

3.6 Beugungsmethoden

3.6.1 Beugung von niederenergetischen Elektronen (Low Energy Electron Diffraction)

Die Beugung niederenergetischer Elektronen ist eine Standardmethode zur Analyse von Oberflächenstrukturen. Hier soll nur ein Überblick gegeben werden. Für tiefere Betrachtungen wird auf die Literatur, z.B. [Ertl1985] verwiesen. Bei dieser Methode ist die Periodizität der Oberflächenstrukturen von maßgeblicher Bedeutung. Es kommen Elektronen mit einer Energie zwischen 20 eV und 500 eV zur Anwendung, so dass die deBroglie-Wellenlänge im Bereich von wenigen Ångström liegt. Das entspricht im Allgemeinen den Atomabständen im Festkörper. Die deBroglie-Wellenlänge ist gegeben durch:

$$\lambda_{el} = \frac{h}{p_{el}} = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_{el} \cdot E_{kin,el}}} \quad (3.6.1.1)$$

Aufgrund der geringen Eindringtiefe der Elektronen in den Festkörper wird das Problem zunächst in nur zwei Dimensionen betrachtet. Fällt eine ebene Welle unter einem Winkel nahe 90° auf eine periodische Struktur (atomares Gitter), so interferieren die von den Oberflächenatomen ausgehenden Elementarwellen konstruktiv, wenn der Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist. Das heißt, die Bedingung für die konstruktive Interferenz lautet:

$$m \cdot \lambda_{el} = (n_1 \cdot a_1 + n_2 \cdot a_2) \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0), \quad (3.6.1.2)$$

mit m , n_1 und n_2 ganzen Zahlen, \vec{s} dem Einheitsvektor in Richtung der ausfallenden und \vec{s}_0 dem Einheitsvektor in Richtung der einfallenden Welle. Um diese Bedingung zu erfüllen

$$\frac{2 \cdot \pi \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0)}{\lambda_{el}} = h_1 \cdot \vec{a}_1^* + h_2 \cdot \vec{a}_2^*, \quad (3.6.1.3)$$

betrachtet man den reziproken Raum. Es muss gelten:

$$\vec{k} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \vec{s}_i}{\lambda_{el}} \quad (3.6.1.4)$$

wobei die linke Seite von 4.6.1.3 den Verbindungsvektor im reziproken Raum darstellt. Mit der Definition des Wellenvektors der jeweiligen ebenen Welle:

erhält man:

$$(\vec{k} - \vec{k}_0) = h_1 \cdot \vec{a}_1^* + h_2 \cdot \vec{a}_2^*, \quad (3.6.1.5)$$

als Bedingung für konstruktive Interferenz. In Worten, die Differenz der Wellenvektoren muss im reziproken Raum ein Verbindungsvektor sein. Mit der oben genannten Bedingung, dass die Eindringtiefe der Elektronen bei den verwendeten Energien sehr gering ist und somit nur

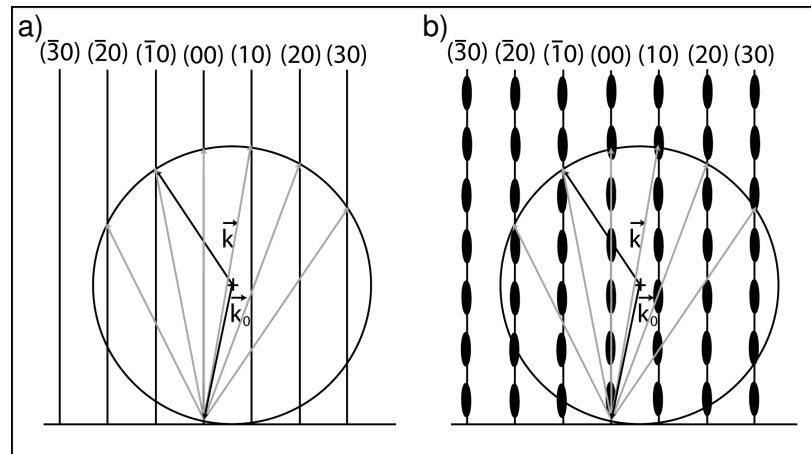


Abb. 3.6.1.1

- a) Darstellung der Ewald-Kugel, unter der Annahme, dass die Elektronen nur an der ersten Atomlage gestreut werden.
- b) Darstellung der Ewald-Kugel, für den Fall, dass die Elektronen auch an weiteren Atomlagen gestreut werden. Man erhält verschieden starke Beugungsreflexe (starke bei (00), (10) und (30), schwächere bei $(\bar{2}0)$, $(\bar{1}0)$ und (20)).

die oberste Atomlage betrachtet werden muss, erhält man, dass die dritte Raumrichtung im reziproken Raum Stangen ergibt. Diese stehen im Impulsraum senkrecht auf der Oberfläche. Dabei entstehen Beugungsmaxima immer dann, wenn der Differenz- oder Streuvektor $(\vec{k} - \vec{k}_0)$ auf einer der eben beschriebenen Stangen liegt und auf einer weiteren oder derselben endet. Die im Folgenden beschriebene Konstruktion zur geometrischen Bestimmung der Beugungsmaxima wird als Ewald-Kugel bezeichnet. Nimmt man jetzt eine Kugel mit dem Radius k_0 um den Anfangspunkt des Vektors \vec{k}_0 so erhält man immer dann einen Beugungsreflex, wenn die Kugeloberfläche eine Stange schneidet. Die Ewaldkugel wird in Abb. 3.6.1.1 a) für eine Richtung dargestellt. In b) sind die Stangen strukturiert dargestellt, was den Fall berücksichtigt, dass die Elektronen tief genug in die Oberfläche eindringen, um an weiteren Atomlagen gestreut zu werden. Diese Berücksichtigung ist notwendig, um zu erklären, warum die Beugungsreflexe in der Realität für verschiedene Elektronenenergien variieren.

Bei der in dieser Arbeit verwendeten LEED-Apparatur handelt es sich um ein sogenanntes „SPA-LEED“, wobei das SPA für „Spot Profile Analysis“ steht. Es unterscheidet sich insofern von einer einfachen LEED-Apparatur, dass es die Beugungsreflexe nicht auf einem gekrümmten Schirm abbildet, sondern die gestreuten Elektronen in einem Channeltron zählt. Um nun den gesamten Impulsraum abbilden zu können, ist es nötig den Elektronenstrahl in das fest installierte Channeltron zu lenken. Das wird mit zwei elektrischen Oktopollinsen realisiert. Da sowohl der einfallende, als auch der ausfallende Strahl von den Linsen beeinflusst wird, variiert auch der Winkel, unter dem die Elektronen auf die Probe treffen. Gemessen werden kann nur bei einem festen Winkel zwischen einfallendem und ausfallendem Elektronenstrahl. Die Ewald-Konstruktion ändert sich dadurch in der Weise, dass sie um den Endpunkt von \vec{k}_0 gedreht wird.

Die Verwendung des SPA-LEEDs ermöglicht damit quantitative Aussagen über die Signalprofile. Vertieft wird das Thema in [Scheithauer1986] und [Gronwald1982].

3.6.2 Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion

(Reflecting High-Energy Electron Diffraction)

Das RHEED wird analog zum LEED zur Untersuchung von periodischen Strukturen verwendet. Dabei unterscheiden sich die beiden Methoden nicht nur durch die Energie der verwendeten Elektronen, sondern auch durch die Geometrie. Während bei einer LEED-Apparatur die Elektronen nahezu unter einem Winkel von 90° auf die Oberfläche treffen, findet dies beim RHEED im so genannten streifendem Einfall ($<5^\circ$) statt. Dadurch ist das RHEED besonders gut geeignet um das Probenwachstum *in situ* zu beobachten. Bei der verwendeten Apparatur konnte die Energie zwischen 10 keV und 50 keV variiert werden. Daraus ergeben sich Wellenlängen zwischen $0,122 \text{ \AA}$ und $0,055 \text{ \AA}$. Unter Berücksichtigung des Einfallswinkels ergibt sich eine Oberflächensensitivität ähnlich der LEED-Apparatur. Beobachtet wird das Beugungsmuster in der Umgebung des spekularen (direkt reflektierten) Strahls. Die Konstruktion der Beugungsreflexe erfolgt mit der Ewald-Kugel analog zu denen der LEED-Reflexe (s. Abb. 3.6.1.1). Die Reflexe liegen auf so genannten Laue-Kreisen. Bei glatten Oberflächen erhält man scharfe Punkte, die auf den Laue-Kreisen liegen. Ist die Probe sehr rau durchdringt der Elektronenstrahl die Strukturen und es bildet sich ein Bild das aus einem Schnitt der Ewald-Kugel mit dem dreidimensionalen reziproken Gitter besteht. Es entsteht ein Volumenbild. Ein solches Volumenbild wurde verwendet, um den Schmelzpunkt der Bismutinseln in Kapitel 4.7 zu bestimmen. Unterscheiden kann man die Volumenreflexe von den Oberflächenreflexen durch Drehen der Probe. Die Volumenreflexe erscheinen und erlöschen dabei einfach, während die Oberflächenreflexe wie auf Stangen wandern, drehen sich die Laue-Kreise um den spekularen Reflex. Der Vollständigkeit halber sollen hier auch polykristalline Proben kurz erwähnt werden. Von ihnen erhält man keine einzelnen Reflexe, sondern Ringstrukturen. Diese können analog zur Pulverdiffraktometrie ausgewertet werden. Abschließend ist noch zu erwähnen, dass sowohl beim LEED, als auch beim RHEED keine direkte Messung der Atomabstände möglich ist, sondern diese durch Vergleiche mit bekannten Strukturen ermittelt werden müssen. Die Analyse der RHEED-Bilder wurde mit einer Digitalkamera und der Software „Safire“ vorgenommen. Für weitergehende Betrachtungen wird auf die Literatur verwiesen, z. B. [Henzler1994] und [Hernandez-C.1983].