Heiko Dumlich May 13, 2008

4 Blatt - Festkörperphysik 2 - Low-energy electron diffraction (LEED)

4.1 (LEED: Auswirkung von Domänen)

a)

Das rechtwinklige Gitter besitzt die Basisvektoren:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

hieraus folgen die reziproken Gittervektoren:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \tfrac{2\pi}{b} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die 2×1 Überstruktur hat somit folgende Basisvektoren:

$$\vec{u}_1 = a \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und als reziproke Gittervektoren:

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^* = \tfrac{2\pi}{b} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

jedoch ist hier zu beachten, das auf Grund einer anderen Domänenausrichtung auch die 1- und die 2-Richtung vertauscht sein könnten (um 90° gedrehte Überstruktur), somit müssen zusätzlich noch Reflexe für

$$\vec{b}_1^{*\prime} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^{*\prime} = \tfrac{2\pi}{b} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

beachtet werden. Dies sieht man in Abbildung (1).
Die 2×2 Überstruktur hat folgende Basisvektoren:

$$\vec{u}_1 = a \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = b \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

für diese ergeben sich als reziproke Gittervektoren

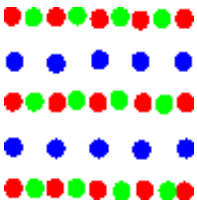

Figure 1: Skizze der Reflexe auf dem Schirm für eine 2×1 Überstruktur mit rechteckigem Substrat. Die roten Spots zeigen die Reflexe für die rechteckige Gitterstruktur an ($a = 2b$), die grünen und blauen Reflexe drücken jeweils eine der möglichen Domänenausrichtungen der Überstruktur aus.

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\0\\0\end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^* = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix}0\\\frac{1}{2}\\0\end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

da die Überstruktur in beide Richtungen die gleiche Anzahl von freien Gitterstellen hat, gibt es keine zusätzlichen Reflexe. Die Substratstruktur könnte höchstens den Einfluss haben, dass sie auf einer anderen Ebene gedreht ist im Gegensatz zu einer der jetzt betrachteten Ebenen. Dann würde auf Grund der rechteckigen Form des Gitters die Möglichkeit von zusätzlichen Reflexen existieren. Dies wird hier jedoch nicht betrachtet. In Abbildung (2) befindet sich das zu erwartende Muster für die 2×2 Überstruktur.

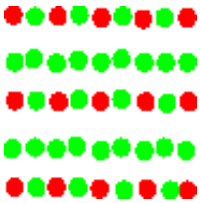

Figure 2: Skizze der Reflexe auf dem Schirm für eine 2×2 Überstruktur mit rechteckigem Substrat. Die roten Spots zeigen die Reflexe für die rechteckige Gitterstruktur an ($a = 2b$), die grünen Reflexe drücken die Reflexe der Überstruktur aus.

b)

Das hexagonale Gitter besitzt die Basisvektoren:

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

hieraus folgen die reziproken Gittervektoren:

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

Die 2×1 Überstruktur hat somit folgende Basisvektoren:

$$\vec{u}_1 = a \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = \tfrac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und als reziproke Gittervektoren:

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^* = \tfrac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

wobei auf wieder die Domänenausrichtung beachtet werden muss, wodurch auch

$$\vec{u}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

möglich ist, was auf die reziproken Gittervektoren:

$$\vec{b}_1^{*\prime} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^{*\prime} = \tfrac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

führt. Dies sieht man in Abbildung (3).

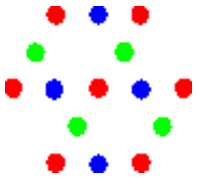

Figure 3: Skizze der Reflexe auf dem Schirm für eine 2×1 Überstruktur mit hexagonalem Substrat. Die roten Spots zeigen die Reflexe für die hexagonale Gitterstruktur an, die grünen und blauen Reflexe drücken jeweils eine der möglichen Domänenausrichtungen der Überstruktur aus.

Die 2×2 Überstruktur hat folgende Basisvektoren:

$$\vec{u}_1 = a \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

was auf die reziproken Gittervektoren:

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2^* = \tfrac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{m} = 2\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

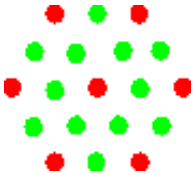

Figure 4: Skizze der Reflexe auf dem Schirm für eine 2×2 Überstruktur mit hexagonalem Substrat. Die roten Spots zeigen die Reflexe für die hexagonale Gitterstruktur an, die grünen Reflexe drücken die Überstruktur aus.

führt. In Abbildung (4) befindet sich das zu erwartende Muster für die 2×2 Überstruktur.

Ich habe jetzt noch gesehen, dass man eigentlich 120°*-Drehungen beachten müsste, um alle möglichen hexagonalen Domänenausrichtungen abzudecken, aber das ist mir zu viel Arbeit jetzt und ich erwarte nicht allzu viel Lerneffekt dabei, daher belasse ich es bei der jetztigen Version.*

4.2 (LEED-Beugungsbild)

Es ist aus dem gegebenen Beugungsbild die Größe der Einheitszelle von Ir zu bestimmen. Die Primärenergie betrage 100 eV, wobei wir von senkrechtem Strahleinfall ausgehen (d.h. Einfallswinkel $\varphi_0 = 0$). Der Öffnungswinkel sei gegeben mit 40°. Es gilt de Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV_0}} \approx \frac{12.26}{\sqrt{V\,(\mathrm{eV})}}\,\text{Å}$$

weiter gilt

$$\sin\theta_{nm} = \frac{\lambda}{a}\sqrt{n^2+m^2}$$

(siehe Fortgeschrittenenpraktikum LEED (quadratisches Gitter)). Umstellen und ineinander einsetzen liefert:

$$a \approx \frac{12.26\sqrt{n^2+m^2}}{\sqrt{V\,(\mathrm{eV})}\sin\theta_{nm}}\,\text{Å}$$

Aus dem gegebenen Bild erkennt man $m = 1, n = 1$, einsetzen von $\theta_{nm} = 40°$ und $V = 100\,\mathrm{eV}$ liefert also:

$$a \approx 2.70\,\text{Å}$$

hieraus kriegen wir jetzt die Gitterkonstante in der Ebene indem wir mit dem Faktor $\sqrt{2}$ multiplizieren. Somit erhalten wir also für die Größe der Einheitszelle:

$$a_{uc} \approx 3.82\,\text{Å}$$

Der Vergleich mit dem Literaturwert zeigt, dass die Übereinstimmung relativ gut ist, da beim LEED ein Fehler von 1-2% nicht untypisch ist (zumindest am FP-Gerät).

4.3 (Kinematische Analyse von LEED Beugungsintensitäten)

Für diese Aufgabe können wir wiederum unsere Kenntnisse aus dem Fortgeschrittenen Praktikum bemühen (zufälligerweise sind unsere eigenen Peaks sehr nah an den hier gegebenen Peaks dran). Hierbei nutzen wir die kinematische Näherung:

$$T(n) = \frac{h^2}{8md^2 \sin^2\theta} n^2 + V$$

mit $\xi = \frac{h^2}{8md^2 \sin^2\theta}$ folgt

$$d = \frac{h}{\sqrt{8m\xi}\sin\theta} \approx \frac{6.13}{\sqrt{\xi\,(\mathrm{eV})}}\,\text{Å}$$

Wir können also aus der Steigung die senkrechte Gitterkonstante erhalten. (Da ich gerade kein Origin oder anderes komfortables Programm zur Hand habe, mache ich es sehr grob, aber die Idee dahinter sollte klar werden.) Wir identifizieren die Bragg Peaks mit den folgenden n:

Energie in eV	Beugungsordnung
279	5
406	6
557	7

ziehen wir noch die 10 eV ab und teilen dann den jeweiligen Wert durch n^2, erhalten wir grob 11 eV als Steigung. Hieraus ergibt sich dann durch einsetzen:

$$d \approx \frac{6.13}{\sqrt{\xi\,(\mathrm{eV})}}\,\text{Å} \approx 1.85\,\text{Å}$$

Das ist natürlich nur sehr grob im Vergleich zum FP. Vermutlich handelt es sich bei diesem Graphen um eine Messung an Cu.