Heiko Dumlich May 6, 2008

3 Blatt - Festkörperphysik 2 - Augerelektronenspektroskopie (AES)

3.1 (Struktureller bcc-fcc Übergang)

Eisen liegt bei Raumtemperatur in der bcc-Phase ($a = 2.87\,\text{Å}$) vor.

a)

Es sind die Gitterabstände der fcc-Struktur zu bestimmen, die dieselbe atomare Dichte wie bcc-Fe aufweist. Die Dichte von bcc-Fe ergibt sich zu

$$\rho = \frac{N}{V}$$

mit $V = a^3$ und $N = \frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$ für die Elementarzelle von bcc. Damit ist die Dichte gegeben mit

$$\rho = \frac{2}{a^3}$$

Diese soll nun übertragen werden auf die fcc Elementarzelle, welche $N = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$ besitzt. Somit folgt also:

$$\frac{9}{a^3} = \frac{4}{b^3}$$

wobei b der Gitterabstand für die fcc Struktur ist. Somit ergibt sich:

$$b = \sqrt[3]{2}a \approx 3.62\,\text{Å}$$

b)

Es ist der nächste Nachbar-abstand in der Ebene und der vertikale Lagenabstand für (001)-orientierte dünne Filme von bcc-Fe sowie dem fcc-Gitter aus **a)** zu berechnen.

Für das bcc-Fe ergibt sich für den nächste Nachbar-abstand in der Ebene:

$$d_1 = a = 2.87\,\text{Å}$$

Der Lagenabstand ergibt sich mit

$$d_2 = \frac{a}{2} = 1.44\,\text{Å}$$

Für das in **a)** bestimmte fcc-Gitter erhalten wir für den nächste Nachbarabstand in der Ebene:

$$l_1 = \frac{b}{\sqrt{2}} = 2.56\,\text{Å}$$

und für den Abstand zur nächsten Lage:

$$l_2 = \frac{b}{2} = 1.81\,\text{Å}$$

3.2 (Lock-in Technik)

Es ist mittels Taylor-Entwicklung von $f(E + U\cos(\omega t))$ zu zeigen, wie die Frequenz der überlagerten Wechselspannung zu wählen ist, damit es zu einer frequenz- und phasenrichtigen Detektion der 1. bzw. 2. Ableitung kommt. Für $U \ll E$ können wir f entwickeln:

$$f(E + U\cos(\omega t)) \approx f(E) + U\cos(\omega t) \cdot f' + \frac{U^2 \cos^2(\omega t)}{2} f'' + \ldots$$

Benutzen wir noch den trigonometrischen Pythagoras:

$$\cos^2(\omega t) = 1 - \sin^2(\omega t)$$

und das Additionstheorem

$$\sin^2(\omega t) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2\omega t))$$

somit also:

$$\cos^2(\omega t) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2\omega t))$$

können wir nach ω-Abhängigkeit umstellen:

$$f(E + U\cos(\omega t)) \approx f + \frac{U^2}{4} f'' + U\cos(\omega t) \cdot (f' + \ldots) + \frac{U^2 \cos(2\omega t)}{4}(f'' + \ldots) + \ldots$$

Wir wollen nun mit dem periodischen Signal überlagern und über die Zeit mitteln

$$I = \frac{1}{T}\int_0^T f(E + U\cos(\omega t)) \, W(\omega, t)\ dt$$

einsetzen unserer Taylorentwicklung liefert:

$$I = \frac{1}{T}\left(\left(f + \frac{U^2}{4} f''\right)\int_0^T W(\omega, t)\ dt + Uf'\int_0^T \cos(\omega t) \, W(\omega, t)\ dt + \frac{U^2 f''}{4}\int_0^T \cos(2\omega t) \, W(\omega, t)\ dt\right)$$

Jetzt können wir hiervon ausgehend bestimmen, wie die Frequenz ω in $W(\omega, t)$ aussehen muss, um die 1. bzw. 2. Ableitung zu erhalten. Für den Fall der 1. Ableitung haben wir die Bedingungen:

$$\begin{aligned}
\int_0^T W(\omega, t)\ dt &= 0 \\
\int_0^T \cos(\omega t) \, W(\omega, t)\ dt &\neq 0 \\
\int_0^T \cos(2\omega t) \, W(\omega, t) \, dt &= 0
\end{aligned}$$

mit $T = \frac{2\pi}{\omega}$ und $W(\omega, t) = U\cos(\omega t)$ folgt

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \cos(\omega t)\ dt &= 0 \\
\int_0^{T} \cos^2(\omega t)\ dt &= \frac{\pi}{\omega} \\
\int_0^{T} \cos(2\omega t)\cos(\omega t)\, dt &= 0
\end{aligned}
$$

d.h.

$$I = \frac{U}{2} f'$$

mit ω erhalten wir daher die 1. Ableitung. Wählen wir nun $W(\omega, t) = U\cos(2\omega t)$ folgt

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \cos(2\omega t)\ dt &= 0 \\
\int_0^{T} \cos(\omega t)\cos(2\omega t)\ dt &= 0 \\
\int_0^{T} \cos^2(2\omega t)\, dt &= \frac{\pi}{\omega}
\end{aligned}
$$

d.h.

$$I = \frac{U^2}{8} f''$$

Somit müssen wir 2ω wählen, um die 2. Ableitung zu erhalten.

3.3 (Wachstumsmodi)

Es ist die Augerintensität I_a eines Adsorbats als Funktion der mittleren, deponierten Schichtdicke d zu berechnen für den Fall,

a)

von lageweisem Wachstum (Frank - van der Merwe). Qualitativ erhalten wir ein exponentielles Verhalten der Augerintensität.

b)

von Inselwachstum (Volmer - Weber), wobei die Inseln mit konstanter Höhe angenommen werden dürfen. Wir erhalten für diesen Fall ein lineares Verhalten.