

Elektronenbeugung an Vizinalflächen und an Kugelflächen von Einkristallen

H. MELLE und E. MENZEL

Institut B für Physik der Technischen Universität Braunschweig
Abteilung für Grenzflächenphysik

(Z. Naturforsch. 27 a, 420—425 [1972]; eingegangen am 5. November 1971)

Herrn Prof. Dr. K. MOLIÈRE zu seinem 60. Geburtstag gewidmet

Electron Diffraction of Vicinals and of Spherically Shaped Crystal Surfaces

The reciprocal lattice of a periodic terrace-ledge surface is calculated by Fourier transformation. This formalism is applied to spherical crystals. In that case the reciprocal lattice consists of bundles of finite streaks; their vertices are situated on the reciprocal lattice points of the bulk crystal. That confirms a model formerly used to discuss LEED experiments with spherical crystals. The calculation is generalized to describe terraces composed of several monolayers.

Der Einfluß der kristallographischen Orientierung auf das physikalische und chemische Verhalten von Grenzflächen läßt sich oft besser verstehen, wenn nicht nur niedrig indizierte Flächen untersucht werden, sondern die gesamte Vielfalt der Orientierungen. Versuche an kugelförmigen Kristallen haben sich hier mannigfach bewährt¹. Beispiele liefern etwa die Epitaxie oder Adsorption bei Reaktionen zwischen Kupfer oder Silber mit Sauerstoff. Flächen höherer Indizierung lassen sich als Vizinalen zu niedrig indizierten Flächen auffassen; sie werden dann als eine äquidistante Folge von atomaren Stufen angesehen. In der Oberfläche von Kristallkugeln, die atomar glatt sind, ändert sich der Stufenabstand monoton.

Die Beugung von mittelschnellen oder langsamen Elektronen in Reflexion ist hier ein bewährtes Hilfsmittel. Trotz vielversprechender Ansätze einer genaueren Theorie ist man bei der Auswertung von Versuchen meist noch auf die kinematische Beschreibung der Elektronenbeugung angewiesen, wie sie in der ersten Bornschen Näherung zur Verfügung steht. In dieser Näherung besteht Fourier-Reziprozität zwischen dem Streupotential des Kristalls und der Beugungsamplitude. Diese Fourier-Reziprozität liefert zu einem plausiblen Strukturmodell das reziproke Modellgitter. Dieses Gitter wird verglichen mit dem reziproken Gitter, das aus dem Experiment folgt. Da bei der Errechnung des reziproken Modellgitters die Mehrfachstreuung nicht berücksichtigt wird, lohnt es nicht, Intensitätsmessungen zur Strukturbestimmung heranzuziehen. Nur aus dem Auftreten

oder Fehlen von Reflexen und allenfalls aus qualitativen Intensitätsangaben werden die experimentierten reziproken Gitter konstruiert.

Zum Verständnis der Elektronenbeugung an Vizinalen und kugelförmigen Oberflächen soll im folgenden das reziproke Gitter von gestuften Kristallflächen durch Fourier-Transformation errechnet werden. Die Beugungsbilder ergeben sich dann aus der Konstruktion nach Ewald. Die charakteristischen Unterschiede für verschiedene Richtungen des Primärstrahls und für langsame und mittelschnelle Elektronen folgen aus den verschiedenen Lagen und Radien der Ewald-Kugel. Dieses Problem wurde mit etwas anderem Ansatz und mit gleichem Ergebnis von ELLIS und SCHWOEBEL² behandelt. RHEAD und PERDEREAU³ benutzten ein graphisches Verfahren. Wir halten die vorliegende Lösung für übersichtlicher und für allgemein anwendbar.

Vizinalflächen

Die Modellstruktur (Abb. 1) besteht aus Terrassenflächen mit niedriger Indizierung und äquidistanten Stufen. Der Einfachheit halber bilde die Elementarmasche der Atome in der Terrasse ein Rechteck mit den Kantenlängen a und b ; seine eine Kante sei parallel zur Stufenkante. Der Übergang zu kom-

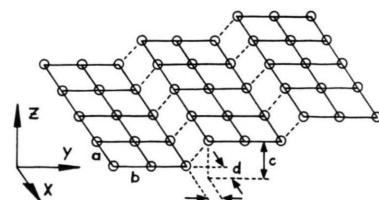


Abb. 1. Modell einer Vizinalfläche.

Reprint requests to Prof. Dr. E. MENZEL, Institut B für Physik der Techn. Universität Braunschweig, D-3300 Braunschweig, Mendelssohnstraße 1, Postfach der TU: 7050.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

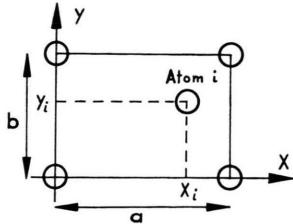


Abb. 2. Die Elementarmasche in der Terrassenfläche.

plizierteren Maschen bringt keine grundsätzliche Schwierigkeit. In der Elementarmasche (Abb. 2) liegen $I+1$ Atome mit den Koordinaten $x_i y_i$. Eine Terrasse enthält M bzw. N Maschen in x - bzw. y -Richtung. $g_i(x, y, z)$ sei die räumliche Verteilung des Streupotentials für das Atom i . Die Verteilung des Streupotentials $\tilde{g}(x, y, z)$ innerhalb einer Terrasse ist das Faltungsprodukt aus g_i und den Punkt-

lagen der Atome; diese werden dargestellt durch eine Summe von Dirac-Funktionen (Dirac-Kamm):

$$\tilde{g}(x, y, z) = \sum_{i=0}^I \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M g_i * \delta[x - m a - x_i] \cdot \delta[y - n b - y_i] \cdot \delta[z - t c] . \quad (1)$$

Nun werden die folgenden reduzierten Koordinaten eingeführt: $\xi_i = x_i/a$; $\eta_i = y_i/b$.

$$\tilde{g}(x, y, z) = \sum_{i=0}^I \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M g_i * \delta[x - (m + \xi_i) a] \cdot \delta[y - (n + \eta_i) b] \cdot \delta[z - t c] . \quad (2)$$

Die Nullpunkte der Maschen in zwei aufeinanderfolgenden Terrassen haben in x -Richtung den Abstand d , in y -Richtung $N b + e$ und in z -Richtung c (Stufenhöhe). c/e ist die „Steilheit“ der Stufe. Das Streupotential der gesamten beugenden Atomanordnung von $T+1$ Terrassen wird dargestellt durch

$$g(x, y, z) = \sum_{t=0}^T \sum_{i=0}^I \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M g_i * \delta[x - (m + \xi_i) a - t d] \cdot \delta[y - (n + \eta_i) b - t(N b + e)] \cdot \delta[z - t c] . \quad (3)$$

Für die folgende Rechnung werde die Ausdehnung des Terrassensystems als groß vorausgesetzt gegenüber der Breite $N b + e$ der Einzelterrasse, also gilt $M, T \gg N$. Die Anzahl der bei der Beugung kohärent zusammenwirkenden Perioden M und T bestimmt die Reflexbreite im Beugungsbild. Diese wird weniger durch die von Elektronen getroffene Periodenzahl bedingt als vielmehr von dem Kohärenzintervall der Bestrahlung durch eine ausgedehnte Elektronenquelle. Dieses Intervall beträgt entsprechend der Wellenlänge und der Qualität der Elektronenoptik 10^2 bis 10^4 Å. Da der Einfluß der Quellengröße gesondert diskutiert werden muß, ist es bei der vorliegenden Arbeit gerechtfertigt, die Summation über m und t zwischen unendlichen Grenzen zu führen.

Das reziproke Gitter ergibt sich aus einer Fourier-Transformation von $g(x, y, z)$. Es wird dargestellt von der Beugungsamplitude $F(R_x, R_y, R_z)$. Seine Ortskoordinaten R_x, R_y, R_z sind die Raumfrequenzen des Terrassensystems, sie sind proportional zu den Kehrwerten seiner Perioden a, b, c .

$$F(R_x, R_y, R_z) = \iiint_{-\infty}^{\infty} g(x, y, z) \exp[2\pi j(R_x x + R_y y + R_z z)] dx dy dz . \quad (4)$$

g wird mit unendlichen Summationsgrenzen für m und t aus (3) in (4) eingesetzt und die Reihenfolge von Integration und Summation vertauscht. f_i ist die Fourier-Transformierte von g_i , also die richtungsabhängige Atomformamplitude. Ein konstanter Faktor und der Rutherford-Nenner der Beugungsamplitude werden im folgenden nicht angeschrieben.

$$F = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \sum_{i=0}^I \sum_{n=0}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_i \int \delta[x - (m + \xi_i) a - t d] e^{2\pi j R_x x} dx \cdot \int \delta[y - (n + \eta_i) b - t(N b + e)] e^{2\pi j R_y y} dy \cdot \int \delta[z - t c] e^{2\pi j R_z z} dz . \quad (5)$$

Nach Beachten des Verschiebungstheorems bei Fourier-Transformation folgt

$$F = \sum_t \sum_i \sum_n \sum_m f_i \exp\{2\pi j R_x [(m + \xi_i) a + t d]\} \cdot \exp\{2\pi j R_y [(n + \eta_i) b + t(N b + e)]\} \exp\{2\pi j R_z t c\} . \quad (6)$$

Umordnung der Summanden ergibt

$$F = \sum_{i=0}^I f_i \exp\{2\pi j[R_x \xi_i a + R_y \eta_i b]\} \sum_{n=0}^N \exp\{2\pi j n R_y b\} \\ \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp\{2\pi j R_x m a\} \sum_{t=-\infty}^{\infty} \exp\{2\pi j t[R_x d + R_y (N b + e) + R_z c]\}. \quad (7)$$

Die Summe über m kann als Fourier-Reihe eines Dirac-Kamms angesehen werden.

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp\{2\pi j m a R_x\} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta[a R_x - \mu]. \quad (8)$$

μ durchläuft alle ganzen Zahlen. Die Summe über t in (7) wird analog behandelt, der Dirac-Kamm habe hier die Laufzahl τ . (7) wird dann zu

$$F = \sum_{i=0}^I f_i \exp\{2\pi j[\xi_i a R_x + \eta_i b R_y]\} \sum_{n=0}^N \exp\{2\pi j n b R_y\} \\ \cdot \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \delta[a R_x - \mu] \cdot \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta[d R_x + (N b + e) R_y + c R_z - \tau]. \quad (9)$$

Analog zur gewohnten Beugung an Kristallgittern lässt sich F als Produkt von mehreren Strukturamplituden darstellen:

$$F(R_x, R_y, R_z) = F_1 \cdot F_2 \cdot F_3; \quad F_1 = \sum_{i=0}^I f_i \exp\{2\pi j[\xi_i a R_x + \eta_i b R_y]\} \quad (10), \quad (11)$$

ist die Strukturamplitude der Elementarmasche in einer Terrasse.

$$F_1 \cdot F_2 = F_1 \cdot \sum_{n=0}^N \exp\{2\pi j n b R_y\} = F_1 e^{\pi j N b R_y} \cdot \frac{\sin \pi (N+1) b R_y}{\sin \pi b R_y} \quad (12)$$

ist die Strukturamplitude für eine Reihe von Maschen über die Breite der Terrasse. Aus dieser Reihe baut sich das beugende Objekt durch unendliche Translation auf. Damit ist eine solche Reihe die Zelle der Gesamtstruktur.

$$F_3 = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \delta[a R_x - \mu] \cdot \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta[d R_x + (N b + e) R_y + c R_z - \tau] \quad (13)$$

ist die Gitteramplitude der Gesamtstruktur. Die ganzen Zahlen μ und τ sind Lauesche Indizes der Beugungsreflexe für das Terrassensystem.

Voraussetzung für das Auftreten eines Beugungsreflexes ist zunächst $F_3 \neq 0$. Daraus folgen die notwendigen Bedingungen

$$a R_x - \mu = 0, \quad d R_x + (N b + e) R_y + c R_z - \tau = 0. \quad (14), \quad (15)$$

Die Summen der δ -Funktionen in (13) bezeichnen nur den Ort im reziproken Gitter, an dem Reflexe auftreten können. Dieser Ort ist durch (14) und (15) definiert.

(14) und (15) definieren Scharen von parallelen Geraden, auf denen als Reflexionsbereiche die bekannten Stäbchen liegen. Die Stäbchen haben eine verschwindende Dicke. Die Verteilung der Reflexintensität auf den Geraden im reziproken Gitter wird durch $J(R_x, R_y, R_z) = |F_1 \cdot F_2|^2$ beschrieben.

$$J(R_x, R_y, R_z) = \left| \sum_{i=0}^I f_i \exp\{2\pi j[\xi_i a R_x + \eta_i b R_y]\} \right|^2 \cdot \left| \frac{\sin \pi (N+1) b R_y}{\sin \pi b R_y} \right|^2. \quad (16)$$

Beugungsbilder von ebenen Vizinalflächen werden am besten graphisch diskutiert. Hierfür zeichnet man verschiedene Schnitte durch das reziproke Gitter und trägt darin sowohl die Bedingungen (14) bis (16) ein als auch die Schnittlinien der Ewald-Kugel. Gemeinsame Schnittpunkte kennzeichnen die zu erwartenden Beugungsreflexe.

Kugelflächen

Das Beugungsverhalten von kugelförmigen Kristallen wird in seinen Grundzügen deutlich, wenn man zunächst nur die durch (14) und (15) beschriebenen Geraden betrachtet, wenn man also vorerst die Intensitätsverteilung auf den Stäbchen (16) unbedacht läßt.

Die Terrassenstruktur (Abb. 1) geht für $N = \infty$ oder für $c = 0$ in ein ebenes Netz über, welches in der niedrig indizierten Ebene des Kristalls liegt. Dann wird (15) von R_z unabhängig, und die Bereiche des reziproken Gitters entarten erwartungsgemäß zu unbegrenzten Stäbchen senkrecht zum Ortsnetz.

Für eine allgemeine Terrassenstruktur lauten die Gleichungen der Geraden, auf denen die Stäbchen liegen, nach (14) und (15)

$$a R_x = \mu; \quad c R_z = -(N b + e) R_y - d R_x + \tau. \quad (17)$$

Der Neigungsfaktor $-(N b + e)/c$ in der $R_y - R_z$ -Ebene und die Bedingung $R_x = \text{const}$ zeigen, verglichen mit Abb. 1, daß die Stäbchen senkrecht auf der durch das Terrassensystem definierten Vizinalen stehen, also auch senkrecht zu den Stufenkanten. Das entspricht dem gewohnten Verhalten der Stäbchen. Auf Kristallen in Form von Zylindern mit Achsen in x -Richtung ändert sich die Breite $N b + e$ der Terrassenstufe monoton. Entsprechend zur Neigung der Vizinalen drehen sich die Stäbchen, wenn man sich in der $y - z$ -Ebene auf dem Großkreis einer Kristallkugel bewegt. Dabei drehen sich die Stäbchen mit bestimmtem μ und τ um feste Punkte R^0 . Diese Punkte erhält man unter der Bedingung, daß (17) unabhängig von N ist.

$$a R_x^0 = \mu; \quad R_y^0 = 0; \quad c R_z^0 = \tau - d R_x^0. \quad (18)$$

Die Beziehungen zwischen den Laueschen Indizes $\mu \tau$ der Geraden und den Indizes hkl für das massive Kristallgitter seien am Beispiel eines rhombisch primitiven Gitters betrachtet: Die Terrassenflächen seien Quaderflächen. Die konventionellen Achsen des reziproken Gitters R^G für den massiven Kristall und die Achsen des reziproken Gitters R für das Terrassensystem seien in diesem Beispiel parallel; dabei gilt $d = e = 0$ und $I = 0$. Zu dem massiven Gitter gehören Punkte des reziproken Gitters bei

$$R_x^G = h/a; \quad R_y^G = k/b; \quad R_z^G = l/c.$$

Diese Punkte liegen auf den durch (17) dargestellten Geraden, was sich durch Einsetzen von $R^G = R$

in (17) zeigt. Daraus folgt für die Indizes der Geraden und die des massiven Kristalls der Zusammenhang

$$\mu = h; \quad \tau = N k + l. \quad (19)$$

Da N ganzzahlig ist, können sämtliche Indizes in (19) alle ganzen Zahlen annehmen. Durch einen Punkt hkl geht ein Büschel von Stäbchen, die sich durch ihre Zahlen N und im allgemeinen auch durch τ unterscheiden. Nur für $k = 0$ haben die Stäbchen eines Büschels denselben Index $\tau = l$. Analoge Aussagen lassen sich für kompliziertere massive Gitter gewinnen; dann werden sich die Perioden der Terrassenstruktur und die Gitterkonstanten des massiven Gitters unterscheiden. Sind die Terrassenflächen nicht mehr Würfel- oder Quaderflächen des massiven Gitters, dann liegen die Achsen der reziproken Gitter R und R^G nicht mehr parallel. Auch in solchen Fällen sind die durch den Strukturfaktor erlaubten Punkte hkl Scheitelpunkte für Büschel von Stäbchen.

Bei der Beugung von langsamten Elektronen an kugelförmigen Kupferkristallen⁴ hatten sich zur Deutung der Beugungsbilder Doppelkegel als Elemente des reziproken Gitters bewährt. Auch dort lagen die Kegelscheitel auf den Punkten hkl für das massive Gitter. Die Öffnungswinkel der Kegel waren gleich dem Zentriwinkel des von Elektronen bestrahlten Sektors der Kristallkugel. Bei der Beschreibung mit der Ewaldschen Konstruktion lieferte dieses reziproke Gitter sowohl den beobachteten Gang der Reflexintensität mit der Strahlspannung als auch bestimmte fokussierende Eigenschaften der kugelförmigen Kristalloberfläche. Die vorliegende Arbeit begründet mit den zu Büscheln geordneten Stäbchen die früher benutzten Doppelkegel eingehender.

Im Schnittbereich der Stäbchen müßten grundsätzlich die Beugungsamplituden addiert werden, die zu den einzelnen Stäbchen gehören, die also von benachbarten Terrassensystemen mit unterschiedlichem N stammen. Das Kohärenzintervall der Beleuchtung des Kristalls mit Elektronen ist aber klein gegen den von Elektronen getroffenen Kristallbereich. Das rechtfertigt eine Addition der von den einzelnen Vizinalen herrührenden Intensitäten.

(16) beschreibt die Intensitätsbelegung der Geraden im reziproken Gitter. Bei einem rhombisch primitiven Gitter liegen die Hauptmaxima der Intensitäten bei

$$b R_y = \nu \quad (20)$$

mit ganzzahligem ν . ν ist neben μ und τ der dritte Lauesche Index der dreidimensionalen Terrassenstruktur, die aber nur monatomar belegt ist. Dieser Spezialfall zeigt, daß die Punkte maximaler Intensität auf den Stäbchen zusammenfallen mit den Punkten hkl für das massive Gitter. Als Ergänzung zu (19) ergibt sich

$$\nu = k. \quad (19 \text{ a})$$

Entsprechend dem Gitterfaktor bei der Beugung an dünnen Kristallplatten ist die Beugungsintensität nach (16) nicht streng auf ganzzahlige ν beschränkt. Zwischen den mit μ , τ , ν bezeichneten Hauptmaxima liegen schwache Nebenmaxima. Die erste Nullstelle der Intensität neben einem Hauptmaximum hat von diesem den Abstand

$$\Delta R_y = 1/b(N+1); \quad (21)$$

dabei betrachtet man nur die Projektion des Stäbchens auf die R_y -Richtung. Die halbe Länge L des Stäbchens längs der durch (17) beschriebenen Geraden beträgt dann für unseren Spezialfall

$$L = [(\Delta R_y)^2 + (\Delta R_z)^2]^{1/2} = \frac{N}{N+1} \left(\frac{1}{N^2 b^2} + \frac{1}{c^2} \right)^{1/2}. \quad (22)$$

ΔR_z folgt mit $d = e = 0$ aus (17), und es gilt $\Delta R_x = 0$.

Bei Vizinalen mit großem N , also mit geringer Neigung gegen die Terrassenfläche, wird $L = 1/c$. Da in realen Atomgittern großenordnungsmäßig gilt $a \approx b \approx c$, ist hier die Länge der Stäbchen für beliebiges N immer von der Größenordnung des Nachbarabstandes reziproker Gitterpunkte des massiven Kristalls.

Terrassen mit S Monoschichten

Unser Modell und der entwickelte Formalismus erfassen auch den Fall, daß die Terrassenstruktur nicht nur aus einer Monoschicht gebildet wird, sondern daß S untereinander liegende Schichten mit gleicher Streuamplitude an der Elektronenbeugung beteiligt sind. Das soll in aller Kürze für ein rhombisch primitives Gitter entwickelt werden mit Quadratflächen als Terrassenflächen. Die Terrassenstruktur wird aufgebaut von Monoschichten der Breite $N_S b$. Von dieser Breite bildet der Anteil $N_T b$ die freie Terrassenfläche. Der Anteil $(N_S - N_T) b$ wird von der darüberliegenden Monoschicht bedeckt. Damit gilt

$$N_S = S \cdot N_T. \quad (23)$$

Das Modell (Abb. 1) und der Formalismus werden diesem Modell gerecht, wenn man in allen Gleichungen setzt

$$e = -b(N_S - N_T), \quad (24)$$

und an Stelle der Summationsgrenze N nun die Grenze N_S setzt. So steht auch in (12), (16), (17) N_S an Stelle von N . (17) wird zu

$$a R_x = \mu; \quad c R_z = -N_T b R_y - d R_x + \tau. \quad (25)$$

Die Anordnung der Stäbchen im reziproken Gitter ist dieselbe wie für das Terrassenmodell aus einer Monoschicht. Die Projektion der Stäbchen in R_y -Richtung hat analog zu (21) ein erstes Minimum bei

$$\Delta R_y = 1/b(N_S + 1). \quad (26)$$

Die Länge $2L$ der Stäbchen folgt analog zu (22) aus (25) und (26)

$$2L = 2 \frac{N_T}{N_S + 1} \left(\frac{1}{N_T^2 b^2} + \frac{1}{c^2} \right)^{1/2}. \quad (27)$$

Unter Berücksichtigung von (23) ersieht man aus (27), daß L etwa mit $1/S$ geht.

Es ist nicht schwierig, auch dieses Modell auf kompliziertere Strukturen anzuwenden. Aber schon dieses einfache Modell zeigt das Grundsätzliche.

Bei der Beugung von 60 keV-Elektronen an Kugelflächen von kugelförmigen Metallkristallen, z. B. Ag⁵, zeigt das Experiment längliche Laue-Reflexe senkrecht zur Kristalloberfläche. In der Nähe des Primärflecks ist die Länge der Reflexe von der Größenordnung der Reflexabstände. Das ist ein Hinweis dafür, daß zumindest die Elektronen, die streifend zur Oberfläche einfallen und an Netzebenen gebeugt werden, die etwa parallel zur Oberfläche liegen, eine Eindringtiefe von nur wenigen oder sogar nur einer Atomlage besitzen. Das ist im Einklang mit der Erfahrung, daß mittelschnelle Elektronen monatomare Oberflächenstrukturen nachweisen können^{5, 6}.

Als Erweiterung ist ein Modell wichtig, bei dem die Stufenhöhe größer ist als eine Monoschicht. Ein solches Modell enthält neben den oben verwendeten Terrassenflächen eine weitere Schar von mit Atomen besetzten Ebenen. Diese liegen schräg zu den Terrassen der ersten Art und können als Terrassen zweiter Art aufgefaßt werden. Erst mit einem solchen Relief aus Terrassenflächen lassen sich alle Flächen einer kristallographischen Zonengemeinschaft und auch Vergrößerungen erfassen. Eine solche Darstellung hatte sich bei der Diskussion der Epitaxie auf Kugelkristallen bewährt⁷.

- ¹ E. MENZEL, Rept. Progr. Phys. **26**, 47 [1963].
² W. P. ELLIS u. R. L. SCHWOEBEL, Surf. Sci. **11**, 82 [1968].
³ G. E. RHEAD u. J. PERDEREAU, in: Colloque International sur la Structure et les Propriétés des Surfaces des Solides, Paris 1969.
⁴ E. MENZEL u. O. SCHOTT, Z. Naturforsch. **20 a**, 1221 [1965]. — E. MENZEL u. O. SCHOTT, Surf. Sci. **8**, 217 [1967]. — O. SCHOTT, Z. Angew. Physik **22**, 63 [1967].
⁵ H. MELLE, E. MENZEL u. J. ZAUNERT, Phys. Stat. Sol. (a) **1**, 85 [1970].
⁶ L. TREpte, Chr. MENZEL-KOPP u. E. MENZEL, Surf. Sci. **8**, 223 [1967].
⁷ Chr. MENZEL-KOPP, Z. Naturforsch. **21 a**, 1247 [1966].

Dynamical Interaction of Electron Waves in a Perfect Single Crystal

G. LEHMPFUHL

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin-Dahlem

(Z. Naturforsch. **27 a**, 425—433 [1972]; received 11 November 1971)

Dedicated to Prof. Dr. K. MOLIÈRE on his 60-th birthday

Electron diffraction from a perfect single crystal shows the influence of many-beam interaction. Investigations with a single crystal wedge allow a direct analysis of the Bloch-waves which are displayed into their partial waves. The strength of the dynamical interactions in a MgO crystal wedge was investigated by comparing the photographic record of a section through the dispersion surface with many-beam calculations. For a direction of the incident beam near the [110] zone axis the interaction of at least 50 beams has to be taken into account. Using a 50-beam calculation the structure potential V_{111} was determined to 1.80 volts $\pm 3\%$.

The influence of many-beam interactions on the absorption and the extinction fringe profiles in electron micrographs is discussed. Analysis of extinction fringes on the basis of a 50-beam approximation allowed the determination of the mean absorbing potential V_0^{im} of MgO to 0.7 volts $\pm 10\%$.

The electron diffraction pattern from an undistorted perfect single crystal shows very clearly the influence of many-beam interactions. The more accurate the experimental observations become the more accurate the approximations of the dynamical theory have to be, in order to understand and to interpret the diffraction figures. This was already shown in convergent beam investigations¹ where diffraction diagrams were obtained from parallel sided undistorted crystal regions of only 150 Å to 200 Å in diameter. The probability of finding an undistorted region increases with decreasing diameter of the investigated crystal area. The analysis of the Kossel-Möllenstedt diffraction pattern was done by a many-beam approximation using computer methods. The information from complicated dynamic diffraction diagrams allows an accurate determination of the low-indexed structure potentials and the absorbing potential, provided the applied approximation of the dynamical theory is sufficiently accurate. Low-indexed structure potentials contain information on the binding of the atoms in the crystal. Comparison of accurate experimental

observations with calculations for different models are of some interest.

In a perfect crystal with periodic potential the incident plane wave generates wave fields or Bloch-waves, which are a superposition of plane waves². The wave vectors of the partial waves in the crystal are connected with the vacuum wave vector by the boundary conditions. These Bloch-waves are separated into different plane waves when the exit surface of the crystal is not parallel to the entrance surface. Consequently, a more direct analysis and observation of the dynamical effects is possible in the diffraction experiment with a crystal wedge.

In the diffraction diagram the strongest partial waves can be observed as a fine structure of the reflections. Their separation is related to the crystal potential. This was shown in many papers for two beam situations in MgO³. Since each fine structure spot represents a point on the dispersion surface, the dynamical interaction of many beams in an undistorted single crystal can be seen very clearly in a photographic record of a section through the dispersion surface⁴. On the other hand each fine-structure spot represents one wave field, containing information on the absorption coefficient of this particular wave field. The absorption coefficients of the