

Scattering of atomic beams off stepped surfaces

Doctoral Thesis

Author(s):

Blatter, Johann Walter

Publication date:

1984

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000311977>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No 7454

Scattering of Atomic Beams off Stepped Surfaces

A dissertation submitted to the

SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by
JOHANN WALTER BLATTER
dipl. Phys. ETH
born November 10, 1955
citizen of Glis (Kt. Wallis)

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. T.M. Rice, examiner
Prof. Dr. W. Hunziker, co-examiner
1984

Separatdruck aus Phys. Rev. B
Verlag: The American Phys. Soc.

Band: 27, 7050 (1983)

ABSTRACT

The diffraction pattern for atomic beams scattered off stepped surfaces is calculated, using a hard-wall potential for the atom-surface interaction. An exact solution is found for the case of a single rectangular step on a planar surface using the Wiener-Hopf method. The large extent of a step defect gives rise to strong diffuse scattering due to interference between scattering off the different surface levels. The exact solution provides information on the asymptotic behavior for the scattering off the infinitely extended defect and at the same time serves as a test for approximative methods. The eikonal approximation (EA) describes well the interference effects due to differences in path length and therefore it agrees well with the exact results for the single step.

The EA is then used to calculate the diffuse scattering for several configurations of random arrays of parallel steps. The scattering pattern oscillates in shape and width with varying incident angle and this can be used to get information on the step height, the step density, and the step distribution.

The distribution of steps can be given by an ad hoc distribution function for a non-equilibrium surface. For a surface in thermodynamic equilibrium a surface Hamiltonian can be defined which describes the generation of steps microscopically. Such a description is used in the final part of this work to examine the behavior of the diffraction pattern for scattering off a rough surface. The characteristic of this surface is the mere *logarithmic* divergence of the mean square height difference, leading to an algebraic decay of the phase correlation instead of the exponential behavior found for the non-equilibrium surface before. The results for the diffraction pattern show that the temperature dependent exponent of the phase correlation function and the transition temperature can be determined by an atom scattering experiment.

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit berechnen wir differentielle Wirkungsquerschnitte für die Streuung von Atomstrahlen an gestuften Oberflächen. Die Atom-Oberflächen Wechselwirkung wird durch eine harte Wand beschrieben, wobei sich das quantenmechanische Streuproblem auf ein optisches Randwertproblem reduziert. Zuerst lösen wir das Streuproblem für eine einzelne Rechteckstufe auf einer glatten Oberfläche. Da die Stufe eine Störung von unendlicher Ausdehnung ist, führt dies auf eine starke diffuse Streuung, welche sich auf die Umgebung des gespiegelten Strahles konzentriert. Diese Streuung ist das Resultat von Interferenzeffekten zwischen den beiden unendlich ausgedehnten, in der Höhe verschobenen Halbebenen und zeigt ein nicht-triviales asymptotisches Verhalten. Dieses zu berechnen und ein Testbeispiel für approximative Methoden zu entwickeln war das Ziel dieser Aufgabenstellung.

Als halb-klassische Näherungsmethode wurde die Eikonal Approximation erfolgreich getestet. Diese beschreibt zuverlässig die Interferenzstreuung zwischen den beiden Halbebenen, vermag aber nicht Aufschluss über die eigentliche Stufenform zu geben. Die Streuung wird jedoch von den Interferenzeffekten dominiert.

Für ein realistisches Oberflächenmodell mit zufällig verteilten, parallelen Rechteckstufen berechnen wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt für verschiedene Verteilungen von Stufen in Eikonal Approximation. Das Beugungsmuster verändert sich periodisch mit der Variation des Einfallswinkels und diese Veränderungen der Form und der Breite geben Aufschluss über die Stufenhöhe, die Dichte der Stufen und deren Verteilung.

Die Beschreibung einer gestuften Oberfläche durch eine vorgegebene Verteilungsfunktion für die Stufen ist für eine nicht im Gleichgewicht befindliche Oberfläche angemessen. Befindet sich die Oberfläche im thermodynamischen Gleichgewicht, ist eine mikroskopische Beschreibung durch eine Hamiltonfunktion befriedigender. Eine derartige, statistisch mechanische Beschreibung benutzen wir im dritten Teil dieser Arbeit, um die Streuung an einer rauhen Oberfläche (in EA) zu berechnen. Das

Charakteristikum einer solchen rauhen Oberfläche ist die Tatsache, dass die mittlere quadratische Höhendifferenz nur logarithmisch mit der Distanz wächst, im Gegensatz zum obigen Fall, welcher ein quadratisches (evt. lineares) Wachstum zeigt. Diese schwache Rauigkeit führt auf einen algebraischen (statt exponentiellen) Abfall der Phasenkorrelation und damit auf sehr kleine Verbreiterungen des gespiegelten Strahles für niedrige Temperaturen. Die Resultate für den differentiellen Wirkungsquerschnitt zeigen jedoch, dass diese Verbreiterung gemessen werden kann und dadurch Aussagen über den temperaturabhängigen Exponenten der Phasenkorrelationsfunktion sowie über die Rauigkeitstemperatur ermöglicht werden.