

Fortgeschrittenenpraktikum – Vorbereitung

# Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen (LEED)

Erik Streb\*

20. Juni 2007

Betreuer: Herr Dr. Lenz

## 1 Einleitung

LEED (Low Energy Electron Diffraction) ist eine Untersuchungsmethode für Festkörperoberflächen. Elektronen mit Energien zwischen 20 eV und 500 eV werden an der zu untersuchenden Oberfläche gebeugt und dann auf einem Leuchtschirm nachgewiesen. Aus dem so gewonnenen Beugungsbild kann dann auf die Struktur der Oberfläche geschlossen werden.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Reziproker Raum

Ein Festkörper hat eine ideale Kristallstruktur, wenn er in erstarrter Form als periodische Wiederholung von kleinsten Untereinheiten beschrieben werden kann. Die kleinste Untereinheit nennt man Basis, so dass der Kristall die Summe von Gitter und Basis ist. Das Bravais-Gitter ist die Menge aller Vektoren  $\vec{T}$ , die das Gitter unter Translation invariant lassen. Das reziproke Gitter ist die Menge aller Vektoren  $\vec{G}$ , die nach  $\Psi = \Psi_0 e^{i\vec{G}}$  ebene Wellen mit der Periodizität des Gitters erzeugen. Die obige Definition des Bravaisgitters ist analog zu der, dass es zu jedem Bravaisgitter drei Vektoren  $\vec{a}_i$  gibt, so dass jeder Gitterpunkt durch die natürliche Linearkombination

$$\vec{R} = n_i \vec{a}_i, \quad n_i \in \mathbb{N}$$

---

\*E-Mail: mail@erikstreb.de

dargestellt werden kann. Das reziproke Gitter lässt sich auch definieren als Menge aller Vektoren  $\vec{G}$ , die die Bedingung  $e^{i\vec{R}\vec{G}} = 1$  erfüllen. Daraus folgt

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (1)$$

wobei die Vektoren  $\vec{b}_i$  die Basis des reziproken Gitters im reziproken Raum sind.

Wir betrachten die Streuung von Elektronen an einem zweidimensionalen Gitter, das von den Vektoren  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  aufgespannt wird. Entsprechend wird der reziproke Raum von den Vektoren  $\vec{b}_1$  und  $\vec{b}_2$  aufgespannt.

## 2.2 Unterschiedliche Gitter übereinander

Beim Betrachten einer Überstruktur auf einem zweidimensionalen Gitter erkennt man, dass sie genau wie das Gitter des Substrats auf dem Leuchtschirm ein Beugungsbild erzeugt. Im Folgenden wird erläutert, wie vom Beugungsbild auf die räumliche Anordnung der Überstruktur im Vergleich zum Substratgitter geschlossen werden kann.

Die Basisvektoren der Überstruktur können als Linearkombination der Basisvektoren des Substrats geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 &= m_{11} \vec{a}_1 + m_{12} \vec{a}_2 \\ \vec{u}_2 &= m_{21} \vec{a}_1 + m_{22} \vec{a}_2 \end{aligned} \quad (2)$$

Noch kompakter geht es in der Matrixschreibweise  $\mathbf{u} = M \mathbf{a}$ .

Analog für das reziproke Gitter:

$$\begin{aligned} \vec{v}_1 &= m_{11}^* \vec{b}_1 + m_{12}^* \vec{b}_2 \\ \vec{v}_2 &= m_{21}^* \vec{b}_1 + m_{22}^* \vec{b}_2 \end{aligned} \quad (3)$$

und in Matrixschreibweise  $\mathbf{v} = M^* \mathbf{b}$ . Man kann zeigen, dass zwischen den Matrizen  $M$  und  $M^*$  der folgende Zusammenhang besteht:

$$\begin{aligned} m_{11} &= \frac{1}{\det M^*} \cdot m_{22}^* \\ -m_{12} &= \frac{1}{\det M^*} \cdot m_{21}^* \\ -m_{21} &= \frac{1}{\det M^*} \cdot m_{12}^* \\ m_{22} &= \frac{1}{\det M^*} \cdot m_{11}^* \end{aligned} \quad (4)$$

## 3 Aufgaben

### 3.1 Wellenlänge monochromatischer Elektronen

Die Wellenlänge der Elektronen lässt sich aus der de-Broglie-Beziehung  $\lambda = h/p$  berechnen.

$$E_{\text{kin}} = eV_0 = \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{h^2}{2\lambda^2 m_e} \quad (5)$$

Nach der Wellenlänge aufgelöst

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV_0}} \quad (6)$$

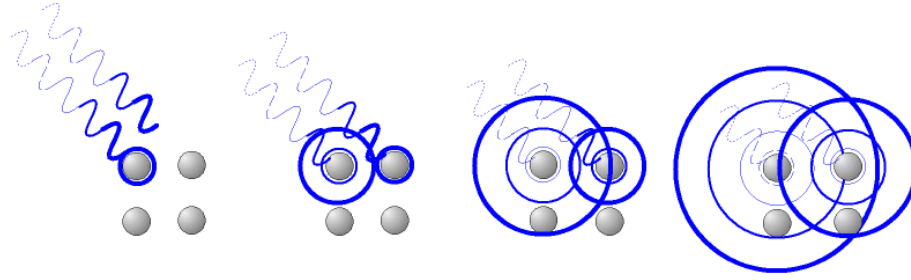


Abbildung 1: Schematische Darstellung der Beugung

und Zahlenwerte eingesetzt erhält man

$$\lambda = \frac{1,2265 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{V_0}} \text{ m} \quad (7)$$

Bei einer Beschleunigungsspannung von  $V_0 = 500 \text{ V}$  haben die Elektronen also eine Wellenlänge von  $\lambda = 0,055 \text{ nm}$  und eine Geschwindigkeit von  $1,326 \cdot 10^7 \text{ m/s}$ . Das führt zu einer relativistischen Korrektur von

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \approx 1,00098 \quad (8)$$

Die erste relativistische Korrektur tritt erst in der vierten Nachkommastelle auf, hier kann man also noch klassisch rechnen.

### 3.2 Konstruktive Interferenz

Wird eine Welle an einem eindimensionalen Gitter gebeugt (Abbildung 1), so erhält man genau dann eine konstruktive Interferenz, wenn der Weglängenunterschied gerade ein vielfaches der Wellenlänge ist.

$$n\lambda = a(\sin \Theta_0 - \sin \Theta_n) \quad (9)$$

Mit Hilfe des reziproken Gitters kommt man auf das selbe Ergebnis. Im Realraum wird das eindimensionale Gitter aufgespannt vom Vektor

$$\vec{a} = a \hat{e} \quad (10)$$

Aus Bedingung (1) erhält man sofort den reziproken Basisvektor

$$\vec{b} = \frac{2\pi}{a} \hat{e} \quad (11)$$

Nötig für die konstruktive Interferenz ist die Laue-Bedingung

$$\vec{s}'_n - \vec{s}_0 = \vec{G} = n \frac{2\pi}{a} \hat{e} \quad (12)$$

Mit  $\vec{s}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{e}$ ,  $\vec{s}'_n = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{e}'$  und skalarer Multiplikation mit  $\hat{e}$  erhält man

$$n\lambda = a(\vec{e}' \cdot \hat{e} - \vec{e} \cdot \hat{e}) = a(\sin \Theta_0 - \sin \Theta_n) \quad (13)$$

was exakt Gleichung (9) entspricht.

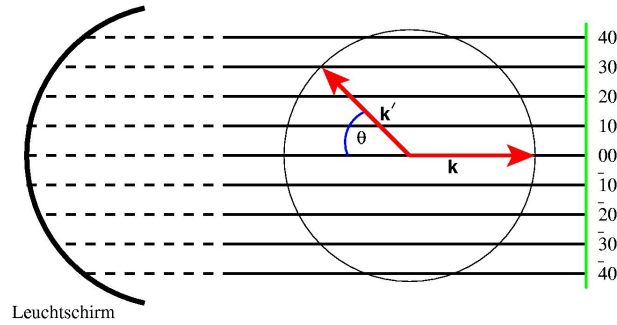


Abbildung 2: Ewaldkonstruktion für ein zweidimensionales Gitter. Die Geraden im  $k$ -Raum werden durch die Geometrie des Aufbaus direkt auf den Leuchtschirm abgebildet.

### 3.3 Beugung an zweidimensionalem Gitter

Die Bedingung für konstruktive Interferenz ist hier ganz ähnlich wie in Aufgabe 3.2, nur trifft hier die Welle auf jeden Fall senkrecht auf, es gilt also  $\Theta_0 = 0$ . Außerdem treten viele verschiedene Abstände zwischen den Atomen auf, die sich als  $d = a\sqrt{m^2 + n^2}$  schreiben lassen. Setzt man dies in Gleichung (9) ein, so erhält man

$$\sin \Theta_{m,n} = \frac{\lambda}{a} \sqrt{m^2 + n^2} \quad (14)$$

Weitaus anschaulicher kann man den reziproken Raum einer kubischen Oberfläche erhalten, wenn man von einem kubischen Gitter (aufgespannt durch  $\vec{a}_i = a_i \vec{e}_i$ ) ausgeht und beobachtet was mit dem reziproken Raum (aufgespannt durch  $\vec{b}_i = \frac{2\pi}{a_i} \vec{e}_i$ ) passiert, wenn der Vektor senkrecht zur Oberfläche (hier  $\vec{a}_3$ ) unendlich verlängert wird, die Netzebenen also im unendlichen Abstand zueinander sind. Die Länge des entsprechenden Vektors im  $k$ -Raum geht gegen Null wodurch der reziproke Raum in dieser Dimension quasi kontinuierlich wird. Man erhält also Geraden im  $k$ -Raum. Diese Geraden sind zusammen mit einer Ewald-Kugel in Abbildung 2 dargestellt.

### 3.4 Anwendung von LEED

Die Gleichungen (7) und (14) kann man zu einer Bedingung für die Minimalenergie zusammensetzen:

$$V_0 = \left( \frac{1,2265 \text{ nm}}{a \sin \Theta} \right)^2 (m^2 + n^2) \quad (15)$$

Für  $a = 0,255 \text{ nm}$  und  $\Theta = 52^\circ$  erhält man die folgenden Ergebnisse:

- $m = 1, n = 1 \Rightarrow V_0 = 37 \text{ eV}$
- $m = 0, n = 1 \Rightarrow V_0 = 74 \text{ eV}$
- $m = 2, n = 2 \Rightarrow V_0 = 296 \text{ eV}$

Die entsprechenden Beugungsbilder sind in Abbildung 3 dargestellt.

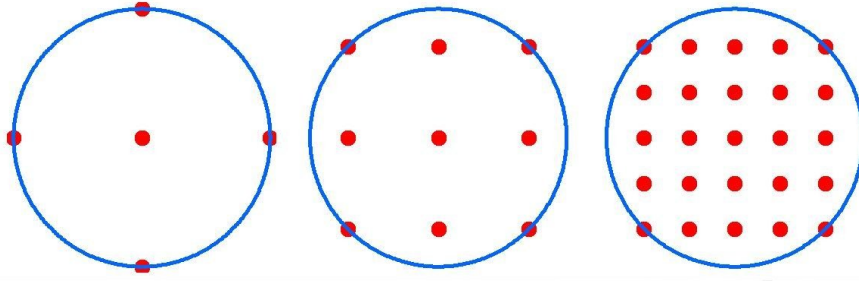


Abbildung 3: Beugungsbilder, die den (1,0)-, (1,1)- und (2,2)-Reflex gerade noch zeigen

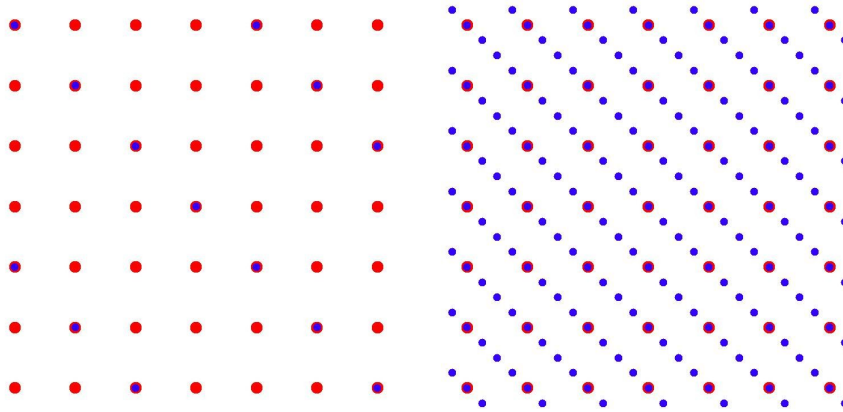


Abbildung 4: Substratgitter (dunkel) und Überstruktur (hell) im Realraum (links) und im reziproken Raum (rechts)

### 3.5 Überstruktur

Es soll eine  $(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})R45^\circ$ -Überstruktur (Woods-Notation) betrachtet werden. Der erste Teil gibt die Längenverhältnisse der Basisvektoren der Überstruktur zu den Basisvektoren des Substrats an, der Winkel ihre Rotation. Diese recht anschauliche Schreibweise lässt sich allerdings nicht verwenden, wenn die beiden Basisvektoren um unterschiedliche Winkel gedreht werden. Mit der in Kapitel 2 eingeführten Notation kann man schreiben:

$$\begin{pmatrix} \vec{u}_1 \\ \vec{u}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

was im reziproken Raum zu Folgendem wird:

$$\begin{pmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{b}_1 \\ \vec{b}_2 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Die Überstruktur im realen und reziproken Raum sind in Abbildung 4 dargestellt.

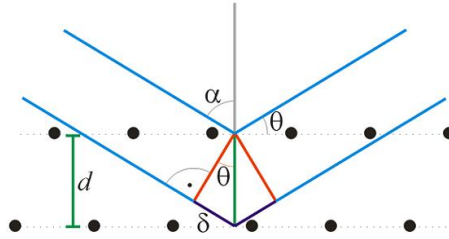


Abbildung 5: Bragg-Bedingung

### 3.6 Kinematische Näherung

Die kinematische Näherung besagt, dass die einfallenden Elektronen nur schwach mit dem Festkörper wechselwirken, und dass es nur der Betrachtung von Einfach-Streuprozessen bedarf, um eine gute Näherung zu liefern. Das ist zwar eigentlich eher für hochenergetische Elektronen und Röntgenstrahlung gültig, trotzdem verwendet man diese Näherung aber auch für Elektronen mit niedriger Energie, denn sie ist recht einfach und liefert unter bestimmten Umständen brauchbare Ergebnisse.

Wir betrachten einen senkrecht auf die Oberfläche treffenden Elektronenstrahl. Die Bragg-Bedingung (siehe Abbildung 5) lautet in diesem Fall:

$$2d \sin \Theta = n\lambda = n \frac{1,2265 \text{ nm}}{\sqrt{V_0}} \quad (18)$$

Die Wellenlänge ist hier aber nicht ganz korrekt, da die Elektronen beim Eintritt in das Material zusätzliche Energie gewinnen. Also muss noch ein weiterer Term im Nenner hinzugefügt werden.

$$2d \sin \Theta = n\lambda = n \frac{1,2265 \text{ nm}}{\sqrt{V_0 + U}} \quad (19)$$

Jetzt kann man durch variieren der Beschleunigungsspannung Reflexionsmaxima suchen und aus ihnen und der vermuteten Beugungsordnung  $d$  und  $U$  bestimmen.

## 4 Versuchsaufbau

Eine schematische Darstellung des LEED Aufbaus sieht man in Abbildung 6. Im linken Teil der Abbildung werden Elektronen an der Glühkathode freigesetzt und mit einer Spannung (50–500 V) beschleunigt. Sie fliegen durch das Loch im Leuchtschirm und treffen auf die zu untersuchende Probe. Dort werden sie elastisch und inelastisch gestreut und treffen dann auf den Leuchtschirm. Da man eigentlich nur an den inelastisch gestreuten Elektronen interessiert ist, befinden sich vor dem Leuchtschirm noch drei Metallgitter, die mittels der an sie angelegten Spannungen dafür sorgen, dass nur Elektronen mit einer bestimmten Mindestenergie passieren können. Um ausreichend Fluoreszenz anregen zu können liegt zwischen dem letzten Gitter und dem Schirm eine sehr große Spannung an (8 kV), die die Elektronen vor dem Auftreffen auf dem Schirm noch einmal stark beschleunigt.



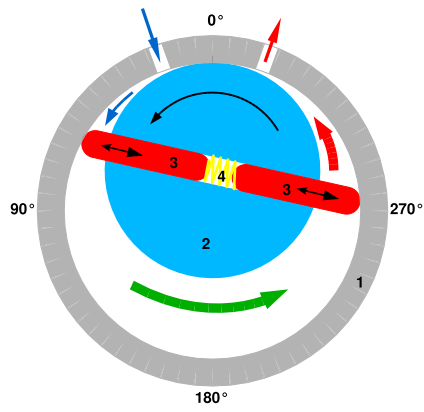


Abbildung 7: SKizze einer Drehschieberpumpe



Abbildung 8: Foto einer aufgeschnittenen Turbomolekularpumpe