Zusammenfassung vom 04.02.2011

Intensität der Raman-Linien

Proportional zum Betragsquadrat der Matrixelemente für Phononen-Erzeugung bzw. -Vernichtung

➔ $I(\omega-\Omega) \propto \left|\left\langle n_{\vec{K}}+1 \middle| r \middle| n_{\vec{K}} \right\rangle\right|^2 \propto \left\langle n_{\vec{K}}+1 \right\rangle$ ***Stokes-Linie***

➔ $I(\omega+\Omega) \propto \left|\left\langle n_{\vec{K}}-1 \middle| r \middle| n_{\vec{K}} \right\rangle\right|^2 \propto \left\langle n_{\vec{K}} \right\rangle$ ***Anti-Stokes-Linie***

Intensitätsverhältnis Stokes/Anti-Stokes-Linie

➔ $$\frac{I_{\text{Anti-Stokes}}}{I_{\text{Stokes}}} = \frac{I(\omega+\Omega)}{I(\omega-\Omega)} = \frac{\left\langle n_{\vec{K}} \right\rangle}{\left\langle n_{\vec{K}} \right\rangle + 1} = e^{-\frac{\hbar\Omega}{k_B T}}$$

➔ **bei $T \to 0$ verschwindet die Intensität der Anti-Stokes-Linie**

Relaxation

➔ **die einzelnen Atome der obersten Atomlage sitzen an der gleichen Position, wie im Volumen, aber der Abstand zur nächsten Lage ist verringert**

Rekonstruktion

➔ **die Atome der obersten Atomlage formen eine neue Struktur, die sich deutlich von derjenigen des Volumens unterscheidet**

➔ **hoch indizierte Oberflächen werden ersetzt durch parallele, niedrig indizierte, die durch Stufenkanten getrennt sind.**

Zusammenfassung vom 04.02.2011

Oberflächen-strukturen

- ➔ sind in der Regel in zwei Dimensionen periodisch
- ➔ man spricht auch von *Netzen*
- ➔ entstehen durch fremdes Material, das angelagert wurde, oder durch das Material des Substrates selber

Bravais-Gitter in 2D

- ➔ in zwei Dimensionen fünf verschiedene Punktgitter: Parallelogramm-, Quadrat-, Rechteck-, zentriertes Rechteck- und hexagonales Gitter

Einheitszelle in 2D

- ➔ wird gebildet durch zwei primitive Gittervektoren : $\vec{a}_{1,}\ \vec{a}_2$

Referenzstruktur

- ➔ wird gebildet durch das Gitter der Volumenstruktur an der Oberflächen

Bsp.: die (111)-*Oberfläche einer einfach kubischen Struktur entspricht dem hexagonalen Netz*

Beschreibung der Oberflächenstruktur

- ➔ die beiden primitiven Gittervektoren $\vec{c}_{1,}\ \vec{c}_2$, die die Oberflächenstruktur beschreiben, können durch eine Matrixoperation aus $\vec{a}_{1,}\ \vec{a}_2$ erzeugt werden:

$$\begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_2 \end{pmatrix} = \mathbb{P} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \end{pmatrix}$$

Zusammenfassung vom 04.02.2011

Kurzschreibweise der Oberflächenstruktur

$$y\left(\frac{c_1}{a_1}\times\frac{c_2}{a_2}\right)R\,\alpha$$

wenn der Winkel zwischen $\vec{c}_1, \vec{c}_2$ und zwischen $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ gleich ist, kann die Kurznotation von E. A. Wood benutzt werden

c_i/a_i = *Verhältnis der Längen der beiden primitiven Gittervektoren*

R = *Rotation des Oberflächennetzes gegenüber dem Referenznetz*

α = *relativer Rotationswinkel in Grad (0° wird weggelassen)*

y = p *(primitiv, wird auch weggelassen)*, c *(zentriert)*

reziprokes Gitter in 2D

das reziproke Gitter in 2D wird gleich konstruiert wie in 3D:

$$\vec{c}_i\cdot\vec{c}_j^{\,*}=2\pi\delta_{ij} \qquad \vec{a}_i\cdot\vec{a}_j^{\,*}=2\pi\delta_{ij}$$

c_i^*, a_i^*= *reziproker Gittervektor*

➔ **das 2D reziproke Gitter kann in drei Dimensionen als *periodisch angeordnete, parallele Stäbe*, die senkrecht zur Oberfläche liegen, interpretiert werden.**

Grund.: die fehlende dritte Periode senkrecht zur Oberfläche kann als unendlich große Periode aufgefasst werden, dies entspricht einem Kontinuum im reziproken Raum

Ewald-Konstruktion

liefert immer Reflexe, solange $k > k_{min}$(= halber Abstand der Stäbe) da Stäbe immer einen Durchstoßpunkt mit der Ewald-Kugel haben