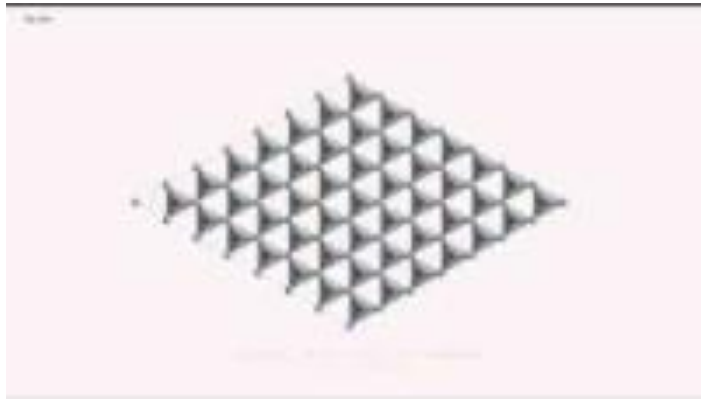


Si(111) 7x7 reconstruction – Aufgabe 3.1



Anzahl der ungesättigten Bindungen pro EZ:

12 Adatome

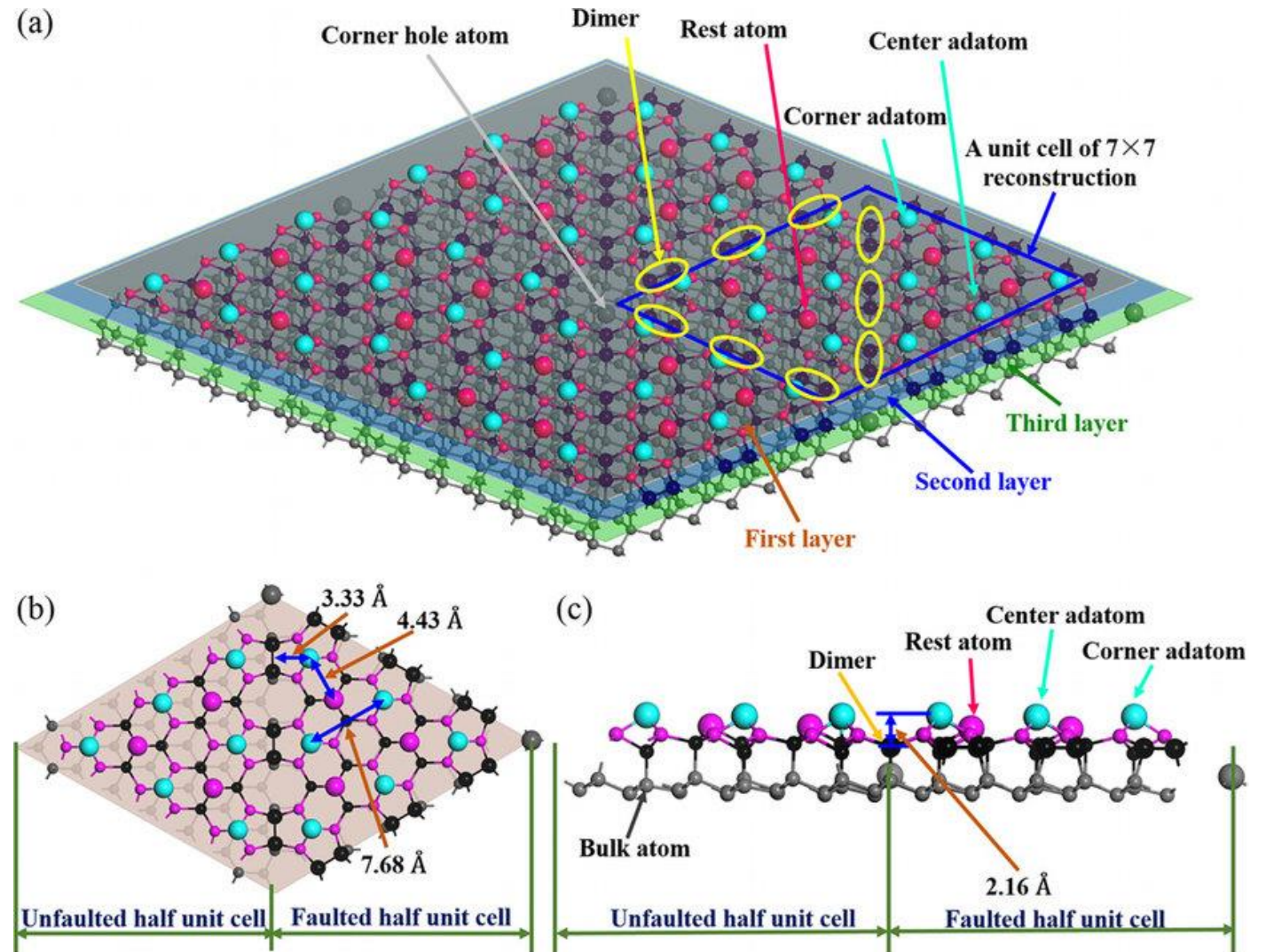
6 Restatome

1 Eckplatz

$1.415 \cdot 10^{-3}$ H₂O pro nm² pro s

6.25 nm² ist eine EZ.

Eff. treffen 32 H₂O Moleküle pro Stunde auf die Oberfläche. -> Oberfläche nach etwa 47 mins. komplett benetzt.



- $2 \cdot 10^{(-10)} \text{ mbar} / \sqrt{2 \cdot \text{PI} \cdot 2.989 \cdot 10^{(-26)} \text{ kg} \cdot \text{boltzmann constant} \cdot 77 \text{ Kelvin}}$
- $\sin(60) \cdot (7 \cdot 5.431 / \sqrt{2} \text{ Angstrom})^2$
- $\sin(60) \cdot (7 \cdot 5.431 / \sqrt{2} \text{ Angstrom})^2 \cdot 2 \cdot 10^{(-10)} \text{ mbar} / \sqrt{2 \cdot \text{PI} \cdot 2.989 \cdot 10^{(-26)} \text{ kg} \cdot \text{boltzmann constant} \cdot 77 \text{ Kelvin}} \cdot \text{Haftungs faktor}$

STM vs LEED

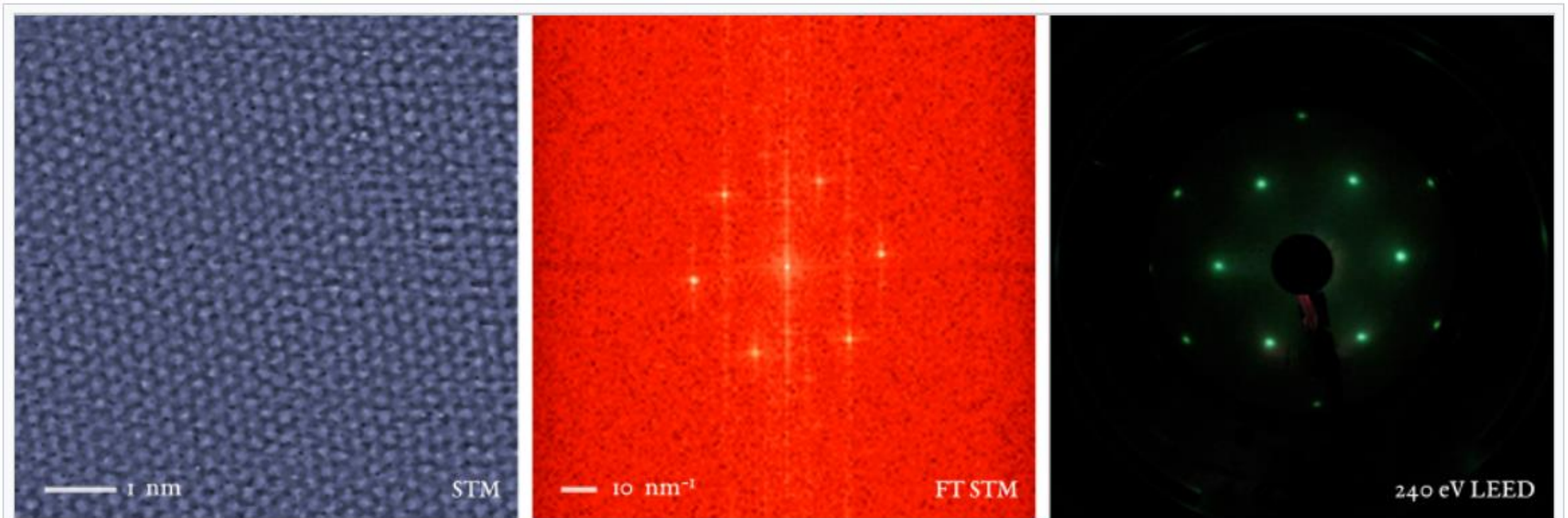


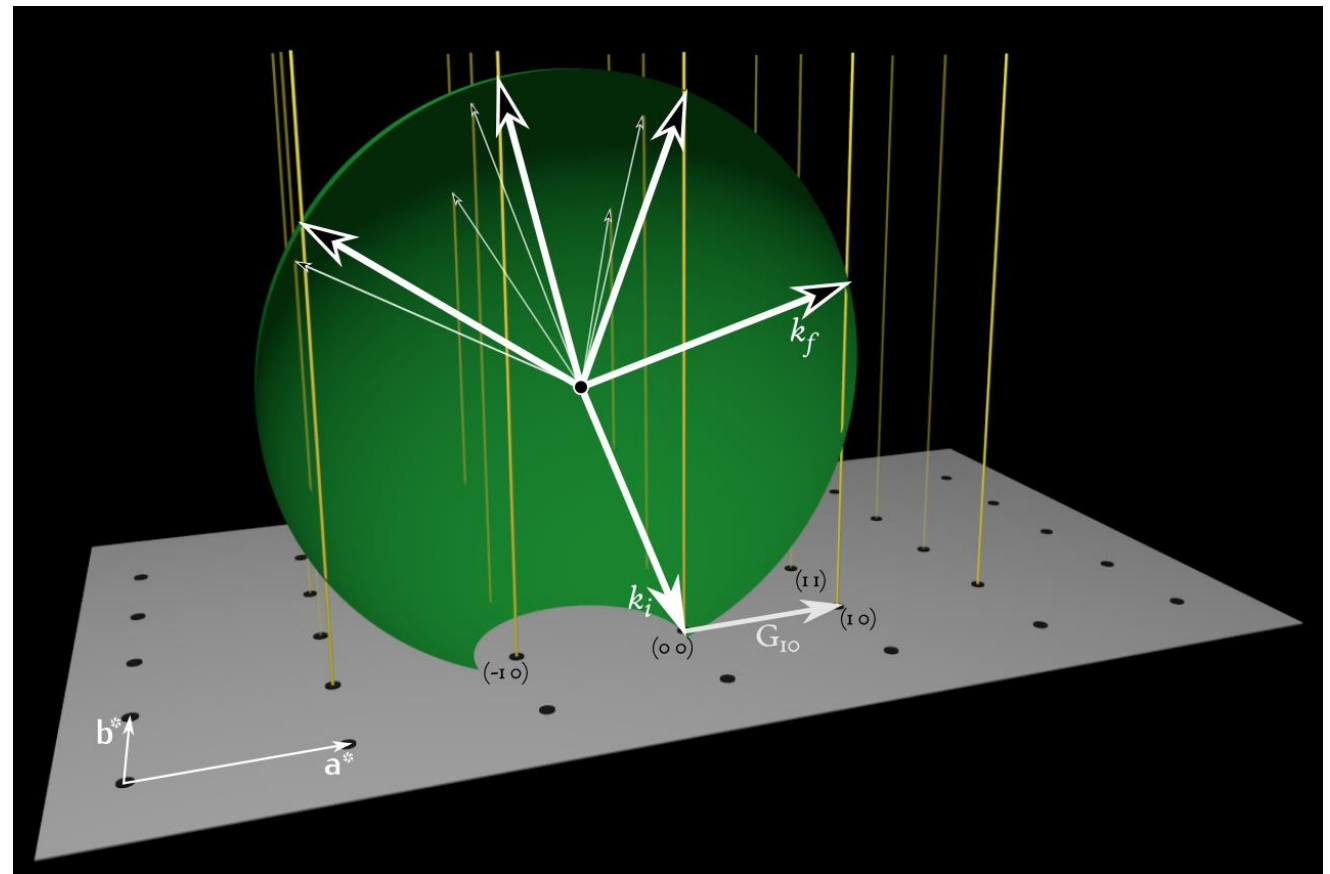
Figure 5: Real-space STM topographic map of palladium (111) surface, its Fourier transform in reciprocal space showing main periodicity components, and a 240 eV LEED image from the same surface

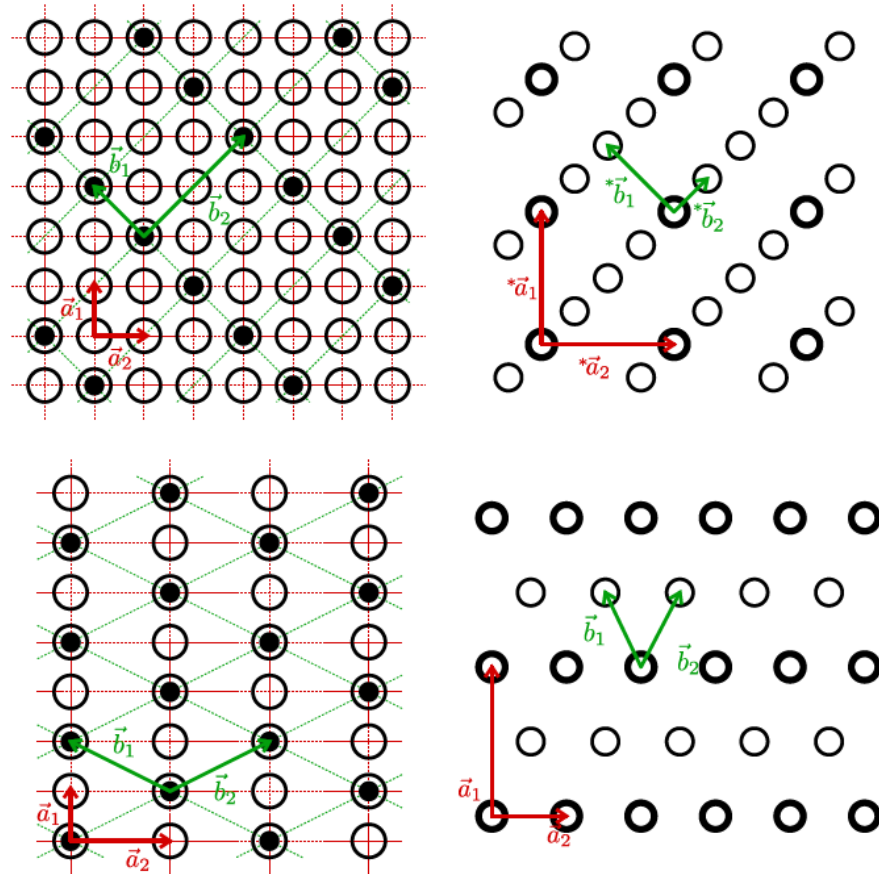
LEED basics

$$I(d) = I_0 e^{-d/\Lambda(E)}$$

$$\lambda \text{ [nm]} \approx \sqrt{\frac{1.5}{E \text{ [eV]}}}$$

$$\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i = \mathbf{G}_{hkl}$$

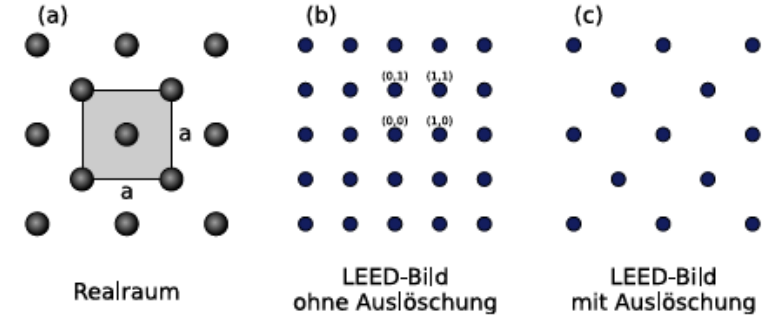




Superposition von Mustern der einzelnen Domänen. In diesem Fall wäre das die Überlagerung des Musters aus (A.1) und eines um 90° dazu verdrehten Musters.

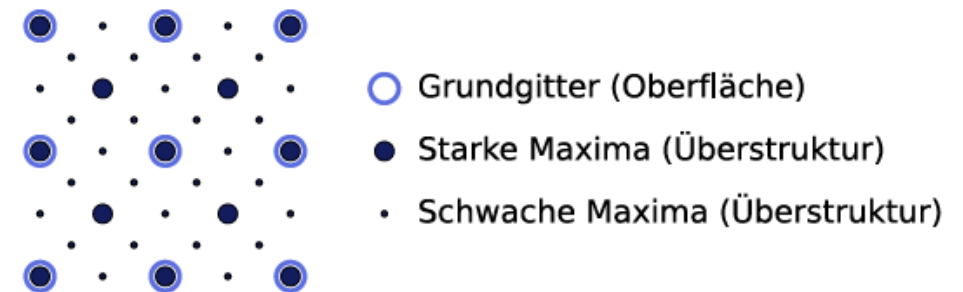
Wenn die Einheitszelle der Oberfläche nicht primitiv ist, dann gilt $\Delta \vec{R}_i = \Delta \vec{R}_{nm\alpha} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + \vec{r}_\alpha$, wobei $\{\vec{r}_\alpha\}$ die Positionen von Atome in der Einheitszelle geben. In diesem Fall kann man $\Delta \vec{R}_{nm}$ ausklammern, so dass der Teil der obigen Summe für eine Einheitszelle ist gleich $e^{i\vec{R}_0 \cdot \Delta \vec{R}_{nm}} \sum_{\alpha} e^{i\vec{r}_\alpha \cdot \vec{g}}$. Für die Gesamtsumme ergibt sich $e^{i\vec{R}_0 \cdot \vec{g}} \sum_{n,m} e^{i\Delta \vec{R}_{nm} \cdot \vec{g}} \sum_{\alpha} e^{i\vec{r}_\alpha \cdot \vec{g}}$. Wie im vorherigen Fall gilt bei konstruktiver Interferenz $\vec{g}_{\parallel} = \vec{G}_{pq}$, aber die Intensität vom entsprechenden LEED-Punkt ist zusätzlich proportional zu $F_b = \sum_{\alpha} e^{i\vec{r}_\alpha \cdot \vec{G}_{pq}}$. Das wird bestimmte Punkte schwächen, und manchmal zur Auslöschung führen.

Als Beispiel betrachten Sie folgendes Gitter.

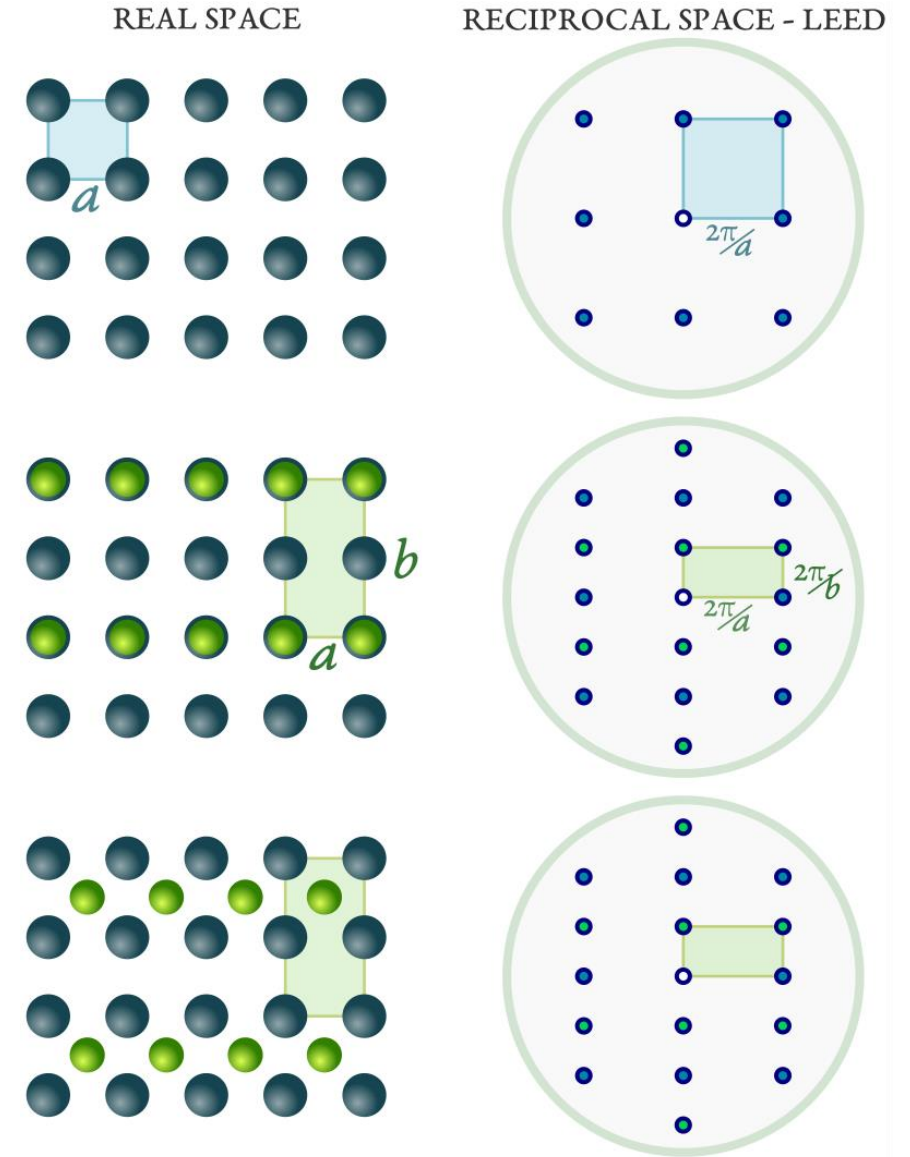


Wir können es als ein quadratisches Gitter mit einem zweiatomigen Basis betrachten. Ohne Berücksichtigung des zusätzlichen Faktors würde man ein quadratisches Gitter im reziproken Raum erwarten mit Gitterkonstante $2\pi/a$ ($\vec{G}_{pq} = \frac{2\pi}{a} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$) (Abb. b.). Da aber die Einheitszelle nicht primitiv ist, muss der zusätzliche Faktor F_b berücksichtigt werden. Die zwei Vektoren der Basis sind $\vec{r}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ und $\vec{r}_1 = \frac{a}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Damit gilt $F_b = 1 + e^{i\pi(p+q)} = 1 + (-1)^{p+q}$. F_b ist Null wenn $p + q$ ungerade ist, und damit wird die Hälfte aller Punkte ausgelöscht. Das resultierende LEED-Muster ist auch quadratisch, aber mit einer Gitterkonstante von $2\sqrt{2}\pi/a$, wie erwartet.

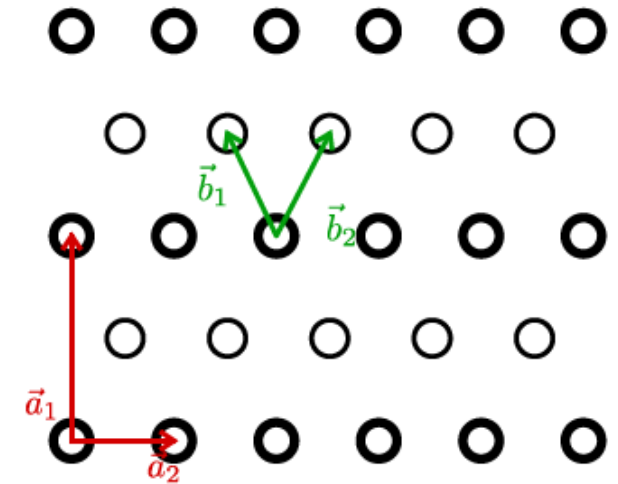
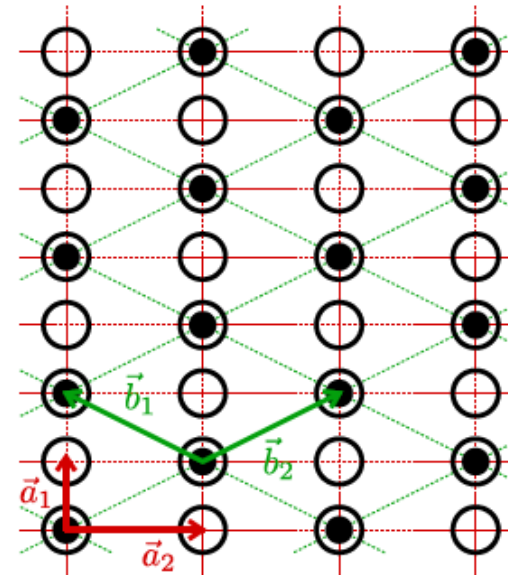
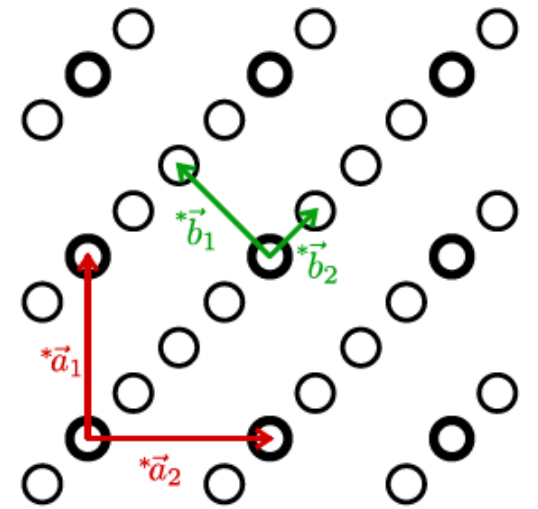
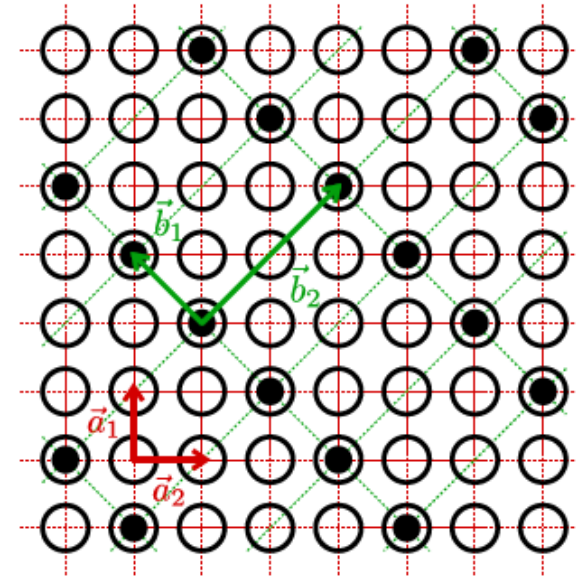
Das Gitter aus der Aufgabe hat drei Überstrukturatome pro Einheitszelle. Zur Vereinfachung können wir die Achsen entlang der Basisvektoren wählen. Damit sind die drei Vektoren $\vec{r}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, $\vec{r}_1 = a\sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ und $\vec{r}_2 = a\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Die Vektoren des reziproken Gitters sind $\vec{G}_{pq} = \frac{\pi}{a\sqrt{2}} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$. Es gilt $F_b = 1 + e^{i\pi p} + e^{i\pi q} = 1 + (-1)^p + (-1)^q$. In diesem Fall findet keine Auslöschung statt. Nur die Punkte mit ungeradem p oder q werden neun Mal schwächer, als Punkte mit geraden p und q .



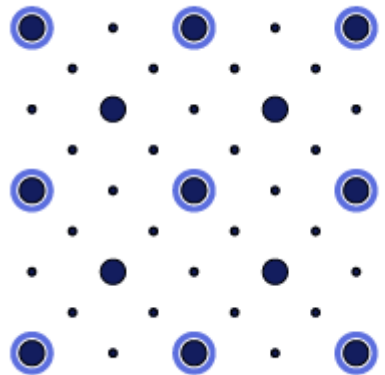
LEED patterns



LEED – Aufgabe 3.2 a)



LEED – Aufgabe 3.2 b)



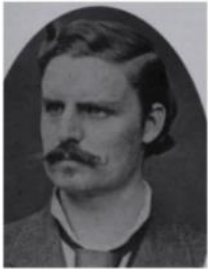
- Grundgitter (Oberfläche)
- Starke Maxima (Überstruktur)
- Schwache Maxima (Überstruktur)

Debye Waller factor – Aufgabe 3.3

$$W = e^{\left(-\frac{3q^2 T \hbar^2}{2mk_B \theta_D^2} \right)}$$

Intensität kohärent, elastisch gestreuter Elektronen, die an einem Kristallgitter gestreut haben. -> Gitterschwingungen werden berücksichtigt.

Diffusion – Aufgabe 4.1 – Fick's law



Adolf Fick
1829 – 1901

Fick's Law

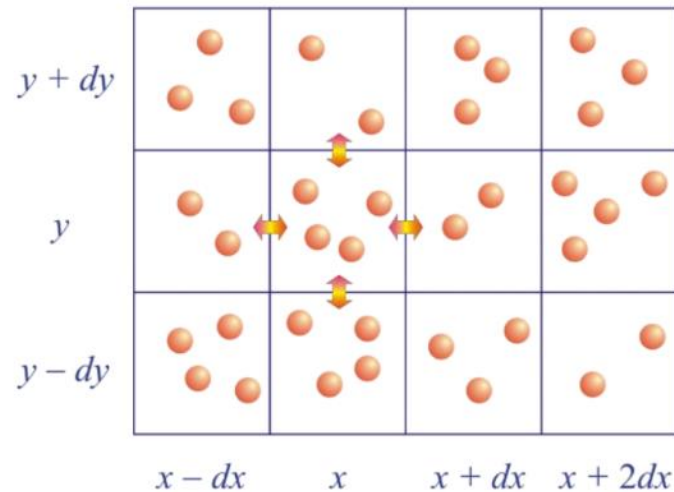
$$j_x = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$j_y = -D \frac{\partial c}{\partial y}$$

$$\mathbf{j} = -D \mathbf{grad} c$$

diffusion constant

Fick's law



Mean Values of Fundamental Solution

$$c(t, r) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{1}{(4\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

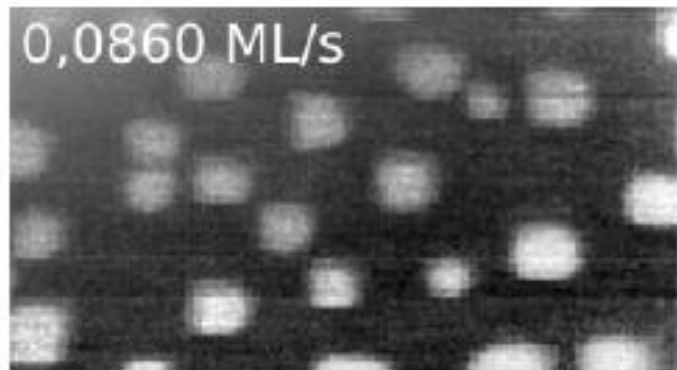
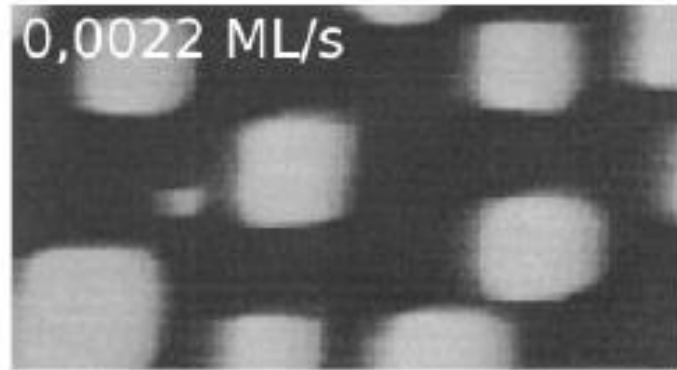
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \exp(-\beta x^2) = -\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\beta x^2) = -\frac{d}{d\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{1}{2\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

mean square displacement
increases linearly with time

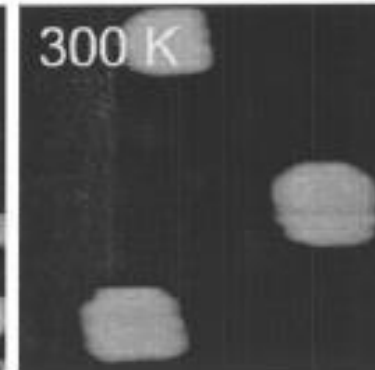
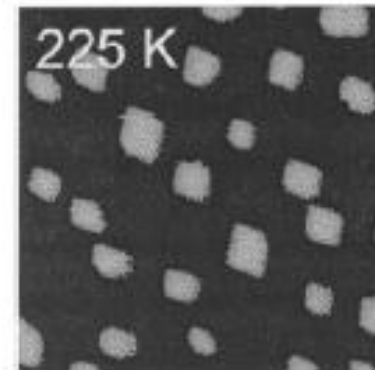
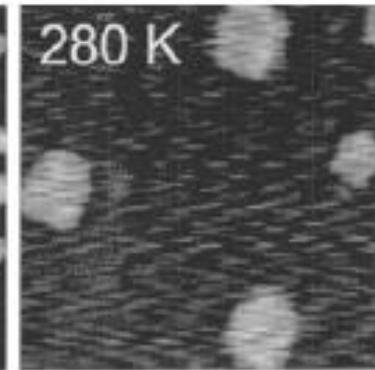
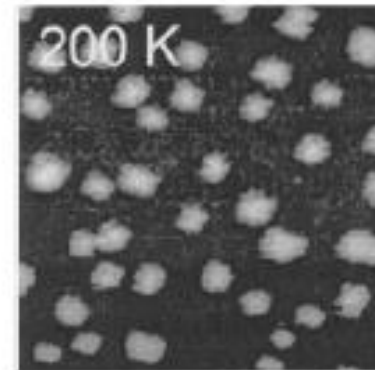
$$\langle x^2 \rangle = 2Dt$$

Kritische Keimgröße – Aufgabe 4.2

(1) $T = 295 \text{ K}$



(2) $R = 0,006 \text{ ML/s}$



$$N \propto R^{\frac{i}{i+2}} e^{\frac{iE_d + E_i}{(i+2)k_B T}}$$

Fundamental growth modes – 4.3

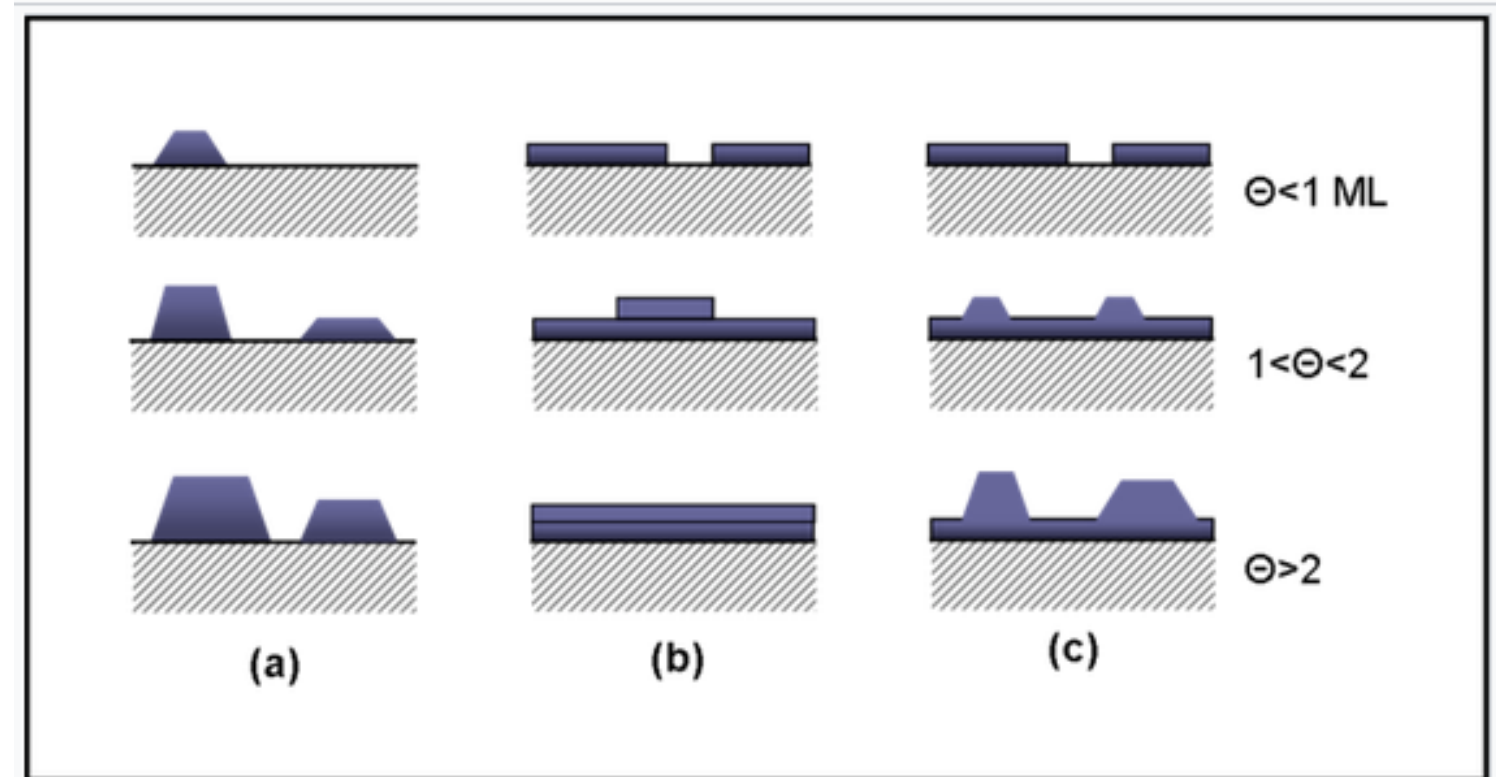


Figure 1. Cross-section views of the three primary modes of thin-film growth including (a) Volmer–Weber (VW: island formation), (b) Frank–van der Merwe (FM: layer-by-layer), and (c) Stranski–Krastanov (SK: layer-plus-island). Each mode is shown for several different amounts of surface coverage, Θ .