

Institut für Reaktorwerkstoffe
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
des Landes Nordrhein-Westfalen

Fokussierende 110-Stoßfolgen in flächen-
zentrierten Kristallen bei kleinen Winkeln

von

Chr. Lehmann und G. Leibfried

JÜl - 4 - RW

Januar 1961

Sonderdruck

aus Zeitschrift für Physik, Springer-Verlag, Berlin · Göttingen · Heidelberg



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 4

Institut für Reaktorwerkstoffe Jül – 4 – RW

Dok.: CRYSTAL LATTICES-SHOCK WAVE EFFECTS * DK 548.0 : 531.66

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Aus dem Lehrstuhl für Reaktorwerkstoffe der T. H. Aachen
und dem Institut für Reaktorwerkstoffe der Kernforschungsanlage Jülich

Fokussierende 110-Stoßfolgen in flächenzentrierten Kristallen bei kleinen Winkeln

Von
CHR. LEHMANN und G. LEIBFRIED

Mit 7 Figuren im Text
(Eingegangen am 23. Januar 1961)

Focusing collisions along 110 directions in f. c. c. lattices are investigated. For small angular deviations from this direction an exact treatment of subsequent collisions is possible. The results are compared with machine calculations by VINEYARD and collaborators⁴. The agreement is practically complete. The influence of neighbouring atomic chains can be neglected.

1. Einleitung

In der letzten Zeit sind eingehende theoretische und experimentelle Untersuchungen von Stoßfolgen entlang dicht gepackter Gittergeraden in flächenzentrierten Kristallen durchgeführt worden¹⁻⁵. Als anschau-

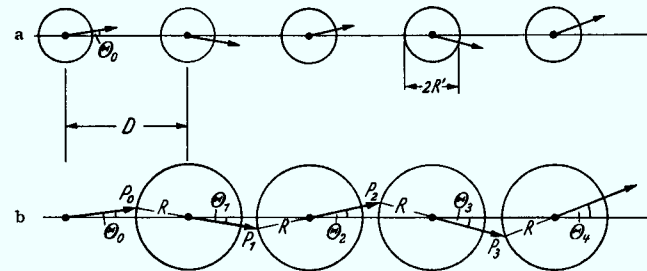


Fig. 1. a Stoßfolge entlang einer Reihe äquidistanter „harter Kugeln“. b Vereinfachte Darstellung mit dem Stoß- oder Harten-Kugel-Radius R zur Konstruktion der Stoßwinkel

lichen Startpunkt zur Diskussion solcher Folgen kann man einen Stoß entlang einer Reihe von Billardkugeln vom Radius R' betrachten (Fig. 1a).

¹ SILSBEE, R. H.: J. Appl. Phys. **28**, 1246 (1957).

² LEIBFRIED, G.: J. Appl. Phys. **30**, 1388 (1959); **31**, 177 (1960).

³ THOMPSON, M. W.: Phil. Mag. **4**, 139 (1959). — THOMPSON, M. W., and R. S. NELSON: Atomic Energy Res. Establishment, Harwell, Report AERE-R 3320 (April 1960). — Proc. Roy. Soc. Lond. A 1961 (im Druck).

⁴ VINEYARD, G. H., and J. B. GIBSON, A. N. GOLAND, M. MILGRAM: J. Appl. Phys. **30**, 1322 (1959). — Brookhaven National Laboratory Report 4871. — Phys. Rev. **120**, 1229 (1960).

⁵ Eine zusammenfassende Darstellung findet man in den Vorlesungen von G. H. VINEYARD, M. W. THOMPSON und G. LEIBFRIED an der Sommerschule über „Radiation Damage“ im Sept. 1960 im „Centro di Studi Nucleare di Ispra“ [Nuovo Cimento (im Druck)].

Einen Stoß zwischen zwei Kugeln vom Radius R' beschreibt man am einfachsten als Stoß zwischen einem *Punkt* und einer Kugel vom *doppelten* Radius $R = 2R'$. Da beim Stoß harter Kugeln nur Impuls in radialer Richtung übertragen wird, so erhält man aus dem Startwinkel Θ_0 der ersten Kugel in der Reihe den Startwinkel Θ_1 der zweiten Kugel durch Verbinden des Stoßpunktes P_0 mit dem Mittelpunkt der zweiten Kugel (Fig. 1 b).

Wir werden nur kleine Winkel Θ diskutieren. Dann ist offenbar das Verhältnis von Θ_1 zu Θ_0 durch

$$A = \frac{\Theta_1}{\Theta_0} = \frac{D-R}{R} = \frac{D}{R} - 1 \quad (1)$$

gegeben.

Da die gleiche Überlegung für jeden folgenden Stoß durchgeführt werden kann, so erhält man

$$\Theta_n = A^n \Theta_0 \quad (2)$$

für den Winkel des Atoms Nummer n . Die Größe A , der „Fokussierungsparameter“, entscheidet das Verhalten der Stoßfolge. Ist $A > 1$, so wächst der Winkel ständig mit n an. Ist $A < 1$, so wird der Winkel monoton kleiner und man hat schließlich eine Folge von Zentralstößen ohne Winkeländerung. Dieses Verhalten nennt man auch Fokussierung (des Winkels), während man im Falle $A > 1$ von Defokussierung spricht. Die Fokussierungsbedingung

$$A < 1 \quad (3a)$$

kann auch durch

$$R > \frac{D}{2} \quad (3b)$$

ersetzt werden. Ist (3 b) erfüllt, so erhält man auch bei endlichem (kleinen) Startwinkel Θ_0 schließlich eine Folge von Zentralstößen, während andernfalls der Winkel solange wächst, bis kein Stoß mehr stattfindet und die Folge unterbrochen wird.

Diese Überlegungen kann man auch auf wirkliche Stoßfolgen in Kristallen anwenden. Wir werden speziell Stöße entlang der dichtestgepackten 110-Richtungen in flächenzentrierten Gittern untersuchen (Fig. 2). Das Wechselwirkungspotential $\Phi(r)$ zwischen den Atomen sei rein abstoßend*. Ist $\Phi(r)$ ein schnell (z.B. exponentiell) abfallendes Potential, so kann man für den Stoß eine „Harte-Kugel-Näherung“ (HKN) verwenden, bei der R durch den Minimalabstand bei zentralem

* Die für den Fokussierungseffekt wesentlichen Energien sind so groß, daß die anziehenden Anteile des Potentials vernachlässigt werden dürfen. Ferner kann man sich leicht klarmachen, daß quantenmechanische Korrekturen vernachlässigbar sind, daß also die klassische Stoßtheorie ausreicht.

Stoß bestimmt ist^{1-4,6}. Ist E_0 die Energie des Atoms Nummer 0, so ist das korrespondierende R_0 durch

$$\Phi(R_0) = \frac{E_0}{2}; \quad R_0 = R(E_0) \quad (4)$$

gegeben.

Betrachtet man nur kleine Winkel und fokussierende Stöße, so wird die Energie praktisch vollständig übertragen und man kann die Energieänderung entlang der Kette vernachlässigen. Das entspricht dann genau dem Billardball-Modell mit konstantem $R = R(E_0)$. Der Fokussierungsparameter ist damit eine Funktion der Stoßenergie $E_0 = E$

$$A_{HK} = \frac{D}{R(E)} - 1. \quad (1a)$$

Eine solche einfache Stoßfolge entlang einer Reihe ohne Berücksichtigung von Nachbarn ist sicher am besten realisiert entlang den dichtesten Geraden, da deren Nachbargeraden den größten Abstand besitzen. Für ein „Born Mayer Potential“ der Form

$$\Phi(r) = A e^{-\frac{r}{a}}; \quad A = 22500 \text{ eV}, \quad a = \frac{D}{13} \quad (5)$$

($D \cong 2,5 \text{ \AA}$ ist der Abstand benachbarter Atome im Cu-Gitter),

welches für Kupfer häufig verwendet wird, ist $A_{HK}(E)$ in Fig. 6 dargestellt. Es stellt sich heraus, daß die Übereinstimmung der HKN mit den auf der Maschine gerechneten Werten⁴ nicht sehr gut ist. Die Fokussierungs-Grenzenergie E_F , definiert durch $A(E_F) = 1$ liegt z.B. in der HKN mit dem Potential (5) bei 70 eV, nach Ausweis der Maschinenrechnung aber bei 30 eV. Das Ziel dieser Arbeit ist es, die Abweichungen von der HKN zu diskutieren und quantitativ zu berechnen.

Noch eine andere Folge der HKN sei hier bemerkt². Bei Zentralstößen bleibt das stoßende Atom am Stoßpunkt liegen. Die Endlagen der Atome in der 110-Richtung der Fig. 2 liegen im Fokussierungsbereich vor der durch ein Kreuz gekennzeichneten Mittellage. Die Mittellage ist gleichzeitig eine Symmetrielage. Bleibt ein Atom vor dieser Lage liegen, so versuchen die Nachbarreihen, es in seine alte Lage zurück-

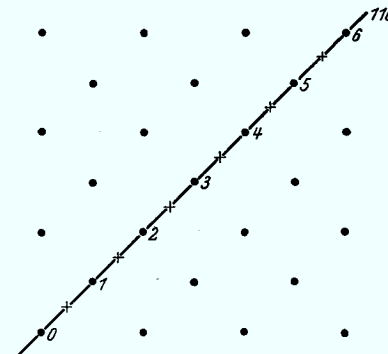


Fig. 2. 100-Ebene eines flächenzentrierten Gitters. Die Stoßfolge soll sich entlang der bezeichneten 110-Geraden fortpflanzen. Die Kreuze bezeichnen die Mitten zwischen den einzelnen Ruhelagen

⁶ HOLMES, D. K., G. LEIBFRIED and O. S. OEN: Oak Ridge National Laboratory, Ann. Rep. 1959.

zutreiben. Anders im defokussierenden Bereich, wo die Nachbarreihen das Atom in die benachbarte Lage treiben wollen. Benutzt man diese Endlage als Kriterium, so würde also bei defokussierenden Stößen schließlich ein Zwischengitteratom entlang 110 transportiert, während eine Leerstelle in 0 zurückbleibt. Das stationäre Zwischengitteratom bildet sich dann in der Umgebung der 110-Reihe aus, z.B. da, wo der Winkel so groß wird, daß der Stoß unterbrochen wird. Anders im Fall von fokussierenden Stößen, bei denen nur Energie aber keine Masse transportiert wird und auch keine Leerstelle zurückbleibt. Dieses Kriterium für den Massentransport ist sehr qualitativ und grob, wird aber in der HKN nahegelegt.

2. Ergebnisse der klassischen Streutheorie

Der nahezu zentrale Stoß kann bei beliebigem Potential ohne große Mühe streng behandelt werden. Da die Potentiale sehr schnell mit der Entfernung abfallen und die Ruheabstände D der Stoßpartner so groß sind, daß $\Phi(D)$ gegen $\Phi(R)$ vernachlässigt werden kann, so genügt es, die asymptotischen Verhältnisse für „große“ Entfernungen zu diskutieren.

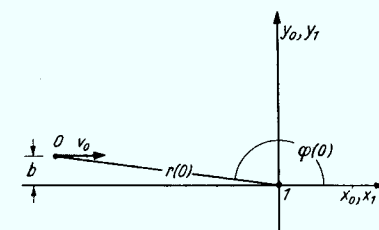


Fig. 3. Zur Berechnung der Bahn in der klassischen Stoßtheorie

Der Stoß werde in der üblichen Weise (Fig. 3) beschrieben. Das Teilchen 0 mit Geschwindigkeit v_0 und Energie E_0 stößt auf ein im Ursprung ruhendes Teilchen 1. Der „Stoßparameter“ sei b . Gesucht sind die Bahnen $x_0(t)$, $y_0(t)$, $x_1(t)$, $y_1(t)$ der beiden Teilchen. Das mechanische Problem ist in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten $\mathfrak{R}$, $\mathfrak{r}$ separierbar. Wir beschränken uns der Einfachheit halber auf gleiche Massen $m_0 = m_1 = m$. Dann ist

$$\left. \begin{aligned} \mathfrak{R} &= \frac{1}{2} (\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_1) & \mathbf{r}_0 &= \mathfrak{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_1 &= \mathfrak{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

und die Bewegungsgleichungen werden

$$M \ddot{\mathfrak{R}} = 0, \quad (7a)$$

$$\mu \ddot{\mathbf{r}} = - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} \quad (7b)$$

$$\text{mit } M = m_0 + m_1 = 2m \quad \text{und} \quad \mu = \frac{m_0 m_1}{M} = \frac{m}{2}.$$

Die Lösung von (7a) ist

$$\mathfrak{R}(t) = \mathfrak{R}(0) + \dot{\mathfrak{R}}(0) t \quad (8)$$

mit den Anfangswerten $\mathfrak{R}(0)$ und $\dot{\mathfrak{R}}(0)$ zur Zeit $t=0$. Die Gleichung für die Relativkoordinaten zerlegt man zweckmäßig nach Polarkoordinaten r, φ ($x=r \cos \varphi, y=r \sin \varphi$) und benutzt Energie- und Drehimpulserhaltung:

$$\frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \Phi(r) = E_{\text{rel}}, \quad (9a)$$

$$\mu r^2 \dot{\varphi} = M_{\text{rel}} = \mu v_0 b. \quad (9b)$$

Hier ist M_{rel} der Drehimpuls und E_{rel} die Energie in Relativkoordinaten (Schwerpunktssystem). Mit unseren Anfangsbedingungen ist

$$E_{\text{rel}} = \frac{\mu}{2} v_0^2 + \Phi(r(0)) \cong \frac{\mu}{2} v_0^2 = \frac{E_0}{2} = \Phi(R). \quad (10)$$

Die potentielle Energie $\Phi(r(0))$ im Anfangszustand mit Abstand $r(0)$ kann aus den oben dargelegten Gründen immer vernachlässigt werden. Aus den Gln. (9) erhält man

$$\dot{r}(t) = \pm v_0 \left\{ \frac{E_{\text{rel}} - \Phi(r)}{(\mu/2) v_0^2} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \cong \pm v_0 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} \pm \frac{b}{r^2 \left\{ \frac{E_{\text{rel}} - \Phi(r)}{(\mu/2) v_0^2} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}}} \cong \pm \frac{b}{r^2 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}}}. \quad (12)$$

Das negative Zeichen der Wurzel ist zu nehmen, bevor $r(t)$ sein Minimum $R_s(b)$, definiert durch $\dot{r}=0$, erreicht hat. Im Minimum wechselt die Wurzel das Vorzeichen.

Die Integration von (12) liefert φ als Funktion von r

$$\varphi(r) = \varphi(0) - \left\{ \int_{R_s}^{r(0)} + \int_{R_s}^r \frac{b dr}{r^2 \left\{ \frac{E_{\text{rel}} - \Phi(r)}{(\mu/2) v_0^2} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}}} \right\}. \quad (12a)$$

Diese Form setzt voraus, daß $r(t)$ das Minimum bereits durchlaufen hat. Wir wollen den Ausdruck (12a) für kleine Winkel (kleine b) und asymptotisch für große r (etwa $r(t)$ wieder größer als der Anfangsabstand $r(0)$) diskutieren. Dann ist

$$\varphi(r) \cong \varphi(0) - 2b \int_{R_s}^{r(0)} \frac{dr}{r^2 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} \right\}^{\frac{1}{2}}} + b \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r(0)} \right), \quad (12b)$$

$$\varphi(r) \cong \pi - \frac{2b}{R_{\text{eff}}} + \frac{b}{r}. \quad (12c)$$

Beim Übergang von (12a) nach (12b) wurde vom zweiten Integral in (12a) ein Integral von $r(0)$ bis r abgespalten, in dessen Integrand die Wurzel gleich Eins gesetzt werden kann. Ferner ist überall b^2 vernach-

lässt $(R_s(b) \cong R)$, ebenso $\Phi(r(0))$. Beim Übergang nach (12c) ist $\varphi(0)$ durch $\pi - b/r(0)$ ersetzt worden (Fig. 3). Der effektive Radius R_{eff} ist definiert durch

$$\frac{1}{R_{\text{eff}}} = \int_R^{r(0)} \frac{dr}{r^2 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} \right\}^{\frac{1}{2}}} \cong \int_R^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} \right\}^{\frac{1}{2}}}. \quad (13)$$

Für ein Hartes-Kugel-Potential würde R_{eff} mit R übereinstimmen. Tatsächlich ist R_{eff} nach (13) kleiner als R . Die exakte Winkeländerung beim Stoß wird also nicht durch den Harten-Kugel-Radius R , sondern durch den effektiven Radius R_{eff} bestimmt. Im Vergleich mit der HKN ist das ein die Fokussierung vermindender Effekt (A wird größer).

Diese Abweichung von der HKN liefert dann einen Fokussierungsparameter

$$A_{\text{eff}} = \frac{D}{R_{\text{eff}}} - 1. \quad (14)$$

Dieses A_{eff} stimmt schon wesentlich besser mit den Maschinenergebnissen überein, allerdings liegt jetzt $A_{\text{eff}}(E)$ etwas zu hoch, die Fokussierungsenergie zu niedrig (etwa 25 eV, vgl. Fig. 6). Der Grund für diese Abweichung liegt darin, daß nicht nur der Ablenkwinkel für die Stoßfolge eine Rolle spielt, sondern auch die genaue Bahn der angestoßenen Teilchen. Das Teilchen 0 wirkt schon vor Erreichen des Minimalabstandes R auf Teilchen 1 ein. Dadurch wird Teilchen 1 etwas in Richtung auf Teilchen 2 verschoben, wodurch sich, grob gesprochen, der Abstand D für den Stoß zwischen 1 und 2 auf $D - d$ verkürzt. Dies führt dann zu

$$A = \frac{D - d}{R_{\text{eff}}} - 1. \quad (15)$$

Während (14) für die jeweils ersten Stöße gilt, ist (15) für alle späteren Stöße einer Serie zu verwenden.

Die Berechnung von d ist ebenfalls einfach. Die Gl. (11) wird integriert

$$\int_{R_s}^{r_0} + \int_{R_s}^r \frac{dr}{\left\{ \frac{E_{\text{rel}} - \Phi(r)}{(\mu/2) v_0^2} - \frac{b^2}{r^2} \right\}^{\frac{1}{2}}} = v_0 t. \quad (16)$$

Asymptotische Entwicklung und Vernachlässigung von b^2 ergibt

$$r \cong r(0) - 2 \int_R^{r(0)} \frac{dr}{\left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} \right\}^{\frac{1}{2}}} + v_0 t. \quad (16a)$$

Daraus erhält man

$$x = r \cos \varphi \cong -r; \quad y = r \sin \varphi \cong -b + \frac{2br}{R_{\text{eff}}} \quad (17)$$

und unter Benutzung von (6) und (8)

$$\left. \begin{aligned} x_0(t) &\cong \frac{1}{2}(-r(0) + v_1 t - r) & x_1(t) &\cong \frac{1}{2}(-r(0) + v_0 t + r), \\ y_0(t) &\cong \frac{b r}{R_{\text{eff}}} & y_1(t) &\cong b \left(1 - \frac{r}{R_{\text{eff}}}\right). \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Aus (18) kann man zunächst die Ruhelage des stoßenden Teilchens 0 nach einem Zentralstoß ablesen

$$\left. \begin{aligned} x_0(\infty) &= r(0) - \int_R^{r(0)} \frac{dr}{\left\{1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)}\right\}^{\frac{1}{2}}} \cong -R + \int_R^\infty dr \left[\frac{1}{\left\{1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)}\right\}^{\frac{1}{2}}} - 1 \right], \\ x_0(\infty) &= -R + \Delta. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Die Ruhelage ist nicht wie in der HKN bei $-R$, sondern um die Strecke Δ nach rechts verschoben. Man kann sich auch noch leicht davon überzeugen, daß beim kleinsten Abstand R ($x_1 - x_0 = R$) das Atom 0 bei $x_0 = -R + \Delta/2$ liegt.

Gl. (18) liefert auch die asymptotische Gerade, auf der Teilchen 1 sich nach dem Stoß bewegt. Der Winkel dieser Bewegung gegen die Einfallsrichtung ist b/R_{eff} (Fig. 4). Diese Gerade trifft aber nicht den Startpunkt des Teilchens 1 (die Ruhelage im Gitter), sondern ihr Schnittpunkt mit der x_1 -Achse ist um δ nach rechts verschoben. Diese Strecke δ ergibt sich nach (18) zu

$$\left. \begin{aligned} \delta &= x_0(\infty) + R_{\text{eff}} \\ &= -R + \Delta + R_{\text{eff}}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Nach Fig. 5 ergibt sich als Fokussierungsparameter $\Theta_1|\Theta_0$ der Wert Δ_{eff} nach (14), während für alle anderen Stöße eine Verkürzung der Strecke D um d in Rechnung zu setzen ist. Dabei ist nach Fig. 5

$$d = \delta \frac{\frac{b}{R_{\text{eff}}}}{\frac{b}{R_{\text{eff}}} - \frac{b}{D}} = \frac{\delta}{1 - \frac{R_{\text{eff}}}{D}}. \quad (21)$$

Das ergibt schließlich den Fokussierungsparameter Δ nach (15).

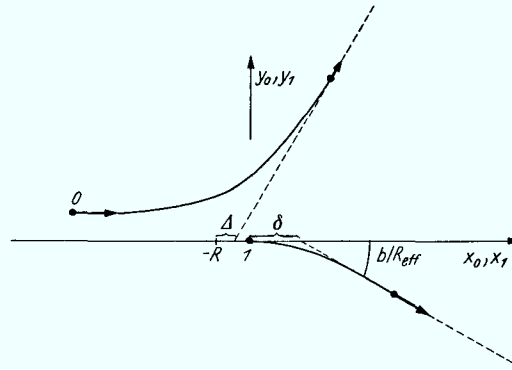


Fig. 4. Die asymptotische Bewegung der Atome 0 und 1 nach dem Stoß

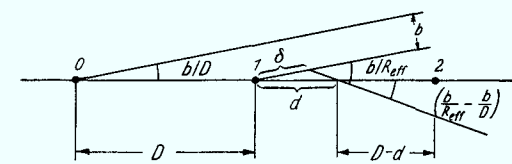


Fig. 5. Zur Berechnung der Winkeländerung und der scheinbaren Verkürzung von D

3. Vergleich mit den Ergebnissen von Vineyard und Mitarbeitern

VINEYARD u. Mitarb.⁴ haben Stoßfolgen entlang 110-Geraden in einem räumlichen Modell mit einer Rechenmaschine vom Typ IBM 704 untersucht. Als Potential wurde (5) verwendet. Sie haben ferner solche Ereignisse in einem Film dargestellt. Schon in diesem Film kann man sehen, daß bei Fokussierungsfolgen entlang 110 die Umgebung praktisch unbeeinflusst bleibt (allerdings sieht man die nächst benachbarten 110-Reihen im Film nicht). Dann aber müssen unsere Ergebnisse, bei denen nur die Atome *einer* Reihe berücksichtigt sind, direkt auf die von VINEYARD untersuchten Stoßfolgen anwendbar sein.

Die benötigten Größen R , R_{eff} und Δ sind mit dem Potential (5) leicht zu berechnen:

$$R = a \ln (2A/E), \quad (22)$$

$$\Delta = 2 a \ln 2, \quad (23)$$

$$\frac{R}{R_{\text{eff}}} = R \int_R^\infty \frac{dr}{r^2 \left\{ 1 - \frac{\Phi(r)}{\Phi(R)} \right\}^{\frac{1}{2}}} = \int_0^\infty \frac{d\eta}{(1+\eta)^2 \{1 - e^{-\eta R/a}\}^{\frac{1}{2}}}, \quad (24a)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{R}{R_{\text{eff}}} &\sim 1 + \frac{a}{R} 2 \ln 2 - \frac{a^2}{R^2} \left(\frac{\pi^2}{3} - 4 (\ln 2)^2 \right) + \dots \\ &= 1 + 1,39 \frac{a}{R} - 1,36 \frac{a^2}{R^2} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (24b)$$

Die Darstellung (24b) ist die asymptotische Entwicklung von (24a). Die asymptotische Entwicklung ist im Anhang abgeleitet. Benutzt man diese asymptotische Entwicklung, so kann man auch die drei verschiedenen Fokussierungsparameter nach a/R entwickeln mit dem Resultat:

$$\Delta_{\text{HK}} = \frac{D}{R} - 1, \quad (1a)$$

$$\Delta_{\text{eff}} \cong \Delta_{\text{HK}} + \frac{D}{R} \left(1,39 \frac{a}{R} - 1,36 \frac{a^2}{R^2} \right), \quad (14a)$$

$$\Delta \cong \Delta_{\text{eff}} - \frac{a^2}{R^2} \frac{3,29}{1 - \frac{R}{D}}. \quad (15a)$$

Die Entwicklung ist nur bis zu quadratischen Gliedern in a/R durchgeführt. Man erkennt hier auch deutlich die Reihenfolge $\Delta_{\text{eff}} > \Delta > \Delta_{\text{HK}}$. Diese Entwicklung ist aber nicht zur Berechnung der Δ -Kurve benutzt worden.

In Fig. 6 sind die Ergebnisse von VINEYARD für die Verhältnisse zweier aufeinanderfolgender Winkel in Abhängigkeit von der Stoßenergie dargestellt (nach Ref. 5). Dabei kommen hauptsächlich Stöße in einer

Folge vor, für die (15) zutreffen sollte. Aber auch Anfangsstöße nach (14) sind (wahrscheinlich nur vereinzelt) verwendet worden. Bei der Auswahl sind nur kleine Winkel berücksichtigt. Ferner enthält Fig. 6 die Parameter Λ_{HK} nach (1a), Λ_{eff} nach (14) und Λ nach (15 und 21).

Während die HKN schlecht zu VINEYARD's Ergebnissen paßt, liefert Λ eine ganz ausgezeichnete Übereinstimmung. Es sollte bemerkt werden, daß Λ die exakte Lösung im Grenzfall kleiner Winkel ist. Bei anwachsendem Winkel wird Θ_2/Θ_1 vergrößert, was man schon am Modell harter Kugeln deutlich sieht. Daher liegt auch die Λ -Kurve am unteren Rand

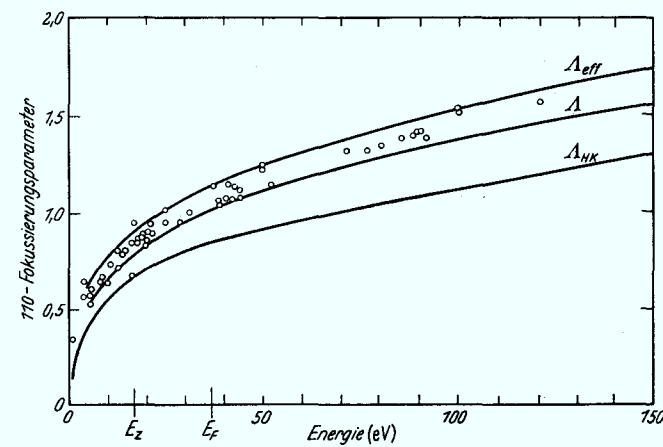


Fig. 6. Vergleich mit den Ergebnissen von VINEYARD⁴. $\circ \circ \circ$ „Meßwerte“ nach VINEYARD; Λ_{HK} Fokussierungsparameter in der Näherung harter Kugeln; Λ_{eff} Fokussierungsparameter für die Anfangsstöße; Λ Fokussierungsparameter für die Stöße innerhalb einer Folge

der „Meßpunkte“, die ja nicht ganz infinitesimalen Winkeln entsprechen. Das tritt vor allem bei hohen Energien auf, wo naturgemäß immer etwas größere Winkel untersucht werden. Diese gute Übereinstimmung zeigt auch, daß der jedenfalls fokussierende Effekt der Nachbargeraden vernachlässigt werden kann.

Die neue Endlage des stoßenden Atoms (Verschiebung um Λ gegen die Endlage der HKN) erfordert auch eine neue Entscheidung darüber, ob der Stoß nur Energie oder auch Masse transportiert. Legt man wie in der Einleitung die Endlage als Kriterium zugrunde, so kann man nun eine Energie E_z durch

$$R(E_z) - \Lambda = \frac{D}{2} \quad (25)$$

definieren, bei der die Endlage gerade in der Mitte liegt. Unterhalb E_z hat man nur Energietransport, oberhalb auch Massetransport. E_z ist etwa 17 eV (Fig. 6) und kleiner als $E_F \cong 35$ eV. In der HKN fallen E_z und E_F zusammen. Auch dieser Tatbestand paßt gut zu den Ergebnissen von VINEYARD.

Für $r(t)$ erhält man aus Gl. (16)

$$r(t) = R + v_0(t - t_s) + 2a \ln 2 \left(1 + e^{-\frac{v_0}{a}(t-t_s)} \right). \quad (26)$$

Dabei ist t_s die „Stoßzeit“, bei der $r(t_s) = R$ ist:

$$v_0 t_s = 2a \ln 2 - r(0) - R. \quad (27)$$

Fig. 7 enthält $x_0(t)$ und $x_1(t)$ nach VINEYARD für eine Energie von $E_0 = 100$ eV und Zentralstoß ($\Theta_0 = 0$). Als Anfangsbedingung haben wir

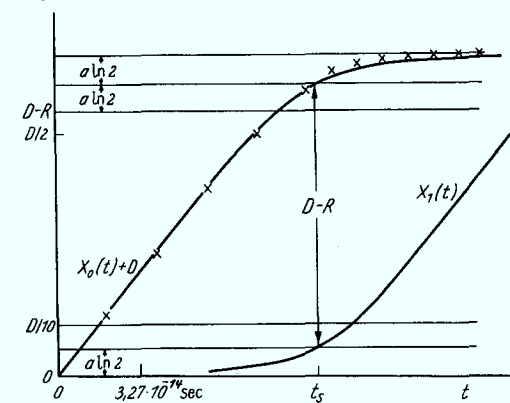


Fig. 7. Die Bewegung der Atome 0 und 1 bei zentralem Stoß. Aufgetragen ist $x_0(t) + D$ und $x_1(t)$. — Nach VINEYARD; $\times \times \times$ nach (26), (27)

$x_0(0) = -r(0) = -D$ und $x_1(0) = 0$. Die eingezeichneten Punkte sind dem nach (6), (7), (12a) und (26) für Zentralstoß berechneten $x_0(t)$ entnommen.

Die Übereinstimmung ist gut. Nach der HKN sollte die Endlage in Fig. 7 des Teilchens Nummer 0 bei $D - R$ sein, in der korrigierten Theorie dagegen bei $D - R + 2a \ln 2$. Man sieht, daß diese berechneten wahren Endlagen auch erreicht werden.

Aus der vorangehenden Diskussion ist ersichtlich, daß man die Fokussierungsstöße in 110-Richtung bei kleinen Winkeln praktisch exakt in einfacher Weise berechnen kann. Der Einfluß benachbarter Geraden ist zu vernachlässigen, während er bei Stoßfolgen in anderen kristallographischen Richtungen entscheidend ist. Der Einfluß benachbarter Geraden soll in einer späteren Arbeit untersucht werden.

Den Herren M.W. THOMPSON und G.H. VINEYARD danken wir für zahlreiche Diskussionen im Grand Palace Hotel zu Varese, sowie für die Überlassung noch nicht veröffentlichter Ergebnisse.

Anhang

Asymptotische Entwicklung des Integrals

$$I(\alpha) = \frac{R}{R_{\text{eff}}} = \int_0^\infty \frac{d\eta}{(1+\eta)^2 (1 - e^{-\alpha\eta})^{\frac{1}{2}}}; \quad \alpha = \frac{R}{a} \gg 1. \quad (\text{A.1})$$

Man entwickelt nach $e^{-\alpha\eta}$ und erhält

$$I(\alpha) \sim \int_0^\infty \frac{d\eta}{(1+\eta)^2} \sum_{\mu=0}^\infty A_\mu e^{-\mu\alpha\eta}; \quad A_\mu = \frac{(2\mu)!}{2^{2\mu}(\mu!)^2} \quad (\text{A.2})$$

oder

$$I(\alpha) \sim \sum_{\mu=0}^{\infty} A_{\mu} e^{\mu\alpha} \int_1^{\infty} \frac{e^{-\mu\alpha\eta}}{\eta^2} d\eta. \quad (\text{A.3})$$

Partielle Integration ergibt

$$\int_1^{\infty} \frac{d\eta}{\eta^2} e^{-\mu\alpha\eta} = e^{-\mu\alpha} - \mu\alpha \int_1^{\infty} \frac{e^{-\mu\alpha\eta}}{\eta} d\eta \quad \text{für } \mu \neq 0. \quad (\text{A.4})$$

Die asymptotische Entwicklung des Integrals in (A.4) erhält man durch fortgesetzte partielle Integration*.

$$\int_1^{\infty} \frac{e^{-\mu\alpha\eta}}{\eta} d\eta \sim \frac{e^{-\mu\alpha}}{\mu\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n n!}{(\mu\alpha)^n} \quad \text{für } \mu \neq 0. \quad (\text{A.5})$$

Damit wird

$$\int_1^{\infty} \frac{d\eta}{\eta^2} e^{-\mu\alpha\eta} = -e^{-\mu\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n n!}{(\mu\alpha)^n} \quad \text{für } \mu \neq 0. \quad (\text{A.4a})$$

Schließlich erhalten wir ($A_0 = 1!$)

$$\left. \begin{aligned} I(\alpha) &\sim 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n n!}{\alpha^n} \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^n}, \\ I(\alpha) &\sim 1 + \frac{1}{\alpha} \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu} - \frac{2}{\alpha^2} \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^2} + \frac{6}{\alpha^3} \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^3} - + \dots \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.6})$$

Die einzelnen Summen können mit Hilfe der Darstellung

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x}} - 1 = \sum_{\mu=1}^{\infty} A_{\mu} x^{\mu} \quad (\text{A.7})$$

berechnet werden**:

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu} = \int_0^1 \frac{dx}{x} f(x) = 2 \ln 2 \cong 1,39, \quad (\text{A.7a})$$

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^2} &= \int_0^1 \frac{dx}{x} \int_0^x \frac{dx'}{x'} f(x') = 2 \left\{ L_2(1) - L_2\left(\frac{1}{2}\right) \right\} - 3(\ln 2)^2 \\ &= \frac{\pi^2}{6} - 2(\ln 2)^2 \cong 0,68. \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.7b})$$

* Das Integral ist identisch mit $-Ei(-\mu\alpha)$.

** $L_2(x) = - \int_0^x \frac{\ln|1-t|}{t} dt$ ist der Eulersche Dilogarithmus.

$$L_2(1) = \frac{\pi^2}{6}; \quad L_2\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\pi^2}{12} - \frac{(\ln 2)^2}{2}.$$

Die dritte Summe läßt sich bequem abschätzen; denn es ist

$$\Gamma_{n+1} \leq \Gamma_n = \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^n} \leq \Gamma_{n-1}; \quad \Gamma_{\infty} = A_1 = \frac{1}{2}.$$

Folglich gilt

$$\frac{1}{2} \leq \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{A_{\mu}}{\mu^3} \leq \Gamma_2 = 0,68.$$

In dem uns interessierenden Bereich ($E \cong 50$ eV; $R/a = \alpha \cong 6,5$) bedeutet demnach die Vernachlässigung des letzten Gliedes in (A.6) einen Fehler von etwa 1%, so daß in guter Näherung gilt

$$I \sim 1 + 2 \ln 2 \frac{a}{R} - \left\{ \frac{\pi^2}{3} - 4 (\ln 2)^2 \right\} \frac{a^2}{R^2} + \dots \quad (\text{A.8})$$

$$I \sim 1 + 1,39 \frac{a}{R} - 1,36 \frac{a^2}{R^2} + \dots \quad (\text{A.9})$$

Die gleiche asymptotische Entwicklung kann man einfacher erhalten:

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \int_0^{\infty} \frac{d\eta}{(1+\eta)^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-e^{-\eta\alpha}}} - 1 + 1 \right) \\ &= 1 + \int_0^{\infty} \frac{d\eta}{(1+\eta)^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-e^{-\eta\alpha}}} - 1 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Die Substitution $\eta\alpha = x$ liefert

$$I(\alpha) = 1 + \frac{1}{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\left(1 + \frac{x}{\alpha}\right)^2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1-e^{-x}}} - 1 \right\}. \quad (\text{A.11})$$

Die Entwicklung des Integranden nach x/α liefert ebenfalls die gewünschte asymptotische Entwicklung

$$\begin{aligned} I(\alpha) &\sim 1 + \frac{1}{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (m+1)!}{\alpha^m} \int_0^{\infty} dx \cdot x^m \left\{ \frac{1}{\sqrt{1-e^{-x}}} - 1 \right\} \\ &= 1 + \frac{1}{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (m+1)!}{\alpha^m} \Gamma_{m+1}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Das erste Integral in der Summe ist identisch mit dem Integral in (19). Wir haben diese Darstellung nicht benutzt, weil uns die Abschätzung der Γ_n mit Hilfe der A_{μ} -Summen bequemer erschien.