

Optische Doppelbeugung und LEED

Klaus Heinz

Lehrstuhl für Festkörperphysik und Universität
Erlangen-Nürnberg

(Z. Naturforsch. **29 a**, 1514–1515 [1974];
eingegangen am 16. August 1974)

Optical Double Diffraction and LEED

The phenomenon of double diffraction in the Fraunhofer case can be assumed to occur also in LEED. Double diffraction spots can cancel in special geometric arrangements.

Bei der Beugung langsamer Elektronen treten manchmal Zusatzreflexe auf, die durch Doppelbeugung an benachbarten Netzflächen gedeutet werden können, sofern diese durch die Additivität der jeweiligen reziproken Gittervektoren beschrieben wird (z. B. ^{1, 2, 3}). Dies ist sicher dann richtig, wenn die auf das zweite Gitter fallende Welle eben ist. In ⁴ wird der experimentelle Nachweis für die Gültigkeit dieser Additionsregel im Fall optischer Simulation von LEED erbracht. Die folgende Rechnung zeigt zunächst, daß dabei noch zusätzliche geometrisch bedingte Auswahlregeln auftreten können, so daß Doppelbeugungsreflexe nicht unbedingt auftreten müssen. Als Hauptanliegen wird gezeigt, wie die im Fraunhoferfall bestätigte Additionsregel qualitativ auf den Fresnellfall (LEED) übertragen werden kann.

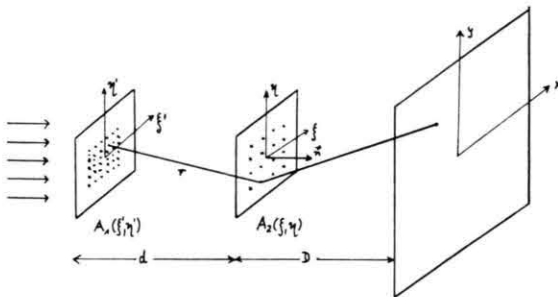


Abb. 1. Schematischer Aufbau der Doppelbeugungssimulation.

Abbildung 1 zeigt die experimentelle Simulationsanordnung, wobei jedoch der relative Gitterabstand d/D sehr viel größer als bei LEED ist. Die Integration der Kirchhoffschen Beugungsformel über das Gitter A_1 gibt die Amplitude in der (x, y) -Ebene zu

$$\Psi(x, y) \sim \int A_1(\xi', \eta') A_2(\xi, \eta) (1 - \cos(n, r)) \frac{1}{r} \cdot \exp \left[i k \left(r - \frac{x \xi + y \eta}{D} \right) \right] d\xi' d\eta' d\xi d\eta,$$

* Sonderdruckanforderungen an Dr. K. Heinz, Lehrstuhl für Festkörperphysik der Universität Erlangen-Nürnberg, D-8520 Erlangen, Erwin-Rommel-Straße 1.

wobei k die Wellenzahl und $A_{1,2}$ die Durchlaßfunktionen sind. Mit $\delta(\xi', \eta')_{\max}$ ergibt sich angenähert

$$\Psi(x, y) \sim \int A_1(\xi', \eta') A_2(\xi, \eta) \cdot \exp \left[-i k \left(\frac{\xi' \xi + \eta' \eta}{d} + \frac{\xi x + \eta y}{D} \right) \right] \cdot \exp[i k \delta] d\xi' d\eta' d\xi d\eta$$

wobei $\delta = (\xi^2 + \eta^2)/2d$ ist. Für z. B.

$$A_1(\xi', \eta') = \sum_{m_1, n_1}^{M_1, N_1} \delta(\xi' - m_1 g_{1\xi}) \delta(\eta' - n_1 g_{1\eta})$$

ist dann

$$\Psi(x, y) \sim \int A_2(\xi, \eta) \frac{\sin M_1 k g_{1\xi} \xi/2d}{\sin k g_{1\xi} \xi/2d} \frac{\sin N_1 k g_{1\eta} \eta/2d}{\sin k g_{1\eta} \eta/2d} \cdot \exp \left[-i k \frac{\xi x + \eta y}{D} - \delta \right] d\xi d\eta.$$

Der Sinusausdruck gibt große Beiträge nur für

$$\xi = \xi_m = \frac{2\pi d}{k g_{1\xi}} m, \quad \eta = \eta_n = \frac{2\pi d}{k g_{1\eta}} n, \quad m, n = 0, \pm 1, \dots,$$

so daß sich das verbleibende Integral auf eine Summe von Integralen um diese Punkte reduziert. δ kann um diese Stellen herum linearisiert werden und es ergeben sich für z. B.

$$A_2(\xi, \eta) = \sum_{m_2, n_2}^{M_2, N_2} \delta(\xi - m_2 g_{2\xi}) \delta(\eta - n_2 g_{2\eta})$$

nichtverschwindende Amplituden nur für $x = x_{mm'}$ und $y = y_{nn'}$:

$$\Psi(x, y) = \Psi(x_{mm'}, y_{nn'}) \sim \sum_{m, n} \exp \left[-i k \left(\frac{x_{mm'}}{D} \xi_m + \frac{y_{nn'}}{D} \eta_n \right) \right]$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{x_{mm'}}{D} &= \frac{2\pi}{k} \left(\frac{m}{g_{1\xi}} + \frac{m'}{g_{2\xi}} \right), \\ \frac{y_{nn'}}{D} &= \frac{2\pi}{k} \left(\frac{n}{g_{1\eta}} + \frac{n'}{g_{2\eta}} \right). \end{aligned} \right.$$

mit

Dies ist die erwartete Additionsregel für die reziproken Gittervektoren. Die Summe, die sich bei symmetrischer Mitnahme höherer Beugungsordnungen wieder auf den gewohnten Sinusausdruck reduziert, ergibt zusätzliche Auslöschungen, bzw. beschreibt eine starke Abhängigkeit der Amplitude von d , die in ⁴ beobachtet wurde. Das dort gemessene charakteristisch große Intensitätsverhältnis zwischen Einfach- und Doppelbeugungsreflexen, läßt sich durch Berücksichtigung der endlichen Spaltbreite, die sich bei

Doppelbeugung doppelt auswirkt, errechnen. Die zusätzliche Selektivität ist dann wegen der Schwächung höherer Beugungsordnungen weniger ausgeprägt.

Im Fresnel-Fall (LEED) ist eine rechnerische Bestätigung der Additionsregel analytisch schwer durchführbar. Die Simulation als „rechter Grenzfall“ ($d \gg (\xi', \eta')_{\max}$) von LEED ist höchstens ein erster Hinweis. Im „linken Grenzfall“

$$(d \ll \lambda, d \ll (\xi', \eta')_{\max}),$$

der physikalisch von dem koinzidierenden Gitter nicht unterscheidbar ist, ergibt sich (ohne Beschränkung der Allgemeinheit eindimensional)

$$\Psi(x) \sim \int A_1(\xi) A_2(\xi) \exp[-ik(x\xi/D)] d\xi,$$

d. h. $\Psi(x)$ ist die Fourier-Transformation von $A_1 \cdot A_2$, die sich durch Anwendung des Faltungssatzes für z. B.

$$A_1(\xi) = \sum_n \delta(\xi - n g_1), \quad A_2(\xi) = \sum_m \delta(\xi - m g_2)$$

¹ H. Jakusch, Dissertation Karlsruhe 1973.

² A. U. MacRae, K. Müller, J. J. Lander u. J. Morrison, *Surface Science* **15**, 483 [1969].

³ E. Bauer, *Surface Science* **7**, 351 [1967].

ergibt zu

$$\Psi(x) \sim \sum_{m,n} \delta\left(x - \frac{2\pi D}{k} \left(\frac{m}{g_1} + \frac{n}{g_2}\right)\right).$$

Damit bestätigt sich also auch im „linken Grenzfall“ der Fresnel-Beugung die Additionsregel für die reziproken Gittervektoren. Die Fresnel-Beugung bei LEED kann somit als Zwischenstadium zweier der Additionsregel gehorchenden Grenzfälle betrachtet werden, wodurch sich ein qualitatives Argument für die Gültigkeit auch für den LEED-Fall ergibt.

Im Gegensatz zur Doppelbeugung an nachfolgenden Gittern unterscheiden sich bei der Einfachbeugung an koinzidierenden Gittern die Intensitäten von primären und Zusatzreflexen nicht. Dennoch ist eine Unterscheidung zwischen beiden Fällen bei LEED aufgrund der hier viel komplizierteren Intensitätsverhältnisse im Einzelfall nur schwer möglich^{3, 5}. Im Durchschnitt müßten jedoch Doppelbeugungsreflexe schwächer auftreten als die zugehörigen Einfachbeugungsreflexe. Eine vergleichende Zusammenstellung der Intensitätsverhältnisse von bisher als Doppelbeugung gedeuteten Reflexen könnte in diesem Sinne daher weiterhelfen.

⁴ H. Hilferink, C. Klingshirn u. K. Müller, *Z. Naturforsch.* **29 a**, 1512 [1974].

⁵ W. P. Ellis in: *Optical Transforms*, Ed. H. S. Lipson, Academic Press, London 1972.