

Kap. 3 - Dopad elektronů na povrch

E. Tomková

[1],[2],[3],[6],[7],[11]

difrakce elektronů
kinematická teorie
inelastický rozptyl

Dopad elektronů na povrch pevné látky vede k následujícím procesům:

- a) odraz a elastický rozptyl elektronů (interakce s jádry) - při něm si elektrony zachovávají svou původní energii E_p
- b) neelastické interakce primárních elektronů s vodivostními elektrony
- c) interakce primárních elektronů s prostorovým nábojem (pohyblivých) valenčních - vodivostních elektronů a (nepohyblivých) iontových zbytků
- d) neelastické interakce primárních elektronů s elektrony na vnitřních hladinách
- e) elektrony přejdou zářivým přechodem na nižší volnou hladinu
- f) interakce s mřížkou - dochází k ohřevu látky
- g) interakce s atomy přítomnými na povrchu - s adsorbátem

Elastický rozptyl.

Při dopadu svazku elektronů na povrch dochází k jejich rozptylu - elastickému nebo neelastickému. Elastický rozptyl na atomových zbytcích představuje srážku s mnohonásobně těžší částicí, dochází tedy pouze ke změně směru a ne ke změně energie. Je-li elektronový svazek rovnoběžný a monochromatický s energií E_p , je možno ho popsat rovinnou vlnou o vlnovém vektoru \mathbf{k} , $k = \sqrt{8\pi^2 m E_p / h^2}$ (přesněji - místo E_p bychom měli v látce brát energii odečítanou ode dna vodivostního pásu). Jednotlivé atomové zbytky můžeme považovat za rozptylová centra, rozptýlená vlna má vlnový vektor o stejné velikosti jako vlna primární, ale může se šířit libovolným směrem. Jednotlivé rozptýlené vlny spolu interferují, při pravidelném uspořádání rozptylových center nebo jejich skupin (krystalická látka, atomární nebo molekulární) se v určitých směrech vzájemně zesilují - pozorujeme elektronovou difrakci.

Popis difraktujícího objektu.

Difraktující objekt popisujeme krystalickou mřížkou - *základními vektory translace* (mřížovými vektory) \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 a *elementární buňkou*, reprezentovanou bodem, jehož translací ve třech nezávislých směrech je krystalická mřížka vytvořena. Elementární buňka je tvořena libovolně, musí ovšem obsahovat alespoň ty atomy, které tvoří nejmenší opakující se motiv. Obsahuje-li pouze jeden atom, nazývá se *primitivní*. Poloha libovolného mřížového bodu krystalu je určována vektorem

$$\mathbf{a} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$$

h, k, l jsou celá čísla.

Krystal je možno popsat pomocí nekonečného počtu osnov rovin, tj. množin rovin vzájemně rovnoběžných a stejně vzdálených. Každá osnova je určena *orientací* - rovina nejbližší k počátku souřadnic vytíná na osách úseky $\pm a_1/h$, $\pm a_2/k$, $\pm a_3/l$, kde h, k, l jsou tzv. Millerovy indexy - a *mezirovinnou vzdáleností* d_{hkl} .

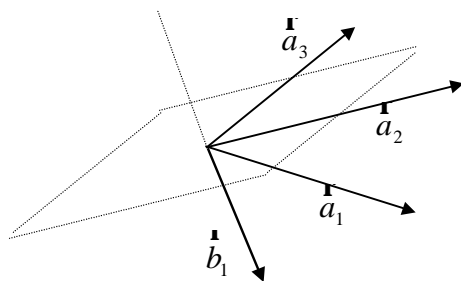
K přímé mřížce je konstruována mřížka *reciproká*, význam jejího zavedení je zřejmý z teorie difrakce, případně z teorie pásové struktury látek. Libovolný bod reciproké mřížky je opět možno popsat celočíselnými násobky základních vektorů $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$:

$$\mathbf{b} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

Mezi základními vektory přímé a reciproké mříže platí vztahy

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

nebo vztahy $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = d_{ij}$. Vektor \mathbf{b}_1 je tedy vždycky kolmý k vektorům $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; totéž platí cyklicky o vektorech $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$. Skalární součin libovolného vektoru přímé mříže s vektorem mříže reciproké dá celé číslo.



obr.3.1

Mezirovinné vzdálenosti je možno vyjádřit pomocí parametrů reciproké mříže:

$$\mathbf{b}_{hkl} \cdot \mathbf{b}_{hkl} = b_{hkl}^2 = \frac{1}{d_{hkl}^2}$$

a pro kubickou soustavu platí

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

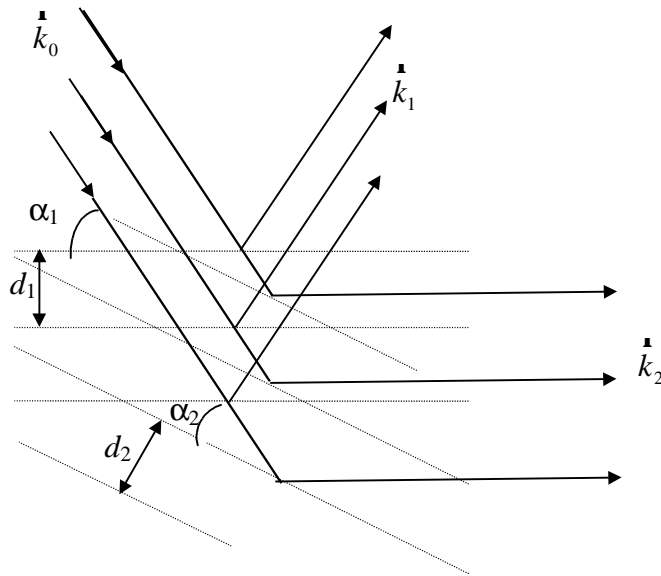
Ewaldova konstrukce.

Původní teorie popisovala elektronovou difrakci jako odraz elektronové vlny na jednotlivých systémech rovin (hkl), vyžadující splnění Braggovy podmínky

$$2d_{hkl} \sin \alpha = n\lambda$$

Přesnější popis - periodicky uspořádané atomové zbytky působí jako identická rozptylová centra (jako zdroje kulových vln), difrakční směr je dán *Laueovými podmínkami*: je-li dopadající vlna určena vlnovým vektorem \mathbf{k}_0 a rozptýlená vlna vektorem \mathbf{k} , oba o stejné velikosti k (energie se nemění), budou jednotkové vektory ve směru šíření vln $\mathbf{s}_0 = \mathbf{k}_0 / k$ a

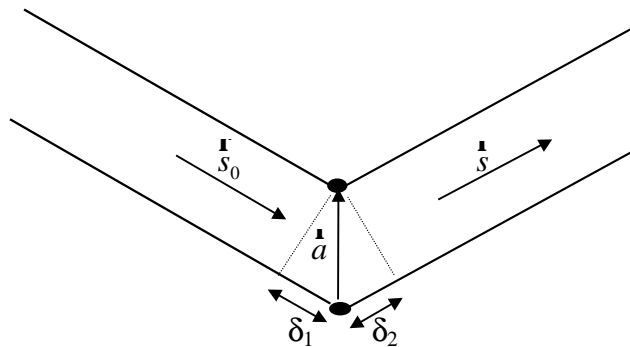
$$\mathbf{s} = \mathbf{k} / k$$



obr.3.2

Symbolem \vec{a} je označen vektor mřížce. Pro difrakční směr musí platit $(\delta_1 + \delta_2) = n \lambda$, tj.

$$-\vec{r} \cdot \vec{s}_0 + \vec{r} \cdot \vec{s} = \frac{\vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}{k} = l$$



obr.3.3

neboli

$$\vec{a} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2 p n$$

Při rozptylu na trojrozměrné mřížce musí výše uvedený vztah platit ve třech vzájemně nezávislých směrech - můžeme je popsat základními vektory mřížky \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 . Takto vzniklé tři vztahy

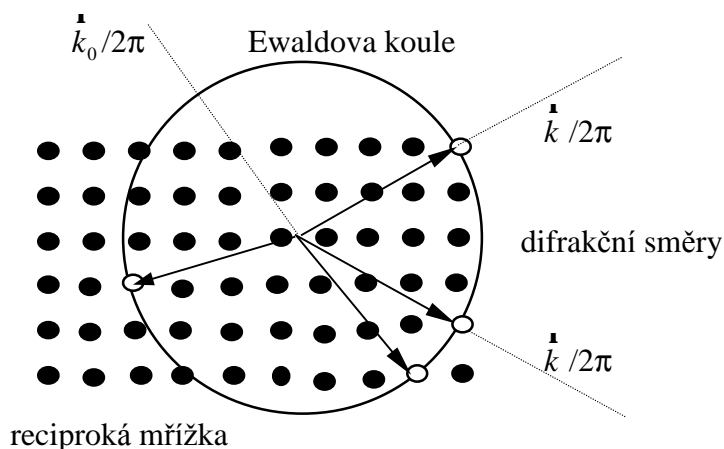
$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) &= 2p n_1 \\ \mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) &= 2p n_2 \\ \mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) &= 2p n_3 \end{aligned}$$

ukazují pro libovolný vektor mřížky $\mathbf{a} = u \cdot \mathbf{a}_1 + v \cdot \mathbf{a}_2 + w \cdot \mathbf{a}_3$ (u, v, w celé), že difrakční směr \mathbf{k} musí splňovat podmínku $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2p$. celé číslo.

Protože pro libovolné vektory přímé a reciproké mřížky platí $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \text{celé číslo}$, je tato podmínka splněna tehdy, je-li difrakční vektor $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \equiv \mathbf{K}$ 2π -násobkem libovolného vektoru reciproké mřížky:

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \equiv \mathbf{K} = 2p \mathbf{b} \quad (3.1)$$

Na tomto poznatku je založena tzv. *Ewaldova konstrukce* (obr.3.4), umožňující sestavit difrakční směry pro danou strukturu a orientaci zkoumané krystalické látky a pro dopadající monochromatickou vlnu.

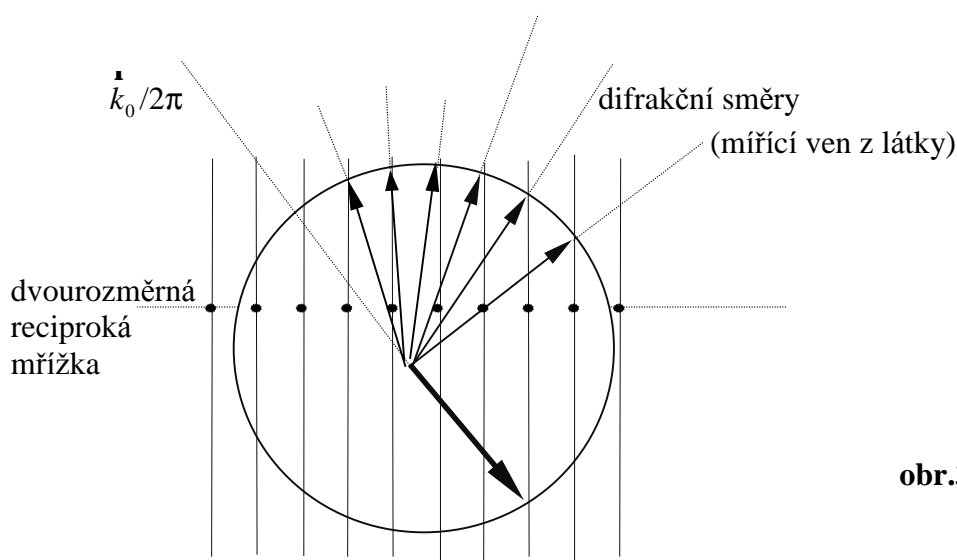


Látka je charakterizována reciprokou mřížkou. Dopadající a rozptýlenou vlnu popíšeme vektory $\mathbf{k}_0/2\pi$ a $\mathbf{k}/2\pi$, které mají stejnou velikost; při společném počátku bude tedy geometrickým místem jejich koncových bodů koule o poloměru $k/2\pi$. Aby byla splněna podmínka difrakce, musí být rozdíl vektorů $\mathbf{k}_0/2\pi$ a $\mathbf{k}/2\pi$ - tj. vektor spojující jejich koncové body - vektorem reciproké mřížky. Jeho počátek a konec tedy musí současně ležet na povrchu koule a v bodech této mřížky. Libovolné dva body mřížky ležící na povrchu Ewaldovy koule pak udávají difrakční vektor \mathbf{K} ($\mathbf{K}/2\pi$), směr vektoru \mathbf{k} je difrakčním směrem.

Ewaldova konstrukce pro povrchovou difrakci.

Pro difrakci, které se účastní jen povrchová vrstva atomů, má Ewaldova konstrukce (obr.3.5) poněkud jinou podobu. Důležitost třetího rozměru - směru kolmo k povrchu - se

ztrácí, přítomnost atomů v dalších vrstvách neuvažujeme. Definujeme dvourozměrnou povrchovou mřížku $\vec{a}_{1S}, \vec{a}_{2S}$, jejíž libovolný vektor \vec{a} leží v rovině povrchu. Podmínka $\vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2p \cdot \text{celé číslo}$ se tedy týká jen složky vektoru \vec{K} rovnoběžné s povrchem, $\vec{K}_{||}$. Složka k povrchu kolmá, \vec{K}_{\perp} , může být libovolná. Prvky reciproké mřížky pak budou přímky kolmé k povrchu, procházející body dvourozměrné reciproké mřížky, jejíž vektory rovněž leží v rovině rovnoběžné s povrchem a jsou od vektorů $\vec{a}_{1S}, \vec{a}_{2S}$ odvozeny pravidlem $\vec{r}_{iS} \cdot \vec{b}_{jS} = d_{ij}$. Difrakčních směrů je samozřejmě více než kolik by odpovídalo objemové difrakci.

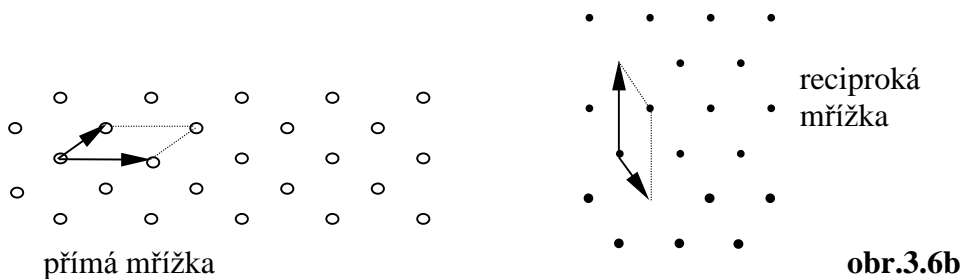
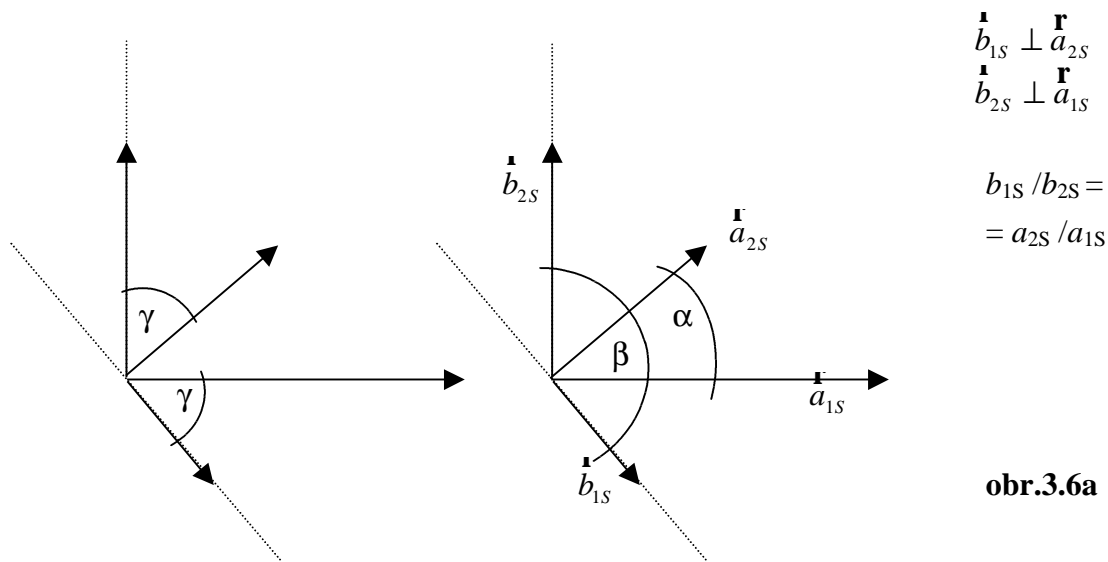


obr.3.5

Symetrie povrchu a difrakčního obrazu.

Dvourozměrná reciproká mřížka má stejnou symetrii jako dvourozměrná mřížka přímá, je jen vůči ní pootočená o 90° . Na difrakčním obrazu tedy přímo pozorujeme symetrii povrchu. Tato skutečnost je zřejmá z následujícího:

Úhel mezi vektory $\vec{a}_{1S}, \vec{a}_{2S}$ označíme α , mezi \vec{b}_{1S} a \vec{b}_{2S} β , úhly mezi dvojicemi vektorů $\vec{a}_{1S}, \vec{b}_{1S}$ a $\vec{a}_{2S}, \vec{b}_{2S}$ symboly γ_1, γ_2 . Výraz $\vec{a}_{iS} \cdot \vec{b}_{jS} = d_{ij}$, znamenající, že pro $i \neq j$ je $\vec{a}_{iS} \perp \vec{b}_{jS}$ a $a_{iS} \cdot b_{iS} \cos \gamma_i = 1$, dává následující vztahy: 1) hodnota γ_i leží mezi 0 a $\pi/2$ (kladný skalární součin). 2) $\gamma_1 = \gamma_2$, $b_{1S}/b_{2S} = a_{2S}/a_{1S}$ (kolmost vektorů $\vec{a}_{iS}, \vec{b}_{jS}$). 3) $\beta = \pi - \alpha$ (důsledek předchozích dvou vztahů). Výsledná symetrie je zřejmá z obr.3.6a,b.



Povrchovost difrakce závisí na energii a směru dopadu primárního svazku elektronů, tj. na hloubce jeho průniku do difraktující látky a na schopnosti rozptýlené elektronové vlny opět z látky vystoupit. Průnik i úniková hloubka jsou dány střední vlnovou dráhou elektronu v látce, která je funkcí jeho energie; při elastickém rozptylu jsou tedy obě výše uvedené veličiny stejné.

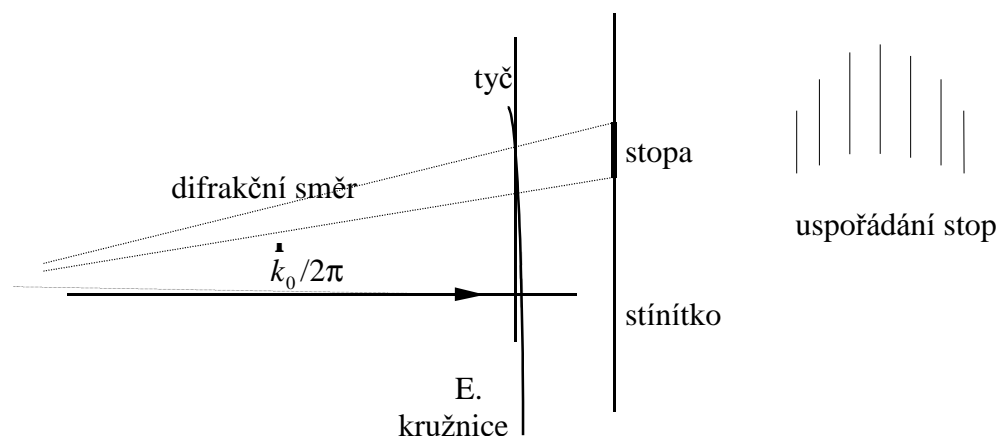
Nejmenší průnik, $\sim 4\text{\AA}$, mají elektrony, jejichž energie činí $\sim 100\text{ eV}$. Metoda používající energie v okolí této hodnoty - *LEED* - je tedy vysoce povrchová. Při jejím použití je vlnová délka elektronů

$$\lambda[\text{nm}] = 0,1 \sqrt{150/E[\text{eV}]} \quad (3.2)$$

řádově srovnatelná s meziatomární vzdáleností a velikost vlnového vektoru s velikostí základních vektorů reciproké mříže. Úhel mezi jednotlivými difrakčními směry, které můžeme pozorovat, je tedy velký, jak to naznačuje obr.3.5 a stopy na stínítku jsou dobře rozlišitelné. Obvyklé experimentální uspořádání je na obr.1.16.

Ziskáváme-li difrakční obraz povrchu metodou *RHEED*, tj. elektronovým svazkem o energii několika desítek až stovek keV, je hloubka průniku (a hloubka informace) dána jen

tu částí energie elektronů, která je spojena se složkou jejich rychlosti kolmou k povrchu. Malá hloubka průniku je tedy zajištěna tím, že dopadající svazek je s povrchem téměř rovnoběžný (odchylka několika málo °). Jak vyplývá z Ewaldovy konstrukce, bude získaný obraz odlišný od obrazu, daného difrakcí pomalých elektronů.



obr.3.7

Monokrystalický atomárně hladký povrch: délka vlnového vektoru je mnohem menší než základní vektory reciproké mřížky (vzdálenost Ewaldových tyčí) \Rightarrow poloměr Ewaldovy koule je velký, v místě průsečíků s tyčemi, které určují pozorovatelné difrakční směry, je povrch koule téměř rovinný. Protože energie elektronů i poloha rozptylových center vykazují malý, ale konečný rozptyl, mají přímky reciproké mřížky (často se nazývají tyče - „rods“) i Ewaldova koule (téměř rovina) konečný rozměr a stopy nejsou bodové, ale jsou to úsečky, uspořádané do obloučku (viz obr.3.7).

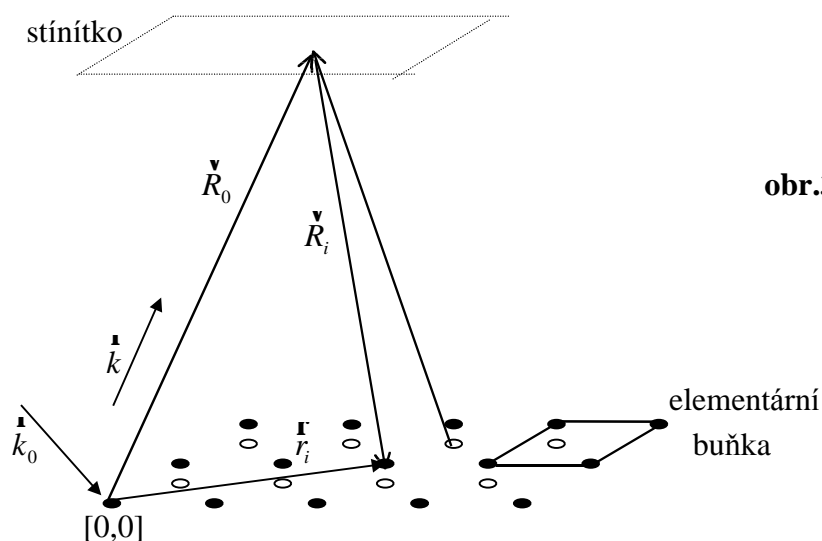
Monokrystalický povrch s nerovnostmi: pokud jsou nerovnosti malé, elektronový svazek jimi projde (obr.1.17) a kromě povrchové difrakce vznikne i difrakce objemová, charakterizovaná bodovými stopami. Výsledný difrakční obraz je kombinací obou typů difrakcí.

Výše uvedená Ewaldova konstrukce bere v úvahu jen geometrické uspořádání rozptylových center v povrchové rovině. Vliv počtu center a jejich struktury, která může být složitá v případě, že rozptylovými centry jsou skupiny atomů např. na povrchu s adsorbátem nebo v molekulárních krystalech, vysvětluje kinematická teorie - opět zjednodušeně, neboť předpokládá jen jednoduchý rozptyl, vícenásobné rozptylové jevy zanedbává. Vícenásobným rozptylem, zahrnujícím rozptyl na několika atomárních rovinách, se zabývá velmi složitá teorie dynamická.

Kinematická teorie.

Kinematická teorie vychází z představ o atomových zbytcích - rozptylových centrech, které jsou zdroji kulových vln. Tyto vlny je možno v dostatečné vzdálenosti vyšetřovat jako vlny rovinné, určené jen vlnovým vektorem. Případná úhlová závislost jejich intenzity je dána charakterem rozptylu.

Na povrch s pravidelným uspořádáním atomů dopadá rovinná vlna s vlnovým vektorem \vec{k}_0 , skládání vln rozptýlených jednotlivými atomy vyšetřujeme v určitém místě stínítka charakterizovaném vektorem \vec{R}_0 , určujícím vyšetřovaný směr difrakce \vec{k} (viz obr.3.8). Protože vzdálenost vyšetřovaného místa od povrchu (velikost vektoru \vec{R}_0) je mnohem větší než vzdálenost atomů i než lineární rozměr koherenční oblasti (maximálně několik set Å), dopadnou rozptýlené vlny na stínítko prakticky se stejnou amplitudou. Podstatné je ovšem to, že se liší svými fázemi. Rozdíl fází získaly jednak na rozdílných drahách, které dopadající vlna potřebovala k dosažení jednotlivých atomů a jednak na drahách od rozptylových center k vyšetřovanému místu na stínítku.



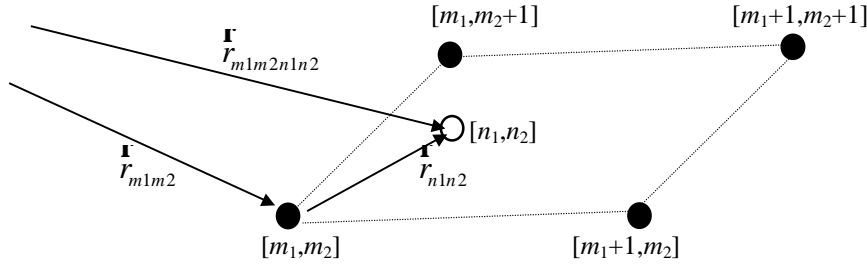
obr.3.8

Pro výpočet zvolíme na povrchu referenční bod - počátek $[0,0]$, a jako referenční nulovou fázi označíme fázi vlny dopadající do tohoto bodu. Vlna dopadající na atom, jehož poloha je popsána vektorem \vec{r}_i , pak bude mít fázi $\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_i$ a vlna rozptýlená tímto atomem získá na dráze ke stínítku další fázové posunutí $\vec{k} \cdot \vec{R}_i$.

Atom o polohovém vektoru \vec{r}_i je součástí j -té elementární buňky, reprezentované mřížkovým bodem. Polohu buňky vůči počátku můžeme popsat celými čísly m_1, m_2 : $\vec{r}_{m_1 m_2} \equiv \vec{a}_j = (m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2)$. Podobně lze vyjádřit i polohu atomu v buňce: $\vec{r}_{n_1 n_2} = (n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2)$, čísla n_1, n_2 jsou kladná a menší než 1 (viz obr.3.9). Protože stejné atomy mají stejnou polohu ve všech buňkách, vypovídají čísla n_1, n_2 i o typu příslušného atomu. Pro vektory \vec{r}_i a \vec{R}_i platí (obr.3.9)

$$\vec{r}_i \equiv \vec{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2} = \vec{r}_{m_1 m_2} + \vec{r}_{n_1 n_2} = (m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2) + (n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2)$$

$$\vec{R}_0 = \vec{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2} + \vec{R}_{m_1 m_2 n_1 n_2}, \quad \vec{R}_{m_1 m_2 n_1 n_2} = \vec{R}_i$$



obr.3.9

Ve vyšetřovaném místě na stínítku je výsledná elektronová vlna Ψ dána sumou příspěvků od jednotlivých atomů. Vyjádříme ji následujícím výrazem:

$$\Psi = \sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} \Psi_{m_1 m_2 n_1 n_2} = \sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} A_{m_1 m_2 n_1 n_2} \exp(-i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{m_1 m_2 n_1 n_2}) \quad (3.3)$$

Amplituda j -tého příspěvku, $A_{m_1 m_2 n_1 n_2}$, je dána jednak intenzitou dopadající vlny a vzdáleností $R_0 \equiv R_{m_1 m_2 n_1 n_2}$ (tyto příspěvky k její velikosti jsou stejné pro všechna rozptylová centra) a jednak rozptylovými schopnostmi atomu, tj. atomovým faktorem $f \equiv f_{n_1 n_2}$. Bude tedy

$$A_{m_1 m_2 n_1 n_2} = A \cdot f_{n_1 n_2} \quad (3.4)$$

a

$$\begin{aligned} \Psi &= A \sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} f_{n_1 n_2} \exp(-i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2}) \exp\{-i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_0 - \mathbf{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2})\} \\ &= A \sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} f_{n_1 n_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_{m_1 m_2 n_1 n_2}\} \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0) \\ &= A \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0) \sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} f_{n_1 n_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot [(m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2) + (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2)]\} \\ &= A \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0) \cdot \sum_{m_1 m_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot (m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2)\} \sum_{n_1 n_2} f_{n_1 n_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2)\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

kde označíme $G(\mathbf{K}) \equiv \sum_{m_1 m_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot (m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2)\}, \quad (3.6a)$

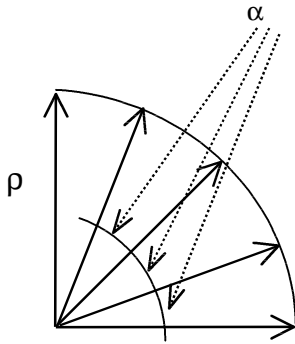
$$F(\mathbf{K}) \equiv \sum_{n_1 n_2} f_{n_1 n_2} \exp\{-i (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2)\} \quad (3.6b)$$

Činitel $G(\mathbf{K})$ závisí jen na uspořádání bodů povrchové mřížky a nazývá se geometrický faktor. Je-li pro vyšetřovaný směr \mathbf{k} splněna podmínka difrakce, tj. $\mathbf{K} \equiv (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) = 2\pi \mathbf{b}$, má každý člen sumy hodnotu 1, protože $\mathbf{b} \cdot (m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2)$ je celé číslo pro libovolná m_1, m_2 , jak plyne z definice reciproké mřížky. Suma pak bude mít maximální hodnotu. Činitel $F(\mathbf{K})$ je odvozen pouze od uspořádání a vlastností atomů v buňce, nazývá se strukturní faktor. I při splnění difrakční podmínky může být nulový nebo komplexní (n_1, n_2 nemusí být celá čísla).

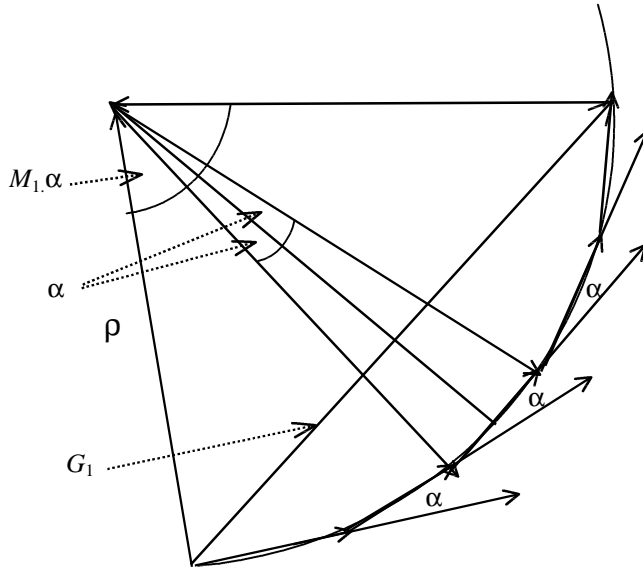
Protože je intenzita elektronového svazku I ve vyšetřovaném místě (pravděpodobnost výskytu) úměrná Ψ^2 , bude

$$I \approx G^2 \cdot F^2 \quad (3.7)$$

K určení velikosti geometrického faktoru a jeho závislosti na směru \hat{k} , v němž pozorujeme



obr.3.10



obr.3.11

rozptyl, je možno použít vektorové sčítání amplitud. Protože m_1, m_2 jsou vzájemně nezávislá, můžeme psát

$$G = \sum_{m_1 m_2} \exp\{-i(\hat{k}_0 - \hat{k}) \cdot (m_1 \hat{a}_1 + m_2 \hat{a}_2)\}$$

$$= \sum_{m_1} \exp\{i \hat{K} m_1 \hat{a}_1\} \sum_{m_2} \exp\{i \hat{K} m_2 \hat{a}_2\} = G_1 G_2.$$

Každý ze součinitelů představuje součet exponenciál, např.

$$G_1 = 1 + \exp\{i \hat{K} \hat{a}_1\} + \exp\{2i \hat{K} \hat{a}_1\} + \exp\{3i \hat{K} \hat{a}_1\} + \dots$$

Všechny sčítance mohou být znázorněny vektory v Gaussově rovině (obr.3.10). Mají velikost 1 a fázově jsou posunuty o stejný úhel $\alpha = \hat{K} \hat{a}_1$ (obr.3.11) Celkový počet sčítanců je M_1 (M_2 v případě G_2). Mohou být vektorově sečteny (obr.3.11).

Z obr.3.11 je zřejmé, že pro jednotlivé sčítance (velikosti vektorů) a pro jejich součet platí vztahy

$$\frac{1/2}{r} = \sin\left(\frac{a}{2}\right), \quad \frac{G_1/2}{r} = \sin\left(\frac{M_1 a}{2}\right)$$

a tedy

$$G_1 = \frac{\sin\left(\frac{M_1 a}{2}\right)}{\sin\left(\frac{a}{2}\right)} \quad (3.8)$$

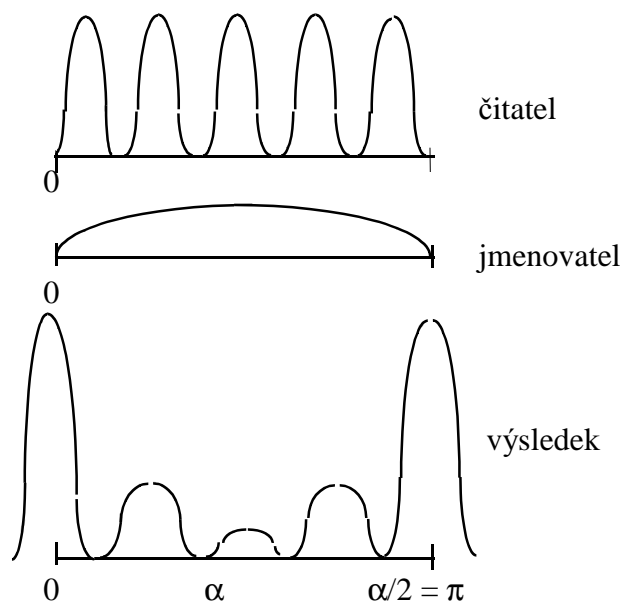
Podobně

$$G_2 = \frac{\sin\left(\frac{M_2 b}{2}\right)}{\sin\left(\frac{b}{2}\right)}, \quad \beta = \frac{\mathbf{r}}{K a_2} \quad (3.9)$$

a tedy

$$I \approx \frac{\sin^2\left(\frac{M_1 a}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{a}{2}\right)} * \frac{\sin^2\left(\frac{M_2 b}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{b}{2}\right)} \quad (3.10)$$

Grafické znázornění prvního činitele (na obr.3.12 uvedeno pro $M_1=5$) objasní vliv počtu rozptylových center na velikost difrakční stopy.



obr.3.12

Měníme-li vyšetřovaný difrakční směr $\frac{\mathbf{r}}{K}$, mění se úhel $\alpha = K \frac{\mathbf{r}}{a_1}$. Šířka stopy je nepřímo úměrná počtu sčítanců (a tedy úměrná $1/M_1$), výška krajní - největší - stopy je dána výrazem

$$\lim \frac{\sin^2\left(\frac{M_1 a}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{a}{2}\right)}$$

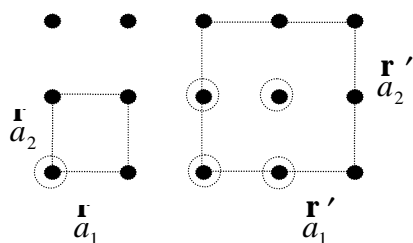
pro $\alpha=0, 2\pi, 4\pi, \dots$ tj. pro \mathbf{K} splňující podmínku difrakce $\mathbf{K} = 2\pi \mathbf{b}$ (nebo $\mathbf{K} \cdot \mathbf{a} = 2\pi l$, l je celé číslo). Hodnota limity je $[(M_1\alpha/2)/(\alpha/2)]^2 = M_1^2$.

Intenzitní profil difrakční stopy, tj závislost její intenzity na směru rozptylu (na stínítku je to závislost na vzdálenosti od středu stopy) je tedy dán počtem rozptylových center: maximální intenzita je $M_1^2 \cdot M_2^2$, stopa je široká ve směru kolmém na reálný směr obsahující malý počet center a úzká ve směru kolmém na reálný směr s velkým počtem center.

Vlivem strukturního faktoru ovšem mohou některé stopy vyhasnout. Jako příklad, na němž je předveden význam strukturního faktoru, je proveden rozbor vlivu volby elementární buňky atomárně čistého povrchu, rovina sc(100). Volba buňky nepodléhá žádným pravidlům (jen konvenci), difrakční obraz na ní samozřejmě nemůže záviset.

Volba 1 (obr.3.13): mřížkové vektory jsou $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, elementární buňka je primitivní (jeden atom v kroužku)

Volba 2 (obr.3.13): mřížkové vektory jsou $\mathbf{a}'_1 = 2\mathbf{a}_1, \mathbf{a}'_2 = 2\mathbf{a}_2$, elementární buňka obsahuje 4 atomy (v kroužku). Z Ewaldovy konstrukce vyplyne difrakční obraz o dvojnásobné hustotě stop než při volbě 1.



obr.3.13

Buňka $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$: jedno rozptylové centrum (počet sčítanců ve strukturním faktoru) 1, $n_1=n_2=0$, stejné atomy $f_{n_1n_2} = f$. Pro strukturní faktor platí

$$F(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \sum_{n_1n_2} f_{n_1n_2} \exp\{i \mathbf{K} (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2)\} = f.$$

Všechny stopy odpovídající geometrickému faktoru se objeví se stejnou intenzitou. Tato intenzita bude $M_1^2 M_2^2 \cdot f^2$.

Buňka $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2$: počet center 4, n_1, n_2 : [0,0], [0,1/2], [1/2,0], [1/2,1/2], $f_{n_1n_2} = f$,

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2) &= \sum_{n_1n_2} f_{n_1n_2} \exp\{i \mathbf{K} (n_1 \mathbf{a}'_1 + n_2 \mathbf{a}'_2)\} = \\ &= f \cdot [1 + \exp\{i \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}'_1 / 2\} + \exp\{i \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}'_2 / 2\} + \exp\{i \mathbf{K} \cdot (\mathbf{a}'_1 + \mathbf{a}'_2) / 2\}] \end{aligned}$$

Pro difrakční stopy ($\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_i = 2l_i \pi$) bude: $l_1/2, l_2/2$ sudé $f \cdot [1+1+1+1] = 4f$

$$l_1/2 \text{ sudé}, l_2/2 \text{ liché} \quad f \cdot [1+1-1-1] = 0$$

$$l_1/2 \text{ liché}, l_2/2 \text{ sudé} \quad f \cdot [1-1+1-1] = 0$$

$$l_1/2, l_2/2 \text{ liché} \quad f \cdot [1-1-1+1] = 0$$

V obou směrech se tedy uplatní jen každá druhá stopa, jejich intenzita bude $M_1'^2 \cdot M_2'^2 \cdot 16f^2$. Protože ale při volbě dvojnásobné buňky je $M_i' = M_i/2$, bude výsledná intenzita nevyhaslých stop opět $M_1^2 M_2^2 \cdot f^2$. Obraz je v obou případech stejný.

Inelastický rozptyl, sekundární emise.

Je částečně přednášeno v rámci přednášky F 070, Elektronika pevných látek. Podrobněji v [1], [2].

Elektrony vstupující do látky:

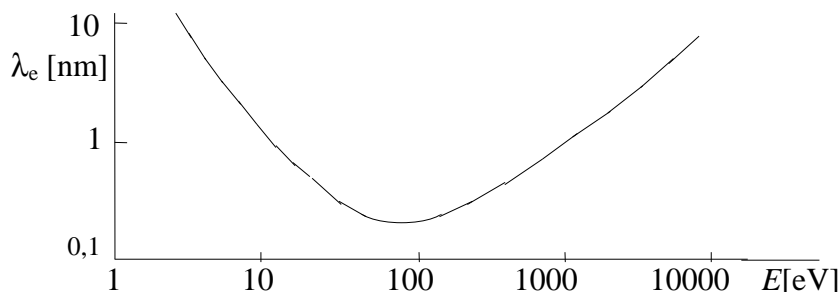
Kinetické energii E_p , s níž elektrony dopadají z vakua na povrch, odpovídá v látce hladina, vzdálená ode dna vodivostního pásu o $(E_p + E_a)$. E_a je elektronová afinita látky.

Interakce s látkou:

- Elektrony mohou interagovat - s jednotlivými atomy látky (iontovými zbytky)
- s vodivostními (valenčními) elektrony (malé E_p)
 - s prostorovým nábojem elektronů + iontů (velké E_p)
 - s mřížkou jako celkem (fonony)
 - s atomy adsorbátu

Interakce mohou být *elastické* nebo *inelastické*.

Elastické interakce odpovídají interakcím s atomy, při nichž nejsou excitovány jejich vnitřní elektrony. Jak bylo uvedeno v předchozí části této kapitoly, zachovává si



obr.3.14

interagující elektron svou původní energii, mění jen směr svého pohybu. Výsledkem je odraz elektronů s energií E_p , v případě pravidelného uspořádání atomů difrakce. Do skupiny pružně odražených elektronů se často řadí i ty elektrony, které prodělaly interakci s fonony nebo - u elektronů s vyšší primární energií - i ty, které vybudily přechod mezi rotačními stavy adsorbátu, protože odpovídající ztráta energie je zanedbatelně malá (cca desítky meV).

Při *inelastické interakci* předá interagující elektron druhému objektu část své energie. Pokud vystoupí z látky po jedné interakci s dobře definovanou energetickou ztrátou, zařadí se do skupiny elektronů *charakteristických ztrát* (jde o vybudění plazmonů, o ionizační ztráty nebo o výše zmíněné vybudění vibračního spektra adsorbátu).

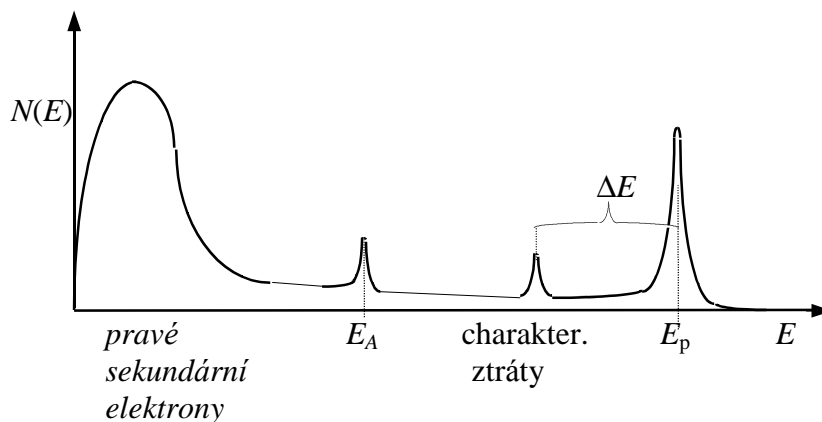
Inelastické interakce jsou provázeny *deexcitačními procesy* (vznik Augerových elektronů, vznik kvant $h\nu$, předávání energie mříži).

Výstup elektronů do vakua (primárních pružně nebo nepružně odražených i elektronů, vzniklých při interakcích) je podmíněn jejich *transportem* k povrchu a *výstupem z látky přes povrchovou bariéru*.

Transport je charakterizován *střední volnou dráhou* λ_e elektronů. λ_e je střední hodnota dráhy, po jejímž proběhnutí dojde k nepružné srážce elektronu, při níž se jeho energie mění. Tato střední volná dráha závisí na energii elektronů; pro kovy je závislost $\lambda_e(E)$ popsána universální křivkou (obr.3.14), jejíž minimum leží v bodě o souřadnicích cca 100 eV, 0,4nm. Tato křivka nezahrnuje vliv tzv. *kanálování*, které se projevuje u monokrystalů a představuje snazší postup elektronů podél nízkoindexových (hustých) rovin.

Výstup z látky přes povrchovou bariéru:

Předpokládáme-li izotropní pohyb elektronů, můžeme pomocí jednoduchých úvah určit velikost pravděpodobnosti toho, že elektrony mající energii E překonají povrchovou bariéru a vystoupí do vakua. Povrchovou bariéru popíšeme elektronovou afinitou E_a . Elektrony s energií E , pohybující se v určitém směru, mohou překonat bariéru jen tehdy, splňují-li následující podmínku: nejen jejich celková energie, ale i kinetická energie spojená se složkou rychlosti kolmou k povrchu musí být větší než elektronová afinita E_a . Splnění této podmínky vymezení prostorový úhel, v němž se pohybují elektrony schopné výstupu - označíme ho ϑ_v . Poměr tohoto úhlu k celkovému úhlu, v němž se pohybují elektrony mířící směrem k povrchu, pak udává pravděpodobnost výstupu $P(E)$, tj. $P(E) = \vartheta_v / 2\pi = [1 - (E_a/E)^2]^{1/2}$. Někdy se uvádí celý prostorový úhel, $P(E) = \vartheta_v / 4\pi$.



obr.3.15

Pozorované důsledky dopadu elektronů:

- sekundární elektronová emise
- emise elektromagnetického. záření
- elektronově stimulovaná desorpce
- ohřev látky

Informace o látce a procesech:

Sekundární emise - na energetickém rozdělení $N(E)$ (obr.3.15) pozorujeme přítomnost charakteristických píků:

Augerovy elektrony (stálá poloha na energetické škále, E_A)

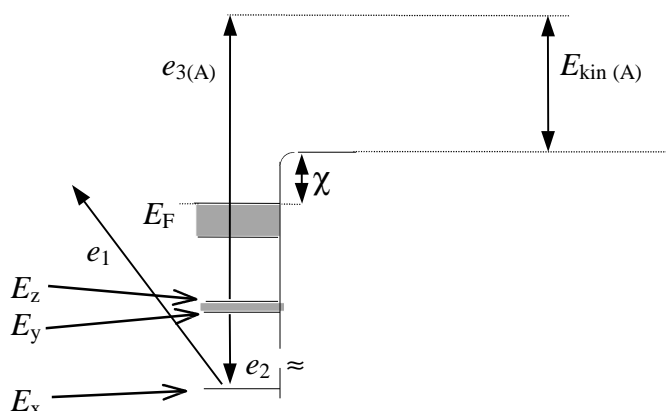
charakteristické ztráty (stálý odstup od energie budících elektronů)

Emise elektromagnetického. záření - deexcitace vnitřních hladin zářivým přechodem (SXAPS)

přechod primárního elektronu na hladinu nad E_F - studium neobsazených hladin (inverzní fotoelektronová spektroskopie)
Elektronově stimulovaná desorpce - typ adatomů, vazba

Augerovy elektrony:

Vznikají následujícím procesem (viz obr.3.16): dopadající elektron, jehož energie činí obvykle několik keV, předá energii elektronu e_1 na některé z vnitřních hladin atomu látky E_x a převede ho na neobsazenou hladinu nad Fermiovou hladinou E_F . Následuje deexcitační

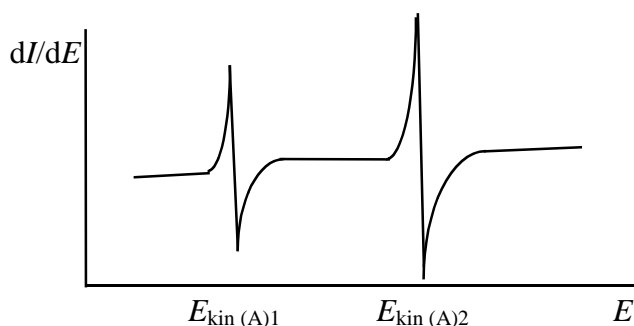


obr.3.16

proces - díra po excitovaném elektronu se zaplní elektronem e_2 z hladiny E_y . Přitom se uvolní množství energie odpovídající rozdílu těchto hladin, tj. $E_y - E_x$. Tato energie se předá dalšímu elektronu $e_{3(A)}$, který leží na hladině E_z . Je-li tato energie dostatečně velká, elektron vystoupí z látky jako Augerův elektron s kinetickou energií $E_{kin(A)}$. Pro tuto energii platí vztah

$$E_{kin(A)} = E_y - E_x - (E_F - E_z) - \chi \quad (3.11)$$

Při jejím číselném vyhodnocování je třeba vzít v úvahu skutečnost, že hladina, z níž je Augerův elektron uvolňován, je poněkud pozměněna relaxačními jevy souvisejícími s emisí elektronů.



obr.3.17

Spektra, obsahující Augerovy píky, jsou obvykle uváděna v modu první derivace (dI/dE , obr.3.17). Jednotlivým prvkům příslušejí charakteristické skupiny píků, každý z nich pro jinou kombinaci hladin E_x , E_y , E_z .

Elektrony, které se v energetickém rozdělení objevují s určitým energetickým odstupem před elasticky odraženými elektrony, jsou primární elektrony, které vystoupily z povrchu poté, co

utrpěly charakteristickou ztrátu. Podobně se elektrony charakteristických ztrát mohou objevovat i před Augerovými elektrony.

Nejčastější charakteristické ztráty:

vybuzení plazmonů (u kovů, kmity prostorového náboje), $\Delta E \approx 5 - 50 \text{ eV}$.

vybuzení mezipásových a vnitropásových přechodů, $\Delta E \approx 3 - 20 \text{ eV}$

vybuzení vibrací adsorbovaných atomů, $\Delta E \approx 50 - 500 \text{ meV}$

ztráty na fononech (zanedbatelně malé).