

The primes meaning that such matrix elements are calculated with single particle functions of the rearranged selfconsistent potential where one particle is in the state $A' \neq A$. This is expected to lower the quasiparticle energies compared to the eigenvalue differences for a constant potential. That correction of order A^{-1} will probably go in the same direction in each matrix element and therefore the summation may lead to an appreciable effect. Calculations of $\overline{r^2}$ from $\Sigma |\psi|^2$ while putting the last particle in a level that was not occupied in the ground state, gave mean square radii which sometimes were increased by about one percent. Hence one should consider the influence of very slight fluctuations of the nuclear density, especially near closed shells. This may be justified to some extent also in analogy to the periodic system of elements where large fluctuations of the atomic radii occur at closed shells. In Fig. 3 some lead isotopes are considered for a quantitative example. Since the eigenvalues are very sensitive to variations of r_0 while the other parameters are kept fixed, a one half percent deviation of the selfconsistent radius from the $R = r_0 A^{1/3}$ line gives a remarkable (1 MeV) effect. An assumed density dependence near the neutron number 126 as given in the upper curve in Fig. 3 leads to a smoothed dependence of the last filled level on the particle numbers as is shown in the lower part of that figure. Here a constant potential depth U was assumed, since a reasonable δU for a simultaneous r_0 variation gives only a smaller correction. After all, the rearrangement is expected to be of order 1 MeV. Hence it would be question-

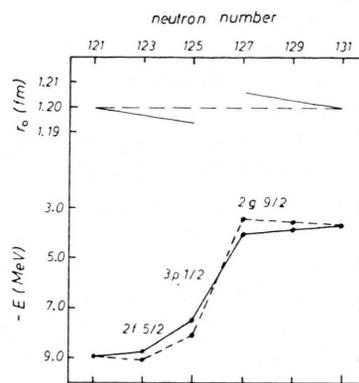


Fig. 3. Last filled levels in Pb isotopes.

able to draw quantitative conclusions on potential depths or nonlocalities from a comparison with single particle excitation energies which are about 1 to 3 MeV.

In conclusion, one should keep in mind that only rather sophisticated investigations of residual effects can enable a satisfactory quantitative comparison of the experimental levels near the FERMI surface with single particle energy differences. Such investigations, however, are reasonably done with eigenfunctions of nonlocal single particle potentials that give account of the data also at energies further removed from the FERMI level.

We thank Professor H. J. MANG for discussions, the Deutsches Rechenzentrum Darmstadt for performing calculations on the IBM 7090 and the Deutsche Forschungsgemeinschaft for sponsoring the computations. One of us (H. M.) acknowledges a scholarship of the Stiftung Volkswagenwerk.

Beugung langsamer Elektronen an kugelförmigen Kupfer-Kristallen mit unberührter Oberfläche

E. MENZEL

Institut A für Physik der Technischen Hochschule
Braunschweig

O. SCHOTT

I. Physikalisches Institut der Technischen Hochschule
Darmstadt

(Z. Naturforschg. 20 a, 1221—1223 [1965]; eingegangen am 26. Juli 1965)

Die Beugung langsamer Elektronen wurde durch die schon von EHRENBURG¹ benutzte und von GERMER und Mitarbeitern² vervollkommnete Leuchtschirm-

Beobachtung zu einer vielfach verwendeten Methode bei der Untersuchung von Oberflächen. Silicium und Germanium haben dabei Oberflächenstrukturen gezeigt, die aus ihrem Raumgitter nicht unmittelbar zu verstehen sind^{3, 4}. Metalle dagegen liefern Beugungsbilder, die ihren Raumgittern entsprechen⁵. Adsorption von Gasen auf reinen Oberflächen führt zu Beu-

¹ W. EHRENBURG, Phil. Mag. 18, 878 [1934].

² L. H. GERMER u. C. D. HARTMAN, Rev. Sci. Instr. 31, 784 [1960].

³ R. E. SCHLIER u. H. E. FARNSWORTH, J. Chem. Phys. 30, 917 [1959].

⁴ J. J. LANDER u. L. MORRISON, J. Chem. Phys. 33, 729 [1962].

⁵ siehe z. B. L. H. GERMER, A. U. MACRAE u. C. D. HARTMAN, J. Appl. Phys. 32, 2432 [1961].



gungsbildern, die in manchen Einzelheiten, besonders in ihrer Abhängigkeit von der Elektronenenergie, noch nicht gedeutet sind⁶. Die Wechselwirkung der langsamen Elektronen mit dem Kristallgitter ist so stark, daß die vorliegenden Ansätze der Dynamischen Theorie nicht ohne weiteres benutzt werden können.

Bei den bisherigen Untersuchungen wurden stets ebene Oberflächen mit niedriger kristallographischer Indizierung verwendet. Umfassendere Informationen sind aber bei kugelförmigen Kristallen zu erwarten; hier können Oberflächen beliebiger Orientierung an einem Präparat untersucht werden; dadurch ist die Gleichförmigkeit der Präparation besser gesichert als an verschiedenen Präparaten; dazu wird der Zeitaufwand für Präparation und Pumpen sehr verringert. Bei Problemen der Epitaxie fördern die Erscheinungen auf den Vizinalflächen oft das Verständnis für das Geschehen auf den Hauptflächen.

In verschiedenen Untersuchungen hatten sich schon früher kugelförmige Metallkristalle bewährt, die im Vakuum durch Erstarren von Schmelztropfen entstanden waren^{7, 8}. Ihre Oberfläche ist unberührt von jeder physikalischen oder chemischen Präparation. Sie erfüllen gut die Forderungen an ungestörte Oberflächen: wenig chemische Verunreinigungen, geringe Konzentration an strukturellen Baufehlern und Glätte. Mit solchen Kristallen wurden jetzt Versuche zur Beugung langsamer Elektronen unternommen.

Die Kupferproben wurden zunächst im Hochvakuum (unter 10^{-5} Torr) auf Wolframträgern aufgeschmolzen und entgast; sie erstarren hier zu Einkristallen von etwa 5 mm Durchmesser; diese haften auf dem Wolframträger⁷. Die Proben wurden in die Beugungsapparatur umgesetzt und bei einem Druck unter $1 \cdot 10^{-9}$ Torr (Vac-Ion-Pumpe) erneut aufgeschmolzen. Die Beugungseinrichtung entspricht der Anordnung von GERMER; zunächst wurde mit ebenen Netzen und einem ebenen Leuchtschirm gearbeitet. Der Kristall kann im Ultrahochvakuum um zwei Achsen gegen den Primärstrahl gedreht und in einer Ebene senkrecht zum Primärstrahl verschoben werden. Der Primärstrahl hat auf dem Kristall einen Durchmesser von etwa 1 mm, er bedeckt also eine Kugelkappe mit einem Zentriwinkel von etwa 20° .

Unmittelbar nach dem Erstarren können Beugungsreflexe beobachtet werden. Durch Verkippen und Verschieben des Kristalls gelingt es leicht, Reflex-

anordnungen von vierzähliger oder dreizähliger Symmetrie einzustellen. Sie zeigen an, daß der Primärstrahl auf Würfelpole oder auf Oktaederpole gefallen ist. Eine Einstellung auf einen bestimmten Pol ist sehr genau, wenn kristallographisch äquivalente Reflexe ihre Intensitätsmaxima bei der gleichen Elektronenenergie erreichen. Durch Änderung der Elektronenenergie können die verschiedenen Reflexbilder hervorgerufen werden, die nach dem reziproken Gitter des kubisch-flächenzentrierten Kupfers zu erwarten sind. Zusätzliche Reflexe, die auf eine Umordnung der Atome in der Oberfläche infolge Gasadsorption oder anderer Verunreinigung schließen ließen, wurden weder unmittelbar nach dem Aufschmelzen noch nach einer mehrwöchigen Standzeit des Kristalles bei einem Druck unter $1 \cdot 10^{-9}$ Torr beobachtet.

Abb. 1 zeigt die beobachteten Beugungsbilder bei einer Elektronen-Energie von etwa 100 eV für eine Anzahl von Polen. Diese Bilder gehen durch Drehen des Kristalles auseinander hervor, sie lassen sich mit Hilfe des reziproken Gitters verstehen. Für die Indizierung wurden die Reflexe des Raumgitters gewählt. Eine Indizierung als Flächengitter-Reflexe erscheint weniger günstig, weil sich das dafür nötige Koordinatensystem mit der kristallographischen Orientierung der Oberfläche ändert; dadurch wird

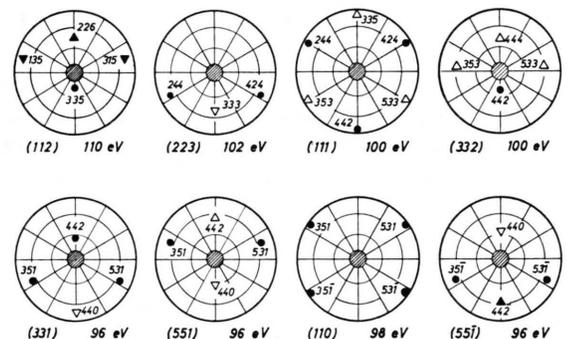


Abb. 1. Vom Leuchtschirm skizzierte Beugungsreflexe eines kugelförmigen Kupfer-Kristalls. Einstrahlung von Elektronen der Energie eU auf verschiedene Pole (hkl); sie wurden nacheinander eingestellt durch Drehung des Kristalls um $[1\bar{1}0]$. Die Elektronenenergie wurde in der Nähe von 100 eV so gewählt, daß mindestens ein Reflex maximale Intensität zeigte. \blacktriangle , \triangle : Mittlere bzw. schwache Intensität, zunehmend mit steigender Elektronenenergie; \blacktriangledown , \triangledown : Mittlere bzw. schwache Intensität, abnehmend mit steigender Elektronenenergie. \bullet : Maximale Intensität; Auf dem Leuchtschirm sichtbarer Bereich der Beugungswinkel etwa 6° bis 33° . Zwischenkreise bei 15° und 25° .

⁶ A. U. MACRAE, Surface Sci. **1**, 319 [1964].

⁷ E. MENZEL, Optik **10**, 407 [1953].

⁸ E. MENZEL, Rep. Progr. Phys. **26**, 47, The Institute of Physics, London 1963.

der Vergleich von Beugungsbildern verschiedener Pole sehr erschwert.

Bei kleinen Spannungsänderungen bewegen sich alle Reflexe relativ zu einem Zentrum, das dem Spiegelreflex an der Oberfläche entspricht; es macht sich also keine Facettierung der Oberfläche bemerkbar. Die Spannungsänderung, die ein Reflex erträgt, ohne im Untergrund zu verschwinden, ist ein Maß für die Länge seines Intensitätsbereichs (Stäbchen) im reziproken Gitter. Diese Stäbchen stellen die Schärfe dar, mit der die dritte LAUE-Bedingung erfüllt ist; ihre Länge wächst mit fallender Eindringtiefe der Elektronen in die Oberfläche. Da die Stäbchen senkrecht auf der Kristalloberfläche stehen, werden sie bei kugelförmigen Kristallen zu Doppelkegeln, deren Scheitel mit den Punkten des reziproken Gitters zusammenfallen; der Kegelswinkel ist gleich dem Zentriwinkel des bestrahlten Bereichs auf der Kristallkugel. Wenn sich mit veränderter Spannung die EWALD-Kugel vom Kegelscheitel entfernt, sollte bei kugelförmigen Kristallen der Durchmesser des Reflexes größer werden; damit nimmt zugleich seine Erkennbarkeit ab, denn der Elektronenstrom des Reflexes wird jetzt auf einen größeren Raumwinkel verteilt. Die Stäbchenlänge ist also scheinbar verringert gegenüber der Beugung an ebenen Präparaten. Dieses Verhalten konnte beobachtet werden.

Die Kugelgestalt sollte sich auch in einer anderen Weise auswirken: Verschiebt man den Kristall senkrecht zum Elektronenstrahl, so wird ein Oberflächenbereich getroffen, der im Mittel nicht mehr senkrecht zum Strahl liegt; die Orientierung des reziproken

Gitters bleibt dabei erhalten, die Stäbchen bzw. Kegelsachsen drehen sich jedoch. Dadurch sollten sich alle die Reflexe verschieben, für die die EWALD-Kugel nicht durch den Scheitel geht. Diese Verschiebung sollte parallel sein zur Translation des Kristalls für die Reflexe, deren Scheitel außerhalb der EWALD-Kugel liegen. Reflexe mit Scheiteln innerhalb der EWALD-Kugel sollten sich in Gegenrichtung verschieben. Eine solche Umkehr der Bewegungsrichtung bei Änderung der Strahlspannung wurde beobachtet. Dabei tritt das Stillstehen der Reflexe bei Spannungen U_S auf, die ohne jede Korrektur aus der BRAGGSchen Gleichung folgen. Die Intensitätsmaxima der Reflexe wurden hingegen bei Spannungen U_{max} beobachtet, die um ΔU kleiner sind als U_S . Die Werte von ΔU liegen zwischen 7 und 22 V; sie lassen bisher noch keine gesicherte systematische Abhängigkeit für verschiedene Pole und Reflexe erkennen. Da U_S unmittelbar aus der BRAGGSchen Gleichung folgt, liegt die Vermutung nahe, dies sei eine Folge der Interferenz von Elektronen, die nur an der Oberfläche gestreut sind. Der Einfluß der 3. LAUE-Bedingung kann auch ohne Eindringen der Elektronen unter die Oberfläche verstanden werden aus den Stufen⁹ an der Oberfläche, wie sie bei der Kugelgestalt der Kristalle zu erwarten sind.

Herrn Prof. Dr. W. WADELICH danken wir sehr, daß er die Weiterführung der Arbeit in seinem Institut ermöglichte und sie mit großzügiger apparativer Hilfe unterstützte.

⁹ J. J. LANDER u. L. MORRISON, J. Appl. Phys. **34**, 3517 [1963].

Lichtelektrische Austrittspotentiale an kugelförmigen Kupferkristallen mit unberührter Oberfläche

P. KÖHLER

I. Physikalisches Institut der Technischen Hochschule
Darmstadt

E. MENZEL

Institut A für Physik der Technischen Hochschule
Braunschweig

(Z. Naturforschg. **20 a**, 1223—1225 [1965]; eingegangen am 26. Juli 1965)

Die Empfindlichkeit des lichtelektrischen Effekts gegenüber dem Zustand der untersuchten Oberfläche ist seit langem bekannt¹. Da bisher manche Ergebnisse, etwa an Kupfer, nicht eindeutig sind, wurden

Untersuchungen an Kristallen mit unberührter Oberfläche^{2,3} unternommen. Diese Proben erlauben zugleich Aussagen über den Einfluß der kristallographischen Orientierung. Weiter wurde die Wirkung von Adsorptionsschichten und von einer künstlich erhöhten strukturellen Fehlordnung untersucht.

Unberührte Kupferkristalle wurden zunächst im Hochvakuum (unter 10^{-5} Torr) hergestellt durch Erstarren eines Schmelztropfens auf einem strombeheizten Wolframband²; ein Temperaturgradient sorgt für den Beginn der Erstarrung von einem

¹ H. SIMON u. R. SUHRMANN, Der Lichtelektrische Effekt und seine Anwendungen, Springer-Verlag, Berlin 1958.

² E. MENZEL, Optik **10**, 407 [1953].

³ E. MENZEL, Rep. Progr. Phys. **26**, 47, The Institute of Physics, London 1963.