

Optische Simulation der Doppelbeugung bei LEED

Heinz Hilferink, Claus Klingshirn und Klaus Müller

Lehrstuhl für Festkörperphysik der Universität
Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. **29 a**, 1512–1513 [1974];
eingegangen am 16. August 1974)

Optical Simulation of Double Diffraction in LEED

Double diffraction in optical simulation is a useful tool for the interpretation of LEED patterns. A particular example is the case of Cs/W(100).

Die optische Simulation hat sich als geeignetes Hilfsmittel bei der Interpretation von LEED-Bildern erwiesen^{1, 2, 3}. Hierbei wird ein Laserstrahl an einem zweidimensionalen, fotografisch hergestellten Modell einer Oberfläche gebeugt (Einfachbeugung). In dieser Arbeit wird gezeigt, daß sich durch Verwendung von zwei Gittern auch LEED-Doppelbeugungsreflexe optisch simulieren lassen. Eine theoretische Betrachtung folgt in⁴.

Für die Herstellung der Beugungsgitter eignen sich zwei Verfahren. Bei beiden wird zunächst ein makroskopisches Modell (Gitterkonstante $d = 0,5$ cm) hergestellt. In einem Fall^{1, 2} werden die Gitterpunkte durch kleine Löcher in einem schwarzen, von hinten beleuchteten Karton dargestellt, im anderen³ durch schwarze Punkte auf weißer Unterlage. Die Modelle werden fotografisch verkleinert ($d \approx 30 \mu\text{m}$), so daß der Laser ein Objekt von 40×40 Gitterpunkten durchstrahlt, was etwa dem Kohärenzgebiet bei LEED entspricht. Beide Strukturen liefern gleiche Beugungsbilder (Babinet'sches Theorem), jedoch zeigt sich, daß die Lochmasken lichtstarke Beugungsreflexe bis zu höheren Ordnungen erzeugen.

Bei LEED kommt das Beugungsbild nicht nur durch Beugung an einer rein zweidimensionalen Struktur zustande, denn zur Beugung tragen drei bis vier Atomlagen bei, die unterschiedliche Strukturen haben können (z. B. Grundgitter a, Adsorbatgitter b).

Mit den Bezeichnungen $\mathbf{k}_0$: einfallender Wellenvektor, $\mathbf{k}'$, $\mathbf{k}''$, $\mathbf{k}'''$: gebeugte Wellenvektoren, A, B : Menge aller Vektoren der reziproken Gitter von a bzw. b, gelten die Beziehungen:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_a; \quad \mathbf{g}_a \in A, \quad (1)$$

$$\mathbf{k}'' = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_b; \quad \mathbf{g}_b \in B, \quad (2)$$

$$\mathbf{k}''' = \mathbf{k}' + \mathbf{g}_b = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_a + \mathbf{g}_b. \quad (3)$$

* Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. Klaus Müller, Lehrstuhl für Festkörperphysik der Universität Erlangen-Nürnberg, D-8520 Erlangen, Erwin-Rommel-Straße 1.

Gleichung (3) beschreibt die Mehrfachbeugung (siehe auch⁴). Sind a und b kohärente Gitter, ist also eines ein Teilgitter des anderen, so folgt für beliebige $\mathbf{g}_a \in A$ und $\mathbf{g}_b \in B$:

$$(\mathbf{g}_a + \mathbf{g}_b) \in \overset{A}{B}. \quad (4)$$

Es treten also zu den Reflexen der Gitter a und b nach (1) und (2) durch Mehrfachbeugung keine zusätzlichen Beugungsmaxima auf, sondern es wird die Intensität der schon vorhandenen Reflexe verändert. Die Intensität ist in diesem Zusammenhang aber ohne Bedeutung, da Vergleiche mit LEED nur im Rahmen der kinematischen Näherung erlaubt sind. Sind a und b jedoch inkohärent, so treten durch Mehrfachbeugung zusätzliche Reflexe auf.

Ist zum Beispiel a ein quadratisches Grundgitter und b ein Adsorbat mit hexagonaler Struktur, so stellt Abb. 1 einen Schnitt durch die reziproken Gitter bei geeigneter Wahl der Gitterkonstanten und der Orientierung dar. Dieser Fall zweier inkohärenter Strukturen ist bei der Adsorption von Cäsium auf Wolfram (100) realisiert. Dieses System wurde bereits mit LEED untersucht^{5, 6, 7}.

Die Ergebnisse legen nahe, daß sich Cs in der Endphase in dichtester Kugelpackung (*hcp*) auf der quadratischen W(100)-Oberfläche anordnet. Ein Teil der LEED-Reflexe (Δ in Abb. 1) wird durch Doppelbeugung gedeutet^{5, 6}.

Zur Simulation des Beispiels Cs/W(100) wurden ein entsprechendes quadratisches und ein hexagonales Gitter hergestellt. Ordnet man die beiden Gitter hintereinander an und wählt den Abstand so groß, daß beim Durchstrahlen mit dem Laser nur noch die nullte Beugungsordnung des ersten Gitters auf das

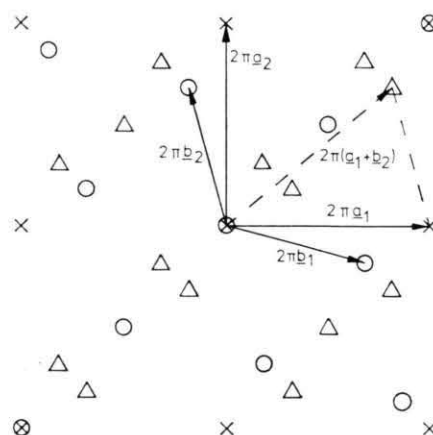


Abb. 1. Schnitt durch zwei reziproke Gitter; $\times$, $\circ$ Punkte des reziproken Gitters von a, b; Δ Doppelbeugungsreflexe; a_1, a_2 bzw. b_1, b_2 sind die Basisvektoren der reziproken Gitter von a bzw. b; es sind nicht alle möglichen Doppelbeugungsreflexe eingetragen.

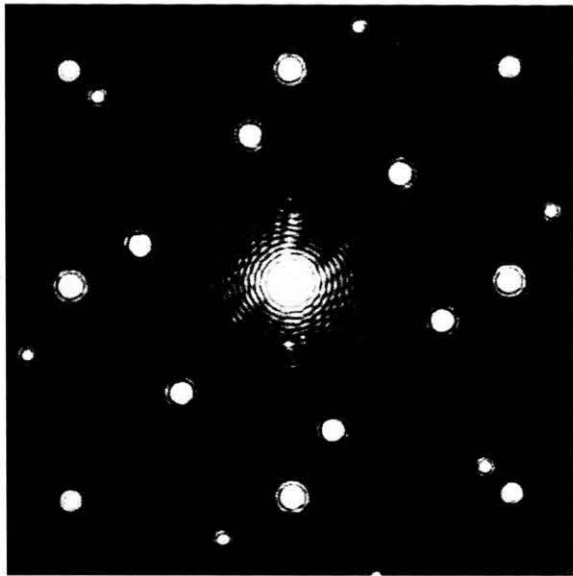


Abb. 2 a. Beugungsreflexe der Gitter a und b ohne Doppelbeugung.

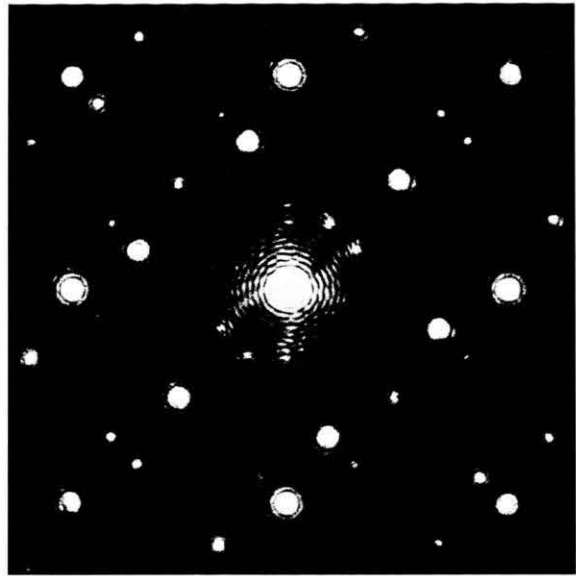


Abb. 2 b. Beugungsreflexe der Gitter a und b mit Doppelbeugung.

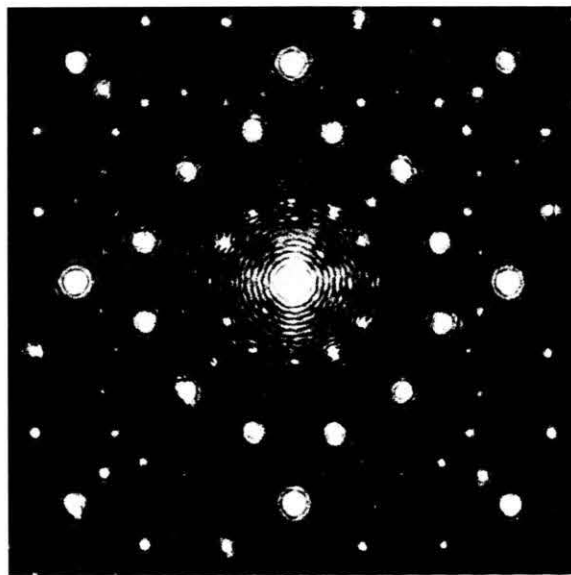


Abb. 2 c. Wie Abb. 2 b, jedoch mit zwei um 90° gegeneinander verdrehten Cs-Domänen.

zweite Gitter fällt, so treten erwartungsgemäß keine Doppelbeugungsreflexe auf und man erhält das in Abb. 2 a * fotografierte Beugungsbild. Es zeigt die Reflexe des W(100)-Grundgitters (x in Abb. 1) und die des hexagonalen Cs-Adsorbats (0 in Abbildung 1).

Bringt man die Gitter nahe genug zusammen, so erscheinen Doppelbeugungsreflexe (Abbildung 2 b). Bei der Durchführung des Experiments ist darauf zu achten, daß mindestens die 1. Ordnung der im Gitter a abgelenkten Strahlen auch durch Gitter b fallen.

Die Intensität der sichtbaren Doppelbeugungsreflexe ist etwa um einen Faktor 10^{-2} schwächer als die der Einfachbeugungsreflexe, wesentlich bedingt durch den endlichen Durchmesser der Streuzentren⁴. Doppelbeugungsreflexe, die durch Kombination von höher indizierten Einfachbeugungsreflexen

entstehen, zeigen entsprechend geringere Intensität. In Abb. 2 b sind auch einige Doppelbeugungsreflexe zu sehen, die sich bei LEED nicht mehr vom Untergrund abheben.

Bei der Adsorption von Cs auf W(100) treten meistens zwei um 90° verdrehte hexagonale Domänen auf. Das dann bei LEED beobachtete Beugungsbild mit dem charakteristischen Zwölferring konnte auch in der optischen Simulation mit einem entsprechenden Adsorbattgitter dargestellt werden (Abbildung 2 c).

Es zeigt sich also, daß die Doppelbeugung in der optischen Simulation ein wichtiges Hilfsmittel bei der Interpretation von LEED-Bildern sein kann, insbesondere da durch einfache Variation des Abstandes zwischen den Gittern die Doppelbeugung an- und abgeschaltet werden kann.

* Abbildungen 2 a–c auf Tafel S. 1512 a.

¹ W. P. Ellis, in: Optical Transforms. Ed. H. S. Lipson, Academic Press, London 1972.

² C. S. McKee, D. L. Peny, and M. W. Roberts, Surface Science **39**, 176 [1973].

³ W. Karcher, Karlsruher Staatsexamensarbeit 1973.

⁴ K. Heinz, Z. Naturforsch. **29 a**, 1514 [1974].

⁵ A. U. Mac Rae, K. Müller, J. J. Lander, and J. Morrison, Surface Science **15**, 483 [1969].

⁶ H. Jakusch, Karlsruher Dissertation 1973, to be published.

⁷ C. A. Papageorgopoulos and I. M. Chen, Surface Science **39**, 283 [1973].