

PRAKTIKUM FÜR FORTGESCHRITTENE

LEED

Martin Mücke

Matthias Kreier

21. Mai 2003

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	3
2 Auswertung	
2.1 Vakuum für mehrstündiges Messen an einer sauberen Oberfläche	3
2.2 Kristall auf Probenhalter kleben, Spalthebel anbringen	4
2.3 Restgasanalyse mit dem Quadrupol-Massenspektrometer	5
2.4 Transfer des Probenhalters in LEED-Kammer, Spalten des Kristalls	10
2.5 Auswertung des Beugungsbildes, reziproke Gittervektoren hexagonaler Gitter	10
2.6 Zusammenhang zwischen Gitterkonstante und Elektronenenergie	11
2.7 Periodizität des Kristalls senkrecht zur Oberfläche: der c-Parameter	13
Anlagen	
1 Das „EES“-Labor	
2 Skizze des Transfersystems	
3 Meßprotokoll des Versuches LEED	
4 Nebenrechnung zu Aufgabe 5	

1 Einleitung

Eine der wichtigsten Methoden zur Untersuchung geordneter Oberflächenstrukturen ist die Beugung niederenergetischer Elektronen an der Oberfläche (englisch: Low Energy Electron Diffraction - LEED). Niederenergetische Elektronen werden vom Festkörper jedoch schon nach der Durchstrahlung von wenigen Netzebenen absorbiert. Deshalb sind Beugungsexperimente nur als Reflexionsexperimente möglich und zeigen die Struktur der obersten Atomlagen eines Kristalls.

Das erste Elektronenbeugungsexperiment wurde 1927 von *Davisson* und *Germer* [4] ausgeführt. Damit wurde experimentell die Wellennatur des Elektrons nachgewiesen. Dem Elektron kann damit die nach *De Broglie* benannte Wellenlänge zugeordnet werden:

$$\lambda_{deBroglie} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Die Energie der bei LEED verwendeten Elektronen liegt bei 10-1000 eV. Gemäß [2] Seite 41 kann damit nur etwa 1-5 nm Festkörpermaterie durchstrahlt werden. Eine Grundvoraussetzung für diese Untersuchungsmethode ist daher eine saubere Oberfläche während der Messung. Dabei ist die Herstellung einer solchen Oberfläche eine Seite des Problems. In unserem Versuch ließ sich diese Oberfläche vergleichsweise einfach erzeugen, weil das untersuchte Schichtkristall TiTe nur geringe Bindungskräfte zwischen den Schichtebenen besitzt.

Darüber hinaus soll eine erzeugte saubere Oberfläche nicht sofort wieder verunreinigt werden, zum Beispiel durch die Adsorption von Gasen der Umgebung. Diese bilden eine sogenannte Überstruktur und erzeugen eigene Beugungsbilder (siehe [2, S. 44] Abb 1.2 b). Daher müssen Messungen in einer UHV-Umgebung (UltraHochVakuum, $p < 10^{-8}$ Pa) durchgeführt werden (siehe 2.1). Die Geräte und Untersuchungsmethoden der Vakuumtechnik im UHV werden daher im Rahmen dieses Praktikumsversuches ebenfalls ausgewertet.

2 Auswertung

2.1 Vakuum für mehrstündiges Messen an einer sauberen Oberfläche

Die Aufgabenstellung beinhaltet eine Abschätzung der Güte des Vakuums, um an einer sauberen Fläche (z.B. einer frischen Spaltfläche) mehrere Stunden messen zu können.

Um diese Abschätzung vornehmen zu können, betrachten wir ein einfaches Modellsystem. Ein ideales Gas befinde sich in einem Würfel der Kantenlänge a , dem Volumen $V = a^3$ und der Oberfläche $A = 6a^2$ (die 6 Innenflächen). Die mittlere kinetische Energie E_{kin} je Freiheitsgrad der Teilchen ergibt sich mit der Boltzmannkonstante k_B aus der Temperatur nach der Formel:

$$\overline{E_{kin}} = \frac{1}{2} k_B T$$

Bezogen auf die Oberfläche trägt nur ein Freiheitsgrad zu unserer Rechnung bei. Gleichzeitig ergibt sich die mittlere kinetische Energie pro Teilchen natürlich aus der Masse m der Teilchen und ihrer mittleren Geschwindigkeit \bar{v} durch die Formel:

$$\overline{E_{kin}} = \frac{1}{2} m \bar{v}^2$$

Die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} der Teilchen beträgt also:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \quad (1)$$

In unserem Würfel erreicht ein Teilchen also nach $t_1 = a/\bar{v}$ die Oberfläche A. Um die Oberfläche komplett zu bedecken nehmen wir an, daß alle Teilchen an der Oberfläche haften bleiben und bei vollständiger Bedeckung einen Abstand von $b=0,15$ nm voneinander haben. Die gesamte Oberfläche A wird also von insgesamt N Teilchen in unserem Beispielwürfel nach der folgenden Zeit bedeckt sein:

$$t = \frac{1}{N} \frac{a}{\bar{v}} \frac{A}{b^2}$$

Mit $A=6a^2$, $V=a^3$ und Formel (1) ergibt sich:

$$t = \frac{V}{N} \frac{6}{b^2} \sqrt{\frac{m}{k_B T}} \quad (2)$$

Für das ideale Gas gilt nunmehr $pV = Nk_B T$ und damit für das Volumen $V = Nk_B T p^{-1}$. Dies setzen wir in Formel (2) ein, stellen nach dem Druck p um und erhalten:

$$p = \frac{6 \sqrt{k_B T m}}{t b^2} \quad (3)$$

Für unser Modellsystem betrachten wir H_2O -Moleküle als Teilchen des Gases, damit ist die Teilchenmasse $m_{H_2O} = 18 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Für eine Umgebungstemperatur von $T = 300 \text{ K}$ und einer gewünschten Meßzeit von $t = 10 \text{ h} = 36000 \text{ s}$ ergibt sich für den Druck p, der in unserer Apparatur maximal herrschen darf:

$$p = \frac{6}{36000 \text{ s}} \frac{\sqrt{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 300 \text{ K} \cdot 29,88 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}}{(1,5 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2} = 8,2 \cdot 10^{-8} \text{ Pa} \approx 10^{-9} \text{ mbar}$$

An diesem einfachen Rechenbeispiel zeigt sich, daß Oberflächenuntersuchungen wie LEED in einem UHV (UltraHochVakuum) bzw. in Apparaturen mit $p < 10^{-9} \text{ mbar}$ durchgeführt werden sollten. Erst die Fortschritte in der Vakuumtechnik ermöglichen heute eine Vielzahl von effektiven Oberflächenuntersuchungsmethoden, in denen man auch mehrere Stunden an der Probe Messungen durchführen möchte.

2.2 Kristall auf Probenhalter kleben, Spalthebel anbringen

In diesem Praktikumsversuch haben wir kleine Kristalle aus TitanTellurid untersucht. Die nur ca. 3 x 5 mm großen und sehr flachen Kristalle haben wir mir einem leitfähigen Zweikomponentenkleber auf Silberbasis auf dem Kupferstempel befestigt. Zum Aushärten des Klebers mußte die Probe für 30 min in einem Ofen auf 120 °C erhitzt werden. Danach haben wir auch auf der Oberfläche den Kleber aufgebracht und den Spalthebel darauf befestigt. Anschließend haben wir auch diesen Kleber im Ofen aushärten lassen.

Wir haben auf diese Weise 3 Proben hergestellt, um im Fall einer "Ausschußprobe" dennoch

alle Messungen durchführen zu können. Aufgrund der Probedimensionen war es nicht einfach, den Kleber möglichst homogen auf der Probe – jedoch nicht auf bereits ausgehärtetem Kleber – zu verteilen. Damit hätte entweder das Spalten mißlingen oder aber der Spalthebel nicht ausreichend Kontaktfläche zum Kristall haben können.

Erfreulicherweise erwiesen sich alle 3 Proben als brauchbar. Wir wählten 2 Proben aus und verschraubten sie im Probenträger in der Schleusenkammer. Somit hatten wir innerhalb der UHV-Apparatur eine weitere Sicherheitsreserve. Dann erneuerten wir alle Kupferdichtungen, verschlossen die gesamte Apparatur wieder und begannen mit dem Evakuieren durch die Drehschieberpumpe und Turbomolekularpumpe.

2.3 Restgasanalyse in der Schleusenkammer mit dem Quadrupol-Massenspektrometer, Partialdruckanalyse, Totaldruckmessung

Nachdem wir den Rezipienten über einer Stunde evakuiert hatten, änderte sich der Druck nicht mehr signifikant. Wir schalteten das Vakuummeter mit der Bayard-Alpert-Röhre ein, die Meßwerte schwankten zwischen $6,8 - 7,2 \times 10^{-7}$ mbar. Danach schalteten wir auch das Quadrupol-Massenspektrometer Transpector™ der Firma Leybold ein. Über eine eingebaute Integrationsfunktion lieferte es uns zum Vergleich einen Gesamtdruck von 1×10^{-6} mbar. Aufgrund des unterschiedlichen Meßprinzipes sind die beiden Werte nicht direkt vergleichbar, sie liegen aber innerhalb der gleichen Größenordnung.

Das Massenspektrometer lieferte uns bereits Druckangaben in mbar, allerdings war die relative Ionisierbarkeit für alle Meßwerte auf 1 gesetzt. Aus [1] Seite 26 erhält man einige Werte für die relative Ionisierbarkeit von H, H₂O und C₃H₈, andere Werte haben wir der Bedienungsanleitung des Massenspektrometers entnommen. Für die 12 Massen mit der größten Intensität haben wir die resultierenden Partialdrücke in der folgenden Tabelle 1 zusammengestellt.

Peak bei [amu]	1	2	15	16	17	18	26	27	28	30	41	42
pp [10^{-8} mbar]	6,75	5,69	5,90	55,7	220	1,90	2,37	13,5	3,09	3,56	2,31	14,8
Molekül (-rest)	H	H ₂	CH ₃	CH ₄	OH	H ₂ O	C ₂ H ₂	C ₂ H ₃	CO	C ₂ H ₆	C ₃ H ₅	C ₃ H ₆
rel. Ionisierbarkeit	1,00	0,44	1,60	1,60	1,00	1,00	2,60	2,60	1,40	2,60	3,50	3,60
Partialdruck [10^{-8} mbar]	6,75	12,9	3,69	34,8	220	1,90	0,91	5,19	2,21	1,37	0,66	4,11

Tabelle 1: Partialdrücke der 12 wichtigsten Gase im Vakuum des Rezipienten

Die Summe der gemessenen Partialdrücke ergibt einen Gesamtdruck von $p=4,46 \times 10^{-6}$ mbar, also viermal mehr als die computergenerierte Summenanzeige des Massenspektrometers und eine Größenordnung vom Meßwert der Bayard-Alpert-Röhre entfernt. Daran zeigt sich, daß auf diese Weise eine Gesamtdruckbestimmung ungenau werden kann. Allerdings erhält man ein viel differenzierteres Bild, das mit anderen Meßmethoden nicht möglich ist. Auch die anderen Meßwerte sind mit einer gewissen Vorsicht zu betrachten. Eine wichtige Einflußgröße für den Meßwert des Massenspektrometers ist z. B. die relative Ionisierbarkeit des betrachteten Gasmoleküls. Ebenso wird die Wirkung unterschiedlicher Gasmoleküle auf die Sensoren anderer Druckmeßinstrumente einer gewissen Bandbreite unterliegen.

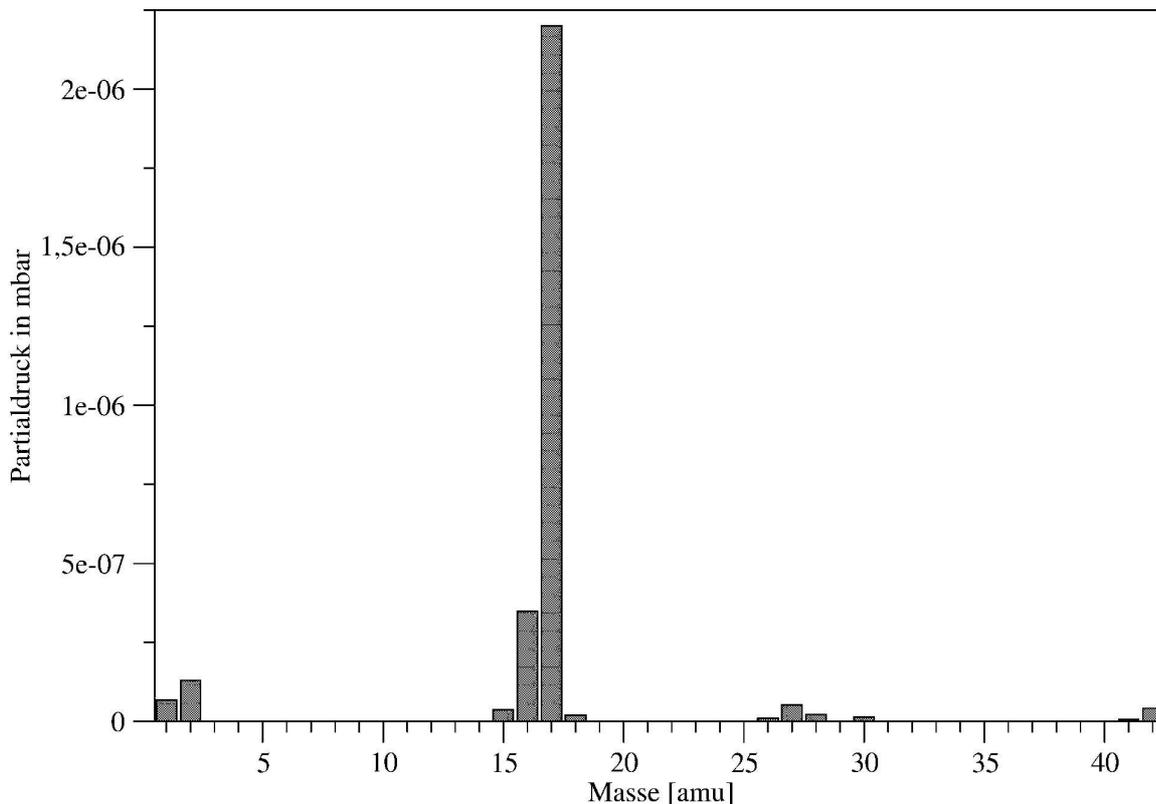
Der große Vorteil eines Massenspektrometers besteht darin, daß man nicht nur ein quantitatives Bild des Vakuums erhält, sondern auch ein fein differenziertes qualitatives Bild. Es läßt sich herausfinden, welche Gase hauptsächlich zum jeweiligen Druck beitragen. Zum einen kann man dann mit entsprechenden Maßnahmen sich auf das Entfernen jener Bestandteile konzentrieren, um z. B. den Gesamtdruck zu erniedrigen. Weiterhin wird man auf mögliche spezifische Lecks innerhalb der Anlage aufmerksam. Wie weiter unten gezeigt ist aus unserem Massenspektrum sehr deutlich der Einfluß des adsorbierten Wassers an den Wänden des Rezipienten zu erkennen.

Darüber hinaus ist es je nach Versuchsaufbau und -ziel notwendig, daß bestimmte Stoffe nur in sehr geringen Anteilen (oder praktisch überhaupt nicht) vorhanden sind. In vielen Fällen sind Kohlenwasserstoffverbindungen im Restgas ein unerwünschter Bestandteil. Daher verwendet man in diesen Fällen Turbomolekularpumpen, die magnetgelagert sind, und Membranpumpen als Vorpumpen. Ebenso lassen sich aufgrund der hohen Empfindlichkeit von Massenspektrometern sogar Anteile bzw. Einflüsse der Ionenquelle nachweisen (siehe [1], Seite 8).

Graphisch aufgetragen ergibt sich das folgende Massenspektrum der Restgase in unserer Schleusenkammer vor dem Ausheizen:

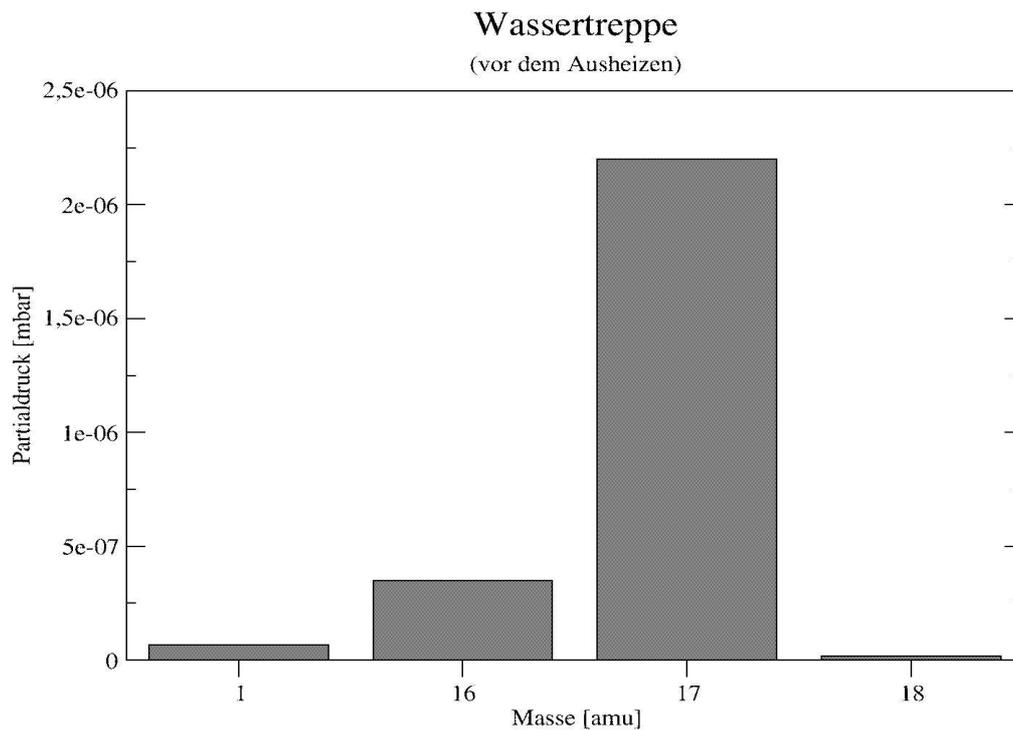
Massenspektrum der UHV-Anlage

(vor dem Ausheizen)



Aus der graphischen Auswertung des Massenspektrums erkennt man leicht, daß die relativen Atommassen 16 und 17 hauptsächlich druckbestimmend sind. Diese Massen lassen sich den Bruchstücken von Wasser zuordnen. Dieses adsorbierte Wasser läßt sich sehr effektiv durch Ausheizen der gesamten UHV-Anlage entfernen. Daher wurde der gesamte Bereich der Schleusenkammer und des Verbindungssystems zum restlichen (noch unter UHV-Bedingungen stehenden) Anlage über mehr als 24 Stunden ausgeheizt. Den Verlauf der Partialdrücke werden wir im folgenden betrachten.

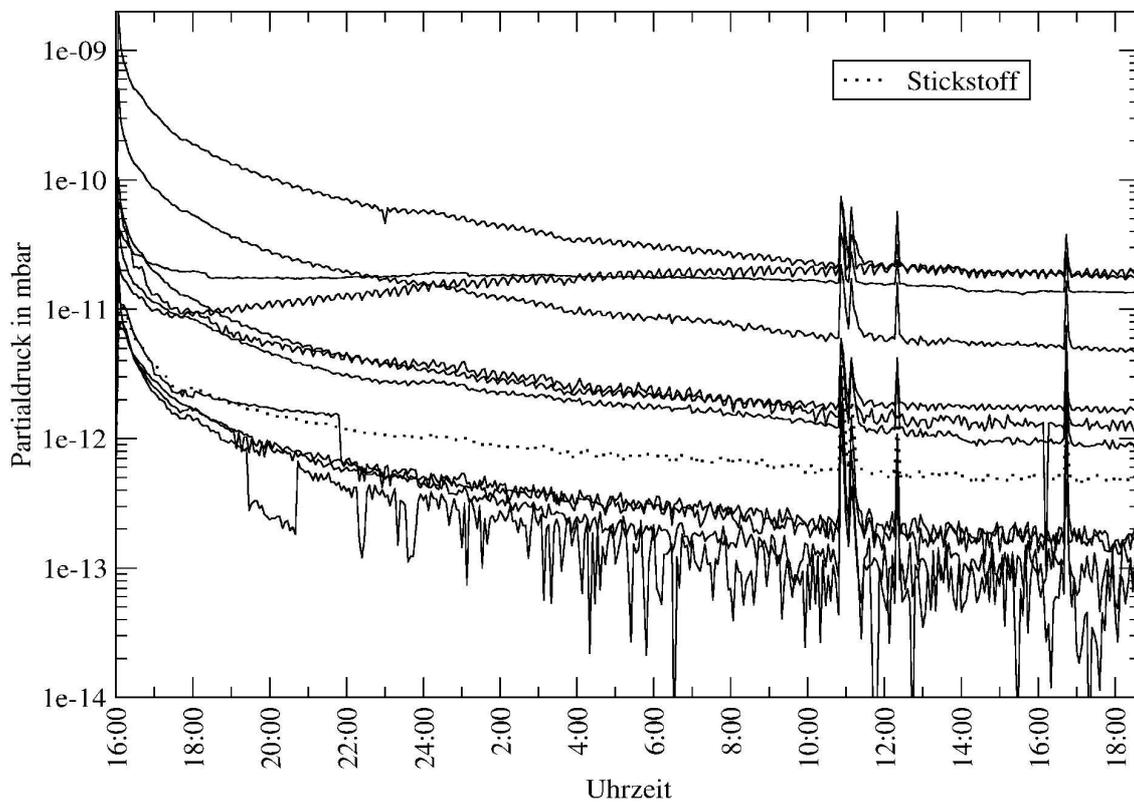
Zunächst ist es allerdings im Rahmen der Untersuchung üblich, die sogenannte Wassertreppe anzugeben, die das Massenspektrum der verschiedenen Wasserionen zeigt. Nachdem wir den Bereich der Schleusenkammer mehrere Stunden evakuiert hatten, aber noch vor dem Ausheizen, erhielten wir das folgende Diagramm der „Wassertreppe“:



Während des Ausheizens haben wir die Partialdrücke der 12 in Tabelle 1 angegebenen Stoffe für 24 Stunden verfolgt. Da eine übersichtliche Kennzeichnung in diesem Diagramm sehr schwierig ist, haben wir nur Stickstoff explizit gekennzeichnet.

Partialdruckverlauf während des Ausheizens

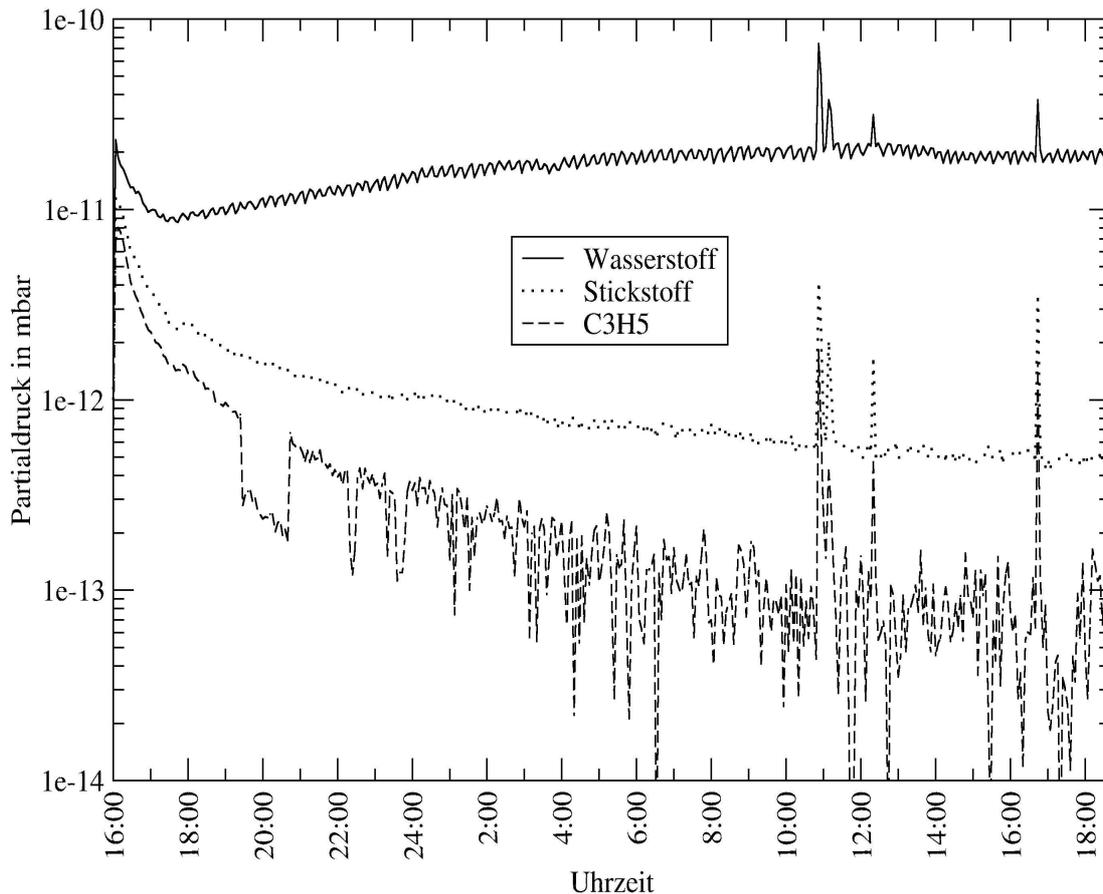
Gesamtansicht aller 12 beobachteten Gase



An diesem Verlauf wird deutlich, daß sich die meisten Gase sehr ähnlich verhalten. Der Verlauf des Druckabfalles um 1 bis 2 Größenordnungen über unseren Meßzeitraum gleicht dem des Stickstoffes. Allerdings zeigen einige Gase ein anderes Verhalten. Ihren Verlauf haben wir daher im folgenden Diagramm noch einmal gesondert untersucht:

Partialdruckverlauf während des Ausheizens

(Wasserstoff, Stickstoff, CH-Verbindung)



Zunächst fällt ein spontaner Druckanstieg für alle Gase (auch im vorherigen Diagramm) um ca. 11 Uhr und um ca. 17 Uhr auf. Offensichtlich rührt dies jedoch von Arbeiten an der UHV-Apparatur her. Solche spontanen Anstiege können z. B. Durch das Einschalten der Bayard-Alpert-Röhre entstehen, da die auf der Kathode absorbierten Stoffe durch das Aufheizen in die Gasphase übergehen und erst wieder abgepumpt werden müssen. Diesen Effekt konnten wir schon während der Untersuchung des Vakuums vor dem Ausheizen beobachten.

Weiterhin zeigt Wasserstoff ein atypisches Verhalten. Nach einem Druckabfall kommt es wieder zu einem Druckanstieg auf den Wert vor Beginn des Ausheizens. Dann bleibt der Druck über den gesamten Zeitraum weitgehend konstant. Die Ursache hierfür liegt in der Pumpcharakteristik von Turbomolekularpumpen begründet. Besonders für sehr leichte Gase wie Wasserstoff ist die Druckdifferenz, die diese Pumpen erzeugen können, um bis zu 3 Größenordnungen kleiner als im Vergleich zu Stickstoff oder Kohlendioxid (siehe [5]). Es kommt also zu einem Rückstrom dieser Gase durch die Pumpe, bis sich ein Gleichgewicht eingestellt hat. Daher bleibt der Partialdruck über die Zeit konstant.

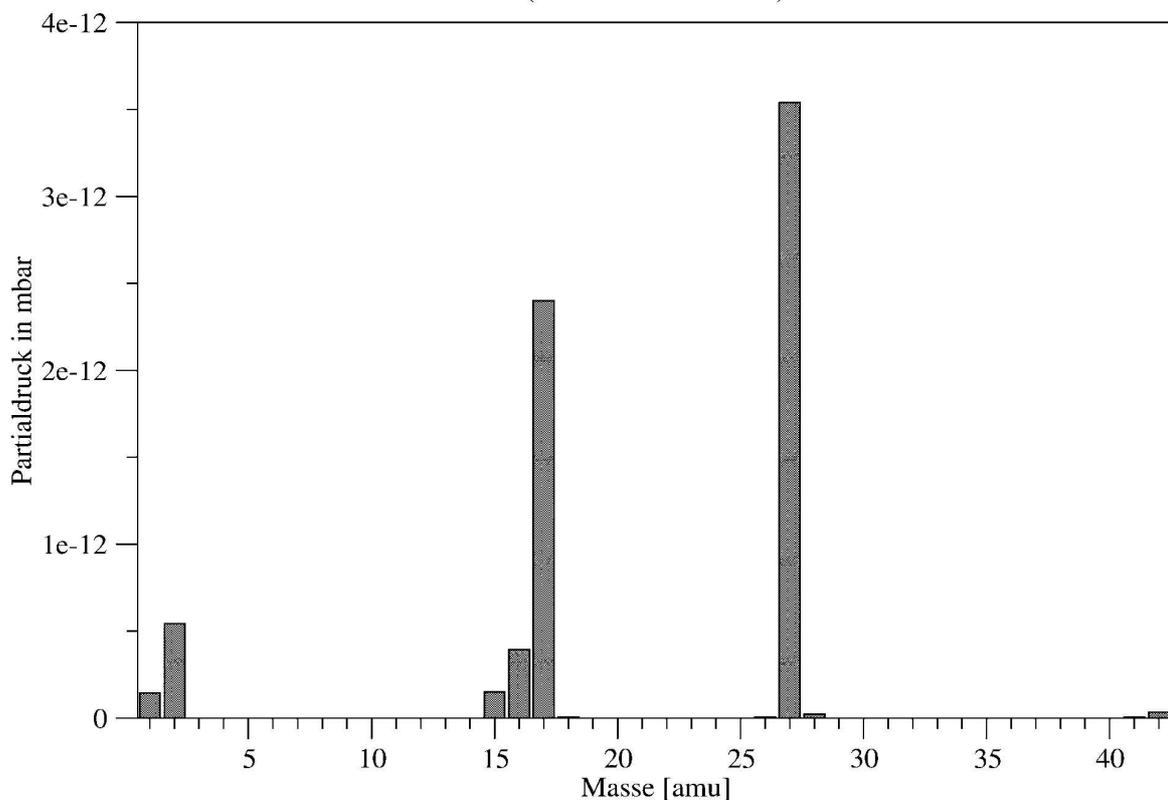
Das andere Gas aus dem vorhergehenden Diagramm, das einen ähnlichen Druckverlauf wie Wasserstoff hat, besitzt die Massenzahl 27. Es macht in der ausgeheizten Anlage den größten Anteil aus. Wir haben diese Massenzahl der Kohlenwasserstoffverbindung C_2H_3 zugeordnet. Als Ursache für diese kurze CH-Kette vermuten wir Bruchstücke des verwendeten Pumpenöls unserer ölgelagerten Turbomolekularpumpe. Sie wurde während des Ausheizens ebenfalls stark erwärmt. Gemäß der Herstellerangabe stellt dies bis $100\text{ }^\circ\text{C}$ kein Problem dar. Damit steigt allerdings auch der Dampfdruck für die CH-Verbindungen des Pumpenöls an sowie die Wahrscheinlichkeit, daß sich aus den langen CH-Ketten des Öls solch kurze Bruchstücke bilden. Um die exakte Zuordnung vornehmen zu können, müßten wir die Herstellerangaben in bezug auf das verwendete Öl untersuchen oder als Vergleich eine trockengelagerte TMP heranziehen.

Der Druckverlauf von C_3H_5 bewegt sich an der Grenze der Meßgenauigkeit unserer Anlage. Es kommt daher in den Bereichen, wo der Meßbereich (die Größenordnung) umgeschaltet wird, zu Sprüngen im Druckverlauf. Besonders zum Ende hin zeigt sich ein sehr ausgefrannter Verlauf. In diesem Bereich kann das Massenspektrometer also maximal noch zur Abschätzung der Größenordnung oder Zehnerpotenz des Partialdruckes dienen. Diese Meßgrenze liegt im Aufbau unseres Massenspektrometers begründet. Mit einer hochwertigeren (und teureren) Ionenquelle und einer empfindlicheren Auswerteeinheit (SEV statt Faraday-Cup) ließe sich die Meßgenauigkeit auch in diesem Bereich noch weiter erhöhen. Für unsere Zwecke war sie ausreichend.

Nach dem Ausheizen zeigte das Massenspektrum die folgende Charakteristik:

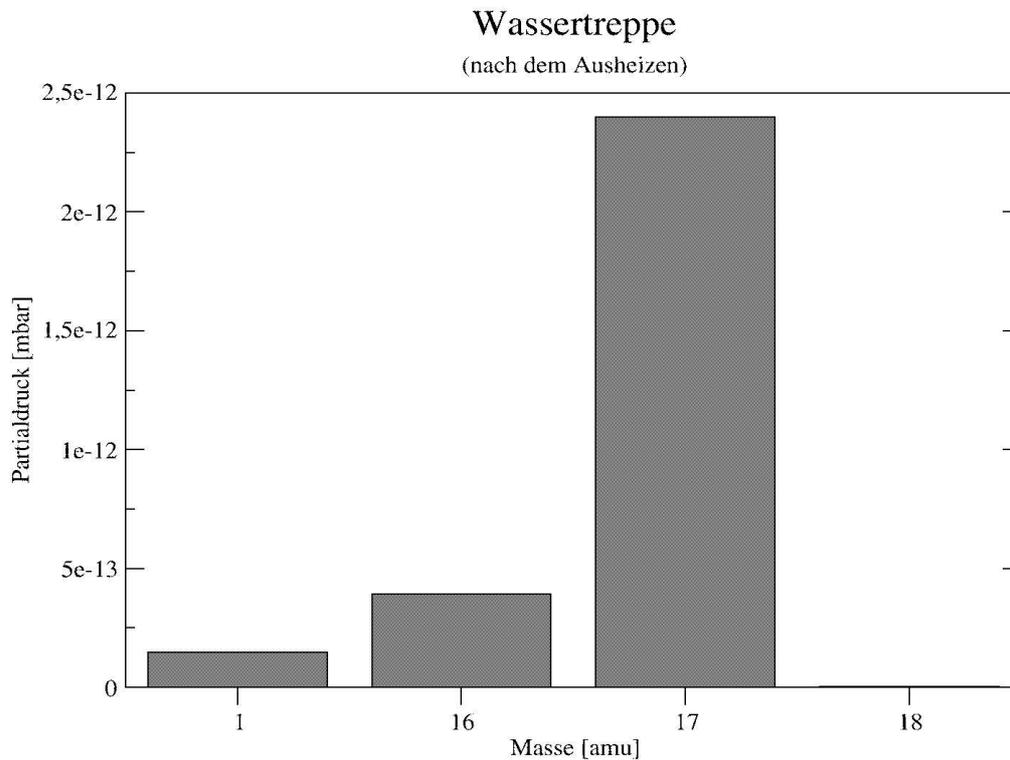
Massenspektrum der UHV-Anlage

(nach dem Ausheizen)



Insgesamt sind alle Druckwerte nach Abkühlen der Anlage natürlich noch einmal gesunken. Vor allem ist das Wasser ausreichend aus der Anlage entfernt worden, so daß sein Anteil zum Restdruck nicht mehr bedeutend ist. Ohne das Ausheizen müßten die Pumpen mehrere Wochen laufen, um ein solch gutes Vakuum zu erhalten.

Der Verlauf der Wassertreppe nach dem Ausheizen sieht wie folgt aus:



Insgesamt konnte der Partialdruck für Wasser durch das Ausheizen um den Faktor 900000 gesenkt werden.

2.4 Transfer des Probenhalters in LEED-Kammer und Spalten des Kristalls

Der Aufbau des Transfersystems ist in Anlage 2 skizziert. Über die Zwischenstation in einem Karussell haben wir unseren Probenhalter in der LEED-Kammer transferiert. Dort haben wir unsere Probe so platziert, daß mit einem gezielten senkrechten Stoß des Transferstabes auf den Aluminium-Spalthebel unsere Probe gespalten werden konnte.

Da TiTe_2 ein Schichtkristall ist, in dem die Schichten nur durch Van-Der Waals-Kräfte zusammengehalten werden, war dazu nur wenig Kraft erforderlich. Das Spalten verlief erfolgreich, wir haben eine saubere Spaltfläche erhalten.

Nun haben wir das Kristall optimal positioniert und ausgerichtet, um mit den Beugungsmessungen langsamer Elektronen beginnen zu können.

2.5 Beugungsbild der Oberfläche des Einkristalles, reziproke Gittervektoren des hexagonalen Gitters, Orientierung des Kristalls

Der erste Teil dieser Aufgabe besteht darin, die reziproken Gittervektoren des hexagonalen Gitters zu berechnen. Wir werden im folgenden die Basisvektoren des direkten Gitters mit \vec{a}_1, \vec{a}_2 und \vec{a}_3 bezeichnen. Die reziproken Gittervektoren erhalten die Bezeichnung \vec{g}_1, \vec{g}_2 und \vec{g}_3 .

Die allgemeine Formel für reziproke Gittervektoren lautet:

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad \text{und zyklisch} \quad (4)$$

Außerdem gilt:

$$\vec{g}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (5)$$

Die Basisvektoren des hexagonalen Gitters in kartesischen Koordinaten schreiben sich gemäß [6], Seite 86 und 100 wie folgt:

$$\vec{a}_1 = a(1, 0, 0) \quad \vec{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right) \quad \vec{a}_3 = c(0, 0, 1)$$

In einer kleinen Nebenrechnung (siehe Anlage 4) erhält man mit den Formeln (4) und (5) die folgenden reziproken Gittervektoren:

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1)$$

Das reziproke Gitter eines hexagonalen Gitters ist also wieder ein hexagonales Gitter (siehe auch [6], Seite 99, Abb. 3.27).

Auf dem Leuchtschirm der LEED-Apparatur konnten wir ein Bild in Sechseckform beobachten. Daher schließen wir auf eine (0001)-Orientierung unseres Kristalls (siehe [6], Seite 105, Abb. 3.32).

2.6 Zusammenhang zwischen Gitterkonstante und Elektronenenergie (Geometrie der LEED-Apparatur beachten), Gitterkonstante berechnen

Die Ewald-Kugel im reziproken Gitter veranschaulicht die Streubedingung $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}$. Es treten Beugungsreflexe auf, wenn die Kugel durch einen Punkt des reziproken Gitters geht. Um diese Beugungsmaxima zu kennzeichnen, genügen die ersten beiden LAUE-Gleichungen, da die Oberfläche in Richtung der Flächennormalen keine Periodizität aufweist (u. a. durch die geringe Eindringtiefe der Elektronen in das Kristall). Mit den entsprechenden Wellenvektoren erhalten wir die ersten beiden LAUE-Gleichungen ($h, k \in \mathbb{N}$):

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2\pi h \quad \text{und} \quad \vec{a}_2 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2\pi k \quad (6)$$

Die Differenz der beiden Wellenvektoren $\vec{k} - \vec{k}_0$ wird als Streuvektor $\Delta \vec{k}$ bezeichnet, er besitzt die drei Komponenten $\Delta \vec{k}_1, \Delta \vec{k}_2$ und $\Delta \vec{k}_3$. Bei Beugungsprozessen an Oberflächen kann die dritte Komponente $\Delta \vec{k}_3$, die senkrecht auf der Oberfläche steht, ebenso wie die dritte LAUE-Gleichung unberücksichtigt bleiben. Der aus den beiden verbleibenden Komponenten aufgebaute zweidimensionale Vektor liegt in der gleichen Ebene wie die Gittervektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 und wird als Streuvektor $\Delta \vec{k}_{\parallel}$ bezeichnet. Die Komponente $\Delta \vec{k}_1$ liegt dabei in Richtung des Vektors \vec{a}_1 , die Komponente $\Delta \vec{k}_2$ in Richtung des Vektors \vec{a}_2 . Damit ergibt sich für die LAUE-Gleichungen:

$$\vec{a}_1 \cdot \Delta \vec{k}_1 = 2\pi h \quad \text{und} \quad \vec{a}_2 \cdot \Delta \vec{k}_2 = 2\pi k \quad (7)$$

Zusammen mit Formel (5) können wir also schreiben:

$$\vec{G} = h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 \quad (8)$$

Wie bereits erwähnt entsprechen die Beugungsmaxima auf dem Schirm den Schnittpunkten der reziproken Gittervektoren mit der Ewaldkugel. Ihr Radius ist gegeben durch:

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}_e^2}{2m_e} \rightarrow k_e = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}} \quad (9)$$

Der direkte Zusammenhang zwischen der Ewald-Kugel und dem LEED-System zeigt sich sehr schön in Abbildung 3.6.1 auf Seite 131 in [7]. Aus der Geometrie der Anordnung ergibt sich die weitere Beziehung:

$$|\vec{G}| = k_e \cdot \sin \gamma \quad (10)$$

Hierbei beschreibt der Winkel γ den Öffnungswinkel unserer LEED-Apparatur, wenn die Beugungspunkte genau auf dem Rand liegen. Gemäß Herstellerangabe beträgt der gesamte Öffnungswinkel des LEED-Systems 52° (siehe Anlage 3). Die Gitterkonstante a ist in den reziproken Gittervektoren \vec{g}_1 und \vec{g}_2 enthalten. Zur Vereinfachung führen wir daher 2 weitere Vektoren ein:

$$\vec{g}_1' = \frac{a}{2\pi} \vec{g}_1 = \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \vec{g}_2' = \frac{a}{2\pi} \vec{g}_2 = \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad (11)$$

Aus den Formeln (8), (9), (10) und (11) erhalten wir daher:

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a} |h \vec{g}_1' + k \vec{g}_2'| = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}} \sin \gamma \quad (12)$$

Mit $\gamma = 52^\circ$ und $E = eU$ (U - Beschleunigungsspannung der Elektronen) können wir eine Formel zur Bestimmung der Gitterkonstanten a angeben:

$$a = \frac{2\pi}{\sin \gamma} \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e e U}} |h \vec{g}_1' + k \vec{g}_2'| \quad (13)$$

Wir konnten bei verschiedenen Beschleunigungsspannungen U ein Beugungsbild auf dem Rand des Schirmes beobachten. Nun müssen wir die dazu passenden Parameter h und k finden. Unsere Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle aufgeführt:

U in V	92	115	164	200	215	95	116	167	201	216
h	2	0	1	3	2	1	0	1	3	2
k	2	4	4	3	4	3	4	4	3	4
a in 10^{-10} m	3,747	3,870	3,713	3,812	3,744	3,838	3,853	3,679	3,803	3,736

Der Mittelwert unserer Werte für die Gitterkonstante a beträgt $3,7796 \cdot 10^{-10}$ m, allerdings schwanken sie um bis zu $0,1 \cdot 10^{-10}$ m, so daß unser Ergebnis lautet:

$$a = (3,8 \pm 0,1) 10^{-10} \text{ m}$$

Gemäß *Structure Data of Elements, Part 2*, Seite 416, No. 15 Te(2)Ti beträgt die Gitterkonstante $a=3.777 \cdot 10^{-10}$ m. Unser Ergebnis überdeckt mit dem Fehlerbereich den Referenzwert und stimmt erfreulich gut damit überein.

2.7 Periodizität des Kristalls senkrecht zur Oberfläche, c-Parameter, Laue-Gleichungen, inneres Potential des Kristalls, Madelung-Verfahren

Für die Intensität des (00)-Reflexes ist die dritte Lauegleichung entscheidend. Sie lautet für ein Maximum:

$$\vec{a}_3(\vec{k}-\vec{k}_0)=2\pi l$$

Hierbei ist l eine ganze Zahl, \vec{a}_3 steht senkrecht auf der Oberfläche und ist parallel zum Wellenvektor $\vec{K}=k-k_0$, dieser beschreibt einen der Wellenlänge des Elektronenstrahles im Kristall entsprechenden Gittervektor. Wegen $\vec{K} \parallel \vec{a}_3$ entfallen die Vektoren, nur die Beträge sind entscheidend und $|\vec{a}_3|=c$. Wir können also einfacher schreiben:

$$c \cdot K = 2\pi l$$

Der Wellenvektor K ist muß allerdings erst durch das Madelung-Verfahren bestimmt werden, denn sein Betrag enthält ein noch unbekanntes Potential V_0 :

$$K^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - V_0)$$

Die Spannung, bei der wir ein Maximum erwarten, bestimmt sich also durch:

$$U = \frac{\hbar^2}{2m_e e c^2} l^2 + \frac{V_0}{e}$$

Es ergibt sich also eine Formel der Form $y=ax^2+b$. Das Potential ist in b enthalten, den Gitterparameter c erhält man aus dem Anstieg a . Die Herausforderung beim Fit der Meßwerte besteht nun darin, den Spannungswerten die passenden ganzen Zahlen l zuzuordnen.

Bei dieser Zuordnung haben wir den Meßwert bei $U=145V$ gestrichen und unsere gemessenen Spannungen wie folgt zugeordnet:

l	3	4	5	6	7	8	9	10	11
U in V	80	112	123	168	250	278	316	386	459

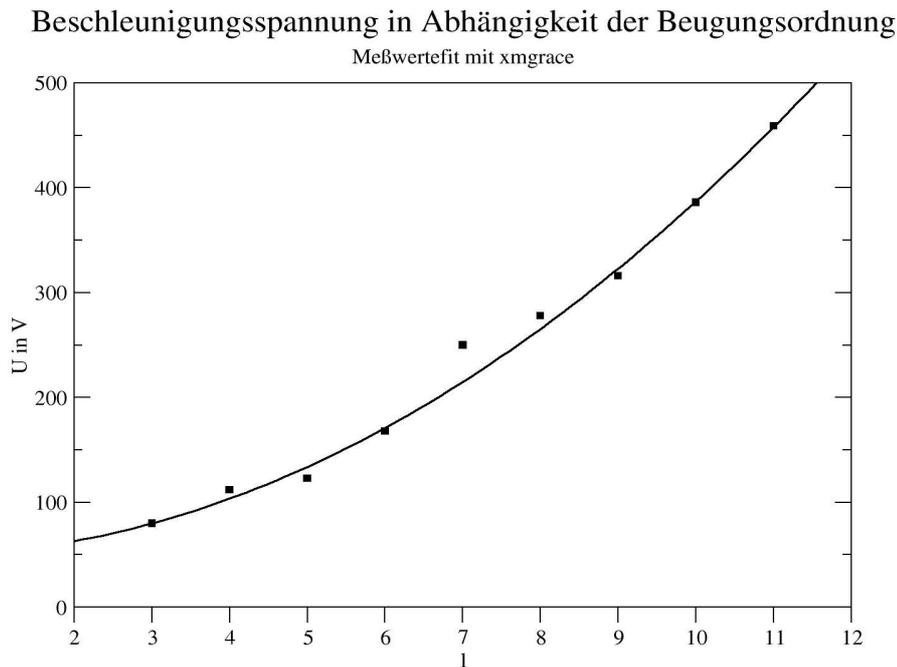
Wir erhalten die Werte $a = (3,36 \pm 0,15) V$ und $b = (54 \pm 9) V$ als Parameter des Geradenausgleiches. Damit ergibt sich für die Gitterkonstante und das Potential:

$$c = (6,7 \pm 0,3) 10^{-10} m$$

$$V_0 = (54 \pm 9) eV$$

Unser Fehlerintervall überdeckt noch den Literaturwert mit $c = 6,495 \cdot 10^{-10}$ m (aus *Structure Data of Elements, Part 2*, Seite 416, No. 15 Te(2)Ti).

Die Anpassung an die Meßdaten haben wir mit `xmgrace` vorgenommen. Dieses Programm gibt auch eine graphische Rückmeldung, wie gut die Anpassung gelungen ist. Das wird in der folgenden Graphik deutlich:



Literatur

- [1] Balzers, *Partialdruckmessung in der Vakuumtechnik*, Balzers AG, Liechtenstein
- [2] Ibach, Lüth, *Festkörperphysik*, Springer-Verlag, Berlin, 1990
- [3] *Praktikumsversuch UHV-Technik und LEED: Hinweise und Erläuterungen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 1998
- [4] C.J. Davisson, L.H. Germer: *Nature* **119**, 558 (1927); *Phys. Rev.* **30**, 705 (1927)
- [5] M. Wutz, H. Walcher: *Theorie und Praxis in der Vakuumtechnik*, Friedrich Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 1992
- [6] R. Herrmann, U. Preppernau: *Elektronen im Kristall*, Akademie-Verlag, Berlin, 1979
- [7] M. Henzler, W. Göpel: *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Teubner, Stuttgart, 1994