# Wiederholung vom 06.01.2005

## Low Energy Electron Defraction (LEED)

(Fraunhoferbeugung in zwei Dimensionen)

Methode, um die Struktur von Oberflächen und Adsorbaten zu bestimmen. Dabei werden mit langsame Elektronen ($E_{kin}$ = 20 − 500 $eV$($\lambda$ = 0, 3 − 0, 05 $nm$ Beugungsbilder der Oberfläche bestimmt. Elektronen eignen sich für die Untersuchung der Oberfäche, da sie im Gegensatz zu Röntgenstrahlung (1000 Å Eindringtiefe) nur einige 10 Å Eindringtiefe besitzen.

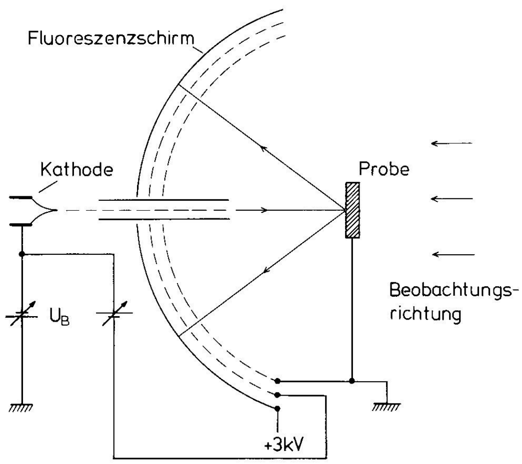


Abbildung 1: Schematischer Aufbau eines LEED-Experiments

## Röntgenbeugung

(Fraunhoferbeugung in drei Dimensionen)

Gegeben sei ein Raumgitter mit den Translationsvektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$. Analog zu zwei Dimensionen kann man ein dreidimensionales reziprokes Gitter mit

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}; \; \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}; \; \vec{b}_3 = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \tag{1}$$

definieren, wobei wieder $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \delta_{ij}$ gilt.

Bei der Röntgenbeugung wird der einfallende Strahl mit dem Vellenvektor $\vec{k}_0$ und der auflaufende Strahl mit $\vec{k}$ beschrieben. Damit Beugungsreflex auftritt, müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:
(i) $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$ (Energieerhaltung)
(ii) $\vec{k}_0 - \vec{k} = \vec{G}$ mit $\vec{G} = 2\pi(h_1^*\vec{b}_1 + h_2^*\vec{b}_2 + h_3^*\vec{b}_3)$, wobei $h_1^*$, $h_2^*$, $h_3^*$ ganzzahlig (Laue-Bedingung).

Ewaldkugel:

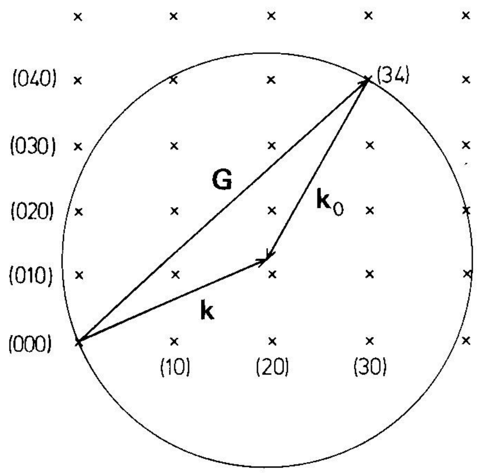


Abbildung 2: Konstruktion der Ewaldkugel im 2-D Schnitt. Ursprung ist Teil der Kugel

Mathematisch beliebig unwahrscheinlich, dass Kugel und reziproker Gittervektor zusammenfallen. Daher wird bei realen Beugungsexperimenten entweder Einfallswinkel (Debye-Scherrer-Verfahren) oder Wellenlänge variieren (Laue-Verfahren) variiert.

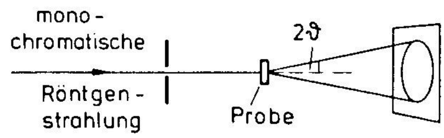


Abbildung 3: Aufbau des Debye-Scherrer-Verfahrens

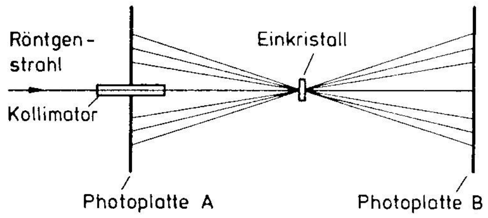


Abbildung 4: Aufbau des Laue-Verfahrens

<u>Bragg-Bedingung</u>: Äquivalente Beschreibung zur Lauegleichung. Dabei wird Röntgenstrahlung an den Netzebenen des Kristalls spekular reflektiert und man erhält $2d\sin\vartheta = n\lambda$.

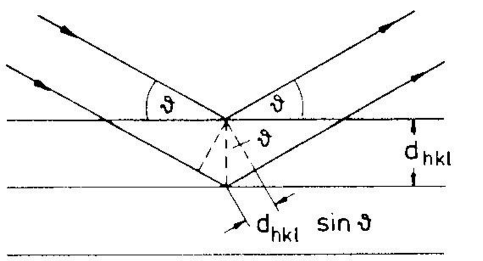


Abbildung 5: Veranschaulichung der Bragg-Bedingung

## Phasenproblem

Bei einem Beugungsbild wird das Betragsquadrat der Fouriertransformierten gemessen. Damit geht die Phase verloren und eine Rücktransformation zur Erhaltung des ursprünglichen Bildes somit nicht möglich (Phasenproblem).

Unter der Annahme, dass das ursprüngliche Objekt $\rho(\vec{r})$ (im Fall der Röntgenbeugung ist $\rho(\vec{r})$ die Elektronendichte) reell und positiv sowie einer Abschätzung über die Größe der Einheitszelle erhält man Gleichungen, die im Regelfall überbestimmt sind und man somit die Phase rekonstruieren kann. Folglich lässt sich (wenn auch mit großem Rechenaufwand) die ursprüngliche Struktur aus den Beugungbildern erhalten.