

Kapitel 2

Schichtanalytik mit schweren Ionen durch Energieverlustmessung

Es existiert eine Vielzahl von Methoden zur Analyse von dünnen, oberflächennahen Schichten. Sie basieren auf den unterschiedlichsten Wechselwirkungen der Sonden mit den Probenatomen und der Detektion verschiedenster Reaktionsprodukte. Tab. 2.1 gibt einen Überblick über diese Vielfalt, geordnet nach anregenden und emittierten Teilchen. Im folgenden werden die Verfahren der weitverbreiteten Ionenstrahlanalytik näher betrachtet, insbesondere diejenigen, die die Tiefeninformation aus dem Energieverlust des Projektilions ableiten. Darunter fallen die **Nukleare Reaktionsanalyse NRA**, die **Rutherford Rückstreuung RBS** und die **Elastische Rückstoßteilchenanalyse ERDA**.

Im Gegensatz zu diesen Verfahren, die zu den **zerstörungsfreien** Methoden zählen, kann auch bei der Secondary Ion Mass Spectroscopy (SIMS) und beim Ion Surface Scattering (ISS) – zwei Verfahren, bei denen mit schweren Ionen die Oberfläche weggesputtert (abgetragen) wird und die herausgeschlagenen Atome in einem Massenspektrometer identifiziert werden – ebenfalls eine Tiefeninformation gewonnen werden. Diese basiert jedoch auf der Kenntnis von Sputterraten, d.h. der Geschwindigkeit, mit der die Oberfläche abgetragen wird, und des Zeitpunktes der Detektion des Teilchens, um auf die Tiefe, aus der es kommt, schließen zu können.

Eine weitere Möglichkeit, Tiefenprofile zu bestimmen, bietet ein Verfahren, bei dem die Probe schräg angeschliffen wird. Somit wird eine Tiefenverteilung der Elemente in eine laterale Verteilung umgewandelt. Mit einem ortsauflösenden Verfahren, wie z.B. RFA, AES oder ELS (s. Tab. 2.1), kann dann ein Tiefenprofil gewonnen werden. Dabei wird die Probe jedoch zerstört. Zudem ist ein Schrägschliff nicht bei allen Materialien möglich.

Emission von	Anregung durch			
	Röntgen	Elektronen	Ionen	thermisch
Photonen	RFA	EPMA SXAPS	PIXE, NRA SIPS	Laseremissions- analyse
Elektronen	PES AES	AES, AEAPS DAPS, ELS	(AES)	
Ionen			SIMS, ISS NRA, RBS, ERDA	Funken-, Laser- Massenspektr.

Tabelle 2.1: *Methoden der Schichtanalytik oberflächennaher, dünner Schichten:*

RFA : Roentgen Flourescence Anal. *PIXE* : Particle Ind. X-Ray Emission
PES : Photo Electron Spectroscopy *NRA* : Nuclear Reaction Analysis
AES : Auger Electron Spectroscopy *SIPS* : Sputtering Ind. Photo Emis.
EPMA : Electron Probe Micro Anal. *SIMS* : Secondary Ion Mass Spec.
SXAPS : Soft X-Ray Appearance Spec. *ISS* : Ion Surface Scattering
AEAPS : Auger Elec. Appearance Spec. *RBS* : Rutherford Back Scattering
DAPS : Disappearance Potential Spec. *ERDA* : Elastic Recoil Detection Anal.
ELS : Electron Loss Spectroscopy

2.1 Verschiedene Meßmethoden der Ionenstrahl-analytik

a) Für die **Nukleare Reaktionsanalyse** [Fel86] benötigt man eine Kernreaktion des Projektils mit dem zu untersuchendem Isotop mit einer möglichst schmalen Resonanz. Dabei unterscheidet man zwei Klassen, je nachdem, ob nach der Reaktion ein Teilchen oder ein γ -Quant nachgewiesen wird.

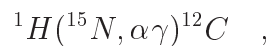
- *Teilchen-Nachweis*

Unter der Vielzahl der geeigneten Reaktionen seien hier beispielhaft nur einige aufgeführt.



- *γ -Nachweis*

Hierfür sei die am Hahn-Meitner-Institut angewandte ^{15}N -Methode zur Bestimmung von Wasserstoffprofilen als Beispiel aufführen. Es handelt sich dabei um die Reaktion



wobei das γ -Quant, das vom ersten angeregten Zustand im ^{12}C -Kern mit einer Energie von $E_\gamma = 4,43$ MeV emittiert wurde, nachgewiesen wird. Die Resonanzenergie der Fusionsreaktion $^{15}\text{N} + ^1\text{H}$ beträgt $E_{Res} = 6,385$ MeV mit einer Breite von nur $\Delta E_{Res} = 0,005$ MeV.

Generell wird in einer NRA-Messung die Energie des Projektils variiert. Üblicherweise beginnt man mit einer Einschußenergie, die der Resonanzenergie entspricht, so daß die Reaktion an der Oberfläche stattfindet. Die Anzahl der detektierten Reaktionsprodukte ist dann ein Maß für die Häufigkeit des untersuchten Elementes an der Oberfläche. Erhöht man die Einschußenergie, so erreicht das Projektil aufgrund des **Energieverlustes** die Resonanzenergie erst in größerer Tiefe x , die über den Energieverlust des Projektils bestimmt werden kann:

$$x = \int_{E_{Res}}^{E_0} \frac{1}{S_p(E)} dE \quad (2.1)$$

(E_0 : Einschußenergie, E_{Res} : Resonanzenergie,
 $S_p(E) = \Delta E/\Delta x$: spez. Energieverlust des Projektils)

Die nun gemessene Zählrate ergibt die Konzentration in dieser Tiefe. Die Resonanzbreite bestimmt dabei die Tiefenauflösung. Durch kontinuierliches Durchfahren der Einschußenergie wird somit die ganze Schicht durchquert und somit das gesuchte Tiefenprofil erhalten. Der Nachteil dieser Methode ist jedoch die Beschränkung auf ein zu untersuchendes Element und die zeitaufwendige Energievariation.

b) Die Projektile einer **RBS**-Messung sind leichter als die Konstituenten der Probe. In den meisten Fällen sind es Protonen, α -Teilchen oder ^{12}C -Ionen. Ähnlich wie bei ERDA-Messungen beschießt man die Probe unter einem flachen Winkel. Die Projektile werden an den Atomkernen der Probe unter Rückwärtswinkeln zurückgestreut und detektiert. Ihre Energie nach der Streuung gibt Aufschluß über die Masse und Ladung der Atome in der Probe. Findet die Streuung in einer Tiefe x statt, so wird das Projektil auf dem Weg zum Streupartner und wieder hinaus abgebremst und verläßt die Probe mit einer Energie $E(x)$:

$$E(x) = k \left(E_0 - S_p(E_{in}) \frac{x}{\sin \Theta_{in}} \right) - S_p(E_{out}) \frac{x}{\sin \Theta_{out}} \quad (2.2)$$

$$k = \left(\frac{(M_t^2 - M_p^2 \sin^2 \Theta)^{1/2} + M_p \cos \Theta}{M_p + M_t} \right)^2 \quad (2.3)$$

(E_0 : Einschußenergie, $S_p(E_{in/out})$: spez. Energieverlust des ein-/auslaufenden Teilchens, $\Theta_{in/out}$: Ein-/Austrittswinkel des Teilchens zur Probenoberfläche, $M_{p/t}$: Masse von Projektil/Target, Θ : Streuwinkel)

Der **Energieverlust** des Projektils liefert die Information über die Tiefe des Streuortes. Diese Meßmethode ist sehr gut geeignet, wenn die Probe aus schweren Elementen besteht. Allerdings kann es, wie schon in der Einleitung diskutiert, bei dickeren Schichten zu Überlappungen der einzelnen Energieprofile kommen, die dann entfaltet werden müssen. Besondere Probleme bereiten Profile von in der Probe selten vorkommenden Konstituenten, wenn sie mit einem sehr häufigen Element überlappen.

Im Gegensatz zu RBS benutzt man bei **ERDA**-Messungen schwere Projektile, denn nun werden die bei der Streuung unter einem kleinen Streuwinkel herausgeschlagenen, leichteren Rückstoßteilchen detektiert. Dabei wird deren Energie, Masse und Kernladungszahl bestimmt. Wiederum ist die Energie der Teilchen ein Maß für die Tiefe, aus der es herausgeschlagen wurde (s. Gl. 1.3). Sie wird vor allem durch den **Energieverlust** des schweren Projektils, dessen Abbremsvermögen im Vergleich zu leichten Ionen deutlich größer ist, bestimmt. Im Gegensatz zu RBS jedoch kann hier für jedes Element ein eigenes Tiefenprofil erzeugt werden, Überlappungen existieren nicht. Diese Methode erweist sich als besonders wirksam bei Proben, die aus leichteren Elementen bestehen, und deckt somit den von RBS nicht erfaßten Bereich ab.

Für all diese Meßverfahren ist die Kenntnis des Energieverlustes essentiell. Aus diesem Grunde wird im folgenden Kapitel ein Abriß der gebräuchlichen Theorien der Abbremsung schwerer Ionen in einem Festkörper dargelegt.

2.2 Energieverlust schwerer Ionen in Materie

Dringt ein Ion in einen Festkörper ein, so wechselwirkt es mit den Atomen und wird dabei abgebremst. Die Stärke der Abbremsung wird als **spezifischer Energieverlust S** oder dE/dx bezeichnet und gibt an, wieviel Energie das Projektil pro $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ bzw. Atome/cm^2 des Probenmaterials verliert.

Der spez. Energieverlust S hängt stark von der Energie des Projektils ab. Man unterscheidet zwei Bereiche (s. Abb. 2.1):

1. niedrige Energien (bis einige 100 keV/Nukleon)

Hierbei erfolgt die Abbremsung durch elastische Stöße mit den Probenatomen. Die Prozesse finden punktweise statt und führen je nach Stoßparameter zu mehr oder minder großen Energie- und Richtungsänderungen. Diese Art der Abbremsung wird **nuklearer Energieverlust S_n** genannt.

2. mittlere Energien (bis einige 10 MeV/Nukleon)

In diesem Bereich dominiert der **elektronische Energieverlust** S_e . Es handelt sich dabei um inelastische Stöße des Projektils mit den freien (Valenz- und Leitungsband-) Elektronen im Festkörper. Die Elektronen wirken dabei wie ein zähes Medium, das das Projektil kontinuierlich abbremst. „Inelastisch“ soll dabei andeuten, daß die Stöße auch zu Anregung oder zur Ionisation sowohl des Probenatoms als auch des Projektilions führen können.

Bei niedrigeren Energien müssen stets beide Arten von Energieverlusten, S_n und S_e , berücksichtigt werden. Oberhalb ca. 200 keV/Nukleon wird der nukleare Energieverlust vernachlässigbar klein, in den meisten Fällen beträgt er weniger als 2 %. Abb. 2.1 zeigt das Verhältnis der beiden Abbremsmechanismen für Kr-Ionen in Kohlenstoff. Da wir für unsere ERDA-Messungen stets Ionen mit einer Energie, bei der der totale Energieverlust möglichst groß sein soll, also in einem Bereich von 1 - 3 MeV/Nukleon benutzen, ist für uns nur der elektronische Energieverlust relevant, der nukleare kann vernachlässigt werden.

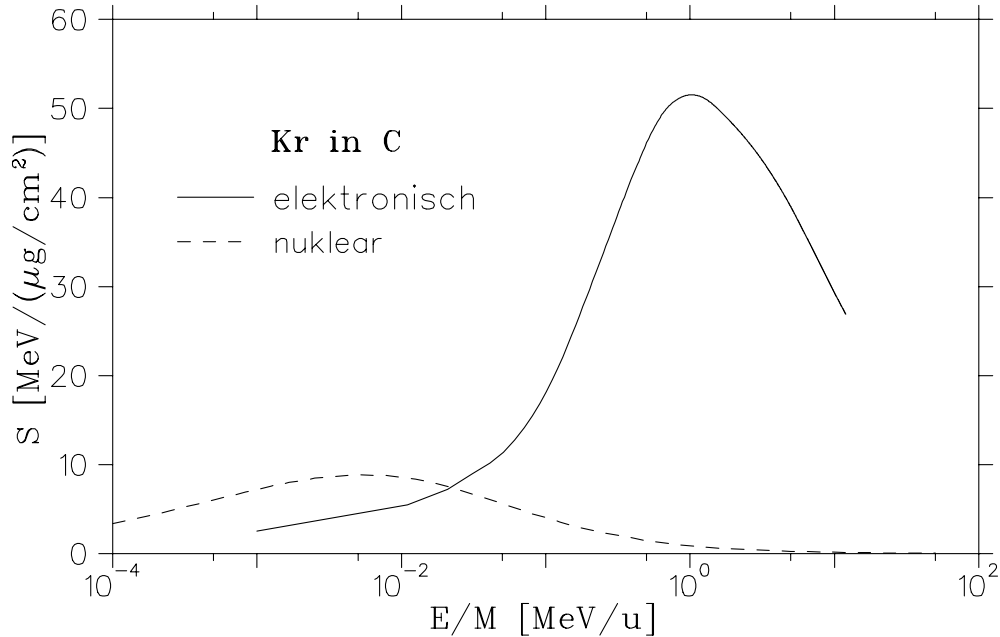


Abbildung 2.1: Nuklearer und elektronischer Energieverlust für Kryptonionen in Kohlenstoff als Funktion der Energie/Nukleon (logarithmischer Maßstab)

Einen guten Überblick über die Entwicklung der Theorien zur Abbremsung geladener Teilchen in Materie vermittelt das Standardwerk von Ziegler, Biersack und Littmark [Zie85]. Ihre Methode zur Berechnung des nuklearen und elektronischen Energieverlustes ist heute wohl am weitesten verbreitet und soll im folgenden kurz dargestellt werden.

2.2.1 Der nukleare Energieverlust S_n

Wie schon erwähnt, erfolgt die nukleare Abbremsung durch elastische Streuung des Ions am Potential des Probenkerns. Für kleine Stoßparameter sieht das Projektil annähernd das Coulombpotential einer Punktladung, bei größerem Abstand schirmen die gebundenen Elektronen die Kernladung ab. So ist eine der wichtigsten Grundlagen für die Berechnung dieses Energieverlustes die Kenntnis der durch die Elektronenhülle abgeschirmten Potentiale. Demnach wird für das Potential $V(r)$ eines Atoms ein Separationsansatz in folgender Form gemacht:

$$V(r) = V_c(r)\Phi(r) = \frac{Z_p Z_t e^2}{r} \Phi(r) \quad (2.4)$$

($V_c(r)$: Coulombpotential, $\Phi(r)$: Abschirmung Z_p/t : Kernladungszahl von Projektil/Target, e : Elementarladung, r : Abstand vom Kern)

Das Coulombpotential $V_c(r)$ wird als kugelsymmetrisch angenommen, die Abschirmfunktion $\Phi(r)$ beinhaltet die Schaleneffekte der Elektronen, deren Bahnradius kleiner als r ist. In der Vergangenheit wurde eine Vielzahl verschiedener Atompotentiale und Abschirmfunktionen vorgeschlagen, sowohl aufgrund von theoretischen Betrachtungen als auch auf der Basis von semiempirischen Rechnungen. Die am meisten benutzten werden hier vorgestellt (s. auch Abb. 2.2):

Bohr [Boh48]:

$$\Phi(r) = \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right) \quad (2.5)$$

mit

$$a_B = \frac{a_0}{\left(Z_p^{2/3} + Z_t^{2/3}\right)^{1/2}} \quad (2.6)$$

und

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

(m_e = Elektronenmasse, e = Elementarladung)

Thomas-Fermi [Som32]:

$$\Phi(r) = \left[1 + \left(\frac{r}{a_{TF} \alpha}\right)^\lambda\right]^{-3/\lambda} \quad (2.7)$$

mit

$$a_{TF} = \frac{0.8853 a_0}{\left(Z_p^{2/3} + Z_t^{2/3}\right)^{1/2}} \quad (2.8)$$

und

$$\lambda = 0.8034, \quad \alpha = 12^{2/3}$$

Molière [Mol47]:

$$\Phi(r) = \sum_{i=1}^3 a_i \exp\left(-b_i \frac{r}{a_{TF}}\right) \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.35 & a_2 &= 0.55 & a_3 &= 0.1 \\ b_1 &= 0.3 & b_2 &= 1.2 & b_3 &= 6.0 \end{aligned}$$

Lenz-Jensen [Len32] verwendeten die gleich Abschirmfunktion wie Mollière mit etwas anderen Parametern:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.7466 & a_2 &= 0.2433 & a_3 &= 0.0101 \\ b_1 &= 1.038 & b_2 &= 0.3876 & b_3 &= 0.206 \end{aligned}$$

Ziegler-Biersack-Littmark [Zie85] paßten eine Abschirmfunktion an theoretisch berechnete Atompotentiale vieler Target-Projektil-Kombinationen an. Ihre Universalabschirmfunktion lautet:

$$\Phi(r) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp\left(-b_i \frac{r}{a_u}\right) \quad (2.10)$$

$$a_u = \frac{0.8854 a_0}{Z_p^{0.23} + Z_t^{0.23}} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.1818 & a_2 &= 0.5099 & a_3 &= 0.2802 & a_4 &= 0.0281 \\ b_1 &= 3.2 & b_2 &= 0.9423 & b_3 &= 0.4029 & b_4 &= 0.2016 \end{aligned}$$

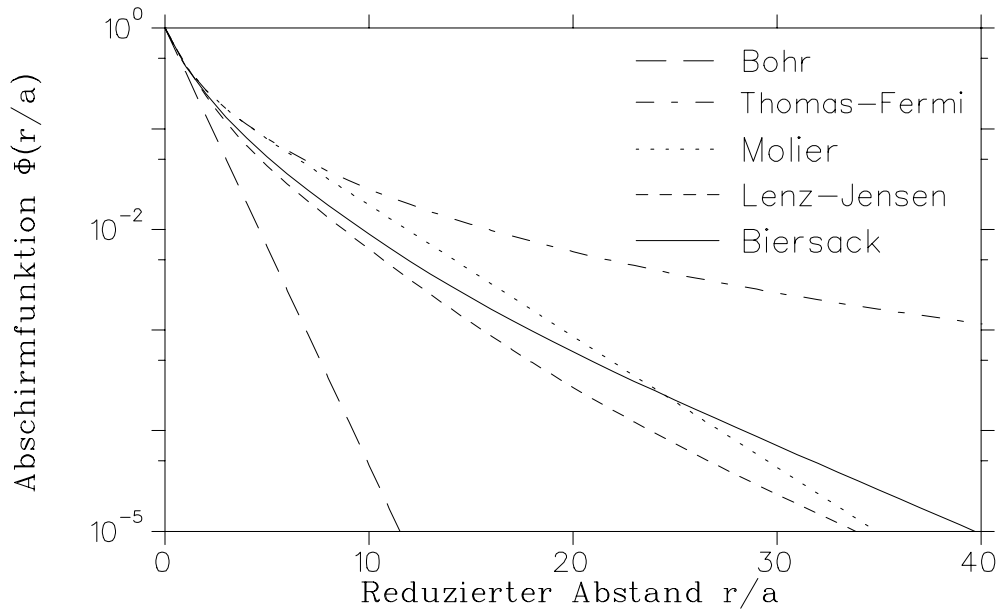


Abbildung 2.2: Abschirmfunktionen zur Beschreibung des Atompotentials.

Mit Hilfe dieser Atompotentiale und der Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltungssätze läßt sich das Streuproblem klassisch lösen (Rutherfordstreuung). Über den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} = \left(\frac{Z_p Z_t e^2}{4E_{CM}}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (2.12)$$

und den Energieübertrag T des Ions an das Rückstoßteilchen

$$T = \frac{4E_0 M_t M_p}{(M_t + M_p)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.13)$$

erhält man den **spezifischen nuklearen Energieverlust** S_n :

$$S_n(E_0) = \int_0^\infty T d\sigma = \frac{8\pi M_p M_t E_0}{(M_p + M_t)^2} \int_0^{b_{max}} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2}\right) b db \quad (2.14)$$

(b : Stoßparameter, b_{max} : maximaler Stoßparameter, für $b > b_{max}$ ist das Kernpotential total abgeschirmt.)

Für die Lösung dieses Integrales unter Verwendung des universellen Potentials aus Gl. 2.10 erhalten Biersack und Ziegler [Zie85] folgenden Ausdruck:

$$S_n(E_0) = \frac{8.462 Z_p Z_t S_n^{red}(E_{red})}{(M_p + M_t) (Z_p^{0.23} + Z_t^{0.23})} \frac{eV}{10^{15} \text{Atome/cm}^2} \quad (2.15)$$

Dabei stehen E_{red} für die reduzierte Energie und S_n^{red} für die reduzierte nukleare Abbremsung und sind folgendermaßen definiert:

$$E_{red} = \frac{32.53 M_t E_0}{Z_p Z_t (M_p + M_t) (Z_p^{0.23} + Z_t^{0.23})} \quad (2.16)$$

für $E_{red} \leq 30$:

$$S_n^{red}(E_{red}) = \frac{\ln(1 + 1.1383 E_{red})}{2(E_{red} + 0.01321 E_{red}^{0.21226} + 0.19593 E_{red}^{0.5})} \quad (2.17)$$

und für $E_{red} > 30$:

$$S_n^{red}(E_{red}) = \frac{\ln(E_{red})}{2 E_{red}} \quad (2.18)$$

2.2.2 Der elektronische Energieverlust S_e

Im Gegensatz zur nuklearen Abbremsung läßt sich der elektronische Energieverlust nicht klassisch berechnen. Er erfolgt im wesentlichen durch inelastische Stöße des Projektils mit dem Elektronengas im Festkörper. Dabei wechselt das Projektil mehrfach seinen Ladungszustand. Außerdem hängt die Abbremsung wesentlich von der elektronischen Struktur des Probenmaterials ab. So unterscheiden sich z.B. die Energieverluste in einer Graphit- und einer Diamantprobe. Man ist also auf analytische Näherungen angewiesen.

Bei hohen Energien ($v > 3v_f$, v_f :Fermi-Energie der Elektronen) berechneten Bethe [Bet32] und Bloch [Blo33] die elektronische Abbremsung als eine Wechselwirkung des Coulombpotentials mit einem harmonischen Oszillator. Sie erhielten für den **spez. elektronischen Energieverlust S_e**

$$S_e = 4\pi \frac{Z_p^2 Z_t e^4}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right) \quad (2.19)$$

$$I = 10,5[eV] \times Z_t: \text{mittleres Ionisationspotential}$$

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

Für niedrigere Energien ($v < v_0$, $v_0 = e^2/\hbar = 2,188 \cdot 10^6$ m/s: Bohrsche Geschwindigkeit des 1s-Elektrons im H-Atom) wird die Wechselwirkung des Projektils mit einem Elektronengas betrachtet. Lindhard und Scharff [Lin54] leiteten daraus folgende Näherung ab:

$$S_e = 4\pi \frac{Z_p^2 Z_t e^4}{m_e v^2} c_k \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right)^{3/2} \quad (2.20)$$

Dabei ist c_k ein freier Parameter, der nur vom Probenmaterial abhängt. Der elektronische Energieverlust steigt demnach für niedrige Energien proportional zur Projektilgeschwindigkeit, während er bei großen Geschwindigkeiten mit $1/v^2$ fällt.

Im Bereich mittlerer Energien kann keine einfache analytische Näherung gefunden werden. Deshalb schlugen Biersack und Ziegler ein harmonisches Mittel aus hoch- und niederenergetischer Abbremsung vor:

$$\frac{1}{S_e} = \frac{1}{S_{low}} + \frac{1}{S_{high}} \quad (2.21)$$

$$S_{low} = \zeta_1 E^{\zeta_2} + \zeta_3 E^{\zeta_4} \quad (2.22)$$

$$S_{high} = \frac{\zeta_5 \ln \left(\frac{\zeta_7}{E} + \zeta_8 E \right)}{E^{\zeta_6}} \quad (2.23)$$

Die Parameter $\zeta_1 - \zeta_8$ hängen nur vom Probenmaterial ab und werden ständig von Ziegler aktualisiert. Dennoch findet man je nach Projektil-Probe-Kombination und Projektilenergie Abweichungen von bis zu 10 %.

Der am leichtesten zu berechnende und am besten vermessene elektronische Energieverlust ist der von Protonen (S_H). Das Abbremsvermögen von schweren Ionen S_{Ion} kann bei gleicher Geschwindigkeit relativ zu einem bekannten S_H skaliert werden, insofern sich das Ion im Ladungsgleichgewicht befindet. Es gilt dann:

$$S_{Ion}(v) = S_H(v) q_{eff}^2(v) \quad (2.24)$$

q_{eff} wird dabei als *effektive Ladung* bezeichnet. Das Problem der Berechnung des spezifischen Energieverlustes von Ionen ist nun übertragen auf die Bestimmung von q_{eff} . Die effektive Ladung hat auch einen physikalischen Hintergrund. Bei schweren Ionen wird die Elektronenhülle nur teilweise abgestreift. Bohr [Boh41] machte die Annahme, daß das Ion alle Elektronen verliert, deren Umlaufgeschwindigkeit kleiner ist als die Projektilgeschwindigkeit. Die verbliebenen Elektronen schirmen den Kern je nach Stoßparameter b mehr oder weniger ab. Gemittelt über alle b leitete Northcliff [Nor60] für die effektive Ladung folgende Gleichung ab:

$$q_{eff} = Z_p \left(1 - \exp \left(- \frac{0.92 v_p}{Z_p^{2/3} v_0} \right) \right) \quad (2.25)$$

Ziegler, Biersack und Littmark extrahierten aus umfangreichen numerischen und experimentellen Daten folgende Parametrisierung:

$$q_{eff} = Z_p \left[\tilde{q} + (1 - \tilde{q}) \frac{v_0^2}{2v_f^2} \ln \left(1 + \left(\frac{2\Lambda v_f}{a_0 v_0} \right)^2 \right) \right] \quad (2.26)$$

mit der Abschirmlänge Λ , die die Ausdehnung der Ladungsverteilung beschreibt:

$$\Lambda = \frac{2a_0(1 - \tilde{q})^{2/3}}{Z_p^{1/3} \left(1 - \frac{1-\tilde{q}}{7} \right)}$$

und der Ionisierung $\tilde{q} = 1 - n/Z_p$ (n : Anzahl der gebundenen Elektronen):

$$\tilde{q} = 1 - \exp \left(\sum_{i=1}^4 \xi_i \left(\frac{\bar{v}}{v_0 Z_p^{2/3}} \right)^{\zeta_i} \right)$$

$$\begin{array}{cccc} \xi_1 = 0.803 & \xi_2 = 1.3167 & \xi_3 = 0.38157 & \xi_4 = 0.008983 \\ \zeta_1 = 0.3 & \zeta_2 = 0.6 & \zeta_3 = 1 & \zeta_4 = 2 \end{array}$$

\bar{v} ist die Relativgeschwindigkeit des Projektils zu der Fermi-Geschwindigkeit der Elektronen im Festkörper $\langle |v_0 - v_f| \rangle$.

Abb. 2.3 zeigt abschließend den spezifischen Energieverlust (skaliert mit $1/Z_p^2$) verschiedener Ionen in Aluminium in Abhängigkeit von ihrer Energie. Für die ERDA-Messungen ist für eine gute Tiefenaufösung der Bereich maximalen spezifischen Energieverlustes relevant, d.h. für Projektil mit $Z = 20 - 60$ ca. $1 - 3$ MeV/Nukleon.

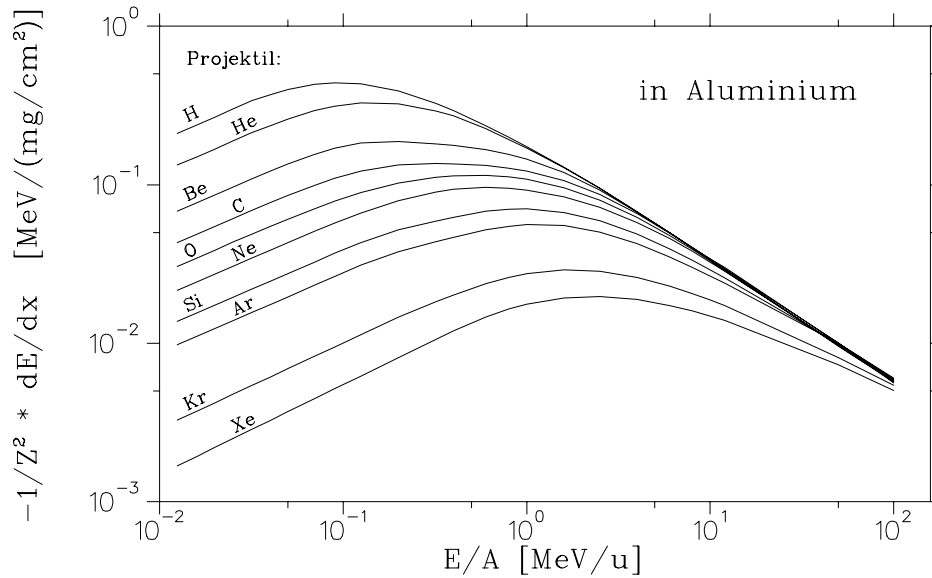


Abbildung 2.3: Spezifische Energieverlust verschiedener Ionen in Aluminium nach [Nor70]

2.2.3 Grenzen der Anwendbarkeit

Das hier aufgeführte Verfahren zur Berechnung des spezifischen Energieverlustes beliebiger Projektile in verschiedenen Materialien liefert meist sehr gute Werte mit Abweichungen unter 5 %. Dennoch muß man die Ergebnisse stets als mehr oder weniger gute *Erwartungswerte* betrachten. Mängel zeigen diese Verfahren z.B. bei kovalent gebundenen Materialien. Hier können die Potentiale nicht mehr als kugelsymmetrisch betrachtet werden und auch die Elektronen sind längs der Bindungsachse konzentriert und nicht homogen um den Kern verteilt. Bei Kristallen trifft die Annahme, daß die Streuzentren statistisch verteilt sind, nicht mehr zu. Effekte wie 'blocking' und 'channeling' können nicht berücksichtigt werden.

Auch bei sehr dünnen Schichten treten merkliche Abweichungen auf. Dies hat seine Ursache zum einen in der Tatsache, daß dünne Schichten teilweise andere physikalische Eigenschaften haben können als Festkörper (z.B. eine veränderte elektronische Struktur, geringere Dichte, etc.), zum anderen benötigt das Projektil eine gewisse Strecke x_{eq} , bis sich die effektive Ladung q_{eff} bzw. das Ladungsgleichgewicht einstellt. Die in dieser Zeit zurückgelegte Strecke hängt dabei von der Energie des Projektils ab und beträgt z.B. für 2 MeV/Nukleon schnelle Kr-Ionen in C nach einer groben Abschätzung [Bet83]:

$$x_{eq} [\mu\text{g}/\text{cm}^2] = 8 \cdot E [\text{MeV}/\text{Nukl.}] = 16 \mu\text{g}/\text{cm}^2 \hat{=} 71 \text{ nm} \quad (2.27)$$

Entlang dieses Weges treten Abweichungen im Energieverlust auf. Betrachtet man die Tatsache, daß die Projektile bei unseren ERDA-Messungen unter einem kleinen Eintrittswinkel ($\alpha \approx 6^\circ$) in die Probe eindringen, so entspricht x_{eq} einer Schichttiefe von ca. 7 nm. In dem in Kap. 4 besprochenen Beispiel ist die erste Schicht der Probe 10,5 nm dick und sie wurde mit einer Tiefenauflösung von 1,3 nm gemessen. Die ERDA-Methode am Q3D ist also auf diese Abweichungen des Energieverlustes im Nichtgleichgewichtszustand sensitiv. Dies war unter anderem ein wichtiger Grund, warum wir uns mit der Untersuchung der Nichtgleichgewichtseffekte in diesem Bereich beschäftigt haben (s. Kap. 5).