

erscheinen, solange man sich die Alkoxygruppen als starre Valenzwinkelketten mit ebener *trans*- oder *cis*-Konfiguration der C-Atome vorstellt. Über die Struktur und die innere Beweglichkeit der Alkoxyketten im kristallin-flüssigen Zustand besitzen wir zur Zeit noch keine genaue Kenntnis, aber die Deutung der Kernresonanzversuche³ führt zu dem Ergebnis, daß die Alkoxygruppen in der kristallin-flüssigen Phase auf keinen Fall als ebene Ketten vorliegen; wahrscheinlich hat man die Existenz verschiedener rotationsisomerer Formen anzunehmen¹³, die sich möglicherweise rasch ineinander um-

wandeln. Bei einem so komplizierten Kettenmodell, welches noch durch die bekannten Kettendeformationsschwingungen zu modifizieren ist, kann die oben genannte „ ξ -Alternation“ durchaus nicht als trivial angesehen werden, vielmehr scheint uns die Bedeutung dieses Alternierens darin zu bestehen, daß es als ein nützliches Kriterium bei der Systematik und bei der Auswahl der in Wirklichkeit vorliegenden rotationsisomeren Formen der Alkoxyketten dienen könnte.

¹³ W. MAIER u. G. ENGLERT, Z. physik. Chemie. N. F. 12, 123 [1957].

Zur Theorie der Sekundärelektronenemission von Metallen

Von H. STOLZ und H. W. STREITWOLF

Institut für theoret. Physik der Humboldt-Universität Berlin und Institut für Festkörperforschung der Deutschen Akademie der Wissenschaften Berlin

(Z. Naturforsch. 13 a, 1100—1101 [1958]; eingeg. am 13. Oktober 1958)

Die Größe, die hinsichtlich der Sekundärelektronenemission maximalen Informationsgehalt besitzt, wenn man vom Spin der Elektronen absieht, ist die Stromdichte $j(E', \vartheta)$ der Sekundärelektronen (S) in Abhängigkeit von der Austrittsenergie E' und dem Austrittswinkel ϑ bezüglich der Normalen zur Oberfläche. Bei idealer Oberfläche und senkrechter Inzidenz der Primärelektronen (P) ergibt sich $j(E', \vartheta)$ elementar als eindeutige Funktion der inneren Elektronenverteilung $N(0, E, \beta)$ [$N(z, E, \beta)$] Dichte der Elektronen der Energie E und Bewegungsrichtung β gegenüber der Normalen in der Tiefe z]. $N(z, E, \beta)$ wird durch die BOLTZMANNSCHE Transportgleichung

$$\begin{aligned} -v \cos \beta \frac{\partial N(z, E, \beta)}{\partial z} &= S(z, E, \beta) - \frac{v}{l(E)} N(z, E, \beta) \\ &+ \int N(z, E'', \beta'') \frac{v''}{l(E'')} p(E, E'', \cos \Theta) dE'' d(-\cos \beta'') d\varphi'' \\ &(v = \sqrt{2 E / m}) \end{aligned} \quad (1)$$

bestimmt [$l(E)$] freie Weglänge, $p(E, E'', \cos \Theta)$ Wahrscheinlichkeit dafür, daß bei einem Stoß ein Elektron vom Bewegungszustand E'', β'', φ'' in den Bewegungszustand E, β, φ übergeht (φ Azimut des Impulsvektors, Θ Streuwinkel), $S(z, E, \beta)$ Anregungsfunktion, d. h. die Dichte der sekundär angeregten S der Energie E und Richtung β .

Die Anregung soll durch P hoher Energie E_P erfolgen, so daß ihre Abbremsung innerhalb der Erzeugungstiefe der S vernachlässigt werden kann.

Die Anregungsfunktion $S(\mathbf{f}')$ (normiert auf Primärstromdichte eins), definiert durch

$$\begin{aligned} S(\mathbf{f}') d^3 \mathbf{f}' &= \frac{1}{2 \pi} S(z, E, \beta) dE d(-\cos \beta) d\varphi \quad (2) \\ (E = \hbar^2 k'^2 / 2m) \end{aligned}$$

bestimmt sich in Einelektronennäherung mit Hilfe der

DIRACschen Störungstheorie zu

$$S(\mathbf{f}') = \frac{m e^4}{\pi^3 \hbar^2 K} \sum_{\mathfrak{H}} \int d^3 \mathbf{f} d^3 \mathbf{R}' \frac{|I|^2}{(q^2 + \lambda^2)^2} \cdot \delta(\mathbf{f} - \mathbf{f}' + \mathbf{q} + 2\pi \mathfrak{H}) \delta(E_{\mathbf{f}' \mathbf{R}'} - E_{\mathbf{f} \mathbf{R}})$$

(\mathbf{R}, \mathbf{f} bzw. \mathbf{R}', \mathbf{f}' Wellenzahlvektoren des P und des Metallelektrons vor bzw. nach dem Stoß, \mathfrak{H} Vektor aus dem reziproken Gitter, λ Abschirmkonstante für das COULOMB-Potential). I ist ein Formfaktor, in den die Elektronenwellenfunktionen eingehen.

Der Summand mit $\mathfrak{H} = 0$ ($\mathfrak{H} = 0$ -Prozesse ohne Quasiimpuls-Austausch mit dem Gitter) liefert den Hauptbeitrag zu der Summe. Man erhält für ihn, wenn man $I = 1$ setzt ($\lambda = 0$):

$$S_{\mathfrak{H}=0}(\mathbf{f}') = \begin{cases} \frac{m^2 e^4}{\pi^2 \hbar^4 K} \frac{K^2 k'^2 - (\mathbf{R}, \mathbf{f}')^2 - (k'^2 - k_F^2)(\mathbf{R} - \mathbf{f}')^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{f}'|^3 (k'^2 - k_F^2)^2} & \text{falls } |(\mathbf{f}', \mathbf{R} - \mathbf{f}')| \leq k_F |\mathbf{R} - \mathbf{f}'|, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3)$$

Für kleine $E \approx E_F$ (FERMI-Energie) verläuft die Winkelabhängigkeit der Anregung wie $\sin^2(\mathbf{f}', \mathbf{R})$, d. h. die Elektronen werden vorwiegend senkrecht zum Primärstrahl angeregt¹.

Durch Integration über die Winkel von \mathbf{f}' erhält man die reine Energieabhängigkeit der Anregungsfunktion (s. auch Anm. 1):

$$S_{\mathfrak{H}=0}(E) = \frac{e^4 k_F^3}{3 \pi E_P (E - E_F)^2}. \quad (4)$$

Diese Ergebnisse folgen hier ohne weitere Vernachlässigungen streng.

Nimmt man für die $\mathfrak{H} \neq 0$ -Prozesse die angeregten Elektronen als frei an und setzt für die Wellenfunktionen der Leitungselektronen die PEIERLSSCHE Näherung quasifreier Elektronen ein, so erhält man bei kubisch raumzentrierten Kristallen für die 12 Summanden mit kleinstem $\mathfrak{H} \neq 0$ nach einer Mittelung über die Kristallorientierungen

$$S_H(E) = \frac{3 m^5 e^4 |V_{\mathfrak{H}}|^2}{\pi^3 \hbar^{10} K^2 \lambda^2 H^2} \cdot \int dk \left[\frac{4 \pi H}{k^2 - k_F^2} - \frac{1}{k - \pi H} \right] \cdot \begin{cases} f(\bar{k}, k'); & \bar{k} \leq k', \\ f(k', k); & \bar{k} \geq k', \end{cases}$$

¹ E. M. BAROODY, Phys. Rev. 78, 780 [1950].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

wobei

$$f(x, y) = \frac{2x(\lambda^2 + x^2 - y^2)}{(\lambda^2 + x^2 + y^2)^2 - 4x^2y^2} + \frac{1}{2} \arctg \frac{2x\lambda}{\lambda^2 + y^2 - x^2}$$

(V_{δ} FOURIER-Koeffizient des Gitterpotentials).

Die Integration ergibt den in Abb. 1 dargestellten Verlauf.

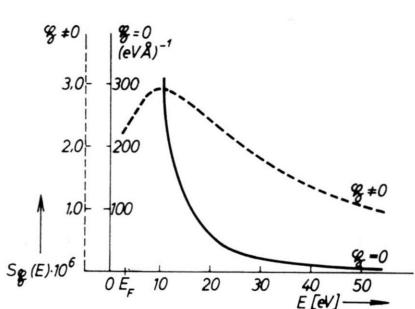


Abb. 1. Anregungsfunktionen $S\delta(E)$ für Na. ($E_f = 3,22$ eV; $a = 4,24$ Å; $|V\delta|^2 = 0,1$ (eV) 2 ; $E_P = 1000$ eV.)

Da die Winkelverteilung der durch $\delta \neq 0$ -Prozesse angeregten S der isotropen Verteilung ähnlicher und daher für den Austritt der Elektronen günstiger ist als die der $\delta = 0$ -Prozesse, kann aus der relativen Seltenheit der $\delta \neq 0$ -Prozesse gegenüber den $\delta = 0$ -Prozessen nicht geschlossen werden, daß die $\delta \neq 0$ -Prozesse für die Sekundärelektronenausbeute keine Rolle spielen. Daß sie den Hauptbeitrag liefern, kann andererseits auch nicht gefolgt werden.

Sehr problematisch ist auch die oben verwendete Näherung für die Wellenfunktionen. Um eine Abschätzung für die Wichtigkeit der $\delta \neq 0$ -Prozesse zu erhalten, müßten numerisch berechnete Wellenfunktionen verwendet werden.

Die Anregungsfunktion (3) ist über (2) in die BOLTZMANN-Gleichung (1) einzusetzen und diese unter

Berücksichtigung der Randbedingungen bei $z=0$ zu lösen. Für Metalle wird man in einer gewissen Näherung annehmen können, daß die inneren S im wesentlichen mit den Leitungselektronen der FERMI-Kugel wechselwirken². Wegen mathematischer Schwierigkeiten ist man zunächst gezwungen, $l(E)$ im Energienbereich der S als energieunabhängig anzunehmen. Dann folgt bei isotoner Streuung

$$p(E, E'', \cos \Theta) = \frac{2}{\pi} \cos \Theta \delta(E - E'' \cos^2 \Theta)$$

unter Beachtung der Elektronenverdoppelung bei jedem Stoß.

Wir vernachlässigen den Einfluß der Oberfläche auf die Verteilung der inneren S. Wegen (3) ist

$$S(E, \beta) = \frac{3}{4} S(E) \sin^2 \beta,$$

[$S(E)$ aus Gl. (4)] eine gute Näherung für die Mehrzahl der S. Damit kann man (1) durch Entwicklung nach Kugelfunktionen auf ein System von Integralgleichungen zurückführen, dessen Lösungen man exakt nach der Methode der GREENSchen Funktion erhält.

Daraus ergibt sich das Energiespektrum im wesentlichen in Übereinstimmung mit der Erfahrung. Die Energie-Winkelverteilung weicht jedoch charakteristisch von der durch JONKER³ beobachteten ab, indem sie mit zunehmender Energie mehr Elektronen mit großen Austrittswinkeln liefert. Da mit einer wesentlichen Beeinflussung der inneren Verteilung $N(0, E, \beta)$ durch die Oberfläche nicht zu rechnen ist, muß man vermuten, daß die Anregung bereits (etwa infolge der Primärstrahlauflaufsplittierung bzw. der Beteiligung rückdiffundierender P an der Anregung) im wesentlichen isotrop geschieht.

Mit $l = 5 \cdot 10^{-7}$ cm erhält man in P_0 -Näherung die Ausbeute zu $\delta_{\text{theor}} = 0,22 \delta_{\text{exp}}$ für Ag ($E_P = 1000$ eV).

Eine ausführliche Arbeit wird später veröffentlicht.

² P. A. WOLFF, Phys. Rev. **95**, 56 [1954].

³ J. L. H. JONKER, Philips Res. Rep. **12**, 249 [1957].

BESPRECHUNGEN

Structure Reports 1951. Vol. 15. General Editor A. J. C. WILSON, Section Editors V. C. BAENZIGER, J. WYART, J. M. ROBERTSON. Verlag N. V. A. Oosthoek's Uitgevers MIJ, Utrecht 1957. VIII, 588 S. mit mehreren Abbildungen.

Mit diesem Band wird die normale Berichterstattung der Structure Reports fortgesetzt, da die Berichtslücke der Kriegsjahre nach dem Erscheinen von Band 8 vollständig ausgefüllt ist. Die Bandnummer ist von 13 auf 15 gesprungen, weil ein Registerband, dessen Veröffentlichung demnächst zu erwarten ist, alle Kristallstrukturen bis 1950 erfassen soll.

Als eines der hervorstechendsten Ereignisse im Gebiet der Strukturkunde während der Berichtszeit darf die Erkenntnis angesehen werden, daß die Struktur des

Beta-Urangs bei intermetallischen Phasen aus Legierungssystemen zwischen Übergangsmetallen ziemlich verbreitet ist. 16 Arbeiten aus England und USA beschäftigen sich allein mit dieser Frage. Der Hintergrund zu diesen Untersuchungen ist gegeben durch ein umfassendes Studium hochschmelzender Übergangsmetalllegierungen. — Ein weiteres zentrales Thema ist die Strukturaufklärung der häufig sehr kompliziert gebauten ferroelektrischen Doppeloxide, die aus wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Gründen in einer großen Zahl von Arbeiten behandelt werden.

Während der Inhalt der Referate durchweg gut ist, wirkt doch ihr Stil hin und wieder etwas verwirrend. Es ist nicht immer klar ersichtlich, was bei den Daten eines Referates wirklich neu ist (vgl. z. B. S. 23). Man