

Berücksichtigung der Gitterperiodizität bei der Elektron-Plasmon-Streuung. II.

W. MÜNCHMEYER

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin-Dahlem *

(Z. Naturforsch. 27 a, 402—407 [1972]; eingegangen am 30. Oktober 1971)

Herrn Prof. Dr. K. MOLIÈRE zu seinem 60. Geburtstag gewidmet

Consideration of Lattice Periodicity at the Electron Plasmon Scattering. II.

It is shown that the existence of the additional inelastic scattering processes described in part I is caused by lattice periodicity and depends upon the form of the Fermi surface. An estimate of that part of the anomalous absorption resulting from this scattering process is given.

Einleitung

In Teil I wurde durch Untersuchung einer speziellen Zwei-Teilchen-Green-Funktion bzw. ihrer Matrix-Elemente ein Ausdruck für den verallgemeinerten Strukturfaktor der unelastischen Streuung und für den Integranden des die Absorption beschreibenden Integrals hergeleitet. Aus diesen Ausdrücken lassen sich der differentielle Wirkungsquerschnitt für unelastische Streuung und die Koeffizienten der anomalen Absorption berechnen. Sie liefern eine Aussage darüber, wann und wie weit solche zusätzlichen Streuprozesse (Abb. 1, I) und die daraus resultierende anomale Absorption auftreten.

1. Der Fall $\mathbf{b}_i = \mathbf{b}_K = 0$

Für diesen Spezialfall erhält man sofort aus Gl. (3.16), I den Wirkungsquerschnitt für Streuung von Elektronen am Plasma, der von FERRELL¹ für homogenes Elektronengas angegeben wurde. Er ist im wesentlichen proportional dem Quotienten $\hbar\omega_{\text{Pl}}/|\hbar\tilde{\mathbf{k}}|^2$. Aus Impulssatz und Energiesatz erhält man die Bedingung, daß der Vektor $\hbar\tilde{\mathbf{k}}$, der Plasmonenimpuls, nicht verschwinden kann. Sein Minimalwert ist

$$|\hbar\tilde{\mathbf{k}}_{r\text{Min}}| = \frac{\hbar\omega_{\text{Pl}}}{2E_0} |\hbar\mathbf{k}_e|. \quad (1.1)$$

Hier bedeuten E_0 die Energie und $\hbar\mathbf{k}_e$ den Impuls des einfallenden schnellen Elektrons. Die Dispersion von $\omega_{\text{Pl}}(\mathbf{k})$ wird nicht berücksichtigt. Die Energieflächen werden näherungsweise durch Kugelflächen ersetzt (vgl. hierzu HOWIE²). Durch Ein-

* Jetzt Siemens AG., Berlin, MWB.

Reprint requests to: Dr. W. MÜNCHMEYER, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, D-1000 Berlin 33, Faradayweg 4—6.

führung des Streuwinkels Θ und der Größe $\Theta_E = \hbar\omega_{\text{Pl}}/2E_0$, die durch den Minimalimpuls gegeben ist, erhält man den Wirkungsquerschnitt nach Ferrell:

$$\sigma(\Theta) = \Theta_E / (\Theta_E^2 + \Theta^2). \quad (1.2)$$

2. Der Fall $\mathbf{b}_i = 0, \mathbf{b}_K \neq 0$

Zur Abschätzung des Wirkungsquerschnittes und der anomalen Absorption muß das in Gl. (3.14), I vorkommende Verhältnis

$$v(\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_K, \mathbf{k}) = \frac{\sum_{\substack{\text{unbes. bes.} \\ n'}} \sum_{n, \mathbf{p}} \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_i) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n*}(\mathbf{b}_K) \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}}{\sum_{\substack{\text{unbes. bes.} \\ n'}} \sum_{n, \mathbf{p}} |\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(0)|^2 \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}} \quad (2.1)$$

berechnet werden. Entsprechend der angegebenen Summationsvorschrift kennzeichnen alle Vektoren \mathbf{p} besetzte Zustände, die um $\tilde{\mathbf{k}}$ verschobenen Vektoren $\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}$ unbesetzte Zustände. Außerdem ist zu unterscheiden zwischen Übergängen von besetzten Zuständen eines Bandes n in unbesetzte Zustände und Übergänge aus besetzten Zuständen im tieferen Band in nichtbesetzte Zustände im höheren Band. Die Grenze zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen ist die Fermi-Fläche $E_F = E_{1(2)}(\mathbf{p})$. Da $\tilde{\mathbf{k}}$ kleiner als der kritische Wert $*k_c$ ist, kommen nur solche Bloch-Funktionen in Betracht, die Elektronen in der Nähe der Fermi-Fläche beschreiben. Die in Gl. (2.1) enthaltenen Integrale, die mit den Bloch-Funktionen $u_{n, \mathbf{p}}(\mathbf{r})$ zu bilden sind,

$$\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_K) = \int_0 u_{n' \mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}}(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{b}_K) \cdot \mathbf{r}} u_{n \mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3 r \quad (2.2)$$

* Nach ³: $k_c \approx (\hbar\omega_{\text{Pl}}/2E_F) \cdot P_F$; E_F = Fermi-Grenzenergie, P_F = Wellenzahl der Elektronen an der Fermi-Grenze.



müssen zunächst ermittelt werden. Es wird im Anhang gezeigt, daß man im Fall $n = n'$ und $|\tilde{\mathbf{k}}| \rightarrow 0$ für die Integrale die Beziehung:

$$\varrho_{\mathbf{p}\mathbf{p}}^{nn}(\mathbf{b}_K) = \frac{\partial E_n(\mathbf{p})}{\partial V_K} \quad (2.3)$$

herleiten kann. (V_K = Fourier-Koeffizient des periodischen Potentials.) Daraus folgt, daß die Größen nur dann einen wesentlichen Beitrag liefern, wenn sich $E_n(\mathbf{p})$ mit V_K , dem als reell angesetzten K -ten Fourier-Koeffizienten des Potentials des Festkörpers, stark ändert. Das ist aber gerade an den Stellen \mathbf{p} des reziproken Gitterraums der Fall, wo sich der Vektor \mathbf{p} der Brillouin-Zellenwand, deren Lage durch den reziproken Gittervektor $\frac{1}{2}\mathbf{b}_K$ gegeben ist, nähert. Diese Stellen sind leicht zu ermitteln, wenn die Energiebandstruktur und Fermi-Fläche des Metalls bekannt sind. Nach der Methode von HARRISON⁴ kann man sich nach dem Modell der fast freien Elektronen einen Überblick über die Form der Fermi-Fläche verschaffen. Die Abweichung des Bandes $E_n(\mathbf{p})$ von der Parabel für freie Elektronen ist gerade an den Brillouin-Zonengrenzen vorhanden, dort spaltet das Band mit endlichem Energieabstand (Energilücke = $2V_K$) auf. Die Fermi-Fläche weicht an dieser Stelle von der Kugelgestalt ab und zerfällt in zwei Teile. In dieser Arbeit werden nur solche Metalle behandelt, bei denen die Fermi-Kugel von den Brillouin-Zonenwänden nur so geschnitten werden, daß der Schnittkreis durch keine anderen Zonenwände hindurchgeht. Beispiele hierfür sind die zweiwertigen Metalle, z.B. Magnesium, dessen Fermi-Fläche von FALIKOV⁵ berechnet wurde. Die durch 002 charakterisierte Wand der Brillouin-Zone ist für Magnesium eine solche Fläche, an der die Fermifläche in der oben beschriebenen Weise zerfällt. Aber auch in den Punkten des \mathbf{p} -Raumes, in denen die Fermi-Kugel den Zonengrenzen nur sehr nahe kommt, tritt eine starke Abweichung von der Kugelgestalt auf, so z.B. bei Kupfer und den Edelmetallen.

Man braucht zur Abschätzung der Ausdrücke Gl. (2.1), (2.2) die Bloch-Zustände der Elektronen in der Nähe dieser Brillouin-Zonenwand in einer guten Näherung, daß wenigstens die Energie $E_n(\mathbf{p})$ und damit die Form der Fermi-Fläche an diesen Stellen richtig wiedergegeben wird. Für die Bloch-Funktionen wird ein Ansatz mit orthogonalisierten ebenen Wellen gemacht (OPW-Verfahren). Die

einfachste Näherung, die die erwähnten Verhältnisse z.B. für Magnesium beschreibt, ist eine Näherung mit zwei ebenen orthogonalisierten Wellen. Nun genügt die Überlagerung der ebenen Wellen, aus denen diese orthogonalisierten ebenen Wellen entstehen, nach PHILLIPS und KLEINMAN⁴ einer Gleichung, die der Schrödinger-Gleichung ähnelt. Das Potential ist hierin jedoch durch ein Pseudopotential zu ersetzen. Die Überlagerung der wenigen ebenen Wellen ist die Pseudowellenfunktion. In der Näherung mit zwei OPW hat die Pseudowellenfunktion die Form:

$$U_{n\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = A_n(p) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} + B_n(p) e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{b}_K) \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.4)$$

Die Konstanten $A_n(p)$ und $B_n(p)$ werden durch Einsetzen dieses Ansatzes in die Phillips-Kleinman-Gleichung bestimmt. Unter den Fourier-Koeffizienten des Potentials V_K ist jetzt stets der Fourier-Koeffizient des Pseudopotentials zu verstehen, der als bekannt vorausgesetzt wird. Sein Wert kann, wenigstens der Größenordnung nach, angegeben werden für verschiedene Metalle, deren Bandstruktur und Fermi-Fläche bekannt sind. Eine numerische Abschätzung hat gezeigt, daß diejenigen Teilintegrale von $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{nn'}(\mathbf{b}_K)$, die unter Verwendung der OPW für die Bloch-Funktionen mit den Rumpffunktionen zu bilden sind, einen Beitrag von maximal 2% zum Gesamtwert von $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{nn'}(\mathbf{b}_K)$ liefern. Sie werden im folgenden stets vernachlässigt. Es ergab sich weiterhin, daß die mit dem Ansatz Gl. (2.4) erhaltenen Summanden der Summen über \mathbf{p} und n in Gl. (2.1) mit wachsendem Abstand der Variablen \mathbf{p} von der Brillouin-Zonenwand stark abnehmen. Die Phillips-Kleinman-Gleichung liefert dann mit dem Ansatz Gl. (2.4) für die Wellenfunktionen auch die Energie $E_{1(2)}(\mathbf{p})$ der beiden Bänder. Ebenso lassen sich die Integrale $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{nn'}(\mathbf{b}_K)$ elementar berechnen. Sie werden jedoch zur Vereinfachung nach dem Vektor $\tilde{\mathbf{k}}$ entwickelt. Da die Plasmaschwingungen nur für Werte von $|\tilde{\mathbf{k}}|$, die wesentlich kleiner als der Grenzwert k_c sind, stabil sind, wird die Taylor-Entwicklung nach $\tilde{\mathbf{k}}$ als zulässig angesehen. Man erhält dann sowohl für den Zähler als auch für den Nenner von $v(\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ eine Entwicklung nach Potenzen von $\tilde{\mathbf{k}}$, die jeweils bis zur zweiten Potenz in $\tilde{\mathbf{k}}$ geführt wird. Zur weiteren Auswertung von Gl. (2.1) muß die Summation über die Vektoren \mathbf{p} in der ersten Brillouin-Zone durch Integration ersetzt werden. Die Integrationsgrenze ist die Fermi-

Fläche $E_F = E_{1(2)}(\mathbf{p})$, die an der Brillouin-Zonenwand $\frac{1}{2}\mathbf{b}_K$ in schon beschriebener Weise von der Kugelgestalt abweicht, und die Fläche

$$E_F = E_{1(2)}(\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}).$$

Da die Funktion $E_1(\mathbf{p}), E_2(\mathbf{p})$ Rotationssymmetrie um eine zu \mathbf{b}_K parallele Achse aufweist, lässt sich die Rechnung durch Einführung von Zylinderkoordinaten (p_r, p_x, φ) im reziproken Raum vereinfachen, wobei p_x die Koordinate parallel zu \mathbf{b}_K ist. Die Integrationsvolumina im reziproken Raum für Übergänge aus besetzten Zuständen im Band 2 bzw. 1 in unbesetzte Zustände im tieferen Band in unbesetzte Zustände des höheren Bandes sind in Abb. 1, 2 und 3 skizziert. Abb. 1 und 2 stellen die Verhältnisse dar, falls $\tilde{\mathbf{k}}$ nur eine r -Komponente hat, Abb. 3, falls $\tilde{\mathbf{k}}$ nur eine x -Komponente hat. Den allgemeinen Fall erhält man durch Überlagerung der beiden Fälle.

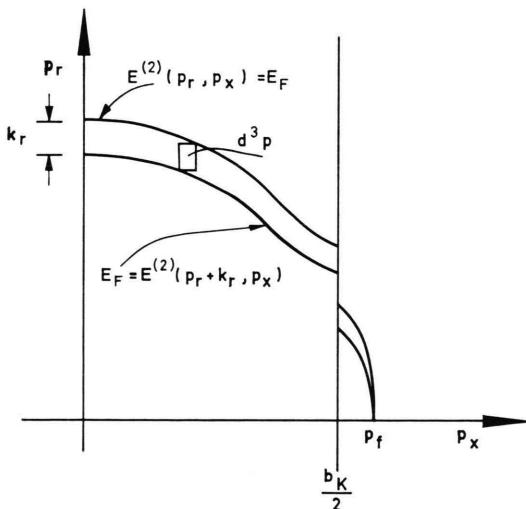


Fig. 1. Zur Integration im p -Raum, Gl. (2.1). Schnitt der Fermi-Fläche und einer um k_r senkrecht zur p_x -Achse verschobenen Fläche mit einer Ebene, die die p_x -Achse enthält.

Man bekommt damit eine qualitative Abschätzung für $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$, mit deren Hilfe dann auf die Winkelverteilung im differentiellen unelastischen Wirkungsquerschnitt mittels Gl. (3.14)I, (3.16)I geschlossen werden kann und mit deren Hilfe die Imaginärteile des komplexen Fourier-Koeffizienten C_{0K} Gl. (1.7)I, (3.17)I berechnet werden können. Nach einer längeren jedoch elementaren Auswertung der Impulsraumintegrale ergibt sich schließlich für $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ das folgende Resultat:

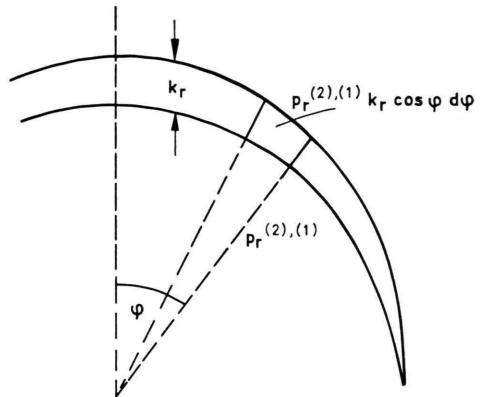


Fig. 2. Schnitt der Flächen aus Fig. 1 mit einer Ebene, die senkrecht zur p_x -Achse steht.

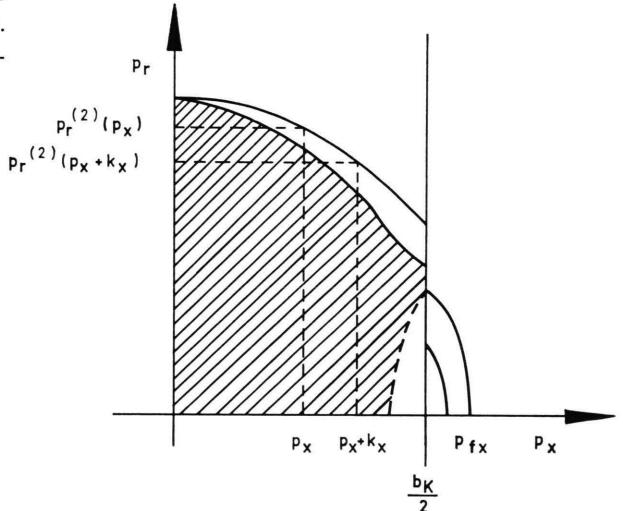


Fig. 3. Dasselbe wie in Fig. 1. Verschiebung erfolgt hier parallel zur p_x -Achse um k_x . Schraffierter Bereich für Übergänge aus besetzten Zuständen des tieferen Bandes in unbesetzte Zustände des höheren Bandes.

$$v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}}) = A \frac{\tilde{\mathbf{k}}_r^2}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2} + B \frac{\tilde{\mathbf{k}}_x^2}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2} + C \frac{\tilde{\mathbf{k}}_r \tilde{\mathbf{k}}_x}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2} + D \frac{(P_F \cdot \tilde{\mathbf{k}}_x)}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2}. \quad (2.5)$$

Die Koeffizienten A, B, C, D hängen in unübersichtlicher Weise von der Fermi-Grenzenergie E_F , dem Fourier-Koeffizienten V_K des Pseudopotentials und der Größe $\epsilon_K = \hbar^2 |\mathbf{b}_K/2|^2 / 2m$ ab*. Eine numerische Auswertung wurde für Magnesium, Beryllium und Kupfer durchgeführt. Dazu wurden die Werte für V_K für Magnesium aus einer Arbeit über die Bänder und Form der Fermi-Fläche von FALICOV⁵ entnommen. Für Be wurden für die Er-

mittlung von V_K Werte aus einer experimentellen Arbeit von WATTS⁶ über die Form der Fermi-Fläche und für E_F ein Wert aus einer Arbeit von LOUCKS und CUTLER⁷ entnommen. Für Kupfer wurden Werte aus einer Rechnung von SEGAL⁸ verwendet. Die für die Berechnung der Koeffizienten A, B, C, D benutzten Zahlenwerte sind in Tab. 1 zusammengestellt. Die damit numerisch berechneten Werte der Koeffizienten A, B, C, D für die verschiedenen Metalle, die Werte für k_c und die Plasmonenenergien $\hbar\omega_{\text{Pl}}$ sind in Tab. 2 angegeben.

Tab. 1. Zahlenwerte der für die Berechnung der Koeffizienten A, B, C, D benutzten Konstanten.

K	[aE]	E_F (eV)	V_K (eV)	ε_K (eV)	p_F [aE]
Mg [002] h.c.p.	$c = 9,7840$ $a = 6,026$	9,30	0,70	5,60	0,825
Be [002] h.c.p.	$c = 6,7715$ $a = 4,2319$	12,36	3,74	11,70	0,955
Cu [111] f.c.c.	$a = 6,83082$	6,92	1,96	8,63	0,715

Für $E_0 = 30 \text{ keV}$, $E_0 = 500 \text{ eV}$ wurde $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$, ($\tilde{\mathbf{k}}_r = k_{r,\min}$)⁹ in Abhängigkeit von $\tilde{\mathbf{k}}_x > 0$ dargestellt, siehe Abbildung 4. Der Verlauf von $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ wird im wesentlichen durch das 1. und 4. Glied der Gl. (2.5) bestimmt. Da der Zähler des 4. Gliedes in Gl. (2.5) linear in $\tilde{\mathbf{k}}_x$ ist, ist die Funktion $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ wegen Vorzeichenänderung von $\tilde{\mathbf{k}}_x$ nicht symmetrisch. Hier könnte die Erklärung für die von ISHIDA¹⁰ gefundene schwache Abhängigkeit der mittleren freien Weglänge für Plasmaschwingungen von der Abweichung von der Bragg-Bedingung gesehen werden. Es ist zu bemerken, daß die Rechnung für niedrige Elektronenenergien wie 500 eV nur eine sehr grobe Abschätzung liefern kann, da bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten in Teil I Störungstheorie bis zur ersten Ordnung angewendet wurde¹¹. Für $\tilde{\mathbf{k}}_r \geq k_{r,\min}$ und $\tilde{\mathbf{k}}_x \approx 0$ ergibt sich ein sehr schwacher Abfall von $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ mit wachsendem $\tilde{\mathbf{k}}_r$. Der Nenner $|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_K|^2$ in Gl. (3.6) führt dann zu einem etwas stärkeren Abfall. Damit ist das Verhalten von $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ in Abhängigkeit von $\tilde{\mathbf{k}}$ skizziert.

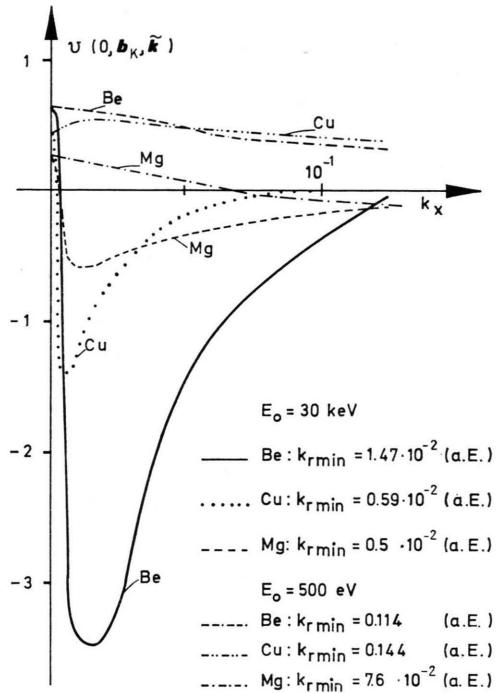


Fig. 4. Die Funktion $V(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$, Gl. (2.5), in Abhängigkeit von $\tilde{\mathbf{k}}_x$ für $\tilde{\mathbf{k}}_r = k_{r,\min}$.

3. Abschätzung des Imaginärteils von C_{0g}

Das Integral Gl. (1.7) zerfällt in ein Volumenintegral, welches den Realteil liefert und in ein Oberflächenintegral, welches den Imaginärteil liefert. In der Plasmafrequenz wird wieder die Dispersion vernachlässigt. Da $\tilde{\mathbf{k}}$ beschränkt ist auf den Bereich $0 \leq |\tilde{\mathbf{k}}| \leq |k_c|$, ist als Integrationsgebiet nur ein bestimmtes Volumen im Impulsraum zugelassen, was durch die beiden δ -Funktionen (Impulserhaltung) erzwungen wird. Mit der Beschränkung auf den Fall $\mathbf{b}_i = 0$; $\mathbf{b}_g \neq 0$ erhält man für die Integration im Impulsraum die aus Abb. 5 ersichtlichen Zusammenhänge. Das Integrationsvolumen ist eine Kugel um den Endpunkt des Vektors \mathbf{K}_0^0 mit dem Radius k_c . Aus der Kugelfläche, die nach Abb. 5 ihren Mittelpunkt im Ur-

Tab. 2. Zahlenwerte der Koeffizienten A, B, C, D für die Berechnung von Gl. (2.5).

	$\hbar\omega_{\text{Pl}}$ (eV)	k_c [aE]	A	B	C	D
Mg	10,9	0,50	$+ 25,9 \cdot 10^{-2}$	$- 6,7 \cdot 10^{-2}$	$- 10,3 \cdot 10^{-2}$	$- 1,58 \cdot 10^{-2}$
Be	18,8	0,72	$+ 64,7 \cdot 10^{-2}$	$+ 40,0 \cdot 10^{-2}$	$+ 76,4 \cdot 10^{-2}$	$- 13,6 \cdot 10^{-2}$
Cu	7,5	0,386	$+ 42,3 \cdot 10^{-2}$	$+ 20,7 \cdot 10^{-2}$	$+ 29,2 \cdot 10^{-2}$	$- 3,07 \cdot 10^{-2}$

sprung des Vektors \mathbf{K}_0^0 und den Radius

$$|\mathbf{k}_{\text{PL}}| = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E - \hbar\omega_{\text{Pl}})}$$

hat, schneidet die schon erwähnte Kugel mit dem Radius \tilde{k}_c einen bestimmten Teil (σ) heraus. Auf dieser Fläche (σ) ist der Energiesatz erfüllt. Diese Schnittfläche hat den Abstand $|\tilde{k}_{r\min}|$ vom Mittelpunkt der Kugel \tilde{k}_c . Die Schnittfläche (σ) ist die Integrationsfläche, über die bei der Berechnung des Imaginärteils von C_{0g} zu integrieren ist. Da für die Absorption nur der Imaginärteil interessiert, soll nur dieses Flächenintegral abgeschätzt werden. Es lautet:

$$\text{Im } C_{0g} = \frac{me^2}{4\pi\hbar^2} \int_{(\text{Fl. } \sigma)} \frac{v(0, \mathbf{b}_g, \tilde{\mathbf{k}})}{|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_g|^2 |\mathbf{K}_{\text{Pl}}|} d\sigma. \quad (2.6)$$

Die Integrationsfläche kann für schnelle Elektronen mit guter Näherung durch eine Kreisscheibe ersetzt werden. Für langsame Elektronen würde

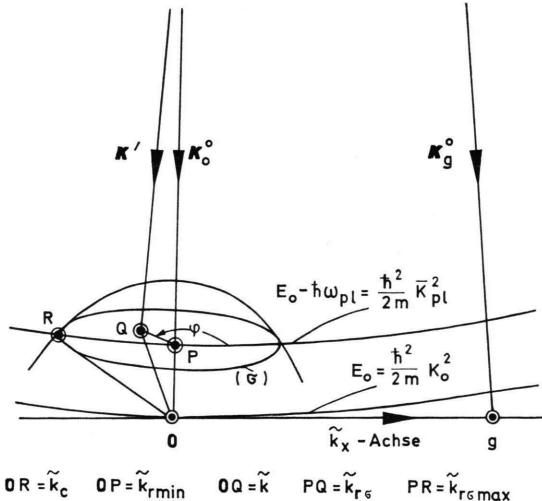


Fig. 5. Zur Integration im Impulsraum. Für die Integration über die Fläche σ wird das aus der Figur ersichtliche System eingeführt:

$$\begin{aligned} \tilde{k}^2 &= \tilde{k}_{r\min}^2 + \tilde{k}_{r\sigma}^2; \quad \tilde{k}_x = \tilde{k}_{r\sigma} \cos \varphi; \quad \tilde{k}_y = \tilde{k}_{r\sigma} \sin \varphi \\ k_{r\sigma\max}^2 &= (\tilde{k}_0^2 - \tilde{k}_{r\min}^2); \quad \tilde{k}_r^2 = \tilde{k}_{r\sigma}^2 \sin^2 \varphi + \tilde{k}_{r\min}^2 \\ d\sigma &= k_{r\sigma} d\varphi dk_{r\sigma}. \end{aligned}$$

diese Näherung natürlich nur noch eingeschränkt gültig sein. Solange jedoch der Durchmesser der Kugel, die zur Energie E_0 gehört, noch erheblich größer ist als der der ersten Brillouin-Zone, kann man zur Abschätzung diese Näherung machen. Die Integrationsgrenzen sind aus Abb. 5 zu entnehmen.

Es ist zweckmäßig, statt mit $\hbar\tilde{k}_{r\min}$ und $\hbar\tilde{k}_c$ mit den Energien zu rechnen, die die entsprechenden

freien Elektronen mit diesen Impulsen haben, d.h.

$$\hbar k_c \triangleq E_{\text{Pl}}^2/4E_F = E_c, \quad \hbar \tilde{k}_{r\min} \triangleq E_{\min} = E_{\text{Pl}}^2/4E_0.$$

Für $\mathbf{b}_g = 0$ folgt aus Gl. (2.6):

$$\text{Im } C_{00} = \frac{e^2 m}{2\hbar |\mathbf{K}_{\text{Pl}}|} \hbar \omega_{\text{Pl}} \ln \left(\frac{\tilde{k}_c^2}{\tilde{k}_{r\min}^2} \right) \quad (2.7 \text{a})$$

$$\text{Im } C_{00} = \frac{1}{2} E_{\text{Pl}} \sqrt{E_H/(E_0 - E_{\text{Pl}})} \ln(E_0/E_F), \quad (2.7 \text{ b})$$

wobei $E_H = e^4 m/2\hbar^2$.

Mit dem schon berechneten Ausdruck für $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ Gl. (2.5) erhält man damit das folgende Integral:

$$\begin{aligned} \text{Im } C_{0g} &= \frac{1}{2} E_{\text{Pl}} \sqrt{\frac{E_H}{E_0 - E_{\text{Pl}}}} \quad (2.8) \\ &\cdot \frac{1}{\pi} \int_0^{k_{r\sigma\max}} \int_0^{2\pi} \frac{v(0, \mathbf{b}_g, \tilde{\mathbf{k}}) k_{r\sigma} dk_{r\sigma} d\varphi}{(\mathbf{b}_g^2 + \tilde{k}_{r\min}^2 + \tilde{k}_c^2 - 2|\mathbf{b}_g| k_{r\sigma} \cos \varphi)}. \end{aligned}$$

Da der Nenner des Integranden von Gl. (2.8) nur schwach von \tilde{k} abhängt, im Gegensatz zur Funktion $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$, wird er durch einen Mittelwert $(\mathbf{b}_g^2 + \frac{1}{2}(\tilde{k}_{r\min}^2 + \tilde{k}_c^2))$ ersetzt. Mit dieser Vereinfachung kann eine Integration durchgeführt werden. Die Ergebnisse einer numerischen Auswertung für die Verhältnisse $\text{Im } C_{0g}/\text{Im } C_{00}$ sind für zwei Werte von E_0 und für die drei Metalle in Tab. 3 angegeben.

Tab. 3. Die nach Gl. (2.7b) und Gl. (2.8) berechneten Verhältnisse der Imaginärteile.

K_9	(30 keV) $\tilde{k}_{r\min} [\text{aE}]$	$\text{Im } C_{0g}$	(500 eV) $\tilde{k}_{r\min} [\text{aE}]$	$\text{Im } C_{0g}$
		$\text{Im } C_{00}$		$\text{Im } C_{00}$
Mg [002]	$0,5 \cdot 10^{-2}$	$0,534 \cdot 10^{-2}$	$7,6 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-2}$
Be [002]	$1,47 \cdot 10^{-2}$	$2,70 \cdot 10^{-2}$	$0,114$	$6,30 \cdot 10^{-2}$
Cu [111]	$0,57 \cdot 10^{-2}$	$0,81 \cdot 10^{-2}$	$0,144$	$1,60 \cdot 10^{-2}$

Diskussion

Eine experimentelle Überprüfung dieser zusätzlichen unelastischen Streuprozesse muß durch Energieanalyse der Beugungsreflexe erfolgen bzw. durch eine sehr genaue Messung der anomalen Absorptionskoeffizienten. Die Untersuchungen von ISHIDA¹⁰ und CUNDY¹² weisen auf einen schwachen Effekt hin. Die hier berechneten numerischen Werte für die anomalen Absorptionskoeffizienten sind größtenteils vergleichbar mit den Werten, die YOSHIOKA¹³ für die durch Einzelelektronenanregung bedingte Absorption erhalten hat. Die Ergebnisse für $E_0 = 500 \text{ eV}$ sind, wie schon erwähnt, bei der Diskussion von $v(0, \mathbf{b}_K, \tilde{\mathbf{k}})$ nur als

grobe Näherung zu werten, die jedoch zeigt, daß der Effekt für 500 eV größer ist und für LEED interessant sein könnte. Das Verhältnis

$$\text{Im } C_{0g}/\text{Im } C_{00}$$

ist von dem Grenzwert \tilde{k}_c abhängig. Dieser Grenzwert liefert die Integrationsgrenze und damit die Größe von $\text{Im } C_{00}$ und $\text{Im } C_{0g}$. Die Abhängigkeit ist jedoch bei dem Verhältnis $\text{Im } C_{0g}/\text{Im } C_{00}$ etwas weniger stark als bei $\text{Im } C_{0g}$ selbst. Die Werte für k_c , die aus der einfachen Abschätzung folgen (siehe z.B. RAETHER³) sind vermutlich zu groß. Eine Dämpfung der Plasmonen, die nicht nur nach dem Erreichen der Grenze k_c eintritt, sondern stets einen endlichen Wert hat, führt zu einer effektiven Verkleinerung von k_c . Diese Dämpfung wird erst durch eine Theorie, die über die Paarnäherung hinausgeht, geliefert. Die hier durchgeföhrte Theorie kann jedoch zur Größenordnungsabschätzung des Anteils vom Imaginärteil des komplexen Potentials der von den Plasmaschwingungen herröhrt, dienen.

Daraus ergibt sich durch Multiplikation der ersten Gleichung mit \tilde{u}_{np}^* und der zweiten mit u_{np} und anschließender Subtraktion beider Gleichungen voneinander und Integration

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [-\tilde{u}_{np}^*(\hbar^2/2m) u_{np} + u_{np}(\hbar^2/2m) \tilde{u}_{np}^*] d^3r \\ + \int_{\Omega} (V(r) - \tilde{V}(r)) \tilde{u}_{np}^* u_{np} d^3r \\ = \int_{\Omega} [E_n(p) - \tilde{E}_n(p)] \tilde{u}_{np}^* u_{np} d^3r. \end{aligned}$$

Das erste Integral verschwindet und in dem zweiten entwickelt man $V(r)$ und $\tilde{V}(r)$ in die Fourier-Reihen. $\tilde{V}(r)$ soll sich von $V(r)$ in einem Fourier-Koeffizienten: $\tilde{V}_K = V_K + \delta V_K$ unterscheiden. $E_n(p)$ und \tilde{u}_{np} werden ebenfalls nach δV_K entwickelt. Wegen der Bloch-Eigenschaft der Wellenfunktionen kann man die Integration über das Kristallvolumen Ω durch die über die Einheitszelle Ω_0 ersetzen. Da δV_K eine beliebige Variation sein soll, und wegen der Normierung der Wellenfunktion folgt die oben angegebene Behauptung.

Anhang¹⁴

Es wird folgende Beziehung hergeleitet:

$$\int_{\Omega_0} u_{np}(r) e^{i b_K r} u_{np}^*(r) d^3r = \partial E_n(p) / \partial V_K.$$

Sei $V(r)$ das Gitterpotential, so lautet die Schrödinger-Gleichung

$$(-(\hbar^2/2m) + V(r)) u_{np}(r) = E_n(p) u_{np}(r)$$

und für ein Elektron in einem davon schwach abweichenden Gitterpotential $\tilde{V}(r)$ mit der gleichen Symmetrie und Gitterkonstanten für die Wellenfunktion $\tilde{u}_{np}(r)$

$$(-(\hbar^2/2m) + \tilde{V}(r)) \tilde{u}_{np}(r) = \tilde{E}_n(p) \tilde{u}_{np}(r).$$

¹ R. A. FERRELL, Phys. Rev. **101**, 554 [1955].

² A. HOWIE, Proc. Roy. Soc. A **271**, 268 [1963].

³ H. RAETHER, Solid State Excitations by Electrons. Springer Tracts in Modern Phys. (Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften) **38**, 85 [1965].

⁴ W. A. HARRISON, Pseudopotentials in the Theory of Metals, W. A. Benjamin Inc., New York 1966.

⁵ L. M. FALICOV, Phil. Trans. A **255**, (No. 1051) 55 [1962].

⁶ WATTS, Proc. Roy. Soc. A **282**, 521 [1964].

⁷ LOUCKS u. CUTLER, Phys. Rev. **133A**, 819 [1964].

⁸ B. SEGALL, Phys. Rev. **125**, 109 [1962].

Herr Professor Dr. K. MOLÉRE danke ich für die Anregung zu den als Teil I und II veröffentlichten Arbeiten und für die Förderung bei der Durchführung.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. K. KAMBE. Seine Ratschläge und fördernde Kritik, zu der er jederzeit bereit war, waren eine außerordentlich wertvolle Hilfe. Ebenfalls möchte ich mich bei Herrn Dr. E. H. WAGNER für seine Bereitschaft zu Diskussionen und Gesprächen bedanken.

Für diese Arbeiten stellte die Max-Planck-Gesellschaft ein Stipendium zur Verfügung; weitere Mittel gewährte die Deutsche Forschungsgemeinschaft. Beiden Institutionen bin ich zu Dank verpflichtet.

* Eine ausführliche Darstellung der Koeffizienten A , B , C , D enthält die Dissertation des Verfassers, D 83 T.U. Berlin 1969.

⁹ $\tilde{k}_r = \tilde{k}_{r,\min}$ wegen Energie- und Impulserhaltung, siehe Gl. (1.1).

¹⁰ K. ISHIDA, M. MANNAMI, and K. TANAKA, J. Phys. Sov. Japan **23**, 1362 [1967].

¹¹ Für noch niedrigere Energien als ~ 30 eV sind keine Streuungen am Plasma mehr möglich, da $\tilde{k}_{r,\min}$ dann größer als \tilde{k}_i werden würde.

¹² S. L. CUNDY, A. J. F. METHERELL, and M. J. WHELAN, 6th Int. Conf. El. Micr. Kyoto Vol. 1, p. 87, Tokyo 1966.

¹³ H. YOSHIOKA, J. Phys. Soc. Japan **12**, 618 [1957].

¹⁴ K. KAMBE, private Mitteilung.