5 Blatt - Festkörperphysik 2 - Quantitative Augeranalyse (AES)

5.1 (a)

Da wir Ableitungen der Anzahl (Messgraph in dN/dE) besitzen, müssen wir die Peaks integrieren, um eine Anzahl zu erhalten. Hierzu können wir angenäherte Dreiecke in die Peaks legen, vergleiche Abbildung (1).

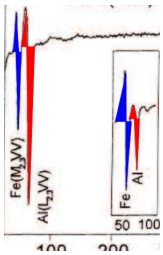

Figure 1: Durch Dreiecke grob integrierte Peaks der AES Messung.

Wir erhalten für den ungereinigten Fall für die blauen Dreiecke - Fe(MVV):

$$\begin{aligned} A_{b1} &= 350 \\ A_{b2} &= 798 \\ A_b &= 1148 \end{aligned}$$

wobei die Angabe in Pixeln zum Quadrat (d.h. A.U.) ist und wir von links nach rechts die Dreiecke bezeichnen. Die roten Dreiecke - Al(LVV) liefern

$$\begin{aligned} A_{r1} &= 426 \\ A_{r2} &= 2360 \\ A_r &= 2786 \end{aligned}$$

Jetzt müssen wir noch beachten, dass die Ausbeute an Augerelektronen für Fe um $S_{Fe} = 1.84$ höher ist als für Al. Somit ist das wirkliche Verhältnis

$$\frac{A_r}{A_b} S_{Fe} = 4.47$$

Dies bedeutet, dass auf ein Eisen Atom im Durchschnitt ca. 4.5 Aluminium Atome kommen. Für den Fall der gereinigten Oberfläche erwarten wir eine Verminderung dieses Verhältnisses. Wir betrachten die Flächen für die gereinigte Oberfläche. Die blauen Dreiecke - Fe(MVV) liefern:

$$\begin{aligned} A_{b1} &= 880 \\ A_{b2} &= 630 \\ A_b &= 1510 \end{aligned}$$

womit die Zahl bereits erhöht ist. Andererseits erhalten wir aber für die roten Dreiecke - Al(LVV)

$$\begin{aligned} A_{r1} &= 182 \\ A_{r2} &= 523 \\ A_r &= 705 \end{aligned}$$

Somit ist das Verhältnis in dem gereinigten Fall

$$\frac{A_r}{A_b} S_{Fe} = 0.86$$

Was einen enormen Unterschied macht. Die Oberfläche hat somit eine große Anzahl an Aluminium-Atomen verloren.

5.2 (b)

Wir gehen nun von einer epitaktischen Auftragung von Al auf eine bcc (100) Ebene aus Eisen aus. Bei der bcc (100) Ebene haben wir eine Elementarzelle, bei der 4 Fe quadratisch liegen, in deren Mitte sich ein, um $\frac{a}{2} = 1.43\,\text{Å}$ nach unten versetztes 5. Fe befindet, siehe Abbildung (2).

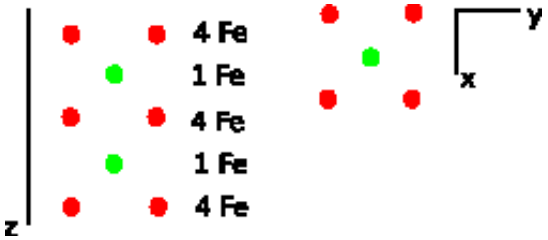

Figure 2: Links die Gitterstruktur in z-Richtung, rechts in der xy-Ebene. Eine Monolage in der xy-Ebene zu erkennen, liefert "2 Atomlagen". D.h. wir definieren eine Lage so, dass sie ein 4 Fe und ein 1 Fe enthält. Da wir so keine "freien Stellen" (soweit man das bei Elektronenwahrscheinlichkeitsverteilungen denn sagen kann) in der Oberfläche erwarten.

Wobei die Gitterkonstante $a = 2.86\,\text{Å}$ für Eisen sei. Der Abstand zu dem 5. Fe beträgt $\sqrt{\frac{3}{4}}a = 2.48\,\text{Å}$ von den anderen 4 Fe. Die zweite bcc (100) Lage des Fe beginnt dann $a = 2.86\,\text{Å}$ unter den 4 Fe, bzw. $\frac{a}{2}$ unter dem 5. Fe. Die 1 Fe Schicht liefert jedoch den gleichen Beitrag an Atomen, wie die 4 Fe Schicht, da bei Betrachtung der Elementarzelle effektiv nur 1 Atom aus der 4 Fe Schicht geliefert wird, da jedes der 4 nur zu $\frac{1}{4}$ in der Elementarzelle liegt. Die mittlere freie Weglänge der Augerelektronen betrage $\lambda = 4.2\,\text{Å}$. D.h. wir erreichen 4 Fe, 1 Fe, 4 Fe, wenn kein Aluminium aufliegt, und verfehlen knapp (im Mittel) das 1 Fe der 2. bcc(100) Lage.

Ansatz: Mit dem Al aufliegend wird es vermutlich ähnlich aussehen, bzw. wahrscheinlich erreichen wir sogar nur die 1. bcc (100) Lage des 4 Fe und es sind 2.25 Al Lagen (wobei eine Lage hierbei definiert ist als 1 Al , 4 Al; das 0.25 bedeute, wir haben zum Schluss eine halbe 1 Al Lage die besetzt wird.), zu erwarten, die sich auf dieser anlagern. Es ist nun schwer abzuschätzen, an welchen Stellen sich das Al anlagern wird (bridge site?). Daher gehen wir von der vereinfachten Annahme aus, dass sich das Aluminium direkt über die Fe Atome absetzt (d.h. kein Winkel oder kompliziertere Annahmen). Wobei im ungereinigten Falle die Besetzung auf der 1 Fe Ebene anfange, wobei ein Al dann über diesem positioniert wird, welches jedoch auch höher als die 4 Fe Ebene liegt. Problematisch ist hierbei jedoch die hohe Anzahl an Monolagen, diese würde verlangen, dass

die Schichtdicke des Al geringer ist als die des Fe, damit die freie Weglänge lang genug ist, um die Fe-Schicht überhaupt zu erreichen

Im Falle der gereinigten Oberfläche gehen wir auch davon aus, dass sich die Al in den Aushölungen befinden, die die 1 Fe bilden, jedoch wieder über dem 1 Fe.

Ergebnis:

Wir haben also für den ungereinigten Fall 2.25 ML Al über der Fe Schicht, während für den gereinigten Fall nur vereinzelte Al (bzw. eine Teillage, keine volle Monolage, etwa eine $\frac{0.86}{2} = 0.43$ Lage) auf der Schicht auftreten.

Unterscheidung:

Eine Unterscheidung der Möglichkeiten a) (gemischte Oberfläche aus Al und Fe) und b) (Schichtsystem) sind allein mit der Messgraphik nicht möglich. Jedoch könnte man eine zeitaufgelöste Messung während der Reinigung durchführen, dann würde, im Falle, dass ein Schichtsystem von Al über dem Fe liegt zuerst die Al Anzahl im Zeitverlauf stark sinken. Hiermit müsste man auch abschätzen können, ob die Al sich in den Aushölungen befinden, da in diesen eine Trennung von der Oberfläche vermutlich schwieriger ist, und somit ein starkes Abklingen der "Reinigungsgeschwindigkeit" auftreten müsste. Ein erstes Abklingen sollte bereits erkennbar sein, wenn die Al so weit entfernt sind, dass bereits Fe "sichtbar" ist, d.h. wenn kein Al mehr über ihnen liegt. Da in diesem Fall die Edelgas-Teilchen, die auftreffen, nicht immer Al treffen, sondern auch Fe treffen können. (**c)** deutet an, das wir eine Mischung von a) und b) zu erwarten haben, d.h. wir haben eine Monolage aufliegend, wobei danach eine Mischung von Fe und Al als FeAl auftritt, es ist in **c)** näher spezifiziert, dass sich Fe und Al in einer CsCl-artigen Struktur abwechseln, d.h. in dem hier benutzen Bild, dass wir 4 Fe, 1 Al, 4 Fe, 1 Al, Schichten besitzen [wieder beachten, dass der Beitrag jeweils 1 Atom pro Elementarzelle ist, damit gilt auch stöchiometrisch FeAl].)

5.3 (c)

Jetzt befindet sich eine Monolage Al über der FeAl Struktur, wobei wir davon ausgehen, dass die FeAl Struktur, mit einer Al Ebene beginne, wobei sich bei dieser Fe und Al Schichtweise abwechseln, was Abbildung (3) zeigt.

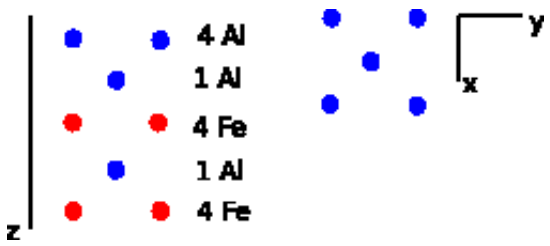

Figure 3: Links die Gitterstruktur in z-Richtung, rechts in der xy-Ebene. Gut zu erkennen ist, dass somit Anfangs die gesamte Oberfläche aus Al besteht.

Das die Oberfläche anfangs vollständig aus Al besteht ist wahrscheinlich, da die Messung zeigt, dass durch Reinigung sehr viel Al abgetragen wird. Das würde dafür sprechen, dass die gesamten obersten 2 Al Anteile abgetragen werden würden.

Wir wollen nun den neuen $S_{Fe,FeAl}$ Faktor bestimmen. Hierzu nutzen wir das Verhältnis von 4.47 von Al zu Fe und die Gitterkonstante 2.9 Å für die FeAl Struktur. D.h. wir werden 3 Lagen Al sehen und nur eine Lage Fe, da auf Grund der freien Weglänge von 4.2 Å die nächste Fe Schicht (unterste Fe Schicht auf Abbildung (3)) nicht erreicht werden wird. Somit haben wir also ein Verhältnis von 3 Al zu 1 Fe. Dies erscheint falsch, wenn man bedenkt, dass zuvor der Wert von $S > 1$ war. Nun würde sich als Wert $S = 0.67$ ergeben. Daher gehen wir von dem anderen Fall aus, dass wir 0.86 Al zu Fe haben, jedoch die oberste Lage unter der Lage Al jetzt

Fe ist. Dann erhalten wir ein Verhältnis von 2 Fe zu 2 Al. Hieraus ergibt sich das besser übereinstimmende $S = 1.16$ (zumindestens ist es größer als 1, auch wenn es weit von $S = 1.84$, dem Wert aus **a)**, entfernt ist).