Heiko Dumlich April 29, 2008

2 Blatt - Festkörperphysik 2 - 2D Gitter

2.1 (Oberflächen kubisch raumzentrierter Kristalle)

a)

In Abbildung (1) befinden sich die drei Draufsichten der (100), (110) und (111) Ebenen des kubisch-raumzentrierten Gitters. Die erste Atomlage ist in rot, darunter liegende Lagen sind in grün gekennzeichnet.

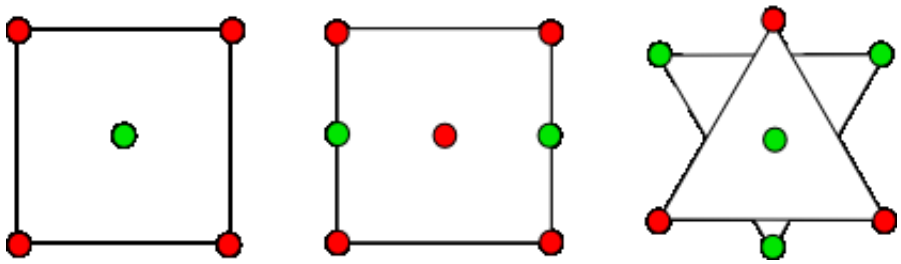

Figure 1: (100) (110) (111), 1. Atomlage rot, 2. Atomlage grün

b)

Wir erhalten die folgenden Punktgruppen (unter Beachtung von Spiegelebenen und Drehachsen):

Punktgruppe	Orientierung
C_{4v}	(100)
C_{2v}	(110)
C_{3v}	(111)

dies kann man der Abbildung (2) entnehmen.

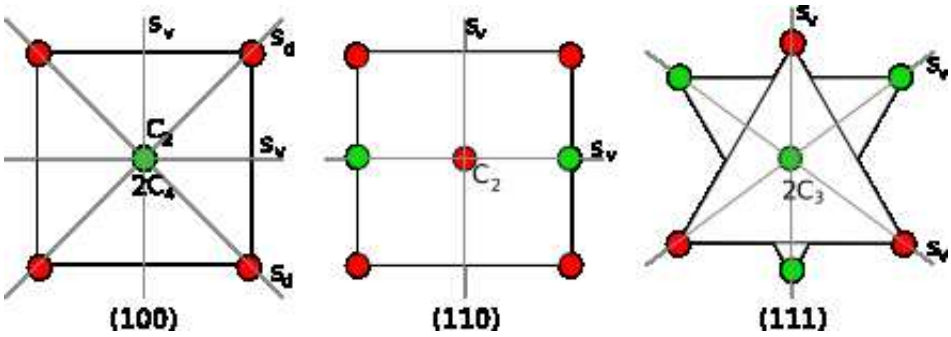

Figure 2: (100) (110) (111), 1. Atomlage rot, 2. Atomlage grün, Spiegelebenen s_x, Drehachsen C_x

c)

Die Einheitsvektoren für die Oberflächeneinheitszellen ergeben sich wie folgt:

$$
\begin{array}{lll}
(100) & \vec{a}_1 = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{a}_2 = a\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
(110) & \vec{a}_1 = \frac{\sqrt{2}a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{a}_2 = \dfrac{\sqrt{2}a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
(111) & \vec{a}_1 = \sqrt{2}a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \vec{a}_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}a\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}
\end{array}
$$

damit erhalten wir für die Längen:

$$
\begin{array}{lll}
(100) & |\vec{a}_1| = 1 & |\vec{a}_2| = 1 \\
(110) & |\vec{a}_1| = 1 & |\vec{a}_2| = 1 \\
(111) & |\vec{a}_1| = \sqrt{2} & |\vec{a}_2| = \sqrt{2}
\end{array}
$$

Die Lagenabstände ergeben sich zu:

$$
\begin{array}{ll}
(100) & d = a \\
(110) & d = \dfrac{\sqrt{2}}{2}a \\
(111) & d = \dfrac{1}{\sqrt{3}}a
\end{array}
$$

2.2 (Beugung am 2D Gitter)

a)

In Abbildung (3) befindet sich sich die Atomanordnung eines kubisch flächenzentrierten Gitters mit der (111) Ebene.

Abbildung (4) beinhaltet die Fläche, die sich bei einem (111) Schnitt ergibt. Hierbei ist der Abstand zwischen den Atomen $\frac{\sqrt{2}}{2}a$. Es handelt sich um ein gleichseitiges Dreieck, d.h. alle Winkel betragen 60°. Der Abstand von dem unterem mittleren Atom zum Atom oben beträgt $\sqrt{\frac{5}{2}}a$. Die Seitenlänge des Dreiecks beträgt $\sqrt{2}a$. Das Dreieck besteht aus 4 kleineren gleichseitigen Dreiecken mit der Seitenlänge $\frac{\sqrt{2}}{2}a$.

b)

Wir wollen nun das reziproke Gitter berechnen. Hierzu bestimmen wir zuerst die Basisvektoren für unser Gitter. Dieses ergeben sich zu:

$$
\vec{a}_1 = \frac{a}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_3 = a\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
$$

die reziproken Gittervektoren können wir nun über die bekannten Formeln:

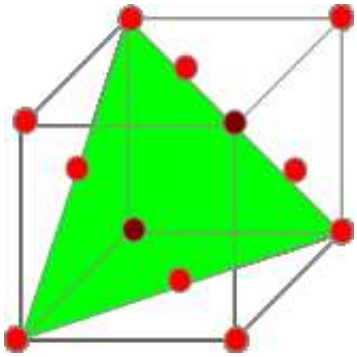

Figure 3: Skizze einer fcc-Gitterstruktur. Die (111) Ebene ist in grün eingetragen. Die roten Punkte stellen Gitteratome dar. Die dunkelroten zeigen an, dass dort auf Grund der Perspektive nicht sichtbar ein weiteres Atom sitzt.

Figure 4: Bild einer fcc-(111)-Oberfläche. Es entsteht ein gleichseitiges Dreieck mit der Seitenlänge $\sqrt{2}a$ und dem Winkel 60°

$$
\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{2\sqrt{2}\pi a^2}{\sqrt{\frac{3}{8}} a^3} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{8}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} \frac{\sqrt{16}}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{\frac{8}{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \\
\vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a} \frac{\sqrt{16}}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{\frac{3}{8}}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Hieraus erhalten wir das reziproke Gitter, das in Abbildung (5) dargestellt ist.

c)

Wir vergleichen die Beugung von Elektronen und Röntgenquanten. Elektronen sind hierbei geladene Teilchen, während Röntgenquanten keine Ladung besitzen. Zusätzlich muss beachtet werden, dass Elektronen eine Ruhemasse besitzen, Röntgenquanten besitzen diese nicht. Elektronen wechselwirken sehr viel stärker mit Atomen als Röntgenquanten. Die Wellenlängen der Elektronen liegen deutlich unter den Gitterabständen, während Röntgenquanten in der Größenordnung der Gitterabstände gewählt werden.

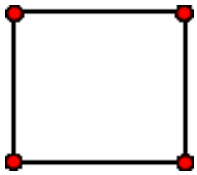

Figure 5: Bild der reziproken fcc-(111)-Oberfläche. Es entsteht ein Rechteck mit den Seitenlängen $a = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$ und $b = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}\frac{2}{\sqrt{3}}$.

d)

Es gilt die Bragg-Bedingung (für konstruktive Interferenz):

$$n\lambda = 2d\sin\theta$$

mit d dem Netzebenenabstand, θ dem Auftreffwinkel, n der Beugungsordnung und λ der Wellenlänge. Für den Netzebenenabstand gilt im kubischen Kristallsystem:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

d.h.

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

Die erste Ordnung ist nun gegeben mit

$$\theta_1 = \arcsin\frac{\lambda}{2d}$$

während die nullte Ordnung mit

$$\theta_0 = \arcsin 0 = (2k+1)\cdot\pi$$

mit $k \in \mathbb{N}_0$ gegeben ist. Für den relevanten Fall also 0°, bzw. 180°. Da der Winkel 0. Ordnung 0° beträgt, können wir gleich den Winkel für die 1. Ordnung berechnen:

$$\theta_1 = \arcsin\left(\frac{h}{2a}\sqrt{\frac{3}{2m_e eU}}\right)$$

mit $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$ (Herleitung siehe **e)**). Das Beugungsmuster ist nachdem wir das reziproke Gitter in **b)** bestimmt haben einfach zu überlegen. Wir erhalten in 0. Ordnung einen Punkt in der Mitte. Nun werden oben, unten, links und rechts unter dem Winkel der 1. Beugungsordnung die Reflexe 1. Ordnung erscheinen.

e)

Die Wellenlänge der Elektronen ist über die de-Broglie-Beziehung gegeben:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

wobei der Impuls der Elektronen über die Beschleunigungsspannung U bestimmt wird.

$$eU = \frac{1}{2} m_e v^2 \Leftrightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$$

Somit ergibt sich für die Wellenlänge:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$$

Die Energie der Röntgenquanten ist dann gegeben mit

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \sqrt{2m_e eU}c$$

Typische Energien für LEED liegen bei $10 - 200\,\mathrm{eV}$. Nehmen wir $E = 100\,\mathrm{eV}$ an, hieraus ergibt sich dann eine Wellenlänge von:

$$\lambda = \frac{hc}{E} = 124\,\text{Å}$$

Es ist also davon auszugehen, dass die Wellenlänge der Röntgenquanten nun nicht mehr in der Größenordnung des Gitterabstandes liegt (insofern man diese Energiegrößenordnung verwendet). Somit wird auch kein Reflex sichtbar sein (die nullte Ordnung müsste immer auftreten, nach der folgenden Bedingung). Die Bragg-Bedingung sagt für die Beugungswinkel:

$$\theta_n = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d}\right)$$

somit muss also $\lambda \leq \frac{2d}{n}$ gelten, damit der Beugungswinkel für eine bestimmte Beugungsordnung auftreten kann. Dies würde bedeuten, dass wir die 0. Ordnung immer sehen, wobei schon für die 1. Beugungsordnung:

$$\lambda \leq 2d$$

sein muss, dies heisst also mit unserer Beispielenergie folgt:

$$\frac{\lambda}{2} = 62\,\text{Å} \leq d$$

somit müsste also d größer als $62\,\text{Å}$ sein. Dies ist jedoch nicht so. Die höheren Ordnungen verlangen noch größere d's um aufzutauchen. Somit sehen wir nur die 0. Ordnung.