



FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

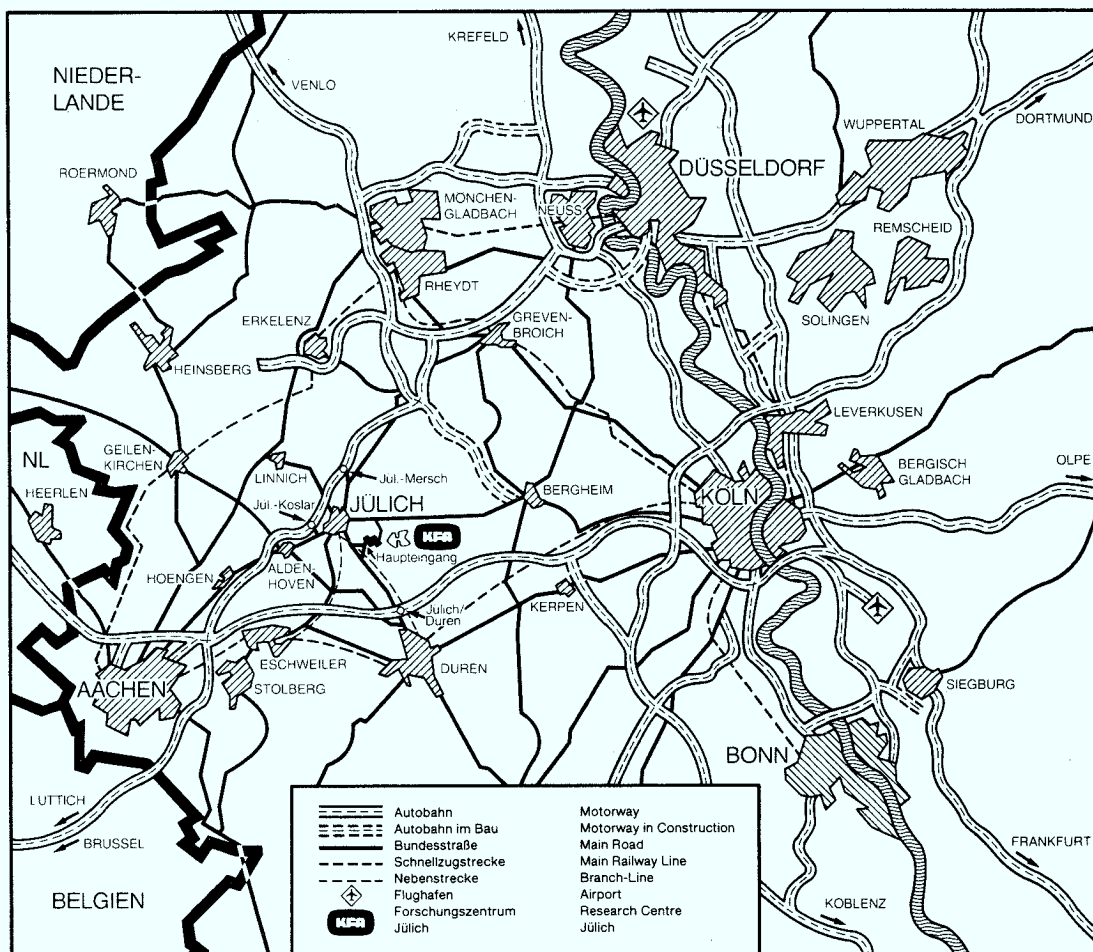
Institut für Festkörperforschung

**Theorie der
inelastischen Elektronenstreuung
an Metalloberflächen**

von

Wolfgang Piepke

**Jül-2395
Oktober 1990
ISSN 0366-0885**



Als Manuskript gedruckt

Forschungszentrum Jülich: Berichte Nr. 2395
 Institut für Festkörperforschung Jül-2395
 D 464 (Diss. Universität-GH-Duisburg)

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK · Forschungszentrum Jülich GmbH
 Postfach 19 13 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)
 Telefon: 02461/61-0 · Telex: 833556-70 kfa d · Telefax: 02461/61-61 03

Theorie der inelastischen Elektronenstreuung an Metalloberflächen

von
Wolfgang Piepke

Abstract

Two methods have been developed in order to calculate the inelastic scattering of electrons from metal surfaces. The first method uses a formalism based on the Fermi Golden-Rule. Accounting for the angular resolved density of states (experiments are typically angular resolved) caused this method to be numerically too cumbersome.

The second method uses a Greensfunction formalism, which calculates the current of inelastic scattered electrons. This formalism avoids the difficulties which occurred in the Golden-Rule formalism by using an optical potential.

This second method has been applied to the homogeneous electron gas and the homogeneous electron gas with surface barrier. The latter case is the easiest way to realistically simulate the inelastic angular resolved electron scattering at solid state surfaces.

Closer to reality is the use of the layer-KKR-theory to calculate the states and propagators involved in the scattering at the real crystal. Within this framework the crystal atoms are allowed as scatterers. Consequently, it is possible to determine the electrons scattered inelastically at the real crystal.

These theories have been applied to the case of inelastic electron scattering from aluminium surfaces.

Zusammenfassung

Zwei Methoden wurden entwickelt, um die inelastische Elektronenstreuung an Metalloberflächen theoretisch zu untersuchen. Einmal wurde die Goldene-Regel der Streutheorie benutzt. Dabei verursachte die dort zu verwendende winkelaufgelöste Zustandsdichte einen numerisch zu hohen Aufwand, um mit dem winkelaufgelösten Streuexperiment vergleichbare Ergebnisse zu erhalten.

Weiter wurde ein Greensfunktionsformalismus entwickelt, der den Strom der inelastisch gestreuten Elektronen ermittelt. Dieser vermied, durch Verwendung eines optischen Potentials die Schwierigkeiten, die in der Goldenen-Regel auftraten.

Das zweite Modell wurde auf das homogene Elektronengas und das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere angewendet. Letzteres erwies sich als das einfachste Modell, um die winkelaufgelöste inelastische Elektronenstreuung an Festkörperoberflächen zu simulieren.

Dann wurde die Schicht-KKR-Theorie dazu verwendet, die an der Streuung am realen Kristall beteiligten Zustände und Propagatoren zu berechnen, so daß in diesem Teil der Arbeit die Kristallatome als Elektronenstreuer zugelassen sind. Somit ist es möglich, die am realen Kristall inelastisch gestreuten Elektronenströme zu berechnen.

Diese Theorien wurden dann zur Berechnung der inelastischen Elektronenstreuung an Aluminiumoberflächen verwendet.

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Die Wechselwirkungspotentiale	7
2.1. Das inelastische Wechselwirkungspotential	8
2.2. Das elastische Wechselwirkungspotential	11
3. Inelastische Streuung von langsamen Elektronen an Oberflächen : Verluststrom und Streuwahrscheinlichkeit	15
3.1. Überblick	15
3.1.1. Der Goldene-Regel-Formalismus	16
3.1.2. Die Schichtabhängigkeit der Übergangsmatrixelemente	23
3.2. Der Vielteilchenformalismus	27
3.2.1. Der Zusammenhang zwischen Verluststrom und Selbstenergie	28
3.2.2. Die Selbstenergieeinschübe in 2. Ordnung und die Verlustströme	31
3.2.3. Die Schichtabhängigkeit der Verlustströme	42
3.3. Äquivalenz zwischen dem Verluststrom- und dem Goldene-Regel- Formalismus	45
4. Die Verlustströme im homogenen Elektronengas	49
4.1. Energie- und winkelaufgelöste inelastische Elektronenstreuung im homogenen Elektronengas	50
4.2. Energie- und winkelaufgelöste inelastische Elektronenstreuung im homogenen Elektronengas mit Oberflächenbarriere	58
5. Zustände und Greensfunktionen in der Schicht-KKR-Theorie	65
5.1. Die Streuung von Elektronen am Einzelatom	68

5.2. Die Abbildungseigenschaften einer Schicht	72
5.3. Die Abbildungseigenschaften von Schichtsystemen	77
5.4. Die Konstruktion der LEED-Zustände	82
5.5. Die Konstruktion der Halbraumzustände	84
5.6. Die Greensfunktionen der Halbraumzustände	86
5.6.1. Die Berechnung der Leerschicht-Greensfunktion	87
5.6.2. Die Berechnung der Schicht-Greensfunktion	91
5.6.3. Die Greensfunktion für verschiedene Schichten	92
6. Die Übergangsmatrixelemente	97
6.1. Die Übergangsmatrixelemente des Goldenen-Regel-Formalismus	97
6.2. Die Matrixelemente in den Verlustströmen	101
7. Anwendungen	104
7.1. Der Goldene-Regel-Formalismus	105
7.2. Die Auswertung der Verlustströme an einer Al(100)-Oberfläche	107
7.2.1. Die Potentiale	107
7.2.2. Einiges zur Konvergenz	110
7.2.3. Informationen zu den Zuständen	114
7.2.4. Die Verlustströme an einer Al(100)-Oberfläche	120
8. Numerische Aspekte	129
9. Zusammenfassung	135
Anhang A. Die potentialfreie symmetrieangepaßte Greensfunktion	137

Anhang B. Die Greensfunktion für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere	143
Anhang C. Zeitumgekehrter LEED-Zustand und Greensfunktion	147
Anhang D. Die Integration über die Oberflächenbrillouinzone	151
Anhang E. Das Transformationsverhalten von Zuständen und Greens- funktionen in der fcc (100) Oberflächenbrillouinzone	158
Anhang F. Die Radialintegrale der Matrixelementberechnung	161
Anhang G. Die Matrixelemente im Zwischen-Muffin-Tin-Bereich	171
Anhang H. Die Gaunt-Koeffizienten	172

1. Einleitung

Das physikalische Verhalten eines Kristalls zu kennen, heißt Kenntnisse über die elektronischen Eigenschaften des Festkörpers zu besitzen. Sind diese Eigenschaften bekannt, so lassen sich zum Beispiel makroskopisch die Festigkeitseigenschaften dieses Materials bestimmen. Mikroskopisch hängen zum Beispiel die magnetischen Eigenschaften des Festkörpers von den Elektronen ab. Die gesamte elektronische Datenverarbeitung ist erst möglich geworden durch die Kenntnis des Verhaltens der Elektronen in Halbleitern.

Heute ist man im Besitz vieler experimenteller Methoden, um die elektronischen Zustände der Elektronen im Kristall zu bestimmen. Möchte man realistisch eine Oberfläche in die Betrachtungen miteinbeziehen, so haben sich unter anderem die Methoden der niederenergetischen Elektronenbeugung^[1] an Kristalloberflächen sowie die Photoemission erfolgreich etabliert (Feder (1985)) und neue Erkenntnisse über die elektronischen Zustände geliefert. Im ersten Fall ist ein angeregtes Elektron, d.h. $E > E_{Fermi}$, die Sonde, mit der man den Festkörper untersucht, im zweiten Licht, welches mit seiner Energie ein Festkörperelektron anregt, das dann aus dem Kristall austritt und gemessen wird. Beide Experimente sind so ausgelegt, daß die Wechselwirkung zwischen Elektron und Kristall ohne Energieverlust untersucht werden kann.

Die inelastische Elektronenstreuung oder Energieverlustspektroskopie wird seit langem schon angewendet, um Volumen- und Oberflächeneigenschaften von Kristallen zu untersuchen und damit wieder Erkenntnisse über das Verhalten der Elektronen zu gewinnen. Mit dieser Methode können, wie in der Photoemission und mit LEED auch, Anregungsspektren von Quasiteilchen ("Teilchen" mit endlicher Lebensdauer) gemessen sowie theoretisch berechnet werden.

Bei der Energieverlustspektroskopie wird ein monoenergetischer Elektronenstrahl auf die Oberfläche eines Kristalls gelenkt. Die in den Kristall eindringenden Elektronen wechselwirken einmal mit den Atomrümpfen der das Kristallgitter bildenden Atome, zum anderen mit den die Kerne abschirmenden Ladungen. Das einfallende Elektron wird im Kristall mehrfach gestreut, bei der Wechselwir-

^[1]Hinfort mit LEED, Low Energy Electron Diffraction, abgekürzt.

kung mit den Festkörperelektronen einen Energieverlust erfahren und hauptsächlich durch die Wechselwirkung an den Atomrümpfen seine Richtung ändern, so daß es bei ausreichender Energie wieder zur Oberfläche gestreut wird, aus dem Kristall austritt und gemessen werden kann. Die elastisch wie inelastisch rückgestreuten Elektronen tragen nun Informationen über den Kristall, zum Beispiel über sein elektronisches Wechselwirkungspotential, über die besetzten und unbesetzten Elektronenzustände und über seine magnetischen Eigenschaften.

In der inelastischen Elektronenstreuung haben die aus dem Festkörper austretenden Elektronen niedrigere Energie als die einfallenden, gleichzeitig ist die Austrittsrichtung verschieden zur Eintrittsrichtung. Somit wurden dem Kristall Energie und Impuls zugeführt, das heißt, er wurde angeregt. Der Kristall kann nun in verschiedener Weise auf diese Störung reagieren, je nachdem wie groß die übertragene Energie (und Impuls) ist.

Denkt man sich den Kristall vor der Störung im Grundzustand und stellt sich die Elektronen in einem Metall als nahezu frei beweglich vor, so wird ein diesen Grundzustand störendes, auf die Oberfläche auftreffendes Elektron die Festkörperelektronen zu Abschirmbewegungen und bei bestimmten Anregungsenergien das Elektronengas zu einer kollektiven Schwingung anregen. Diese kollektiven Schwingungen werden Plasmaschwingungen genannt. Deren Energie ist gequantelt, und man nennt das durch die Quantelung entstehende Quasiteilchen Plasmon. Kollektive Phänomene wie die Anregung von Volumenplasmonen wurden von Bohm, Pines (1951) und Oberflächenplasmonen von Ritchie (1957) theoretisch vorausgesagt. Deren Messung ist mit Hilfe der inelastischen Elektronenstreuung zum Beispiel an Li, Mg, Al mit Elektronen ab einer Primärenergie von 5eV (Ertl, Küppers (1974)) möglich. Plasmonen werden durch die zur Verfügung gestellte Verlustenergie angeregt, die durch sie hervorgerufenen Maxima in den Verluststromspektren wandern somit bei veränderter Primärenergie in konstantem Abstand mit.

Weiter können die Atomrümpfe durch die übertragene Energie zu Gitterschwingungen angeregt werden, deren kleinstes Energiequant Phonon genannt wird. Diese Anregung kann ebenfalls mit Hilfe der inelastischen Elektronenstreuung untersucht werden (Ibach (1980)). Die Maxima in den Phononen-Verluststromspektren haben lediglich eine Breite von wenigen zehntel eV und lie-

gen sehr nah an dem Maximum der elastisch gestreuten Elektronen, so daß sie ohne weiteres von Maxima, die durch andere Prozesse entstanden sind, unterschieden werden können (Ertl, Küppers (1974)).

Der in der vorliegenden Arbeit näher zu untersuchende Prozeß ist die Anregung eines im Grundzustand befindlichen Festkörperelektrons mit der dem Kristall durch die Energiedifferenz der ein- und mit anderer Energie austretenden niederenergetischen Elektronen zur Verfügung gestellten Energie (und Impuls). Das angeregte Elektron hinterläßt in dem zuvor besetzten Grundzustand eine Leerstelle, ein sogenanntes Loch. Damit ist dann eine Elektron-Lochpaar Anregung erfolgt. Haben die vom Experiment präparierten, in den Kristall eindringenden Elektronen niedrige Energie, hat dies den Vorteil, daß die Elektronen eine geringe Eindringtiefe haben und man somit eine oberflächensensitive Meßmethode hat. Dieser Eigenschaft hat die zu entwickelnde Theorie Rechnung zu tragen.

Nun besitzen die Elektronen noch einen Spin. Er ist verantwortlich für das ferromagnetische Verhalten einiger Metalle. Mit Hilfe der spinaufgelösten inelastischen Elektronenstreuung ist es möglich, magnetische Oberflächen zu untersuchen. In einem Ferromagneten ist die Anzahl der besetzten Zustände für Majoritäts-Spin- ($|\uparrow\rangle$) Elektronen größer als die der mit Minoritäts-Spin- ($|\downarrow\rangle$) Elektronen besetzten. Daraus resultiert ein magnetisches Moment, welches den Ferromagnetismus erklärt. Die Energie-Impuls $E(\mathbf{k})$ -Beziehung, die Bänder, der ferromagnetischen Materialien sind mit einer unterschiedlichen Anzahl von Spin- $|\uparrow\rangle$ und Spin- $|\downarrow\rangle$ Elektronen besetzt, sie sind daher austauschgespalten. Bei dieser Austauschspaltung ist es nun möglich, mit Hilfe der inelastischen Elektronenstreuung ein Elektron-Lochpaar anzuregen, bei dem Elektron und Loch unterschiedliche Spins besitzen. Diese sogenannte Spin-Flip Streuung wird Stoner-Anregung oder auch magnetische Anregung (Venus, Kirschner (1988)) genannt. Mit ihr kann die räumliche und energetische Verteilung der Austauschspaltung der Bänder von Ferromagneten untersucht werden. Dies wurde erstmals von Hopper et al. (1984) an einem ferromagnetischen Glas und von Kirschner (1984) an einer Nickel(110) Schicht experimentell ausgeführt. Kirschner (1985b) berichtete erstmals von einem spin-, winkel- und energieaufgelösten inelastischen Elektronenstreuexperiment, bei dem die Spinpolarisation der in den Kristall eintretenden wie

austretenden Elektronen separat bestimmt werden konnte. Weitere Experimente wurden von Kirschner, Suga (1986) an Eisen, Idzerda et al. (1988) an Kobalt, Abraham, Hopster (1989) an Nickel und Mulhollan et al. (1990) an Cu(100) und Mo(110) ausgeführt.

In der vorliegenden Arbeit soll eine mikroskopische Theorie entwickelt werden, die die spin- und winkelaufgelöste niederenergetische inelastische Elektronenstreuung an Metallen beschreibt. Insbesondere die Spinabhängigkeit der Elektronen muß berücksichtigt werden, so daß auch ferromagnetische Materialien damit behandelt werden können. Zur Beschreibung von Oberflächen müssen die elektronischen Zustände als Eigenzustände eines halbunendlichen Kristalls konstruiert werden.

Wie oben beschrieben, interessieren die sogenannten Spin-Flip-Prozesse, bei denen der Spin der gemessenen Elektronen entgegengesetzt zu dem der eingeschossenen ist. Die Spinumkehr kann bei Materialien mit kleiner Kernladungszahl Z nur durch Austauschprozesse stattfinden, denn dann ist die Spin-Bahnpkopplung vernachlässigbar. Dabei verbleibt das eingeschossene Elektron im Festkörper, regt aber ein zuvor im Grundzustand befindliches Elektron an, welches dann austritt und gemessen wird. Man erhält durch dieses ehemalige Festkörperelektron unmittelbar Informationen über den Festkörper und seine magnetischen Eigenschaften, die zuvor beschriebene Stoner-Anregung und die wellenvektorabhängige Austauschspaltung in der Einheitszelle des Kristalls.

Zur Beschreibung der Spin-Flip-Streuprozesse muß die Theorie Austauscheffekte enthalten, was in manchen bisher entwickelten Theorien wegen der hohen Energie der Elektronen vernachlässigt wurde (Echenique et al. (1987)). Dort nimmt man an, daß die ein- und austretenden Elektronen wegen ihrer hohen Energie von den langsameren Festkörperelektronen unterschieden werden können (Sturm (1980)). Zudem regt man bei höherenergetischen, in den Kristall eintretenden Elektronen mit möglichem hohen Energieverlust Festkörperelektronen in sehr viel tiefer liegenden Energieniveaus an, als es bei Untersuchungen an Leitungsbändern nötig ist. Diese Zustände sind stark lokalisiert, was bei Leitungsbandelektronen keineswegs der Fall ist. Daher sind von Mila, Noguera (1987), Moser, Wendin (1988) oder Saldin (1988) entwickelte Theorien für lokalisierte

Festkörperelektronen in der niederenergetischen inelastischen Elektronenstreuung nicht anwendbar.

Neben der Untersuchung einfacher Metalle ist es auch möglich, dünne magnetische Schichten mit der inelastischen Elektronenstreuung zu untersuchen. Wird eine solche Schicht ummagnetisiert, so ändert sie ihre Streueigenschaften, und die Anzahl der rückgestreuten Elektronen wird geändert sein zu der, die bei der ursprünglichen Magnetisierung reflektiert wurde. Von praktischem Interesse ist dabei, daß mit diesen Schichten zum Beispiel mit Elektronen lesbare Informationsspeicher hergestellt werden könnten. Zu beachten ist dabei die geringe Wellenlänge der Elektronenwelle, so daß auf kleinstem Raum gespeicherte Informationen gelesen werden könnten.

Von theoretischem Interesse ist die inelastische Elektronenstreuung noch, weil sie das Absorptionsverhalten von Licht aber auch Elektronen eines Kristalls untersucht. Makroskopisch gewinnt man Erkenntnisse über die Abhängigkeit der Dielektrizitätskonstante von den übertragenen Anregungsenergien und -impulsen (Echenique et al. (1987), Echenique et al. (1990)). Mikroskopisch ergibt sich die Möglichkeit, die Energie des Elektrons, das mit einem Ensemble vieler zuvor im Grundzustand befindlicher Elektronen wechselwirkt, die sogenannte Selbstenergie, außerhalb des Homogenen-Elektronengas-Modells zu untersuchen. Yoshioka (1957) führte die Absorption hochenergetischer Elektronenstrahlen auf einen Imaginärteil eines aus der Selbstenergie berechneten optischen Potentials zurück. Jones, Strozier (1969) wandten diese Theorie auf die LEED-Theorie an und konnten damit zum Beispiel die Breite und Asymmetrie der Maxima experimenteller LEED-Spektren besser reproduzieren.

Sham, Kohn (1965) wiesen nach, daß ausgehend von der nichtlokalen, komplexen und energieabhängigen Selbstenergie mit verschiedenen Näherungen ein Austausch und Korrelation beinhaltendes Einteilchenpotential folgt. Dazu äquivalent ist die von ihnen vorher abgeleitete Lokale-Dichte-Näherung (Kohn, Sham (1965)), die in der Dichte-Funktional-Theorie (Hohenberg, Kohn (1964)) zu einer, die Wechselwirkung zwischen dem betrachteten Elektron und allen anderen Festkörperelektronen näherungsweise beschreibenden, effektiven Einteilchengleichung führt. Sham, Kohn (1965) sowie Hedin, Lundqvist (1971) wiesen darauf

hin, daß dieses effektive Einteilchenpotential in modifizierter Form auch zur Berechnung von angeregten Zuständen (mit Vorsicht, nur für Übergänge von $|N; 0 \rangle$ zu $|N \pm 0, 1; s \rangle$ -Teilchen Systemen) anwendbar ist, was gerade wieder auf die an der inelastischen Elektronenstreuung beteiligten und in der dazugehörigen Theorie zu berechnenden, angeregten LEED-und Lochzustände Auswirkungen hat.

2. Die Wechselwirkungspotentiale

In dieser Arbeit soll die Wechselwirkung zwischen in den Festkörper eingeschossenen ($E > E_{Vac}$ ^[2]) Elektronen und den Festkörperelektronen untersucht werden. Dabei wird die Propagation der Teilchen zwischen den inelastischen Streuakten mit Hilfe der elastischen Streuung beschrieben, welche gegenüber der inelastischen Wechselwirkung zu unterscheiden ist. In diesem Kapitel sollen das Potential konstruiert werden, welches bei dem inelastischen Streuakt wirksam ist, und einige Betrachtungen angestellt werden über die Auswahl von mit der Dichte-Funktional-Theorie berechneten effektiven Einteilchenpotentialen, die zur Beschreibung der elastischen Elektron-Elektron-Wechselwirkung dienen. Die Ausführungen sollen eine kurze Begründung geben, warum für den Grundzustand der Elektronen berechnete Potentiale in modifizierter Form auch zur Berechnung angeregter Zustände verwendet werden können.

An der inelastischen Elektronenstreuung beteiligte Zustände werden in folgender Weise benannt. Die durch das Experiment präparierten Elektronen sind im sogenannten Zustand 1. Jene, die mit niedrigerer Energie in Reflexion austreten und gemessen werden, sind im Zustand 2. Die Festkörperelektronen, die sich vor der Wechselwirkung im Grundzustand befinden, werden angeregt und sind dann im Zustand 4, und das dabei entstehende Loch wird als Zustand 3 bezeichnet.

Als Einheitensystem wurden atomare Einheiten gewählt, das heißt, daß

$$e = m_e = \hbar = 1$$

ist.

^[2]Hinfort wird die Vakuumenergie mit E_{Vac} abgekürzt.

2.1. DAS INELASTISCHE WECHSELWIRKUNGSPOTENTIAL

Formuliert man die inelastische Wechselwirkung von Elektronen mit Einteilchengleichungen, die untereinander unabhängige Teilchen voraussetzen, so wird die Wechselwirkung der eingeschossenen Elektronen mit denen im Festkörper durch ein Coulomb-Potential beschrieben. Nun sind die Teilchen, während sie wechselwirken, zum Beispiel in ihrer Energie und damit ihrem Potential nicht unabhängig voneinander, und das tatsächliche Potential wird von der reinen Coulombschen Form abweichen. Man versucht, die gegenseitige Beeinflussung der Teilchen durch Berücksichtigung der Vielteilcheneffekte bei der Konstruktion des Wechselwirkungspotentials der inelastischen Streuung miteinzubeziehen. Anschaulich kann man beim Eindringen einer Probeladung in eine gleichnamige Ladungsverteilung eine Abstoßung der Ladungen in der Verteilung durch die Probeladung feststellen. Eine geeignete Vielteilchenkorrektur des Coulomb-Potentials wird eine Abschirmung der Ladungsverteilung gegen die eindringende Probeladung sein. In dieser Abschirmung sollten im Idealfall alle Vielteilchenkorrekturen des Anregungsprozesses wie Absorption der Elektronen, kollektive Anregungen (das heißt zum Beispiel Plasmon- und Phonon-Anregungen) und weitere ähnliche Effekte Berücksichtigung finden. Dies kann nur näherungsweise zum Beispiel mit der Random-Phase-Approximation^[3] (Mattuck (1970)) geschehen. In der vorliegenden Arbeit ist das einfachste Abschirmmodell nach Thomas-Fermi verwendet worden.

Wird eine Probeladung in eine zuvor im Gleichgewicht befindliche Ladungsverteilung gebracht, so induziert sie zusätzliche Felder. Findet die Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Leitungsbandbereich der Festkörperelektronen statt, so kann man zum Beispiel bei Aluminium ein nahezu freies Elektronengas voraussetzen. Die Gesamtladung setzt sich dann zusammen aus der Probeladung und der durch sie induzierten Ladungsverteilung (Ashcroft, Mermin (1975)).

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_{ext}(\mathbf{r}) + \rho_{ind}(\mathbf{r})$$

Die so erzeugten Ladungsverschiebungen führen zu einer zusätzlichen Polarisierung (durch die Ladungsdichte erzeugtes Dipolmoment, multipliziert mit der Teilchenanzahl) $\mathbf{P} = N\langle\rho(\mathbf{r})\mathbf{r}\rangle$ und einer dielektrischen Verschiebung als Reaktion auf

^[3]Hinfort mit RPA abgekürzt.

das durch die Probeladung erzeugte elektrische Feld (Jackson (1983)) .

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \int_V \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \int_V (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + 4\pi\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (2.1)$$

Mit der Poisson-Gleichung für das externe Potential V_{ext} der Probeladung, der Ladungsdichte ρ_{ext} und der Potentialgleichung $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = -\nabla V_{ext}(\mathbf{r})$ erhält man

$$\nabla \mathbf{D}(\mathbf{r}) = -\Delta V_{ext}(\mathbf{r}) = 4\pi\rho_{ext}(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

sowie für $\mathbf{E}$

$$\nabla \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\Delta V(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}) . \quad (2.3)$$

Damit ist es möglich, einen Ausdruck für ϵ zu gewinnen, welches die gesuchte Abschirmung enthält und V mit V_{ext} verbindet. Ist das Medium homogen, wie es beim freien Elektronengas der Fall ist, so hängt ϵ und damit auch χ vom Abstand $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ab. Setzt man (2.2) und (2.3) in (2.1) ein und führt eine Fouriertransformation bezüglich $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ aus, so entsteht die gesuchte Beziehung.

$$V(\mathbf{q}) = \epsilon^{-1}(\mathbf{q}) V_{ext}(\mathbf{q}) \quad (2.4)$$

Im Thomas-Fermi-Modell (Ashcroft, Mermin (1975)) erhält man für dieses ϵ in Abhängigkeit von den Parametern des homogenen Elektronengases

$$\epsilon(\mathbf{q}) = 1 + \left(\frac{k_0^{TF}}{q} \right)^2$$

mit

$$k_0^{TF} = \left(\frac{16}{3\pi^2} \right)^{2/3} \left(\frac{r_s}{a_0} \right) .$$

r_s ist der mittlere Abstand der Elektronen im homogenen Elektronengas und durch die Dichte des homogenen Elektronengases festgelegt. a_0 ist der Bohr'sche Radius. r_s hängt vom gerade betrachteten Material, also Z , ab. Tabellen und Z -abhängige Ausdrücke für r_s findet man in Ashcroft, Mermin (1975). Damit ergibt sich das die inelastische Elektron-Elektron-Wechselwirkung beschreibende Potential näherungsweise (RPA) zu

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 + k_0^{TF2}} \quad (2.5) .$$

Natürlich sind neben dem Thomas-Fermi-Modell auch andere Abschirmmechanismen denkbar. Penn (1980) hat ergänzend zur Abschirmung im Thomas-Fermi-Modell auch die von Lindhard (1954), Kukkonen, Wilkins (1979) und Singwi (1970) mit in die Berechnung der inelastischen Elektronenstreuung einbezogen. Dies wäre als Erweiterung der vorliegenden Arbeit ebenfalls denkbar, um zum Beispiel eine langreichweitigere Wechselwirkung oder zum Beispiel Plasmonen-Anregungen^[4] zur besseren Interpretation der Verlustspektren mitzuberechnen.

Eine Fourierrücktransformation mit $V_{ext}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2}$ ergibt mit Hilfe des Residuensatzes das ortsabhängige Thomas-Fermi-abgeschirmte Coulomb-Potential

$$V(\mathbf{R}) = \frac{e^{-k_0^{TF} R}}{R} . \quad (2.6)$$

Wählt man das Koordinatensystem nicht wie bisher mit einem Elektron im Ursprung, sondern an einem beliebigen Ort, so erhält man ein nichtlokales Wechselwirkungspotential, indem in (2.6) R durch $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ersetzt wird.

Während (2.5) eine 3-dimensionale Fouriertransformation des Potentials (2.6) darstellt, kann man die einer Oberfläche angepaßte Form des Potentials (2.6) mit Hilfe einer zweidimensionalen Fouriertransformation gewinnen. Mit dem Ansatz für (2.6)

$$V(\mathbf{R}) = \int V(\mathbf{q}_{//}; z, z') e^{-i\mathbf{q}_{//}(\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//})} \frac{d^2 \mathbf{q}_{//}}{(2\pi)^2}$$

folgt mit Hilfe des Residuensatzes

$$V(\mathbf{q}_{//}; z, z') = \frac{2\pi}{\sqrt{\mathbf{q}_{//}^2 + k_0^{TF2}}} e^{-\sqrt{\mathbf{q}_{//}^2 + k_0^{TF2}} |z - z'|} . \quad (2.7)$$

Diese Form des inelastischen Wechselwirkungspotentials wird in Kapitel 4.2 benötigt.

[4] Dann müßte das hier verwendete $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ durch $\varepsilon(\mathbf{q}, \Delta E = E_1 - E_2)$ ersetzt werden, das heißt, auch ε kann inelastische Prozesse in Form von Anregungen von Quasiteilchen berücksichtigen.

2.2. DAS ELASTISCHE WECHSELWIRKUNGSPOTENTIAL

Ein auf einen im Grundzustand befindlichen Festkörper geschossenes Elektron und der Festkörper bilden ein aus dem Grundzustand $|N; 0\rangle$ angeregtes Gesamtsystem im s_1 -ten angeregten Zustand $|N + 1; s_1\rangle$. Der Zustand 3 ist isoliert von den anderen als ein $|N - 1; s_3\rangle$ Zustand zu verstehen. Die Zustände 2 und 4 sind angeregte $|N + 1; s_2\rangle$ und $|N; s_4\rangle$ Zustände. Dies wird an Bild 6, 7 deutlich. Diese Zustände werden mit Einteilchengleichungen, die die N -Teilcheneffekte näherungsweise in einem effektiven Einteilchenpotential enthalten (Hedin, Lundqvist (1969)), versucht zu berechnen. Mit der Dichte-Funktional-Theorie (Hohenberg, Kohn (1964)) und der dort verwendeten Lokalen-Dichte-Näherung (Kohn, Sham (1965)) ist es möglich, dieses Einteilchen-Grundzustandspotential, welches eine Ladung durch Wechselwirkung mit allen anderen Ladungen im Kristall hat, auf mikroskopischer Ebene näherungsweise zu ermitteln. Sham, Kohn (1965) haben gezeigt, daß das durch die Lokale-Dichte-Näherung gewonnene Potential auch aus einem sogenannten Massenoperator (auch Selbstenergie oder optisches Potential genannt) gewonnen werden kann. Dabei kann die Gleichung

$$i\dot{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) + \int \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \Psi(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt' \quad (2.8)$$

mit

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) e^{-iEt} \quad (2.9)$$

fouriertransformiert werden, was dann

$$\left\{ -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}) + \int \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \Psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

ergibt. $V(\mathbf{r})$ setzt sich additiv zusammen aus dem externen Potential der Probeladung und dem durch die Dichten der Festkörperladungen erzeugten Hartree-Potential. Dabei wird die Born-Oppenheimer-Näherung verwendet, die besagt, daß die Bewegung der Kerne von der der Elektronen entkoppelt ist. Weiterhin werden die Kerne als starr an den Gitterpunkten positioniert gedacht. Dies wird die Näherung der eingefrorenen Kerne genannt.

Das Σ -Potential für Leitungsbandelektronen von Metallen nähern Sham, Kohn (1965) durch das Selbstenergie-Potential des homogenen Elektronengases Σ_{hom} .

Dadurch hängt dieses Potential lediglich noch vom Abstand der wechselwirkenden Elektronen ab. Eine WKB-Näherung der Wellenfunktion in (2.8) und die Vernachlässigung der $\mathbf{r}'$ -Abhängigkeit von Ψ ^[5], wenn Σ_{hom} als Operator auf Ψ wirkt, ergibt dann einen Zusammenhang zwischen dem ursprünglich komplexen, nichtlokalen und energieabhängigen Selbstenergiepotential und einem selbstkonsistent berechenbaren, Austausch (x) und Korrelation (c) beinhaltenden, lokalen, effektiven Einteilchenpotential. Hedin, Lundqvist (1969) geben an, wie der Realteil dieses Potentials $V_{xc}^{eff,r}(\mathbf{r})$ zu berechnen ist. In der LEED-Theorie wird aber zusätzlich ein die Lebensdauer der Quasiteilchen berücksichtigender Imaginärteil im Potential benötigt (Hedin, Lundqvist (1971)). In dieser Arbeit wird ein sogenanntes optisches Potential der Form

$$\begin{aligned} V_{xc}^{eff}(\mathbf{r}) &:= \Sigma_{hom}(p(\mathbf{r}); E(p(\mathbf{r}); \rho(\mathbf{r})); \rho(\mathbf{r})) \\ &= V_{xc}^{eff,r}(\mathbf{r}; E) - iV_c^i(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (2.11)$$

verwendet. Unter $V_{xc}^{eff,r}$ und V_c^i wird der Real- und Imaginärteil des Potentials verstanden. Ein solcher lokaler Ausdruck für die Selbstenergie wurde für Kristalle, also außerhalb des Homogenen-Elektronengas-Modells, noch nicht gefunden. Man ist daher auf Näherungen für die Energieabhängigkeit von V_c^i (Lundqvist (1967)) oder empirische Modelle (Feder (1985) und Literatur darin) angewiesen. In der vorliegenden Arbeit wurde das allgemeine Potential (2.11) näherungsweise durch ein energieunabhängiges $V_{xc}^{eff,r}$ (Moruzzi, Janak, Williams (1978)) sowie einen vom Ort unabhängigen Imaginärteil $V_c^i \rightarrow V_{opt}^i$ (Lundqvist (1967)), welcher als Imaginärteil des optischen Potentials bezeichnet wird, ersetzt. Der energieabhängige Imaginärteil V_{opt}^i beschreibt die Absorption, das heißt die Lebensdauer der sogenannten Quasiteilchen, und wird durch die in Σ enthaltene Korrelation der Elektronen verursacht. Unter anderem durch diesen imaginären Anteil, und, wenn nötig (Clauberg (1984)), über eine Translation der Energieskala um $V_c^{eff,r}$ (Hedin, Lundqvist (1969)), den Realteil eines durch Korrelation entstandenen Selbstenergieanteils, können die angeregten Zustände ihre Berücksichtigung finden. Allein mit Dichte-Funktional-Theorie in Lokaler-Dichte-Näherung ermittelte rein reelle

[5] Dies ist wegen der voraussetzungsgemäß schwachen Ortsabhängigkeit im homogenen Elektronengas näherungsweise möglich.

Potential enthalten, im Gegensatz dazu, lediglich Grundzustandseigenschaften. Über die Selbstenergie ist es damit möglich, Quasiteilchen wie zum Beispiel Plasmonen in die Berechnung der Einteilchenpropagatoren für einen Festkörper mit Oberfläche miteinzubeziehen (Inkson (1973), Inglesfield, Wikborg (1973)).

Die Schrödinger-Gleichung, die in dieser Arbeit verwendet wird, ist eine Gleichung, die näherungsweise über den Imaginärteil V_{opt}^i auch angeregte $N \pm 1$ -Teilchenzustände zur Lösung hat (Hedin, Lundqvist (1971)).

$$\left\{-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) + V_{xc}^{eff}(\mathbf{r})\right\}\Psi_i(\mathbf{r}) = E_i\Psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

Hier können E_i als Anregungsenergie (woraus die Bandstruktur folgt) und Ψ_i als Zustände (zum Beispiel die später berechneten LEED-Zustände) physikalisch interpretiert werden.

Trotz der offensichtlich groben Näherungen ($\Sigma \rightarrow V^{eff}$) ergeben die effektiven Einteilchenpotentiale erstaunlich gut mit dem Experiment übereinstimmende, theoretisch berechnete LEED-Spektren (Feder (1985)) sowie Photoemissionsspektren (Feder (1985), Pendry (1976), Ackermann (1985)). Dieses realistische Verhalten der mit der Dichte-Funktional-Theorie berechneten Potentiale legt es nahe, auch die an der inelastischen Elektronenstreuung beteiligten Zustände mit (2.12) zu berechnen. Die Greensfunktion wird mit einer zu (2.12) äquivalenten Gleichung $(E - \mathcal{H})\mathcal{G} = 1$ ermittelt. Sie lautet in Ortsdarstellung

$$\left\{E - \left(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) + V_{xc}^{eff}(\mathbf{r})\right)\right\}\mathcal{G}^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.13)$$

In der vorliegenden Arbeit werden Potentiale, die selbstkonsistent mit der Dichte-Funktional-Theorie berechnet wurden, verwendet, um die Eigenzustände des Kristalls (2.12) oder die Propagatoren dieser Zustände zu berechnen. Sie werden in der Form

$$V^{eff}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V_{xc}^{eff}(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

in die Berechnungen eingehen. Diese Eigenzustände und Propagatoren werden mit der sogenannten Schicht-KKR Theorie^[6] konstruiert, die in Kapitel 5 dargestellt wird.

[6] Nach Korringa (1946), Kohn, Rostoker (1954) benannt und von Kambe (1967) auf Schichtsymmetrie umformuliert.

Wegen des Zusammenhangs $\Sigma \rightarrow V^{eff}$ ist es möglich, die Selbstenergie Σ in ihrer räumlichen Beschaffenheit experimentell und, ab zweiter störungstheoretischer Ordnung über das Modell des homogenen Elektronengases hinaus, theoretisch mit der inelastischen Elektronenstreuung zu untersuchen. Man tastet mit dem dabei entstehenden Vektor des Impulsübertrags $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ die Beschaffenheit der Selbstenergie in der Einheitszelle des betrachteten Kristalls ab und erhält wegen (2.11) auch Informationen über $V_c^i(E, \mathbf{r})$ ^[7]. Diese Untersuchung kann auch an Materialien mit austauschtaufgespaltenem Potential durchgeführt werden, wenn die inelastische Elektronenstreuung spinaufgelöst behandelt wird.

Eastman et al. (1983) stellten fest, daß die an Nickel gemessenen Photoemissionsspektren unter anderem eine um die Hälfte reduzierte Austauschspaltung als die mit Dichte-Funktional-Theorie berechneten Potentiale zeigen. Liebsch (1979) führte dies auf die starke Korrelation der d-Elektronen in Nickel zurück und versuchte, mit Hilfe von Korrekturen, die aus der Selbstenergie gewonnen werden können $V^{eff} = i\Im(\Sigma) + V_{xc}^{eff,r}$, sowie einer Translation der Energieskala um $\Re(\Sigma)$ ein die Korrelation der Elektronen beinhaltendes und daher realistischeres theoretisches Modell zu entwickeln, mit welchem die experimentellen Photoemissionsspektren besser interpretiert werden können (Clauberg (1984)).

Berechnungen an Ag(111)-Oberflächen von Tamura et al. (1989c) haben Diskrepanzen zwischen dem mit Lokale-Dichte-Näherung gewonnenen $V_{xc}^{eff,r}$ und daraus ermittelten Photoemissionsspektren ergeben, die unter anderem durch zu grobe Näherungen bei der Berechnung von $V_{xc}^{eff,r}$ mit der Lokale-Dichte-Näherung verursacht sein können. Auch dadurch erscheint eine Untersuchung von Σ außerhalb des Homogenen-Elektronengas-Modells mit der inelastischen Elektronenstreuung motiviert.

^[7]Ist zum Beispiel $\mathbf{q}$ groß, tastet man die nähere Umgebung im Ortsraum des betrachteten Punktes ab.

3. Inelastische Streuung von langsamen Elektronen an Oberflächen : Verluststrom und Streuwahrscheinlichkeit

3.1. ÜBERBLICK

In diesem Kapitel sollen die theoretisch berechenbaren Größen abgeleitet werden, die einen Vergleich mit dem Experiment zulassen.

Die naheliegende Methode ist, wie schon in der Theorie der Photoemission (Adawi (1964), Mahan (1970)), Fermi's Goldene Regel der Streutheorie zu benutzen, um die Übergangswahrscheinlichkeit der inelastischen Elektronenstreuung zu berechnen. Es ergab sich im Laufe der Arbeit, daß die erforderlichen Integrationen numerisch nicht ausgeführt werden können, da über stark variierende Funktionen integriert werden muß. Dies kann nur mit einem unvertretbar hohen numerischen Aufwand geschehen.

Eine zweite, erfolgversprechendere Methode ist, den Energieverluststrom aus einem nichtlokalen Selbstenergiepotential zu berechnen. Dieses Potential wird mit Hilfe der Vielteilchentheorie aus dem Störpotential und den Teilchenpropagatoren, den Greensfunktionen, konstruiert. Es hat den Vorteil, daß ein Imaginärteil im Elektronen-Streupotential die Konvergenz bei der Integration beschleunigt, die im Goldene-Regel-Formalismus Schwierigkeiten bereitet.

Beide Verfahren werden soweit entwickelt, daß sie auf Festkörper mit Oberflächen angewendet werden können. Ausgehend von dieser Formulierung, werden die Übergangsmatrixelemente in zur Oberfläche parallele Schichtbeiträge zerlegt.

3.1.1. DER GOLDENE-REGEL-FORMALISMUS

Eine mit dem Experiment zu vergleichende Größe, die theoretisch die inelastische Streuung von Elektronen untersucht, ist der differentielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma_{fi}$ (i für initial und f für final). $d^2\sigma_{fi}$ stellt eine Wahrscheinlichkeitsstromdichte von Teilchen dar, die pro Zeiteinheit in einen Raumwinkelbereich $d\Omega_f$ um die Raumwinkelrichtung Ω_f und in einen Energiebereich dE um E gestreut werden. $d^2\sigma_{fi}$ wird mit dem Betrag der Wahrscheinlichkeitsstromdichte des Anfangszustands $\frac{j_i}{(2\pi)^3}$ normiert. Aus dem differentiellen Wirkungsquerschnitt kann die Streuintensität oder der Verluststrom $dj_{fi} = d\sigma_{fi}(E, \Omega_f) \frac{j_i}{(2\pi)^3}$ nach Joachain (1975) mit

$$j_{fi} = \frac{d^2\sigma_{fi}}{d\Omega_f dE} = \frac{(2\pi)^3}{|j_i|} \frac{dw_{fi}}{d\Omega_f} \quad (3.1)$$

berechnet werden. dw_{fi} bezeichnet dabei die Übergangswahrscheinlichkeit des Systems pro Zeiteinheit vom Zustand i in den Zustand f. dw_{fi} wird in der zeitabhängigen Dirac'schen Störungstheorie (Joachain (1975)) berechnet zu

$$\frac{dw_{fi}}{d\Omega_f} = 2\pi \int |T_{fi}|^2 \rho(\alpha_i, \alpha_f) d\alpha_i d\alpha_f \quad (3.2)$$

Dabei ist das Übergangsmatrixelement T_{fi} des Störpotentials (2.6) gegeben durch

$$T_{fi} := \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (3.3)$$

Ψ_i und Ψ_f sind die Zweiteilchen Anfangs- und Endzustände, die berechnet werden müssen. $\rho(\alpha_i, \alpha_f)$ setzt sich zusammen aus den Zustandsdichten der Vielteilchenzustände, die ein kontinuierliches Eigenwertspektrum $E(\alpha)$ besitzen, hier also die Festkörperzustände 3 und 4 (siehe Bild 2), sowie der Dichte des gemessenen Zustands ρ_2 . Dieser Zustand wird in Form einer ebenen Welle gemessen, das heißt, daß

$$\rho_2(E_2) = k_2^2 \frac{dk_2}{dE_2} = k_2$$

ist.

Die zugrundegelegte Streugeometrie ist in Bild 1 dargestellt.

Bild 1 enthält der besseren Übersicht wegen lediglich die Wellenvektoren der durch das Experiment präparierten und gemessenen Elektronen. Diese wechselwirken

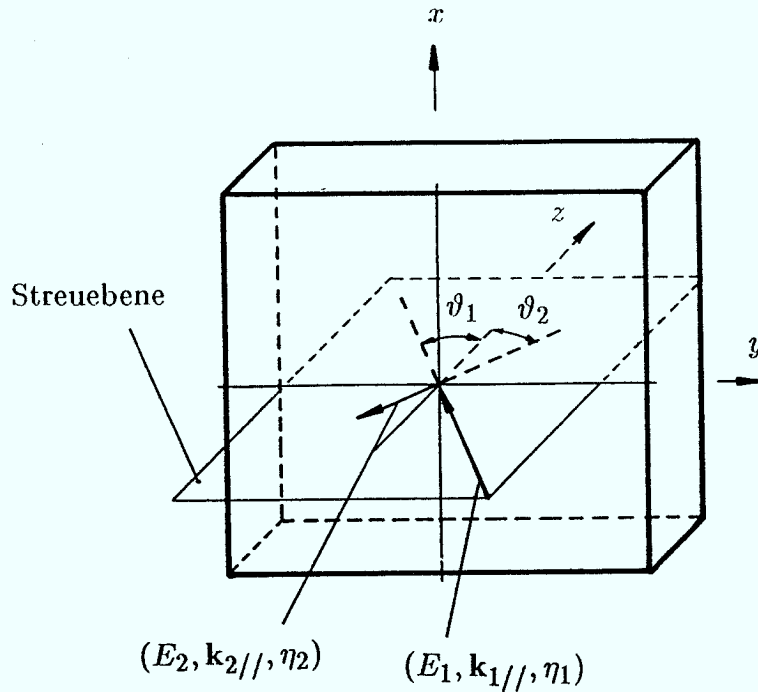


Bild 1 : Die Streugeometrie für die inelastische Elektronenstreuung, wie sie durch das Experiment vorgegeben ist.

mit den Festkörperelektronen, so daß die Gesamtzustände Ψ_f und Ψ_i die durch das Experiment vorgegebenen Zustände 1 und 2 (Bild 2) und die Festkörperelektronenzustände 3 und 4 (Bild 2) enthalten müssen. Da es sich bei Elektronen um Fermionen handelt, muß das Pauli'sche Ausschließungsprinzip erfüllt sein. Das erfordert, daß die Einteilchenzustände in antisymmetrisierter Form in Ψ_f und Ψ_i eingehen.

Betrachtet man einen Volumenkristall ohne Oberfläche, bleibt bei der Streuung der Elektronen deren Impuls bis auf Gittervektoren erhalten, und es genügen zur eindeutigen Kennzeichnung eines Zustandes das dreidimensionale $\mathbf{k}$ und der Bandindex. In einem Festkörper mit Oberfläche ist die Translationssymmetrie senkrecht zur Oberfläche gebrochen (hier in z -Richtung). Folglich gibt es keinen Impulserhaltungssatz der Elektronen in dieser Richtung (Theorem von E.Noether; dargestellt in Greiner (1985)). Wegen der gitterperiodisch angeordneten atomaren Streuzentren entlang der Oberfläche (hier die x,y -Richtung) bleibt der Impuls $\mathbf{k}_{//}$ in diesen Richtungen bis auf reziproke Gittervektoren erhalten. Daher ist es nicht mehr möglich, einen Zustand durch sein $\mathbf{k}$ und Bandindex zu kennzeichnen, weil

eine eindeutige Beziehung zwischen k_z und E fehlt. Um nun einen elektronischen Zustand α eindeutig zu kennzeichnen, müssen dessen Energie E_α , der Impuls parallel zur Oberfläche $\mathbf{k}_{\alpha//}$ und der Spin η_α des Elektrons vorgegeben sein. Im folgenden wird ein Zustand $\langle \mathbf{r}_i, \sigma_i | (\eta_\alpha, E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//}) \rangle$ durch

$$\Psi_{E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//}}^{\eta_\alpha}(\mathbf{r}_i, \sigma_i) = \eta_\alpha(\sigma_i) \psi_{E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//}}^{\eta_\alpha}(\mathbf{r}_i) =: \eta_\alpha(\sigma_i) \psi_\alpha(\mathbf{r}_i) \quad (3.4)$$

symbolisiert. Der Spinindex η_α in ψ^{η_α} soll daran erinnern, daß die Wellenfunktion wegen V^{eff, η_α} ebenfalls spinabhängig ist und der Spin nicht nur in den spinabhängigen Faktoren auftritt. Die Spinabhängigkeit in ψ wird durch ein möglicherweise austauschaufgespaltenes Potential erzeugt, welches sich für Spin- $|\uparrow\rangle$ -Elektronen unterscheidet zu dem für Spin- $|\downarrow\rangle$ -Elektronen. Diese Spinabhängigkeit wird durch das Miteinbeziehen von ferromagnetischen Materialien in die Theorie verursacht, die ihrerseits durch das Pauli-Prinzip verursachte austauschaufgespaltene Potentiale besitzen. Nun lassen sich die initialen und finalen Zweiteilchenzustände in der Näherung, in der die Teilchen als unabhängig betrachtet werden^[8], antisymmetrisch aus Einteilchenzuständen zusammensetzen, wie zum Beispiel von Kessler (1985) angegeben

$$\Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \eta_1(\sigma_1) \psi_1(\mathbf{r}_1) \eta_3(\sigma_2) \psi_3(\mathbf{r}_2) - \eta_1(\sigma_2) \psi_1(\mathbf{r}_2) \eta_3(\sigma_1) \psi_3(\mathbf{r}_1) \} \quad (3.5)$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \eta_2(\sigma_1) \psi_2(\mathbf{r}_1) \eta_4(\sigma_2) \psi_4(\mathbf{r}_2) - \eta_2(\sigma_2) \psi_2(\mathbf{r}_2) \eta_4(\sigma_1) \psi_4(\mathbf{r}_1) \} \quad (3.6)$$

Die bei der inelastischen Elektronenstreuung möglichen Prozesse, direkte und Austauschstreuung, sind schematisch in Bild 2 dargestellt. Einen Imaginärteil im Potential der Halbraum-Zustände 3 und 4 ist aus Gründen, die später erläutert werden, nicht möglich zu berücksichtigen. Das heißt, die Teilchen haben keine endliche Lebensdauer; somit kann der Zustand 3 nicht als Lochzustand behandelt werden, was er in einem die realen Verhältnisse beschreibenden Modell aber sein

[8] Die gleiche Näherung wird zum Beispiel in der Theorie der Photoemission von Bardyszewski, Hedin (1985) angewendet, aber dort ohne die Austauschkopplung.

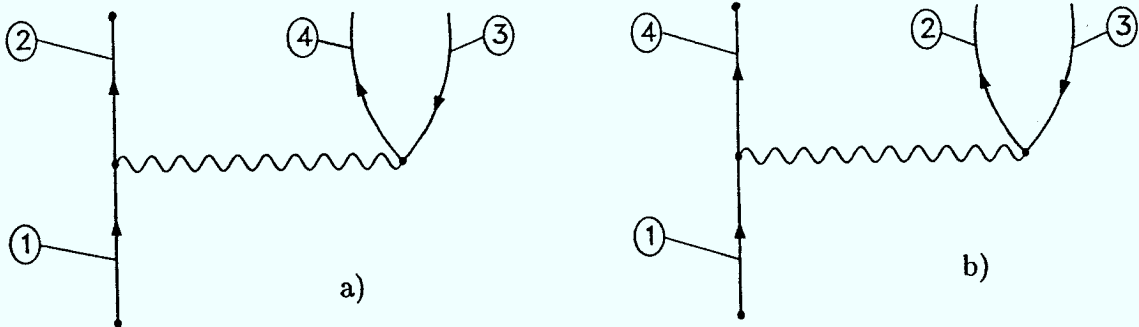


Bild 2: Darstellung der Propagation der in den Festkörper eingeschossenen (1) und gemessenen (2) sowie der mit ihnen wechselwirkenden Festkörperelektronen (3) und (4) durch Feynman-Graphen. a) Direkter- und b) Austauschstreuprozess.

Setzt man (3.6) und (3.5) in (3.3) ein, erhält man die Übergangswahrscheinlichkeiten für die in Bild 2 aufgeführten spinabhängigen Streuprozesse. Diese können dann durch folgende Ortsintegrale berechnet werden

$$f_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} = \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \int \psi_2(1)^* \psi_4(2)^* V(1, 2) \psi_1(1) \psi_3(2) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \quad (3.7)$$

mit^[9]

$$\Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} := \xi_1^f \times \xi_2^f = \left(\sum_{\sigma_1} \langle \eta_2(\sigma_1) | \eta_1(\sigma_1) \rangle \right) \left(\sum_{\sigma_2} \langle \eta_4(\sigma_2) | \eta_3(\sigma_2) \rangle \right)$$

und

$$g_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} = \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \int \psi_2(1)^* \psi_4(2)^* V(1, 2) \psi_1(2) \psi_3(1) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \quad (3.8)$$

mit

$$\Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} := \xi_1^g \times \xi_2^g = \left(\sum_{\sigma_1} \langle \eta_2(\sigma_1) | \eta_3(\sigma_1) \rangle \right) \left(\sum_{\sigma_2} \langle \eta_4(\sigma_2) | \eta_1(\sigma_2) \rangle \right)$$

^[9] Falls $\eta_i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, dann ist $\eta_i(\sigma_1 = +) = 1$ und $\eta_i(\sigma_1 = -) = 0$

mit

$$\Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} =: \xi_1^g \times \xi_2^g = \left(\sum_{\sigma_1} \langle \eta_2(\sigma_1) | \eta_3(\sigma_1) \rangle \right) \left(\sum_{\sigma_2} \langle \eta_4(\sigma_2) | \eta_1(\sigma_2) \rangle \right)$$

In Tabelle 1 sind die möglichen 6 spinabhängigen Streuprozesse aufgeführt .

(i)	$\eta_1 + \eta_3 \rightarrow \eta_2 + \eta_4$	$f_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} - g_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4}$	ξ_1^f	ξ_2^f	ξ_1^g	ξ_2^g
1	$ \uparrow\rangle + \uparrow\rangle \rightarrow \uparrow\rangle + \uparrow\rangle$	$f_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} - g_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow}$	1	1	1	1
2	$ \uparrow\rangle + \downarrow\rangle \rightarrow \uparrow\rangle + \downarrow\rangle$	$f_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow}$	1	1	0	0
3	$ \uparrow\rangle + \downarrow\rangle \rightarrow \downarrow\rangle + \uparrow\rangle$	$-g_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow}$	0	0	1	1
4	$ \downarrow\rangle + \downarrow\rangle \rightarrow \downarrow\rangle + \downarrow\rangle$	$f_{\downarrow\downarrow}^{\downarrow\downarrow} - g_{\downarrow\downarrow}^{\downarrow\downarrow}$	1	1	1	1
5	$ \downarrow\rangle + \uparrow\rangle \rightarrow \downarrow\rangle + \uparrow\rangle$	$f_{\downarrow\uparrow}^{\downarrow\uparrow}$	1	1	0	0
6	$ \downarrow\rangle + \uparrow\rangle \rightarrow \uparrow\rangle + \downarrow\rangle$	$-g_{\downarrow\uparrow}^{\downarrow\uparrow}$	0	0	1	1

Tab. 1: Spinkonfigurationen für die Direkte (f)-und Austauschstreue (g) , die bei der inelastischen Elektronenstreuung möglich sind .

Dem Experiment direkt zugänglich sind aber nur die spinabhängigen Größen, die durch den Zustand 1 vorgegeben werden können und durch den gemessenen Zustand 2 festliegen. Die Spins der Festkörperzustände lassen sich durch das Experiment nicht festlegen, gehen aber in summierter Form indirekt in die Meßergebnisse ein (3.11). Es sind für die Übergänge folgende Spinkonfigurationen möglich

$$\eta_1 \rightarrow \eta_2 : |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \text{ oder } |\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle \quad (i)$$

$$\eta_1 \rightarrow \eta_2 : |\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle \text{ oder } |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \quad (ii) .$$

Die jeweils letzten Spinkombinationen sind die sogenannten Spin-Flip-Prozesse.

Nimmt man an, die Dichten der Zustände seien unkorreliert, ersetzt die Vielteilchenzustandsdichte durch Produkte der Dichten der einzelnen Zustände und stellt die "guten" Quantenzahlen, das sind jene, mit denen ein Zustand eindeutig gekennzeichnet werden kann, mit $\alpha = \{ \eta_\alpha, E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//} \}$ dar, dann ist

$$\begin{aligned} \rho(\alpha_3, \alpha_4) d\alpha_3 d\alpha_4 &= \rho_2(\mathbf{k}_2) \rho^{\eta_3}(E_3, \mathbf{k}_{3//}) \rho^{\eta_4}(E_4, \mathbf{k}_{4//}) \\ &\times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2\mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2\mathbf{k}_{4//} \\ &=: k_2 \rho_3 \rho_4 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2\mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2\mathbf{k}_{4//} , \end{aligned} \quad (3.9)$$

weil (Raimes (1972)) (mit $\alpha = 3, 4$)

$$d^3\mathbf{k}_\alpha = \frac{dk_{\alpha,z}}{dE_\alpha} dE_\alpha d^2\mathbf{k}_{\alpha//} = j_{\alpha,z}^{-1} dE_\alpha d^2\mathbf{k}_{\alpha//} = \rho_\alpha dE_\alpha d^2\mathbf{k}_{\alpha//} \quad (3.10)$$

gilt. Normiert man die Zustände 3 und 4 nun mit $j_{\alpha,z}$, dem Strom, der durch eine senkrecht zur z-Achse liegende Fläche fließt, dann muß lediglich über $dE_\alpha d^2\mathbf{k}_{\alpha//}$ der Zustände 3 und 4 integriert werden. Energie und $\mathbf{k}_{\alpha//}$ sind aber gerade die zur eindeutigen Kennzeichnung eines Zustands notwendigen Größen. Die Wahrscheinlichkeit für den ersten Übergang in Prozeß (i) ist dann

$$\begin{aligned} \frac{dw_{fi}}{d\Omega_f} &= 2\pi k_2 \int \left(|f_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} - g_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow}|^2 + |f_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow}|^2 \right) \\ &\times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4 d^2\mathbf{k}_{3//} d^2\mathbf{k}_{4//} \end{aligned} \quad (3.11)$$

und für den zweiten Prozeß in (i)

$$\frac{dw_{fi}}{d\Omega_f} = 2\pi k_2 \int |g_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow}|^2 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4 d^2\mathbf{k}_{3//} d^2\mathbf{k}_{4//} . \quad (3.12)$$

Durch die Summe über $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ und $E_4, \mathbf{k}_{4//}$ kommt zum Ausdruck, daß alle Festkörperzustände 3 und 4 zur Übergangswahrscheinlichkeit beitragen können. Alle Zustände 3 und 4 sind zugelassen, die zu dem Übergang 1 nach 2 führen, der durch das Experiment vorgegeben ist.

Anders ist dies zum Beispiel bei der Photoemission mit ultravioletttem Licht. Die Energie eines Photons ist $E = pc = h\nu$. Der Impuls des Photons $p = h/\lambda$ ist daher um mehrere Zehnerpotenzen kleiner als der Impuls der Festkörperelektronen, die es anregt. Durch das Photon kann somit nur Energie übertragen werden, der Impuls bleibt bei der Anregung und der Propagation des Elektrons durch den Kristall in guter Näherung bis auf reziproke Gittervektoren $\mathbf{g}_{//}$ erhalten. Das heißt wiederum, daß durch Vorgabe von $\mathbf{k}_{//}$ des finalen Zustandes auch das $\mathbf{k}_{//}$ des initialen Zustandes festgelegt ist, es ist daher nicht erforderlich, über $\mathbf{k}_{//}$ zu summieren. Daraus resultiert zum Beispiel die Möglichkeit, mit der Photoemission die Bandstruktur eines Kristalls zu untersuchen.

Davon völlig verschieden ist die inelastische Elektronenstreuung. Der Übergang des Zustands $1 \rightarrow 2$ legt in keiner Weise Energie und Impuls des Festkörperszustands 3 fest. Alle Zustände, die $E_4 = E_3 + E_1 - E_2 =: E_3 + \Delta E$ und $\mathbf{k}_{4//} = \mathbf{k}_{3//} + \mathbf{k}_{1//} - \mathbf{k}_{2//} + \mathbf{g}_{//} =: \mathbf{k}_{3//} + \mathbf{q}_{//} + \mathbf{g}_{//}$ erfüllen, tragen zum Übergang $1 \rightarrow 2$ bei. Dies kommt in (3.11) und (3.12) durch die Summe über die Zustände 3 und 4 zum Ausdruck.

3.1.2. DIE SCHICHTABHÄNGIGKEIT DER ÜBERGANGSMATRIXELEMENTE

Nun soll unter Verwendung der lateralen $k_{//}$ -Symmetrie die Matrixelementberechnung weiter vereinfacht werden. In dieser Arbeit werden Materialien mit einem Atom pro Einheitszelle untersucht. Der Festkörper soll so aufgebaut sein, daß er sich aus gleichartigen Schichten erzeugen läßt, die nur eine Atomsorte enthalten. In diesem Fall ist es nach Tamura (1987) möglich, die Zustände in Anteile zu zerlegen, die nur in der j -ten Schicht definiert und außerhalb null sind. Der Gesamtzustand setzt sich summarisch aus den in jeder Schicht separat definierten Anteilen zusammen. Das Integrationsvolumen ist der Halbraum $\mathbf{R}_+ := \{z | (0 \leq z \leq \infty)\} \times \{(x, y) | -\infty \leq x \leq \infty, -\infty \leq y \leq \infty\}$, weil die besetzten Festkörperzustände nur in diesem Halbraum ungleich null sind. Der Halbraum läßt sich ebenfalls in Schichten zerlegen. Das Integrationsvolumen setzt sich somit zusammen aus $\bigcup_{j=1}^{\infty} V_{L(j)}$. Dabei ist $V_{L(j)}$ das Volumen einer Schicht (Layer), und die schichtabhängige Wellenfunktion ist dann definiert

$$\psi_{\alpha}(i) = \sum_{j=1}^{\infty} \psi_{\alpha}^j(i) \quad \text{mit} \quad \psi_{\alpha}^j(i) := \begin{cases} 0 & \text{falls } \mathbf{r}_i \notin V_{L(j)} \\ \neq 0 & \text{falls } \mathbf{r}_i \in V_{L(j)} \end{cases} \quad (3.13)$$

Mit diesen Definitionen erhält man eine Summe über die einzelnen Schichtanteile, die zu (3.11) und (3.12) Beiträge liefern. Eine zusätzliche Schwierigkeit ist die Nichtlokalität des Wechselwirkungspotentials (2.6). Potentiale dieser Art wurden von Mott, Massey (1965) untersucht. Nach einem Vorschlag von Tamura (1987) kann man diese Nichtlokalität durch eine Fouriertransformation des Potentials umgehen, stattdessen (2.5) verwenden und erhält mit der Definition

$$\Delta_{\mathbf{q}}(i) := e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \quad (3.14)$$

dann

$$\begin{aligned} f_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} &= \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \sum_{j_1, j_2} \int e^{i\mathbf{q}(\mathbf{d}_{j_1} - \mathbf{d}_{j_2})} V(\mathbf{q}) \\ &\times \int_{\mathbf{r}_1 \in V_L} \psi_2^{j_1}(1)^* \Delta_{\mathbf{q}}(1) \psi_1^{j_1}(1) d^3\mathbf{r}_1 \\ &\times \int_{\mathbf{r}_2 \in V_L} \psi_4^{j_2}(2)^* \Delta_{-\mathbf{q}}(2) \psi_3^{j_2}(2) d^3\mathbf{r}_2 \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \end{aligned} \quad (3.15)$$

und

$$\begin{aligned}
g_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} &= \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \sum_{j_1, j_2} \int e^{i\mathbf{q}(\mathbf{d}_{j_1} - \mathbf{d}_{j_2})} V(\mathbf{q}) \\
&\times \int_{\mathbf{r}_1 \in V_L} \psi_2^{j_1}(1)^* \Delta_{\mathbf{q}}(1) \psi_3^{j_1}(1) d^3\mathbf{r}_1 \\
&\times \int_{\mathbf{r}_2 \in V_L} \psi_4^{j_2}(2)^* \Delta_{-\mathbf{q}}(2) \psi_1^{j_2}(2) d^3\mathbf{r}_2 \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} .
\end{aligned} \tag{3.16}$$

$\mathbf{d}_{j_i}$ ist der Abstandsvektor zwischen den Koordinatenursprüngen der verschiedenen Schichten. Die Nichtlokalität des Wechselwirkungspotentials wird durch eine zusätzliche $\mathbf{q}$ -Integration umgangen, die jedoch die Berechnung der Verlustströme aufwendiger macht. Dafür sind die Integrationen über $\mathbf{r}_1$ und $\mathbf{r}_2$ jetzt entkoppelt.

Weiter kann man ausnutzen, daß jedes Schichtvolumen $V_{L(j)}$ sich aus einer Summe von Einheitszellen mit Volumen V_{uc} zusammensetzt $V_{L(j)} = \bigcup_s V_{uc}^s$, die alle nach Voraussetzung gleich sind. Die Zustände in den einzelnen Einheitszellen sind bis auf Phasenfaktoren gleich, denn es gilt wegen der Translationsinvarianz das Bloch-Theorem parallel zur Schicht (in (x,y)-Richtung). $\psi_{\alpha}^j(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{s//}) = e^{ik_{\alpha//}\mathbf{r}_{s//}} \psi_{\alpha}^j(\mathbf{r})$ reduziert die Integration über ein Schichtvolumen auf eine Integration über eine für diese Schicht repräsentative Einheitszelle, indem man die Blochbedingung in (3.15) und (3.16) einsetzt und das Integrationsvolumen $V_{L(j)}$ durch eine Summe über die Einheitszellen V_{uc}^s ersetzt. Durch die Summe der Streubeiträge der jeweils von $\mathbf{r}_1$ oder $\mathbf{r}_2$ abhängenden Übergangswahrscheinlichkeiten aus allen Zellen und der Übergangswahrscheinlichkeit in der repräsentativen Einheitszelle, an der der Ursprung des Koordinatensystems gewählt wurde, ergibt sich eine Summe über Produkte von Phasenfaktoren (3.17). Zugleich ist dadurch berücksichtigt, daß zwei in verschiedenen Einheitszellen befindliche Elektronen miteinander wechselwirken können. Mit Hilfe des Bloch-Theorems wird diese Wechselwirkung dann auf die repräsentative Einheitszelle bezogen. Fuchssteiner, Laugwitz (1974) geben an, wie man aus der dadurch gewonnenen Summe über Phasenfaktoren die Gitter- δ -Funktion gewinnt, die die $\mathbf{k}_{//}$ -Impulserhaltung enthält. A_{uc} ist die Fläche der Einheitszelle senkrecht zur z -Achse, und es gilt dann

$$\sum_{\mathbf{r}_{s//}} e^{i(\mathbf{k}_{\beta//} + \mathbf{q}_{//} - \mathbf{k}_{\beta'//})\mathbf{r}_{s//}} = \frac{(2\pi)^2}{A_{uc}} \sum_{\mathbf{g}_{//}} \delta(\mathbf{k}_{\beta//} + \mathbf{q}_{//} - \mathbf{k}_{\beta'//} + \mathbf{g}_{//}) . \tag{3.17}$$

$\mathbf{g}_{//}$ sind die Basisvektoren des reziproken Gitters, β und β' symbolisieren die Zustände 1,2,3 oder 4. Nach erfolgter $\mathbf{q}_{//}$ -Integration erhält man anstelle von (3.15) und (3.16) nur noch Ortsraum-Integrale über eine repräsentative Einheitszelle. Diese Integrale werden durch folgende Matrixelemente abgekürzt

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{j_i}(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}) := \langle \psi_{\alpha}^{j_i} | \Delta_{\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}} | \psi_{\alpha'}^{j_i} \rangle = \int_{\mathbf{r}_i \in V_{uc}} \psi_{\alpha}^{j_i}(\mathbf{r}_i)^* \Delta_{\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}}(\mathbf{r}_i) \psi_{\alpha'}^{j_i}(\mathbf{r}_i) d^3\mathbf{r}_i, \quad (3.18)$$

womit dann (3.15) und (3.16) zu

$$f_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} = \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \frac{2\pi}{A_{uc}^2} \sum_{j_1, j_2, \mathbf{g}_{//}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{q}_{21}(\mathbf{d}_{j_1} - \mathbf{d}_{j_2})} \mathbf{M}_{21}^{j_1}(\mathbf{q}_{21}) \times V(\mathbf{q}_{21}) \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \mathbf{M}_{43}^{j_2}(-\mathbf{q}_{21}) dq_z \quad (3.19)$$

und

$$g_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} = \Xi_{\eta_1 \eta_3}^{\eta_2 \eta_4} \frac{2\pi}{A_{uc}^2} \sum_{j_1, j_2, \mathbf{g}_{//}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{q}_{14}(\mathbf{d}_{j_1} - \mathbf{d}_{j_2})} \mathbf{M}_{23}^{j_1}(\mathbf{q}_{14}) \times V(\mathbf{q}_{14}) \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \mathbf{M}_{41}^{j_2}(-\mathbf{q}_{14}) dq_z \quad (3.20)$$

werden. Bei der Auswertung der $\mathbf{q}_{//}$ -Integrale ergibt sich aus den δ -Funktionen und den jeweils beteiligten $\mathbf{k}_{\beta}$ -Vektoren (d.h. den Zuständen) der Impulsübertragsvektor

$$\mathbf{q}_{\beta\beta'} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{\beta\beta'//} \\ q_z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{\beta//} - \mathbf{k}_{\beta'//} + \mathbf{g}_{//} \\ q_z \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

An der Zerlegung der Übergangswahrscheinlichkeiten (3.19) und (3.20) in einzelne Matrixelemente der Einteilchenübergänge, beschrieben durch (3.18), sieht man, daß ein Streuübergang, zum Beispiel mit M_{21} berechnet, in der i -ten Einheitszelle der j -ten Schicht stattfinden kann, ein anderer aber mit M_{43} in der k -ten Einheitszelle dieser Schicht. Daraus folgt, daß die inelastische Wechselwirkung zweier Elektronen in verschiedenen Einheitszellen durch die obige Formulierung mitberücksichtigt wird. Es sind nicht nur zwei verschiedene Einheitszellen in einer Schicht zugelassen, sondern, da die verschiedenen Matrixelemente (3.18) von verschiedenen Schichten abhängen können, beinhalten (3.19) und (3.20) auch die Wechselwirkung der Elektronen in unterschiedlichen Schichten.

Es entsteht nun die Aufgabe, die schichtabhängigen Zustände in der Einheitszelle zu konstruieren, die den Ursprung des Koordinatensystems enthält. Dabei sind alle möglichen elastischen Wechselwirkungen innerhalb einer Schicht und zwischen verschiedenen Schichten durch Einbeziehung der Mehrfachstreuung mitzuberechnen, die bei der Propagation eines Zustands vor und nach der inelastischen Wechselwirkung stattfinden können.

3.2. DER VIELTEILCHENFORMALISMUS

Bisher wurde die inelastische Elektronenstreuung im Rahmen eines Modells untersucht, welches die Teilchen als unabhängig behandelt. Dies kommt in (3.5, 3.6) dadurch zum Ausdruck, daß die Gesamtwellenfunktion als Slater-Determinante der an der inelastischen Streuung beteiligten, voneinander unabhängigen Einteilchenzustände^[10] in die Rechnung eingeht. Ein Vielteilchenformalismus verläßt dieses Modell.

Weiter wird in Kapitel 3.1 vernachlässigt, daß alle an der inelastischen Elektronenstreuung beteiligten Zustände nicht zum Grundzustand gehören. Der Zustand 3 ist ein Lochzustand, und die Zustände 1,2 und 4 sind angeregte Elektronenzustände. Diese Einteilchenzustände müssen nach Hedin, Lundqvist (1971) unter Berücksichtigung der Streuung an Kristallpotentialen mit Imaginärteil (2.11) konstruiert werden. Diese in Kapitel 2.2 kurz dargestellten, sogenannten optischen Potentiale oder Selbstenergien beinhalten Vielteilcheneffekte und damit auch die Anregung des Gesamtsystems. In Kapitel 3.1 muß der Zustand 3 eine "Halbraum"-Grundzustandswellenfunktion sein, weil bei der Konstruktion derselben kein Imaginärteil im elastischen Wechselwirkungspotential miteinbezogen werden kann.

^[10]Die Einteilchenzustände selbst werden aber in der Dichte-Funktional-Theorie so konstruiert, daß näherungsweise die Wechselwirkung mit allen anderen Elektronen berücksichtigt wird.

3.2.1. DER ZUSAMMENHANG ZWISCHEN VERLUSTSTROM UND SELBSTENERGIE

Mit Hilfe der Vielteilchentheorie ist es möglich, den Bereich der in Kapitel 3.1 verwendeten "Unabhängigen-Teilchen-Näherung" zu verlassen. Die Streuung eines vom Experiment präparierten Elektrons vom Zustand 1 in den gemessenen Zustand 2 an einem Festkörper erzeugt durch Energie- und Impulsübertrag aus einem im Grundzustand befindlichen Elektron ein angeregtes Festkörperelektron im Zustand 4 und hinterläßt einen Lochzustand 3. Loch und angeregtes Elektron beeinflussen die Propagation der eingeschossenen und der aus dem Kristall hinauspropagierenden Elektronen. Es ergibt sich die Frage, welchen Strom von Elektronen man mißt, wenn Elektronen im Zustand 1 auf den Festkörper geschossen werden, ihn anregen und dieser nun seinerseits die Propagation der Elektronen 1 und 2 beeinflußt.

In der Vielteilchentheorie (Inkson (1973), Fetter, Walecka (1971)) wird versucht, dieses Problem der "indirekten Selbstwechselwirkung" durch die Einführung der sogenannten Selbstenergie anstelle eines Potentials zu lösen (2.8, 2.10). In dieser Theorie und insbesondere in der Dichte-Funktional-Theorie (Sham, Kohn (1965)) kann von einem komplexen, nichtlokalen, von der Energie abhängigen Massenoperator, optisches Potential oder auch Selbstenergie genannten $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ ausgegangen werden, das alle Vielteilcheneffekte enthält. In der Dichte-Funktional-Theorie nähert man diese Selbstenergie (wie in Kapitel 2.2 erwähnt) durch ein, näherungsweise Austausch und Korrelation enthaltendes, effektives Einteilchenpotential, welches dann selbstkonsistent in der Lokalen-Dichte-Näherung als Grundzustandspotential berechnet werden kann.

Diese Selbstenergie hängt auch mit der die Abschirmung einer Probeladung vermittelnden Dielektrizitätskonstante (2.4), die auch alle Vielteilcheneffekte beinhaltet, zusammen (Echenique et al. (1990)) und damit wieder mit der in Kapitel 2.1 gewählten Abschirmung des inelastischen Wechselwirkungspotentials.

Natürlich kann man in Rechnungen am realen Kristall nicht alle Vielteilcheneffekte in $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ mitberücksichtigen, und es wird vielmehr darauf ankommen, auf das jeweilige Problem zugeschnittene Näherungen zu finden, die die wesentlichen Korrekturen mitnehmen.

Wird eine Probeladung, welche ein Potential V_{ext} im Kristall erzeugt, auf einen

Kristall geschossen, dann wird die Dynamik des Systems beschrieben durch eine Schrödinger-Gleichung mit der die Vielteilcheneffekte enthaltenden nichtlokalen Selbstenergie (Inkson (1980), Fetter, Walecka (1971)) (2.8). Diese Gleichung wird verwendet, um den Verluststrom, verursacht durch den Imaginärteil des komplexen Potentials Σ , zu berechnen, welchen auf den Kristall geschossene Elektronen hervorrufen. Der aus dem Zustand 1 absorbierte Strom kann mit der Kontinuitätsgleichung berechnet werden (Harris (1980), Schiff (1968)).

$$\dot{\rho}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t) + 2\Im \left\{ \int \Psi_1^*(\mathbf{r}, t) \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \Psi_1(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt' \right\}$$

Der letzte Term ergibt neben dem elastisch gestreuten Teilchenstrom gerade den gesuchten, aus dem Zustand 1 ($E_1 \rightarrow E_2$ mit $E_2 < E_1$) herausabsorbierten Strom.

Der Hamilton Operator in (2.8) ist zeittranslationsinvariant, weswegen man berechtigt ist, (2.8) nur von der Zeitdifferenz abhängen zu lassen. Weiterhin erlaubt die Zeittranslationsinvarianz, eine Fouriertransformation bezüglich der Zeit oder, was äquivalent dazu ist, den üblichen Separationsansatz (2.9) zu verwenden. Man befindet sich damit im sogenannten "Stationary-State"-Modell, innerhalb dessen man $\dot{\rho} = \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 \Psi_1^* = 0$ verwenden darf, da E in (2.9) reell ist.

Man ist an einer Bilanz der insgesamt gestreuten Teilchen interessiert, das heißt, man zählt alle in ein festes Volumen (danach geht $V \rightarrow \infty$) hinein- und dann daraus herausgestreuten Teilchen.

$$\int_V \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 2\Im \left\{ \int_V \Psi_1^*(\mathbf{r}) \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_1) \Psi_1(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \right\} \quad (3.22)$$

Mit dem Integralsatz von Gauß kann das $\mathbf{r}$ -Integral auf der linken Seite der Gleichung in ein Oberflächenintegral über das gerade betrachtete Volumen umgeformt werden. Man bilanziert dadurch sämtliche, durch die Volumenoberfläche ein- und austretende Teilchen im Zustand 1, wobei die Anzahl der mit E_1 eintretenden Teilchen wegen des Imaginärteils des Potentials unterschiedlich sein kann zur Anzahl der mit E_1 austretenden. Die aus dem 1. Zustand ($E_1, \mathbf{k}_{1//}$) in den 2. Zustand ($E_2, \mathbf{k}_{2//}$) gestreute Teilchenanzahl^[11], die Übergangswahrscheinlichkeit

[11] $\int \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j} d^3\mathbf{r}$ mißt die Teilchenzahl.

zwischen den beiden Zuständen, ergibt $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ -aufsummiert zusammen mit den einströmenden Teilchen im Zustand 1 wieder den durch die Oberfläche ($V \rightarrow \infty$) fließenden Strom von Teilchen

$$\int_{\partial V} \mathbf{j}_{E_1, \mathbf{k}_{1//}}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{f} =: \int j(E_1, \mathbf{k}_{1//}, E_2, \mathbf{k}_{2//}) dE_2 d^2\mathbf{k}_{2//} .$$

Diese Übergangswahrscheinlichkeit in der inelastischen Elektronenstreuung wird im weiteren Verlauf der Arbeit als Verluststrom j bezeichnet.

Gemeinhin (Fetter, Walecka (1971)) werden die bei der Berechnung der Selbstenergie durch die Feynman-Graphen entstehenden impliziten (inneren) Energieabhängigkeiten aufsummiert, so daß Σ wie in (3.22) lediglich von E_1 abhängt. Jedoch im Fall der inelastischen Elektronenstreuung wird durch die Messung von E_2 diese innere Summation (" $\Sigma(E_1) = \int \Sigma(E_1, E_2) dE_2$ ") über E_2 verhindert. Die E_2 -Abhängigkeit ist dann in der Selbstenergie zu berücksichtigen, siehe Bild 4, 5, falls der Streuprozess $(E_1, \mathbf{k}_{1//}) \rightarrow (E_2, \mathbf{k}_{2//})$ winkel- und energieaufgelöst behandelt werden soll, wie es bei einem Vergleich mit winkel- und energieaufgelösten Experimenten nötig ist. Wird durch die Messung der Zustand 2 festgelegt, so ist dies durch die Verwendung einer δ -Funktion bei der Konstruktion des Propagators dieses Zustands zu berücksichtigen (Anhang 3).

Somit ist man nicht an den in alle Richtungen mit $E_2 < E_1$ gestreuten Teilchen interessiert, sondern an dem Strom von Teilchen, die aus dem Zustand 1 in den Zustand 2 gestreut werden.

$$j(E_1, \mathbf{k}_{1//}, E_2, \mathbf{k}_{2//}) = 2\Re \left\{ \int \Psi_1^*(\mathbf{r}) \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_1, \mathbf{k}_{1//}; E_2, \mathbf{k}_{2//}) \Psi_1(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \right\} . \quad (3.23)$$

Eine Darstellung der Selbstenergie mit Hilfe von Zuständen und Greensfunktionen ist nun notwendig.

3.2.2. DIE SELBSTENERGIEEINSCHÜBE IN 2. ORDNUNG UND DIE VERLUST-STRÖME

Nun erhebt sich die Frage, in welcher Gestalt die Selbstenergie in (3.23) eingeht. Verwendbar für die inelastische Elektronenstreuung sind nur die irreduziblen Selbstenergieeinschübe (siehe Bild 3), denn nur sie erlauben einen Energieübertrag. Das heißt für die beliebig viele inelastischen Streuakte enthaltende volle Greensfunktion $\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(1)} + \mathcal{G}^{(2)} + \dots$, daß erst ab Termen zweiter Ordnung ein Energieübertrag mit Hilfe der Elektron-Lochpaaranregung möglich ist. Der Grund dafür ist, daß an den Vertices der Feynman-Graphen Energie- und Impulserhaltung erfüllt werden müssen unter der Beachtung, daß die volle Greensfunktion vor und nach der Wechselwirkung nur von derselben Energie und demselben Impuls abhängen kann.

Mit der irreduziblen Selbstenergie gilt $\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(0)} \Sigma_p \mathcal{G}$. Für die reduzible Selbstenergie kennt man eine Beziehung zwischen der vollen Greensfunktion, die die inelastische wie elastische Wechselwirkung beinhaltet, und den Einteilchenpropagatoren $\mathcal{G}^{(0)}$ der elastisch wechselwirkenden Teilchen (Fetter, Walecka (1971)).

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(0)} \Sigma \mathcal{G}^{(0)} . \quad (3.24)$$

Eine Berücksichtigung von Termen höherer als zweiter Ordnung bedeutet, daß man inelastische Mehrfachstreuung in die Berechnungen miteinbezieht, jedoch wird vermutlich die Mitnahme der 2. Ordnung den Hauptbeitrag ergeben.

Diese Vermutung wird bestärkt durch die Erfahrung mit der Theorie der Photoemission, wo Terme 2. Ordnung schon die Hauptbeiträge zum Photoemissionsspektrum liefern (Caroli et al. (1973), Pendry (1976)). Erst nachdem man Erfahrung gesammelt hatte, wurde festgestellt, daß Terme höherer Ordnung bei manchen Systemen, zum Beispiel bei Ni (Liebsch (1979)), keinesfalls vernachlässigbar sind. Sie können zum Beispiel zur Erklärung von Satellitenstrukturen (Tamura et al. (1989d), Almbladh (1985)) mitberücksichtigt werden.

Auch aufgrund der in höherer Ordnung multiplikativ eingehenden Potentiale (2.6) oder (2.5) ist zu erwarten, daß Einschübe höherer Ordnung kleinere Beiträge liefern. Dies wird an der Drehimpulsentwicklung der Matrixelemente besonders

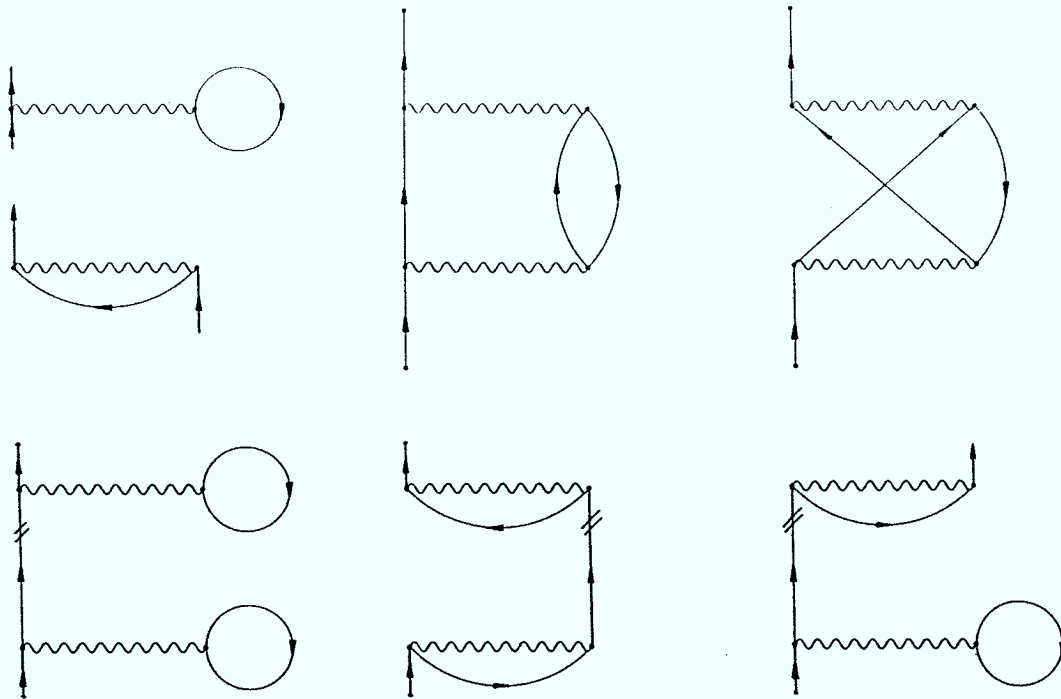


Bild 3 : Beiträge zur vollen Greensfunktion bis zur 2. Ordnung in der Wechselwirkung mit den dazugehörigen Selbstenergieeinschüben. Durch // sind die reduzierbaren Einschübe gekennzeichnet. Sie setzen sich aus Graphen niedrigerer Ordnung , hier 1. Ordnung, zusammen. Man erkennt, daß wegen der zu erfüllenden Energie- und Impulserhaltung an den Vertices mit ihnen kein Energieübertrag möglich ist.

deutlich, da dort das Potential unter anderem aus Produkten der schnell abfallenden sphärischen Bessel-Funktion besteht.

Die Selbstenergie in der inelastischen Elektronenstreuung kann mit den Feynman-Regeln und der dazugehörigen Diagrammtechnik auf Potenzreihen von Produkten der Greensfunktion $\mathcal{G}^{(0)}$ mit dem inelastischen Wechselwirkungspotential zurückgeführt werden. In Bild 4 und Bild 5 sind die Feynman-Graphen der relevanten Prozesse dargestellt. Man erhält dann für die Direkte-Streuung (Bild 4a)) die ortsabhängige Greensfunktion zweiter Ordnung von im Ortsraum nicht translationsinvarianten Systemen, zum Beispiel dem inhomogenen Elektro-

nengas

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(2),\sigma_6\sigma_1}(x_6, x_1) = & i^2(-1) \sum_{\sigma_2, \dots, \sigma_5'} \int_{x_2 \dots x_5} \mathcal{G}^{(0),\sigma_6\sigma_3'}(x_6, x_3) U_{\sigma_3\sigma_3'\sigma_5\sigma_4'}(x_3, x_5) \\ & \times \mathcal{G}^{(0),\sigma_3\sigma_2'}(x_3, x_2) \mathcal{G}^{(0),\sigma_4'\sigma_4}(x_4, x_5) \mathcal{G}^{(0),\sigma_5'\sigma_5}(x_5, x_4) \\ & \times U_{\sigma_2\sigma_2\sigma_4\sigma_5'}(x_2, x_4) \mathcal{G}^{(0),\sigma_2\sigma_1}(x_2, x_1) d^4x_2 d^4x_3 d^4x_4 d^4x_5 . \end{aligned}$$

Die Zeittranslationsinvarianz erlaubt eine Fouriertransformation bezüglich der Zeit in dieser Gleichung. Die Zeitintegration ergibt dabei eine δ -Funktion für die wichtige Energieerhaltung und die Reihenfolge der Propagatoren (zum Beispiel $\mathcal{G}^+\mathcal{G}^-\mathcal{G}^+$). Für die Fouriertransformation der Greensfunktion (Anhang A) $\mathcal{G}^{(0)}$ erhält man die kausale $((+) \iff (t_i - t_k) > 0)$ Greensfunktion, die die Propagation der Teilchen beschreibt, oder die antikausale $((-) \iff (t_i - t_k) < 0)$, die die Propagation eines Loches beschreibt. Durch die Beschränkung auf Materialien mit kleinem Z wird die Spin-Bahnkopplung vernachlässigbar klein sein. Dadurch ist es möglich, nichtrelativistisch zu rechnen. Bei der Auswertung der Diagramme mit Hilfe der Feynman-Regeln ist darum zu beachten, daß der Spin sich während der elastischen Propagation der Elektronen nicht ändert, was folgende Darstellung der Greensfunktion

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{\pm, \eta_\alpha(\sigma_i)\eta_\alpha(\sigma_k)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k; E_\alpha) &= \delta_{\sigma_i\sigma_k} \langle (\mathbf{r}_i, \sigma_i) | \mathcal{G}^{\pm, \eta_\alpha}(E_\alpha) | (\mathbf{r}_k, \sigma_k) \rangle \\ &=: \mathcal{G}_\alpha^{\pm, \sigma_i}(i, k) \end{aligned} \quad (3.25)$$

nach sich zieht. Der Übersichtlichkeit halber wird im folgenden darauf verzichtet, den Spinor η_α des α -ten Zustands in den Greensfunktionen immer mitzukennzeichnen. Stattdessen wird σ_i als Spinindex verwendet, was zwar ungenau ist, aber, wie betont, übersichtlicher. Zudem ist das Potential für die inelastische Wechselwirkung spinunabhängig; der Spin ändert sich bei dieser Wechselwirkung nicht. Deshalb nimmt das Potential die Form

$$U_{\sigma\sigma'}(x_i, x_k) = \delta_{\sigma\sigma'} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) \delta(t_i - t_k) =: \delta_{\sigma\sigma'} V((i) - (k)) \delta(t_i - t_k) \quad (3.26)$$

an. Eine Änderung des Spins ist daher nur mit Austauschprozessen möglich. Das in dieser Arbeit behandelte nichtrelativistische Modell setzt eine instantane Wechselwirkung voraus, woraus die δ -Funktion der Wechselwirkungszeiten in (3.26) folgt.

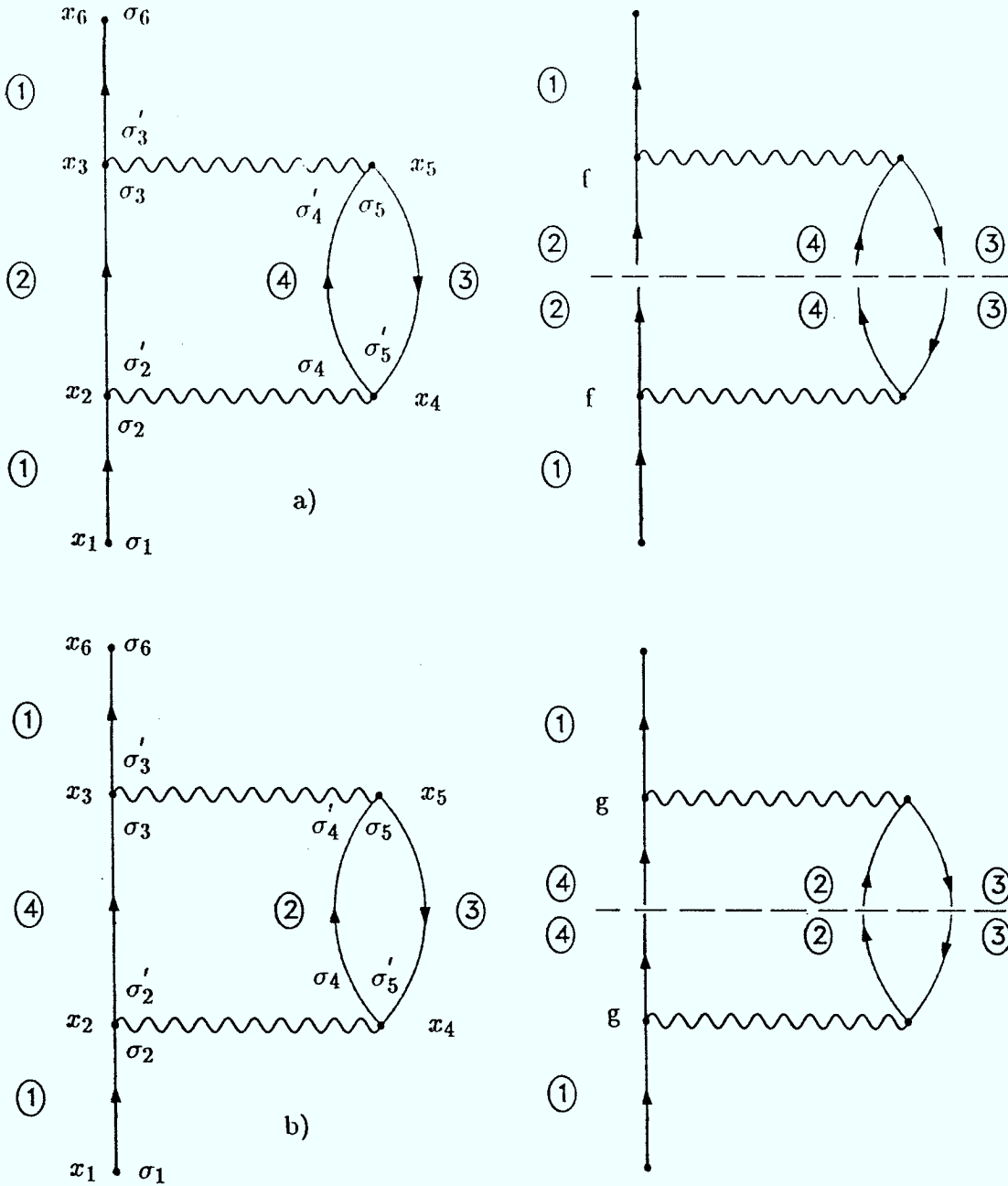


Bild 4: Feynman-Graphen, die Beiträge zur Greensfunktion zweiter Ordnung für die a) Direkte- und b) "doppelte" Austausch-Streuung darstellen. $x := (\mathbf{r}, t)$ und $\odot$ kennzeichnet den propagierenden Zustand $\mathcal{G}^{(0), \pm, \eta_\sigma}$. Rechts die Feynman-Graphen des Goldenen-Regel-Formalismus.

Die Gestalt der ersten (oberer Index (1)) Selbstenergie für die direkte Streuung

(Bild 4a)) erhält man nach der Zeit-Energie-Fouriertransformation durch Vergleich mit (3.24) unter der Berücksichtigung von (3.25) und (3.26) und der Auswahl der irreduziblen Selbstenergieanteile

$$\begin{aligned}\Sigma_{\sigma_1\sigma_4}^{(1)}(3, 2; E_2) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int V((3) - (5)) \mathcal{G}_2^{(0),+, \sigma_1}(3, 2) \mathcal{G}_3^{(0),-, \sigma_4}(4, 5) \\ &\times \mathcal{G}_4^{(0),+, \sigma_4}(5, 4) V((2) - (4)) \\ &\times d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4 .\end{aligned}\quad (3.27)$$

Die zweite Selbstenergie, die des doppelten Austauschgraphen in Bild 4b), ist

$$\begin{aligned}\Sigma_{\sigma_1\sigma_4}^{(2)}(3, 2; E_2) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int V((3) - (5)) \mathcal{G}_4^{(0),+, \sigma_1}(3, 2) \mathcal{G}_3^{(0),-, \sigma_4}(4, 5) \\ &\times \mathcal{G}_2^{(0),+, \sigma_4}(5, 4) V((2) - (4)) \\ &\times d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4 .\end{aligned}\quad (3.28)$$

Auf dieselbe Weise gewinnt man die Selbstenergie der gemischten Graphen in Bild 5a,b). Bei ihnen gibt es keinen Spin-Flip, da die Propagation zusammenhängend erfolgt und, wie oben erläutert, der Spin sich bei der inelastischen Wechselwirkung und elastischen Propagation nicht ändern kann. Die dritte Selbstenergie für den Graphen in Bild 5a) ist

$$\begin{aligned}\Sigma_{\sigma_1\sigma_1}^{(3)}(3, 2; E_2) &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int V((3) - (5)) \mathcal{G}_2^{(0),+, \sigma_1}(3, 4) \mathcal{G}_3^{(0),-, \sigma_1}(4, 5) \\ &\times \mathcal{G}_4^{(0),+, \sigma_1}(5, 2) V((2) - (4)) \\ &\times d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4\end{aligned}\quad (3.29)$$

und für den Graphen Bild 5b)

$$\begin{aligned}\Sigma_{\sigma_1\sigma_1}^{(4)}(3, 2; E_2) &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int V((3) - (5)) \mathcal{G}_4^{(0),+, \sigma_1}(3, 4) \mathcal{G}_3^{(0),-, \sigma_1}(4, 5) \\ &\times \mathcal{G}_2^{(0),+, \sigma_1}(5, 2) V((2) - (4)) \\ &\times d^3\mathbf{r}_4 d^3\mathbf{r}_5 \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 dE_4 .\end{aligned}\quad (3.30)$$

In Bild 6, 7^[12] werden die einzelnen Spineinstellungsmöglichkeiten dargestellt, um eine Verbindung zur Tabelle 1 zu bekommen. Dadurch können die einzelnen Selbstenergien und damit die Verlustströme den in Kapitel 3.1 behandelten Streuprozessen zugeordnet werden.

^[12]Die Fermi Energie wird hinfert mit E_F abgekürzt, der Fermi Impuls mit k_F .

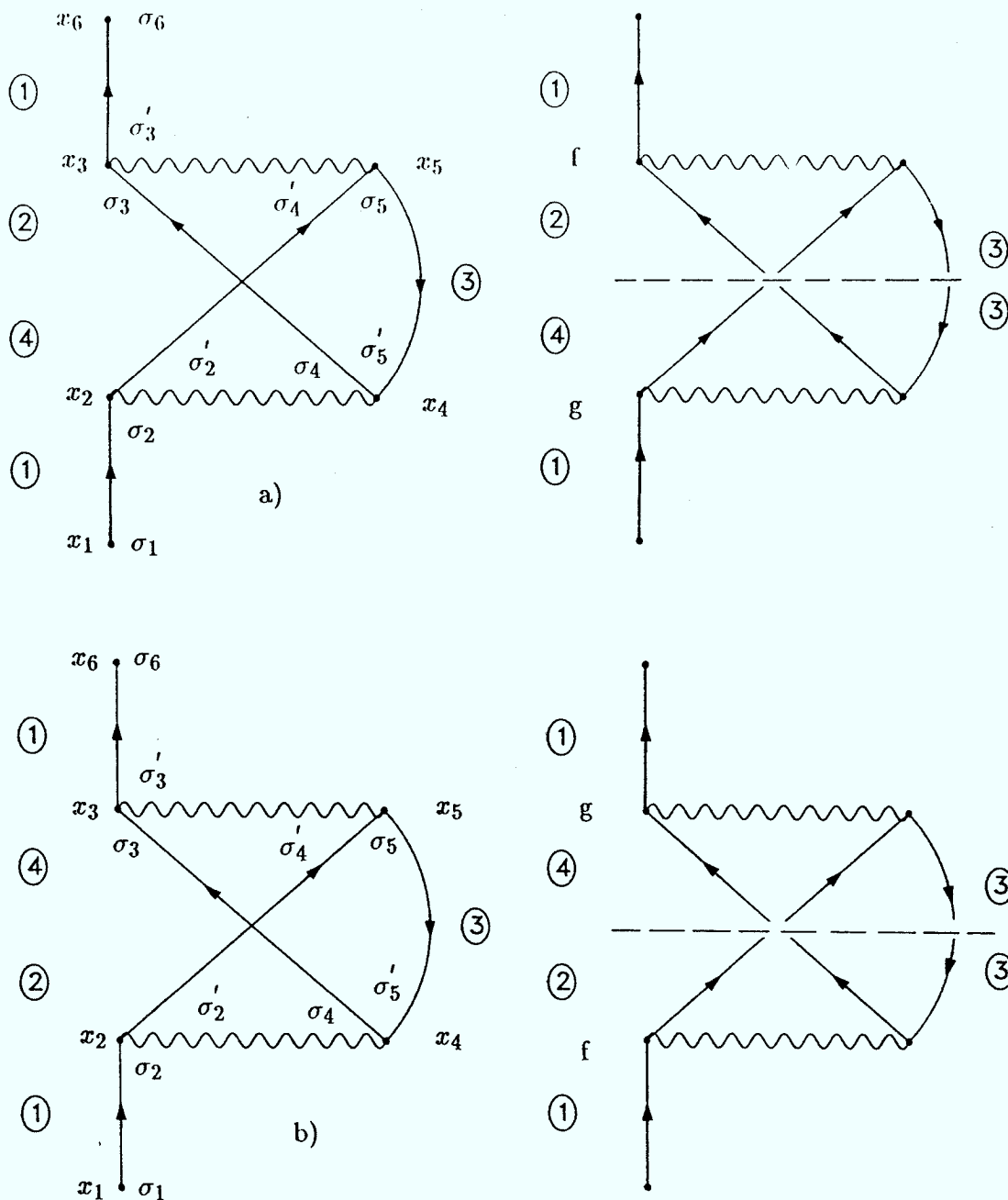


Bild 5: Feynman-Graphen, die Beiträge zur Greensfunktion zweiter Ordnung für die b) Direkte- mit anschließender Austausch-Streuung und a) die Austausch- mit anschließender Direkt-Streuung darstellen. $x := (\mathbf{r}, t)$ und $\textcircled{\alpha}$ kennzeichnet den propagierenden Zustand $\mathcal{G}^{(0), \pm, \eta_\alpha}$. Rechts die Feynman-Graphen des Goldenen-Regel-Formalismus.

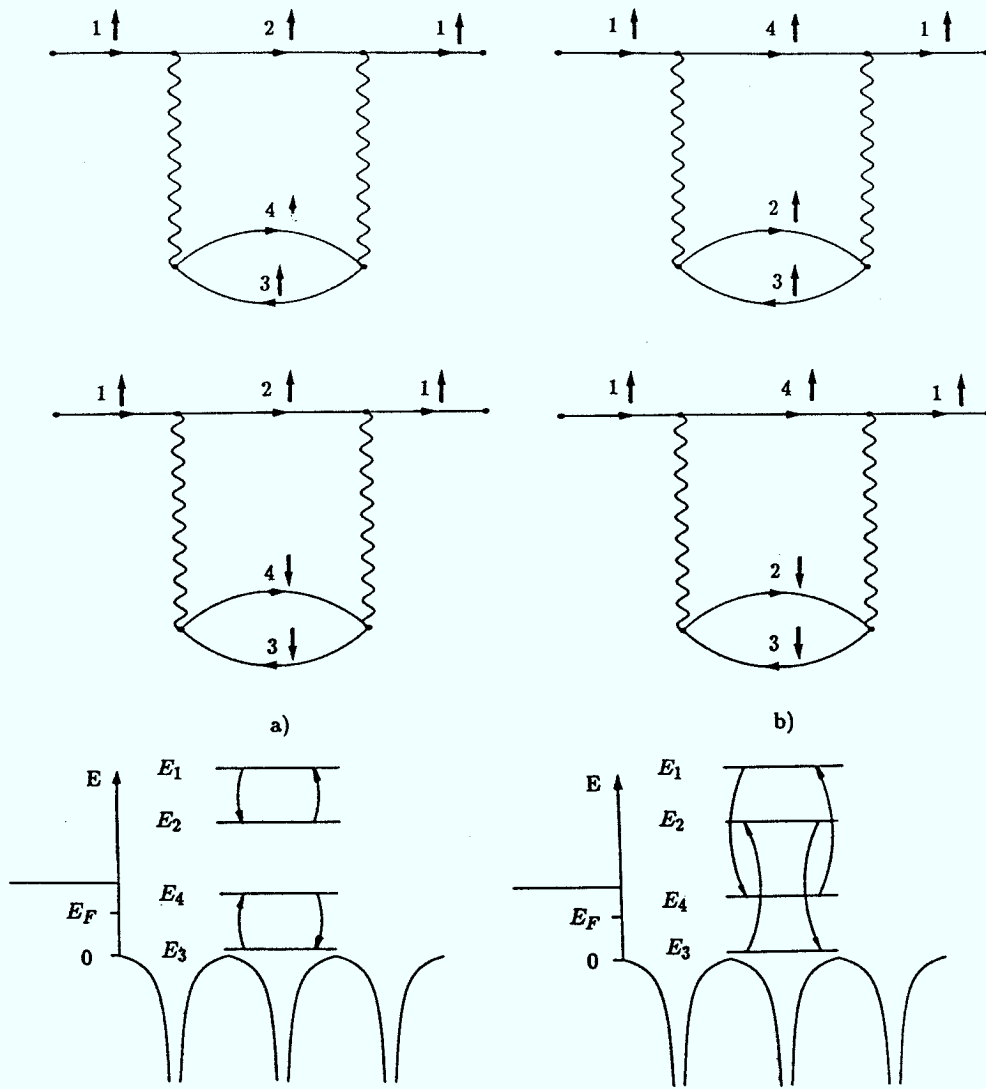


Bild 6 : Die spinabhängigen $\uparrow$ ($\downarrow$ durch Spinumkehr) Verlustströme für die
a) Direkte- und b) "doppelte" Austausch-Streuung. Lediglich der
Prozeß rechts unten erlaubt einen Spin-Flip. Unten sind mögliche ener-
getische Übergänge bezüglich E_F gezeigt.

Die Selbstenergien (3.27–3.30), eingesetzt in (3.23), liefern vier Verlustströme. Der Zustand 1 ist definiert in (3.4).

$$j_{\sigma_1 \sigma_3}^{\sigma_2 \sigma_4} = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} 2\Re \left\{ \int \Psi_1^*(3) \Sigma_{\sigma_1 \sigma_4}^{(1)}(3, 2; E_2) \Psi_1(2) d^3 r_2 d^3 r_3 \right\} \quad (3.31)$$

$$j_{\sigma_1 \sigma_3}^{\sigma_2 \sigma_4} = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} 2\Re \left\{ \int \Psi_1^*(3) \Sigma_{\sigma_1 \sigma_4}^{(2)}(3, 2; E_2) \Psi_1(2) d^3 r_2 d^3 r_3 \right\} \quad (3.32)$$

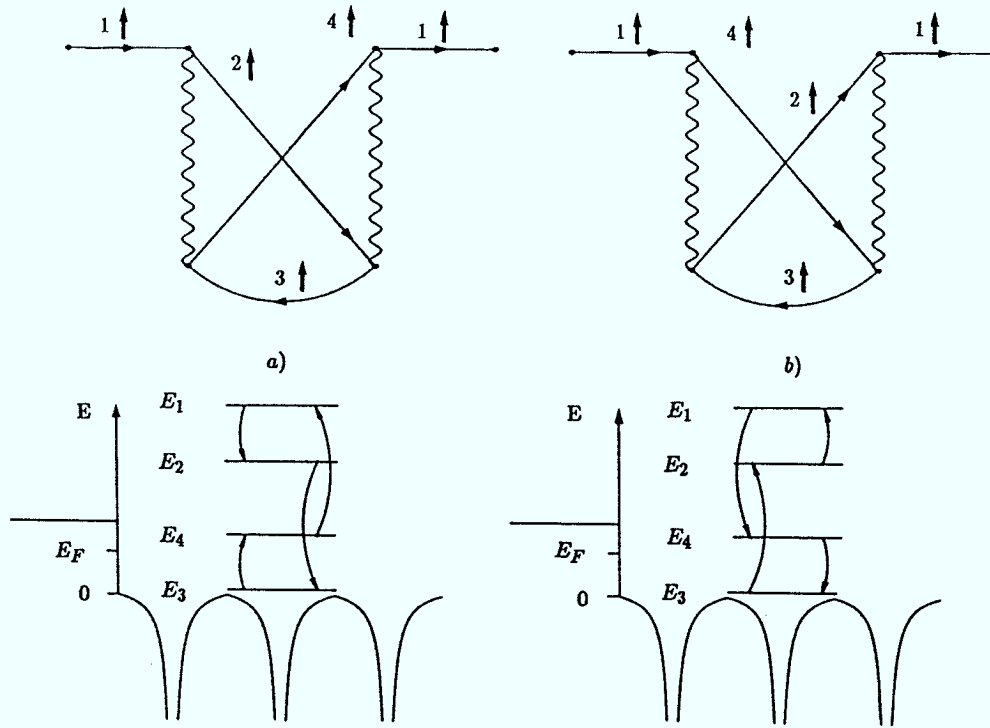


Bild 7: Die spinabhängigen $\uparrow$ ($\downarrow$ durch Spinumkehr) Verlustströme für die a) Direkte- mit anschließender Austausch-Streuung und die b) Austausch- mit anschließender Direkt-Streuung. Hier sind keine Spin-Flip Prozesse möglich. Unten sind mögliche energetische Übergänge bezüglich E_F gezeigt.

$$j_{3\sigma_1\sigma_3}^{\sigma_2\sigma_4} = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_1\sigma_4}2\Im\left\{\int\Psi_1^*(3)\Sigma_{\sigma_1\sigma_1}^{(3)}(3,2;E_2)\Psi_1(2)d^3r_2d^3r_3\right\}\quad(3.33)$$

$$j_{4\sigma_1\sigma_3}^{\sigma_2\sigma_4} = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_1\sigma_4}2\Im\left\{\int\Psi_1^*(3)\Sigma_{\sigma_1\sigma_1}^{(4)}(3,2;E_2)\Psi_1(2)d^3r_2d^3r_3\right\}.\quad(3.34)$$

Die Non-Flip-Übergänge, zum Beispiel für den $|\uparrow\rangle$ -Spin Fall des Zustands 1, ergeben einen Verluststrom, vergleichbar mit den Streuamplituden f und g aus

Tabelle 1 in Kapitel 3.1.

$$\begin{aligned}
 j_{nf} &= j_{1\uparrow\uparrow} + j_{2\uparrow\uparrow} + j_{3\uparrow\uparrow} + j_{4\uparrow\uparrow} + j_{1\uparrow\downarrow} \\
 &\cong f_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} f_{\uparrow\uparrow}^{*\uparrow\uparrow} + g_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} g_{\uparrow\uparrow}^{*\uparrow\uparrow} - f_{\uparrow\uparrow}^{*\uparrow\uparrow} g_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} - f_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} g_{\uparrow\uparrow}^{*\uparrow\uparrow} + f_{\uparrow\downarrow}^{*\uparrow\downarrow} f_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow} .
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Die Spin-Flip-Übergänge werden durch den Verluststrom (3.32) beschrieben.

$$j_f = j_{2\uparrow\downarrow} \cong |g_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow}|^2 \tag{3.36}$$

Wie in Kapitel 3.1.2 dargestellt, läßt sich das inelastische Wechselwirkungspotential (2.6) transformieren zu (2.5) und dadurch die Berechnung der Verlustströme vereinfachen. Weiterhin muß der Meßprozeß, wie in Anhang 3 erläutert, mit einer δ -Funktion in die Konstruktion des Propagators des gemessenen Zustands 2 mitbezogen werden. In Anhang C ergibt sich für diesen Propagator nach Tamura (1989b) (C.3).

$$\mathcal{G}_2^{(0),+, \sigma_2}(i, k) = -i \Phi_2(i) \Phi_2^*(k) . \tag{3.37}$$

Für den aus dem Kristall mit Oberfläche herauspropagierenden Endzustand 2 wird ein zeitinvertierter LEED-Zustand Φ_2 verwendet (Tamura (1989b)). Φ ist Lösung von $(\mathcal{H} - E)^* \Phi = 0$, was wegen des Imaginärteils des elastischen Wechselwirkungspotentials und der sich durch komplex-konjugiert-Bildung ändernden Randbedingung wohlunterschieden werden muß zu Ψ , welches, unter Verwendung der austretenden-Welle-Randbedingung, Lösung von $(\mathcal{H} - E) \Psi = 0$ ist.

Der Index (0) in $\mathcal{G}^{(0), \pm, \sigma}$ kann unterdrückt werden, da er nur zur Unterscheidung zwischen $\mathcal{G}^{(0), \pm, \sigma}$ und $\mathcal{G}^{(2), \pm, \sigma}$, dem Propagator 2. Ordnung, diene. Dieser wird aber nicht mehr benötigt.

Für die Greensfunktionen der Zustände 3 und 4 wird eine Spektraldarstellung nach den kontinuierlichen Eigenwerten verwendet. Hier sind $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ und $(E_4, \mathbf{k}_{4//})$ die "guten" Quantenzahlen, durch die der Zustand eindeutig gekennzeichnet ist. Für den Propagator $\langle (\mathbf{r}_i, \sigma_i) | \mathcal{G}_{\alpha}^{\pm, \eta_{\alpha}} | (\mathbf{r}_k, \sigma_k) \rangle$ mit Oberfläche gilt dann (Hora, Scheffler (1984)) mit (3.20)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_{\alpha}^{\pm, \sigma_i}(i, k) &= \int_{\mathbf{k}_{\alpha//} \in OBZ} G^{\pm, \sigma_i}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k; E_{\alpha}, \mathbf{k}_{\alpha//}) \frac{d^2 \mathbf{k}_{\alpha//}}{(2\pi)^2} \\
 &=: \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{k}_{\alpha//} \in OBZ} G_{\alpha}^{\pm, \sigma_i}(i, k) d^2 \mathbf{k}_{\alpha//} .
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

Es wird über die Oberflächenbrillouinzone (OBZ) mit der in Anhang D dargestellten Methode integriert. Ist keine Oberfläche zu berücksichtigen, dann muß über die Volumenbrillouinzone (VBZ) summiert werden, und die Greensfunktion hat folgende Spektraldarstellung

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\alpha^{\pm, \sigma_i}(i, k) &= \int_{\mathbf{k}_\alpha \in VBZ} G^{\pm, \sigma_i}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k; E_\alpha(\mathbf{k}_\alpha)) \frac{d^3 \mathbf{k}_\alpha}{(2\pi)^3} \\ &=: \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}_\alpha \in VBZ} G_\alpha^{\pm, \sigma_i}(i, k) d^3 \mathbf{k}_\alpha . \end{aligned} \quad (3.39)$$

Die Fouriertransformation des Potentials (2.6) und die soeben eingeführten Definitionen (3.38) sowie (3.4) ergeben in (3.31–3.34) die später weiterverwendete Darstellung der Verlustströme. Die Reihenfolge der einzelnen Propagatoren, Phasen und Wellenfunktionen wird durch die jeweilige Ortsabhängigkeit vorgegeben und hängt darüber unmittelbar mit den Diagrammen aus Figur 5 und 6 zusammen, das heißt die Indizierung der Ortsabhängigkeit wurde der besseren Übersichtlichkeit wegen unterlassen, kann aber aus Bild 4, 5 abgelesen werden.

$$\begin{aligned} j_1^{\sigma_1^2 \sigma_3^4} &= \frac{2}{(2\pi)^{12}} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} \Im \left((-i) \int V(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}') \right. \\ &\times \langle \Psi_1^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}} | \Phi_2^{\sigma_1} \rangle \langle \Phi_2^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}'} | \Psi_1^{\sigma_1} \rangle \langle \Delta_{-\mathbf{q}} G_3^{-, \sigma_4} \Delta_{-\mathbf{q}'} G_4^{+, \sigma_4} \rangle \\ &\times \left. d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{q}' \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2 \mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2 \mathbf{k}_{4//} \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} j_2^{\sigma_1^2 \sigma_3^4} &= \frac{2}{(2\pi)^{12}} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} \Im \left((-i) \int V(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}') \right. \\ &\times \langle \Psi_1^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}} G_4^{+, \sigma_1} \Delta_{\mathbf{q}'} | \Psi_1^{\sigma_1} \rangle \langle \Phi_2^{\sigma_4} | \Delta_{-\mathbf{q}'} G_3^{-, \sigma_4} \Delta_{-\mathbf{q}} | \Phi_2^{\sigma_4} \rangle \\ &\times \left. d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{q}' \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2 \mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2 \mathbf{k}_{4//} \right) \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} j_3^{\sigma_1^2 \sigma_3^4} &= \frac{2}{(2\pi)^{12}} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \Im \left((+i) \int V(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}') \right. \\ &\times \langle \Psi_1^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}} | \Phi_2^{\sigma_1} \rangle \langle \Phi_2^{\sigma_1} | \Delta_{-\mathbf{q}'} G_3^{-, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}} G_4^{+, \sigma_1} \Delta_{\mathbf{q}'} | \Psi_1^{\sigma_1} \rangle \\ &\times \left. d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{q}' \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2 \mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2 \mathbf{k}_{4//} \right) \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} j_4^{\sigma_1^2 \sigma_3^4} &= \frac{2}{(2\pi)^{12}} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \Im \left((+i) \int V(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}') \right. \\ &\times \langle \Psi_1^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}} G_4^{+, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}'} G_3^{-, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}} | \Phi_2^{\sigma_1} \rangle \langle \Phi_2^{\sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}'} | \Psi_1^{\sigma_1} \rangle \\ &\times \left. d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{q}' \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2 \mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2 \mathbf{k}_{4//} \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

$\Delta_{\mathbf{q}}$ wird erzeugt durch die Fouriertransformation des inelastischen Wechselwirkungspotentials und ist erklärt in (3.14).

Damit sind die Verlustströme für die inelastische Elektronenstreuung ermittelt. An dem Auftreten des Lochpropagators G_3^- des Zustands 3 sieht man, daß ein realistischeres Modell als das in Kapitel 3.1 verwendete hier zugrundeliegt. Jenes hatte die Teilchen als unabhängig angenommen und die angeregten Festkörperzustände, das Loch im Zustand 3 und das angeregte Elektron im Zustand 4, können nur unter Vernachlässigung der Lochlebensdauer berechnet werden. Zwischen Loch- und Teilchenpropagation kann man in diesem Modell nicht unterscheiden.

3.2.3. DIE SCHICHTABHÄNGIGKEIT DER VERLUSTSTRÖME

Wie in Kapitel 3.1.2 im Goldene-Regel-Formalismus können die Verluststrombeiträge aus jeder Schicht gesondert bestimmt werden. Dazu ist wieder eine Schichtzerlegung nicht nur der Zustände wie in (3.13) nötig, sondern auch die Greensfunktion muß in dieser Weise zerlegt werden. Es ist

$$G_{\alpha}^{\pm, \sigma_n}(i, k) = \sum_{j_i, j_k=1}^{\infty} G_{\alpha; j_i j_k}^{\pm, \sigma_n}(i, k)$$

mit der Definition

$$G_{\alpha; j_i j_k}^{\pm, \sigma_n}(i, k) := \begin{cases} 0 & \text{falls } \mathbf{r}_i \notin V_{L(i)} \text{ und/oder } \mathbf{r}_k \notin V_{L(k)} \\ \neq 0 & \text{falls } \mathbf{r}_i \in V_{L(i)} \text{ und } \mathbf{r}_k \in V_{L(k)} \end{cases} \quad (3.44)$$

Abermals wird jede Schicht in ihre Einheitszellen zerlegt, woraus sich die Möglichkeit ergibt, alle Streubeiträge aus verschiedenen Einheitszellen einer Schicht auf die den Ursprung enthaltende zu beziehen. Die $\mathbf{q}_{//}$ und $\mathbf{q}'_{//}$ -Integration führt dann wie in Kapitel 3.1.2 zur Impulserhaltung (3.17) und (3.21), die bis auf reziproke Gittervektoren erfüllt ist. Wieder werden dadurch inelastische Wechselwirkungen von Elektronen in verschiedenen Einheitszellen einer und auch unterschiedlicher Schichten mitberücksichtigt.

Für die Konstruktion eines Teilchenpropagators stehen schon entwickelte Methoden in der Schicht-KKR-Methode zur Verfügung. Sie berücksichtigen sämtliche elastischen Wechselwirkungen zwischen der Probeladung und dem Kristall mit Hilfe der mit der Dichte-Funktional-Theorie berechneten Potentiale. Die Gittersummation, dargestellt im Anhang A, ist für die Berechnung von G^+ bereits erprobt, und es können existierende Programme zur numerischen Behandlung benutzt werden (Hopkinson et al. (1980)). Die Berechnung des Lochpropagators G^- würde die Entwicklung einer geänderten Gittersummation (Anhang A) erfordern. Deshalb wurde der Lochpropagator mit der Beziehung (Economou (1983))

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r})^*$$

umgeformt. Die schichtabhängigen Verlustströme sind dann

$$\begin{aligned}
j_{1\sigma_1}^{\sigma_2\sigma_4} &= \frac{2\delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{\sigma_3\sigma_4}}{(2\pi A_{uc})^4} \Im \left((-i) \sum_{g//} \int V(\mathbf{q}_{12}) V(\mathbf{q}'_{21}) \right. \\
&\times \left(\sum_{j_2} e^{i\mathbf{q}'_{21}\mathbf{d}_{j_2}} M_{21}^{j_2,\sigma_1}(\mathbf{q}'_{21}) \right) \left(\sum_{j_3} e^{i\mathbf{q}_{12}\mathbf{d}_{j_3}} M_{12}^{j_3,\sigma_1}(\mathbf{q}_{12}) \right) \\
&\times \left(\sum_{j_4,j_5} e^{-i(\mathbf{q}'_{21}\mathbf{d}_{j_4} + \mathbf{q}_{12}\mathbf{d}_{j_5})} M_{34}^{j_4,j_5,\sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) \right) \\
&\times dq_z dq'_z \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \\
&\times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2\mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2\mathbf{k}_{4//} \Big)
\end{aligned} \tag{3.45}$$

$$\begin{aligned}
j_{2\sigma_1}^{\sigma_2\sigma_4} &= \frac{2\delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{\sigma_3\sigma_4}}{(2\pi A_{uc})^4} \Im \left((-i) \sum_{g//} \int V(\mathbf{q}_{14}) V(\mathbf{q}'_{41}) \right. \\
&\times \left(\sum_{j_2,j_3} e^{i(\mathbf{q}'_{41}\mathbf{d}_{j_2} + \mathbf{q}_{14}\mathbf{d}_{j_3})} M_{14}^{j_2,j_3,\sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{41}) \right) \\
&\times \left(\sum_{j_4,j_5} e^{-i(\mathbf{q}'_{41}\mathbf{d}_{j_4} + \mathbf{q}_{14}\mathbf{d}_{j_5})} M_{23}^{j_5,j_4,\sigma_4}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{41}) \right) \\
&\times dq_z dq'_z \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \\
&\times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2\mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2\mathbf{k}_{4//} \Big)
\end{aligned} \tag{3.46}$$

$$\begin{aligned}
j_{3\sigma_1}^{\sigma_2\sigma_4} &= \frac{2\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_1\sigma_4}}{(2\pi A_{uc})^4} \Im \left((+i) \sum_{g//} \int V(\mathbf{q}_{12}) V(\mathbf{q}'_{41}) \right. \\
&\times \left(\sum_{j_3} e^{i\mathbf{q}_{12}\mathbf{d}_{j_3}} M_{12}^{j_3,\sigma_1}(\mathbf{q}_{12}) \right) \\
&\times \left(\sum_{j_2,j_4,j_5} e^{-i(\mathbf{q}'_{41}\mathbf{d}_{j_4} + \mathbf{q}_{12}\mathbf{d}_{j_5})} e^{i\mathbf{q}'_{41}\mathbf{d}_{j_2}} M_{2341}^{j_2,j_4,j_5,\sigma_1}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{41}) \right) \\
&\times dq_z dq'_z \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \\
&\times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2\mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2\mathbf{k}_{4//} \Big)
\end{aligned} \tag{3.47}$$

$$\begin{aligned}
j_4^{\sigma_2 \sigma_4} = & \frac{2\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_1 \sigma_4}}{(2\pi A_{uc})^4} \Im \left((+i) \sum_{g//} \int V(\mathbf{q}_{14}) V(\mathbf{q}'_{21}) \right. \\
& \times \left(\sum_{j_2} e^{i\mathbf{q}'_{21} \mathbf{d}_{j_2}} M_{21}^{j_2, \sigma_1}(\mathbf{q}'_{21}) \right) \\
& \times \left(\sum_{j_3, j_4, j_5} e^{-i(\mathbf{q}'_{21} \mathbf{d}_{j_4} + \mathbf{q}_{14} \mathbf{d}_{j_5})} e^{i\mathbf{q}_{14} \mathbf{d}_{j_3}} M_{1432}^{j_3, j_4, j_5, \sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{21}) \right) \\
& \times dq_z dq'_z \delta(\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} + \mathbf{g}_{//}) \\
& \times \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^2 \mathbf{k}_{3//} dE_4 d^2 \mathbf{k}_{4//} \Big) .
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Mit den $M_{\alpha, \dots}^{j, \sigma}$ wurden die Ortsintegrale abgekürzt. Die unteren Indizes zeigen, welche Zustände beteiligt sind, an den oberen erkennt man die Schicht- und Spinabhängigkeit. Sie sind wie folgt definiert

$$M_{12}^{j_3, \sigma_1}(\mathbf{q}_{12}) := \langle \psi_1^{j_3, \sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}_{12}}^{j_3} | \phi_2^{j_3, \sigma_1} \rangle \tag{3.49a}$$

$$M_{21}^{j_2, \sigma_1}(\mathbf{q}'_{21}) := \langle \phi_2^{j_2, \sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}'_{21}}^{j_2} | \psi_1^{j_2, \sigma_1} \rangle \tag{3.49b}$$

$$M_{34}^{j_4 j_5, \sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) := \langle \Delta_{-\mathbf{q}'_{21}}^{j_4}, G_{3, j_5 j_4}^{+, \sigma_4} \Delta_{-\mathbf{q}_{12}}^{j_5} G_{4, j_5 j_4}^{+, \sigma_4} \rangle \tag{3.49c}$$

$$M_{14}^{j_2 j_3, \sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{41}) := \langle \psi_1^{j_3, \sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}_{14}}^{j_3} G_{4, j_3 j_2}^{+, \sigma_1} \Delta_{\mathbf{q}'_{41}}^{j_2} | \psi_1^{j_2, \sigma_1} \rangle \tag{3.49d}$$

$$M_{23}^{j_4 j_5, \sigma_4}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{41}) := \langle \phi_2^{j_4, \sigma_4} | \Delta_{-\mathbf{q}_{14}}^{j_4} G_{3, j_5 j_4}^{+, \sigma_4} \Delta_{-\mathbf{q}'_{41}}^{j_5} | \phi_2^{j_5, \sigma_4} \rangle \tag{3.49e}$$

$$M_{2341}^{j_2 j_4 j_5, \sigma_1}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{41}) := \langle \phi_2^{j_4, \sigma_1} | \Delta_{-\mathbf{q}_{41}}^{j_4}, G_{3, j_5 j_4}^{+, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}_{12}}^{j_5} G_{4, j_5 j_2}^{+, \sigma_1} \Delta_{\mathbf{q}'_{41}}^{j_2} | \psi_1^{j_2, \sigma_1} \rangle \tag{3.49f}$$

$$M_{1432}^{j_3 j_4 j_5, \sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{21}) := \langle \psi_1^{j_3, \sigma_1} | \Delta_{\mathbf{q}_{14}}^{j_3} G_{4, j_3 j_4}^{+, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}'_{21}}^{j_4}, G_{3, j_5 j_4}^{+, \sigma_1} \Delta_{-\mathbf{q}_{14}}^{j_5} | \phi_2^{j_5, \sigma_1} \rangle . \tag{3.49g}$$

An den Indizes j_i der Schichten ist die Abhängigkeit von den einzelnen Ortsvariablen abzulesen. Mit ihnen sind die Propagationen, wie in Bild 4, 5 dargestellt, unmittelbar nachvollziehbar.

3.3. ÄQUIVALENZ ZWISCHEN DEM VERLUSTSTROM- UND DEM GOLDENE- REGEL- FORMALISMUS

Im Kapitel 3.1 war zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit nur die Kenntnis der Zustandsfunktionen der Elektronen nötig. Anders in Kapitel 3.2, dort wurden neben den Zuständen auch Greensfunktionen gebraucht. Für die Festkörperzustände in 3.1, das sind $|\eta_3, E_3, \mathbf{k}_3\rangle$ und $|\eta_4, E_4, \mathbf{k}_4\rangle$, müssen sogenannte Halbraumzustände konstruiert werden, um eine Oberfläche mit in die Rechnung einzubeziehen. Dabei werden die Zustände und ihre Ableitungen an der Oberfläche ($z = 0$) an nach außen exponentiell abfallende Wellen angepaßt.

Diese Anpassung kann aber nur vorgenommen werden, wenn das Elektronenpotential (2.11) rein reell ist, also keinen absorptiven imaginären Anteil hat. Die Halbraumzustände werden dadurch berechnet, daß die Blochzustände, die durch die senkrecht zur z -Achse liegende Oberfläche in und aus dem Kristall Strom tragen, und diejenigen, die in den Kristall hinein exponentiell abfallen, an dieser Oberfläche an eine nach außen exponentiell abfallende Welle angepaßt werden. Diese Blochzustände, die man durch Lösen des Eigenwertproblems aus Kapitel 5.3 erhält, ergeben eine ausreichende Anzahl von Gleichungen, die das Anpassungsproblem eindeutig lösbar machen.

Hat man aber ein imaginäres Potential, so entfallen die in den Kristall hinein stromtragenden Blochzustände, weil nur noch exponentiell ansteigende und abfallende Blochzustände existieren, und das zu lösende Gleichungssystem ist unterbestimmt, da die exponentiell ansteigenden Lösungen nun wegfallen, und es ist somit nicht mehr eindeutig lösbar. Das heißt, im mathematischen Sinne existieren keine Halbraumzustände, und die Goldene Regel kann nicht mehr verwendet werden.

Mit Imaginärteil im Potential ist eine Äquivalenz zwischen dem Goldenen-Regel- und dem dynamischen Verluststrom-Formalismus daher nur für ein System ohne Oberfläche möglich. Dieser Imaginärteil ist für die numerische Behandlung auf jeden Fall notwendig, da er die Singularitäten in der Zustandsdichte von (3.19, 3.20) und in den Nennern der Greensfunktionen so weit glättet, daß eine Berechnung mit vertretbarem Aufwand erst möglich wird. Aus der dann tief im Volumenkristall gelösten Schrödinger-Gleichung mit komplexem V_{xc}^{eff} in (2.12)

erhält man für vorgegebene $\mathbf{k}$ die Volumenzustände.

Im Verluststromformalismus ist dann für die Festkörpervolumenzustände 3 und 4 (3.39) die die Propagation beschreibende Greensfunktion. Um die Äquivalenz zu zeigen, wird sie in der Form

$$G_{\alpha}^{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Psi_{\mathbf{k}_{\alpha}} \Psi_{\mathbf{k}_{\alpha}}^* \rho^{\pm}(E, \mathbf{k}_{\alpha}) d\mathbf{k}_{\alpha}$$

(wegen der besseren Übersichtlichkeit ohne Spinnotierung) mit der Definition

$$\rho^{\pm}(E, \mathbf{k}_{\alpha}) := (E \pm i\varepsilon - E(\mathbf{k}_{\alpha}))^{-1}$$

in die Rechnung eingehen. Sie kann in dieser Gestalt für die Zustände 3 und 4 in die Ausdrücke für die Verlustströme (3.40–3.43) eingesetzt werden. Der Propagator des gemessenen Zustands 2 wird in der in Anhang 3 abgeleiteten Form (3.37) berücksichtigt. Mit den Übergangswahrscheinlichkeiten

$$f_{\mathbf{q}} := \langle \Phi_2 \Psi_4 | \Delta_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^* | \Psi_1 \Psi_3 \rangle$$

der direkten und der Austauschstreuung

$$g_{\mathbf{q}} := \langle \Phi_2 \Psi_4 | \Delta_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^* | \Psi_3 \Psi_1 \rangle$$

und den Definitionen

$$F_1(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E_3, E_4) := f_{\mathbf{q}'} f_{\mathbf{q}}^*$$

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E_3, E_4) := g_{\mathbf{q}'} g_{\mathbf{q}}^*$$

$$F_3(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E_3, E_4) := f_{\mathbf{q}'} g_{\mathbf{q}}^*$$

$$F_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E_3, E_4) := g_{\mathbf{q}'} f_{\mathbf{q}}^* ,$$

eingesetzt in (3.40–3.43), werden die n-Verlustströme ($n = 1, 2, 3, 4$) zu

$$j_n = \frac{2}{(2\pi)^{12}} \Im \left((\mp i) \int_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}') \int_{E_3, E_4} F_n(\mathbf{q}', \mathbf{q}, E_3, E_4) \right. \\ \left. \times \rho^-(E_3, \mathbf{k}_3) \rho^+(E_4, \mathbf{k}_4) \delta(E_1 + E_3 - E_2 - E_4) dE_3 d^3 \mathbf{k}_3 dE_4 d^3 \mathbf{k}_4 d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{q}' \right) . \quad (3.50)$$

Die Norm der Festkörperzustände 3 und 4 bleibt beschränkt für $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, so daß die E_3 -Integration in (3.50) mit dem Residuensatz ausgewertet werden kann. Die E_4 -Integration ergibt mit der aus den Feynman-Regeln (durch die Zeitintegration) folgenden Energieerhaltungs- δ -Funktion $E_4 = E_3 + E_1 - E_2 =: E_3 + \Delta E$. Der Nenner der so erhaltenen Funktion von E_3 ist ein Polynom 2. Ordnung in E_3 . Daher ist es möglich, den Residuensatz anzuwenden, womit sich

$$I := \int \frac{F_n(\mathbf{q}', \mathbf{q}, E_3, E_4)}{(E_3 - i\varepsilon - E(\mathbf{k}_3)) ((E_3 + \Delta E) + i\varepsilon' - E(\mathbf{k}_4))} dE_3 \quad (3.51)$$

$$= \Im \left(\frac{2\pi i F_n(\mathbf{q}', \mathbf{q}, E_3, E_3 + \Delta E)}{E(\mathbf{k}_3) + \Delta E - E(\mathbf{k}_4) + i(\varepsilon + \varepsilon')} \right)$$

ergibt. Mit $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x - x_0 \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x - x_0}\right) \mp i\pi\delta(x - x_0)$ und reellem F_n folgt nach der Auswertung des Imaginärteils

$$I = \frac{1}{2}(2\pi)^2 F_n(\mathbf{q}', \mathbf{q}, E_3, E_3 + \Delta E) \delta(E_1 + E(\mathbf{k}_3) - E_2 - E(\mathbf{k}_4)) .$$

Das Integrationsergebnis, eingesetzt in die Verlustströme, hat mit (3.35–3.36) eine zu (3.11–3.12) äquivalente Form der Übergangswahrscheinlichkeit zur Folge. Die Ströme haben die Gestalt

$$j_n = \mp \int_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} F_n(\mathbf{q}', \mathbf{q}, E_3, E_3 + E_1 - E_2)$$

$$d^3\mathbf{q} d^3\mathbf{q}' \delta(E_1 + E(\mathbf{k}_3) - E_2 - E(\mathbf{k}_4)) \frac{d^3\mathbf{k}_3}{(2\pi)^3} \frac{d^3\mathbf{k}_4}{(2\pi)^3} .$$

Wie bei der Goldenen Regel enthält F_n nur noch die Übergangsmatrixelemente. Neben der Energieerhaltung sind die Dichten der Zustände mit kontinuierlichem Spektrum implizit in der δ -Funktion durch $E(\mathbf{k})$ enthalten. Unter Verwendung von (3.10) nimmt dann F_n die Form der in Kapitel 3.1 verwendeten Übergangswahrscheinlichkeiten (3.11, 3.12) an. Dabei kommt einem der Umstand entgegen, daß die Integrationen über q_z und q'_z wegen der Gestalt der F_n unabhängig voneinander ausgeführt werden können. Daher ist der Goldene-Regel Formalismus von störungstheoretisch 1. Ordnung. Durch die Quadrierung bei der Betragsbildung wird eine scheinbar quadratische Abhängigkeit vom Störpotential erzeugt.

Diese Entkopplung kann im Verluststromformalismus, der eine Oberfläche berücksichtigt, nicht durchgeführt werden; die Matrixelemente hängen in nicht

separierbarer Form von q_z und q'_z ab, so daß dort eine echte Entwicklung störungstheoretisch 2. Ordnung vorliegt.

4. Die Verlustströme im homogenen Elektronengas

Das homogene Elektronengas ist das einfachste Modell, mit dem die inelastische Elektronenstreuung an Leitungsbandelektronen simuliert werden kann.

Zur Ermittlung der mittleren freien Weglänge von heißen Elektronen ($E > E_F$) im homogenen Elektronengas wurden von Ritchie, Ashley (1965) Rechnungen durchgeführt, die erstmals Austauschintegrale enthielten. Dadurch war es möglich, den Spin in die Berechnungen miteinzubeziehen.

Penn (1980) hat diese Rechnungen mit verschiedenen Abschirmungen des Wechselwirkungspotentials wiederholt und untereinander verglichen.

Eine Untersuchung von ferromagnetischen Materialien mit inelastischer Elektronenstreuung wurde von Yin, Tosatti (1981) durchgeführt (inhaltsgleich mit Boccheta et al. (1987)). Es ist dort aber nicht winkelaufgelöst gerechnet worden. Der Ferromagnetismus wird dabei lediglich über eine Abschneidefunktion $\theta(k - k_F)$ und über austauschaufgespaltene Spin- $|\uparrow\rangle$ und Spin- $|\downarrow\rangle$ Parabeln für die $E(\mathbf{k})$ -Beziehung simuliert. Die Abschneidefunktionen entscheiden, ob der Zustand besetzt ist oder nicht. Neben den später in Kapitel 4.1 festgestellten, wenig realistischen Ergebnissen dieses Modells erscheint auch eine von $\mathbf{k}$ unabhängige Austauschaufspaltung der Realität nicht zu entsprechen (Venus, Kirschner (1988)).

Vignale, Singwi (1985) untersuchten ebenfalls mit der inelastischen Elektronenstreuung ferromagnetische Materialien im Rahmen des homogenen Elektronengases aber ließen noch zusätzlich Magnonen Anregungen zu.

Dieses unrealistische Verhalten des Homogenen-Elektronengas-Modells wird durch die zur Verfügung stehenden Erhaltungssätze verursacht, so daß als zweites Modell das homogene Elektronengas mit einer die Translationssymmetrie brechenden Oberflächenbarriere untersucht wird.

Beide Modelle werden ohne Austauschaufspaltung des homogenen Elektronengases behandelt, somit ist eine Spinabhängigkeit nicht zu berücksichtigen.

4.1. ENERGIE- UND WINKELAUFGELÖSTE INELASTISCHE ELEKTRONENSTREUUNG IM HOMOGENEN ELEKTRONENGAS

Hier soll nun die energie- und winkelaufgelöste inelastische Elektronenstreuung des ein- wie austretenden Elektrons berechnet werden. Die Herleitung des Verluststroms (3.40–3.43) bleibt auch in diesem Rahmen anwendbar, nur die Greensfunktion hat wegen der dreidimensionalen Translationsinvarianz des homogenen Elektronengases die Gestalt (A.4). Als inelastisches Wechselwirkungspotential wird (2.5) verwendet. Dies in (3.40–3.43) eingesetzt und Ausintegrieren der $\mathbf{r}$ -abhängigen Exponentialfunktionen ergibt die dreidimensionale Impulserhaltung enthaltenden δ -Funktionen. Aufgrund der energieabhängigen Nenner kann wieder wie in (3.51) mit Hilfe des Residuensatzes über E_3 integriert werden. Die Fermi-Energie E_F und den Impuls k_F kann man für das homogene Elektronengas zum Beispiel Ashcroft, Mermin (1975) entnehmen. Das ergibt für die Verlustströme^[13]

$$j_1 = (4\pi)^2 \int \frac{\theta(k_F - k_3)\theta(k_4 - k_F)}{\left[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 + k_0^{TF^2}\right]^2} \times \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\delta(E_1 - E_2 + E(\mathbf{k}_3) - E(\mathbf{k}_4)) d^3\mathbf{k}_3 d^3\mathbf{k}_4 \quad (4.1)$$

$$j_2 = (4\pi)^2 \int \frac{\theta(k_F - k_3)\theta(k_4 - k_F)}{\left[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)^2 + k_0^{TF^2}\right]^2} \times \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\delta(E_1 - E_2 + E(\mathbf{k}_3) - E(\mathbf{k}_4)) d^3\mathbf{k}_3 d^3\mathbf{k}_4 \quad (4.2)$$

$$j_3 = (4\pi)^2 \int \frac{\theta(k_F - k_3)\theta(k_4 - k_F)}{\left[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)^2 + k_0^{TF^2}\right] \left[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1)^2 + k_0^{TF^2}\right]} \times \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\delta(E_1 - E_2 + E(\mathbf{k}_3) - E(\mathbf{k}_4)) d^3\mathbf{k}_3 d^3\mathbf{k}_4 \quad (4.3)$$

$$j_4 = (4\pi)^2 \int \frac{\theta(k_F - k_3)\theta(k_4 - k_F)}{\left[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)^2 + k_0^{TF^2}\right] \left[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)^2 + k_0^{TF^2}\right]} \times \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\delta(E_1 - E_2 + E(\mathbf{k}_3) - E(\mathbf{k}_4)) d^3\mathbf{k}_3 d^3\mathbf{k}_4 . \quad (4.4)$$

Die Translationsinvarianz ergibt neben der Impulserhaltung auch noch eine eindeutige Beziehung zwischen E und $\mathbf{k}$ mit $E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\mathbf{k}^2$. Aus den δ -Funktionen

[13] Wegen der fehlenden Austauschspaltung sind die Verlustströme im homogenen Elektronengas spinunabhängig.

folgt $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3$ und $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3$, und damit ist dann $j_3 = j_4$. Das Gesamtsystem ist zeittranslationsinvariant, also enthalten die Ströme auch die Energieerhaltung.

Die Integrationen sind im Gegensatz zu Yin, Tosatti (1981) analytisch ausführbar und im Vergleich zu Penn (1980) ohne Näherungen zu berechnen^[14], wenn bei der $\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$ -Integration in folgender Reihenfolge vorgegangen wird.

I. k_{4z} -Integration:

In dem noch beliebigen Koordinatensystem sind $\mathbf{k}_{3//}$ und $\mathbf{k}_{4//}$ Vektoren in der (x,y)-Ebene. Die $k_{4,z}$ -Integration ergibt dann $(\Delta E := E_1 - E_2)$

$$\delta(E_1 - E_2 + \frac{1}{2}(\mathbf{k}_3^2 - \mathbf{k}_4^2)) = \frac{1}{k_{1z} - k_{2z}} \delta(k_{3z} - \frac{1}{k_{1z} - k_{2z}} \times (\Delta E + \frac{1}{2}(\mathbf{k}_{3//}^2 - \mathbf{k}_{4//}^2) - \frac{1}{2}(k_{1z} - k_{2z})^2)) .$$

Legt man das Koordinatensystem jetzt so, daß $\mathbf{q}_{12} := \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ parallel zur z-Achse ist, ermöglicht dies die

II. k_{3z} -Integration:

Bei Ausnutzung der unter I. erhaltenen δ -Funktion ergibt sich, daß $k_{3z} = k_{2z}$ und somit $k_{4z} = k_{1z}$ sein müssen.

Dieses Ergebniss hätte man auf einem anderen Weg ebenfalls ermitteln können. Mit $E_i = \frac{1}{2}\mathbf{k}_i^2$ ($i = 1, 2, 3, 4$) und den vier Erhaltungssätzen stehen 8 Gleichungen zur Verfügung. Durch das Experiment sind $(E_1, \mathbf{k}_{1//})$ und $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ vorgegeben. Legt man noch zwei zusätzliche Größen fest, dann sind alle $E_i, \mathbf{k}_{i//}, k_{i,z}$ aus dem Gleichungssystem bestimmbar^[15].

Bisher ist das Koordinatensystem nur insoweit vorgegeben worden, daß $\mathbf{q}_{12}$ in z-Richtung zeigt, wie in Bild 8 dargestellt. Die z-Achse liegt dadurch in der Ebene,

^[14]Dort ist eine zusätzliche Integration vorzunehmen, weil nicht winkelaufgelöst gerechnet wird.

^[15]Die Gleichungen sind zwar zum Teil quadratisch, aber in diesem Fall einfach zu lösen.

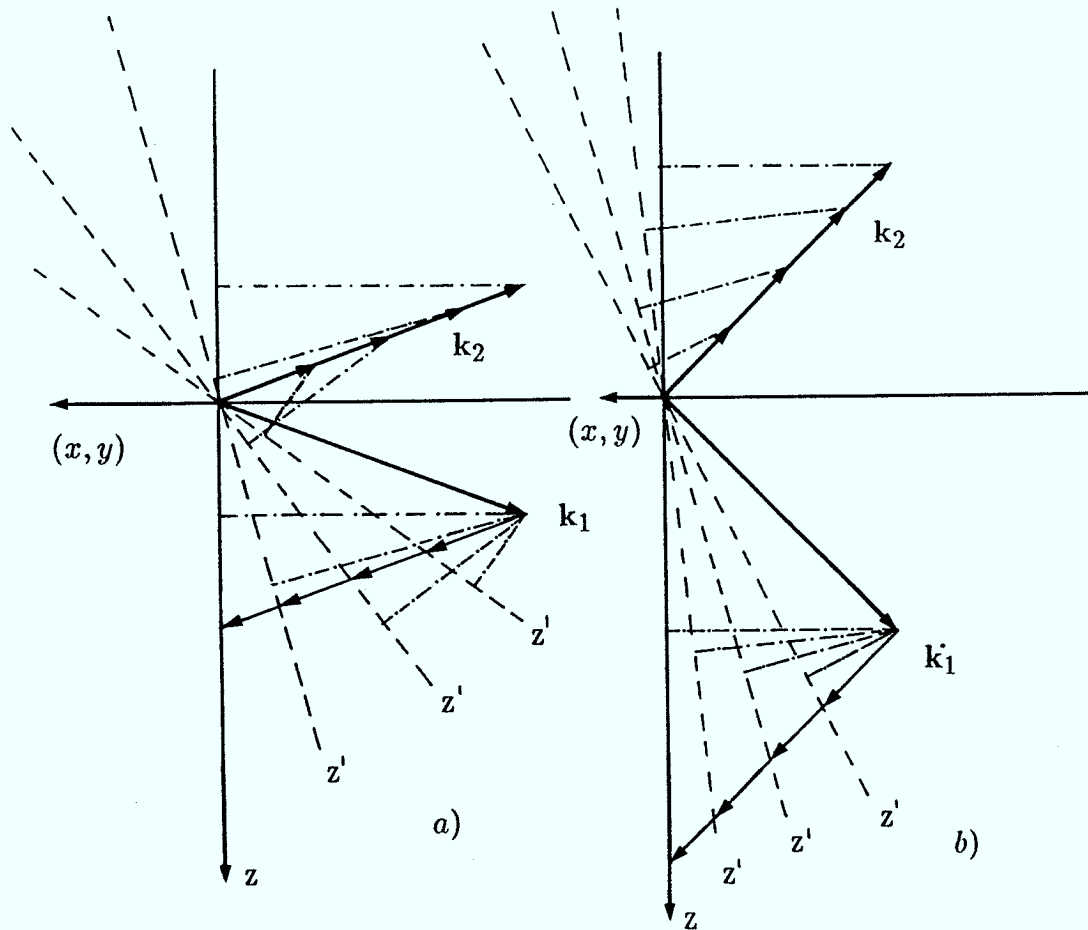


Bild 8: Rotation des Koordinatensystems von z nach z' , so daß die z -Achse parallel zu $q_{12} := k_1 - k_2$ liegt. Für kleine Öffnungswinkel zwischen k_1 und k_2 (linkes Bild) variiert $k_{2,z}$ in einem kleineren Bereich als $k_{1,z}$.

die k_1 und k_2 aufspannen. Man hat nun noch die Freiheit, das Bezugssystem um die z -Achse zu rotieren, und zwar so, daß $k_{1y} = 0$ und $k_{2y} = 0$ sind. Stellt man dann den zweidimensionalen Vektor $k_{3//}$ in Zylinderkoordinaten dar, erhält man für die Nenner in den Verlustströmen

$$\left((k_1 - k_k)^2 + k_0^{TF2} \right)^2 = (q_{12z}^2 + k_0^{TF2})^2$$

$$\left((k_2 - k_3)^2 + k_0^{TF2} \right) = (k_{2x}^2 + k_{3//}^2 - k_{2x}k_{3//} \cos \vartheta + k_0^{TF2}) .$$

Nach Ausnutzung der δ -Funktion bleiben noch ϑ und $k_{3//}$ als Integrationsvariablen, über die analytisch integriert werden kann.

Unter Ausnutzung der δ -Funktionen und mit dem Übergang zu reduzierten Variablen (d.h. $k \rightarrow k := \frac{k}{k_F}$) sind nach der ϑ und $k_{3//}$ -Integration die Verlustströme gegeben zu

$$\begin{aligned} j_1 &= + \frac{\pi}{k_F^3} \frac{(4\pi)^2}{|q_{12z}|} \frac{k_{1z}^2 - k_{2z}^2}{(q_{12z}^2 + k_0^{TF2})^2} \\ j_2 &= + \frac{\pi}{k_F^3} \frac{(4\pi)^2}{|q_{12z}|} \frac{k_{3//}^2 - k_0^{TF2} - k_{2x}^2}{2k_0^{TF2} \sqrt{k_{3//}^4 + 2(k_0^{TF2} - k_{2x}^2)k_{3//}^2 + (k_{2x}^2 + k_0^{TF2})^2}} \Big|_{k_{3//}^{min}}^{k_{3//}^{max}} \\ j_3 &= - \frac{\pi}{k_F^3} \frac{(4\pi)^2}{|q_{12z}|} \frac{1}{q_{12z}^2 + k_0^{TF2}} \operatorname{arsinh} \frac{k_{3//}^2 + k_0^{TF2} - k_{2x}^2}{2k_{2x}k_0^{TF}} \Big|_{k_{3//}^{min}}^{k_{3//}^{max}}. \end{aligned}$$

Durch die Heaviside-Funktionen θ in (4.1—4.4) ist das Integrationsgebiet eingeschränkt, und man erhält aus ihnen die Integrationsgrenzen $k_{3//}^{min} = \sqrt{1 - k_{1z}^2}$ und $k_{3//}^{max} = \sqrt{1 - k_{2z}^2}$. Diese Bedingungen an den Integrationsbereich ergeben dann die Knicke in den berechneten Verlustströmen aus Bild 9, 10.

Aus diesen Einschränkungen und der Beziehung $k_{3z} = k_{2z}$ erkennt man, daß bei vorgegebenen $(E_1, k_{1//})$ und $(E_2, k_{2//})$ $k_{3//}$ nur eingeschränkt wählbar ist. Es sind nur solche Konfigurationen der Zustände sinnvoll, die Werte ergeben, auf denen arsinh und die Wurzelfunktion physikalisch interpretierbar sind. Zum Beispiel müssen k_{1z} und k_{2z} kleiner als eins sein. Anhand folgender Überlegung kann man sich diese Einschränkungen verdeutlichen.

Nimmt man den Fall an, daß k_1 und k_2 auf der z -Achse liegen, dann sind senkrechter Ein- und Ausfall vorausgesetzt. Wird dann ein Elektron bei einem inelastischen Stoßprozeß zurückgestreut und seine vor dem Stoß positive k_{1z} -Komponente ist nach dem Stoß negativ, so hat ein Impulsübertrag $q_{12z} = k_{1z} - k_{2z}$ stattgefunden. Dieser kann nur durch den Impuls des Zustands 3 ermöglicht worden sein, der jedoch seinerseits nur höchstens gleich dem Fermi-Impuls sein kann. Das heißt, es können nur Stöße stattfinden, bei denen k_3 genügend übertragbaren Impuls zur Verfügung stellt. Daraus folgt hier $|k_3| = |k_{1z}| + |k_{2z}| < k_F$. k_{1z} und k_{2z} sind aber experimentell vorgegeben mit $k_{1/2z} > k_F$. Diese Streusituation ist also im homogenen Elektronengas verboten. Das Experiment zeigt aber im Gegensatz dazu auch bei senkrechtem Ein- und Ausfall der Elektronen

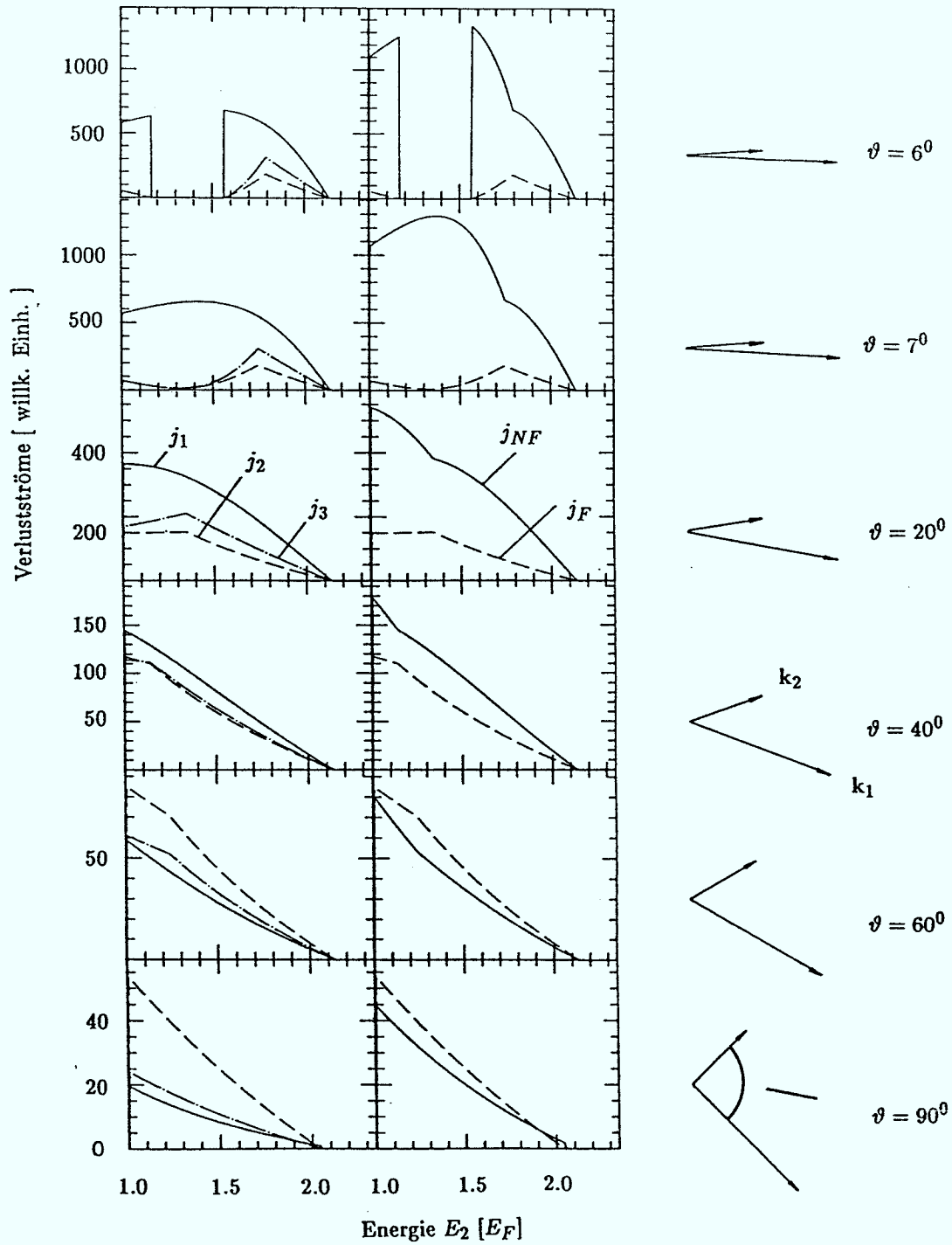


Bild 9: Non-Flip- und Flip-Verlustströme (3.35, 3.36) für Aluminium mit $E_F = 11.7 \text{ eV}$ im Rahmen des Modells des homogenen Elektronengases mit konstanter Primärenergie $E_1 = 2.14 E_F \rightarrow 25 \text{ eV}$, aber sich ändernden Einfallswinkel- und Ausfallswinkeln.

einen Verluststrom. Daraus folgt, daß Verlustströme im Rahmen dieses Modells des homogenen Elektronengases ohne Oberfläche nur bei streifendem Einfall der Elektronen zu erwarten (Bild 9) sind.

Auf diese Weise kommen die Erhaltungssätze zum Ausdruck, wodurch zum Beispiel für bestimmte Winkelbereiche, wie in Bild 9 oben dargestellt, Lücken im Spektrum entstehen oder, wie in Bild 9 unten, die Spektren für größer werdende Öffnungswinkel, angefangen an der Primärenergie, ebenfalls Lücken aufweisen. Das Experiment zeigt diese Lücken nicht, daher muß man das homogene Elektronengas als unrealistisches Modell bezeichnen. Geändert wird dieses Verhalten durch Einbeziehen einer Oberfläche oder eines Kristallgitters mit den Atomrümpfen als Elektronenstreuer in das theoretische Modell. Dadurch wird die Translationssymmetrie gebrochen, und man hat zum Beispiel bei einer Oberfläche einen Erhaltungssatz weniger, was zur Folge hat, daß keine Lücken mehr im Spektrum entstehen. Aus diesem Grund wird im nächsten Kapitel das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere untersucht.

In Bild 10 sind Spektren für wachsende Primärenergie aufgetragen, die im Rahmen des Modells des homogenen Elektronengases berechnet wurden. Der mit j_2 angegebene Austauschanteil des Verluststroms, der die Spin-Flip Übergänge ermittelt, nimmt im Vergleich zu den Non-Flip Übergängen für steigende Primärenergie ab. Dieses Verhalten wurde auch von anderen Autoren, wie Sturm (1980), beobachtet. Für größer werdende Primärenergie wird dies zum Anlaß genommen, den Austauschanteil zu vernachlässigen, so auch in der Photoemission von Bardyszewski, Hedin (1985).

Weiter ist in Übereinstimmung mit dem Experiment festzustellen, daß bei zunehmender Primärenergie die Anzahl der rückgestreuten Elektronen bei festgehaltener Energie der austretenden Elektronen E_2 abnimmt.

Bei verändertem Ein- und Ausfallwinkel gibt es Konfigurationen, in denen die durch Austauschstreuung hervorgerufenen Ströme j_2 die anderen Ströme überwiegen. Dafür verantwortlich ist der Strom j_1 , der bei Winkelkonfigurationen, die streifenden Ein- und Ausfall simulieren, den Hauptbeitrag liefert. Bild 8 zeigt, daß für diesen streifenden Ein- und Ausfall die k_{2z} -Komponente klein ist und in dem Ausdruck für j_1 weniger verändert, als wenn k_{2z} in derselben Größenordnung

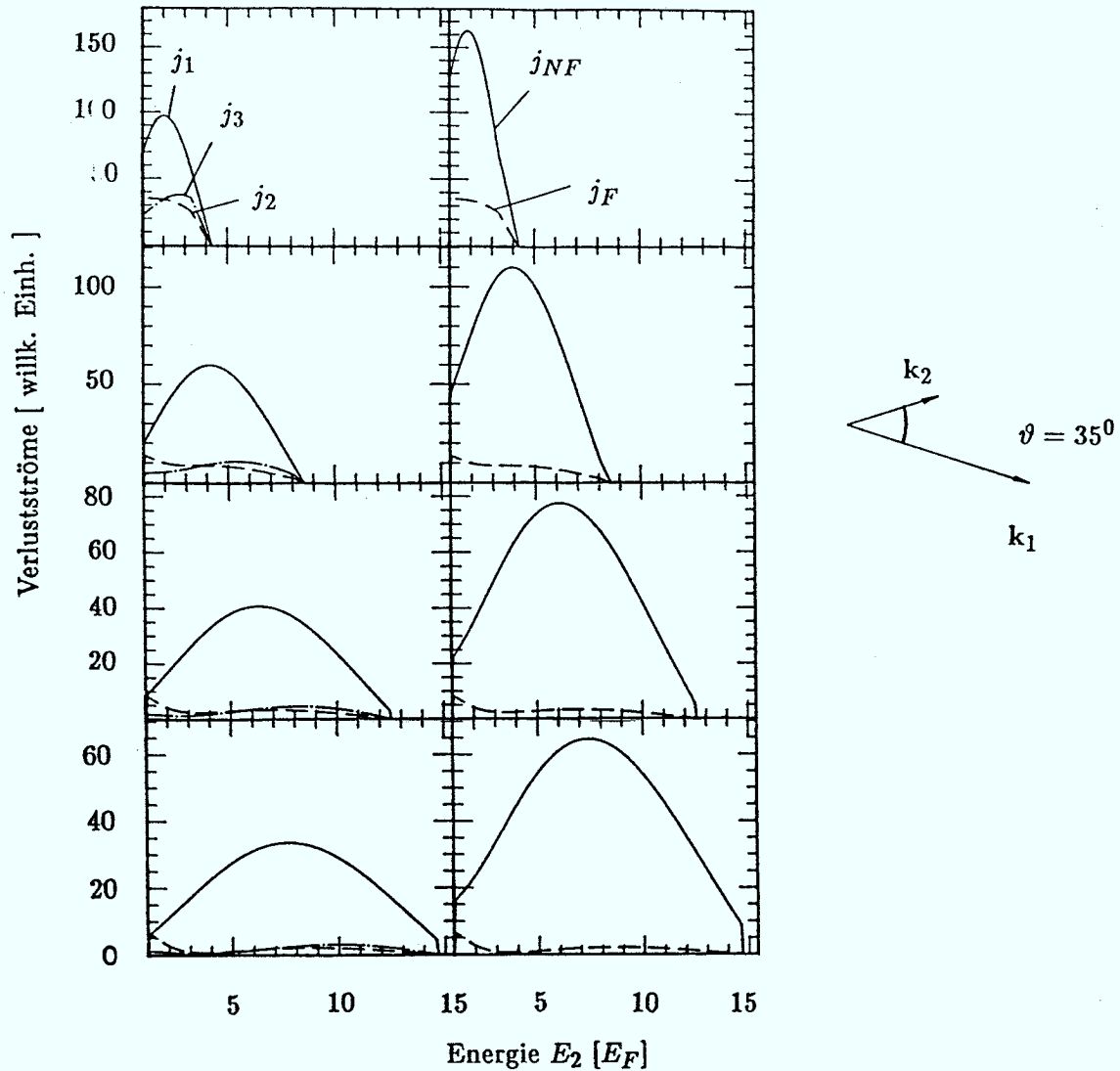


Bild 10 : Non-Flip- und Flip-Verlustströme (3.35, 3.36) für Aluminium im Rahmen des Modells des homogenen Elektronengases mit wachsender Primärenergie; von oben nach unten $E_1 = 4.27, 8.55, 12.83, 15.4 E_F$, aber konstanten Einfalls- und Ausfallswinkeln.

liegt wie k_{1z} . Letzteres ist aber gerade bei größerem Öffnungswinkel zwischen k_1 und k_2 der Fall, siehe Bild 8. j_1 variiert stark mit dem Öffnungswinkel, j_2 und j_3 verändern sich nicht so stark. Dies geht soweit, daß die Non-Flip Ströme kleiner werden als die Spin-Flip Ströme, wie im unteren Teil von Bild 9 dargestellt. Die Situation, daß $j_2 > j_1$ ist, tritt auch in den von Yin, Tosatti (1981) berechneten

Verluststromspektren auf.

Das Verhalten der Verlustströme, bei $E_2 \rightarrow E_1$ gegen null zu gehen, ist sofort an den analytischen Ausdrücken der Verlustströme zu erklären. j_2 und j_3 sind null, weil $k_3^{min} = k_3^{max}$ ist, und $j_1 = 0$ folgt nach Kürzen von q_{12} wegen $k_{1,z} = -k_{2,z}$.

4.2. ENERGIE- UND WINKELAUFGELÖSTE INELASTISCHE ELEKTRONENSTREUUNG IM HOMOGENEN ELEKTRONENGAS MIT OBERFLÄCHENBARRIERE

Das Kapitel 4.1 behandelte das homogene Elektronengas. Die dort fehlende Oberfläche ergab unrealistische Spektren für dieses Modell. Nun soll eine Oberfläche, wie in Bild 31 aus Anhang B dargestellt, in die Berechnung der Verlustströme miteinbezogen werden. Dieses Modell entspricht einem halbunendlichen homogenen Elektronengas. Die Translationsinvarianz ist senkrecht zur Oberfläche gebrochen, der Impuls bleibt in dieser z -Richtung nicht erhalten. Die Verknüpfung $k_{3z} = k_{2z}$, wie sie in Kapitel 4.1 bestand, wird zerstört. Lediglich parallel zur Oberfläche ist die Translationsinvarianz gegeben, gilt also $\mathbf{k}_{1//} + \mathbf{k}_{3//} - \mathbf{k}_{2//} - \mathbf{k}_{4//} = 0$. Eine Rückstreuung von senkrecht auf die Oberfläche einfallenden Elektronen mit $(E_1, \mathbf{k}_{1//})$ in den Zustand $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ kann nun aufgrund der gebrochenen Translationsinvarianz in z -Richtung im Gegensatz zu Kapitel 4.1 stattfinden.

Die für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere notwendigen Greensfunktionen (B.4) und Zustände (B.1, B.2) sind im Anhang B abgeleitet. In Kapitel 2.1 wurde ein dieser Symmetrie angepaßtes Wechselwirkungspotential (2.7) der inelastischen Elektronenstreuung abgeleitet, welches nun zur Berechnung der Verlustströme (3.40–3.43) verwendet wird. Ein analytisches Ausintegrieren der z -abhängigen Gebietsintegrale kann ausgeführt werden, wenn man die betragsabhängigen Teile der Greensfunktionen mit der Heaviside'schen-Sprungfunktion auflöst. Daraus ergeben sich dann Einschränkungen im Integrationsbereich der unter anderem im Ortsraum vierdimensionalen Gebietsintegrale. Die $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ -Integration muß numerisch erfolgen. Aus den somit gewonnenen vier Verlustströmen wird dann der Spin-Non-Flip-Verluststrom mit (3.35) berechnet sowie der Spin-Flip-Verluststrom mit (3.36). Konkrete Auswertungen wurden für Aluminium durchgeführt, da es sich auch in realistischeren Modellen, zum Beispiel in der im Kapitel 5 dargestellten Schicht-KKR-Theorie, im Leitungsbandbereich wie ein nahezu freies Elektronengas verhält. Aus Ashcroft, Mermin (1975) kann die Dichte des Elektronengases in Abhängigkeit von der Kernladungszahl des untersuchten Materials, hier für Aluminium mit $Z = 13$, entnommen und damit nach Ashcroft, Mermin (1975) E_F , k_F und k_0^{TF} ermittelt werden. Für die Dämpfung

der propagierenden Elektronen wurde ein konstanter Imaginärteil im optischen Potential von -1eV verwendet.

In Bild 11 sind für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere für verschiedene Primärenergien des Zustands 1 bei festem Ein- wie Austrittswinkel die Verlustströme dargestellt. Hier nun ist jede Streukonfiguration zugelassen, insbesondere senkrechter Ein- wie Austritt der Elektronen. Es entstehen keine Lücken in den Spektren. Bei erster Betrachtung überrascht, daß in Bild 11 die Verlustströme für die Austauschstreuung j_2 größer sind als für die direkte Streuung.

Bild 12 zeigt, daß bei streifendem Einfalls- und Ausfallswinkel diese Situation sich ändert. Die direkten Streubeiträge von j_1 und damit auch die Spin-Non-Flip Übergänge haben dort, insbesondere im Bereich nahe der Primärenergie, ein größeres Gewicht.

Bei streifendem Einfall der Elektronen ist die z -Komponente des Geschwindigkeitsvektors klein, und die Abstoßung der Elektronen untereinander verhindert zusätzlich ein tiefes Eindringen in den "Kristall" (d.h. das homogene Elektronengas nach der Barriere). Die streifend einfallenden Elektronen werden nur in der Umgebung der Oberfläche wechselwirken, die Abstoßung ein Eindringen verhindern, so daß die meisten Elektronen direkt von der Umgebung der Oberfläche zurückgestreut werden. Anders ist dies bei größeren Einfallswinkeln. Die z -Komponente des Geschwindigkeitsvektors ist groß, die Teilchen dringen tief in den "Kristall" ein, und ein Austauschstreuprozess wird wahrscheinlicher sein als bei streifendem Einfall. Dies wäre eine mögliche Erklärung dafür, daß $j_2 < j_1$ ist.

Explizite Rechnungen mit energieabhängigem Imaginärteil im optischen Potential (Lundqvist (1967)) zeigen, daß dann wieder j_1 , der durch direkte Streuung verursachte Verluststrom, die anderen Verlustströme überwiegt.

Ein Grund, warum $j_2 > j_1$ ist, könnte sein, daß im homogenen Elektronengas die Streuung nur an Elektronen stattfindet. Die Reflexion findet an der Barriere und an den Elektronen des Elektronengases statt. Im realen Kristall sind es hauptsächlich die Atome, die durch Streuung die Richtung der Elektronen verändern. Im bloßen Elektronengas, in dem die eingeschossenen Elektronen ununterscheidbar sind von denen des Gases, ist der Einfluß der Austauschstreuung im Vergleich zu

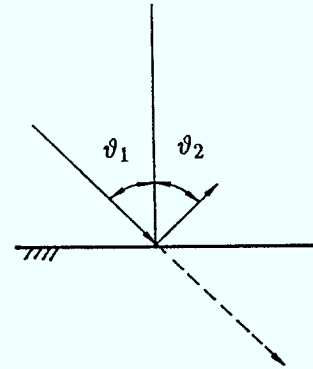
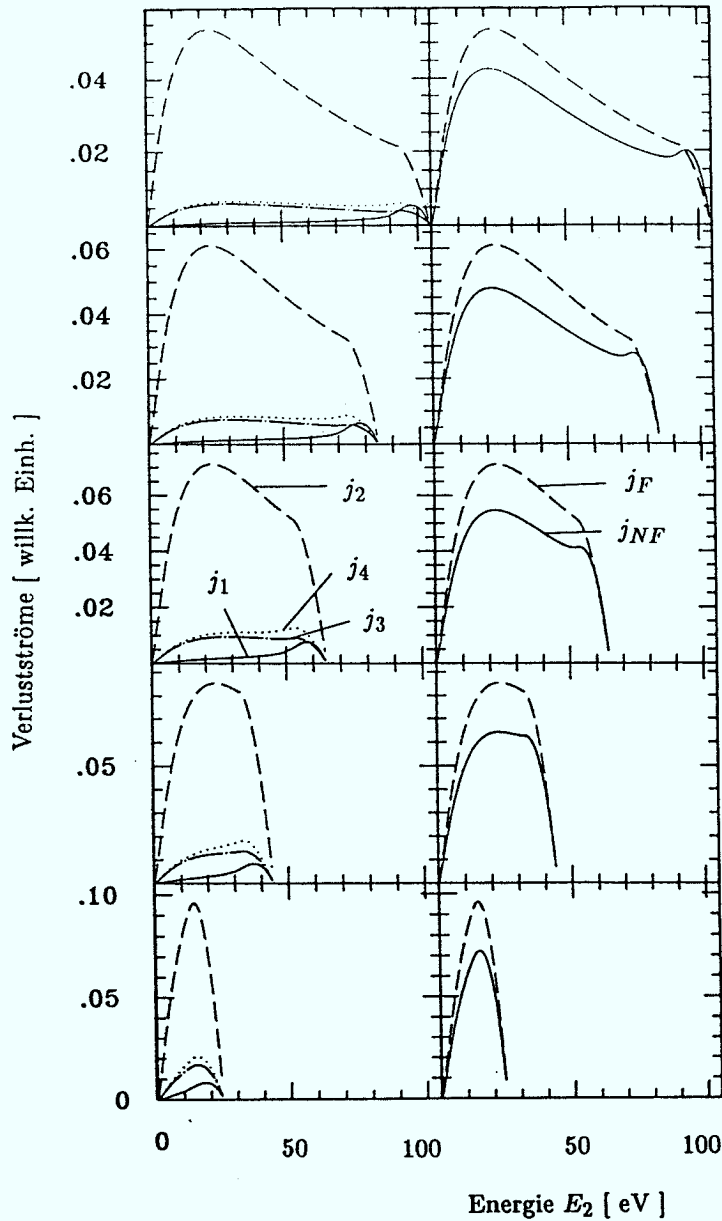


Bild 11 : Verlustströme für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere von Aluminium für die Primärenergien $E_1 = 25, 45, 65, 85, 105 \text{ eV}$ mit $\vartheta_1 = -45^\circ$ Einfallswinkel und $\vartheta_2 = 45^\circ$ Austrittswinkel aus der "Kristalloberfläche". j_1 (—), j_2 (---), j_3 (-·-·-), j_4 (···) sind im linken Bildteil dargestellt, rechts die nach (3.35, 3.36) berechneten Non-Flip (—) und Flip (---) Verlustströme.

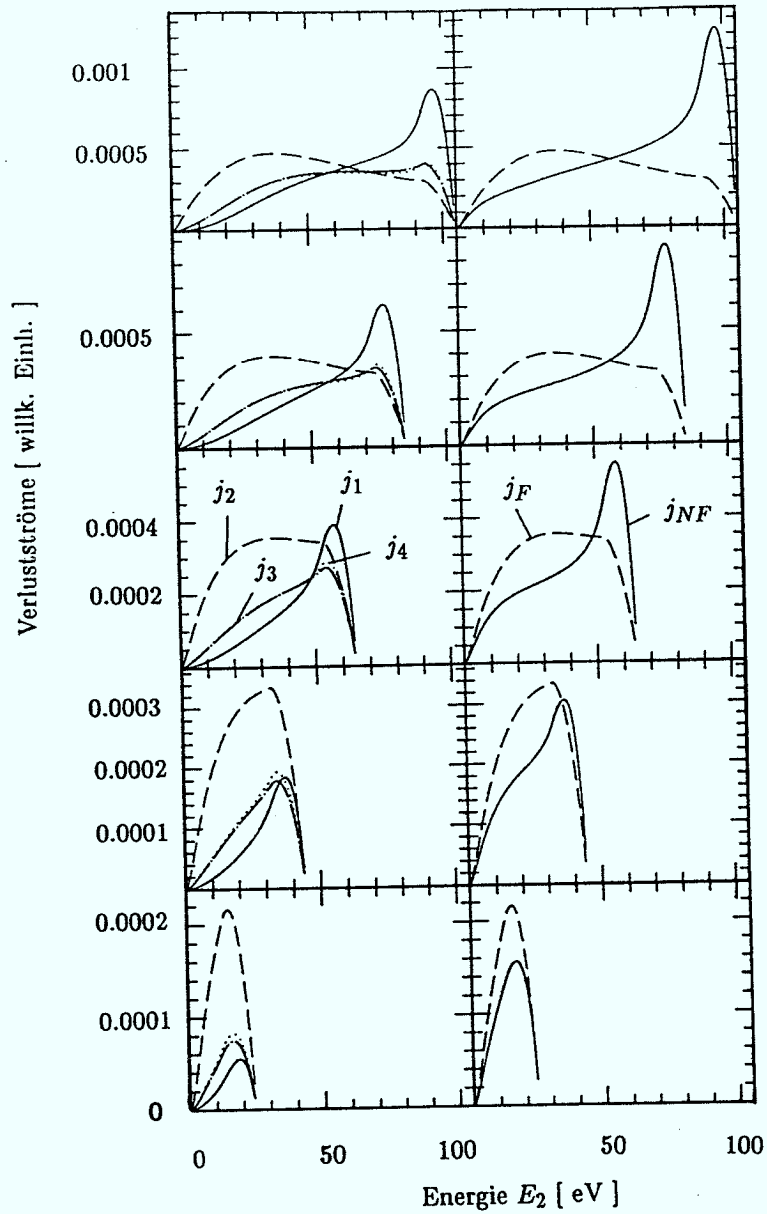


Bild 12: Verlustströme für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere von Aluminium für die Primärenergien $E_1 = 25, 45, 65, 85, 105 \text{ eV}$ mit $\vartheta_1 = -85^\circ$ Einfalls- und $\vartheta_2 = 85^\circ$ Austrittswinkel aus der "Kristalloberfläche". j_1 (—), j_2 (- - -), j_3 (- · - ·), j_4 (···) sind im linken Bildteil dargestellt, rechts die nach (3.35, 3.36) berechneten Non-Flip (—) und Flip (- - -) Verlustströme.

den insgesamt gestreuten Teilchen größer, da die Streuung an den Atomrümpfen fehlt.

Mit zunehmender Primärenergie nimmt in Bild 12 die Fläche unter dem durch direkte Streuung entstehenden Verluststrom im Vergleich zur Fläche unter dem Verluststrom mit ausschließlicher Austauschstreueung zu, das heißt, die Austauschstreueung wird immer unwahrscheinlicher, was bei wachsender Primärenergie im Einklang mit der Erfahrung steht, denn mit wachsender Energie werden die schnellen Teilchen unterscheidbar zu den "Kristall"-Elektronen. Wie schon erwähnt, wurde dies zum Anlaß genommen, die Austauschstreueung bei großen Primärenergien zu vernachlässigen.

Bild 13 zeigt für flacher werdenden Eintrittswinkel, also streifenden Ein- und Austritt, die Abnahme der Flip-Übergänge im Vergleich zu den Non-Flip-Verlustströmen. Das Maximum in der Nähe der Primärenergie nimmt dabei weiter zu. Man kann daraus ersehen, daß die direkte Streuung in Vorwärtsrichtung im "fastelastischen" Bereich an Bedeutung gewinnt, je flacher Ein- und Austrittswinkel werden.

In der Nähe der Primärenergie werden die Verlustströme null. Für $E_2 = E_1$ findet elastische Streuung statt. Dieser Energiebereich wird mit anderen Methoden als den für die inelastische Elektronenstreueung entwickelten behandelt. Man berechnet in der LEED-Theorie die Eigenzustände des Kristalls mit Hilfe seiner Reflexionsmatrix, wohingegen hier eine Störungstheorie 2. Ordnung und Berechnung von Übergangsmatrixelementen zwischen verschiedenen Zuständen zu den Verlustströmen führen. Für die elastische Streuung ergibt die Theorie der inelastischen Elektronenstreueung somit keinen Beitrag.

Zudem ist $\mathbf{k}_{2//} = \mathbf{k}_{1//}$, falls $E_2 = E_1$ und das gestreute Elektron in Reflexion zum einfallenden gemessen wird (siehe Bild 32). Damit folgt jedoch, daß $(E_2, \mathbf{k}_{2//}) = (E_1, \mathbf{k}_{1//})$ sein muß. Das heißt, es erfolgen kein Energieübertrag und kein Impulsübertrag parallel zur Oberfläche, die die Zustände eindeutig festlegenden Größen sind gleich und daher sind Zustand 1 und Zustand 2 gleich. Aus den Feynman-Regeln folgt, daß Zustand 3 und 4 wegen der Energie- und Impulserhaltung an den Vertices ebenfalls gleich sein müssen. Dies ist aber unmöglich, da nicht zwei Teilchen, nämlich 3 und 4, Loch und Elektron, im gleichen Zustand

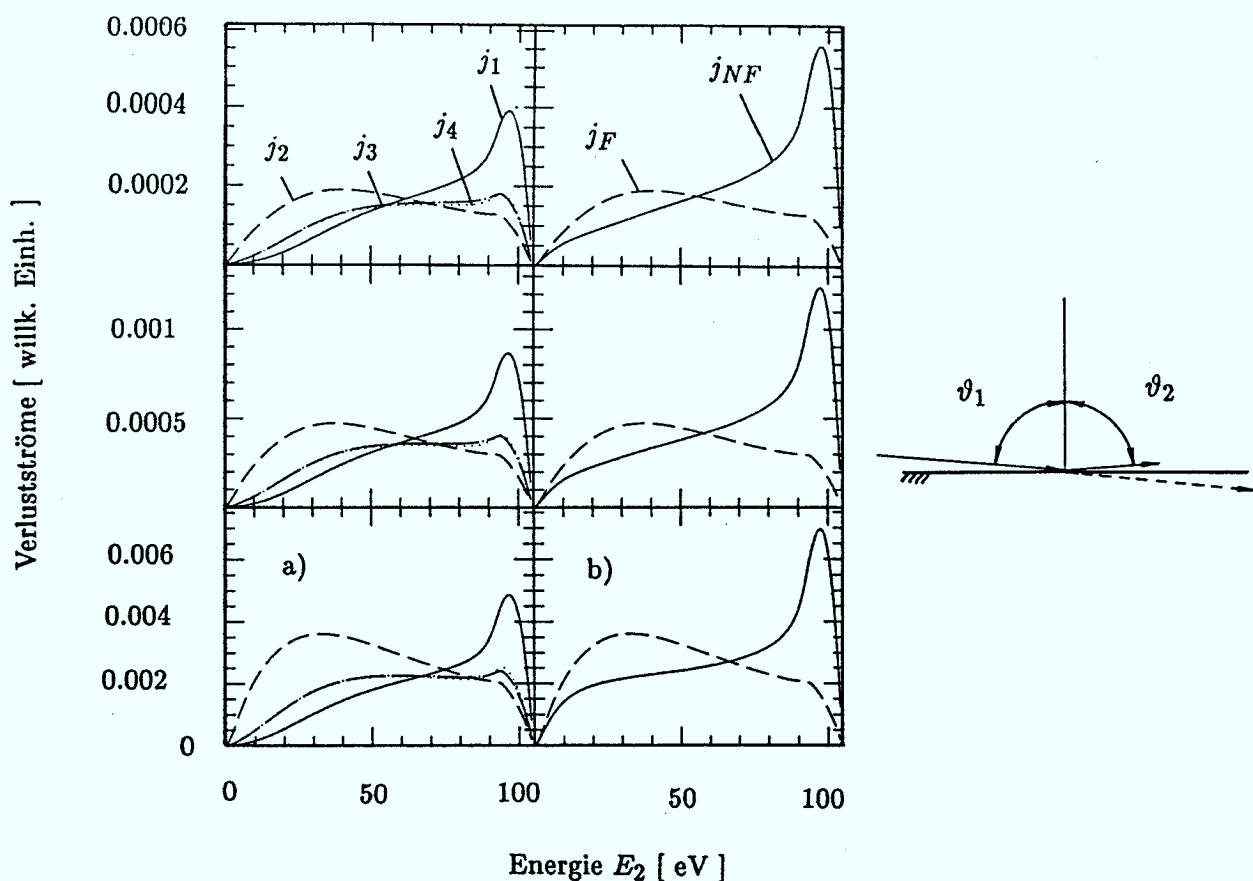


Bild 13: Verlustströme für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere von Aluminium für feste Primärenergie von $E_1 = 105\text{eV}$. Die Elektronen haben im Bild von unten nach oben $\vartheta_1 = -80^\circ, -85^\circ, -88^\circ$ Einfalls- und $\vartheta_2 = 80^\circ, 85^\circ, 88^\circ$ Austrittswinkel aus der "Kristalloberfläche". j_1 (—), j_2 (- - -), j_3 (-·-·-), j_4 (···) sind im linken Bildteil dargestellt, rechts die nach (3.35, 3.36) berechneten Non-Flip (—) und Flip (- - -) Verlustströme.

sein können. Somit ergeben die zur Herleitung der Theorie benutzten Graphen in diesem Fall keinen Beitrag zum Verluststrom.

Die Verluststromspektren werden nicht nur in der Nähe der Primärenergie null, sondern auch für $E_2 \rightarrow 0$. Dort ergibt der als Faktor eingehende Zustand 2 und der durch ihn getragene Strom einen kleiner werdenden Beitrag, was letztendlich

dazu führt, daß die Verlustströme auch dort gegen null gehen.

Betrachtet man zum Beispiel Bild 11, so erkennt man, daß für weite Bereiche der E_2 -Achse (für die Bereiche an den Enden der Verluststromkurve gilt dies nicht) bei wachsender Primärenergie die Anzahl der rückgestreuten Elektronen bei fester Energie E_2 abnimmt. Trägt man für feste Energie E_2 die Größe des Verluststroms (aus Bild 11 und aus Rechnungen für höhere Primärenergien) in Abhängigkeit von steigender Primärenergie auf, erhält man einen Funktionsverlauf, der für größer werdende Primärenergie abfällt (wie in Yin, Tosatti (1981)) und gegen eine Konstante strebt. Das heißt, daß für hohe Primärenergien verschiedener Größe ungefähr dieselbe Anzahl von Teilchen aus dem Elektronenstrahl herausgestreut wird. Dieses Verhalten ist bekannt (in Lundqvist (1967) der energieabhängige Imaginärteil der Selbstenergie), denn die Erfahrung zeigt (der Verlauf von $V_{opt}^i(E)$ in Feder (1985)), daß für hohe Energie der Imaginärteil des optischen Potentials bezüglich der Energie nahezu konstant ist, die Absorption damit nicht energieabhängig ist.

5. Zustände und Greensfunktionen in der Schicht-KKR-Theorie

Nachdem in Kapitel 3 entwickelt worden ist, wie die Übergangswahrscheinlichkeit oder die Verlustströme der inelastischen Elektronenstreuung ermittelt werden können, ist es für die Durchführung der Rechnung am realen Kristall notwendig, die schichtabhängigen Zustände und Greensfunktionen zu berechnen.

Die KKR-Theorie löst mit der Muffin-Tin-Näherung die Schrödinger-Gleichung für ein durch den Kristall propagierendes Elektron. In dieser Arbeit wird von Systemen mit einem Streuer pro Einheitszelle ausgegangen, zudem müssen alle Streuer der Schicht in einer Ebene liegen. In der Muffin-Tin-Näherung wird angenommen, daß das Potential innerhalb der Muffin-Tin-Kugel sphärisch symmetrisch ist, außerhalb dieser Kugel ist es konstant. Ihr Radius ist durch die Bedingung vorgegeben, daß die Kugeln sich berühren sollen. Somit legen die Gitterstruktur und die Gitterkonstante die Größe der Wigner-Seitz Zelle und damit den Radius der Kugel fest. Stellt man die Zustände innerhalb des sphärischen Potentialbereichs in sphärischen Koordinaten dar, so sind sie mit dem geringsten numerischen Aufwand innerhalb der Muffin-Tin-Kugel zu berechnen. Außerhalb dieses Bereichs ist eine Entwicklung der Zustände nach ebenen Wellen sinnvoll, denn dort ist das Potential konstant.

Dieses Potential, $V_{xc}^{eff,r}$ aus (2.11), kann mit der von Kohn, Sham (1965) entwickelten Dichte-Funktional-Theorie in Lokaler-Dichte-Näherung berechnet werden. Tabellarisch sind auf diese Weise berechnete Metall-Potentiale unter anderem in Moruzzi, Janak, Williams (1978) aufgeführt. Durch die Näherung (2.11), mit der aus der Selbstenergie ein Imaginärteil des Potentials gewonnen werden kann, beinhaltet die in den Feynman-Graphen in Figur 7 und 8 zwischen den inelastischen Streuakten dargestellte Propagation alle elastischen Streuakte mit Absorption. Das in den Rechnungen die Absorption bewirkende iV_{opt}^i wird in Form eines Imaginärteils des elastischen Wechselwirkungspotentials zu dem mit Dichte-Funktional-Theorie berechneten Potential hinzuaddiert. Es wird dann mit der KKR-Theorie die volle Lippmann-Schwinger-Gleichung gelöst, und durch sie werden alle möglichen elastischen Vielfachstreuungen berücksichtigt.

In der dreidimensionalen Version der KKR-Theorie wird $E, \mathbf{k}$ vorgegeben, das Gleichungssystem ist dadurch überbestimmt. Die Lösung der KKR-Schrödinger-

Gleichung ergibt dann bei vorgegebener Orientierung des Kristalls durch Variieren zum Beispiel von E die erlaubten Energieeigenwerte $E = E(\mathbf{k})$, das sind die sogenannte Bandstruktur und die Eigenzustände des betrachteten Kristalls.

Die von Kambe (1967) entwickelte Schicht-KKR-Theorie erlaubt es, die Schrödinger-Gleichung in ein Gleichungssystem zu transformieren, das bei seiner Lösung zu vorgegebenem $(E, \mathbf{k}_{\parallel})$ die erlaubten k_z und die Zustände $\psi_{E, \mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r})$ ergibt. Von den k_z kann es mehrere geben, denn die $E = E(\mathbf{k})$ -Beziehung ist im Kristall nicht eindeutig. Es entfällt dabei die vorher notwendige Vorgabe verschiedener E , um die erlaubten $\mathbf{k}$ zu erhalten. Diese Methode ist der Symmetriebrechung durch eine Oberfläche angepaßt, denn sie zerlegt den Kristall in zur Oberfläche parallele Schichten. Durch die gebrochene Translationsinvarianz müssen die Zustände und Propagatoren schichtabhängig sein.

Beide Versionen dieser Theorie nutzen aus, daß man das Streuproblem im Kristall in einen von der Gittersymmetrie (zur Gittersummation siehe Anhang A) abhängigen und einen lediglich von der Streuung am Einzelatom abhängigen Teil zerlegen kann.

Diese Lösung des Streuproblems am Einzelatom ist bei der Berechnung der vier an der inelastischen Streuung beteiligten Zustände gleich und soll als erstes behandelt werden. Die Theorie ist dann weiterhin so aufgebaut, daß die Mehrfachstreuung in einer Schicht ermittelt und schließlich die Streueigenschaft mehrerer zusammengefügter Schichten untersucht wird. Damit lassen sich dann die Zustände und Propagatoren berechnen.

Es wird gezeigt, wie elektronische Eigenzustände des Kristalls für $E < E_F$ und LEED-Zustände mit $E > E_F + \varphi$ ^[16] konstruiert werden können. Da schon ausführliche Beschreibungen existieren, zum Beispiel bei Ackermann (1985) oder Pendry (1974), werden nur kurz die wesentlichen Merkmale skizziert. Weiter wird eine Greensfunktions-Methode dargestellt, die die Propagation von Elektronen in einer Schicht und zwischen verschiedenen Schichten beschreibt. Letzteres ist nötig, da bei der spektroskopischen Untersuchung von Festkörpern im Volumenkristall angeregte Elektronen durch verschiedene Schichten hindurch zur Oberfläche pro-

^[16]Mit φ wird hinfort die Austrittsarbeit bezeichnet.

pagieren.

Absicht dieser Arbeit ist es, die inelastische Elektronenstreuung auch an ferromagnetischen Übergangsmetallen zu berechnen. Das Potential dieser Materialien ist austauschaufgespalten und damit spinabhängig, das heißt $V_{xc}^{\uparrow} \neq V_{xc}^{\downarrow}$, wie es in Kapitel 3 benötigt wird. Ein Spin- $|\uparrow\rangle$ -Elektron erfährt eine andere Streuung als ein Spin- $|\downarrow\rangle$ -Elektron. Dabei wird bei der Streuung an einem dieser Potentiale der Spin des Elektrons selbst nicht geändert. Aufgrund der kleinen Ordnungszahl dieser Materialien ist es nicht nötig, eine relativistische Rechnung durchzuführen, da die Spin-Bahnpkopplung für kleine Z , hier $Z=26,27,28$ für Fe,Co,Ni, zum Beispiel nach Feder (1985), Messiah (1979) oder Ziesche, Lehmann (1983) kaum einen Einfluß auf die Elektronenstreuung hat und daher vernachlässigbar ist. Dies ist für die inelastische Elektronenstreuung an Fe im Experiment von Venus, Kirschner (1988) nachgewiesen worden. Damit folgt die Möglichkeit, die Zustände mit (2.12) und die Greensfunktionen mit (2.13) separat für $V_{xc}^{\uparrow}$ und $V_{xc}^{\downarrow}$ zu berechnen und die dazugehörige Theorie spinunabhängig darzustellen. Erst bei der Auswertung des Verluststroms oder der Übergangswahrscheinlichkeit müssen wegen des austauschaufgespaltenen Potentials die Ausdrücke wieder den Spin berücksichtigen.

5.1. DIE STREUUNG VON ELEKTRONEN AM EINZELATOM

Bei der Lösung des Streuproblems mit der Schrödinger-Gleichung (2.12) wird im Rahmen dieser Arbeit von einem kugelsymmetrischen Muffin-Tin-Potential ausgegangen. Durch diese Symmetrie ist der Separationsansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{j;l,m} A_l^{m,j} R_l(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (5.1)$$

mit $\hat{\mathbf{r}} := \frac{\mathbf{r}}{r}$ sinnvoll. Die Schrödinger-Gleichung wird damit separiert in einen von r und einen von $\hat{\mathbf{r}}$ abhängigen Teil. Der vom Betrag von $\mathbf{r}$ abhängige Teil ist mit dem Potential (2.14) nach Joachain (1975)

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2(E - V^{eff}(r)) \right\} R_l(kr) = 0 .$$

Mit einer Reihe von Substitutionen kann diese Gleichung in eine für numerische Behandlungen geeignete Form gebracht werden. Mit $R_l(r) =: \frac{1}{r} u_l(r)$ und dann $u_l(r) =: r^s f_l$ erhält man

$$\left\{ r^2 \frac{d^2}{dr^2} + 2sr \frac{d}{dr} + (s(s-1) - l(l-1)) + 2r^2 (E - V^{eff}(r)) \right\} f_l(kr) = 0 .$$

Hier verzweigt sich nun der Lösungsweg. Man kann diese Gleichung vereinfachen, wenn Lösungen von $(s(s-1) - l(l+1)) = 0$ gefunden werden. Dies sind $s = l+1$ und $s = -l$. Die Lösung mit $s = l+1$ wird wegen des Ansatzes für u_l eine am Ursprung reguläre sein, die mit $s = -l$ wird am Ursprung irregulär. Mit den Ansätzen $y_1 = f_l$ und $y_2 = \frac{1}{2} f_l'$ führt man die Differentialgleichung zweiter Ordnung in ein zweidimensionales System erster Ordnung über.

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -(E - V^{eff}(r)) & -\frac{2s}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

Die r^{-1} -Gestalt des Potentials legt aus numerischen Gründen^[17] nahe, ein am Ursprung dichter liegendes Netz der Integrationsvariablen r zu verwenden. Man wählt ein exponentielles Netz $r = R_{MT} e^t$, das heißt $r_n = R_{MT} e^{(N-n)h}$. R_{MT} ist der Muffin-Tin-Radius, N die Anzahl der Stützstellen, i die aktuelle Stützstelle und h die Schrittweite des im Exponenten linearen Netzes. Dies ergibt dann

^[17] Wegen der Stabilität der numerischen Lösungen am Ursprung.

letztendlich die numerisch aufzuintegrierende Form der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2r \\ -(E - V^{eff}(r))r & -2sr \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} . \quad (5.2)$$

Für die numerische Berechnung von $y(r)$ wurde eine Zerlegung des Potentials wie

$$V^{eff}(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{v^{eff}(r)}{r} \Rightarrow v^{eff}(r) = Z + rV^{eff}(r) \quad (5.3)$$

gewählt. Zur numerischen Aufintegration ist ein Predictor-Corrector-Verfahren, welches das PECE-Schema (Grigorieff (1972)) verwendet, gewählt worden. Dieses Schema berechnet zum Beispiel im i -ten Schritt eine erste vorausgesagte Lösung ($P \equiv$ Predictor), ermittelt dann den Fehler, den man machen würde bei Verwendung dieser Lösung ($E \equiv$ Error Derivative), korrigiert die alte Lösung um diesen Fehler ($C \equiv$ Corrector) zur neuen Lösung und ermittelt dann im voraus den damit im i -ten Schritt gemachten Fehler für die Berechnung des Predictors im $i+1$ -ten Schritt. Wegen der Regularität am Ursprung wird zuerst die Lösung zu $s = l + 1$ berechnet. Man kann sie an den ersten fünf Stützstellen nahe am Ursprung in eine Potenzreihe $y_n = \sum_{i=0}^4 a_i r^i$ entwickeln, weil dort das Potential ein r^{-1} -Verhalten zeigt ($v^{eff} \rightarrow 0$). Für die dann folgenden Stützstellen sind die Predictor Schritte nach einem Vorschlag von Tamura (1989a) mit dem Algorithmus

$$y_n = y_{n-1} + p_n c_n + p_{n-1} c_{n-1} + p_{n-2} c_{n-2} + p_{n-3} c_{n-3} \quad (5.4)$$

des Adams-Moulton-Verfahrens (Schwarz (1986))

$$p_n = \frac{1}{3} \frac{55}{8} \quad p_{n-1} = -\frac{1}{3} \frac{59}{8} \quad p_{n-2} = \frac{1}{3} \frac{37}{8} \quad p_{n-3} = -\frac{1}{3} \frac{9}{8}$$

berechnet worden. Die Ableitung c_n der Lösung y_n ist unter Berücksichtigung des exponentiellen Netzes in (5.2) gegeben durch (oben erwähnte Error Derivative)

$$c_{n-k} = \begin{pmatrix} c_{1,n-k} \\ c_{2,n-k} \end{pmatrix} = h \begin{pmatrix} 0 & 2r \\ -(Er - v^{eff}(r) + Z) & -2s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{1,n-k} \\ y_{2,n-k} \end{pmatrix} \quad k = 0, 1, 2, 3 .$$

Der sogenannte Adams-Bashfort-Corrector benutzt nach Hamming (1980) anstelle der p_n in (5.4) folgendes Koeffizientenschema

$$k_n = \frac{1}{3} \frac{9}{8} \quad k_{n-1} = \frac{1}{3} \frac{19}{8} \quad k_{n-2} = -\frac{1}{3} \frac{5}{8} \quad k_{n-3} = \frac{1}{3} \frac{1}{8} .$$

Die Form von (5.4) und die Werte der Predictor-Corrector-Koeffizienten werden in Hamming (1980) oder Grigorieff (1972) abgeleitet. Durch die Werte der Koeffizienten wird die Stabilität und Genauigkeit der Lösung y beeinflusst. Benötigt man größere Genauigkeit und ändert die Koeffizienten, so vermindert sich zum Beispiel die Stabilität des Lösungsverfahrens (Hamming (1980)).

Die Auswahl der Form des Algorithmus (5.4) und der Koeffizienten richtet sich nach den Erfordernissen des zu behandelnden Problems. Hier bereitet insbesondere die irreguläre Lösung von (5.4) zu $s = -l$ Stabilitätsprobleme, die die getroffene Wahl der p_n aber meistert. Diese irreguläre Lösung läßt sich mit denselben Predictor- und Corrector-Algorithmen und Koeffizienten wie die reguläre Lösung behandeln. Erst beide Koeffizienten-Gruppen ergeben zusammen die gewünschte Stabilität und Genauigkeit. Um einen ersten Eindruck von der Funktionsfähigkeit des die numerische Lösung berechnenden Programms zu gewinnen, können zum Beispiel beide Lösungsbausteine mit $V(r) = 0$ und $Z = 0$ berechnet werden, dann müssen die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen Ergebnis des Verfahrens sein.

Beide Algorithmen werden in obiger Reihenfolge angewendet. Zuerst wird die reguläre Lösung bestimmt, indem man von innen zum Rand der Muffin-Tin-Kugel integriert. Da das Potential für $r > R_{MT}$ konstant ist, können die Streuphasen δ_l aus der außerhalb des Muffin-Tin wegen des dort konstanten Potentials bekannten Form der analytischen Lösung (Rodberg, Thaler (1967)) (nach Rücksubstitution äquivalent zu u_l)

$$r \geq R_{MT} : J_l(r) = \frac{1}{2}(e^{i\delta_l} h_l^1(r) + e^{-i\delta_l} h_l^2(r)) \quad (5.5)$$

und der am Rand des Muffin-Tin bekannten numerischen Lösung berechnet werden. Dabei ist $h_l^{(1)}$ die Hankel-Funktion 1. Ordnung mit asymptotischem Verhalten einer austretenden Kugelwelle und $h_l^{(2)}$ die Hankel-Funktion 2. Ordnung mit asymptotischem Verhalten einer einfallenden Kugelwelle.

Um die irreguläre Lösung zu ermitteln, geht man einige Schritte^[18] über den Muffin-Tin Rand hinaus, gibt dort wegen $V(r) = \text{const.}$ die bekannte Lösung

[18] Hier haben sich vier als ausreichend erwiesen.

(Rodberg, Thaler (1967)) mit

$$r \geq R_{MT} : N_l(r) = -\frac{i}{2}(e^{i\delta_l} h_l^1(r) - e^{-i\delta_l} h_l^2(r))$$

vor und integriert wieder mit demselben PECE-Schema von außen nach innen. Versuche, wie bei der regulären Lösung von innen nach außen zu integrieren, sind wegen der sich aufaddierenden numerischen Fehler fehlgeschlagen. Durch die in $h_l^{(1/2)}$ enthaltenen Exponentialfunktionen und wegen des Imaginärteils im Potential ergeben sich zusätzlich reelle Phasen in diesen Exponentialfunktionen, die dann ein exponentielles Anwachsen des Fehlers bewirken.

Mit den numerisch innerhalb des Muffin-Tin-Bereichs auf dem exponentiellen Netz ermittelten Lösungen kann dann die in den Greensfunktionen verwendete irreguläre radiale Lösung

$$H_l^+(r) = J_l(r) + iN_l(r) \quad (5.6)$$

innerhalb und außerhalb des Muffin-Tin-Bereichs gebildet werden. Sie hat für $r \geq R_{MT}$ das Verhalten einer austretende Welle.

Zur Bestimmung der vollen Greensfunktion muß der atomare Teil der Greensfunktion, das ist der Teil, der den Fall, daß r, r' sich in derselben Einheitszelle befinden, berücksichtigt, die Sprungbedingung (iii) aus Anhang 2 erfüllen. Das ist in diesem sphärischen Koordinatensystem äquivalent zu (Jackson (1983))

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2} r^2 \frac{d}{dr} G^+(r, r'; E) \Big|_{r=r'-\varepsilon}^{r=r'+\varepsilon} = 1 \quad .$$

Mit dem Ansatz

$$G^+(r, r'; E) = Z_l J_l(r) H_l(r)$$

in dieser Beziehung erhält man eine Bestimmungsgleichung für die Normierungskonstante Z_l . Dort ist dann die Wronski-Beziehung $W[J_l, H_l]$ enthalten, die durch die Gestalt von (5.5, 5.6) festgelegt ist. Es ergibt sich für die Normierungskonstante

$$Z_l = -2ik \quad .$$

5.2. DIE ABBILDUNGSEIGENSCHAFTEN EINER SCHICHT

Fällt eine Elektronenwelle mit $E, \mathbf{k}_{//}$ auf eine Schicht von periodisch angeordneten gleichartigen Atomen^[19], so wird sie reflektiert, transmittiert und wegen des komplexen Potentials auch absorbiert. Bestimmt man die Reflexions- und Transmissionsmatrizen dieser Schicht, sind die Abbildungseigenschaften ermittelt. Berücksichtigt man nur die Einfachstreuung, so setzt sich die rückgestreute Welle summarisch zusammen aus den in der Schicht an jedem Atom einmal gestreuten Wellen, die mit dem für diesen Ort charakteristischen Phasenunterschied multipliziert sind, der die verschiedenen Weglängen zwischen Streuer und Meßort beinhaltet (Pendry (1974)). Eine Theorie, die nur die Einfachstreuung berücksichtigt, nennt man kinematisch. Dazuaddiert werden, wenn man die kinematische Näherung verlassen will, dann noch alle durch Vielfachstreuung an beliebigen Nachbaratomen entstandenen Streuamplituden. Dies ergibt dann bei vorgegebener einfallender Welle die zu berechnenden Reflexions- und Transmissionsmatrizen der betrachteten Schicht.

Da der Hamilton-Operator bis auf Gittervektoren Translationsinvarianz parallel zur Schichtebene besitzt und sich dadurch die Bloch-Bedingung in $\mathbf{k}_{//}$ -Richtung für die Elektronenwelle ergibt, kann der elektronische Zustand in der Schicht fourierentwickelt werden. Im Zwischen-Muffin-Tin-Bereich mit konstantem Potential ist der Zustand an der linken (-z)-Seite der j-ten Schicht daher nach ebenen Wellen entwickelbar. Es ergibt sich

$$\psi_{E, \mathbf{k}_{//}}^j(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} u_{\mathbf{g}, j}^+ e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{r}} + v_{\mathbf{g}, j}^- e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^- \cdot \mathbf{r}} \quad (5.7)$$

mit

$$\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s := \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}_{//} \\ s k_{\mathbf{g}}^z \end{pmatrix} \quad s := \pm$$

und

$$k_{\mathbf{g}}^z = \sqrt{2(E^i + iV_{opt}^i) - (\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}_{//})^2}.$$

Dabei ist E^i die Energie des Elektrons bezüglich des Muffin-Tin-Energienullpunkts im Innern des Kristalls, d.h. $E^i = E^a + E_F + \varphi$. E^a ist die Ener-

^[19]Das heißt $V^{(L)}(\mathbf{r}) = \sum_s V(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{s//})$ mit dem Gittervektor $\mathbf{r}_{s//}$ in dieser Schicht.

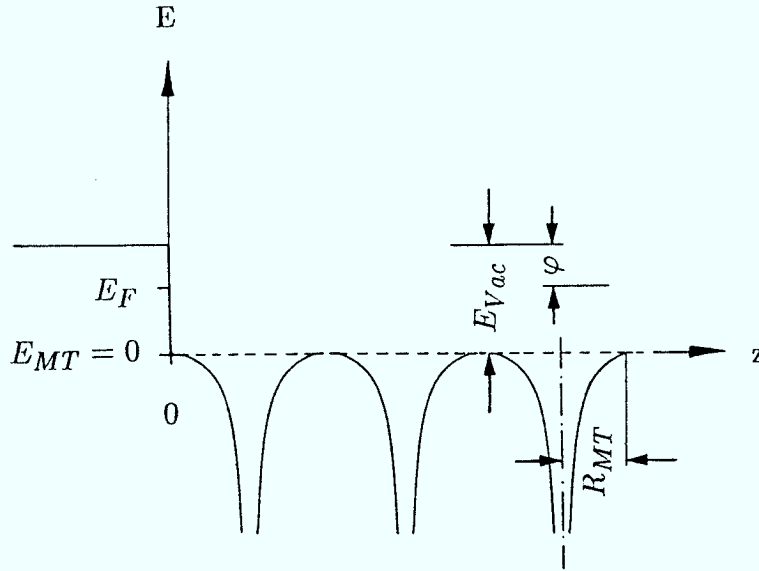


Bild 14: Die Definition des Energie-Nullpunkts der Teilchen-Energie innerhalb und außerhalb des Kristalls. Gleichzeitig wird der Nullpunkt des Ortsraum-Bezugssystems dargestellt.

gie außerhalb des Kristalls. Beide unterscheiden sich durch die Vakuumenergie $E_{Vac} = E_F + \varphi$, wobei φ die Austrittsarbeit ist, siehe Bild 14.

V_{opt}^i ist der energieabhängige, bezüglich der Ortsvariablen konstante Imaginärteil des optischen Potentials (siehe (2.11) in Kapitel 2.2), welcher ein Abklingen der Wellenamplitude bei fortlaufender Propagation durch den Kristall bewirkt. $\mathbf{g}_{//}$ sind die reziproken Gittervektoren innerhalb einer Schicht. Diese Darstellung der Wellenfunktion nach ebenen Wellen soll im weiteren wegen der durch die Gitterstruktur erzeugten Wellenvektoren $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}$ "Beam"-Darstellung (nach Elektronenstrahlen) genannt werden.

Die Reflexions- und Transmissionsmatrizen auf der (-z) wie (+z)-Seite der j-ten Schicht sind dann in Anlehnung an Bild 15 definiert durch

$$v_{\mathbf{g},j}^s = \sum_{\mathbf{g}',s'} M_{\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{s,s'} u_{\mathbf{g}',j}^{s'} \quad s := \pm$$

oder, $(\mathbf{g}, s)$ -basisfrei^[20] dargestellt,

$$\underline{\mathbf{v}}^s = \sum_{s'} \underline{\mathbf{M}}^{s,s'} \underline{\mathbf{u}}^{s'}.$$

^[20]_o kennzeichnet hinfert Matrizen in der Beam-Basis, _o Vektoren in dieser Basis.

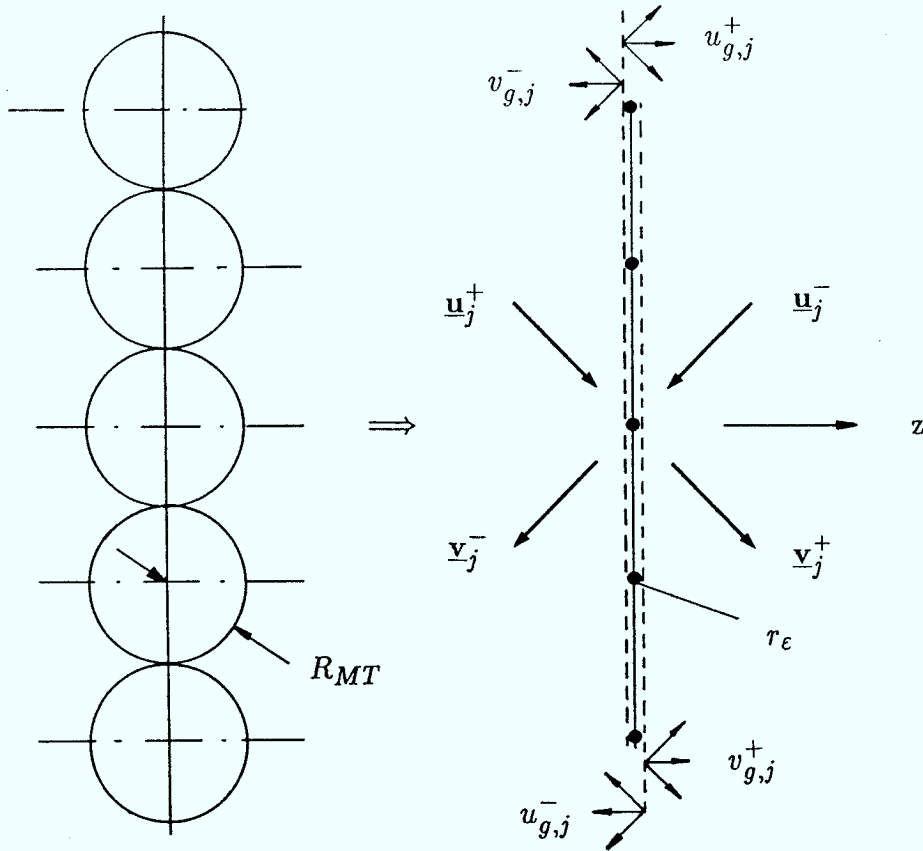


Bild 15: Zur Definition der Reflexions- und Transmissionsmatrizen einer Schicht. Die Wirkung des sphärischen Muffin-Tin Potentials wird dabei auf einen Raumbereich $r_\epsilon \in (-\epsilon, +\epsilon)$ geschrumpft gedacht. Die Wellenfelder $\underline{u}_j^\pm, \underline{v}_j^\pm$ sind dann im potentialfreien Zwischenraum auf der $\pm z$ -Seite der Schicht an der Stelle r_ϵ gegeben.

Geht man über die kinematische Näherung hinaus, kann nach Beeby (1968) die in der betrachteten Schicht stattfindende Vielfachstreuung durch Aufsummation von $G_0^+ V^s$ -Produkten Berücksichtigung finden. Die Vielfachstreuung in einer Schicht beinhaltet Prozesse wie Streuung am s -ten Atom der Schicht, Propagation zum $s+m$ -ten Atom der Schicht, Streuung und Propagation zum Ursprung. Der resultierende elektronische Zustand muß dann die Lippmann-Schwinger-Gleichung erfüllen

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + G_0^+ V^{(L)} |\psi\rangle \quad (5.8)$$

$|\psi^0\rangle$ ist die einfallende Elektronenwelle, $V^{(L)}$ das Potential der Schicht. G_0^+ ist die Greensfunktion des potentialfreien Raumes (Anhang A). Diese Gleichung

beinhaltet Einfach- wie Mehrfachstreuung. Sie berücksichtigt den Einfluß, der durch die Streuung von $|\psi\rangle$ an allen Atomen einer Schicht, vermittelt durch den gestreuten Anteil der Welle $G_0^+ V^{(L)} |\psi\rangle$, auf $|\psi\rangle$ selbst entsteht. Dies ist die Selbstkonsistenzbedingung, die Pendry (1974) bei der Berechnung von M erwähnt. Der Einfluß der Vielfachstreuung kann mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung in Ortsdarstellung (A.8) berechnet werden, indem man die Gesamtwelle innerhalb der Referenz-Muffin-Tin-Kugel konstruiert. Die der sphärischen Symmetrie angepaßte Drehimpulsbasis (5.1) ist zur Darstellung von $|\psi\rangle$ geeignet. Eine einfallende ebene Welle hat darin die Gestalt (A.14). Setzt man (5.1, A.14) und die Kristallgreensfunktion für den potentialfreien Raum (A.15) in die Ortsdarstellung (A.8) von (5.8) ein und beachtet^[21] (Rodberg, Thaler (1967))

$$\left(\underset{\approx}{\mathbf{T}}\right)_{l,l'} = t_{l,l'} \delta_{l,l'} := \frac{1}{2k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l = - \int_{r'=0}^{r'=R_{MT}} j_l(r') V(r') J_l(r') r'^2 dr' \quad (5.9)$$

(j_l sind die sphärischen Bessel-Funktionen und J_l die in Kapitel 5.1 ermittelten numerischen regulären Lösungen der radialen Schrödinger-Gleichung (5.5)), dann erhält man eine Beziehung zwischen den Amplituden der einfallenden und gestreuten Wellen sowie der im Anhang durch die Gittersummation definierten Strukturkonstanten (A.16).

$$A_L = A_L^{(0)} - \sum_{L'} \frac{1}{2k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l A_{L,L'} A_{L'}$$

Schreibt man diese Lippmann-Schwinger-Gleichung in Drehimpulsbasis mit Hilfe einer Inversion um, dann kann man die gesuchten Amplituden der Welle angeben mit

$$\underset{\approx}{\mathbf{A}} = \left(\underset{\approx}{\mathbf{1}} + \underset{\approx}{\mathbf{T}} \underset{\approx}{\mathbf{A}} \right)^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{A}}^{(0)} = \left(\underset{\approx}{\mathbf{1}} - \underset{\approx}{\mathbf{X}} \right)^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{A}}^{(0)} \quad (5.10)$$

In $-\underset{\approx}{\mathbf{T}} \underset{\approx}{\mathbf{A}}$ erkennt man die bei Pendry (1974) sogenannte $\underset{\approx}{\mathbf{X}}$ -Matrix, die Intraschicht-Streumatrix, wieder. In dieser $\underset{\approx}{\mathbf{X}}$ -Matrix sind durch die in den Strukturkonstanten enthaltene Gittersummation alle Mehrfachstreuungsprozesse enthalten.

^[21] $\underset{\approx}{\circ}$ kennzeichnet hinfert Matrizen in der Drehimpuls ($L := (l, m)$)-Basis, $\underset{\approx}{\circ}$ Vektoren in dieser Basis.

Schreibt man (5.10) mit allen Indizes aus, $A_{L'} = \sum_L (\underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{X}})_{L',L}^{-1} A_L^{(0)}$, so zählt L die Partialwellen der einfallenden und L' jene der gestreuten Welle. Die **M**-Matrix für das Mehrfachstreuproblem mit $\mathbf{g} \rightarrow L$ als Index der einfallenden Welle und $\mathbf{g}' \rightarrow L'$ als Index des gestreuten Anteils ist dann (Pendry (1974))

$$M_{\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{s',s} = \delta_{\mathbf{g}',\mathbf{g}} \delta_{s',s} + \frac{8\pi^2 i}{|\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s| A_{uc} k_{\mathbf{g}',z}^+} \sum_{l',m';l,m} [i^l (-1)^m Y_l^{-m}(\widehat{\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s})] \times (\underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{X}})_{l',m';l,m}^{-1} [i^{-l'} Y_{l'}^{m'}(\widehat{\mathbf{k}_{\mathbf{g}'}^{s'}})] e^{i\delta_{l'}} \sin \delta_{l'} . \quad (5.11)$$

A_{uc} ist die Fläche der Einheitszelle senkrecht zur z -Achse. Die Kronecker δ 's berücksichtigen die ungestört durch die Kristallschicht propagierenden Wellenanteile. Setzt man die **X**-Matrix null, vernachlässigt damit die Vielfachstreuung, dann ist die so gewonnene **M**-Matrix diejenige, die allein durch die Aufsummierung der Einzelstreubeiträge über die Einheitszellen der Schicht entsteht. Die volle **M**-Matrix berechnet somit aus den aus $s = \pm z$ -Richtung auf die Schicht fallenden ebenen Wellenamplituden die von jedem Atom gestreuten sphärischen Anteile, berücksichtigt die Vielfachstreuung in einer Schicht und summiert die von allen Atomen ausgehenden gestreuten Kugelwellen auf zu den reflektierten und transmittierten ebenen Wellenanteilen.

5.3. DIE ABBILDUNGSEIGENSCHAFTEN VON SCHICHTSYSTEMEN

Nachdem nun der Einfluß bekannt ist, den eine Schicht von Atomen auf eine Elektronenwelle ausübt, kann die Streueigenschaft von mehreren hintereinanderliegenden Schichten bestimmt werden. Dies geschieht durch die Berechnung der Schicht-Transfermatrix. Aus ihr folgen die Bandstruktur, die Volumenzustände sowie die Volumenreflexionsmatrix. Diese Abbildungsmatrizen werden benötigt, um damit die schichtabhängigen Zustände und Greensfunktionen zu konstruieren.

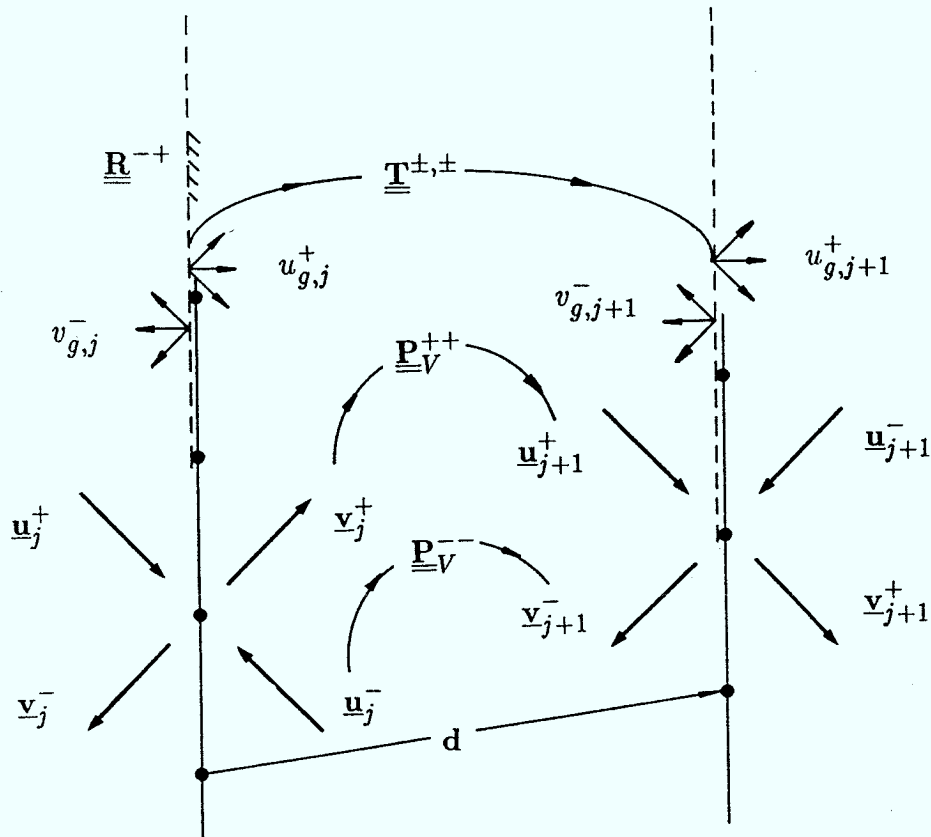


Bild 16 : Transport der Wellenfelder mit der Schicht-Transfermatrix $\underline{T}^{\pm,\pm}$. Dabei sind die Wellenfelder auf der jeweiligen $(-z)$ -Seite der j -ten Schicht und $j+1$ -ten Schicht gegeben. Die Phasoren $\underline{P}_V^{\pm,\pm}$ transportieren die Wellenfelder im potentialfreien Muffin-Tin-Zwischenraum des Volumenkrystals.

Zur Berechnung der Schicht-Transfermatrix ist es notwendig, das Wellenfeld von der (-z)-Seite der j-ten Schicht an die (-z)-Seite der j+1-ten Schicht zu transportieren. Die Propagation des Wellenfeldes im potentialfreien Bereich zwischen den Schichten wird durch die Phasoren $P_{\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{s,s'} = \delta_{\mathbf{g},\mathbf{g}'} \delta_{s,s'} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s \mathbf{r}}$ berücksichtigt. Werden zuerst nur zwei isolierte Schichten betrachtet, so setzt sich das Wellenfeld $(\underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+)_\mathbf{g} := u_{\mathbf{g},j+1}^+$ nach Pendry (1974) (Bild 16) zusammen aus dem Anteil von $\underline{\mathbf{u}}_j^+$, der durch die j-te Schicht transmittiert wird und auf die linke Seite der j+1-ten Schicht durch $P_{\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{++}$ zu läuft, plus dem Anteil von $(\underline{\mathbf{v}}_{j+1}^-)_\mathbf{g} := v_{\mathbf{g},j+1}^-$, der zur j-ten Schicht frei propagiert, dort reflektiert wird und wieder frei zur j+1-ten Schicht hinpropagiert

$$\underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+ = \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{++} \underline{\mathbf{u}}_j^+ + \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- =: \underline{\mathbf{Q}}^{++} \underline{\mathbf{u}}_j^+ + \underline{\mathbf{Q}}^{+-} \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- .$$

Ähnliche Überlegungen führen zu

$$\underline{\mathbf{v}}_j^- = \underline{\mathbf{M}}^{-+} \underline{\mathbf{u}}_j^+ + (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--} \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- =: \underline{\mathbf{Q}}^{-+} \underline{\mathbf{u}}_j^+ + \underline{\mathbf{Q}}^{--} \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- .$$

Die Vielfachstreuung, die bei einem System zwischen zwei Schichten entsteht, führt mit der Definition

$$\begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{T}}^{++} & \underline{\mathbf{T}}^{+-} \\ \underline{\mathbf{T}}^{-+} & \underline{\mathbf{T}}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_j^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_j^- \end{pmatrix}$$

auf die Transfermatrix (Pendry (1974))

$$\begin{pmatrix} \underline{\mathbf{T}}^{++} & \underline{\mathbf{T}}^{+-} \\ \underline{\mathbf{T}}^{-+} & \underline{\mathbf{T}}^{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{Q}}^{++} - \underline{\mathbf{Q}}^{+-} (\underline{\mathbf{Q}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{Q}}^{-+} & \underline{\mathbf{Q}}^{+-} (\underline{\mathbf{Q}}^{--})^{-1} \\ -(\underline{\mathbf{Q}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{Q}}^{-+} & (\underline{\mathbf{Q}}^{--})^{-1} \end{pmatrix} . \quad (5.12)$$

Berücksichtigt man keine Oberfläche und nimmt damit an, tief im Festkörper zu sein, dann ist der Kristall bis auf Gittervektoren translationsinvariant. Daraus folgt eine Blochbedingung, die besagt, daß sich das Wellenfeld an der j-ten Schicht nur um einen Phasenfaktor unterscheidet zu dem an der j+1-ten Schicht.

$$\begin{pmatrix} \underline{\mathbf{T}}^{++} & \underline{\mathbf{T}}^{+-} \\ \underline{\mathbf{T}}^{-+} & \underline{\mathbf{T}}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_j^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_j^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_j^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_j^- \end{pmatrix} =: \lambda \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_j^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_j^- \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Der Abstand zweier in verschiedenen Schichten befindlicher äquivalenter Punkte ist mit $\mathbf{d}$ bezeichnet. Es ergibt sich somit ein Eigenwertproblem, welches gelöst die Eigenwerte, das heißt die Bandstruktur, und die Volumenzustände des Kristalls als Eigenvektoren liefert. Die Darstellung (5.7) wird nach Blochzuständen sortiert und

ist dann im Innern des Kristalls wegen der dreidimensionalen Translationsinvarianz bis auf Gittervektoren nicht mehr schichtabhängig. Die Zerlegung von (5.7) nach Blochwellen lautet dann

$$\psi_{E, \mathbf{k}_{//}}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}, \lambda} a_{\lambda} b_{\mathbf{g}, \lambda}^{+} e^{i \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^{+} \mathbf{r}} + a_{\lambda} b_{\mathbf{g}, \lambda}^{-} e^{i \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^{-} \mathbf{r}} . \quad (5.14)$$

Die $b_{\mathbf{g}, \lambda}^{\pm}$ sind die Entwicklungskoeffizienten der Blochwellen nach der Beambasis, das ist gerade die Matrix, die sich aus den Eigenvektoren der $\underline{\mathbf{T}}$ -Matrix (5.13) ergibt. Sie transformiert Vektoren zwischen der Blochwellen- und Beambasis.

Die Eigenwerte sind im allgemeinen komplex und lassen sich nach Pendry (1974) in folgende Gruppen einteilen

I. $|\lambda| < 1$:

Das sind Zustände, deren Amplitude in (+z)-Richtung exponentiell abfällt.

II. $|\lambda| > 1$:

Das sind Zustände, deren Amplitude in (+z)-Richtung exponentiell ansteigt. Dieses exponentielle Ansteigen macht die Zustände für eine weitere Verwendung unbrauchbar.

III. $|\lambda| = 1$:

Das sind die gesuchten Blochwellen oder Volumenzustände. In Abhängigkeit von der Gruppengeschwindigkeit dieser Welle gibt es jene, die einen Strom durch eine Fläche senkrecht zur z-Achse in (+z)-Richtung tragen, und solche, die in (-z)-Richtung Strom tragen. Mit den zu $|\lambda| = |e^{i \mathbf{k}_{//} \mathbf{d}_{//}} e^{i k_z d_z}| = 1$ gehörigen $(E, \mathbf{k}_{//})$ erhält man dann die für die Bandstruktur $E = E(\mathbf{k}_{//}, k_z)$ notwendigen k_z .

Die Koeffizientenmatrix $b_{\mathbf{g}, \lambda}^{\pm}$ enthält unter anderem die Amplituden der Blochwellen, die einen Strom in den Kristall tragen oder dorthin exponentiell abfallen. Aus den Beziehungen der Koeffizienten dieser so spezifizierten Blochwellen

$$(\underline{\mathbf{u}}^{+})_{\mathbf{g}} = \sum_{\lambda} b_{\mathbf{g}, \lambda}^{+} a_{\lambda} \quad , \quad (\underline{\mathbf{v}}^{-})_{\mathbf{g}} = \sum_{\lambda} b_{\mathbf{g}, \lambda}^{-} a_{\lambda}$$

kann mit Hilfe einer Inversion von $b_{\mathbf{g}, \lambda}^{+} a_{\lambda}$ in der zweiten Gleichung ersetzt werden,

und man erhält die Volumenreflexionsmatrix, die definiert ist durch

$$(\underline{\mathbf{v}}^-) = \underline{\mathbf{R}}_V^{-+} \underline{\mathbf{u}}^+ := \underline{\mathbf{b}}^-(\underline{\mathbf{b}}^+)^{-1} \underline{\mathbf{u}}^+ . \quad (5.15)$$

Diese Reflexionsmatrix ergibt das Reflexionsvermögen beliebig vieler hintereinanderliegender Schichten an der $(-z)$ -Seite der in $(+z)$ -Richtung ersten Schicht des Systems. Behandelt man ein System mit Oberfläche, so ist, wenn man die $(-z)$ -Seite der j -ten Schicht des Systems betrachtet, die Anzahl der Schichten in $(-z)$ -Richtung, also in Richtung zur Oberfläche, beschränkt, in $(+z)$ -Richtung jedoch unbeschränkt. Das Reflexionsverhalten des Systems wird für Wellen, die in $(+z)$ -Richtung propagieren, durch $\underline{\mathbf{R}}_V^{-+}$ beschrieben. Das Reflexionsverhalten in $(-z)$ -Richtung des aus endlich vielen Schichten bestehenden, die Oberfläche beinhaltenden Schichtsystems kann mit Hilfe eines von Pendry (1974) beschriebenen Schichtverdopplungsverfahrens bestimmt werden. Es funktioniert auf folgende Weise.

Gegeben seien an zwei beliebig aus dem Kristall herausgegriffenen benachbarten gleichartigen Schichten die $\underline{\mathbf{M}}^{\pm\pm}$ -Matrizen. Fällt in $(-z)$ -Richtung eine Welle auf dieses Zweischichtsystem, so setzt sich die reflektierte Welle zusammen aus dem an der ersten Schicht reflektierten Anteil $\underline{\mathbf{M}}^{+-} \underline{\mathbf{u}}^-$ und den Anteilen, die durch Mehrfachreflexionen zwischen den beiden Schichten entstehen.

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{R}}_2^{+-} \underline{\mathbf{u}}^- &= (\underline{\mathbf{M}}^{+-} + \underline{\mathbf{M}}^{++} \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--} + \dots \\ &+ \underline{\mathbf{M}}^{++} [\underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--}]^n \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--} + \dots) \underline{\mathbf{u}}^- \\ &= (\underline{\mathbf{M}}^{+-} \\ &+ \underline{\mathbf{M}}^{++} [\sum_{n=0}^{\infty} (\underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--})^n] \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--}) \underline{\mathbf{u}}^- \end{aligned}$$

Die Propagation eines Elektrons unter Berücksichtigung aller elastischen Wechselwirkungen wird durch ein komplexes optisches Potential beeinflusst. Dies sorgt dafür, daß die Amplituden $\underline{\mathbf{u}}^{\pm}$ und $\underline{\mathbf{v}}^{\pm}$ bei fortlaufender Propagation abnehmen. Die Norm der Streuoperatoren ist damit kleiner als eins. Somit hat man bei der Aufsummation der Mehrfachstreuungen lediglich eine geometrische Reihe in den Streuoperatoren aufzusummieren. Diese Summation ergibt für die Reflexionsmatrix des Zweischichtsystems

$$\underline{\mathbf{R}}_2^{+-} = \underline{\mathbf{M}}^{+-} + \underline{\mathbf{M}}^{++} [\underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--}]^{-1} \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{M}}^{+-} (\underline{\mathbf{P}}^{--})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{--} .$$

Für mehr als zwei hintereinander liegende Schichten ist $\underline{\underline{\mathbf{M}}}^{+-}$ durch die vorher mit diesem Verfahren berechnete Reflexionsmatrix für zum Beispiel $n - 1$ Schichten $\underline{\underline{\mathbf{R}}}_{n-1}^{+-}$ zu ersetzen und das Verfahren zu wiederholen. Dann erhält man die Reflektivität von $n - 1 + 1$ Schichten, nämlich $\underline{\underline{\mathbf{R}}}_n^{+-}$. Genauso läßt sich $\underline{\underline{\mathbf{R}}}_n^{-+}$ ermitteln, nur mit entsprechend geänderter Anordnung der Phasoren und $\underline{\underline{\mathbf{M}}}^{s,s'}$ -Matrizen.

5.4. DIE KONSTRUKTION DER LEED-ZUSTÄNDE

Der Elektronenzustand $(E_1, \mathbf{k}_{1//})$ wird durch das Experiment präpariert, der Zustand $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ wird als Endzustand des Streuprozesses gemessen. Zustand 1 ist eine in den Kristall propagierende Elektronenwelle und wird im Kristall als LEED-Zustand behandelt. Berechnet werden kann er durch Lösen der Lippmann-Schwinger Gleichung mit einem nach Schichten zerlegten Potential.

Zustand 2 kann ebenfalls als in den Kristall propagierend konstruiert werden, wenn danach berücksichtigt wird, daß der gemessene Zustand (C.4) der zeitumgekehrte dieses so ermittelten Zustands ist.

Zustand 1 wie 2 werden folgendermaßen als LEED-Zustände schichtweise in den Kristall hineingerechnet, das heißt, daß sie von außen einfallend und dann Schicht für Schicht bestimmt werden. Für beide ist der in den Kristall hineinpropagierende Anfangszustand (A.7) vor der ersten Schicht, der Oberflächenbarriere, durch das Experiment mit

$$u_{\mathbf{g},j=1}^{0,+} = -\frac{i}{k_z} \delta_{\mathbf{g},0}$$

vorgegeben. Ausgehend von dieser Amplitude der einfallenden Welle ist es möglich, mit den bekannten Abbildungsmatrizen der Oberflächenbarriere (B.3) und der Volumenreflexionsmatrix (5.15) das Schichtverdopplungsverfahren zu verwenden und die Gesamtreflexionsmatrix des Systems Barriere-halbunendlicher Volumenkristall $\underline{\mathbf{R}}_{SV}^{-+}$ zu ermitteln und damit die reflektierte Welle zu berechnen. Das ein- wie austretende Wellenfeld ist dann vor der Oberflächenbarriere mit $\mathbf{v}^- = \underline{\mathbf{R}}_{SV}^{-+} \mathbf{u}_{j=1}^{0,+}$ ermittelt. Dabei ist zu beachten, daß die Phasoren $(\underline{\mathbf{p}}_S^{s,s'})_{\mathbf{g}} = e^{i\mathbf{k}_S^s \mathbf{d}_S} \delta_{s,s'}$, die die Propagation zwischen Oberflächenbarriere und erster volumenartiger Schicht berücksichtigen, den Abstand $\mathbf{d}_S$ beinhalten, der diese Distanz gerade angibt. Dieser Abstand ist gewöhnlich verschieden zum Abstand der volumenartigen Schichten untereinander.

Ist das Wellenfeld auf der (-z)-Seite der j-ten Schicht bekannt, so ist es bei Kenntnis der $\underline{\mathbf{M}}^{s,s'}$ -Matrizen, der Phasoren und der Volumenreflexionsmatrix möglich, das Wellenfeld auf der (+z) Seite der j-ten Schicht nach Pendry (1974)

mit

$$(i) \quad \underline{\mathbf{v}}_j^+ = (\underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{M}}^{+-} \underline{\mathbf{P}}^{--} \underline{\mathbf{R}}_V^{-+} \underline{\mathbf{P}}^{++})^{-1} \underline{\mathbf{M}}^{++} \underline{\mathbf{u}}_j^+$$

$$(iv) \quad \underline{\mathbf{u}}_j^- = \underline{\mathbf{P}}^{--} \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^-$$

zu berechnen, ebenso an der (-z) Seite der j+1-ten Schicht

$$(ii) \quad \underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+ = \underline{\mathbf{P}}^{++} \underline{\mathbf{v}}_j^+ \quad , \quad (iii) \quad \underline{\mathbf{v}}_{j+1}^- = \underline{\mathbf{R}}_V^{-+} \underline{\mathbf{u}}_{j+1}^+ .$$

Dies kann in der Reihenfolge (i)–(iv) geschehen. Damit sind nun die auf eine beliebige Schicht einfallenden Wellenfelder $\underline{\mathbf{u}}_j^\pm$ bekannt.

Bisher ist nur der Einfluß der Vielfachstreuung auf das Wellenfeld an der j-ten Schicht, hervorgerufen durch alle anderen Schichten, berücksichtigt worden. Für die Matrixelementberechnung ist aber die Kenntnis des Wellenfeldes innerhalb der Schicht, das heißt in der für die Schicht repräsentativen Einheitszelle, erforderlich. Das einfallende Wellenfeld muß in die Schicht, unter Berücksichtigung aller in dieser Schicht stattfindenden Vielfachstreuungen, hineingerechnet werden. Dort ist das Potential kugelsymmetrisch, das Wellenfeld ist dieser Symmetrie mit der Darstellung (5.1) angepaßt. Mit der Entwicklung einer ebenen Welle nach Drehimpulsen wie in (A.14) kann jede zum Beam g gehörige ebene Welle mit der jeweiligen Amplitude $u_{g,j}^s$ zur Gesamtamplitude aufsummiert werden.

$$(\underline{\mathbf{A}}_{l,m}^{j,(0)}) = A_l^{m;j,(0)} = \sum_{s,g} u_{g,j}^s 4\pi i^l (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{k}}_g^s)$$

Durch die Mehrfachstreuungskorrekturen (5.10), berücksichtigt mit

$$\underline{\mathbf{A}}_{\approx}^j = (\underline{\mathbf{1}}_{\approx} - \underline{\mathbf{X}}_{\approx})^{-1} \underline{\mathbf{A}}_{\approx}^{j,(0)} \quad , \quad (5.16)$$

ist dann das Wellenfeld in der Referenz-Einheitszelle jeder Schicht bekannt. Mit den Lösungen der radialen Schrödinger-Gleichung (5.5) innerhalb der Muffin-Tin Kugel liegen nun die LEED-Zustände in der Form (5.1) vollständig bekannt vor.

5.5. DIE KONSTRUKTION DER HALBRAUMZUSTÄNDE

An der inelastischen Elektronenstreuung sind die Zustände $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ und $(E_4, \mathbf{k}_{4//})$ beteiligt. Sie müssen im Goldene-Regel-Formalismus als Eigenzustände eines halbumendlichen Kristalls bestimmt werden und gehen dann in die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit ein. Diese Eigenzustände werden konstruiert (Liebsch (1978), Ackermann (1985)), indem man die durch die Diagonalisierung (5.13) der Schicht-Transfermatrix gewonnenen Volumenzustände (5.14) an der Oberfläche anpaßt an eine außerhalb des Kristalls exponentiell abfallende Welle.

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \varphi_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^a \mathbf{r}} \quad (5.17)$$

Der außerhalb des Kristalls die Dämpfung ergebende Wellenvektor $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^a$ ist definiert

$$\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^a = \left(\frac{\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}_{//}}{\sqrt{2E^a - |\mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}_{//}|^2}} \right) .$$

$\mathbf{k}_{//}$ ist die durch die Oberflächenbrillouinzone-Integration vorgegebene Parallelkomponente des Wellenvektors. Für die Energie gilt $E^a = E^i - E_{Vac}$. Dabei ist die Energie E^i die Energie des Elektrons, gemessen bezüglich des Muffin-Tin-Energienullpunkts. E_{Vac} ist die Vakuumenergie des betreffenden Materials; es kann die Austrittsarbeit φ für einige Materialien Ashcroft, Mermin (1975) entnommen und mit $E_{Vac} = E_F + \varphi$ die Vakuumenergie berechnet werden.

Für den Zustand $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ ist $E_3 < E_F$, die z-Komponente des Wellenvektors $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^a$ also rein imaginär. Die Elektronenwelle, die von innen an (5.17) angepaßt werden kann, ist in der Darstellung (5.7) gegeben, wobei die Amplituden wie in (5.14) nach Blochwellen sortiert sind. Zum Anpassen können nur Lösungen von (5.13) verwendet werden, die mit $V_{opt}^i = 0$ berechnet wurden (Eilenberger (1980)). Nur dann erhält man ein inhomogenes Gleichungssystem für die gesuchten Koeffizienten der anzupassenden Welle, welches eine ausreichende Anzahl von Gleichungen besitzt, so daß es eindeutig zu lösen ist.

Vor dem Anpassen sind die Zustände $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ und $(E_4, \mathbf{k}_{4//})$ zu normieren, um die in (3.19, 3.20) auftretenden Zustandsdichten dieser Zustände durch die Ströme (3.10), die die Blochwellen tragen, zu ersetzen. Für diese Stromnormierung

fordert man nach Kar (1976) für den Strom von (5.14)

$$i j_{\lambda,\lambda'} \int (\psi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial z} \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) - \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial z} \psi_{\lambda}^*(\mathbf{r})) \Big|_{z=0} d^2\mathbf{r}_{//} = \delta_{\lambda,\lambda'} .$$

Die Normierungskonstante ergibt sich dann zu

$$j_{\lambda,\lambda'} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} [(u_{\mathbf{g},\lambda}^+ + u_{\mathbf{g},\lambda}^-)^* k_{\mathbf{g},z} (u_{\mathbf{g},\lambda}^+ - u_{\mathbf{g},\lambda}^-) + c.c.] \delta_{\lambda,\lambda'} .$$

Die so normierten Zustände sind wieder in der Darstellung (5.14) gegeben. Der Ansatz

$$\Psi_{\lambda} := \psi_{\lambda} + \sum_{\lambda'} R_{\lambda,\lambda'} \psi_{\lambda'}$$

mit den zu bestimmenden Koeffizienten $R_{\lambda,\lambda'}$ wird nun zur Anpassung an (5.17) verwendet. Dazu werden lediglich jene Blochwellen ψ_{λ} berücksichtigt, die einen Strom aus dem Kristall tragen, und die $\psi_{\lambda'}$, die in den Kristall Strom hineintragen sowie in dieser Richtung exponentiell abfallen. Die Anpassung erfolgt an der Oberfläche, also bei $z = 0$, so daß

$$\varphi(\mathbf{r}) \Big|_{z=0} = \Psi(\mathbf{r}) \Big|_{z=0} , \quad \left(\frac{\partial}{\partial z} \varphi(\mathbf{r}) \right) \Big|_{z=0} = \left(\frac{\partial}{\partial z} \Psi(\mathbf{r}) \right) \Big|_{z=0}$$

erfüllt wird. Mit diesen zwei Gleichungen können die Amplituden $\varphi_{\mathbf{g}}$ eliminiert werden, und man erhält ein inhomogenes lineares Gleichungssystem (Ackermann (1985))

$$\sum_{\lambda'} R_{\lambda,\lambda'} (b_{\mathbf{g},\lambda'}^+ + b_{\mathbf{g},\lambda'}^-) - \frac{ik_{\mathbf{g},z}^i}{k_{\mathbf{g},z}^a} (b_{\mathbf{g},\lambda'}^+ - b_{\mathbf{g},\lambda'}^-) = \frac{ik_{\mathbf{g},z}^i}{k_{\mathbf{g},z}^a} (b_{\mathbf{g},\lambda}^+ - b_{\mathbf{g},\lambda}^-) - (b_{\mathbf{g},\lambda}^+ + b_{\mathbf{g},\lambda}^-) ,$$

aus dem die Koeffizienten $R_{\lambda,\lambda'}$ bestimmt werden können.

Das Wellenfeld liegt nach der Summation in (5.14) über λ wieder in der Form (5.7) als auf die Schicht einfallende Elektronenwelle vor, nur mit den durch die Anpassung modifizierten Amplituden $u_{\mathbf{g}}^{\pm}$. Diese werden nun, wie in Kapitel 5.4 dargestellt, nach Drehimpulsen entwickelt, und mit (5.16) wird wieder die in einer Schicht stattfindende Vielfachstreuung berücksichtigt. Damit stehen die Halbraumzustände $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ und $(E_4, \mathbf{k}_{4//})$ zur Matrixelementberechnung in (3.19, 3.20) zur Verfügung.

5.6. DIE GREENSFUNKTIONEN DER HALBRAUMZUSTÄNDE

Der dynamische Formalismus der Verluststromberechnung (3.45–3.48) in Kapitel 3.2 erfordert die Kenntnis der Propagatoren der Elektronen. Die Bewegung der Elektronen kann von der j -ten zur j' -ten Schicht erfolgen. Dabei sollen wieder alle möglichen elastischen Wechselwirkungen mitberücksichtigt werden. Die elastische Streuung erfolgt an den mit Dichte-Funktional-Theorie berechneten Kristallpotentialen, die in die Dyson-Gleichung eingehen, welche dann gelöst wird.

Ein weiterer Grund, einen Greensfunktionsformalismus zu verwenden, ist, daß per Konstruktion Oberflächenzustände in den Greensfunktionen enthalten sind. Sie wären nur durch aufwendige Verfahren bei der Konstruktion der Halbraumzustände in die Rechnung miteinzubeziehen (Ackermann (1985)).

Die Verwendung des Greensfunktionsformalismus hat den Vorteil, eine endliche Lochlebensdauer in Form eines Imaginärteils im Potential mitzuberechnen. Man berechnet auf diese Weise alle an der inelastischen Streuung beteiligten Zustände als angeregte Zustände. Experimente, unter anderem die Photoemission und die sie beschreibenden Theorien, zeigen eine deutlichere Übereinstimmung, wenn diese Lochlebensdauer miteinbezogen wird.

Als Nachteil muß man bezeichnen, daß durch den Imaginärteil im Potential eine bisher nur näherungsweise bestimmbare Größe $V_{opt}^i(E)$ (Lundqvist (1967)) in die Theorie eingeht, deren Berechnung durch die hier beschriebene Theorie erstmals versucht wird. Die nötigen Informationen über $V_{opt}^i(E_1)$ des Zustands $(E_1, \mathbf{k}_{1//})$ sind in der energie- und winkelaufgelösten, das heißt $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ -aufgelösten, inelastischen Elektronenstreuung aber erst nach einer numerisch aufwendigen Summation über die Energie E_2 und Winkel $\mathbf{k}_{2//}$ zu gewinnen.

5.6.1. DIE BERECHNUNG DER LEERSCHICHT-GREENSFUNKTION

Um die Greensfunktion für einen Kristall mit Oberfläche, welcher ein halb-unendliches System darstellt, zu berechnen, wird eine von Kambe, Scheffler (1979), Hora, Scheffler (1984) und Maca, Scheffler (1985) entwickelte Methode verwendet und für die Propagation des Elektrons zwischen verschiedenen Schichten weiterentwickelt. Dabei wird die Kristallgitter-Greensfunktion in mehreren Schritten konstruiert. Ausgehend von der Kristallgitter-Greensfunktion des potentialfreien Raumes $\mathcal{G}_0^{c,+}$ mit der Ortsdarstellung (A.13), berechnet man mit Hilfe der Dyson-Gleichung die Propagation eines Elektrons in einem Kristall mit fehlender j-ter Schicht. Die so gewonnene Leerschicht-Greensfunktion wird dann im nächsten Schritt dazu verwendet, die Dyson-Gleichung für die volle Greensfunktion mit Potentiale beinhaltender j-ter Schicht zu bestimmen. In diesem Kapitel wird somit $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ in der j-ten Schicht vorausgesetzt.

Der Gesamtkristall besitzt einen Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^j + V^j := \mathcal{H}_0 + \sum_{i < j} V^i + \sum_{i > j} V^i + V^j \quad (5.18)$$

mit den Potentialen der später fehlenden j-ten Schicht V^j , dem Hamilton-Operator $\mathcal{H}_0$ für die freie Propagation und $\mathcal{H}^j$, dem Hamilton-Operator für den Kristall mit leerer j-ter Schicht. Die Leerschichtgreensfunktion $\mathcal{G}_e^{+,j}$ muß dann folgende zur Schrödinger-Gleichung mit dem Hamilton-Operator $\mathcal{H}^j$ äquivalente Dyson-Gleichung erfüllen^[22]

$$\mathcal{G}_e^{+,j} = \mathcal{G}_0^{c,+} + \mathcal{G}_0^{c,+} \left[\sum_{i < j} V^i + \sum_{i > j} V^i \right] \mathcal{G}_e^{+,j} . \quad (5.19)$$

Darin ist $\mathcal{G}_e^{+,j} - \mathcal{G}_0^{c,+}$ der Anteil, der die Streuung des Elektrons an $V^- := \sum_{i < j} V^i$ und an $V^+ := \sum_{i > j} V^i$ berücksichtigt. Setzt man (5.19) auf der rechten Seite von (5.19) anstelle von $\mathcal{G}_e^{+,j}$, also in sich selbst, wiederholt ein, erhält man

$$\mathcal{G}_e^{+,j} = \mathcal{G}_0^{c,+} + \mathcal{G}_0^{c,+} (V^+ + V^-) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{G}_0^{c,+} (V^+ + V^-)]^n \right\} \mathcal{G}_0^{c,+} . \quad (5.20)$$

[22] Wegen einer besseren Übersichtlichkeit wird auf die Kennzeichnung der $E, \mathbf{k}_{//}$ -Abhängigkeit der Greensfunktionen in Form von $\mathcal{G}_{E, \mathbf{k}_{//}}^{\pm} \rightarrow \mathcal{G}^{\pm}$ verzichtet.

Würde man den durch Vielfachstreuung an den Potentialen $i < j$ entstehenden Zustand benötigen (d.h. $V^+ = 0$), müßte man die Lippman-Schwinger-Gleichung

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \mathcal{G}_0^+ V^- \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{G}_0^{c,+} V^-]^n \right\} |\psi_0\rangle$$

lösen. Daran erkennt man, daß in den Korrekturen, die durch die Streuung verursacht werden, die Reflexionsmatrix des halibunendlichen Systems enthalten ist.

$$\mathcal{R}^{+-} = \mathcal{G}_0^{c,+} V^- \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{G}_0^{c,+} V^-]^n \right\} \quad \mathcal{R}^{-+} = \mathcal{G}_0^{c,+} V^+ \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{G}_0^{c,+} V^+]^n \right\}$$

Mit diesen Reflexionsmatrizen kann (5.20) umgeordnet werden, und man erhält

$$\mathcal{G}_e^{+,j} = \mathcal{G}_0^{c,+} + \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{R}^{+-} + \mathcal{R}^{-+}]^n \right\} \mathcal{G}_0^{c,+}.$$

Im halibunendlichen Kristall ist $\mathcal{R}^{+-}$ die Reflexionsmatrix der in $(-z)$ -Richtung auf das Schichtsystem zwischen j -ter Schicht und Oberflächenbarriere einfallenden Wellen. Sie kann sukzessive aus der Reflexionsmatrix der Oberflächenbarriere und den Abbildungsmatrizen der dahinterliegenden Schichten mit dem in Kapitel 5.3 dargestellten Schichtverdopplungsverfahren berechnet werden.

Die Reflexionsmatrix $\mathcal{R}^{-+}$ ergibt den reflektierten Anteil einer aus $(+z)$ -Richtung einfallenden Welle. In der $(+z)$ -Richtung kann der Kristall als halibunendliches System behandelt werden; bei $\mathcal{R}^{-+}$ handelt es sich somit um die Volumenreflexionsmatrix (5.15). Es ist möglich, diese Folgerung zu ziehen, da ein halibunendliches System immer gleich reflektiert, gleichgültig ob man die j -te Schicht betrachtet oder die j' -te; in $(+z)$ -Richtung liegen immer beliebig viele Schichten.

Durch $\sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{R}^{+-} + \mathcal{R}^{-+}]^n$ wird die Vielfachstreuung zwischen dem $i < j$ und $i > j$ -Bereich sowie innerhalb dieser Bereiche an den Schichtpotentialen berücksichtigt. Die Reflexionsmatrizen ergeben zusätzliche Randbedingungen, aus denen mit Vorgabe der freien Greensfunktion $\mathcal{G}_0^{c,+}$ (mit den irregulären und regulären Lösungen des homogenen Problems) die unbekannten Koeffizienten der zu berechnenden Greensfunktion $\mathcal{G}_e^{+,j}$ bestimmt werden können. Die unbekannten Koeffizienten werden mit Hilfe der regulären Lösung unter Verwendung der Randbedingungen ermittelt (siehe Anhang B).

Wieder handelt es sich wegen des komplexen optischen Potentials lediglich um eine Aufsummation von geometrischen Reihen in den Streuoperatoren, wobei man dadurch die Streukorrekturen $\mathcal{G}_{sc}^{\pm,\pm}$ erhält, die zur Leerschicht-Greensfunktion führen. Diese ist

$$\mathcal{G}_e^{+,j} = \mathcal{G}_0^{c,+} + \mathcal{G}_{sc}^{++} + \mathcal{G}_{sc}^{+-} + \mathcal{G}_{sc}^{-+} + \mathcal{G}_{sc}^{--}$$

mit den Streukorrekturen

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{sc}^{++} &= [1 - \mathcal{R}^{+-}\mathcal{R}^{-+}]^{-1} \mathcal{R}^{+-} \mathcal{R}^{-+} \mathcal{G}_0^{c,+} \\ \mathcal{G}_{sc}^{+-} &= [1 - \mathcal{R}^{+-}\mathcal{R}^{-+}]^{-1} \mathcal{R}^{+-} \mathcal{G}_0^{c,+} \\ \mathcal{G}_{sc}^{-+} &= \mathcal{R}^{-+} [1 - \mathcal{R}^{+-}\mathcal{R}^{-+}]^{-1} \mathcal{G}_0^{c,+} \\ \mathcal{G}_{sc}^{--} &= \mathcal{R}^{-+} [1 - \mathcal{R}^{+-}\mathcal{R}^{-+}]^{-1} \mathcal{R}^{+-} \mathcal{G}_0^{c,+} .\end{aligned}$$

$\mathcal{G}_0^{c,+}$ erfüllt die austretende-Welle-Randbedingung (Anhang A,B)-daher der obere Index (+)-und hat in Ortsdarstellung nach Beams entwickelt die in Anhang A abgeleitete Form (A.13). Die Reflexionsmatrizen verknüpfen den auf eine Schicht einfallenden Teil einer Welle mit dem austretenden, dabei befindet man sich im Zwischen-Muffin-Tin-Bereich, in dem das Potential konstant angenommen wird. Daher lassen sich in der Ortsdarstellung und mit der in Anhang A eingeführten Schreibweise die Streukorrekturen nach Beams entwickeln. Die Leerschichtgreensfunktion lautet darin

$$\begin{aligned}G_e^{+,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) &= \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}', s, s'} \{ \delta_{s,s'} G_{0;\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{c,+} + G_{sc;\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{s,s';j} \} < \mathbf{r} | \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s > < \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s | \mathbf{r} > \\ &=: (\underline{\mathbf{e}}_{\mathbf{r}}^+, \underline{\mathbf{e}}_{\mathbf{r}}^-) \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{G}}_0^{c,++} + \underline{\mathbf{G}}^{++,j} & \underline{\mathbf{G}}_{sc}^{+-,j} \\ \underline{\mathbf{G}}_{sc}^{-+,j} & \underline{\mathbf{G}}_0^{c,+-} + \underline{\mathbf{G}}_{sc}^{--,j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}'}^+ \\ \underline{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}'}^- \end{pmatrix} .\end{aligned}\quad (5.21)$$

Diese übersichtlichere Schreibweise ist in Anhang A definiert. Dort ist in (A.14) auch die Drehimpulsdarstellung der ebenen Wellen erklärt, die nun dazu verwendet wird, die Leerschichtgreensfunktion nach Drehimpulsen zu entwickeln. Dabei erhält man für die Strukturkonstanten der Streukorrektur

$$B_{l,l'}^{j;m,m'} = (4\pi)^2 i^{l-l'} \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}', s, s'} G_{sc;\mathbf{g},\mathbf{g}'}^{s,s';j} (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{g}}^s) Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{g}'}^{s'}) . \quad (5.22)$$

Bekannt sind schon die Strukturkonstanten der Kristall-Greensfunktion des potentialfreien Raumes (A.16), und mit der Dyson-Gleichung (5.20) sowie (5.21) erhält man dann die Strukturkonstante

$$C_{l,l'}^{j;m,m'} = A_{l,l'}^{m,m'} + B_{l,l'}^{j;m,m'} \quad (5.23)$$

der Leerschichtgreensfunktion. Damit ist für $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ in der leeren Schicht die Leerschichtgreensfunktion gegeben zu

$$\begin{aligned} G_e^{+,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) = \sum_{L,L'} \{ -2ikj_l(kr_{<})\delta_{L,L'}h_l^{(1)}(kr_{>}) + j_l(kr)C_{L,L'}^j j_{l'}(kr') \} \\ \times Y_L(\hat{\mathbf{r}})Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}') . \end{aligned} \quad (5.24)$$

5.6.2. DIE BERECHNUNG DER SCHICHT-GREENSFUNKTION

Ausgehend von dem im Gegensatz zum vorigen Kapitel nun vollen Hamilton-Operator erhält man eine Dyson-Gleichung, die die Potentiale der zuvor fehlenden Schicht berücksichtigt. Mit ihr wird immer noch der Fall untersucht, in dem sich $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ in der nun nicht mehr potentialfreien j -ten Schicht befinden.

$$\mathcal{G}^{+,j} = \mathcal{G}_e^{+,j} + \mathcal{G}_e^{+,j} V^j \mathcal{G}^{+,j}$$

Bekannt ist die Leerschichtgreensfunktion $\mathcal{G}_e^{+,j}$ (5.24) in der Drehimpulsentwicklung. Macht man für die volle Schicht-Greensfunktion den Ansatz

$$\begin{aligned} G^{+,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) = \sum_{L,L'} \{ & -2ik J_L(kr_{<}) \delta_{L,L'} H_L^+(kr_{>}) + J_L(kr) D_{L,L'}^j J_{L'}(kr') \} \\ & \times Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}') \end{aligned} \quad (5.25)$$

mit den unbekannten Koeffizienten $D_{L,L'}^j$ und den regulären (J_L aus (5.5)) sowie irregulären Lösungen (H_L^+ aus (5.6)) der radialen Schrödinger-Gleichung, so ist es möglich, obige Dyson-Gleichung zur Bestimmung der Koeffizienten zu verwenden. Für $r > R_{MT}$ haben die reguläre und irreguläre radialen Lösungen der Schrödinger-Gleichung die Darstellung (5.5) und (5.6). Führt man an $r = R_{MT}$ einen Koeffizientenvergleich mit Faktoren von $h_l^{(2)}(r) h_l^{(2)}(r')$ durch, ergibt sich unter Beachtung von (5.9) eine Bestimmungsgleichung für die unbekannten Koeffizienten

$$\underset{\approx}{\mathbf{D}}^j = \underset{\approx}{\mathbf{e}} \left\{ \underset{\approx}{\mathbf{1}} + \frac{1}{2k} \underset{\approx}{\mathbf{C}}^j \underset{\approx}{\mathbf{e}} \underset{\approx}{\mathbf{s}} \right\}^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{C}}^j \underset{\approx}{\mathbf{e}} . \quad (5.26)$$

Dabei sind

$$\underset{\approx}{\mathbf{e}} := e^{i\delta_l} \delta_{l,l'} \quad \text{und} \quad \underset{\approx}{\mathbf{s}} := \sin \delta_l \delta_{l,l'} \quad (5.27)$$

in Matrixschreibweise verwendet worden. δ_l sind die in Kapitel 5.1 ermittelten Streuphasen der Atomstreuung. Die Propagation der Elektronen innerhalb einer Schicht zwischen den inelastischen Streuakten ist damit bekannt.

5.6.3. DIE GREENSFUNKTION FÜR VERSCHIEDENE SCHICHTEN

War im vorigen Kapitel eine Propagation mit $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ in einer Schicht erlaubt, so soll nun eine Propagation zwischen verschiedenen Schichten zugelassen werden. Diese Propagation ist erforderlich, da ein zum Beispiel in der j' -ten Schicht angeregtes Elektron sich zur j -ten Schicht oder auch zur Oberfläche aus dem Kristall hinaus bewegen kann. Damit befinden sich dann $\mathbf{r}$ in der j -ten und $\mathbf{r}'$ in der j' -ten Schicht, und somit ist $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ nicht mehr möglich. Dies hat Auswirkungen auf die Greensfunktion, denn sie ist gerade dann singulär und ergibt in der Ortsdarstellung von $(E - \mathcal{H})\mathcal{G} = 1$ eine δ -Funktion, wenn $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ ist. Ausgegangen wird von der Situation, daß sich $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ in der j' -ten Schicht befinden, aber $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ ist. Nach Anhang B muß die Greensfunktion den Differentialoperator in der ersten Variablen lösen, das heißt dann, es muß

$$\left\{ \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}} + (E - [\sum_{i < j'} V^i(\mathbf{r}) + \sum_{i > j'} V^i(\mathbf{r})]) \right\} G_e^{j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0 \quad (5.28)$$

gelten. Damit läßt sich die Leerschichtgreensfunktion als Wellenfunktion an der $(-z)$ -Seite der leeren j' -ten Schicht in der Variablen $\mathbf{r}$ interpretieren. Im Bereich des dort konstanten Potentials kann sie nach ebenen Wellen entwickelt werden. Mit der Leerschichtgreensfunktion in der Beam-Entwicklung (5.21)

$$\begin{aligned} G_e^{j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) &= G_{e, \mathbf{r}'}^{j'}(\mathbf{r}; E, \mathbf{k}_{//}) = \sum_{\mathbf{g}} u_{\mathbf{g}, j'}^+ e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^+ \mathbf{r}} + v_{\mathbf{g}, j'}^- e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^- \mathbf{r}} \\ &= (\underline{\mathbf{e}}^+, \underline{\mathbf{e}}^-) \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_{j'}^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_{j'}^- \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.29)$$

sind die Amplituden dann definiert

$$(\underline{\mathbf{u}}_{j'}^+)_g = u_{\mathbf{g}, j'}^+(\mathbf{r}') = (G_{0, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{c, ++} + G_{sc, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{+, +, j'} + G_{sc, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{+, -, j'}) \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^+ \mathbf{r}'} \\ e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^- \mathbf{r}'} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

$$(\underline{\mathbf{v}}_{j'}^-)_g = v_{\mathbf{g}, j'}^-(\mathbf{r}') = (G_{sc, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{-, +, j'} + G_{0, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{c, --} + G_{sc, \mathbf{g}, \mathbf{g}'}^{-, -, j'}) \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^+ \mathbf{r}'} \\ e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^- \mathbf{r}'} \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

Der Quellpunkt der Greensfunktion befindet sich damit bei $\mathbf{r}'$ in der j' -ten Schicht. Möchte man nun das Wellenfeld im Aufpunkt an der j -ten Schicht berechnen, muß man die Koeffizienten (5.30, 5.31) des $\mathbf{r}$ -abhängigen Wellenfeldes (5.29) von der j' -ten Schicht in die j -te Schicht transportieren. Dies wird ermöglicht mit der in Kapitel 6.3 bereitgestellten Schicht-Transfermatrix (5.12).

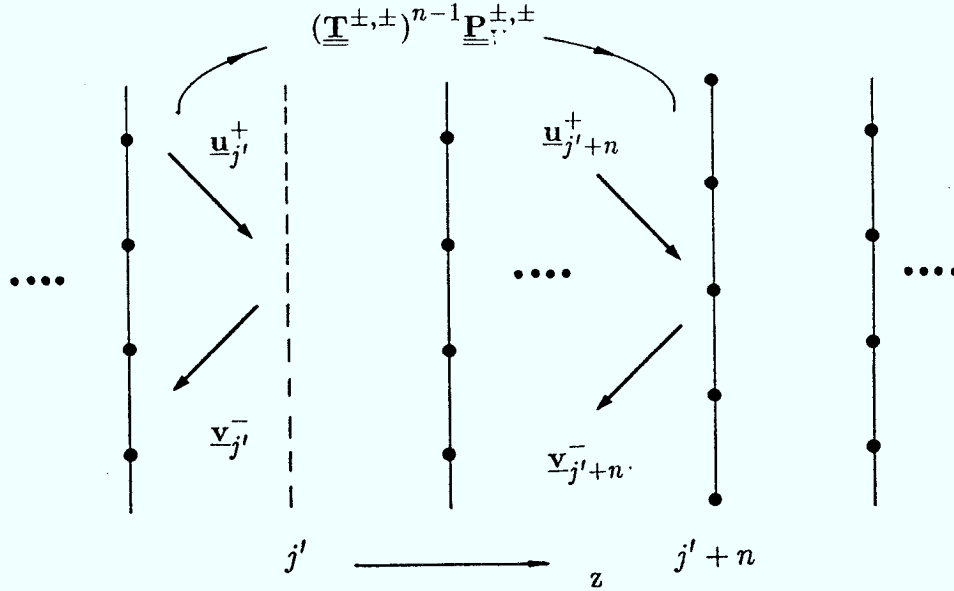


Bild 17: Transport der Leerschichtgreensfunktion von der j' -ten zur j -ten Schicht. Dabei ist die j' -te eine Leerschicht und $j' < j = j' + n$.

Ist $j > j'$, gibt es ein n mit $j = j' + n$. Dann gilt, wie Bild 17 zu entnehmen ist,

$$\begin{pmatrix} \underline{u}_{j'+n}^+ \\ \underline{v}_{j'+n}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{T}^{++} & \underline{T}^{+-} \\ \underline{T}^{-+} & \underline{T}^{--} \end{pmatrix}^{n-1} \begin{pmatrix} \underline{P}^{++} & 0 \\ 0 & \underline{P}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u}_{j'}^+ \\ \underline{v}_{j'}^- \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Die Phasoren berücksichtigen, daß die j' -te Schicht leer ist und die Propagation des Wellenfeldes dort ohne Wechselwirkung erfolgen kann.

Geändert ist die Situation, wenn $j < j'$ ist, es also ein k gibt mit $j = j' - k$. Dann gilt

$$\begin{pmatrix} \underline{u}_{j'-k}^+ \\ \underline{v}_{j'-k}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{T}^{++} & \underline{T}^{+-} \\ \underline{T}^{-+} & \underline{T}^{--} \end{pmatrix}^{-k} \begin{pmatrix} \underline{u}_{j'}^+ \\ \underline{v}_{j'}^- \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Damit ist das Wellenfeld an der $(-z)$ -Seite der j -ten Schicht mit $j \neq j'$ bekannt. Um das insgesamt auf die Schicht einfallende Wellenfeld zu bestimmen, muß die einfallende Welle auf der $(+z)$ Seite der j -ten Schicht ermittelt werden. Falls wieder $j > j'$ ist, erhält man

$$\begin{pmatrix} \underline{v}_{j'+n}^+ \\ \underline{u}_{j'+n}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{P}^{++} & 0 \\ 0 & \underline{P}^{--} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \underline{T}^{++} & \underline{T}^{+-} \\ \underline{T}^{-+} & \underline{T}^{--} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} \underline{P}^{++} & 0 \\ 0 & \underline{P}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u}_{j'}^+ \\ \underline{v}_{j'}^- \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

und für $j < j'$ ist

$$\begin{pmatrix} \underline{\mathbf{v}}_{j'-k}^+ \\ \underline{\mathbf{u}}_{j'-k}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{P}}^{++} & 0 \\ 0 & \underline{\mathbf{P}}^{--} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{T}}^{++} & \underline{\mathbf{T}}^{+-} \\ \underline{\mathbf{T}}^{-+} & \underline{\mathbf{T}}^{--} \end{pmatrix}^{-k+1} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_{j'}^+ \\ \underline{\mathbf{v}}_{j'}^- \end{pmatrix}. \quad (5.35)$$

In (5.32–5.35) sind wegen (5.30, 5.31) die Koeffizienten (5.29) der Leerschichtgreensfunktion enthalten. Nach dem Transport sind die Koeffizienten an der j -ten Schicht bekannt und damit die Leerschichtgreensfunktion mit $j \neq j'$. Wie in (5.22) können jetzt die zu dieser Leerschichtgreensfunktion in der Drehimpulsbasis gehörigen Strukturkonstanten, nun $E_{L,L'}^{j,j'}$ genannt, berechnet werden. Da für die Ortsvariablen jetzt $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ gilt, entfällt im folgenden Ansatz für die Streukorrekturen der die δ -Funktion in (5.28) ergebende Anteil $-2ikJ_l H_l^+$, und man erhält die Leerschichtgreensfunktion ohne Vielfachstreukorrekturen (daher die Verwendung von $\tilde{G}_e^{+,j,j'}$)

$$\tilde{G}_e^{+,j,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) = \sum_{L,L'} J_l(kr) E_{L,L'}^{j,j'} j_{l'}(kr') Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}'). \quad (5.36)$$

$\mathbf{r}'$ befindet sich in der leeren Schicht, daher ist man gezwungen, $j_{l'}(r')$ zu verwenden. Die Koeffizienten $E_{L,L'}^{j,j'}$ sind aus den auf die Schicht fallenden Wellenanteilen ermittelt und müssen nun noch um die in der Schicht stattfindende Vielfachstreuung korrigiert werden. Dabei ist das auf die j -te Schicht einfallende Wellenfeld von $\mathbf{r}$ abhängig, d.h. die Korrektur ist mit

$$\underset{\approx}{\mathbf{F}}^{j,j'} = (\underset{\approx}{\mathbf{1}} - \underset{\approx}{\mathbf{X}})^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{E}}^{j,j'}$$

auszuführen. $\underset{\approx}{\mathbf{X}}$ ist die Intra-Schichtstrematrix (5.10). Es ist der um die Vielfachstreuung korrigierte Koeffizient $\underset{\approx}{F}_{L,L'}^{j,j'}$ anstelle von $E_{L,L'}^{j,j'}$ in der Drehimpulsdarstellung der Leerschichtgreensfunktion (5.36) einzusetzen, womit man dann die weiterverwendete Leerschichtgreensfunktion $G_e^{+,j,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//})$ erhält. Für die volle Greensfunktion, bei der $\mathbf{r}'$ in der j' -ten Schicht und $\mathbf{r}$ in der j -ten Schicht zugelassen sind, macht man den Ansatz

$$\begin{aligned} G_e^{+,j,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E, \mathbf{k}_{//}) = & \sum_{L,L'} \{ -2ikJ_l(kr_{<}) \delta_{L,L'} \delta^{j,j'} H_l^+(kr_{>}) \\ & + J_l(kr) [\delta^{j,j'} D_{L,L'}^{j'} + (1 - \delta^{j,j'}) G_{L,L'}^{j,j'}] j_{l'}(kr') \} Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}') \end{aligned} \quad (5.37)$$

mit dem jetzt unbekannten Koeffizienten $G_{L,L'}^{j,j'}$. Wieder ermöglicht eine Dyson-Gleichung, zwischen der Leerschichtgreensfunktion und der vollen Greensfunktion

$$G^{+,j,j'} = G_e^{+,j,j'} + G_e^{+,j,j'} V^{j'} G^{+,j,j'} \quad (5.38)$$

eine Bestimmungsgleichung für diesen unbekannten Koeffizienten $G_{L,L'}^{+,j,j'}$ abzuleiten. Verwendet man die Matrixschreibweise (5.27) und setzt die Ansätze für die Greensfunktionen in (5.38) ein, ist der unbekannte Koeffizient wieder mit Hilfe eines Koeffizientenvergleichs von Faktoren der Produkte $h_l^{(2)}(r)h_l^{(2)}(r')$ unter Beachtung von (5.9) bestimmt zu

$$\underset{\approx}{\mathbf{G}}^{j,j'} = \underset{\approx}{\mathbf{F}}^{j,j'} \underset{\approx}{\mathbf{e}} \left(\underset{\approx}{\mathbf{1}} - \frac{1}{2k} \underset{\approx}{\mathbf{e}}^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{s}} \underset{\approx}{\mathbf{D}}^j \right) . \quad (5.39)$$

Ein anderer Weg ist, die Dyson-Gleichung

$$G^{+,j,j'} = G_e^{+,j,j'} + G_e^{+,j,j'} V^{j'} G_e^{+,j,j'}$$

zu lösen. Dann erhält man durch dieselbe Form des Koeffizientenvergleichs die Bestimmungsgleichung

$$\underset{\approx}{\mathbf{G}}^{j,j'} = \underset{\approx}{\mathbf{F}}^{j,j'} \left(\underset{\approx}{\mathbf{1}} - \frac{1}{2k} \underset{\approx}{\mathbf{e}} \underset{\approx}{\mathbf{s}} \underset{\approx}{\mathbf{C}}^j \right)^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{e}} . \quad (5.40)$$

Im Gegensatz zur ersten Methode, die zu (5.39) führt, benötigt man bei der zweiten Methode eine zusätzliche Inversion, was einen größeren numerischen Aufwand erfordern würde, so daß (5.39) bei der numerischen Behandlung vorzuziehen ist.

Von Interesse ist es, danach zu fragen, ob die mit verschiedenen Gleichungen berechneten Koeffizienten gleich sind. Setzt man daher (5.39) und (5.40) gleich, führt dies (bei Unterdrückung der Schichtindizierung) auf die Gleichung

$$\underset{\approx}{\mathbf{D}} - \underset{\approx}{\mathbf{e}} \underset{\approx}{\mathbf{C}} \left(\underset{\approx}{\mathbf{1}} + \frac{1}{2k} \underset{\approx}{\mathbf{e}} \underset{\approx}{\mathbf{s}} \underset{\approx}{\mathbf{C}} \right)^{-1} \underset{\approx}{\mathbf{e}} = 0 .$$

Der zweite Summand ist aber gerade $\underset{\approx}{\mathbf{D}}$ ^[23], so daß die Gleichheit gilt, und, da sich ein schon bekannter Koeffizient $\underset{\approx}{\mathbf{D}}$ ergibt, sich damit die Koeffizientengleichungen (5.39) und (5.40) der vollen Greensfunktion als richtig erweisen.

[23] Diese Form der Bestimmungsgleichung ergibt sich anstelle von (5.26), wenn die Dyson-Gleichung $G = G_e + G V G_e$ anstatt $G = G_e + G_e V G$ zur Bestimmung von $\underset{\approx}{\mathbf{D}}$ gewählt wird.

Nun stehen die Zustände und Propagatoren, dargestellt in der Drehimpulsbasis, für die Matrixelement- sowie Verluststromberechnung zur Verfügung. Durch die Entwicklung der Zustände und Propagatoren nach Drehimpulsen ist es nun erforderlich, auch die Matrixelementberechnung (3.19, 3.20) und (3.49) in dieser Basis darzustellen, was Gegenstand der nächsten Kapitel 6.1 und 6.2 sein soll.

6. Die Übergangsmatrixelemente

In den nun folgenden Kapiteln 6.1 und 6.2 werden die im Goldenen-Regel-Formalismus und im Verluststrommodell benötigten Übergangsmatrixelemente in der Drehimpulsentwicklung dargestellt.

6.1. DIE ÜBERGANGSMATRIXELEMENTE DES GOLDENEN-REGEL-FORMALISMUS

Die Integration in (3.18) erstreckt sich über das Gebiet der für die betrachtete Schicht repräsentativen Wigner-Seitz-Einheitszelle mit dem Volumen V_{uc} , in welcher sich der Ursprung des Koordinatensystems der Schicht befindet. Innerhalb dieser Zelle ist das Potential aufgeteilt in einen sphärischen Muffin-Tin-Anteil und einen Anteil, den Zwischen-Muffin-Tin-Bereich, in dem das Potential konstant ist. Im Bereich der sphärischen Symmetrie sind die Zustände nach Drehimpulsen entwickelt und in der Form (5.1) gegeben. Außerhalb des Bereichs des sphärischen Muffin-Tin-Potentials liegen sie in der Form (5.7) vor. Dadurch wird auch die Ortsraum-Integration in der Matrixelementberechnung in diese Bereiche unterteilt

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^j(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}) := \mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{MT,j}(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}) + \mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{IS,j}(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'}) .$$

Bei der Berechnung von $\mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{MT,j}(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'})$ erstreckt sich die Integration über das Muffin-Tin-Volumen V_{MT} und für $\mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{IS,j}(\pm\mathbf{q}_{\beta\beta'})$ über das Gebiet $V_{uc} \setminus V_{MT}$. Letzteres ist gerade jenes, in welchem das Potential konstant ist.

Im Gegensatz zu Kapitel 5 ist nun wieder die Spinabhängigkeit, verursacht durch $V_{xc}^{eff,\uparrow} \neq V_{xc}^{eff,\downarrow}$, zu berücksichtigen. In Kapitel 5 wurde wegen der spinunabhängigen elastischen Wechselwirkung und der vernachlässigbaren Spin-Bahnkopplung von der Spinnotierung abgesehen. Hier nun sind bei Austauschstreu Prozessen Änderungen des Spins möglich, so daß eine Spinindizierung erfolgen muß.

Aufgrund des zeitumgekehrten LEED-Zustandes sind die Matrixelemente M_{21} und M_{23} , an deren Berechnung dieser Zustand beteiligt ist, zu unterscheiden von M_{43} und M_{41} . Der zeitumgekehrte LEED-Zustand hat im Gegensatz zu (5.1) die Darstellung ($L:=(l,m)$)

$$\phi_{E_2, \mathbf{k}_{2//}}^{j, \eta_2}(\mathbf{r}) = \psi_{E_2, -\mathbf{k}_{2//}}^{j, \eta_2 *}(\mathbf{r}) = \sum_{L_2} A_{L_2}^{\eta_2, j *} J_{L_2}^{\eta_2 *} (k_2 r) Y_{L_2}^*(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6.1)$$

mit der Amplitude des zeitumgekehrten Zustands $A_{L_2}^{\eta_2,j} = A_{L_2}^{\eta_2,j}(E_2, -\mathbf{k}_2//)$. Im Gebiet V_{MT} sind die Matrixelemente, an denen der zeitumgekehrte LEED-Zustand (6.1) beteiligt ist, $M_{2\alpha'}^{MT,j}(\mathbf{q}_{\beta\beta'})$ mit $\alpha' = 1, 3$. Sie werden berechnet mit $(\beta, \beta') = (2, 1)$, falls $\alpha' = 1$ ist, oder mit $(\beta, \beta') = (1, 4)$, falls $\alpha' = 3$ ist. Die damit verbundenen Propagationen im Ortsraum und die dadurch stattfindenden Impulsüberträge sind unmittelbar an Bild 2 abzulesen. Setzt man die Zustände der Form (6.1) und (5.1) in (3.18) ein, erhält man

$$M_{2\alpha'}^{MT,j}(\mathbf{q}_{\beta\beta'}) = \sum_{L_2, L, L_{\alpha'}} \mathcal{A}_{L_2, L, L_{\alpha'}}^{T, \eta_2 \eta_{\alpha'}, j} \mathcal{R}_{l_2, l, l_{\alpha'}}^{T, \eta_2 \eta_{\alpha'}} \Omega_{L_2, L, L_{\alpha'}}^T \quad (6.2)$$

Dabei entsteht durch die analytisch ausführbare Raumwinkelintegration der durch den zeitumgekehrten LEED-Zustand modifizierte Gaunt-Koeffizient ($H.3$) $\Omega_{L_2, L, L_{\alpha'}}^T$. Das Radialintegral $\mathcal{R}_{l_2, l, l_{\alpha'}}^{T, \eta_2 \eta_{\alpha'}}$ ist in (F.1) dargestellt und muß numerisch ausgeführt werden. Die Amplituden der einzelnen Zustände werden in dem Produkt

$$\mathcal{A}_{L_2, L, L_{\alpha'}}^{T, \eta_2 \eta_{\alpha'}, j} := A_{L_2}^{\eta_2, j} \Delta_L(+\hat{\mathbf{q}}_{\beta\beta'}) A_{L_{\alpha'}}^{\eta_{\alpha'}, j}$$

mit

$$\Delta_L(\pm \hat{\mathbf{q}}_{\beta\beta'}) := 4\pi i^l (-1)^m Y_l^{-m}(\pm \hat{\mathbf{q}}_{\beta\beta'}) \quad (6.3)$$

zusammengefaßt. Zur Summation aller auftretenden $L_2, L, L_{\alpha'}$ -Kombinationen, die einen Gaunt-Koeffizienten ungleich null haben, kann man einen Sammelindex definieren, $L_2, L, L_{\alpha'} \rightarrow \nu_{2\alpha'}$, der alle diese Kombinationen zu einem langen Index-Vektor zusammenfaßt. Dies hat bei einem Vektorrechner zur Folge, daß die $L_2, L, L_{\alpha'}$ Summationen vektorisieren und somit schnell ausgeführt werden können. Es ist möglich, auch für die Radialintegrale einen solchen Sammelindex zu verwenden, da die Kombinationen $l_2, l, l_{\alpha'}$ von $m_2, m, m_{\alpha'}$ unabhängig sind. Es müssen also nur soviel Radialintegrale ausgeführt werden, wie es verschiedene $l_2, l, l_{\alpha'} \rightarrow \mu_{2\alpha'}$ -Kombinationen gibt, bei denen die zugehörigen Gaunt-Koeffizienten ungleich null sind.

Die Matrixelemente, an denen der Zustand 2 nicht beteiligt ist, sind $M_{4\alpha'}^{MT,j}(\mathbf{q}_{\beta\beta'})$ mit $(\beta, \beta') = (2, 1)$, falls $\alpha' = 3$, und mit $(\beta, \beta') = (1, 4)$, falls $\alpha' = 1$ ist. Einsetzen der Zustände (5.1, 6.1) in (3.18) ergibt die Darstellung

$$M_{4\alpha'}^{MT,j}(-\mathbf{q}_{\beta\beta'}) = \sum_{L_4, L, L_{\alpha'}} \mathcal{A}_{L_4, L, L_{\alpha'}}^{\eta_4 \eta_{\alpha'}, j} \mathcal{R}_{l_4, l, l_{\alpha'}}^{\eta_4 \eta_{\alpha'}} \Omega_{L_4, L, L_{\alpha'}} \quad (6.4)$$

Nun treten wegen des fehlenden zeitumgekehrten LEED-Zustandes die in (H.1) definierten Gaunt-Koeffizienten $\Omega_{L_4, L, L_{\alpha'}}$ als Ergebnis der Raumwinkelintegration auf. Die Radialintegrale $\mathcal{R}_{l_2, l, l_{\alpha'}}^{\eta_4 \eta_{\alpha'}}$ sind in (F.2) ausgeführt. Die Amplituden werden wieder mit Hilfe eines Sammelindex $L_2, L, L_{\alpha'} \rightarrow \nu_{2\alpha'}$ zusammengefaßt zu

$$\mathcal{A}_{L_4, L, L_{\alpha'}}^{\eta_4 \eta_{\alpha'}, j} := A_{L_4}^{\eta_4, j*} \Delta_L(-\hat{\mathbf{q}}_{\beta\beta'}) A_{L_{\alpha'}}^{\eta_{\alpha'}, j}.$$

Wurde bisher über den sphärischen Teil des Potentialbereichs integriert, so soll nun die Integration im Zwischen-Muffin-Tin-Bereich ausgeführt werden. Dort können die Zustände nach ebenen Wellen entwickelt werden (5.7). Nimmt man näherungsweise an, daß das Volumen der Einheitszelle ebenfalls sphärisch ist, aber nun mit dem Volumen der Wigner-Seitz-Einheitszelle, so lassen sich die Matrixelemente analytisch auswerten. Eine Integration über das tatsächliche Wigner-Seitz-Polygonvolumen bedarf aber wegen der komplizierten Ränder dieses Bereichs einer umfangreichen Behandlung der Integrationsgrenzen. Für erste Abschätzungen des Beitrags des Zwischen-Muffin-Tin-Bereichs zu den Matrixelementen sollte die Näherung des Volumens durch eine Kugel ausreichen.

Die Integration in den Matrixelementen über den Zwischen-Muffin-Tin-Bereich ist im Anhang F dargestellt und hat das Ergebnis

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha'}^{IS, j}(\mathbf{q}_{\beta\beta'}) := (\underline{\mathbf{u}}_j^{+, \eta_{\alpha}}, \underline{\mathbf{v}}_j^{-, \eta_{\alpha}})^* \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{I}}^{++} & \underline{\mathbf{I}}^{+-} \\ \underline{\mathbf{I}}^{-+} & \underline{\mathbf{I}}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{u}}_j^{+, \eta_{\alpha'}} \\ \underline{\mathbf{v}}_j^{-, \eta_{\alpha'}} \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

wobei (G.1)

$$I_{\alpha, \alpha'}^{s, s'} := 4\pi R_{WS}^2 \frac{j_1(Q_{\alpha, \alpha'}^{s, s'} R_{WS})}{Q_{\alpha, \alpha'}^{s, s'}} - 4\pi R_{MT}^2 \frac{j_1(Q_{\alpha, \alpha'}^{s, s'} R_{MT})}{Q_{\alpha, \alpha'}^{s, s'}} \quad (6.6)$$

verwendet wird und $s, s' = \pm$ definiert ist. R_{WS} ist der Radius der Kugel mit dem Volumen der Wigner-Seitz-Einheitszelle, R_{MT} der Radius der Muffin-Tin-Kugel. Mit der Größe

$$\mathbf{Q}_{\alpha, \alpha'}^{s, s'} := \mathbf{k}_{\mathbf{g}_{\alpha'}} - \mathbf{k}_{\mathbf{g}_{\alpha}} \pm \mathbf{q}_{\beta\beta'} \quad (6.7)$$

gehen der Impulsübertrag, den das einfallende, vom Experiment präparierte Elektron abgibt oder das aus dem Kristall austretende aufnimmt, und der Übertrag,

den das Gitter in Folge der gebrochenen Translationssymmetrie mit $\mathbf{q}_{\beta\beta'}$ zur Verfügung stellt, in die Matrixelementberechnung ein.

Mit (6.2) und (6.4) ist es nun möglich, die letzten noch ausstehenden Teile der Auswertung der Übergangsmatrixelemente in Form der Ortsraumintegration und Drehimpulssummationen auszuführen. Die inelastische Elektronenstreuung an Festkörperoberflächen erscheint somit theoretisch im Rahmen des Goldene-Regel-Formalismus berechenbar.

6.2. DIE MATRIXELEMENTE IN DEN VERLUSTSTRÖMEN

Es bleibt nun noch, die Matrixelemente der Verlustströme (3.49a–3.49g) in der Drehimpulsbasis zu entwickeln. Dabei werden die Zustände in der Form (5.1) oder für den zeitumgekehrten LEED-Zustand (6.1) sowie die Greensfunktionen mit (5.37) verwendet. Die dann verbleibenden ortsabhängigen Matrixelement-Integrationen reduzieren sich bei der Berechnung der Verlustströme auf eine Integration über die Wigner-Seitz-Einheitszelle des betrachteten Kristalls. Diese Integration kann wieder in den Muffin-Tin-Bereich unterteilt werden, in dem das Potential sphärische Symmetrie besitzt, und den Zwischen-Muffin-Tin-Bereich.

Der Beitrag des Zwischen-Muffin-Tin-Bereichs zum Verluststrom wurde bisher noch nicht entwickelt. Prinzipiell ist er mit der im Anhang F dargestellten Methode zu berechnen, es sind aber noch weitere Untersuchungen, insbesondere numerische Abschätzungen der Größenordnung der zu erwartenden Beiträge, nötig.

Die Ortsraumintegration innerhalb der Muffin-Tin-Kugel separiert wieder in die Radialintegrale und die Integrale über den Raumwinkel. Letztere können analytisch ausgeführt werden und ergeben (H.1) sowie (H.3).

Die Matrixelementberechnung für den Strom j_1 in (3.45) ergibt dann die Anteile (3.49a), was nach Drehimpulsen entwickelt lautet

$$M_{12}^{j_3, \sigma_1}(\mathbf{q}_{12}) = \sum_{L, L_1, L_2} A_{L_2}^{j_3, \sigma_1 *} \Delta_L(\hat{\mathbf{q}}_{12}) A_{L_1}^{j_3, \sigma_1 *} \mathcal{R}_{12; l_1, l, l_2}^{\sigma_1}(\mathbf{q}_{12}) \Omega_{L, L_1, L_2} \quad (6.8)$$

und (3.49b)

$$M_{21}^{j_3, \sigma_1}(\mathbf{q}'_{21}) = \sum_{L, L_1, L_2} A_{L_2}^{j_2, \sigma_1} \Delta_L(\hat{\mathbf{q}}'_{21}) A_{L_1}^{j_2, \sigma_1} \mathcal{R}_{21; l_1, l, l_2}^{\sigma_1}(\mathbf{q}'_{21}) \Omega_{L_2, L, L_1}^T \quad (6.9)$$

sowie (3.49c)

$$\begin{aligned} M_{34}^{j_4, j_5; \sigma_4}(-\mathbf{q}_{12}, -\mathbf{q}'_{21}) = & \sum_{L, L', L_3, L'_3, L_4, L'_4} \Delta_{L'}(-\hat{\mathbf{q}}_{12}) \Delta_L(-\hat{\mathbf{q}}'_{21}) \\ & \times (\mathcal{R}_{34; l_3, l, l', l_4}^{1, \sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} \delta_{L_4, L'_4} \\ & + \mathcal{R}_{34; l_3, l, l'_4, l_4, l'}^{2, \sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} D_{L_4, L'_4}^{j_4, \sigma_4} \\ & + \mathcal{R}_{34; l'_3, l, l_4, l', l_3}^{3, \sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) \delta_{j_5, j_4} D_{L_3, L'_3}^{j_4, \sigma_4 *} \delta_{L_4, L'_4} \\ & + \mathcal{R}_{34; l'_3, l, l'_4, l_4, l', l_3}^{4, \sigma_4}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{21}) G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_4 *} G_{L_4, L'_4}^{j_5, j_4; \sigma_4}) \\ & \times \Omega_{L'_3, L, L'_4} \Omega_{L_4, L', L_3} \end{aligned} \quad (6.10)$$

Dabei ist $\Delta_L(\hat{\mathbf{q}})$ in (6.3) erklärt. Die Radialintegrale ($\mathcal{R}_{\dots}$) sind in (F.3–F.8) im Anhang E dargestellt. Die Propagation des Elektrons innerhalb einer Schicht berücksichtigt die Strukturkonstante $D_{\dots}$ aus (5.26), die Propagation zwischen verschiedenen Schichten ist in $G_{\dots}$ (5.39) enthalten.

Der unter anderem für die Spin-Flip-Prozesse verantwortliche Strom j_2 , erklärt in (3.46), enthält M_{14} , definiert in (3.49d), was nach Drehimpulsen entwickelt lautet

$$\begin{aligned} M_{14}^{j_2 j_3, \sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{41}) = & \sum_{L, L', L_1, L'_1, L_4, L'_4} A_{L_1}^{j_3, \sigma_1 *} A_{L'_1}^{j_2, \sigma_1} \Delta_{L'}(\hat{\mathbf{q}}_{14}) \Delta_L(\hat{\mathbf{q}}'_{41}) \\ & \times (\mathcal{R}_{14; l_4, l'_1, l_1, l'_4}^{1, \sigma_1}(q_{14}, q'_{41}) \delta_{j_3, j_2} \delta_{L_4, L'_4} \\ & + \mathcal{R}_{14; l'_4, l'_1, l_1, l'_4}^{2, \sigma_1}(q_{14}, q'_{41}) G_{L_4, L'_4}^{j_3, j_2; \sigma_1}) \\ & \times \Omega_{L'_4, L, L'_1} \Omega_{L_1, L', L_4} \end{aligned} \quad (6.11)$$

und (3.49e)

$$\begin{aligned} M_{23}^{j_4 j_5, \sigma_4}(-\mathbf{q}_{14}, -\mathbf{q}'_{41}) = & \sum_{L, L', L_2, L'_2, L_3, L'_3} A_{L_2}^{j_5, \sigma_4 *} A_{L'_2}^{j_4, \sigma_4} \Delta_{L'}(-\hat{\mathbf{q}}_{14}) \Delta_L(-\hat{\mathbf{q}}'_{41}) \\ & \times (\mathcal{R}_{23; l'_3, l'_2, l', l, l_2}^{1, \sigma_4}(q_{14}, q'_{41}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} \\ & + \mathcal{R}_{23; l'_3, l'_2, l', l, l_2, l_3}^{2, \sigma_4}(q_{14}, q'_{41}) G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_4 *}) \\ & \times \Omega_{L'_3, L'_2, L'}^T \Omega_{L, L_2, L_3} \end{aligned} \quad (6.12)$$

mit den im Anhang E definierten Radialintegralen (F.9–F.12).

Die Matrixelemente für j_3 in der Drehimpulsbasis sind M_{12} , erklärt in (3.49a), was schon in (6.8) behandelt wurde, und M_{2341} , definiert in (3.49f), was, in der

Drehimpulsbasis entwickelt,

$$\begin{aligned}
M_{2341}^{j_2, j_4 j_5, \sigma_1}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{q}'_{41}) = & \sum_{L, L', L'', L_1, L_2, L_3, L'_3, L_4, L'_4} A_{L_2}^{j_4, \sigma_1} \Delta_{L'}(-\hat{\mathbf{q}}'_{41}) \\
& \times \Delta_L(-\hat{\mathbf{q}}_{12}) \Delta_{L''}(\hat{\mathbf{q}}'_{41}) A_{L_1}^{j_2, \sigma_1} \\
& \times (\mathcal{R}_{2341; l_4, l''_4, l_1, l'_1, l'_2, l_3, l}^{1, \sigma_1}(q_{12}, q'_{41}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{j_5, j_2} \delta_{L_3, L'_3} \delta_{L_4, L'_4} \\
& + \mathcal{R}_{2341; l'_4, l''_4, l_1, l'_1, l'_2, l_3, l_4, l}^{2, \sigma_1}(q_{12}, q'_{41}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} G_{L_4, L'_4}^{j_5, j_2; \sigma_1} \\
& + \mathcal{R}_{2341; l_4, l''_4, l_1, l'_1, l'_2, l'_3, l, l_3}^{3, \sigma_1}(q_{12}, q'_{41}) \delta_{j_5, j_2} G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_1 *} \delta_{L_4, L'_4} \\
& + \mathcal{R}_{2341; l'_4, l''_4, l_1, l'_1, l'_2, l'_3, l_4, l, l_3}^{4, \sigma_1}(q_{14}, q'_{41}) G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_1 *} G_{L_4, L'_4}^{j_5, j_2; \sigma_1}) \\
& \times \Omega_{L'_4, L'', L_1} \Omega_{L', L_2, L'_3} \Omega_{L_4, L, L_3}
\end{aligned} \tag{6.13}$$

ergibt. Der Verluststrom j_4 enthält das schon in (6.9) dargestellte Matrixelement M_{21} sowie zusätzlich M_{1432} , welches mit den Radialintegralen (F.17–F.20) in der Drehimpulsdarstellung

$$\begin{aligned}
M_{1432}^{j_3, j_4 j_5, \sigma_1}(\mathbf{q}_{14}, \mathbf{q}'_{21}) = & \sum_{L, L', L'', L_1, L_2, L_3, L'_3, L_4, L'_4} A_{L_2}^{j_5, \sigma_1 *} \Delta_L(\hat{\mathbf{q}}_{14}) \\
& \times \Delta_{L'}(-\hat{\mathbf{q}}'_{21}) \Delta_{L''}(-\hat{\mathbf{q}}_{14}) A_{L_1}^{j_3, \sigma_1} \\
& \times (\mathcal{R}_{1432; l_1, l, l_4, l_3, l', l_2, l''_4}^{1, \sigma_1}(q_{14}, q'_{21}) \delta_{j_3, j_4} \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} \delta_{L_4, L'_4} \\
& + \mathcal{R}_{1432; l_1, l, l_4, l'_3, l', l_2, l''_4, l_3}^{2, \sigma_1}(q_{14}, q'_{21}) \delta_{j_3, j_4} G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_1 *} \delta_{L_4, L'_4} \\
& + \mathcal{R}_{1432; l_1, l, l_4, l_3, l', l'_4, l_2, l''_4}^{3, \sigma_1}(q_{14}, q'_{21}) \delta_{j_5, j_4} \delta_{L_3, L'_3} G_{L_4, L'_4}^{j_3, j_4; \sigma_1} \\
& + \mathcal{R}_{1432; l_1, l, l_4, l'_3, l', l'_4, l_2, l''_4, l_3}^{4, \sigma_1}(q_{14}, q'_{21}) G_{L_3, L'_3}^{j_5, j_4; \sigma_1 *} G_{L_4, L'_4}^{j_3, j_4; \sigma_1}) \\
& \times \Omega_{L_1, L, L_4} \Omega_{L'_3, L', L'_4} \Omega_{L_2, L'', L_3}
\end{aligned} \tag{6.14}$$

lautet.

Auch hier bietet sich an, einen die verschiedenen L_i -Kombinationen beinhaltenden Sammelindex-Vektor zu definieren, der nur die Kombinationen berücksichtigt, die ein Produkt von Gaunt-Koeffizienten ungleich Null ergeben. Dies ermöglicht es, die $L := (l, m)$ -Summationen auf einem Vektorrechner vektorisierbar zu gestalten.

7. Anwendungen

Nun werden die im Kapitel 3 entwickelten Theorien der inelastischen Elektronenstreuung angewendet. Für den Goldene-Regel-Formalismus wird in Kapitel 7.1 dargestellt, warum eine Berechnung an einem Kristall mit Oberfläche am zu großen Rechenzeitbedarf scheitert.

Auf der Grundlage des Verluststrommodells aus Kapitel 3.2 wurde ein FORTRAN-Programm erstellt, welches die Verlustströme j_1 aus (3.45) und j_2 aus (3.46) mit den Matrixelementen (6.8–6.12), entwickelt in der Drehimpulsbasis, zu berechnen erlaubt. Der Verluststromformalismus wird an einer Al-(100)-Oberfläche angewendet. Die dabei eingehenden Potentiale und Parameter werden in Kapitel 7.2.1 erklärt und in 7.2.2, wie auch die Konvergenz der Summationen, untersucht. Die Ergebnisse konkreter Rechnungen werden dann in Kapitel 7.2.3 und 7.2.4 diskutiert.

7.1. DER GOLDENE-REGEL-FORMALISMUS

Im Goldene-Regel-Formalismus gehen die Zustände der an der inelastischen Streuung beteiligten Elektronen in die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten (3.19, 3.20) ein. Für die Festkörperzustände 3 und 4 (siehe Bild 2) ist die Konstruktion von Halbraumzuständen, die eine Berücksichtigung einer Oberfläche ermöglichen, notwendig. Eine Voraussetzung der in Kapitel 5.5 entwickelten Methode war, daß das Potential der elastischen Elektron-Elektron-Wechselwirkung rein reell sein muß, andernfalls existieren keine Lösungen des Gleichungssystems (siehe Kapitel 3.3), welches man erhält, wenn die Volumenzustände stetig und mit stetiger Ableitung an der Oberfläche an außerhalb des Kristalls exponentiell abfallende Zustände angepaßt werden, um die Halbraumzustände zu bestimmen.

Aufgrund des damit fehlenden Imaginärteils des optischen Potentials folgt, daß man keinen Lochzustand mit der endlichen Lebensdauer eines Quasiteilchens in der Rechnung berücksichtigen kann. Dies wäre aber erforderlich, denn der Zustand 3 ist ein durch die inelastische Anregung entstandenes Loch. Der Zustand 4 beschreibt einen durch die inelastische Streuung entstandenen angeregten Zustand, was ebenfalls nicht durch einen Imaginärteil im Potential Berücksichtigung finden kann. Man muß somit die angeregten Zustände durch Zustände ersetzen, die aus einem Grundzustandspotential berechnet wurden, welches seinerseits mit der Dichte-Funktional-Theorie ermittelt werden kann.

Ein weiterer Nachteil entsteht dadurch, daß man auf die glättende Wirkung von V_{opt}^i auf LEED-IV-Spektren oder Zustandsdichten verzichten muß. Glättend heißt, daß scharfe Maxima aufgrund der Lebensdauerverbreiterung, die durch $(2|V_{opt}^i|)^{-1} = \tau$ in den Rechnungen enthalten ist, eine lorentzartige Verbreiterung und Abschwächung erfahren. Dieser Effekt wird zum Beispiel in Bild 22b) deutlich. Dort sind die $\mathbf{k}_{3//}$ -aufgelösten Volumenzustandsdichten eines Aluminiumkristalls für $\mathbf{k}_{3//}^1$ (siehe Inset von Bild 22), dem ersten speziellen Punkt in der Oberflächenbrillouinzone, für $V_{opt}^i = 0$ und in Bild 22c) für $V_{opt}^i \neq 0$ dargestellt. Zur Berechnung der Zustandsdichte in Bild 22c) wurde dabei $\Im(\Sigma(E)) = V_{opt}^i(E)$ nach Lundqvist (1969) verwendet.

Bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten (3.19, 3.20) an einer Fe(110)-Oberfläche zeigte sich, daß (3.19, 3.20), an verschiedenen speziellen Punk-

ten $\mathbf{k}_{3//}^{sp}$ (siehe Anhang D) der Oberflächenbrillouinzone ausgewertet, sich um bis zu zwei Zehnerpotenzen unterschieden haben. Dies wird verursacht durch die Stromnormierung (3.10), die notwendig ist, um die in der Goldenen Regel enthaltenen Zustandsdichten (3.2, 3.9) in der Rechnung zu berücksichtigen. Dadurch werden die Zustände abhängig von einer Größe, die starken Schwankungen unterworfen ist. Sind Elektronen zum Beispiel stark lokalisiert, die Bänder somit flach und der Strom, den die Elektronen tragen, klein, was insbesondere dann der Fall ist, wenn die Bänder im Rand der Volumenbrillouinzone enden, so wird die Zustandsdichte groß. Mit $V_{opt}^i = 0$ sind die Zustandsdichten wegen $j_z \rightarrow 0$ aus (3.10) dann singulär. Da aber über die Dichte der Anfangszustände $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ summiert werden muß, insbesondere über die Oberflächenbrillouinzone von $\mathbf{k}_{3//}^{sp} \neq 0$, wobei die dazugehörigen Bänder öfter im Volumenbrillouinzone-Rand enden als mit $\mathbf{k}_{3//}^{sp} = 0$, erfordern die großen Schwankungen in den Zustandsdichten eine große Anzahl von Integrations-Stützstellen. Die "spezielle Punkte Methode" zur $\mathbf{k}_{3//}$ -Oberflächenbrillouinzone-Integration aus Anhang D ist bei starken Schwankungen des Integranden nicht mehr effektiv anwendbar. Somit verursacht der fehlende Imaginärteil im optischen Potential einen numerisch unverträglich hohen Aufwand zur Auswertung der inelastischen Elektronenstreuung an Festkörperoberflächen mit dem Goldene-Regel-Formalismus.

Dies war der Grund, warum ein anderer Formalismus (in Kapitel 3.2) entwickelt wurde, nämlich die Berechnung der Verlustströme mit den Selbsteneinschieben 2. Ordnung und mit Hilfe der Greensfunktionen für die Halbraumzustände 3 und 4. Bei der Konstruktion dieser Greensfunktionen ist es möglich, einen Imaginärteil im elastischen Wechselwirkungspotential zu berücksichtigen, so daß seine glättende Wirkung ausgenutzt werden kann.

7.2. DIE AUSWERTUNG DER VERLUSTSTRÖME AN EINER AL(100)-OBERFLÄCHE

7.2.1. DIE POTENTIALE

Zu ersten Untersuchungen des Verluststrommodells wurde eine Aluminium-(100)-Oberfläche gewählt.

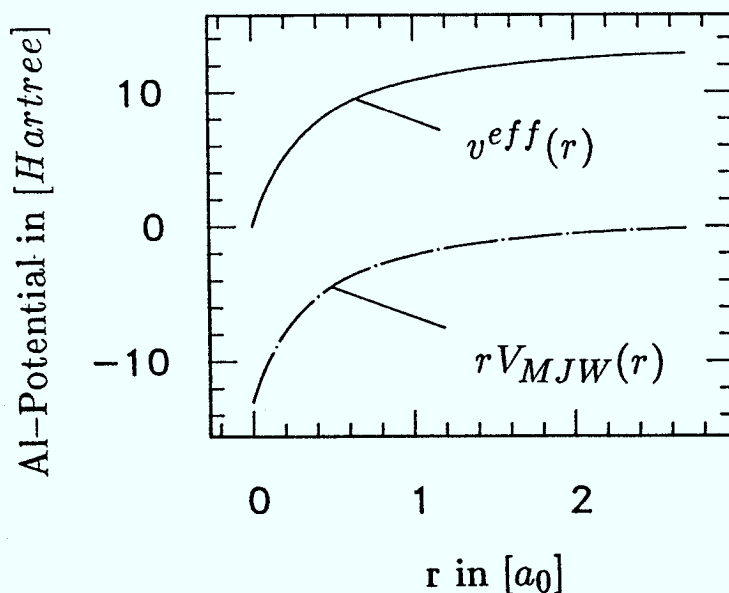


Bild 18: Das von Moruzzi, Janak, Williams (1978) berechnete Aluminium-Grundzustandspotential $Z(r) = -rV_{MJW}(r)$. Aufgetragen sind das in (5.3) benötigte $v^{eff}(r) = rV_{MJW}(r) + Z$ sowie $rV_{MJW}(r)$.

Bisherige Experimente zeigten, daß an dieser Oberfläche keine Rekonstruktionen entstehen (van Hove et al.(1986)).

Ein weiterer Grund, Aluminium zu wählen, ist seine Eigenschaft, sich im Leitungsbandbereich wie ein nahezu freies Elektronengas zu verhalten. Das heißt, die im Goldenen-Regel-Formalismus Schwierigkeiten bereitende Zustandsdichte ergibt beim nahezu freien Elektronengas weitaus weniger Singularitäten als zum Beispiel beim Eisen mit seinen flachen d-Bändern, die zudem noch austauschungs- und aufgespalten sind. Prinzipiell ist es mit dem Verluststrommodell nun möglich, die inelastische Elektronenstreuung auch an Eisenoberflächen zu berechnen. Um erste Erfahrungen zu sammeln, erscheint jedoch eine Aluminium Oberfläche geeigneter.

Mit Aluminium hat man eher die Möglichkeit, die Spektren der inelastischen Elektronenstreuung zu interpretieren und sie zum Beispiel dem Verhalten der Bänder und Zustandsdichten zuzuordnen.

Für die elastische Wechselwirkung wurde das mit Dichte-Funktional-Theorie in der Lokalen-Dichte-Näherung von Moruzzi, Janak, Williams (1978) berechnete Grundzustandspotential von Aluminium im Bereich $0 \leq r \leq R_{MT} = 2.687005a_0$, dargestellt in Bild 18, verwendet.

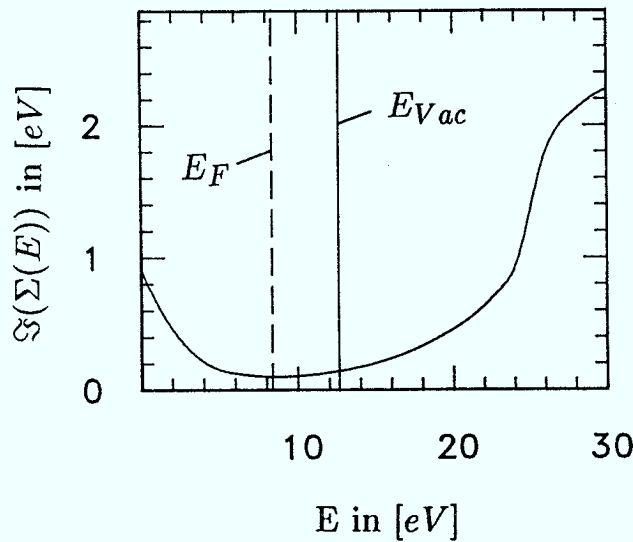


Bild 19: Der Imaginärteil der Selbstenergie eines homogenen Elektronengases mit der Dichte von Aluminium, berechnet von Lundqvist (1969). Dabei ist nach Moruzzi, Janak, Williams (1978) $E_F = 8.395\text{eV}$ und nach Ashcroft, Mermin (1975) $E_{Vac} = 12.65\text{eV}$. Aus numerischen Gründen kann auch bei E_F nicht auf die glättende Wirkung von V_{opt}^i verzichtet werden, daher wurde noch ein bezüglich der Energie konstanter Imaginärteil zu V_{opt}^i von Lundqvist (1969) hinzuaddiert.

Der energieabhängige Imaginärteil des elastischen Wechselwirkungspotentials $V_{opt}^i(E) = \Im(\Sigma(E))$, siehe Bild 19, wurde aus Lundqvist (1969) entnommen. Da-

mit ist für die angeregten Zustände und Greensfunktionen eine Lebensdauer in der Rechnung berücksichtigt.

7.2.2. EINIGES ZUR KONVERGENZ

Das inelastische Wechselwirkungspotential geht fouriertransformiert in die Berechnung des Verluststroms (3.45–3.48) ein.

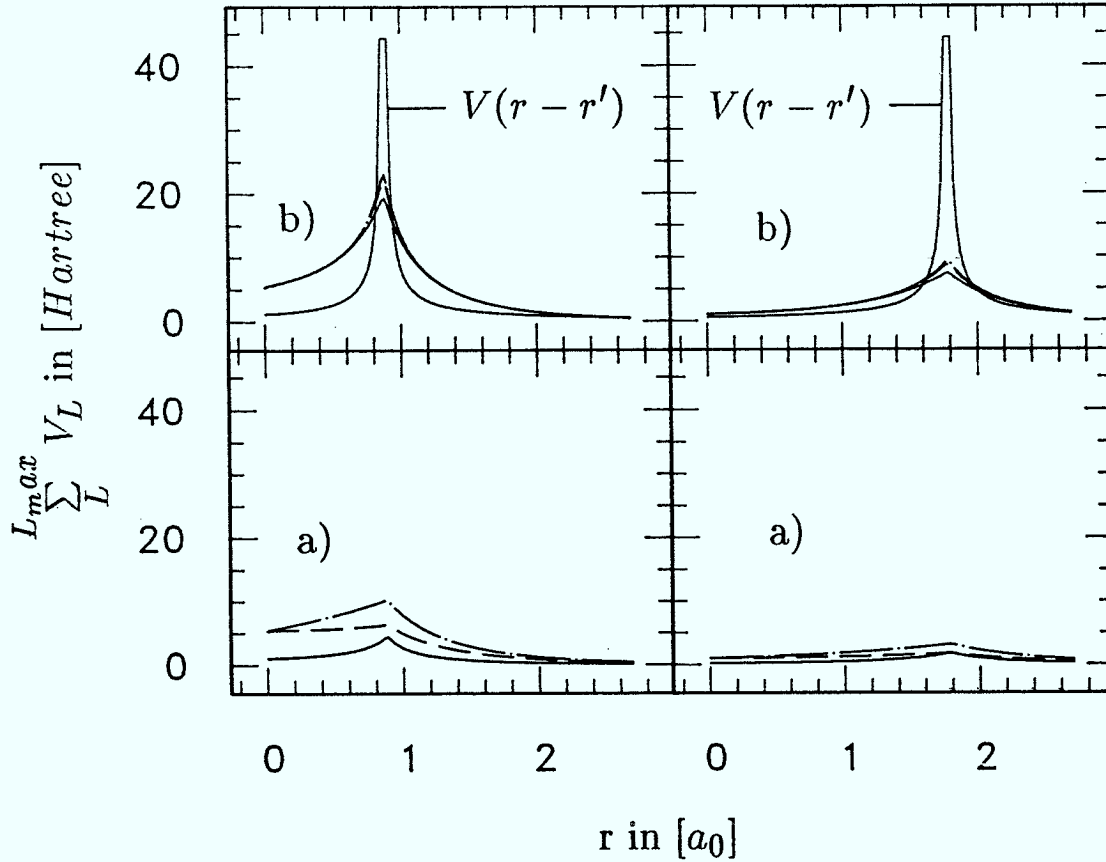


Bild 20: Der Radialanteil der Drehimpulsentwicklung von (2.5). Es sind das volle Potential dargestellt sowie a)(b): $V(r, r') = \sum_{L=0}^{L_{max}} V_L(r, r')$ mit $l_{max} = 1, (6)$ (—), $l_{max} = 2, (10)$ (- - -) und $l_{max} = 4, (14)$ (- · - · -). Im linken Teil des Bildes liegt die r' -Singularität des Potentials näher am Ursprung.

Durch die Drehimpulsentwicklung der Matrixelemente (6.8–6.14) werden die Phasen der Fourierentwicklung ebenfalls in dieser Basis (A.14) entwickelt, so daß die Einwirkung des fouriertransformierten inelastischen Wechselwirkungspotentials

(2.5) auf die Verlustströme in Abhängigkeit der maximal in der Entwicklung mitgenommenen Ordnung studiert werden kann. Dabei hat das Potential die Form $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \sum_L^{L_{max}} \int v_L(r, r'; q) q^2 dq Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}')$, und es ist für $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}' = konst.$ der Radialanteil $V(r, r') = \sum_L^{L_{max}} \int V_L(r, r'; q) q^2 dq = \sum_L^{L_{max}} V_L(r, r')$ in Bild 20 aufgetragen. In der Berechnung der Verlustströme wurde $l_{max}^{pot} = 1, 2, 4$ gewählt. $l_{max}^{pot} = 1$ bedeutet, daß man eine dipolartige Wechselwirkung hat.

Wenn r' nahe am Ursprung liegt, erkennt man aus Bild 20, daß die Güte der Entwicklung in der Nähe der Singularität zunimmt und das Verhalten des genäher-ten Potentials dem tatsächlichen Potential besser entspricht. Dies ist dadurch zu erklären, daß die Drehimpulsentwicklung des (abgeschirmten) Coulombpotentials nach Sommerfeld (1978) extrem langsam konvergiert^[24]. Durch die Nichtlokalität des Potentials erhält man eine asphärische Form, die sich schlecht nach Drehimpulsen entwickeln läßt. Die Ähnlichkeit mit dem vollen Potential nimmt ab, je weiter r' vom Ursprung des Koordinatensystems entfernt ist, je asphärischer $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ also ist.

Die schlechte Konvergenz hat aber, wie im Folgenden gezeigt wird, keine Auswirkungen. Bei der Matrixelementberechnung sind bezüglich der Konvergenz der Drehimpulsentwicklung die mit den Gaunt-Koeffizienten gültigen Auswahlregeln (H.2) hilfreich, denn bei Aluminium genügt für die Zustände $l_{max} = 1$, um sie für niedrige Energie ausreichend konvergiert darzustellen. Das heißt aber für die Wechselwirkung zum Beispiel zwischen den Zuständen 3 und 4, daß nach (H.2) $|l^{pot} - l_4| \leq l_3 \leq l^{pot} + l_4$ ist und die obere Schranke zur Entwicklung des Potentials dann $l_{max}^{pot} = 2$ ist. Höhere Ordnungen in der Entwicklung des Potentials ergeben Gaunt-Koeffizienten $\Omega_{L_3, L, L_4} = 0$, und damit tragen diese Matrixelemente nicht zum Verluststrom bei. Erst wenn ein Zustand $\alpha = 3, 4$ höherer Energie oder Elektronen eines Materials mit besetzten d-Bändern an der Streuung beteiligt sind, muß zu deren Entwicklung eine höhere Ordnung $l_{\alpha, max}$ zur ausreichend konvergierenden Darstellung des Zustands gewählt werden. Dies zwingt dann dazu, ein größeres $l_{max}^{pot} = 2l_{\alpha, max}$ zu verwenden.

^[24](2.6) ist die Greensfunktion von $\{-\Delta + k_0^T F^2\} G = 1$.

Diese Überlegung wird durch folgenden Umstand bestärkt. In Bild 25 sind für Elektronen mit 10eV Primärenergie und $\vartheta = -45^\circ, \varphi = 0^\circ$ Einfalls- wie $\vartheta = +45^\circ, \varphi = 0^\circ$ Austrittswinkel die Verlustströme j_1 und j_2 an einer Al(100)-Oberfläche für $l_{max}^{pot} = 1, 2, 4$ dargestellt. Für die Entwicklung der Zustände wurde dabei $l_{max} = 2$ gewählt. Man erkennt einen deutlichen Unterschied zwischen den mit $l_{max}^{pot} = 1$ und $l_{max}^{pot} = 2$ in der Potentialentwicklung berechneten Spektren, wohingegen sich das Spektrum mit $l_{max}^{pot} = 4$ wenig von dem mit $l_{max}^{pot} = 2$ berechneten unterscheidet. Für das Spektrum mit $l_{max}^{pot} = 4$ mußten weniger E_2 -Stützstellen gewählt werden, um die Rechenzeit in einem vertretbaren Maß zu belassen. Der geringe Unterschied der mit $l_{max}^{pot} = 2, 4$ berechneten Spektren bestätigt, daß zur Entwicklung der Zustände im Aluminium für diese Energiebereiche $l_{max} = 1$ ausreicht. Leider wird der Rechenaufwand dabei nicht wesentlich verändert, denn die meiste Rechenzeit verschlingen die Matrixelementberechnungen und dort insbesondere die Radialintegrale.

Weiterhin zeigt Bild 27, daß die Verluststromberechnungen für die Al(100)-Oberfläche die erfreuliche Eigenschaft haben, schon mit 16 speziellen Punkten in der Oberflächenbrillouinzoneintegration (Anhang D) konvergente Ergebnisse zu liefern, denn die Spektren in Bild 27 mit 16 und 64 speziellen k_3 -Punkten unterscheiden sich wenig voneinander. Unter anderem liegen die Maxima an denselben Positionen, der Funktionsverlauf ist in beiden Fällen im Bereich $1\text{eV} \leq E_2 \leq 8\text{eV}$ sehr ähnlich.

In Tab. 2 sind noch weitere Parametersätze aufgeführt, für die Verlustströme berechnet wurden. Insbesondere hat sich für den betrachteten Energiebereich die Anzahl der q_z -Stützstellen (d.h. die Dichte der q_z -Stützstellen), siehe Tab. 2, im Bereich $-3.5a_0^{-1} \leq q_z \leq 4.5a_0^{-1}$ als ausreichend erwiesen. In diesem q_z -Integrationsbereich variiert der Integrand von (3.45–3.48) merklich, außerhalb fällt er zu null ab.

Wie im Folgenden erläutert (siehe das E_2, E_3 -Schema in Bild 29) wird, sind die Verlustströme nur im Bereich $E_2 = 1\text{eV}$ bis $E_2 = 8\text{eV}$ auswertbar. Die über diesen Bereich hinausgehend berechneten Ströme verlieren durch numerische Instabilitäten ihre Interpretierbarkeit. Zum Beispiel ist für den Bereich $E_2 = 8–10\text{eV}$ die Verlustenergie $\Delta E = E_1 - E_2$ klein. Daraus folgt, daß der E_3 -Integrationsbereich

ΔE ebenfalls klein ist. Da aber für jedes E_2 , an dem der Verluststrom berechnet wird, die Dichte der E_3 -Integrationsstützstellen gleich sein muß, denn kein E_2 ist vor einem E'_2 ausgezeichnet, entsteht für den Bereich $E_2 = 8 - 10 \text{ eV}$ die Situation, daß zu wenig E_3 -Stützstellen zur Verfügung stehen, um eine konvergente Integration auszuführen. Erhöht man die Dichte der E_3 -Stützstellen, so vergrößert sich der Bereich des interpretierbaren Verlustspektrums, und die Teile, die durch die numerischen Instabilitäten verursacht werden, verkleinern sich.

Der Teil der Spektren, in dem E_2 klein ist ($0-2 \text{ eV}$), muß ebenfalls kritisch interpretiert werden. Der Energieverlust ist in dieser Situation groß, das heißt, man schöpft die E_3 -Zustände, die angeregt werden und über die summiert wird, bis zum Muffin-Tin Energienullpunkt aus. In der Nähe dieses Energienullpunkts konvergiert aber die Gittersummation (A.16) für die Berechnung des Zustands 3 schlecht.

7.2.3. INFORMATIONEN ZU DEN ZUSTÄNDEN

In Bild 21 sind die LEED-IV-Spektren für die bei der Verluststromberechnung verwendete Streugeometrie dargestellt. Die (x,z) -Streuebene ist eine Spiegelebene des Kristalls, siehe Bild 34, ebenso die (y,z) -Ebene, so daß ein LEED-IV-Spektrum mit $\vartheta = +45^\circ$ und $\varphi = 0^\circ$ dasselbe Verhalten zeigt wie das in Bild 21 dargestellte. Daher besitzen die Zustände 1 und 2 dasselbe LEED-IV-Spektrum.

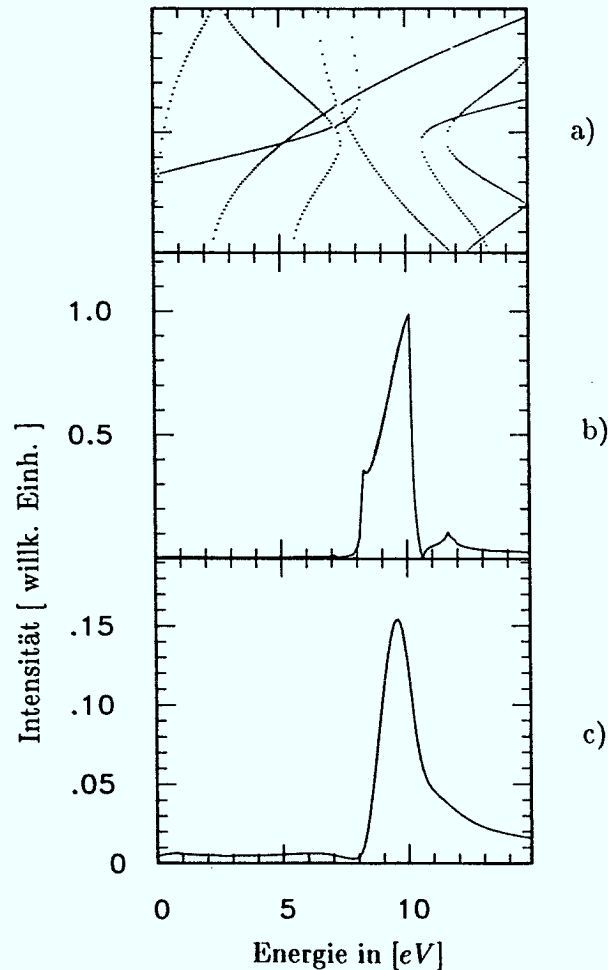


Bild 21 : LEED-IV-Spektrum einer Al(100)-Oberfläche mit $\vartheta = -45^\circ$ und $\varphi = 0^\circ$ Einfallswinkel. a) Bandstruktur, b) Spektrum mit $V_{opt}^i = 0$ und c) mit $V_{opt}^i \neq 0$ nach Lundqvist (1969). Die kinetische Energie der Elektronen ist bezüglich E_{Vac} als Nullpunkt dargestellt.

Das in Kapitel 5.4 dargestellte Verfahren zur Berechnung der LEED-Zustände bestand unter anderem daraus, die Reflexionsmatrix des Systems Oberflächenbarriere und halbumendlicher Kristall zu bestimmen. Äquivalent zu dieser Methode ist, die von außen einfallende ebene Welle stetig und mit stetiger Ableitung an die Zustände des halbumendlichen Systems anzupassen. Dies kann auf dieselbe Weise geschehen wie bei der Konstruktion der Halbraumzustände in Kapitel 5.5, d.h. durch Berechnung der Reflexionsmatrix mit Hilfe der Bloch-Zustände in $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + R|\psi_0\rangle$. Befindet man sich mit der Energie des zu berechnenden Zustands in einer Bandlücke, so fehlen im halbumendlichen Kristall jene Bloch-Zustände, die einen Strom in den Kristall hineintragen. Das heißt wiederum, daß man für die einfallende ebene Elektronenwelle zum Anpassen an der Oberfläche keine Bloch-Zustände findet, mit denen der Zustand in den Kristall hineinpropagieren kann. Die Welle wird reflektiert und klingt in den Kristall hinein exponentiell ab. Somit entsteht im LEED-IV-Spektrum ein Maximum.

Nun ist in Bild 21 ein Maximum im LEED-IV-Spektrum zu erkennen, obwohl es ein Band in diesem Energiebereich gibt. Dies ist damit zu erklären, daß die Symmetrie der Zustände des halbumendlichen Systems in diesem Energiebereich ungerade ist bezüglich der Kristallsymmetrie, das heißt, daß es in der einfallenden ebenen Welle keinen Anteil gibt, der sich in derselben Weise transformiert. Die von außen eintretende ebene Welle hat einen Wellenvektor, der in einer Spiegelebene des Kristalls liegt, und ist deshalb eine gerade Funktion. Sie findet an der Festkörperoberfläche keinen unbesetzten Zustand, an den sie ankoppeln und dann in den Kristall hineinpropagieren könnte. Deshalb ist in diesen Energiebereichen die Reflektivität ebenfalls groß, und man erhält ein Maximum im LEED-IV-Spektrum.

Die etwas asymmetrische Form des Maximums zu höheren Energien wird durch die Lebensdauer verbreiterung des Spektrums durch V_{opt}^i und durch die Energieabhängigkeit dieses Potentialanteils verursacht. In Bild 19 zeigt sich gerade in diesem Bereich eine Änderung in der Steigung der Energieabhängigkeit. Diese Lebensdauer $\tau = (2|V_{opt}^i(E)|)^{-1}$ (Feder (1985)) geht in die näherungsweise berechenbare mittlere freie Weglänge in der Form $\lambda_{MFP} = \tau \sqrt{2(E + V_{opt}^r(E))}$ (Feder (1985)) ein. Wäre diese mittlere freie Weglänge unendlich, könnte das Elektron an

allen Atomen des Kristallgitters gestreut werden und somit das gesamte Kristallgitter "sehen". Die Maxima in den LEED-IV-Spektren wären δ -funktionsartig^[25], wie von Pendry (1974) mit Hilfe der kinematischen Näherung gezeigt wird. Da die Erfahrung aber zeigt, daß λ_{MFP} endlich ist, findet man "ausgeschmierte", verbreiterte Maxima in den LEED-IV-Spektren.

Wie schon aus dem Goldene-Regel-Formalismus bekannt ist, beeinflusst die Zustandsdichte der an der inelastischen Streuung beteiligten Elektronenzustände 3 und 4 die Spektren der Verlustströme. In Bild 22-24 sind daher an den drei speziellen $k_{3//}$ -Punkten im irreduziblen Teil der Oberflächenbrillouinzone, siehe Bild 34 und die Insets in Bild 22-24 selbst, die Bandstruktur des Zustands 3, die $k_{3//}$ -aufgelöste Volumenzustandsdichte sowie die $k_{3//}$ -aufgelöste Zustandsdichte des halbunendlichen Systems für die ersten vier Schichten des Kristalls dargestellt. Über diese speziellen $k_{3//}$ -Punkte (siehe auch Tab. 2) wird, nachdem die Zustände oder Greensfunktionen aus dem irreduziblen Teil der Zone in die gesamte Oberflächenbrillouinzone transformiert wurden (Anhang E), die $k_{3//}$ -Integration in der Verluststromberechnung (3.45-3.48), wie in Anhang D dargestellt, ausgeführt.

Die Oberflächenbrillouinzone hat in der (x,z) -Ebene eine Spiegelebene. Der Impulsübertragsvektor q_{12} liegt in den hier vorgenommenen Rechnungen in dieser Ebene. Die Verlustströme sind reelle und meßbare Größen. Daraus folgt die Möglichkeit, den Rechenaufwand zu reduzieren, indem man lediglich über den Teil der Zone integriert, in dem $k_{3,y} > 0$ ist. Der Strom für $k_{3,y} < 0$ in der Oberflächenbrillouinzone ergibt sich aus der Symmetrioperation der Spiegelung zu $j(k_{3,y} > 0) = j(k_{3,y} < 0)$. Dieses Verhalten zeigen auch die mit dem Programm berechneten Verlustströme, was durch explizite Rechnung nachgewiesen wurde.

Um den numerischen Aufwand in einem vertretbaren Rahmen zu belassen, wurde in den Rechnungen die inelastische Streuung lediglich für eine Schicht, die Oberflächenschicht, durchgeführt.

^[25]Die von allen Gitterstreuplätzen aufsummierten Kugelwellen ergeben einen Ausdruck der Form (3.17), was sich sofort ändert wenn λ_{MFP} endlich ist.

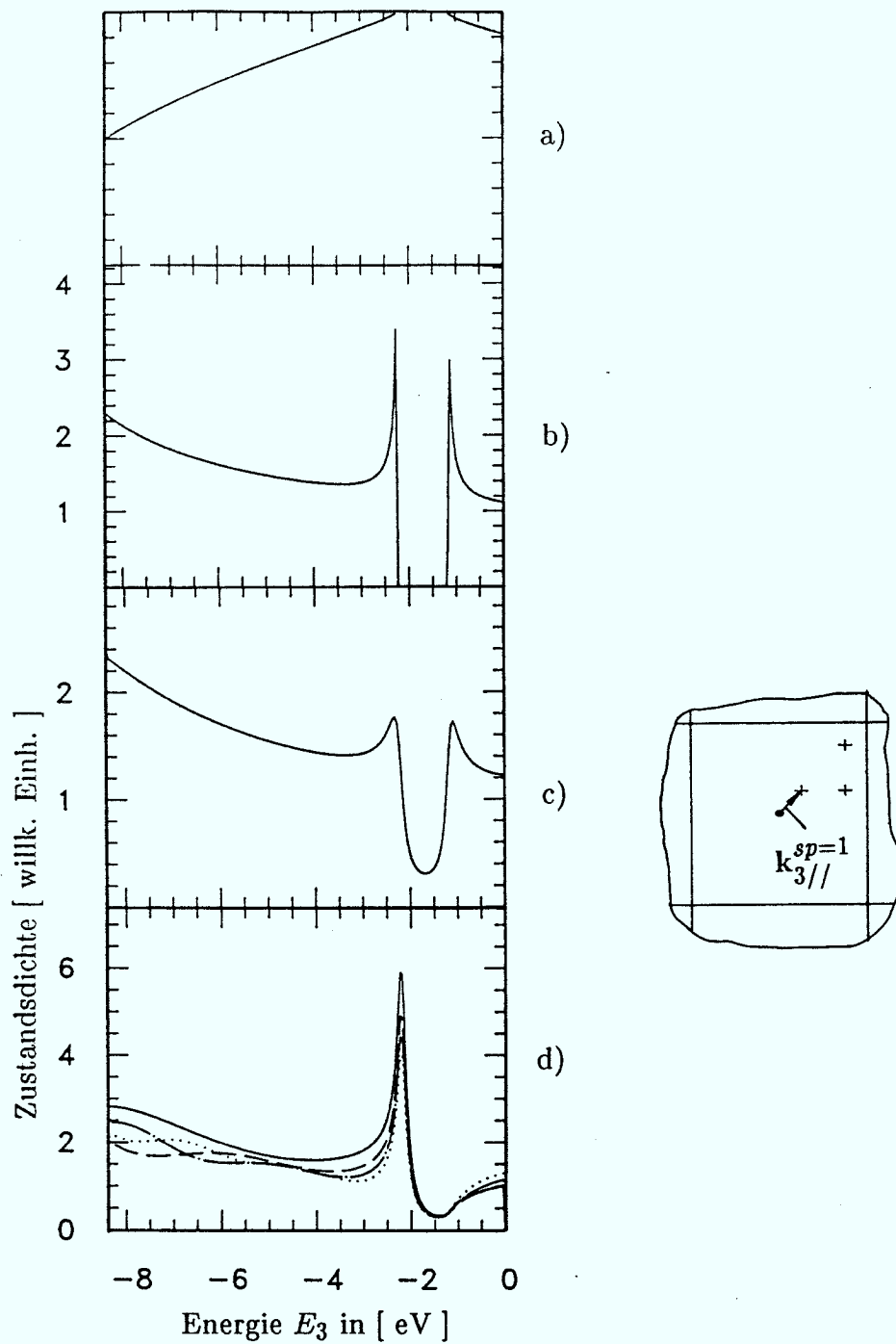


Bild 22: a) Die Bandstruktur des Zustands $E_3, k_{3//}$ bzgl. $E_F = 0$, b) Die $k_{3//}$ -aufgelöste Volumenzustandsdichte mit $V_{opt}^i(E) = 0$ sowie für c) $V_{opt}^i(E) \neq 0$ und d) die schichtabhängige Oberflächenzustandsdichte von 4 Schichten in Al(100) am ersten speziellen Punkt in der Oberflächenbrillouinzone, siehe Inset und Anhang D. Oberflächenschicht (—), 2. Schicht (- - -), 3. Schicht (- · - · -), 4. Schicht (· · ·).

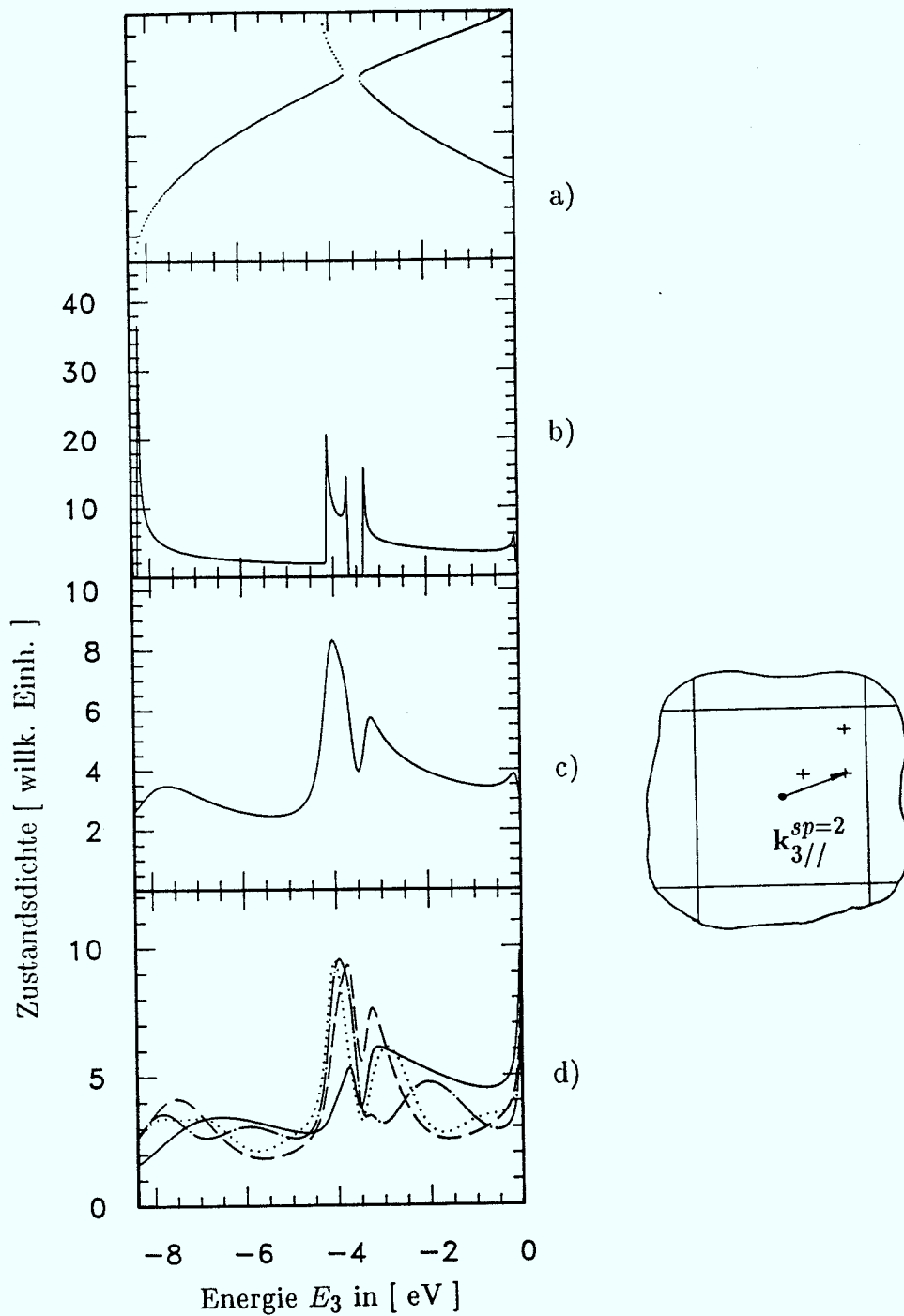


Bild 23: a) Die Bandstruktur des Zustands $E_3, k_{3//}$ bzgl. $E_F = 0$, b) Die $k_{3//}$ -aufgelöste Volumenzustandsdichte mit $V_{opt}^i(E) = 0$ sowie für c) $V_{opt}^i(E) \neq 0$ und d) die schichtabhängige Oberflächenzustandsdichte von 4 Schichten in Al(100) am zweiten speziellen Punkt in der Oberflächenbrillouinzone, siehe Inset und Anhang D. Oberflächenschicht (—), 2. Schicht (- - -), 3. Schicht (— · —), 4. Schicht (· · ·).

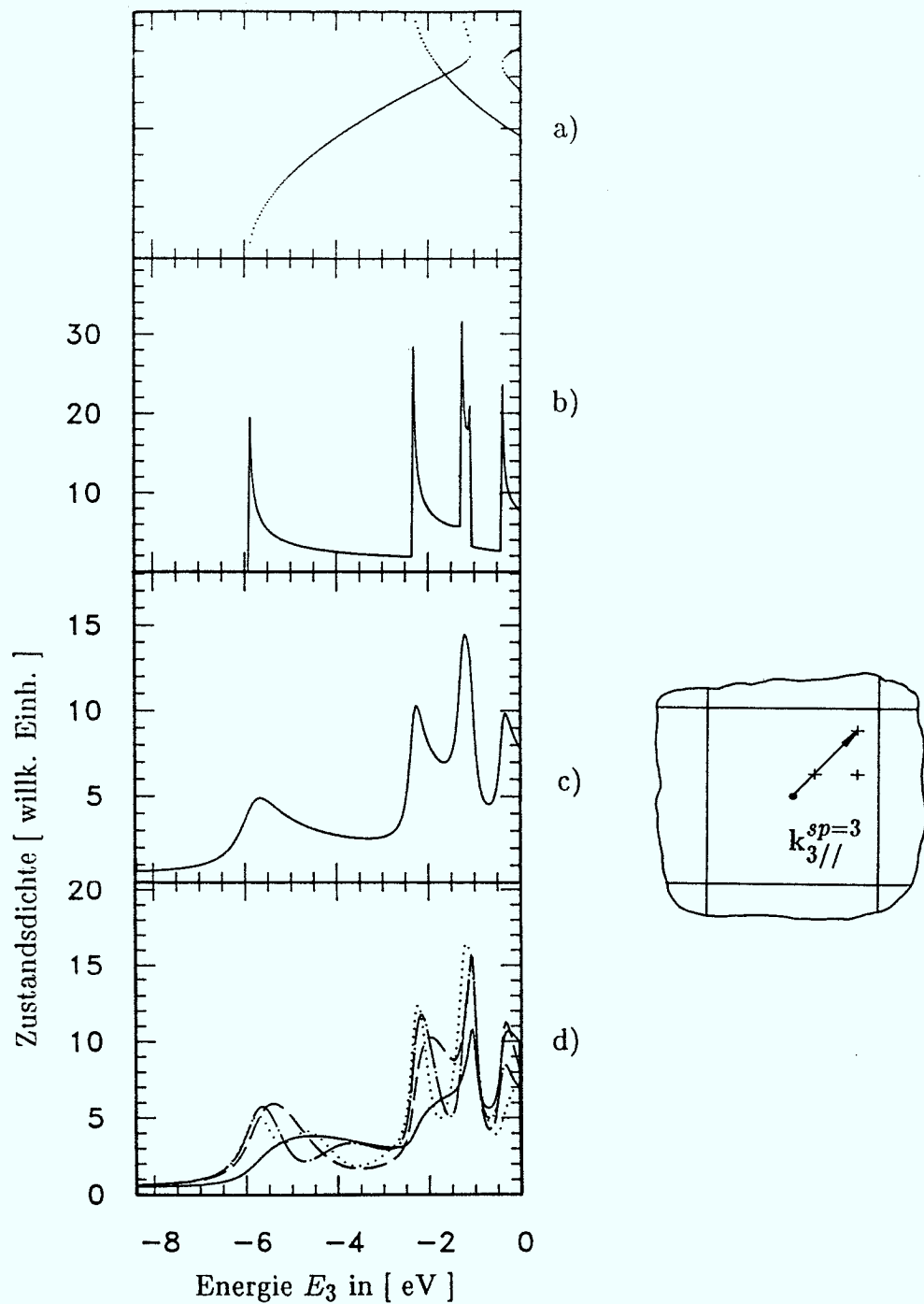


Bild 24: a) Die Bandstruktur des Zustands $E_3, k_{3//}$ bzgl. $E_F = 0$, b) Die $k_{3//}$ -aufgelöste Volumenzustandsdichte mit $V_{opt}^i(E) = 0$ sowie für c) $V_{opt}^i(E) \neq 0$ und d) die schichtabhängige Oberflächenzustandsdichte von 4 Schichten in Al(100) am dritten speziellen Punkt in der Oberflächenbrillouinzone, siehe Inset und Anhang D. Oberflächenschicht (—), 2.Schicht (- - -), 3. Schicht (- · - · -), 4. Schicht (· · ·).

7.2.4. DIE VERLUSTSTRÖME AN EINER AL(100)-OBERFLÄCHE

In Bild 25–28 sind die Verlustströme an einer Al(100)-Oberfläche dargestellt. Diese Verlustströme wurden für verschiedene Sätze von Integrationsstützstellen, aufgeführt in Tab. 2, ausgewertet, so daß man unter anderem die numerische Konvergenz des Programms untersuchen kann. Die Verlustströme sind für eine Al(100)-Oberfläche mit 10eV Primärenergie und $\vartheta_1 = -45^\circ, \varphi_1 = 0^\circ$ Einfallswinkel, gemessen bezüglich der Oberflächennormalen, mit den in Bild 18, 19 und Bild 20 aufgeführten Potentialen berechnet worden. Die Verlustströme wurden noch, wie im Goldene-Regel-Formalismus (3.1, 3.11, 3.12) auch, durch den austretenden pro eintretenden Strom der präparierten und gemessenen ebenen Wellen $j_f/j_i = k_2/k_1$ (Joachain (1975)) normiert.

Bild	Symbol	E_2	E_3	$k_{3//}$	q_z	l_{max}^{pot}
Bild 25	(—)	14	25	16	31	1
Bild 25	(— — —)	14	25	16	31	2
Bild 25	(— · — · —)	7	25	16	31	4
Bild 26	(—)	14	21	64	21	1
Bild 26	(— — —)	14	25	64	31	1
Bild 27	(—)	11	21	16	21	1
Bild 27	(— — —)	11	21	64	21	1
Bild 28	(—)	14	25	64	31	1
Bild 28	(— — —)	14	25	16	31	2

Tab. 2: Der für die Berechnung von Bild 25–28 jeweils zugrundeliegende Parametersatz. In den Spalten für $(E_2, E_3, k_{3//}, q_z)$ ist die Anzahl der jeweiligen Stützstellen angegeben sowie die maximale Ordnung der Drehimpulsentwicklung des inelastischen Wechselwirkungspotentials.

Die Bilder 25–28 zeigen für j_1 übereinstimmend Maxima bei $\Delta E_2 = 4.5 - 7\text{eV}$. Dieser Bereich wird hinfort Δ_A genannt. Ein kleines Maximum befindet sich im Bereich $\Delta E_2 = 2.5 - 3.5\text{eV}$, hinfort mit Δ_B bezeichnet. Die $\Delta_{A/B}$ -Bereiche sind in Bild 29 schraffiert gekennzeichnet.

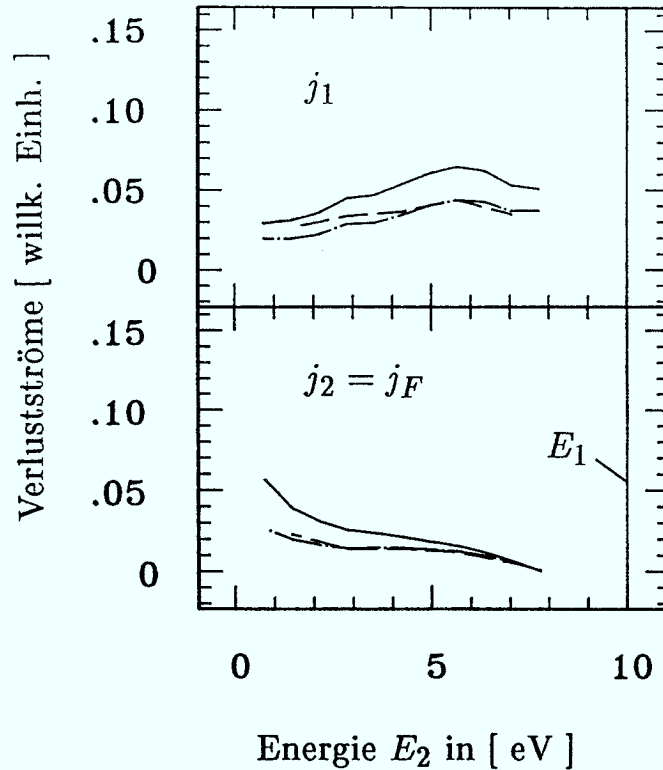


Bild 25 : Die Verlustströme j_1 , j_2 bzgl. $E_{Vac} = 0$, für eine Al(100)-Oberfläche mit verschiedenen l_{max}^{pot} der Drehimpulsentwicklung des inelastischen Wechselwirkungspotentials berechnet. (—) : $l_{max}^{pot} = 1$, (---) : $l_{max}^{pot} = 2$, (- - -) : $l_{max}^{pot} = 4$. Eine unterschiedliche Anzahl von E_2 Stützstellen ergibt, wie aus Bild 29 erkennbar ist, für den mit $l_{max}^{pot} = 4$ berechneten Verluststrom einen kleineren physikalisch interpretierbaren Bereich.

Der Verluststrom j_2 , verursacht durch reine Austauschstreuung, ist vom Betrag her kleiner als j_1 und zeigt lediglich für $l_{max}^{pot} = 2, 4$ eine breite Schulter für $E_2 = 3 - 8 \text{ eV}$. j_2 ist bis auf diese Schulter strukturlos.

Man kann versuchen, die Maxima in j_1 und j_2 mit Hilfe der Zustandsdichten der an der Streuung beteiligten Festkörperzustände zu interpretieren, was aber wegen der Aufsummation über die Lochzustände $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ schwierig ist, da eine große Anzahl von Zustandsdichten des Zustands $E_4, \mathbf{k}_{4//}$ vor der Summation untersucht werden muß. Es werden die verschiedenen Matrixelemente $M_{21} \times M_{12} \times M_{34}$ für

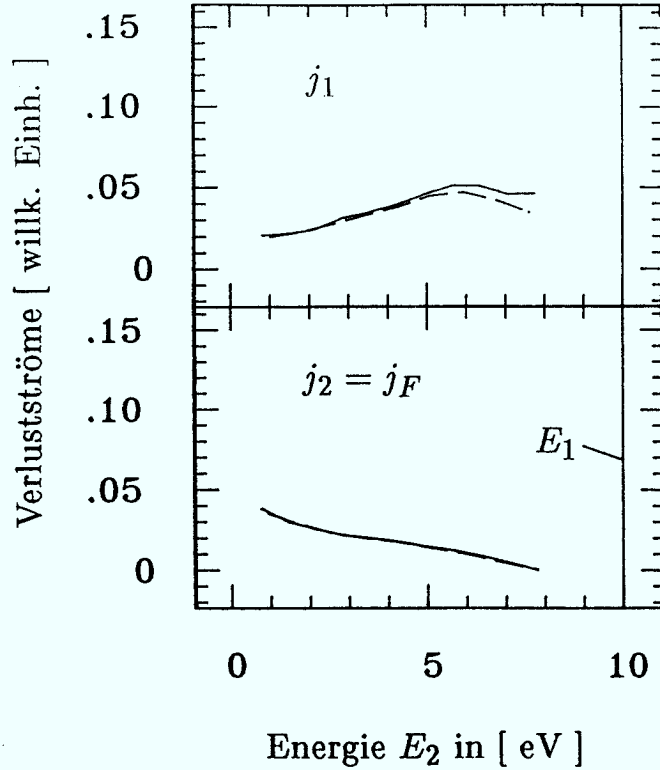


Bild 26 : Die Verlustströme j_1 , j_2 bzgl. $E_{Vac} = 0$ für eine Al(100)-Oberfläche mit einer wie in Tab. 2 angegebenen unterschiedlichen Anzahl von E_3, q_z -Integrationsstützstellen.

die Übergangswahrscheinlichkeiten $(1 \rightarrow 2) \times (3 \rightarrow 4)$ der Direkten-Streuung in j_1 und $M_{14} \times M_{23}$ für die Übergänge $(1 \rightarrow 4) \times (3 \rightarrow 2)$ bei der Austausch-Streuung in j_2 aufsummiert. Die Gestalt der Verluststromspektren kann unter anderem von folgenden Umständen beeinflusst werden.

i) Die Maxima in der Zustandsdichte des Loch-Zustands ergeben die Möglichkeit, eine große Anzahl von Teilchen im Zustand 3 nach 4 oder im Austauschfall in den Zustand 2 anzuregen. Dabei haben die Zustandsdichte-Maxima Einfluß durch die $E_3, k_{3//}$ -Summation, solange sich diese Maxima im Integrationsbereich $E_3^{min} = E_F - \Delta E$ bis $E_3^{max} = E_F$ mit der Verlustenergie $\Delta E = E_1 - E_2$ befinden. Man summiert für jedes $k_{3//}^{sp}$ über ein Energiefenster der Breite ΔE , so daß das Zustandsdichte-Maximum zum Integrationsergebnis beiträgt, solange es sich in dem Fenster-Bereich befindet. Dies wird in Bild 29 deutlich.

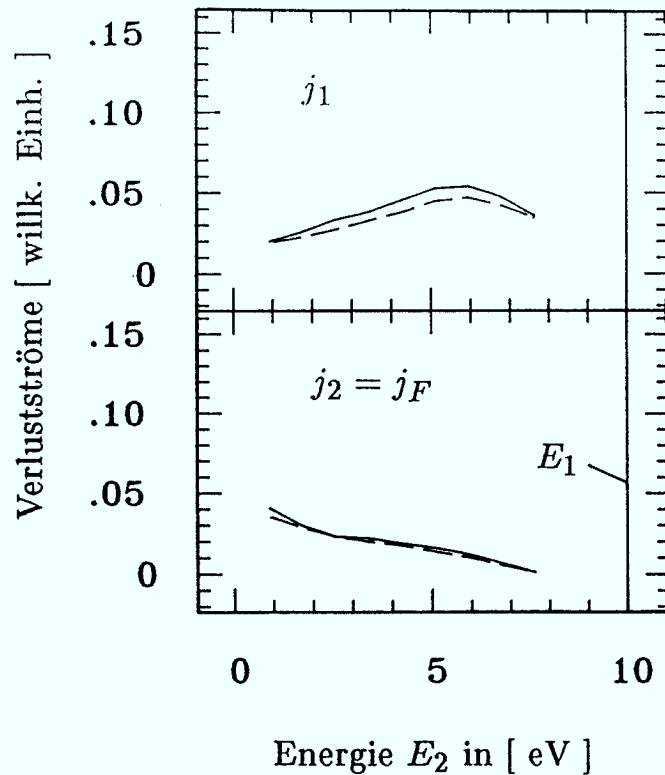


Bild 27: Die Verlustströme j_1 , j_2 bzgl. $E_{Vac} = 0$ für eine Al(100)-Oberfläche mit 16 (—) und 64 (- - -) speziellen $k_{3//}$ -Punkten in der Oberflächenbrillouinzone.

ii) Dort, wo es für den Zustand 2 Bandlücken gibt, finden sich keine Zustände, die nach der Anregung ($1 \rightarrow 2$) oder ($3 \rightarrow 2$) aus dem Innern des Kristalls hinauspropagieren und dann gemessen werden können. Denn, wo es Maxima im LEED-IV-Spektrum gibt, ist die Reflektivität des Kristalls groß, die Elektronen können dort schlecht in den Festkörper hineinpropagieren. Es gibt dort keine Eigenzustände des Kristalls, die an eine von außen in den Kristall hineinpropagierende ebene Welle ankoppeln können und die Propagation im Kristall ermöglichen. Somit gibt es in diesem Zustandsbereich für den zeitumgekehrten LEED-Zustand keinen besetzbaren Zustand, in dem das angeregte Elektron vom Innern des Kristalls nach außen propagieren kann ($1 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 2$). Wenn allein der Zustand 2 zur inelastischen Elektronenstreuung beitragen würde, könnte man behaupten, daß dort, wo es Maxima im LEED-IV-Spektrum gibt, es somit Minima im Ver-

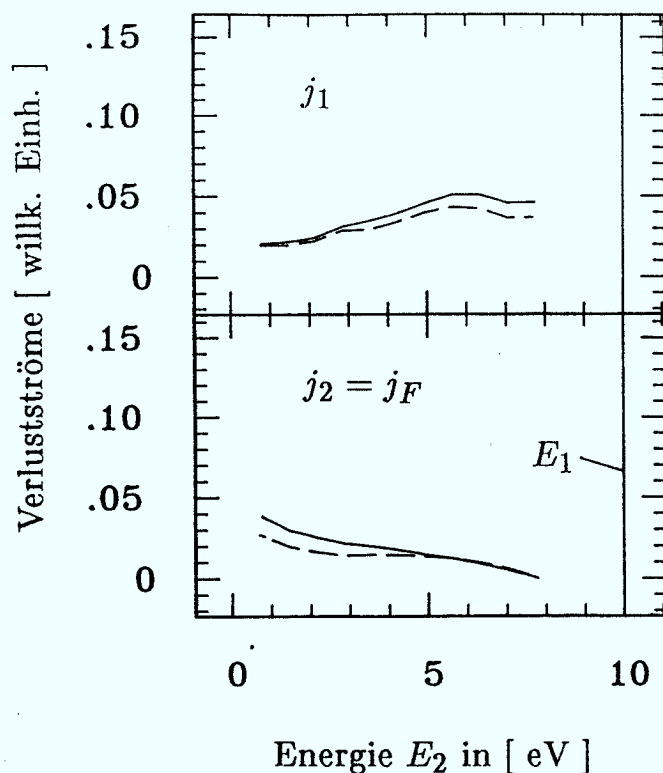


Bild 28 : Die Verlustströme j_1 , j_2 bzgl. $E_{Vac} = 0$ für eine Al(100)-Oberfläche mit 16 (—) und 64 (---) speziellen $k_{3//}$ -Punkten in der Oberflächenbrillouinzone sowie $l_{max}^{pot} = 1, 2$.

luststromspektrum geben muß. Verändert wird dieses Verhalten neben den unter i), iii) und iv) aufgeführten Aspekten zum Beispiel, wenn Oberflächenzustände im Zustand $E_2, k_{2//}$ angeregt werden können, die in den Lücken der Volumenbandstruktur liegen.

iii) Nicht allein das Übergangsmatrixelement M_{21} des präparierten Zustands 1 in den gemessenen Zustand 2 trägt bei der Berechnung des Verluststroms j_1 bei, sondern auch das Matrixelement M_{34} für den Übergang $3 \rightarrow 4$. Ähnlich ist dies bei der Berechnung von j_2 , wo die Übergänge $3 \rightarrow 2$ in M_{23} und $1 \rightarrow 4$ in M_{14} multiplikativ in die Berechnung von j_2 eingehen und damit auch die Festkörperzustände 3 und 4 die Struktur der Verlustströme mitverursachen. Dies wird deutlich an Bild 21, welches im Bereich $E_2 = 1 - 8\text{eV}$ keine Struktur in dem LEED-IV Spektrum zeigt, so daß die Struktur in den Verlustströmen vollständig vom Über-

gang ($3 \rightarrow 4$) verursacht worden sein muß. Die inelastische Elektronenstreuung läßt sich nicht durch den Übergang $1 \rightarrow 2$ allein erklären.

iv) Neben dem in i) und iii) erklärten Einfluß des Zustands 3, von dem aus angeregt wird, ist auch die Zustandsdichte des Zustands 4 mit $E_4 > E_F$, in den angeregt wird, nach iii) wegen der Übergangswahrscheinlichkeit M_{34} in j_1 oder M_{14} in j_2 wichtig. Falls im Festkörper für den Zustand 4 besetzbare Zustände existieren, zum Beispiel die Zustandsdichte groß ist, dann werden M_{14} und M_{34} an Einfluß gewinnen. Dieser Zustand 4 entsteht aber in der Rechnung mit Hilfe der Energieerhaltung $E_4 = E_3 + \Delta E$ und der lateralen Impulserhaltung $\mathbf{k}_{4//} = \mathbf{k}_{3//} + \mathbf{q}_{//}$, was zur Folge hat, daß er sich während der $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ -Integration und des Durchlaufens der Verlustenergie E_2 fortlaufend ändert. Daher ist dieser Einfluß wegen der anfallenden Datenmenge sehr schwer auszuwerten und einzuschätzen. Dies ist nicht weiter verwunderlich, denn man tastet mit der Änderung von $\Delta E = E_1 - E_2$ sowie $\mathbf{q}_{//} = \mathbf{k}_{1//} - \mathbf{k}_{2//}$ die Energie- und $\mathbf{q}_{//}$ -Abhängigkeit des optischen Potentials $V_{opt}^i(E, \mathbf{q}_{//})$ und damit der Selbstenergie $\Sigma(E, \mathbf{q}_{//})$ in der Oberflächenbrillouinzone des Kristalls ab, was sich als sehr aufwendig erweist. Der große $E_4, \mathbf{k}_{4//}$ Bereich, der in der Oberflächenbrillouinzone abgetastet wird, könnte eine Ursache für das ausgeschmierte Maximum im sonst strukturlosen j_2 -Verlustspektrum sein.

So macht man sich folgendes Bild über die Ursache der Strukturen in den Verluststromspektren. Die Maxima des Verluststroms j_1 zwischen $\Delta_A E_2 = 4.5 - 7.0 \text{ eV}$ ($\Rightarrow 3 \text{ eV} \leq \Delta E := E_1 - E_2 \leq 5.5 \text{ eV}$) und $\Delta_B E_2 = 2.5 - 3.5 \text{ eV}$ ($\Rightarrow 6.5 \text{ eV} \leq \Delta E \leq 7.5 \text{ eV}$) kann man mit den Maxima in den Oberflächenzustandsdichten des Zustands 3 in Teil d) von Bild 22-24 erklären. Für den Bereich $2.5 \text{ eV} \leq E_3 \leq 5.5 \text{ eV}$ (assoziiert mit $\Delta_A E_2$, siehe Bild 29) ist in der Oberflächenzustandsdichte für den speziellen Punkt $\mathbf{k}_{3//}^2$ in Bild 23 ein Maximum festzustellen sowie in der Oberflächenzustandsdichte für $\mathbf{k}_{3//}^3$ in Bild 24. Diese Maxima tragen durch die Aufsummierung der $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ Zustände solange zum Verluststrom bei, wie $\Delta E = E_1 - E_2$ diesen Bereich überdeckt. Da diese Oberflächenzustandsdichtemaxima näher zur Fermi-Energie liegen, tragen sie wegen der näher an der Primärenergie E_1 liegenden E_2 -Stützstellen und damit kleinerem ΔE -Fenster öfter zum Summationsergebnis bei als Maxima bei kleineren Bindungsenergien. Aus diesem Grund und weil sie über einen größeren E_3 -Bereich verteilt sind, ist

das $\Delta_A E_2$ -Maximum höher und breiter als das $\Delta_B E_2$ -Maximum.

Für den Bereich $6\text{eV} \leq E_3 \leq 7.5\text{eV}$ (assoziiert zu $\Delta_B E_2$) ist lediglich in der Oberflächenzustandsdichte des speziellen Punktes $k_{3//}^2$ ein Maximum zu beobachten. Dies ist in Bild 29 durch den kleineren schraffierten Bereich verdeutlicht. So kann das breite Maximum $\Delta_A E_2$ den Maxima in den Zustandsdichten von $k_{3//}^2$ und $k_{3//}^3$ zugeordnet werden, das leichte Maximum $\Delta_B E_2$ dem Maximum in der $k_{3//}^3$ Oberflächenzustandsdichte, siehe Bild 29.

Die Zustandsdichten der speziellen Punkte $k_{3//}^2$ und $k_{3//}^3$ werden zu den Spektren einen größeren Beitrag liefern können, weil sie im Vergleich zur Zustandsdichte von $k_{3//}^1$ um den Faktor 2 – 2.5 höhere Maxima besitzen, also mit mehr Teilchen besetzt sind. Dieses Verhalten zeigt auch das Verlustspektrum, in dem das Maximum im Bereich $\Delta_A E_2$ das größere ist.

Betrachtet man die schichtabhängigen Zustandsdichten in Bild 22–24 für die verschiedenen speziellen $k_{3//}^{sp}$ -Punkte in ihrer Schichtabhängigkeit, so erkennt man, daß die Positionen der Maxima für tiefer liegende Schichten den Positionen der Maxima der Volumenzustandsdichte zustreben, die im allgemeinen an anderer Stelle liegen als die Oberflächenzustandsdichtemaxima^[26]. Bei der Berücksichtigung von mehr als einer Schicht tragen die Zustandsdichtemaxima während der E_3 -Summation über einen weiteren Energiebereich zum Verluststrom bei, da die E_3 -Position der Zustandsdichtemaxima sich in verschiedenen Schichten ändert. Dies wäre eine mögliche Erklärung für die von Abraham, Hopster (1989) erwähnte Ausschmierung der Maxima in der inelastischen Elektronenstreuung. In der vorliegenden Arbeit wurden die Verlustströme nur für eine Schicht berechnet.

Es konnten die Verlustspektren j_1 und j_2 berechnet werden. Die Programme zur Berechnung von j_3 und j_4 stehen noch nicht zur Verfügung, zudem ist der numerische Aufwand, allein schon j_1 und j_2 zu berechnen, sehr groß. Die Rechenzeit zur Ermittlung des Verluststroms für zum Beispiel 64 spezielle Punkte $k_{3//}^{sp}$ in der Oberflächenbrillouinzone (der dazu notwendige Parametersatz kann Tab. 2 entnommen werden) beträgt ungefähr 150000 CPU-Sekunden auf einer

[26] Erst bei ungefähr acht Schichten hat die schichtabhängige Zustandsdichte die Form der Volumenzustandsdichte.

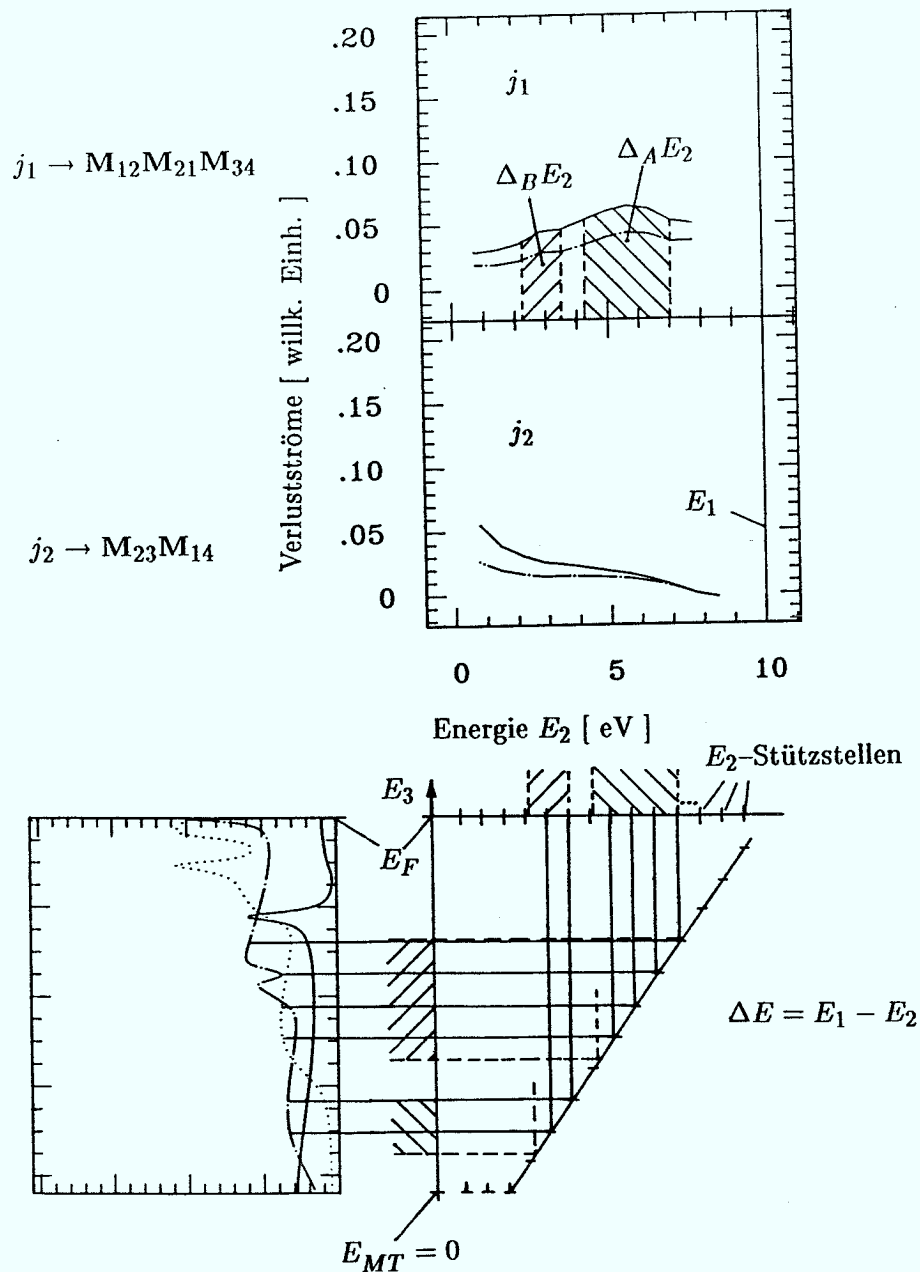


Bild 29: Zur Erläuterung des Einflusses der $k_{3//}$ -aufgelösten Oberflächenzustandsdichte (siehe Inset Bild 22–24) auf die Verluststromspektren. Links die Oberflächenzustandsdichte aus Bild 22–24 für $k_{3//}^{sp=1}$: (—), $k_{3//}^{sp=2}$: (---), $k_{3//}^{sp=3}$: ($\cdot \cdot \cdot$).

CRAY-X-MP48 der KFA-Jülich, bei einer Rate von 70 Millionen Floating Point Operationen pro Sekunde. Bei 16 speziellen Punkten reduziert sich die Rechenzeit ungefähr um die Hälfte; die Rechenzeit und die Anzahl der Stützstellen hängen

nichtlinear miteinander zusammen. Die Berechnung der Verlustströme j_3 und j_4 erfordert noch mehr numerischen Aufwand wegen der komplizierteren Radialintegrale. Bisher waren dies höchstens Zweizentrenintegrale (F.5–F.12), für j_3 und j_4 benötigt man Dreizentren–Radialintegrale (F.13–F.20). Da bisher die Radialintegrale 85⁰/₀ der Rechenzeit verbrauchten, wenn man sich auf die Auswertung des Verluststroms an der ersten Schicht beschränkte, wird dieser Aufwand sich bei der Berechnung von j_3 und j_4 noch vergrößern.

Nun könnte man vermuten, motiviert durch den Goldene–Regel–Formalismus (Bild 2, 5) und dessen Äquivalenz zum Verluststrommodell an Festkörpern ohne Oberflächen, daß $j_3 = j_4$ ist, wenn man das konjugiert Komplexe des Teils von (3.47) nimmt, von dem dann der Imaginärteil gebildet wird. Dies sei symbolisch durch $j_3 = j_4^*$ bezeichnet, obwohl der Strom eine reelle Größe ist. Beachtet man Bild 5 und vergleicht die Verlustströme mit den Übergangswahrscheinlichkeiten in (3.35, 3.36), so könnte man vermuten, daß diese Behauptung richtig ist, denn beide Feynman–Graphen in Bild 5 unterscheiden sich durch die zeitliche Reihenfolge der Direkt– und Austauschstreuprozesse. Die zeitliche Reihenfolge der Prozesse wird aber gerade durch die konjugiert–komplex–Bildung vertauscht.

Leider hat man aber das optische Potential, insbesondere dessen Imaginärteil, dabei außer acht gelassen. Dieser Imaginärteil macht die numerische Auswertung des Verluststroms an Oberflächen erst möglich und hat auch bei Rechnungen ohne Oberfläche die Eigenschaft, die Zustandsdichte zu glätten. Er sorgt aber gleichzeitig dafür, daß eine Absorption in der Rechnung berücksichtigt wird. Wie bei Diffusionsproblemen ist dadurch die Zeitrichtung ausgezeichnet, in der die angeregten Quasiteilchenzustände zerfallen. Daher ist es wesentlich, den Streuprozess Direkt– mit anschließender Austausch–Streuung von dem in umgekehrter Reihenfolge stattfindenden Prozess zu unterscheiden. Die Direkt– und Austausch–Streuung finden in der Berechnung von j_3, j_4 in zeitlich verschiedener Reihenfolge statt, so daß die Beiträge der Absorption in verschiedener Weise eingehen. Folglich kann mit obiger Vermutung keine Rechenzeit eingespart werden.

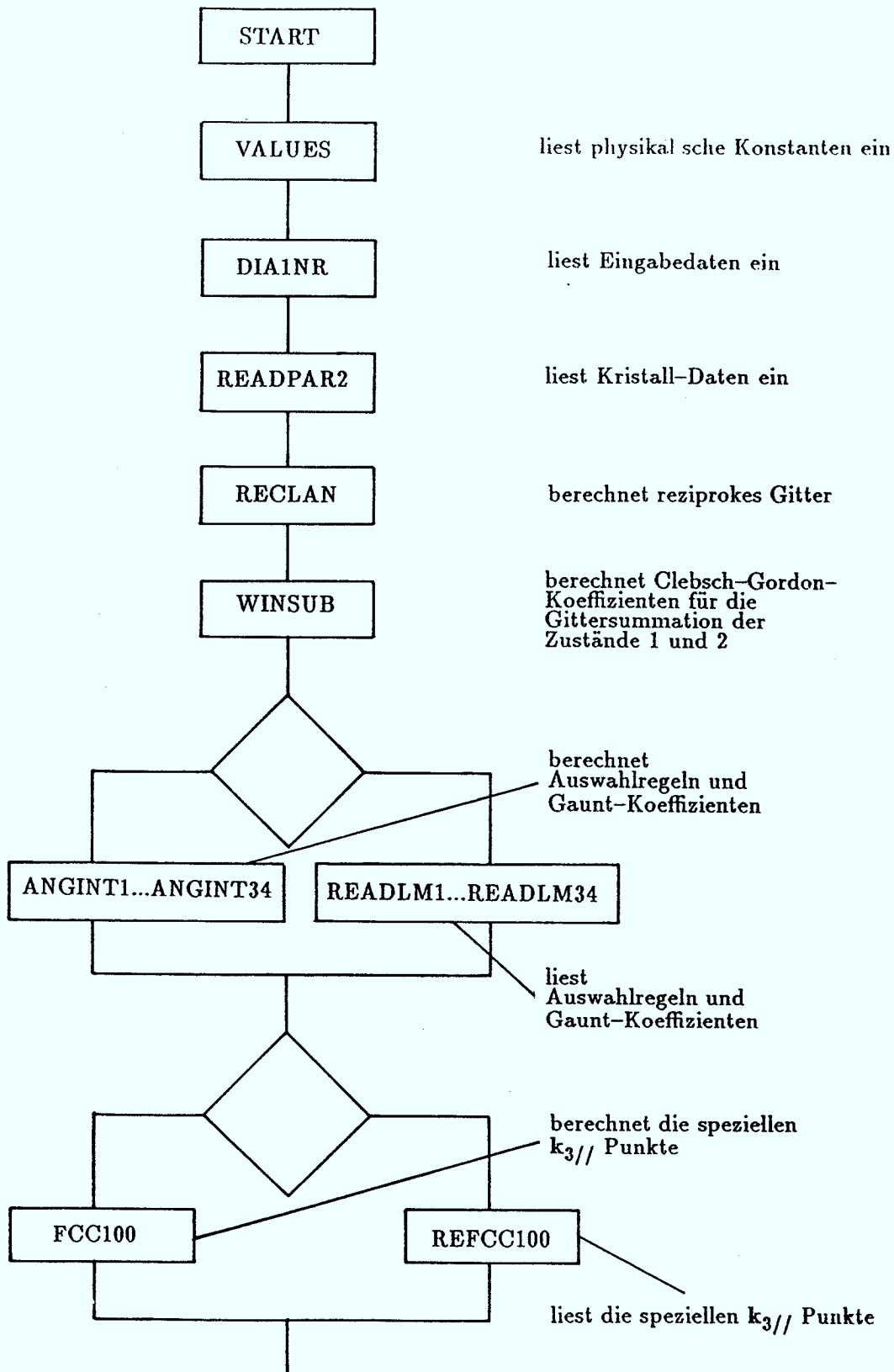
Die Rechnungen mit dem einfachen Modell des homogenen Elektronengases mit Oberflächenbarriere und $V_{opt}^i(E) = -1\text{eV} \neq 0$ in Bild 11–13 zeigen, daß $j_3 \neq j_4^*$ ist.

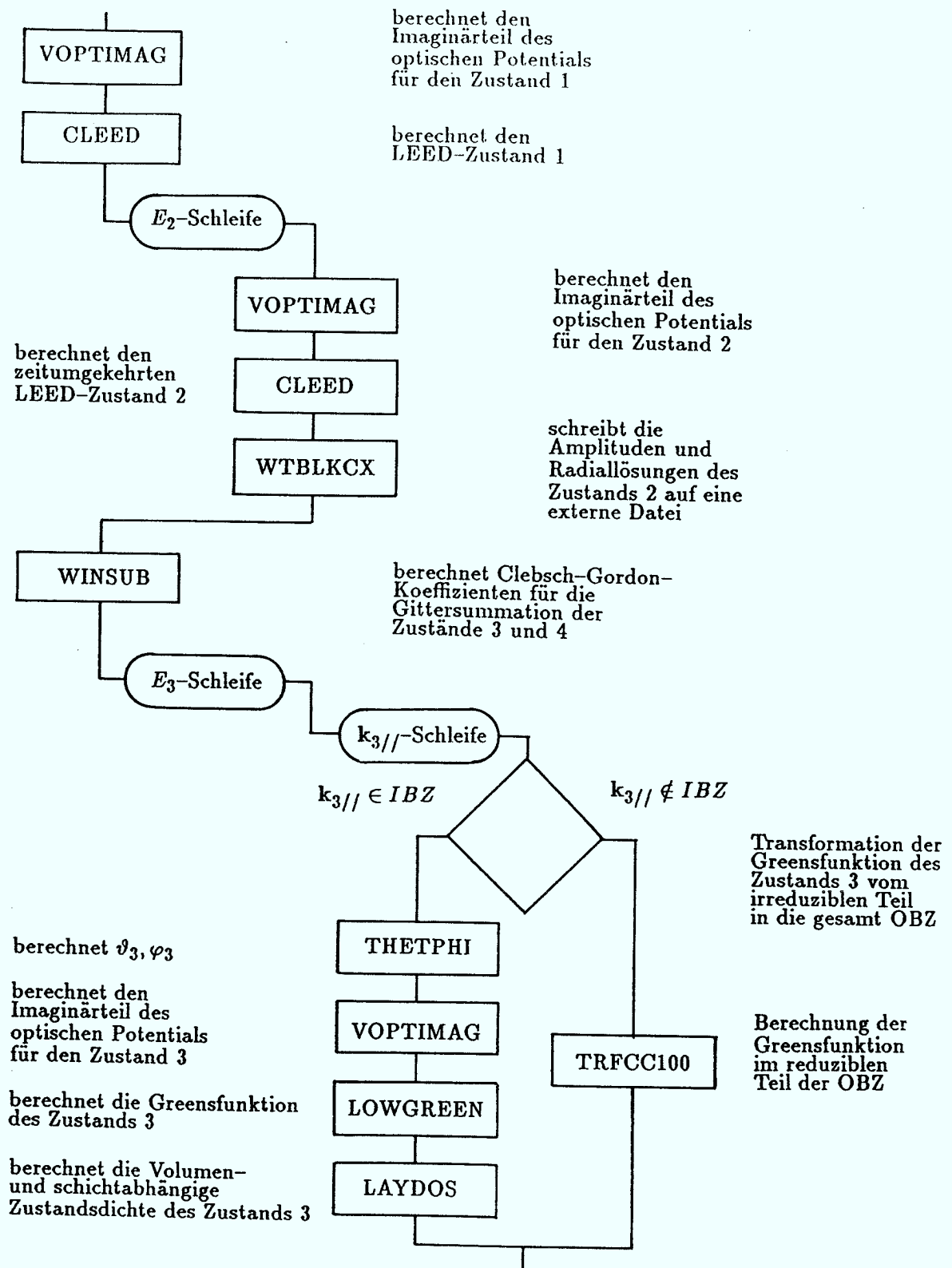
8. Numerische Aspekte

Zur Berechnung der Verlustströme wurde ein FORTRAN-Programm erstellt, dessen Ablaufplan in Bild 30 aufgeführt ist. Die Auswertung der in Kapitel 7 dargestellten Verlustströme konnte an einer CRAY X-MP48 der KFA-Jülich erfolgen. Trotz der Verwendung dieses leistungsfähigen Vektorrechners gestaltete sich die Berechnung der Verlustströme sehr zeitaufwendig. Dies ist im Vergleich zur Photoemission, wo nur zwei Zustände zu berechnen sind sowie Matrixelemente eines dipolartigen Störpotentials, nicht verwunderlich. An der inelastischen Elektronenstreuung sind vier Zustände beteiligt, es muß eine $E, \mathbf{k}_{//}$ -Summation über den Zustand 3 ausgeführt werden, und das Störpotential ist das abgeschirmte, nichtlokale Coulomb-Potential.

Beim Aufbau des Programms hat es sich als vorteilhaft herausgestellt, zuerst alle von $E_2, E_3, \mathbf{k}_{3//}, q_z, q'_z$ und Schichten unabhängigen Größen, die zur Berechnung von (3.45–3.48) benötigt werden, wie Gaunt-Koeffizienten, Auswahlregeln und die speziellen $\mathbf{k}_{3//}$ -Punkte zu ermitteln sowie die Kristallstruktur vorzugeben, siehe Bild 30.

Da der Verluststrom von E_2 und E_3 abhängt, gibt es, wie in Bild 29 dargestellt, zwei Möglichkeiten, bei der $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ -Summation vorzugehen. Man kann die jeweilige Verlustenergie E_2^i festhalten und über die $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ -Bereiche summieren. Wenn dann für die Berechnung des Verluststroms an der nächsten E_2^{i+1} Stelle dieselbe Einteilung des $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ -Bereichs gewählt wird wie bei der Berechnung des Verluststroms an E_2^i , sind die Zustände $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ schon bei der Verluststromberechnung an E_2^i ermittelt worden, stehen also, falls sie abgespeichert wurden, der Verluststromberechnung bei E_2^{i+1} zur Verfügung. Dies erfordert aber insbesondere bei der Abspeicherung der Greensfunktion des Zustands 3 einen sehr großen Speicherplatzbedarf, um die reguläre wie irreguläre Radiallösung auf dem radialen Netz sowie die Strukturkonstanten $X_{L,L'}^j, G_{L,L'}^{j,j'}$ für alle Schichten und alle $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ abzuspeichern. Daher erscheint die zweite Möglichkeit, für festes $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ die Verlustströme an allen möglichen E_2 Stellen auszuwerten, extern abzuspeichern und dann zum nächsten $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ überzugehen, sinnvoller.





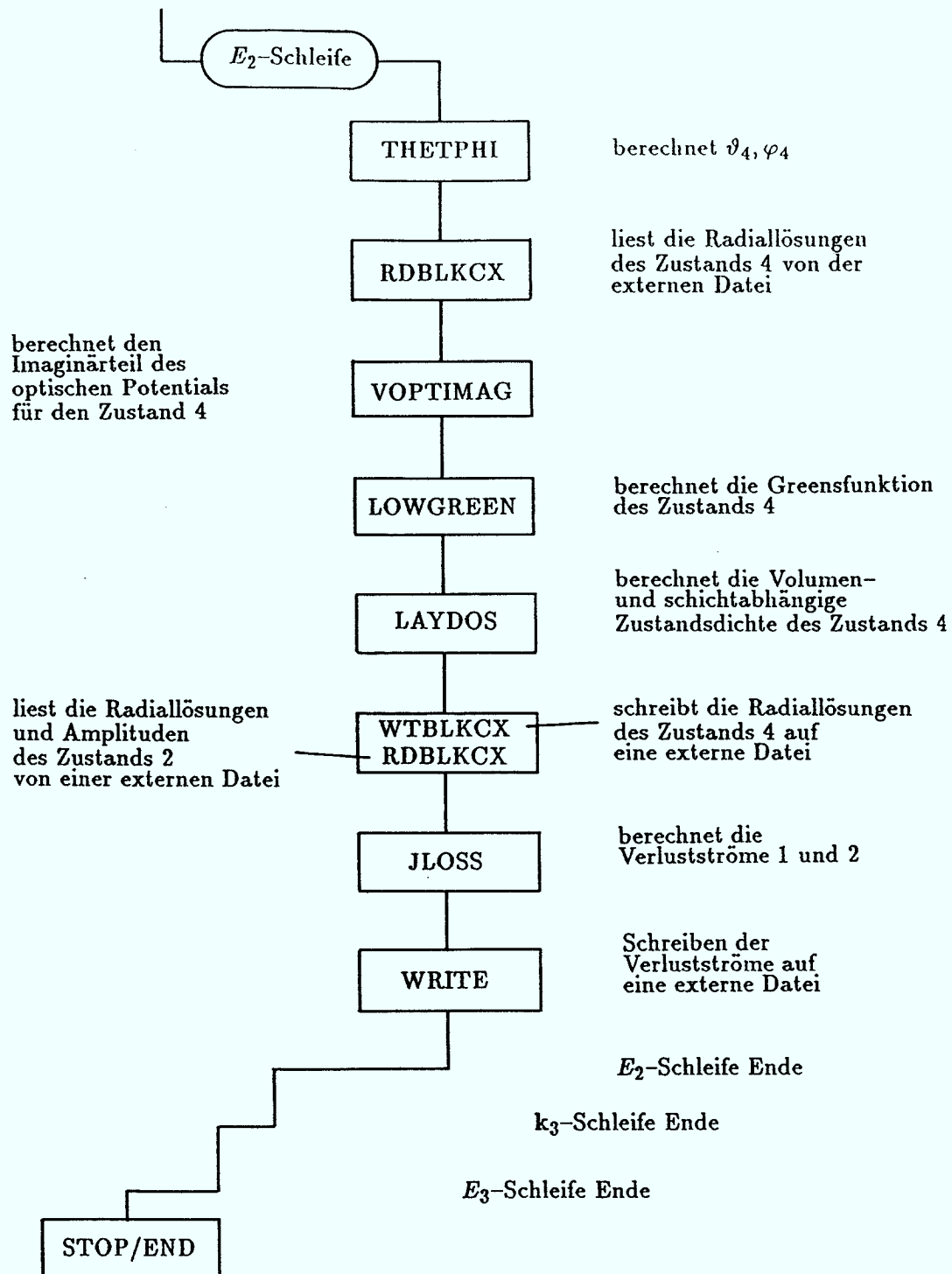


Bild 30 : Flußdiagramm des FORTRAN-Programms zur Berechnung des Verluststroms j_1, j_2 .

Mit dieser Vorgehensweise erspart man sich das Abspeichern der Strukturkonstanten und Radiallösungen der Zustände 3, man durchläuft nicht wiederholt denselben $(E_3, \mathbf{k}_{3//})$ -Bereich und speichert weitaus weniger aufwendig die zuvor berechneten Zustände 2 ab, dies sind der Amplitudenvektor $A_L^{j,\sigma}$ und die reguläre Radiallösung. Man durchläuft damit das in Bild 29 dargestellte E_2, E_3 -Schema nicht von oben nach unten, sondern von links nach rechts. Die benötigte Rechenzeit ist in beiden Fällen ungefähr gleich.

Rechenzeit kann eingespart werden, wenn die Berechnung der Greensfunktion auf den irreduziblen Teil (IBZ) der Oberflächenbrillouinzone beschränkt wird. Sobald ein Zustand mit $\mathbf{k}_{3//} \notin IBZ$ aus dem Rest der Oberflächenbrillouinzone zu berechnen ist, kann die Greensfunktion durch Transformation aus der an $\mathbf{k}_{3//} \in IBZ$ bekannten Greensfunktion erzeugt werden, wie in Anhang E dargestellt ist. Das Flußdiagramm Bild 30 macht diese Vorgehensweise ebenfalls deutlich.

Bei der Verluststromberechnung an lediglich einer Schicht, siehe Kapitel 7.2.4, hat die Radialintegration 85⁰/₀ der Rechenzeit verbraucht. Obwohl die von der Schicht- und q_z, q'_z -Summation unabhängigen Teile der Verluststromberechnung (zum Beispiel die Multiplikation der Radiallösungen (F.5–F.12)) vorab ausgeführt wurden, verbrauchte die Radialintegration trotz Vektorisierung der daran beteiligten Programmteile den Hauptteil der benötigten Rechenzeit. Allein die die Radialintegration vorbereitenden vektorisierenden Multiplikationen und Summationen sind so zeitaufwendig, daß eine Verkürzung der Rechenzeit schwierig erscheint.

Da die Radialintegrale die meiste Rechenzeit bei der Verluststromberechnung an einer Schicht beanspruchen und sich diese Situation auch bei Rechnungen an mehr als einer Schicht nur geringfügig ändert, erscheint es unwesentlich, ob bei der Matrixelementberechnung als innerste Summation die (l, m) -Summation, dann die Schicht-Summation, anschließend die q_z, q'_z - und dann die $E_3, \mathbf{k}_{3//}$ -Integration ausgeführt werden. Außerdem sollte bei einer Veränderung dieser Reihenfolge *unter anderem* beachtet werden, daß die Radialintegrale q_z -abhängig sind.

Die Berechnung von $j(E_1, \mathbf{k}_{1//}; E_2, \mathbf{k}_{2//}; E_3, \mathbf{k}_{3//})$ erforderte je nach gewähltem Parametersatz aus Tab. 2 30–160cpu sec auf der CRAY XMP-48 der KFA-Jülich, wohingegen zur Ermittlung eines vollständigen Verlustspektrums durch

Aufsummation von $j(E_1, \mathbf{k}_1//; E_2, \mathbf{k}_2//; E_3, \mathbf{k}_3//)$ zu $j(E_1, \mathbf{k}_1//; E_2, \mathbf{k}_2//)$ für verschiedene Verlustenergien E_2 40000–150000cpu sec benötigt wurden.

Zur Lösung des Eigenwertproblems (5.13) mit der nichthermiteschen, dicht besetzten, komplexen Transfermatrix sowie zur Inversion komplexer Matrizen wurden Bibliotheksroutinen der IMSL-Library (IMSL, (1987)) verwendet, die bezüglich ihres Vektorisierungsgrades optimiert sind. Weiter wurde auf schon existierende Programme für die Gittersummation (Hopkinson et al. (1980)) zurückgegriffen sowie auf Routinen dieses Programmpakets, die die Kristallstruktur und das reziproke Gitter erzeugen.

9. Zusammenfassung

Anfänglich wurde eine Theorie der inelastischen Elektronenstreuung abgeleitet, die von der Goldenen Regel der Streutheorie ausgeht. Die Ermittlung der dabei beteiligten Festkörperzustände ist nur mit einem Imaginärteil des optischen Potentials $V_{opt}^i = 0$, also unter Vernachlässigung der Lebensdauer der Quasiteilchen (Festkörperlochzustand 3 und angeregter Festkörperzustand 4), möglich. Dies macht aber wegen der scharfen Maxima der in die Goldene Regel eingehenden Zustandsdichte der Festkörperzustände eine numerische Auswertung unvertretbar aufwendig.

Aus diesem Grund wurde eine Greensfunktionsmethode zur Berechnung der Festkörperzustände eines Kristalls mit Oberfläche verwendet, die $V_{opt}^i \neq 0$ erlaubt. Weiter wurde dann mit Hilfe von Methoden der Vielteilchentheorie eine Theorie der inelastischen Elektronenstreuung entwickelt, welche die Greensfunktionen der Festkörperzustände benutzt. Die damit berechneten Verlustströme berücksichtigen die Spinabhängigkeit der Elektronen sowie Direkte- und Austausch-Streuprozesse. Insgesamt erlaubt sie, spin-, winkel- und energieaufgelöste Verluststromspektren an Kristallen mit Oberfläche zu ermitteln.

Vorab wurden nach dieser Theorie die Verlustströme für Aluminium im Rahmen des homogenen-Elektronengas-Modells und das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere untersucht.

Weiter ist nach dieser Theorie ein FORTRAN-Programm gestaltet worden, welches die Zustände, die an der inelastischen Elektronenstreuung beteiligt sind, unter Berücksichtigung der Streuung der Elektronen an den Atomrümpfen sowie an den Elektronen der Atomhülle mit Hilfe der Schicht-KKR-Theorie konstruiert.

Dieses Programm wurde für erste Berechnungen der Verlustströme an einer Al(100) Oberfläche eingesetzt. Es wurden zwei der vier möglichen Verlustströme damit berechnet. Die verbleibenden zwei Verlustströme erfordern einen wesentlich höheren Rechenaufwand, so daß Vereinfachungen, die die Rechenzeit verkürzen, insbesondere bei der Radialintegration in den Matrixelementberechnungen, noch entwickelt werden müssen.

Mit diesem Programm wurden die Strukturen in den Verluststromspektren un-

tersucht und versucht zu erklären. Soweit dies bei der großen anfallenden Datenmenge der an der inelastischen Elektronenstreuung beteiligten Festkörperzustände 3 und 4 möglich ist, konnten die in den Verlustströmen auftretenden Maxima den Maxima der Zustandsdichte des Lochzustands 3 zugeordnet werden. Neben den Zustandsdichteeffekten des Lochzustands 3 können aber auch die Zustandsdichten des erst durch die Locherzeugung aus einem Festkörpergrundzustand angeregten Zustands 4 Strukturen im Verlustspektrum hervorrufen, die wegen der Datenfülle eine Analyse erschweren.

Weiterhin ist es möglich, daß Endzustandseffekte des austretenden LEED-Zustands 2 Strukturen in den Verluststromspektren ergeben, denn da, wo es LEED-IV-Maxima gibt, sollten Minima im Verluststromspektrum entstehen, wenn nicht aus Oberflächenzuständen zusätzlich Elektronen emittiert werden können und nicht Zustandsdichteeffekte der Zustände 3 und 4 dieses Verhalten überdecken.

Anhang A. Die potentialfreie symmetriangepaßte Greensfunktion

Greensfunktionen werden zur Lösung von Randwertproblemen verwendet. Sie müssen die jeweiligen Randbedingungen erfüllen und in der ersten Variablen Lösung des betrachteten Differentialoperators sein. Hier ist dies die Schrödinger-Gleichung

$$\{i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}\}g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t').$$

Die Propagation eines Elektrons im potentialfreien Raum, das heißt mit $\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}}$, ist zeittranslationsinvariant. Daraus folgt, daß $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t')$ ist. Daher kann obige Gleichung auf beiden Seiten bezüglich der Zeit einer Fouriertransformation unterworfen werden. Man erhält dann nach Joachain (1975), Economou (1983) mit der Energie E

$$\{E - \mathcal{H}\}G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (A.1)$$

$G_0(E)$ hat Pole auf der reellen Achse, ist also nicht überall definiert. Aus diesem Grund führt man in der Zeit vorwärts (kausale) und rückwärts (antikausale) propagierende Greensfunktionen ein, die dann wohldefiniert sind.

$$g(t - t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int G_0^\pm(E \pm i\varepsilon) e^{-iE(t-t')} dE \quad (A.2)$$

Nach der Ausintegration in der komplexen Energieebene erhält man $G_0^+(E)$, den kausalen Teilchenpropagator, durch eine Integration über die untere Halbebene mit $t - t' > 0$ oder $G_0^-(E)$, den antikausalen Lochpropagator, mit einer Integration über die obere Halbebene mit $t - t' < 0$. Ist das den Differentialoperator lösende Fundamentalsystem vollständig, dann hat die Greensfunktion folgende Spektraldarstellung.

$$G_0^\pm(E) = \int \frac{|\psi_\lambda \rangle \langle \psi_\lambda|}{(E \pm i\varepsilon) - E(\lambda)} d\lambda . \quad (A.3)$$

Für ein System wie das homogene Elektronengas mit 3-dimensionaler Translationsinvarianz im Ortsraum ist $\lambda = \mathbf{k}$. Zudem ist die Ortsdarstellung von $G_0^\pm(E)$ $G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ nur von der Differenz $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ abhängig. Eine Fouriertransformation von $G_0^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; E)$ und der δ -Funktion in (A.1) bezüglich dieser Differenz ergibt die zu (A.3) äquivalente Darstellung

$$G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(E \pm i\varepsilon) - E(\mathbf{k})} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} . \quad (A.4)$$

Sie ist Ausgangspunkt aller weiteren abgeleiteten Formen von $G_0^\pm$. So kann zum Beispiel nach Übergang in Kugelkoordinaten $\mathbf{k} \rightarrow (k, \vartheta_k, \varphi_k)$ und Wahl eines Koordinatensystems mit $\mathbf{R} = (0, 0, R)$ parallel zur z -Achse die ϑ_k und φ_k -Integration in (A.4) ausgeführt werden. Die k -Integration wird unter Beachtung von $k > 0$ mit Hilfe des Residuensatzes vorgenommen. Für G_0^+ hat man kausale (austretende Wellen) Randbedingungen, für G_0^- antikausale (einfallende Wellen), was die Integrationskontour in der komplexen Ebene festlegt. Man erhält dann die bekannte Form des freien Teilchenpropagators.

$$G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\mathbf{k}^2. \quad (\text{A.5})$$

Ausgehend von (A.1) kann auf die gleiche Weise eine Greensfunktion abgeleitet werden, die eine Koordinatenachse, zum Beispiel die z -Achse, auszeichnet. Diese Greensfunktion besitzt dann eine Symmetrie, die einer Oberfläche in der (x, y) -Richtung angepaßt ist. Setzt man den die (x, y) -Symmetrie berücksichtigenden Ansatz

$$G_0^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int G_0^\pm(z, z'; E) e^{ik_{//}(\mathbf{r}_{//}-\mathbf{r}'_{//})} \frac{d^2\mathbf{k}_{//}}{(2\pi)^2} \quad (\text{A.6})$$

in (A.1) ein und führt einen Koeffizientenvergleich durch, erhält man nach einer Integration mit dem Residuensatz

$$G_0^\pm(z, z'; E) = \mp \frac{i}{k_z} e^{\pm ik_z|z-z'|} \quad k_z := \sqrt{2E - \mathbf{k}_{//}^2}. \quad (\text{A.7})$$

Neben der Gleichheit von (A.4–A.7) läßt sich auch die Gleichheit der in der KKR-Theorie verwendeten Greensfunktionen des potentialfreien Raumes zeigen. Die Idee der KKR-Theorie ist es, die Schrödinger-Gleichung für den Kristall in zwei Etappen zu lösen. In einem Schritt soll nur die Kristallstruktur berücksichtigt werden, im anderen lediglich die Streueigenschaft der Einzelatome, aus deren periodischer Anordnung der Gesamtkristall zusammengesetzt ist. Der erste Schritt soll kurz skizziert werden.

Im Innern eines Kristalls gibt es keine Elektronenquellen, so daß man folgende, alle Vielfachstreuungen beinhaltende, Lippman-Schwinger-Gleichung zu lösen hat.

$$\psi(\mathbf{r}) = \int G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \sum_{\mathbf{r}_s} V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_s) \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (\text{A.8})$$

$G_0^\pm$ ist die in (A.5) definierte Greensfunktion für den potentialfreien Raum. $\mathbf{r}_s$ ist ein Gittervektor. Absicht ist es nun, eine Greensfunktion abzuleiten, die für den potentialfreien Raum mit simulierter Gittersymmetrie die Propagation von Elektronen beschreibt. Durch Vertauschen von Gittersummation und Integration versucht man, die Summation auf die Greensfunktion zu übertragen. Benennt man die Variablen wie folgt um (Kohn, Rostoker (1954))

$$\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}' + \mathbf{r}_s \quad V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_s) \rightarrow V(\mathbf{r}'),$$

nutzt das Bloch-Theorem mit

$$\psi(\mathbf{r}') \rightarrow \psi(\mathbf{r}' + \mathbf{r}_s) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \psi(\mathbf{r}')$$

aus und definiert die potentialfreie Gitter-Greensfunktion

$$G_0^{c,+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) := \sum_{\mathbf{r}_s} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{r}_s; E), \quad (A.9)$$

dann wird die Lippmann-Schwinger Gleichung zu

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}' \in V_{uc}} G_0^{c,+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'$$

mit dem gewünschten Ergebnis, daß die Kristallstruktur nun in der Greensfunktion enthalten ist. V_{uc} ist das Volumen der Wigner-Seitz-Einheitszelle. Das ursprüngliche Integrationsvolumen wird durch die Summe in der Gitter-Greensfunktion auf eine Integration über das Einheitszellenvolumen reduziert. Ist man an der Streueigenschaft einer Schicht interessiert, wie in der Schicht-KKR-Theorie (Kambe (1967)), so erstreckt sich die Gittersummation nur über in einer Schicht liegende Orte $\mathbf{r}_{s//}$.

Eine Kristallgitter-Greensfunktion, die eine von jedem Gitterort austretende Kugelwelle enthält, ist in Verallgemeinerung von (A.5) die Gleichung (A.9), die mit (A.5) zu

$$G_0^{c,\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{r}_{s//}} \frac{e^{\pm i\mathbf{k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{r}_{s//}|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{r}_{s//}|} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{s//}} \quad (A.10)$$

wird. Auf dieselbe Weise wie in (A.4) erhält man

$$G_0^{c,\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{r}_{s//}} \int \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{r}_{s//})}}{(E \pm i\varepsilon) - E(\mathbf{q})} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{s//}} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3}. \quad (A.11)$$

Faßt man die $\mathbf{r}_{s//}$ abhängigen Exponentialfunktionen zusammen, so kann die Gitter- δ -Funktion (3.17) dazu verwendet werden, die $\mathbf{q}_{//}$ -Integration auszuführen. Mit $\mathbf{k}_{g//} := \mathbf{k}_{//} + \mathbf{g}_{//}$ und $k_{gz}^{\pm} = \pm \sqrt{2E - \mathbf{k}_{g//}^2}$ erhält man

$$G_0^{c,\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{2\pi A_{uc}} \sum_{\mathbf{g}_{//}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{e^{iq_z(z-z')}}{(k_{gz}^{\pm 2} \pm i\epsilon) - \frac{1}{2}q_z^2} dq_z e^{i\mathbf{k}_{g//}(\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//})}.$$

Nach einer Ausintegration mit dem Residuensatz folgt daraus die an eine Oberfläche angepaßte Greensfunktion

$$G_0^{c,\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{\mathbf{g}} G_{0,\mathbf{g}}^{c,+} e^{i\mathbf{k}_{g//}(\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//})} e^{ik_{gz}^{\pm}|z-z'|} \quad (A.12)$$

mit $G_{0,\mathbf{g}}^{c,+} := \frac{1}{ik_{gz}^+ A_{uc}}$. Dies ist die von Kambe (1967) abgeleitete Kristallschicht-Greensfunktion für den potentialfreien Raum. Sie wird in der Schicht KKR-Theorie als "Anfangszustand" verwendet, um die Streueigenschaften einer Schicht oder eines aus vielen Schichten zusammengesetzten Schichtsystems zu ermitteln. In der übersichtlicheren Matrixschreibweise lautet diese Greensfunktion

$$\begin{aligned} G_0^{c,+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \sum_{\mathbf{g}, s; \mathbf{g}', s'} G_{0,\mathbf{g}\mathbf{g}'}^{c,+,s,s'} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s \rangle \langle \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s | \mathbf{r}' \rangle \\ &= : (\mathbf{e}_{\mathbf{r}}^+, \mathbf{e}_{\mathbf{r}}^-) \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{G}}_0^{c,+,++} & 0 \\ 0 & \underline{\mathbf{G}}_0^{c,+;--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{\mathbf{r}'}^+ \\ \mathbf{b}_{\mathbf{r}'}^- \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (A.13)$$

Die Koeffizientenmatrix ergibt sich dabei zu

$$G_{0,\mathbf{g}\mathbf{g}'}^{c,+,s,s'} = \frac{1}{ik_{gz}^+ A_{uc}} \delta_{\mathbf{g},\mathbf{g}'} \begin{cases} \delta_{s,+} & \text{falls } z - z' > 0 \\ \delta_{s,-} & \text{falls } z - z' < 0 \end{cases},$$

und die Basis ist definiert durch

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_{\mathbf{r}}^{\pm})_{\mathbf{g}} &:= \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s \rangle = e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^{\pm} \mathbf{r}} = \sum_{l,m} A_l^{(0)m} j_l(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \\ (\mathbf{b}_{\mathbf{r}}^{\pm})_{\mathbf{g}} &:= \langle \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s | \mathbf{r} \rangle = e^{-i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^{\pm} \mathbf{r}} = \sum_{l,m} B_l^{(0)m} j_l(r) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (A.14)$$

mit den Amplituden der ebenen Welle $A_l^{(0)m} := 4\pi i^l (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{g}})$ sowie $B_l^{(0)m} := 4\pi i^{-l} Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{g}})$ und der sphärischen Bessel-Funktion j_l . $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}$ ist der Raumwinkelanteil von $\mathbf{r}$ in der Kugelflächenfunktion $Y_L := Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$. Dabei ist unbedingt zu beachten, daß wegen des Imaginärteils im Potential $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s$ komplex ist und somit $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s \rangle \neq \langle \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^s | \mathbf{r} \rangle^*$ ist.

In dieser Schicht-Greensfunktion findet sich nicht allein die Translationssymmetrie parallel zur Oberfläche wieder, sondern sie ist eine Entwicklung nach ebenen Wellen. Damit ist sie dem potentialfreien ($V = \text{const.}$) Bereich zwischen den Muffin-Tin-Kugeln symmetrieangepaßt.

Neben den Formen (A.10–A.12) läßt sich noch ein Ausdruck für die Greensfunktion finden, der die sphärische Symmetrie innerhalb einer Muffin-Tin Kugel berücksichtigt. Allgemein bekannt ist die Darstellung der Greensfunktion (A.5) nach Drehimpulsen $L := (l, m)$ (Jackson (1983))

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -2ik \sum_L j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}') .$$

$r_{<(>)}$ ist der kleinere (größere) Wert von $|\mathbf{r}|$ oder $|\mathbf{r}'|$. j_l ist die reguläre Besselfunktion, $h_l^{(1)}$ die im Ursprung singuläre Hankelfunktion erster Art. Diese Form der Greensfunktion in (A.10) eingesetzt, ergibt

$$\begin{aligned} G_0^{c,+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = & -2ik \sum_{L, \mathbf{r}_{s//}} \{ j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) \delta_{s,0} \\ & + j_l(kr') h_l^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s//}|) e^{ik|\mathbf{r}_{s//}|} \} Y_L(\widehat{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s//}}) Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}') . \end{aligned}$$

Es kann auf existierende Programme der Gittersummation zurückgegriffen werden (Hopkinson et al. (1980)), wenn die Summation in folgender Weise ausgeführt wird. Man bezieht die von $\mathbf{r}_{s//}$ abhängigen Ausdrücke auf den Ursprung von $\mathbf{r}$, dies geschieht mit

$$h_l^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s//}|) Y_L(\widehat{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s//}}) = \sum_{L'} G_{LL'}^{+,s} j_{l'}(kr) Y_{L'}(\hat{\mathbf{r}}) .$$

$G_{LL'}^{+,s}$ ist nach Pendry (1974) definiert

$$G_{LL'}^{+,s} := 4\pi \sum_{L''} i^{l-l'-l''} h_{l''}^{(1)}(k|\mathbf{r}_{s//}|) Y_{L''}^*(\widehat{-\mathbf{r}_{s//}}) \Omega_{L',L,L''}$$

mit den in (H.1) definierten Gaunt-Koeffizienten $\Omega_{L',L,L''}$, welche durch die Raumwinkelintegration des Produktes dreier Kugelflächenfunktionen entstehen. Man erhält nach Umbenennung der Indizes $L \rightarrow L'$ und $L' \rightarrow L$ eine weitere Darstellung der potentialfreien Schicht-Greensfunktion. Sie ist nicht nur der Schichtsymmetrie angepaßt, sondern besitzt auch sphärische Symmetrie und erfüllt wegen

$h_l^{(1)}$ die Randbedingung einer austretenden Welle.

$$G_0^{c,+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{L, L'} \{ -2ik j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) \delta_{L, L'} + j_l(kr) A_{LL'} j_{l'}(kr') \} Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}') \quad (A.15)$$

In der sogenannten Strukturkonstante $A_{LL'}$ ist die Kristallstruktur in Form der Gittersummation enthalten.

$$A_{LL'} := -2ik \sum_{\mathbf{r}_s} G_{L'L}^{+,s} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_s} \quad (A.16)$$

Damit ist die Gleichheit innerhalb der Gleichungsgruppen (A.4–A.7) und (A.10–A.15) gezeigt.

Anhang B. Die Greensfunktion für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere

In der Verluststromformulierung der inelastischen Elektronenstreuung des Kapitels 3.2 werden Greensfunktionen zur Beschreibung der Propagation der Zustände 3 und 4 benötigt. Diese Propagatoren werden nun für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere berechnet, die Anordnung des Koordinatensystems ist in Bild 31 dargestellt. Dies ist nötig, da in der Literatur Adawi (1964), Schaich, Ashcroft (1968), Feibelman, Duke, Bagchi (1974), Inglesfield, Wikborg (1973), Ishii, Pendry (1989), Trott, Schnittler (1989) zum Teil widersprüchliche Ausdrücke zu finden sind.

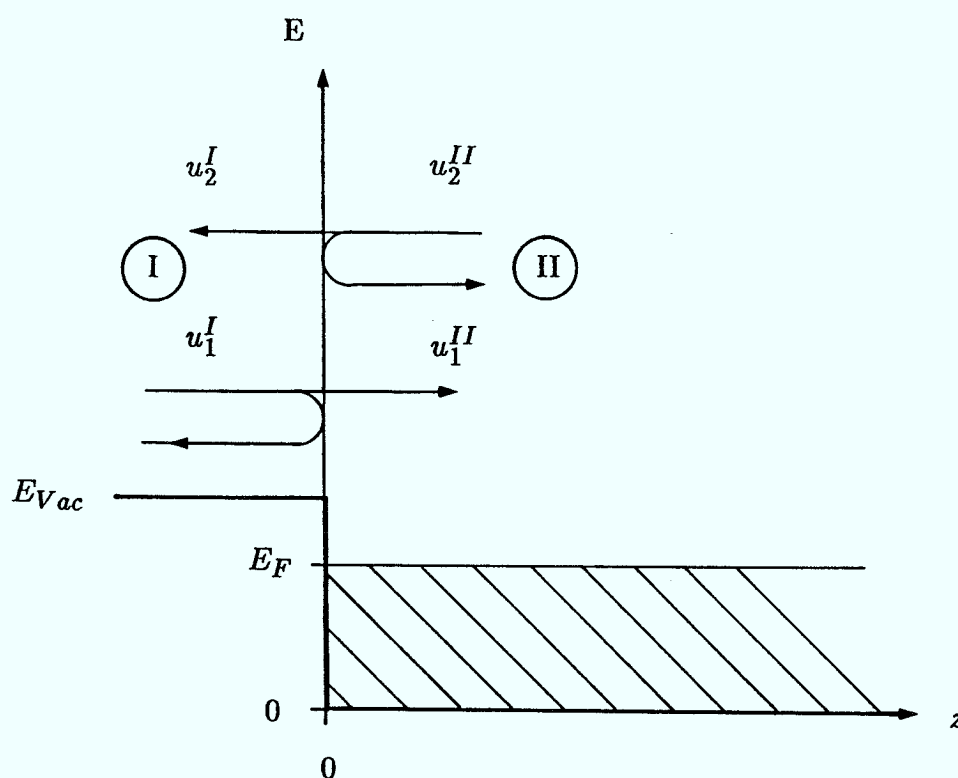


Bild 31 : Das homogene Elektronengas mit Potentialstufe und den möglichen Elektronen-Propagationen, die zu dem verwendeten Fundamentalsystem führen.

Zur Konstruktion der Greensfunktion benötigt man ein Fundamentalsystem des

zugrundeliegenden Differentialoperators. Hier lautet er

$$L[\psi](\mathbf{r}) := \{E - \mathcal{H}(\mathbf{r})\} \psi(\mathbf{r}) = 0 .$$

Für dieses Modell ist $\mathcal{H} := -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} + V(z)$ mit $V(z) := \theta(-z)E_{Vac} + \theta(z)iV_{opt}^i$ der die Propagation beschreibende Hamilton-Operator. Mit dem Imaginärteil im Potential wird die Absorption der Elektronenwelle bei fortlaufender Propagation simuliert. Die Schrödinger-Gleichung kann durch den Ansatz $\psi(\mathbf{r}) = w(\mathbf{r}_{//})u(z)$ in einen nur von der lateralen Symmetrie abhängigen Teil $w(\mathbf{r}_{//}) = e^{i\mathbf{k}_{//}\mathbf{r}_{//}}$ und einen z -abhängigen Teil separiert werden. Dabei ist $\mathbf{k}_{//}$ der Teil des Wellenvektors des betrachteten Teilchens parallel zur Oberfläche. Das gesuchte Fundamentalsystem muß Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k_z^{II^2} \right\} u^I(z) = 0 \quad , \quad k_z^{I^2} = 2(E - E_{Vac}) - k_{//}^2$$

im Gebiet I sein und

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k_z^{II^2} \right\} u^{II}(z) = 0 \quad , \quad k_z^{II^2} = 2(E - iV_{opt}^i) - k_{//}^2$$

im Gebiet II erfüllen. E ist die Energie des Elektrons bezüglich des Energienullpunkts des Gebietes II. Man erhält nach Messiah (1979) das Fundamentalsystem

$$u_1(z) = u_1^I(z) + u_1^{II}(z) = \theta(-z) \left\{ e^{ik_z^I z} + r^{-+} e^{-ik_z^I z} \right\} + \theta(z) t^{++} e^{ik_z^{II} z} \quad (B.1)$$

$$u_2(z) = u_2^I(z) + u_2^{II}(z) = \theta(-z) t^{--} e^{-ik_z^I z} + \theta(z) \left\{ e^{-ik_z^{II} z} + r^{+-} e^{ik_z^{II} z} \right\} . \quad (B.2)$$

Dabei sind die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten gegeben zu

$$\begin{aligned} r^{-+} &= \frac{k_z^I - k_z^{II}}{k_z^I + k_z^{II}} \quad , \quad r^{+-} = -r^{-+} \\ t^{++} &= \frac{2k_z^I}{k_z^I + k_z^{II}} \quad , \quad t^{--} = \frac{k_z^{II}}{k_z^I} t^{++} . \end{aligned} \quad (B.3)$$

Eine Greensfunktion muß nun nach Walther (1972) folgende Bedingungen erfüllen:

- i) $G(z, z')$ erfüllt als Funktion von z für $z \neq z'$ die homogene Differentialgleichung $L[G_{z'}](z) = 0$.
- ii) $G(z, z')$ ist im Lösungsgebiet $\{(z, z') \in \mathbb{R}^2 | a \leq z \leq b \wedge a \leq z' \leq b\}$ stetig in beiden Variablen.

- iii) Hat der Differentialoperator die Gestalt $L[u](z) = p(z)u''(z) + q(z)u'(z) + r(z)u(z) = 0$, macht $\frac{\partial G}{\partial z}$ einen Sprung der Größe $\frac{1}{p(z)}$ auf der Diagonalen des Lösungsgebietes. Dies bedeutet nach Sommerfeld (1978), daß G eine Einheitsquelle am Quellpunkt z' besitzt.
- iv) $G(z, z')$ erfüllt als Funktion von z bei Streuproblemen die homogenen Randbedingungen $R_1[G_{z'}(z)] = R_2[G_{z'}(z)] = 0$. Sommerfeld (1978) nennt diese Bedingung das Ausstrahlungsprinzip mit $R[G_{z'}(z)] = \left\{ \frac{d}{dz} - ik \right\} G_{z'}(z) = 0$. Dies ist bei der Konstruktion der Greensfunktion mit der austretenden Welle-Randbedingung, also der kausalen Greensfunktion G^+ , verbunden.

Courant, Hilbert (1968) oder Walther (1972) geben einen allgemeinen Ansatz für die durch i)–iv) festgelegte Greensfunktion zu

$$G(z, z') = \theta(z - z')[C_1(z)u_1(z') + C_2(z')u_2(z)] \\ + \theta(z' - z)[D_1(z)u_1(z') + D_2(z')u_2(z)]$$

an, wobei im allgemeinen $R_1 \neq R_2 \neq 0$ zugelassen ist. Geht man mit diesem Ansatz in die die Greensfunktion bestimmende Differentialgleichung ein und verwendet die Bedingungen i)–iv), so erhält man ein Gleichungssystem für die unbekannten Koeffizienten C_i, D_i , welches eindeutig lösbar ist.

Hat nun das Problem Randbedingungen $R_1[u_1] = 0$ und $R_2[u_2] = 0$, was hier durch die Randbedingung des Sommerfeld'schen Ausstrahlungsprinzips der Streutheorie erfüllt ist, so erkennt man mit dem Gleichungssystem für die C_i, D_i , daß schon der Ansatz

$$G(z, z') = -\frac{1}{W[u_1, u_2]} \left\{ \theta(z - z')u_1(z)u_2(z') + \theta(z' - z)u_1(z')u_2(z) \right\}$$

genügt, um die gesuchte Greensfunktion zu bestimmen. Dabei ist $W[u_1, u_2]$ die Wronski-Determinante der beiden Lösungsbausteine u_1 und u_2 . Erfolgt die Propagation ausschließlich in Gebiet II , d.h. der Quellpunkt z' und Aufpunkt z der Greensfunktion liegen in II , dann erhält man unter Verwendung von (C.2) für die θ -Funktionen und des Residuensatzes den $\theta(z)\theta(z')$ -Anteil der Greensfunktion

$$G_{0;II \rightarrow II}^+(z, z') = -\frac{i}{k_z^{II}} \left\{ e^{ik_z^{II}|z-z'|} + \frac{1}{2} r^{+-} e^{ik_z^{II}(z+z')} \right\} . \quad (B.4)$$

Somit ist der Propagator der Zustände 3 und 4 für das homogene Elektronengas mit Oberflächenbarriere bekannt.

Anhang C. Zeitumgekehrter LEED-Zustand und Greensfunktion

Für den Zustand des austretenden und dann mit $(E_2, \mathbf{k}_{2//})$ gemessenen Elektrons wird in der Berechnung der Verlustströme (3.31–3.34), verursacht durch die Feynman-Regeln, ein den Zustand beschreibender Propagator benötigt. Die Propagation erfolgt wegen der Messung nicht ungestört, das heißt in den Feynman-Graphen von Bild 4, 5 und in den Ausdrücken der Verlustströme ist die Messung dieses Zustands zu berücksichtigen, wie es in Kapitel 3.2.1 erwähnt wurde. Dies geschieht in (3.40–3.43) für die Verlustströme durch eine δ -Funktion, welche die Messung repräsentiert, die die Propagation des Elektrons stört.

Die Verwendung komplexer Potentiale in der LEED- und Photoemissionstheorie ist seit langem üblich, jedoch ist der dadurch zerstörten Hermitezität des Hamilton-Operators zum Beispiel in Adawi (1964), Mahan (1970), Feibelman, Eastman (1974) nicht genügend Beachtung geschenkt worden. Diese Nicht-Hermitezität hat nach einer Theorie von Bross (1977) und verbessert von Tamura (1989b) insbesondere Auswirkungen auf die Konstruktion des zeitumgekehrten LEED-Zustandes. Die nachfolgenden Betrachtungen basieren auf einer Untersuchung des zeitumgekehrten LEED-Zustands, die von Tamura (1989b) entwickelt wurde.

Nach Morse, Feshbach (1953) finden komplexe Potentiale und damit Energien unter anderem in der Berücksichtigung biorthogonaler Funktionensysteme ihren Niederschlag. Damit ist die Schrödinger-Gleichung

$$(E - \mathcal{H})|\psi\rangle = 0$$

für die Konstruktion des LEED-Zustandes, der in den Kristall hinein exponentiell abfällt, zu verwenden. Lösen der Schrödinger-Gleichung heißt aber immer, daß dies unter Verwendung der Randbedingung geschehen muß. Bei der Konstruktion des LEED-Zustandes hat man die austretende-Welle-Randbedingung im Vakuum zu wählen.

Die assoziierte Wellenfunktion erhält man mit derselben Randbedingung, wenn

$$(E^* - \mathcal{H}^+)|\phi\rangle = 0$$

gelöst wird. Sie propagiert aus dem Kristall heraus, und ihre Amplitude nimmt dabei zu. Die Lösung dieser adjungierten Gleichung ergibt gerade nicht den zeitumgekehrten LEED-Zustand, denn man hat bei einer konjugiert-komplex-Bildung auch die Randbedingung, die zu $|\phi\rangle$ führte, geändert, so daß $|\phi\rangle^* \neq |\psi\rangle$ ist. Vielmehr ist der zeitumgekehrte LEED-Zustand unter der Berücksichtigung der einfallenden-Welle-Randbedingung (Adawi (1964), Mahan (1970)) zu konstruieren, das heißt obige Gleichungen unter Verwendung dieser Randbedingungen zu lösen. Diese Lösungen seien mit $|\psi^e\rangle, |\phi^e\rangle$ bezeichnet. Nach Tamura (1989b) kann man dann durch Vergleich der Randbedingungen den am Detektor (im Vakuum) gemessenen LEED-Zustand $|\phi_{E,k_{//}}^e\rangle$ dazu verwenden, den zeitumgekehrten LEED-Zustand mit $|\psi_{E,-k_{//}}^e\rangle^*$ zu identifizieren.

Nun muß entwickelt werden, wie aus der Greensfunktion dieser zeitumgekehrte LEED-Zustand in die Verluststromberechnung eingeht. Einer besseren Übersichtlichkeit wegen wird der Index e in $|\psi^e\rangle, |\phi^e\rangle$ unterdrückt. Biorthogonale Funktionensysteme haben die Eigenschaft, daß die Orthogonalitätsrelation $\langle \psi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle = \delta_{\lambda,\lambda'}$ gilt. Falls sie ein vollständiges Funktionensystem bilden, gilt für die Propagatoren

$$G^+(E) = \int \frac{|\psi_\lambda\rangle \langle \phi_\lambda|}{E - E(\lambda) + i\epsilon} d\lambda$$

und

$$G^-(E) = \int \frac{|\phi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda|}{E - E^*(\lambda) - i\epsilon} d\lambda .$$

Die der Symmetrie der Oberfläche angepaßte Greensfunktion ist (3.38) (abgeleitet wie (A.6)). Die zeitabhängige Form (A.2) erfüllt nach Economou (1983) für $t_2 > t_1 > t_3$ die Beziehung

$$g^+(t_1 - t_3) = -ig^-(t_1 - t_2)g^+(t_2 - t_3) ,$$

falls $\mathcal{H}^+ = \mathcal{H}$, was im Vakuum bei der Messung des Zustands $|\phi_\lambda^0\rangle$ erfüllt ist. Dies wird dann in Ortsdarstellung und unter Berücksichtigung des am Detektor^[27]

[27] Also im Vakuum, wo der Hamilton-Operator hermitesch ist und es für $|\phi_\lambda^0\rangle$ eine Vollständigkeitsrelation $\int |\phi_\lambda^0\rangle \langle \phi_\lambda^0| d\lambda = 1$ gibt.

gemessenen zeitumgekehrten LEED-Zustands $|\phi_\lambda^0\rangle$ zu

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 | g^+(t_1 - t_3) | \mathbf{r}_3 \rangle &= -i \int \langle \mathbf{r}_1 | g^-(t_1 - t_2) | \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \phi_\lambda^0 \rangle \\ &\times \langle \phi_\lambda^0 | \mathbf{r}_2' \rangle \langle \mathbf{r}_2' | g^+(t_2 - t_3) | \mathbf{r}_3 \rangle d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_2' d\lambda . \end{aligned} \quad (C.1)$$

Die zum Zeitpunkt $t_2 \rightarrow \infty$ erfolgende Messung von $\lambda' = (E_2, \mathbf{k}_{2//})$ kann dann in der Form

$$\langle \psi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') = \delta(E - E_2) \delta(\mathbf{k}_{//} - \mathbf{k}_{2//})$$

in diese Beziehung eingehen. Wird ein Volumenkristall ohne Oberfläche behandelt, ist $d\lambda = \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$ mit Oberfläche $d\lambda = \frac{d^2\mathbf{k}_{//}}{(2\pi)^2}$ [28].

Wählt man für die Greensfunktion die Darstellung (A.3), so kann mit der Orthogonalitätsrelation gezeigt werden, daß

$$\int g^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t_1 - t_2) \phi_\lambda^0(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 = +i\phi_\lambda(\mathbf{r}_1) e^{-iE_\lambda t_1} \theta(-(t_1 - t_2))$$

und

$$\int \phi_\lambda^{0*}(\mathbf{r}_2') g^+(\mathbf{r}_2', \mathbf{r}_3; t_2 - t_3) d^3\mathbf{r}_2' = -i\phi_\lambda^*(\mathbf{r}_3) e^{iE_\lambda t_3} \theta(t_2 - t_3)$$

gilt. Dies, eingesetzt in (C.1), ergibt mit

$$\theta(t_1 - t_3) = -\frac{1}{2\pi i} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega(t_1 - t_3)}}{\omega + i\varepsilon} d\omega \quad (C.2)$$

die Darstellung des Propagators des gemessenen Zustands

$$\begin{aligned} g^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3; t_1 - t_3) &= -i\phi_{E_2, \mathbf{k}_{2//}}(\mathbf{r}_1) \phi_{E_2, \mathbf{k}_{2//}}^*(\mathbf{r}_3) e^{-iE_2(t_1 - t_3)} \\ &= -i\psi_{E_2, -\mathbf{k}_{2//}}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{E_2, -\mathbf{k}_{2//}}(\mathbf{r}_3) e^{-iE_2(t_1 - t_3)} . \end{aligned} \quad (C.3)$$

Die aus dem Kristall austretenden gemessenen Elektronen können mit zeitumgekehrten LEED-Zuständen beschrieben werden.

Diese Eigenschaft wurde schon in der Theorie der Photoemission erstmals von Adawi (1964) für die Berechnung der Endzustände ausgenutzt. In der inelastischen

[28] Mit Oberfläche ist $(E, \mathbf{k}_{//})$ zur eindeutigen Kennzeichnung eines Zustands nötig, ohne Oberfläche $\mathbf{k}$ allein.

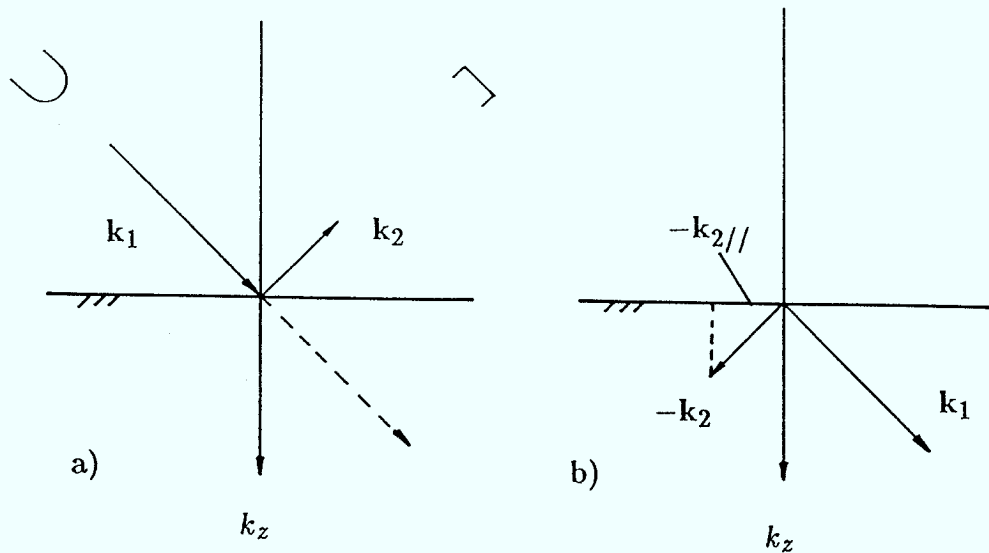


Bild 32 : a) Der aus dem Kristall austretende LEED-Zustand, wie er im Experiment vorgegeben ist, b) wie er in der Rechnung als zeitumgekehrter LEED-Zustand Berücksichtigung findet.

Elektronenstreuung ist die Situation in Bild 32 dargestellt. (C.3) und den zugeordneten Randbedingungen ist zu entnehmen, daß der zeitumgekehrte LEED-Zustand zu berechnen ist wie ein in den Kristall hineinpropagierender LEED-Zustand, nur mit geändertem $k_{2//}$

$$\phi_{E_2, k_{2//}}(\mathbf{r}) = \psi_{E_2, -k_{2//}}^*(\mathbf{r}) \quad (C.4)$$

und unter konjugiert-komplex-Bildung, nachdem $\psi_{E_2, -k_{2//}}(\mathbf{r})$ berechnet wurde. In dieser Weise wird der Propagator (C.3) des gemessenen Zustandes 2 mit Hilfe des zeitumgekehrten LEED-Zustandes in den Programmen ermittelt.

Anhang D. Die Integration über die Oberflächenbrillouinzone

Zur Berechnung der inelastischen Elektronenstreuung im Goldenen-Regel-Formalismus (3.11, 3.12) sowie mit dem Verluststrommodell (3.40–3.43) ist eine Integration über die Oberflächenbrillouinzone von $\mathbf{k}_{3//}$ erforderlich, im ersten Fall verursacht durch die nötige Summe über die Dichte der Zustände, im zweiten durch die Spektraldarstellung der Greensfunktionen. Es bieten sich für die $\mathbf{k}_{3//}$ -Integration verschiedene Methoden an. Die naheliegende ist, die Fläche der Zone mit Stützstellen zu überziehen und eine 2-dimensionale Integration zum Beispiel mit der Tetraedermethode (Ziesche, Lehmann (1983)) auszuführen. Dabei bestimmt die Auswahl der Stützstellen und vor allem ihre Anzahl die Konvergenz des Verfahrens.

Eine andere Methode ist, die Anzahl der Integrationsstützstellen zu minimieren, aber trotzdem einen Einfluß auf die Konvergenz zu behalten. Das heißt, man muß die Stützstellen gezielt nach speziellen Auswahlkriterien bestimmen. Dies ist aber an ein "vernünftiges" Verhalten der zu integrierenden Funktion gebunden, sie muß glatt sein und darf im Integrationsgebiet nicht zu stark variieren. Gerade dies hat die Auswahl eines Potentials mit Imaginärteil für die elastische Streuung in Kapitel 2.2 zum Ziel. Dieses zweite Verfahren, das in der Literatur (Chadi, Cohen (1973), Evarestov, Smirnov (1983)) das "spezielle Punkte" Auswahlverfahren genannt wird, ist hier in seiner 2-dimensionalen Version (Cunningham (1974)) angewendet worden.

Das "spezielle Punkte" Verfahren setzt voraus, daß die zu integrierende Funktion periodisch ist. Das heißt hier, daß der Verluststrom $j(\mathbf{k}_{3//} + \mathbf{g}_{//}) = j(\mathbf{k}_{3//})$ erfüllen sollte. $\mathbf{g}_{//}$ ist dabei ein reziproker Gittervektor parallel zur Oberfläche. Die einzigen Größen im Verluststrom, die von $\mathbf{k}_{3//}$ abhängen, sind die $\mathbf{q}_{\beta\beta'//}$ aus (3.21) und die Zustände $\Psi_{E_3, \mathbf{k}_{3//}}$ und $\Psi_{E_4, \mathbf{k}_{4//}}$. Der Zustand $\Psi_{E_4, \mathbf{k}_{4//}}$ hängt von $\mathbf{k}_{3//}$ ab, weil er wegen der Impulserhaltung parallel zur Oberfläche (3.17) und (3.21) nach der $\mathbf{k}_{4//}$ -Integration mit $\mathbf{k}_{4//} = \mathbf{k}_{3//} + \mathbf{g}_{//} + \mathbf{q}_{\beta\beta'//}$ ebenfalls $\mathbf{k}_{3//}$ enthält. Parallel zur Oberfläche ist eine Blochbedingung für die Zustände und Propagatoren gültig, woraus zum Beispiel für die Zustände folgt $\Psi_{E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//} + \mathbf{g}_{//}}(\mathbf{r}) = \Psi_{E_\alpha, \mathbf{k}_{\alpha//}}(\mathbf{r})$, so daß der Wellenvektor $\mathbf{k}_{\alpha//}$ repräsentativ für alle $\mathbf{k}_{\alpha//} + \mathbf{g}_{//}$ steht. Liegt zum Beispiel $\mathbf{k}'_{\alpha//}$ nicht in der ersten Brillouinzone, so

kann er durch $\mathbf{k}_{\alpha//} + \mathbf{g}_{//} \equiv \mathbf{k}'_{\alpha//}$ in die erste Brillouinzone transformiert werden. Das heißt, wenn $\Psi_{E_{\alpha}, \mathbf{k}'_{\alpha//}}(\mathbf{r})$ Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, dann ist es auch $\Psi_{E_{\alpha}, \mathbf{k}_{\alpha//}}(\mathbf{r})$. Die Zustände $\alpha = 3, 4$ sind damit $\mathbf{g}_{//}$ -periodisch. Dies gilt in der gleichen Weise für die Propagatoren.

Der Verluststrom ist nun noch wegen des Impulsübertrags $\mathbf{q}_{\beta\beta'}$ (3.21) von $\mathbf{g}_{//}$ abhängig. Praktisch wird die Berechnung von (3.45–3.48) und (3.19–3.20) aber mit $\mathbf{g}_{//} = \mathbf{0}$ durchgeführt. Dies ist dadurch begründet, daß $V(\mathbf{q}_{\alpha\beta//})$ eine $\mathbf{g}_{//}$ Abhängigkeit zu vierter Potenz im Nenner enthält, so daß die Mitnahme von $\mathbf{g}_{//} \neq \mathbf{0}$ Termen in (2.5) $V(\mathbf{q}_{\alpha\beta//} + \mathbf{g}_{//}) \ll V(\mathbf{q}_{\alpha\beta//})$ zur Folge hat. Die Verlustströme oder Übergangswahrscheinlichkeiten mit $V(\mathbf{q}_{\alpha\beta//} + \mathbf{g}_{//})$ würden einen verschwindend kleinen Beitrag ergeben. Mit $\mathbf{q}_{\beta\beta'//} = \mathbf{q}_{\beta\beta'//}(\mathbf{g}_{//} = \mathbf{0})$ in (3.45–3.48) oder (3.19–3.20) und der Periodizität der Zustände folgt, daß der Verluststrom oder die Übergangsmatrixelemente $\mathbf{g}_{//}$ -periodisch sind und damit die "spezielle Punkte" Methode anwendbar ist.

Nun soll die Funktionsweise dieser Methode kurz dargestellt werden. Wegen der Gitterperiodizität im reziproken Wellenvektorraum kann der Verluststrom als Funktion von $\mathbf{k}_{3//}$ in eine Fourierreihe entwickelt werden.

$$j(\mathbf{k}_{3//}) = j_0 + \sum_{1 \leq c_m \leq c_{m+1}}^{\infty} \sum_{\{i | |\mathbf{R}_m^i| = c_m\}} j_m e^{i\mathbf{k}_{3//} \cdot \mathbf{R}_m^i} \quad (D.1)$$

Aus der Theorie der Fourierreihen folgt, daß die $\mathbf{R}_m^i$ die Gittervektoren des Kristallortsraumgitters sein müssen. Das vollständige Orthonormalsystem $A_m := \sum_i e^{i\mathbf{k}_{3//} \cdot \mathbf{R}_m^i}$ ist so geordnet, daß es die Gittervektoren, die auf einem Kreis mit Radius c_m liegen, separat abzählt und dann zu immer größeren Radien übergeht. j_0 ist der Term ($\mathbf{R}_{m=0}$)0-ter Ordnung in dieser Fourierentwicklung, wie er bei jeder Entwicklung nach einem vollständigen Orthogonalsystem entsteht.

Für die hier zu behandelnde Gittersymmetrie gilt nach Chadi, Cohen (1973) (A_{uc} ist die Fläche der 2-dimensionalen OBZ-Einheitszelle)

$$\frac{A_{uc}}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{k}_{3//} \in OBZ} A_m(\mathbf{k}_{3//}) d^2 \mathbf{k}_{3//} = 0 \quad (D.2a)$$

$$\frac{A_{uc}}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{k}_{3//} \in OBZ} A_n(\mathbf{k}_{3//}) A_m(\mathbf{k}_{3//}) d^2 \mathbf{k}_{3//} = N_n \delta_{mn} \quad (D.2b)$$

Der über die Oberflächenbrillouinzone gemittelte Strom ist dann

$$\bar{j} = \frac{A_{uc}}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{k}_{3//} \in OBZ} j(\mathbf{k}_{3//}) d^2 \mathbf{k}_{3//} \quad (D.3)$$

und wird, falls man (D.2a) in (D.1) einsetzt, zu $\bar{j} = j_0$. Gäbe es ein $\mathbf{k}_{3//}^0$ mit der Eigenschaft, daß $A_m(\mathbf{k}_{3//}^0) = 0$ für alle m , würde man dasselbe Ergebnis $\bar{j} = j_0$ auch ohne Integration erhalten. Dieses $\mathbf{k}_{3//}^0$ wird nur in Spezialfällen existieren und schwierig zu finden sein. Man sucht stattdessen, um die Integration durch eine Summation zu ersetzen, die Menge von sogenannten erzeugenden Punkten $\mathbf{k}_{3//}^n$, bei denen $A_m(\mathbf{k}_{3//}^n)$ auf einer möglichst großen Anzahl von Ringen auf dem Ortsraumgitter null wird. Daher fordern Chadi, Cohen (1973), daß die Auswahl der $\mathbf{k}_{3//}^n$

$$\sum_{n=1}^N \alpha_n A_m(\mathbf{k}_{3//}^n) = 0 \quad (D.4)$$

mit

$$\sum_{n=1}^N \alpha_n = 1 \quad (D.5)$$

erfüllen muß.

Die Gleichung (D.4) erfordert das Lösen goniometrischer Gleichungen n -ter Ordnung. Im allgemeinen ist das nicht möglich, so daß man auf eine geschickte optimale Wahl (Alternativen zu Chadi, Cohen (1973) bieten Monkhorst, Pack (1976)) der erzeugenden Punkte angewiesen ist.

Multipliziert man (D.1) mit (D.5), so erhält man für den Mittelwert

$$j_0 = \sum_{n=1}^N \left\{ \alpha_n j(\mathbf{k}_{3//}^n) - \sum_{m=N+1}^{\infty} \alpha_n j_m A_m(\mathbf{k}_{3//}^n) \right\} .$$

N ist die Anzahl der Ringe, auf denen A_m Null ist. j_m ist der Fourierkoeffizient,

der, je größer der Radius der Ringe wird, einen immer kleineren Wert annimmt.

OBZ	Anzahl der $\mathbf{k}_{//}^n$	$\mathbf{k}_{//}^n$	N mit $\sum_{m=1}^N A_m = 0$
$fcc(100)$	2	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{2}\left(\frac{1}{2}\right), \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}\left(\frac{1}{4}\right)$	9
$fcc(100)$	3	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{2}\left(\frac{1}{8}\right)$	29
$fcc(100)$	n	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{2}\left(\frac{1}{2}\right)^n\left(\frac{1}{1}\right)$	...
$bcc(110)$	2	$\frac{\pi}{2a}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right), \frac{\pi}{2a}\left(\frac{1}{\sqrt{2}/2}\right)$	10
$bcc(110)$	3	$\frac{\pi}{2a}\left(\frac{1}{\sqrt{2}/4}\right)$	34
$bcc(110)$	n	$\frac{\pi}{2a}\left(\frac{1}{2}\right)^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$	...

Tab. 3: Erzeugende und spezielle Punkte für eine $bcc(110)$ oder $fcc(100)$ Oberflächenbrillouinzone (OBZ). Dabei ist a die Gitterkonstante des betreffenden Materials. $\mathbf{k}_{//}^n$ sind die erzeugenden Punkte. Es ist zu beachten, daß die Darstellung der erzeugenden Punkte von der Wahl des Koordinatensystems bezüglich der Kristallorientierung abhängt.

Näherungsweise läßt sich das gemittelte $\bar{j}$ berechnen durch

$$j_0 = \sum_{n=1}^N \alpha_n j(\mathbf{k}_{3//}^n) .$$

Man ersetzt die Integration somit durch eine gewichtete Summe über den an den speziellen Punkten ausgewerteten Verluststrom. Dabei hat man den Fehler $\mathbf{R}_n = \sum_{m=N+1}^{\infty} j_m \sum_n \alpha_n A_m(\mathbf{k}_{3//}^n)$ gemacht. Chadi, Cohen (1973) zeigen, daß dieser Fehler sehr schnell klein wird, je glatter die zu integrierende Funktion ist^[29] und je besser die Wahl der $\mathbf{k}_{3//}^n$ war. Hat man mindestens zwei $\mathbf{k}_{3//}^n$ gefunden, so ist es möglich, sich durch die Symmetrietransformationen T der Punktgruppe des Kristalls die gesuchten speziellen Punkte zu verschaffen.

$$\mathbf{k}_{3//}^{sp} = \mathbf{k}_{3//}^1 + T \circ \mathbf{k}_{3//}^2, \quad \alpha_{sp} = \frac{1}{n_{T,p}}$$

[29] In den Fehler geht der Gradient der zu integrierenden Funktion linear ein.

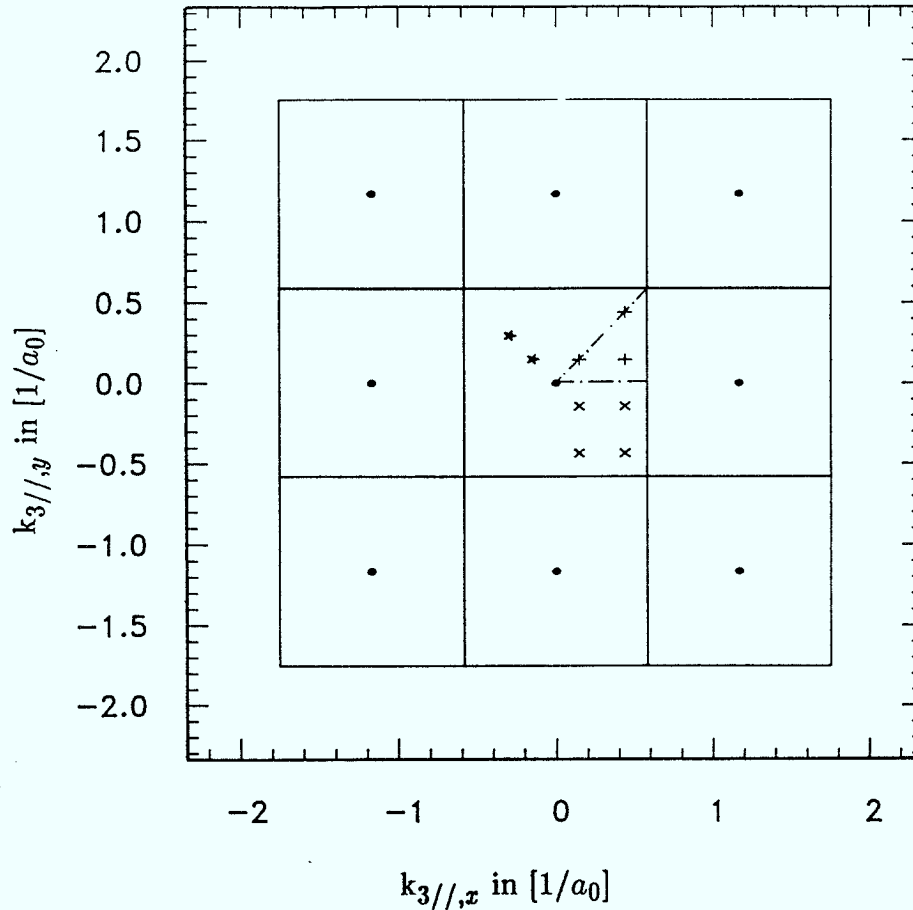


Bild 33 : Zwei erzeugende Punkte in der bcc(110) Oberflächenbrillouinzone sind mit $\star$ gekennzeichnet und in den ersten Quadranten geklappt zu denken. Die durch Symmetrietransformationen daraus erzeugten speziellen Punkte sind durch $\times$ dargestellt, sie sind ebenfalls in den ersten Quadranten transformiert vorzustellen. Die in den irreduziblen Teil der OBZ transformierten speziellen Punkte sind mit $+$ symbolisiert.

$n_{T,p}$ ist die Anzahl der Gruppenelemente.

Chadi, Cohen (1973) haben gezeigt, daß mit $k_{3//}^{sp}$ die A_m 's auf derselben Anzahl von Ringen null werden wie mit den erzeugenden Punkten. Dieses Verfahren, aus den erzeugenden Punkten die speziellen Punkte zu berechnen, kann sukzessive fortgesetzt werden, wenn zusätzliche erzeugende Punkte $k_{3//}^n$, die die A_m 's auf

einer größeren Anzahl von Ringen zu Null machen, gefunden werden.

$$\mathbf{k}_{3//}^{sp_i} = \mathbf{k}_{3//}^{sp_{i-1}} + T \circ \mathbf{k}_{3//}^n \quad , \quad \alpha_{sp} = \left(\frac{1}{n_{T,sp}} \right)^{sp_i-1} .$$

Cunningham (1974) gibt für eine große Gruppe von Oberflächenbrillouinzone eine Auswahl von erzeugenden Punkten an.

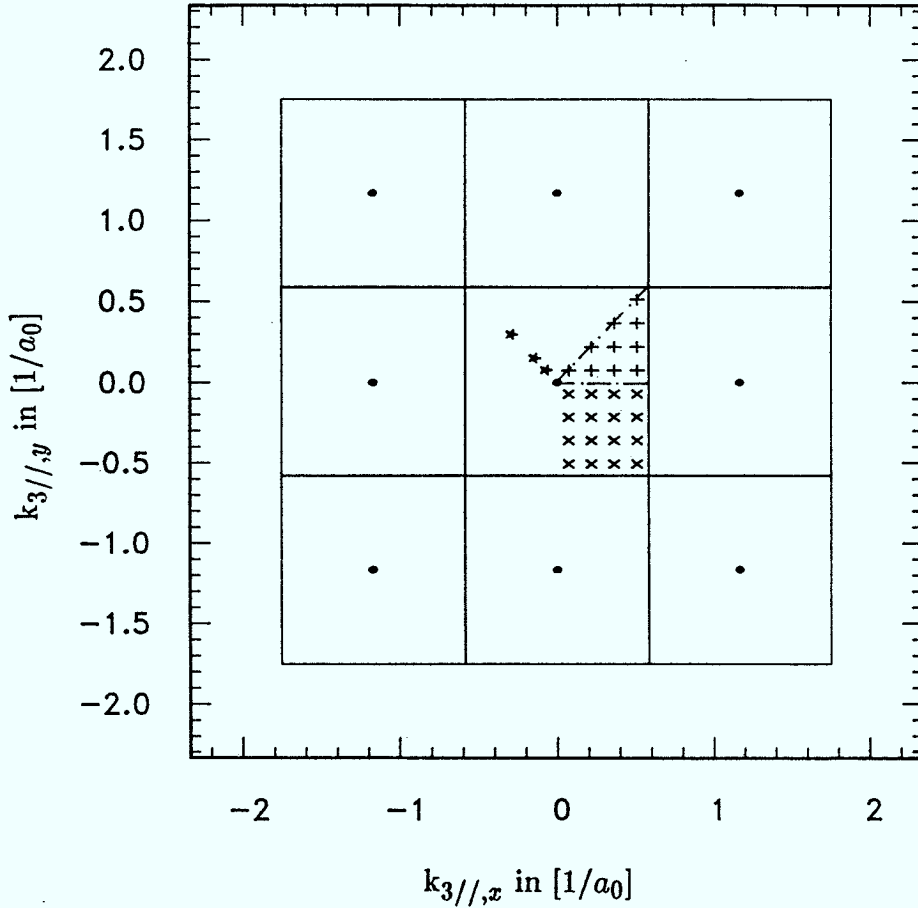


Bild 34: Drei erzeugende Punkte in der fcc(100) Oberflächenbrillouinzone sind mit $\star$ gekennzeichnet und in den ersten Quadranten geklappt zu denken. Die durch Symmetrietransformationen daraus erzeugten speziellen Punkte sind durch $\times$ dargestellt, sie sind ebenfalls in den ersten Quadranten transformiert vorzustellen. Die in den irreduziblen Teil der OBZ transformierten speziellen Punkte sind mit $+$ symbolisiert.

Ist die zu summierende Funktion nicht nur translationsinvariant bezüglich $\mathbf{g}_{//}$,

sondern besitzt sie auch die Symmetrie der Punktgruppe des Kristalls, dann ist eine Integration über die volle Oberflächenbrillouinzone nicht mehr nötig. Eine Integration über den Teil der Oberflächenbrillouinzone, der durch Anwendung der Symmetrietransformationen die ganze Zone erzeugt, ist dann erforderlich. Die volle Symmetrie besitzt zum Beispiel die Elektronendichte in der Einheitszelle des Kristalls. Leider haben die Zustände und Propagatoren diese Symmetrie nicht $\langle T\beta|\mathbf{r} \rangle \neq \langle \beta|\mathbf{r} \rangle$, so daß man bei der Verluststromberechnung über die volle Oberflächenbrillouinzone integrieren muß.

In dieser Arbeit wurden verschiedene erzeugende Punktemengen der bcc(110) und fcc(100) Oberflächenbrillouinzone mit (D.4) untersucht. Dabei haben sich die in Tab. 3 aufgeführten Punkte als jene herausgestellt, die die Funktion (D.4) auf der größten Anzahl von Ringen zu Null machen. In Bild 33 werden die speziellen Punkte für die fcc(100) Zone, gebildet aus zwei erzeugenden Punkten, dargestellt, in Bild 34 die für drei erzeugende Punkte. Die Tabelle 2 gibt für bcc(110)- sowie fcc(100)-Geometrie die erzeugenden und speziellen Punkte an sowie die Anzahl der Ringe, auf denen die Summe der A_m 's dann zu null gemacht werden kann.

Anhang E. Das Transformationsverhalten von Zuständen und Greensfunktionen in der fcc (100) Oberflächenbrillouinzone

Die Berechnung der Verlustströme oder der Übergangswahrscheinlichkeiten (3.19–3.20) erfordert eine 2-dimensionale $\mathbf{k}_{3//}$ -Integration über die Oberflächenbrillouinzone (OBZ) des betrachteten Kristalls. Der Rechenaufwand kann reduziert werden, wenn dabei berücksichtigt wird, daß die Gesamtbrillouinzone aus dem irreduziblen Teil (IBZ) durch Symmetrietransformationen der Punktgruppe des Kristalls erzeugt werden kann. Damit folgt ebenfalls, daß alle von $\mathbf{k}_{3//}$ abhängenden Zustände und Greensfunktionen mit $\mathbf{k}_{3//} \in OBZ$ aus den Zuständen und Greensfunktionen $\mathbf{k}_{3//} \in IBZ$ erzeugt werden können. Da über die ganze Oberflächenbrillouinzone integriert werden muß, erleichtert dies die Berechnung der Zustände und Greensfunktionen, denn sie können in der irreduziblen Oberflächenbrillouinzone berechnet und dann in die gesamte Oberflächenbrillouinzone transformiert werden. Für einen Zustand $|\beta'\rangle = R \circ |\beta\rangle$ mit R aus der Punktgruppe des Kristalls gilt nach Greiner (1985) oder Fernando et al. (1989)

$$\langle \mathbf{r} | \beta' \rangle = \langle \mathbf{r} | R \circ \beta \rangle = \langle R^{-1} \circ \mathbf{r} | \beta \rangle \quad ,$$

das heißt

$$\langle \mathbf{r} | \beta' \rangle = \psi_{R \circ \beta}(\mathbf{r}) = \psi_{\beta}(R^{-1} \circ \mathbf{r}) \quad .$$

Mit diesem Zusammenhang kann das Transformationsverhalten von Zuständen und Greensfunktionen untersucht werden. In der Drehimpulsbasis, mit der z -Achse senkrecht zur Oberfläche in den Kristall hinein zeigend, haben sie die Form ($L := (l, m)$) (5.1) und

$$\begin{aligned} \psi_{E_3, \mathbf{k}_{3//}}(\mathbf{r}) &= \sum_L A_L(E_3, \mathbf{k}_{3//}) J_l(k_3 r) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) \\ G_{E_3, \mathbf{k}_{3//}}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{L, L'} (-2ik_3 J_l(k_3 r_<) \delta_{L, L'} H_l(k_3 r_>) \\ &\quad + J_l(k_3 r) X_{L, L'} J_{l'}(k_3 r') Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}^*(\hat{\mathbf{r}}')) \quad . \end{aligned}$$

Zum Beispiel ist bei der Operation der Spiegelung an der x -Achse der Operator R im Ortsraum darstellbar mit $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Daraus folgt, daß $R = R^{-1}$ ist. Die Kugelflächenfunktion hat dann das Transformationsverhalten

$$Y_l^{|m|}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{|m|} C_l^{|m|} P_l^{|m|}(\vartheta) e^{i|m|\varphi} \xrightarrow{R^{-1}} (-1)^{|m|} C_l^{|m|} P_l^{|m|}(\vartheta) e^{-i|m|\varphi} \quad .$$

$C_l^{|m|}$ ist eine Normierungskonstante. $P_l^{|m|}(\vartheta)$ sind die verallgemeinerten Legendre Polynome. Damit transformiert sich dann der Zustand

$$\psi_{E_3, \mathbf{k}_{3//}}(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} A_l^m J_l(k_3 r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \xrightarrow{R^{-1}} \sum_{l,m} A_l^m J_l(k_3 r) (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{r}})$$

$$\psi_{E_3, R\mathbf{k}_{3//}}(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} (-1)^m A_l^{-m} J_l(k_3 r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) .$$

A_l^m wird unter der Operation der Spiegelung an der xz -Ebene zu $(-1)^m A_l^m$. Auf diese Weise kann für eine beliebige Oberflächenbrillouinzone das Transformationsverhalten der Zustände und Greensfunktionen untersucht werden. Für eine fcc(100) Oberflächenbrillouinzone ist dies für die Amplituden der Zustände und Strukturkonstanten der Greensfunktion durchgeführt und in Tab. 4, 5 aufgelistet.

R	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
R^{-1}	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\varphi \rightarrow \varphi'$	$\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2} - \varphi$	$\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2} + \varphi$	$\varphi \rightarrow \frac{3\pi}{2} - \varphi$
$Y_l^m(R^{-1}\Omega)$	$(-1)^m Y_l^{-m}$	$(i)^m Y_l^m$	$(i)^m Y_l^{-m}$
$\psi_{E, \mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}})$	$(-1)^m A_l^{-m}$	$(i)^m A_l^m$	$(i)^{-m} A_l^{-m}$
$G_{E, \mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}')$	$(-1)^{m+m'} X_{l,l'}^{-m, -m'}$	$(i)^m (-i)^{m'} X_{l,l'}^{m, m'}$	$(-i)^m (i)^{m'} X_{l,l'}^{-m, -m'}$

Tab. 4: Transformationsverhalten der Amplituden der Zustände und der Strukturkonstanten der Greensfunktion aus dem irreduziblen Teil heraus in die Gesamt-fcc(100) Oberflächenbrillouinzone. Es ist dabei $\mathbf{r} \rightarrow \tilde{\mathbf{r}} := R^{-1}\mathbf{r}$.

R	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
R^{-1}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
$\varphi \rightarrow \varphi'$	$\varphi \rightarrow \pi + \varphi$	$\varphi \rightarrow \pi - \varphi$
$Y_l^m(R^{-1}\Omega)$	$(-1)^m Y_l^m$	Y_l^{-m}
$\psi_{E,\mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}})$	$(-1)^m A_l^m$	A_l^{-m}
$G_{E,\mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}')$	$(-1)^{m+m'} X_{l,l'}^{m,m'}$	$X_{l,l'}^{-m,-m'}$

R	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
R^{-1}	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\varphi \rightarrow \varphi'$	$\varphi \rightarrow \frac{3\pi}{2} + \varphi$	$\varphi \rightarrow \frac{3\pi}{2} - \varphi$
$Y_l^m(R^{-1}\Omega)$	$(-i)^m Y_l^m$	$(-i)^m Y_l^{-m}$
$\psi_{E,\mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}})$	$(-i)^m A_l^m$	$(-i)^{-m} A_l^{-m}$
$G_{E,\mathbf{k}_{//}}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}')$	$(-i)^m (i)^{m'} X_{l,l'}^{m,m'}$	$(i)^m (-i)^{m'} X_{l,l'}^{-m,-m'}$

Tab. 5: Transformationsverhalten der Amplituden der Zustände und der Strukturkonstanten der Greensfunktion aus dem irreduziblen Teil heraus in die Gesamt-fcc(100) Oberflächenbrillouinzone . Es ist dabei $\mathbf{r} \rightarrow \tilde{\mathbf{r}} := R^{-1}\mathbf{r}$.

Anhang F. Die Radialintegrale der Matricelementberechnung

Die Separation der Zustände (5.1) und Greensfunktionen (5.25, 5.37) in kugelkoordinatenabhängige Anteile ermöglicht es, die $|\mathbf{r}|$ -Integration und die Integration über den Raumwinkel zu trennen. Die Radialintegrale im sphärischen Potential-Gebiet werden numerisch ausgewertet, da die Lösungen der radialen Schrödinger-Gleichung, auf einem radialen Netz tabelliert, numerisch bestimmt werden müssen. Für die Matricelemente des Goldenen-Regel-Formalismus erhält man für die Radialintegrale, an denen der zeitumgekehrte LEED-Zustand 2 beteiligt ist,

$$\mathcal{R}_{l_2, l_1, l_{\alpha'}}^{T, \eta_2 \eta_{\alpha'}}(q_{\beta\beta'}) := \int_{r=0}^{r=R_{MT}} J_{l_2}^{\eta_2}(r) j_l(q_{\beta\beta'} r) J_{l_{\alpha'}}^{\eta_{\alpha'}}(r) r^2 dr \quad (F.1)$$

und für das verbleibende Radialintegral ohne Zustand 2 Beteiligung

$$\mathcal{R}_{l_4, l_1, l_{\alpha'}}^{\eta_4 \eta_{\alpha'}}(q_{\beta\beta'}) := \int_{r=0}^{r=R_{MT}} J_{l_4}^{\eta_4*}(r) j_l(q_{\beta\beta'} r) J_{l_{\alpha'}}^{\eta_{\alpha'}}(r) r^2 dr \quad (F.2)$$

Die Radialmatricelemente zur Berechnung der Verlustströme sind für das Matricelement (3.49a)

$$\mathcal{R}_{12; l_1, l_1, l_2}^{\sigma_1}(q_{12}) := \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{12} r_3) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_3) r_3^2 dr_3 \quad (F.3)$$

für das Matricelement (3.49b)^[30]

$$\mathcal{R}_{21; l_1, l_1, l_2}^{\sigma_1}(q'_{21}) := \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1}(r_3) j_l(q'_{21} r_3) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 \quad (F.4)$$

Die Matricelemente, die die Greensfunktionen beinhalten, müssen den atomaren Teil der radialen Greensfunktion berücksichtigen, d.h. den Fall r und r' in derselben Einheitszelle, was dann zu dem $-2ikJ_l(r_<)H_l^+(r_>)$ -Teil in den Radialintegralen führt. Durch die kleiner-größer Relation in den Variablen gestalten sich die Radialintegrale komplizierter. Aus Bild 4 kann man entnehmen, daß für die

^[30] $q_{\beta\beta'}$ enthält q_z und $q'_{\beta\beta'}$ hängt von q'_z ab.

Berechnung von j_1 und j_2 die Propagation des Zustands 1 nach 2 oder 1 nach 4 getrennt erfolgt von der Propagation des Zustands 3 nach 4 oder 3 nach 2. Daraus folgt, dass die Propagatoren der Zustände 3 und 4 oder 3 und 2 von denselben Variablen abhängen und von den Variablen der Propagatoren 1 und 2 oder 1 und 4 absepariert sind. Dies gestaltet die Radialintegrale für j_1, j_2 einfacher als die für j_3, j_4 .

Für den Strom j_1 in (3.49c) erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{34;l_3,l,l',l_4}^{1,\sigma_4}(q_{12}, q'_{21}) &:= 4k_3^* k_4 \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+,\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) H_{l_4}^{+,\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 \\ &+ J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{+,\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) H_{l_4}^{+,\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 \end{aligned} \quad (F.5)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{34;l_3,l,l',l_4,l'}^{2,\sigma_4}(q_{12}, q'_{21}) &:= 2ik_3^* \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+,\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) J_{l'}^{\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 \\ &+ J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) J_{l'}^{\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{+,\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 \end{aligned} \quad (F.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{34;l'_3,l,l,l_4,l'_3}^{3,\sigma_4}(q_{12}, q'_{21}) &:= -2ik_4 \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) H_{l_4}^{+,\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 \\ &+ J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21} r_4) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12} r_5) H_{l_4}^{+,\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 \end{aligned} \quad (F.7)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{34;l'_3,l,l'_4,l_4,l',l_3}^{4,\sigma_4}(q_{12},q'_{21}) &:= \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_l(q'_{21}r_4) J_{l'_4}^{\sigma_4}(r_4) r_4^2 dr_4 \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_5) j_{l'}(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_4}(r_5) r_5^2 dr_5 .
\end{aligned} \tag{F.8}$$

An der Berechnung von (3.49d) sind

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{14;l_4,l,l'_1,l_1,l',l'_4}^{1,\sigma_4}(q_{12},q'_{21}) &:= -2ik_4 \int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_2) j_l(q'_{41}r_2) J_{l'_1}^{\sigma_1}(r_2) \\
&\times \int_{r_3=0}^{r_3=r_2} J_{l'_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_{l'}(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 \\
&+ J_{l'_1}^{\sigma_1}(r_2) j_l(q'_{41}r_2) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_2) \\
&\times \int_{r_3=r_2}^{r_3=R_{MT}} J_{l'_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_{l'}(q_{14}r_3) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_3) r_3^3 dr_3 r_2^2 dr_2
\end{aligned} \tag{F.9}$$

und

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{14;l'_4,l,l'_1,l_1,l',l_4}^{2,\sigma_4}(q_{14},q'_{41}) &:= \int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} J_{l'_1}^{\sigma_1}(r_2) j_l(q'_{41}r_2) J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 \\
&\times \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l'_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_{l'}(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3
\end{aligned} \tag{F.10}$$

beteiligt. In die Berechnung von (3.49e) gehen

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{23;l'_3,l'_2,l',l,l_2}^{1,\sigma_4}(q_{14},q'_{41}) &:= 2ik_3^* \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l'_3}^{+;\sigma_4*}(r_4) j_{l'}(q_{14}r_4) J_{l'_2}^{\sigma_4}(r_4) \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l'_2}^{\sigma_4*}(r_5) j_l(q'_{41}r_5) J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
&+ J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_{l'}(q_{14}r_4) J_{l'_2}^{\sigma_4}(r_4) \\
&\times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} J_{l'_2}^{\sigma_4*}(r_5) j_l(q_{41}r_5) H_{l'_3}^{+;\sigma_4*}(r_5) r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4
\end{aligned} \tag{F.11}$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{23;l'_3,l'_2,l',l,l_2,l_3}^{2,\sigma_4}(q_{14},q'_{41}) &:= \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_4*}(r_4) j_{l'}(q_{14}r_4) J_{l'_2}^{\sigma_4}(r_4) r_4^2 dr_4 \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l_2}^{\sigma_4*}(r_5) j_l(q'_{41}r_5) J_{l_3}^{\sigma_4*}(r_5) r_5^2 dr_5 \end{aligned} \quad (F.12)$$

ein. Für den Strom j_3 mit (3.47) sind, wie in Bild 5 dargestellt, Produkte zweier Greensfunktionen mit fortlaufender Propagation erforderlich. Die Linien, die die Propagation der Elektronen und Löcher kennzeichnen, sind nicht zertrennt, woraus folgt, daß die Propagatoren und damit die Radialintegrale von jeweils zwei der Variablen $r_2, r_3, \dots, r_5$ abhängen. Somit erhält man für die Radialintegrale wieder wegen der kleiner-größer Relation im atomaren Teil der radialen Greensfunktionen kompliziertere Radialintegrale in (3.49f)

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{1,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) &= 4k_3^*k_4(\mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{11,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) \\ &+ \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{12,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) \\ &+ \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{13,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) \\ &+ \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{14,\sigma_1}(q_{12},q'_{41})) \quad , \end{aligned} \quad (F.13)$$

wobei für den Fall $r_5 > r_4 \wedge r_5 > r_2$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l',l_2,l_3,l}^{11,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) &= \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_5) \\ &\times \int_{r_4=0}^{r_4=r_5} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\ &\times \int_{r_2=0}^{r_2=r_5} J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 r_5^2 dr_5 \quad , \end{aligned}$$

für den Fall $r_2 > r_5 > r_4$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l'',l_2,l_3,l}^{12,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) &= \int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_2} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) \\ &\times \int_{r_4=0}^{r_4=r_5} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 r_5^2 dr_5 r_2^2 dr_2, \end{aligned}$$

für den Fall $r_4 > r_5 > r_2$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l'',l_2,l_3,l}^{13,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) &= \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) \\ &\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_5) \\ &\times \int_{r_2=0}^{r_2=r_5} J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 \end{aligned}$$

und für $r_5 < r_4 \wedge r_5 < r_2$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2341;l_4,l''',l_1,l'',l_2,l_3,l}^{14,\sigma_1}(q_{12},q'_{41}) &= \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) \\ &\times \int_{r_4=r_5}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\ &\times \int_{r_2=r_5}^{r_2=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 r_5^2 dr_5 \end{aligned}$$

numerisch zu berechnen sind. Weiter müssen für (3.49f) in j_3

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{2341;l'_4,l''_4,l_1,l'_1,l_2,l'_2,l_3,l'_3,l_4,l'_4}^{2,\sigma_4}(q_{12},q'_{41}) &:= 2ik_3^* \int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 \\
&\times \left(\int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) \right. \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
&+ J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) \\
&\times \left. \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 \right)
\end{aligned} \tag{F.14}$$

und

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{2341;l_4,l''_4,l_1,l'_1,l_2,l'_2,l_3,l'_3,l_4,l'_4}^{3,\sigma_4}(q_{12},q'_{41}) &:= -2ik_4 \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\
&\times \left(\int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) \right. \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_2} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
&+ J_{l_4}^{\sigma_1}(r_2) j_{l''}(q'_{41}r_2) J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) \\
&\times \left. \int_{r_5=r_2}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_5) \right. \\
&\times \left. r_5^2 dr_5 r_2^2 dr_2 \right)
\end{aligned} \tag{F.15}$$

sowie

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{2341;l'_4,l''',l_1,l',l_2,l'_3,l_4,l,l_3}^{4,\sigma_4}(q_{14},q'_{41}) &:= \int_{r_2=0}^{r_2=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1}(r_2) j_{l'''}(q'_{41}r_2) J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_2) r_2^2 dr_2 \\
&\times \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q_{41}r_4) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_l(q_{12}r_5) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_5) r_5^2 dr_5
\end{aligned} \tag{F.16}$$

numerisch ausgewertet werden. Die Radialintegrale, die der Strom j_4 zu berechnen erfordert, sind in (3.49g)

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{1,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) &= 4k_3^*k_4(\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{11,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) \\
&+ \mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{12,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) \\
&+ \mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{13,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) \\
&+ \mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{14,\sigma_1}(q_{14},q'_{21})) ,
\end{aligned} \tag{F.17}$$

wobei für den Fall $r_4 > r_3 \wedge r_4 > r_5$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{11,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) &= \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_4) \\
&\times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
&\times \int_{r_3=0}^{r_3=r_4} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^3 dr_3 r_4^2 dr_4 ,
\end{aligned}$$

für den Fall $r_3 > r_4 > r_5$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{12,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) = & \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_3) \\
& \times \int_{r_4=0}^{r_4=r_3} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_4) \\
& \times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) \\
& \times r_5^2 dr_5 r_4^2 dr_4 r_3^2 dr_3 ,
\end{aligned}$$

für den Fall $r_5 > r_4 > r_3$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{13,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) = & \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) \\
& \times \int_{r_4=0}^{r_4=r_5} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_4) \\
& \times \int_{r_3=0}^{r_3=r_4} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 r_4^2 dr_4 r_5^2 dr_5
\end{aligned}$$

und für $r_3 < r_4 \wedge r_5 < r_4$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l_3,l',l_2,l''}^{14,\sigma_1}(q_{14},q'_{21}) = & \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_4) \\
& \times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
& \times \int_{r_3=r_4}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 r_4^2 dr_4
\end{aligned}$$

numerisch zu berechnen sind. Weiter müssen für (3.49g) in j_4

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l'_3,l',l_2,l'',l_3}^{2,\sigma_4}(q_{14},q'_{21}) = & -2ik_4 \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
& \times \left(\int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_3) \right. \\
& \times \int_{r_4=0}^{r_4=r_3} J_{l'_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\
& + J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) \\
& \times \int_{r_4=r_3}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) H_{l_4}^{+;\sigma_1}(r_4) \\
& \times r_4^2 dr_4 \left. r_3^2 dr_3 \right)
\end{aligned} \tag{F.18}$$

und

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l'_3,l',l'_4,l_2,l''}^{3,\sigma_4}(q_{14},q'_{21}) = & 2ik_3^* \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 \\
& \times \left(\int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} H_{l_3}^{+;\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_4) \right. \\
& \times \int_{r_5=0}^{r_5=r_4} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) r_5^2 dr_5 \\
& + J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q'_{21}r_4) J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_4) \\
& \times \int_{r_5=r_4}^{r_5=R_{MT}} H_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) r_5^2 dr_5 \left. r_4^2 dr_4 \right)
\end{aligned} \tag{F.19}$$

sowie

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{1432;l_1,l,l_4,l'_3,l',l'_4,l_2,l'',l_3}^{4,\sigma_4}(q_{14},q'_{21}) = & \int_{r_3=0}^{r_3=R_{MT}} J_{l_1}^{\sigma_1*}(r_3) j_l(q_{14}r_3) J_{l_4}^{\sigma_1}(r_3) r_3^2 dr_3 \\
& \times \int_{r_4=0}^{r_4=R_{MT}} J_{l'_3}^{\sigma_1*}(r_4) j_{l'}(q_{21}r_4) J_{l'_4}^{\sigma_1}(r_4) r_4^2 dr_4 \\
& \times \int_{r_5=0}^{r_5=R_{MT}} J_{l_3}^{\sigma_1*}(r_5) j_{l''}(q_{14}r_5) J_{l_2}^{\sigma_1*}(r_5) r_5^2 dr_5
\end{aligned} \tag{F.20}$$

numerisch bis zum Muffin-Tin Radius integriert werden.

Die numerische Auswertung der Radialintegrale erweist sich trotz der Verwendung eines Vektorrechners CRAY-X-MP48 als der weitaus zeitaufwendigste Teil der Matrixelementberechnung. Die zur numerischen Integration verwendete Trapez-Regel ergibt eine vektorisierende Ausführung der radialen Integration, trotzdem benötigt man c.a. 85⁰/₀ der Zeit, die die Matrixelementberechnung für die Auswertung des Verluststromes an einem ($E_2, E_3, \mathbf{k}_3 //, j_{Schicht} = 1$) Punkt insgesamt verbraucht.

Anhang G. Die Matrixelemente im Zwischen-Muffin-Tin-Bereich

Durch die Schichtzerlegung in Kapitel 3.12 und durch die Verwendung der Gitter-Delta-Funktion (3.17) konnte der Integrationsbereich der Matrixelementberechnung vom 3-dimensionalen Ortsraum auf das Volumen der Wigner-Seitz-Einheitszelle beschränkt werden. Das Integrationsvolumen zerlegt sich dann in den Muffin-Tin-Bereich V_{MT} und das Zwischen-Muffin-Tin-Volumen $V_{uc} \setminus V_{MT}$. Die Matrixelementberechnung über den Zwischen-Muffin-Tin-Bereich wird nun untersucht. In diesem Bereich werden die Zustände nach ebenen Wellen entwickelt (5.7) und in (3.18) eingesetzt. Es ergibt sich dabei das Integral

$$\begin{aligned} I_{\alpha\alpha'}^{s,s'} &= \int_{V_{uc} \setminus V_{MT}} e^{iQ_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \frac{1}{Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} 2} \int_{V_{uc} \setminus V_{MT}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 e^{iQ_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{-i}{Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} 2} \int_{\partial(V_{uc} \setminus V_{MT})} e^{iQ_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \mathbf{r}} \mathbf{Q}_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \cdot d^2\mathbf{f} \\ &= \frac{-i}{Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} 2} \int_{\partial(V_{uc} \setminus V_{MT})} e^{iQ_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \mathbf{r}} \mathbf{Q}_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} \cdot \left(\frac{d\mathbf{r}}{d\vartheta} \times \frac{d\mathbf{r}}{d\varphi} \right) d\vartheta d\varphi. \end{aligned}$$

Dabei ist $Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'}$ in (6.7) definiert. Die Integration läßt sich analytisch ausführen, wenn man den Rand der Wigner-Seitz-Zelle ∂V_{uc} näherungsweise ersetzt durch eine Kugeloberfläche, so daß die Kugel dasselbe Volumen hat wie die ursprüngliche Wigner-Seitz-Einheitszelle. Mit der Entwicklung der ebenen Welle im Integranden nach Drehimpulsen (A.14) und

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\vartheta} \times \frac{d\mathbf{r}}{d\varphi} d\vartheta d\varphi = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}(\hat{\mathbf{r}}) - Y_1^1(\hat{\mathbf{r}})) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}(\hat{\mathbf{r}}) + Y_1^1(\hat{\mathbf{r}})) \\ Y_1^0(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}$$

folgt dann unter Ausnutzung der Orthogonalität der Y_l^m das Ergebnis der Integration zu

$$I_{\alpha\alpha'}^{s,s'} = 4\pi r^2 \frac{j_1(Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'} r)}{Q_{\alpha,\alpha'}^{s,s'}} \Big|_{r=R_{MT}}^{r=R_{WS}}. \quad (G.1)$$

Dies ist in Kapitel 7.1 in (6.6) verwendet worden.

Anhang H. Die Gaunt-Koeffizienten

Durch das Produkt von jeweils drei Y_l^m 's in den Matrixelementberechnungen von Kapitel 6 ist es möglich, die Raumwinkelintegration analytisch durchzuführen. Zwei der Kugelflächenfunktionen kommen durch die Zustände oder Propagatoren in dieses Produkt, die dritte durch die Fourierentwicklung des Potentials und anschließende Darstellung des Phasors $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ in der Drehimpulsbasis (A.14). Aus der Theorie der Addition von Drehimpulsen (Rose (1957)) ist bekannt, daß

$$\begin{aligned}\Omega_{L_1, L_2, L_3} &:= \Omega_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3} = \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\vartheta=\pi} Y_{l_1}^{m_1*}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_3}^{m_3}(\hat{\mathbf{r}}) \sin \vartheta \, d\vartheta d\varphi \\ &= \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi(2l_1+1)}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (H.1)$$

mit $\hat{\mathbf{r}} := \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ ist. Die 3j-Symbole können über die zum Beispiel nach Rose (1957), Messiah (1979) bekannten Clebsch-Gordon Koeffizienten ermittelt werden. Daraus folgt dann, daß

$$\Omega_{L_1, L_2, L_3} \neq 0 \iff |l_2 - l_3| \leq l_1 \leq l_2 + l_3 \wedge m_1 = m_2 + m_3 \quad (H.2)$$

ist. Zudem sind die Gaunt-Koeffizienten reell.

Durch Umbenennung des Index $m_1 = -M_1$ kann gezeigt werden, daß

$$\Omega_{L_1, L_2, L_3}^T := (-1)^{m_1} \Omega_{l_1, L_2, L_3}^{-m_1, m_2, m_3} = \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\vartheta=\pi} Y_{l_1}^{m_1}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_3}^{m_3}(\hat{\mathbf{r}}) \sin \vartheta \, d\vartheta d\varphi. \quad (H.3)$$

Mit Hilfe von (H.2) kann man die Gaunt-Koeffizienten auswählen, die ungleich null sind, und mit den dadurch entstehenden (l, m) -Kombinationen kann ein Indexvektor $\nu \rightarrow (L_1, L_2, L_3)$ definiert werden. Gleichzeitig ist es möglich, alle diese Gaunt-Koeffizienten in der ν -Reihenfolge abzuspeichern. Bei der $(L_1, L_2, L_3) \rightarrow \nu$ Matrixelementsummation genügt es dann, über einen Index, nämlich ν , zu summieren. Auf einem Vektorrechner vektorisiert diese Summation und ist somit schneller auszuführen als auf einem normalen Rechner. In derselben Weise können die in der Matrixelementberechnung der Verlustströme auftretenden Produkte von Gaunt-Koeffizienten behandelt werden, so daß dort entsprechend größere Indexvektoren $\mu = (\nu, \nu')$ mit $\Omega_\nu \times \Omega_{\nu'} \neq 0$ -Feldern abgespeichert werden müssen.

LITERATURVERZEICHNIS

- I.Abraham, H.Hopster, Phys. Rev. Lett., **62(10)**, 1157, **1989**
- B.Ackermann, Dissertation, Universität-GH-Duisburg,
Jül.-Report 2021,ISSN 0366-0885, **1985**
- I.Adawi, Phys. Rev., **134(3A)**, A788, **1964**
- C.O.Almbladh, Physica, **32**, 341, **1985**
- N.W.Ashcroft, N.D.Mermin *Solid State Physics*, Saunders College ,
Philadelphia, **1976**
- W.Bardyszewski, L.Hedin, Physica Scripta, **32**, 439, **1985**
- J.L.Beeby, J. Phys. C , **1**, 82, **1968**
- C.J.Boccheta, E.Tosatti, S.Yin, Z.f.Physik ,B, **67**, 89, **1987**
- D.Bohm, D.Pines, Phys. Rev. , **82(5)**, 625, **1951**
- D.Bohm, D.Pines, Phys. Rev. , **85(2)**, 338, **1952**
- D.Bohm, D.Pines, Phys. Rev. , **92(3)**, 609, **1953**
- D.Pines, Phys. Rev. , **92(6)**, 626, **1953**
- H.Bross,Z.Phys.B,**28**, 173,**1968**
- C.Caroli, D.Lederer-Rozenblatt, B.Roulet, D.Saint-James, Phys. Rev.
B, **8(10)**, 4552, **1973**
- D.J.Chadi, M.L.Cohen, Phys. Rev. B, **8**, 5747, **1973**
- R.Clauberg, Dissertation, Universität zu Köln, Jül.Report 1926, ISSN
0366-0885, **1984**
- R.Courant, D.Hilbert, *Methoden der Mathematischen Physik*, Springer-
Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1968**
- S.L.Cunningham, Phys. Rev. B, **10**, 4988, **1974**

- D.E.Eastman, F.J.Himpsel, J.A.Knapp, Phys. Rev. Lett., **40**, 1514, 1978
- P.M.Echenique, J.Bausells, A.Rivacoba, Phys. Rev. B, **35**(4), 1521, 1987
- P.M.Echenique, F.Flores, R.H.Ritchie, *Solid State Physics*,
Eds. H.Ehrenreich, F.Seitz and D.Turnbull, **43**, 229, 1990
- E.N.Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag
Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1983
- G.Eilenberger, *11.Ferienschule über elektronenspektroskopische Methoden an Festkörpern mit Oberflächen*, KFA-Jülich, 1980
- G.Ertl, J.Küppers Low Energy Electrons and Surface Chemistry,
Verlag-Chemie, 1974
- R.A.Evarestov, V.P.Smirnov, Phys.stat.sol. (b), **119**, 9, 1983
- R.Feder, *Polarized Electrons in Surface Physics*, Singapore: World
Scientific, 1985
- P.J.Feibelman, D.E.Eastman, Phys. Rev. B, **10**(12), 4932, 1974
- P.J.Feibelman, C.B.Duke, A.Bagchi, Phys. Rev. B, **5**(7), 2436, 1972
- G.W.Fernando, J.W.Davenport, R.E.Watson, M.Weinert, Phys. Rev. B,
40(5), 2757, 1989
- A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*,
Mc-Graw Hill Book Company, 1971
- R. Fuchssteiner, R. Laugwitz, *Funktionalanalysis*, Bibliographisches
Institut Hamburg Wien Zürich, 1974
- W.Greiner, Lehrbuch der theoretischen Physik
Quantenmechanik Band 5(II) Verlag Harri Deutsch Thun, 1985

- R.D.Grigorieff, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen* Bd.2, Teubner –Verlag, 1972
- R.W.Hamming, *Numerical methods for scientists and engeneers* , Mc Graw Hill , 1973
- J. Harris, *11.Ferienschule über elektronenspektroskopische Methoden an Festkörpern mit Oberflächen*, KFA-Jülich , 1980
- L.Hedin, B.I.Lundqvist, J. Phys. C, 4, 2064, 1971
- L.Hedin, B.I.Lundqvist, *Solid State Physics* ,
Eds. H.Ehrenreich, F.Seitz and D.Turnbull, 23, 1, 1969
- P.Hohenberg, W.Kohn, Phys. Rev. B, 136(3b), 864, 1964
- J.F.L.Hopkinson, J.B.Pendry, D.J.Titterington, Comp. Phys. Commun., 19, 69, 1980
- H.Hopster, R.Raue, R.Clauberg, Phys. Rev. Lett., 53(7), 695, 1984
- R.Hora, M.Scheffler, Phys. Rev. B, 29, 692, 1984
- M.A.van Hove, W.H.Weinberg, C.M.Chan, *Low-Energy Electron Diffraction* Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo, 1986
- H. Ibach, *11.Ferienschule über elektronenspektroskopische Methoden an Festkörpern mit Oberflächen*, KFA-Jülich , 1980
- Y.U.Idzerda, D.M.Lind, D.A.Papaconstantopoulos, G.A.Prinz, B.T.Jonker, J.J.Krebs, Phys. Rev. Lett., 61(10), 1222, 1988
- IMSL Inc., *IMSL Problem-Solving Software Systems*
Houston (Texas) ,Version 2.0,1987
- J.E.Inglesfield, J. Phys. C, Solid State Physics, 6 , L158, 1973
- J.E.Inglesfield, E.Wikborg, J. Phys. C, Solid State Physics, 4 , L14, 1971

- J.C.Inkson, J. Phys. F: Metal Phys., **3**, 2143, **1973**
- Daniel Joubert, J.C.Inkson, J. Phys., Cond. Matter, **1**, 1077, **1989**
- J.C.Inkson, *Many Body Theory of Solids* , Plenum Press, **1983**
- A.Ishii, J.B.Pendry, Surface Science, **209**, 23, **1989**
- J.D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik* , 2. Auflage, Berlin New-York, de Gruyter, **1983**
- C.J.Joachain, *Quantum Collision Theory* , North-Holland Publishing Company Amsterdam, **1975**
- R.O.Jones, J.A.Strozier Jr., Phys.Rev.Lett., **22(22)**, 1186, **1969**
- K.Kambe, Z. Naturforschg., **22a**, 322, **1967**
- K.Kambe, Z. Naturforschg., **22a**, 422, **1967**
- K.Kambe, Z. Naturforschg., **23a**, 1280, **1968**
- N.Kar, Dissertation, University of Pennsylvania, Unveröffentlicht, **1976**
- J. Kessler, *Polarized Electrons* , Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1985**
- J.Kirschner, *Polarized Electrons at Surfaces*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1985**
- J.Kirschner, Phys. Rev. Lett., **55**,973, **1985**
- J.Kirschner, D.Rebenstorff, H.Ibach, Phys. Rev. Lett., **53**,698, **1984**
- J.Kirschner, S.Suga, Surf. Science, **178**,327, **1986**
- W.Kohn, L.J.Sham, Phys. Rev. A, **140(4A)**, 1133, **1965**
- W.Kohn, N.Rostoker, Phys. Rev., **94**, 1111, **1954**
- J.Korringa, Physica, **13**, 392, **1946**
- C.A.Kukkonen, J.W.Wilkins, Phys. Rev. B, **19(12)**, 6075, **1979**

- A.Liebsch, in L.Fiermans, J.Vennick, W. Dekeyser (Hrsgb.) *Electron and Ion Spectroscopy of Solids*, Plenum-Press New York, 1978
- A.Liebsch, Phys. Rev. Lett., 42, 1431, 1979
- A.Liebsch, *Festkörperprobleme*, XIX, 209, 1979
- A.Liebsch, Phys. Rev. B, 23, 5203, 1981
- J. Lindhard, Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-Fys. Medd., 28, No.8, 1980
- B.I.Lundqvist, Physik der Kondensierten Materie, 6, 193, 1967
- B.I.Lundqvist, Physik der Kondensierten Materie, 6, 206, 1967
- B.I.Lundqvist, Physik der Kondensierten Materie, 7, 117, 1968
- B.I.Lundqvist, phys. stat. sol., 32, 273, 1969
- F.Maca, M.Scheffler, Computer Physics Communication, 38, 403, 1985
- G.D.Mahan, Phys. Rev. B, 2(11), 4334, 1970
- R.D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many Body Problem*, Mc Graw Hill Publishing Company Limited, London, 1967
- A. Messiah, *Quantenmechanik*, Band I, II
2. Auflage, Berlin New-York, de Gruyter, 1979
- F.Mila, C.Noguera, J. Phys. C, Solid State Phys., 20, 3863, 1987
- H.J.Monkhorst, J.D.Pack, Phys. Rev. B., 13, 5188, 1976
- J.D.Pack, H.J.Monkhorst, Phys. Rev. B, 16, 1748, 1977
- P.M.Morse, H.Feshbach, *Methods of theoretical physics*, Mc Graw Hill Book Company, Inc., 1953
- V.L.Moruzzi, J.F.Janak, A.R.Williams, *Calculated electronic properties of metals*, Pergamon Press, New York, 1978
- H.R.Moser, G.Wendin, Solid State Communication, 65(2), 107, 1988

- N.F.Mott, H.S.W.Massey, *The theory of Atomic Collissions* ,
Oxford at the Clarendon Press, 1965
- G.A.Mulhollan, Xia Zhang, F.B.Dunning, G.K.Walters, Phys. Rev. B,
41(12), 8122, 1990
- J.B.Pendry, *Low Energy Electron Diffraction* ,
Academic Press, 1974
- J.B.Pendry, Surface Science, 57, 679, 1976
- D.R.Penn, Phys. Rev. B, 22(6), 2677, 1980
- D.Pines, Phys. Rev., 92(6), 626, 1953
- S. Raimes, *The Wave Mechanics of Electrons in Metals* ,
North-Holland Publishing Company Amsterdam-London, 1961
- S. Raimes, *Many-Electron Theory* ,
North-Holland Publishing Company Amsterdam-London, 1979
- R.H.Ritchie, J.C.Ashley, J. Phys., Chem. Solids, 26, 1689, 1965
- R.H.Ritchie, Phys. Rev., 106(5), 874, 1957
- L.S.Rodberg, R.M.Thaler, *Introduction to the Quantum Theory of Scat-
tering* Academic Press, 1967
- M.E.Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum* ,
Wiley New York, 1957
- D.K.Saldin, Phys. Rev. Letters, 60(12), 1197, 1988
- W.L.Schaich, N.W.Ashcroft, Phys. Rev. B, 3(8), 2452, 1971
- K.Kambe, M.Scheffler, Surface Science, 89, 262, 1979
- L.I. Schiff *Quantum Mechanics* , Mc Graw Hill Publishing Company
Limited ,London, 1968

- B.Schmiedeskamp, B.Vogt, U.Heinzmann, Phys. Rev. Lett., **60**, 651, **1988**
- L.J.Sham, W.Kohn, Phys. Rev. A, **145**(2), 561, **1966**
- K.S.Singwi, A.Sjolander, M.P.Tosi, R.H.Land, Phys. Rev. B, **1**, 1044, **1970**
- A.Sommerfeld , *Partielle Differentialgleichungen in der Physik*, 6.Auflage Verlag Harri Deutsch, **1978**
- K.Sturm, *11.Ferientschule über elektronenspektroskopische Methoden an Festkörpern mit Oberflächen*, KFA-Jülich , **1980**
- E.Tamura, Private Mitteilung, **1989a**
- E.Tamura, Private Mitteilung, **1987**
- E.Tamura, Private Mitteilung, wird veröffentlicht, **1989b**
- E.Tamura, R.Feder, B.Vogt, B.Schmiedeskamp, U.Heinzmann, Z.Phys.B Condensed Matter, **77**, 129, **1989c**
- E.Tamura, W.Piepkke, R.Feder, J. Phys.: Cond. Matter, **1**, 6469, **1989d**
- M.Trott, Ch.Schnittler, Phys. stat. sol.(b), **152**, 153, **1989**
- D.Venus, J.Kirschner, Phys. Rev. B, **37**(4), 2199, **1988**
- G.Vignale, K.S.Singwi, Phys. Rev. B, **32**(5), 2824, **1985**
- W.Walther, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1972**
- S.Yin,E.Tosatti, ICTP,Trieste,Preprint, , 129, **1981**
- H.Yoshioka, Journ. of the Phys. Soc. of Japan, , **12**(6), **1957**
- P.Ziesche, G.Lehmann , *Elektronentheorie der Metalle* , Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1983**

P.Ziesche, G.Lehmann , *Elektronentheorie der Metalle* , Springer-Verlag
Berlin Heidelberg New York Tokyo , **1983**

Danksagung

Ich danke Herrn Prof.Dr. R.Feder für die interessante Themenstellung und Anregung zu dieser Arbeit.

Der Kernforschungs Anlage (KFA)–Jülich und insbesondere dort dem Institut für Festkörperforschung (IFF) danke ich für die große Gastfreundschaft und die Möglichkeit, dort zu arbeiten und ihre Einrichtungen zu nutzen. Herrn Prof.Dr. M.Campagna und Herrn Prof.Dr. W.Gudat danke ich für die Gastfreundschaft und die überaus freundliche Aufnahme in ihrer Arbeitsgruppe, dem Institut für elektronische Eigenschaften (IEE) im IFF der KFA–Jülich.

Herrn Prof.Dr. R.Feder danke ich für die Diskussionsbereitschaft und sein stetes Interesse an meiner Arbeit.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. E.Tamura, der in vielen Diskussionen mein Verständnis geschult hat und bereit war, mir seine große Erfahrung zur Verfügung zu stellen. Zudem hat er mit vielen Tips, Ratschlägen und manchen Kniffen zum Fortlauf und der Erstellung der Arbeit beigetragen.

Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei Herrn Dipl.–Phys. J.W.Krewer, der immer zu Austausch und Diskussion über die ähnlichen Arbeitsgebiete bereit war.

Dank gilt auch Herrn Dr. B.Ackermann, der mich bei der Einarbeitung unterstützte und mir seine Programme zur Verfügung stellte, anhand derer ich mich in die Theorie, insbesondere der Photoemission, einarbeiten konnte.

Mein Dank gilt auch den vielen zum Teil ehemaligen Mitgliedern der Arbeitsgruppe des IEE im IFF der KFA–Jülich, den Herren Dr. B.Daudt, Dr. W.Dürr, Dr. T.Dodt, Dr. H.Gollisch, Dr. W.Heinen, Dipl.–Phys. T.Kachel, Dipl.–Phys. D.Kerkmann, cand.–phys. R.Kersjes, Prof.Dr. D.Pescia, Dipl.–Phys. F.Schumann, Dipl.–Phys. D.Tillmann und den Damen Dipl.–Phys. B.van Look, Dr. R.Rochow, mit denen oft ein fruchtbares Diskutieren möglich war und ein lustiges Arbeitsklima vorherrschte.

Weiterhin danke ich allen Mitarbeitern des Instituts für Numerische Methoden und Datenverarbeitung des IFF der KFA–Jülich für deren stete Hilfsbereitschaft bei allen Fragen, die mit den benutzten Computern zusammengehängen haben.

