Theoretischer Hintergrund der LEED-Analyse

Im folgenden Video soll der theoretische Hintergrund der LEED-Analyse vorgestellt werden.

LEED bedeutet: Low Energy Electron Diffraction also die Beugung niederenergetischer Elektronen. Dabei wird ein Strahl von Elektronen auf eine periodische Probe geschossen. Durch die Streuung der Elektronen entsteht ein Beugungsbild, welches Aufschlüsse über die Oberfläche der Probe zulässt.

Für die Streuung gibt es zwei unterschiedliche Theorien. Bei der Einfachstreutheorie wird angenommen, dass die Elektronen an nur einer Stelle des Gitters gestreut werden. Es gibt keine weiteren Wechselwirkungen mit dem Kristall. Die Mehrfachstreutheorie berücksichtigt genau diese Wechselwirkungen, die auch das Beugungsbild mit beeinflussen. Allerdings wird im weiteren Verlauf die Einfachstreutheorie benutzt, da sie sehr gute Näherungen liefert und einfache Grundannahmen besitzt. Desweiteren soll im folgenden die ebene Welle in der dargestellten Form benutzt werden. Bei der Einfachstreutheorie wird die ebene Welle elastisch gestreut. Dies bedeutet, dass der Wellenvektor $\vec{k'}$ der gestreuten Welle betragsmäßig gleich dem Wellenvektor $\vec{k}$ der einfallenden Welle ist.

Am Anfang soll ein einfaches Beispiel aufgezeigt werden. Zu sehen ist, dass der einfallende Elektronenstrahl an einem Volumenelement dV und am Koordinatenursprung gestreut wird. Der Wegunterschied Δ ist gleich $S_1 + S_2$. Es kommt zu konstruktiver Interferenz, wenn Δ ein ganzzahliges Vielfaches von der Wellenlänge λ ist. Werden nun die einfallende und die gestreute Welle betrachtet, so ist zu erkennen, dass der Phasenunterschied $\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}$ ist. Dabei bezeichnet $\Delta\vec{k}$ den sogenannten Streuvektor, welcher gleich $(\vec{k} - \vec{k'})$ ist.

Wird nun die gesamte Kristallprobe betrachtet, so kann angenommen werden, dass die Streuamplitude der jeweiligen Partialwellen proportional zur lokalen Elektronendichte ist, welche an der jeweiligen Stelle des Kristalls zu finden ist. Die Gesamtintensität ergibt sich aus dem Betragsquadrat der Summe der gestreuten Partialwellen. Dabei bezeichnet $\Delta\vec{k}$ wieder den Streuvektor $(\vec{k} - \vec{k'})$, der den Gangunterschied der einzelnen Partialwellen zum Ausdruck bringt und n($\vec{r}$) die Elektronendichte. Der Term $e^{i\omega t}$ ist hier nicht mehr von Bedeutung. Das kommt daher, dass es sich um ein Ortsintegral handelt. Dadurch kann $e^{i\omega t}$ vor das Integral gezogen werden. Wird der Betrag davon gebildet, so ergibt er sich zu eins. Insgesamt entspricht das Integral bis auf einen Vorfaktor genau der Fouriertransformierten der Ladungsdichte.

Bei den folgenden Betrachtungen soll die Periodizität des Kristallgitters ausgenutzt werden. Es lässt sich leicht folgern, dass die Elektronendichte ebenfalls periodisch ist. Das heißt, dass wenn die Elektronendichte um einen beliebigen Translationsvektor $\vec{T}$ verschoben wird, dass sich diese nicht verändert. Dabei sind beim Translationsvektor die Vorfaktoren a, b und c Elemente der ganzen Zahlen und $\vec{x_1}, \vec{x_2}$ und $\vec{x_3}$ die Basisvektoren des Kristallgitters.

Da die Intensität proportional der Fouriertransformierten der Ladungsdichte ist, sollen jetzt die Fourierkomponenten der Elektronendichte betrachtet werden. Anschließend wird die Elektronendichte n($\vec{r}$) durch n($\vec{r}+\vec{T}$) ersetzt und $e^{i\Delta\vec{k}\vec{r}}$ wird mit $e^{i\Delta\vec{k}(\vec{r}+\vec{T})}$ angeglichen. Danach lässt sich die Periodizität der Elektronendichte ausnutzen, in dem n($\vec{r}+\vec{T}$)durch n($\vec{r}$) ersetzt wird. Im Anschluss kann n($\Delta\vec{k}$) ausgeklammert werden. Aus der Rechnung folgt zwangsläufig, dass $e^{i\Delta\vec{k}\vec{T}}$ gleich eins sein muss.

Die Fourierkomponenten sind also nur für bestimmte diskrete $\Delta\vec{k}$-Werte nicht null. Die Menge dieser Vektoren sind die reziproken Gittervektoren. Die Basisvektoren des reziproken Gitters lassen sich folgendermaßen aus den Basisvektoren des Kristallgitters darstellen. Zu sehen ist, dass die Einheit der reziproken Gittervektoren eins geteilt durch Länge ist. Wenn ein Basisvektor des Kristallgitters vergrößert wird, so schrumpft der zugehörige reziproke Gittervektor. Die Betrachtungen entsprechen der Laue-Bedingung, die besagt, dass die Änderung des $\vec{k}$-Vektors einem reziproken Gittervektor entspricht.

Um Beugungsrelfexe vorhersagen zu können, wird die sogenannte Ewaldkonstruktion benutzt. Als erstes soll der Kristall als dreidimensionales Objekt betrachtet werden. Der Vektor $\vec{k}$ wird auf einen beliebigen Punkt im reziproken Gitter gelegt. Um den Vektor wird eine Kugel gelegt, wobei der Radius seinem Betrag entspricht. Wird das reziproke Gitter betrachtet, so sind alle Schnittpunkte der Ewaldkugel mit den Gitterpunkten mögliche Beugungsreflexe, da hier die Differenz $\Delta\vec{k}$ vom einfallenden Vektor $\vec{k}$ und dem gestreuten Vektor $\vec{k'}$ genau der Verbindung zwischen zwei reziproken Gittervektoren entspricht und somit selber ein reziproker Gittervektor ist, was mit der Laue-Bedingung übereinstimmt. Es lässt sich erkennen, dass bei einer rein dreidimensionalen Betrachtung die Laue-Bedingung nur für sehr wenige diskrete $\vec{k}$-Werte erfüllt wäre und dementsprechend die Ewaldkugel nur wenige Schnittpunkte mit dem reziproken Gitter hätte.

Im folgenden soll ein Spezialfall betrachtet werden: die zweidimensionale Ewaldkonstruktion. Dabei wird näherungsweise angenommen, dass die Beugung nur an der Oberfläche stattfindet und tiefere Lagen werden nicht berücksichtigt. Weil es sich um eine Monolage von Atomen handelt, wird der Einheitsvektor des Kristalls in z-Richtung als unendlich groß angesetzt, woraus durch den vorhin erwähnten Zusammenhang folgt, dass der Einheitsvektor in z-Richtung im reziproken Gitter gegen null geht. Die Punkte rücken in dieser Richtung im reziproken Gitter immer dichter aufeinander und entarten so zu Gitterstäben.

Die Ewaldkonstruktion verändert sich in 2D folgendermaßen. Hier lässt sich erkennen, dass ab einer bestimmten Größe vom Betrag von $\vec{k}$ die Ewaldkugel immer Schnittpunkte mit dem reziproken Gitter hat und somit immer Reflexe auftreten.

Bei realen Oberflächen muss die endliche freie Weglänge von Elektronen und somit der Einfluss von Schichten unterhalb der Oberfläche beachtet werden. Das heißt, dass es sich nicht mehr um eine reine zwei- oder dreidimensionale Betrachtung handelt. Die Gitterstäbe entarten in der Ewaldkonstruktion folgendermaßen. Mit dieser Ewaldkonstruktion lässt sich jetzt nicht nur die Position der Beugungsreflexe vorhersagen, sondern auch deren Intensität. Dort liegt der Zusammenhang zu der dreidimensionalen Konstruktion, denn der starke Reflex tritt ungefähr da auf, wo das Volumengitter einen reziproken Punkt hätte.

Im folgenden Ausschnitt aus einer Messaufnahme sind diese Annahmen gut sichtbar. Bei der Messung wird die kinetische Energie der Elektronen erst hochgefahren und dann wieder erniedrigt. Je höher die kinetische Energie der Elektronen, desto größer die Ewaldkugel. Dadurch entstehen dementsprechend mehr Schnittpunkte mit dem reziproken Gitter. Es sind somit mehr Beugungsreflexe zu sehen. Es ist ebenfalls gut erkennbar, wie die Intensität der Reflexe variiert. Die einzelnen Punkte verschwinden nie komplett, sondern wechseln nur, wie vorhergesagt, zwischen starkem und schwachen Reflex.

Als letztes soll der experimentelle Aufbau kurz erläutert werden. Von der Kathode geht ein Elektronenstrahl aus. Durch die Linsen A bis D findet eine Fokussierung des Strahles auf die Probe statt. An der Probe werden die Elektronen anschließend gestreut. Die Gitter eins bis drei liegen auf Massepotential, genauso wie die Probe. Dadurch befinden sich die Elektronen bis Gitter vier in einem feldfreien Raum. Am Gitter vier liegt eine Gegenspannung an, die alle nicht elastisch gestreuten Elektronen nicht hindurchlässt. Die elastisch gestreuten Elektronen werden nach dieser Abbremsung nach dem vierten Gitter mit 5 kV beschleunigt, so dass sie mit einer hohen Energie auf den Leuchtschirm treffen und so sichtbar werden. Das Beugungsbild wird von einer Kamera aufgezeichnet und kann so auf einem Rechner sichtbar gemacht werden.