

DIFRACCION Y ENFOQUE EN LA DISPERSION ELASTICA DE ELECTRONES SOBRE Cu(001)

H.Ascolani*, M.M.Guraya y G.Zampieri.

Centro Atómico Bariloche, C.C.439, 8400, San Carlos de Bariloche.

Hemos medido la intensidad de electrones reflejados elásticamente sobre Cu(001) como función del ángulo polar de salida y de la energía cinética en el rango de 200-1500 eV. A bajas energías la distribución angular de los electrones presenta picos agudos debidos a la difracción de electrones lentos (LEED). Para $E > 500$ eV aparecen picos intensos en ángulos correspondientes a ejes cristalográficos principales. Interpretamos que estos picos son originados por el mismo efecto de enfoque que ocurre en la difracción de electrones Auger y fotoelectrones. La importancia de este resultado es que tanto la red recíproca como la red real se pueden explorar en el mismo experimento simplemente variando la energía de los electrones.

En el contexto de la física de superficies, la difracción de electrones lentos (LEED) y, más recientemente, la difracción de electrones Auger (AED) y de fotoelectrones (XPD), se utilizan para el análisis cristalográfico. En el experimento de LEED, un haz monocromático de electrones es dispersado coherentemente por los átomos del cristal; la condición de interferencia constructiva se da en direcciones directamente relacionadas con la red recíproca de la superficie. El fenómeno de difracción desaparece para $E > 500$ eV en la mayoría de los experimentos debido a la pérdida de coherencia en la dispersión originada por las vibraciones térmicas de los átomos de la red, que se tornan importantes para estas longitudes de onda.

En los experimentos de AED/XPD [1-3], efectos de interferencia que involucran pocos átomos producen anisotropía en la distribución angular de electrones emitidos. Las estructuras más intensas ocurren en las direcciones de los principales ejes cristalográficos y tienen una explicación simple: el electrón emitido ($E \approx 1$ keV) es enfocado en las direcciones de ligadura por los potenciales atractivos de los vecinos cercanos del átomo emisor. Este efecto de enfoque produce emisión máxima de electrones en ángulos conectados con los principales ejes cristalográficos y, por lo tanto, con la red real.

Este último punto nos llevó a investigar si este efecto de enfoque ocurre también en la reflexión elástica de electrones a energías intermedias. Si esto sucediera sería muy importante, porque tanto la red recíproca como la red real se podrían investigar en el

mismo experimento.

Hemos medido la intensidad de electrones reflejados elásticamente sobre Cu(001) en función del ángulo polar de salida, para un ángulo azimutal correspondiente a la dirección [010], y de la energía del electrón incidente en el rango de 200 - 1500 eV. Para realizar el barrido angular la muestra se rota alrededor del eje [100], y la geometría del experimento es tal que la dirección de observación coincide con algunos ejes cristalográficos importantes, mientras que la dirección de incidencia no. El ángulo entre la dirección de incidencia y la de observación es fijo e igual a 144.3° . Para aislar los efectos debidos al orden cristalino, también medimos la intensidad de electrones reflejados elásticamente sobre un policristal de Cu. Los resultados son presentados en términos del factor de anisotropía a A definido de la siguiente manera:

$$A = [I(\text{cristal}) - I(\text{policristal})] / I(\text{policristal})$$

Los resultados principales de nuestro trabajo están contenidos en la Fig.1. Se ha incluido también un gráfico de la intensidad de la emisión Auger LMM (917 eV) en función del ángulo polar (PIP), con el objeto de servir de comparación para los resultados de la reflexión elástica de electrones. Los picos que aparecen a 0° y 45° , que corresponden a la emisión a lo largo de los ejes cristalográficos [001] y [010], son originados por el efecto de enfoque discutido mas arriba [2]. La estructura que aparece a $\theta \approx 20^\circ$ tiene dos orígenes: además del enfoque a lo largo del eje [013], hay un efecto de interferencia de primer orden que es importante para este ángulo de emisión. [4].

El gráfico del pico elástico a 200 eV presenta estructuras muy agudas debidas a efectos de LEED

* Becario del CONICET

(notar la gran reducción en la escala). Las flechas indican ángulos polares para los cuales se espera que una dirección de Leed caiga dentro de la resolución angular del analizador.

Cuando se aumenta la energía de los electrones a 400 eV, el acuerdo entre las posiciones de los picos y los ángulos polares conectados con las direcciones de LEED es todavía excelente. Se observa, además, una gran disminución de la intensidad. Esto se relaciona con la pérdida de coherencia en la dispersión producida por las vibraciones térmicas de los átomos, un efecto que es más importante cuanto más corta es la longitud de onda de los electrones.

A una energía de 900 eV el PIP del pico elástico ha tomado la forma característica de los experimentos de AED / XPD. Se observan dos picos intensos a 0° y 45° y uno menor a $\theta \approx 20^\circ$. Notar que la anisotropía es un factor dos mayor que en el caso de la emisión Auger LMM. Las estructuras de LEED han desaparecido de acuerdo a las consideraciones de pérdida de coherencia hechas más arriba.

El aumento de la energía a 1300 eV no afecta la posición angular de los dos picos más intensos, sino sólo sus alturas. Esto sugiere fuertemente que el enfoque en las direcciones de los ejes [001] y [011] es el responsable de estas anisotropías. La estructura a $\theta \approx 20^\circ$ varía notoriamente, por lo que parece estar ligada más a un efecto de interferencia que a un efecto de enfoque.

Para saber si una explicación similar a la de AED / XPD es aplicable al caso de una reflexión elástica de electrones, consideramos que para $E > 500$ eV la coherencia de la dispersión para los distintos átomos se ha perdido y cada centro dispersor actúa independientemente de los demás. Adaptamos el modelo de "single scattering cluster calculations" [1,4] usado para calcular las distribuciones angulares en AED / XPD, pero reemplazando la onda Auger / fotoelectrón por la onda de scattering $f(\theta) \exp(ikr) / r$, donde $f(\theta)$ es la amplitud de dispersión de una onda plana. Calculamos las distribuciones angulares para un cluster sencillo de tres átomos para diferentes energías del electrón incidente. Se obtuvo un excelente acuerdo cualitativo con los gráficos de la Fig. 1 lo que indica que el modelo contiene todos los efectos importantes.

En conclusión, encontramos que cuando los efectos de LEED desaparecen por la elevación de la energía, la distribución angular de electrones reflejados elásticamente no es suave sino que presenta anisotropías. Las estructuras más intensas son causadas por un efecto de enfoque, por lo que están direc-

tamente relacionadas con los principales ejes cristalográficos, lo cual hace que este fenómeno sea un excelente complemento de LEED para el análisis cristalográfico de superficies.

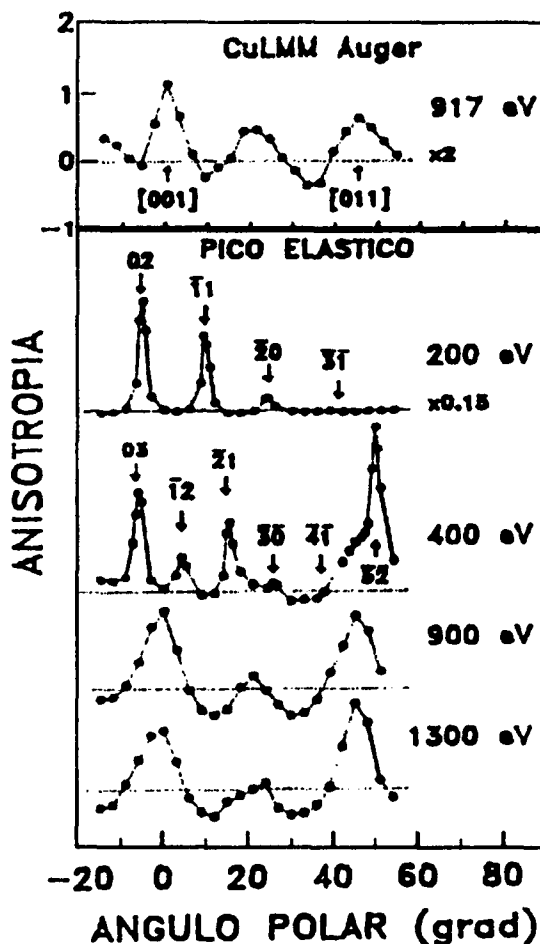


Figura 1: Gráficos de factor de anisotropía de la emisión Auger Cu LMM y del pico elástico en función del ángulo polar para las energías indicadas a la derecha. La escala vertical, indicada únicamente para el gráfico de la emisión Auger Cu LMM, es la misma en todos los gráficos, salvo para 200 eV.

REFERENCIAS

1. S.Kono, S.M.Goldberg, N.F.T. Hall and C.S.Fadley, Phys. Rev. B 22, 6085 (1980).
2. W.F.Egelhoff, Phys.Rev. B 30, 1052 (1984).
3. S. A. Chambers, S. B. Anderson and J. A. Weaver, Phys. Rev. B 32, 4872 (1985).
4. E.L.Bullock and C.S.Fadley, Phys. Rev. B 31, 1212 (1985); R.A.Armstrong and W.F.Egelhoff, Surf.Sci. 154, L225 (1985).