM')
3337 FORMAT (T20,'E N E R G Y - P R C F I L E')
3340 FORMAT (1H1,T10,'F L U X - P R O F I L E'//
1
T20,'J = ',I4//)
3350 FORMAT (10X,10F12.0)
3360 FORMAT (1H1,T10,'E N E R G Y - P R C F I L E'//
1
T20,'J = ',I4//)
3370 FORMAT (10X,10F12.1)
3620 FORMAT (1H0,T15,'WINDOW SETTINGS (CH.NO.) : ',T50,
1
'WINDOW WIDTH (CH.) : ',T85,'COUNTS / CHANNEL : ',
2
T110,'NORMALIZED VALUE : '//)
3630 FORMAT (T25,I4,T60,I4,T85,F10.0,T110,F10.3)
3640 FORMAT (I4)
3810 FORMAT ('0',T25,'NUMBER OF NEGLECTED PARTICLES : ',I10)
3840 FORMAT ('0',T25,'LIMIT. POT. VALUES (KEV) : ',F10.3,5X,F10.3)
4020 FORMAT (1H0,' AVERAGED DE / DX OF THE INCIDENT PARTICLE : ',
1
F10.0,' EV / ANGSTROEM')
4610 FORMAT ('1',T15,'EXPERIMENTAL BACKSCATTERING SPECTRUM'////)
4740 FORMAT ('0',CORRECTED CHARGE : ',F10.1)
5295 FORMAT (T19,'D A M A G E P R O F I L E : '/
1
T19,'*****'//
2
T25,'MEAN DISPLACEMENT : ',F10.2,' ANGSTROEM'//
3
T25,'MEAN DEPTH : ',F10.0,' ANGSTROEM'//
5
T25,'PERCENTAGE : ',F10.1,' %')
00021840
00021850
00021860
00021870
00021880
00021890
00021900
00021910
00021920
00021930
00021940
00021950
00021960
00021970
00021980
00021990
00022000
00022010
00022020
00022030
00022040
00022050
00022060
00022070
00022080
00022090
00022100
00022110
00022120
00022130
00022140
00022150
00022160
00022170
00022180
00022190
00022200
00022210
00022220
00022230
00022240
00022250
00022260
00022270
00022280
00022290
00022300
00022310
00022320
00022330
00022340
00022350
00022360
00022370
00022380
00022390
00022400
00022410
00022420
00022430
00022440

```

END

```

SUBROUTINE START (DEPSI,PXMAT,PYMAT,XMAT,YMAT,EMAT,NX,NY
1      ,EO)
C
C      =====
C      S T A R T
C      =====
C      SUBROUTINE TO CALCULATE THE START VALUES
C      RELATIVE MOMENTUM AND COORDINATES, AS WELL AS THE TABULATED
C      VALUES OF THE ENERGY LOSS AND THE SCATTERING ANGLE
C      =====
C
DIMENSION PXMAT(NY,NX), PYMAT(NY,NX)
DIMENSION XMAT(NY,NX), YMAT(NY,NX)
DIMENSION EMAT(NY,NX)
DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)
DIMENSION THVBSI(12000)
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)
DIMENSION SILV(4000), SILSI(4000)
DIMENSION TA(4000)
DIMENSION ALFA(3), BETA(3)
DIMENSION FTA(3), FSILV(3), FSILSI(3)
C
LOGICAL ROTAT
LOGICAL SISC
C
COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNGRM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SISC
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2 ASQ, ASQ2, ASC4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
COMMON /MOLP/ ALFA, BETA
C
AM = 0.0
V = 0.0
PHIT = PHI
PI2 = 2.0 * PI
IX0 = 150656729
C
      CALCULATION OF THE COORDINATES AND THE RELATIVE MOMENTUM
      =====
C
DO 2000 K = 1,NX
DO 2000 L = 1,NY
C
IF (.NOT. ROTAT) GOTO 2060
PHIT = PHIT + DEPHI
PSIINX = ATAN (COS (PHIT) * TAN (THETA) )
PSIINY = ATAN (SIN (PHIT) * TAN (THETA) )
XMAT(L,K) = - (NX - 1.) / (2. * NX) + (L - 1.) / NX
YMAT(L,K) = (NY - 1.) / (2. * NY) - (K - 1.) / NY
IF (ISEC .EQ. 2) GOTO 2100
XMAT(L,K) = XMAT(L,K) * A
YMAT(L,K) = YMAT(L,K) * A
C
      GOTO 2110
2100 XMAT(L,K) = XMAT(L,K) * ASQ
YMAT(L,K) = YMAT(L,K) * A
2110 CONTINUE
C
IF (DEPSI .LE. 0.0) GOTO 2010
CALL GAUSS (IX0,DEPSI,AM,V)
2010 PXMAT(L,K) = PSIINX + V
C
IF (DFPSI .LE. 0.0) GOTO 2020
CALL GAUSS (IX0,DFPSI,AM,V)
2020 PYMAT(L,K) = PSIINY + V
C
EMAT(L,K) = EO
2000 CONTINUE
C
      CALCULATION OF THE ENERGY LOSS AND THE SCATTERING ANGLE
      =====
C
DO 2030 L = 1,3
FTA(L) = ALFA(L) * BETA(L)
FSILV(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFV * ATFV)
FSILSI(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFSI * ATFSI)
2030 CONTINUE
C
DO 2040 L = 1,4000
STA = 0.0
SSILV = 0.0
SSILSI = 0.0
SREL = FLOAT (L) / 200.
C
DO 2050 K = 1,3
XSREL = BETA(K) * SREL
CALL BESK (XSREL,1,RSTA,IER)
CALL BESK (XSREL,0,RSSIL,IER)
STA = STA + FTA(K) * RSTA
SSILV = SSILV + FSILV(K) * RSSIL
SSILSI = SSILSI + FSILSI(K) * RSSIL
C
2050 CONTINUE
C
TA(L) = STA
SILV(L) = ZV / (2. * PI * A4) * SSILV
IF (ISEC .EQ. 2) SILV(L) = ZV / (2. * PI * ASQ8) * SSILV
IF (ISEC .EQ. 2) SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * ASQ8) * SSILSI
SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * A4) * SSILSI
SILV(L) = SILV(L) / RHOAT
SILSI(L) = SILSI(L) / RHOAT
C
2040 CONTINUE
C
      OUTPUT OF THE CALCULATED VALUES ON TSTLIB
      =====
C
00022450 2100 XMAT(L,K) = XMAT(L,K) * ASQ
00022460 YMAT(L,K) = YMAT(L,K) * A
00022470 2110 CONTINUE
00022480 C
00022490 IF (DEPSI .LE. 0.0) GOTO 2010
00022500 C
00022510 CALL GAUSS (IX0,DEPSI,AM,V)
00022520 2010 PXMAT(L,K) = PSIINX + V
00022530 C
00022540 IF (DFPSI .LE. 0.0) GOTO 2020
00022550 C
00022560 CALL GAUSS (IX0,DFPSI,AM,V)
00022570 2020 PYMAT(L,K) = PSIINY + V
00022580 C
00022590 EMAT(L,K) = EO
00022600 C
00022610 2000 CONTINUE
00022620 C
00022630 C
00022640 C
00022650 C
00022660 DO 2030 L = 1,3
00022670 FTA(L) = ALFA(L) * BETA(L)
00022680 FSILV(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFV * ATFV)
00022690 FSILSI(L) = FTA(L) * BETA(L) / (ATFSI * ATFSI)
00022700 2030 CONTINUE
00022710 C
00022720 C
00022730 DO 2040 L = 1,4000
00022740 C
00022750 STA = 0.0
00022760 SSILV = 0.0
00022770 SSILSI = 0.0
00022780 SREL = FLOAT (L) / 200.
00022790 C
00022800 DO 2050 K = 1,3
00022810 XSREL = BETA(K) * SREL
00022820 CALL BESK (XSREL,1,RSTA,IER)
00022830 CALL BESK (XSREL,0,RSSIL,IER)
00022840 STA = STA + FTA(K) * RSTA
00022850 SSILV = SSILV + FSILV(K) * RSSIL
00022860 SSILSI = SSILSI + FSILSI(K) * RSSIL
00022870 C
00022880 C
00022890 2050 CONTINUE
00022900 C
00022910 C
00022920 TA(L) = STA
00022930 SILV(L) = ZV / (2. * PI * A4) * SSILV
00022940 IF (ISEC .EQ. 2) SILV(L) = ZV / (2. * PI * ASQ8) * SSILV
00022950 IF (ISEC .EQ. 2) SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * ASQ8) * SSILSI
00022960 SILSI(L) = ZSI / (2. * PI * A4) * SSILSI
00022970 SILV(L) = SILV(L) / RHOAT
00022980 SILSI(L) = SILSI(L) / RHOAT
00022990 C
00023000 2040 CONTINUE
00023010 C
00023020 C
00023030 C
00023040 C
00023050 C
00023060 C
00023070 C
00023080 C
00023090 C
00023100 C
00023110 C
00023120 C
00023130 C
00023140 C
00023150 C
00023160 C
00023170 C
00023180 C
00023190 C
00023200 C
00023210 C
00023220 C
00023230 C
00023240 C
00023250 C
00023260 C
00023270 C
00023280 C
00023290 C
00023300 C
00023310 C
00023320 C
00023330 C
00023340 C
00023350 C
00023360 C
00023370 C
00023380 C
00023390 C
00023400 C
00023410 C
00023420 C
00023430 C
00023440 C
00023450 C
00023460 C
00023470 C
00023480 C
00023490 C
00023500 C
00023510 C
00023520 C
00023530 C
00023540 C
00023550 C
00023560 C
00023570 C
00023580 C
00023590 C
00023600 C
00023610 C
00023620 C
00023630 C

```

```

C      REWIND 1
      WRITE (1) PXMAT
      WRITE (1) PYMAT
      WRITE (1) XMAT
      WRITE (1) YMAT
      WRITE (1) EMAT
      WRITE (1) TA
      WRITE (1) SILV, SILSI
      END FILE 1
C
C      RETURN
C
C      END

```

```

00023640
00023650
00023660
00023670
00023680
00023690
00023700
00023710
00023720
00023730
00023740
00023750
00023760
00023770
00023780
00023790

```

```

SUBROUTINE SCAT1 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*,*,*)
C
C      =====
C      S C A T 1
C      =====
C      SCATTERING PROCESS IN THE FIRST MONOLAYER,
C      EQUIVALENT TO SCATTERING PROCESS IN THE
C      FIFTH MONOLAYER
C      =====

```

```

C      DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)
C      DIMENSION PNORM(12000)
C      DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)
C      DIMENSION THVBSI(12000)
C      DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)
C      DIMENSION PXSCAT(6)
C      DIMENSION PYSCAT(6)
C      DIMENSION DEL(6)
C      DIMENSION BS(150,150)

```

```

C
C      REAL*8 PZ
C      LOGICAL ROTAT
C      LOGICAL SISC

```

```

C
C      COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SISC
C      COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,
1      ZPART, ZV, ZSI, THEV, THSI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2      ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQB, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
C      COMMON /SCAL/ XSCAT1(6), YSCAT1(6)
C      COMMON /TEST/ PHILM, THV1, THV2, THSI, EQ, BS, RESOLE, RESOLD,
1      FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHIO2, ELIM, U2V, U2S, THV450
C      COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, CMGA, PHI, THETA, PRDP,
1      FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2      COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
C      COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMC, BETHEV, BETHES

```

```

C
C      VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)
C      SILPI = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * A4
C      SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * A4
C      CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
C      IF (SISC) GOTO 3000
C      SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4
C      SCRIT = 4.0 * THV2
C      INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESOLE + 1.5)

```

```

C
C      SCATTERING BY THE WEAK V - ROWS
C      =====

```

```

C      DO 2200 I = 1,4
C
C      DPLC = DPLCM

```

```

00023800
00023810
00023820
00023830
00023840
00023850
00023860
00023870
00023880
00023890
00023900
00023910
00023920
00023930
00023940
00023950
00023960
00023970
00023980
00023990
00024000
00024010
00024020
00024030
00024040
00024050
00024060
00024070
00024080
00024090
00024100
00024110
00024120
00024130
00024140
00024150
00024160
00024170
00024180
00024190
00024200
00024210
00024220
00024230
00024240
00024250
00024260
00024270
00024280
00024290
00024300
00024310
00024320
00024330
00024340
00024350
00024360
00024370
00024380

```

```

IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ)
DX = X - THVRV1(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEC)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
DPLC = DPLCM
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
DY1 = Y - DPLC * PDPLC(IEQ)
DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEC)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S = SQRT((DX-XSCAT1(I))*DX-XSCAT1(I)) +
      (DY-YSCAT1(I))*DY-YSCAT1(I))
1
IF (IDEPH .GT. 150) GOTO 2221
IF (INTE .GT. 150) GOTO 2221
SX = DX1 - XSCAT1(I)
SY = DY1 - YSCAT1(I)
SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)
IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221
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
2221 SREL = S / ATFV
C
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3
IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220
C
ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
STHETA = THEV * TA(ISREL) / E
DEL(I) = SILBOU * SILV(ISREL)
GOTC 2230
C
2220 STHETA = 0.0
DEL(I) = 0.0
C
2230 CONTINUE
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)
PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +
1
      PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))
C
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1
C
2200 CONTINUE
C
SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHES * E) * A4
SCRIT = 4.0 * THSI
INTE = IFIX ((ELIM - FKFS * E) / RESOLE + 1.5)
C
SCATTERING BY THE SI - ROWS

```

```

00024390
00024400
00024410
00024420
00024430
00024440
00024450
00024460
00024470
00024480
00024490
00024500
00024510
00024520
00024530
00024540
00024550
00024560
00024570
00024580
00024590
00024600
00024610
00024620
00024630
00024640
00024650
00024660
00024670
00024680
00024690
00024700
00024710
00024720
00024730
00024740
00024750
00024760
00024770
00024780
00024790
00024800
00024810
00024820
00024830
00024840
00024850
00024860
00024870
00024880
00024890
00024900
00024910
00024920
00024930
00024940
00024950
00024960
00024970
00024980

```

```

=====
DO 2250 I = 5,6
C
DPLC = DPLCM
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ) - XSCAT1(I)
DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEC)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
DPLC = DPLCM
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
DY1 = Y - DPLC * PDPLC(IEQ) - YSCAT1(I)
DY = Y - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEC)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S = SQRT ((DX-XSCAT1(I))*DX-XSCAT1(I)) +
      (DY-YSCAT1(I))*DY-YSCAT1(I))
1
IF (IDFPTH .GT. 150) GOTO 2261
IF (INTE .GT. 150) GOTO 2261
SB = SQRT (DX1 * DX1 + DY1 * DY1)
IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2261
PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)
PRBL = PRBL * EXP (- SB * SB / (U2S * U2S))
CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)
PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E)
PZ = PZ * Q / NUM
BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
2261 SREL = S / ATFSI
C
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4
IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2260
C
ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
STHETA = THESI * TA(ISREL) / E
DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)
GOTO 2270
C
2260 STHETA = 0.0
DEL(I) = 0.0
C
2270 CONTINUE
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)
PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT1(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +
1
      PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))
C
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2
C
2250 CONTINUE
C
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0

```

```

00024990
00025000
00025010
00025020
00025030
00025040
00025050
00025060
00025070
00025080
00025090
00025100
00025110
00025120
00025130
00025140
00025150
00025160
00025170
00025180
00025190
00025200
00025210
00025220
00025230
00025240
00025250
00025260
00025270
00025280
00025290
00025300
00025310
00025320
00025330
00025340
00025350
00025360
00025370
00025380
00025390
00025400
00025410
00025420
00025430
00025440
00025450
00025460
00025470
00025480
00025490
00025500
00025510
00025520
00025530
00025540
00025550
00025560
00025570
00025580

```

```

C      SUM3 = 0.0
C      DO 2280 I = 1,6
C      SUM1 = SUM1 + DEL(I)
C      SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)
C      SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)
2280 CONTINUE
C      PXREL = PXREL + SUM2
C      PYREL = PYREL + SUM3
C      DFLE = SUM1 + SILPL / CPH
C      E = E - DELE
C      X = X + A4 * PXREL
C      Y = Y + A4 * PYREL
C
C      RETURN
C
C      SCATTERING BY ONE ATOM PER PLANE
C      =====
C
3000 CONTINUE
C      IF (X .LT. 0.0) GOTO 3010
C      IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3020
C      DX = X - THVBV1(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      DY = Y - THVBV2(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      IEQ = IEQ + 1
C      S1 = SQRT((DX-XSCAT1(2))*(DX-XSCAT1(2)) +
1      (DY-YSCAT1(2))*(DY-YSCAT1(2)))
C      DX = X - THVBSI(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      IEQ = IEQ + 1
C      S2 = SQRT((DX-XSCAT1(6))*(DX-XSCAT1(6)) +
1      (DY-YSCAT1(6))*(DY-YSCAT1(6)))
C      S22 = ZSI / ZV * S2
C
C      IAT = 6
C      IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
C      IAT = 2
C      GOTO 3040
C
3020 DX = X - THVBV1(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      DY = Y - THVBV2(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      IEQ = IEQ + 1
C      S1 = SQRT((DX-XSCAT1(4))*(DX-XSCAT1(4)) +
1      (DY-YSCAT1(4))*(DY-YSCAT1(4)))
C      DX = X - THVBSI(IGAUSS)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
00025590 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025600 IEQ = IEQ + 1
00025610 S2 = SQRT((DX-XSCAT1(6))*(DX-XSCAT1(6)) +
00025620 1      (DY-YSCAT1(6))*(DY-YSCAT1(6)))
00025630 S22 = ZSI / ZV * S2
00025640
C      IAT = 6
00025650 IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
00025660 IAT = 4
00025670 GOTO 3040
C
C      3010 CONTINUE
00025700 IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3050
00025710 DX = X - THVBV1(IGAUSS)
00025720 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025730 DY = Y - THVBV2(IGAUSS)
00025740 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025750 IEQ = IEQ + 1
00025760 S1 = SQRT((DX-XSCAT1(1))*(DX-XSCAT1(1)) +
1      (DY-YSCAT1(1))*(DY-YSCAT1(1)))
00025770 DX = X - THVBSI(IGAUSS)
00025780 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025790 DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
00025800 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025810 IEQ = IEQ + 1
00025820 S2 = SQRT((DX-XSCAT1(5))*(DX-XSCAT1(5)) +
1      (DY-YSCAT1(5))*(DY-YSCAT1(5)))
00025830 S22 = ZSI / ZV * S2
C
C      IAT = 5
00025840 IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
00025850 IAT = 1
00025860 GOTO 3040
C
C      3050 DX = X - THVBV1(IGAUSS)
00025870 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025880 DY = Y - THVBV2(IGAUSS)
00025890 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025900 IEQ = IEQ + 1
00025910 S1 = SQRT((DX-XSCAT1(3))*(DX-XSCAT1(3)) +
1      (DY-YSCAT1(3))*(DY-YSCAT1(3)))
00025920 DX = X - THVBSI(IGAUSS)
00025930 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025940 DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
00025950 IGAUSS = IGAUSS + 1
00025960 IEQ = IEQ + 1
00025970 S2 = SQRT((DX-XSCAT1(5))*(DX-XSCAT1(5)) +
1      (DY-YSCAT1(5))*(DY-YSCAT1(5)))
00025980 S22 = ZSI / ZV * S2
C
C      IAT = 5
00025990 IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
00026000 IAT = 3
C
C      SCATTERING BY A V - ATOM
C      =====
C
3040 CONTINUE
C      SILBOU = EPO / E * ALOG (RETHEV * E) * A4
C      SCRIT = 4.0 * THV2
00026010
00026020
00026030
00026040
00026050
00026060
00026070
00026080
00026090
00026100
00026110
00026120
00026130
00026140
00026150
00026160
00026170
00026180
00026190
00026200
00026210
00026220
00026230
00026240
00026250
00026260
00026270
00026280
00026290
00026300
00026310
00026320
00026330
00026340
00026350
00026360
00026370
00026380
00026390
00026400
00026410
00026420
00026430
00026440
00026450
00026460
00026470
00026480
00026490
00026500
00026510
00026520
00026530
00026540
00026550
00026560
00026570
00026580
00026590
00026600
00026610
00026620
00026630
00026640
00026650
00026660
00026670
00026680
00026690
00026700
00026710
00026720
00026730
00026740
00026750
00026760
00026770
00026780

```

```

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

```

```

00026790 3200 SREL = S2 / ATFSI
00026800 C
00026810 IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4
00026820 IF (SREL .GT. 20.0) GOTC 3210
00026830 C
00026840 ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
00026850 STHETA = THESI * TAI(SREL) / F
00026860 DELE = SILBOU * SILSI(ISREL)
00026870 GOTC 3220
00026880 C
00026890 C
00026900 3210 STHETA = 0.0
00026910 DELE = 0.0
00026920 C
00026930 C
00026940 3220 CONTINUE
00026950 SCA = SQRT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E)
00026960 PX = STHETA * (DX - XSCAT1(IAT)) / S2 + PNORM(IGAUSS) * SCA
00026970 IGAUSS = IGAUSS + 1
00026980 PY = STHETA * (DY - YSCAT1(IAT)) / S2 + PNORM(IGAUSS) * SCA
00026990 IGAUSS = IGAUSS + 1
00027000 PHIL = ARCCOS (1.0 / SQRT (PX * PX + PY * PY + 1.0))
00027010 C
00027020 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2
00027030 C
00027040 3300 PXREL = PXREL + PX
00027050 PYREL = PYREL + PY
00027060 E = E - DELE - SILPL / CPH
00027070 X = X + A4 * PXREL
00027080 Y = Y + A4 * PYREL
00027090 C
00027100 C
00027110 RETURN
00027120 C
00027130 END
00027140
00027150
00027160
00027170
00027180
00027190
00027200
00027210
00027220
00027230
00027240
00027250
00027260
00027270
00027280
00027290
00027300
00027310
00027320
00027330
00027340
00027350
00027360
00027370
00027380

```

```

00027390
00027400
00027410
00027420
00027430
00027440
00027450
00027460
00027470
00027480
00027490
00027500
00027510
00027520
00027530
00027540
00027550
00027560
00027570
00027580
00027590
00027600
00027610
00027620
00027630
00027640
00027650
00027660
00027670
00027680
00027690
00027700
00027710
00027720
00027730

```

```

C      SUBROUTINE SCAT2 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)
C
C      =====
C      S C A T 2
C      =====
C      SCATTERING PROCESS IN THE SECOND MONDLAYER,
C      EQUIVALENT TO SCATTERING PROCESS IN THE
C      FOURTH MONDLAYER
C      =====
C
C      DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)
C      DIMENSION PNORM(12000)
C      DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)
C      DIMENSION THVBSI(12000)
C      DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)
C      DIMENSION BS(150,150)
C
C      REAL*8 PZ
C      LOGICAL ROTAT
C      LOGICAL SISC
C
C      COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SISC
C      COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,
1      ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2      ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
C      COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,
1      FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV4
C      COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1      FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2      COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
C      COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES
C
C      VEL = SQRT(.2 * E / UCSQ)
C      SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMO * E) * A4
C      SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALCG (VEL / VFERMI) * A4
C      SILAGU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4
C      SCRIT = .4 * THV2
C      INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5)
C      CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
C
C      SCATTERING PROCESS BY THE STRONG V - ROWS
C      =====
C
C      DPLC = DPLCM
C      IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
C      DX1 = X - DPLC * PDPLC(IEQ)
C      DX = X - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      IEQ = IEQ + 1
C      DPLC = DPLCM
C      IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
C
C      DY1 = Y - DPLC * PDPLC(IEQ)
C      DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      IEQ = IEQ + 1
C      S = SQRT (DX * DX + DY * DY)
C      S1 = SQRT (DX1 * CX1 + DY1 * DY1)
C      IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2421
C      IF (INTE .GT. 150) GOTO 2421
C      IF (S1 .GT. SCRIT) GOTO 2421
C      PRBL = 1.0 / (PI * U2V * U2V)
C      PRBL = PRBL * EXP (- S1 * S1 / (U2V * U2V))
C      CALL SIGMA (ZV,FMV,SGMV,PXREL,PYREL)
C      PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)
C      PZ = PZ * Q / NUM
C      BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
2421  SREL = S / ATFV
C
C      IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2
C      IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2420
C
C      ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
C      STHETA = THEV * TA(ISREL) / E
C      DELE = SILBOU * SILV(ISREL)
C      GOTC 2430
C
C      2420  STHETA = 0.0
C      DFLE = 0.0
C
C      2430  CONTINUE
C      SCA = SQRT (ELSCAT * (DFLE + SILVAL / CPH) / E)
C      PX = STHETA * DX / S + PNCRM(IGAUSS) * SCA
C      PXREL = PXREL + PX
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      PY = STHETA * DY / S + PNCRM(IGAUSS) * SCA
C      PYREL = PYREL + PY
C      IGAUSS = IGAUSS + 1
C      PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX * PX + PY * PY + 1.0))
C
C      IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1
C
C      F = E - DELE - SILPL / CPH
C      X = X + A4 * PXREL
C      Y = Y + A4 * PYREL
C
C      RETURN
C
C      END
C
C      00027740
C      00027750
C      00027760
C      00027770
C      00027780
C      00027790
C      00027800
C      00027810
C      00027820
C      00027830
C      00027840
C      00027850
C      00027860
C      00027870
C      00027880
C      00027890
C      00027900
C      00027910
C      00027920
C      00027930
C      00027940
C      00027950
C      00027960
C      00027970
C      00027980
C      00027990
C      00028000
C      00028010
C      00028020
C      00028030
C      00028040
C      00028050
C      00028060
C      00028070
C      00028080
C      00028090
C      00028100
C      00028110
C      00028120
C      00028130
C      00028140
C      00028150
C      00028160
C      00028170
C      00028180
C      00028190
C      00028200
C      00028210
C      00028220
C      00028230
C      00028240
C      00028250
C      00028260
C      00028270
C      00028280
C      00028290
C      00028300
C      00028310
C      00028320
C
C      00028330
C      00028340
C      00028350
C      00028360
C      00028370
C      00028380
C      00028390
C      00028400
C      00028410
C      00028420
C      00028430
C      00028440
C      00028450
C      00028460
C      00028470
C      00028480
C      00028490
C      00028500
C      00028510
C      00028520
C      00028530
C      00028540
C      00028550
C      00028560
C      00028570
C      00028580
C      00028590
C      00028600
C      00028610
C      00028620
C      00028630
C      00028640
C      00028650
C      00028660
C      00028670
C      00028680
C      00028690
C      00028700
C      00028710
C      00028720
C      00028730
C      00028740
C      00028750
C      00028760
C      00028770
C      00028780
C      00028790
C      00028800
C      00028810
C      00028820
C      00028830

```



```

C      DO 2250 I = 5,6,
C
DPLC = DPLCM
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
SX = X - DPLC * PDPLC(IEQ) - XSCAT3(I)
DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
DPLC = DPLCM
IF (PUNIF(IEQ) .GT. PRDP) DPLC = 0.0
SY = Y - DPLC * PDPLC(IEQ) - YSCAT3(I)
DY = Y - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S = SQRT ((DX-XSCAT3(I))*(DX-XSCAT3(I)) +
1      (DY-YSCAT3(I))*(DY-YSCAT3(I)))
IF (IDEPH .GT. 150) GOTO 2261
IF (INTE .GT. 150) GOTO 2261
SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)
IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2261
PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)
PRBL = PRBL * EXP (- SB * SB / (U2S * U2S))
CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)
PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E)
PZ = PZ * Q / NUM
BS(INTE,IDEPH) = BS(INTE,IDEPH) + PZ
2261 SREL = S / ATFSI
C
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4
IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2260
C
ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
STHETA = THESI * TA(ISREL) / E
DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)
GOTO 2270
C
C
2260 STHETA = 0.0
DEL(I) = 0.0
C
C
2270 CONTINUE
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)
PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCAT3(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +
1      PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))
C
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 2
C
2250 CONTINUE
C
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
C

```

```

00030030      DO 2280 I = 1,6
00030040      SUM1 = SUM1 + DEL(I)
00030050      SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)
00030060      SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)
00030070      2280 CONTINUE
C
PXREL = PXREL + SUM2
PYREL = PYREL + SUM3
DELE = SUM1 + SILPL / CPH
E = E - DELE
X = X + A4 * PXREL
Y = Y + A4 * PYREL
C
C
RETURN
C
C
SCATTERING BY ONE ATOM PER PLANE
=====
C
3000 CONTINUE
IF (X .LT. 0.0) GOTO 3010
IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3020
DX = X - THVBV2(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBV1(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S1 = SQRT ((DX-XSCAT3(3))*(DX-XSCAT3(3)) +
1      (DY-YSCAT3(3))*(DY-YSCAT3(3)))
DX = X - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S2 = SQRT ((DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) +
1      (DY-YSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5)))
S22 = ZSI / ZV * S2
C
IAT = 5
IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
IAT = 3
GOTO 3040
C
3020 DX = X - THVBV2(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBV1(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S1 = SQRT ((DX-XSCAT3(4))*(DX-XSCAT3(4)) +
1      (DY-YSCAT3(4))*(DY-YSCAT3(4)))
DX = X - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1

```

```

00030630
00030640
00030650
00030660
00030670
00030680
00030690
00030700
00030710
00030720
00030730
00030740
00030750
00030760
00030770
00030780
00030790
00030800
00030810
00030820
00030830
00030840
00030850
00030860
00030870
00030880
00030890
00030900
00030910
00030920
00030930
00030940
00030950
00030960
00030970
00030980
00030990
00031000
00031010
00031020
00031030
00031040
00031050
00031060
00031070
00031080
00031090
00031100
00031110
00031120
00031130
00031140
00031150
00031160
00031170
00031180
00031190
00031200
00031210
00031220

```

```

S2 = SQRT((DX-XSCAT3(6))*(DX-XSCAT3(6)) +
1 (DY-YSCAT3(6))*(DY-YSCAT3(6)))
S22 = ZSI / ZV * S2
C
IAT = 6
IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
IAT = 4
GOTO 3040
C
3010 CONTINUE
IF (Y .LT. 0.0) GOTO 3050
DX = X - THVBV2(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBV1(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S1 = SQRT((DX-XSCAT3(1))*(DX-XSCAT3(1)) +
1 (DY-YSCAT3(1))*(DY-YSCAT3(1)))
DX = X - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBSI(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S2 = SQRT((DX-XSCAT3(5))*(DX-XSCAT3(5)) +
1 (DY-YSCAT3(5))*(DY-YSCAT3(5)))
S22 = ZSI / ZV * S2
C
IAT = 5
IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
IAT = 1
GOTO 3040
C
3050 DX = X - THVBV2(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
DY = Y - THVBV1(IGAUSS)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S1 = 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 + 1
IEQ = IEQ + 1
S2 = SQRT((DX-XSCAT3(6))*(DX-XSCAT3(6)) +
1 (DY-YSCAT3(6))*(DY-YSCAT3(6)))
S22 = ZSI / ZV * S2
C
IAT = 6
IF (S1 .GT. S22) GOTO 3030
IAT = 2
C
SCATTERING BY A V - ATCM
=====
C
3040 CONTINUE
SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHEV * E) * A4
SCRIT = 4.0 * THV2
INTE = IFIX ((ELIM - FKFV * E) / RESCLE + 1.5)
IF (IDEPH .GT. 150) GOTO 3100

```

```

00031230 IF (INTE .GT. 150) GOTO 3100
00031240 SX = X - XSCAT3(IAT)
00031250 SY = Y - YSCAT3(IAT)
00031260 SB = SORT (SX * SX + SY * SY)
00031270 IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 3100
00031280 PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV2 * THV1)
00031290 PRBL = PRBL * EXP (- SX * SX / (2.0 * THV2 * THV2)) *
1 EXP (- SY * SY / (2.0 * THV1 * THV1))
00031300 CALL SIGMA (ZV,FMV,SGMV,PXREL,PYREL)
00031310 PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)
00031320 PZ = PZ * Q / NUM
00031330 BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
00031340
00031350 3100 SREL = S1 / ATFV
00031360 C
00031370 IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 3
00031380 IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 311C
00031390 C
00031400 ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
00031410 STHETA = THEV * TA(ISREL) / E
00031420 DELE = SILBOU * SILV(ISREL)
00031430 GOTO 3120
00031440 C
00031450 C
00031460 3110 STHETA = 0.0
00031470 DELE = 0.0
00031480 C
00031490 C
00031500 3120 CONTINUE
00031510 SCA = SQRT (ELSCAT * (DELE + SILVAL / CPH) / E)
00031520 PX = STHETA * (DX - XSCAT3(IAT)) / S1 + PNORM(IGAUSS) * SCA
00031530 IGAUSS = IGAUSS + 1
00031540 PY = STHETA * (DY - YSCAT3(IAT)) / S1 + PNORM(IGAUSS) * SCA
00031550 IGAUSS = IGAUSS + 1
00031560 PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PX * PX + PY * PY + 1.0))
00031570 C
00031580 IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1
00031590 C
00031600 GOTO 3300
00031610 C
00031620 SCATTERING BY A SI - ATCM
00031630 =====
00031640 C
00031650 3C30 CONTINUE
00031660 SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHES * E) * A4
00031670 SCRIT = 4.0 * THSI
00031680 INTE = IFIX ((ELIM - FKFES * E) / RESCLE + 1.5)
00031690 IF (IDEPH .GT. 150) GOTO 3200
00031700 IF (INTE .GT. 150) GOTO 3200
00031710 SX = X - XSCAT3(IAT)
00031720 SY = Y - YSCAT3(IAT)
00031730 SR = SORT (SX * SX + SY * SY)
00031740 SB = SORT (SX * SX + SY * SY)
00031750 PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)
00031760 PRBL = PRBL * EXP (- SB * SB / (U2S * U2S))
00031770 CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)
00031780 PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E)
00031790 PZ = PZ * Q / NUM
00031800 BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
00031810 3200 SREL = S2 / ATFSI
00031820 C

```

```

00031830
00031840
00031850
00031860
00031870
00031880
00031890
00031900
00031910
00031920
00031930
00031940
00031950
00031960
00031970
00031980
00031990
00032000
00032010
00032020
00032030
00032040
00032050
00032060
00032070
00032080
00032090
00032100
00032110
00032120
00032130
00032140
00032150
00032160
00032170
00032180
00032190
00032200
00032210
00032220
00032230
00032240
00032250
00032260
00032270
00032280
00032290
00032300
00032310
00032320
00032330
00032340
00032350
00032360
00032370
00032380
00032390
00032400
00032410
00032420

```

	IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 4	00032430
	IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 3210	00032440
C		00032450
	ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00032460
	STHETA = THESI * TA(ISREL) / E	00032470
	DFLE = SILBOU * SILSI(ISREL)	00032480
	GOTO 3220	00032490
C		00032500
C		00032510
	3210 STHETA = 0.0	00032520
	DFLE = 0.0	00032530
C		00032540
C		00032550
	3220 CONTINUE	00032560
	SCA = SQRT (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
C		00032650
	3300 PXREL = PXREL + PX	00032660
	PYREL = PYREL + PY	00032670
	E = E - DFLE - SILPL / CPH	00032680
	X = X + A4 * PXREL	00032690
	Y = Y + A4 * PYREL	00032700
C		00032710
C		00032720
	RETURN	00032730
C		00032740
	END	00032750

```

SUBROUTINE SCAT21 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)
=====
S C A T 2 1
=====
SCATTERING PROCESS IN THE FIRST MONOLAYER.
=====

DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)
DIMENSION PNORM(12000)
DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)
DIMENSION THVBSI(12000)
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)
DIMENSION PXSCAT(6)
DIMENSION PYSCAT(6)
DIMENSION DEL(6)
DIMENSION BS(150,150)

REAL*8 PZ
LOGICAL ROTAT
LOGICAL SISC

COMMON /KVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SISC
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
COMMON /SCA21/ XSCT21(5), YSCT21(5)
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THSI, EO, BS, RESOLE, RESOLD,
1 FKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV450
COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, DRIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMC, BETHEV, BETHES

VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)
SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMC * E) * ASQ8
SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * ASQ8
CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
SILBOU = EPO / E * ALOG (BETHES * E) * ASQ8
SCRIT = 4.0 * THSI
INTE = IFIX ((ELIM - FKFS * E) / RESOLE + 1.5)

SCATTERING BY SI - ROBS
=====

DO 2200 I = 1,5

SX = X - DPLC * PDPLC(IEQ) - XSCT21(I)
DX = X - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
SY = Y - DPLC * PDPLC(IEQ) - YSCT21(I)

DY = Y - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S = SQRT((DX-XSCT21(I))*(DX-XSCT21(I)) +
1 (DY-YSCT21(I))*(DY-YSCT21(I)))
IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221
IF (INTE .GT. 150) GOTO 2221
SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)
IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221
PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)
PRBL = PRBL * EXP (- SB * SB / (U2S * U2S))
CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)
PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E)
PZ = PZ * Q / NUM
BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
2221 SREL = S / ATFSI
C
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2
IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220
C
ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
STHETA = THESI * TA(ISREL) / E
DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)
GOTO 2230
C
2220 STHETA = 0.0
DEL(I) = 0.0
C
2230 CONTINUE
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)
PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT21(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCT21(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +
1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))
C
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1
C
2200 CONTINUE
C
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
C
DO 2280 I = 1,5
SUM1 = SUM1 + DEL(I)
SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)
SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)
2280 CONTINUE
C
PXREL = PXREL + SUM2
PYREL = PYREL + SUM3
DELE = SUM1 + SILPL / CPH
E = E - DELE
X = X + ASQ8 * PXREL
Y = Y + ASQ8 * PYREL
C
RETURN
C
END
00032760
00032770
00032780
00032790
00032800
00032810
00032820
00032830
00032840
00032850
00032860
00032870
00032880
00032890
00032900
00032910
00032920
00032930
00032940
00032950
00032960
00032970
00032980
00032990
00033000
00033010
0000033020
00033030
00033040
00033050
00033060
00033070
00033080
00033090
00033100
00033110
00033120
00033130
00033140
00033150
00033160
00033170
00033180
00033190
00033200
00033210
00033220
00033230
00033240
00033250
00033260
00033270
00033280
00033290
00033300
00033310
00033320
00033330
00033340
00033350
00033360
00033370
00033380
00033390
00033400
00033410
00033420
00033430
00033440
00033450
00033460
00033470
00033480
00033490
00033500
00033510
00033520
00033530
00033540
00033550
00033560
00033570
00033580
00033590
00033600
00033610
00033620
00033630
00033640
00033650
00033660
00033670
00033680
00033690
00033700
00033710
00033720
00033730
00033740
00033750
00033760
00033770
00033780
00033790
00033800
00033810
00033820
00033830
00033840
00033850
00033860
00033870
00033880
00033890
00033900
00033910
00033920
00033930
00033940
00033950
00033960
00033970
00033980

```

```

SUBROUTINE SCAT22 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)
=====
S C A T 2 2
=====
SCATTERING PROCESS IN THE SEC. MONDLAYER.
=====

DIMENSION TA(4000), SILV(4000), SILSI(4000)
DIMENSION PNORM(12000)
DIMENSION THVBV1(12000), THVBV2(12000)
DIMENSION THVBSI(12000)
DIMENSION PDPLC(2200), PUNIF(2200)
DIMENSION PXSCAT(6)
DIMENSION PYSCAT(6)
DIMENSION DEL(6)
DIMENSION BS(150,150)

REAL*8 PZ
LOGICAL ROTAT
LOGICAL SISC

COMMON /WVAL/ TA, SILV, SILSI, PNORM, THVBV1, THVBV2, THVBSI, SISC
COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHCAT, PSIINX, PSIINY,
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
COMMON /SCA22/ XSCT22(3), YSCT22(3)
COMMON /TEST/ PHILIM, THV1, THV2, THS1, EQ, BS, RESOLE, RESOLD,
1 PKFV, FKFS, SREL, PHI2, PHI02, ELIM, U2V, U2S, THV45
COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
COMMON /EPSI/ EPO, ZVAL, PLASMO, BETHEV, BETHES

VEL = SQRT (2.0 * E / UCSQ)
SILPL = EPO / E * ZVAL * ALOG (PLASMO * E) * ASQ8
SILVAL = EPO / E * ZVAL * ALOG (VEL / VFERMI) * ASQ8
CPH = (1.0 / SQRT (PXREL * PXREL + PYREL * PYREL + 1.0))
SILBCU = EPO / E * ALCG (BETHEV * E) * ASQ8
SCRIT = 4.0 * THV1
INTE = IFIX ((ELIM - PKFV * E) / RESCLE + 1.5)

SCATTERING BY V - RCWS
=====

DO 2200 I = 1,3

SX = X - DPLC * PDPLC(IEQ) - XSCT22(I)
DX = X - THV45 * PNORM(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
SY = Y - DPLC * PDPLC(IEQ) - YSCT22(I)

DY = Y - THVBV2(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)
IGAUSS = IGAUSS + 1
IEQ = IEQ + 1
S = SQRT((DX-XSCT22(I))*(DX-XSCT22(I)) +
1 (DY-YSCT22(I))*(DY-YSCT22(I)))
IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221
IF (INTE .GT. 150) GOTG 2221
SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)
IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221
PRBL = 1.0 / (2.0 * PI * THV45 * THV2)
PRBL = PRBL * EXP [- SX * SX / (2.0 * THV45 * THV45) *
1 EXP [- SY * SY / (2.0 * THV2 * THV2)]]
CALL SIGMA (ZV,FMV,SGMV,PXREL,PYREL)
PZ = PRBL * SGMV * OMEGA / (E * E)
PZ = PZ * Q / NUM
RS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ
2221 SREL = S / ATFV
C
IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2
IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220
C
ISREL = IFIX (200.0 * SREL)
STHETA = THEV * TA(ISREL) / E
DEL(I) = SILBOU * SILV(ISREL)
GOTO 2230
C
2220 STHETA = 0.0
DEL(I) = 0.0
C
2230 CONTINUE
SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)
PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT22(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSCT22(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA
IGAUSS = IGAUSS + 1
PHIL = ARCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +
1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))
C
IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1
C
2200 CONTINUE
C
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
C
DO 2280 I = 1,3
SUM1 = SUM1 + DEL(I)
SUM2 = SUM2 + PXSCAT(I)
SUM3 = SUM3 + PYSCAT(I)
2280 CONTINUE
C
PXREL = PXREL + SUM2
PYREL = PYREL + SUM3
DELE = SUM1 + SILPL / CPH
E = E - DELE
X = X + ASQ8 * PXREL
Y = Y + ASQ8 * PYREL
C
C
RETURN
C
END

```


C	SUBROUTINE SCAT25 (X,Y,PXREL,PYREL,E,IGAUSS,IEQ,IDEPTH,*,*)	00037710	OY = Y - THVBSI(IGAUSS) - DPLC * PDPLC(IEQ)	00038300
C	=====	00037720	IGAUSS = IGAUSS + 1	00038310
C	S C A T 2 5	00037730	IEQ = IEQ + 1	00038320
C	=====	00037740	S = SQRT((DX-XSCT25(I))*(DX-XSCT25(I)) +	00038330
C	SCATTERING PROCESS IN THE FIFTH MONOLAYER.	00037750	1 (DY-YSC25(I))*(DY-YSC25(I)))	00038340
C	=====	00037760	IF (IDEPTH .GT. 150) GOTO 2221	00038350
C		00037770	IF (INTE .GT. 150) GOTO 2221	00038360
C		00037780	SB = SQRT (SX * SX + SY * SY)	00038370
C		00037790	IF (SB .GT. SCRIT) GOTO 2221	00038380
C		00037800	PRBL = 1.0 / (PI * U2S * U2S)	00038390
C		00037810	PRBL = PRBL * EXP [- SB * SB / (U2S * U2S)]	00038400
C		00037820	CALL SIGMA (ZSI,FMSI,SGMS,PXREL,PYREL)	00038410
C		00037830	PZ = PRBL * SGMS * OMEGA / (E * E)	00038420
C		00037840	PZ = PZ * Q / NUM	00038430
C		00037850	BS(INTE,IDEPTH) = BS(INTE,IDEPTH) + PZ	00038440
C		00037860	2221 SREL = S / ATFSI	00038450
C		00037870	IF (SREL .LT. 0.005) RETURN 2	00038460
C		00037880	IF (SREL .GT. 20.0) GOTO 2220	00038470
C		00037890	ISREL = IFIX (200.0 * SREL)	00038480
C		00037900	STHETA = THESI * TA(ISREL) / E	00038490
C		00037910	DEL(I) = SILBOU * SILSI(ISREL)	00038500
C		00037920	GOTO 2230	00038510
C		00037930	2220 STHETA = 0.0	00038520
C		00037940	DEL(I) = 0.0	00038530
C		00037950	2230 CONTINUE	00038540
C		00037960	SCA = SQRT (ELSCAT * (DEL(I) + SILVAL / CPH) / E)	00038550
C		00037970	PXSCAT(I) = STHETA * (DX - XSCT25(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00038560
C		00037980	IGAUSS = IGAUSS + 1	00038570
C		00037990	PYSCAT(I) = STHETA * (DY - YSC25(I)) / S + PNORM(IGAUSS) * SCA	00038580
C		00038000	IGAUSS = IGAUSS + 1	00038590
C		00038010	PHIL = ARCCOS (1.0 / SQRT (PXSCAT(I) * PXSCAT(I) +	00038600
C		00038020	1 PYSCAT(I) * PYSCAT(I) + 1.0))	00038610
C		00038030	IF (PHIL .GT. PHILIM) RETURN 1	00038620
C		00038040		00038630
C		00038050		00038640
C		00038060		00038650
C		00038070		00038660
C		00038080		00038670
C		00038090		00038680
C		00038100		00038690
C		00038110		00038700
C		00038120		00038710
C		00038130		00038720
C		00038140		00038730
C		00038150		00038740
C		00038160		00038750
C		00038170		00038760
C		00038180		00038770
C		00038190		00038780
C		00038200		00038790
C		00038210		00038800
C		00038220		00038810
C		00038230		00038820
C		00038240		00038830
C		00038250		00038840
C		00038260		00038850
C		00038270		00038860
C		00038280		00038870
C		00038290		00038880
C				00038890
C				00038900
C				00038910
C				00038920
C				00038930


```

4050 CONTINUE
      IF (IXG .EQ. 0) GOTO 4100
C
      IXC = 1
4220 LIMSP = IUR(IXC) - IUL(IXC) + 1
      NSD = 0
      NSDR = 1
C
      DO 4200 I = 1, LIMSP
        INDEX = IUL(IXC) + I - 1
        AX(I) = INDEX
        AY(I) = HETH(INDEX)
        NSD = NSD + 1
        AAY(NSD) = HETH(INDEX)
        IF (I .EQ. LIMSP) GOTO 4201
        IF (NSD .LT. IFWHM) GOTO 4200
C
      CALL TALLY (AAY, Sk, TOTAL, AVER, SD, VMIN, VMAX, NSD, 1, IER)
C
      INX = INDEX - (IFWHM - 1) / 2
      HINT(INX) = AVER(1)
C
      DO 4202 II = NSDR, I
        P(II) = DELNUM * AVER(1)
4202 CONTINUE
C
      NSDR = I + 1
      NSD = 0
4200 CONTINUE
4201 IF (NSD .EQ. 1) GOTO 4204
C
      CALL TALLY (AAY, Sk, TCTAL, AVER, SD, VMIN, VMAX, NSD, 1, IER)
C
      INX = INDEX - NSD / 2
      HINT(INX) = AVER(1)
C
      DO 4203 II = NSDR, LIMSP
        P(II) = DELNUM * AVER(1)
4203 CONTINUE
C
      GOTO 4205
C
4204 CONTINUE
      HINT(INDEX) = HETH(INDEX)
      P(LIMSP) = DELNUM * AVER(1)
C
4205 CONTINUE
      SPLSUM = FLOAT (LIMSP)
C
      CALL SMCOTH (LIMSP, AX, AY, P, SPLSUM, AC, BC, CC, DC, Z1, Z2, Z3, Z4, Z5,
1          Z6, Z7)
C
      DO 4320 I = 1, LIMSP
        INDEX = IUL(IXC) + I - 1
        HSMO(INDEX) = AC(I)
4320 CONTINUE
C
      IXC = IXC + 1

```

```

00044790
00044800      IF (IXC .LE. IXG) GOTO 4220
00044810 C
00044820 C
00044830 4100 CONTINUE
00044840 C
00044850 C
00044860      WRITE (6, 3530) HSMO
00044870      MINCH = IUL(1)
00044880 C
00044890      RETURN
00044900 C
00044910      F O R M A T - S P E C I F I C A T I O N S
00044920      =====
00044930 C
00044940 3511 FORMAT (IHO, T30, 'MAX. CHANNEL NUMBER =', I10//)
00044950 3530 FORMAT (5X, 10F12.0)
00044960 3520 FORMAT (1H1, T15, 'BACKSCATTERING SPECTRUM - NOT SMOOTHED'////)
00044970 3550 FORMAT (1H1, T15, 'BACKSCATTERING SPECTRUM - SMOOTHED'////)
00044980 C
00044990      END
00045000
00045010
00045020
00045030
00045040
00045050
00045060
00045070
00045080
00045090
00045100 C
00045110 C
00045120 C
00045130 C
00045140 C
00045150 C
00045160 C
00045170 C
00045180 C
00045190 C
00045200
00045210
00045220
00045230
00045240
00045250
00045260
00045270
00045280 C
00045290 C
00045300
00045310
00045320
00045330
00045340
00045350
00045360
00045370
00045380

```

```

      IF (IXC .LE. IXG) GOTO 4220
C
4100 CONTINUE
C
      WRITE (6, 3530) HSMO
      MINCH = IUL(1)
C
      RETURN
C
      F O R M A T - S P E C I F I C A T I O N S
      =====
C
3511 FORMAT (IHO, T30, 'MAX. CHANNEL NUMBER =', I10//)
3530 FORMAT (5X, 10F12.0)
3520 FORMAT (1H1, T15, 'BACKSCATTERING SPECTRUM - NOT SMOOTHED'////)
3550 FORMAT (1H1, T15, 'BACKSCATTERING SPECTRUM - SMOOTHED'////)
C
      END
C
SUBROUTINE KINFCT (FM2, FKFACT)
C
      =====
      K I N F C T
      =====
      EVALUATION OF THE KINEMATIC FACTORS
      =====
C
LOGICAL ROTAT
C
COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, CMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1      FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2      COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
C
FKFACT = SORT (FM2*FM2 - FMPART*FMPART * (SIN (BANGLE))**2.0)
FKFACT = (FKFACT + FMPART * COS (BANGLE)) / (FMPART + FM2)
FKFACT = FKFACT * FKFACT
C
      RETURN
      END

```

```

00045390
00045400
00045410
00045420
00045430
00045440
00045450
00045460
00045470
00045480
00045490
00045500
00045510
00045520
00045530
00045540
00045550
00045560
00045570
00045580
00045590
00045600
00045610
00045620
00045630
00045640
00045650
00045660
00045670
00045680
00045690
00045700
00045710
00045720
00045730
00045740
00045750
00045760
00045770
00045780
00045790
00045800
00045810

```

```

C SUBROUTINE SIGMA (Z2,FM2,SGM,PXREL,PYREL)
C
C *****
C S I G M A
C *****
C EVALUATION OF THE RUTHERFORD CROSS SECTION
C RESULT IN (KEV ** 2 A ** 2)
C *****
C
C LOGICAL ROTAT
C
C COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
C COMMON /GVAL/ PI, ATFV, ATFSI, A, A2, A4, RHOAT, PSIINX, PSIINY,
1 ZPART, ZV, ZSI, THEV, THESI, ELSCAT, UCSQ, VFERMI,
2 ASQ, ASQ2, ASQ4, ASQ8, ISEC, DPLCM, PDPLC, PUNIF
C
C CALL COTRAN (PXREL,PYREL,THETAR)
C SGM2 = SQRT (1.0 - (FMPART / FM2 * SIN (THETAR)) ** 2.0)
C SGM1 = (COS (THETAR) + SGM2) ** 2.0
C SGM = ZPART * Z2 * 1.44E-2 / (2.0 * (SIN (THETAR)) ** 2.0)
C SGM = SGM * SGM
C SGM = SGM * SGM1 / SGM2
C
C RETURN
C END

```

```

00045820
00045830
00045840
00045850
00045860
00045870
00045880
00045890
00045900
00045910
00045920
00045930
00045940
00045950
00045960
00045970
00045980
00045990
00046000
00046010
00046020
00046030
00046040
00046050
00046060
00046070
00046080
00046090
00046100
00046110

```

```

C SUBROUTINE COTRAN (PXREL,PYREL,THETAR)
C
C *****
C C O T R A N
C *****
C CALCULATION OF THE REAL BACKSCATTERING ANGLE
C *****
C
C LOGICAL ROTAT
C
C COMMON /BVAL/ Q, WIDTH, BANGLE, ORIGIN, OMEGA, PHI, THETA, PRDP,
1 FMV, FMSI, FMPART, FWHM, NUM, DEPHI, ZVAL1, ZVAL2,
2 COSPHI, SINPHI, FL1, FN1, RCTAT
C
C XBAR = COSPHI * PXREL + SINPHI * PYREL
C YBAR = - SINPHI * PXREL + COSPHI * PYREL
C DIAG = SQRT (XBAR*XBAR + YBAR*YBAR + 1.0)
C FL = XBAR / DIAG
C FN = 1.0 / DIAG
C THETAR = ARCOS (FL*FL1 + FN*FN1)
C RETURN
C END

```

```

00046120
00046130
00046140
00046150
00046160
00046170
00046180
00046190
00046200
00046210
00046220
00046230
00046240
00046250
00046260
00046270
00046280
00046290
00046300
00046310
00046320
00046330
00046340
00046350
00046360

```

```

C SUBROUTINE DAMGPR (DAMAX)
C
C *****
C D A M G P R
C *****
C SEARCH FOR THE MAXIMUM OF THE DAMAGE PROFILE
C *****
C
C DIMENSION DAM(101)
C COMMON /DAMG/ DAM
C DAMAX = 0.0
C DO 10 I = 1,101
C IF (DAM(I) .GT. DAMAX) DAMAX = DAM(I)
C 10 CONTINUE
C WRITE (6,30) DAMAX
C 30 FORMAT ('MAXIMUM OF THE DISTRIBUTION FUNCTION :',F10.4)
C
C RETURN
C END

```

```

00046370
00046380
00046390
00046400
00046410
00046420
00046430
00046440
00046450
00046460
00046470
00046480
00046490
00046500
00046510
00046520
00046530
00046540
00046550
00046560

```

```

C SUBROUTINE DISTFU (DPTH,OPTMEA,DAMAX,DISTR)
C
C *****
C D I S T F U
C *****
C EVALUATION OF THE DAMAGE DENSITY
C *****
C
C DIMENSION DAM(101)
C COMMON /DAMG/ DAM
C IND = IFIX (DPTH / OPTMEA * 100.) / 2 + 1
C IF (IND .GT. 101) GO TO 10
C DISTR = DAM(IND) / DAMAX
C RETURN
C 10 CONTINUE
C DISTR = 0.0
C RETURN
C END

```

```

00046570
00046580
00046590
00046600
00046610
00046620
00046630
00046640
00046650
00046660
00046670
00046680
00046690
00046700
00046710
00046720
00046730
00046740
00046750

```

```

SUBROUTINE STRUCT (A)
=====
S T R U C T
=====
STORAGE OF THE CRYSTALLOGRAPHIC STRUCTURE
=====

COMMON /SCA1/ XSCAT1(6), YSCAT1(6)
COMMON /SCA3/ XSCAT3(6), YSCAT3(6)
COMMON /SCA21/ XSCT21(5), YSCT21(5)
COMMON /SCA22/ XSCT22(3), YSCT22(3)
COMMON /SCA23/ XSCT23(2), YSCT23(2)
COMMON /SCA24/ XSCT24(3), YSCT24(3)
COMMON /SCA25/ XSCT25(4), YSCT25(4)
COMMON /SCA26/ XSCT26(3), YSCT26(3)
COMMON /SCA27/ XSCT27(2), YSCT27(2)
COMMON /SCA28/ XSCT28(3), YSCT28(3)

A2 = A / 2.
A4 = A / 4.
ASQ = A * SQRT (2.)
ASQ2 = ASQ / 2.
ASQ4 = ASQ / 4.
ASQ8 = ASQ / 8.

XSCAT1(1) = - A4
XSCAT1(2) = A4
XSCAT1(3) = - A4
XSCAT1(4) = A4
XSCAT1(5) = - A2
XSCAT1(6) = A2
YSCAT1(1) = A2
YSCAT1(2) = A2
YSCAT1(3) = - A2
YSCAT1(4) = - A2
YSCAT1(5) = 0.
YSCAT1(6) = 0.

XSCAT3(1) = - A2
XSCAT3(2) = - A2
XSCAT3(3) = A2
XSCAT3(4) = A2
XSCAT3(5) = 0.
XSCAT3(6) = 0.
YSCAT3(1) = A4
YSCAT3(2) = - A4
YSCAT3(3) = A4
YSCAT3(4) = - A4
YSCAT3(5) = A2
YSCAT3(6) = - A2

XSCT21(1) = - ASQ2
XSCT21(2) = ASQ2
XSCT21(3) = 0.

XSCT21(4) = - ASQ2
XSCT21(5) = ASQ2
YSCT21(1) = A2
YSCT21(2) = A2
YSCT21(3) = 0.
YSCT21(4) = - A2
YSCT21(5) = - A2

XSCT22(1) = ASQ8
XSCT22(2) = 3. * ASQ8
XSCT22(3) = ASQ8
YSCT22(1) = A2
YSCT22(2) = 0.
YSCT22(3) = - A2

XSCT23(1) = - ASQ4
XSCT23(2) = - ASQ4
YSCT23(1) = A4
YSCT23(2) = - A4

XSCT24(1) = 3. * ASQ8
XSCT24(2) = ASQ8
XSCT24(3) = 3. * ASQ8
YSCT24(1) = A2
YSCT24(2) = 0.
YSCT24(3) = - A2

XSCT25(1) = 0.
XSCT25(2) = - ASQ2
XSCT25(3) = ASQ2
XSCT25(4) = 0.
YSCT25(1) = A2
YSCT25(2) = 0.
YSCT25(3) = 0.
YSCT25(4) = - A2

XSCT26(1) = - 3. * ASQ8
XSCT26(2) = - ASQ8
XSCT26(3) = - 3. * ASQ8
YSCT26(1) = A2
YSCT26(2) = 0.
YSCT26(3) = - A2

XSCT27(1) = ASQ4
XSCT27(2) = ASQ4
YSCT27(1) = A4
YSCT27(2) = - A4

XSCT28(1) = - ASQ8
XSCT28(2) = - 3. * ASQ8
XSCT28(3) = - ASQ8
YSCT28(1) = A2
YSCT28(2) = 0.
YSCT28(3) = - A2

RETURN
END

```

```

C      BLOCK DATA                                00047930
C      =====                                00047940
C      STORAGE OF THE DAMAGE DEPTH PROFILE      00047950
C      =====                                00047960
C      =====                                00047970
C      =====                                00047980
C      =====                                00047990
C      =====                                00048000
C      COMMON /DAMG/ DAM(101)                   00048010
C      DATA DAM/.5750,.7529,.8561,.8847,.9013,.9189,.9377,.9583,.9814, 00048020
C      11.010,1.052,1.113,1.186,1.254,1.307,1.358,1.416,1.485,1.565,1.656,00048030
C      21.756,1.863,1.975,2.087,2.197,2.300,2.396,2.483,2.566,2.630,2.690,00048040
C      32.743,2.786,2.821,2.846,2.862,2.867,2.863,2.848,2.823,2.789,2.747,00048050
C      42.697,2.640,2.577,2.509,2.436,2.359,2.279,2.197,2.113,2.028,1.941,00048060
C      51.855,1.768,1.682,1.596,1.512,1.428,1.346,1.266,1.188,1.111,1.038,00048070
C      6.9662,.8975,.8315,.7684,.7083,.6511,.5970,.5459,.4979,.4528,.4107,00048080
C      7.3715,.3351,.3015,.2704,.2419,.2158,.1920,.1703,.1506,.1329,.1169,00048090
C      8.1325,.0896,.0782,.0680,.0590,.0510,.0439,.0378,.0324,.0277,.0236,00048100
C      9.0200,.0170,.0143,.0121/                 00048110
C      END                                       00048120
C      END                                       00048130

```

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; Appl. 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/ Handbook of Chemistry and Physics; 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: Classical Mechanics; 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: Handbook of Mathematical Functions,
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. B4, 10 (1971)
- /32/ C. Kittel: Einführung in die Festkörperphysik; 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: Festkörperphysik I, II; 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. 46, 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 mancher 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.