

---

# Skript zum Versuch Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)

---

**Versuch zum Fortgeschrittenenpraktikum in Physikalischer Chemie**

**Betreuer:** Florian Neuberger, Mail: [neuberger@cluster.pc.chemie.tu-darmstadt.de](mailto:neuberger@cluster.pc.chemie.tu-darmstadt.de)

**Version:** Florian Neuberger, Mai 2018

**Erstausgabe:** Peter Hörtz, 2013



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT

Eduard-Zintl-Institut  
Fachbereich Chemie

---

## Inhaltsverzeichnis

---

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Reales Gitter - Bragg Gleichung . . . . .	3
2.2	Reziprokes Gitter - Laue Gleichungen . . . . .	5
2.3	Vernüpfung von realem und reziprokem Gitter . . . . .	10
2.4	Modell der Ewaldkugel . . . . .	12
2.5	Die Theorie in der Praxis . . . . .	14
2.5.1	Bestimmung der Gitterkonstanten . . . . .	14
2.5.2	Bestimmung des Netzebenenabstandes . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>17</b>
3.1	Aufbau der LEED-Optik . . . . .	17
3.2	Aufbau der Messanordnung . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Versuchsdurchführung</b>	<b>20</b>
4.1	Reinigung der Kristalloberfläche . . . . .	20
4.2	Inbetriebnahme des LEED-Gerätes . . . . .	21
4.3	Messungen . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Aufgabenstellungen</b>	<b>23</b>

---

## 1 Einleitung

---

Die Methode der Low-Energy Electron Diffraction (LEED) wurde rein zufällig von Clinton Davids und Lester Gerner 1925 entdeckt, als sie die winkelabhängige Verteilung von elastisch reflektierten Elektronen an Nickel untersuchten. Aufgrund experimenteller Probleme musste die Probe zur Reinigung gezwungenermaßen über längere Zeit erhitzt werden. Das führte dazu, dass sich die durch die Elektronenbeugung entstandene, unscharfe Intensitätsverteilung zu einem regelmäßigen, scharfen Muster veränderte. Durch die Hitzeeinwirkung bildeten sich in dem polykristallinen Nickel kristalline Bereiche aus, und die scharfen Spots interpretierten die beiden Wissenschaftler schon damals zurecht als ein Interferenzmuster. Damit wiesen sie nicht nur als Erste experimentell den Wellencharakter von Elektronen nach, den Louis De Broglie zwei Jahre zuvor theoretisch postuliert hatte, sondern legten damit den Grundstein für eine neue Methode zur Untersuchung der Struktur von einkristallinen Oberflächen.

Um im Allgemeinen die Beugung von Elektronen verstehen zu können, muss dessen Wellencharakter einbezogen werden. Einem Elektron kann eine Wellenlänge  $\lambda_e$

$$\lambda_e = \frac{h_p}{p_e} = \frac{h_p}{m_e v_e} = \sqrt{\frac{1.50 \text{ eV nm}^2}{E_{kin}}} \quad (1)$$

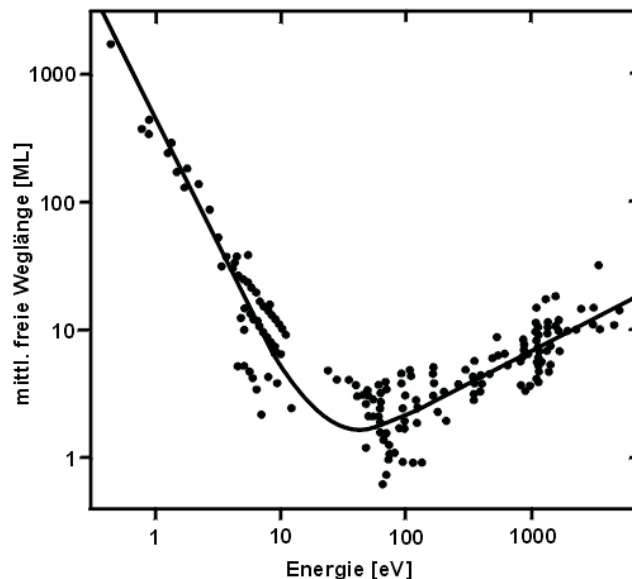
und ein Wellenvektor  $\vec{k}_e$  zugeordnet werden, dessen Betrag durch

$$|\vec{k}_e| = \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{2\pi p_e}{h_p}, \quad (2)$$

gegeben ist, wobei  $h_p$  das Planck'sche Wirkungsquant,  $m_e$  die Masse,  $v_e$  die Geschwindigkeit und  $p_e$  den Impuls des Elektrons darstellt. Für geringe kinetische Energien des Elektrons zwischen einigen zehn und einigen hundert Elektronenvolt besitzt dieses eine Wellenlänge im Bereich der interatomaren Abstände in Kristallen und Molekülen. Durch die Beugung der einfallenden Elektronenwellen an den Gitterebenen des Kristalls entsteht durch konstruktive und destruktive Interferenz ein Muster, welches das sog. reziproke Gitter widerspiegelt und Informationen über die Anordnung der Atome im Kristall enthält. Dieses Interferenzmuster liefert somit wichtige kristallographische Größen wie z.B. Gitterkonstanten oder Netzebenenabstände. Da Elektronen, im Gegensatz zu Röntgenphotonen, innerhalb eines bestimmten Energiebereichs nur eine sehr kleine mittlere freie Weglänge im Festkörper besitzen (vgl. Abbildung 1) und deshalb oft nicht tiefer als einige Monolagen in den Kristall eindringen können, stellt LEED eine äußerst oberflächensensitive Untersuchungsmethode dar. Neben der qualitativen Charakterisierung der Oberflächenstruktur des reinen Kristalls ist die Untersuchung von Überstrukturen von auf der

Oberfläche gebundenen Adsorbaten eine weitere Anwendungsmöglichkeit, was z.B. wichtig für die heterogene Katalyse ist. Des Weiteren können mit Hilfe von LEED-Mustern qualitative Aussagen über den Grad der Kristallinität, sowie über die Sauberkeit von Metalloberflächen getroffen werden. Unter Betrachtung des Verlaufs der Intensität  $I$  der Beugungsreflexe in Abhängigkeit der kinetischen Energie der Elektronen können quantitative Informationen über die vorliegende Kristallstruktur wie Gitterabstände, Netzebenenabstände, Fehlstellenanordnung bzw. -größe erhalten werden. Für eine präzise Interpretation dieser sog.  $I(E)$ -Kurven sind jedoch Vergleiche mit theoretischen Rechnungen und viel Erfahrung auf diesem Gebiet nötig.

Durch einen vergleichsweise einfachen Versuchsaufbau bei gleichzeitig vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten stellt die Methode der Low Energy Electron Diffraction eine häufig genutzte Oberflächenmethoden dar.



**Abbildung 1** Die mittlere freie Weglänge von Elektronen in Festkörpern.<sup>[1]</sup>

Im Rahmen dieses Versuches soll eine Pt(111)-Oberfläche mittels LEED untersucht werden. Dabei sollen die theoretischen Grundlagen der Elektronenbeugung am Kristall verstanden und aus den ermittelten Daten des Experiments die Oberflächenstruktur rekonstruiert werden. Außerdem soll dieses Praktikum als Einführung in das wissenschaftliche experimentelle Arbeiten unter Ultrahochvakuum-Bedingungen (UHV) dienen.

---

## 2 Theoretische Grundlagen

---

Die Beugung von Elektronen an einem Kristall kann auf zwei Arten beschrieben werden. Zum einen nur von dem realen Gitter des Kristalls ausgehend, in dem die Atome (und damit auch die Elektronendichte) periodisch angeordnet sind und Ebenen bilden, die als eine Art Spiegel für die Elektronenwelle fungieren. Dieser recht einfachen aber unvollständigen Beschreibung steht zum anderen die Theorie des reziproken Gitters gegenüber, die den Beugungsvorgang und ihre Voraussetzungen exakt erfasst und erklärt. Beide Betrachtungsweisen liefern für unsere Zwecke im Prinzip jedoch dasselbe Ergebnis und können miteinander verknüpft werden.

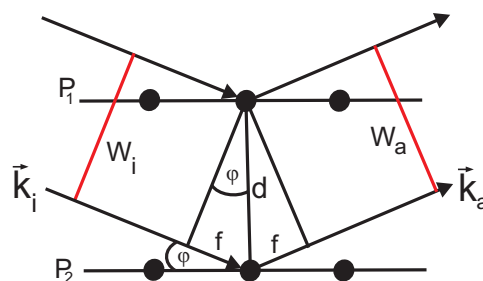
Es soll hier kurz vermerkt werden, dass Beugung und elastische Streuung dasselbe Phänomen beschreiben und im folgenden Text als identische Prozesse behandelt werden.

---

### 2.1 Reales Gitter - Bragg Gleichung

---

Nehmen wir im einfachsten Fall an, dass Elektronen in Form einer Wellenfront  $W_i$  mit dem Wellenvektor  $\vec{k}_i$  im Winkel  $\varphi$  auf die zwei Netzebenen  $P_1$  und  $P_2$  eines Kristalls treffen, die sich im Abstand  $d$  voneinander befinden. Zwei Strahlen dieser Wellenfront werden an den Atomen aus diesen Ebenen gebeugt und im selben Winkel  $\varphi$  reflektiert; die Ebenen dienen als eine Art Spiegel. Die beiden austretenden Strahlen der neuen Wellenfront  $W_a$  besitzen dann den Wellenvektor  $\vec{k}_a$ , wie in Abbildung 2 dargestellt.



**Abbildung 2** Zwei Strahlen werden an zwei Atomen im Winkel  $\varphi$  zur Ebene reflektiert. Die Weglängendifferenz der beiden Strahlen ist gerade  $2f$ .<sup>[2]</sup>

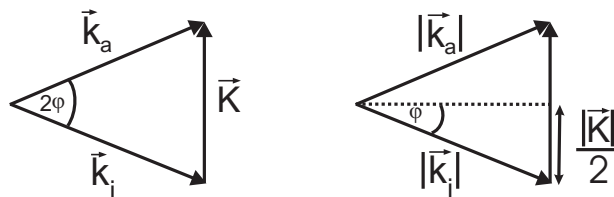
Ausgehend von einer elastischen Streuung muss der Gangunterschied der beiden reflektierten Strahlen  $2f$  gerade ein Vielfaches deren Wellenlänge sein, damit die beiden gebeugten Wellen

konstruktiv miteinander interferieren. Diese einfach hergeleitete Streubedingung wird durch die Bragg-Gleichung ausgedrückt

$$\boxed{2f = 2d \sin \varphi_B = n\lambda} . \quad (3)$$

Dabei ist  $n$  eine ganze Zahl,  $\varphi_B$  der von den Strahlen und den Ebenen eingeschlossene Bragg-Winkel, bei dem konstruktive Interferenz resultiert und  $d$  der Abstand der beiden Ebenen. Für einen festen Wert von  $d$  muss also entweder der Einfallswinkel oder die Wellenlänge so variiert werden, dass diese Bedingung erfüllt und konstruktive Interferenz erhalten wird.

Durch Verschiebung der Wellenvektoren  $\vec{k}_a$  und  $\vec{k}_i$  aus Abbildung 2 kann ein neuer Wellenvektor  $\vec{K}$  konstruiert werden (siehe Abbildung 3).



**Abbildung 3** Beschreibung der Beugungsbedingung mit Hilfe der Wellenvektoren (links) und der korrespondierenden Wellenvektorbeträge (rechts).<sup>[2]</sup>

Dieser neue Wellenvektor ergibt sich nach Abbildung 3a gerade zu:

$$\vec{K} = \vec{k}_a - \vec{k}_i . \quad (4)$$

Da ein elastischer Streuvorgang stattfindet, müssen die Beträge der Wellenvektoren  $|\vec{k}_i|$  und  $|\vec{k}_a|$  gleich groß sein und gemäß Abbildung 3 b ergibt sich:

$$\sin \varphi = \frac{|\vec{K}| / 2}{|\vec{k}_i|} \quad (5)$$

$$\rightarrow |\vec{K}| = 2 \sin \varphi |\vec{k}_i| = 2 \sin \varphi \frac{2\pi}{\lambda} . \quad (6)$$

Wenn  $\varphi = \varphi_B$  gilt, tritt konstruktive Interferenz auf, so dass die Werte von  $|\vec{K}|$  als  $|\vec{G}|$  bezeichnet werden können und folgender Zusammenhang entsteht:

$$\boxed{|\vec{K}| = n \frac{2\pi}{d} = |\vec{G}|}, \quad (7)$$

wobei  $d$  gerade der Netzebenenabstand und  $n$  eine ganze Zahl ist. Zwei Eigenschaften von  $|\vec{G}|$  sollen hier kurz festgehalten werden: zum einen besitzt er die Einheit  $m^{-1}$  und zum anderen muss er, genau wie  $d$ , senkrecht auf der Ebenenschar  $(P_1, P_2)$  liegen.

---

## 2.2 Reziprokes Gitter - Laue Gleichungen

---

In einem idealen dreidimensionalen Kristall sind die jeweiligen Atome in allen drei Raumrichtungen periodisch angeordnet und bilden ein Gitter. Das Parallelepipet mit dem kleinstmöglichen Volumen, das den gesamten Raum durch die wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen ausfüllt, wird primitive Elementarzelle genannt. Diese wird durch die drei primitiven Gittervektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{a}_3$  aufgespannt, so dass

$$\vec{r} = \vec{r}' + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (8)$$

gilt.  $n_1$ ,  $n_2$  und  $n_3$  sind beliebige ganze Zahlen und  $\vec{r}'$  ein beliebiger Punkt im Gitter, von dem aus betrachtet die Anordnung der Atome in jeder Hinsicht identisch erscheint wie vom Punkt  $\vec{r}$ . Dabei sind  $\vec{r}'$  und  $\vec{r}$  gerade über

$$\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (9)$$

den Translationsvektor, miteinander verknüpft. Die Menge aller Punkte  $\vec{r}$ , die durch Gleichung 8 festgelegt ist, definiert das Kristallgitter. Jedem Gitterpunkt kann eine Elektronendichte  $\rho(\vec{r})$  zugeordnet werden, die periodisch bezüglich der Translation sein muss, wodurch

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{T}) \quad (10)$$

erhalten wird. Eine solche periodische Funktion kann durch eine Fourier-Reihe entwickelt werden. Im Eindimensionalen wird zunächst

$$\rho(x) = \rho_0 + \sum_{p>0} C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a), \quad (11)$$

erhalten, wobei  $p$  positive Zahlen und  $C_p$  und  $S_p$  die sog. Fourier-Koeffizienten der Entwicklung sind. In einer kompakteren Form und erweitert auf das Dreidimensionale ergibt sich aus Gleichung 11 für die Elektronendichte am Punkt  $\vec{r}$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_G \exp(i \vec{G} \cdot \vec{r}) . \quad (12)$$

Die Menge der Vektoren  $\vec{r}$  beschreibt hierbei das reale Gitter. Die Menge der  $\vec{G}$ -Vektoren spannen dagegen das sog. reziproke Gitter auf und werden reziproke Gittervektoren genannt; sie haben die Einheit  $m^{-1}$ . Entsprechend dem realen Gittervektor gemäß Gleichung 9 wird der reziproke Gittervektor

$$\vec{G} = h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3 , \quad (13)$$

eingeführt, wobei  $h$ ,  $k$  und  $l$  ganze Zahlen sind und Miller'sche Indizes genannt werden.  $\vec{b}_1$ ;  $\vec{b}_2$  und  $\vec{b}_3$  stellen die primitiven Vektoren des reziproken Raums dar. Der Kristall kann sich so vorgestellt werden, dass er sich auch aus zwei Gittern aufbaut: aus dem realen und dem reziproken Gitter. Beide stehen eindeutig über deren primitive Gittervektoren miteinander in Verbindung und können ineinander überführt werden:

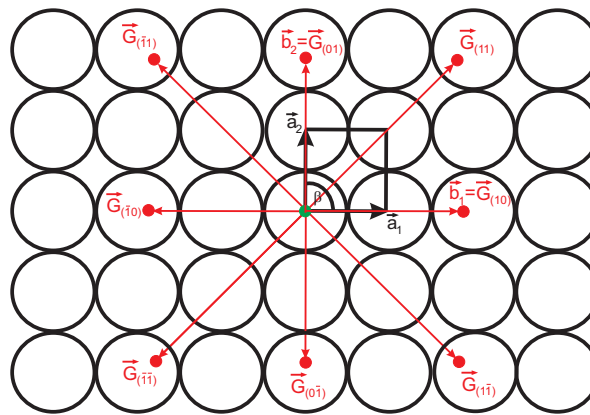
$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} . \quad (14)$$

Verkürzt wird dies durch folgenden wichtigen Zusammenhang ausgedrückt:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} ; \quad \delta_{ij} \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ 1 & \text{für } i = j \end{cases} \quad (15)$$

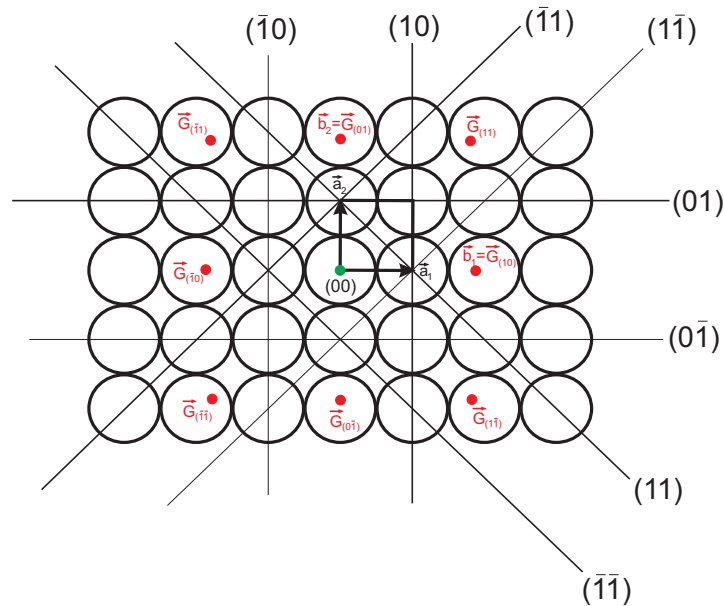


Da Elektronen mit kinetischen Energien im Bereich zwischen zehn und einigen hundert Elektronenvolt nur wenige Monolagen tief in die Probe eindringen, sie dadurch nur mit der Oberfläche des Kristalls wechselwirken und sie somit auch nur diese "abtasten", ist es zunächst sinnvoll, obige Gleichungen nur auf die beiden Dimensionen der Oberfläche zu reduzieren. Es kann gezeigt werden, dass dann z.B. der reziproke Vektor  $\vec{b}_1$  gerade senkrecht auf dem realen Vektor  $\vec{a}_2$  steht und mit  $\vec{a}_1$  einen Winkel  $\beta$  (siehe Abbildung 9 einschließt. Eine geometrische Darstellung beider Gitter und deren Zusammenhang für eine (100)-Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten (fcc) Kristalls wie des Platins ist in Abbildung 4 gezeigt.



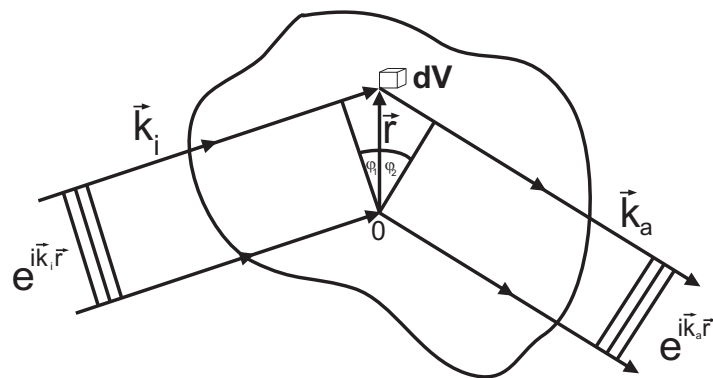
**Abbildung 4** Geometrische Darstellung des realen Gitters mit den primitiven Gittervektoren  $\vec{a}_i$  (schwarz) und des reziproken Gitters mit den reziproken Gittervektoren  $\vec{b}_i$  sowie der ersten acht reziproken Gitterpunkte  $\vec{G}_i$  (rot) für die (100)-Oberfläche.

Jeder Punkt im reziproken Gitter (rot in Abbildung 4 und 5) entspricht im Dreidimensionalen einer Ebenenschar oder, wie in unserem zweidimensionalen Fall, einer Schar von Ketten im realen Raum, die beide über die  $hkl$ -Werte definiert sind. So würde z.B. der reziproke Gittervektor bzw. Gitterpunkt  $\vec{G}_{(234)}$  im realen Raum der Ebenenschar entsprechen, die die x-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_1 / h = n \cdot \vec{a}_1 / 2$ , die y-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_2 / k = n \cdot \vec{a}_2 / 3$  und die z-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_3 / l = n \cdot \vec{a}_3 / 4$  schneidet. **Der reziproke Gittervektor steht dabei stets senkrecht auf der jeweiligen Ebenen- bzw. Kettenschar** (vergleiche Abbildung 5). Für die zweidimensionale Oberflächenstruktur beschreibt z.B. der reziproke Gittervektor bzw. Gitterpunkt  $\vec{G}_{(23)}$  die Schar von Ketten, die die x-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_1 / h = n \cdot \vec{a}_1 / 2$  und die y-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_2 / k = n \cdot \vec{a}_2 / 3$  schneidet. Für die Reflexe niedriger Ordnungen wird dies in Abbildung 5 verdeutlicht.



**Abbildung 5** Reziproke Gitterpunkte (rot) und zugehörige Ketten im realen Raum (schwarz) für eine fcc(100)-Oberfläche.

Dieses eingeführte reziproke Gitter, welches den vorliegenden Kristall bzw. die vorliegende Oberfläche charakterisiert, ist nun von entscheidender Bedeutung für den Streuprozess, da es die Beugungsbedingung festlegt. Wie in Abbildung 6 dargestellt, kann ein ähnliches Gedankenexperiment wie in Kapitel 2.1 konstruiert werden.



**Abbildung 6** Der Gangunterschied für die einfallende Welle  $\vec{k}_i$  zwischen den Punkten 0 und  $\vec{r}$  ist  $|\vec{r}| \cdot \sin \varphi_1$ , die Phasendifferenz ist  $(2\pi \cdot |\vec{r}| \cdot \sin \varphi_1) / \lambda$ , was gleich  $\vec{k}_i \cdot \vec{r}$  ist. Für die gestreute Welle ist die Phasendifferenz  $-\vec{k}_a \cdot \vec{r}$ ; die gesamte Phasendifferenz ist somit  $(\vec{k}_i - \vec{k}_a) \cdot \vec{r}$ .<sup>[3]</sup>

Elektronen treffen in Form einer stehenden Welle  $\exp(i \cdot \vec{k} \cdot \vec{r})$  als Front auf einen Kristall und werden dort von dem Volumenelement  $dV$  im Abstand  $\vec{r}$  gestreut. Es kann gezeigt werden, dass die einfallende und die ausfallende Wellenfront gerade eine Phasendifferenz von  $(\vec{k}_i - \vec{k}_a) \cdot \vec{r}$  haben. Die Amplitude der von dem Volumenelement gestreuten Welle ist proportional der lokalen Elektronendichte  $\rho(\vec{r})$ . Die gesamte Amplitude der in Richtung  $\vec{k}_a$  gestreuten

Welle ist proportional dem Integral über den Kristall von  $\rho(\vec{r})dV$  multipliziert mit dem sog. Phasenfaktor  $\exp[i(\vec{k}_i - \vec{k}_a) \cdot \vec{r}]$ . Wir definieren die sog. Streuamplitude  $F$  demnach als:

$$F = \int \rho(\vec{r}) \exp[i(\vec{k}_i - \vec{k}_a) \cdot \vec{r}] dV = \int \rho(\vec{r}) \exp(-i \cdot \Delta \vec{k} \cdot \vec{r}) dV, \quad (16)$$

wobei gilt:

$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_a - \vec{k}_i. \quad (17)$$

$\Delta \vec{k}$  ist die durch die Streuung verursachte Änderung des Wellenvektors und wird Streuvektor genannt. Durch Einsetzen von Gleichung 12 für die Elektronendichte ergibt sich der Zusammenhang:

$$F = \sum_{\vec{G}} \int n_G \exp(i \vec{G} \cdot \vec{r}) \cdot \exp(-i \cdot \Delta \vec{k} \cdot \vec{r}) dV \quad (18)$$

$$= \sum_{\vec{G}} \int n_G \exp[i(\vec{G} - \Delta \vec{k}) \cdot \vec{r}] dV. \quad (19)$$

Aus Gleichung 19 ist ersichtlich, dass für

$$\boxed{\Delta \vec{k} = \vec{G}} \quad (20)$$

die Streuamplitude maximal wird; es kommt zu einem Beugungsreflex. Weichen die beiden Größen voneinander ab, so wird  $F$  vernachlässigbar klein und keine Reflexe sind zu beobachten. **Es entsteht nur ein Reflex, wenn die Differenz zwischen den Wellenvektoren der einfallenden und ausfallenden Elektronenwelle  $\Delta \vec{k}$  genau einem reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  entspricht.** Diese sog. Laue-Bedingung kann auch noch anders formuliert werden, indem Gleichung 20 auf beiden Seiten mit  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{a}_3$  skalar multipliziert wird. Dadurch ergeben sich die sog. Laue-Gleichungen, die aufgrund ihrer geometrischen Darstellbarkeit sehr nützlich sind (siehe Kapitel 2.4):

$$\vec{a}_1 \cdot \Delta \vec{k}_1 = 2\pi \cdot h \quad (21)$$

$$\vec{a}_2 \cdot \Delta \vec{k}_2 = 2\pi \cdot k \quad (22)$$

$$\vec{a}_3 \cdot \Delta \vec{k}_3 = 2\pi \cdot l, \quad (23)$$

Damit eine Reflexion stattfinden kann, müssen prinzipiell alle drei Laue-Gleichungen erfüllt sein. Da der Elektronenstrahl aufgrund seiner niedrigen Energie nur einige wenige Monolagen in den Kristall eindringen kann, "tastet" er nur die Oberfläche ab und "sieht" deshalb auch nur die Periodizität der Elektronendichte in der  $\vec{a}_1$ - und  $\vec{a}_2$ -Richtung, jedoch nicht in der  $\vec{a}_3$ -Richtung. Aus diesem Grund müssen im Falle des LEED nur die ersten beiden Laue-Gleichungen erfüllt sein; für die z-Komponente von  $\Delta \vec{k}_3$  liegt keine Einschränkung vor.

---

### 2.3 Vernüpfung von realem und reziprokem Gitter

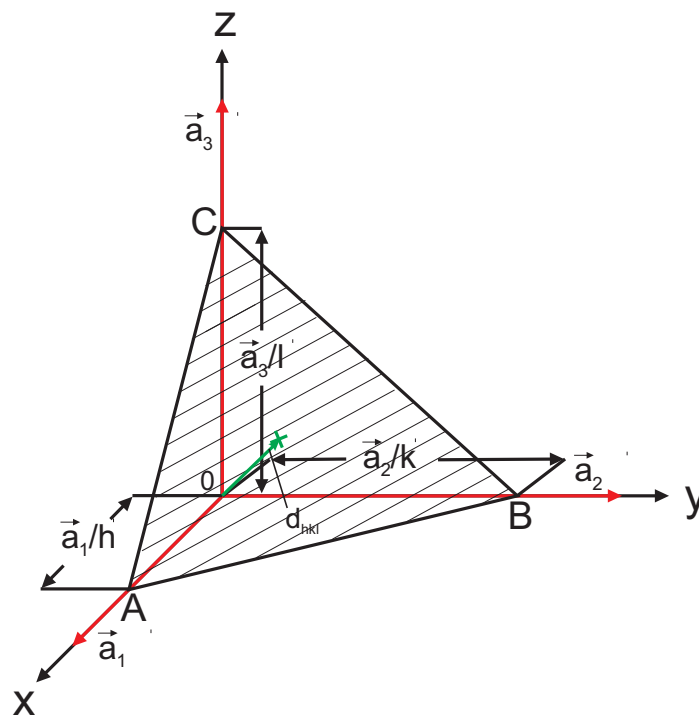
---

Nun sind alle Voraussetzungen gegeben, um die beiden Ansätze (Bragg-Gleichung und Laue-Gleichungen) miteinander zu verknüpfen, um dadurch einen Zusammenhang zwischen realem und reziprokem Gitter zu erhalten. Wie wir bereits festgestellt haben, stehen die reziproken Gittervektoren  $\vec{G}_{hkl}$  senkrecht auf der entsprechenden Ebenenschar im realen Raum. Diese Ebenenschar schneiden die x-Achse gerade bei  $n \cdot \vec{a}_1/h$ , die y-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_2/k$  und die z-Achse bei  $n \cdot \vec{a}_3/l$ , so dass über die hkl-Werte beide Gitter bereits miteinander verknüpft sind. Aus geometrischen Überlegungen gemäß untenstehender Abbildung 7 kann daraus ein handfester Zusammenhang ermittelt werden. Der kürzeste Abstand  $d_{hkl}$  (grün in Abbildung 7) zwischen dem Koordinatenursprung und der Ebene ABC entspricht dem Skalarprodukt zwischen dem Einheitsvektor der Normalen auf der Ebene  $\vec{n}$  und einem der Schnittpunktvektoren zwischen Ebene und den Achsen. Da der reziproke Gittervektor  $\vec{G}_{hkl}$  auch senkrecht auf der Ebene steht, gilt z.B.:

$$d_{hkl} = \vec{n} \cdot \frac{\vec{a}_1}{h} = \frac{\vec{G}_{hkl}}{|\vec{G}_{hkl}|} \cdot \frac{\vec{a}_1}{h} = \frac{(h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3)}{|\vec{G}_{hkl}|} \cdot \frac{\vec{a}_1}{h} \quad (24)$$

$$\rightarrow d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} \quad (25)$$

Der Abstand zwischen zwei Ebenen im realen Raum ist also proportional zum Kehrwert des Betrags des Gittervektors. Dieses Ergebnis wurde bereits in Kapitel 2.1 in Gleichung 7 formuliert, wobei dort die Bedeutung von  $|\vec{G}|$  noch nicht bekannt war. Beim Vergleich von Gleichung 4 mit Gleichung 17 wird deutlich, dass das  $\vec{K}$  in der Bragg-Beziehung gerade dem  $\Delta \vec{k}$  in den Laue-Beziehungen entspricht.



**Abbildung 7** Die Ebene ABC schneidet die x-Achse in  $\vec{a}_1/h$ , die y-Achse in  $\vec{a}_2/k$  und die z-Achse in  $\vec{a}_3/l$ . Dieser Ebene entspricht ein reziproker Gittervektor- bzw.-punkt  $\vec{G}_{hkl}$ . Der Abstand  $d_{hkl}$  zwischen dem Ursprung und dieser hkl-Ebene ist gerade durch den Kehrwert des Betrags des jeweiligen Gittervektors  $|\vec{G}_{hkl}|$  gegeben (Gleichung 25).

---

## 2.4 Modell der Ewaldkugel

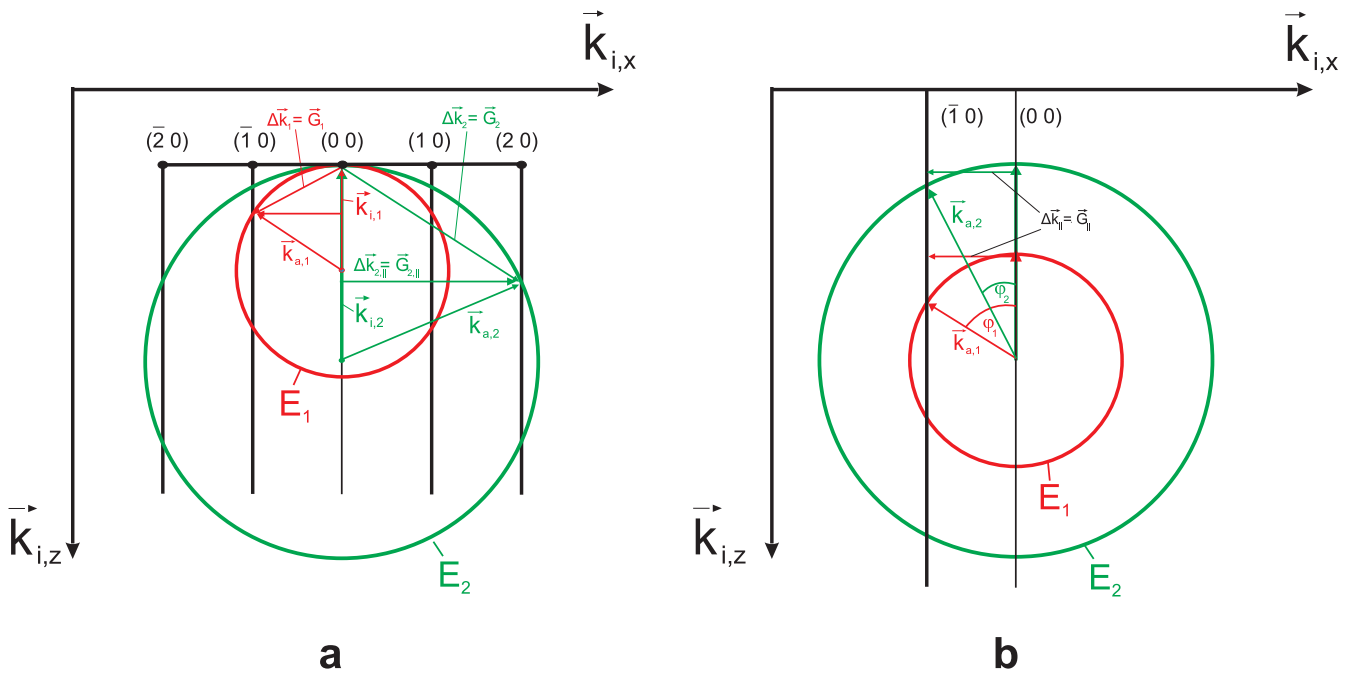
---

Die Ewaldkugel ist eine einfache und wertvolle Konstruktion, um die Bedingungen für einen Beugungsprozess in einem Kristall, also die Laue-Gleichungen, geometrisch anschaulich zu verdeutlichen.

Hierbei wird der Wellenvektor der einfallenden Elektronenwelle  $\vec{k}_i$  so gezeichnet, dass er an einem beliebigen reziproken Gitterpunkt endet. Nun wird um  $\vec{k}_i$  eine Kugel mit dem Radius  $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$  gezeichnet. Schneidet diese Kugel im reziproken Raum einen reziproken Gitterpunkt, so erfüllt gerade derjenige austretende Wellenvektor  $\vec{k}_a$  die Laue-Bedingungen, der an diesem Schnittpunkt endet. Wie bereits in Kapitel 2.2 angedeutet, gelten für Elektronen mit niedriger Energie nur die Laue-Bedingungen für die xy-Ebene, was in der Ewaldkugel durch Säulen entlang der z-Richtung gewährleistet wird. Dadurch ändert sich die Laue-Bedingung dahingehend, dass die Komponente  $\Delta \vec{k}_{||}$  parallel zur Oberfläche gerade der Komponente des reziproken Gittervektors parallel zur Oberfläche  $\vec{G}_{||}$  entsprechen muss.

$$\boxed{\Delta \vec{k}_{||} = \vec{G}_{||}} \quad (26)$$

In Abbildung 8a sind die Ewaldkugeln für zwei unterschiedliche Beträge der Wellenvektoren  $\vec{k}_i$ , sprich für zwei verschiedene Energien der Elektronen, für die 100-Oberfläche eines fcc-Kristalls gezeigt. Die Ewaldkugel des Wellenvektors mit der niedrigeren Energie  $\vec{k}_{i,1}$  (rot) schneidet die z-Säule bei den reziproken Gitterpunkten  $G_{\bar{1}0}$  bzw.  $G_{10}$ , so dass diese als Beugungsreflexe auftauchen. Beim Erhöhen der Energie der einfallenden Elektronen ( $\vec{k}_{i,2}$ , grün), werden zum einen zusätzlich zu den  $G_{\bar{1}0}$  bzw.  $G_{10}$  Reflexen außerdem die  $G_{\bar{2}0}$  bzw.  $G_{20}$  Reflexe sichtbar. Zum anderen führt eine Energieerhöhung des Elektronenstrahls dazu, dass sich das auf dem Phosphorschirm (siehe Kapitel 3.1) entstandene Beugungsmuster "zusammenzieht" und dadurch können Reflexe höherer Ordnung abgebildet werden. Dieses Phänomen, welches durch die fehlende Laue-Bedingung für die z-Komponente auftritt, wird in Abbildung 8b am Beispiel des  $(\bar{1}0)$ -Reflexes verdeutlicht. Es ist erkennbar, dass der Winkel  $\varphi$  mit steigender Energie kleiner wird und sich der Reflex somit in Richtung des (00)-Spots bewegt.



**Abbildung 8** Graphische Beschreibung der Beugungsbedingung anhand der Ewaldkugel: Man zeichne den Wellenvektor der eintreffenden Elektronenwelle  $\vec{k}_i$  so, dass er an einem beliebigen reziproken Gitterpunkt trifft und zieht um ihn die Ewaldkugel mit dem Radius  $2\pi/\lambda$ . Dort, wo die Kugel einen zweiten reziproken Gitterpunkt schneidet, erfüllt der zugehörige Wellenvektor  $\vec{k}_a$  der austretenden Welle die Lauebedingung und ein Reflex ist zu sehen. In **a** ist diese Konstruktion für zwei unterschiedliche Energien gezeigt ( $E_1 < E_2$ ), **b** verdeutlicht das "Zusammenziehen" des LEED-Patterns bei steigender Elektronenenergie aufgrund der fehlenden Laue-Bedingung für die z-Komponente. <sup>[4]</sup>

---

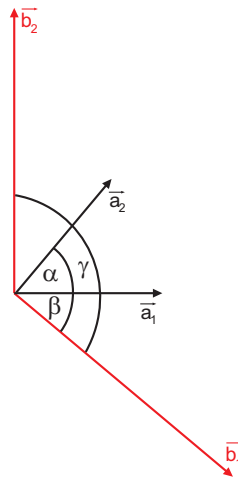
## 2.5 Die Theorie in der Praxis

---

### 2.5.1 Bestimmung der Gitterkonstanten

---

Zunächst ist es sinnvoll, sich erneut die geometrischen Gegebenheiten bezüglich der realen und der reziproken Gittervektoren vor Augen zu führen. In Abbildung 9 ist dies, unter Vernachlässigung der Gittervektoren in z-Richtung, schematisch für einen beliebigen Kristall dargestellt.



**Abbildung 9** Geometrische Darstellung der Zusammenhänge zwischen den realen und reziproken primitiven Gittervektoren.  $|\vec{a}_1|$  steht senkrecht auf  $|\vec{b}_2|$  und schließt mit  $|\vec{b}_1|$  den Winkel  $\beta$  und mit  $|\vec{a}_2|$  den Winkel  $\alpha$  ein.

Es gelten folgende Beziehungen:

$$\gamma = 180^\circ - \alpha$$

$$\beta = 90^\circ - \alpha$$

$$\sin(\gamma) = \sin(\alpha)$$

$$\cos(\beta) = \sin(\alpha)$$

$$\cos(\gamma) = -\cos(\alpha)$$

Für die Länge des reziproken Gittervektors  $|\vec{G}|$  auf der Oberfläche gilt:

$$\begin{aligned} |\vec{G}| &= \sqrt{\vec{G} \cdot \vec{G}} = \sqrt{(h \cdot \vec{b}_1 + k \cdot \vec{b}_2) \cdot (h \cdot \vec{b}_1 + k \cdot \vec{b}_2)} \\ &= \sqrt{h^2 \cdot |\vec{b}_1|^2 + k^2 \cdot |\vec{b}_2|^2 + 2hk \cdot |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \cdot \cos \gamma} . \end{aligned} \quad (27)$$



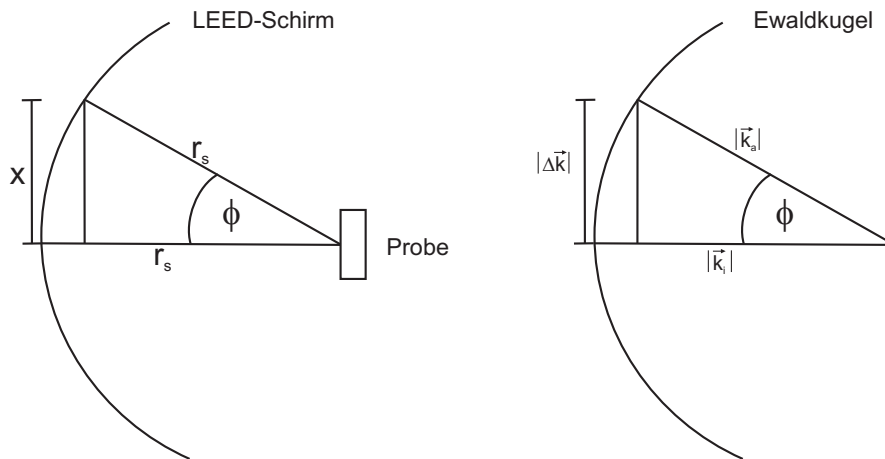
Daraus wird für den Streuvektor erhalten:

$$|\vec{G}| = |\Delta \vec{k}| = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{\sin \alpha}\right)^2 \left(\frac{h}{|\vec{a}_1|}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{\sin \alpha}\right)^2 \left(\frac{k}{|\vec{a}_2|}\right)^2 - \left(\frac{2\pi}{\sin \alpha}\right)^2 \frac{2 \cdot h \cdot k \cdot \cos \alpha}{|\vec{a}_1| \cdot |\vec{a}_2|}}. \quad (28)$$

Es kann eine Konstante  $b$  eingeführt werden, die das Verhältnis der beiden Beträge der primitiven Gittervektoren ausdrückt  $|\vec{a}_2| = b \cdot |\vec{a}_1|$ , so ergibt sich:

$$|\vec{a}_1| = \frac{2\pi}{|\Delta \vec{k}| \cdot \sin \alpha} \sqrt{h^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 - \frac{2 \cdot h \cdot k \cdot \cos \alpha}{b}}. \quad (29)$$

Die Länge des Streuvektors  $|\Delta \vec{k}|$ , die der Länge eines reziproken Gittervektors entspricht, kann mit Hilfe des bekannten Probe-Schirm Abstandes  $r_s$  und des Abstands  $x$  der Reflexe zum (00)-Reflex auf dem Phosphorschirm (aus dem LEED-Muster zu ermitteln) ausgedrückt werden:



**Abbildung 10** Vergleich der apparativen Anordnung mit der Ewaldkugel-Konstruktion; der Winkel  $\phi$  ist in beiden Fällen derselbe. <sup>[3]</sup>

Aus Abbildung 10, Gleichung 2 und der Beziehung  $\lambda = \frac{h_p}{\sqrt{2mE_{kin}}}$  geht hervor:

$$\sin \phi = \frac{x}{r_s} = \frac{|\Delta \vec{k}|}{|\vec{k}_i|} \quad (30)$$

$$(31)$$

$$|\Delta \vec{k}| = \frac{2\pi \sqrt{2mE_{kin}}}{h_p} \cdot \frac{x}{r_s}, \quad (32)$$

wobei  $E_{kin}$  gerade die kinetische Energie der Elektronen ist. Damit geht Gleichung 29 schließlich über in:

$$|\vec{a}_1| = \frac{h_p}{\sqrt{2mE_{kin}}} \cdot \frac{r_s}{x \cdot \sin \alpha} \cdot \sqrt{h^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 - \frac{2 \cdot h \cdot k \cdot \cos \alpha}{b}} \quad (33)$$

## 2.5.2 Bestimmung des Netzebenenabstandes

Aus der Abhängigkeit der Intensitäten der Beugungsspot von der kinetischen Energie der Elektronen kann recht einfach auf den Netzebenenabstand  $d$  geschlossen werden. Da die Elektronenkanone in unserem Versuchsaufbau senkrecht auf die Probe trifft, resultiert für den (00)-Reflex ein Bragg-Winkel von  $\varphi = 90^\circ$ . Aus der Bragg-Beziehung (Gleichung 3) wird somit

$$\sqrt{E_{kin,max}} = n \frac{h_p}{d \sqrt{8m}} \quad (34)$$

erhalten, wobei  $n$  ganze Zahlen sind und  $E_{kin}$  den Energien entspricht, bei denen der direkt reflektierte Reflex ein Maxima durchläuft. Durch die experimentelle Bestimmung von  $E_{kin,max}$  kann durch eine geeignete Auftragung der Netzebenenabstand  $d$  bestimmt werden.

### 3 Experimenteller Aufbau

#### 3.1 Aufbau der LEED-Optik

Ein schematischer Aufbau der LEED-Optik ist in untenstehender Abbildung 11 gezeigt. Elektronen, die in der Elektronenkanone durch ein Wolfram-Rhenium Filament thermisch emittiert werden, werden zunächst durch ein elektrisches Potential  $V_0$  beschleunigt, später fokussiert und treffen dann als Elektronenstrahl mit einem Strahldurchmesser zwischen  $250 \mu\text{m}$  und  $1 \text{ mm}$  senkrecht auf die Probe. Typischerweise wird an das Filament ein Strom von  $2,5\text{-}2,7 \text{ A}$  angelegt, so dass dadurch ein Elektronenstrom von einigen Mikroampere erhalten wird.

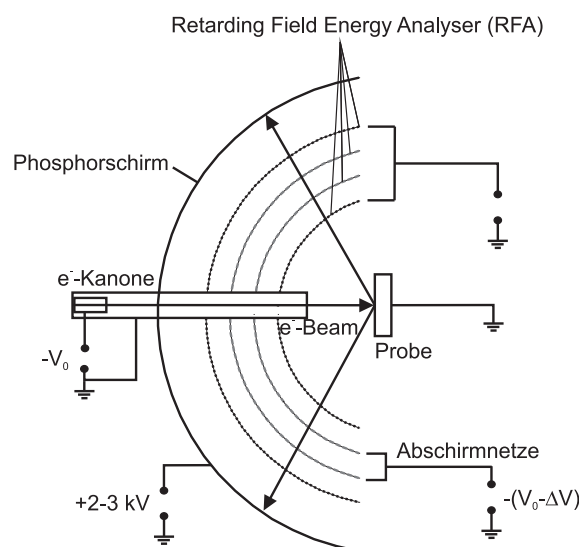


Abbildung 11 Schematischer Aufbau der LEED-Optik. [4]

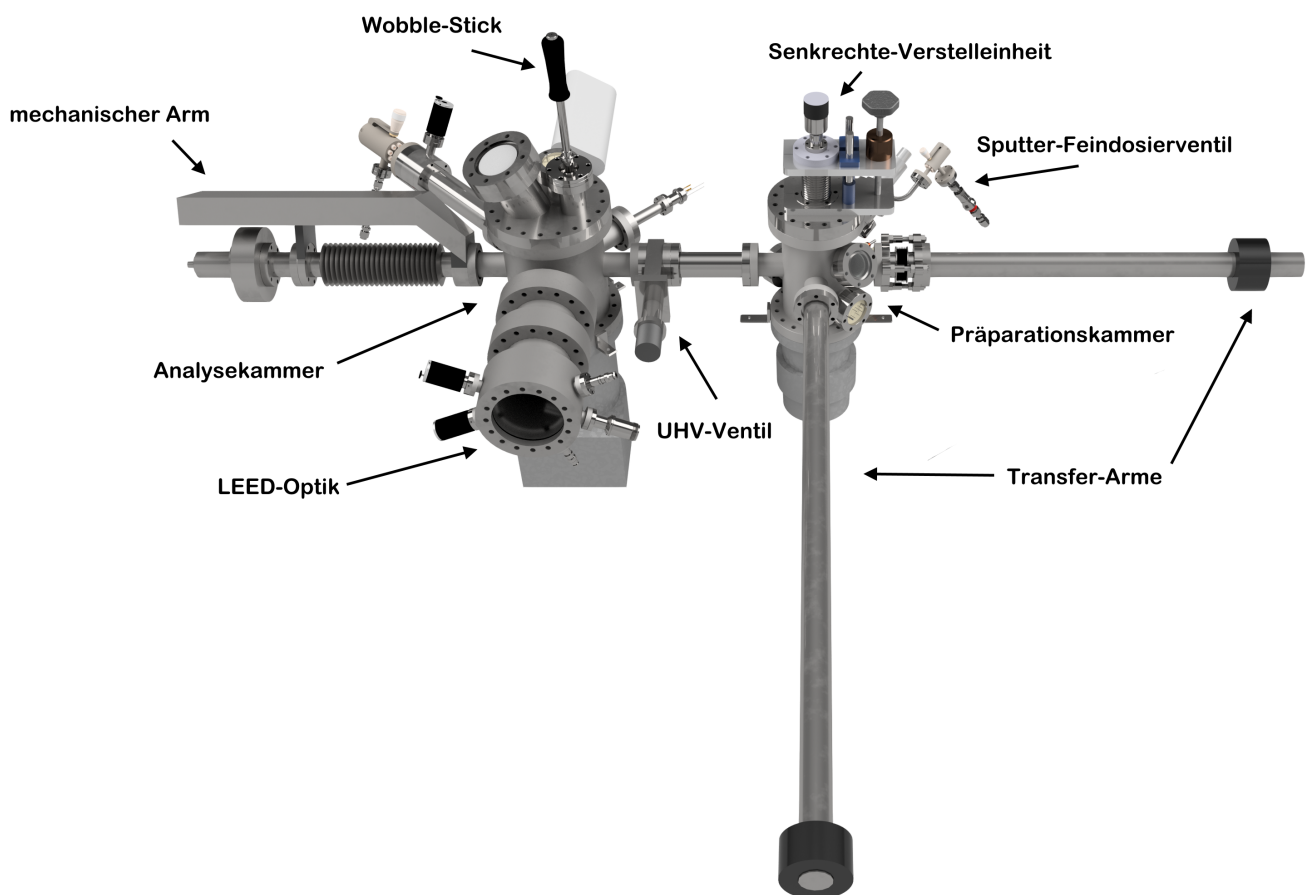
Die Probe ist in der Mitte eines hemisphärischen Phosphorschirms angeordnet, so dass alle gebeugten Elektronen auf einer radialen Flugbahn den Schirm treffen. Dieser Schirm besteht aus Kieselgel, das mit Indium-Zinnoxid und einem fluoreszierenden, durch Kupfer aktiviertes Zinksulfid bedampft ist. Auftreffende Elektronen werden dadurch mittels Lumineszenz für eine relativ lange Zeit sichtbar gemacht, und das Beugungsmuster kann direkt z.B. mit Hilfe einer Kamera aufgenommen werden.

Um auch nur die elastisch gestreuten Elektronen zu detektieren, müssen die Elektronen zunächst den Retarding Field Energy Analyser (RFA) passieren. Dieser besteht aus vier hemisphärischen, mit Gold bedampften Wolframdraht-Netzen (jeweils konzentrisch mit dem Phosphorschirm), durch deren zentrales Loch in der Mitte die Elektronenkanone verläuft. Das erste Netz ist, wie auch die Probe, geerdet, damit sich die Elektronen auf dem Weg zwischen Probe und erstem Netz feldfrei bewegen. Zwischen den nächsten beiden Abschirmnetzen ist ein negatives Potential  $-(V_0 - \Delta V)$  angelegt ( $\Delta V$  beträgt typischerweise ca.  $5 \text{ V}$ ), so dass nur die elastisch gestreuten Elektronen passieren können. Der Schirm an sich liegt dagegen auf einem positivem

Potential (2-3 kV) und garantiert damit, dass die passierten Elektronen auf den Schirm beschleunigt werden. Das äußerste Netz ist geerdet, um das Durchdringen des positiven Potentials des Schirms auf die Abschirmnetze zu reduzieren. Die LEED-Optik befindet sich im Ultrahochvakuum (UHV) (siehe Kapitel 3.2) und das entstandene Beugungsmuster kann von hinten durch einen Fensterflansch betrachtet werden.

### 3.2 Aufbau der Messanordnung

Die für diesen Versuch zu verwendende Apparatur ist in untenstehender Abbildung 12 gezeigt.



**Abbildung 12** Ausschnitt der UHV-Apparatur der Clusterkatalyse im AK-Schäfer. Gezeigt ist der für den LEED-Versuch notwendige Teil, d.h. die Präparationskammer für das Heizen und Sputtern der Probe und die Analysekammer für das eigentliche LEED-Experiment. Die Funktionen einzelner Komponenten sind direkt der Abbildung zu entnehmen.

---

Die Apparatur besteht prinzipiell aus zwei, durch ein UHV-Ventil voneinander getrennten, Vakuumkammern. In der Probenpräparationskammer befindet sich eine Argon-Sputterkanone sowie eine Widerstandsheizung, in der Messkammer ist die LEED-Optik eingebaut. Von oben ragt in die Analysekarmer ein Greifarm (Wobblestick), mit dem die Probe in die jeweiligen Probenhalterungen befördert werden kann. Eine Magnetdurchführung mit Probenwagen ermöglicht das Transferieren der Probe zwischen den beiden Kammern unter der Zuhilfenahme eines magnetisch gekoppelten Transferarms.

Die Sputterkanone erzeugt und beschleunigt durch das Feindosierventil zugegebene Argonionen mit 750 eV auf die Probe, so dass durch deren Aufprall erste Verunreinigungen wie Adsorbate und Restgase von der Probe entfernt werden. Da bei diesem Vorgang jedoch auch ein gewisser Teil der Platinoberfläche abgetragen wird und dadurch die einkristalline Struktur teilweise verloren geht, wird die Probe anschließend mit Hilfe einer Widerstandsheizung für eine Minute auf ca. 1000°C erhitzt. Dadurch rekonstruiert die Oberfläche und die einkristalline Struktur wird wiederhergestellt. Für den Versuch ist es notwendig, in den Kammern einen Druck besser als  $1 \cdot 10^{-9}$  mbar zu generieren. Dies wird durch Turbomolekularpumpen mit einer Saugleistung von 700 L/s für die Messkammer, und 230 L/s für die Probenpräparationskammer garantiert, die beide mit einer Drehschieberpumpe vorevakuiert werden. Der Druck wird jeweils mit einem Glühkathodendruckmesskopf kontrolliert.

---

## 4 Versuchsdurchführung

---

Nach einer Einweisung durch den Assistenten in die Apparatur und deren Steuerelektronik kann der Versuch beginnen. **Der gesamte Ablauf ist zu protokollieren und der Auswertung beizufügen. Beschriftungen einzelner Komponenten sind der Abbildung direkt zu entnehmen.**

---

### 4.1 Reinigung der Kristalloberfläche

---

Um die vorliegende Pt(111)-Oberfläche mit Hilfe des LEED-Experiments richtig charakterisieren zu können, muss die Probe frei von Kohlenstoffresten oder Restgasen sein. Unter der Annahme von Luft als Hauptbestandteil des Restgases innerhalb der Kammer und bei Adsorption jedes Gasteilchens, welches auf die Oberfläche trifft, so kann mit Hilfe von Gleichung 35 leicht abgeschätzt werden, nach welcher Zeit  $t_{mono}$  die Oberfläche vollkommen durch Restgas bedeckt ist.

$$t_{mono} = \frac{1,33 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}\cdot\text{s}}{p} . \quad (35)$$

Bei einem Druck von  $1 \cdot 10^{-9}$  mbar dauert die Belegung der Oberfläche mit einer Monolage etwa 20 Minuten. Zwar ist die Annahme eines sog. Haftkoeffizienten von eins für Luft auf Platin keinesfalls gerechtfertigt, da sich die Probe zuvor aber mindestens über Nacht unbehandelt in der Kammer befand, ist von einer vollkommenen Bedeckung durch Restgas auszugehen. Vor allem Wasser, aber auch Kohlenstoffreste oder ganze organische Moleküle, die im Zuge der in unserem Arbeitskreis betriebenen Forschung evt. auf die Oberfläche dosiert worden sind, könnten die Oberfläche blockieren.

Aus diesem Grund ist es notwendig, die Oberfläche vor dem Beginn des eigentlichen LEED-Experiments zu säubern.

#### (1) Sputtern

Der erste Reinigungsprozess besteht darin, die Oberfläche mit Argonionen zu "beschießen". Hierfür wird die Probe in die Präparationskammer überführt, sodass sie in die Position zum Heizen und Sputtern gebracht werden kann. Da durch den Sputterprozess der Druck in der Kammer sehr schnell auf bis zu  $3 \cdot 10^{-5}$  mbar ansteigt, muss sichergestellt werden, dass sämtliche Ventile zu benachbarten Kammern geschlossen sind. Nachdem die Stromversorgung mit dem Sputterkopf verbunden wurde, kann die Elektronik eingeschaltet werden; auf dem Display sollte der Modus "Standby" angezeigt werden. Durch Drücken der Operate-Taste wird nun ein Filament-

---

Strom von 10 mA aufgebaut (rechts auf dem Display), der durch ein kreisrundes, mit Thorium versetztes Iridium-Filament fließt und Elektronen emittiert. Danach wird zusätzlich in den "HV"-Modus gewechselt, welcher eine Spannung 750 V an einen zylindrisch geformten Draht anlegt, der sich innerhalb des Filaments befindet. Durch das Nadelventil zur Argonflasche wird Argongas vorsichtig in die Anordnung aus Filament und zylindrischem Netz eingeleitet. Durch Stöße der Argonatome mit den Elektronen entsteht ein Plasma und die Argonionen werden mit einer Energie von 750 eV auf die Probe beschleunigt. Der Argonstrom wird so eingestellt, dass ein Strom von 10-20  $\mu\text{A}$  (Mitte im Display) für 20 Minuten fließt.

## (2) Flashen

Durch den Sputterprozess wird die Probe zwar gereinigt, die einkristalline Struktur der Platin-Oberfläche jedoch dadurch auch teilweise zerstört. Um den (111)-Charakter wiederherzustellen, wird die Oberfläche für 15s auf ca. 1000°C erhitzt. Hierfür wird die Heizlampe zuvor noch während des Sputterns ausgeheizt, um sie von desorbierenden Gasen zu befreien. Für das eigentliche Regenerieren der Probe wird ein Strom von 8 A an der Lampe für etwa 15s angelegt. Nach einer Minute wird die Probe wieder in den Probenwagen gesetzt und mittels Magnetdurchführung in die Messkammer transferiert. **Achtung: UHV-Ventil nicht vergessen!** In der Messkammer wird die Probe mit einem Greifarm (Wobble-Stick) in die Halterung vor der LEED-Optik platziert, der Probenwagen zurück gefahren und das UHV-Ventil wieder geschlossen. Die Halterung wird mit Hilfe einer dafür vorgesehenen Einheit und mit einem Schrittmotor mittig vor die LEED-Optik gefahren, welche ihrerseits mit Hilfe einer Lineardurchführung so nah als möglich an die Probe herangefahren wird.

---

## 4.2 Inbetriebnahme des LEED-Gerätes

---

Die LEED-Optik mit dem Phosphorschirm und den Abschirmnetzen ist ein relativ sensibles und teures System, so dass mit Vorsicht und nur unter Aufsicht und Anleitung des Assistenten daran gearbeitet werden darf.

Bevor das LEED-System in Betrieb genommen werden kann, muss zunächst die richtige Verkabelung zwischen Optik und Elektronik hergestellt werden. Hierzu wird das BNC-Kabel mit der Beschriftung "Screen" in die jeweilig dafür vorgesehenen Anschlüsse in Optik bzw. Elektronik gesteckt. Der dicke, mehrpolige Stecker für die Elektronenkanone wird mit dem Anschluss LEED-Mode (Achtung, nicht AES-Mode!) an der Elektronik, und dem Anschluss "E-GUN" an der Optik verbunden. Aus diesem Kabel entspringt das Kabel für die Stromversorgung für die beiden Abschirmnetze, das in den Anschluss "Grid 2" gesteckt wird.

Nach dem Vergewissern, dass zum einen die Regler "Screen Voltage" und "Filament Current" beide auf null (also im Anschlag entgegen des Uhrzeigersinns) gestellt sind, und zum ande-

---

ren der Schalter neben dem Powerknopf auf “LEED”-Mode steht, kann die Elektronik angestellt werden. Danach wird die Schirmspannung (Screen Voltage) langsam auf 3 kV und der Filamentstrom (Filament Current) auf ca. 2,7 A eingestellt, wobei darauf zu achten ist, dass der Filamentstrom 2,8 A nicht übersteigt. Die Wehneltspannung bleibt auf null Volt eingestellt und die Elektronenstrahlenergie (Beam Energy) wird langsam auf ca. 135 eV hochgedreht, so dass der Elektronenstrahlstrom (Beam Current) einige Mikroampere beträgt und erste Reflexe auf dem Schirm erscheinen. Nun kann das Beugungsmuster optimiert werden, indem die Abschirmspannung (Retarding Voltage) so weit minimiert wird, dass die äußeren Spots gerade noch eingefangen werden. Zum Schluss wird die Fokussierspannung (Focus Voltage) so variiert, dass die Spots möglichst scharf und klein werden.

Achtung: Bevor das Gerät wieder ausgeschaltet werden kann, müssen zuerst die Regler “Screen Voltage” und “Filament Current” wieder auf null gestellt werden!

---

### 4.3 Messungen

---

In Aufgabe 2 soll aus den Abständen verschiedener Beugungsspots [(01) (erste Ordnung), (11) (zweite Ordnung) und (20) (dritte Ordnung)] zum (00)-Reflex die Gitterkonstante  $|\vec{a}_1|$  bzw.  $|\vec{a}_2|$  der Pt(111)-Oberfläche ermittelt werden. Hierfür wird ein 1mm dicker Platin-Einkristall verwendet. Die Elektronenenergie wird so angepasst, dass jeder der oben genannten Beugungsreflexe dreimal bei einer jeweils unterschiedlichen Energie auf dem Schirm zu sehen ist. Es ist jeweils zu jedem Bild der entsprechende Energiewert zu notieren. Die Messung wird insgesamt zweimal durchgeführt, so dass für jeden Reflex insgesamt sechs Energiewerte erhalten werden.

In Aufgabe 3 soll die Intesität des (00)-Reflexes in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie betrachtet werden, um aus den gewonnenen Daten den Netzebenenabstand  $d$  zu bestimmen. Hierfür wird der Einkristall so rotiert, dass der (00)-Reflex nicht mehr von der Elektronenkanone verdeckt wird. Die Elektronenstrahlenergie wird von ca. 30 eV an erhöht und die Werte notiert, bei denen der (00)-Reflex Maxima durchläuft. Um die Genauigkeit der Messung zu erhöhen und um eine Abschätzung für den gemachten Fehler zu bekommen, soll jedes Maximum dreimal durchlaufen werden.



## 5 Aufgabenstellungen

### Aufgabe 1 (zur Vorbereitung; bitte zu Hause schon lösen!)

Leiten Sie anhand der primitiven Gittervektoren der Pt(111)-Oberfläche (siehe Abbildung 13) das resultierende LEED-Pattern her und ordnen Sie die Reflexe (10), (11) und (20) zu. Erläutern Sie Ihre Vorgehensweise.

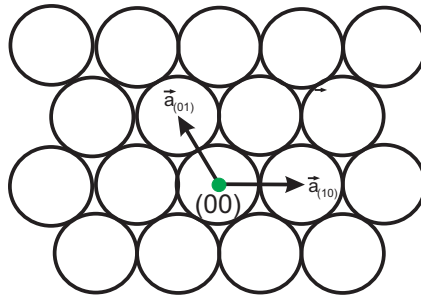


Abbildung 13 Primitive Gittervektoren für die Pt(111)-Oberfläche.

### Aufgabe 2

Berechnen Sie mit Hilfe von Gleichung 33 die Gitterkonstanten  $|\vec{a}_1|$  bzw.  $|\vec{a}_2|$  der Pt(111)-Oberfläche aus den (10), (11) und (20) Reflexen, indem Sie deren Abstand zum 00-Reflex wie oben beschrieben untersuchen. Verwenden Sie hierfür den sichtbaren Schirmdurchmesser  $x_{max} = 65$  mm bzw. alternativ/ergänzend für den Durchmesser der mittig positionierten Elektronenkanone  $x_{kanone} = 10$  mm und für den Probe-Schirm Abstand den Wert  $r_s = 46,7$  mm. Bestimmen Sie den Fehler mittels Gauß'scher Fehlerrechnung und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der Literatur. Schätzen sie die möglichen Fehlergrößen hierfür selbst ab.

### Aufgabe 3

Betrachten Sie den (00)-Reflex und bestimmen Sie die Energien, bei denen dieser Reflex eine maximale Intensität zeigt. Bestimmen Sie durch eine geeignete Auftragung von Gleichung 34 den Netzebenenabstand  $d$ . Ermitteln Sie den Fehler mittels Gauß'scher Fehlerrechnung und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der Literatur.

Für die Aufgaben 2 und 3 soll das Ergebnis mit dem Literaturwert verglichen werden. Diese erhalten Sie aus der Angabe, dass die Gitterkonstante der fcc-Elementarzelle  $a = 3,92$  Å beträgt.<sup>[5]</sup>

---

## Literatur

---

- [1] Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenbourg , **1999**.
- [2] R. Barth, *Oberflächenanalytik mit Elektronen*, Universität Heidelberg, **2007**.
- [3] D. B. Williams, *Transmission Electron Microscopy - Diffraction 2*, Springer, **1996**.
- [4] G. Held, *Low-Energy Electron Diffraction*, Bunsen-Magazin, **2010**.
- [5] R. Wiesendanger, *Scanning probe microscopy and spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge, **1994**.
- [6] R.H. Schroder, N. Schmitz-Pranghe und R. Kohlhaas, *Zeitschrift für Metallkunde*, 63, 12, **1999**.