

- ¹ H. BETHE, Ann. Physik **87**, 55 [1928].
² P. M. J. FISHER, Ph. D. Thesis, Melbourne University, 1970, and references therein.
³ P. J. ESTRUP and E. G. MCRAE, Surf. Sci. **25**, 1 [1971].
⁴ R. COLLELA and J. F. MENADUE, Acta Cryst., to be published.
⁵ R. COLLELA, Acta Cryst., to be published.
⁶ E. LAMLA, Ann. Physik **32**, 178 [1938].
⁷ E. LAMLA, J. Reine Angew. Math. **179**, 134 [1938].
⁸ E. T. WHITTAKER and C. W. WATSON, Modern Analysis, C.U.P., 415 [1963].
⁹ L. FOX, An Introduction to Numerical Linear Algebra, O.U.P., 60 [1965].
¹⁰ K. NICKEL, Num. Math. **9**, 80 [1966].
¹¹ P. A. DOYLE and P. S. TURNER, Acta Cryst. **A 24**, 390 [1968].
¹² A. R. MOON and J. M. COWLEY, J. Vac. Sci. Tech., to be published.
¹³ J. F. MENADUE, Acta Cryst., to be published.
¹⁴ J. H. WILKINSON, The Algebraic Eigenvalue Problem, O.U.P., 515 [1965].
¹⁵ K. KAMBE, private communication.
¹⁶ E. G. MCRAE, Surf. Sci. **25**, 491 [1971].

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

W. MÜNCHMEYER

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

(Z. Naturforsch. **27 a**, 395—401 [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. I.

The scattering of electrons by solid-state plasmons is investigated, the system of valence electrons being treated with Green's function method. The lattice periodicity is taken into account for the wave field of the incident electrons as well as for the plasma oscillations of the valence electrons. Scattering processes which contain a reciprocal-lattice vector in the momentum balance appear in addition to the usual inelastic small-angle scattering. Their influence upon the imaginary part of the complex scattering potential is discussed. In a following paper, the reason for the additional scattering processes will be given in terms of the form of the Fermi surface of the solid.

Einleitung

Bei der Elektronenbeugung an Kristallen werden neben den elastisch gestreuten Elektronen auch die unelastisch gestreuten vornehmlich in die durch die Bragg-Bedingung bestimmten Reflexionsrichtungen gestreut. Diese unelastisch gestreuten Elektronen haben vor oder nach der elastischen Streuung am Gitter Energie durch Wechselwirkung mit den Festkörperelektronen verloren. So führt die Anregung von Plasmaschwingungen der Festkörperelektronen durch schnelle Elektronen zur unelastischen Kleinwinkelstreuung. Der Wirkungsquerschnitt für den zuletzt erwähnten Prozeß wurde nach der Bohm-Pines-Theorie von FERRELL¹ berechnet. Im wesentlichen basieren alle Erklärungen der Experimente auf der Theorie des homogenen Elektronengases². Dort wird zur Vereinfachung eine dielektrische Funktion eingeführt, die von Wellenzahl und Frequenz der Störung abhängig ist. Es wurde jedoch zusätzlich von ISHIDA

u. a.³ und CUNDY⁴ experimentell eine schwache Abhängigkeit der freien Weglänge für Elektronen von der Bragg-Bedingung festgestellt. Im Gegensatz dazu wurde von MEYER⁵ und HIRSCH⁶ keine solche Abhängigkeit angegeben. Ob und in welcher Form bei der Elektron-Plasmon-Streuung eine Abhängigkeit von der Bragg-Bedingung und damit von der Gitterstruktur des Festkörpers vorliegt, soll in der vorliegenden Arbeit theoretisch geklärt werden. Ausgegangen wird von KAINUMAS⁷ Theorie der Kikuchi-Linien und YOSHIOKAS⁸ Theorie der anomalen Absorptionskoeffizienten. Es werden zunächst zwei Probleme behandelt:

1. Es wird untersucht, ob zusätzlich zu der oben beschriebenen elastisch-unelastischen Zweifachstreuung eine direkte unelastische Streuung in die Reflexrichtung erfolgt. Eine schematische Darstellung dieses Sachverhalts ist aus Abb. 1 zu entnehmen (s. Diskussion).

2. Es wird eine Formel für den Imaginärteil des komplexen Streupotentials angegeben, die die wegen der zusätzlichen Streuprozesse zu erwartende Änderung der Absorption beschreibt (anomale Absorption).

* 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.

Die direkte Elektronenstreuung in die Bragg-Reflexe lässt sich nur dann erklären, wenn der inverse dielektrische Operator^{9,10} eine Matrix im reziproken Gitterraum ist. In der vorliegenden Arbeit wird jedoch dieser Operator nicht vollständig benötigt. Der Wirkungsquerschnitt nach Ferrell ist natürlich als Sonderfall in ihr enthalten.

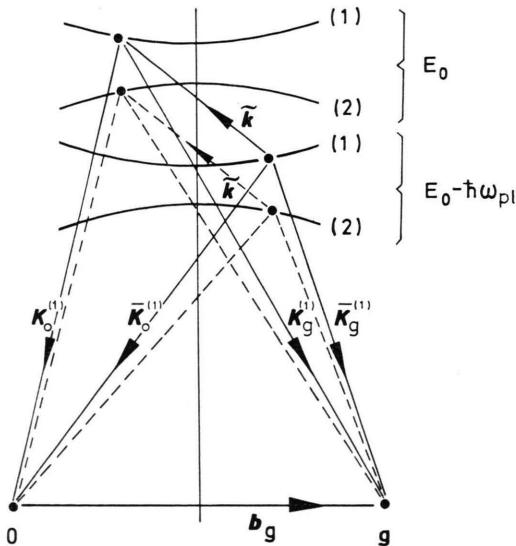


Abb. 1. Schematische Darstellung der geometrischen Beziehung zwischen den Plasmonenimpulsen \tilde{k} , den reziproken Gittervektoren \mathbf{b}_i , \mathbf{b}_j und den Wellenvektoren der Wellenfelder $\mathbf{K}_h^{(nu)}$, $\mathbf{K}_g^{(\mu)}$, $\bar{\mathbf{K}}_h^{(\nu')}$, $\bar{\mathbf{K}}_g^{(\mu')}$ (die ausgezogenen Linien kennzeichnen insgesamt 8 mögliche Fälle, u. a. den Fall:

Normaler Prozeß

$$\mathbf{b}_i = 0; \quad \tilde{k} + \mathbf{K}_0^{(1)} - \bar{\mathbf{K}}_0^{(1)} = 0.$$

Zusätzlicher Prozeß

$$\mathbf{b}_j = -\mathbf{b}_g; \quad \tilde{k} + \mathbf{K}_g^{(1)} - \bar{\mathbf{K}}_g^{(1)} + \mathbf{b}_g = 0.$$

1. Der Wirkungsquerschnitt für unelastische Streuung und der anomale Absorptionskoeffizient

Aus dem Elektron mit der Energie E_0 entsteht im Kristall das Bloch-Wellenfeld $\Psi_{\mathbf{K}^0}^0(\mathbf{R})$. Das Kristallelektronensystem befindet sich im Grundzustand $a_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$. Durch Coulombwechselwirkung des schnellen Elektrons mit den Festkörperlektronen werden im Kristall elektronische Prozesse angeregt, wodurch das Wellenfeld Energie verliert. Gitterschwingungen werden nicht betrachtet. In einem Streuprozeß erster Ordnung entsteht ein Wellenfeld $\Psi_{\mathbf{K}^n}^n(\mathbf{R})$ mit der Energie $E_n < E_0$, das sich im Vakuum in dem unelastisch gestreuten Elektron fortsetzt. Das Kristallelektronensystem befindet sich im angeregten Zustand $a_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$. Die Entwicklung eines Wellenfeldes sei gegeben durch:

$$\Psi_{\mathbf{K}^0}^0(\mathbf{R}) = \sum_{(\nu)h} \chi_h^{0(\nu)} \exp \{i(\mathbf{K}_h^{0(\nu)} \cdot \mathbf{R})\}. \quad (1.1)$$

Darin bedeuten: $\mathbf{K}_h^{0(\nu)} = k^{0(\nu)} + \mathbf{b}_h$ der Wellenvektor eines Feldes mit der Energie E_0 , der zur Dispersionsfläche (ν) gehört, \mathbf{b}_h ein reziproker Gittervektor, $\chi_h^{0(\nu)}$ die Amplituden des Bloch-Wellenfeldes.

Die gleiche Entwicklung wird für das Wellenfeld $\Psi_{\mathbf{K}^n}^n(\mathbf{R})$ durchgeführt. Die dazugehörigen Amplituden und Wellenvektoren werden im folgenden durch Überstreichen gekennzeichnet. Analog zu KAINUMAS Theorie der Kikuchi-Linien^{7,11}, jedoch unter Mitführung der Abhängigkeit von $\hbar\omega = E_0 - E$, erhält man für den differentiellen Wirkungsquerschnitt in erster Näherung für die unelastische Streuung von Elektronen in den Energiebereich E_f mit der Energiebreite $2\Delta E$ das folgende Ergebnis:

$$\sigma_{af} = C_0 \int_{E_t - \Delta E}^{E_t + \Delta E} \sqrt{\frac{E}{E_0}} \sum_{\substack{h, h', g, g' \\ (\nu), (\nu'), (\mu), (\mu')}} \chi_h^{0(\nu)} \bar{\chi}_{h'}^{(\nu')} * \chi_g^{0(\mu)*} \bar{\chi}_{g'}^{(\mu')} S \left(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \frac{E_0 - E}{\hbar} \right). \quad (1.2)$$

Hierin ist S die folgende Funktion:

$$S(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \iint_{\Omega} H_{0n}(\mathbf{R}) H_{n0}(\mathbf{R}') \exp \{i(\mathbf{q}_{hh'} \cdot \mathbf{R})\} \exp \{-i(\mathbf{q}_{gg'} \cdot \mathbf{R}')\} d^3R d^3R' \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (1.3)$$

wobei Ω = Kristallvolumen.

Darin sind die Abkürzungen eingeführt:

$$\mathbf{q}_{hh'} = \mathbf{K}_h^{0(\nu)} - \mathbf{K}_{h'}^{(\nu')}; \quad \mathbf{q}_{gg'} = \mathbf{K}_g^{0(\mu)} - \mathbf{K}_{g'}^{(\mu')}. \quad (1.4)$$

$H_{nm}(\mathbf{R})$ sind die Matrixelemente der Wechselwirkung

$$H_W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}) = \sum_i e^2 / |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}| \quad (1.5)$$

der einfallenden Elektronen mit den Festkörperelektronen:

$$H_{nm}(\mathbf{R}) = \int \int \int_{\Omega} a_n^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) H_W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}) a_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N. \quad (1.6)$$

Die Größe $S(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega)$ ist der verallgemeinerte Strukturfaktor, der die Eigenschaften des streuenden Systems beschreibt. Er ist, abgesehen von der Variablen ω , eine Funktion der beiden unabhängigen Impulse $\mathbf{q}_{hh'}$ und $\mathbf{q}_{gg'}$.

Die Ermittlung von $S(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega)$ führt zur Lösung des ersten Problems.

Die Wirkung der unelastischen Felder auf das elastische Wellenfeld wird in niedrigster Näherung beschrieben durch ein komplexes Potential⁸. Die Fourier-Koeffizienten dieses Potentials sind nach YOSHIOKA [siehe ⁸, Gl. (20)]:

$$C_{hg} = \frac{1}{8\pi^3 \Omega} \int_{(K')} G(\mathbf{K}_h^0 - \mathbf{K}', \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}', \hbar \omega(\mathbf{K}')) d^3 \mathbf{K}', \quad (1.7)$$

wobei G die Funktion:

$$G(\mathbf{K}_h^0 - \mathbf{K}', \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}', \hbar \omega(\mathbf{K}')) = \sum_{n=0} \int \int_{\Omega} H_{0n}(\mathbf{R}) H_{n0}(\mathbf{R}') \frac{\exp\{-i(\mathbf{K}_h^0 - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R}\} \exp\{i(\mathbf{K}_g - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R}\}}{(\hbar \omega(\mathbf{K}') - \hbar \omega_{n0} + i\varepsilon)} d^3 R d^3 R' \quad (1.8)$$

und

$$\hbar \omega(\mathbf{K}') = E_0 - \frac{\hbar^2 \mathbf{K}'^2}{2m} \quad (1.9)$$

ist. Die Imaginärteile von C_{hg} ($h+g$) sind die sogenannten anomalen Absorptionspotentiale der Elektronenbeugungstheorie.

2. Zusammenhang mit der Zweiteilchen-Green-Funktion

Es lassen sich die Funktionen S und G auf eine Zweiteilchen-Green-Funktion G^{II} zurückführen, die man angennähert berechnen kann. Um den Zusammenhang zu erhalten, wird die Wechselwirkung in eine Fourier-Reihe entwickelt und das Matrixelement $H_{0n}(\mathbf{R})$ folgendermaßen umgeschrieben:

$$H_{0n}(\mathbf{R}) = \left\langle 0 \left| \int \varphi^+(\mathbf{r}) \frac{4\pi e^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}-\mathbf{r})} \varphi(\mathbf{r}) d^3 r \right| n \right\rangle. \quad (2.1)$$

Darin sind $|0\rangle$ der Grundzustand des N -Elektronensystems, $|n\rangle$ der n -te angeregte Zustand des N -Elektronensystems. Beides sollen die exakten Zustände unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung sein. $\varphi^+(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eines Elektrons am Ort \mathbf{r} . In dieser Darstellung erhält man für S und G^+ nach Einführung des Dichteoperators $\varrho(\mathbf{r}) = \varphi^+(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})$ und nach Integration sowohl über die Ortskoordinaten des Elektronenwellenfeldes der schnellen Elektronen \mathbf{R}, \mathbf{R}' als auch über die Koordinaten \mathbf{r} der Festkörperelektronen die folgenden Ausdrücke:

$$S(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega) = (4\pi e^2)^2 \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \frac{1}{|\mathbf{q}'|^2} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{hh'}) \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}_{gg'}) A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega), \quad (2.2)$$

$$G(\mathbf{K}_h^0 - \mathbf{K}', \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}', \hbar \omega(\mathbf{K}')) = (4\pi e^2)^2 \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \frac{1}{|\mathbf{q}'|^2} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{K}_h^0 + \mathbf{K}') \cdot \delta(-\mathbf{q}' + \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}') G^+(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega(\mathbf{K}')). \quad (2.3)$$

Es bedeuten:

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega) = \sum_n \langle 0 | \varrho(\mathbf{q}) | n \rangle \langle n | \varrho(\mathbf{q}') | 0 \rangle \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (2.4)$$

$$G^+(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega(\mathbf{K}')) = \sum_n \frac{\langle 0 | \varrho(\mathbf{q}) | n \rangle \langle n | \varrho(\mathbf{q}') | 0 \rangle}{\hbar \omega(\mathbf{K}') - \hbar \omega_{n0} + i\varepsilon}. \quad (2.5)$$

$\varrho(\mathbf{q})$ ist die Fourier-Transformierte von $\varrho(\mathbf{r})$.

Die Fourier-Transformierte der Zweiteilchen-Green-Funktion $G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ bezüglich der Orts- und Zeitkoordinaten sei $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$. Da die Invarianz gegenüber kontinuierlichen Koordinatentransformationen nicht mehr besteht, hängt G^{II} von den beiden Koordinaten $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ bzw. den beiden Impulsen \mathbf{q}, \mathbf{q}' ab. Die Lehmannsche Spektraldarstellung der Zweiteilchen-Green-Funktion $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ ist¹²:

$$G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \bar{\omega})}{\omega - \bar{\omega} + i\varepsilon} - \frac{A(\mathbf{q}', \mathbf{q}, \bar{\omega})}{\omega + \bar{\omega} - i\varepsilon} \right) d\bar{\omega}. \quad (2.6)$$

Das erste Integral von Gl. (2.6) ist identisch mit $(\hbar/2\pi) G^+(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ aus Gl. (2.5). Kennt man $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ so auch $A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ und umgekehrt. Nach einem zum homogenen Fall^{13,14} analogen Vorgang erhält man für den inhomogenen Fall nach Zerlegung von G^{II} in seine symmetrischen und antisymmetrischen Anteile $G^{\text{II}s}$ und $G^{\text{II}a}$ mit Hilfe der Spektraldarstellung den folgenden Zusammenhang:

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega) = -2 \operatorname{Im}(G^{\text{II}s}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)) + 2 \operatorname{Re}(G^{\text{II}a}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)) \quad (\omega > 0). \quad (2.7)$$

3. Berechnung von $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$

Für das dichte Elektronengas liefert die Aufsummierung der Polarisations-Graphen-Reihe, die im homogenen Fall möglich ist, ein konvergentes Ergebnis für $\mathbf{q} \rightarrow 0$ ¹⁵. Beschränkt man sich weiterhin auf den Fall des dichten Elektronengases, lässt aber die Beschränkung der Homogenität fallen, so erhält man, wie für den homogenen Fall, für den nicht homogenen Fall zur Bestimmung von $G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ die Integralgleichung:

$$G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = G_0^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + 2\pi \int_{\Omega} L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3, \omega) G^{\text{II}}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, \omega) d^3r_3, \quad (3.1)$$

die man durch Fourier-Transformation bezüglich der Zeit aus der Integralgleichung:

$$G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) = G_0^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) + \frac{1}{\hbar} \int_{\Omega} L(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_3, t_3) \delta(t_1 - t_3) G^{\text{II}}(\mathbf{r}_3, t_3, \mathbf{r}_2, t_2) d^3r_3 dt_3 \quad (3.2)$$

bekommt. Darin sind:

$$G_0^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) = -i G_0^{\text{I}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) G_0^{\text{I}}(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1), \quad G_0^{\text{I}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) \quad (3.3)$$

die Einteilchen-Green-Funktion und

$$L(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_2, t_2) = \frac{i}{\hbar} \int G_0^{\text{I}}(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_3, t_3) G_0^{\text{I}}(\mathbf{r}_3, t_3, \mathbf{r}_1, t_1) v(|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2|) \delta(t_3 - t_2) d^3r_3 dt_3 \quad (3.4)$$

der Kern der Integralgleichung. Die Integralgleichung (3.2) ist das Analogon zu der Integralgleichung für $G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t)$ im homogenen Fall, die man durch die Rücktransformation in die (\mathbf{r}, t) -Darstellung der durch die Aufsummation der Polarisations-Graphen-Reihe entstehenden Beziehung im (\mathbf{q}, ω) -Raum erhalten kann. Analoge Integralgleichungen haben HUBBARD¹⁶ sowie ABE, OSAKA und MORITA¹⁷ für die modifizierte Wechselwirkung und FALK⁹ für den inversen dielektrischen Operator $\varepsilon^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s)$ hergeleitet. Eine Näherung für die Fourier-Transformierte des inversen dielektrischen Operators im nicht homogenen Fall hat ENGELSBERG¹⁸ auf anderem Wege gefunden. Nach HUBBARD¹⁶ (III,4) benutzt man zur Abschätzung der Lösung der Integralgleichung (3.1) die Eigenschaft der vorderen und hinteren Kernfunktionen $\Phi^{(i)}$ und $\chi^{(i)}$ der homogenen Integralgleichung von Gl. (3.1).

$$\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega) \chi^{(i)}(\mathbf{r}_1 \tilde{\mathbf{k}}, \omega) = 2\pi \int_{\Omega} L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \chi^{(i)}(\mathbf{r}_2 \tilde{\mathbf{k}}, \omega) d^3r_2 \quad (3.5a)$$

$$\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega) \Phi^{(i)*}(\mathbf{r}_2, \tilde{\mathbf{k}}, \omega) = 2\pi \int_{\Omega} L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \Phi^{(i)*}(\mathbf{r}_1, \tilde{\mathbf{k}}, \omega) d^3r_1. \quad (3.5b)$$

Da der Kern, Gl. (3.4) der Integralgleichung gitterperiodisch ist, d.h., da gilt:

$$L(\mathbf{r}_1 + \mathbf{R}_n, \mathbf{r}_2 + \mathbf{R}_n, \omega) = L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \quad (\mathbf{R}_n = \text{bel. Gittervektor}) \quad (3.6)$$

müssen die Eigenfunktionen $\Phi^{(i)}, \chi^{(j)}$ den Charakter von Bloch-Funktionen haben. Die Eigenwerte $\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega)$ müssen Bandstruktur besitzen. Der Index (i) kennzeichne das Band. Nachdem man alle gitterperiodischen Funktionen, die als Faktoren in den Eigenfunktionen $\Phi^{(i)}, \chi^{(j)}$, in dem Kern und in G_0^{II} auftreten, in Fourier-Reihen entwickelt hat, erhält man nach einer einfachen Zwischenrechnung den folgenden Ausdruck für $G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ bzw. für die in Abschnitt 2 eingeführte Funktion $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$:

$$\begin{aligned} G^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, i, j, n, m} \frac{\sum_{\mathbf{r}, s} G_0^{\text{II}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s) \varphi^{(i)*}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r) \chi^{(j)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_s)}{(1 - \mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega))} \Phi^{(j)*}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_n) \chi^{(i)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_m) \\ &\quad \cdot \begin{cases} \exp\{-i(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_n) \cdot \mathbf{r}_1\} \exp\{i(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_m) \cdot \mathbf{r}_2\} \\ \delta(-\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{b}_n - \mathbf{q}) \cdot \delta(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_m + \mathbf{q}') \end{cases} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Darin sind $G_0^{\text{II}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s)$ die Entwicklungskoeffizienten von $G_0^{\text{II}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$, $\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega)$ der oben eingeführte Eigenwert der homogenen Integralgleichung (im allgemeinen komplex), $\Phi^{(i)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r)$, $\chi^{(j)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r)$ die Entwicklungskoeffizienten der oben eingeführten Eigenfunktionen der homogenen Integralgleichung. Das Ergebnis Gl. (3.7) soll jetzt ausgewertet werden. Die Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte der homogenen Integralgleichung ist:

$$\text{Det}(2\pi L(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s) - \mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega) \delta_{rs}) = 0. \quad (3.8)$$

Die $L(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s)$ sind die Matrixelemente des Kernes, sie werden im Anhang I angegeben. Die niedrigste Näherung für die $\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega)$ sind die Diagonalelemente von L , d.h.:

$$\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega) = 2\pi L(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_r). \quad (3.9)$$

Die einzelnen Eigenwerte (d.h. die Indices (i)) werden jetzt durch die \mathbf{b}_r charakterisiert. Dann sind in niedrigster Näherung die dazugehörigen Eigenfunktionen im Impulsraum:

$$\Phi^{(i)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r) = \delta_{ir}; \quad \chi^{(j)}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_s) = \delta_{js}. \quad (3.10)$$

Damit erhält man aus Gl. (3.7) den vereinfachten Ausdruck:

$$G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega) = \sum_{\mathbf{k}, i, j} \frac{G_0^{\text{II}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j) \delta(-\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{q} + \mathbf{b}_i) \delta(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{q}' - \mathbf{b}_j)}{1 - \mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega)}. \quad (3.11)$$

Die Näherung Gl. (3.11) für G^{II} enthält qualitativ sowohl die Anregung des Festkörpers als auch den Einfluß der Gitterperiodizität, so daß man hiermit die Stärkefunktion berechnen kann. Man erkennt an Gl. (3.11), daß $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ zusätzlich zu den Polen der Greenschen Funktion $G_0^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ noch einen weiteren Pol $\omega_{\text{Pl}}(\mathbf{k})$ besitzt, der durch die Gleichung:

$$1 - \mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{(i)}(\omega) = 0 \quad (3.12)$$

bestimmt wird. Das heißt, es existiert eine zusätzliche Anregung mit der Energie $\hbar\omega_{\text{Pl}}$, vorausgesetzt, daß die Bedingung $\text{Re}(\omega_{\text{Pl}}) \gg \text{Im}(\omega_{\text{Pl}})$ erfüllt ist. Nun ist der Realteil der linken Seite von Gl. (3.12) für $\mathbf{b}_r = 0$ jedoch identisch mit dem Realteil der Frequenz- und Wellenzahl abhängigen dielektrischen Konstanten des Festkörpers¹⁹, wie sie z.B. aus der Random-Phase-Näherung gewonnen wird. Somit stellt Gl. (3.12) die Dispersionsgleichung für Plasmaschwingungen dar. Setzt man die Existenz dieser Plasmaschwingungen voraus, so kann man mit Gl. (2.7) die Spektraldichte (Stärkefunktion) in Analogie zum homogenen Fall in zwei Anteile zerlegen^{14, 20}. Für den Pol von $G^{\text{II}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega)$ an der Stelle ω_{Pl} erhält man nach einer Zwischenrechnung für $\mathbf{b}_i = 0$ oder $\mathbf{b}_j = 0$ oder $\mathbf{b}_i = \mathbf{b}_j = 0$ das folgende Ergebnis²⁰:

$$\begin{aligned} A_{\text{Pl}}(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}') &= \frac{\delta(\omega - \omega_{\text{Pl}})}{\hbar \omega_{\text{Pl}}} \frac{|\tilde{\mathbf{k}}|^2}{8\pi e^2} \sum_{i, j} \left\{ \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \sum_{n, p}^{\text{bes.}} \frac{\varrho_{\mathbf{p}+\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_i) \varrho_{\mathbf{p}+\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n*}(\mathbf{b}_j) \Delta E_{\mathbf{p}+\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}}{(\hbar^2 \omega^2 - (\Delta E_{\mathbf{p}+\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n})^2)} \right. \\ &\quad \left. \cdot (\delta_{i0} + \delta_{j0}) \delta(-\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{q} + \mathbf{b}_i) \delta(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{q}' - \mathbf{b}_j) \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

bzw. mit der Annahme $\hbar \omega_{\text{Pl}} \gg E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}$ den vereinfachten Ausdruck²¹:

$$A_{\text{Pl}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j) = \delta(\omega - \omega_{\text{Pl}})(\delta_{i0} + \delta_{j0}) \cdot \frac{|\tilde{\mathbf{k}}|^2 \hbar \omega_{\text{Pl}}}{8\pi e^2} \frac{\sum_{n'}^{\text{unbes.}} \sum_{n,p}^{\text{bes.}} \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_i) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_j) \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}}{\sum_{n'}^{\text{unbes.}} \sum_{n,p}^{\text{bes.}} |\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(0)|^2 \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}}. \quad (3.14)$$

Der zweite Anteil A_e für die Einzelanregungen wird in Anhang II angegeben. Mit dem Ausdruck für A_{Pl} (und A_e) erhält man schließlich mittels Gln. (2.2), (2.3) die Funktionen S und G . In dieser Arbeit soll nur der Anteil A_{Pl} behandelt werden. Der Anteil A_e erfordert eine besondere Behandlung, da dazu eine Berechnung von $\mu_{\tilde{\mathbf{k}}}(\omega)$ für den Festkörper nötig ist. Mit Gl. (3.14) ergeben sich sofort die entsprechenden Anteile von S und G , die von den Plasmaschwingungen herrühren, nachdem man die Summation über \mathbf{q} und \mathbf{q}' in Gln. (2.2), (2.3) ausgeführt hat:

$$S_{\text{Pl}}(\mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega) = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} S_{\text{Pl}}(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega), \quad (3.15)$$

$$S_{\text{Pl}}(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{q}_{hh'}, \mathbf{q}_{gg'}, \omega) = (4\pi e^2)^2 \sum_{i,j} A_{\text{Pl}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j) \frac{\delta(-\mathbf{k} + \mathbf{b}_i - \mathbf{q}_{hh'})}{|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_i|^2} \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{b}_j + \mathbf{q}_{gg'})}{|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_j|^2}, \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} G_{\text{Pl}}(\mathbf{K}_h^0 - \mathbf{K}', \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}', E_0 - (\hbar^2 \mathbf{K}'^2 / 2m)) \\ = (4\pi e^2)^2 \sum_{i,j} \int \frac{A_{\text{Pl}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_j) d\omega}{(E - \hbar^2 \mathbf{K}'^2 / 2m - \hbar \omega + i\epsilon)} \frac{\delta(-\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{b}_i - \mathbf{K}_h^0 + \mathbf{K}')}{|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_i|^2} \frac{\delta(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_j + \mathbf{K}_g^0 - \mathbf{K}')}{|\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_j|^2}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Diskussion

Die δ -Funktionen in Gl. (3.16), (3.17) enthalten die Auswahlregeln für die Vektoren $\mathbf{K}_h^{0(v)}$ und $\mathbf{K}_h^{(v')}$ im reziproken Gitterraum. Es soll hier nur die Bedeutung der bei Gl. (3.16) stehenden δ -Funktion diskutiert werden. Sie verknüpfen den Plasmonimpuls $\tilde{\mathbf{k}}$ mit den Wellenvektoren $\mathbf{q}_{hh'} = \mathbf{K}_h^{0(v)} - \mathbf{K}_h^{(v')}$ der Wellenfelder und den reziproken Gittervektoren \mathbf{b}_i . Zur Vereinfachung sei angenommen, daß sowohl das Wellenfeld mit der Energie E_0 als auch das mit der Energie $E_0 - \hbar \omega_{\text{Pl}}$ jeweils im Zweistrahlfall angeregt ist. Für einen dieser Beziehung genügenden Wert von $\tilde{\mathbf{k}}$ lassen sich die möglichen Übergänge, die in Gl. (3.16) enthalten sind, durch die Abb. 1 veranschaulichen. In welchem Maße Streuvorgänge vorkommen, in deren Impulsbilanz zusätzlich ein reziproker Gittervektor vorkommt, hängt von den Werten von $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_i)$ ab. Eine numerische Abschätzung soll in einem zweiten Teil erfolgen. Dabei ergibt sich als Kriterium für das Auftreten eines solchen Streuprozesses, daß die Fermi-Fläche des Festkörpers von der Kugelgestalt abweichen muß. Diese Streuvorgänge haben dann zur Folge, daß zusätzliche Anteile zu den Fourier-Komponenten des Imaginärteils des komplexen Potentials erhalten werden.

Anhang I

Die Matrixelemente des Kernes der Integralgleichung (3.1)

$$L(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s) = \frac{2e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{b}_s|^2} \left(\sum_{n'}^{\text{unbes.}} \sum_{n,p}^{\text{bes.}} (P_{(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{k}}, \omega)}^{n'n} - i Q_{(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{k}}, \omega)}^{n'n}) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_r) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_s) \right); \quad (I.1)$$

$$P_{(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{k}}, \omega)}^{n'n} = \frac{2 \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}}{(\hbar^2 \omega^2 - \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n})}; \quad (I.2) \quad \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n} = E_{n'}(\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}) + E_n(\mathbf{p}); \quad (I.3)$$

$$Q_{(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{k}}, \omega)}^{n'n} = \pi (\delta(\hbar \omega - \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}) + \delta(\hbar \omega + \Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n})); \quad (I.4)$$

$$\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_r) = \int_{\Omega_0} u_{n', \mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}}(\mathbf{r}) \exp\{-i(\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{b}_r)\} u_{n, \mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) d^3r. \quad (I.5)$$

$u_{n, \mathbf{p}}(\mathbf{r})$ sind die Einteilchenwellenfunktionen des Elektrons im Zustand (n, \mathbf{p}) (n = Bandindex, \mathbf{p} = Pseudoimpuls).

Anhang II

Der Anteil A_e für die Einzelanregungen, für den Gl. 3.12 nicht erfüllt ist, hat folgende Form:

$$A_e(\tilde{\mathbf{k}}, \omega, \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s) = \frac{\hbar}{\pi} \sum_{n'}^{\text{unbes.}} \sum_{n, p}^{\text{bes.}} \left\{ \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_r) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n*}(\mathbf{b}_s) \left(\frac{1}{|\overset{\circ}{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)_{rr}|^2} + \frac{1}{|\overset{\circ}{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)_{ss}|^2} \right) Q_{(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{k}}, \omega)}^{n'n} \right\}. \quad (\text{II.1})$$

$$\overset{\circ}{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)_{rr} = 1 - \mu_{\tilde{\mathbf{k}}}^{0(r)}(\omega). \quad (\text{II.2})$$

Die Anregungsenergien sind die ungestörten Einteilchenenergiedifferenzen für die Übergänge aus besetzten Zuständen (n, \mathbf{p}) unterhalb der Fermi-Grenze in unbesetzte Zustände $(n', \mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}})$ oberhalb der Fermi-Grenze. Die Produkte der Matrixelemente $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_r) \varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n*}(\mathbf{b}_s)$ für diese Übergänge werden durch die Faktoren $(1/|\overset{\circ}{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)_{rr}|^2 + 1/|\overset{\circ}{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)_{ss}|^2)$ modifiziert. Für $\mathbf{b}_r = \mathbf{b}_s = 0$ erhält man den schon bekannten Ausdruck für den homogenen Fall (siehe z. B. Gl. (3.105) bei SCHULTZ¹⁴).

- ¹ R. A. FERRELL: Phys. Rev. **101**, 554 [1955].
- ² R. H. RITCHIE: Phys. Rev. **114**, 644 [1959].
- ³ K. ISHIDA, M. MANNAMI, and K. TANAKA: J. Phys. Soc. Japan **23**, 1362 [1967].
- ⁴ S. L. CUNDY, A. J. F. METHERELL, and M. J. WHELAN: 6th Int. Conf. El. Micr. Kyoto, Vol. 1, p. 87, Tokyo 1966.
- ⁵ G. MEYER: Phys. Letters **20**, 240 [1966], Z. Naturforsch. **21a**, 1524 [1966].
- ⁶ P. B. HIRSCH et al., Electron Microscopy of Thin Crystals, Butterworths: London 1965.
- ⁷ Y. KAINUMA, Acta Cryst. **8**, 247 [1955].
- ⁸ H. YOSHIOKA, J. Phys. Soc. Japan **12**, 618 [1957].
- ⁹ D. S. FALK, Phys. Rev. **118**, 105 [1960].
- ¹⁰ P. C. MARTIN u. J. SCHWINGER, Phys. Rev. **15**, 342 [1959].
- ¹¹ F. FUJIMOTO u. Y. KAINUMA, J. Phys. Soc. Japan **8**, 1792 [1963].
- ¹² D. A. KIRZHNTS, Field Theoretical Methods in Many-Body-Systems, Pergamon-Press, London 1967, Kap. 23.6, S. 246.
- ¹³ P. NOZIERES, Theory of Interacting FERMI-Systems, W. A. Benjamin, Inc. 1964, New York-Amsterdam. Kap. 3, Gl. 3-64, S. 81.
- ¹⁴ T. D. SCHULTZ, Quantum Field Theory and the many-body-Problem, Gordon and Breach, Science Publ., New York 1961.
- ¹⁵ R. D. MATTUCK, A Guide to Feynman Diagrams in the many-body-Problem, MacGraw-Hill, London 1966. Kap. 13.3, S. 196.
- ¹⁶ J. HUBBARD, Proc. Phys. Soc. A **68**, 44 [1955], Proc. Phys. Soc. A **68**, 976 [1955].
- ¹⁷ Y. ABE, Y. OSAKA, and A. MORITA, J. Phys. Soc. Japan **17**, 1576 [1962].
- ¹⁸ S. ENGELBERG, Phys. Rev. **126**, 1262 [1961].
- ¹⁹ H. EHRENREICH, u. M. H. COHEN, Phys. Rev. **115**, 786 [1959].
- ²⁰ D. F. DUBOIS, Ann. Physics **7**, 174 [1959].
- ²¹ Die Matrixelemente $\varrho_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}(\mathbf{b}_i)$ und die Energiedifferenzen $\Delta E_{\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{p}}^{n'n}$ werden in Anhang I und II angegeben. „unbes.“ bedeutet: alle unbesetzten Zustände $(n', \mathbf{p} + \tilde{\mathbf{k}})$, „bes.“ alle besetzten Zustände (n, \mathbf{p}) .