

## Teil II

# ERDA-Untersuchungen

# Kapitel 3

## Prinzip und Realisierung der ERDA

Das 3. Kapitel führt in die Grundlagen der elastischen Rückstredetektionsanalyse ein (ERDA - engl.: elastic recoil detection analysis) und erklärt den Aufbau der für die Messungen verwendeten Anlage sowie deren Datenaufnahme und Auswertung.

Im ersten Teil - 3.1 erfolgt eine Besprechung der physikalischen Grundlagen, die zum Verständnis der mit der Streuung von Ionen in einer Probe zusammenhängenden Vorgänge notwendig sind. Dazu gehören der kinematische Faktor, der Streuquerschnitt, das Abbremsvermögen und die Energieverluststreuung.

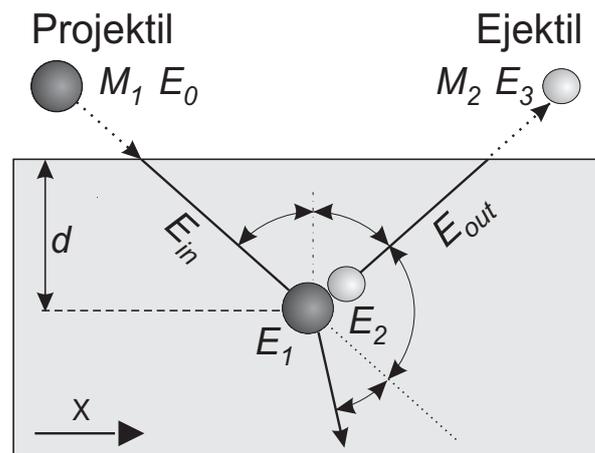
Darauf aufbauend erklärt der zweite Teil - 3.2 den Aufbau der für die Messungen verwendeten Flugzeit-ERDA Apparatur. Nach einigen einführenden Bemerkungen zu prinzipiellen Möglichkeiten des Aufbaus von ERDA-Meßplätzen, wird der am HMI realisierte Aufbau beschrieben. In diesem Zusammenhang werden die für die Berechnung des Auflösungsvermögens der Anlage (Kapitel 4) wichtigen Parameter angegeben.

Der letzte Teil - 3.3 erklärt schließlich die Aufnahme der Meßdaten und den Ablauf der Datenauswertung von den Rohdaten, dargestellt in Scatterplots, zu den Energiespektren der einzelnen chemischen Elemente.

### 3.1 Physikalische Grundprinzipien

Die elastische Rückstredetektionsanalyse - **ERDA** - beruht auf dem physikalischen Prinzip der elastischen Streuung von Ionen an den Atomkernen in einer Probe. Eine schematische Darstellung der dabei auftretenden Prozesse zeigt Abbildung 3.1.

Schwere, hochenergetische Ionen - die **Projektil**e - mit der Eingangsenergie  $E_0$  und der Masse  $M_1$  werden unter streifendem Einfall (Abschnitt 3.1.1) unter einem Winkel  $\alpha$  relativ zur Oberflächennormalen auf die zu untersuchende Probe geschossen. Beim Durchgang der Projektilen durch die Probe verlieren diese die Energie  $\Delta E_{in}$  aufgrund ihrer Wechselwirkung mit der Materie (Abschnitt 3.1.3). Wenn ein Projektil einen Atomkern in der Probe trifft, dann kommt es zu einem elastischen Streuprozeß (Abschnitt 3.1.2). Die Wahrscheinlichkeit für diesen Prozeß wird durch den **Streuquerschnitt**  $\Sigma_{ERD}$  beschrieben (Abschnitt 3.1.2). Ein definierter Teil der Energie des Projektils vor dem Stoß  $E_1$  geht dabei auf den gestoßenen Atomkern



**Abb. 3.1:** Schematische Darstellung des Streuprozesses in der Probe

über, welcher im Folgenden als **Ejektil** bezeichnet wird. Durch die auf das Ejektil übertragene Energie  $E_2$  löst es sich aus dem Atomverband und bewegt sich seinerseits durch die Probe. Der Winkel zwischen der Trajektorie des Projektils vor dem Stoß und der Trajektorie des Ejektils nach dem Stoß wird als Streuwinkel  $\phi$  bezeichnet, der Winkel der Trajektorie des Ejektils nach dem Stoß relativ zur Oberflächennormalen mit  $\beta$ . Der Anteil der übertragenen Energie wird durch den **kinematischen Faktor**  $K = E_2/E_1$  beschrieben (Abschnitt 3.1.1).

Das Ejektil verliert beim Durchgang durch die Materie ebenfalls wieder Energie. Der Energieverlust wird in der Abbildung als  $\Delta E_{out}$  bezeichnet. Die Energie des Ejektils nach dem Austritt aus der Probe läßt sich somit wie folgt beschreiben:

$$E_3 = K \cdot \underbrace{(E_0 - \Delta E_{in})}_{E_2} - \Delta E_{Out} \quad (3.1)$$

- 
- $E_0$  - Kinetische Energie des Projektils vor dem Eindringen in die Probe
  - $E_1$  - Kinetische Energie des Projektils direkt vor dem Stoßprozeß
  - $E_2$  - Kinetische Energie des Ejektils direkt nach dem Stoßprozeß
  - $E_3$  - Kinetische Energie des Ejektils nach dem Verlassen der Probe
  - $K$  - Kinematischer Faktor
  - $\Delta E_{in}$  - Energieverlust des Projektils beim Durchgang durch die Probe
  - $\Delta E_{out}$  - Energieverlust des Ejektils beim Durchgang durch die Probe

Die mittleren Energieverluste von Ionen beim Durchgang durch die Materie lassen sich mit der Hilfe des **Abbremsvermögens**  $S$  berechnen (Abschnitt 3.1.3). Der tatsächliche Energieverlust einzelner Projektile bzw. Ejektile kann allerdings Abweichungen zu diesem Mittelwert aufweisen. Diese Variation der Energieverluste wird mit Hilfe der **Energieverluststreuung**  $\sigma$  beschrieben (Abschnitt 3.1.4).

Nachdem das Ejektil die Probe verlassen hat, wird dessen Energie und dessen Masse bzw. dessen Kernladungszahl bestimmt, wobei der zweite Parameter indirekt über Flugzeiten der Ionen im Vakuum oder über Energieverluste in mit Gas gefüllten

Bereichen erfolgt. Aus der gleichzeitigen Analyse der beiden Parameter lassen sich dann die Abläufe in der Probe rekonstruieren. Daraus gewinnt man Informationen über die **tiefenabhängigen Konzentrationen** der Bestandteile der Probe, aus denen Erkenntnisse über die Schichtstrukturen in der Probe gewonnen werden.

### 3.1.1 Kinematischer Faktor

Trifft ein Projektil der Masse  $M_1$  mit der kinetischen Energie  $E_1$  auf ein Atom des Atomverbandes mit der Masse  $M_2$ , kommt es zu einem Streuprozess. Wenn die Energie des Projektils unterhalb der Energie des Coulombwalles - der unteren Grenze für Reaktionen zwischen den Kernen - liegt, ist dieser Streuprozess elastisch. Dann können aus dem Energie- und dem Impulserhaltungssatz die Bewegungen der Ionen nach dem Stoß berechnet werden. Bei den für ERDA typischen Energien kann dabei angenommen werden, daß die kinetische Energie und der Impuls des Ejektils ( $E \leq 1\text{eV}$ ) vor dem Stoß vernachlässigbar gegenüber den entsprechenden Beiträgen des Projektils (mehrere MeV) sind. Dies gilt ebenfalls für die Bindungsenergien des Ejektils und eventuelle Energieübertragungen innerhalb des Atomverbandes ( $E \leq 100\text{eV}$ ).

Aus einfachen kinematischen Berechnungen ergibt sich dann der vom Streuwinkel  $\phi$  abhängige kinematische Faktor:

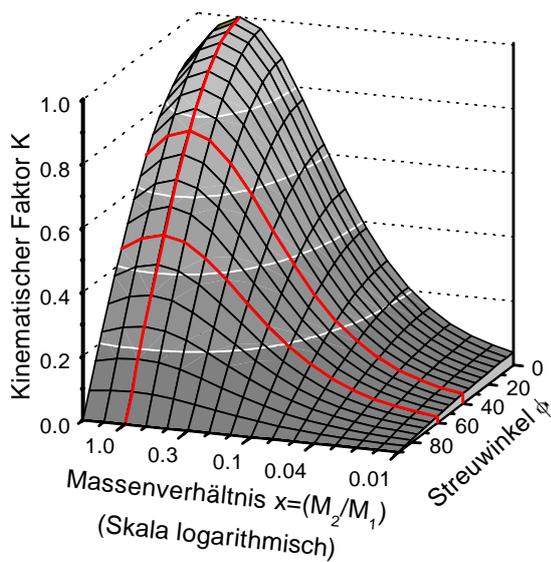
$$K = \frac{E_2}{E_1} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \cos^2\phi \quad (3.2)$$

$$= \frac{4x}{(x + 1)^2} \cdot \cos^2\phi \quad (3.3)$$

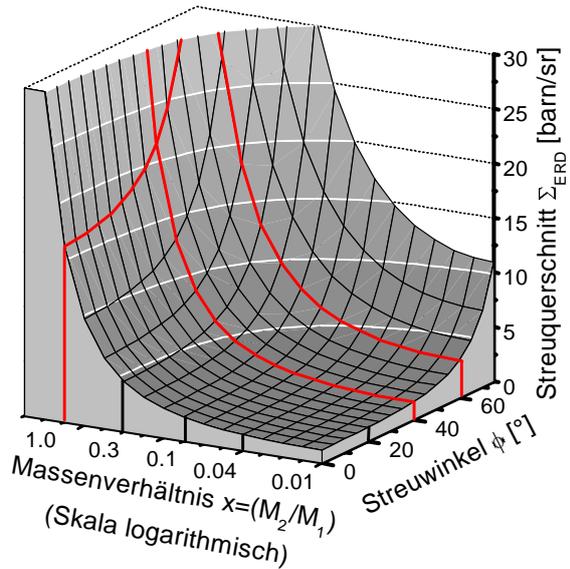
---

|                       |   |
|-----------------------|---|
| $K$                   | - Kinematischer Faktor                      |
| $\phi$                | - Streuwinkel des Ejektils                  |
| $M_1$                 | - Masse des Projektils                      |
| $M_2$                 | - Masse des Ejektils                        |
| $x = \frac{M_2}{M_1}$ | - Massenverhältnis von Ejektil zu Projektil |

In Abbildung 3.2 ist der kinematische Faktor in Abhängigkeit vom Streuwinkel des Ejektils  $\phi$  und des Massenverhältnisses  $x = \frac{M_2}{M_1}$  dargestellt. Kleine  $x$ -Werte entsprechen der Streuung von Projektilen an leichten Atomen (z.B.  $M_H/M_{Xe} \approx 0.008$ ) und große  $x$ -Werte der Streuung an schweren Atomen ( $M_{Au}/M_{Xe} \approx 1.5$ ). Die für unsere ERDA-Anlage relevanten Streuwinkel für das lange und das kurze Flugzeitleteleskop (3.2.4) von  $40^\circ$  bzw.  $60^\circ$  sind rot gekennzeichnet. Außerdem ist auch der für alle Streuwinkel maximale kinematische Faktor für  $M_1 = M_2$  hervorgehoben. Der Energieübertrag vom Projektil zum Ejektil sinkt entsprechend der  $\cos^2\phi$ -Abhängigkeit sehr schnell mit steigendem Streuwinkel  $\phi$ . Deshalb werden ERDA-Messungen unter relativ kleinen Streuwinkeln und daraus folgend unter streifendem Einfall der Projektilen auf die Probe durchgeführt.



**Abb. 3.2:** Der kinematische Faktor als Funktion des Streuwinkels  $\phi$  des Ejektils und des Massenverhältnisses  $x = \frac{M_2}{M_1}$ , berechnet nach Formel 3.2;  $40^\circ$  bzw.  $60^\circ$  entsprechen den Streuwinkeln für das lange bzw. kurze Flugzeitleteoskop (Abschnitt 3.2.4), der maximale kinematische Faktor liegt bei  $x = 1$



**Abb. 3.3:** Der Streuquerschnitt  $\Sigma_{ERD}$  als Funktion des Streuwinkels  $\phi$  des Ejektils und des Massenverhältnisses  $x = \frac{M_2}{M_1}$  berechnet für das Projektil  $^{129}\text{Xe}$  mit einer Energie von 230MeV (ohne Wasserstoff) nach Gleichung 3.6;  $40^\circ$  bzw.  $60^\circ$  entsprechen den Streuwinkeln für das lange bzw. kurze Flugzeitleteoskop (Abschnitt 3.2.4),  $x \leq 1$  gilt für die meisten Ejektile.

### 3.1.2 Streuquerschnitt

Der mittlere differentielle Streuquerschnitt elastischer Streuprozesse - im weiteren als **Streuquerschnitt**  $\Sigma_{ERD}$  bezeichnet - gibt das Verhältnis der Zahl der gestreuten Ejektile  $A$  aus  $N \cdot t$  Atomen pro Flächeneinheit einer Probe in einen Raumwinkel  $\Omega$  zur Anzahl der eingeschossenen Projektile  $Q$  an. Da sich der Raumwinkel des Detektors und die Zahl der einfallenden Projektile genau bestimmen lassen, kann man bei bekanntem Streuquerschnitt aus der Zahl der detektierten Ejektile direkt die absolute Anzahl der Atome pro Flächeneinheit berechnen:

$$A = \Sigma_{ERD} \cdot \Omega \cdot Q \cdot N \cdot t \quad (3.4)$$

|     |                                      |                |                                 |
|-----|--------------------------------------|----------------|---------------------------------|
| $A$ | - Anzahl der detektierten Ejektile   | $\Omega$       | - Raumwinkel des Detektors      |
| $N$ | - Zahl der Atome je Raumvolumen      | $t$            | - Schichtdicke der Streuschicht |
| $Q$ | - Anzahl der einfallenden Projektile | $\Sigma_{ERD}$ | - Streuquerschnitt              |

Der Streuquerschnitt  $\Sigma_{ERD}$  kann aus elastischen Streuprozessen zweier Punktmassen berechnet werden, zwischen denen die abstoßende Coulomb-Kraft der gleichartig geladenen Atomkerne wirkt. Die Annahme gilt für den Fall, daß der minimale Abstand zwischen den beiden Stoßpartnern kleiner als der Bohrsche Radius

$a_0$  ist, aber größer als die Summe der Kernradien der beiden am Stoß beteiligten Atome. Dann können sowohl die Abschirmungen der Atomkerne durch die Elektronen der beiden Atomhüllen als auch Reaktionen zwischen den Atomkernen vernachlässigt werden. Dieser Energiebereich - das sogenannte Coulombfenster - erstreckt sich von einigen keV/amu bis zu 2-3 MeV/amu.

Nach dem Ansatz von E. Rutherford aus dem Jahr 1911 [Rut11] läßt sich der Streuquerschnitt analytisch berechnen. Da sich die restlichen Parameter in Gleichung 3.4 leicht ermitteln lassen, ergibt sich aus der Anzahl der detektierten Ejektile die Anzahl der Atome je Flächeneinheit  $N \cdot t$ , d.h. die atomaren Konzentrationen der Elemente in der Probe.

Auf dieser Grundlage werden Streumethoden zur Bestimmung absoluter Konzentrationen verwendet. Das ermöglicht insbesondere den Einsatz der Methode für beliebige neue Materialsysteme ohne vorherige Kalibrierung. Durch diesen Vorteil können ERDA-Messungen sogar zur Erstellung von Eichstandards für andere Meßmethoden genutzt werden [Str03].

Für den Streuquerschnitt  $\Sigma_{ERD}$ , dessen Berechnung z.B. in [Eva55] nachvollzogen werden kann, ergibt sich aus den Massen und den Kernladungszahlen der Stoßpartner sowie dem Streuwinkel  $\phi$  und der Energie  $E_1$ :

$$\Sigma_{ERD}(E_1, \phi) = \frac{[Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)]^2}{[2(4\pi\epsilon_0) M_2 E_1]^2 \cos^3 \phi} \quad (3.5)$$

$$= \left( \frac{Z_1 M_1}{E_1} \cdot \frac{Z_2}{M_2} \cdot \frac{e^2}{2(4\pi\epsilon_0)} \right)^2 \cdot \frac{(x+1)^2}{\cos^3 \phi} \quad (3.6)$$

---

|                |   |
|----------------|---|
| $\Sigma_{ERD}$ | - Streuquerschnitt  |
| $Z_1 / Z_2$    | - Kernladungszahl des Projektils / Ejektils                     |
| $M_1 / M_2$    | - Masse des Projektils / Ejektils                               |
| $x$            | - Verhältnis der Massen von Ejektil und Projektil ( $M_2/M_1$ ) |
| $E_1$          | - kinetische Energie des Projektils vor dem Stoß                |
| $\phi$         | - Streuwinkel des Ejektils                                      |
| $e$            | - Elementarladung ( $1.60219 \cdot 10^{-19}$ As)                |
| $\epsilon_0$   | - Elektrische Feldkonstante ( $8.85419 \cdot 10^{-12}$ As/(Vm)) |

Wenn man annimmt, daß das Verhältnis von Kernladungszahl zu Atommasse bei allen Ejektileten außer Wasserstoff rund  $Z_2/M_2 \simeq 1/2$ amu beträgt (Wasserstoff  $Z_2/M_2 = 1/1$ amu), ergibt sich für Massenverhältnisse  $x \leq 1$  eine relativ geringe Abhängigkeit des Streuquerschnittes von der Art des Ejektils. Der Streuquerschnitt von Wasserstoff ist entsprechend des Verhältnisses von  $Z_2/M_2$  um einen Faktor  $\sim 4$  höher. Des weiteren erhöht sich der Streuquerschnitt mit dem Inversen des Quadrates der Projektilenergie und dem Inversen der dritten Potenz des Kosinus des Streuwinkels. In Arbeiten wie [And80] oder [Boz91b], [Boz91a] wurde die Gültigkeit der Streuquerschnitte untersucht und Abweichungen experimenteller Daten von den theoretischen Werten (Formel 3.6) erst oberhalb der Energien des oben angegebenen Coulombfensters (2-3MeV/amu) gefunden.

### 3.1.3 Abbremsvermögen

Je tiefer in der Probe ein Streuprozeß stattfindet, desto länger ist der Weg, den das Projektil und das Ejektil durch die Probe zurücklegen müssen. Daraus folgt, daß die Energieverluste sowohl des Projektils  $\Delta E_{in}$  als auch des Ejektils  $\Delta E_{out}$  zunehmen. Dies führt zu einer Verringerung der Energie der Ejektile beim Austritt aus der Probe  $E_3$  mit zunehmender Tiefe  $d$  (siehe Formel 3.1). Die Energieverluste  $\Delta E_{in}$  und  $\Delta E_{out}$  lassen sich aus dem **Abbremsvermögen**  $S$  (engl.: stopping power) berechnen, welches den Energieverlust je Längeneinheit (parallel zur Trajektorie) von Ionen beim Durchgang durch die Probe angibt.

$$\Delta E_{in,out}(d) = \int_0^d \frac{dE}{dx}(E) dx = \int_{E(x=0)}^{E(x=d)} \frac{S_{P,E}(E)}{\cos(\gamma)} dE \quad (3.7)$$

---

|                     |   |
|---------------------|---|
| $\Delta E_{in,out}$ | - Gesamtenergieverlust des Projektils bzw. Ejektils   |
| $d$                 | - Tiefe, in der der elastische Streuprozeß stattfindet  |
| $\frac{dE}{dx}$     | - Energieverlust pro Tiefeneinheit senkrecht zur Probenoberfläche   |
| $S_{P,E}$           | - Abbremsvermögen des Projektils ( $S_P$ ) bzw. des Ejektils ( $S_E$ )  |
| $\gamma$            | - Winkel der Flugrichtung des Projektils ( $\gamma = \alpha$ ) bzw. Ejektils ( $\gamma = \beta$ ) zur Oberflächennormalen |

Der Energieverlust der Ionen ist von der kinetischen Energie und der Art des Ions sowie der Zusammensetzung der Probe abhängig. Deshalb muß man die Gesamtenergieverluste ( $\Delta E_{in}$  und  $\Delta E_{out}$ ) durch Integration ermitteln. Anstelle der winkelabhängigen Energieverluste je Tiefeneinheit führt man das Abbremsvermögen  $S$  ein.

Im Gegensatz zum kinematischen Faktor und zum Streuquerschnitt läßt sich das Abbremsvermögen  $S$  nur mit Näherungsmodellen berechnen. Zur Beschreibung werden Ansätze verwendet, von denen die meisten auf die Arbeiten von Bohr [Boh15] sowie Andersen, Ziegler und Biersack ([And77], [Zie85] und [Zie88]) zurückgehen. Sie unterteilen die Abbremsvermögen in einen elektronischen Anteil, der durch die Wechselwirkungen des Ions mit dem Elektronensystem des Festkörpers entsteht, und einen nuklearen Anteil durch Kleinwinkelstreuungen des Ions an den Atomrümpfen. Für konkrete Materialsysteme können ohne Anpassungen der Modelle Abweichungen von bis zu 10% auftreten, die sich direkt auf die Bestimmung der Tiefen der Streuprozesse in den Proben auswirkt. Die Fehler lassen sich durch gezielte Experimente zur Ermittlung des Energieverlustes im zu untersuchenden System verringern. Aktuelle Erkenntnisse werden dabei in die Datenbanken der Simulationsprogramme eingefügt und stehen damit für die Auswertung der Energiespektren chemischer Elemente zur Verfügung. Dokumentationen hierzu findet man zum Beispiel in den Referenzen von Mayer [May97].

### 3.1.4 Energieverluststreuung

Während das Abbremsvermögen  $S$  den Mittelwert des Energieverlustes der Projektile bzw. Ejektile aus einer großen Anzahl von Wechselwirkungen jedes einzelnen Ions mit der Probe angibt, wird die dabei auftretende Variation der Energieverluste durch die

**Energieverluststreuung**  $\sigma$  beschrieben. Wie in Abschnitt 4.4 gezeigt wird, bestimmt diese Streuung die Energie- und damit die Tiefenauflösung der Meßmethode wesentlich, d.h. die Genauigkeit der Bestimmung der Streutiefe von Ejektile einer Energie. Entsprechend dem Abbremsvermögen  $S$  wird auch die Energieverluststreuung in einen elektronischen und einen nuklearen Anteil unterteilt.

Die elektronische Energieverluststreuung dominiert im Bereich der hohen Energien, wie sie bei den ERDA-Untersuchungen mit schweren Ejektile sowohl für das Projektil als auch für alle Ejektile auftreten. Die Beschreibung dieses elektronischen Anteils beruht auf einer Arbeit von Bohr [Boh15], der vom Durchgang vollständig ionisierter Ionen durch die Probe ausgeht. Korrekturen dieser Berechnungen für nicht vollständig ionisierte Ionen mit mittleren und geringen Energien werden in einer Arbeit von Chu [Chu76] beschrieben, bei der eine Abschirmungskorrektur eingeführt wird.

Der Einfluß der nuklearen Energieverluststreuung auf den Gesamtwert der Energieverluststreuung wird in der letzten Zeit diskutiert, da dieser Anteil zu einer nicht symmetrischen Verteilung des Energieverlustes um den vom Abbremsvermögen  $S$  beschriebenen Mittelwert führt. Nach den Ausführungen von [Sch98]) hat der nukleare Anteil von  $\sigma$  entsprechend dem nuklearen Anteil vom Abbremsvermögen  $S$  im für die ERDA-Messungen relevanten Energiebereich keinen wesentlichen Einfluß auf den Gesamtwert der Energieverluststreuung  $\sigma$ . Das in dieser Arbeit für die Simulationen von Energiespektren chemischer Elemente (Abschnitt 3.3.3) verwendete Simulationsprogramm SimNRA [May97] berücksichtigt deshalb nur den elektronischen Anteil der Energieverluststreuung.

## 3.2 Aufbau des verwendeten HI-TOF-ERDA Meßplatzes

Im Ionenstrahllabor des HMI wird seit Ende 1996 ein Meßplatz für ERDA-Messungen nach dem Prinzip der Flugzeitmessung (engl.: TOF - time-of-flight) benutzt, der für die Benutzung schwerer Projektile (engl.: HI - heavy ions) ausgelegt ist. Derartige ERDA Meßplätze sind nicht kommerziell erhältlich und müssen speziell entwickelt werden. Deshalb geht dieser Abschnitt - 3.2 kurz auf die zugrunde liegende generelle historische Entwicklung der ERDA-Methode und Möglichkeiten der Realisierung von ERDA-Messungen ein und beschreibt im Anschluß den Aufbau des Meßplatzes am HMI.

### 3.2.1 Historische Entwicklung der ERDA-Technologie und Möglichkeiten des Meßaufbaues

Anfang des letzten Jahrhunderts wurden mit der Erforschung der Struktur der Materie durch das Experiment von Geiger [Gei09], bei dem  $\alpha$ -Partikel auf eine Goldfolie geschossen und unter großen Streuwinkeln detektiert werden konnten, die Anfänge für die ersten Rutherford-Rückstreuexperimente (RBS - engl. Rutherford backscattering; Detektion der gestreuten Projektile) gelegt. E. Rutherford lieferte dazu die theoretische Beschreibung [Rut11], die auch die Grundlage für das weitere

Verständnis des Atommodelles bildet.

Mit den von L'Ecuyer [L'E76] durchgeführten Experimenten, bei denen leichte gestreute Teilchen, also Ejektile, aus der untersuchten Probe detektiert wurden, begannen die Anfänge der ERDA. Aufgrund des Aufbaus der ersten Experimente und der Nutzung relativ leichter Projektile, konnten zunächst nur leichte Elemente (Wasserstoff bis ca. Kohlenstoff) detektiert werden. Später konnten mit höheren Projektilenergien auch schwerere Ejektile nachgewiesen werden (z.B. [Sto89]). Damit bestand nun die Möglichkeit, alle atomaren Komponenten der untersuchten Proben gleichzeitig zu messen und zu unterscheiden, was einen deutlichen Vorteil gegenüber RBS-Experimenten bietet.

Um die Ejektile nach Atomsorten sortieren zu können, muß deren Energie und deren Masse oder Kernladungszahl bestimmt werden. Dazu werden die Methoden der  $\Delta E$ -E-Messung in Detektorsystemen mit gasgefüllten Kammern (Energie-Energieverlust-Messung, z.B. [Ass94]) oder der Flugzeit-Messung (z.B. [Boh98a]) benutzt. Einfachere Aufbauten lassen sich - wie in [Tes95] beschrieben - mit leichten Projektilen und einer Stopping-Folie aufbauen. Diese können aber nur sehr leichte Ejektile nachweisen, i.a. nur Wasserstoff. Alle anderen Ejektile werden in der Folie vollständig abgestoppt, da das Abbremsvermögen  $S$  proportional zum Quadrat der Kernladungszahl ist ( $\propto Z^2$ ). Zur Erhöhung der Auflösung können statt der Energieverlust- oder Flugzeit-Bestimmung ( $\Delta E$  oder TOF) magnetische (z.B. [Dol92]) oder elektrostatische (z.B. [End92]) Analysemethoden eingesetzt werden, die aber aufgrund der Energieverluststreuung nur für die Analyse der direkten Probenoberfläche bessere Auflösungen ermöglichen (siehe Abschnitt 4.4).

Mit  $\Delta E$ -E-Meßplätzen lassen sich im Vergleich zu TOF-Meßplätzen größere Detektionsraumwinkel  $\Omega$  realisieren, was bereits bei einer vergleichsweise geringen Anzahl von Projektilen  $Q$  zu einer guten Statistik führt (Formel 3.4). Dafür ist die Massenselektivität für Ejektile aus tieferen Schichten der Probe besonders für schwere Ionen mit der TOF-Methode höher.

### 3.2.2 Erzeugung der Projektile für die ERDA-Messungen

Die HI-TOF-ERDA Anlage ist ein Meßplatz des Ionenstrahllobes ISL am Hahn-Meitner-Institut Berlin. Diese Einrichtung stellt Ionenstrahlen der unterschiedlichsten Massen und Energien zur Verfügung. Dazu verfügt das ISL über zwei Primärbeschleuniger [Arn77], [Pel94] und ein Zyklotron zur weiteren Beschleunigung der Ionen [Bus75]. Die erzeugten Strahlen werden an die Strahlplätze der jeweiligen Nutzer weitergeleitet. Für den ERDA-Strahlplatz werden 150MeV  $^{86}Kr$  (1.74MeV/amu), 230MeV  $^{129}Xe$  (1.78MeV/amu) oder 350MeV  $^{197}Au$  (1.78MeV/amu) als Projektile verwendet. Die Energien liegen damit am oberen Ende des Coulomb-Fensters für elastische Streuprozesse (Abschnitt 3.1.2).

Der Strahl liegt in gepulster Form - sogenannten Bunchen - mit Pulsabständen von  $\sim 250$ ns und Pulslängen von ca. 500ps vor. Dies ist Voraussetzung für die Nutzung des kurzen Flugzeitteleskopes (Abschnitt 3.2.4).

Typische Strahlströme für die Messungen liegen bei 0.3 TnA (Teilchen-Nanoampere), was ca. 470 Projektilen je Strahlpaket entspricht. Ein zu großer Teilchenstrom führt

zu einem Verlust von Ereignissen während der Messung<sup>1</sup> und zu falschen Signalen. Durch die Integration des Streuquerschnittes  $\Sigma_{ERD}$  über die gesamte Eindringtiefe der Projektile, die im Bereich einiger  $\mu\text{m}$  liegt (Abschnitt 4.1), läßt sich die Anzahl der Ejektile für typische Detektorraumwinkel von  $<10\text{msr}$  abschätzen. Die Wahrscheinlichkeit für das gleichzeitige Auftreten zweier Ejektile aus einem Bunch des Strahles liegt bei den von uns verwendeten maximalen Strahlströmen bei ca.  $10^{-5}$ . Um aus der Zahl der detektierten Ejektile  $A$  auf deren Konzentration  $N \cdot t$  schließen zu können, muß man die Anzahl der einfallenden Projektile  $Q$  während der Messung kennen (Formel 3.4). Dazu benötigt man eine Meßmethode, mit der man den Strahlstrom mißt, ohne den Strahl selbst zu verändern.

Herkömmliche Meßaufbauten arbeiten dazu mit einer rotierenden Meßscheibe, auf der ein Teil des Stromes abgefangen und gemessen wird (z.B. [Pás90]). Dies hat allerdings den Nachteil, daß der Strahlstrom sinkt und sich die Qualität des Strahles verschlechtert. Mit der Hilfe eines am HMI entwickelten Verfahrens, das die Restgasionisierung in der Flugbahn der Projektile nutzt, läßt sich die Anzahl der Ionen ohne Beeinflussung des Ionenstrahles messen [Boh96]. Der maximale Fehler dieser Methode liegt bei 2%.

### 3.2.3 ERDA-Meßplatz

Der Aufbau der HI-TOF-ERDA Anlage am HMI ist in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt. Das vom Ionenstrahlabor kommende Strahlrohr ist auf der linken Seite der Abbildung zu erkennen. Der Primärstrahl passiert zur Messung des Strahlstromes zunächst den Strahlstrommonitor und die Position eines Faraday-Cups, der zur Eichung des Strahlstrommonitors relativ zum Strahlengang verfahren werden kann. In der Kammer, im mittleren Teil der Abbildung, treffen die Projektile auf die Probe. Der Strahl wird auf diesen Punkt fokussiert und hat dort einen Durchmesser von  $\leq 2\text{mm}$ .

Jeweils 6 Proben der Größe  $\approx (1 \times 1)\text{cm}^2$  befinden sich senkrecht übereinander auf einem Probenhalter. Dieser wird über eine Schleuse in das Vakuum ( $\sim 2 \cdot 10^{-8}\text{mbar}$ ) eingeschleust mit Hilfe eines in der Streuebene verschiebbaren Goniometers relativ zum Strahl positioniert und gedreht.

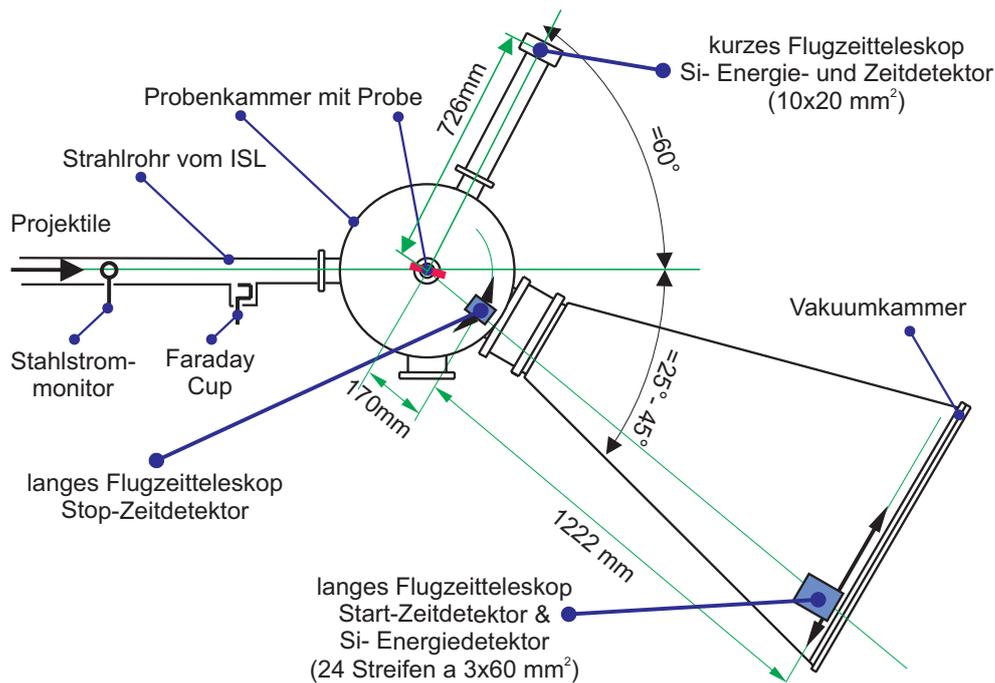
An die Kammer anschließend befinden sich zwei unterschiedliche Flugzeitlekope. Vom Primärstrahl aus gesehen links befindet sich unter einem festen Streuwinkel von  $60^\circ$  das kurze Flugzeitlekop. Rechts befindet sich ein Flugzeitlekop mit einem variablen Streuwinkel von  $25^\circ - 40^\circ$  innerhalb einer Kammer. In den meisten Fällen wird dieses Teleskop unter einem Winkel von  $40^\circ$  betrieben. Durch Wahl des Anstellwinkels der Probe zum Primärstrahl kann eines der Teleskope benutzt werden. Für den Wechsel des Flugzeitlekopes reicht eine Drehung der Probe aus.

### 3.2.4 Flugzeitlekope

Das kurze Flugzeitlekop besteht nur aus einem Energiedetektor in einer Entfernung von 726mm von der Probe. Der Detektor befindet sich hinter einer rechteckigen

---

<sup>1</sup>aufgrund von Zeitintervallen während der Flugzeitmessung des Detektorsystems, in denen keine weiteren Signale verarbeitet werden



**Abb. 3.4:** Schematische Aufsicht auf den ERDA-Meßplatz. Von links kommen die Projektilen, die - je nach Drehung der Probe relativ zum Strahl - Ejektilen aus der Probe in Richtung des kurzen bzw. langen Flugarmes auslösen.

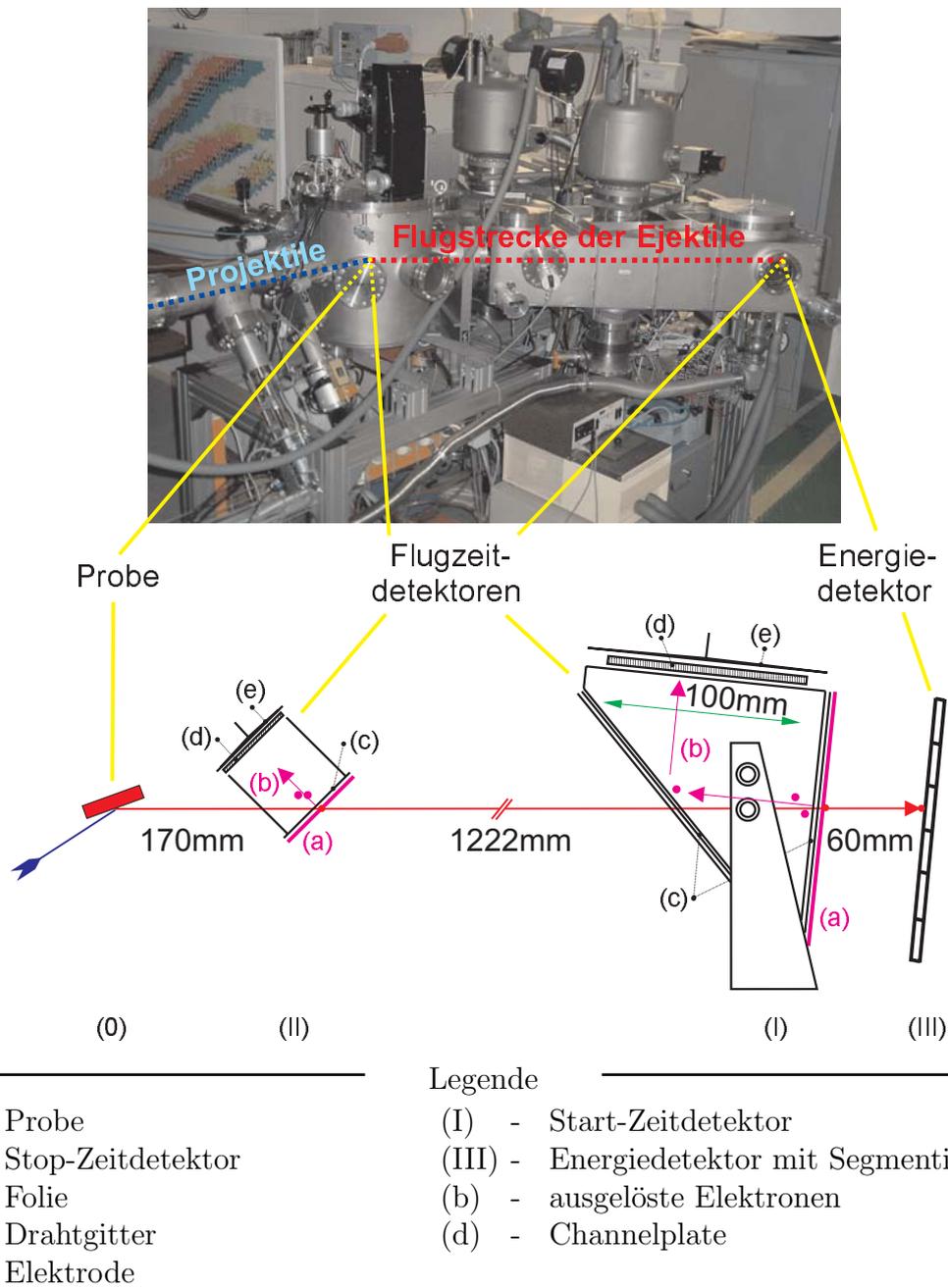
Blende mit einer Größe von  $(20.1 \times 10.1) \text{ mm}^2$ . Dies ergibt einen Öffnungswinkel von  $0.80^\circ$  und einen Raumwinkel von  $0.39 \text{ msr}$ . Das wesentlichste Anwendungsgebiet des kurzen Teleskopes ist die Detektion von Wasserstoff mit 100%iger Effizienz<sup>2</sup>. Dies erreicht man durch Nutzung des Zeitsignales des Energie-Halbleiterdetektors und des Hochfrequenzsignales des Zyklotrons zur Zeitmessung.

Die Verwendung des Hochfrequenzsignales des Zyklotrons zur Zeitmessung begrenzt sowohl die Zeitauflösung als auch den maximalen Flugweg der Ionen im Flugzeitleteleskop (Tabelle 3.1). Der maximale Flugweg wird dadurch begrenzt, daß Ereignisse aus verschiedenen Strahlpaketen bei der Detektion zeitlich nicht in das gleiche Meßintervall von  $200 \text{ ns}$  fallen dürfen. Daraus ergibt sich mit dem zeitlichen Abstand der Strahlpakete von  $250 \text{ ns}$  (Abschnitt 3.2.2) und der minimal nachgewiesenen Energie der zu messenden Ejektilen von ca.  $100 \text{ keV/amu}$  eine maximale Flugweglänge von  $0.78 \text{ m}$ , was knapp überhalb der Länge des Flugzeitleteleskopes liegt.

Der Aufbau des langen Flugzeitleteleskopes, dargestellt in Abbildung 3.5, ermöglicht die Messung von Ejektilen mit hoher Zeitauflösung [Boh98a], [Boh98b]. Das Flugzeitleteleskop besteht aus zwei unterschiedlichen Channel-Plate Zeitdetektoren (I) und (II), gefolgt von einem Silizium Energiedetektor mit einer Segmentierung in Streifen (III). Mit den beiden Zeitdetektoren wird die Flugzeit der Ejektilen unabhängig von externen Zeitsignalen gemessen. Dadurch sind längere Flugweglängen für die

<sup>2</sup>alle anderen Ejektilen werden sowohl mit dem langen als auch mit dem kurzen Flugzeitleteleskop mit 100% Effizienz detektiert

Ejektile und exaktere Flugzeitmessungen (TOF) im Vergleich zur kurzen Flugstrecke realisierbar (Tabelle 3.1). Als Resultat ergibt sich ein höheres Auflösungsvermögen (Kapitel 4).



**Abb. 3.5:** Foto und schematische Darstellung der langen Flugzeitkammer (Detail aus Abbildung 3.4).

Zur Erzeugung von Zeitsignalen sind auf dem Flugweg der Ejektile innerhalb der beiden Zeitdetektoren (I), (II) zwei dünne Folien, die aus  $30\mu\text{g}/\text{cm}^2$  Polypropylen und einem dünnen metallischen Film auf der Oberfläche bestehen, aufgestellt ((a) in

Abbildung 3.5).

Beim Durchgang eines Ejektils durch eine Folie werden proportional zum relativ geringen Energieverlust der Ejektile Elektronen ausgelöst ((b) in Abbildung 3.5). Aus der Schichtdicke der Folien ergibt sich ein zusätzlicher Energieverlust der Ejektile und damit einhergehend eine Erhöhung der Energieverluststreuung, weshalb möglichst dünne Folien verwendet werden.

Aufgrund der Wahl möglichst dünner Folien und die Abhängigkeit des Energieverlustes in den Folien von der Kernladungszahl der Ejektile (proportional  $Z^2$ ), erzeugen leichte Ionen - insbesondere Wasserstoff - sehr wenig Elektronen. Nach [Boh98a] führt dies zu einer Detektionseffizienz für Wasserstoffkerne von 40% bei 3MeV, die mit dem Energieverlust auf 75% bei 0,4MeV zunimmt. Deshalb wird zum Nachweis von Wasserstoff das kurze Flugzeitleteleskop verwendet.

Die Elektronen, die entgegen der Flugrichtung des Ejektils aus der Folie austreten, werden mit Hilfe eines Gitters einige mm vor der Folie beschleunigt ((c) in Abbildung 3.5), indem man eine Spannung zwischen der Folie und dem Gitter anlegt. Zur Detektion der Elektronen werden diese zunächst mit einem Channel-Plate vervielfacht ((d) in Abbildung 3.5) und anschließend auf einer Elektrode gesammelt ((e) in Abbildung 3.5). Die Zeitdifferenz zwischen dem Auslösen der Elektronen aus der Folie und der Sammlung an einer Stelle der Anode muß dabei für alle Stellen der Folie gleich lang sein.

Um einen ungestörten Durchgang der Ejektile durch den Detektor zu gewährleisten, dürfen weder das Channel-Plate noch die Anode im Flugweg der Ejektile stehen. Bei Zeitdetektor (II) wird dies durch eine Neigung des Detektors um  $45^\circ$  zum Flugweg der Ejektile erreicht. Da die Distanz zwischen den Folien (a) der beiden Zeitdetektoren (I) und (II) für alle der von der Probe kommenden Wege der Ejektile gleich lang sein muß, ergibt sich die Neigung der Folie in Zeitdetektor (I) bei einem Abstand von 1222mm zu  $9^\circ$ . Damit das zugehörige Channel-Plate (Id) und die Anode (Ie) nicht im Flugweg der Ejektile stehen, erfolgt der Aufbau des zweiten Zeitdetektors in Form eines Spiegel-Channel-Plates (Form von I in Abbildung 3.5), wie es in [Bus80] beschrieben wird.

Die Transmission der langen Flugstrecke für die Ejektile bis zum Energiedetektor ist durch die Verwendung der Drahtgitter (Ic) und (IIc) zur Beschleunigung und Umlenkung der Elektronen für die Zeitmessung (Ib) und (IIb) reduziert. Wenn ein Ion durch einen der Drähte dringt, wird es darin gestopt oder gestreut. Diese Ejektile führen dann nicht mehr zu verwertbaren Ereignissen. Die damit verbundene Verringerung der Transmission läßt sich aus der Dicke des Drahtes und dem Abstand benachbarter Drähte abschätzen. Die Transmission eines Gitters liegt bei 93% (Drahtdicke:  $70\mu\text{m}$ , Abstand: 1mm) und die der langen Flugstrecke bei 75% (4 Gitter).

Aus dem Aufbau der beiden Zeitdetektoren (I) und (II) ergibt sich die maximale Zeitauflösung des langen Flugzeitleteleskopes, deren Zusammensetzung in Tabelle 3.1 gemeinsam mit den zugehörigen Werten für die kurze Flugzeitstrecke aufgeführt ist.

Hinter dem 2. Zeitdetektor befindet sich im Abstand von 6cm ein rechteckiger, ionenimplantierter Silizium-Detektor. Er ist auf  $-10^\circ\text{C}$  gekühlt, um den Leckstrom zu reduzieren und damit die Langzeitstabilität zu erhöhen. Seine aktive Fläche beträgt  $7.2 \times 6.0 \text{cm}^2$ . Damit ergibt sich ein Raumwinkel von 1.54msr und ein Öffnungswinkel in der Streuebene von  $2.9^\circ$ .

Eine Besonderheit des Energie-Detektors ist seine Unterteilung in 24 Streifen, wodurch

man den Streuwinkel der Ejektile bis auf  $0.12^\circ$  genau bestimmen kann. Das ermöglicht eine winkelabhängige Energiekorrektur, auf die Abschnitt 4.4.4 näher eingeht.

Die Bestimmung der Energie der Ejektile erfolgt im Silizium-Halbleiterdetektoren beim Durchgang der Ejektile durch einen von Ladungsträgern entleerten Bereich. Innerhalb der Detektoren erzeugen die Ionen proportional zu ihrer Energie Elektronen-Loch-Paare. Diese werden mittels einer in diesem Bereich anliegenden Potentialdifferenz separiert. Aus der daraus resultierenden Ladung wird die Energie ermittelt.

Bei schweren Ejektile ist die Anzahl der registrierten Ladungsträger allerdings nicht ganz proportional zur Energie der Ejektile. Das liegt an der hohen Dichte der lokal erzeugten Ladungsträgerpaare aufgrund der geringeren Reichweite von schweren Ionen. Dadurch wird das externe Feld teilweise abgeschirmt und es kommt zu einer erhöhten Rekombinationswahrscheinlichkeit zwischen den Elektronen und den Löchern [Mou78]. Zusätzlich kann es zu unterschiedlichen Zeitverzögerungen des Detektors für verschiedene Ejektilmassen kommen [Boh85].

Damit der Energiedetektor (III) bei einer Verschiebung der Probe relativ zum Strahl und der damit verbundenen Verschiebung des Ausgangspunktes der Ejektile nicht durch die Rahmen der vorderen Detektoren verdeckt wird, sind die Raumwinkel der vorderen Detektoren (II und I) größer. Deshalb werden in den Zeitdetektoren die Ejektile aus einem entsprechend größerem Bereich des Raumwinkels detektiert (Tabelle 3.1), was zu einer Erhöhung der Zählrate führt. Für die Auswertung werden die Informationen aller drei Detektoren (I), (II) und (III) benötigt, weshalb die zusätzlich in den vorderen Zeitdetektoren registrierten Ereignisse nicht verwertbar sind.

Um die elektrische Totzeit zu minimieren werden die Zeitmessungen durch den hinteren Zeitdetektor (I) ausgelöst, der aufgrund seines kleineren Raumwinkels weniger Ereignisse registriert. Dafür werden die Signale des vorderen Zeitdetektors um eine feste Zeit  $t_0$  verzögert, was zu einer Zeitmessung von  $t_0 - TOF$  führt (TOF - engl.: time of flight). Das verringert die Totzeiten während der Zeitmessungen erheblich, da der benötigte Zeit-Amplituden-Konverter (TAC - engl.: time-to-amplitude Converter) nach jedem Start  $5\mu s$  benötigt, um in seinen Ausgangszustand zurückzukehren und in der Lage ist, erneut Ereignisse zu detektieren.

## 3.3 Erfassung der Daten und deren Auswertung

### 3.3.1 Datenerfassung und Darstellung im Scatterplot

Die von den einzelnen Detektoren erzeugten Signale müssen so umgewandelt werden, daß aus ihnen speicherbare Rohdaten für die weitere Bearbeitung werden. Dabei werden die zum jeweiligen Ejektil gehörenden Daten zeitlich geordnet nacheinander abgespeichert.

Aus den beiden Signalen der Flugzeitdetektoren wird eine zur Zeitdifferenz  $t_0 - TOF$  proportionale Spannung mit einem Zeit-Amplituden-Konverter (engl.: TAC - time to amplitude converter) erzeugt, die mittels eines Analog-Digital-Konverters (engl.: ADC - analog digital converter) mit 8192 Kanälen digitalisiert wird (Y-Achse in Abbildung 3.6). Ein verstärktes Signal des Energiedetektors wird mittels eines zweiten ADC's

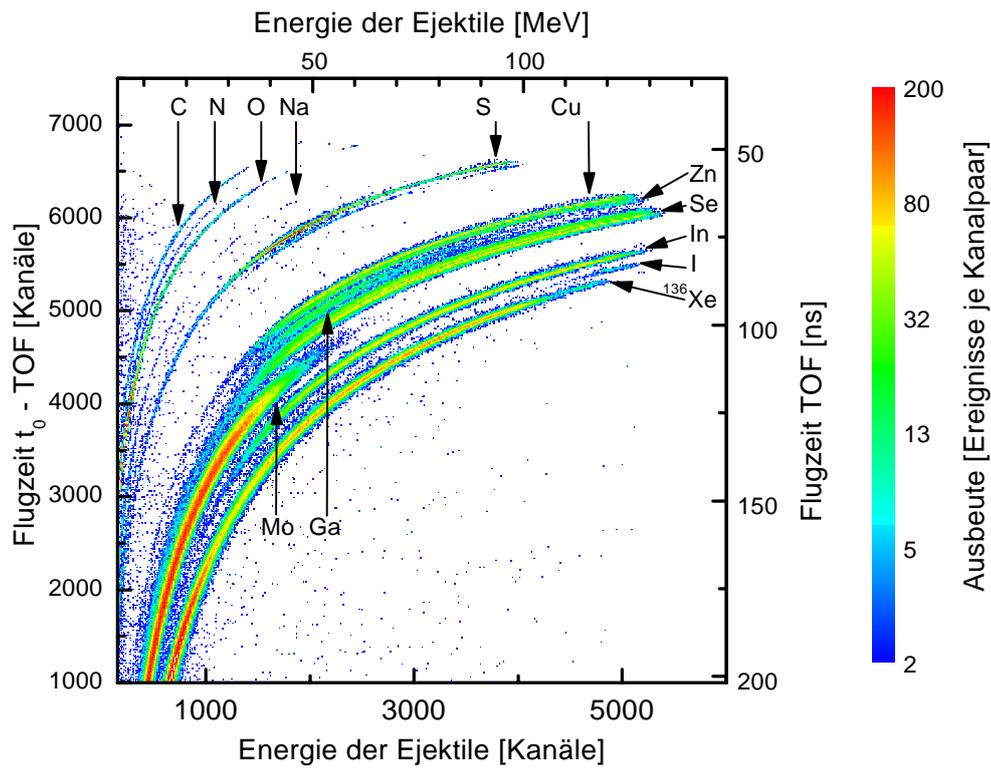
**Tab. 3.1:** Vergleich der Parameter der Flugzeitteleskope

|   | langes Teleskop                | kurzes Teleskop                |
|---|--------------------------------|--------------------------------|
| <b>Streuwinkel</b>                      | 40°(25°..40°)                  | 60°                            |
| <b>Stopsignal Zeitmessung</b>           | Channelplate                   | Zyklotron des ISL              |
| Zeitauflösung [ps]                      | ~ 50                           | ~ 500                          |
| Abstand von der Probe [mm]              | 170                            | -                              |
| Detektorgröße [mm]                      | 25                             | -                              |
| Detektorwinkel [°]                      | < 8.4                          | -                              |
| Transmission durch die Gitter [%]       | 93                             | -                              |
| Detektorraumwinkel [msr]                | 63.2                           | -                              |
| <b>Startsignal Zeitmessung</b>          | Spiegelchannelplate            | Energiedetektor                |
| Zeitauflösung [ps]                      | ~ 140                          | ~ 50                           |
| Abstand von der Probe [mm]              | 1392                           | wie Energiedetektor            |
| Detektorgröße (B x H)[mm <sup>2</sup> ] | 92 x 75                        | wie Energiedetektor            |
| Detektorwinkel [°]                      | 3.8                            | wie Energiedetektor            |
| Transmission durch die Gitter [%]       | 80                             | wie Energiedetektor            |
| Detektorraumwinkel [msr]                | 2.67                           | wie Energiedetektor            |
| <b>Energiedetektor</b>                  | Silizium<br>Halbleiterdetektor | Silizium<br>Halbleiterdetektor |
| mittlere Energieauflösung [%]           | ~ 1%                           | ~ 1%                           |
| Abstand von der Probe [mm]              | 1452                           | 726                            |
| Detektorgröße (B x H)[mm <sup>2</sup> ] | 72 x 60 / 24 · 3 x 60          | 10.1 x 20.1                    |
| Detektorwinkel [°]                      | 2.8 / 24 · 0.12                | 0.8                            |
| Transmission durch die Gitter [%]       | 75                             | -                              |
| Detektorraumwinkel [msr]                | 1.53 / 24 · 0.064              | 0.39                           |

mit gleicher Kanalzahl ebenfalls digitalisiert (X-Achse in Abbildung 3.6). Beim langen Flugzeitteleskop kommt zusätzlich noch die Information über den aktivierten Streifen des segmentierten Energiedetektors hinzu. Die Zuordnung der Einzelinformationen zu einem bestimmten Ejektil erfolgt durch ein Zeitfenster, welches durch das Zeitsignal des Energiedetektors ausgelöst wird. Aus der chronologischen Ordnung der gespeicherten Ereignisse kann bei der Auswertung auf die zeitliche Abfolge der Ejektile geschlossen werden.

Aus der Auftragung aller Paare der Rohdaten von Energie und Flugzeit erhält man einen Graphen wie in Abbildung 3.6. Dieser wird als **Scatterplot** bezeichnet. Er steht bereits während der Messung zur Verfügung und erlaubt dem Experimentator einen groben Überblick über die Zusammensetzung der Probe, im Fall der Abbildung 3.6 einer Heterostruktur (von unten nach oben) aus Glas, Molybdän, Cu(In,Ga)(S,Se)<sub>2</sub>-Absorber und ZnSe aus dem CVD-Prozeß mit einem Anteil von Jod.

Als Orientierungshilfe sind am Scatterplot in Abbildung 3.6 rechts und oben die Flugzeit und die Energie der Ejektile aufgetragen. Die Farbe der Punkte im Scatterplot



**Abb. 3.6:** Scatterplot von einer Heterostruktur (von unten nach oben) aus Glas / Molybdän / Cu(In,Ga)(S,Se)<sub>2</sub>-Absorber / ZnSe:I

gibt die Anzahl der detektierten Ejektile mit den gleichen Kanalpaaren aus der Konvertierung mit den Analog-Digital-Konvertern, respektive den gleichen Zeit- und Energiewerten an. Die Anzahl der Ereignispaare wird auch als Ausbeute bezeichnet und kann aus der Farbskala auf der rechten Seite ausgelesen werden.

Die gemessene Zeit  $t$  als Differenz der Zeitverschiebung  $t_0$  und der Flugzeit  $TOF$ , die Masse  $M_2$  und die Energie  $E_3$  der Ejektile für eine Flugstrecke der Länge  $s$  sind entsprechend der Formel 3.8 voneinander abhängig.

$$t = t_0 - TOF = t_0 - \sqrt{M_2 s^2 / 2E_3} \quad (3.8)$$

- 
- $t$  - gemessene Zeitdifferenz
  - $t_0$  - Zeitverschiebung des Stop-Zeitdetektors (II) aus Abbildung 3.5
  - $s$  - Länge der Flugstrecke im Flugzeitleteleskop

Daraus ergibt sich für jede Ejektilmasse ein sogenannter Massenast, auf dem sich alle zu der Masse zuordenbaren Datenpaare befinden. In Abbildung 3.6 sind diese Bereiche mit den zugehörigen chemischen Elementen beschriftet.

Für die leichten chemischen Elemente kann man bei mehrisotopigen Elementen sogar die einzelnen Isotope erkennen (Abschnitt 4.2). Ein Beispiel dafür sind die beiden Massenäste des Schwefel ( $^{32}\text{S}$  - 95%,  $^{34}\text{S}$  - 4.2 %) in Abbildung 3.6. Isotope anderer Elemente können bei der Vergrößerung einzelner Bereiche identifiziert werden

(Abbildung 6.5 auf Seite 94). Die Massenauflösung ist durch die Auflösung der Energie- und Zeitdetektoren gegeben. Dies wird in Abschnitt 4.2 eingehender besprochen. Wenn innerhalb des Targets chemische Elemente mit hohen Massen vorhanden sind, kann auch das Projektil selbst in Richtung des Flugzeitleteleskopes gestreut werden. Dann findet man einen zusätzlichen Massenast der Projektile.

### 3.3.2 Umwandlung der Daten in Energiespektren

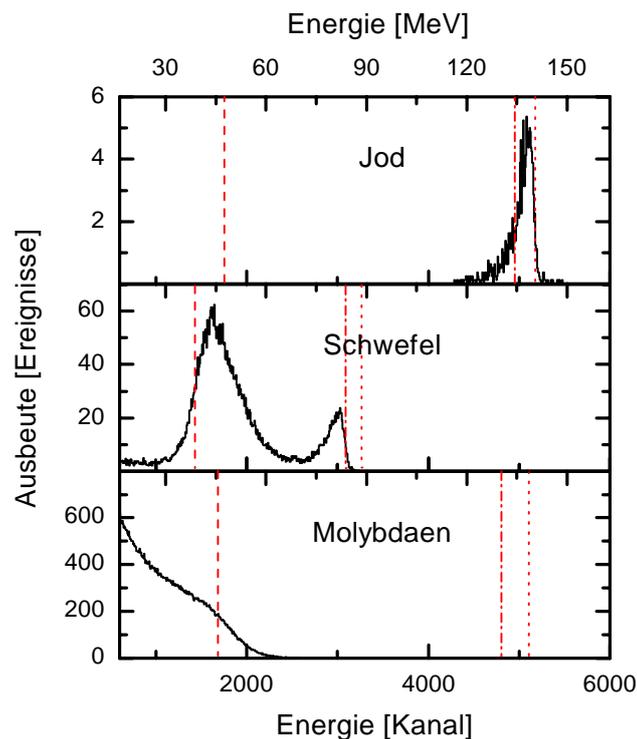
Mit der Hilfe des Scatterplotes können die zu den jeweiligen chemischen Elementen gehörenden Ejektile identifiziert werden. Da alle Ereignisse innerhalb eines Massenastes im Scatterplot (Formel 3.8) zu einer Ejektilsorte gehören, kann man deren Ereignisse separieren, indem man nur die Daten der Fläche des Massenastes im Scatterplot extrahiert. Mit den daraus gewonnenen Daten der Ejektile eines Isotopes oder eines chemischen Elementes können nun weitere Berechnungen vorgenommen werden.

Da die Masse der Ejektile eines Massenastes bekannt ist, kann die zu jedem Ereignis gehörende Energie entweder aus den Werten des Energiedetektors oder indirekt aus den gemessenen Flugzeiten ermittelt werden. Die zweite Methode führt für das lange Flugzeitleteleskop zu deutlich besseren Energieauflösungen (siehe Abschnitt 4.4).

Die zu einer Ejektilsorte gehörenden Ereignisse können als Funktion der Energie aufgetragen werden. Daraus resultieren die **Energiespektren** der chemischen Elemente bzw. der Isotope. In Abbildung 3.7 sind die Energiespektren von 3 chemischen Elementen der Heterostruktur (von unten nach oben) aus Glas, Molybdän,  $\text{Cu(In,Ga)(S,Se)}_2$ -Absorber und  $\text{ZnSe:I}$  dargestellt, die aus den zu Abbildung 3.6 gehörenden Daten gewonnen wurden. Zur Orientierung wurde zusätzlich oberhalb der Spektren die zu den Kanälen gehörige Energie dargestellt. Außerdem sind die Energien  $E_3$  der verschiedenen Ejektile als senkrechte Linien in die Energiespektren eingezeichnet, die den mittleren Streutiefen  $\bar{d}$  (Abschnitt 5.1) an der Oberfläche (gepunktete Linie), am Übergang zwischen  $\text{ZnSe}$ -Schicht und Absorber (strichpunktierte Linie) und am Übergang zwischen Absorber und Rückkontakt (gestrichelte Linie) entsprechen (Formel 3.2).

Entsprechend ihres Vorkommens finden sich die Ereignisse der chemischen Elemente nur in dem Energiebereich, die der jeweiligen Schicht entsprechen. Für Jod ist dies der Bereich der Zinkselenidschicht, für Schwefel der Bereich des Absorbers und für Molybdän der Bereich des Rückkontaktes der Heterostruktur. Abweichungen sind das Resultat der Tiefenauflösung (Abschnitt 4.4) und der Rauigkeiten der Schichten (Abschnitt 6.4).

Die Flanken, die die Spektren zu hohen Energien hin begrenzen, werden auch als **Hochenergie-Flanken** (HE-Flanke) bezeichnet. Äquivalent dazu nennt man die andere Seite **Niederenergie-Flanke** (NE-Flanke). Aus der Anzahl der Ereignisse läßt sich die Konzentration des Elementes in der Tiefe mit Hilfe des Streuquerschnittes  $\Sigma_{ERD}$  (siehe Abschnitt 3.1.2) bestimmen. Zur Ermittlung der tiefenabhängigen Konzentrationen aus den Energiespektren werden verschiedene Simulationsprogramme zur Interpretation verwendet, deren generelle Funktionsweise im Abschnitt 3.3.3 besprochen wird.



**Abb. 3.7:** Energiespektren der chemischen Elemente Jod, Schwefel und Molybdän der Heterostruktur (von unten nach oben) Glas / Molybdän /  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})(\text{S}, \text{Se})_2$ -Absorber /  $\text{ZnSe}:\text{I}$ , ermittelt aus der Umrechnung der Flugzeiten der Ereignisse aus Scatterplot 3.6. Die senkrechten Linien geben die zur mittleren Streutiefe  $\bar{d}$  gehörenden Energien  $E_3$  für die Oberfläche (gepunktet), den Übergang  $\text{ZnSe}$  / Absorber (strichpunktiert) und den Übergang Absorber / Rückkontakt (gestrichelt) an.

### 3.3.3 Interpretation der Energiespektren

An die Umsetzung der Spektren der Elemente in tiefenabhängige Konzentrationen kann in verschiedener Weise herangegangen werden. Die dafür existierenden Computer-Programme können in drei Gruppen unterteilt werden.

Der intuitivste Ansatz, den die erste Gruppe nutzt, ist die Simulation der Wege einzelner Projektil-Ejektil-Paare beim Durchgang durch vom Nutzer vorgegebene Probenstrukturen. Die resultierenden simulierten Spektren werden mit den gemessenen Spektren verglichen und im nächsten Simulationslauf angepaßt. Mit Hilfe dieser als Vollsimulation bezeichneten Methode kann man alle möglichen Einflüsse berücksichtigen, hat allerdings einen extrem hohen Rechenaufwand. Deshalb wird dieser Ansatz nur in wenigen Fällen genutzt.

Die zweite Gruppe von Programmen vereinfacht die Simulation durch eine Reihe von Annahmen über die Probenstruktur. Man nimmt hier eine Schichtstruktur der vermessenen Probe an und gibt für jede Schicht eine Zusammensetzung vor. Anschließend berechnen die Programme für jede Schicht die erwartete Anzahl der Ejektile und die Energie der Projektile, die durch die Schicht hindurchgelangen.

Aus der Summation der Signale aus den einzelnen Schichten erhält man dann das Gesamtspektrum der Simulation. Auch dieses wird mit den gemessenen Spektren verglichen. Ein Simulationsprogramm dieser Gruppe ist das für die Auswertungen in dieser Arbeit verwendete Programm SimNRA [May97].

Die dritte Gruppe von Computer-Programmen versucht, die Probenzusammensetzung aus den gemessenen Spektren weitestgehend automatisch zu ermitteln. Dazu berechnen die Programme von der Oberfläche der Probe beginnend iterativ die zur Tiefe  $d$  erwarteten Energien  $E_3$  für jedes chemische Element und ermitteln aus der bei dieser Energie gemessenen Anzahl der Ejektile die chemische Zusammensetzung der Probe. Ein Beispiel dafür ist das Programm KonzERD [Ber95]. Diese Methode kann nicht alle notwendigen Einflüsse berücksichtigen, wie die Tiefenauflösung oder Oberflächenrauigkeiten und kann deshalb nur zur Abschätzung von tiefenabhängigen Konzentrationsprofilen verwendet werden.