

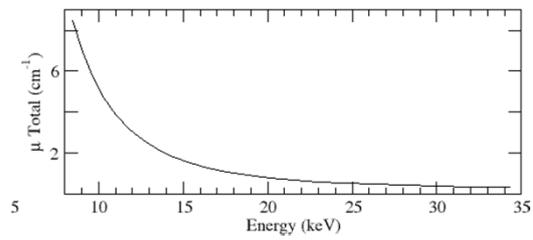
Oberflächenröntgenbeugung

Wechselwirkung Röntgenstrahlung - Materie

- geringe Absorption (\rightarrow hohe Eindringtiefe)

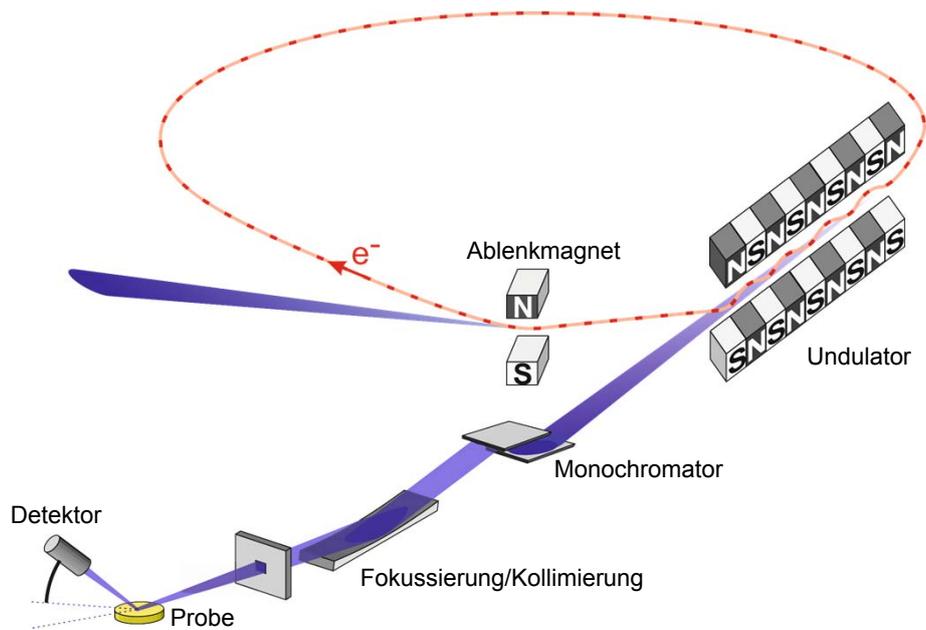
Absorptionslänge in Wasser

H₂O, E = 8 - 35 keV



<http://physics.nist.gov/PhysRefData/>

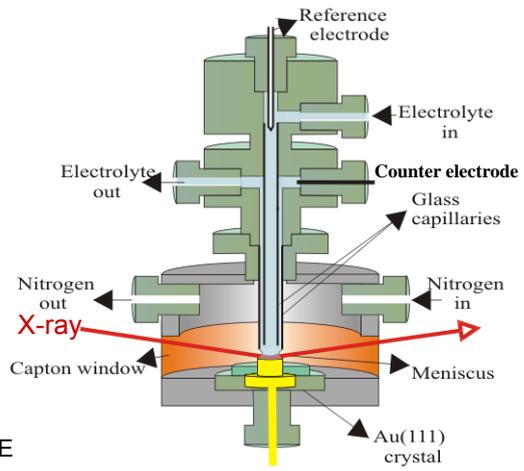
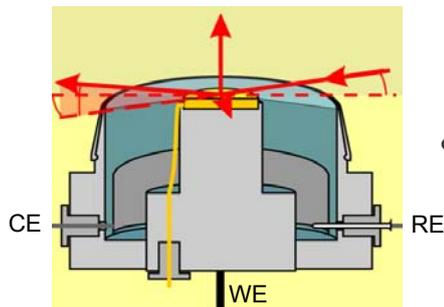
Synchrotron



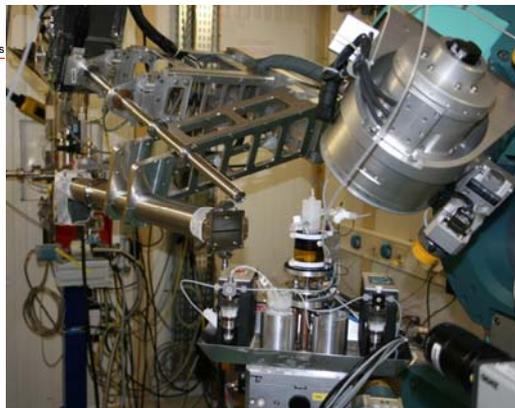
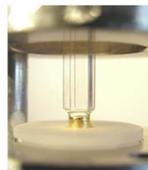
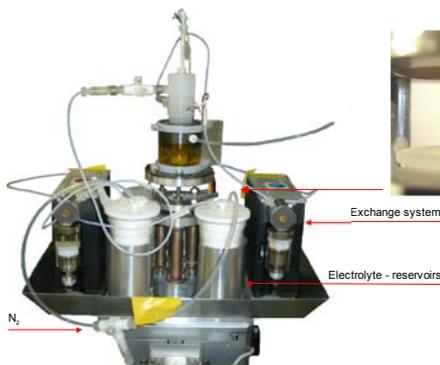
Instrumentierung

Elektrochemische Zellen für Experimente an elektrochemischen Grenzflächen:

- Dünnschichtzelle
- Transmissionszelle



Instrumentierung



Instrumentierung



Streutheorie

Brechungseffekte:

Brechungsindex: $n \equiv 1 - \delta + i\beta$

Realteil abhängig von Elektronendichte ρ_e : $\delta = \lambda^2 r_e \rho_e / 2\pi$
(Thomson Elektronenradius $r_e = 2.82 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$)

Imaginärteil abhängig von Absorptionskoeffizient μ : $\beta = \lambda\mu / 4\pi$

Brechung von Röntgenstrahlung ist schwacher Effekt.

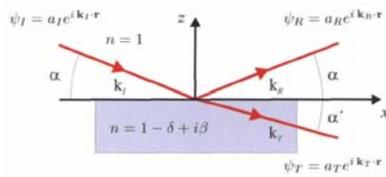
Beispiel: $\lambda = 1 \text{ \AA}$, Au ($4.65 \text{ e}_0 \text{ \AA}^{-3}$): $\delta = 2.09 \cdot 10^{-5}$

Streutheorie

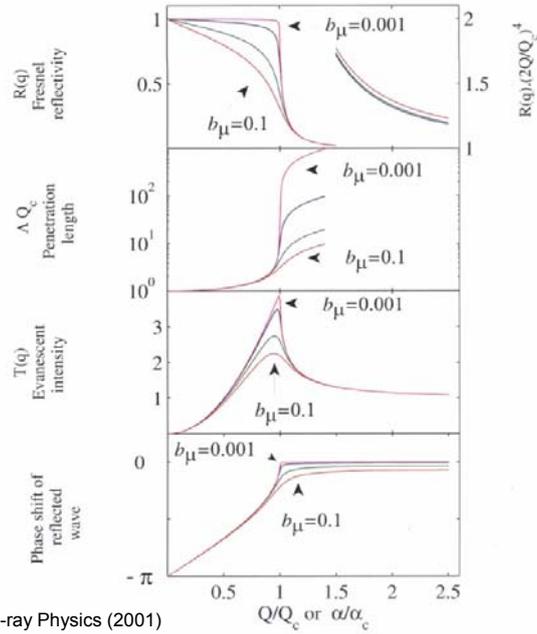
Brechungseffekte:

- Totalreflexion für Übergang vom optisch dickere (n_1) ins optisch dünnere ($n_2 < n_1$) Medium für Einfallswinkel α größere kritischem Winkel α_c
- Für $\alpha < \alpha_c$ geringe Eindringtiefe
- Für $\alpha \approx \alpha_c$ Feldverstärkung nahe Grenzfläche

→ Oberflächensensitivität

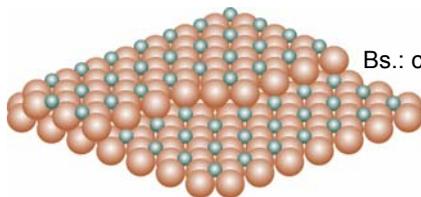


Als Nielsen, McMorow, Elements of modern X-ray Physics (2001)

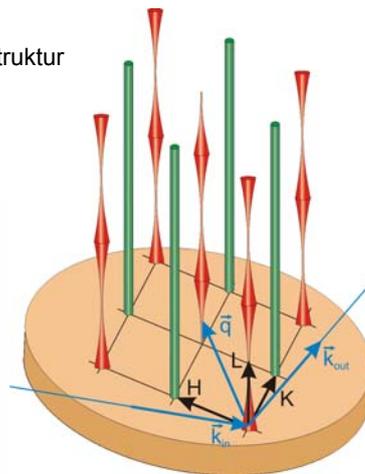
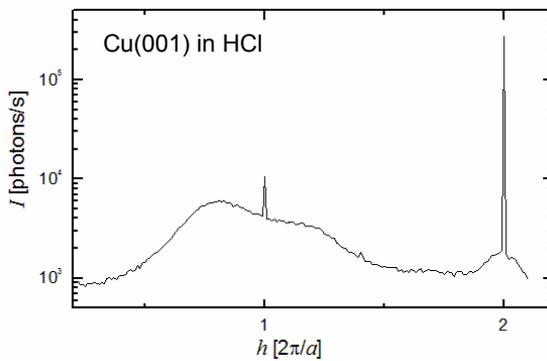


Beugungsuntersuchungen an Oberflächen

Beugung an **2D Gitter** / halboneudlichem 3D Kristall, wenn q-Vektor in reiprokem Raum auf "Gitterstab" senkrecht dazu liegt.



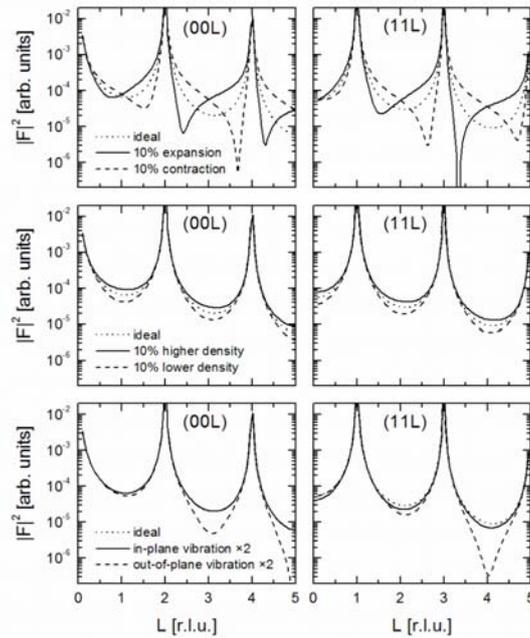
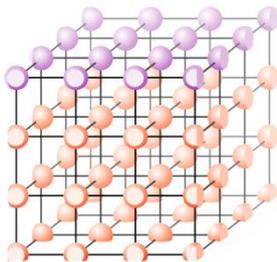
Bs.: c(2x2) - Struktur



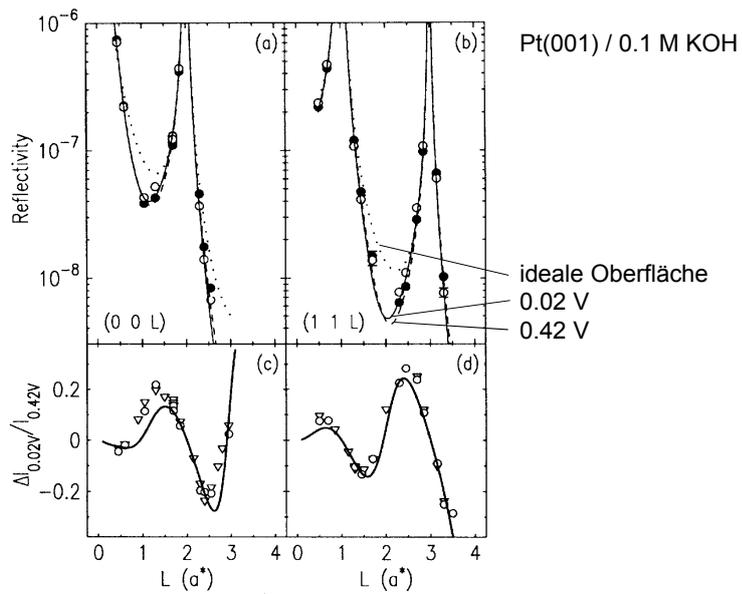
Oberflächenbeugung

CTRs bei Modifikation von

- Ebenenabstand
- Dichte
- Debye-Waller Faktor der obersten Atomlage.

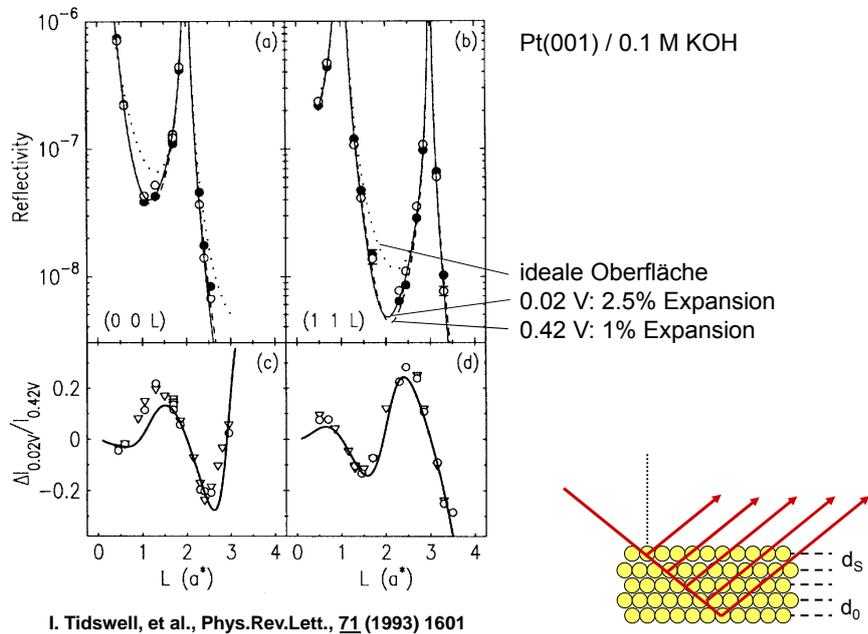


Einfluss auf Oberflächenrelaxation



I. Tidswell, et al., Phys.Rev.Lett., **71** (1993) 1601

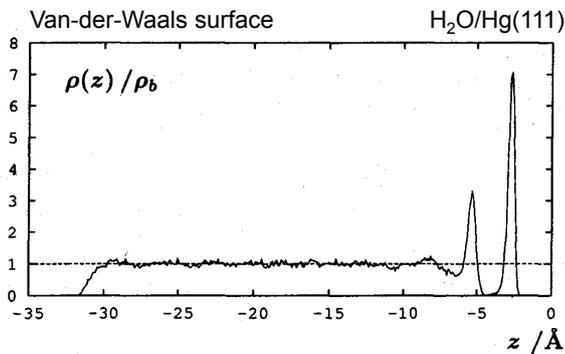
Einfluss auf Oberflächenrelaxation



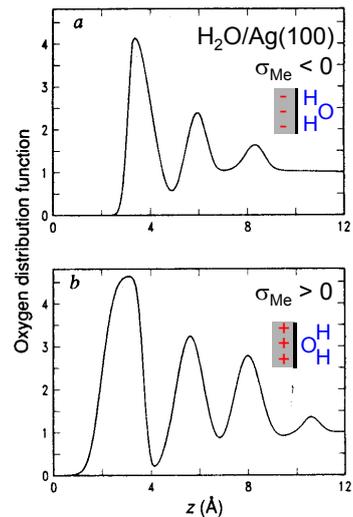
Grenzfläche Wasser - Metall

Festkörperoberfläche führt zu geänderter Nahordnung in Flüssigkeit

- molekulare Schichtung || Grenzfläche
- $\sigma_{Me} \geq 0$: vorzugsweise O Richtung OF orientiert
(\rightarrow Oberflächenpotential von 100...700 mV)
- $\sigma_{Me} < 0$: vorzugsweise H Richtung OF orientiert
- ähnlich für Edelmetalle



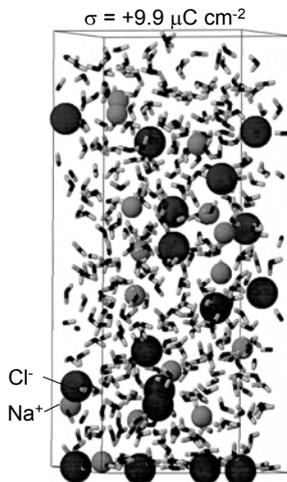
E.Spohr, in: Computer simulation of electrochemical interfaces, R.C.Aikire and D.M.Kolb, Eds., VCH, Weinheim (1999) 1-76.



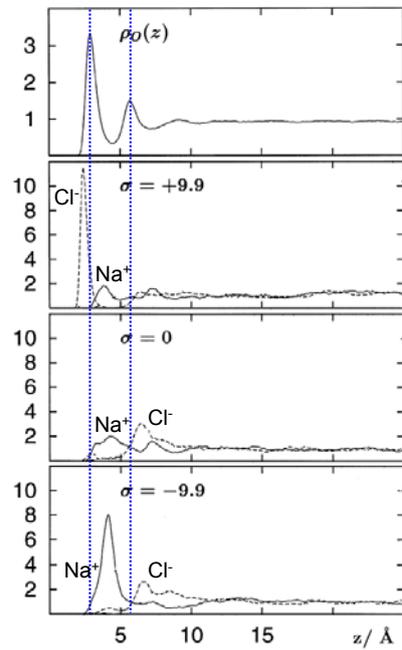
Toney et al., Nature 368 (1994) 445

Molekulardynamik-Simulationen

Beispiel:
Idealisiertes Metall (Hg) / NaCl
bei hoher Konzentration



E. Spohr, *Electrochim. Acta* **44** (1999) 1697

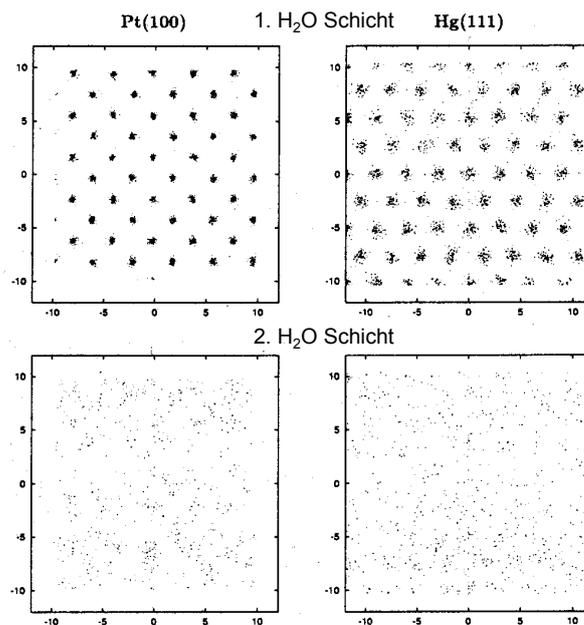


Grenzfläche Wasser - Metall

Einfluss der Oberfläche:

induzierte Ordnung in Flüssigkeit nahe der Oberfläche, abhängig von:

- Wechselwirkung der Flüssigkeitsspezies mit den Oberflächenatomen
- interatomaren Abständen in beiden Phasen



E. Spohr, in: *Computer simulation of electrochemical interfaces*
R.C. Alkire and D.M. Kolb, Eds.,
VCH, Weinheim (1999) 1-76.