

Vorstellung Simulationssoftware

Im folgenden Video wird eine Simulationssoftware vorgestellt, wie sie im Praktikumsversuch „LEED“ zur Analyse benutzt wird.

Zuerst muss der Kristall allgemein in der Software konstruiert werden. Dazu gehe ich auf „Rasmol/LEED“ und dann auf „Make ras.dat“.

Bei der Probe im Versuch handelt es sich um Wolfram, welches im Kristall orthorhombisch aufgebaut ist. Die Gitterkonstante ist in alle drei Raumrichtungen gleich groß und beträgt 3.16 \AA . Das Programm muss wissen, um welches Element es sich handelt. Dafür wird die Ordnungszahl 74 für Wolfram eingefügt. Im nächsten Schritt werden die Atompositionen der Elementarzelle festgelegt, aus denen der restliche Kristall konstruiert wird. Das erste Atom lege ich bei $(0; 0; 0)$ fest und füge es hinzu. Da es sich um ein bcc-Kristall handelt, muss eine zweite Atomposition festgelegt werden, die ich bei $(0.5; 0.5; 0.5)$ hinzufüge. Die Wyckoffplätze bleiben bei $(0; 0; 0)$ und müssen ebenfalls hinzugefügt werden. Die Oberflächennormale belasse ich vorerst auf $(0; 0; 1)$ und kann somit die „.dat“ fertigstellen und anschließend unter einem beliebigen Namen speichern.

Die eben gespeicherte Datei muss nun in das Programm geladen werden. Dazu gehe ich auf „File“ und dann auf „Open“ und suche in dem sich öffnenden Verzeichnis die eben gespeicherte Datei und lade sie in das Programm. Das Programm kennt jetzt die allgemeinen Eigenschaften des Kristalls. Deshalb muss im Anschluss dessen Größe festgelegt werden. Dies funktioniert über eine Abschneidefunktion, bei der ich den Quader wähle und dessen Größe beispielsweise auf 33 \AA , 33 \AA und 11 \AA festlege. Anschließend gehe ich auf „Rasmol/LEED“ und dann auf „Make Cluster“. Das Programm generiert mir den fertigen Kristall und zeigt mir an, wie viele Atome sich in ihm befinden. Wenn ich mir den Kristall betrachten will, gehe ich wieder auf „Rasmol/LEED“ und dann auf „View Cluster“. Das ist der Kristall aus der Sicht, wie die Elektronen auf ihn treffen. Ich kann in diesem Fenster den Kristall drehen, was nicht den Auftreffpunkt oder Auftreffwinkel ändert. Das bleibt so, wie es beim Öffnen des Fensters angezeigt wird. Ich kann das Bild in den angegebenen Formaten abspeichern. Dabei wird die gerade angezeigte Position in der aktuellen Auflösung verwendet.

Ich möchte mir nun das Beugungsbild ansehen. Dazu gehe ich wieder auf „Ras-

mol/LEED“ und dann auf „View LEED“. In dem sich öffnenden Fenster „LEED-Bild“ kann ich neben der kinetischen Energie der Elektronen noch die Intensität variieren. Bei 100 eV ergibt sich folgendes Beugungsbild. Das Feld „Intensität“ wird rot unterlegt, wenn das Bild übersättigt ist. Im Feld rechts daneben schlägt mir das Programm eine Intensität vor, die ich ungefähr übernehme, um ein sauberes Beugungsbild zu erhalten. Wenn ich die kinetische Energie verändere, variiert ebenfalls das Beugungsbild. Wenn ich beispielsweise auf 50 eV verkleinere, so rücken die Reflexe weiter auseinander. Das Bild lässt sich auf „Save“ ebenfalls abspeichern, allerdings nur als Bitmap. Die Größe lässt sich mit dem Feld „Bildgröße“ verändern.

Natürlich lässt sich die Größe des Kristalls im Programm beliebig abändern. Zum Beispiel kann ich eine Kette von Atomen herstellen. Dazu gebe ich in nur eine Raumrichtung eine von 1 Å verschiedene Länge ein. Anschließend lasse ich wieder den Kristall herstellen und schaue ihn mir dann an. Die Frage ist, wie dann das Beugungsbild aussieht. Ich kann solche Atomketten ebenfalls in die anderen beiden Raumrichtungen aufbauen. Es soll überlegt werden, wie sich das auf die Beugung auswirkt.

In der Realität sind die meisten Kristalle nicht perfekt geschnitten bzw. poliert worden. Er kann ebenfalls gekippt oder gedreht sein. Deshalb gibt es weitere Parameter, die sich im Programm verändern lassen.

Ich gebe die Kristallgröße von vorhin ein und kippe den Kristall um 15° . Ich erstelle wieder den Kristall und schaue ihn mir anschließend an. Es lässt sich gut erkennen, dass der Kristall nach hinten gekippt ist. Von der Seite ist die Kippung noch deutlicher zu sehen. Ich rufe wieder das LEED-Bild auf. Es wird noch das alte Beugungsbild angezeigt. Deshalb muss ich es jetzt neu berechnen lassen. Zu sehen ist, dass die Symmetrie links-rechts erhalten geblieben ist, jedoch die Symmetrie oben-unten durch die Kippung zerstört wurde.

Im Anschluss möchte ich mir den Kristall betrachten, wenn dieser gedreht ist. Dazu setze ich die Kippung zurück auf null und die Drehung auf 20° . Nach der Herstellung des Kristalls rufe ich wieder das Fenster auf, in dem ich ihn mir betrachten kann. Die Anordnung der Atome ist leicht gedreht. Die Ränder sehen ausgefranst aus. Das kommt daher, dass natürlich nur ganze Atome abgeschnitten werden können und so Unregelmäßigkeiten entstehen. Hier ist ebenfalls die

Frage, wie das Drehen das Beugungsbild verändert.

Wenn der Kristall nicht komplett gerade geschnitten wurde, entsteht eine Art von Stufen auf der Oberfläche. Um das zu demonstrieren, setze ich die Drehung zurück auf null Grad, vergrößere den Kristall auf 55 \AA , 55 \AA , 11 \AA und verändere den Oberflächenvektor auf $(0.1; 0; 1)$. Bei der Erstellung des Kristalls gibt mir das Programm eine Warnmeldung, dass sich mehr als 2.000 Atome im Kristall befinden. Allerdings wird die Rechenleistung erst bei mehr als 10.000 Atomen stark beeinträchtigt. Wenn ich mir anschließend den Kristall ansehe, lassen sich die Stufen auf der Kristalloberfläche erkennen. Die Frage ist, wie sich das Beugungsbild dadurch ändert.

Ich kann zusätzlich in x- und y-Richtung den Oberflächenvektor von null verschieden setzen, woraus sich die letzten beiden Fragen ergeben. Wie sieht dann der Kristall aus und wie das zugehörige Beugungsbild?