

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

LONGITUDINALE UND TRANSVERSALE SPIN-
POLARISATION BEI DER BEUGUNG NIEDER-
ENERGETISCHER ELEKTRONEN: EINFLUSS
VON ZEITUMKEHR, KRISTALLSYMMETRIE
UND KRISTALLPOTENTIAL

Peter Bauer

IPP 9/34

Dezember 1980

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

Abstract

In electron-atom scattering there are strong polarization effects due to spin orbit coupling. In low-energy electron diffraction (LEED) from single-crystal surfaces these polarization effects are strongly influenced by multiple scattering. This is one of the most important results of polarization investigations in LEED done up to now using Au(110) und W(001) surfaces and has further consequences: If an unpolarized electron beam is diffracted, the polarization vector after diffraction is, in general, only perpendicular to the scattering plane in those cases, where the scattering plane is a mirror plane of the crystal, otherwise the polarization components parallel to the scattering plane do not vanish; time reversal changes not only the sign but also the direction of the polarization vector while its length (the degree of polarization) remains unchanged.

This study illustrates these effects of multiple scattering on polarization for the simple case of double scattering processes. The fact that the basic symmetry behaviour of the polarization in diffraction is correctly described by the foregoing general reasoning is experimentally proved by the means of rotational diagrams (azimuthal measurement in the mirror beam) of the transverse polarization component P_n perpendicular to the scattering plane and of the longitudinal component P_k (parallel to the momentum of the diffracted electrons) of an electron beam diffracted from a Pt(111) surface which has threefold symmetry. This is the first time that the longitudinal polarization component has been measured in a diffraction experiment, yielding maximum values of 30 %, while for the transverse component P_n maximum values of 95 % have been found.

Analysis of pronounced polarization maxima in the specular beam while varying the polar angle and the diffraction energy shows that strong polarization effects may appear when the direction of the incident or diffracted beam coincides with certain crystallographic directions and when electronic surface states are excited.

Measurements of the polarization components P_n and P_k while varying the polar and the azimuthal angles are compared with corresponding results of the relativistic dynamic LEED theory of R. Feder. As the Pt(111) surface is unreconstructed - this is an essential assumption of the calculation -, this comparison proves the quality of the structure independent model assumptions of the theory (effective scattering potential, inner potential, Debye temperature). The best fit of the theoretical results to the experimental data is achieved when an effective scattering potential is chosen in which an energy-dependent exchange approximation is included. A variation of the imaginary part of the inner potential and of the first layer spacing of the crystal lattice within a few per cent has only a weak influence on the results.

Zusammenfassung:

Streut man langsame Elektronen an Atomen, so treten infolge der Spin-Bahn-Wechselwirkung starke Polarisierungseffekte auf. Bei der Beugung von Elektronen (LEED) an Einkristalloberflächen werden diese Polarisierungseffekte durch Mehrfachstreuung wesentlich beeinflusst. Dies ist eines der wichtigsten Ergebnisse der bisher durchgeführten Polarisierungsuntersuchungen bei LEED an Au(110) und W(001) Oberflächen und hat weiterreichende Konsequenzen: Beugt man einen unpolarisierten Elektronenstrahl, so steht nach dem Beugungsprozeß der Polarisationsvektor im allgemeinen nur dann senkrecht auf der Streuebene, wenn die Streuebene gleich einer Symmetrieebene des Kristalls ist, andernfalls verschwinden die beiden Polarisationskomponenten parallel zur Streuebene nicht; bei Zeitumkehr ändert der Polarisationsvektor nicht nur sein Vorzeichen, sondern auch seine Richtung bei gleichbleibender Länge (Polarisationsgrad).

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden diese Konsequenzen der Mehrfachstreuung auf die Polarisierung am übersichtlichen Beispiel von Zweifachstreuung veranschaulicht. Der experimentelle Nachweis dafür, daß durch diese allgemeinen Überlegungen das prinzipielle Symmetrieverhalten der Polarisierung bei der Beugung richtig beschrieben wird, wird mit Hilfe von Rotationsdiagrammen (azimutabhängige Messung im Spiegelstrahl) der transversalen Polarisationskomponente P_n senkrecht zur Streuebene und der longitudinalen Komponente P_k (parallel zum Impuls der gebeugten Elektronen) bei Beugung an der dreizähligen Pt(111) Oberfläche erbracht. Diese erstmalige Messung der longitudinalen Polarisationskomponente

in einem Beugungsexperiment hat Maximalwerte von 30 % ergeben, für die Transversalkomponente P_n sind Maximalwerte von 95 % gefunden worden.

Die Analyse ausgeprägter Polarisationsextrema im Spiegelstrahl in Abhängigkeit von Polarwinkel und Beugungsenergie ergibt, daß durch Einschub in bestimmte kristallographische Richtungen und durch Anregung von Oberflächenzuständen starke Polarisierungseffekte auftreten können.

Polar- und azimutwinkelabhängige Messungen der Polarisationskomponenten P_n und P_k in zwei Nebenstrahlen werden mit den entsprechenden Ergebnissen der dynamischen relativistischen LEED-Theorie von R. Feder verglichen. Da die Pt(111) Oberfläche unrekonstruiert ist - dies ist eine wesentliche Voraussetzung der Rechnung -, ermöglicht dieser Vergleich Aussagen über die strukturunabhängigen Modellannahmen der Theorie (effektives Streupotential, inneres Potential, Debye-Temperatur). Beste Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie ergibt sich für die Wahl eines effektiven Streupotentials, das die Austauschwechselwirkung energieabhängig approximiert, während eine Variation des imaginären inneren Potentials und des Abstandes der obersten beiden Atomlagen innerhalb einiger Prozent nur einen geringen Einfluß auf das Ergebnis hat.

INHALT

1. EINLEITUNG	1
2. POLARISATIONEFFEKTE BEI STREUUNG UND BEUGUNG VON ELEKTRONEN . .	4
2.1 Spin und Spinpolarisation	4
2.2 Streuung an einem Zentralpotential	9
2.2.1 Anschauliches Bild.	9
2.2.2 Lösungsweg des Streuproblems	13
2.2.3 Intensität und Polarisation bei Einfach- und Mehrfachstreuung	17
2.3 Beugung an Kristalloberflächen	19
2.3.1 Oberflächensymmetrie und LEED-Bild	19
2.3.2 Kinematisches Modell der Beugung	24
2.3.3 Einfluß von Vielfachstreuung-Kristallsymmetrien . . .	26
2.3.4 Zeitumkehrinvarianz	28
3. AUFBAU UND VORBEREITUNG DES EXPERIMENTS	33
3.1 Prinzipieller Aufbau	34
3.2 Vakuumsystem	36
3.3 LEED-System	38
3.3.1 LEED-Elektronenkanone	38
3.3.2 Kristallmanipulator	38
3.3.3 LEED-System	41
3.3.4 Messanordnung für Auger-Elektronen-Spektroskopie . .	42
3.4 Polarisationsdetektor	45
3.5 Kristallbehandlung	48
3.5.1 Präparation der (111)-Oberfläche	48
3.5.2 In situ Reinigung des Kristalls	49

4. EXPERIMENTELLE ERGEBNISSE	50
4.1 Polarisierung als Funktion des Polarwinkels	51
4.1.1 Empfindlichkeit der Meßmethode und Zuverlässigkeit der Ergebnisse	52
4.1.2 Polarisierung im Spiegelstrahl als Funktion des Polarwinkels	55
4.2 Polarisierung als Funktion des Azimutwinkels.	65
5. VERGLEICH EXPERIMENT - THEORIE	73
5.1 Theoretisches Modell	73
5.2 Vorgangsweise	76
5.3 Vergleich der Polarisationsdaten	77
5.3.1 Energieabhängigkeit in den Nebenstrahlen	77
5.3.2 Polarwinkelabhängigkeit in den Nebenstrahlen	81
5.3.3 Rotationsdiagramme	86
6. ZUSAMMENFASSUNG	90
7. LITERATURVERZEICHNIS	92

1. EINLEITUNG

In dieser Arbeit werden spinabhängige Effekte bei der Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) an einer Platin(111)-Oberfläche untersucht. Das Ziel dabei ist, den Einfluß der geometrischen Struktur des Kristalls (insbesondere der Kristallsymmetrie), des effektiven Streupotentials und der Zeitumkehr auf die Spinpolarisation bei LEED zu prüfen.

Das einfachste Modell, aus dem konkrete Aussagen über Polarisierungseffekte bei LEED folgen, ist das kinematische Modell, das die Vielfachstreuung vernachlässigt. In dieser Näherung verhält sich die Polarisation bei Beugung am Kristall genauso wie bei der Streuung am freien Atom (Maison 1966): Die Polarisation ist bei gegebener Elektronenenergie und gegebenem Streuwinkel allein durch die Streueigenschaften der Kristallatome bestimmt, sie ist unabhängig von der Kristallstruktur und von der Orientierung der Elektronenstrahlen zum Kristall. Die Spinvorzugsrichtung steht dabei senkrecht zu der durch einfallenden und gebeugten Strahl aufgespannten Streuebene.

Infolge der Größe des Wirkungsquerschnitts für elastische Streuung der Elektronen im Kristall ist die Vernachlässigung der Vielfachstreuung nicht gerechtfertigt (Bauer 1975). Die Spinpolarisation wird durch Vielfachstreuung wesentlich beeinflusst: Sie hängt empfindlich vom Azimut (φ) und Polarwinkel (θ) des einlaufenden bzw. auslaufenden Strahles ab, Messungen bei gleichem Streuwinkel an verschiedenen Strahlen liefern vollkommen unterschiedliche Ergebnisse (Müller 1977 a). Die Spinvorzugsrichtung steht nur in Ausnahmefällen senkrecht zur Streuebene (z.B. wenn die Streuebene eine Spiegelebene des Kristalls ist), im allgemeinen verschwinden die in der Streuebene liegenden Polarisationskomponenten $\underline{P}_{\parallel}$ nicht.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird das prinzipielle, durch die Kristallsymmetrie und die Zeitumkehr bestimmte Verhalten der Spinpolarisation am einfachen Modell der Zweifachstreuung dargestellt; experimentell wird es an Hand von Rotationsdiagrammen der transversalen Polarisationskomponente P_n senkrecht zur Streuebene und der longitudinalen Komponente P_k parallel zum auslaufenden Strahl demonstriert. Da für die vorliegenden Untersuchungen eine Kristallfläche mit dreizähliger Symmetrie ausgewählt wurde, ist an den Rotationsdiagrammen auch der Einfluß der Zeitumkehr auf die Polarisation direkt erkennbar. Mit den Rotationsdiagrammen $P_k(\vartheta)$ wurde erstmals eine der in der Streuebene liegenden Komponenten P_{\parallel} in einem Beugungsexperiment gemessen.

Als weitere interessante Fragestellung wird untersucht, wie sich die regelmäßige Anordnung der Atome im Kristall auf die Spinpolarisation bei LEED auswirkt. Durch systematische Variation der Energie, des Polarwinkels und des Azimuts werden daher die Ursachen von ausgeprägten Polarisationsstrukturen analysiert; dabei zeigt sich, daß u.a. bei Koinzidenz der Strahlrichtungen mit gewissen kristallographischen Richtungen und bei Anregung von Oberflächenzuständen auffallende Polarisierungseffekte auftreten können.

Für eine mögliche Anwendung von Spinpolarisationsmessungen bei LEED zur Oberflächenstrukturanalyse ist die Frage wichtig, ob und wie gut die experimentellen Ergebnisse durch Rechnungen beschrieben werden können. Ein Vergleich von Messungen und Rechnungen kann hier infolge der Auswahl des Kristalls sinnvoll durchgeführt werden: die Rechnungen setzen im derzeitigen Stand der Theorie unrekonstruierte Kristalloberflächen voraus; die Platin(111)-Oberfläche ist unrekonstruiert, wie LEED-Untersuchungen (Kesmodel et al. 1977, Adams et.al. 1979) und Ionenstreuexperimente (Davies et.al. 1978, Bøgh et.al. 1977 und van der Veen et al. 1979) gezeigt haben. Als einzige Abweichungen von der Geometrie des Grundgitters wird eine

Aufweitung des Abstandes der obersten beiden Atomlagen um $(1,5 \pm 1) \%$ gefunden. Diese Aufweitung kann in der Rechnung berücksichtigt werden; ihre Auswirkungen sind aber so klein, daß sie in keinem Fall den Vergleich der Messungen mit der Theorie wesentlich beeinträchtigen. Signifikante Abweichungen der Rechnungen von den experimentellen Daten sind daher in den strukturunabhängigen Annahmen der Theorie begründet. Durch Variation dieser Modellannahmen und Vergleich mit dem Experiment lassen sich diese Diskrepanzen verringern.

Die bisher veröffentlichten spinpolarisierten LEED-Experimente wurden ausschließlich an den Flächen $W(001)$ und $Au(110)$ durchgeführt (O'Neill et al. 1975, Müller et al. 1976, Müller 1977a,b u.c, Calvert et al. 1977, Kalisvaart et al. 1978, Riddle et al. 1978, 1979, Kirschner und Feder 1979, Wang et al. 1979, Mahan et al. 1980 und Reihl 1980). Beide Kristalloberflächen weisen bei tiefen Temperaturen eine Rekonstruktion der Oberfläche auf, oberhalb einer charakteristischen Temperatur - für $W(001)$ liegt sie bei etwa 400 K (Debe et al. 1977), für $Au(110)$ bei etwa 700 K (Fedak et al. 1967 und Wolf 1972) - entspricht das LEED-Bild der Grundgitterstruktur der Kristallfläche. Es braucht dann jedoch noch nicht die Geometrie des Grundgitters vorzuliegen; durch Feldionenmikroskopie wurde z.B. gezeigt, daß die $W(001)$ -Oberfläche auch bei 460 K noch Reste einer Überstruktur besitzt (Melmed 1979). Außerdem ist für $W(001)$ und für $Au(110)$ auch bei hohen Temperaturen der Abstand der ersten und zweiten Atomlage vom Wert des Kristallinneren verschieden, aber nicht genau bekannt (van Hove und Tong 1975, Lee et al. 1977, Debe und King 1979, Feldman et al. 1977, Feder und Kirschner, 1978, Feder et al. 1977, Müller 1977a).

Diese Unsicherheiten in der Kristallstruktur existieren bei $Pt(111)$ praktisch nicht. Daher kommt dem hier durchgeführten Vergleich besondere Bedeutung zu.

2. POLARISATIONEFFEKTE BEI STREUUNG UND BEUGUNG VON ELEKTRONEN ¹⁾

2.1 Spin und Spinpolarisation

Die Beschreibung eines Eigendrehimpulses (Spin) von Elektronen ist nicht in der Schrödinger'schen Quantenmechanik, sondern erst in der Dirac-Theorie enthalten. Schon 1925 wurde die Existenz des Elektronenspins von Uhlenbeck und Goudsmit zur Erklärung der Atomspektren postuliert.

Dem Elektronenspin \underline{s} ist ein magnetisches Moment $\underline{\mu}_s$ zugeordnet. Es gilt

$$2.1) \quad \underline{\mu}_s = g_s \cdot \frac{e}{2mc} \cdot \underline{s} \quad \text{mit } g_s \approx 2$$

Eine der Spinkomponenten, sie sei s_z , besitzt bezüglich einer ausgezeichneten Richtung zwei Eigenwerte, nämlich $s_z = +\hbar/2$ und $s_z = -\hbar/2$. Bei Messung von s_z ist simultan keine der anderen Spinkomponenten (s_x und s_y) meßbar. Die gebräuchlichste Darstellung des Spinoperators erfolgt durch die Paulischen Spinmatrizen:

$$2.2) \quad \underline{s} = \frac{\hbar}{2} \cdot \underline{\sigma} \quad \text{mit } \underline{\sigma} = (\underline{\sigma}_x, \underline{\sigma}_y, \underline{\sigma}_z), \text{ wobei}$$

$$2.3) \quad \underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Eigenfunktionen der Spinmatrizen sind zweikomponentige Wellenfunktionen (Spinoren). Die Eigenwertgleichungen für $\underline{\sigma}_z$ lauten:

¹⁾ Ausführliche Beschreibungen von Spin und Spinpolarisation finden sich z.B. bei Messiah 1964, Eckstein, 1970 und Kessler, 1976.

$$2.4) \quad \underline{\sigma}_z \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} =: 1 \cdot \chi_{+z}$$
$$\underline{\sigma}_z \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (-1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =: (-1) \cdot \chi_{-z}$$

Die beiden Eigenfunktionen χ_{+z} und χ_{-z} bilden eine vollständige, orthogonale Basis; jeder Spinzustand lässt sich darstellen als Linearkombination (kohärente Überlagerung):

$$2.5) \quad \chi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_1 \cdot \chi_{+z} + a_2 \cdot \chi_{-z} \quad \text{mit}$$
$$\langle \chi | \chi \rangle = (a_1^* \ a_2^*) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$|a_1|^2$ und $|a_2|^2$ geben die Wahrscheinlichkeit an, an Elektronen im Spinzustand χ den Eigenwert $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$ für s_z zu messen.

Der Spinor χ ist die zur Komponente $\underline{e} \cdot \underline{\sigma}$ des Spinoperators gehörige Eigenfunktion. Die Spinorkomponenten a_1 und a_2 sind durch den Richtungsvektor \underline{e} gegeben (siehe Bild 2.1):

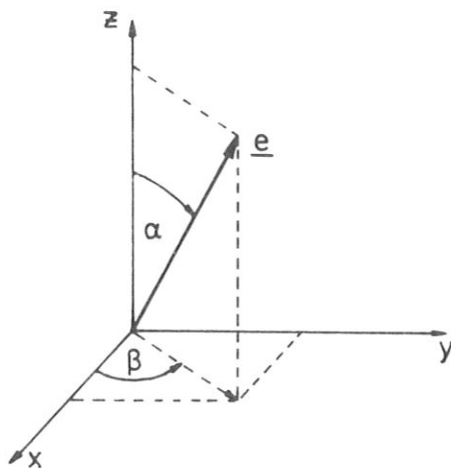


Bild 2.1: Definition der Winkel α und β , die die Ausrichtung von \underline{e} beschreiben.

2.6) $a_1 = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad a_2 = \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot e^{i\beta}$ für den Eigenwert +1
 $a_2 = \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad a_1 = -\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot e^{-i\beta}$ für den Eigenwert -1

Wählt man zum Beispiel $\alpha = \pi/2$ und $\beta = 0$, so erhält man die Spinfunktion in x-Richtung χ_{+x} :

2.7) $\chi_{+x} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\chi_{+z} + \chi_{-z})$

Für die Elektronenwellenfunktion $\Psi(\underline{r}, \underline{s})$ gilt infolge der Vertauschbarkeit von Orts- und Spinvariablen

2.8) $\Psi(\underline{r}, \underline{s}) = \psi(\underline{r}) \cdot \chi(\underline{s}) = \psi(\underline{r}) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$

Der Spinpolarisationsvektor \underline{p} ist definiert als Erwartungswert $\langle \underline{s} \rangle$ des Vektoroperators \underline{s} . Für den Polarisationsvektor eines Ensembles von Elektronen im Spinzustand χ gilt also:

2.9) $\underline{p} := \langle \chi | \underline{s} | \chi \rangle = (\langle \chi | \underline{s}_x | \chi \rangle, \langle \chi | \underline{s}_y | \chi \rangle, \langle \chi | \underline{s}_z | \chi \rangle) = (\sin\alpha \cdot \cos\beta, \sin\alpha \cdot \sin\beta, \cos\alpha)$

Für den Polarisationsgrad $P_{\text{abs}} = |\underline{p}| = \sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}$ gilt in diesem reinen Zustand $P_{\text{abs}} = 1$.

Im allgemeinen ist ein Ensemble von Elektronen eine statistische Mischung von verschiedenen reinen Spin-Zuständen χ_i mit Besetzungswahrscheinlichkeiten η_i . Der Polarisationsvektor für diesen Mischungszustand ergibt sich zu

$$2.10) \quad \underline{P} = \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \underline{P}_i = \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \langle \chi_i | \underline{\sigma} | \chi_i \rangle ,$$

wobei $\eta_i = N_i / \sum_i N_i$ und $\sum_i \eta_i = 1$

N_i = Anzahl der Elektronen
im Zustand i .

In einem Mischungszustand kann der Polarisationsgrad folgende Werte annehmen:

$$2.11) \quad 0 \leq P_{abs} \leq 1$$

Die Eigenschaften statistischer Mischungen werden durch die Dichtematrix beschrieben. Für ein Ensemble von Elektronen in Spinzuständen $\chi_i = \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \end{pmatrix}$ ist die (Spin)-Dichtematrix definiert durch

$$2.12) \quad \underline{\rho} := \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \chi_i \chi_i^\dagger = \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1i}^* & a_{2i}^* \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \begin{pmatrix} |a_{1i}|^2 & a_{1i} a_{2i}^* \\ a_{1i}^* a_{2i} & |a_{2i}|^2 \end{pmatrix}$$

Ist $\underline{\rho}$ bekannt, so sind der Polarisationsvektor und die Intensität bestimmt durch

$$2.13) \quad I = \text{Sp } \underline{\rho} \quad I: \text{ Anzahl der Elektronen (Intensität)}$$

$$\underline{P} = \langle \underline{\sigma} \rangle = \frac{\text{Sp } \underline{\rho} \underline{\sigma}}{\text{Sp } \underline{\rho}}$$

Als Beispiel sei P_z berechnet:

$$\begin{aligned}
 2.14) \quad \underline{\rho}_z &= \frac{\text{SP} \underline{\rho} \underline{\sigma}_z}{\text{SP} \underline{\rho}} = \frac{\text{SP} \sum_i \eta_i \cdot \begin{pmatrix} |a_{1i}|^2 & a_{1i} a_{2i}^* \\ a_{1i}^* a_{2i} & |a_{2i}|^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}{\text{SP} \sum_i \eta_i \cdot \begin{pmatrix} |a_{1i}|^2 & a_{1i} a_{2i}^* \\ a_{1i}^* a_{2i} & |a_{2i}|^2 \end{pmatrix}} = \\
 &= \frac{\sum_i \eta_i \cdot \text{SP} \begin{pmatrix} |a_{1i}|^2 & -a_{1i} a_{2i}^* \\ a_{1i}^* a_{2i} & -|a_{2i}|^2 \end{pmatrix}}{\sum_i \eta_i \text{SP} \begin{pmatrix} |a_{1i}|^2 & a_{1i} a_{2i}^* \\ a_{1i}^* a_{2i} & |a_{2i}|^2 \end{pmatrix}} = \frac{\sum_i \eta_i (|a_{1i}|^2 - |a_{2i}|^2)}{\sum_i \eta_i (|a_{1i}|^2 + |a_{2i}|^2)} =: \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}
 \end{aligned}$$

Hierbei gibt $N_{\uparrow}/(N_{\uparrow}+N_{\downarrow})$ [bzw. $N_{\downarrow}/(N_{\uparrow}+N_{\downarrow})$] die Wahrscheinlichkeit an, an einem Elektron aus dem betrachteten Ensemble für $\underline{\sigma}_z$ den Eigenwert $+\hbar/2$ (bzw. $-\hbar/2$) zu messen. Eine übersichtliche Darstellung für die Dichtematrix erhält man, wenn man sie als Linearkombination der Matrizen 1 , $\underline{\sigma}_x$, $\underline{\sigma}_y$ und $\underline{\sigma}_z$ darstellt:

$$2.15) \quad \underline{\rho} = \frac{1}{2} \cdot (\underline{1} + \underline{P} \cdot \underline{\sigma}) = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1+P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1-P_z \end{pmatrix}$$

(Für die Herleitung von Formel 2.15 siehe zum Beispiel Eckstein 1970).

Mit dieser Darstellung lassen sich die Dichtematrizen für einige Spezialfälle sofort angeben. Für ein vollständig polarisiertes Ensemble gilt:

$$2.16) \quad P_z = 1, P_x = P_y = 0 \quad : \quad \underline{\rho}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_z = -1, P_x = P_y = 0 \quad : \quad \underline{\rho}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Daraus folgt für ein unpolarisiertes Ensemble:

$$2.17) \quad P_x = P_y = P_z = 0 \quad : \quad \underline{\underline{Q}}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{Q}}_1 + \underline{\underline{Q}}_2)$$

und für ein teilweise in z-Richtung polarisiertes Ensemble

$$2.18) \quad P_x = P_y = 0, \quad 0 < P_z \equiv P < 1 \quad : \quad \underline{\underline{Q}}_4 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix} = \\ = \frac{1+P}{2} \cdot \underline{\underline{Q}}_1 + \frac{1-P}{2} \cdot \underline{\underline{Q}}_2$$

Ein unpolarisierter Strahl kann also als inkohärente Überlagerung zweier total polarisierter Teilstrahlen mit entgegengesetzten Spinvorzugsrichtungen und mit gleichen Intensitäten aufgefaßt werden; analog ergibt sich für teilweise polarisierte Strahlen für das Verhältnis der Teilintensitäten

2.19)

$$\frac{I_{\uparrow}}{I_{\downarrow}} = \frac{1+P}{1-P}$$

2.2 Streuung an einem Zentralpotential

2.2.1 Anschauliches Bild

Bei der Streuung von Elektronen an einem Zentralpotential $V(r)$ werden Polarisierungseffekte durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung hervorgerufen. Das Auftreten der Spin-Bahn-Wechselwirkung läßt sich folgendermaßen verstehen:

Bei Streuung an einem Atom (mit einem Potential $V(r)$) werden Elektronen durch das anziehende Potential bis zu großen Geschwindigkeiten beschleunigt, so daß besonders

bei hoher Kernladungszahl des Atoms relativistische Effekte merkbar werden. Um qualitative Aussagen zu erhalten, ist es sinnvoll, den Ablauf des Prozesses im Ruhesystem des Elektrons zu betrachten:

Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich der Atomkern am Elektron vorbei und erzeugt ein Magnetfeld $\underline{B} \sim \underline{E} \times \underline{v}$, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons $\underline{\mu}_s$ wechselwirkt; die Wechselwirkungsenergie U_{SB} ist gegeben durch

$$2.20) \quad U_{SB} = - \underline{\mu}_s \cdot \underline{B} \sim \underline{s} \cdot (\underline{E} \times \underline{v}) \sim \underline{s} \cdot (\underline{E} \times \underline{p})$$

$$\text{Mit } \underline{E} = \frac{dV}{dr} \cdot \frac{r}{r} \text{ folgt } U_{SB} \sim \frac{1}{r} \cdot \frac{dV}{dr} \cdot \underline{s} \cdot \underline{l} \quad \text{mit } \underline{l} = \underline{r} \times \underline{p}$$

Der richtige aus der relativistischen Theorie folgende Wert ist

$$2.21) \quad U_{SB} = - \frac{1}{2} \cdot \frac{e}{m^2 \cdot c^2} \cdot \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \underline{s} \cdot \underline{l}$$

Da der Potentialgradient in Kernnähe maximal ist, ist dort die Spin-Bahn-Wechselwirkung ebenfalls am stärksten.

In diesem Streuprozeß ist die Quantisierungsrichtung senkrecht zur Streuebene, andernfalls wäre die Paritätserhaltung verletzt (Kessler 1976): \underline{k}_0 sei der Impuls (Wellenvektor) vor und \underline{k} der Impuls (Wellenvektor) nach der Streuung. Wenn die Komponenten des Polarisationsvektors \underline{p} , die in der Streuebene liegen, nicht verschwinden, ist $\underline{p} \cdot \underline{k} \neq 0$ oder $\underline{p} \cdot \underline{k}_0 \neq 0$ und ändert bei Spiegelung des Streuprozeses am Ursprung das Vorzeichen ($\underline{k}_0 \rightarrow -\underline{k}_0$ und $\underline{k} \rightarrow -\underline{k}$). Der Polarisationsvektor kann also nur invariant gegen die Paritätsoperation sein, wenn $\underline{p} \cdot \underline{k} = \underline{p} \cdot \underline{k}_0 = 0$ und $\underline{p} = p \cdot \underline{n}$ ($\underline{n} = \frac{e_{\underline{k}_0 \times \underline{k}}}{|\underline{k}_0 \times \underline{k}|} =$ Einheitsvektor senkrecht zur Streuebene) ist.

Infolge des Auftretens der Spin-Bahn-Wechselwirkung besitzen Elektronen mit bezogen auf \underline{B} verschiedenen Spinrichtungen unterschiedliche Streupotentiale (siehe Bild 2.2) und daher unterschiedliche Streuwirkungsquerschnitte ($W_{\uparrow}, W_{\downarrow}$).

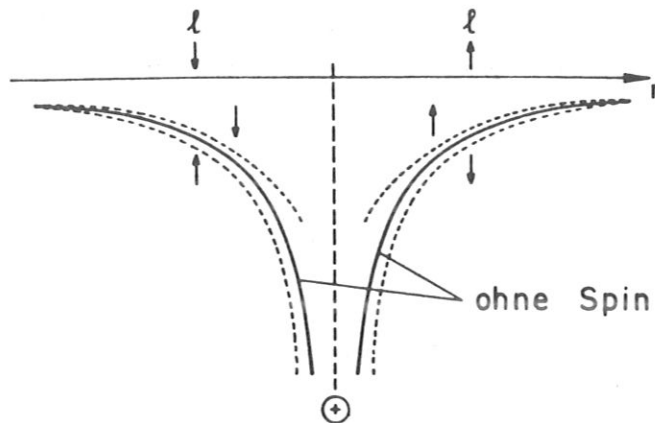


Bild 2.2: Streupotential eines Atoms in Abhängigkeit vom Abstand des Elektrons zum Atomkern für die möglichen Einstellungen von Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons (nach Kessler 1976).

Für einen anfangs unpolarisierten Strahl ($I_{O\uparrow} = I_{O\downarrow}$) ist der Polarisationsvektor \underline{P} nach der Streuung gegeben durch

$$2.22) \quad \underline{P} = \frac{W_{\uparrow} - W_{\downarrow}}{W_{\uparrow} + W_{\downarrow}} \cdot \underline{n} = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}, \quad N_{\uparrow, \downarrow} = I_0 \cdot W_{\uparrow, \downarrow}$$

$$\underline{n} = \frac{\underline{e}_{\underline{k}_0 \times \underline{k}}}{|\underline{k}_0 \times \underline{k}|}$$

In Bild 2.3 und Bild 2.4 sind für Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen der differenzielle Wirkungsquerschnitt W für die beiden möglichen Spineinstellungen (bezüglich der Quantisierungsrichtung \underline{n}) und die Spinpolarisation P in Abhängigkeit vom Streuwinkel für zwei verschiedene Energien angegeben. In Bild 2.3 ist die Streuenergie $E = 200$ eV, in Bild 2.4 ist $E = 121$ keV.

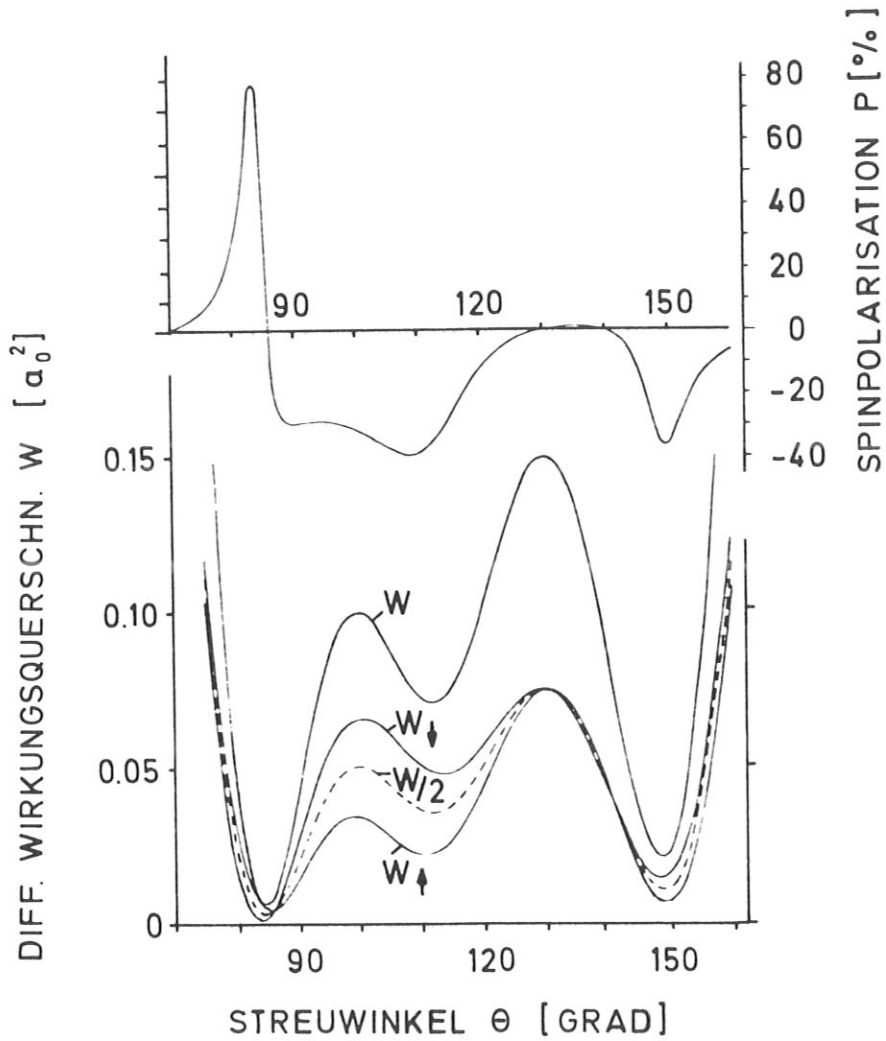


Bild 2.3: Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen bei der Energie $E = 200$ eV: Spinabhängiger Wirkungsquerschnitt W (in atomaren Einheiten) und Spinpolarisation in Abhängigkeit vom Streuwinkel (nach Eckstein 1970).

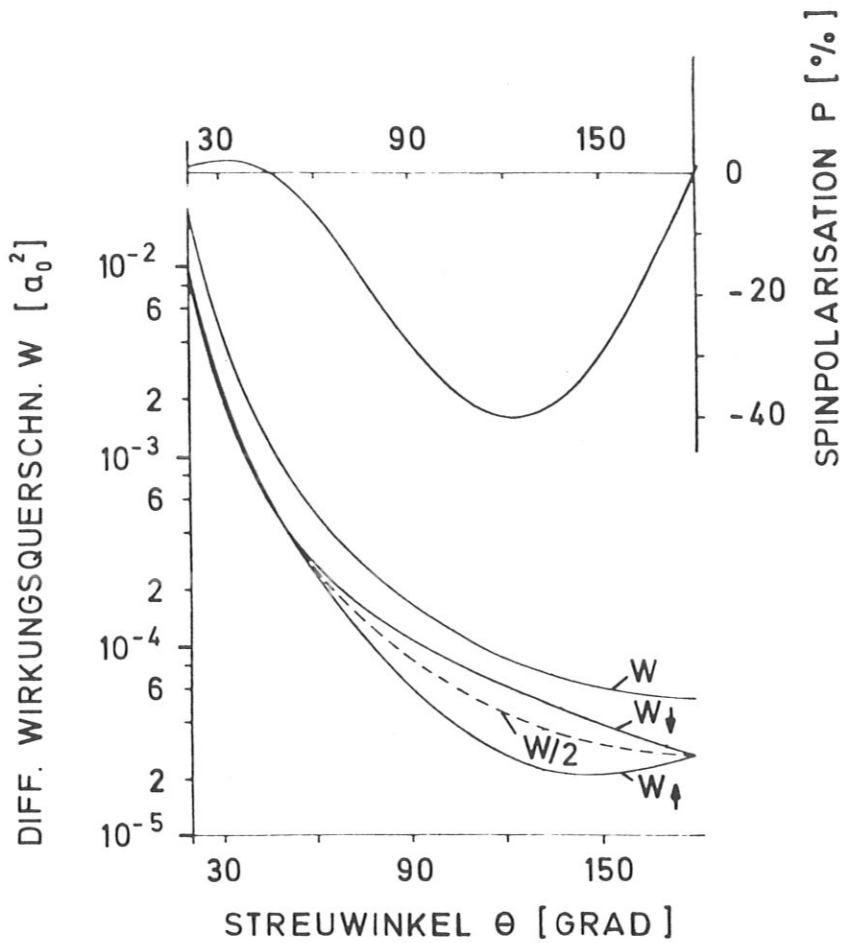


Bild 2.4: Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen bei $E = 121$ keV: Spinabhängiger Wirkungsquerschnitt und Spinpolarisation P in Abhängigkeit vom Streuwinkel (nach Eckstein 1970).

2.2.2 Lösungsweg des Streuproblems

Zur exakten Behandlung des Streuproblems muß man für zwei orthogonale Spinzustände χ_{+z} und χ_{-z} die Dirac-Gleichung lösen. Durch kohärente Überlagerung dieser beiden Lösungen läßt sich dann das Verhalten beliebiger Spinzustände beschreiben. Die Randbedingung für die Lösung ist:

die vier Komponenten ψ_λ , $\lambda = 1, 2, 3, 4$ der Viererspinoren lassen sich für $r \gg a_0$ (dem Bohrschen Radius) als Superposition einer einfallenden ebenen Welle (mit Impuls $\underline{k}_0 = k_0 \cdot \underline{e}_z$) und auslaufender Kugelwellen (mit Impulsbetrag $k = k_0$) darstellen:

$$2.23) \quad \psi_\lambda \rightarrow a_\lambda \cdot e^{ikz} + a'_\lambda(\theta, \varphi) \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{für } r \gg a_0$$

wobei θ : Streuwinkel
 φ : Azimutwinkel

Der differenzielle Wirkungsquerschnitt $W(\theta, \varphi)$ für elastische Streuung ist definiert durch

$$2.24) \quad W(\theta, \varphi) = \frac{\sum_{\lambda=1}^4 |a'_\lambda(\theta, \varphi)|^2}{\sum_{\lambda=1}^4 |a_\lambda|^2}$$

Übersichtlicher wird das Problem dadurch, daß für freie Teilchen nur zwei Komponenten der Viererspinoren linear unabhängig sind; es genügt daher ein zweikomponentiger Formalismus zur Beschreibung. In den oben angegebenen Formeln enthalten schon die Komponenten ψ_1 und ψ_2 die volle Information.

Liegt die Polarisation der einfallenden Welle in +z-Richtung, so gelten für die Komponenten ψ_1 und ψ_2 des Zweierspinors folgende Randbedingungen für $r \gg a_0$

$$2.25) \quad \psi_1 \rightarrow e^{ikz} + f(\theta) \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\psi_2 \rightarrow g(\theta) \cdot e^{i\varphi} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{für } r \gg a_0$$

Ist die einfallende Welle in (-z)-Richtung polarisiert, gilt entsprechend:

$$2.26) \quad \begin{aligned} \psi_1 &\rightarrow -g(\theta) \cdot e^{-i\varphi} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \\ \psi_2 &\rightarrow e^{ikz} + f(\theta) \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \quad \text{für } r \gg a_0$$

Die Streuamplitude f hängt nicht vom Azimut ab, da das Streuproblem bei Erhaltung von s_z zylindersymmetrisch bezüglich der Richtung \underline{e}_z ist. Die Streuamplitude g beschreibt die Spinflipstreuung, bei der s_z beim Streuprozess sein Vorzeichen wechselt (Kessler 1976). Die in den Gleichungen (2.25) und (2.26) angegebene Darstellung der Streuamplituden folgt aus der expliziten Berechnung allgemeiner $f_i(\theta)$ und $g_i(\theta, \varphi)$. Diese erhält man durch Konstruktion der Lösung des Streuproblems aus partikulären Lösungen für einen definierten Drehimpuls analog zur Partialwellenentwicklung der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Allerdings muß man hier ein System gekoppelter Differentialgleichungen lösen. Man erhält dann $f(\theta)$ und $g(\theta, \varphi)$ in Abhängigkeit von den Streuphasen, die das Streuverhalten des Potentials $V(r)$ beschreiben. Nach Eckstein 1970 müssen im Streupotential bei Energien $E \lesssim 200$ eV die Abschirmung der Kernladung durch die Hüllenelektronen sowie die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen (Austausch und Korrelation) berücksichtigt werden (siehe auch Kap. 5.1).

Aus den Lösungen für Polarisation in +z- und (-z)-Richtung ergibt sich für beliebige Polarisationsrichtung der einfallenden ebenen Welle:

$$2.27) \quad \psi_0 = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \cdot e^{ikz} = A \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot e^{ikz} + B \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot e^{ikz}$$

für die gestreute Kugelwelle gilt:

$$\psi' = \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} = \begin{pmatrix} A \cdot f - B \cdot g \cdot e^{-i\varphi} \\ B \cdot f + A \cdot g \cdot e^{i\varphi} \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

2.28)

$$= \begin{pmatrix} f & -g \cdot e^{-i\varphi} \\ g \cdot e^{i\varphi} & f \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} =: \underline{\underline{S}} \cdot \chi_0 \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

$\underline{\underline{S}}$: Spinstreumatrix

Die Darstellung von $\underline{\underline{S}}$ läßt sich folgendermaßen vereinfachen (Eckstein 1970):

$$2.29) \quad \underline{\underline{S}} = f \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + g \cdot \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} = f \cdot \underline{\underline{1}} - i \cdot g \cdot \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}$$

Die Dichtematrix für den gestreuten Elektronenstrahl ist gegeben durch

$$2.30) \quad \underline{\underline{\rho}}' = \psi' \psi'^{\dagger} = \underline{\underline{S}} \psi_0 \psi_0^{\dagger} \underline{\underline{S}}^{\dagger} = \underline{\underline{S}} \underline{\underline{\rho}}_0 \underline{\underline{S}}^{\dagger} =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot (f \cdot \underline{\underline{1}} - i \cdot g \cdot \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \cdot \left(\underline{\underline{1}} + \cancel{\underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}} \right) \cdot (f^* \cdot \underline{\underline{1}} + i \cdot g^* \cdot \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}) = \dots =$$

für $\underline{\underline{P}}_0 = 0$

$$2.31) \quad \underline{\underline{\rho}}' = \frac{1}{2} \cdot \left[(|f|^2 + |g|^2) \cdot \underline{\underline{1}} + i \cdot (f \cdot g^* - f^* \cdot g) \cdot \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot W \cdot \left[\underline{\underline{1}} + S \cdot \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \right] = \frac{1}{2} \cdot W \cdot \left[\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \right]$$

hierbei ist $S(\theta) = i \cdot \frac{f \cdot g^* - f^* g}{|f|^2 + |g|^2}$ die Shermanfunktion,

$$\underline{n} = \underline{e}_{\underline{k}_0 \times \underline{k}} ,$$

$$\underline{P} = S(\theta) \cdot \underline{n} ,$$

und $W = |f|^2 + |g|^2$ der differentielle Wirkungsquerschnitt.

2.2.3 Intensität und Polarisation bei Einfach- und Mehrfachstreuung

Die Intensität I' des gestreuten Elektronenstrahls ist

$$2.32) \quad I' = \text{Sp } \underline{\rho}' = \frac{1}{2} \cdot W \cdot 2 = W$$

für den Polarisationsvektor \underline{P}' folgt

$$2.33) \quad \underline{P}' = \frac{\text{Sp } \underline{\rho}' \underline{\sigma}}{\text{Sp } \underline{\rho}'} = \frac{\frac{1}{2} \cdot W \cdot 2 \cdot \underline{P}}{\frac{1}{2} \cdot W \cdot 2} = \underline{P}$$

$$\text{da } \text{Sp } \underline{\sigma}_i = 0 \text{ und } \underline{\sigma}_i \underline{\sigma}_j = i \cdot \underline{\sigma}_k$$

Das Ergebnis zeigt also erwartungsgemäß, daß für einen unpolarisierten Elektronenstrahl der Wirkungsquerschnitt nur vom Polarwinkel abhängt und der Polarisationsvektor senkrecht auf der Streuebene steht.

Um das Verhalten von Intensität I'' und Polarisation \underline{P}'' in einem darauffolgenden zweiten Streuprozess zu bestimmen, bildet man zunächst die Dichtematrix $\underline{\rho}''$, die den Zustand des zweifach gestreuten Strahls beschreibt:

$$2.34) \quad \underline{Q}'' = (f_2 \cdot \underline{1} - i \cdot g_2 \cdot \underline{n_2} \underline{\sigma}) \cdot \frac{1}{2} W_1 \cdot (\underline{1} + \underline{P_1} \underline{\sigma}) \cdot (f_2^* \cdot \underline{1} + i \cdot g_2^* \cdot \underline{n_2} \underline{\sigma}) \dots =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot W_1 \cdot W_2 \cdot \left\{ (1 + \underline{P_1} \cdot \underline{P_2}) \cdot \underline{1} + T_2(\theta) \cdot \underline{P_1} \underline{\sigma} + \underline{P_2} \underline{\sigma} + \right.$$

$$\left. + (1 - T_2(\theta)) \cdot (\underline{P_1} \cdot \underline{n_2}) \cdot (\underline{n_2} \underline{\sigma}) - U_2(\theta) \cdot (\underline{P_1} \times \underline{n_2}) \underline{\sigma} \right\}$$

wobei $T(\theta) = \frac{|f|^2 - |g|^2}{|f|^2 + |g|^2}$ und $U(\theta) = \frac{f \cdot g^* + f^* \cdot g}{|f|^2 + |g|^2}$

Damit berechnen sich I'' und \underline{P}'' zu

$$I'' = W_1 \cdot W_2 \cdot (1 + \underline{P_1} \cdot \underline{P_2})$$

$$2.35) \quad \underline{P}'' = \frac{1}{1 + \underline{P_1} \cdot \underline{P_2}} \cdot \left\{ [\underline{P_1} \cdot \underline{n_2} + S_2(\theta)] \cdot \underline{n_2} + \right.$$

$$\left. + T(\theta) \cdot [\underline{P_1} - (\underline{P_1} \cdot \underline{n_2}) \underline{n_2}] + U(\theta) \cdot (\underline{n_2} \times \underline{P_1}) \right\}$$

I'' hängt also vom Winkel zwischen $\underline{n_1}$ und $\underline{n_2}$ ab. Dies kann man ausnutzen, um $\underline{P_1}$ zu bestimmen:

wählt man $\underline{n_2} \uparrow \uparrow \underline{n_1}$, folgt $I''_+ = W_1 W_2 \cdot (1 + P_1 P_2)$

2.36)

wählt man $\underline{n_2} \uparrow \uparrow \underline{n_1}$, folgt $I''_- = W_1 W_2 \cdot (1 - P_1 P_2)$

Bildet man aus I''_+ und I''_- die Intensitätsasymmetrie

$$2.37) \quad A_- := \frac{I''_+ - I''_-}{I''_+ + I''_-} = P_1 \cdot P_2,$$

so kann man daraus bei bekanntem P_2 die Polarisation des Strahls vor der Streuung (P_1) bestimmen (siehe Kapitel 3.4). Führt man zwei identische Streuprozesse hintereinander durch, so kann man $P = P_1 = P_2$ bestimmen

$$2.38) \quad P_1 = P_2 = \sqrt{A_-}$$

Die Darstellung (2.35) ist geeignet, an Hand einiger Beispiele die Richtungsänderung des Polarisationsvektors bei einer zweiten Streuung zu veranschaulichen.

2.39)

Für $\underline{n}_1 \uparrow \uparrow \underline{n}_2$ ist $\underline{P}_+'' = \frac{1}{1 + \underline{P}_1 \cdot \underline{P}_2} (\underline{P}_1 + \underline{P}_2) = \frac{S_1 + S_2}{1 + S_1 S_2} \cdot \underline{n}_1$

für $\underline{n}_1 \uparrow \downarrow \underline{n}_2$ ist $\underline{P}_-'' = \frac{1}{1 + \underline{P}_1 \cdot \underline{P}_2} (\underline{P}_1 + \underline{P}_2) = \frac{S_1 - S_2}{1 - S_1 S_2} \cdot \underline{n}_1$

für $\underline{n}_1 \perp \underline{n}_2$ ist $\underline{P}_\perp'' = (T(\theta) \cdot \underline{P}_1 + \underline{P}_2 - U(\theta) \underline{P}_1 \times \underline{n}_2)$

Durch Vielfachstreuung können sich also Polarisations-
effekte verstärken oder abschwächen. Verläuft die Vielfach-
streuung komplanar, so bleibt der resultierende Polari-
sationsvektor senkrecht zu dieser Ebene, im allgemeinen
Fall beliebiger Streuebenen besitzt der resultierende Polari-
sationsvektor drei von null verschiedene Komponenten.

2.3 Beugung an Kristalloberflächen ¹⁾

2.3.1 Oberflächensymmetrie und LEED-Bild

Der Beugungsprozeß an Kristalloberflächen wird durch ein Potential $V(\underline{r})$ bestimmt, das die Periodizität der Kristalloberfläche wiedergibt:

1) Für Zusammenfassungen über Elektronenbeugung siehe Pendry 1974, Webb und Lagally 1973, und Aberdam 1978;
für Spinpolarisation bei LEED siehe Feder 1980a.

$$2.40) \quad V(\underline{r} + \underline{R}_v) = V(\underline{r})$$

$$\underline{R}_v = n_1 \underline{a} + n_2 \underline{b}$$

n_1, n_2 : ganze Zahlen

$\underline{a}, \underline{b}$: Basisvektoren der Oberflächeneinheitsmasche

Der einfallende Strahl wird als ebene Welle angesetzt:

$$2.41) \quad \psi_0 = A_0 \cdot e^{i(\underline{k}_0 \underline{r} + E \cdot t/\hbar)} \cdot \chi_0 \quad E = \hbar^2 \cdot k_0^2 / 2m$$

Die Beugung kann formal durch

$$2.42) \quad \psi_0 \rightarrow \psi_s(\underline{r}) = A(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{R}_0) \cdot e^{i(\underline{k} \underline{r} + E t/\hbar)} \cdot \chi$$

beschrieben werden (A = Amplitude des gebeugten Elektronenstrahls); es gelten folgende Erhaltungssätze (siehe z.B. Aberdam 1978):

- 1) Da die elastische Beugung voraussetzt, daß die Elektronen keine inelastische Wechselwirkung erfahren haben, ist die Energie E und damit auch der Betrag des Impulses konstant: $k_0 = k$.
- 2) Unter der Annahme, daß kein elektrisches Feld parallel zur Oberfläche existiert, ist $\underline{k}_{0\parallel}$ (die Komponente des Wellenvektors parallel zur Oberfläche) konstant mit der Einschränkung, daß Vektoren des reziproken Oberflächen-gitters addiert werden können.

Als Folge der zweidimensionalen Periodizität des Potentials gilt für die gestreuten Elektronen ein zweidimensionales Bloch-Theorem:

$$2.43) \quad \Psi_S(\underline{r}) = \Phi_S(\underline{r}) \cdot e^{i(\underline{k}_{0||} \cdot \underline{r}_{||})} \quad \text{mit}$$

$$\Phi_S(\underline{r} + \underline{R}_{||}) = \Phi_S(\underline{r}) = \sum_{\underline{g}} a_{\underline{g}}(z) \cdot e^{i\underline{g} \cdot \underline{r}_{||}}$$

wobei \underline{g} definiert ist durch

$$2.44) \quad \underline{g} \equiv \underline{g}_{\mu\nu} := \mu \cdot \underline{A} + \nu \cdot \underline{B} \quad \mu, \nu : \text{ganze Zahlen}$$

\underline{A} und \underline{B} sind die Basisvektoren des reziproken Oberflächengitters. Sie ergeben sich aus den Oberflächenbasisvektoren \underline{a} und \underline{b} durch

$$2.45) \quad \underline{A} = 2\pi \cdot \frac{\underline{b} \times \underline{e}_z}{\underline{a}(\underline{b} \times \underline{e}_z)} \quad \underline{e}_z : \text{Einheitsvektor senkrecht zur Oberfläche}$$

$$\underline{B} = -2\pi \cdot \frac{\underline{a} \times \underline{e}_z}{\underline{a}(\underline{b} \times \underline{e}_z)}$$

Gleichung (2.45) ist äquivalent der zweidimensionalen Laue-Bedingung

$$2.46) \quad (\underline{k} - \underline{k}_0) \cdot \underline{R}_{||} = 2n\pi \quad n : \text{ganze Zahl}$$

Für $\Psi_S(\underline{r})$ gilt dann:

$$2.47) \quad \Psi_S(\underline{r}) = \sum_{\mu, \nu} A_{\mu\nu} \cdot e^{i[(\underline{k}_{0||} + \underline{g}_{\mu\nu}) \cdot \underline{r}_{||} + k_{\mu\nu \perp} \cdot z]} \cdot \chi$$

$$\text{mit } k_{\mu\nu \perp} = -\sqrt{k_0^2 - (\underline{k}_{0||} + \underline{g}_{\mu\nu})^2}$$

Beobachtbar wird ein Strahl, wenn die zweidimensionale Laue-Bedingung (2.46) erfüllt ist und zusätzlich $k_{\mu\nu \perp}$ reell und positiv ist, also

$$2.48) \quad |\underline{k}_{0||} + \underline{g}_{\mu\nu}| < k_0$$

Die Richtungen der austretenden Strahlen und daher auch das auf einem Leuchtschirm beobachtbare Beugungsbild sind durch das reziproke Gitter und damit durch die Geometrie der Kristalloberfläche bestimmt. Dies sei am Beispiel der Pt(111)-Fläche veranschaulicht: Die Kristallstruktur des Platins ist kubisch flächenzentriert (fcc). Die (111)-Fläche stellt eine dichtest gepackte hexagonale Anordnung von Platinionentrümpfen dar und besitzt für sich sechszählige Symmetrie. Auf Grund der ABC-Stapelung der dichtest gepackten Flächen im fcc-Gitter reduziert sich die Symmetrie auf Dreizähligkeit (siehe Bild 2.5).

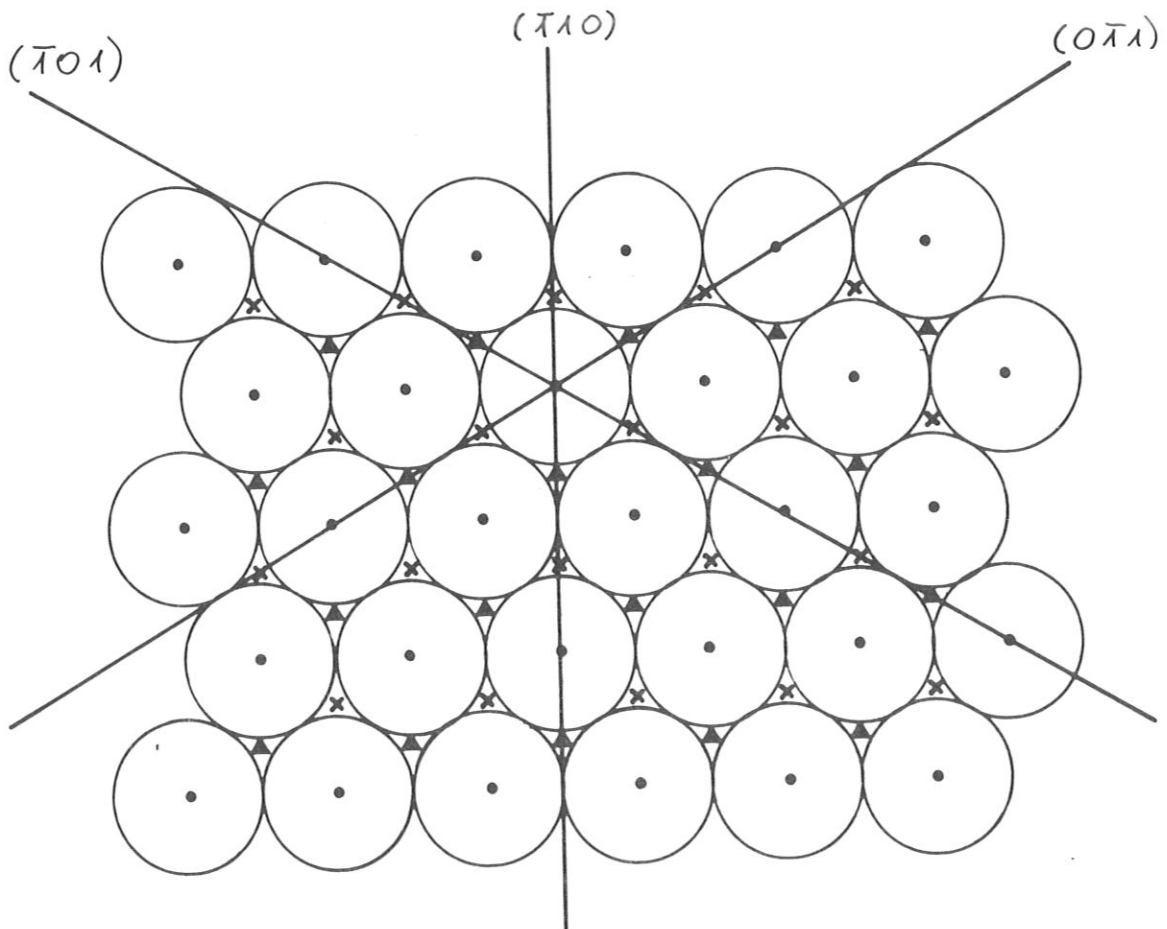


Bild 2.5: Anordnung der Atome der (111)-Fläche des fcc-Gitters: Schwerpunkte der Atome der Oberfläche (Lage "A") •, der zweiten Lage ("B") x und der dritten Lage ("C") ▲. Zusätzlich eingezeichnet sind die drei Spiegelebenen $(\bar{1}10)$, $(\bar{1}01)$ und $(0\bar{1}1)$.

Eine 120° -Drehung des Kristalls um die $[111]$ -Richtung (der Raumdiagonale im Einheitswürfel) - sie steht senkrecht auf der (111) -Ebene - stellt also eine Symmetrioperation dar. Durch diese dreizählige Achse gehen drei Spiegelebenen S_1, S_2, S_3 , die damit senkrecht auf der (111) -Ebene stehen (siehe Bild 2.5).

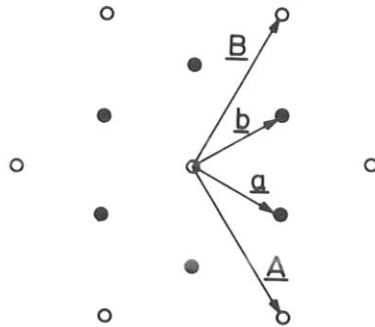


Bild 2.6: Basisvektoren der Kristalloberfläche (a und b) und des dazugehörigen reziproken Gitters (A und B)

Bild 2.6 gibt, der Systematik von Wood 1963 folgend, die hexagonale Oberflächenmaschen des realen und des reziproken Gitters an.

Damit ergibt sich folgende Nomenklatur der Nebenstrahlen, die durch Addition des reziproken Gittervektors $\underline{g}_{\mu\nu}$ zum Impuls des Spiegelstrahls erzeugt werden (s. Bild 2.7).

Die Reflexe der Nebenstrahlen sind ringförmig um den Spiegelstrahl angeordnet. Von den sechs Nebenstrahlen des ersten Rings sind auf Grund der Dreizähligkeit der untersuchten Kristallfläche die Strahlen (01) , (10) und $(\bar{1}\bar{1})$ äquivalent, ebenso $(0\bar{1})$, $(\bar{1}0)$ und (11) . Im zweiten Ring sind infolge der Spiegelsymmetrie der Oberfläche alle sechs Reflexe äquivalent.

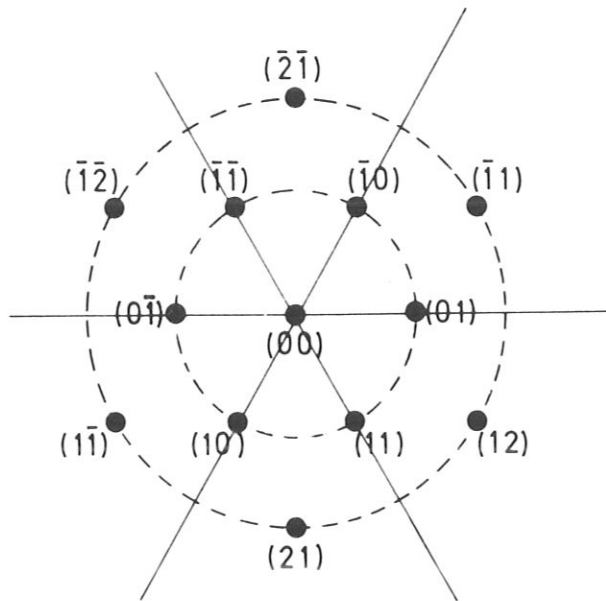


Bild 2.7: Nomenklatur der Beugungsreflexe und Lage der Spiegelebenen des reziproken Gitters.

2.3.2 Kinematisches Modell der Beugung

Die Information über Intensität und Polarisation ist in den Amplituden A der reflektierten Strahlen enthalten. Das einfachste Modell, das Aussagen über die Streuamplituden macht, ist das kinematische Modell, das den Beugungsprozeß unter Vernachlässigung von Vielfachstreuung beschreibt.

Wählt man als Spinquantisierungsrichtung die Normale der Streuebene ($\underline{n} = \underline{e}_{\underline{k}_0} \times \underline{k}$), so bleibt diese in der Einfachstreuung im Beugungsprozeß erhalten. Man kann daher die Polarisationseffekte bei der Beugung eindeutig erfassen, indem man die Streuung der Elektronen in den beiden orthogonalen Spinzuständen χ_{\uparrow} und χ_{\downarrow} getrennt behandelt. Man erhält dann zwei spinabhängige Amplituden (Webb und Lagally 1973, und Müller 1977 a).

$$2.49) \quad A_{\uparrow\downarrow} = a_{\uparrow\downarrow}(\theta, E) \cdot \sum_j e^{i(\underline{k}-\underline{k}_0)\cdot\underline{r}_j} =$$

$$= a_{\uparrow\downarrow}(\theta, E) \cdot \sum_{\substack{j \\ R_1=0}}^{M_1 \cdot a + M_2 \cdot b} e^{i \underline{g}_{\mu\nu} \cdot R_{j1}} \cdot \sum_{\ell=0}^{M_3} \alpha^\ell \cdot e^{i(k_{\mu\nu 1} - k_{01}) \cdot \ell \cdot c}$$

für einatomare Kristalle. Hierin sind $a_{\uparrow\downarrow}$ atomare Streuamplituden, die vom Streuwinkel θ und der Energie E abhängen, α berücksichtigt die Abschwächung der Intensität der Elektronenstrahlen durch elastische Streuung im Kristall. Die Exponentialfunktion gibt die Phasendifferenzen für Atome an verschiedenen Orten an. Der Einfluß des Streuprozesses ($a(\theta, E)$) ist in Gleichung (2.49) vom Einfluß des Gitters ($\sum_j \underline{r}_j$) entkoppelt. Daraus folgt für die Berechnung der Polarisation (bezogen auf $\underline{n} = \frac{e_{\underline{k}_0} \times \underline{k}}{|\underline{k}_0 \times \underline{k}|}$)

$$2.50) \quad P = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}} = \frac{\sum_j \langle \psi_{j\uparrow} | \psi_{j\uparrow} \rangle - \sum_j \langle \psi_{j\downarrow} | \psi_{j\downarrow} \rangle}{\sum_j \langle \psi_{j\uparrow} | \psi_{j\uparrow} \rangle + \sum_j \langle \psi_{j\downarrow} | \psi_{j\downarrow} \rangle} =$$

$$= \frac{|a_{\uparrow}|^2 - |a_{\downarrow}|^2}{|a_{\uparrow}|^2 + |a_{\downarrow}|^2}$$

und für die Intensität

$$I = I_{\uparrow} + I_{\downarrow} = (|a_{\uparrow}|^2 + |a_{\downarrow}|^2).$$

2.51)

$$\cdot \frac{\sin \frac{1}{2} M_1 \cdot \underline{g}_{\mu\nu} \cdot a}{\sin \frac{1}{2} \underline{g}_{\mu\nu} \cdot a} \cdot \frac{\sin \frac{1}{2} M_2 \cdot \underline{g}_{\mu\nu} \cdot b}{\sin \frac{1}{2} \underline{g}_{\mu\nu} \cdot b} \cdot \frac{1}{1 + \alpha^2 - 2\alpha \cdot \cos(k_{\mu\nu 1} - k_{01}) \cdot c}$$

Die Intensität gebeugter Elektronenstrahlen ist durch die Anordnung der Atome im Kristallgitter und den atomaren Streufaktor $|a_{\uparrow}|^2 + |a_{\downarrow}|^2$ bestimmt. Konstruktive Interferenz tritt auf, wenn die zweidimensionale Laue-Bedingung erfüllt ist. Durch die Intensitätsabschwächung senkrecht zur Oberfläche existiert keine scharfe Laue-Bedingung in dieser Richtung, der Faktor $(1 + \alpha^2 - 2\alpha \cdot \cos(k_{\mu\nu 1} - k_{01}) \cdot c)^{-1}$ ergibt nur eine Modulation der Interferenzfunktion.

Die Polarisation ist im Rahmen des kinematischen Modells vom Kristallgitter unabhängig, sie hat den Wert der Elektron-Atom-Streuung. Daraus folgt, daß die Polarisation nur von der Elektronenenergie und vom Streuwinkel, nicht aber vom Strahl (μ ν), von der Kristalltemperatur und vom Azimutwinkel abhängt.

Müller hat 1977a gezeigt, daß die Aussagen des kinematischen Modells für die Polarisation nicht anwendbar sind. Diese Aussage wird in Teil 4 dieser Arbeit durch Rotationsdiagramme der Polarisation bestätigt.

2.3.3 Einfluß von Vielfachstreuung -

Kristallsymmetrien

Auf die Beschreibung einer dynamischen Theorie wird hier verzichtet (der Gang einer relativistischen dynamischen Rechnung ist in Kap. 5.1 angegeben). Es sollen vielmehr anschaulich der Einfluß der Mehrfachstreuung und die Auswirkungen von Symmetrieoperationen auf die Polarisation erläutert werden:

Durch den Einfluß der Mehrfachstreuung gibt es für die mit Impuls \underline{k}_0 einfallenden Elektronen eine Vielzahl von möglichen Mehrfachstreuungsprozessen, die zu einem Impuls \underline{k} der auslaufenden Elektronen führen. Sie treten mit verschiedener endlicher Wahrscheinlichkeit auf und sind mit bestimmten Spinvorzugsrichtungen verbunden. Die Intensität und die Polarisation \underline{P} der aus dem Kristall austretenden Elektronen ergeben sich durch gewichtete kohärente Überlagerung der verschiedenen Vielfachstreuungsprozesse.

Infolge der Mehrfachstreuung besitzt der Polarisationsvektor wie im Falle von Mehrfachstreuung an Atomen (siehe Abschnitt 2.3.3) auch nicht verschwindende Komponenten $\underline{P}_{||}$ parallel zur Streuebene.

Die Spinvorzugsrichtung steht nur in Ausnahmefällen senkrecht zur Streuebene, z.B. dann, wenn die Streuebene eine Spiegelebene des Kristalls ist (Feder 1977a). Der Grund hierfür liegt im unterschiedlichen Transformationsverhalten der Polarisationskomponenten P_n und $P_{||}$ bei räumlicher Spiegelung. Um dies zu zeigen, wird im folgenden das Verhalten der Polarisation für den Fall untersucht, daß die durch die Impulse \underline{k}_0 und \underline{k} definierte Streuebene gleich einer Spiegelebene des Kristalls ist. Für diesen Fall gibt es zu jedem Vielfachstreuungsprozeß einen gleich wahrscheinlichen, an der Symmetrieebene gespiegelt ablaufenden Streuungsprozeß. Für beide Streuungsprozesse sind die Impulsvektoren parallel zur Streuebene identisch, die Impulse senkrecht zur Streuebene besitzen jedoch verschiedenes Vorzeichen. In Bild 2.8 sind ein Zweifachstreuungsprozeß und der gespiegelt ablaufende Streuungsprozeß schematisch dargestellt. Durch Anwenden von Gleichung (2.35) für diesen Spezialfall der Zweifachstreuung sieht man, daß für die beiden gespiegelt ablaufenden Streuungsprozesse die Normalkomponenten P_n der Polarisation gleich sind, die Parallelkomponenten $P_{||}$ jedoch bei gleichem Betrag verschiedenes Vorzeichen besitzen. Daraus ergibt sich bei kohärenter Überlagerung beider Streuungsprozesse mit gleicher Amplitude, daß nur P_n von null verschieden sein kann. Da dies für jeden der möglichen Vielfachstreuungsprozesse gilt, folgt daraus $\underline{P} = P \cdot \underline{n}$, wenn die Streuebene eine Spiegelebene des Kristalls ist. In diesem Fall erhält man durch Messen der Normalkomponente P_n die vollständige Information über die Polarisation. Für eine dreizählige Oberfläche (z.B. Pt(111)) gilt, solange die Streuebene die Oberflächennormale enthält, $\underline{P} = P \cdot \underline{n}$ für alle Nebenstrahlen des ersten Rings (siehe Bild 2.7). Für den Spiegelstrahl gilt dies für die den Spiegelebenen entsprechenden Azimutwerte, die hier als $\varphi = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ, \dots$ eingeführt werden. $\varphi = 0^\circ$ wird dabei als der Azimutwinkel definiert, für den die Streuebene parallel zur $(\bar{1}10)$ -Ebene des Kristalls liegt. Es bleibt allerdings eine Unbestimmtheit des Nullpunkts der Azimutskala, da man im LEED-Experiment allein nicht zwischen $\varphi = 0^\circ$ und $\varphi = 180^\circ$ unterscheiden kann.

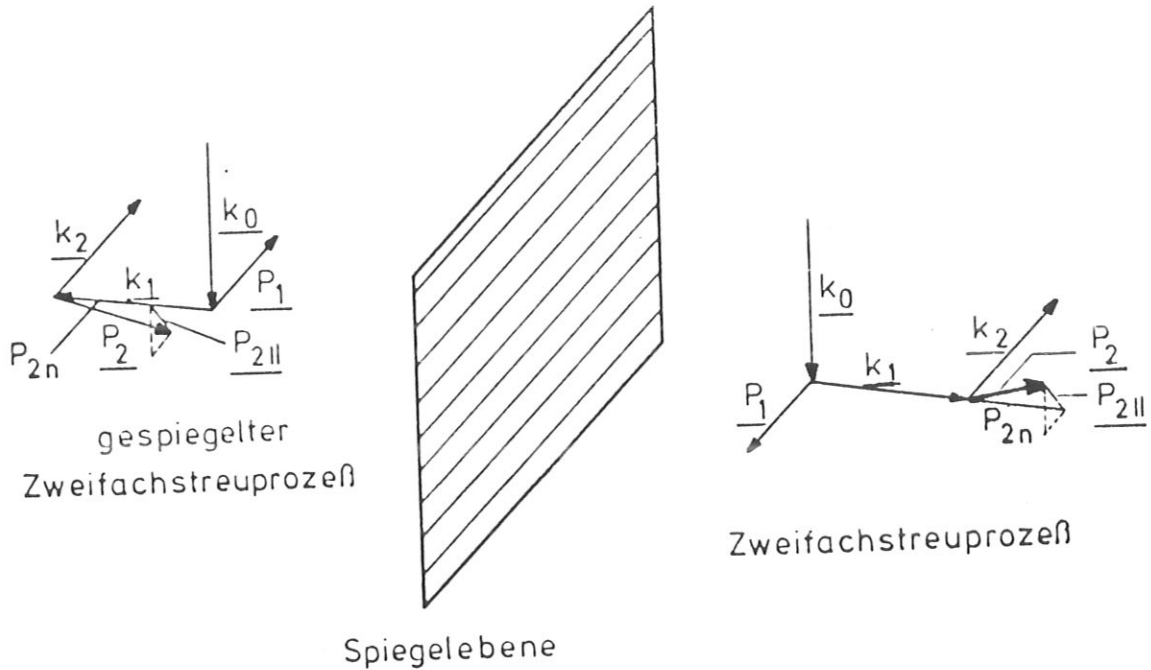


Bild 2.8: Schematische Darstellung des Einflusses der Spiegelung an einer Ebene auf die Parallel- und Normalkomponenten des Polarisationsvektors.

2.3.4 Zeitumkehr - Invarianz

Aus dem Reziprozitätstheorem für Streuprozesse (Dawydow 1967) folgt: Die Intensität gebeugter Elektronen ändert sich nicht bei Zeitumkehr (Umkehr des Strahlwegs) (Woodruff und Holland 1970, Lagally et al. 1971, Farnsworth 1971):

$$2.52) \quad I(\underline{k}_0, \underline{k}) = I(-\underline{k}, -\underline{k}_0).$$

Aus dem Verhalten der Spinstreumatrix bei Zeitumkehr folgt jedoch, daß eine äquivalente Aussage nur für die Länge des Polarisationsvektors (den Polarisationsgrad P_{abs}), nicht aber für die einzelnen Komponenten P_x , P_y , und P_z gilt (Feder 1980b).

Das Verhalten der Spinstreumatrix bei Zeitumkehr ist bereits an dem einfachen Spezialfall der Doppelstreuung zu erkennen. Für diesen Fall sei daher hier der Einfluß der Zeitumkehr auf die Polarisation berechnet:

Unter der Voraussetzung $\underline{P}_0 = 0$ gilt nach (2.30) für die Dichtematrix $\underline{\rho}''$ des zweifach gestreuten Zustands:

$$2.53) \quad \underline{\rho}'' = \underline{S}_2 \cdot \underline{S}_1 \cdot \underline{\rho}_0 \cdot \underline{S}_1^\dagger \cdot \underline{S}_2^\dagger = \frac{1}{2} \cdot \underline{S}_2 \cdot \underline{S}_1 \cdot \underline{S}_1^\dagger \cdot \underline{S}_2^\dagger,$$

wobei

$$2.54) \quad \underline{S}_1 = (f_1 \cdot \underline{1} - i \cdot g_1 \cdot \underline{n}_1 \cdot \underline{\sigma})$$

$$\underline{S}_2 = (f_2 \cdot \underline{1} - i \cdot g_2 \cdot \underline{n}_2 \cdot \underline{\sigma})$$

$$\underline{\rho}_0 = \frac{1}{2} \cdot (\underline{1} + \underline{P}_0 \cdot \underline{\sigma}) = \frac{1}{2} \cdot \underline{1} \quad \text{wegen } \underline{P}_0 = 0$$

Da in diesem Abschnitt die Information über die Richtung des Polarisationsvektors im Raum nicht benötigt wird, sei hier die Dichtematrix $\underline{\rho}''$ abweichend von Gleichung (2.35) berechnet und zusammengefaßt. Für das Produkt der Streumatrizen $\underline{S}_2 \cdot \underline{S}_1$ gilt:

$$2.55) \quad \underline{S}_2 \cdot \underline{S}_1 = (f_2 \cdot \underline{1} - i \cdot g_2 \cdot \underline{n}_2 \cdot \underline{\sigma}) \cdot (f_1 \cdot \underline{1} - i \cdot g_1 \cdot \underline{n}_1 \cdot \underline{\sigma}) = \dots =$$

$$= \left\{ [f_1 \cdot f_2 - g_1 \cdot g_2 \cdot (\underline{n}_1 \cdot \underline{n}_2)] \cdot \underline{1} - i \cdot [f_1 \cdot g_2 \cdot \underline{n}_2 + f_2 \cdot g_1 \cdot \underline{n}_1 + g_1 \cdot g_2 \cdot (\underline{n}_1 \times \underline{n}_2)] \cdot \underline{\sigma} \right\} =: [F \cdot \underline{1} + G \cdot \underline{\sigma}]$$

Damit läßt sich $\underline{\underline{\rho}}''$ berechnen:

$$2.56) \underline{\underline{\rho}}'' = \frac{1}{2} \cdot \left\{ (|F|^2 + |G|^2) \cdot \underline{\underline{1}} + [F^* \underline{\underline{G}} + \overline{F} \cdot \underline{\underline{G}}^* + i \cdot (\underline{\underline{G}} \times \underline{\underline{G}}^*)] \cdot \underline{\underline{\delta}} \right\} \text{ mit}$$

$$2.57) \text{Sp} \underline{\underline{\rho}}'' = (|F|^2 + |G|^2)$$

Aus der Kenntnis von $\underline{\underline{\rho}}''$ folgt für den Polarisationsvektor $\underline{\underline{P}}$:

$$2.58) \underline{\underline{P}} = \frac{\text{Sp} \underline{\underline{\rho}}'' \cdot \underline{\underline{\delta}}}{\text{Sp} \underline{\underline{\rho}}''}$$

wobei

$$\text{Sp} \underline{\underline{\rho}}'' \cdot \underline{\underline{\delta}} = (F^* \cdot \underline{\underline{G}} + \overline{F} \cdot \underline{\underline{G}}^*) + i \cdot (\underline{\underline{G}} \times \underline{\underline{G}}^*)$$

Damit ergibt sich

$$2.59) \underline{\underline{P}} = \frac{(F^* \underline{\underline{G}} + \overline{F} \cdot \underline{\underline{G}}^*) + i \cdot (\underline{\underline{G}} \times \underline{\underline{G}}^*)}{|F|^2 + |G|^2} = \frac{2 \text{Re}(F \underline{\underline{G}}^*) + i \cdot (\underline{\underline{G}} \times \underline{\underline{G}}^*)}{|F|^2 + |G|^2}$$

Für den zeitumgekehrten Streuprozess gilt

$$2.60) \underline{\underline{\rho}}'' = \frac{1}{2} \cdot \underline{\underline{S}}_{2-} \cdot \underline{\underline{S}}_{1-} \cdot \underline{\underline{S}}_{1-}^\dagger \cdot \underline{\underline{S}}_{2-}^\dagger$$

wobei für die Streumatrizen $\underline{\underline{S}}_{1-}$ und $\underline{\underline{S}}_{2-}$ infolge der Vorzeichenumkehr der Vektoren $\underline{\underline{n}}_1$ und $\underline{\underline{n}}_2$ gilt

$$2.61) \underline{\underline{S}}_{1-} = (f_2 \cdot \underline{\underline{1}} + i \cdot g_2 \cdot \underline{\underline{n}}_2 \cdot \underline{\underline{\delta}})$$

$$\underline{\underline{S}}_{2-} = (f_1 \cdot \underline{\underline{1}} + i \cdot g_1 \cdot \underline{\underline{n}}_1 \cdot \underline{\underline{\delta}})$$

Die Aussage der Gleichungen (2.61) wird in Bild 2.9 veranschaulicht:

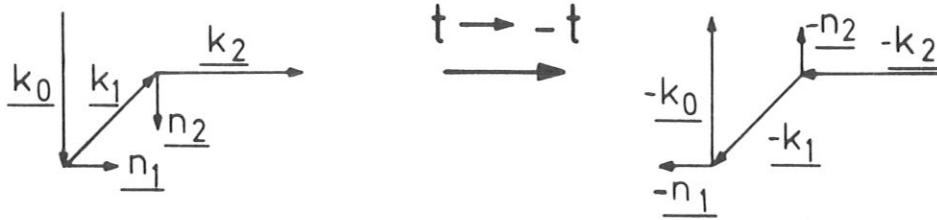


Bild 2.9: Zeitumkehr bei einem Zweifachstreuprozess

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
 2.62) \quad \underline{S}_{2-} \cdot \underline{S}_{1-} &= (f_1 \cdot \underline{1} + i \cdot g_1 \cdot \underline{n}_1 \underline{\sigma}) \cdot (f_2 \cdot \underline{1} + i \cdot g_2 \cdot \underline{n}_2 \underline{\sigma}) = \dots = \\
 &= \left\{ [f_1 f_2 - g_1 g_2 \cdot (\underline{n}_1 \cdot \underline{n}_2)] \cdot \underline{1} + i \cdot [f_1 g_2 \cdot \underline{n}_2 + f_2 g_1 \cdot \underline{n}_1 + \right. \\
 &\quad \left. + g_1 g_2 \cdot (\underline{n}_2 \times \underline{n}_1)] \cdot \underline{\sigma} \right\} = [F - \underline{G} \cdot \underline{\sigma}]
 \end{aligned}$$

Es gilt daher

$$2.63) \quad \underline{P}_- = \frac{-2 \operatorname{Re}(F \cdot \underline{G}^*) + i \cdot (\underline{G} \times \underline{G}^*)}{|F|^2 + |\underline{G}|^2} \neq \underline{P}$$

und

$$2.64) \quad \underline{I}_- = \operatorname{Sp} \underline{P}_- = |F|^2 + |\underline{G}|^2 = \operatorname{Sp} \underline{P} = \underline{I}$$

Für den Polarisationsgrad P_{abs} folgt, da

$$2.65) \quad \underline{G} \cdot (\underline{G} \times \underline{G}^*) = \underline{G}^* (\underline{G} \times \underline{G}^*) = 0,$$

$$2.66) \quad P_{\text{abs}} = |\underline{P}| = |\underline{P}_-| = P_{\text{abs}}$$

Für die Annahme $\underline{n}_2 = \pm n_1$ (komplanare Zweifachstreuung) vereinfacht sich der Ausdruck für \underline{P} zu

$$2.67) \quad \underline{P} = \frac{2 \operatorname{Re}(\underline{F} \cdot \underline{G}^*)}{|\underline{F}|^2 + |\underline{G}|^2} = -\underline{P}$$

denn in diesem Spezialfall ist $\underline{G} \sim \underline{n}_1$ und $\underline{G}^* \sim \underline{n}_1$ und daher $\underline{G} \times \underline{G}^* = 0$.

Im Falle von Vielfachstreuung gilt die Beziehung (2.66) nur dann, wenn der Polarisationsvektor auf der Streuebene senkrecht steht, z.B., wenn die Streuebene gleich einer Spiegelebene des Kristalls ist. Da die Zeitumkehr für den Spiegelstrahl mit einer Drehung des Azimuts um 180° äquivalent ist, wird bei dreizähligen Kristalloberflächen die Symmetrie in der Intensität des Spiegelstrahls auf Grund von Gleichung (2.52) zur Sechszähligkeit erhöht, während für einzelne Komponenten des Polarisationsvektors wegen Gleichung (2.63) eine Symmetrieerhöhung nicht erwartet werden kann. Der experimentelle Nachweis der Dreizähligkeit von Rotationsdiagrammen einzelner Polarisationskomponenten wird im Rahmen dieser Arbeit erbracht (s. Kap. 4.2).

3. AUFBAU UND VORBEREITUNG DES EXPERIMENTES

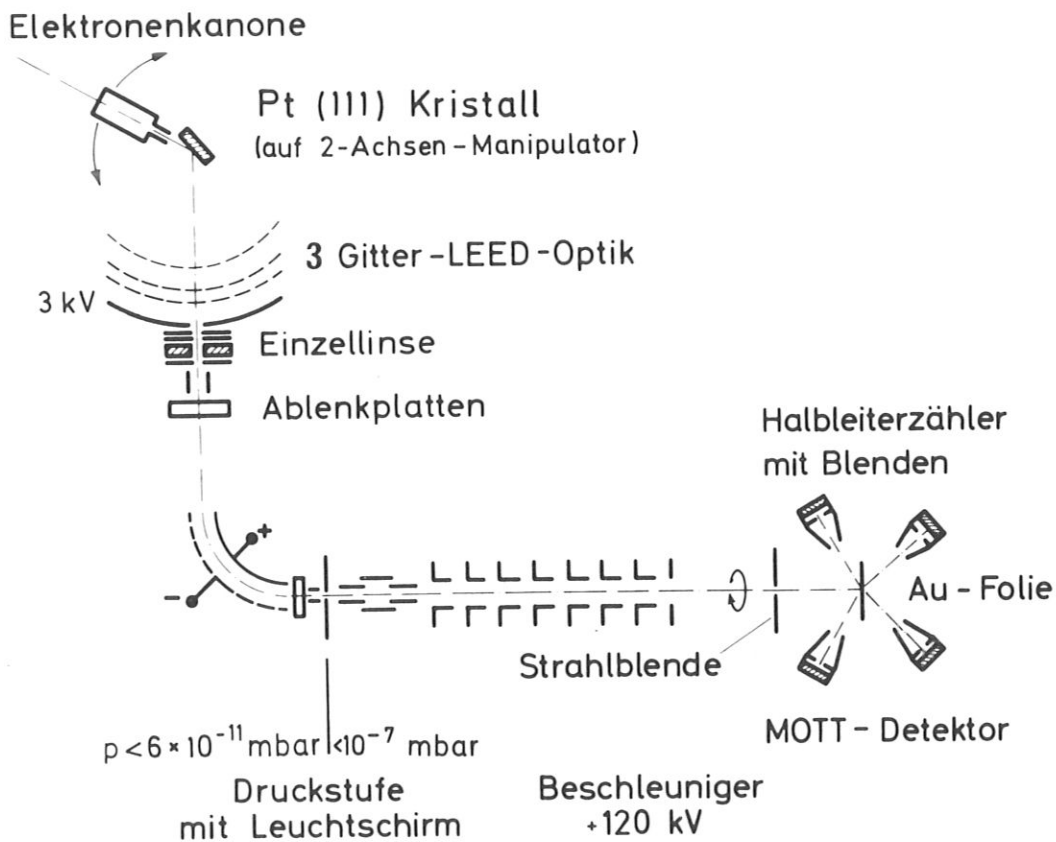
Das Verhalten des Elektronenspins bei der Beugung an einem Kristall kann mit zwei prinzipiell verschiedenen Methoden untersucht werden (vgl. Abschn. 2.3.3):

- 1) Ein Elektronenstrahl definierter, veränderbarer Polarisation $P_{\underline{O}}$ wird am zu untersuchenden Kristall gestreut; von der Anfangspolarisation abhängige Intensitätsänderungen in den gebeugten Strahlen werden ausgewertet (Wang 1979).
- 2) Ein unpolarisierter Elektronenstrahl wird am zu untersuchenden Kristall gebeugt, die Polarisation auslaufender Strahlen wird durch einen zweiten Streuprozess analysiert. Ein möglicher, zuverlässiger Analysator ist der Mott-Detektor (Streuung an polykristallinen Goldfolien bei Energien über 100 keV, siehe z.B. van Klippen 1966), ein anderer die niederenergetische Streuung der Elektronen an freien Atomen (z.B. Quecksilberdampf, siehe z.B. Deichsel 1961). Auch eine zweite Beugung bei niedrigen Energien ist zum Polarisationsnachweis geeignet (Kirschner und Feder 1979).

Unter Benutzung eines bereits vorhandenen Mott-Detektors wurde die vorliegende Arbeit als Doppelstreuexperiment durchgeführt; ein unpolarisierter Elektronenstrahl wurde an einem Pt(111)-Kristall gebeugt und die Spinpolarisation durch Mott-Streuung nachgewiesen.

3.1 Prinzipieller Aufbau

Die verwendete Apparatur ist in Bild 3.1 schematisch dargestellt. Sie besteht aus zwei Teilen: dem Beugungssystem, das in UHV-Technologie ausgeführt ist, und dem Mott-Detektor, der als Hochvakuumapparatur aufgebaut ist. Diese beiden



LEED-System mit Polarisationsdetektor

Vakuumsysteme sind durch das Beschleunigungsrohr gekoppelt. Das UHV-System und das Beschleunigungsrohr sind durch eine Druckstufe getrennt (s. Kap. 3.2).

Der Einsatz des Mott-Detektors zum Polarisationsnachweis erfordert festen Lauf des ausfallenden Strahls für alle zu untersuchenden Streubedingungen. Zur Variation der Beugungsbedingungen müssen daher sowohl der Kristall als auch die Kanone bewegbar sein: Der Kristall ist bezüglich zweier Achsen drehbar (zur Variation des Polarwinkels und des Azimutwinkels, siehe Abschn. 3.3.2), zusätzlich ist die Elektronenkanone um die polare Drehachse des Kristalls schwenkbar (siehe Abschn. 3.3.1). Dadurch wird es ermöglicht, bei frei wählbarer Energie den gewünschten Beugungsreflex aus dem LEED-System durch ein Loch im Leuchtschirm (probehole) auszufädeln (siehe Abschn. 3.3.3); in dieser Meßanordnung können allerdings nur Streuebenen, die die Oberflächennormale enthalten, untersucht werden.

In dem nachfolgenden Strahlführungssystem wird der ausgefädelte Strahl mehrmals fokussiert, um 90° elektrostatisch abgelenkt und auf eine Energie von 120 keV beschleunigt. Die Ablenkung um 90° erfolgt in der Streuebene der Beugung, sodaß sie für den Nachweis der Normalkomponente der Polarisation P_n keinen Einfluß hat. Sie verhindert aber, daß der durch die Druckstufe tretende Gasstrahl direkt auf die Kristalloberfläche trifft und so eine erhöhte Verunreinigung der Kristalloberfläche bewirkt.

Sowohl der Eingang der Druckstufe als auch die aus Glas gefertigte Strahlblende vor der Streufolie im Mott-Detektor sind als Leuchtschirm ausgebildet. Der Strahlverlauf kann dadurch überprüft und justiert werden. Im Mott-Detektor wird der hochenergetische Elektronenstrahl an einer dünnen, freitragenden Goldfolie gestreut. Ist der Elektronenstrahl polarisiert, so ist die Intensität der

an der Goldfolie gestreuten Elektronen azimutabhängig (siehe Abschnitt 2.2.3, Gleichung 2.36). Die daraus folgende Intensitätsasymmetrie wird über Oberflächensperrschichtzähler registriert und daraus rechnerisch die Polarisation des einfallenden Elektronenstrahls bestimmt (siehe Kapitel 3.4).

Äußere Magnetfelder werden nur in dem Bereich niedriger Elektronenenergien, im LEED-System und im Ablensystem vor dem Eintritt in das 120 keV-Beschleunigungsrohr durch drei Spulenpaare kompensiert. Das verbleibende Restmagnetfeld wirkt sich nur im Energiebereich unter 30 eV störend aus.

3.2 Vakuumsystem

Das UHV-Beugungssystem wird vor und während des Ausheizens mit Hilfe einer Turbomolekularpumpe (TVP 250) mit einer Diffusionspumpe (Leybold DO 30) und einer zweistufigen Drehschieberpumpe vorvakuumseitig gepumpt. Der erreichbare Enddruck der Turbomolekularpumpe liegt bei 3×10^{-10} mbar. Als UHV-Pumpe dient eine elektrostatische Ionengetterpumpe (Granville Phillips Electro-Ion-Pump). Die Vorteile dieser Pumpe sind, daß sie unmagnetisch ist, die Titan-Verdampfungsleistung im Bereich von 25 bis 750 W wählbar ist und die Anodenspannung abgeschaltet werden kann. Dadurch können die Edelgase, die zum Reinigen der Kristalloberfläche in das UHV-System eingelassen werden, durch Gettern der chemisch aktiven Verunreinigungen sauber gehalten werden. Die UHV-Pumpe ist über ein pneumatisches Ganzmetall-Schieberventil mit der Apparatur verbunden, sodaß bei Belüften der Anlage oder Einlaß reaktiver Gase die Pumpe vom System getrennt werden kann. Der in der Beugungskammer erreichbare Enddruck liegt bei $4-6 \times 10^{-11}$ mbar.

Bei Betrieb der LEED-Kanone bleibt dieser Druck konstant, während bei Betrieb der Auger-Elektronenkanone der Druck auf etwa 2×10^{-10} mbar ansteigt. Zur Restgasanalyse wird ein Quadrupol-Massenspektrometer (Balzers QMG 111) verwendet, das eine qualitative Bestimmung der Restgaskomponenten ermöglicht. Allerdings verfälscht das Massenspektrometer selbst das Restgasspektrum, da im Betrieb am Heizfaden der Ionenquelle CO entsteht. Ein bei einem Druck von 6×10^{-11} mbar aufgenommenes Massenspektrum zeigt, daß sich das Restgas im wesentlichen aus H_2 , H_2O , CO und CO_2 zusammensetzt.

Der Polarisationsdetektor wird mit Hilfe einer Turbomolekularpumpe (TUP 100) mit einer Diffusionspumpe und einer zweistufigen Drehschieberpumpe als Vorpumpe durch das Beschleunigungsrohr hindurch evakuiert. Zusätzlich befindet sich in der Streukammer eine Volumengetterpumpe (SAES-Getters). Sie pumpt chemisch aktive Gase reaktiv, Wasserstoff wird im Volumen des Getters gelöst. Das Saugvermögen der Pumpe beträgt etwa 50 l/s. Der damit erreichte Enddruck im Mott-Detektor liegt bei $<1 \cdot 10^{-7}$ mbar. Die Druckstufe ist als Lochblende mit einem Durchmesser von 1 mm ausgeführt. Bei einem Druck von 4×10^{-11} mbar im LEED-System ist dieser Druck im wesentlichen durch den Gasanfall durch die Druckstufe bestimmt.

Der Beugungskammer ist über ein Dosierventil (Balzers UDV 035) ein Gaseinlaßsystem mit H_2 , O_2 , Ne und Ar-Flaschen angeschlossen. Das Leitungssystem wird durch eine Ionenzerstäubungspumpe (Leybold IZ 30) gepumpt. Der erreichbare Enddruck liegt bei etwa 7×10^{-10} mbar. Zur Druckmessung befinden sich im LEED-System, im Gaseinlaßsystem und über den Turbomolekularpumpen Bayard-Alpert-Meßröhren. Die Röntgengrenze der Meßröhre im UHV-Teil liegt bei $2,5 \times 10^{-11}$ mbar (Varian UHV 24).

3.3 LEED-System

3.3.1 LEED-Elektronenkanone

Die LEED-Elektronenkanone wurde von Müller (1977a) beschrieben. Es seien daher nur kurz die Daten zusammengefaßt:

Bei einer Endenergie von 50 eV ist der erreichbare Strahlstrom 10 μA , für einen Strahlstrom kleiner als 3 μA ist die Strahldivergenz kleiner als 1° . Die Energie des Elektronenstrahls ist mit einer Reproduzierbarkeit von 0.1 eV einstellbar, der angegebene Absolutwert besitzt jedoch infolge von Kontaktpotentialen und eines unsymmetrischen Spannungsabfalls am Heizfaden eine Unsicherheit von ± 1 eV. Die Kanone ist um eine Achse senkrecht zur Elektronenstrahlrichtung über einen Zahnstangenantrieb in einem Winkelbereich von 270° schwenkbar. Die Reproduzierbarkeit der Einstellung liegt bei $0,2^\circ$, die Linearität ist besser als 2° . Gestreute Elektronen werden von der Kanone in einem Kegel mit einem halben Öffnungswinkel von 10° abgeschattet. Dadurch ergibt sich als maximaler Streuwinkel 170° .

3.3.2 Kristallmanipulator

Der Kristallmanipulator muß zwei Drehachsen besitzen; nur so können, wenn Streuebene und Streuwinkel vorgegeben sind, verschiedene Reflexe durch das Loch im Leuchtschirm ausgefädelt werden (siehe Bild 3.2). Die polare Drehachse liegt in der Kristalloberfläche, sie fällt innerhalb einer Unsicherheit von etwa $0,5^\circ$ mit der Drehachse zusammen, um die die Elektronenkanone geschwenkt wird. Die zweite Drehachse steht senkrecht auf der Kristalloberfläche; mit dieser Rotation wird der Azimutwinkel φ variiert.

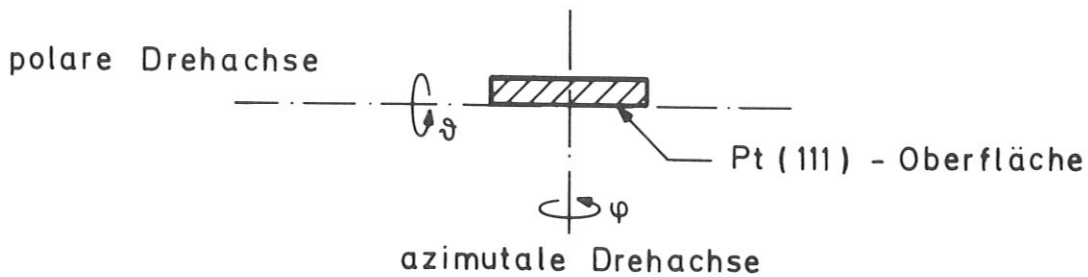


Bild 3.2: Drehachsen und Drehwinkel des Kristalls

Als Antrieb für die beiden Kristalldrehungen ist eine Präzisions-Drehdurchführung mit coaxialer Schubstange eingesetzt (V.G. RD2-S). Für sie wurde ein Manipulatorkopf entwickelt, der die Drehung der Durchführung für die Variation des Polarwinkels (bis zu 360°) und den Schub für die azimutale Drehung des Kristalls (bis zu 180°) verwendet. Für die Azimutdrehung wird die Schubbewegung über eine schrägverzahnte Zahnstange auf ein Zahnrad übertragen, das zwischen zwei Kugellagern gehalten ist. Das Zahnrad ist Teil einer Hohlachse, auf der die Halterung des Kristallheizelements (Varian) in der Höhe und der Winkellage justierbar befestigt ist. Auf diesem Heizelement ist der Kristall mit Hilfe zweier Platindrähte festgeklemmt (siehe Bild 3.3). In der Hohlachse werden die Heizleitungen und das Thermoelement miteinander verdrillt geführt. Der Kristallmanipulator mit montiertem Kristall ist in Bild 3.3 dargestellt.

Der Manipulatorkopf wurde so konstruiert, daß über Justierschrauben die Fertigungsgenauigkeiten kompensiert werden können. Dadurch wurde es möglich, folgende Einstellungen durchzuführen:

- i) Ausrichtung des Winkels zwischen polarer und azimuthaler Drehachse auf $90^\circ \pm 0.05^\circ$.

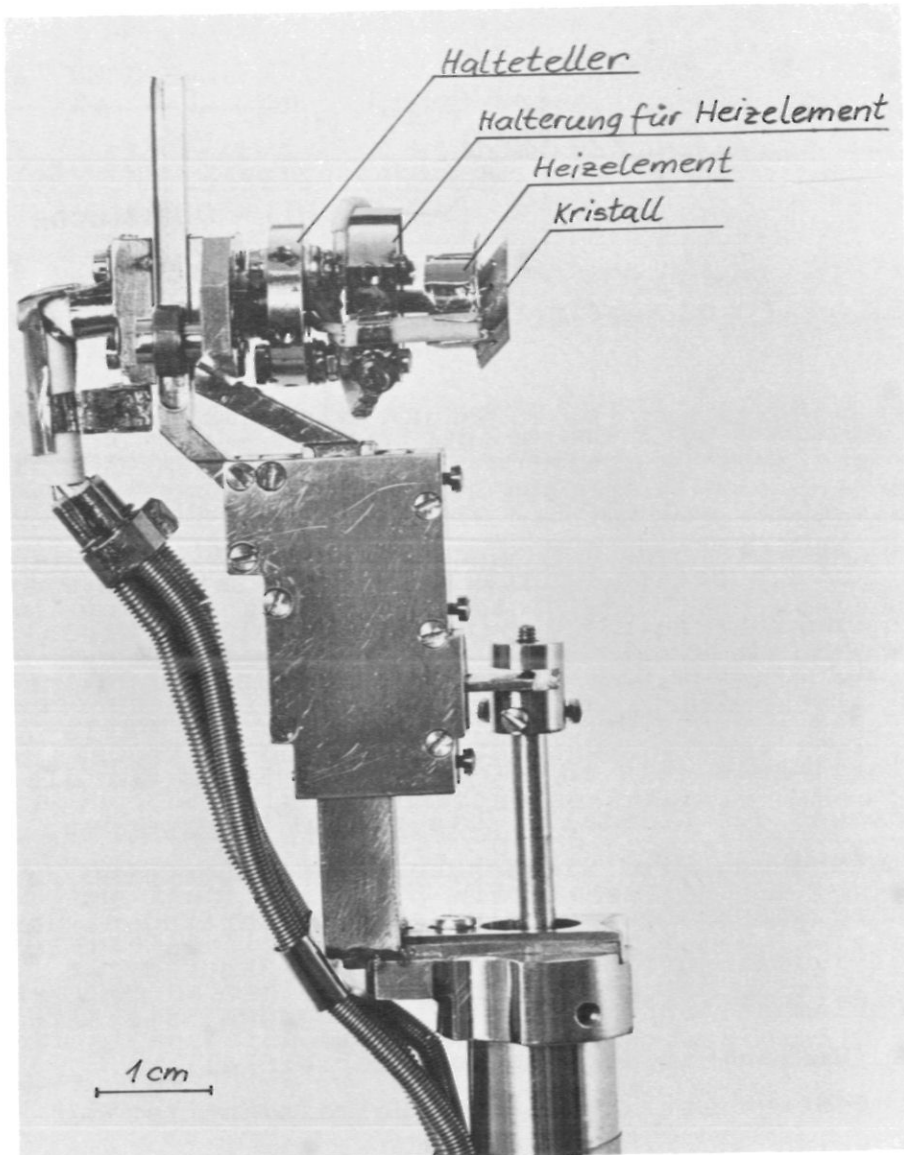


Bild 3.3: Kristallmanipulator mit Platinkristall

- ii) Parallelverschiebung der azimuthalen Drehachse, sodaß sie die polare Achse innerhalb von ± 0.06 mm schneidet.
- iii) Ausrichtung des Winkels zwischen optischer Kristalloberfläche und azimuthaler Drehachse auf $90^\circ \pm 0.15^\circ$.

- iv) Höheneinstellung der Kristallhalterung, sodaß die Kristalloberfläche innerhalb von 0.1 mm auf der polaren Drehachse liegt.

Für die Genauigkeit der Einstellungen von Kristallwinkeln gilt: Die Linearität der Azimutdrehung beträgt $\pm 1^\circ$ in einem Winkelbereich von 180° . Die Ablesegenauigkeit des Polarwinkels ist entsprechend der Ablesung des Nonius an der Durchführung bzw. des inkrementalen Winkelkodierers (Litton 70 LDBI 1800-1-10) 0.1° . Der abgelesene Winkel weicht jedoch vom eingestellten Winkel infolge von Fertigungsungenauigkeiten der Drehdurchführung um bis zu 0.3° ab.

Das Spiel bei Übertragung der Schubbewegung der Drehschiebedurchführung auf das Zahnrad wurde auf maximal 1° (entsprechend 0.05 mm Schubbewegung) eingestellt.

Das Kristall-Heizelement wird über Stromdurchgang geheizt; bei dem maximalen Heizstrom von 4 A erreicht der Kristall eine Temperatur von 1500 K. Die Temperatur wird über ein Pt-PtRh10-Thermoelement gemessen. Die Thermodrähte sind gegenüberliegend unmittelbar neben dem Kristall auf den Haltedrähnten angepunktet. Die Thermospannung wird mit Hilfe eines digitalen Temperaturmeßgerätes (Doric Trendicator 400 A) gemessen, die Kristalltemperatur wird dabei mit einer Auflösung von 0,1 K digital angezeigt.

3.3.3 LEED-System

Zur Energiefilterung der gestreuten Elektronen dient eine 3-Gitter-Anordnung. Die Gitter sind aus verkupferten Edelstahlnetzen mit einer Maschenweite von 0,5 mm und einer Transparenz von 85 % gefertigt, die Netzzradien sind 70, 80 und 85 mm. Für Polarisationsmessungen ist das erste

Netz geerdet, das mittlere Netz wird auf negativem Potential nahe der Abschneideschwelle und das dritte Netz auf positiver Spannung von etwa + 250 eV betrieben. So treffen nur die quasielastisch gestreuten Elektronen auf den Leuchtschirm. Dieser ist aus rostfreiem Stahl gefertigt und spannt einen Winkel von 70° auf, sein Radius ist 100 mm. Während der Polarisationsmessungen wurde an den Leuchtschirm eine Spannung von etwa 2,7 keV angelegt, zum Betrachten des LEED-Bildes 5 kV.

Um systematische Winkelfehler infolge räumlicher Modulation des ausgefädelten Elektronenstrahls am Retardierungsgitter (Müller 1977a) zu vermeiden, wurde an diesem Gitter eine Blende mit einem Durchmesser von 0,6 mm und am dritten Gitter eine Blende mit 1 mm Durchmesser befestigt. Die Blenden sind innerhalb von 0,1 mm zur Leuchtschirmbohrung zentriert. Der durch die Blenden aufgespannte Winkel beträgt etwa $0,45^\circ$. Infolge der starken Linsenwirkung der Feldverteilung im Bereich der Blenden und des Ausfädelloches ist Transmission nur für Elektronen mit einer Winkeldivergenz $< 0,1^\circ$ zur Sollrichtung möglich (vgl. Abschnitt 4.1.1). Für die angegebenen Potentiale wird die Durchlaßintensität maximal. Außerdem ist für die gewählten Spannungswerte die Laufstrecke klein gehalten, auf der die Elektronen Energien nahe null haben und daher durch magnetische Störfelder besonders stark beeinflusst werden.

3.3.4 Meßanordnung für Auger-Elektronen-Spektroskopie

Die LEED-Elektronenkanone ist nicht für Betriebsspannungen von 2 kV geeignet, es wurde daher eine Auger-Elektronenkanone (Varian 981-2454) in einem Winkel von 60° zur Ausfädelachse (entsprechend 30° zur Kristalloberfläche bei Ausrichtung der Oberflächennormalen zur Ausfädelachse) angebracht. Die Primärelektronenenergie ist von 0 - 3 keV, der Strom von 0 - 60 μ A einstellbar. Die im Kristall erzeugten Sekundärelektronen werden vom Leuchtschirm in einem Kegel mit 70° Öffnungswinkel erfaßt. Das Gegenfeld

und die Modulationsspannung wurden am mittleren Gitter angelegt, die anderen beiden Gitter wurden geerdet. Die Auskopplung des Sekundärelektronenstroms vom Leuchtschirm erfolgt über einen Transformator, dessen Primärwicklung auf + 100 V gegen Erde liegt (siehe Bild 3.4). Die Sekundär-

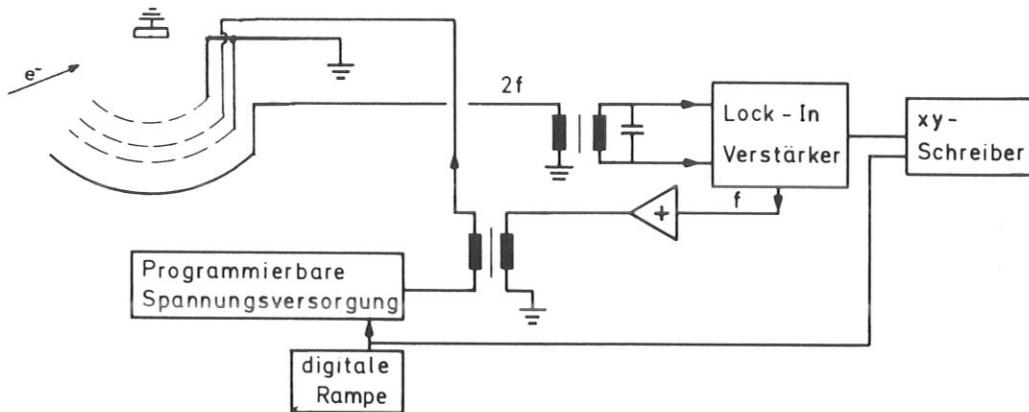


Bild 3.4: Messanordnung zur Auger-Elektronen-Spektroskopie

wicklung ist als LC-Resonanzkreis für das $2f$ -Signal ausgeführt, wodurch die störende kapazitative Einkopplung des f -Signals erheblich verringert wird. Der verwendete Lock-in-Verstärker (Princeton Applied Research, Mod. 186 A) besitzt einen internen Sinus-Generator für die Modulation, sein Ausgang wird im nachgeschalteten Verstärker auf 14 V_{pp} erhöht. Die Frequenz des Modulationssignals wurde zu 945 Hz gewählt. Die Eingangsempfindlichkeit des Lock-in-Verstärkers wurde auf 10^{-7} V eingestellt. Zur Störungsunterdrückung wurden fast alle Spektren ohne Vorverstärker mit Differenzeingang gemessen. Die Nachweisempfindlichkeit der Auger-Spektroskopie-Anordnung wurde auf etwa 10^{-2} Monolagen Kohlenstoff abgeschätzt (Staib und Staudenmaier, 1977, Biberian und Somorjai, 1979).

In den Messungen wurde, um chemische Einflüsse des hochenergetischen Elektronenstroms gering zu halten, ein möglichst niedriger Primärstrom ($3 \mu\text{A}$) verwendet. Als Pri-

märenergie wurde 2 keV gewählt, um vergleichbare Anregungswahrscheinlichkeiten für die Kohlenstofflinie und die 237 eV-Platinlinie zu erhalten. In Bild 3.5 sind Augerspektren des Platinkristalls unmittelbar nach dem Einbau (oben) und nach der Reinigung (unten) angegeben.

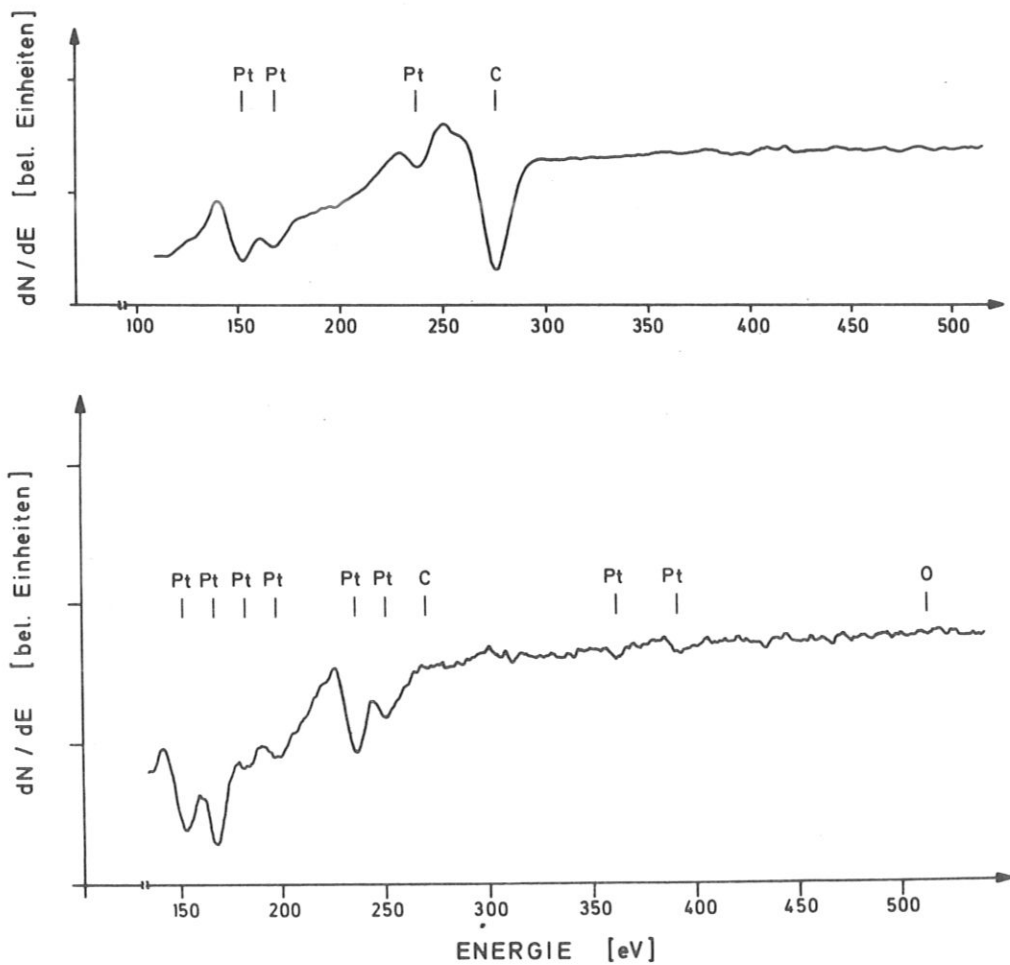


Bild 3.5: Augerspektren des Pt-Kristalls unmittelbar nach dem Einbau (oben) und nach Reinigung des Kristalls (unten).

3.4 Polarisations-Detektor

Zur Analyse der bei der Beugung der Elektronen auftretenden Spinpolarisation wurden die Elektronen im Polarisationsdetektor an freitragenden polykristallinen Goldfolien bei einer Energie von 120 keV gestreut (Mott-Streuung). Der hier verwendete Mott-Detektor geht in seiner Grundaufführung auf Müller 1966 zurück und wurde in seiner modifizierten Ausführung von Müller 1977a beschrieben.

Die Streukammer des Mott-Detektors kann um den einlaufenden Strahl um etwa 360° gedreht werden. In einer Ebene, die den einfallenden Strahl enthält, sind vier Oberflächensperrschichtzähler angebracht: zwei davon befinden sich unter einem Streuwinkel von 120° und dienen zur Bestimmung der polarisationsabhängigen Intensitätsasymmetrie. Die beiden anderen Elektronenzähler stehen bei einem Streuwinkel von 45° . Bei diesem Winkel ist die Polarisationsempfindlichkeit um mehr als eine Größenordnung kleiner und die Streuwahrscheinlichkeit um mehr als eine Größenordnung größer als bei 120° . Intensitätsasymmetrien in diesen Zählern sind daher ein Maß für die Größe apparativer Asymmetrien.

Richtet man die Streuebene des Mott-Detektors, die durch den einfallenden Elektronenstrahl und die vier Zähler aufgespannt wird, parallel zur Streuebene der Beugung aus, so wird die Komponente P_n des Polarisationsvektors senkrecht zur Streuebene analysiert. Dreht man aber den Mott-Detektor um 90° , so stehen die Streuebene der Beugung und der Mott-Streuung senkrecht aufeinander. In diesem Fall wird die longitudinale Polarisationskomponente P_n parallel zum Impuls des gebeugten Strahls erfaßt. Sie steht nach der 90° -Ablenkung senkrecht auf der Bewegungsrichtung (siehe Bild 3.1). Mit Ausnahme der Rotationsdiagramme für P_k wurden die vorliegenden Messungen für die Normalkomponente P_n durchgeführt.

Um systematische Fehler beim Polarisationsnachweis möglichst gering zu halten, wurde bei jedem Meßpunkt die gesamte Mott-Streuanordnung um 180° gedreht. Die apparativen Asymmetrien wurden durch Messung an einem Elektronenstrahl bekannter Polarisation ($P = 0$ im direkten Kanonenstrahl) bestimmt und bei den Messungen an gebeugten Elektronen durch Berücksichtigung der Zählratenasymmetrie der polarisationsunempfindlichen 90° -Zähler in der Auswertung eliminiert. Für Polarisationsmessungen gelten die folgenden Fehlerangaben:

Der Nullpunkt der Polarisation ist innerhalb eines absoluten Fehlers von 0,01 (1 % Polarisation) bekannt, für die Polarisationsempfindlichkeit beträgt die Unsicherheit 7 % (siehe unten), die Reproduzierbarkeit von Polarisationsmessungen liegt entsprechend der Nullpunktunsicherheit bei ± 1 % Polarisation.

Die Verstärker und Zählelektronik wurden von Müller 1977 a beschrieben, Bild 3.6 gibt ein Prinzipschaltbild:

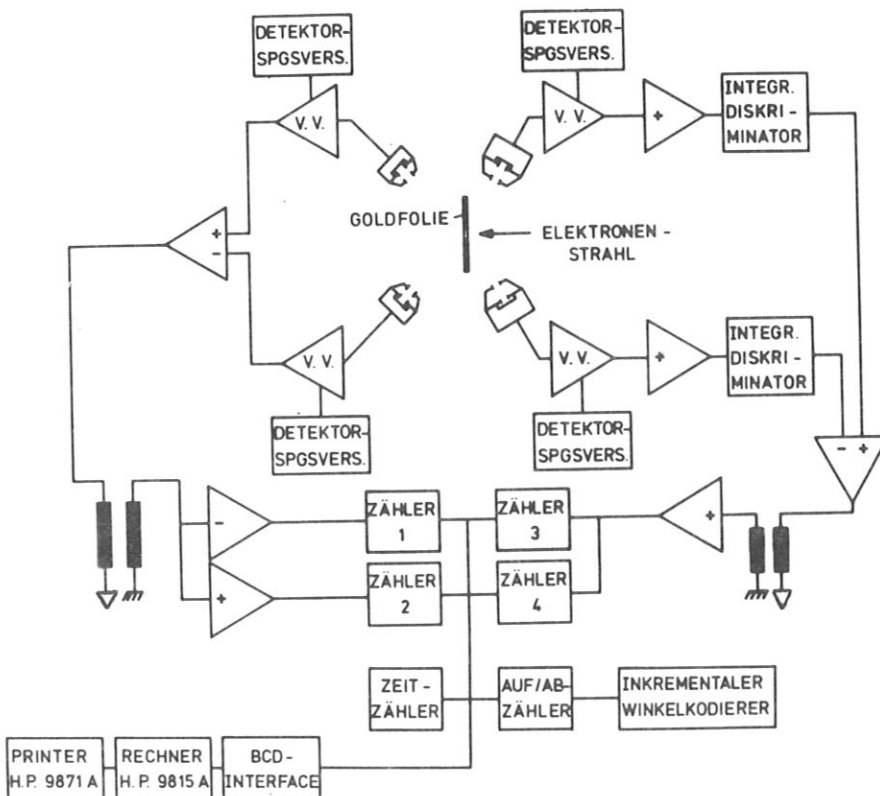


Bild 3.6: Prinzipschaltbild des Polarisationsnachweises und der Datenerfassung

Ergänzt wurde die Datenerfassung dadurch, daß zusätzlich zu den vier Elektronenkanälen und dem Zeitzähler auch der Polarwinkel des Kristalls über einen Winkelkodierer vom Rechner direkt übernommen wurde. Diese Winkelablesung über den Kodierer ist genauer als die Bestimmung des Streuwinkels am Kanonenmanipulator, deshalb wurde abweichend von Müller 1977a der Polarwinkel statt des Streuwinkels als Meßvariable gewählt.

Da neue Goldfolien eingesetzt wurden, änderte sich die Polarisationsempfindlichkeit im Vergleich zu dem von Müller 1977a angegebenen Wert. Die Polarisationsempfindlichkeit des Mott-Detektors D hängt für dünne Folien von der Dicke d der verwendeten Streufolie folgendermaßen ab (Raith 1962, Müller 1966):

$$3.1) \quad D(d) = D(0) \cdot \frac{1}{1 + \alpha \cdot d}$$

α : apparative Konstante
 d : Foliendicke
 $D(0) = S$: Shermanfunktion

Da die Shermanfunktion genau bekannt ist und für den verwendeten Mott-Detektor die apparative Konstante α schon bestimmt wurde (Müller 1977a), mußte lediglich die Dicke der verwendeten Goldfolie ermittelt werden. Dazu wurde die Dicke einer anderen, gleichzeitig neben der Streufolie aufgedampften Goldfolie mit Hilfe von Ionenstreuung bestimmt:

Bei Beschuß einer dünnen Folie mit hochenergetischen Ionen (in diesem Fall $1,25 \text{ MeV He}^+$) ist die maximale Energie der rückgestreuten Ionen bei einem Rückstoß von einem Oberflächenatom durch Impuls- und Energieerhaltung gegeben. Wird das Ion hingegen von der Rückseite des Films in den Detektor zurückgestreut, so verliert es beim zweifachen Weg durch die Folie Energie durch inelastische Wechselwirkung (im wesentlichen durch Anregung der Valenz- und Leitungselektronen), die makroskopisch durch den Energieverlust pro Wegeinheit beschrieben ist. Die Ionenenergie wurde gerade so gewählt, daß dieser Energieverlust von der Ionenenergie nur

unwesentlich abhängt. Die Differenz zwischen maximaler und minimaler Energie der rückgestreuten Ionen ist daher direkt proportional der Foliendicke (Chu et al. 1978). Durch Vergleich der Spektren der zu untersuchenden Folie mit einem Eichtarget bekannter Dicke ergab sich die Dicke der Folie zu $170 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ mit einer Unsicherheit von etwa 3 %. Für die Polarisationsempfindlichkeit folgte damit $D(170) = 0,267 \pm 0,019$.

3.5 Kristallbehandlung

3.5.1 Präparation der (111)-Oberfläche

Aus einem zylindrischen Platin-Kristall mit der Achsrichtung [110] wurde durch Funkenerosion ungefähr parallel zu den (111) Ebenen eine etwa 3 mm dicke Scheibe geschnitten. Sie wurde auf einen Probenhalter geklebt, mit zwei Bohrungen parallel zur Oberfläche für die Befestigung versehen und mit Diamantpaste mechanisch poliert, bis die Laue-Aufnahmen scharfe Reflexe zeigten. Nach der Vororientierung an Hand der Laue-Aufnahmen wurde der Kristall mit Hilfe eines Röntgendiffraktometers (Braggbeugung eines Cu-K-Strahls) mit einer Genauigkeit von $\pm 0,1^\circ$ orientiert.

Beginnend mit einer Korngröße von $50 \mu\text{m}$ wurde der Kristall dann mit immer feiner werdenden Körnungen bis zu $0,25 \mu\text{m}$ poliert. Dabei wurde eine etwa 0,4 mm dicke Oberflächenschicht abgetragen. Ein abschließend aufgenommenes Laue-Bild zeigte scharfe und in der Intensität symmetrische Reflexe.

Abschließend wurde an einem γ -Diffraktometer die Winkelabhängigkeit des Beugungsmaximums von Au- γ -Strahlung durchgemessen. Die Linienbreite erlaubt Rückschlüsse auf die Kleinwinkel-Kornverteilung des Kristalls. Die Halbwertsbreite des Beugungsmaximums wurde zu $< 0,1^\circ$ bestimmt. Dieser Wert ist eine Obergrenze für Abweichungen einzelner Kristallite von der Sollorientierung. Er ist kleiner als die Unsicherheit der Kristalljustierung.

3.5.2 In situ-Reinigung des Kristalls

Unmittelbar vor Einbau ins Vakuum wurde der Kristall in verdünnter Schwefelsäure und in destilliertem Wasser gekocht, anschließend mit Äthanol gespült. Ein Auger-Spektrum, das nach dem Ausheizen der Apparatur vor Beginn der Kristallreinigung aufgenommen wurde (Abb. 3.4, Kapitel 3.3) zeigte Kohlenstoff als Hauptverunreinigung.

Um das Kristallvolumen an Kohlenstoff zu verarmen, wurde der Kristall im Vakuum mehrmals mehrere Stunden lang in 10^{-8} bis 10^{-7} mbar O_2 bei etwa 1100 K geglüht und anschließend mit 3 keV Argonionen bei schrägem Einschub und wechselndem Azimut bis zu einer Fluenz von etwa 6×10^{17} Teilchen pro cm^2 (Christmann und Ertl 1976) beschossen. Während der Messungen wurde keine Diffusion von Verunreinigungen aus dem Kristallvolumen an die Oberfläche beobachtet. Es genügte daher, das adsorbierende Restgas durch regelmäßiges Hochheizen des Kristalls auf 600 K zu desorbieren (üblicherweise alle 1 bis 3 Stunden). An verschiedenen ausgeprägten Polarisationsstrukturen wurde festgestellt, daß diese auch ohne thermische Desorption über mehrere Stunden keinerlei Veränderungen zeigten. Nur bei wenigen (durch Oberflächenresonanzen hervorgerufenen) Polarisationsstrukturen zeigte Adsorption des Restgases in kürzerer Zeit einen Einfluß. Für diese Messungen wurde der Kristall alle 30 Minuten geheizt. Wöchentlich wurde der Kristall durch streifenden Beschub mit 1 keV Ne-Ionen gesäubert (Fluenz bis zu 4×10^{16} Teilchen/ cm^2), um zu verhindern, daß Kohlenstoff vom Heizfaden der Elektronenkanone auf dem Kristall angehäuft wird. Ein Auger-Spektrum des sauberen Kristalls ist in Bild 3.4 in Kapitel 3.3 angegeben.

4. EXPERIMENTELLE ERGEBNISSE

Das Verhalten der Polarisation hängt sehr empfindlich von der Elektronenenergie E , der Beugungsgeometrie (dem Polarwinkel θ , dem Azimut φ und dem analysierten Strahl (μV)) und der Oberflächenstruktur des Kristalls ab. Die Polarisationsmessungen zeigen im allgemeinen ausgeprägte Spitzen und resonanzartige Minimum-Maximum-Strukturen, die nur einige eV in der Energie (bzw. einige Grad im Winkel) breit sind. Diese Strukturen gehen oft ineinander über oder überlagern sich; die Variation der Meßparameter hat einen sehr starken Einfluß auf die Meßergebnisse.

Infolge der komplizierten Struktur der Meßkurven ist es im allgemeinen nicht möglich, die Ursachen der Polarisationsstrukturen anzugeben. In diesem Teil der Arbeit sollen anhand von polarwinkelabhängigen Messungen Vorstellungen vermittelt werden, in welchem Maße es möglich ist, aus systematischen Meßreihen Aussagen über die möglichen Ursachen ausgeprägter Polarisationsstrukturen zu gewinnen.

Zusätzlich werden für den Spiegelstrahl einige markante Polarisationsstrukturen in ihrer Azimutabhängigkeit $P(\varphi)$ untersucht, um den Einfluß von Kristallsymmetrie und Zeitumkehr auf die Polarisation zu prüfen. Zusätzlich gibt die Azimutabhängigkeit der Polarisation in Verbindung mit den polarwinkelabhängigen Messungen Hinweise auf die Ursachen der zu analysierenden Polarisationsstrukturen. Die Folgerungen, die sich aus dem Vergleich des Experiments mit Rechnungen ergeben, werden in Teil 5 (Vergleich Experiment-Theorie) aufgezeigt.

Eine für das Experiment wichtige Frage ist, ob die Messung $P(E)$ für verschiedene Polar- und Azimutwinkel oder die Messung $P(\theta)$ für verschiedene Energien und Azimutwerte vorzuziehen ist. Da sich die Polarisation aber bei Variation der Energie um 1 eV weniger stark ändert als bei einer Winkeländerung um 1° , wurden die Polarisationsstrukturen im Rahmen

dieser Arbeit für konstante Energie in Abhängigkeit der Winkel ϑ und φ untersucht. Eine Ausnahme bilden die für den Vergleich mit Rechnungen wichtigen energieabhängigen Polarisationsmessungen für senkrechten Ausfall in den Nebenstrahlen (siehe Kap.5.2). In der Darstellung der Meßergebnisse werden die Polarisationskomponenten (entsprechend der Nomenklatur von Kap. 3.4) mit P_n und P_k bezeichnet; bei Messungen, für die $P = P_n \cdot n = P \cdot n$ gilt, wird die Bezeichnung P verwendet. Die Fehlerbalken in den Meßkurven geben den statistischen Fehler der Zählungen im Mott-Detektor an, bezüglich der systematischen Fehler siehe Abschnitt 3.3.3 und Kapitel 3.4.

4.1 Polarisation als Funktion des Polarwinkels

Als Polarwinkel wird der Winkel zwischen der Oberflächennormalen und dem auslaufenden Strahl definiert (siehe Bild 4.1), für den Spiegelstrahl gilt $\vartheta_o = \vartheta$.

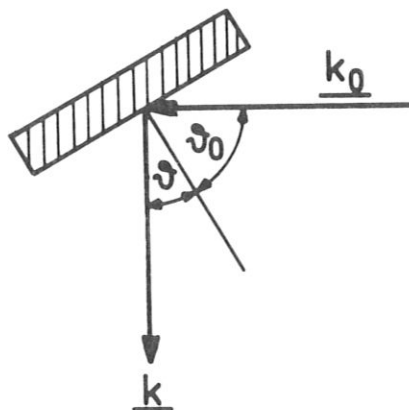


Bild 4.1: Definition des Polarwinkels

Im nächsten Abschnitt wird an Hand eines Beispiels ($P(\vartheta)$ im (10) Strahl für $E = 87$ eV) die Reproduzierbarkeit des Experiments und die Meßgenauigkeit aufgezeigt, anschließend werden die $P(\vartheta)$ -Ergebnisse des Spiegelstrahls diskutiert.

4.1.1 Empfindlichkeit der Meßmethode und Zuverlässigkeit der Ergebnisse

Polarwinkelabhängige Messungen werden wie folgt durchgeführt: der Kristall wird um einen definierten Winkel um die polare Achse gedreht, anschließend wird die Elektronenkanone so nachgefahren, daß die Intensität im Mott-Detektor maximal wird.

Bild 4.2 zeigt zwei polarwinkelabhängige Polarisationskurven $P(\vartheta)$ der beiden äquivalenten Nebenstrahlen (01) und (10) für die Energie $E = 87$ eV. Dabei wurde die Messung des (01)-Strahls in der "gespiegelten Beugungsgeometrie" durchgeführt: die Elektronenkanone wurde über das Ausfädelloch geschwenkt und der Kristall um die polare Achse so gedreht, daß Streuwinkel und Ausfallswinkel die gleichen Werte wie bei der Messung des (10)-Strahls annahmen. Der Azimutwinkel des Kristalls wurde um 60° verändert, sodaß der dem (10)-Reflex äquivalente (01)-Reflex untersucht wurde. Bei Messung in der gespiegelten Beugungsgeometrie ändert die Referenzrichtung $\underline{e}_{k_0 \times k}$ ihre Richtung im Raum, sodaß der Polarisationsvektor im Laborsystem sein Vorzeichen ändert. Die Meßergebnisse sind bezogen auf $\underline{e}_{k_0 \times k}$ dargestellt, da dann die Ergebnisse für beide Beugungsgeometrien äquivalent sein sollten.

Die beiden Meßkurven in Bild 4.2 zeigen gute Übereinstimmung. Die Maxima bei $\vartheta = 11^\circ$ weisen in beiden Strahlen 93 % Polarisierung auf. Dies ist der höchste in dieser Arbeit gemessene Polarisationswert; aus ihm wurde die Obergrenze des in Abschnitt 3.4 angegebenen Skalierungsfehlers von 7 % für die Polarisierung abgeleitet. Aus den beiden scharfen Nulldurchgängen bei $\vartheta = 9^\circ$ und $\vartheta = -5^\circ$ kann aus den an der Drehdurchführung abgelesenen Winkeln (ϑ_k) der dem senkrechten Ausfall entsprechende Winkel $\vartheta_{k \perp}$ ermittelt werden. Bei Kenntnis von $\vartheta_{k \perp}$ läßt sich der Polarwinkel ϑ aus ϑ_k berechnen:

4.1) $\vartheta = \vartheta_{k\perp} \pm \vartheta_k$ + für gespiegelte Beugungsgeometrie
- für normale Beugungsgeometrie

$\vartheta_{k\perp}$ kann innerhalb einer Unsicherheit von 0.1° bestimmt werden. Allerdings kann $\vartheta_{k\perp}$ infolge magnetischer Streufelder zeitlich schwanken, sodaß die Angabe des Polarwinkels insgesamt eine Unsicherheit von 0.3° bis 0.5° enthält. Für unmittelbar nacheinander gemessene Kurven ist diese Langzeitschwankung ohne Bedeutung, die Präzision der Angaben von Polarwinkeländerungen ist durch die Ablesegenauigkeit von ϑ_k ($\approx 0,1^\circ$) und den systematischen Fehler der Winkelablesung am Kristallmanipulator (maximal 0.3° , siehe Abschnitt 3.3.2) gegeben.

Da sich im Nulldurchgang bei $\vartheta = 9^\circ$ die Polarisation bei Änderung des Polarwinkels um $\Delta\vartheta = 0.2^\circ$ um etwa 30 % ändert, kann man daraus schließen, daß der Akzeptanzwinkel der Ausfädeloptik von vergleichbarer Größe ist. Die Obergrenze des Akzeptanzwinkels läßt sich infolge des Sprungs in der Kurve für 91 eV in Bild 5.4 mit $\Delta\vartheta = 0.1^\circ$ angeben. Die Blenden in der LEED-Optik geben zwar einen größeren Winkel vor, die Feldverteilung an den Blenden erlaubt jedoch Transmission nur für Elektronen, die in unmittelbarer Achsnähe einfallen.

Die beiden negativen Extrema sind für die beiden Strahlen nicht gleich tief. Der Grund dafür kann in der zu großen Schrittweite bei der Messung liegen; energieabhängige Messungen äquivalenter Nebenstrahlen in den beiden Beugungsgeometrien zeigten innerhalb des statistischen Fehlers Übereinstimmung der Messungen (siehe Abschnitt 5.3.1).

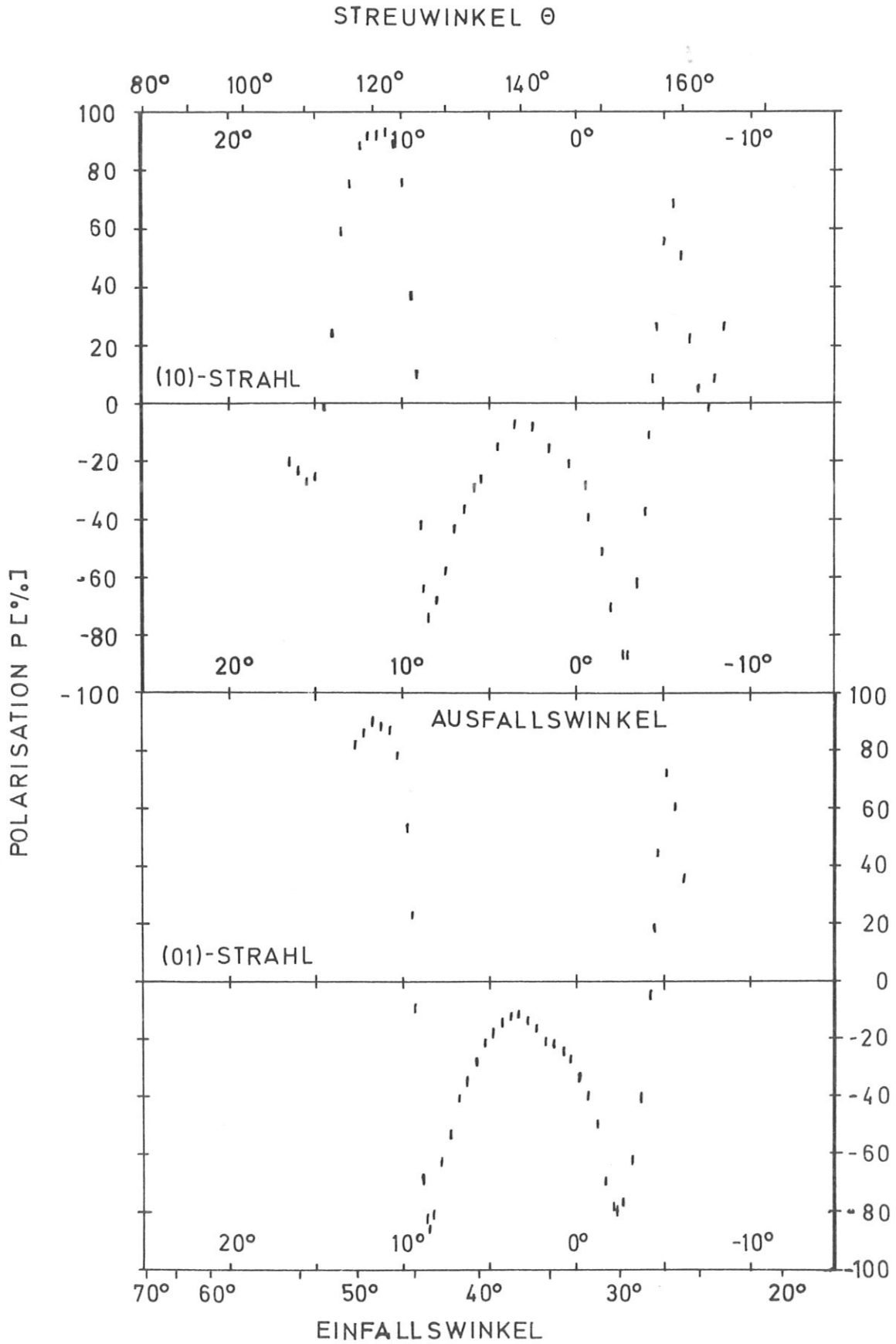


Bild 4.2: Polarwinkelabhängigkeit der Polarisationskomponente P_n (senkrecht zur Streuebene) im (10)-Strahl und (01)-Strahl für $E = 87$ eV.

4.1.2 Polarisation im Spiegelstrahl als Funktion des Polarwinkels

Am Spiegelstrahl wurden $P_{\parallel}(\vartheta)$ -Kurven für zwei verschiedene Werte des Azimutwinkels gemessen: für den einen Teil der Experimente wurde die Streuebene parallel zu den Spiegelebenen des Kristalls gewählt, dieser Azimutwinkel wurde als 0° definiert (siehe Abschnitt 2.3.3). Der zweite Teil wurde bei einem Azimutwinkel von $\varphi = 19^{\circ}$ durchgeführt, da hierfür ausgeprägte Extrema der Polarisation auftreten. Mit diesem Azimut $\varphi = 19^{\circ}$ sind in Bild 4.3 polarwinkelabhängige Messungen für die Energien $E = 60, 70, 80$ und 90 eV angegeben. An ihnen fällt auf, daß im Bereich des Polarwinkels $\vartheta = 50^{\circ} - 75^{\circ}$ die Polarisation unempfindlich ist gegen Variation der Energie des Polarwinkels. Für Polarwinkel $30^{\circ} \leq \vartheta \leq 50^{\circ}$ treten einige auffallende Polarisationsminima auf, die auch im Azimut sehr scharf ausgeprägt sind; für Winkel $\vartheta < 30^{\circ}$ wird das Verhalten der Polarisation unübersichtlich.

In Bild 4.4 ist der Winkelbereich $25^{\circ} \leq \vartheta \leq 55^{\circ}$ (in wenigen Fällen bis 75°) für Energien von $57,5 \text{ eV} \leq E \leq 67,5 \text{ eV}$ untersucht.

Das Auffallende an dieser Kurvenschar ist das Polarisationsminimum bei $\vartheta = 43^{\circ}$: Es tritt, wie Bild 4.5 zeigt, im Energiebereich von 59 eV bis $66,5 \text{ eV}$ beim gleichen Winkel auf. Dieses $P(\vartheta)$ -Minimum ist auch in der Azimutabhängigkeit scharf definiert ($\varphi = 19^{\circ}$ mit einer Halbwertsbreite von $\Delta\varphi = 3^{\circ}$, siehe Bild 5.5) und ist mit einem tiefen Minimum der Intensität gekoppelt. Diese Polarisationsstruktur ist mit dem Einschub (oder Ausfall) des Elektronenstrahls mit einer niederindizierten Gitterrichtung des Kristalls korreliert. Das Auftreten der scharfen, tiefen Minima der Intensität und ihre Spinabhängigkeit, die auch in den Messungen an Au(110) gefunden wurden (Müller 1977 a) ist nicht voll erklärt, weitere systematische Messungen könnten zu einem besseren Verständnis führen.

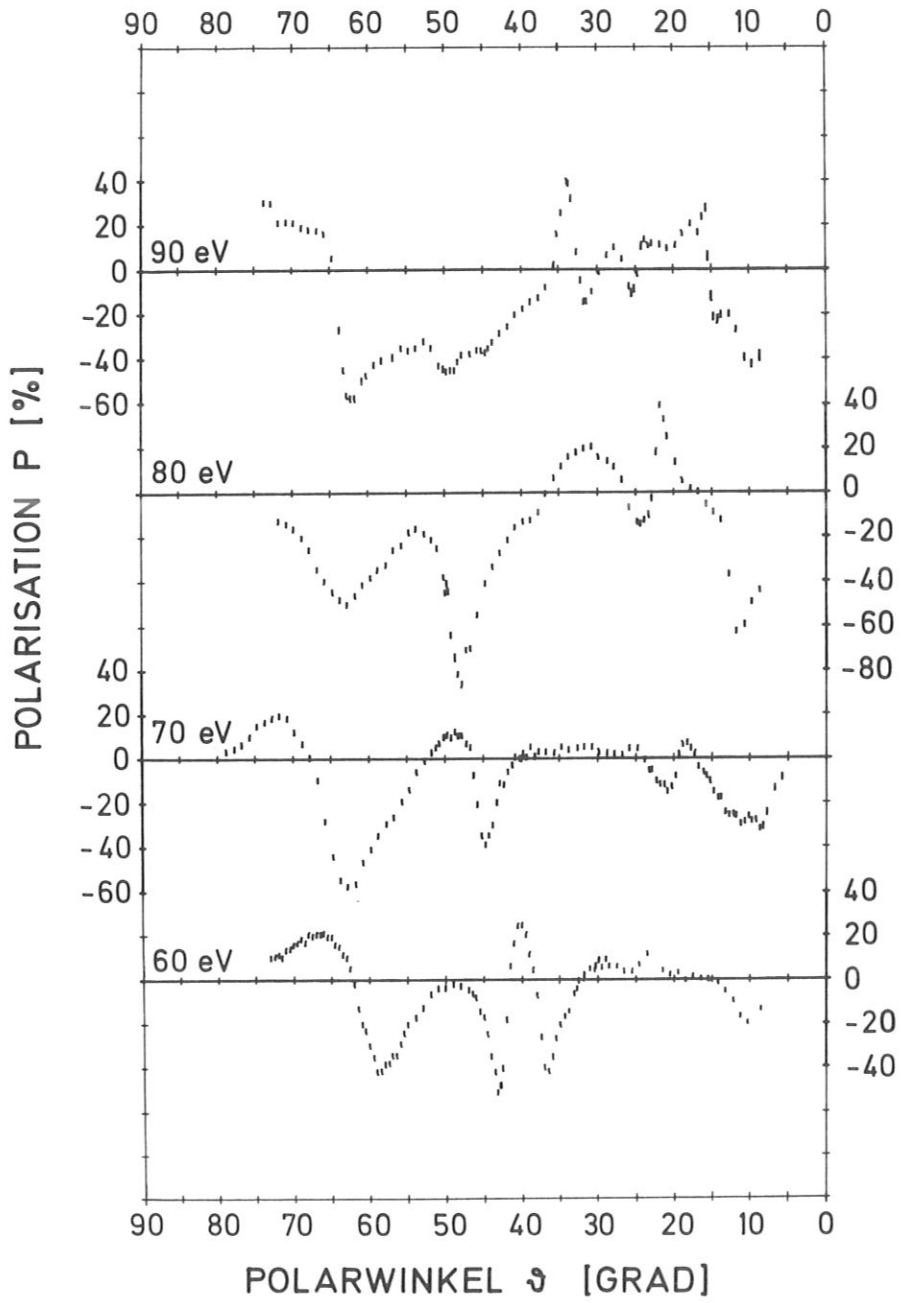


Bild 4.3: Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P_n(\vartheta)$ des Spiegelstrahls bei konstantem Azimut $\varphi = 19^\circ$ und Energien $E = 60$ eV bis 90 eV.

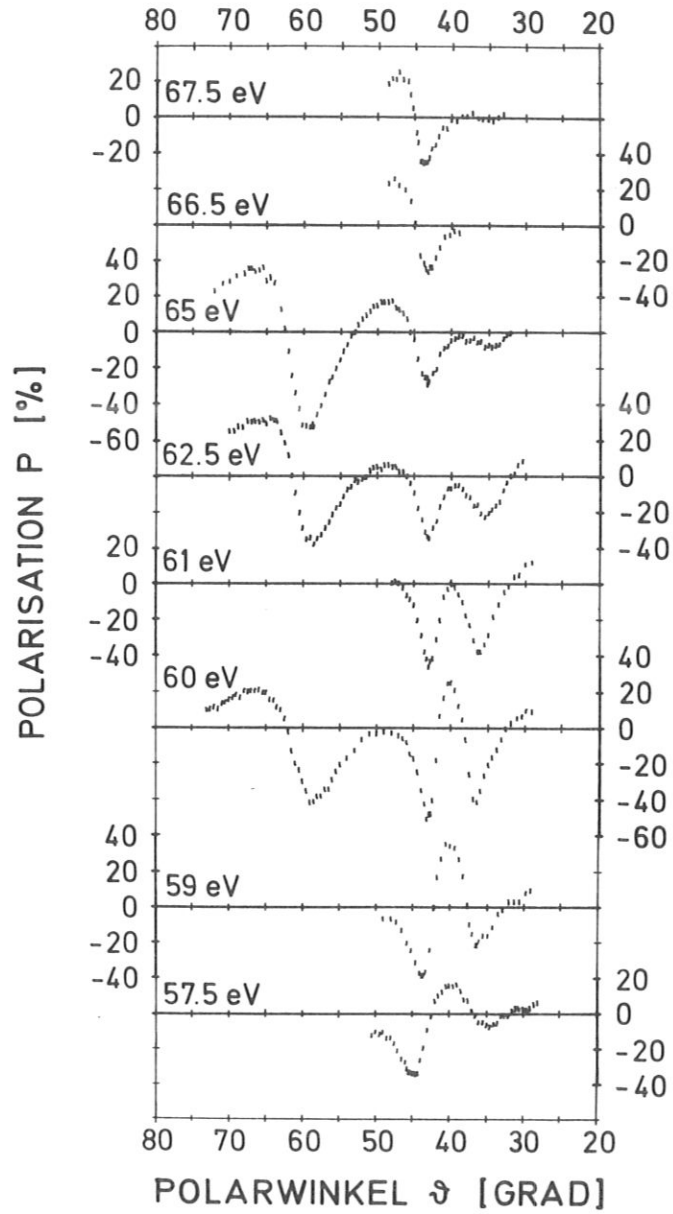


Bild 4.4: Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P_n(\theta)$ des Spiegelstrahls bei konstantem Azimut $\varphi = 19^\circ$ und Energien $E = 57,5$ eV bis $67,5$ eV.

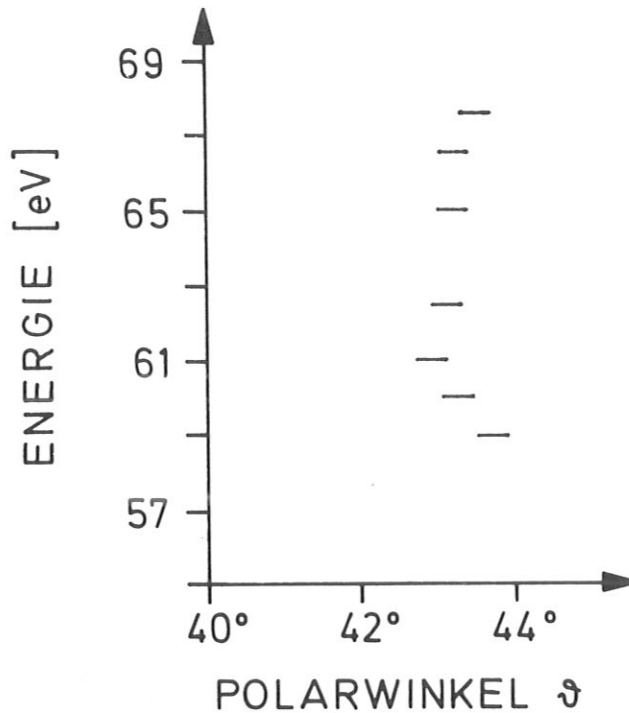


Bild 4.5: Winkellage des Polarisationsminimums aus Bild 4.4 bei Variation der Beugungsenergie. Die Fehlerbalken geben die Unsicherheit in der Bestimmung der charakteristischen Winkel ϑ an.

Bei der Bestimmung der Gitterrichtung, die der Elektronenstrahlrichtung entspricht, ist zu berücksichtigen, daß sich durch Brechung der Elektronen an der Oberflächenbarriere - ihre Höhe ist durch den Wert des inneren Potentials $V_{o,r}$ gegeben - der Einschuß-(Ausfalls-)winkel ändert:

$$4.2) \quad \sin \vartheta' = \sqrt{\frac{E}{E+V_{o,r}}} \cdot \sin \vartheta \quad V_{o,r} = 12 \text{ eV} \dots \text{inneres Potential}$$

Daraus ergibt sich $\vartheta' = 38,5^\circ$. Die [230]-Richtung ist durch $\vartheta = 36,0^\circ$ und $\varphi = 18,5^\circ$ charakterisiert. Diese Werte entsprechen etwa den Werten $\vartheta' = 38,5^\circ$ und $\varphi = 19^\circ$, die angegebene Interpretation ist dadurch bestätigt.

Das Polarisationsminimum bei $\vartheta = 36^\circ$ ist in seiner Charakteristik von der eben beschriebenen Polarisationsstruktur gänzlich verschieden: Es tritt nur in einem Energieintervall von etwa 3 eV auf, während das Minimum bei $\vartheta = 43^\circ$ in einem Energieintervall von etwa 8 eV existiert. Zudem zeigt das Minimum bei $\vartheta = 36^\circ$ eine Variation in der Winkellage um $\Delta\vartheta = 0.5^\circ$ bei Variation der Energie um $\Delta E = 1$ eV. Da das Minimum aber nur in einem so kleinen Energiebereich existiert, erscheint eine systematische Untersuchung der Dispersion $E(k_{0\parallel})$ nicht sinnvoll möglich. Zusätzlich reagiert dieses Extremum empfindlich auf Gasbelegung der Kristalloberfläche. Daraus kann man schließen, daß die Ursache dieser Polarisationsstruktur kein Volumeneffekt wie der oben beschriebene ist, eine mögliche Ursache kann zum Beispiel eine Oberflächenbarrierenresonanz sein.

In Bild 4.6 sind Ergebnisse der polarwinkelabhängigen Messungen für $\varphi = 0^\circ$ dargestellt. Die in diesem Bild gezeigte Meßserie zeigt, wie ein breites, hohes Polarisationsmaximum bei Erhöhen der Elektronenenergie verschwindet und ein scharfes Minimum auftritt; die Winkellage dieses Minimums ändert sich mit der Energie signifikant.

Zur Klärung der Ursache des Polarisationsminimums in Bild 4.6 liegt es nahe, die Dispersion $E(k_{0\parallel})$ zu untersuchen (siehe Bild 4.7). Man erkennt aus der Dispersion, daß für diese $P(\vartheta)$ -Struktur die Parallelkomponente des Impulses $k_{0\parallel}$ innerhalb der Meßgenauigkeit konstant ist. Diese Dispersion kann nicht einer Strahlaustrittsschwelle (McRae 1979)

$$4.3) \quad k_0^2 - (k_{0\parallel} + g_{\mu\nu})^2 = 0$$

zugeordnet werden, da sowohl $k_{0\parallel}$ als auch $g_{\mu\nu}$ konstant sind, k_0 aber mit der Energie wächst. Eine Erklärung für das Auftreten dieser Dispersion konnte bislang nicht ge-

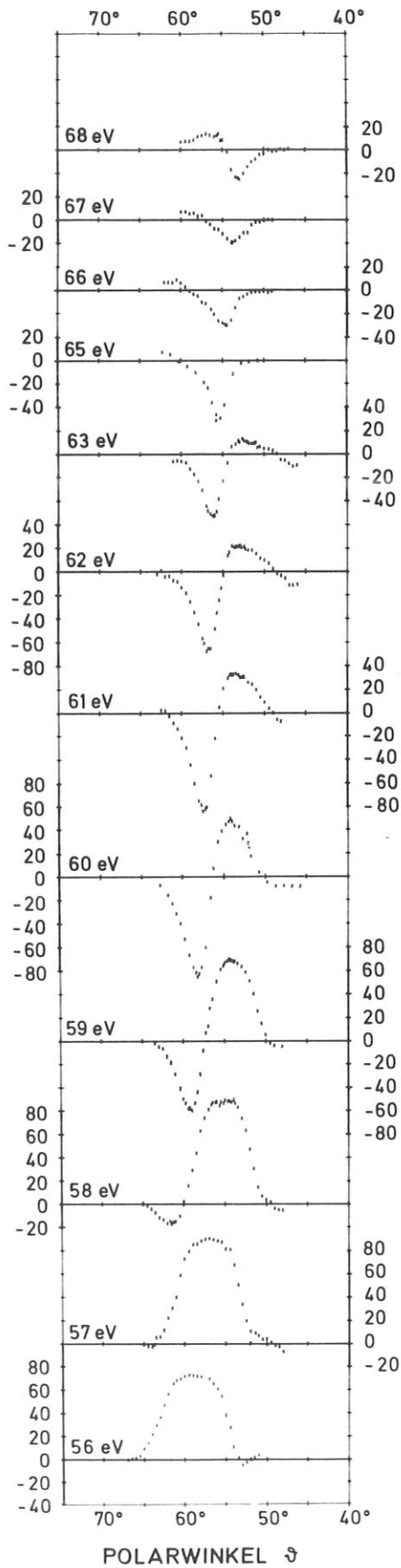


Bild 4.6:

Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P(\theta)$ des Spiegelstrahls, gemessen für konstanten Azimut $\varphi=0^\circ$ und Energien im Bereich von 56 eV bis 68 eV.

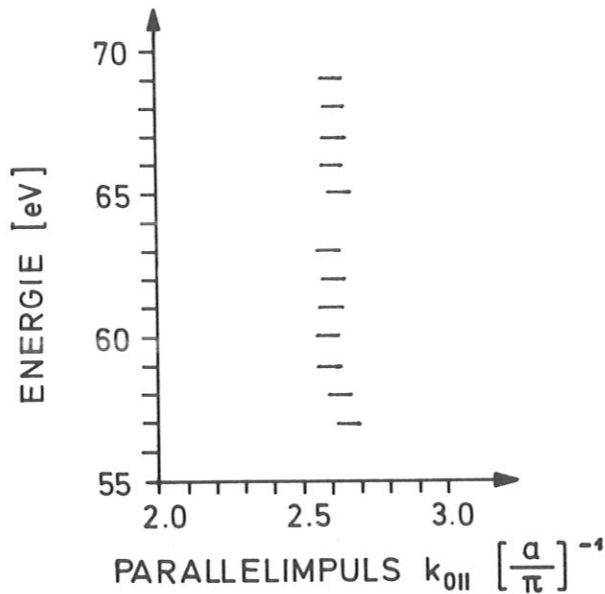


Bild 4.7: Dispersion $E(k_{0||})$ für das Polarisationsminimum aus Bild 4.6. Die Fehlerbalken geben die Unsicherheit im Wert des Parallelimpulses an, die aus der Ungenauigkeit der Polarwinkelmessung folgt.

funden werden; auch bei Polarisationsmessungen an einer Au(110)-Oberfläche im Spiegelstrahl sind Polarisationsstrukturen mit $k_{0||} = \text{konst.}$ gefunden worden [Müller 1980].

In Bild 4.8 sind Polarisationsmessungen im gleichen Winkelbereich wie in Bild 4.6 für Energien von 68 eV bis 80 eV dargestellt. In diesem Energiebereich wird eine Polarisationsstruktur durchlaufen, die bei etwa 70 eV - 71 eV symmetrisch bezüglich $P = 0$ ist, ober- und unterhalb dieser Energien aber in ein negatives Extremum der Polarisation

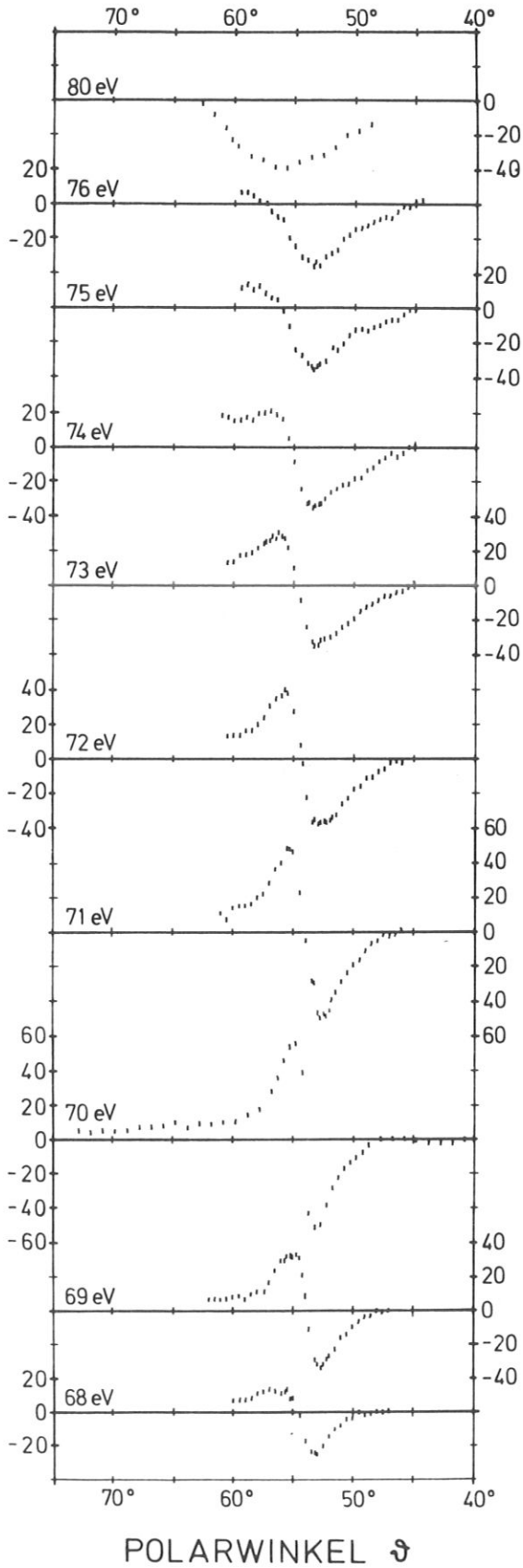


Bild 4.8:

Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P(\theta)$ des Spiegelstrahls bei LEED an Pt(111), gemessen für konstanten Azimut $\phi = 0^\circ$ und Energien E im Bereich von 68 eV bis 80 eV.

übergeht. In diesem Minimum ist der Polarisationsgrad zwar nicht sehr groß, das Extremum tritt aber in einem sehr großen Energiebereich ($E = 67 \text{ eV} - 78 \text{ eV}$) auf. Seine Winkellage ist im Energiebereich von 68 eV bis 76 eV konstant und beträgt $52,9 \pm 0,4^\circ$ (vgl. Bild 4.9). Das Auftreten dieses Polarisationsminimums kann wieder auf eine Korrelation mit einer Kristallrichtung zurückgeführt werden. Die $[33\bar{1}]$ -Richtung des Kristalls entspricht mit $\vartheta = 48,5^\circ$ und $\varphi = 0^\circ$ sehr gut den Werten $\vartheta' = 47,8^\circ$ (nach Gleichung 5.2) und $\varphi = 0^\circ$ des Polarisationsminimums.

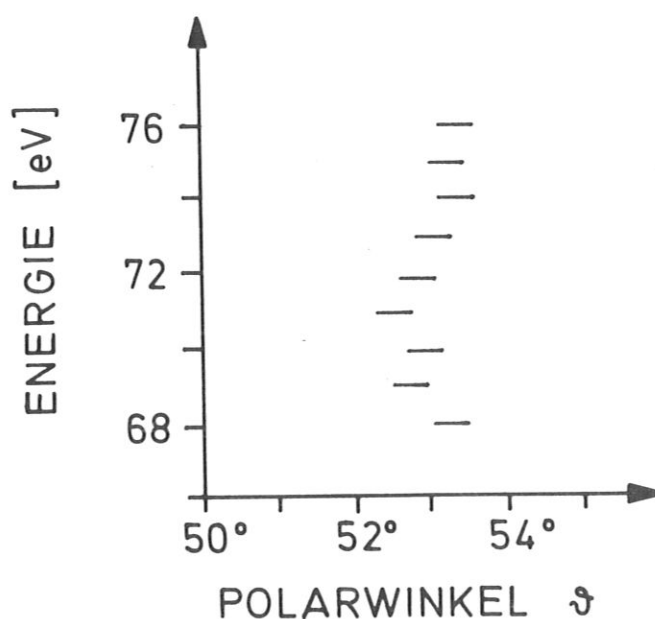


Bild 4.9: Winkellage des Polarisationsminimums aus Bild 4.8 für verschiedene Beugungsenergien. Die Fehlerbalken geben die Unsicherheit in der Bestimmung der charakteristischen Winkel ϑ an.

An den in diesem Abschnitt besprochenen polarwinkelabhängigen Meßkurven $P(\vartheta)$ erkennt man, daß eine wesentliche Eigenschaft von Polarisationsstrukturen das Verhalten ihrer Winkellage bei Variation der Energie ist. Bei einem Teil der untersuchten Polarisationseffekte ändert sich die Winkellage mit der Energie nicht (Bild 4.5 und Bild 4.9), diese Polarisationsstrukturen können dann auftreten, wenn die Einschuß- oder Ausfallsrichtung der Elektronen mit gewissen kristallographischen Richtungen zusammenfällt. Für das in Bild 4.6 gezeigte Polarisationsminimum verschiebt sich die Winkellage mit der Energie systematisch. Aus der Analyse der Dispersion $E(\underline{k}_{O\parallel})$ ergibt sich, daß der Impuls $\underline{k}_{O\parallel}$ parallel zur Oberfläche konstant ist (Bild 4.7). Dieses Verhalten läßt sich nicht im Rahmen einer zweidimensionalen Bandstruktur verstehen; eine resonante Anregung eines Oberflächenzustandes ist als Ursache nicht möglich.

Diese Ergebnisse geben einen Ansatzpunkt für das Verständnis; um die Polarisationseffekte bei der Elektronenbeugung tiefergehend zu verstehen, sind weiterführende systematische Untersuchungen von $P(\vartheta)$ -Profilen notwendig.

4.2 Rotationsdiagramme

Wenn das kinematische Modell das Verhalten der Polarisation bei Variation des Azimutwinkels richtig beschreiben würde, wäre die Messung von Rotationsdiagrammen sinnlos, da in der Näherung dieses Modells die Polarisation des (00)-Strahls azimutunabhängig ist. Die Polarisation verhält sich jedoch anders; es ist schwierig, Beugungsbedingungen für ϑ und E zu finden, für die eine Variation des Azimuts keinen starken Einfluß hat. $E = 70$ eV und $\vartheta = 11^\circ$ sind Parameter, für die die Polarisation nur schwach vom Azimut abhängt (siehe Bild 4.10), die Polarisation nimmt Werte von -20 % bis -30 % an. Im Gegensatz dazu liegt nach Feder 1977b der Wert der Polarisation in der Elektron-Atom-Streuung für $\theta = 160^\circ$ ($\vartheta = 10^\circ$), und $E = 80$ eV (Energieverschiebung durch Berücksichtigung des inneren Potentials) bei -5 % bis -10 %. Dieser Wert ist im Betrag signifikant kleiner als die bei der Beugung gemessene Polarisation. Man kann daher nicht einmal dieses Rotationsdiagramm als Hinweis dafür nehmen, daß das kinematische Modell noch begrenzte Gültigkeit hat.

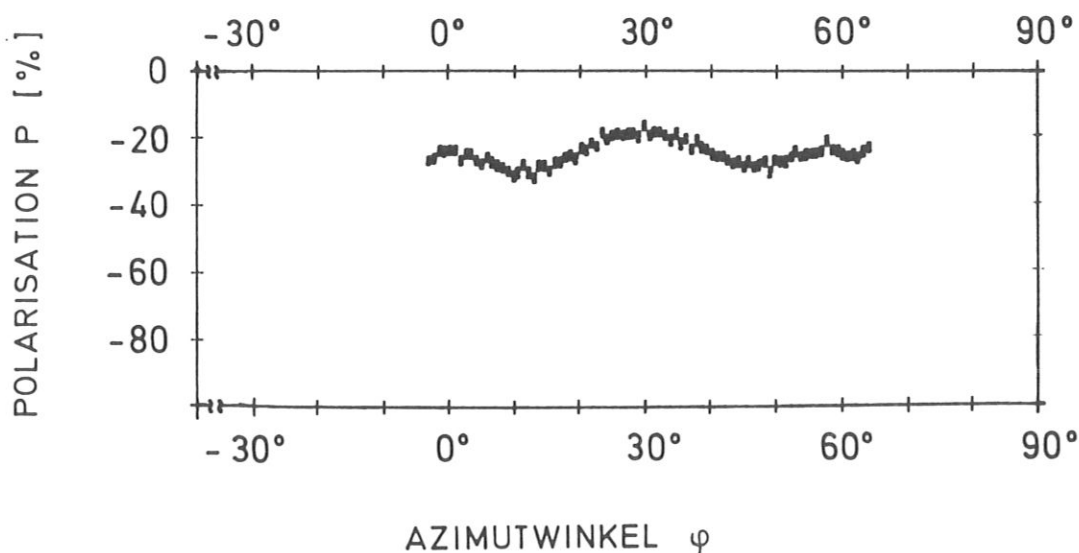


Bild 4.10: Azimutabhängiges Polarisationsprofil $P_n(\varphi)$ (Rotationsdiagramm) bei LEED an Pt(111) für Beugungsenergie $E = 70$ eV und Polarwinkel $\vartheta = 11^\circ$.

Wie schon angedeutet, reagiert aber die Polarisation im allgemeinen genau so empfindlich auf Variation des Azimuts wie auf Änderungen des Polarwinkels oder der Energie. Da die Rotationsdiagramme aber ein Abbild der Kristallsymmetrie sind, sind Rotationsdiagramme übersichtlicher als $P(\varphi)$ -Profile. Für die (111)-Fläche des fcc-Gitters erwartet man (nach Abschnitt 2.3.4) dreizählige Symmetrie.

Das Verhalten der Polarisationskomponenten P_n und $P_{||}$ bei Variation des Azimutwinkels folgt aus dem Verhalten von P_n und $P_{||}$ bei räumlicher Spiegelung (siehe Abschnitt 2.3.3):

Die Komponente P_n senkrecht zur Streuebene ist invariant gegenüber Spiegelung des Streuprozesses an einer Spiegelebene, $P_n(\varphi)$ ist daher symmetrisch bezüglich der Spiegelebenen (charakterisiert durch φ_0)

$$4.4) \quad P_n(\varphi - \varphi_0) = P_n(\varphi + \varphi_0)$$

Für $\varphi = \varphi_0$ nimmt P_n ein Extremum an.

Die Komponenten des Polarisationsvektors parallel zur Streuebene $P_{||}$ wechseln bei räumlicher Spiegelung das Vorzeichen, $P_{||}(\varphi)$ ist daher antisymmetrisch bezüglich der Spiegelebenen (φ_0):

$$4.5) \quad P_{||}(\varphi - \varphi_0) = -P_{||}(\varphi + \varphi_0)$$

Als Folge des Reziprozitätstheorems ändern sich Intensität und Polarisationsgrad bei Umkehrung des Strahllaufs nicht (siehe Abschnitt 2.3.4, Gleichungen 3.64 und 2.67 und Feder 1980b).

Dadurch haben die Intensität und der Polarisationsgrad bei Beugung an einem dreizähligen Kristall sechszählige Symmetrie, denn die Umkehrung des Strahllaufs ist einer Drehung des Kristalls um 180° äquivalent (siehe Bild 4.11).

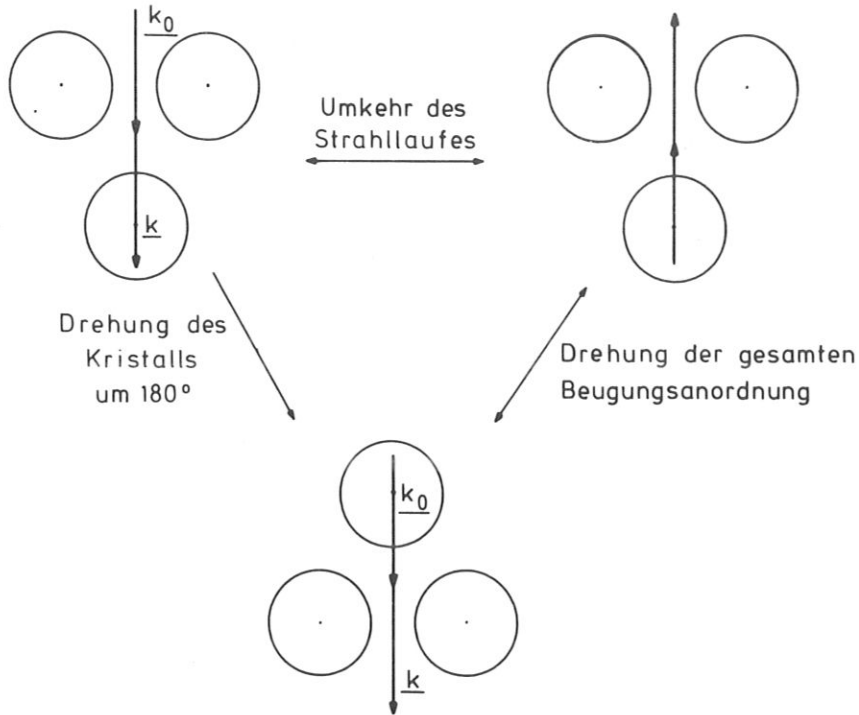


Bild 4.11: Äquivalenz der Umkehrung des Strahllaufes und der Drehung des Kristalls um 180° (für den Spiegelstrahl)

In Bild 4.12 sind Rotationsdiagramme für $E = 60 \text{ eV}$ und $\vartheta = 62^\circ$ und $\vartheta = 59^\circ$ gezeigt.

In der Kurve für $\vartheta = 62^\circ$ sind die Daten von zwei Meßdurchgängen eingetragen, die im Azimut gegeneinander versetzt gemessen wurden. Zwischen beiden Meßdurchgängen sind innerhalb der Zählstatistik keine Abweichungen feststellbar. Dieses Rotationsdiagramm zeigt Spiegelsymmetrie bezüglich $\varphi = 0^\circ$ und $\varphi = 60^\circ$, die Sechszähligkeit scheint dadurch gebrochen zu sein, daß die Maxima bei $\varphi = 50^\circ$ und 70° um etwa 3 % niedriger sind als die entsprechenden Maxima bei $\varphi = -10^\circ$ und $+10^\circ$. Dieser Effekt liegt allerdings nur geringfügig über der Meßunsicherheit von 1 %.

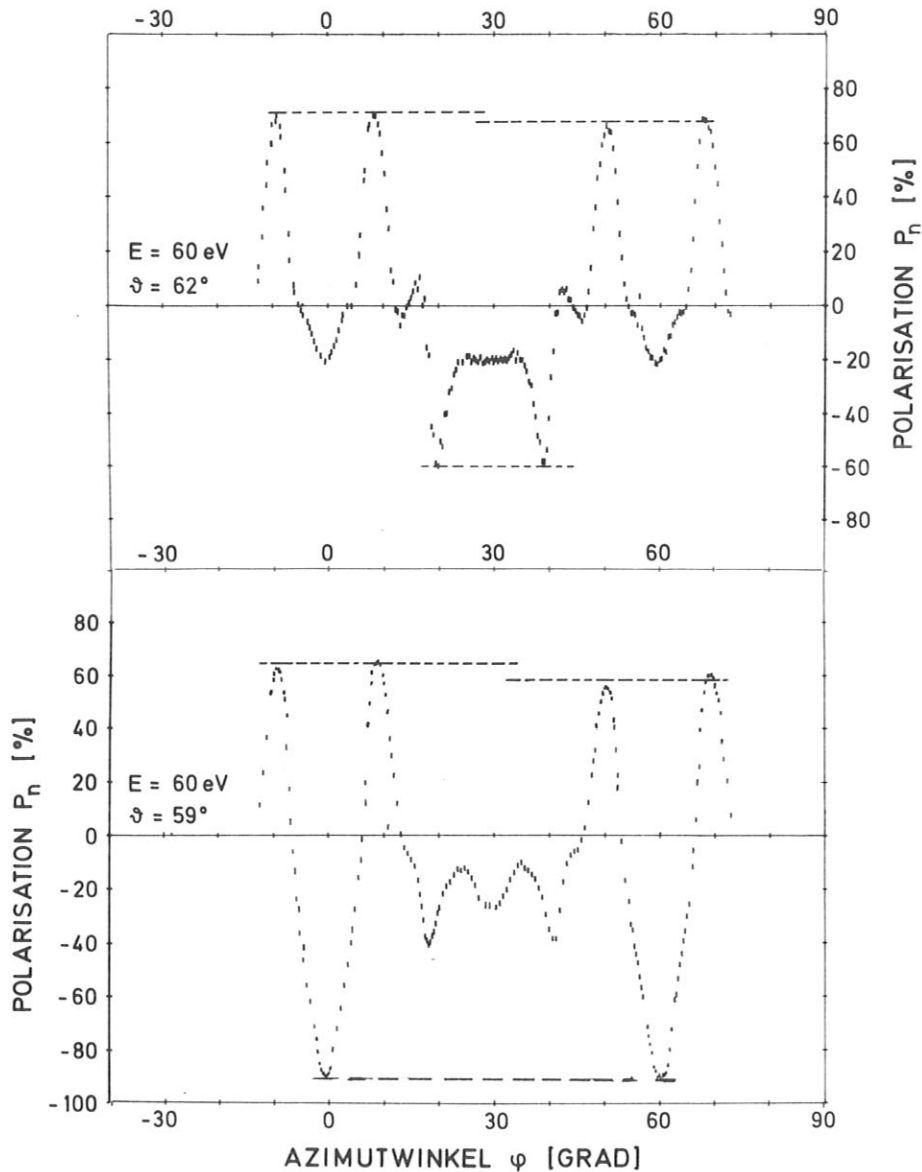


Bild 4.12: Rotationsdiagramme $P_n(\varphi)$ bei Energie $E = 60 \text{ eV}$ und Polarwinkel $\vartheta = 59^\circ$ und $\vartheta = 62^\circ$.

Die Polarisationsminima bei $\varphi = 0^\circ$ und 60° sollten exakt gleich tief sein, da hier $\underline{P} = P \cdot \underline{n} = \underline{P}_n$ gilt ($\underline{n} = \underline{e}_{\underline{k}_0 \times \underline{k}}$) und $|\underline{P}|$ sechszählige Symmetrie besitzt. Tatsächlich ist in beiden Minima die Polarisation gleich, obwohl das polarwinkelabhängige Polarisationsprofil $P(\vartheta)$ bei $\vartheta = 62^\circ$ die steile Flanke einer ausgeprägten Minimum-Maximumstruktur durchläuft. Bei einer Variation von ϑ um

$\Delta \vartheta = 0,2^\circ$ würde sich die Polarisation um $\pm 5\%$ ändern. Die Genauigkeit der Ausrichtung der (111)-Fläche des Kristalls zur azimutalen Drehachse ist also so gut, daß die Kristallfläche bei einer Drehung um $\Delta \vartheta = 60^\circ$ um weniger als $0,1^\circ$ gekippt wird. Das ist eine Bestätigung der in Abschnitt 3.3.2 angegebenen Genauigkeit bei der Kristallpräparation und der Kristallmontage.

Das Rotationsdiagramm für $\vartheta = 59^\circ$ in Bild 4.12 ist für den Polarwinkel aufgenommen worden, bei dem für $\vartheta = 0^\circ$ P_n ein scharfes Polarisationsminimum mit $P = -90\%$ annimmt. Wie in Bild 4.12 ersichtlich ist, ist auch dieses Minimum für $\vartheta = 0^\circ$ und 60° gleich tief. Allerdings existieren Abweichungen von der zu erwartenden Spiegelsymmetrie bezüglich $\vartheta = 0^\circ$ und 60° in den Polarisationsmaxima bei $\vartheta = -10^\circ$ und $\vartheta = +10^\circ$, ebenso bei $\vartheta = 50^\circ$ und $\vartheta = 70^\circ$. Diese Asymmetrie wurde in mehreren unabhängigen Messungen gefunden. Solche Abweichungen von der Sollsymmetrie treten auch für Messungen von Rotationsdiagrammen für die Komponente P_k parallel zum auslaufenden Strahl auf. Bild 4.13 zeigt ein Rotationsdiagramm für P_k bei $E = 60$ eV

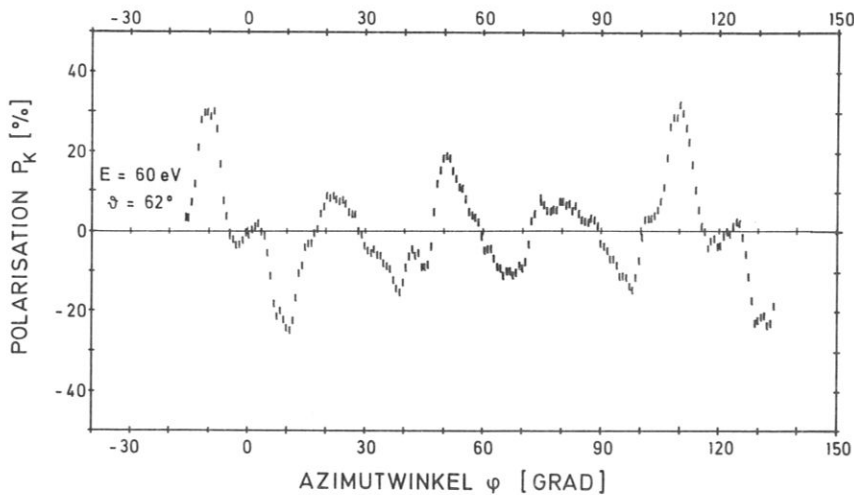


Bild 4.13: Rotationsdiagramm der Polarisationskomponente P_k , gemessen bei $E = 60$ eV und $\vartheta = 62^\circ$.

und $\vartheta = 62^\circ$. P_k weist Polarisationswerte bis zu 30 % auf und ist stark strukturiert. Bei $\varphi = 0^\circ, 60^\circ$ und 120° besitzt P_k die von der Symmetrie geforderten Nulldurchgänge, zusätzlich in der Nähe von $\varphi = 30^\circ$ und $\varphi = 90^\circ$. Die Antisymmetrie von P_k bezüglich der Spiegelebenen ist allerdings nicht erfüllt, die Abweichungen ($\Delta P = 10\%$) sind signifikant. Da aber die Messung dreizählige Symmetrie zeigt, kann man die Abweichungen nicht als Folge von etwaigen Defekten der Kristalloberfläche erklären. Störungen der Antisymmetrie infolge Unregelmäßigkeiten und Störungen der Oberfläche würden nämlich bei einer Rotation des Kristalls um 120° eher in der anderen Richtung auftreten und daher die dreizählige Symmetrie stören. Als apparative Ursachen für die Abweichung von der Sollsymmetrie kommen eine nicht exakte Justierung des LEED-Systems (Rotationsachse der Elektronenkanone gegenüber der polaren Drehachse des Kristalls) und Restmagnetfelder in Frage. Bei Messung der Rotationsdiagramme in der raumgespiegelten Beugungsgeometrie bleibt der Einfluß des Magnetfeldes gleich, während sich der Einfluß der Beugungsgeometrie umdreht. Da in Experimenten in der gespiegelten Geometrie (vgl. Abschnitt 4.1.1) die Asymmetrien in der gleichen Richtung auftreten, ist die Abweichung von der Sollsymmetrie als Folge von Streumagnetfeldern zu deuten.

Bild 4.14 zeigt Rotationsdiagramme für die Normalkomponente $P_n(\varphi)$ und die Parallelkomponente $P_k(\varphi)$. Die Beugungsbedingungen sind $E = 80$ eV und $\theta = 47^\circ$. Beide $P(\varphi)$ -Kurven wurden in der raumgespiegelten Beugungsgeometrie gemessen. Sie besitzen die dreizählige Symmetrie des Kristalls und die erwartete Symmetrie bzw. Antisymmetrie bezüglich der Spiegelebenen. Die Abweichung von der Sechszähligkeit ist im $P_n(\varphi)$ -Diagramm klar zu erkennen: die Minima bei $\varphi = 42^\circ, \varphi = 78^\circ$ und $\varphi = 162^\circ$ sind weniger tief als die Minima bei $\varphi = 102^\circ$ und $\varphi = 138^\circ$. Im $P_k(\varphi)$ -Diagramm ist die Dreizähligkeit noch auffallender: diese Polarisationskomponente besitzt bei $\varphi = 42^\circ, \varphi = 78^\circ$ und $\varphi = 162^\circ$ ebenfalls Extrema, bei $\varphi = 102^\circ$ und $\varphi = 138^\circ$ jedoch

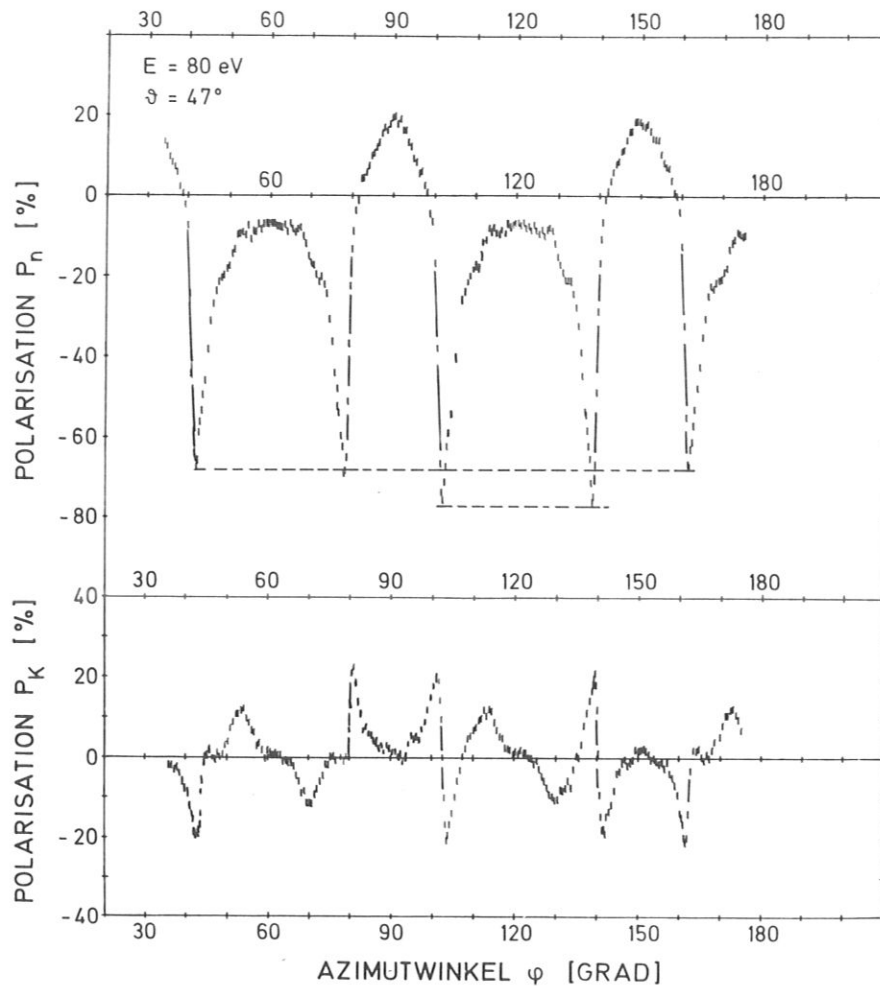


Bild 4.14: Rotationsdiagramme für $P_n(\varphi)$ und $P_k(\varphi)$ für die Polarisationskomponenten P_n und P_k , gemessen für Beugungsenergie $E = 80 \text{ eV}$ und Polarwinkel $\vartheta = 47^\circ$.

Minimum-Maximum-Strukturen mit scharfen Nulldurchgängen. Die Nulldurchgänge dieser Doppelpeakstrukturen liegen genau bei den Azimutwinkeln, für die die P_n -Komponente das tiefere Minimum durchläuft, die dem Betrag nach kleineren Polarisationswerte der $P_n(\varphi)$ -Kurve sind mit Extremwerten des $P_k(\varphi)$ -Diagramms gekoppelt. Dieses Verhalten ist konsistent mit der Forderung, daß $|\underline{P}| = \sqrt{P_n^2 + P_k^2 + P_e^2}$ sechszählige Symmetrie besitzt (P_e ist die zweite in der Streuebene liegende Komponente mit $\underline{e} = \frac{1}{k} \cdot \underline{n} \times \underline{k}$). Weitere Rotationsdiagramme für P_n und P_k werden in Kap. 5.3 zum Vergleich des Experiments mit Rechnungen gezeigt.

Die in diesem Abschnitt beschriebenen Rotationsdiagramme enthalten vielfältige Information:

- Das kinematische Modell ist keine geeignete Beschreibung der Elektronenbeugung
- Die Messung der Normalkomponente P_n liefert nicht die vollständige Information über die Polarisierungseffekte. Für die longitudinale Polarisationskomponente - sie wurde in dieser Arbeit erstmals einem Beugungsexperiment untersucht - wurden Werte bis zu $P_k = 30\%$ gefunden.
- Bei Spiegelung des Experiments an Symmetrieebenen des Kristalls verhält sich die Normalkomponente des Polarisationsvektors symmetrisch, die Parallelkomponenten verhalten sich antisymmetrisch.
- Bei Umkehrung des Strahllaufes im Experiment (Zeitumkehr) gehen die Komponenten des Polarisationsvektors nicht in sich selbst über.
- Die Symmetrie der Rotationsdiagramme von Polarisationskomponenten gibt daher die dreizählige Symmetrie der Kristalloberfläche wieder, während sich für Rotationsdiagramme der Intensität infolge der Gültigkeit des Reziprozitätstheorems die Symmetrie zur Sechszähligkeit erhöht.
- Polarisierungseffekte können mit sehr hoher Genauigkeit analysiert werden. Hierfür sind sowohl die Genauigkeit der Kristallorientierung und die Präzision des Kristallmanipulators als auch die Zuverlässigkeit des Polarisationsanalysators wesentlich.

5. VERGLEICH EXPERIMENT - THEORIE ¹⁾

Dieser Vergleich der Messungen mit Rechnungen wurde durch die Zusammenarbeit mit Herrn Professor Dr. Roland Feder (Universität Duisburg) ermöglicht. Von ihm stammen alle hier gezeigten berechneten Daten. Seinen Rechnungen liegt folgendes theoretisches Modell zugrunde:

5.1 Theoretisches Modell -----

Der Beugungsprozeß wird in einer Einteilchen-Näherung behandelt. Für das Kristallpotential wird das Muffin-tin Modell verwendet: die Ionen des Kristallgitters werden bis zu dem Radius, der durch den halben Abstand nächster Nachbarn gegeben ist, durch ein kugelsymmetrisches Potential $V(r)$ beschrieben. Dadurch ist gewährleistet, daß die Potentiale verschiedener Ionen nicht überlappen. Im Raum zwischen diesen kugelsymmetrischen Potentialen wird ein konstantes Potential $V_{o,r}$ angesetzt.

An der Oberfläche wird für den Übergang vom Volumenwert des inneren Potentials $V_{o,r}$ zum Vakuumniveau eine eindimensionale, glatte Oberflächenbarriere - sie hängt nur von der Richtung senkrecht zur Oberfläche ab - angenommen. Die an dieser Barriere reflektierten Elektronen werden nur dem Spiegelstrahl überlagert. Eine realistische Barrierenform würde eine mit der Periodizität der Oberfläche gekoppelte Ortsabhängigkeit besitzen und daher auch den Nebenstrahlen Reflexionsanteile überlagern. Allerdings kann man annehmen, daß für eine dicht gepackte Fläche die Näherung einer eindimensionalen Oberflächenbarriere hinreichend gut ist [Smoluchowski, 1941].

¹⁾ Die wesentlichen Ergebnisse dieses Vergleichs von Experiment und Theorie wurden bereits publiziert (Bauer et al. 1980a und Bauer et al. 1980b).

Für das effektive Streupotential $V(r)$ der Ionenrümpfe wurden zwei verschiedene Potentiale verwendet:

- 1) ein Bandstrukturpotential V_B , das eine energieunabhängige Austausch-Wechselwirkung enthält, und
- 2) ein Potential V_{ex} , das aus selbstkonsistenten Ladungsdichten konstruiert wurde und eine energieabhängige Austauschwechselwirkung berücksichtigt (nach Slater, Wilson, Wood 1969).

Entsprechend der Stärke der Austausch-Wechselwirkung wird das effektiv wirksame Streupotential variiert. Die inelastische Wechselwirkung der Elektronen durch Anregung von Elektron-Loch-Paaren und Plasmonen wird pauschal durch Einführen eines komplexen inneren Potentials $V_{o,i}$ berücksichtigt. Der Imaginärteil des komplexen Potentials beschreibt eine endliche Lebensdauer der Elektronen:

$$5.1) \psi(\underline{r}, t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} \cdot e^{iEt/\hbar} = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} \cdot e^{iEt/\hbar} \cdot e^{-|V_{o,i}| \cdot t/\hbar}$$

Der Wert von $V_{o,i}$ läßt sich aus der Minimalbreite von Intensitätsstrukturen in Abhängigkeit von der Energie (ΔE) abschätzen (Pendry 1974, Demuth et al. 1975): Die Wahrscheinlichkeit, daß das Elektron nach der Zeit t noch nicht inelastisch gestreut wurde, ist

$$5.2) W_e = e^{-2|V_{o,i}| \cdot t/\hbar} =: e^{-t/\tau}$$

Über die Unschärferelation kann man aus

$$\Delta E \cdot \tau = \Delta E \cdot \frac{\hbar}{2|V_{o,i}|} \approx \hbar$$

abschätzen. Das ergibt für Elektronenenergien bei LEED ($30 \text{ eV} \leq E \leq 100 \text{ eV}$)

$$5.3) V_{oi} \approx 4 \text{ eV} - 5 \text{ eV}$$

Das einfallende Elektron wird durch eine ebene Welle beschrieben, das Streuproblem selbst wird in drei Schritten gelöst:

- 1) Für das effektive Streupotential eines Kristallions werden durch Lösen der Dirac -Gleichung die spinabhängigen Streuphasen bestimmt.
- 2) Aus diesen Streuphasen wird die Vielfachstreuung innerhalb einer Atomlage parallel zur Oberfläche berechnet (Intra-layer multiple scattering).
- 3) Aus den Beiträgen der einzelnen Atomlagen wird schließlich die Vielfachstreuung im gesamten Kristall (Inter-layer multiple scattering) zusammengesetzt. Wegen der begrenzten Reichweite (Lebensdauer) der Elektronen müssen nur etwa 8 Lagen berücksichtigt werden.

Zu Einzelheiten der Rechnung siehe Feder 1980a.

Die Modellannahmen der Rechnung betreffen:

- 1) die Gitterstruktur des Kristalls
- 2) das Muffin-tin Streupotential, insbesondere die in ihm enthaltene Austausch-Wechselwirkung
- 3) den Realteil des inneren Potentials $V_{o,r}$
- 4) den Imaginärteil des inneren Potentials $V_{o,i}$
- 5) den Abstand der obersten beiden Atomlagen (Oberflächenkontraktion oder -dilatation)
- 6) die Form und die Lage der Oberflächenbarriere.

Infolge der genauen Kenntnis der Geometrie der Pt(111)-Oberfläche muß Punkt 5 nur geringfügig variiert werden. Rechnungen für 1 % Dilatation und Kontraktion zeigen Effekte, die im Vergleich zu den Einflüssen der anderen Annahmen vernachlässigt werden können.

Zur Bestimmung des Einflusses der Potentiale $V(r)$, $V_{o,r}$, $V_{o,i}$ und der Oberflächenbarriere ist das folgende Vorgehen am besten geeignet:

5.2 Vorgangsweise

Im ersten Schritt werden für verschiedene Nebenstrahlen gemessene und berechnete energieabhängige Polarisationsprofile $P(E)$ für senkrechten Einfall bzw. Ausfall (siehe Abschnitt 4.3.1) verglichen. Für diesen Fall hat nämlich die Barrierenform - abgesehen von möglichen Oberflächenresonanzen - keinen Einfluß auf das Ergebnis, Veränderung von $V_{o,r}$ verschiebt die Kurve lediglich auf der Energieachse. Die Kurvenform hängt nur von der Wahl des Streupotentials $V(r)$ (im wesentlichen von der Austauschapproximation) ab, Rechnungen für verschiedene Werte von $V_{o,i}$ zeigen nur geringen Einfluß auf die Polarisation.

Die Aussagen des Vergleichs der $P(E)$ -Kurven bezüglich $V(r)$ und V_o können an Hand von polarwinkelabhängigen Kurven für Nebenstrahlen überprüft werden. Dabei ist aber zu beachten, daß den Nebenstrahlen Reflexionsanteile der realen Oberflächenbarriere überlagert sein können, die die Rechnung nicht berücksichtigt; zusätzlich können Oberflächenresonanzen durch eine falsche Form der Barriere in der Rechnung unterdrückt oder verfälscht beschrieben werden.

Beim Vergleich der Polarisationsdaten des Spiegelstrahls werden nun V_o und $V(r)$ konstant gehalten; durch Berücksichtigung oder Vernachlässigen des Reflexionsanteils der Oberflächenbarriere wird deren Einfluß untersucht.

5.3 Vergleich der Polarisationsdaten

5.3.1 Energieabhängigkeit in den Nebenstrahlen

Die $P(E)$ -Daten wurden für senkrechten Einfall ($\vartheta_0 = 0$) berechnet, gemessen wurden die $P(E)$ -Kurven für senkrechten Ausfall ($\vartheta = 0$, vgl. Bild 4.1). Dabei wurde die Invarianz der Polarisation gegen Umkehrung des Strahllaufs bei Messung in Spiegelebenen des Kristalls verwendet. Da diese Messungen sehr empfindlich auf Fehljustierungen sind, wäre eine Messung für senkrechten Einfall, bei der sowohl der Kristallwinkel als auch die Kanone für jeden Energieschritt bewegt werden müssten, mit einer zu großen Unsicherheit behaftet, der Meßaufwand wäre dabei erheblich erhöht (Feder et al. 1977, Müller 1977a). Die Messungen wurden an den beiden nicht äquivalenten Nebenstrahlen des ersten Rings durchgeführt, wobei zur Überprüfung von Fehljustierungen für jeden der beiden Strahlen zwei äquivalente Repräsentanten unter verschiedenen Beugungsgeometrien analysiert wurden.

Nach der Messung am $(0\bar{1})$ -Strahl wurde der $(\bar{1}0)$ -Strahl in der raumgespiegelten Beugungsgeometrie (siehe Abschnitt 4.1.1) untersucht (siehe Bild 5.1). Analog wurden die $P(E)$ -Kurven für den (10) - und den (01) -Strahl gemessen (siehe Bild 5.2). Die Ergebnisse für äquivalente Strahlen erwiesen sich als jeweils deckungsgleich, apparative Störeffekte können daher weitgehend ausgeschlossen werden.

Die Rechnung für das Bandstrukturpotential wurde für zwei verschiedene Werte des imaginären Potentials ($V_{0,i} = 4$ eV und $V_{0,i} = 5$ eV) durchgeführt (vgl. Bild 5.1 und Bild 5.2). Die Auswirkungen auf die Polarisation sind gering, dies läßt sich folgendermaßen interpretieren: Bei Erhöhung des imaginären Potentials wird im wesentlichen die Reichweite

der Elektronen verringert. Da der Effekt für die Polarisierung klein ist, kann man daraus schließen, daß die Teilintensitäten der beiden Spinzustände im vorliegenden Fall annähernd gleichmäßig gedämpft werden.

Beim Vergleich der Ergebnisse für die beiden verwendeten Streupotentiale fällt auf, daß für den $(\bar{1}0)$ -Strahl in Bild 5.1 die Austausch-Wechselwirkung einen sehr starken Einfluß auf die berechnete Spinpolarisation hat, insbesondere in der Nähe von 60 eV. Für Energien über 70 eV zeigt das Potential mit dem energieabhängigen Austausch qualitativ bessere Übereinstimmung mit dem Experiment, für Energien unter 50 eV beschreiben beide Potentialtypen das Experiment gut. Das ist deshalb zu erwarten, weil die Austauschapproximation des Bandstrukturpotentials für kleine Elektronenenergien am besten stimmt. Entsprechend zeigt das Potential mit dem energieabhängigen Austausch für größere Energien bessere Übereinstimmung mit der Realität.

Die Rechnungen wurden für $V_{o,r} = 14$ eV durchgeführt. Der Vergleich mit dem Experiment ergab als korrekten Wert $V_{o,r} = 12$ eV.

Da für die (10) und (01)-Strahlen (Bild 5.2) sowohl die Messungen als auch die Rechnungen weniger stark strukturiert sind als für den $(\bar{1}0)$ -Strahl, eignen sich die (10) und (01)-Strahlen schlechter als Test für die Güte des Potentialmodells der Rechnung. Die Aussagen über das innere Potential bestätigen sich allerdings auch hier: der Realteil des inneren Potentials ergibt sich zu $V_{o,r} = 12$ eV, eine Änderung des Imaginärteils von $V_{o,i} = 4$ eV auf $V_{o,i} = 5$ eV hat wenig Einfluß auf die Polarisation. Alle folgenden Rechnungen wurden daher für $V_{o,r} = 12$ eV und $V_{o,i} = 4$ eV durchgeführt.

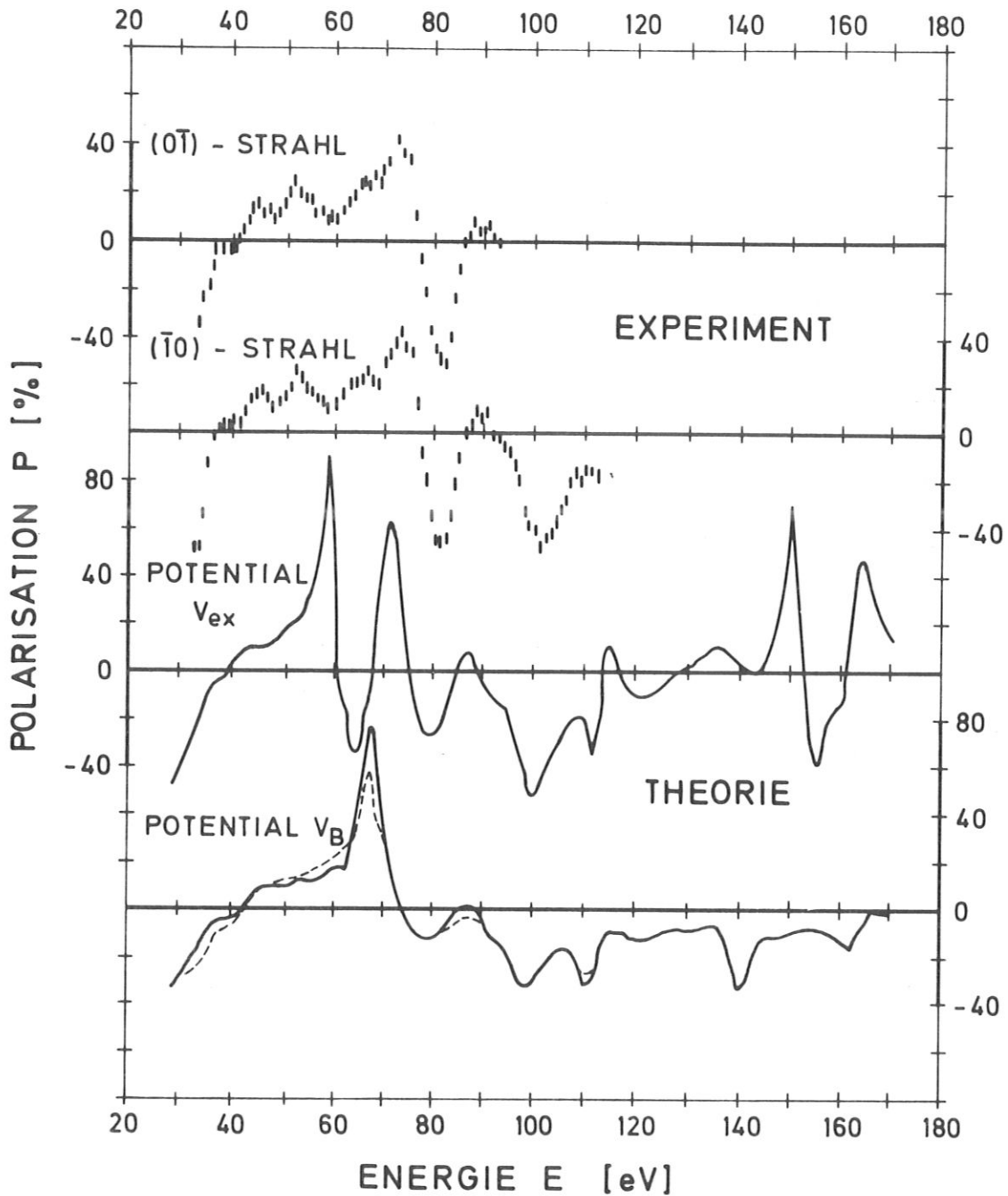


Bild 5.1: Energieabhängige Polarisationsprofile $P(E)$, gemessen im $(0\bar{1})$ und $(\bar{1}0)$ -Strahl. Rechnung unter Verwendung eines Streupotentials mit energieabhängigem Austausch (V_{ex}) und eines Bandstrukturpotentials (V_B). Das innere Potential ist mit $V_{o,r} = 12$ eV und $V_{o,i} = 4$ eV (—) angesetzt. Die Rechnung für V_B wurde auch für $V_{o,i} = 5$ eV durchgeführt (---).

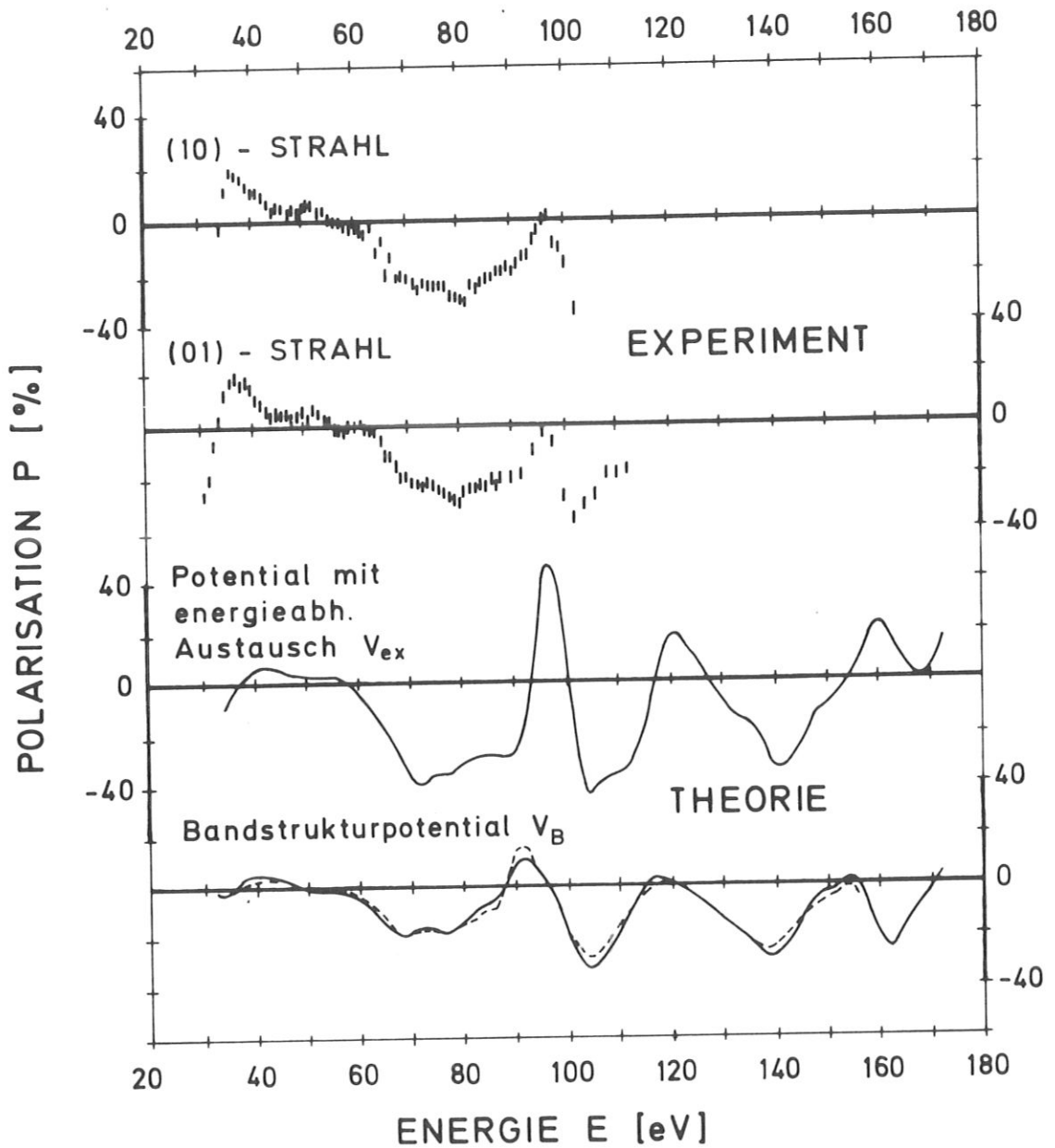


Bild 5.2: Energieabhängiges Polarisationsprofil $P(E)$, gemessen am (10)- und (01)-Strahl, berechnet unter Verwendung eines Streupotentials mit energieabhängigem Austausch (V_{ex}) und eines Bandstrukturpotentials (V_B) für Werte des inneren Potentials $V_{o,r} = 12$ eV und $V_{o,i} = 4$ eV (—). Für V_B wurde $P(E)$ auch für $V_{o,i} = 5$ eV berechnet (---).

5.3.2 Polarwinkelabhängigkeit in den Nebenstrahlen

Die Polarwinkelabhängigkeit der Polarisation wurde für den (10)-Strahl (siehe Bild 5.3) im Energiebereich $E = 70 \text{ eV}$ bis 95 eV gemessen und berechnet. Die $P(\vartheta)$ -Daten sind stark strukturiert, für Energiedifferenzen von $1 \text{ eV} - 2 \text{ eV}$ unterscheiden sich die $P(\vartheta)$ -Kurven signifikant. Das Gleiche gilt für den (0 $\bar{1}$)-Strahl, für den die polarwinkelabhängigen Polarisationsprofile (Bild 5.4) angegeben sind.

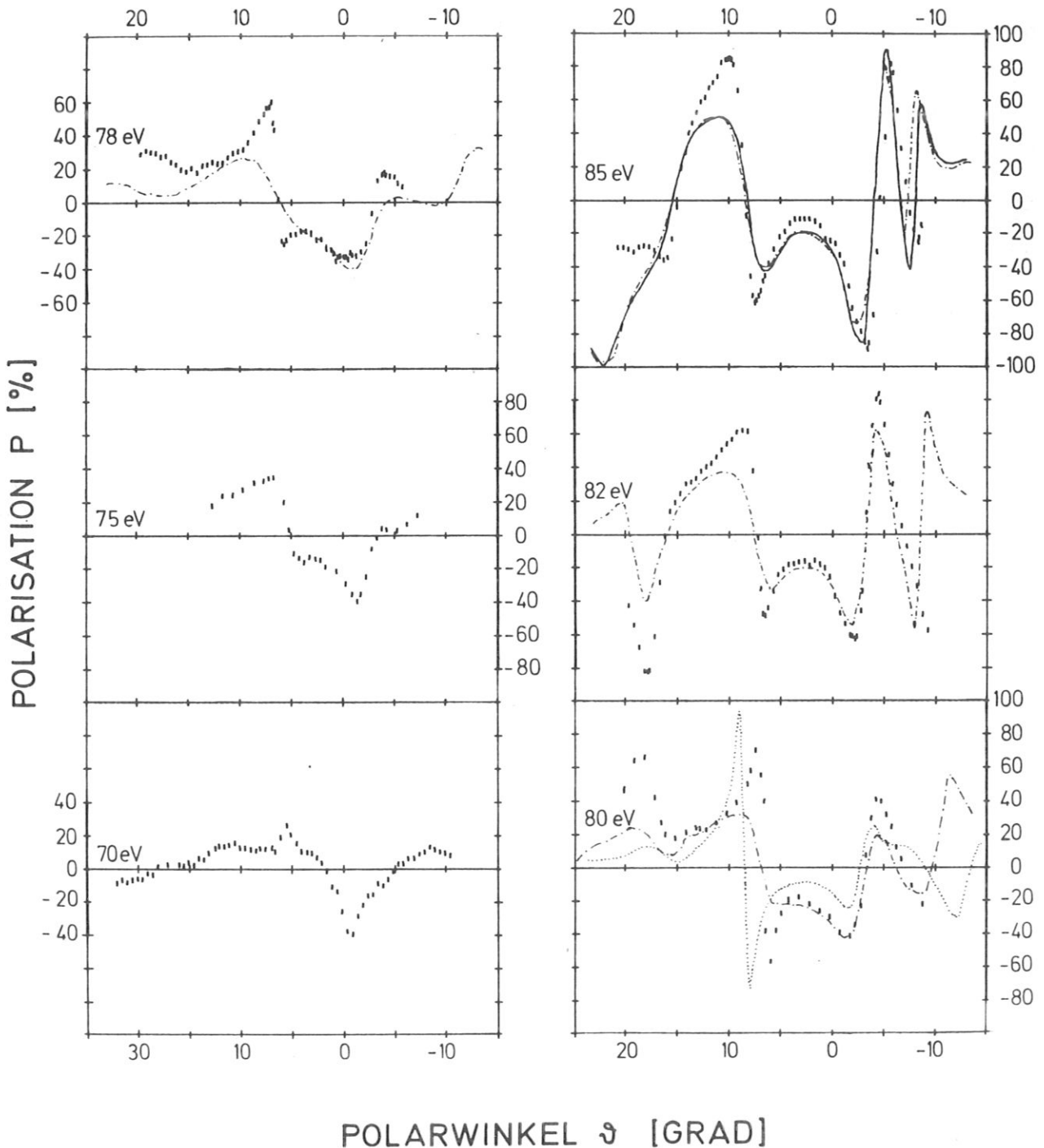


Bild 5.3: Text s. nächste Seite.

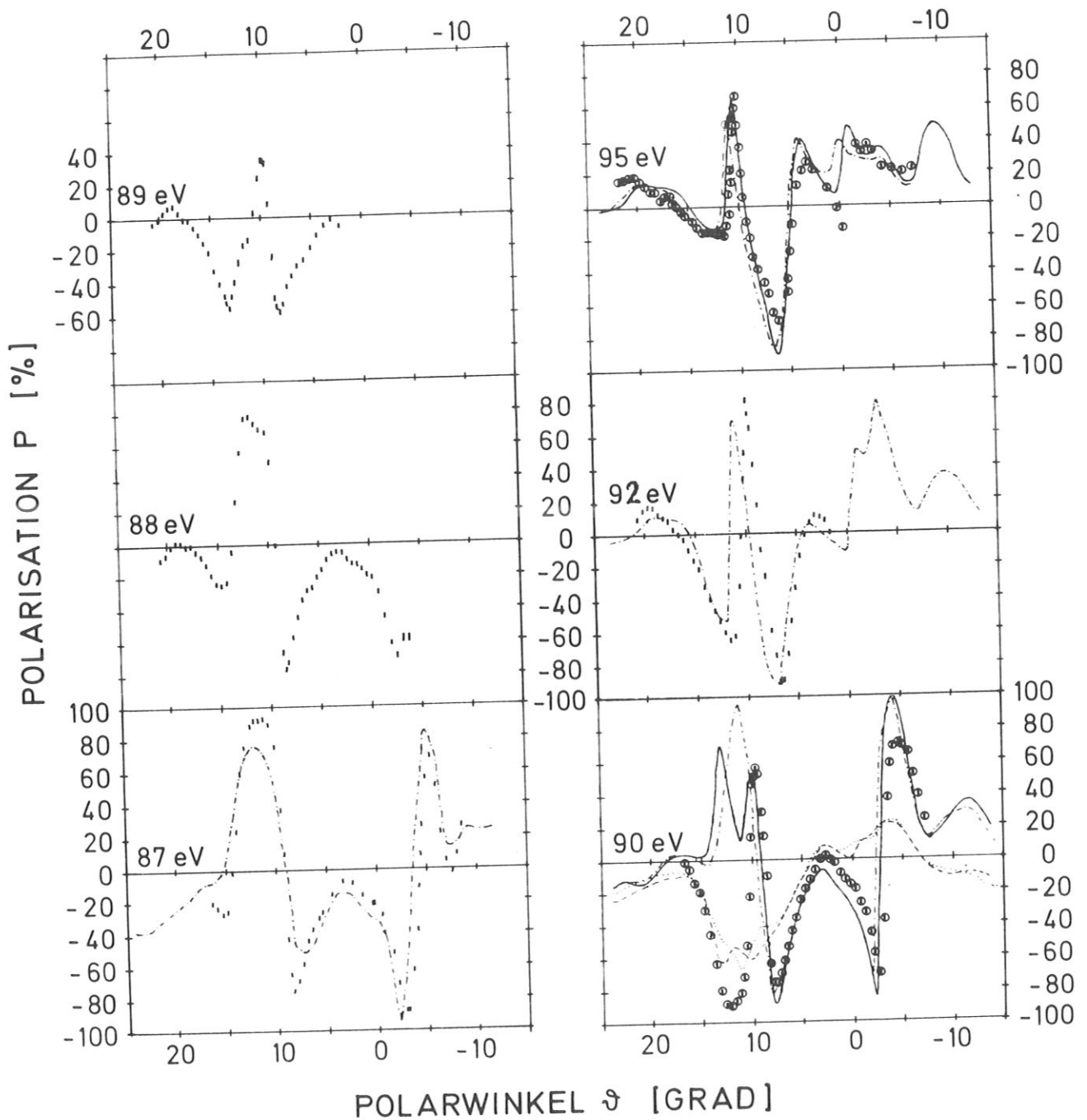


Bild 5.3: Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P(\vartheta)$ des (10)-Strahls, gemessen und berechnet für Beugungsenergien im Bereich $E = 70$ eV und $E = 95$ eV.

Die experimentellen Daten sind für $E = 90$ eV und $E = 95$ eV durch \odot hervorgehoben, die Rechnungen wurden für verschiedene Annahmen durchgeführt:

- Streupotential V_{ex} mit exponentieller Barriere: —
- " mit nichtreflektierender B.: - - -
- Streupotential V_B mit exponentieller Barriere: ---
- " mit nichtreflektierender B.: ...

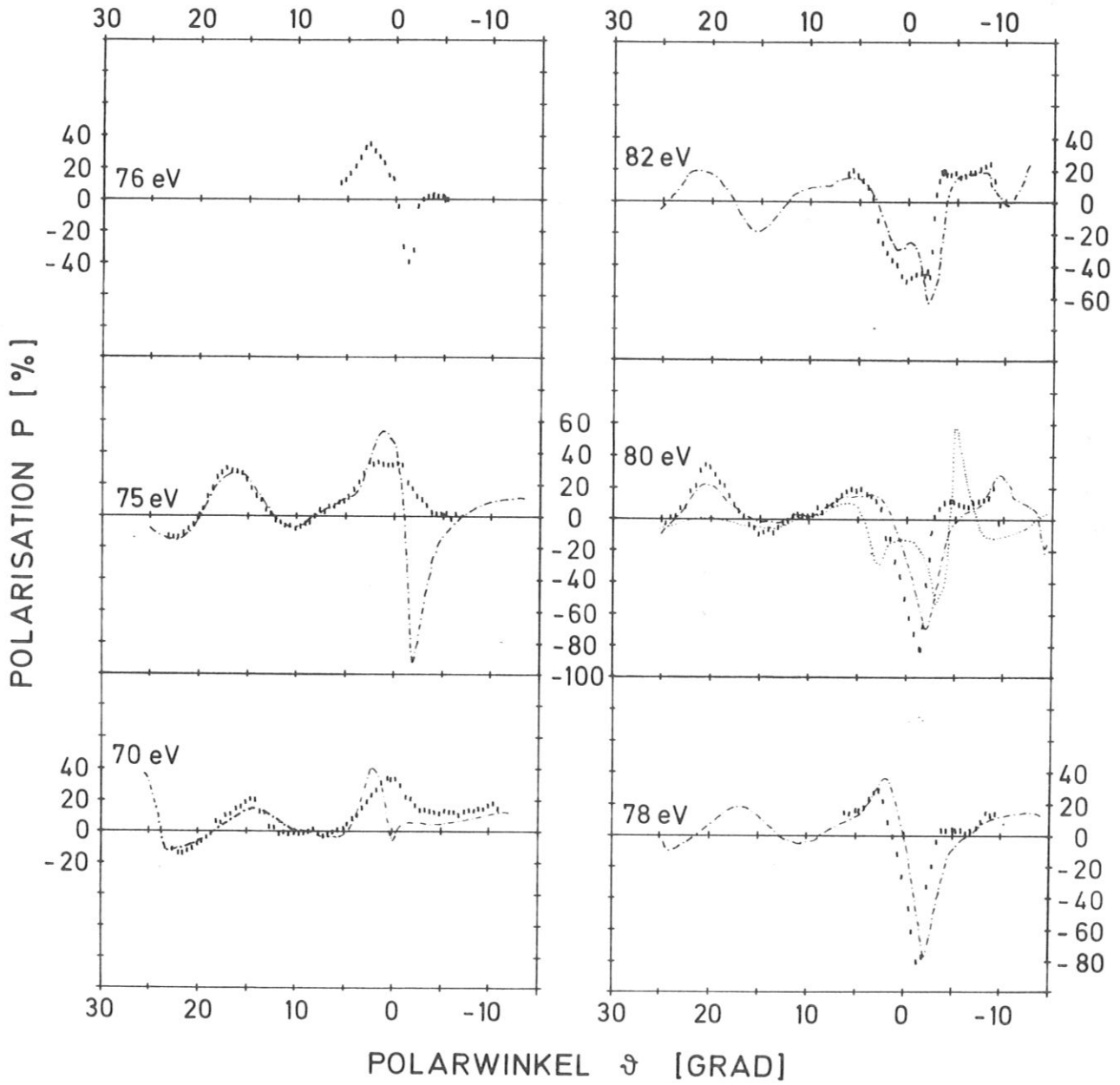


Bild 5.4

Text siehe nächste Seite!

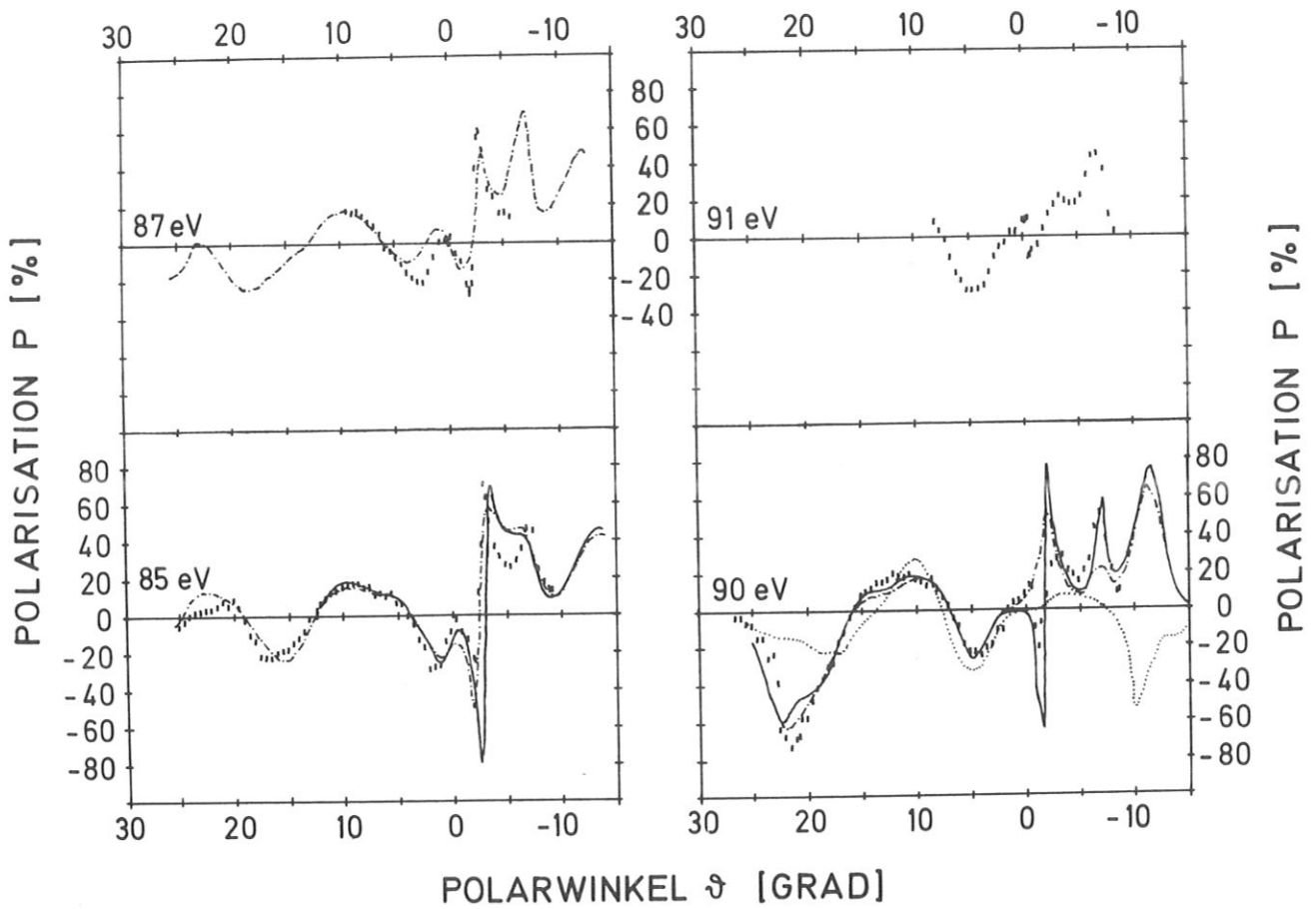


Bild 5.4: Polarwinkelabhängige Polarisationsprofile $P(\vartheta)$ des $(0\bar{1})$ -Strahls, gemessen und berechnet für Beugungsenergien im Bereich von $E = 70$ eV bis $E = 91$ eV. Die Rechnungen wurden für folgende Rechenparameter durchgeführt:

Streupotential V_{ex}	und exponentielle Oberflächenbarriere	—
"	und nichtreflektierende	----
" V_B	und

Zugeordnete theoretische und experimentelle Kurven ergeben ohne Winkel- und Energieverschiebung die beste Übereinstimmung; aus dem Vergleich der $P(E)$ -Daten ist also das innere Potential hinreichend gut bestimmt worden und die Winkelangaben des Experiments sind ausreichend genau. (Bezüglich Definition und Genauigkeit des Polarwinkels im Experiment siehe Abschnitt 4.1.1).

Allerdings bleiben auch für das Potential mit dem energieabhängigen Austausch noch systematische Abweichungen im Vergleich zum Experiment. Im (10)-Strahl erscheinen z.B. im Energiebereich von $E = 78 \text{ eV} - 87 \text{ eV}$ die scharfen Zacken des Experiments bei $\vartheta = 6^\circ$ in der Rechnung als schwache Änderungen, bei 90 eV wird die Polarisationsstruktur bei $\vartheta = 10^\circ - 15^\circ$ nur qualitativ beschrieben. Dafür gibt es verschiedene Ursachen: In diesem Winkelbereich liefert das Bandstrukturpotential vollkommen andere Ergebnisse als das Potential V_{ex} ; zusätzlich zeigt aber auch die Oberflächenbarriere gerade in diesem Winkelbereich einen starken Einfluß. Bei der Rechnung für das Potential V_{ex} verringert sich unter Verwendung einer reflektierenden glatten Barriere die Diskrepanz zum Experiment. Das polarwinkelabhängige Polarisationsprofil des (10)-Strahls reagiert also für $E = 90 \text{ eV}$ und $\vartheta = 10^\circ - 15^\circ$ sowohl auf die Austauschapproximation als auch auf die Form der Oberflächenbarriere empfindlich. Aus dem Einfluß der Oberflächenbarriere ergibt sich die Interpretation, daß für diese Beugungsbedingungen eine Oberflächenresonanz angeregt wird.

Die Meßergebnisse des ($0\bar{1}$)-Strahls werden im Bereich $0^\circ \leq \vartheta \leq 20^\circ$ durch das Streupotential V_{ex} fast quantitativ beschrieben. Im Bereich $-10^\circ \leq \vartheta \leq 0^\circ$ ist die Übereinstimmung schlechter. Für $E = 90 \text{ eV}$ zeigt sich ein sehr starker Einfluß der Oberflächenbarriere im Bereich $-3^\circ \leq \vartheta \leq 0^\circ$; die Rechnung für die glatte, reflektierende

Barriere und die energieabhängige Austauschapproximation V_{ex} beschreibt das Experiment qualitativ, während die Rechnung mit dem selben Potential und einer nichtreflektierenden Barriere das scharfe Minimum des Experiments bei $\vartheta = -2^\circ$ nicht reproduziert. Daraus ist zu schließen, daß in diesem Winkel- und Energiebereich eine Oberflächenresonanz angeregt wird.

5.3.3 Azimutabhängigkeit im Spiegelstrahl

Der Vergleich der Polarisationsdaten des (00)-Strahls wurde auf Rotationsdiagramme $P_n(\vartheta)$ und $P_k(\vartheta)$ beschränkt. Die Rotationsdiagramme bieten die Möglichkeit, den Einfluß der Zeitumkehr und der Kristallsymmetrie zu untersuchen (siehe Abschnitt 2.2.4 und Kap. 4.2). Durch Vergleich der azimutabhängigen Messungen und Rechnungen läßt sich außerdem der Einfluß der Oberflächenbarriere ermitteln.

In Bild 5.5 sind azimutabhängige Profile $P_n(\vartheta)$ der Polarisationskomponente normal zur Streuebene dargestellt. Gemessen wurde für $E = 60$ eV und $\vartheta = 43.5^\circ$ in der gespiegelten Beugungsgeometrie. Die Rechnungen wurden für dieselbe Energie und $\vartheta = 43^\circ$ (oben) und $\vartheta = 44^\circ$ (unten) und die Annahme einer glatten, reflektierenden und einer nichtreflektierenden Oberflächenbarriere durchgeführt. Dabei zeigt die Rechnung mit der reflektierenden Barriere für $\vartheta = 44^\circ$ bessere Übereinstimmung mit dem Experiment als die Rechnung, in der der Einfluß der Oberflächenbarriere unterdrückt wird.

Obwohl der Kurvenverlauf des Experiments durch die Rechnung sehr gut wiedergegeben wird, bleibt als wesentliche Abweichung der Absolutwert der Polarisation. Die Rechnung ergibt Minima, die um etwa 20 % tiefer sind als im Experiment gemessen wurde. Übereinstimmung findet man beim Vergleich der in diesem Bild gezeigten Daten auch bezüglich der Symmetrie: sowohl das Experiment als auch die Rechnung

ergeben Dreizähligkeit, die durch die unterschiedlichen Polarisationswerte der Minima bezüglich der Spiegelebenen bei $\varphi = 60^\circ$ und $\varphi = 120^\circ$ eindeutig gegeben ist. Für die gleichen Beugungsparameter wie die $P_n(\varphi)$ -Kurven von Bild 5.5 sind die Rotationsdiagramme für P_k ermittelt worden. Diese sind in Bild 5.6 dargestellt. Für $P_k(\varphi)$ zeigt die Oberflächenbarriere wenig Einfluß, die Übereinstimmung der Rechnungen mit dem Experiment ist - abgesehen von den zu hohen Extremwerten - sehr gut.

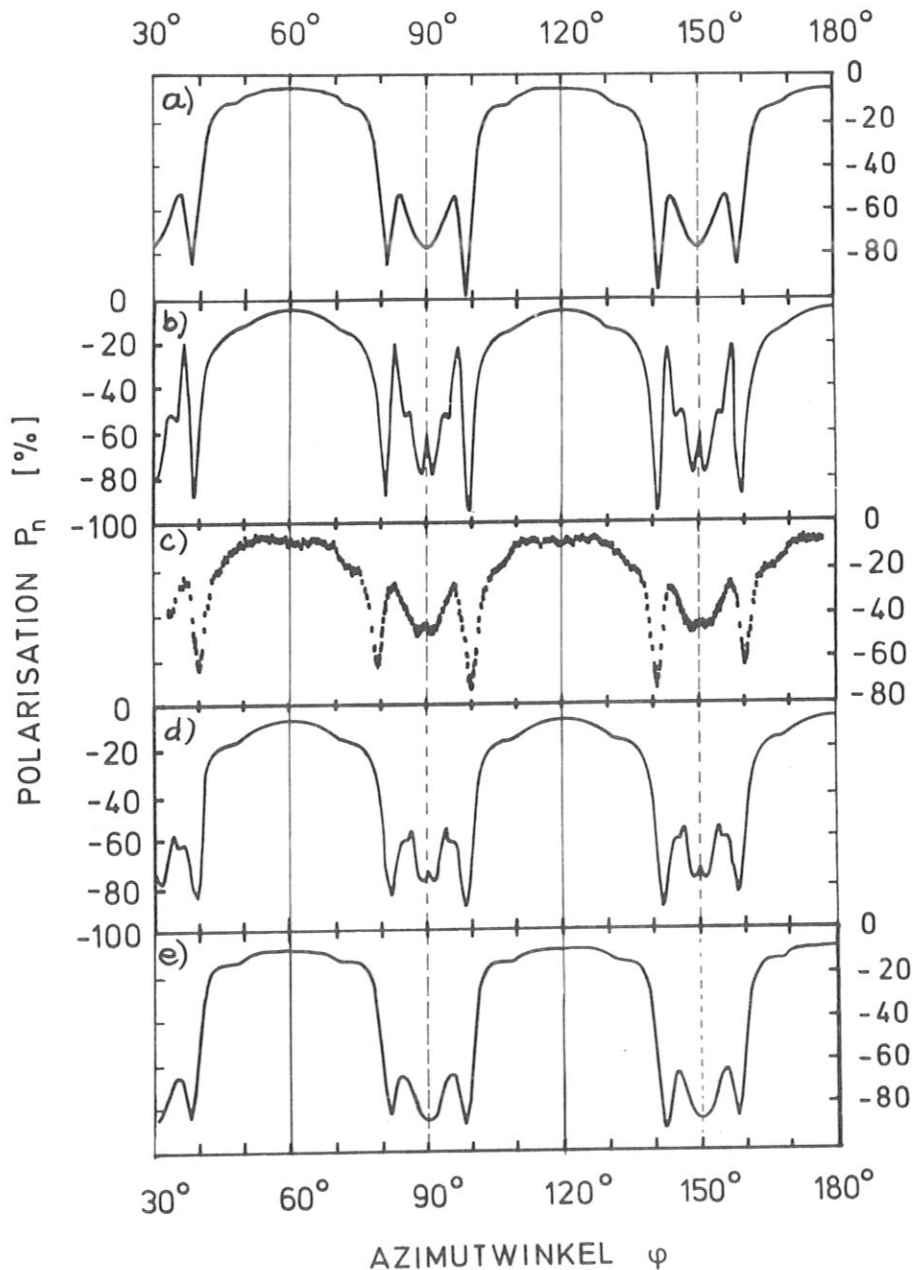


Bild 5.5: Rotationsdiagramm $P_k(\varphi)$, gemessen für $E = 60$ eV, $\theta = 43,5^\circ$ (c), berechnet für $E = 60$ eV und
 (a) = 43° , mit nichtreflektierender Barriere
 (b) = 43° , mit exponentieller Barriere
 (c) = 44° , mit exponentieller Barriere
 (d) = 44° , mit nichtreflektierender Barriere

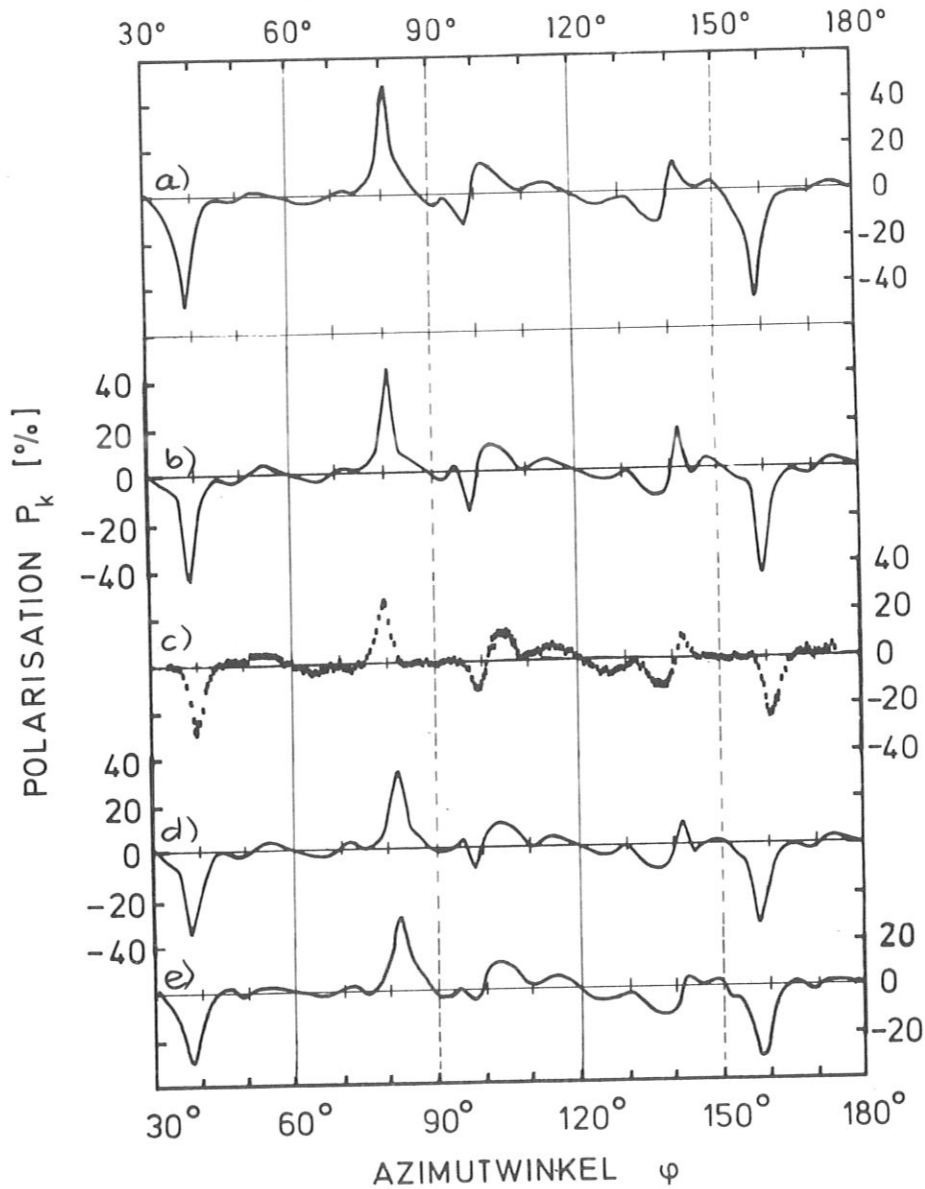


Bild 5.6: Rotationsdiagramm $P_k(\varphi)$, gemessen für $\vartheta = 43,5^\circ$ und $E = 60$ eV (c) berechnet für $E = 60$ eV und

- (a) = 43° , mit nichtreflektierender Barriere
- (b) = 43° , mit exponentieller Barriere
- (d) = 44° , mit exponentieller Barriere
- (e) = 44° , mit nichtreflektierender Barriere

Faßt man die Ergebnisse des Vergleiches Experiment-Theorie für Pt(111) zusammen, so werden die experimentellen Daten durch die Rechnungen im allgemeinen sehr gut wiedergegeben; die Übereinstimmung ist immer qualitativ, teilweise sogar quantitativ. Die verbleibenden Diskrepanzen (vor allem bei den $P(E)$ -Daten) sind zum Teil im effektiven Streupotential der Rechnung und in einer nicht optimalen Beschreibung der Oberflächenbarriere begründet. Doch auch die Annahmen einer mittleren, im gesamten Kristall konstanten Debyetemperatur, wie sie im theoretischen Modell enthalten ist, stellt eine zu grobe Näherung dar: Aus Ionenstreuungsmessungen von Davies 1978 und van der Veen 1979, wurde ermittelt, daß die Schwingungsamplituden der Oberflächenatome der Pt(111)-Flächen- insbesondere senkrecht zur Oberfläche - wesentlich größer sind als im Volumen. Dem entsprechen kleinere Werte der Oberflächen-Debyetemperatur. Infolge der Vergrößerung der Schwingungsamplituden verringert sich die Intensität der gebeugten Elektronen, auch für die Spinpolarisation sind daher Änderungen zu erwarten. Eine Berücksichtigung der Oberflächen-Debyetemperatur sollte daher zu einer weiteren Reduzierung der systematischen Abweichungen zwischen Rechnungen und Experiment führen. Aber auch im derzeitigen Stand wäre der Versuch interessant, Strukturanalyse von Adsorbatsystemen auf der Pt(111)-Oberfläche durch Vergleich von Polarisationsmessungen und entsprechenden Rechnungen durchzuführen.

6. ZUSAMMENFASSUNG

Die Ergebnisse der in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Polarisationsmessungen bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Pt(111) lassen sich in drei wesentliche Punkte zusammenfassen:

- Das prinzipielle Verhalten des Polarisationsvektors unter dem Einfluß von Kristallsymmetrie und Zeitumkehr wurde bestimmt.
- Zur Klärung des Zusammenhangs zwischen Streuprozessen und Polarisationswirkungen wurde das Verhalten signifikanter Strukturen in den polarwinkelabhängigen Polarisationsdaten $P(\vartheta)$ bei Variation der Beugungsparameter (Energie, Polarwinkel und Azimut) analysiert.
- Der Vergleich der Polarisationsmessungen mit entsprechenden Rechnungen zeigt, inwieweit die Theorie die experimentellen Ergebnisse beschreibt und wo die Ansatzpunkte zur Verbesserung des theoretischen Modells liegen.

Die experimentelle Untersuchung des prinzipiellen Verhaltens des Polarisationsvektors unter dem Einfluß räumlicher und zeitlicher Spiegelung erfolgte mit Hilfe von Rotationsdiagrammen der Normalkomponente P_n (senkrecht zur Streuebene) und der longitudinalen Komponente P_k (parallel zur Richtung des gebeugten Elektronenstrahls). Mit diesen $P_k(\vartheta)$ -Messungen wurde erstmals eine Komponente des Polarisationsvektors parallel zur Streuebene in einem Beugungsexperiment erfaßt. Für P_k ergab sich Antisymmetrie und für P_n Symmetrie bei Spiegelung des Experiments an Symmetrieebenen des Kristalls. Als Rotationssymmetrie ergab sich für beide Polarisationskomponenten Dreizähligkeit. Daraus folgt, daß die einzelnen Polarisationskomponenten (P_n und $P_{||}$) bei Zeitumkehr nicht in sich selbst übergehen, denn die Invarianz des Polarisationsvektors gegenüber Zeitumkehr hätte eine Erhöhung der Symmetrie zur Sechszähligkeit zur Folge. Dieses Verhalten läßt sich als Folge des

Transformationsverhaltens der Spinstreumatrix verstehen.

Aus der Analyse des Verhaltens signifikanter Strukturen in den $P(\theta)$ -Daten bei Variation der Winkel θ und φ und der Elektronenenergie ergab sich, daß in der Elektronenbeugung durch Einschub in bestimmte kristallographische Richtungen und durch Anregung von Oberflächenresonanzen ausgeprägte Polarisierungseffekte hervorgerufen werden können. Für ein bestimmtes Polarisationsminimum (Bild 4.6) zeigte die Dispersion $E(\underline{k}_{\text{Ofl}})$, daß hierfür bei Variation der Energie der Parallelimpuls $\underline{k}_{\text{Ofl}}$ (parallel zur Oberfläche des Kristalls) konstant ist. Für das Auftreten dieser Dispersion kann keine Erklärung gegeben werden.

Die bisher durchgeführten Vergleiche von Polarisationsmessungen und Rechnungen bei der Elektronenbeugung wurden dadurch erschwert, daß die Struktur der untersuchten Kristallflächen nicht genau bekannt ist. Die Einflüsse der strukturabhängigen und der strukturunabhängigen Parameter der Rechnung ließen sich daher nicht eindeutig trennen. Durch die Wahl der Pt(111)-Fläche, die keine Rekonstruktion aufweist, für die vorliegenden Untersuchungen existieren hier diese Schwierigkeiten nicht. Für Pt(111) stimmen die Ergebnisse einer relativistischen dynamischen LEED-Theorie mit den Polarisationsmessungen zumindest qualitativ- in zahlreichen Fällen sogar quantitativ- überein, wenn man für die Austausch-Wechselwirkung eine energieabhängige Approximation wählt. Die verbleibenden Diskrepanzen zwischen Rechnung und Experiment - zum Beispiel im Falle der Oberflächenresonanzen - geben Ansatzpunkte für mögliche Verbesserungen des theoretischen Modells. Doch schon das hier erzielte Maß an Übereinstimmung zeigt die Möglichkeit auf, mit Hilfe von Polarisationsuntersuchungen bei der Elektronenbeugung die Struktur von Adsorbatsystemen zu analysieren.

7. LITERATURVERZEICHNIS

- Aberdam D. (1978).
in "Handbook of Surfaces and Interfaces" Bd.2, S.191,
ed. L.Dobrzynski, Garland STPM Press, New York
- Adams D.L. et al. (1979).
Phys.Rev. B 20, 4789
- Bauer E. (1975).
in "Interactions on Metal Surfaces", ed. R. Gomer
(Topics in Appl.Phys., Bd.4) S.225, Springer, Berlin
- Bauer P. et al. (1980a).
Surf.Sci. 99, L 395
- Bauer P. et al. (1980b).
Solid State Com., im Druck
- Biberian J.P. und Somorjai G.A. (1979).
Appl.Surf.Sci. 2, 352
- Bøgh E. et al. (1977).
Proc.7th Intern.Vac.Congr. and 3rd Intern.Conf.
Solid Surf. (Wien 1977) S.A-2707
- Calvert R.L. et al. (1977).
Phys.Rev. Lett.39, 1226
- Christmann K.G. et al. (1976).
Surf.Sci. 54, 365
- Chu W.K. et al. (1978).
"Backscattering Spectrometry", Acad.Press,
New York
- Davies J.A. et al. (1978).
Surf.Sci. 78, 274
- Dawydow A.S. (1967).
"Quantenmechanik", VEB Deutscher Verlag der
Wissenschaften, Berlin

- Debe M.K. et al. (1977).
Surf.Sci. 68, 437
- Debe M.K. und King D.A. (1979).
Surf.Sci. 81, 193
- Deichsel H. (1961).
Z.Phys. 164, 156
- Demuth J.E. et al. (1975).
Phys.Rev. B 11, 1460
- Eckstein W. (1970)
"Polarisationseffekte bei der elastischen
Elektronenstreuung", interner Bericht IPP 7/1,
Institut für Plasmaphysik, Garching
- Farnsworth H.E. (1971).
Phys.Lett. 36 A, 56
- Fedak D.G. und Gjostein N.A. (1967).
Acta Metallurgica 15, 827
- Feder R. (1977a).
Surf.Sci. 63, 283
- Feder R. (1977b).
Surf.Sci. 68, 229
- Feder R. et al. (1977c).
Z.Phys. B 28, 265
- Feder R. und Kirschner J. (1978).
Phys.Stat.Sol. 45 A, K117
- Feder R. (1980 a).
in "Elektronenspektroskopische Methoden an
Festkörpern und Oberflächen", KFA Jülich
- Feder R. (1980b).
Phys.Lett. 78 A, 103
- Feldman et al. (1977).
Phys.Rev.Lett. 39, 38

- Van Hove M.A. und Tong S.Y. (1975).
Surf.Sci.54, 91
- Kalisvaart M. et al. (1978).
Phys.Rev. B 17, 1570
- Kesmodel L.L. et al. (1977).
Surf.Sci. 64, 342
- Kessler J. (1976).
"Polarized Electrons", Springer-Verlag, Berlin
- Kirschner J. und Feder R. (1979).
Phys. Rev.Lett.42, 1008
- Van Klinken J. (1966).
Nucl.Phys.75, 161
- Lagally M.G. et al. (1971).
Surf.Sci.25, 444
- Lee B.W. et al. (1977).
J.Vac.Sci.Technol.14, 291
- Mahan A.H. et al. (1980).
Surf.Sci.93, 550
- Maison D. (1966).
Phys.Lett. 19, 654
- Mc Rae E.G. (1979).
Rev.Mod.Phys. 51, 541
- Melmed A.J. et al. (1979).
Phys.Rev.Lett.43, 1521
- Messiah A. (1964).
"Quantum Mechanics", North Holland Publ.Comp.
- Müller N. (1966).
"Ein Detektor für Elektronenpolarisation mit direkter Registrierung", Diplomarbeit, Universität München
- Müller N. und Wolf D. (1976).
Bull.Am.Phys.Soc.II 21, 944

Müller N. (1977a).

"Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an einer Gold-(110)-Oberfläche",
Dissertation, Universität München

Müller N. and Wolf D (1977b).

Proc.7th Intern.Vac.Congr. and 3rd Intern.Conf.
Solid Surf.(Wien 1977) Bd.III, A-2754.

Müller N. et al. (1977c).

Inst.Phys.Conf.Ser. 41 Kap.4, S. 281 (Proc. der
Conf. 50th Anniversary of the Discovery of Electron
Diffraction, Imperial College, London)

Müller N. (1980).

Persönliche Mitteilung

O'Neill M.R. et al. (1975).

Phys.Rev.Lett.34, 1167

Pendry J.B. (1974).

"Low Energy Electron Diffraction", Academic Press,
London

Raith W. (1962).

"Zur Messung der Spinpolarisation von Elektronen-
strahlen", Dissertation, TU Berlin

Reihl B. (1980).

"Erzeugung spinpolarisierter Elektronen durch
Photoemission aus Galliumarsenid und ihre
Beugung (LEED) an Gold (110)", Dissertation,
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

Riddle T.W. et al (1978).

J.Vac.Sci.Technol. 15, 1686

Riddle T.W. et al. (1979).

Surf.Sci. 82, 511 und 517

Slater J.C. et al. (1969).

Phys.Rev.179, 28

Smoluchowski R. (1941).

Phys.Rev. 60, 661

Staib P. und Staudenmaier G. (1977).

Proc.7th Intern.Vac.Congr. and 3rd Intern.
Conf. Solid Surf.(Wien 1977), 2355

- Uhlenbeck G.E. und Goudsmit S. (1925).
Die Naturwissenschaften 13, 953
- Van der Veen F. et al. (1979).
Surf.Sci. 79, 219
- Wang G.-C. et al. (1979)
Phys.Rev.Lett. 42, 1349
- Webb M.B. und Lagally M.G. (1973).
Solid State Phys. 28, 301, ed.H.Ehrenreich,
F. Seitz, D. Turnbull, Academic Press,
New York
- Wolf D. (1972).
"Beugung niederenergetischer Elektronen an
Goldoberflächen", Dissertation,
Universität München
- Wood E. (1963).
J.Appl. Phys. 35, 1306
- Woodruff D.P. und Holland B.W. (1970).
Phys.Lett. 31 A, 207

Herrn Professor Menzel danke ich für sein Interesse am Fortgang dieser Arbeit, für die hilfreichen Diskussionen und seine tatkräftige Förderung.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Bereitstellung der Personalmittel im Rahmen des SFB 128; dem Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, insbesondere den Herren Dr. Behrisch, Dr. Eckstein und Dr. Vernickel möchte ich dafür danken, daß ich diese Arbeit im Projekt Plasma-Wand-Wechselwirkung durchführen konnte und mir für die Dauer der Dissertation eine Teilzeitanstellung im IPP ermöglicht wurde. Herrn Dr. Eckstein gebührt mein Dank auch für viele interessante Diskussionen und seine wohlwollende Unterstützung während der Durchführung der Arbeit.

Mein besonders herzlicher Dank gebührt Herrn Dr. Müller für die Überlassung wesentlicher Teile der Apparatur, seine tatkräftige Hilfe beim Aufbau des Experimentes und viele wertvolle Diskussionen bei der Interpretation der Ergebnisse.

Auch meinen Kollegen, insbesondere Herrn K. Ertl, möchte ich für die Unterstützung, vor allem beim Umbau der Apparatur, aufrichtig danken.

Herr Nagleder hat mit seinem vielfältigen technischen Geschick wesentlich zur erfolgreichen Vorbereitung des Experimentes beigetragen. Hierfür sei ihm sowie allen anderen beteiligten Mitarbeitern am Institut herzlich gedankt.

Fräulein Hirschinger danke ich für die präzise Anfertigung der Abbildungen, Fräulein Daube und Frau Kraus für die Erstellung des Manuskripts.