



Technika LEED wykorzystuje dyfrakcję elektronów o niskich energiach w celu odtworzenia struktur krystalicznych na powierzchniach. Doświadczenie przeprowadzono na modelowych półprzezroczystych wzorach periodycznych, przy użyciu światła laserowego zamiast elektronów. Wykonano rekonstrukcje struktur powierzchniowych i zbadano ich parametry.

## Struktura powierzchni krystalicznej

Powierzchnię krystaliczną można otrzymać przecinając kryształ wzdłuż pewnej płaszczyzny. Na powierzchni przeciętego kryształu równowaga energetyczna jest zaburzona przez brak oddziaływania z jednej strony płaszczyzny. Na skutek dyfuzji lub adsorpcji struktura powierzchni zmienia się (ulega rekonstrukcji) i osiąga nową statyczną konfigurację. Często występujące motywy na powierzchniach zrekonstruowanych to *dimery*, czyli atomy połączone w pary albo *brakujące rzędy*. Ciekawa i skomplikowana rekonstrukcja zachodzi na powierzchni krzemu Si. Jako kombinacja *dimerów*, *brakujących atomów* i przesunięć powstaje heksagonalna powierzchnia (7x7).

## Dyfrakcja na powierzchni

Rozważa się monochromatyczną wiązkę światła padającą na dwuwymiarową powierzchnię, przez którą transmisja określona jest funkcją  $f(x,y)$ . Korzystając z przybliżenia dalekiego pola oraz zakładając, że funkcja jest periodyczna:  $f(x,y) = f(x+na_1, y+ma_2)$  (gdzie  $n$  i  $m$  są liczbami całkowitymi) można otrzymać amplitudę wektora fali elektromagnetycznej ugiętej na strukturze powierzchniowej. Wektory  $\mathbf{a}_1$  i  $\mathbf{a}_2$  nazywa się stałymi sieci rzeczywistej, a wektor  $\Delta\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ , skonstruowany ze składowych wektora falowego  $\mathbf{k}$ , jest parametrem określającym kierunek propagacji ugiętej fali. Natężenie światła w punkcie wskazywanym przez wektor  $\mathbf{R}_0$  wynosi:

$$I(k_x, k_y) = \left| \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0}}{R_0} \iint_A f(x,y) e^{i(k_x x + k_y y)} dx dy \right|^2 = \frac{1}{R_0^2} \left| \iint_s f(x,y) e^{i(k_x x + k_y y)} dx dy \right|^2 \left[ \frac{\sin \frac{N}{2} \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1}{\sin \frac{1}{2} \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} \right]^2 \left[ \frac{\sin \frac{M}{2} \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}{\sin \frac{1}{2} \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \right]^2$$

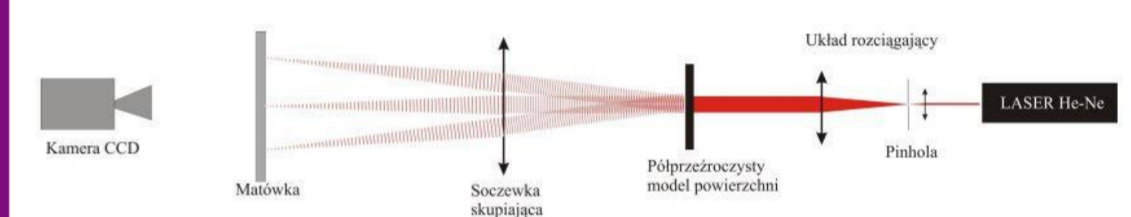
człon strukturalny      efekt periodycznej struktury

W pierwszym wzorze całkowanie wykonuje się po całkowitej powierzchni modelu  $A$ , a w drugim po powierzchni komórki elementarnej  $s$ . W pierwszym wzorze znajduje się transformata Fouriera funkcji  $f(x,y)$ . Drugi człon drugiego wzoru wynika z periodyczności struktury i nie zależy od  $f(x,y)$ , a jedynie od stałych sieci i rozmiarów modelu określonych przez liczby  $N$  i  $M$ . Wynikają z niego warunki Lauego dla wektorów sieci odwrotnej zdefiniowanych jako  $\Delta\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ , określających kierunki dla których zachodzi konstruktywna interferencja światła.

$$\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi n, \quad \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi m, \quad n, m \in \mathbb{Z}$$

## Układ pomiarowy

Modele powierzchni (klisze) umieszczano wewnątrz rzutnika i wyświetlano obrazy sieci rzeczywistych na ekranie. Obrazy rejestrowano kamerą CCD. Następnie wykorzystano układ przedstawiony na schemacie w celu zapisania obrazów dyfrakcyjnych.



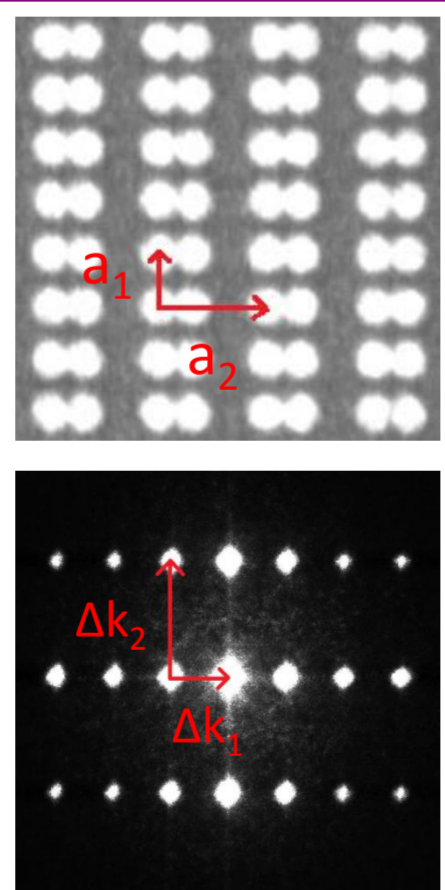
Na rysunku od lewej: kamera, matówka, soczewka skupiająca, model powierzchni, kolimator, pinhola, laser He-Ne.

Źródło: Instrukcja do ćwiczenia Z17.

## Sprawdzenie warunków Lauego

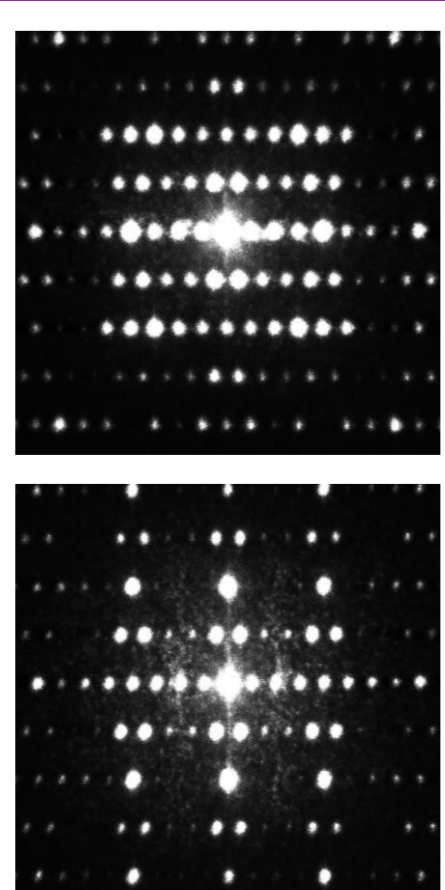
Na rzeczywistych i dyfrakcyjnych obrazach zaznaczono stałe sieci. Na podstawie ich długości sprawdzono warunki Lauego (z dokładnością do stałej wynikającej z zastosowanego w układzie powiększenia obrazów). W granicy błędu 3% otrzymano jednakowe wartości odpowiednich iloczynów skalarnych dla 10 badanych modeli (7 sieci kwadratowych i 3 heksagonalne).

Obraz sieci rzeczywistej (po lewej) i odwrotnej (po prawej) modelu *dimery*.



## Wpływ czynnika strukturalnego

Rysunki przedstawiają obrazy dyfrakcyjne modeli o jednakowych stałych sieci, ale różnych strukturach wewnątrz komórek elementarnych. Jednakowe stałe sieci przekładają się na identyczne człony siatki dyfrakcyjnej, dlatego położenia jasnych punktów na obu zdjęciach są takie same. Człony strukturalne odpowiadają za różnicę w rozkładzie natężenia światła (określają, które punkty są jaśniejsze, a które ciemniejsze).



## Odtworzenie struktury powierzchni

Wzór na natężenie ugiętego światła można interpretować w następujący sposób. Dyfrakcja na modelu przeprowadza transformatę Fouriera z domeny położenia na powierzchni tego modelu w domenę kierunków (kątów) w przestrzeni. Transformowaną funkcją jest  $f(x,y)$ , która definiuje obraz rzeczywisty. Można go zatem odzyskać z obrazu dyfrakcyjnego wykorzystując odwrotną transformatę Fouriera. Na rysunku przedstawiono model sieci heksagonalnej 7x7 (a).

Transformata Fouriera tego obrazu (b) posiada charakterystyczne elementy obecne w obrazie dyfrakcyjnym (d). Najważniejszym wynikiem doświadczenia jest odzyskanie struktury modelu (c) jako odwrotnej transformaty Fouriera z obrazu dyfrakcyjnego. Wektor elektryczny ugiętego światła, który w pełni definiuje obraz dyfrakcyjny ma postać zespoloną. Na matówce tracona jest informacja o fazie tego wektora. Stanowi to tak zwany problem fazowy, który uniemożliwia odzyskanie szczegółów struktury powierzchni na podstawie zdjęcia obrazu dyfrakcyjnego.

Na rysunku: a) obraz rzeczywisty, b) jego transformata Fouriera, c) transformata Fouriera obrazu dyfrakcyjnego, d) obraz dyfrakcyjny.

