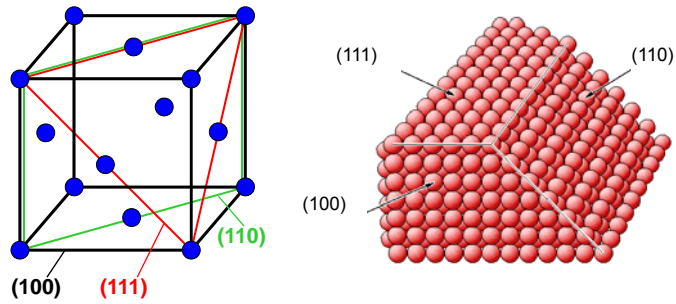


Atomare Oberflächenstruktur von Festkörpern

Abhängig von Schnittebene unterschiedliche Symmetrien

Schnittebene angegeben über Miller-Indizes (h,k,l)

Beispiel: dichtgepackte, niederindizierte Oberflächen von fcc-Kristallen

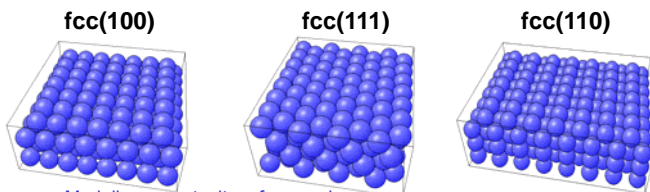


Atomare Oberflächenstruktur von Festkörpern

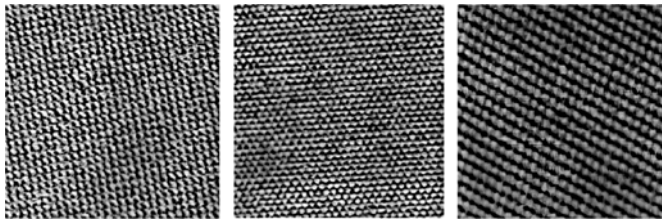
Abhängig von Schnittebene unterschiedliche Symmetrien

Schnittebene angegeben über Miller-Indizes (h,k,l)

Beispiel: dichtgepackte, niederindizierte Oberflächen von fcc-Kristallen



Modelle erzeugt mit surface explorer
(w3.rz-berlin.mpg.de/~rammer/surfexp_prod/SXinput.html)

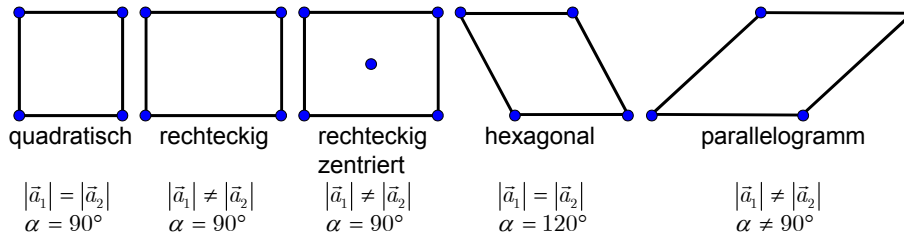


STM, Au(hkl), 8 x 8 nm²

Formale Beschreibung der Oberflächenstruktur

Gittervektoren: $\vec{r} = n \cdot \vec{a}_1 + m \cdot \vec{a}_2$

Translationssymmetrie \rightarrow 2D Bravais-Gitter:

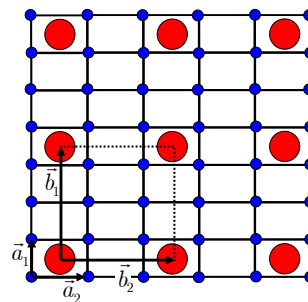


Formale Beschreibung der Oberflächenstruktur

Überstrukturen: $\vec{r}_{ad} = n' \cdot \vec{b}_1 + m' \cdot \vec{b}_2$

Bezeichnung in
a) Matrix-Notation: $\begin{pmatrix} \vec{b}_1 \\ \vec{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \end{pmatrix}$; z.B. $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

b) Woods-Notation:
(falls Winkel zwischen Vektoren in Substratgitter und Überstruktur gleich und $\vec{b}_1 = c_1 \cdot \vec{a}_1$; $\vec{b}_2 = c_2 \cdot \vec{a}_2$)
 \rightarrow
 $(c_1 \times c_2)$ falls $\gamma = 0^\circ$ bzw. $(c_1 \times c_2)R\gamma$; $\gamma \equiv \text{Winkel}(\vec{a}_1, \vec{b}_1)$
z.B. (3×2)



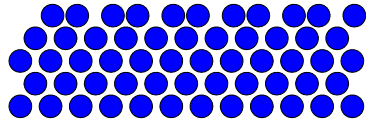
Oberflächenrelaxation und Oberflächenrekonstruktion

Reale Oberflächen \neq ideal terminierter Kristall

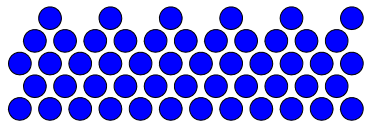
Oberflächenrekonstruktion

Oberflächeneinheit zelle weicht von ideal terminierter Oberfläche ab

1) lokale Verlagerung von Atomen:

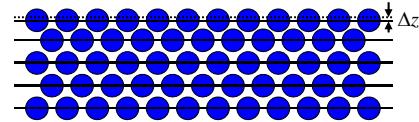


2) Änderung der Oberflächendichte
(\rightarrow langreichweitiger Transport):



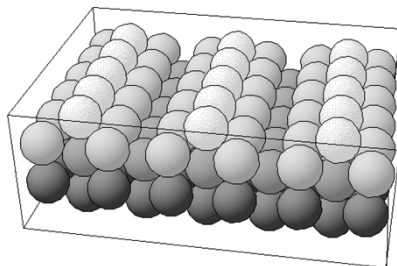
Oberflächenrelaxation

Atomabstände an der Oberfläche weichen von denen im Volumen ab (immer vorhanden)

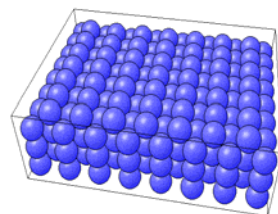
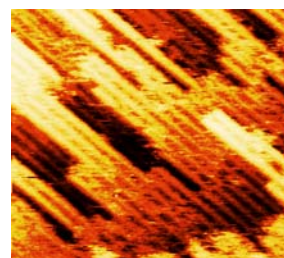


Beispiel für Oberflächenrekonstruktionen

Au(110)



(1x2) missing row Rekonstruktion

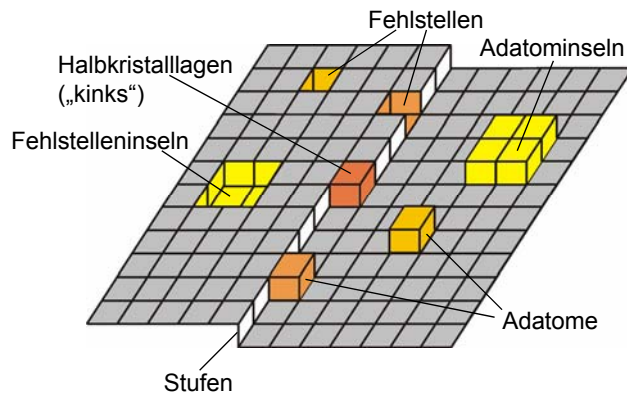


unrekonstruierte fcc(110) Oberfläche

Defekte auf Festkörperoberflächen

Auf realen Festkörperoberflächen ist das Kristallgitter nicht ideal terminiert, sondern weist Oberflächendefekte auf, die viele Oberflächenprozesse entscheidend beeinflussen.

Oberflächendefekte



Defekte auf Festkörperoberflächen

Auf realen Festkörperoberflächen ist das Kristallgitter nicht ideal terminiert, sondern weist Oberflächendefekte auf, die viele Oberflächenprozesse entscheidend beeinflussen.

Defekte des Volumenkristalls (an Oberfläche sichtbar)

