

Beiträge zur winkel- und spinaufgelösten Photoelektronenbeugung

Kumulative Habilitationsschrift
zur Erlangung des akademischen Grades
Doctor rerum naturalium habilitatus (Dr.rer.nat.habil.)

vorgelegt der
**Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät der
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg**

von
Frau Dr. rer. nat. Angelika Chassé
geb. am 22. Mai 1957 in Thale (Harz)

Gutachter:

1. Prof. Dr. Peter Rennert
2. Prof. Dr. Yuri Kucherenko
3. Prof. Dr. Wolfgang Schattke

Halle (Saale), den 11. Juli 2000

Die vorliegende Habilitationsschrift ist in einer kumulativen Form abgefaßt. Sie basiert auf Ergebnissen aus bereits publizierten und noch unpublizierten Arbeiten. Auf die bereits publizierten Originalarbeiten, wird im Text mit [CH- i] ($i = 1, 2 \dots$) Bezug genommen. Verweise auf weitere Publikationen, an denen die Autorin der vorliegenden Schrift beteiligt war erscheinen in der Form [ch i]. Alle anderen Publikationen sind von der Form [i].

Originalarbeiten der kumulativen Habilitationsschrift¹

- [CH-1] **A. Chassé**, C. Nowak, P. Rennert, W. Braun, W. Richter, D.R.T. Zahn,
Surf. Sci. 331-333 (1995) 389-394.
- [CH-2] C. Nowak, A. Hempelmann, A. Märkl, **A. Chassé**, E. Dudzik, C. Müller, I.T.
McGovern, W. Braun, W. Richter, and D.R.T. Zahn, Surf. Sci. 331-333 (1995)
564-568.
- [CH-3] T. Chassé, **A. Chassé**, S. Schömann,
J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 96 (1998) 1-9.
- [CH-4] T. Chassé, **A. Chassé**, H. Peisert, P. Streubel,
Appl. Phys. A 65 (1997) 543-549.
- [CH-5] **A. Chassé**, P. Rennert,
J. Phys. Chem. Sol. 58 (1997) 509-513.
- [CH-6] **A. Chassé**, P. Rennert,
J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 87 (1997) 91-99.
- [CH-7] **A. Chassé**, P. Rennert,
Phys. Rev. B 55 (1997) 4120-4123.
- [CH-8] **A. Chassé**, L. Niebergall, P. Rennert,
J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 101-103 (1999) 335-339.
- [CH-9] **A. Chassé**,
J. Phys.: Condens Matter 11 (1999) 6475-6486.

¹Aus urheberrechtlichen Gründen sind die Arbeiten in der Online-Version der Habilitationsschrift nicht enthalten.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Die Methode PED	7
3	Der Endzustand der Photoelektronen	12
4	Vielfachstreu-Cluster-Modell	14
4.1	Der Anfangszustand	14
4.2	Der Photonenoperator	15
4.3	Das elastische Streupotential	16
4.4	Die direkte Welle	17
4.5	Der Endzustand in der $(L\sigma)$ -Darstellung	18
4.6	Die Streuamplitude	19
4.7	Inelastische Streuung und Debye-Waller-Faktor	21
4.8	Potentialstufe und Energienullpunkt	22
5	Strukturbestimmung mit PED	24
5.1	III-V(110)-Halbleiteroberflächen	26
5.2	Adsorption einer Sb-Monolage	28
5.3	As/InP(110) und S/InP(001)	32
6	Spinpolarisation in nichtmagnetischen Systemen	34
7	Zirkularer Dichroismus und Peakrotation	38
8	Symmetriebrechung durch ein Magnetfeld	40
9	Magnetischer Dichroismus in Co- und Fe-Schichten	41
10	Zusammenfassung und Ausblick	45
11	Literatur	48

Abkürzungen

ARPEFSF	Angle-Resolved Photoelectron Fine Structure
CCLS	Chemical Core-Level Shift
CDAD	Circular Dichroism in the Angular Dichroism
ECLS	Expitaxial Continued Layer Structure
EXAFS	Extended X-ray Absorption Fine Structure
FS-XPD	Forward-Scattering X-ray Photoelectron Diffraction
ICLS	Interface Core-Level Shift
LEED	Low Energy Electron Diffraction
MDAD	Magnetic Dichroism in the Angular Distribution
NPD	Normal Emission Photoelectron Diffraction
PED	Photoelectron Diffraction
PES	Photoelectron Spectroscopy
PW	Plane Wave
RAME	Reduced Angular Momentum Expansion
SEXAFS	Surface Extended X-ray Absorption Fine Structure
SCLS	Surface Core-Level Shift
STM	Scanning Tunneling Microscopy
XPD	X-ray Photoelectron Diffraction

1 Einleitung

Die elektronischen und magnetischen Eigenschaften an Oberflächen oder Grenzflächen eines Festkörpers werden wesentlich durch die chemische Zusammensetzung und geometrische Struktur bestimmt. Zur Charakterisierung existieren eine Reihe von Analy-

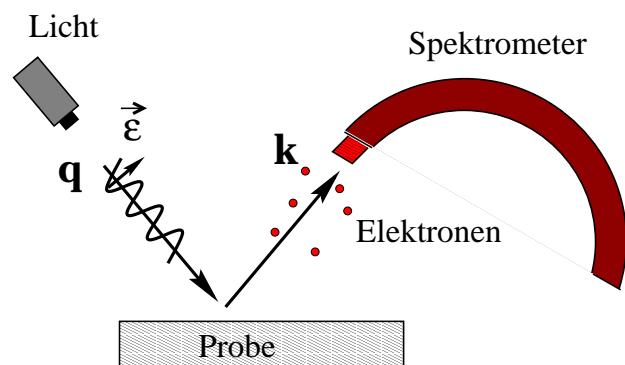


Abb. 1.1: Experimentelle Anordnung bei PES und PED.

severfahren, deren Oberflächenempfindlichkeit auf der geringen Informationstiefe der mit Elektronen, Ionen oder Atomen erzielten Signale beruht. Insbesondere die Photoelektronenspektroskopie (PES) stellt eine ideale Methode dar, um die elektronische und geometrische Struktur an Oberflächen zu untersuchen aber auch magnetische Eigenschaften zu erforschen. Elektronen mit einer kinetischen Energie zwischen 50 eV und 1000 eV haben neben einer geringen Austrittstiefe (5-20 Å) eine Wellenlänge in der Größenordnung der Gitterkonstante eines Festkörpers. Durch die Beugung der Elektronen wird damit die Bestimmung der geometrischen Struktur des Festkörpers möglich.

Die Methode Photoelektronenbeugung (PED=photoelectron diffraction) hat sich in den letzten Jahren zu einer wichtigen und erfolgreichen Methode entwickelt, die die Analyse der Struktur und der chemischen Bindung an Oberflächen und Grenzflächen ermöglicht. Hierzu werden Elektronen aus Rumpfständen der Probe mit monochromatischem Licht angeregt. Im Experiment (Abb.1.1) wird dann die Intensität der Photoelektronen als Funktion der Emissionsrichtung oder/und der Energie der Elektronen mit hoher Winkel- und Energieauflösung gemessen. Durch die Interferenz der Photoelektronenwelle, die den Analysator direkt erreicht mit den Wellen, die durch Einfach- oder Vielfachstreuung an der Emitterumgebung entstehen (Abb.1.2), kommt es zu Modulationen in der Intensität der Photoelektronen. Diese Modulation enthält damit Informationen über die lokale Geometrie der Umgebung des Emitters und bei einer magne-

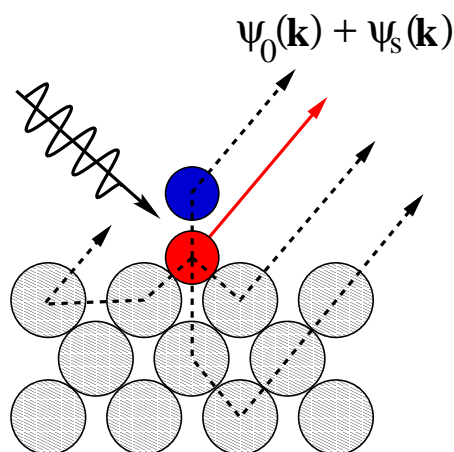


Abb. 1.2: Modulation der Intensität durch die Interferenz der direkten Welle ψ_0 und der Streuwelle ψ_s .

tischen Probe auch über die lokale magnetische Ordnung in der Probe.

Da die Rumpfniveaus an einem bestimmten Atom oder Ion lokalisiert sind, hat man bei der Photoelektronenbeugung eine lokale Elektronenquelle im Festkörper. Außerdem sind die Rumpfniveaulinien für jedes Atom charakteristisch, so daß die Photoelektronenbeugung auch atomspezifisch ist. Das ist ein wesentlicher Unterschied zur traditionellen Beugungsmethode LEED (=low energy electron diffraction), wo sich die Elektronenquelle außerhalb der Probe befindet und die Elektronen am zweidimensionalen Gitter der Probe gebeugt werden. Im Gegensatz zu LEED entstehen die Beugungseffekte der Photoelektronen durch die lokale Geometrie um das Emitteratom, d.h. durch die Streuung an den nächsten Nachbarn. Eine Fernordnung der Atome wie bei LEED ist nicht erforderlich. Dadurch können mit der Methode PED gezielt lokale Eigenschaften des Festkörpers untersucht werden.

In dieser Arbeit werden Beiträge zur winkel- und spinaufgelösten Photoelektronenbeugung vorgestellt, die zum einen aus Fragestellungen im Experiment entstanden und zum anderen neue Erkenntnisse prinzipieller Art darstellen.

Im Kapitel 2 wird zunächst ein kurzer Überblick in Bezug auf experimentelle und theoretische Entwicklungen der Methode PED gegeben. Der Schwerpunkt liegt hierbei in der Strukturanalyse von Ober- und Grenzflächen eines Festkörpers mit PED. Die Erfolge basieren auf dem engen Wechselspiel von Experiment und Theorie.

Die Theorie der Photoelektronenbeugung wird in dieser Arbeit im Rahmen eines nicht-relativistischen Vielfachstreu-Cluster-Modells behandelt. Hierbei wird die Streuung der Elektronen in einem effektiven Einteilchenpotential betrachtet. Im Kapitel 3 sind die Grundlagen für die Beschreibung des Endzustandes der Photoelektronen dargestellt.

Für die Interpretation spinaufgelöster Messungen in der Photoemission wurde im Anfangszustand der Elektronen die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt. Der Anfangszustand wird dann durch die Quantenzahlen (j, μ) des Gesamtdrehimpulses und der Quantenzahl l des Bahndrehimpulses beschrieben. Diese Erweiterung der Theorie und Näherungen zur Beschreibung der Vielfachstreuung in einem Clustermodell sind im Kapitel 4 zusammengefaßt.

In den Kapiteln 5 bis 9 werden ausgewählte Beiträge zur Photoelektronenbeugung vorgestellt, die im Anhang als abgedruckte Originalarbeiten vorliegen. Des weiteren wurden in die Arbeit auch neue Ergebnisse aufgenommen, die noch nicht publiziert sind.

Einen Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit bildet die Strukturbestimmung mit PED

an Halbleiteroberflächen und Halbleitergrenzflächen, präsentiert im Kapitel 5.

Das genaue Verständnis der Halbleiteroberflächen und -grenzflächen ist sowohl in der Grundlagenforschung als auch in der Technologie von besonderem Interesse. Durch die fortschreitende Miniaturisierung von Halbleiterbauelementen werden deren Eigenschaften zunehmend von der elektronischen und geometrischen Struktur der Ober- bzw. Grenzfläche bestimmt.

In enger Zusammenarbeit mit experimentellen Gruppen wurde die Struktur von komplexen Adsorbat-Halbleitersystemen mit der Methode PED untersucht. Hierbei wurde erstmalig mit PED bei niedrigen Energien die geometrische Struktur von Sb-Monolagen auf verschiedenen III-V(110)-Halbleiteroberflächen bestimmt (Kapitel 5.2). Als Testsysteme für die Simulationsrechnungen dienen hierbei die reinen III-V(110)-Oberflächen (Kapitel 5.1).

Die geometrische und damit auch die elektronische Struktur der Ober- bzw. Grenzflächen von Halbleitern hängt wesentlich von der Präparation der Oberfläche ab. Adsorbierte Atome können in das Substrat diffundieren oder Substratatome können sich an der Oberfläche abscheiden. Damit bietet sich die Möglichkeit, Eigenschaften der Ober- bzw. Grenzfläche gezielt zu verändern. Entsprechende Untersuchungen wurden für As auf InP(110) und für S auf InP(001) durchgeführt (Kapitel 5.3).

Ein weiterer Schwerpunkt in den Beiträgen zur winkel- und spinaufgelösten PED ist die Untersuchung zum Einfluß der Photoelektronenbeugung auf Spinpolarisation und Dichroismus in der Photoemission. Hierbei steht die durch Streueffekte bedingte Abweichung von dem durch atomare Modelle beschriebenen Verlauf im Vordergrund. In verschiedenen Experimenten zur Spinpolarisation der Photoelektronen in nichtmagnetischen Systemen wurden Modulationen in der Spinpolarisation beobachtet, die im Rahmen eines atomaren Modells nicht interpretiert werden konnten. Für die Spinpolarisation von Cu₃p-Photoelektronen in Cu(001) konnte schon durch Einfachstreurechnungen eindeutig gezeigt werden, daß die beobachtete Modulation durch PED hervorgerufen wird. Die Beiträge zur Spinpolarisation werden im Kapitel 6 vorgestellt.

Werden Elektronen mit zirkular polarisiertem Licht angeregt, kann man die Differenz des Photoelektronenstroms für die Anregungen mit Licht positiver und negativer Helizität in Abhängigkeit vom Beobachtungswinkel und der kinetischen Energie der Photoelektronen auswerten. Diese Differenz in der winkelaufgelösten Photoemission nennt man CDAD (=circular dichroism in the angular distribution of photoelectrons). Der CDAD wurde zunächst an Molekülen mit chiraler Symmetrie untersucht, später auch an nichtchiralen Molekülen, die räumlich orientiert sind. Während man für Moleküle durchaus mit einem

atomaren Modell arbeiten kann, wird der CDAD an einem Festkörper überhaupt erst verständlich, wenn man die Streuung der Elektronen in die Diskussion einbezieht.

Aus der PED-Theorie konnte das Modell der Peakrotation, das ein einfaches, aber anschauliches Modell für die Erklärung des zirkularen Dichroismus darstellt, quantenmechanisch abgeleitet werden. Die Grundzüge des Modells werden im Kapitel 7 vorgestellt.

Die Symmetrie der Oberfläche wird auf Spinpolarisation und Dichroismus der Photoelektronen übertragen. Durch die Streuung an magnetischen Atomen wird die Symmetrie gebrochen. Aus theoretischer Sicht wird im Kapitel 8 gezeigt, daß eine durch das magnetische Moment der Atome induzierte Symmetriebrechung im CDAD eine meßbare Größe darstellt.

Das hier vorgestellte Modell der Photoelektronenbeugung erlaubt auch die Diskussion magnetischer Eigenschaften des Festkörpers im Rahmen einer Einteilchentheorie des Ferromagnetismus. Durch die Austauschwechselwirkung der Elektronen mit dem spinabhängigen Valenzband spaltet jedes spin-bahn-aufgespaltene Rumpfniveau noch einmal in eine Reihe von Unterniveaus bzgl. der Quantenzahl μ auf. Die Intensität für jedes einzelne μ kann bestimmt werden und damit der Einfluß der Photoelektronenbeugung auf den magnetischen Dichroismus. Damit kann ein wichtiger Beitrag in Untersuchungen zum magnetischen Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen (MDAD=**m**agnetic **d**ichroism in the **a**ngular **d**istribution) geleistet werden. Sowohl im MDAD mit zirkular wie auch im MDAD mit linear polarisierter Strahlung wurde ein vom atomaren Modell abweichendes Verhalten beobachtet. Der Einfluß der Photoelektronenbeugung auf den MDAD wird für Co- und Fe-Schichten im Kapitel 9 diskutiert.

2 Die Methode PED

In der Methode PED wird die Intensität der aus Rumpfniveaus angeregten Photoelektronen in einem winkelaufgelösten Experiment bestimmt. Abb.2.1 zeigt das

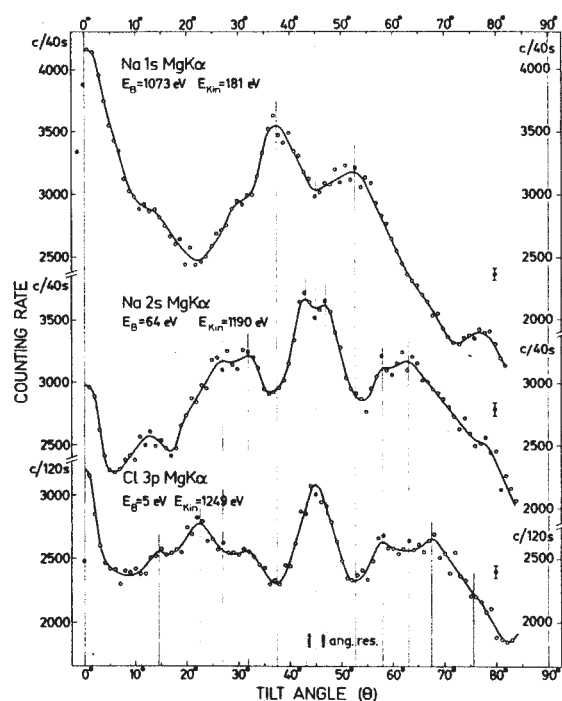


Abb. 2.1: Intensität in Abhängigkeit vom Polarwinkel (TILT ANGLE) für Na1s-, Na2s- und Cl3p-Photoelektronen in NaCl(001). (aus [1])

preis für Physik.

Die Modulationen in der Winkel- oder Energieverteilung der Photoelektronen aus einem Festkörper entstehen durch die elastische Streuung der angeregten Elektronen an der Emitterumgebung, was als Photoelektronenbeugung (PED) bezeichnet wird.

Um die in der Intensität der Photoelektronen enthaltenen Informationen über die Struktur zu gewinnen, muß man gewöhnlich Simulationsrechnungen für geeignete Modellsysteme durchführen, die theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen vergleichen bis für einen bestimmten Satz von Strukturdaten und Eingabeparametern eine optimale Übereinstimmung mit dem Experiment gefunden wird. Voraussetzung für eine genaue Strukturanalyse ist, daß im Experiment in Abhängigkeit vom System geeignete Bedingungen eingestellt werden, so daß große Modulationen in der Intensität auftreten. Hierzu hat man bei PED eine Vielzahl von Variablen, die geändert werden können durch die Drehung des Analysators, die Änderung der Einfallsrichtung und der Polarisierung des Lichtes, die Drehung der Probe oder die Variation der Photonenenergie (Abb.2.2).

erste publizierte Ergebnis zur Photoelektronenbeugung an einem Festkörper [1]. Mit Röntgenstrahlung (MgK α) wurden Na1s-, Na2s- und Cl3p-Rumpfelektronen in einem NaCl(001)-Einkristall angeregt und die Intensität der Photoelektronen in Abhängigkeit vom Emissionswinkel gemessen.

Kay Siegbahn zeigte mit diesem Experiment, daß die Winkelverteilung der Elektronen in einem Festkörper im Gegensatz zum atomaren Modell starke Modulationen aufweisen kann, die von der kinetischen Energie der Elektronen, dem angeregten Rumpfniveau und der lokalen Umgebung des Emitters abhängen. 1980 bekam Kay Siegbahn für seine Forschungsarbeit auf dem Gebiet der Elektronenspektroskopie den Nobel-

In den Anfängen wurde die Methode PED vorwiegend für die Untersuchung der Struktur von einfachen Adsorbatsystemen eingesetzt wie z.B. O/Cu(001), S/Ni(001), Se/Ni(001), CO/Ni(001) (Abb.2.3(a,b)). Angeregt werden hierbei Rumpfelektronen der Adsorbataatome mit Röntgenstrahlung ($\text{AlK}\alpha$, $\text{MgK}\alpha$), mit UV-Strahlung oder mit Synchrotronstrahlung [2,3].

Bei der Anregung mit Röntgenstrahlung (XPD=x-ray photoelectron diffraction) wird die Winkelabhängigkeit der Intensität der Photoelektronen aufgezeichnet, wobei entweder der Polarwinkel θ (fester Azimutwinkel ϕ), der Azimutwinkel ϕ (fester Polarwinkel θ) oder beide Winkel gleichzeitig (2π -Scan) variiert werden (Abb.2.2).

Da die kinetische Energie der Elektronen bei der Anregung mit Röntgenstrahlung mehrere 100 eV betragen kann, zeigt die Streuwelle ein ausgeprägtes Vorwärtsstreuverhalten, d.h. die Elektronen werden an einem Atom hauptsächlich in Vorwärtsrichtung gestreut. Daher muß man für die Untersuchungen an einer Oberfläche oder Grenzfläche eine geeignete experimentelle Geometrie finden. Für die Bestimmung der Struktur mit XPD an einer Adsorbatschicht (2.3(a)) kann man die ϕ -Abhängigkeit der Intensität für Elektronen aufzeichnen, die relativ flach zur Oberfläche austreten (grazing-emission XPD). Ein solches Spektrum gibt unmittelbar die Symmetrie des Adsorptionsplatzes auf der Oberfläche wieder. Die genaue Position des Adsorbataatoms relativ zur Oberfläche muß mit Hilfe von Simulationsrechnungen bestimmt werden.

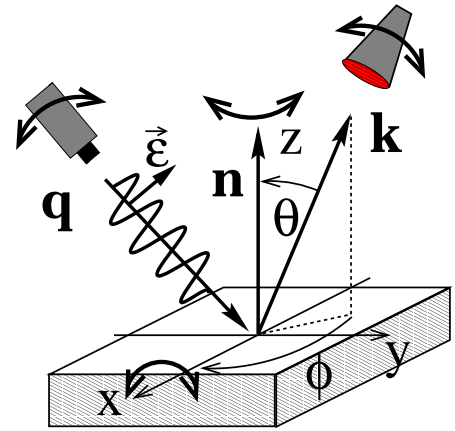


Abb. 2.2: Variation der Winkel bei PED.

Man kann aber auch die Vorwärtsstreuung bei XPD unmittelbar in der Untersuchung intramolekularer Bindungsrichtungen in adsorbierten Molekülen wie CO oder NH_3 nutzen, um Information über die Geometrie und Orientierung der Moleküle zu erhalten (Abb.2.3(b)). Die Maxima in der Intensität sind dann mit den Bindungsrichtungen korreliert [3,4].

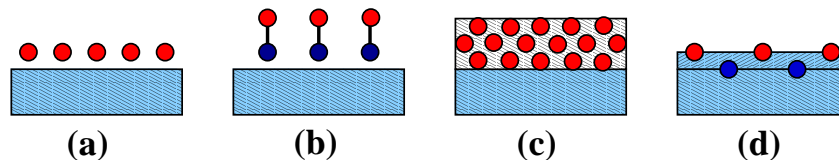


Abb. 2.3: Strukturuntersuchungen mit PED an verschiedenen Systemen.

Ein weiteres Anwendungsgebiet für XPD ist die Untersuchung des Wachstums und der Struktur dünner Filme (Abb.2.3(c)). Hier läßt sich anhand der Lage der Intensitätsma-

xima in der Winkelverteilung der Photoelektronen die Ordnung und Struktur des Films bestimmen. Angeregt werden hierbei Rumpfelektronen im Film, die dann hauptsächlich an den Atomen gestreut werden, die oberhalb der Emitteratome liegen [5,6].

Eine Steigerung der Oberflächenempfindlichkeit wird erreicht, wenn man die Intensität bei niedrigen Energien (50-200 eV) aufnimmt, etwa durch die Anregung mit UV-Strahlung, weicher Röntgenstrahlung oder Synchrotronstrahlung. In diesem Energiebereich erhält man auch Informationen über Relaxation und Rekonstruktion einer reinen Oberfläche (Abb.2.3(d)). In den Rumpfniveauspektren kann man auf Grund von Energieverschiebungen verschiedene Oberflächenzustände unterscheiden und separat untersuchen. Des weiteren läßt sich auch gezielt die Rückwärtsstreuung der in einem Adsorbatom angeregten Elektronen an der Substratumgebung zur Strukturbestimmung nutzen.

Ein wesentlicher Schritt in der Entwicklung der Methode PED zur modernen Oberflächenmethode war der Einsatz von Synchrotronstrahlung in den Untersuchungen. Die variable Photonenenergie und die Polarisation der Strahlung eröffneten neue Möglichkeiten in der Ausführung von Experimenten. So können Adsorbatsysteme durch Aufzeichnung der kinetischen Energie der Photoelektronen bei fester Austrittsrichtung der Elektronen senkrecht (NPD=normal photoelectron diffraction) oder nicht senkrecht (off-NPD, ARPEFS) zur Probenoberfläche untersucht werden [3, 7, 8]. Die Energieabhängigkeit der Intensität kann mit Hilfe einer Fouriertransformation [9–12] oder der Projektionsmethode [13] direkt in den Ortsraum überführt werden. Eine weitere direkte Methode stellt die Photoelektronenholographie dar, die auf der Idee basiert, daß eine Winkelverteilung der Photoelektronen bei fester Energie als Photoelektronenhologramm aufgefaßt werden kann [14]. Die Rücktransformation der Beugungsdaten führt jedoch nur begrenzt zu brauchbaren Bildern im Ortsraum [15–17].

Seit Ende der 80er Jahre hat sich die Methode PED als Methode zur Strukturuntersuchung an Festkörperoberflächen fest neben Methoden wie LEED, EXAFS, Ionenstreuung, Röntgenbeugung oder STM etabliert. Eine detaillierte Darstellung aller Ergebnisse würde weit über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen. Angesichts der Fülle von Resultaten kann hier nur auf eine Reihe sehr guter Übersichtsartikel verwiesen werden [3–7, 15, 18, 19].

Die Strukturuntersuchungen mit PED lassen sich hinsichtlich der betrachteten Systeme schwerpunktmäßig zusammenfassen [3]:

- Relaxation und Rekonstruktion von Festkörperoberflächen
- Adsorptionsgeometrie von Atomen und kleinen Molekülen
- Epitaktisches Wachstum dünner Schichten
- Ausbildung von Metall-Halbleiter-Grenzflächen

- Adsorption von Clustern auf Oberflächen

Die Erfolge der Methode PED in der Bestimmung von Strukturdaten sind eng verknüpft mit der Entwicklung theoretischer Modelle, die sich auch numerisch mit großer Effizienz umsetzen lassen.

Grundlegende Theoriewerke zur Winkelabhängigkeit in der Photoemission unter Einbeziehung von Vielfachstreuungseffekten wurden von Liebsch [20], Pendry [21] und Holland [22] geleistet. Darauf basieren eine Reihe von Arbeiten, die sich in der Beschreibung des Anfangszustandes, der Näherung für die Streuung an der Emitterumgebung und der Berechnung der Vielfachstreuung der Elektronen unterscheiden.

Für die Behandlung der Vielfachstreuung im Festkörper werden in der Theorie der PED zwei verschiedene Methoden eingesetzt:

(1) Berechnung im \mathbf{k} -Raum

Wie in der Methode LEED wird der Festkörper in Schichten eingeteilt, die eine zweidimensionale Gitterperiodizität aufweisen. Die Vielfachstreuung der Elektronen wird dann in der Schicht unter Ausnutzung der Periodizität und zwischen den Schichten separat betrachtet [23,24]. Durch Ausnutzung der zweidimensionalen Gitterperiodizität kann man sehr schnelle Computerprogramme erstellen. Das Bild der lokalen Anregung und lokalen Strukturbestimmung geht hierbei jedoch verloren.

(2) Berechnung im Ortsraum

Betrachtet wird die Streuung der angeregten Welle an der Emitterumgebung in einem Cluster aus Atomen, wobei die Größe des Clusters über die inelastische mittlere freie Weglänge von der kinetischen Energie der Elektronen abhängt [10, 25–28]. Im Clustermodell werden die Streubeiträge entsprechend der möglichen Streupfade, die das Elektron im Cluster durchlaufen kann, aufsummiert. Damit kann man gezielt die Beiträge aus der lokalen Umgebung des Emitters analysieren. Eine Fernordnung ist nicht erforderlich. Die Vielfachstreuung von Kugelwellen in einem Cluster erfordert jedoch bei Energien von mehreren 100 eV einen hohen numerischen Aufwand. Daher kann der Kugelwellencharakter in diesem Energiebereich nur näherungsweise berücksichtigt werden.

Das wohl einfachste Modell in der Theorie der PED wurde 1978 von Kono *et al.* [29] für die Bestimmung der Adsorbatposition von O-Atomen auf einer Cu(001)-Oberfläche eingeführt. In diesem Modell werden die angeregten Elektronen für die Streuung an der Emitterumgebung durch eine ebene Welle (PW=plane wave) angenähert, wobei nur Einfachstreubeiträge im Endzustand der Photoelektronen berücksichtigt werden. Dieses Modell, das numerisch nicht sehr aufwendig ist, hat sich in der Diskussion von XPD-Daten

als sehr effektiv erwiesen [3]. Es wurde aber auch bald klar, daß die Vielfachstreuung der Elektronen [30–32] und der Kugelwellencharakter [33, 34] der angeregten Welle in vielen Betrachtungen nicht vernachlässigt werden können.

Im Rahmen des Clustermodells wurden verschiedene Näherungen für die Vielfachstreuung von Kugelwellen entwickelt, um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten:

- PW-Modell [25, 27, 35, ch01]
- Modifiziertes PW-Modell [26, 33–37]
- Taylor-Reihen-Entwicklung [38, 39]
- Reduzierte Drehimpulsentwicklung (RAME) [40, 41]
- Rehr-Albers-Formalismus [42, 43].

Bis auf das PW-Modell wird in allen Modellen versucht, den Kugelwellencharakter der angeregten Welle bei der Berechnung der Vielfachstreubeiträge mehr oder weniger gut zu berücksichtigen. Es gibt eine Reihe von Arbeiten, die die verschiedenen Näherungen ausführlich und vergleichend untersucht haben [27, 38, 39, 44, 45, ch02]. Insbesondere Rehr-Albers-Formalismus und RAME haben sich im Clustermodell durchgesetzt und finden heute breite Anwendung. Durch die enorme Entwicklung der Computertechnik ist es möglich, die Streuung von Kugelwellen auch ohne Näherung zu berechnen, wenn die Zahl der Partialwellen begrenzt werden kann.

In den letzten Jahren wurde auch der Spin der Photoelektronen in die Untersuchungen der Eigenschaften eines Festkörpers mit einbezogen [46]. An magnetischen Filmen werden der magnetische Dichroismus und die Spinpolarisation in der Photemission untersucht. Damit entstand einerseits die Frage, welchen Einfluß die Photoelektronenbeugung auf Größen wie die Spinpolarisation oder den magnetischen Dichroismus hat. Andererseits wurde versucht, den lokalen Charakter der Methode für Untersuchungen zur lokalen magnetischen Struktur in einem Festkörper zu nutzen [47, 48]. Für eine Erweiterung der Theorie gibt es verschiedene Ansätze. So wurden zunächst atomare Einteilchentheorien zur Erklärung des magnetischen Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen herangezogen [49–52], in die dann noch die Streuung der Elektronen im Festkörper einbezogen wurde [53]. In Systemen mit starker Elektron-Elektron-Korrelation dominieren Vielteilcheneffekte im Anfangszustand der Elektronen gegenüber Streueffekten im Endzustand [54], so daß der Einfluß des Festkörpers nicht oder in der Näherung eines kleinen Clusters (4 Atome) berücksichtigt wird [55]. Es gibt hierzu auch eine Reihe relativistischer Konzepte für die Beschreibung des Anfangszustandes der Photoelektronen bzw. die Berechnung der Vielfachstreubeiträge [56–60].

3 Der Endzustand der Photoelektronen

Der Festkörper wird durch eine Anordnung von Atomen oder Ionen an Orten \mathbf{R} dargestellt, die das Potential $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \equiv \sum_{\mathbf{R}} v_{\mathbf{R}}$ erzeugen. Der Anfangszustand der Elektronen im Festkörper soll durch eine Wellenfunktion φ_i und die Energie E_i gegeben sein, die man aus der Lösung des Eigenwertproblems²

$$(E_i - H) \varphi_i(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{mit} \quad H = -\Delta + V(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

erhält. Das einfallende Licht (Energie ω , Einfallsrichtung \mathbf{q} , Polarisationsvektor $\vec{\epsilon}'$) kann man als zeitabhängige Störung $H'(t) = (H_q(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + c.c.)$ des Systems H behandeln. Aus einer zeitabhängigen Störungsrechnung folgt dann die Wellenfunktion der auslaufenden Photoelektronen am Ort \mathbf{r} [20, ch01]:

$$\psi_f(\mathbf{r}; E) = \int d\tau' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) H_q(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') \equiv G H_q \varphi_i \quad \text{mit} \quad E = \omega + E_i. \quad (3.2)$$

Die Wellenfunktion ψ_f (3.2) beschreibt den Endzustand der Photoelektronen mit der Energie $E = \omega + E_i$, die durch Absorption von Lichtquanten der Energie ω aus einem Anfangszustand φ_i (Energie E_i) angeregt werden. Der Operator H_q in (3.2) stellt hierbei den ortsabhängigen Teil des Störoperators der Photonen dar. Die Bewegung der angeregten Elektronen im Festkörperpotential wird durch die Greensche Funktion G in (3.2) beschrieben. G kann formal mit Hilfe der Greenschen Funktion freier Elektronen G_0 und der T -Matrix des Festkörpers unter Verwendung der Dyson-Gleichung ausgedrückt werden:

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \quad \text{mit} \quad T = V + V G_0 T. \quad (3.3)$$

Da das angeregte Elektron auch mit dem Emitterpotential wechselwirkt, ist es sinnvoll den entsprechenden atomaren Beitrag in der Greenschen Funktion (3.3) zu separieren. Hierzu wird eine atomare Greensche Funktion G_a mit Hilfe der atomaren Streumatrix $t_{\mathbf{R}}$ definiert. Für die Greensche Funktion (3.3) folgt für einen Emitter am Ort $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ [20, 22]

$$G = G_a + G_0 T' G_a \quad \text{mit} \quad G_a = G_0 + G_0 t_0 G_0, \quad (3.4)$$

wobei die Streumatrix T' in (3.4) dann definiert ist als

$$T' = \sum_{\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{0}} t_{\mathbf{R}_1} + \sum_{\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{R}_1 \neq \mathbf{0}} t_{\mathbf{R}_2} G_0 t_{\mathbf{R}_1} + \dots \quad \text{mit} \quad t_{\mathbf{R}} = v_{\mathbf{R}} + v_{\mathbf{R}} G_0 t_{\mathbf{R}}. \quad (3.5)$$

² $\hbar = 1, m = 1/2, e^2/(4\pi\epsilon_0) = 1$; Impulsoperator \mathbf{p} ; Vektoren als Fettdruck (\mathbf{x}), außer $\vec{\epsilon}$; $|\hat{\mathbf{x}}| = 1$.

Durch die Separation von G_a in (3.4) wird klar, daß die Wellenfunktion der Photoelektronen (3.6) zwei Beiträge enthält:

$$\psi_f = \psi_0 + G_0 T' \psi_0 \quad \text{mit} \quad \psi_0 = G_a H_q \varphi_i. \quad (3.6)$$

In dieser Form kann die Wellenfunktion der Photoelektronen ψ_f (3.6) als Streuzustand interpretiert werden. Eine direkte Welle ψ_0 in (3.6), die die Anregung der Elektronen aus einem Anfangszustand φ_i durch H_q darstellt und den Einfluß des Emitterpotentials durch G_a berücksichtigt, wird an den Atomen der Emitterumgebung gestreut (T'), so daß der direkten Welle ψ_0 eine Streuwelle $G_0 T' \psi_0$ überlagert wird. Durch die Interferenz der beiden Wellen entstehen die in der Intensität der Photoelektronen beobachteten Modulationen.

Aus der Wellenfunktion ψ_f in der Darstellung (3.2) oder (3.6) kann der Photoelektronenstrom $\mathbf{j} = 2e \Re(\psi_f^* \mathbf{p} \psi_f)$ bzw. die Intensität $I(\mathbf{k})$ der in Richtung $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{r}}$ in den Raumwinkel $d\Omega_{\mathbf{k}}$ emittierten Elektronen berechnet werden:

$$\frac{dI}{d\Omega_{\mathbf{k}}} \equiv I(\mathbf{k}) = \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}. \quad (3.7)$$

In dieser Arbeit wird der Endzustand der Photoelektronen in der Darstellung (3.6) betrachtet und im Rahmen eines Vielfachstreu-Cluster-Modells berechnet (Kapitel 4).

Der Endzustand der Photoelektronen wird in der Literatur oft noch in einer anderen Weise definiert. Das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion (3.2) wird durch das der Greenschen Funktion G bestimmt. Die Randbedingungen fordern, daß G für $r \rightarrow \infty$ eine auslaufende Kugelwelle darstellt:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \rightarrow -\frac{e^{ikr}}{r} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \quad \text{mit} \quad \mathbf{k} = k\hat{\mathbf{r}} \quad \text{und} \quad E = k^2. \quad (3.8)$$

Die Amplitude $\varphi_{\mathbf{k}}^*$ in (3.8) hängt von der Richtung \mathbf{k} und der Energie E der Elektronen ab. Damit erhält man in der Matrixschreibweise den folgenden Ausdruck für die Intensität der Photoelektronen (3.7) [ch01]:

$$I(\mathbf{k}) \propto |\langle \varphi_{\mathbf{k}} | H_q | \varphi_i \rangle|^2. \quad (3.9)$$

Oft wird $\varphi_{\mathbf{k}}^*$ in (3.8) selbst als Endzustand der Photoelektronen bezeichnet, so daß das Matrixelement $\langle \varphi_{\mathbf{k}} | H_q | \varphi_i \rangle$ in (3.9) die Wahrscheinlichkeit darstellt, daß ein Elektron aus einem Anfangszustand φ_i durch Photonenabsorption (H_q) in einen Endzustand $\varphi_{\mathbf{k}}$ übergeht. Diese Darstellung bezeichnet man auch als Einstufen-Modell der Photoemission [46].

4 Vielfachstreu-Cluster-Modell

4.1 Der Anfangszustand

Der Anfangszustand φ_i der Elektronen im Festkörper soll ein Rumpfzustand c an einem Atom $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ sein. Da die Rumpfzustände auch im Festkörper stark lokalisiert sind, kann man als Anfangszustand eine atomare Wellenfunktion φ_c (Energie ε_c) betrachten, die man als Lösung der SG

$$(h - \varepsilon_c) \varphi_c(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{mit} \quad h = -\Delta + v(\mathbf{r}) \quad (4.1)$$

erhält. Ist das Potential des Emitteratoms $v(\mathbf{r}) = v(r)$ in (4.1) kugelsymmetrisch, wird der Zustand φ_c in der Partialwellendarstellung als Produkt einer radialen Wellenfunktion $\phi_l(r)$ und einer Winkelfunktion $Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ ($L \equiv (l, m)$) geschrieben. Im Zentralkraftfeld sind die Funktionen Y_L die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators \mathbf{L} [61]. Die radiale Wellenfunktion $\phi_l(r)$ muß Lösung der radialen SG

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) - \varepsilon \right) \phi_l(r) = 0 \quad (4.2)$$

sein, wobei für den Anfangszustand nur gebundene Zustände von (4.2) gesucht werden. Damit läßt sich der Anfangszustand der Elektronen φ_c für ein Rumpfniveau mit den Quantenzahlen $(n_c L_c, \sigma)$ in folgender Weise darstellen:

$$\varphi_c(\mathbf{r}, s) = \phi_{n_c l_c(\sigma)}(r) Y_{L_c}(\hat{\mathbf{r}}) \chi_\sigma(s) \equiv \phi_{c(\sigma)}(r) |L_c, \sigma\rangle, \quad (4.3)$$

In (4.3) wurde der Spin der Elektronen durch die Spineigenfunktionen $\chi_\sigma(s)$ berücksichtigt ($(L\sigma)$ -Darstellung). Die Quantenzahl σ kann die Werte $\pm 1/2$ annehmen und steht für Elektronen mit Spin-auf und Spin-ab. Die Quantenzahl n_c gibt die Hauptquantenzahl eines Rumpfzustandes an.

Die $(L\sigma)$ -Darstellung (4.3) ist ungeeignet, wenn die Spin-Bahn-Wechselwirkung im Anfangszustand berücksichtigt werden soll. Durch die Spin-Bahn-Kopplung tritt ein zusätzlicher Term $h_{so} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{s}$ in der SG (4.1) auf, so daß m und σ keine guten Quantenzahlen mehr sind. Gute Quantenzahlen sind die Quantenzahlen $j = l \pm 1/2$ und $\mu = -j, -j + 1, \dots, j$ des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{j} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$. Der Winkel- und Spinanteil der Wellenfunktion φ_c wird dann durch Funktionen $|j_c l_c \mu_c\rangle$ beschrieben ($(j l \mu)$ -Darstellung), die nach den Funktionen $|L, \sigma\rangle$ entwickelt werden können [ch03]:

$$\begin{aligned} \varphi_c(\mathbf{r}, s) &= \phi_{c(\sigma)}(r) |j_c l_c \mu_c\rangle \quad \text{mit} \quad j_c = l_c \pm \frac{1}{2} \quad \text{und} \\ |j_c l_c \mu_c\rangle &= \sqrt{\frac{l_c \mp \mu_c + \frac{1}{2}}{2l_c + 1}} |l_c \mu_c + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l_c \pm \mu_c + \frac{1}{2}}{2l_c + 1}} |l_c \mu_c - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Der Index (σ) der radialen Wellenfunktion in (4.3) bzw. (4.4) bedeutet, daß die radiale Wellenfunktion auch spinabhängig sein kann, falls das Potential $v(r)$ spinabhängig wird.

In einem äußeren Magnetfeld tritt neben der Spin-Bahn-Wechselwirkung h_{so} noch die Austauschwechselwirkung $h_{ex} = \xi s_z$ (Spinfeld-Darstellung) auf. Durch das Spinfeld wird die Kugelsymmetrie gebrochen und die Zustände mit $j = l+1/2$ und $j = l-1/2$ können für gleiche μ mischen. Da die Kugelsymmetrie entlang der Magnetisierungsrichtung erhalten bleibt, ist die Quantenzahl μ weiterhin eine gute Quantenzahl. Damit lassen sich Eigenfunktionen durch geeignete Linearkombinationen der Zustände $|j l \mu\rangle$ darstellen [49, 62]. Die Zustände mit $\mu = \pm j$ bleiben hierbei unverändert.

Im Fall $\lambda \gg \xi$ sind die spin-bahn-aufgespaltenen Zustände $j = l+1/2$ und $j = l-1/2$ energetisch so weit getrennt, daß keine Mischung der Zustände auftritt und man mit der $|j l \mu\rangle$ -Darstellung arbeiten kann. Die Komponenten spalten jedoch auf Grund der Austauschwechselwirkung in weitere Unterniveaus bzgl. μ auf.

4.2 Der Photonenoperator

Das Licht (Energie ω , Polarisation $\vec{\epsilon}$) soll auf den Festkörper in Richtung \mathbf{q} einfallen. Der Vektor \mathbf{q} und die Normalenrichtung der Probenoberfläche bilden die Einfallsebene der elektromagnetischen Strahlung. Eine Änderung des Polarisationsvektors $\vec{\epsilon}$ oder der Energie ω beim Eindringen durch die Probenoberfläche in den Festkörper wird vernachlässigt.

Die Wechselwirkung der Elektronen und der elektromagnetischen Strahlung mit dem Vektorpotential \mathbf{A} wird in (3.7) durch den Ortsanteil des Photonenoperators $H_q(\mathbf{r}) = -e \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ beschrieben, der die Absorption von Lichtquanten darstellt [61]. Der Photonenoperator wird in der Dipolnäherung benutzt [61]:

$$H_q(\mathbf{r}) \approx -e A_0 \vec{\epsilon} \cdot \mathbf{p} = -i e A_0 \omega \vec{\epsilon} \cdot \mathbf{r} \quad \text{mit} \quad A_0 = \sqrt{\frac{1}{2\varepsilon_0 \omega V_K}} \quad (4.5)$$

Für die Umformung auf der rechten Seite in (4.5) wird vorausgesetzt, daß $\varphi_{\mathbf{k}}$ und φ_i in (3.7) Eigenzustände von H in (3.1) sind. Dann erhält man $\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \mathbf{p} | \varphi_i \rangle = i \langle \varphi_{\mathbf{k}} | [H, \mathbf{r}] | \varphi_i \rangle = i \omega \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \varphi_i \rangle$. A_0 in (4.5) ist eine Größe, die so bestimmt ist, daß die über eine Schwingungsperiode gemittelte elektromagnetische Energie im Volumen V_K gerade ω ergibt.

Der komplexe Einheitsvektor $\vec{\epsilon}$ in (4.5) ist der Polarisationsvektor der elektromagnetischen Strahlung

$$\vec{\epsilon} = \mathbf{e}_1 \cos \alpha + \mathbf{e}_2 \sin \alpha e^{i\zeta}, \quad (4.6)$$

der durch zwei linear unabhängige Einheitsvektoren \mathbf{e}_1 und \mathbf{e}_2 gegeben ist, die senkrecht auf der Einfallrichtung des Lichtes \mathbf{q} stehen. Die Winkel α und ζ in (4.6) sind zwei Parameter, die die Art der Polarisation des Lichtes beschreiben. Für $\zeta = 0$ ist das Licht linear polarisiert, für $\alpha = 45^\circ$ und $\zeta = \pm\pi/2$ ist das Licht zirkular polarisiert mit positiver bzw. negativer Helizität, je nach Vorzeichen von ζ .

4.3 Das elastische Streupotential

Für die elastische Streuung der Elektronen im Festkörper wird angenommen, daß das Potential an jedem Gitterplatz \mathbf{R} innerhalb einer Kugel (Radius $r_{MT}^{\mathbf{R}}$) kugelsymmetrisch ist, wobei die Kugeln der Nachbaratome sich nicht überlappen sollen. Im Bereich zwischen den Kugeln soll das Potential konstant sein. Ein solches Modell wird Muffin-Tin-Potential genannt und ist in Abb.4.1 schematisch dargestellt.

Im Muffin-Tin-Modell wird für jedes nichtäquivalente Atom im Festkörper ein kugelsymmetrisches Potential $v(r)$ konstruiert, das aus einem Coulombanteil $v_c(r)$ und einem Austauschanteil $v_{ex}(r)$ besteht. Beide Anteile werden bestimmt durch die Art des betrachteten Atoms und die Art, den Abstand und die Anzahl der Atome um dieses Atom. Zu Beginn der Rechnung werden zunächst das atomare Coulombpotential v_{ac} und die atomare Dichte n_a jeder Atomsorte berechnet und daraus dann das Potential bzw. die Dichte für das jeweilige Atom im Festkörper bestimmt [63]:

$$v_c(r) = v_{ac}(r) + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{0}} v_{ac}(r; R) \quad (4.7)$$

$$n(r) = n_a(r) + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{0}} n_a(r; R).$$

Für das eigentlich nichtlokale Austauschpotential wird eine lokale Näherung der Form

$$v_{ex}(r) = -\alpha \frac{3}{2} \left(\frac{3n(r)}{\pi} \right)^{1/3} \quad (4.8)$$

betrachtet ($X\alpha$ -Näherung), wobei α ein Parameter in den Rechnungen ist. Nun kann die Muffin-Tin-Konstante (E_{MT}) im Zwischengebiet als Mittelwert des Gesamtpotentials berechnet werden [63]. Der Übergang zum Vakuum wird durch eine Potentialstufe angenähert (Kap.4.8).

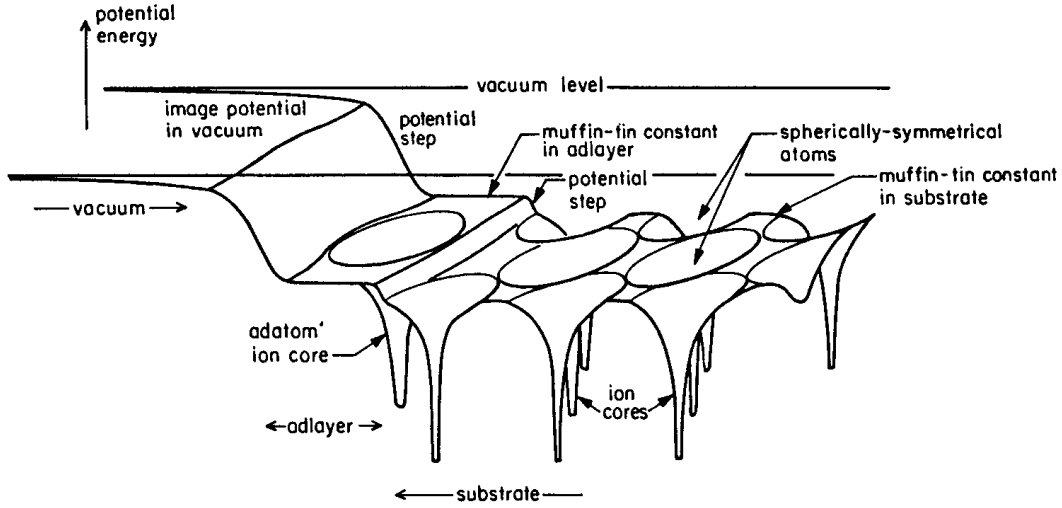


Abb. 4.1: Muffin-Tin-Potential in einem Festkörper mit Potentialstufen im Oberflächenbereich. (aus [64])

Mit Hilfe eines solchen Potentials können nun für jede beliebige kinetische Energie E der Elektronen und für jede Atomsorte im Festkörper Streuphasen $\delta_l(E)$ berechnet werden. Haben die Atome ein magnetisches Moment, ist die Dichte $n_{(\sigma)}$ für Elektronen mit Spin-auf und Spin-ab unterschiedlich. Dadurch werden das Streupotential $v_{(\sigma)}$ und die Streuphasen $\delta_{l(\sigma)}$ spinabhängig.

4.4 Die direkte Welle

Da das Emitterpotential kugelsymmetrisch sein soll, wird die atomare Greensche Funktion G_a (3.4) in der Partialwellendarstellung berechnet, wobei die Energie $E = \omega + \varepsilon_c$ durch die Energieerhaltung in der Photoemission vorgegeben ist:

$$G_a(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -ik \sum_L \eta_l(r) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) e^{i\delta_l} \phi_l(r') Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}') \quad \text{für } r > r' \quad (E = k^2), \quad (4.9)$$

$$\eta_l(r) = h_l^+(kr) \quad \text{und} \quad e^{i\delta_l} \phi_l(r') = j_l(kr') + t_l h_l^+(kr') \quad \text{für } r, r' > r_{MT}.$$

Die radialen Funktionen ϕ_l und η_l sind die reguläre und die singuläre Lösung der radialen SG (4.2) ein Emitteratom am Ort \mathbf{R} . Die Funktion η_l geht außerhalb des Emitterbereichs in die sphärische Hankelfunktion h_l^+ [65] über und beschreibt damit eine auslaufende Kugelwelle. Die Funktion ϕ_l ist ein Streuzustand mit $t_l = i \sin \delta_l \exp(i\delta_l)$.

Mit den Annahmen für φ_i (4.1) und G_a (4.9) kann man die direkte Welle $\psi_0 = G_a H_q \varphi_i$ berechnen und erhält in der $(L\sigma)$ -Darstellung

$$\begin{aligned}
\psi_0(\mathbf{r}; E) &= -ik \sum_L h_l^+(kr) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) M_{L\sigma,c}(\vec{\epsilon}, \omega) \quad \text{für } r > r_{MT} \\
&\rightarrow -\frac{e^{ikr}}{r} \sum_L (-i)^l Y_L(\hat{\mathbf{k}}) M_{L\sigma,c}(\vec{\epsilon}, \omega) \quad \text{für } r \rightarrow \infty.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Für $r \rightarrow \infty$ (2. Zeile in (4.10)) stellt die direkte Welle ψ_0 eine auslaufende Kugelwelle dar, deren Amplitude von der Emissionsrichtung der Elektronen $\hat{\mathbf{k}}$, der Energie der Elektronen $E = k^2$ und dem Matrixelement der Photoionisation

$$M_{L\sigma,c}(\vec{\epsilon}, \omega) = e^{i\delta_l} \langle \phi_l Y_L \chi_\sigma | H_q | \varphi_c \rangle \propto \sqrt{\omega} R_{l,c}(\omega) \langle L, \sigma | \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} | j_c l_c \mu_c \rangle \tag{4.11}$$

abhängt.

In der Dipolnäherung für H_q treten nur Beiträge zu $l = l_c \pm 1$ in der direkten Welle auf. Das Gewicht dieser Beiträge wird bestimmt durch das energieabhängige radiale Matrixelement $\exp(i\delta_l) \langle \phi_l | r | \phi_c \rangle \equiv R_{l,c}$ in (4.11). Mit der direkten Welle allein erhält man die bekannten Formeln für den atomaren Photoionisationswirkungsquerschnitt [66].

Die direkte Welle ψ_0 (4.10) in der Photoemission ist eine auslaufende Kugelwelle und muß für die Berechnung der Streuwelle $G_0 T' \psi_0$ um die Gitterplätze \mathbf{R} nach regulären Lösungen entwickelt werden [74]:

$$\begin{aligned}
\psi_0(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= -ik \sum_L h_l^+(k|\mathbf{r} + \mathbf{R}|) Y_L(\widehat{\mathbf{r} + \mathbf{R}}) M_{L\sigma,c} \\
&= -ik \sum_L \sum_{L'} j_{l'}(kr) Y_{L'}(\hat{\mathbf{r}}) G_{L'L}(\mathbf{R}) M_{L\sigma,c} \quad \text{für } |\mathbf{r} + \mathbf{R}| > r_{MT}^{\mathbf{R}}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

mit

$$G_{L'L}(\mathbf{R}) = 4\pi \sum_{L''} i^{l'-l-l''} h_{l''}^+(kR) Y_{L''}^*(\widehat{\mathbf{R}}) C_{L'LL''} \quad \text{und} \tag{4.13}$$

$$C_{L'LL''} = \langle Y_{L'} | Y_L Y_{L''} \rangle.$$

4.5 Der Endzustand in der $(L\sigma)$ -Darstellung

Bei der Streuung einer Partialwelle $j_l Y_L$, wie sie in der direkten Welle (4.12) vorkommt, entsteht außerhalb der Muffin-Tin-Kugel eine auslaufende Kugelwelle der Form $t_l h_l^+ Y_L$ ($r > r_{MT}$) [61], die wiederum an anderen Atomen gestreut werden kann. Im Endzustand ψ_f der Photoelektronen (3.6) werden alle Streubeiträge einschließlich des direkten Beitrags (Emitter \mathbf{R}_0) aufsummiert und im Streupfadoperator $B_L^{\mathbf{R}_0}$ zusammengefaßt [ch01]:

$$\psi_f(\mathbf{r}; E) \rightarrow -\frac{e^{ikr}}{r} \sum_L B_{L(\sigma)}^{\mathbf{R}_0}(\mathbf{k}) M_{L\sigma,c}^{\mathbf{R}_0}(\vec{\epsilon}, \omega) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (4.14)$$

mit

$$\begin{aligned} B_L^{\mathbf{R}_0}(\mathbf{k}) = & e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_0} (-i)^l Y_L(\hat{\mathbf{k}}) \\ & + \sum_{\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \sum_{L'} (-i)^{l'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{k}}) t_{l'}^{\mathbf{R}_1} G_{L'L}(\mathbf{R}_{10}) \\ & + \sum_{\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_2} \sum_{L''L'} (-i)^{l''} Y_{L''}(\hat{\mathbf{k}}) t_{l''}^{\mathbf{R}_2} G_{L''L'}(\mathbf{R}_{21}) \\ & \quad \times t_{l'}^{\mathbf{R}_1} G_{L'L}(\mathbf{R}_{10}) \\ & + \dots \end{aligned} \quad (4.15)$$

Der Streupfadoperator B_L in (4.14) kann spinabhängig sein, falls die Streuphasen bzw. die t_l 's in (4.15) spinabhängig sind.

In dieser Darstellung des Endzustandes der Photoelektronen (4.14) treten Anregung ($M_{L\sigma,c}$) und Streuung (B_L) der Photoelektronen separat auf. Der erste Summand im Streupfadoperator B_L (4.15) ist der Beitrag der direkten Welle, die weiteren Summanden stellen die Beiträge der Einfach-, Zweifach- und Vielfachstreuung dar. Die einzelnen Summanden lassen sich sehr anschaulich interpretieren. Die Bewegung der Elektronen von einem Atom \mathbf{R}_i zum Atom \mathbf{R}_j wird durch die $G_{L'L}$'s (4.13) beschrieben, die vom Differenzvektor $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ und der Energie der Elektronen abhängen. Die Streuung am Atom \mathbf{R}_j wird durch die Größe $t_l = i \exp(i\delta_l) \sin \delta_l$ dargestellt.

Die winkel- und spinaufgelöste Intensität der Photoelektronen, die aus einem Rumpfungszustand c durch Absorption von Photonen in Richtung $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{r}}$ mit der Energie $E = k^2$ angeregt werden, kann damit in der folgenden Form geschrieben werden [ch01]:

$$I_c^\sigma(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}) \propto \sum_c \sum_{\mathbf{R}_0} \left| \sum_L B_{L(\sigma)}^{\mathbf{R}_0}(\mathbf{k}) M_{L\sigma,c}^{\mathbf{R}_0}(\vec{\epsilon}, \omega) \right|^2. \quad (4.16)$$

Die Summe über c in (4.16) bedeutet, daß über entartete Anfangszustände summiert wird, d.h. im nichtmagnetischen Fall über die entsprechenden μ_c . Nicht äquivalente Emittentome an Positionen \mathbf{R}_0 , die zur Intensität (4.16) beitragen, werden inkohärent überlagert.

4.6 Die Streuamplitude

Für die Diskussion des Streuverhaltens der Elektronen im Festkörper ist es nützlich, den Streupfadoperator B_L (4.16) in einer einfachen Näherung zu betrachten. Es werden hierbei

nur Einfachstreubeiträge in (4.15) berücksichtigt und die Streuung an den Atomen in der Ebene-Wellen-Näherung betrachtet. Man ersetzt die Hankelfunktion $h_l^+(x)$ in $G_{L'L}$ (4.13) durch den asymptotischen Verlauf $(-i)^l \exp(ix)/(ix)$ für $x \gg l(l+1)$ [65], kann dann die Integration in $C_{L'LL''}$ über die Y_L 's ausführen und erhält den Streupfadoperator B_L in der Ebene-Wellen-Näherung:

$$B_L^{\mathbf{R}_0}(\mathbf{k}) \approx e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_0} (-i)^l Y_L(\hat{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{10}}}{R_{10}} f^{\mathbf{R}_1}(\mathbf{k}, \mathbf{R}_{10}) (-i)^l Y_L(\hat{\mathbf{R}}_{10}). \quad (4.17)$$

Die Streuwelle (2.Summand in (4.17)) enthält dann die Streuamplitude für die Streuung einer ebenen Welle, die aus Richtung \mathbf{R}_{10} kommend am Atom \mathbf{R}_1 in Richtung \mathbf{k} gestreut wird:

$$f^{\mathbf{R}_1}(\mathbf{k}, \mathbf{R}_{10}) = \frac{1}{ik} \sum_l (2l+1) t_l^{\mathbf{R}_1} P_l(\cos \Theta_s^{(10)}) \quad \text{und} \quad \cos \Theta_s^{(10)} = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10}}{k R_{10}}. \quad (4.18)$$

Das Verhalten der Streuamplitude $f^{\mathbf{R}}$ (4.18) wird wesentlich durch die kinetische Energie der Elektronen bestimmt. Für Energien > 500 eV hat der Betrag der Streuamplitude um $\Theta_s = 0^\circ$ ein starkes Maximum, während der Betrag für größere Streuwinkel rasch abfällt (Abb.4.2). Das bedeutet, daß insbesondere in Richtung der Emittier-Streuer-Achse \mathbf{R}_{10} in (4.17) eine große Intensität durch die Streuung der Elektronen verursacht werden kann. Man spricht dann von einem Vorwärtsstreubeitrag (FS=forward scattering) in der Intensität der Photoelektronen.

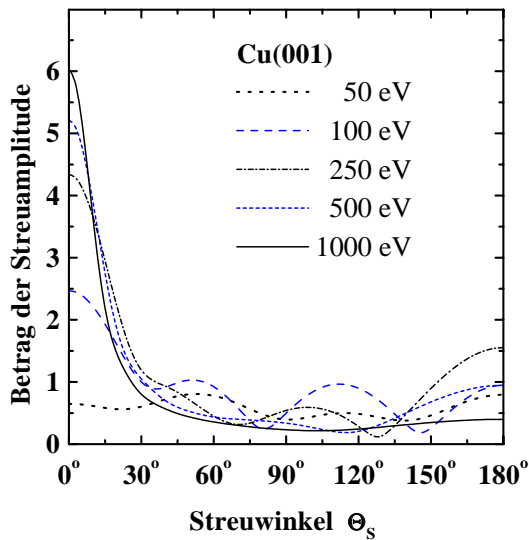


Abb. 4.2: Betrag der Streuamplitude für einen Cu-Einkristall in Abhängigkeit vom Streuwinkel für Energien von 50-1000 eV

Das FS-Verhalten kann man nutzen für eine einfache Interpretation von XPD-Daten. Die Lage der Hauptmaxima in der Winkelverteilung der Photoelektronen sollte in dieser Näherung mit den kristallographischen Richtungen im Festkörper korreliert sein. Auf diese

Art und Weise kann man prüfen, inwieweit die Atome im Festkörper Plätze in einem idealen Gitter besetzen oder davon abweichen. Diese Methode wurde und wird sehr erfolgreich in der Interpretation von XPD-Daten dünner Schichten eingesetzt und hat sich hier als eigenständige Methode etabliert (FS-XPD) [5, 6].

Das FS-Modell ist eine Näherung in der Diskussion von XPD-Daten, für die auch eine

Reihe von Abweichungen bekannt sind. So kann es durch Defokussierung bei der Vielfachstreuung entlang von Atomketten zu einer drastischen Reduzierung der Intensität in Richtung der Atomketten kommen, auch wenn die Energie der Elektronen mehrere 100 eV beträgt [3,30,31]. Außerdem können Maxima in der Intensität auch durch die Interferenz der direkten Welle mit der Streuwelle entstehen. Die Interferenz benachbarter Einzelstreubeiträge kann das erwartete FS-Verhalten reduzieren oder sogar zerstören, wie es z.B. für Si [67] und MgO [ch04] beobachtet wurde.

4.7 Inelastische Streuung und Debye-Waller-Faktor

Inelastische Streuprozesse werden in der Theorie durch einen Abfall in der Amplitude der Wellenfunktion der Elektronen für alle Wege (Länge L) zwischen den Atomen und zur Oberfläche in der Form $\exp(-\gamma L)$ berücksichtigt, wobei $\gamma = 1/(2\lambda)$ durch die inelastische mittlere freie Weglänge der Elektronen λ bestimmt wird. Da die inelastischen Prozesse energieabhängig sind, ist $\lambda = \lambda(E)$ auch energieabhängig. Für viele Materialien kann λ durch eine universelle Kurve beschrieben werden, die in Abb.4.3 dargestellt ist [68]. Für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 50-1500 eV liegt die mittlere freie Weglänge bei 5-20 Å, so daß man zur Intensität der Photoelektronen Beiträge aus einer Tiefe von 5-10 Schichten des Festkörpers kommen. Durch geeignete Wahl der experimentellen Bedingungen (kleine Energie oder lange Austrittswege bei streifendem Austritt der Elektronen) kann man die Oberflächenempfindlichkeit der Methode noch erhöhen. Besonders interessant ist der Bereich, in dem die inelastische mittlere freie Weglänge der Elektronen ein Minimum hat (Abb.4.3), d.h. bei einer Elektronenenergie von ca. 50 eV. Dann resultieren alle wesentlichen Beiträge zur Intensität aus den ersten Atomlagen des Festkörpers. Auf Grund der starken Dämpfung kann man sich bei der Berechnung auf einen relativ kleinen

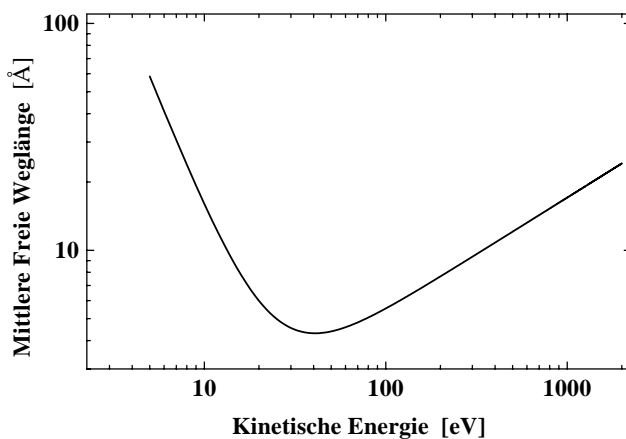


Abb. 4.3: Inelastische mittlere freie Weglänge der Elektronen in Abhängigkeit von der kinetischen Energie der Elektronen (nach [68]).

Cluster und Einfach- oder Zweifachstreubeiträge beschränken.

Bei endlicher Temperatur schwingen die Atome um ihre Gleichgewichtslage \mathbf{R}^0 mit der Verrückung \mathbf{u}_R , wobei $|\mathbf{u}_R| \ll |\mathbf{R}^0|$ gilt. Die relativen Atompositionen \mathbf{R}_{ij} im Streupfadoperator B_L (4.15) sind dann durch Vektoren $\mathbf{R}_{ij}^0 + \mathbf{u}_{ij}$ zu ersetzen, wobei \mathbf{u}_{ij} die

relative Verrückung zwischen zwei Atomen \mathbf{R}_i und \mathbf{R}_j darstellt. Für die Berechnung des thermodynamischen Mittelwertes $\langle \dots \rangle_T$ wird die Ebene-Wellen-Näherung verwendet:

$$\langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}} G_{L'L}(\mathbf{R}_{ij}) \rangle_T \approx e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}^0} G_{L'L}(\mathbf{R}_{ij}^0) \langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}_{ij} \widehat{\mathbf{R}}_{ij}^0 (1-\cos \Theta^{(ij)})} \rangle_T. \quad (4.19)$$

In dieser Näherung erhält man für den temperaturabhängigen Term in (4.19) nach Ausführung der Mittelung über die Temperatur T den Debye-Waller-Faktor DWF [69]:

$$DWF = e^{-k^2 \overline{u_{ij}^2} (1-\cos \Theta_s^{(ij)})}. \quad (4.20)$$

In (4.20) ist $\overline{u_{ij}^2}$ die relative mittlere quadratische Verrückung zwischen zwei Atomen \mathbf{R}_i und \mathbf{R}_j [69]. Der Winkel $\Theta_s^{(ij)}$ in (4.20) ist der Streuwinkel zwischen \mathbf{R}_{ij} und \mathbf{k} . In der thermischen Mittelung in (4.20) wurde vorausgesetzt, daß die Dämpfung isotrop ist und keine Korrelation zwischen den thermischen Schwingungen der verschiedenen Atome auftreten.

Für die Streuung von Kugelwellen wurden in den letzten Jahren eine Reihe verbesserter Modelle eingeführt und diskutiert [70–73]. In der Ebene-Wellen-Näherung des DWF 's (4.20) gibt es keine Dämpfung für FS-Beiträge ($\Theta_s = 0^\circ$) bei endlicher Temperatur.

4.8 Potentialstufe und Energienullpunkt

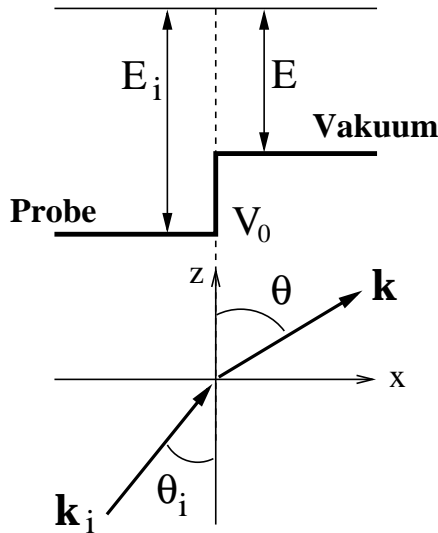


Abb. 4.4: Potentialstufe und Wellenvektor der Elektronen an der Oberfläche.

Der Übergang zwischen Festkörper und Vakuum kann näherungsweise durch eine Potentialstufe der Höhe V_0 beschrieben werden (s. Abb. 4.4). Beim Austritt der Photoelektronen aus der Probe in das Vakuum ändert sich der Wellenvektor \mathbf{k}_i der Elektronen senkrecht zur Oberfläche, während die Parallelkomponente zur Oberfläche erhalten bleibt. Es tritt eine Brechung auf, wodurch sich die Polarwinkel des Wellenvektors \mathbf{k} innerhalb (θ_i) und außerhalb (θ) der Probe unterscheiden:

$$\sin \theta_i = \sqrt{\frac{E + |V_0|}{E}} \sin \theta.$$

Gewöhnlich liegt der Wert von $|V_0|$ zwischen 5-15 eV, bezogen auf das Vakuumniveau der Probe.

In der Muffin-Tin-Konstruktion wird das mittlere Potential zwischen den Muffin-Tin-Kugeln durch die Muffin-Tin-Konstante E_{MT} bestimmt. Die Muffin-Tin-Konstante ist eine konstruierte Größe, die nicht meßbar ist. Der Potentialverlauf an der Oberfläche eines Festkörpers wird durch Dipolschichten modifiziert. Damit sind V_0 und E_{MT} keine identischen Größen. In den Rechnungen wird V_0 als Parameter für die Brechung an der Oberfläche betrachtet, der für jedes System angepaßt wird [64].

An dieser Stelle soll noch eine Anmerkung zum Energienullpunkt der Rechnungen eingefügt werden. Die Energie ε_c der gebundenen Zustände des Emittentatoms ist negativ und wird im allg. auf das Vakuumniveau, die Fermienergie E_F oder die Oberkante des Valenzbandes bezogen (Abb.4.5). Die Energie des Endzustandes der Photoelektronen E folgt aus der Energieerhaltung und soll hier auf das Vakuumniveau der Probe bezogen sein, d.h. $E = \omega + \varepsilon_c^{(vak)}$. Für die Berechnung der Vielfachstreuung in der Probe muß noch $|V_0|$ addiert werden.

Im Experiment wird die kinetische Energie der Elektronen in Bezug auf das Vakuumniveau des Spektrometers bestimmt (E_{kin} in Abb.4.5) und unterscheidet

sich daher von E um die Differenz der entsprechenden Austrittsarbeiten $\Delta\Phi = (\Phi_{sp} - \Phi)$ des Spektrometers Φ_{sp} und der Probe Φ . Diese Differenz, die in der Größenordnung von einigen eV liegt, ist nicht immer genau bekannt. Daraus resultiert eine kleine Unsicherheit in der Bestimmung von E aus den experimentellen Daten, die in den Rechnungen bei kleinen Elektronenenergien zu beachten sind.

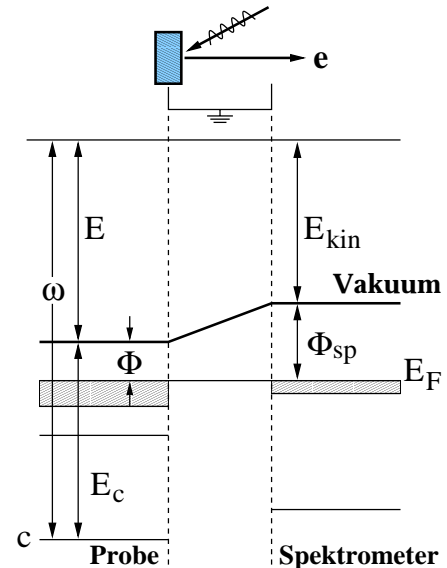


Abb. 4.5: Energieniveauschema bei der Photoemission. (nach [66])

5 Strukturbestimmung mit PED

In dieser Arbeit werden Ergebnisse zur Strukturbestimmung mit PED an III-V-Halbleiteroberflächen präsentiert. Diese Halbleiter sind auf Grund ihrer Bandlücken und der hohen Elektronenbeweglichkeit für viele technologische Anwendungen interessant. Durch Aufbringen eines Adsorbates können die Struktur der Oberfläche sowie deren elektronische und chemische Eigenschaften verändert werden [75].

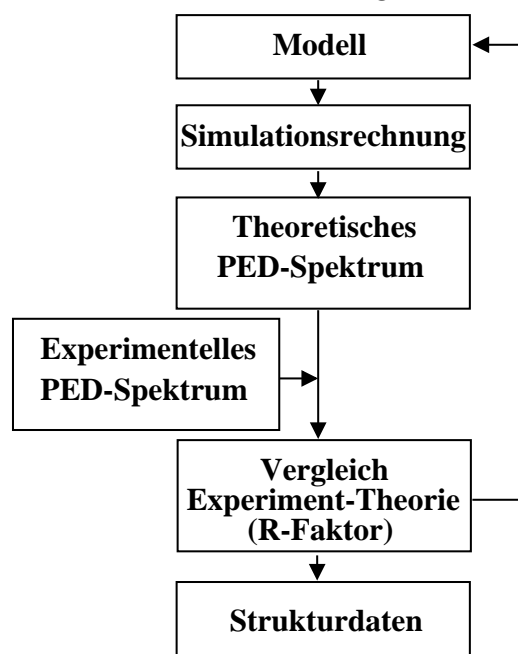


Abb. 5.1: Flußdiagramm zur Bestimmung von Strukturdaten mit PED.

Ausgehend von einem Modell für die betrachtete Oberfläche erhält man aus einer Simulationsrechnung ein theoretisches Spektrum, das mit den experimentellen Daten verglichen wird. Als quantitatives Kriterium für die Übereinstimmung von Theorie und Experiment wird ein R-Faktor (reliability factor) definiert, der die relative Abweichung der experimentellen und theoretischen Daten voneinander beschreibt. Diese R-Faktoren wurden zur Auswertung von LEED-I-V-Kurven entwickelt [77] und auf die Photoelektronenbeugung übertragen [78–80]. Im Fall einer optimalen Übereinstimmung zwischen experimentellen und theoretischen Daten nimmt der R-Faktor ein Minimum an.

Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie hängt dabei jedoch nicht allein von den Atompositionen ab. Daneben haben noch Parameter wie das innere Potential, die mittlere freie Weglänge der Elektronen oder der Debye-Waller-Faktor einen Einfluß. Des weiteren müssen in der Theorie bestimmte experimentelle Randbedingungen beachtet werden. So hat der Analysator eine endliche Energie- und Winkelaufösung und kann selbst auch eine Winkelabhängigkeit in der Messung besitzen. Das ist im Vorfeld unbedingt zu klären.

Die Methode PED kann zur Aufklärung der lokalen Struktur an den Halbleiteroberflächen beitragen. Untersucht wurden in diesem Zusammenhang die Relaxation der reinen III-V(110)-Oberflächen [CH-1, ch05, 76], die Adsorption einer Sb-Monolage auf III-V(110)-Halbleiteroberflächen [CH-2, ch06, ch07, ch08, 76] und die Aufbringung von As- bzw. S-Atomen auf InP(110) bzw. InP(001) [CH-3, CH-4]. Des weiteren gab es Untersuchungen an den Systemen Se/GaAs(110) und Se/InP(110) [ch09], die hier jedoch nicht detailliert gezeigt werden.

In Abb.5.1 ist das Prinzip der Strukturbestimmung mit PED als Flußdiagramm dargestellt.

Ausgehend von einem Modell für die betrachtete Oberfläche erhält man aus einer Simulationsrechnung ein theoretisches Spektrum, das mit den experimentellen Daten verglichen wird.

Hervorgehoben werden soll an dieser Stelle, daß die Ergebnisse nur durch eine enge Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment erzielt werden konnten.³ Wichtig ist, für die jeweilige Fragestellung optimale experimentelle Bedingungen zu wählen. Erst durch die Kombination verschiedener Meßmethoden (Abhängigkeit der Intensität von der Energie, dem Polarwinkel und dem Azimutwinkel) kann man ein glaubwürdiges und genaues Ergebnis erzielen.

In den Untersuchungen der reinen und Sb-bedeckten III-V(110)-Halbleiteroberflächen

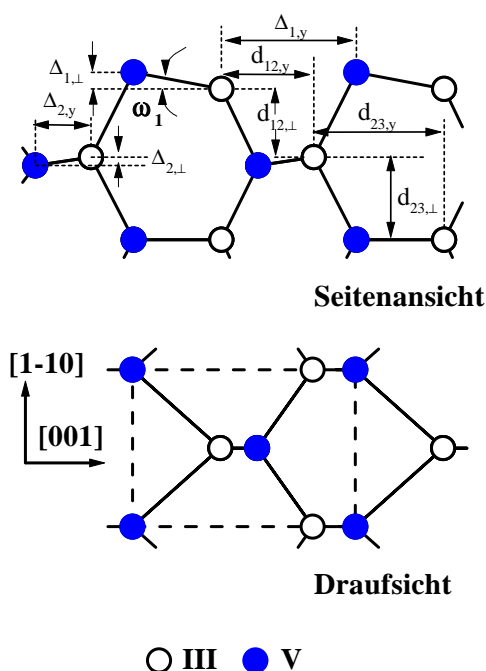


Abb. 5.2: Relaxation der (110)-Oberfläche eines III-V-Halbleiters (Seitenansicht und Draufsicht) und Definition der Strukturparameter.

Für die Strukturanalyse an einer solchen Grenzfläche bietet die Methode PED verschiedene Ansätze.

Findet ein atomarer Austausch nur innerhalb der ersten Schicht des Substrates statt, kann man die Photoelektronenbeugung bei niedrigen Energien (100-200 eV) für eine Strukturanalyse einsetzen. Die Modulation in der Intensität entsteht dann im wesentlichen durch die Rückwärts- und Vielfachstreuung der Photoelektronen an der Substratumgebung. Diese Methode wurde für die Untersuchung des Systems As/InP(110) herangezogen.

Dringen die Adsorbatatome auch in tiefere Schichten des Substrates ein, bietet die Anregung bei hohen Energien (XPD) Aufschluß über die Position des Adsorbatatoms. Die Maxima in der Winkelabhängigkeit der Intensität sind dann korreliert mit der Vorwärts-

wurde zum ersten Mal systematisch die Photoelektronenbeugung bei niedrigen Energien (50-100 eV) zur Strukturanalyse an Halbleiteroberflächen eingesetzt. Hierbei wird die Energieverschiebung der Rumpfniveaulinien für Atome an Oberflächen und auf Adsorbatplätzen mit unterschiedlicher chemischer oder struktureller Umgebung ausgenutzt. Um diese Energieverschiebung (0.1-0.3 eV) im Experiment auflösen zu können, sollte die kinetische Energie der Elektronen unter 100 eV liegen. Die Rumpfniveauspektren lassen sich dann in entsprechende Komponenten zerlegen, deren Winkel- bzw. Energieabhängigkeit dann separat analysiert werden kann.

Die chemische und strukturelle Zusammensetzung der Grenzfläche zwischen Adsorbatschicht und Substrat hängt wesentlich von den experimentellen Bedingungen bei der Probenpräparation ab.

³Die Autorin war nicht an der Aufnahme und Bearbeitung der experimentellen Daten selbst beteiligt.

streuung an den oberhalb des Emitteratoms liegenden Substratatomen. Auf diese Weise wurde die Position der S-Atome in InP(001) bestimmt.

Alle in diesem Abschnitt vorgestellten Rechnungen zur Strukturanalyse basieren auf der RAME-Näherung [41] für den Streupfadoperator B_L (4.15), wodurch der Kugelwellencharakter der angeregten Elektronenwelle gegenüber einer Ebene-Wellen-Näherung berücksichtigt wird. Das Computerprogramm mit der vollen Drehimpulsentwicklung stand erst einige Jahre später zur Verfügung.

Parameter	InP(110)	GaP(110)	GaAs(110)	GaSb(110)
$\Delta_{1,\perp}$	0.64Å	0.64Å	0.68Å	0.69Å
$\Delta_{1,y}$	4.55Å	4.25Å	4.41Å	4.74Å
$d_{12,\perp}$	1.63Å	1.48Å	1.51Å	1.67Å
$d_{12,y}$	3.42Å	3.20Å	3.34Å	3.57Å
ω_1	26°	28°	29°	27°

Tab. 5.1: Optimierte Werte der Parameter für InP(110), GaP(110), GaAs(110) und GaSb(110) im Modell fester Bindungslängen. Definition der Parameter s. Abb.5.2.

5.1 III-V(110)-Halbleiteroberflächen

Atome in der Oberfläche und im Volumen haben eine unterschiedliche Umgebung, was sich geringfügig aber signifikant auf die energetischen Lagen der Oberflächen- und Volumenbeiträge in den Rumpfniveauspektren auswirkt. Man kann daher das aufgezeichnete Rumpfniveauspektrum in Komponenten zerlegen, die den Volumen- bzw. Oberflächenbeitrag zum Spektrum darstellen. Voraussetzung für eine solche Komponentenzerlegung ist eine hohe Energieauflösung (≤ 0.2 eV) im Experiment, wie man sie bei Elektronenenergien von 30-100 eV erreichen kann.

In Abb.5.3(a) ist das In4d-Rumpfniveauspektrum für InP(110) dargestellt, das auf Grund der Spin-Bahn-Wechselwirkung in ein Dublett aufspaltet, bestehend aus der In4d_{5/2}- und der In4d_{3/2}-Komponente. Die spin-bahn-aufgespaltenen Komponenten sind um 0.88 eV gegeneinander verschoben [CH-1]. Die In4d-Elektronen wurden mit linear polarisiertem Licht der Energie $h\nu = 50$ eV angeregt und in Emission senkrecht zur Probenoberfläche ($\theta = 0^\circ$) gemessen. Das In4d-Rumpfniveauspektrum (Abb.5.3(a)) kann nun in eine Komponente für das Volumen (**bulk**) und eine für die Oberfläche (**surface**) zer-

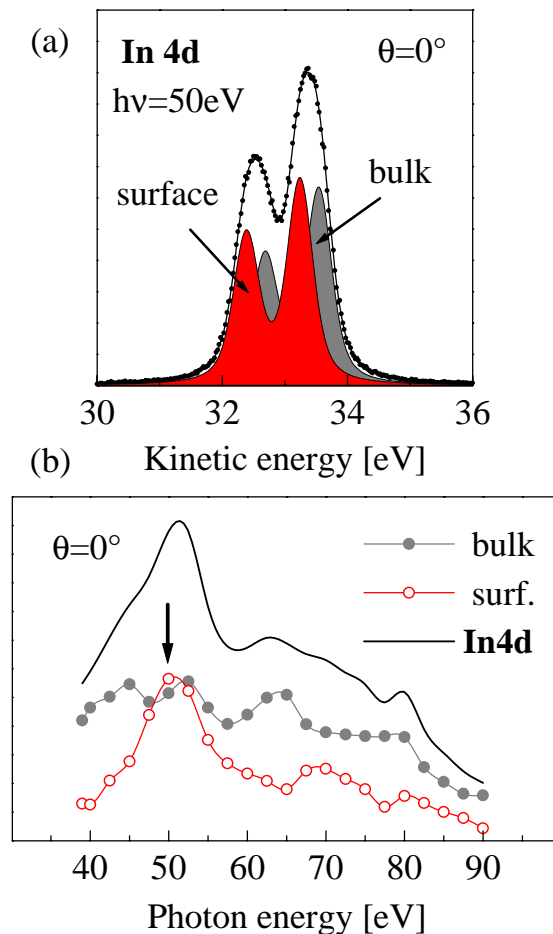


Abb. 5.3: In4d-Rumpfniveauspektrum bei normaler Emission aus InP(110) (nach [CH-1]).

legt werden, wobei die Oberflächenkomponente bzgl. der Volumenkomponente energetisch um 0.31 eV verschoben ist (SCLS=surface core-level shift). Die Intensität der Volumen- und Oberflächenkomponente hängt von der Austrittsrichtung und der kinetischen Energie der Elektronen ab. In Abb.5.3(b) ist die Energieabhängigkeit der Intensität der In4d-Photoelektronen dargestellt. Bei einer Photonenenergie von 50 eV ist die Intensität der Oberflächenkomponente sogar etwas größer als die der Volumenkomponente (Abb.5.3(a) und (b)). Die weiteren Untersuchungen ergaben, daß dieses Verhalten durch die Streuung der Elektronen verursacht wird. Es wurde im betrachteten Energiebereich auch für andere III-V(110)-Halbleiter theoretisch vorausgesagt [CH-1] und experimentell gefunden [ch05, 76].

Insbesondere die Winkel- und Energieabhängigkeit der Oberflächenkomponente enthält Information über die Struktur der obersten Atomlagen der Probe. Um die Strukturparameter der (110)-Oberflächen (Abb.5.2) zu bestimmen wurden verschiedene Relaxationsvariationen durchgeführt. Zunächst wurde der Bindungswinkel ω_1 der obersten Atomlage

(Abb.5.2) im Modell konstanter Bindungslängen [81] variiert bis eine optimale Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie erreicht war. Erst dann wurde die Relaxation der zweiten Schicht in die Rechnungen einbezogen. Dieses Vorgehen ist gerechtfertigt, da die Relaxation in der zweiten Schicht sehr viel kleiner als in der ersten Schicht ist. Die Ergebnisse aus den Simulationsrechnungen werden mit den experimentellen Daten mittels eines R-Faktors [79] verglichen.

Die (110)-Oberflächen von InP, GaAs, GaP und GaSb wurden erstmals systematisch mit SCLS-PED untersucht [CH-1, ch05, 76]. Die Ergebnisse der Strukturanalyse, die in Tab.1 zusammengestellt sind, sind in guter Übereinstimmung mit anderen Methoden wie LEED und Totalenergie-Rechnungen [82, 83].

Somit ist die Methode PED bei niedrigen Energien für eine Strukturanalyse der III-V(110)-Halbleiteroberflächen sehr gut geeignet. Im Prinzip kann man die Methode SCLS-PED auf jede Oberfläche anwenden, für die eine Verschiebung in der Bindungsenergie der Rumpfelektronen bekannt ist und die noch experimentell aufgelöst werden kann [75, 84]. Energieverschiebungen in den Rumpfniveauspektren werden auch für Atome an Grenzflächen oder in Adsorbatsystemen beobachtet.

5.2 Adsorption einer Sb-Monolage

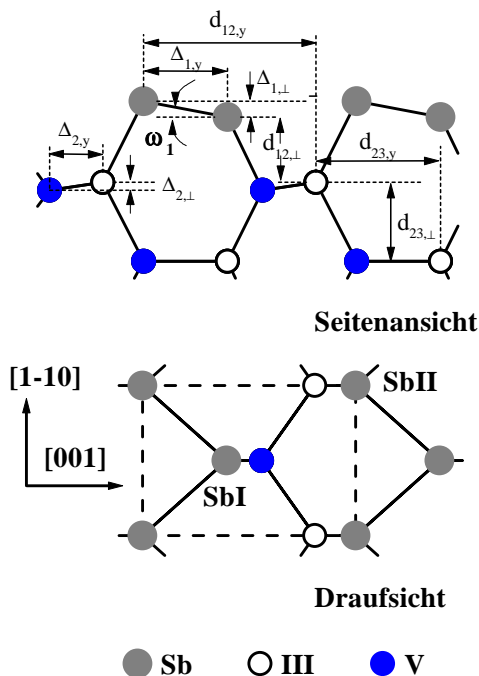


Abb. 5.4: Seitenansicht und Draufsicht für Sb/III-V(110) im ECLS-Modell und Definition der Strukturparameter.

Die Adsorption von Sb-Atomen auf den III-V(110)-Oberflächen ist interessant, da die Sb-Atome im Vergleich zu den meisten anderen Metallen epitaktisch aufwachsen und keine chemische Austauschreaktion an der Grenzfläche verursachen. So bilden die Sb-Atome z.B. auf InP(110) und GaAs(110) geordnete epitaktische Monolagen. Trotz zahlreicher experimenteller und theoretischer Arbeiten wird die geometrische Struktur der Sb/III-V(110)-Systeme in der Literatur teilweise kontrovers diskutiert [83, 85, 86]. Während die Ergebnisse für die Struktur der Sb-Monolage auf GaAs(110) relativ konsistent sind, gibt es erhebliche Unterschiede in den Strukturparametern für das System Sb/InP(110). Die Monolagenstruktur für Sb/InAs(110) wurde bis zur Anwendung von PED nur theoretisch mittels Totalenergie-Rechnungen untersucht.

Die Untersuchungen mit PED ergaben, daß die atomare Struktur der Sb-Monolage auf allen untersuchten III-V(110)-Halbleiteroberflächen durch das aus der Literatur bekannte ECLS-Modell (ECLS=epitaxial continued layer structure) beschrieben werden kann. In diesem Modell bilden die Sb-Atome entlang der [1-10]-Richtung Zick-Zack-Ketten in der Oberfläche und setzen dabei die Volumenstruktur fort (Abb.5.4).

Die gemessenen Sb4d-Rumpfniveauspektren bestehen aus einem Dublett der spin-bahn-aufgespaltenen Sb4d-Rumpfniveaulinie. Diese Spektren lassen sich in zwei Komponenten zerlegen, die energetisch gegeneinander um 0.4-0.43 eV verschoben sind (CCLS=chemical core-level shift) [CH-2, ch06, 76]. Die beiden Komponenten entstehen durch Emission aus Sb-Atomen, die unterschiedliche Adsorptionsplätze auf der (110)-Oberfläche besetzen. Im ECLS-Modell gibt es für die Adsorption einer Sb-Monolage auf einer III-V(110)-Oberfläche zwei nichtäquivalente Adsorptionsplätze, die in Abb.5.4 mit SbI und SbII bezeichnet sind.

Parameter	Sb/InP(110)	Sb/GaP(110)	Sb/GaAs(110)	Sb/InAs(110)
$\Delta_{1,\perp}$	$0.13 \pm 0.02 \text{ \AA}$	$0.07 \pm 0.05 \text{ \AA}$	$0.06 \pm 0.05 \text{ \AA}$	$0.10 \pm 0.05 \text{ \AA}$
$\Delta_{1,y}$	$1.87 \pm 0.20 \text{ \AA}$	$1.91 \pm 0.20 \text{ \AA}$	$1.80 \pm 0.20 \text{ \AA}$	$1.93 \pm 0.20 \text{ \AA}$
$d_{12,\perp}$	$2.41 \pm 0.05 \text{ \AA}$	$2.32 \pm 0.05 \text{ \AA}$	$2.36 \pm 0.05 \text{ \AA}$	$2.36 \pm 0.05 \text{ \AA}$
$d_{12,y}$	$4.59 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$4.56 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$4.35 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$4.56 \pm 0.15 \text{ \AA}$
ω_1	$4.0^\circ \pm 0.5^\circ$	$2.0^\circ \pm 0.5^\circ$	$2.0^\circ \pm 0.5^\circ$	$3.0^\circ \pm 0.5^\circ$
$d(\text{Sb} - \text{Sb})$	$2.80 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.71 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.69 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.88 \pm 0.15 \text{ \AA}$
$d(\text{III} - \text{Sb})$	$2.54 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.60 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.57 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.75 \pm 0.15 \text{ \AA}$
$d(\text{Sb} - \text{V})$	$2.80 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.48 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.69 \pm 0.15 \text{ \AA}$	$2.62 \pm 0.15 \text{ \AA}$

Tab. 5.2: Optimierte Werte der Parameter für Sb/InP(110), Sb/GaP(110), Sb/GaAs(110) und Sb/GaSb(110).

Die Zuordnung zwischen den beiden Komponenten der Rumpfniveauspektren und den beiden möglichen Adsorptionsplätzen auf der (110)-Oberfläche war lange unklar. Durch die separate theoretische Analyse der Winkel- bzw. Energieabhängigkeit der Intensität der beiden Komponenten konnte eine eindeutige Zuordnung auf die Adsorptionsplätze erfolgen. Hierzu wurden die experimentellen Spektren mit Simulationsrechnungen für die beiden Komponenten verglichen. Auf Grund der unterschiedlichen chemischen und strukturellen Umgebung der SbI- und SbII-Plätze auf der (110)-Oberfläche (Abb.5.4) sind die entsprechenden Energie- und Winkelabhängigkeiten der angeregten Sb4d-Photoelektronen

deutlich verschieden.

In Abb.5.5 und in Abb.5.6 sind die Ergebnisse der Simulationsrechnungen und die entsprechenden experimentellen Daten für das System Sb/InP(110) dargestellt. Die Rechnungen wurden für einen Cluster mit 258 Atomen ausgeführt unter Berücksichtigung der

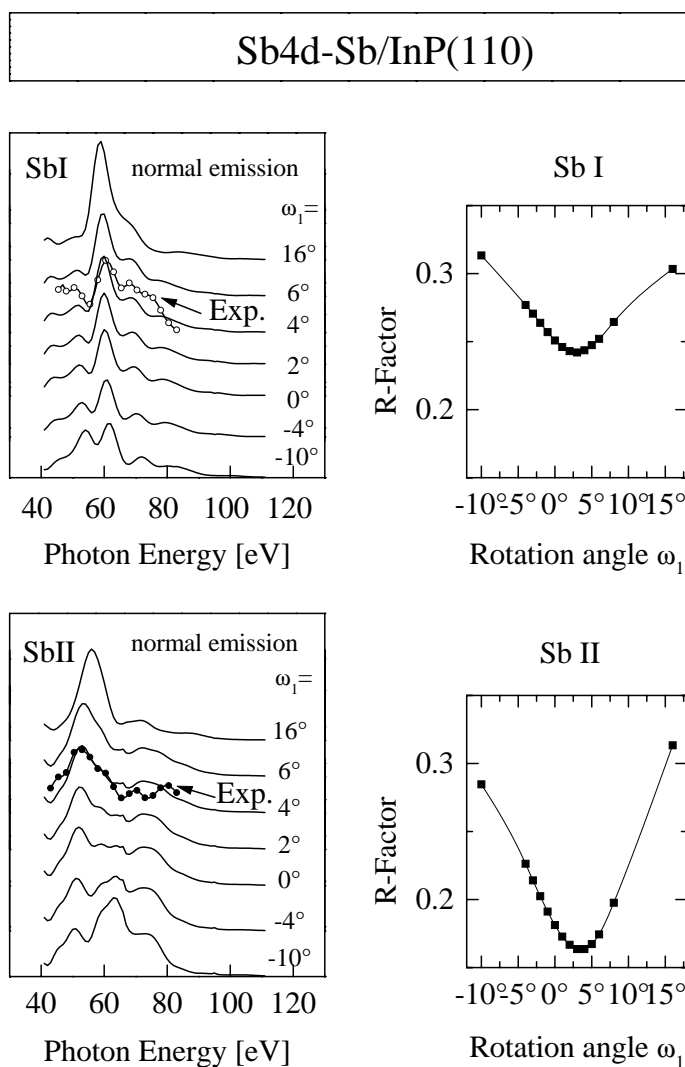


Abb. 5.5: Experimentelle PED-Spektren für SbI und SbII im Vergleich mit Simulationsrechnungen für verschiedene Rotationswinkel ω_1 (links) und R-Faktoren (rechts): Energieabhängigkeit bei normaler Emission. (nach [76])

Vielfachstreuung bis zur zweiten Ordnung. Die Potentialstufe V_0 beträgt 4 eV. Die inelastische mittlere freie Weglänge wurde energieabhängig mit Werten von Seah und Dench [68] berechnet.

In Abb.5.5 und in Abb.5.6 werden die beiden experimentellen Komponenten theoretischen Spektren für verschiedene Winkel ω_1 gegenübergestellt. Die Bindungslängen

$d(\text{Sb} - \text{Sb}) = 2.80\text{\AA}$, $d(\text{In} - \text{Sb}) = 2.80\text{\AA}$ und $d(\text{Sb} - \text{P}) = 2.54\text{\AA}$ sind hierbei konstant (Modell konstanter Bindungslängen).

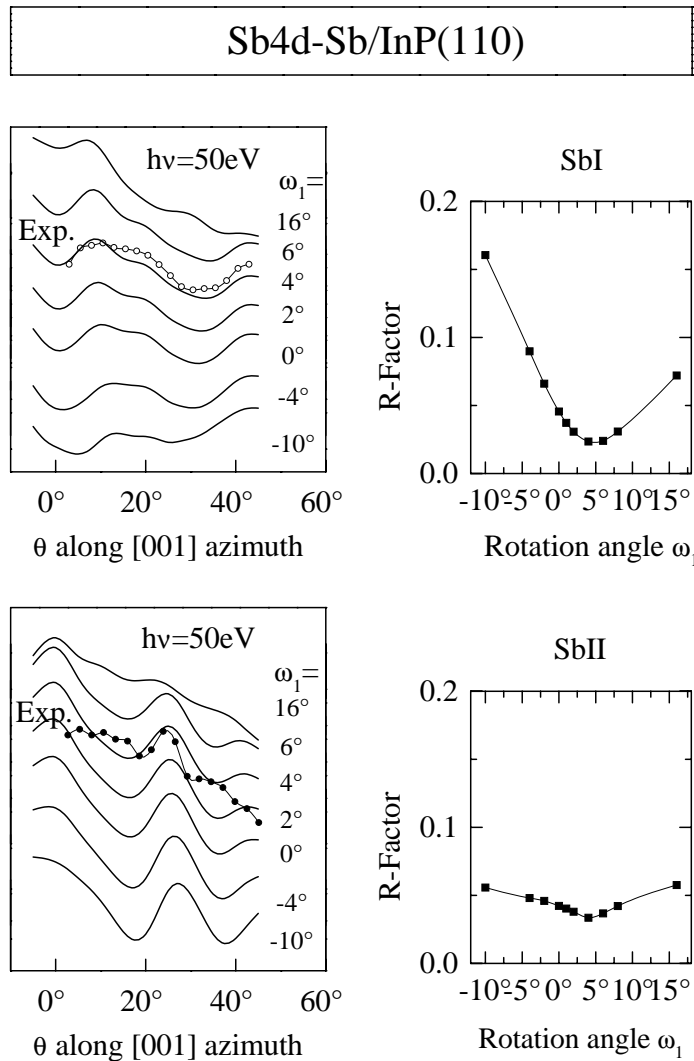


Abb. 5.6: Experimentelle PED-Spektren für SbI und SbII im Vergleich mit Simulationsrechnungen für verschiedene Rotationswinkel ω_1 (links) und R-Faktoren (rechts): Winkelabhängigkeit entlang der [001]-Azimutrichtung. (nach [76])

Aus dem Vergleich der experimentellen Spektren mit den Ergebnissen der Simulationsrechnungen erhält man eine eindeutige Zuordnung der einzelnen Komponenten zu den beiden Sb-Adsorptionsplätzen in der Monolage. Die Komponente mit niedriger Bindungsenergie im Rumpfniveauspektrum (SbI) entspricht der Bindung des Sb-Atoms an das In-Atom, die Komponente mit höherer Bindungsenergie (SbII) ist an das P-Atom gebunden. Um aus den Simulationsrechnungen die Strukturparameter für eine Sb-Monolage

(s. Abb. 5.4) zu bestimmen, wurden die theoretischen Daten mit den experimentellen mittels eines R-Faktors verglichen (Abb. 5.5 und 5.6). Auf diese Weise wurden Strukturdaten für eine Sb-Monolage auf InP(110) [76], GaAs(110) [CH-2], InAs(110) [ch06] und GaP [76] bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tab. 2 zusammengefaßt. Während es für Sb/GaAs(110) und Sb/InP(110) verschiedene Untersuchungen zur Struktur mit LEED und Totalenergie-Rechnungen gab, war das publizierte Ergebnis für Sb/InAs(110) [ch06, 76] die erste Arbeit mit experimentell abgeleiteten Strukturdaten.

5.3 As/InP(110) und S/InP(001)

Die Adsorption von Atomen oder Molekülen auf einer Festkörperoberfläche hängt wesentlich von den experimentellen Bedingungen ab. Bei Raumtemperatur bilden die As-Atome auf der InP(110)-Oberfläche eine geordnete epitaktische Monolage, vergleichbar den schon diskutierten Sb-Monolagen in Kap. 5.2. Bei höheren Temperaturen T beobachtet man jedoch eine Reaktion zwischen der Monolage und dem Substrat. Die Untersuchungen am System As/InP(110) mit PES und PED ergaben, daß es durch As-Adsorption bei $T > 600$ K zu einem As-P-Austausch in der InP(110)-Oberfläche kommt [CH-3]. Für die Bestimmung der Struktur der As-ausgetauschten InP(110)-Oberfläche (Abb. 5.7) wurden Rumpfniveauspektren für As $2p_{3/2}$ in Abhängigkeit vom Polarwinkel bei verschiedenen Azimutwinkeln im Experiment aufgenommen. Die kinetische Energie der As $2p$ -Photoelektronen liegt bei der Anregung mit AlK α -Strahlung bei 165 eV. Die experimentellen Daten wurden mit Daten aus Simulationsrechnungen verglichen, wobei erst die Berücksichtigung von Vielfachstreubeiträgen

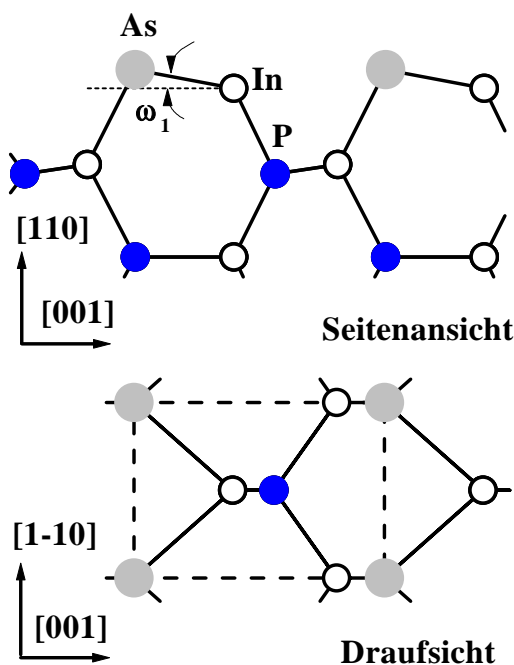


Abb. 5.7: As-P-Austausch in der InP(110)-Oberfläche (Seitenansicht und Draufsicht).

(2. Ordnung) akzeptable Ergebnisse im Vergleich der experimentellen und theoretischen Daten brachte. Es konnte gezeigt werden, daß die Struktur der As-ausgetauschten Oberfläche sehr ähnlich der Struktur der reinen InP(110)-Oberfläche ist. Mit Hilfe einer R-Faktor-Analyse wurde ein Rotationswinkel an der Oberfläche von $\omega_1 = 29^\circ$ bestimmt [CH-3]. Für eine Strukturanalyse unter Einbeziehung der Relaxation der zweiten Schicht waren die experimentellen Daten nicht ausreichend.

Bei höheren Temperaturen T beobachtet man jedoch eine Reaktion zwischen der Monolage und dem Substrat. Die Untersuchungen am System As/InP(110) mit PES und PED ergaben, daß es durch As-Adsorption bei $T > 600$ K zu einem As-P-Austausch in der InP(110)-Oberfläche kommt [CH-3]. Für die Bestimmung der Struktur der As-ausgetauschten InP(110)-Oberfläche (Abb. 5.7) wurden Rumpfniveauspektren für As $2p_{3/2}$ in Abhängigkeit vom Polarwinkel bei verschiedenen Azimutwinkeln im Experiment aufgenommen. Die kinetische Energie der As $2p$ -Photoelektronen liegt bei der Anregung mit AlK α -Strahlung bei 165 eV. Die experimentellen Daten wurden mit Daten aus Simulationsrechnungen verglichen, wobei erst die Berücksichtigung von Vielfachstreubeiträgen

Die Rechnungen zeigten auch, daß As im wesentlichen nur mit dem Phosphor in der ersten Schicht austauscht. Die Winkelverteilung der mit $AlK\alpha$ -Strahlung angeregten P2p- und In3d-Photoelektronen wird durch den As-P-Austausch praktisch nicht beeinflusst, da auf Grund der wesentlich höheren kinetischen Energie (>1000 eV) der Hauptbeitrag aus tieferen Schichten des Substrates kommt [CH-3].

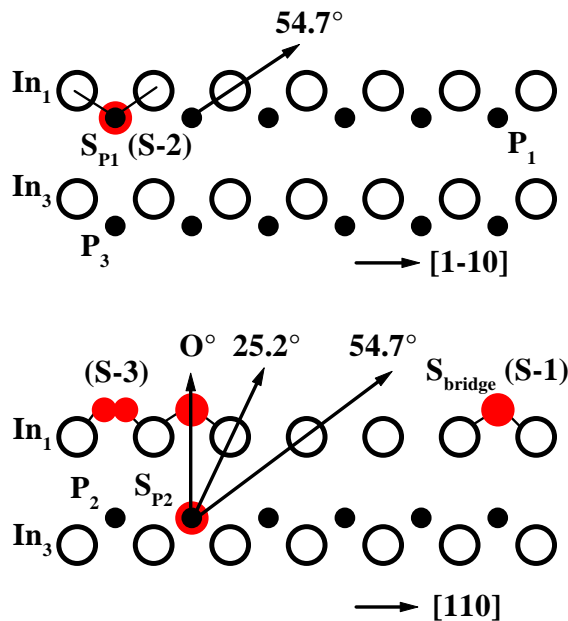


Abb. 5.8: Positionen der S-Atome (S1-S3) auf InP(001) (Seitenansicht).

Elektronen mit $AlK\alpha$ -Strahlung, um die Vorwärtsstreuung der Elektronen als Indiz für den Einbau der S-Atome in das Substrat zu nutzen [CH-4].

In Abhängigkeit von der Temperatur können die S-Atome in verschiedenen Positionen vorkommen (S1-S3 in Abb.5.8). Bei $T=320^\circ\text{C}$ besteht das S2p-Rumpfniveauspektrum aus nur einer Komponente. Die Analyse der Winkelverteilung der S2p-Photoelektronen ergab eindeutig, daß die S-Atome in die InP(001)-Oberfläche eingebaut werden. Hierbei besetzen die S-Atome P-Plätze (S-2 in Abb.5.8). Der detaillierte Vergleich von Experiment und Simulation liefert darüber hinaus noch Hinweise auf eine Relaxation des senkrechten Schichtabstandes zwischen den ersten beiden Atomlagen ($\Delta z=0.1$ nm [CH-4]) gegenüber der idealen InP(001)-Oberfläche.

Die Adsorption von S-Atomen auf InP(001) führt zu einer chemischen und elektronischen Passivierung der InP(001)-Oberfläche, wodurch die Oberflächenoxidation wesentlich reduziert werden kann.

Die Geometrie und Chemie der S-passivierten InP(110)-Oberfläche wurde mit PES und XPD untersucht [CH-4]. In den S2p-Rumpfniveauspektren kann man nach S-Adsorption auf InP(001) verschiedene S-Spezies unterscheiden. Eine Zuordnung dieser Spezies zu Adsorbatplätzen (s. Abb.5.8) allein aus der Diskussion der Bindungsenergie war nicht möglich. Daher wurde die Methode PED eingesetzt, um einen möglichen Einbau der adsorbierten S-Atome in die Volumenstruktur zu untersuchen. Angeregt wurden S2p-

6 Spinpolarisation in nichtmagnetischen Systemen

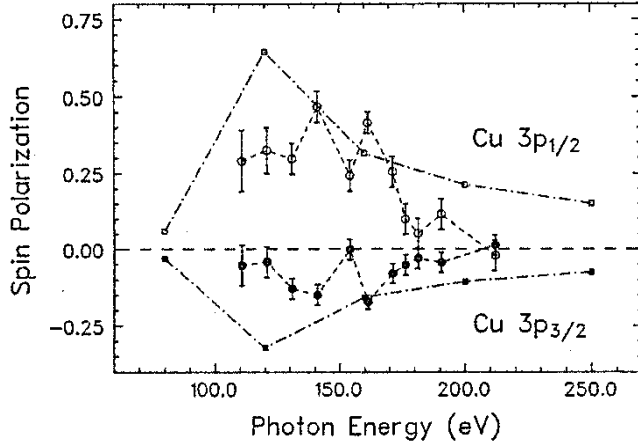


Abb. 6.1: Spinpolarisation für Cu3p-Photoelektronen in Cu(001) angeregt mit linear polarisierter Strahlung. (aus [91])

polarisierten Elektronen aus atomaren Niveaus [89,90]. Im Festkörper sind zusätzlich zur optischen Anregung noch die elastische und inelastische Vielfachstreuung der Elektronen auf dem Weg zur Oberfläche zu berücksichtigen.

Der Einfluß der Vielfachstreuung auf die Spinpolarisation der Photoelektronen im Festkörper kann im Rahmen des hier vorgestellten Modells der PED diskutiert werden [CH-5, CH-6, CH-9, ch03, ch10, ch11, ch12, ch13, ch14]. Der Beitrag der direkten Welle allein zur Intensität der Photoelektronen gibt näherungsweise das atomare Verhalten wieder.

Die (normierte) Spinpolarisation der Photoelektronen

$$S(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}) = \frac{I^\sigma(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}) - I^{-\sigma}(\mathbf{k}, \vec{\epsilon})}{I^\sigma(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}) + I^{-\sigma}(\mathbf{k}, \vec{\epsilon})} \times 100\% \quad (6.1)$$

hängt von der Emissionsrichtung und der kinetischen Energie der Elektronen ab und kann für lineares, zirkulares und unpolarisiertes Licht bestimmt werden. Die Elektronen mit Spin-auf und Spin-ab sind hierbei auf die Quantisierungsrichtung des Analysators \mathbf{e}_S bezogen.

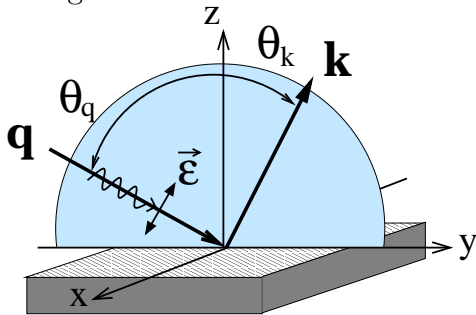


Abb. 6.2: Experimentelle Anordnung für die Messung $S(E)$ mit linear polarisiertem Licht ($\mathbf{e}_S \parallel \mathbf{e}_x$).

Fano zeigte 1969, daß man spinpolarisierte Elektronen durch Photoionisation aus unpolarisierten Atomen erzeugen kann, wenn man die Elektronen mit zirkular polarisierter Strahlung anregt [87, 88]. Hierbei kommt es zur selektiven Anregung der Elektronen aus Niveaus, die durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgespalten sind. Aber auch die Anregung mit linear polarisiertem oder unpolarisiertem Licht führt zur Emission von

Roth *et al.* [91, 92] beobachtete in der Spinpolarisation von Cu3p-Photoelektronen angeregt mit linear polarisierter Strahlung in Cu(001) eine Modulation in der Energie- bzw. Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation. Abb.6.1 zeigt die experimentellen Daten von Roth für die Spinpolarisation der spin-bahn-aufgespaltenen Komponenten Cu3p_{1/2} und Cu3p_{3/2} in Abhängigkeit von der Photonenenergie. Die Modulationen in der Spinpolari-

sation konnten im Rahmen eines atomaren Modells von Roth nicht erklärt werden (Strich-Punkt-Linien in Abb.6.1).

In der betrachteten Geometrie (Abb.6.2) sollte sich die Intensitätsdifferenz in (6.1) $\Delta I^{(\sigma)} = (I^\sigma - I^{-\sigma})$ für $p_{1/2}$ - bzw. $p_{3/2}$ -Elektronen im atomaren Bild wie

$$\Delta I_{at}^{(\sigma)} \propto \pm |R_s| |R_d| \sin(\delta_s - \delta_d) \sin 2(\theta_k + \theta_q) \quad (6.2)$$

verhalten. R_s , R_d und δ_s , δ_d sind das radiale Matrixelement bzw. die Streuphase für die angeregte s - bzw. d -Welle. Die Intensitätsdifferenz $\Delta I^{(\sigma)}$ unterscheidet sich für $p_{1/2}$ - und $p_{3/2}$ -Elektronen nur im Vorzeichen, für die normierte Spinpolarisation (6.1) folgt $S(p_{1/2}) = -3/2 S(p_{3/2})$.

Schon durch Einfachstreurechnungen konnte gezeigt werden, daß die Modulationen in der Energie- und Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation der Cu3p-Photoelektronen eindeutig durch die Streuung der Elektronen im Festkörper entstehen [CH-5, CH-7]. Für die Spinpolarisation der Cu3p-Photoelektronen in Cu(001) wurde eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten von Roth [91, 92] erreicht.

Darüber hinaus wurden auch allgemeine Gesichtspunkte der Spinpolarisation im Rahmen der hier vorgestellten Theorie diskutiert [CH-5, CH-9]. Für die Spinpolarisation

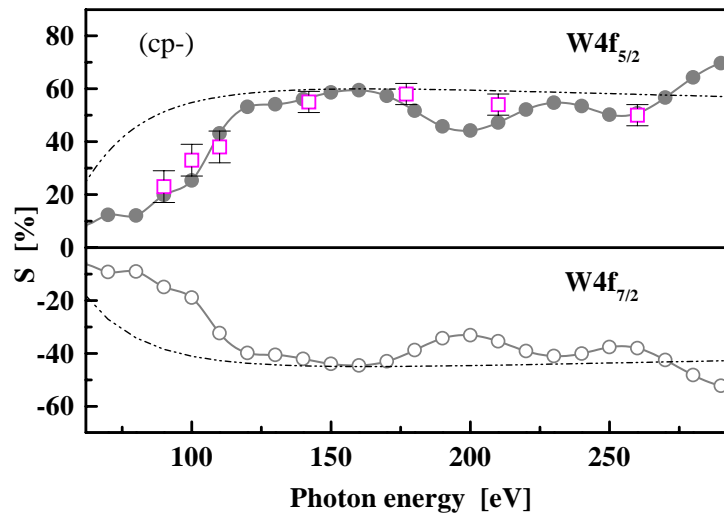


Abb. 6.3: Berechnete Spinpolarisation für W4f in W(110) angeregt mit Licht negativer Helizität (cp-) in Abhängigkeit von der Photonenenergie. Experimentelle Daten (\square) aus [93]: $\mathbf{e}_S \parallel \mathbf{q}$, $\theta_q = 65^\circ$, $\theta_k = 25^\circ$, $\phi_q = \phi_k \parallel [-110]$.

on bei Anregung mit linear polarisierter Strahlung ist offensichtlich die Interferenz der angeregten Partialwellen mit $l = l_c \pm 1$ entscheidend. Das Vorzeichen wird von der Differenz der Phasen ($\delta_{l_c-1} - \delta_{l_c+1}$) bestimmt. Der Einfluß der Photoelektronenbeugung wird mit wachsender kinetischer Energie der Elektronen größer. Allerdings nimmt die Spinpolarisation insgesamt mit der Energie ab.

Ähnliche Modulationen wie für Cu3p-Photoelektronen in Cu(001) wurden von Starke *et al.* [93] in der Energieabhängigkeit der Spinpolarisation für W4f_{5/2}- und W4f_{7/2}-Photoelektronen in W(110) beobachtet, wobei die Rumpfstände mit zirkular polarisierter Strahlung negativer bzw. positiver Helizität angeregt wurden. Die experimentelle Geometrie für die Messung der Spinpolarisation in W(110) wurde so gewählt, daß die Spinquantisierungsachse \mathbf{e}_S in der Ein-

fallsebene parallel zum Lichteinfall \mathbf{q} liegt und die Elektronenemission in Richtung \mathbf{k} senkrecht zu \mathbf{q} erfolgt. In dieser Anordnung würde man für linear polarisiertes Licht keine Spinpolarisation beobachten [CH-9].

Die in [93] gezeigten Rechnungen (Rehr-Albers-Formalismus) gaben erst mit Einführung einer leichten Verkippung der Probe eine befriedigende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Eine solche Verkippung kann hier nicht bestätigt werden. Modellrechnungen wurden für einen W(110)-Cluster mit 42 Atomen unter Annahme einer idealen Volumenstruktur ausgeführt. Die inelastische mittlere freie Weglänge wurde energieabhängig berücksichtigt [68].

Wie in Abb.6.3 dargestellt, werden die experimentellen Ergebnisse für $W4f_{5/2}$ (\square) sehr gut durch die Modellrechnung beschrieben. Im Unterschied zu den Rechnungen von Starke [93] wurden die radialen Matrixelemente und Streuphasen aus einer Muffin-Tin-Rechnung genommen und nicht, wie bei Starke, aus atomaren Tabellen.

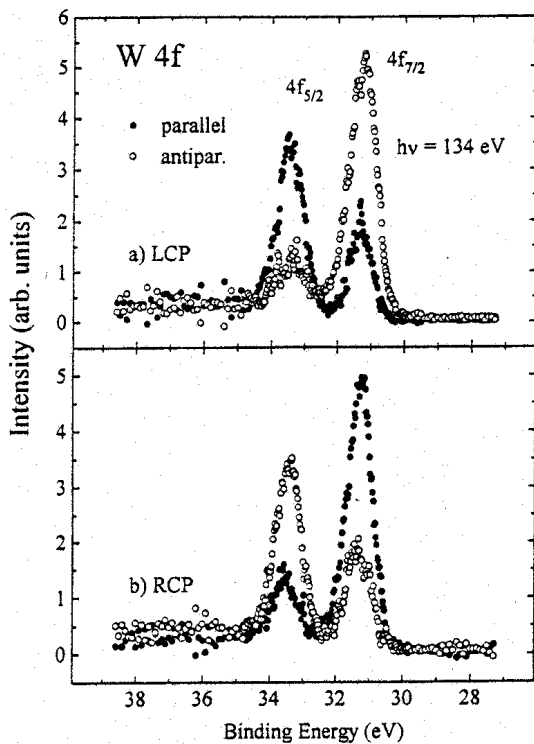


Abb. 6.4: Spinaufgelöste $W4f$ -Spektren ange-regt mit zirkular polarisiertem Licht negativer (LCP) und positiver Helizität (RCP). ($e_s \parallel \mathbf{q}$) [93].

man nur zwei Rumpfniveaueaks mit deutlich unterschiedlicher Spinpolarisation braucht, die energetisch aufgelöst sein müssen. Trotz der Einfachheit gibt es bis heute nur wenige Experimente, die die Möglichkeit einer internen spinpolarisierten Elektronenquelle zur Untersuchung der lokalen magnetischen Struktur im Festkörper betrachtet haben. Sinko-

Die beiden spin-bahn-aufgespaltenen Kom-ponenten im $W4f$ -Rumpfniveauspektrum zeigen im Experiment eine hohe Spinpolarisation mit gegensätzlichem Vorzeichen bezüglich der Spinquantisierungsrichtung (Abb.6.4). Bei einer Photonenenergie von 134 eV beträgt die Spinpolarisation der $f_{5/2}$ -Linie $\pm 55\%$ und $\mp 40\%$ die der $f_{7/2}$ -Linie, wobei die Vorzeichen von der Helizität des Lichtes abhängen [93]. Diese Werte stimmen sehr gut mit den berechneten Werten überein (Abb.6.3). Die Spinpolarisation zeigt hier das erwartete Verhalten, nämlich $S(f_{5/2}) = -1.33 S(f_{7/2})$, das man auch aus der atomaren Rechnung erhält.

Am $W4f$ -Rumpfniveau wird deutlich, daß die Spinpolarisation aus Rumpfniveaus auch noch interessant in Hinblick auf interne Quellen spinpolarisierter Elektronen für die Photoelektronenbeugung sein kann. Die Durchführung des Experiments erscheint einfach, da

vić *et al.* [48] nutzte die Emission spinpolarisierter Photoelektronen aus energetisch getrennten Peaks infolge der Multiplettaufspaltung eines Rumpfniveaus. Er zeigte, daß man mit solchen Elektronen die lokale magnetische Ordnung um einen Emitter im Festkörper untersuchen kann [48].

7 Zirkularer Dichroismus und Peakrotation

Der zirkulare Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen (CDAD) aus einem Festkörper, definiert durch

$$CDAD(\mathbf{k}) = \frac{I(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}_c) - I(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}_c^*)}{I(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}_c) + I(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}_c^*)} \times 100\%, \quad (7.1)$$

wurde zuerst von Daimon *et al.* [94] für Si2p-Photoelektronen beobachtet, die in einem Si(001)-Einkristall angeregt wurden. Hierbei wurde zirkular polarisiertes Licht positiver (cp+) bzw. negativer (cp-) Helizität senkrecht auf die Si(001)-Oberfläche eingestrahlt und die Intensität der Photoelektronen für alle Raumrichtungen gemessen (Abb.7.1).

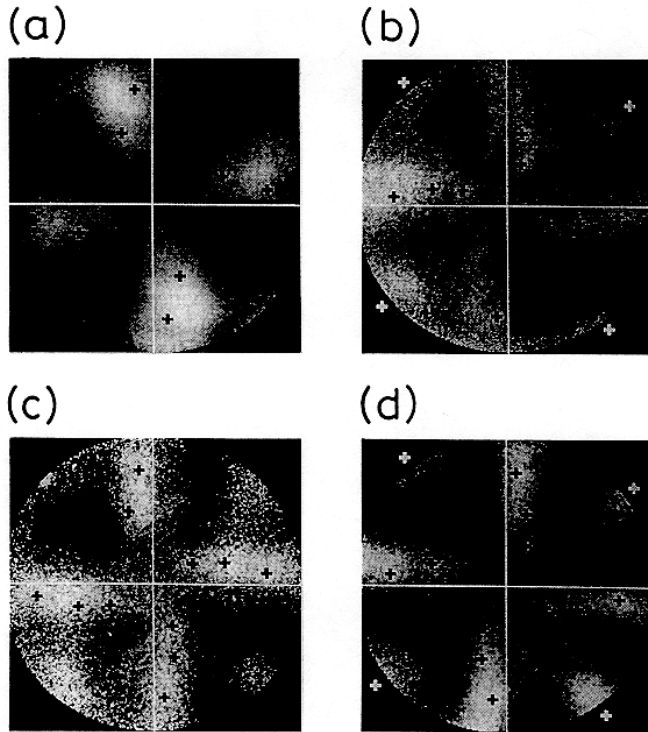


Abb. 7.1: Intensität der Si2p-Photoelektronen aus Si(001) für verschiedene Energien und Polarisationen: (a) 150eV,cp+, (b) 450eV,cp-, (c) 250eV,cp+, (d) 250eV,cp-. Daimon [94]

Beobachtet wurde eine azimutale Verschiebung der Lage der Intensitätsmaxima entlang Richtungen in Vorwärtstreuung, wie man sie im Fall unpolarisierter Strahlung beobachten würde. Die Verschiebung der Peaklagen ist für Licht mit positiver und negativer Helizität gerade entgegengesetzt. In Abb.7.1 erkennt man deutlich die Abweichung der Peaklagen (kleines Kreuz) von den erwarteten FS-Richtungen, die entlang der hellen Linien liegen müßten. Die aktuellen Peaklagen hängen von der kinetischen Energie der Elektronen (Abb.7.1(a) und (c)) und der Helizität des Lichtes (Abb. 7.1(c) und (d)) ab.

Diese Verschiebung der Peaklagen, auch als Peakrotation bezeichnet, wird verursacht durch die Streuung der Elektronen im Festkörper und ist Ursache für den beobachteten zirkularen Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen [94–96].

Die Peakrotation wurde von Daimon in einem semi-klassischen Bild erklärt. Die von ihm abgeleitete Formel für die azimutale Verschiebung $\Delta\phi$ der Peaklagen

$$\Delta\phi = \frac{m}{kR \sin^2 \theta} \quad (7.2)$$

folgt aber unmittelbar aus dem Modell der Photoelektronenbeugung. Die quantenmechanische Herleitung der Formel (7.2) wurde im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt. Man findet die ausführliche Ableitung und Anwendung der Formel (7.2) in [CH-6] bzw. [CH-7].

In der Herleitung von (7.2) wird ausgenutzt, daß bei Anregung mit zirkular polarisiertem Licht auf Grund der Dipolwahlregeln im Endzustand der Photoelektronen eine Partialwelle (l, m) dominiert. Das Vorzeichen von m ändert sich mit der Helizität

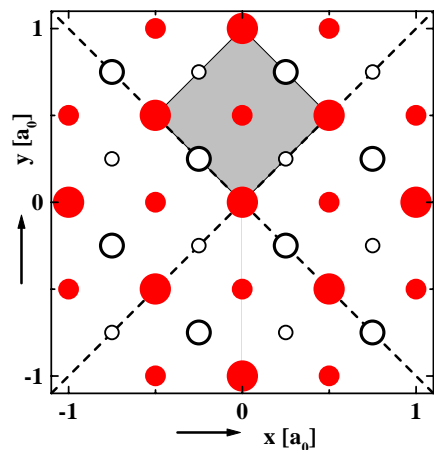


Abb. 7.2: Ideale Si(001)-Oberfläche in Draufsicht (große gefüllte Kreise) mit Spiegelebenen bei $\phi_0 = 45^\circ$ und $\phi_0 = 135^\circ$. Die Atome in tieferen Schichten sind durch kleinere Symbole dargestellt.

die beiden Spiegelebenen bei $\phi_0 = 45^\circ$ und $\phi_0 = 135^\circ$.

Die Symmetrie der Si(001)-Oberfläche überträgt sich auf die Intensität der Photoelektronen [ch16], wobei für elliptisch polarisiertes Licht die Symmetrierelation

$$I(\theta, \phi_0 + \phi; \vec{\epsilon}(\alpha, \zeta)) = I(\theta, \phi_0 - \phi; \vec{\epsilon}^*(\pi/2 - \alpha, \zeta)) \quad (7.3)$$

folgt. Für zirkular polarisiertes Licht ($\alpha = \pi/4$, $\zeta = \pm\pi/2$) oder lineares Licht ($\zeta = 0^\circ$, $\alpha = 0^\circ$ oder $\pi/2$) folgen daraus die Relationen

$$I(\theta, \phi_0 + \phi; \vec{\epsilon}_c) = I(\theta, \phi_0 - \phi; \vec{\epsilon}_c^*) \quad \text{und} \quad I(\theta, \phi_0 + \phi; \mathbf{e}_1) = I(\theta, \phi_0 - \phi; \mathbf{e}_2). \quad (7.4)$$

Diese Symmetriebetrachtungen gelten nur unter idealen Bedingungen, so daß jede Abweichung Rückschlüsse auf die realen experimentellen Bedingungen erlauben sollte [ch16].

Kürzlich wurde von Oelsner *et al.* [98] gezeigt, daß man den CDAD gemessen im UV-Bereich ($h\nu = 24$ eV) zur Untersuchung der optischen Konstanten eines Festkörpers heranziehen kann. Fällt das Licht nicht senkrecht auf die Festkörperoberfläche muß die Änderung des Polarisationsvektors des Lichtes in die Theorie mit einbezogen werden.⁴

⁴Aktuelles DFG-Projekt CH-162/3-2

8 Symmetriebrechung durch ein Magnetfeld

Die Symmetrie des Festkörpers wird auf die Intensität der Photoelektronen und damit auch auf die Spinpolarisation und den Dichroismus übertragen. Hat die Oberfläche des Festkörpers bei ϕ_0 eine Spiegelebene, so gilt für die spinaufgelöste Intensität I^σ der Photoelektronen (4.16) [CH-8, ch15]

$$I^\sigma(\theta, \phi_0 + \phi, \vec{\epsilon}_c) = I^{-\sigma}(\theta, \phi_0 - \phi, \vec{\epsilon}_c^*) \quad (8.1)$$

und ebenso für die Gesamtintensität $I = (I^\sigma + I^{-\sigma})$ der Photoelektronen

$$I(\theta, \phi_0 + \phi, \vec{\epsilon}_c) = I(\theta, \phi_0 - \phi, \vec{\epsilon}_c^*). \quad (8.2)$$

Damit erhält man für die Spinpolarisation (6.1)

$$S(\theta, \phi_0 + \phi, \vec{\epsilon}_c) = -S(\theta, \phi_0 - \phi, \vec{\epsilon}_c^*). \quad (8.3)$$

Für den zirkularen Dichroismus in der Winkelverteilung der Elektronen (7.1) ergibt sich

$$CDAD(\theta, \phi_0 + \phi) = -CDAD(\theta, \phi_0 - \phi). \quad (8.4)$$

In magnetischen Systemen ist die Symmetrierelation (8.1) nicht mehr gültig, da durch das magnetische Moment der Atome Elektronen mit Spin-auf und Spin-ab unterschiedlich gestreut werden. Man kann eine Größe definieren, die diese Symmetriebrechung durch das magnetische Moment der Atome beschreibt [CH-8]:

$$SB(\theta, \phi) = \frac{I(\theta, \phi_0 + \phi, \vec{\epsilon}_c) - I(\theta, \phi_0 - \phi, \vec{\epsilon}_c^*)}{I(\theta, \phi_0 + \phi, \vec{\epsilon}_c) + I(\theta, \phi_0 - \phi, \vec{\epsilon}_c^*)} \times 100\%. \quad (8.5)$$

Die Größe der Symmetriebrechung (8.5) ist direkt proportional zur Größe des magnetischen Moments der Atome. In Modellrechnungen für eine Monolage Fe auf W(110) wurde gezeigt, daß diese Größe durchaus meßbar ist [CH-8]. Hierzu wurde die Winkelverteilung der W4f-Photoelektronen in einem Cluster aus Fe- und W-Atomen berechnet. Durch die Streuung der angeregten W4f-Photoelektronen an den magnetischen Fe-Atomen entsteht eine durch das magnetische Moment der Fe-Atome induzierte Symmetriebrechung im CDAD der Photoelektronen. Diese Symmetriebrechung wird allerdings noch durch die Streubeiträge im nichtmagnetischen W-Substrat geschwächt. Gelingt es, im Rumpfniveauspektrum der W4f-Elektronen den Grenzflächenbeitrag von dem des Volumens zu separieren, kann die Empfindlichkeit wesentlich erhöht werden. Eine solche Energieverschiebung (ICLS=interface core-level shift) in der Bindungsenergie der W4f-Rumpfelektronen in Fe/W(110) ist gut bekannt und im Experiment zugänglich [99].

9 Magnetischer Dichroismus in Co- und Fe-Schichten

Im Rumpfniveauspektrum der Fe2p-Photoelektronen in Fe(001) beobachtete Baumgarten *et al.* 1990 zum ersten Mal eine Abhängigkeit der Austauschaufspaltung in einem Rumpfniveau von der relativen Orientierung des Spins der Photonen und der Magnetisierung der Probe (parallel oder antiparallel) [100].

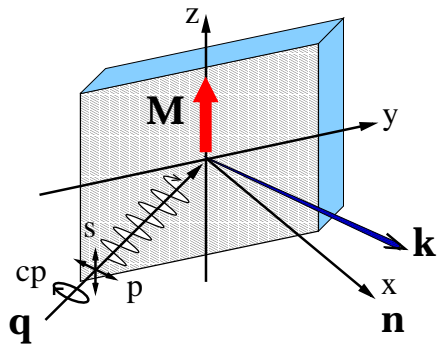


Abb. 9.1: Experimentelle Anordnung für die Messung des MDAD in der Photoemission.

Die Änderung der relativen Intensität der Rumpfniveaulinien in einer magnetischen Probe bei Umkehrung der Helizität der zirkular polarisierten Strahlung oder der Magnetisierung bezeichnet man als MCDAD. Die Beobachtung von Baumgarten löste eine Flut von Untersuchungen des MDAD mit zirkular polarisierter Strahlung aus [101]. Bei geeigneter Geometrie kann man den MDAD auch mit linear polarisierter Strahlung beobachten. Diesen Dichroismus, den man MLDAD nennt, wurde zuerst von Roth *et al.* 1993 in der Untersuchung von Fe3p-Rumpfelektronen in dünnen Fe-Schichten beobachtet [102].

Hillebrecht *et al.* [103] zeigte, daß ein MDAD auch bei Anwendung unpolarisierter Strahlung (MUDAD) existiert. Im Gegensatz zum MCDAD können MLDAD und MUDAD nur durch die Umkehrung der Magnetisierungsrichtung beobachtet werden.

In den meisten theoretischen Arbeiten zum MDAD wird der Einfluß der Photoelektronenbeugung vernachlässigt. Es gibt jedoch eine Reihe experimenteller Arbeiten, wo starke Modulationen im MDAD beobachtet werden, die durch die Streuung der Elektronen im Festkörper entstehen [104, 105, 53]. In diesem Zusammenhang entstand die Frage, inwieweit man im Rahmen einer nicht-relativistischen Einteilchentheorie unter Berücksichtigung der Vielfachstreuung der Photoelektronen im Festkörper die beobachteten Modulationen erklären kann. Hierzu wurde die in dieser Arbeit vorgestellte Theorie der PED in Untersuchungen des MDAD für verschiedene Systeme herangezogen [CH-9, ch17].

Durch ein äußeres Magnetfeld (Magnetisierung \mathbf{M}) wird die Entartung bzgl. der Quantenzahl μ_c im spin-bahn-aufgespaltenen Anfangszustand der Elektronen (4.4) aufgehoben. Durch die Austauschwechselwirkung der Rumpfniveaus mit dem Spin des Valenzbandes spalten die μ_c -Zustände energetisch auf, wobei die Position von der Richtung der Magnetisierung abhängt. Wird die Richtung der Magnetisierung umgekehrt, so werden nur die energetischen Positionen von $+\mu_c$ und $-\mu_c$ bezogen auf eine äußere Richtung ausgetauscht (Abb.9.2). Die Intensität der Photoelektronen (4.16) aus einem Rumpfniveau (j_c, l_c) kann für jede Komponente μ_c einzeln berechnet werden, so daß man für ein vorgegebenes Rumpfniveau die spinaufgelöste Intensität I_{j_c, μ_c}^σ bzw. die Gesamtintensität $I_{j_c, \mu_c} = (I_{j_c, \mu_c}^\sigma + I_{j_c, \mu_c}^{-\sigma})$

in Abhängigkeit von μ_c erhält. Zur Vereinfachung wird l_c nicht mehr explizit aufgeführt, da in den folgenden Abschnitten nur die Emission aus p-Zuständen betrachtet wird.

In diesem Bild kann der magnetische Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen der durch die Umkehrung der Magnetisierungsrichtung entsteht, d.h. die Differenz $\Delta I^{(M)}$ in den Intensitäten für $\pm M$ bei Anregung aus einem Rumpfniveau durch die entsprechende Differenz der Intensitäten $I_{j_c, \pm \mu_c}$ ausgedrückt werden [CH-9]:

$$\Delta I^{(M)} = I_{j_c, \mu_c}(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}) - I_{j_c, -\mu_c}(\mathbf{k}, \vec{\epsilon}). \quad (9.1)$$

Damit läßt sich der Einfluß der Photoelektronenbeugung auf den MDAD für zirkulares, lineares oder auch unpolarisiertes Licht diskutieren.

Die Klassifizierung nach den μ_c für ein gegebenes Rumpfniveau (j_c, l_c) (s. auch Abb.9.2) ist gerechtfertigt, wenn die Austauschaufspaltung Δ_{ex} im Vergleich zur Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_{so} klein ist wie z.B. für 2p-Rumpfelektronen der itineranten Ferro-

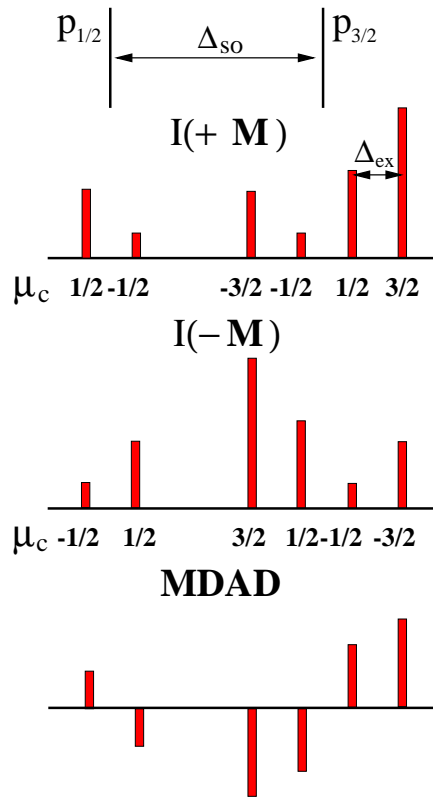


Abb. 9.2: Lage der Komponenten (j_c, μ_c) eines p-Rumpfniveaus in Abhängigkeit von der Richtung der Magnetisierung M .

magneten Fe und Co. Für 3p-Rumpfelektronen in Fe und Co sind Δ_{ex} und Δ_{so} von gleicher Größenordnung, so daß die Zustände $j_c = 3/2$ und $j_c = 1/2$ nicht mehr energetisch getrennt auftreten. Es kommt zu einer Mischung der beiden Zustände mit gleichem $\mu_c = \pm 1/2$. Die Zustände mit $\mu_c = \pm 3/2$ bleiben hierbei jedoch erhalten [49, 62].

Im Rahmen dieser Näherungen wurde der Einfluß von PED-Effekten auf den MDAD in dünnen Fe- und Co-Schichten untersucht. In verschiedenen Messungen waren Modulationen in der Intensität und damit auch im MDAD beobachtet worden, die sich nur unter Berücksichtigung der Streuung der Elektronen im Festkörper erklären lassen. Im Vergleich mit dem Experiment ist zu beachten, wie der MDAD genau bestimmt wird, d.h. aus der Differenz der Peakflächen der Rumpfniveauspektren, die für $\pm M$ gemessen werden, oder aus der Differenz der maximalen und minimalen Peakhöhe im Differenzspektrum der für $\pm M$ gemessenen Rumpfniveauspektren.

Die Winkelabhängigkeit der Intensität und des MDAD für Co2p-Photoelektronen angeregt mit unpolarisierter MgK α -Strahlung in einer geordneten Co-Schicht (5 Monolagen) auf einer Cu(001)-Oberfläche wurde von Kuch und Mitarbeitern gemessen [CH-9].

Die Probe wurde hierbei um die Richtung der Magnetisierung gedreht, die in der Oberfläche parallel zur $[100]$ -Richtung liegt und senkrecht auf der von \mathbf{q} und \mathbf{k} aufgespannten Ebene steht (Abb.9.1). Da der Winkel zwischen der Richtung des Lichteinfalls und der Photoelektronenemission bei der Probendrehung um \mathbf{M} nicht geändert wird, würde man im atomaren Modell einen vom Drehwinkel unabhängigen MDAD erhalten. Die Rechnungen zeigen, daß die im Experiment gemessene Winkelabhängigkeit des MDAD durch die Streuung der Elektronen in der Co-Schicht verursacht werden. Sowohl die Winkelabhängigkeit der Intensität als auch des MDAD im Experiment werden durch die Theorie sehr gut beschrieben [CH-9].

In Abb.9.3 sind die experimentellen und theoretischen Ergebnisse für den MLDAD im System fcc-Co/Cu(001) und im System bcc-Fe/W(110) dargestellt. Sowohl Co als auch Fe

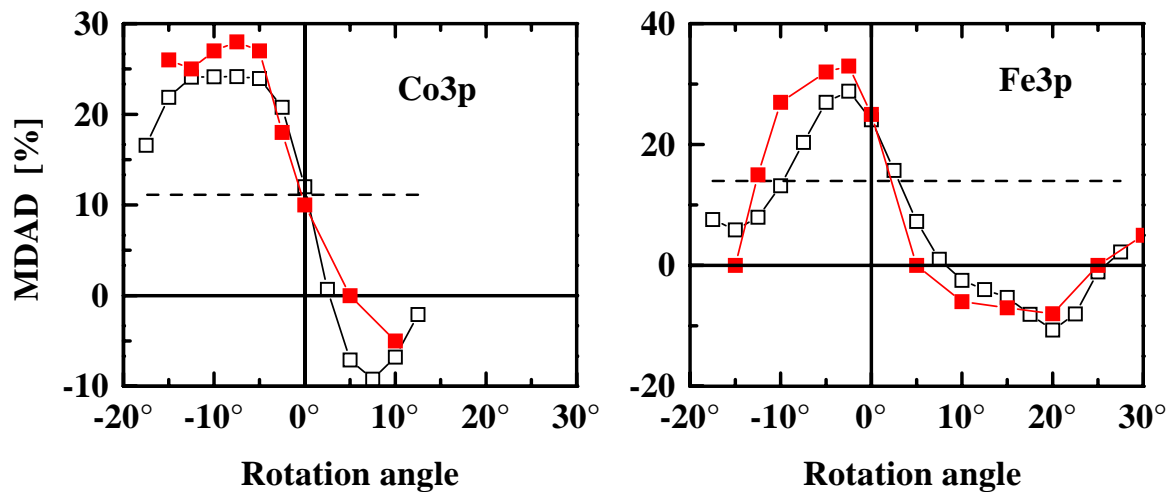


Abb. 9.3: MDAD für Co3p- und Fe3p-Photoelektronen angeregt mit linear polarisierter Strahlung. Die Probe wird um \mathbf{M} gedreht, wobei \mathbf{M} in der Probenoberfläche liegt und senkrecht zur Ebene (\mathbf{k}, \mathbf{q}) -Ebene. Experiment (■), Theorie (□).

bilden geordnete Schichten auf Cu(001) bzw. W(110). Co wächst auf Cu(001) in der bei Raumtemperatur metastabilen fcc-Phase pseudomorph auf und nimmt parallel zur Oberfläche die Gitterkonstante von Cu(001) (3.61\AA) an [106]. Die leichte Magnetisierungsachse liegt für fcc-Co/Cu(001) parallel zur $[110]$ -Richtung, die für Substrat und Film parallel ist. Fe wächst auf der W(110)-Oberfläche in den ersten drei Monolagen pseudomorph auf [107]. Ab der dritten Monolage wird langsam die Gitterkonstante von Fe (2.86\AA) angenommen. Die leichte Magnetisierungsrichtung liegt bei einer Schichtdicke ≥ 10 ML entlang der $[100]$ -Richtung in der Oberfläche.

Im Experiment [106] wurden 3p-Photoelektronen in Co bzw. Fe mit linear polarisierter Strahlung der Energie 130 eV angeregt. Die Proben wurden jeweils um die Richtung der Magnetisierung gedreht, die in der Probenoberfläche und senkrecht zur Einfallsebene des Lichtes liegt. Das Licht fällt unter einem Winkel von 73° zur Probennormale ein.

Die Emission der Photoelektronen wurde senkrecht zur Probenoberfläche aufgezeichnet. Der magnetische Dichroismus wurde im Experiment aus der Differenz der maximalen und minimalen Peakhöhe des Differenzspektrums der für $+\mathbf{M}$ und $-\mathbf{M}$ gemessenen 3p-Rumpfniveaus bestimmt. In diesem Fall kann man den MLDAD aus der Differenz der Intensitäten ($I_{3/2,3/2} - I_{3/2,-3/2}$) berechnen [60].

Die gestrichelten Linien in Abb.9.3 sind das Ergebnis für den Beitrag der direkten Welle zum MLDAD, der in der gewählten Geometrie keine Winkelabhängigkeit zeigt. Die Streuung der Elektronen in der Co- bzw. Fe-Schicht führt zu erheblichen Abweichungen vom atomaren Verhalten. Berechnet wurden Vielfachstreuungseffekte (bis zur 3.Ordnung) in Atomclustern mit 50 Atomen für Co bzw. 42 Atomen für Fe. Die Gitterkonstanten waren 3.5\AA bzw. 3.0\AA . Für Fe zeigten die Rechnungen mit der Fe-Gitterkonstante von 2.86\AA keine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Die Modulationen im MLDAD für Co3p- und Fe3p-Rumpfelektronen in Abb.9.3 unterscheiden sich deutlich. Dies resultiert zum einen aus der unterschiedlichen lokalen Umgebung der Emitteratome in der Co- bzw. Fe-Schicht und zum anderen aus der Differenz in der kinetischen Energie der Elektronen von ca. 6 eV. Beide Faktoren beeinflussen das Ergebnis der Streuung der Elektronen im Festkörper. Die Rechnungen geben für die Anregung der Co3p- bzw. Fe3p-Elektronen den experimentellen Verlauf des MLDAD sehr gut wieder. In der absoluten Größe ist der Dichroismus im Experiment kleiner als in der Theorie, so daß die theoretischen Ergebnisse in Abb.9.3 für den Vergleich mit einem konstanten Faktor skaliert wurden.

Untersucht man die Spinpolarisation der p-Elektronen in den Co- oder Fe-Schichten findet man, daß die Winkelabhängigkeit sich nur um einen konstanten Faktor von der des MDAD unterscheidet [CH-9]. Für das $p_{3/2}$ bzw. $p_{1/2}$ -Niveau lassen sich die folgenden Beziehungen für die spinaufgelöste Intensität $I_j^\sigma = \sum_\mu I_{j,\mu}^\sigma$ aus der Analyse der Dipolmatrixelemente ableiten:

$$I_{3/2}^\uparrow - I_{3/2}^\downarrow = \frac{2}{3} \left(I_{3/2,3/2} - I_{3/2,-3/2} \right) \quad \text{und} \quad I_{1/2}^\uparrow - I_{1/2}^\downarrow = - \left(I_{3/2}^\uparrow - I_{3/2}^\downarrow \right) \quad (9.2)$$

Diese Relationen gelten unter der Voraussetzung, daß die Energiedifferenz der Spin-Bahn-Aufspaltung sehr viel kleiner ist als die kinetische Energie der Photoelektronen und der Einfluß der magnetischen Streuung in der Probe klein ist [CH-9].

10 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit gibt eine geschlossene Darstellung über die Theorie der Photoelektronenbeugung im Rahmen einer nicht-relativistischen Einteilchentheorie. Anregung und Vielfachstreuung der Elektronen treten hierbei separat auf.

Die ausgewählten Beiträge zur Strukturanalyse zeigen, daß die hier vorgestellte Theorie der Photoelektronenbeugung eine Strukturbestimmung mit hoher Genauigkeit auch an komplexen Systemen erlaubt.

Erstmals wurde die Photoelektronenbeugung bei niedrigen Energien systematisch zur Strukturanalyse an adsorbatbedeckten III-V(110)-Halbleiteroberflächen eingesetzt. Der Vorteil der Methode PED gegenüber anderen Oberflächenmethoden liegt darin, daß Oberflächenatome des gleichen Elements hinsichtlich ihrer lokalen Struktur getrennt untersucht werden können. An Grenzflächen kann durch den Einsatz von PED der Austausch von Adsorbat- und Substratatomten aus der Winkelabhängigkeit der Photoelektronen bestimmt werden.

Der Vorteil der Methode PED liegt auch in der Vielzahl der Parameter, die im Experiment variiert werden können. So lassen sich die Abhängigkeit vom Polarwinkel oder/und Azimutwinkel der Austrittsrichtung der Photoelektronen bestimmen oder die Energieabhängigkeit der Photoelektronen bei variabler Photonenenergie. Des weiteren kann die Polarisierung und die Einfallrichtung der anregenden Strahlung variiert werden. Zusätzlich kann der Spin der Photoelektronen in die Untersuchungen einbezogen werden.

Die Berechnung der Vielfachstreuung von Kugelwellen wird bei Energien von mehreren 100 eV numerisch sehr aufwendig, da sich mit der Energie die Anzahl der Streuer und Partialwellen im Cluster erhöht. Mit der reduzierten Drehimpulsentwicklung von Kugelwellen (RAME, Taylor-Reihen-Entwicklung, Rehr-Albers-Formalismus) kann man eine sehr viel höhere Rechengeschwindigkeit erreichen ohne die Nachteile einer Ebene-Wellen-Näherung in Kauf nehmen zu müssen. Im Clustermodell bleibt bei der Analyse der Daten der lokale Charakter der Methode PED erhalten. Damit lassen sich gezielt die verschiedenen Streubeiträge aus der Umgebung des Emitters analysieren.

Eine wichtige Erweiterung der Theorie der Photoelektronenbeugung stellt die Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung im Anfangszustand der Elektronen dar. Damit werden Untersuchungen zur Spinpolarisation und zum magnetischen Dichroismus in der Winkelverteilung der Photoelektronen möglich, ohne den Aufwand einer voll-relativistischen Theorie betreiben zu müssen. Insbesondere lassen sich im Vergleich zum atomaren Modell Modulationen in der Spinpolarisation und im Dichroismus in der Photoemission aus Rumpfständen diskutieren. Die Modulationen in der Energie- und Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation von Cu3p-Photoelektronen aus einem Cu-Einkristall

konnten mit der hier vorgestellten Theorie sowohl qualitativ als auch quantitativ erklärt werden.

Mit der Definition der Symmetriebrechung im CDAD, induziert durch das magnetische Moment der Atome, konnte eine wichtige Größe eingeführt werden, die eng mit den magnetischen Eigenschaften der Probe korreliert ist. Es gibt erste Überlegungen zur Messung am System Fe/W(110) von Prof. H. Daimon in Japan.

In der Diskussion der magnetischen Eigenschaften einer Probe kann die Methode PED auf verschiedene Weise beitragen. Die magnetischen Eigenschaften an Oberflächen und Grenzflächen werden immer auch durch die Struktur bestimmt. Hier stellt PED eine effektive und genaue Methode zur Bestimmung der Strukturparameter dar. Insbesondere für Untersuchungen der Struktur dünner Schichten oder von Clustern auf Oberflächen kann diese Methode eingesetzt werden. Durch spinabhängige Streuphasen können Unterschiede in der Streuung an einer lokalen magnetische Umgebung für Elektronen mit Spin-auf und Spin-ab entstehen, die wiederum Rückschlüsse auf die magnetischen und geometrischen Eigenschaften der Probe zulassen. Des weiteren scheint der Einsatz innerer spinpolarisierter Elektronenquellen zur Untersuchung der lokalen magnetischen Ordnung einfach realisierbar. Die theoretischen Grundlagen für eine entsprechende Auswertung sind vorhanden.

Die PED-Theorie in Verbindung mit einer Einteilchentheorie des Ferromagnetismus erlaubt die Diskussion des Einflusses der Vielfachstreuung auf den magnetischen Dichroismus in der Photoemission. Für angeregte p-Elektronen in Fe- und Co-Schichten konnten die experimentellen Ergebnisse sehr gut erklärt werden. Die Grenze der Methode liegt hier in der Beschränkung auf eine Einteilchentheorie des Ferromagnetismus, die nicht auf magnetische Systeme mit vorherrschenden Vielteilcheneffekten anwendbar ist. Eine Einbeziehung der Multiplettstruktur der Rumpfstände in die Theorie wird angestrebt.

Das Konzept der Vielfachstreuung in einem Cluster wurde auch auf andere Methoden übertragen. Bei der Anregung von Augerelektronen entstehen ebenfalls Modulationen in der Intensität, die aus der Streuung der Elektronen an der Emitterumgebung entstehen und durch einen Streupfadoperator B_L beschrieben werden können. Auch bei EXAFS, wo der Absorptionskoeffizient der Röntgenstrahlung durch die Rückwärts- und Vielfachstreuung der Elektronen beeinflusst wird, kommt das Vielfachstreu-Cluster-Modell zum Einsatz.

In Zukunft sollen Effekte der Spin-Bahn-Kopplung auch im Endzustand der Photoelektronen berücksichtigt werden. Dazu muß davon abgegangen werden, den Spin als Erhaltungsgröße zu betrachten. Die durch die Spin-Bahn-Kopplung bewirkte Spinänderung durch den Streuprozess soll einbezogen werden. Erst für das auslaufende Elektron ist der Spin dann wieder als gute Quantenzahl anzusehen. Durch die Einbeziehung von magne-

tischer Streuung und von Spin-Flip-Prozessen in den Streupfadoperator sollten sich dann detaillierte Diskussionen über den Einfluß magnetischer Strukturen auf die Photoelektronenbeugung führen lassen, ohne den Aufwand einer voll-relativistischen Streutheorie betreiben zu müssen.

Die Beiträge in dieser Arbeit zeigen, daß die Methode PED auf vielfältige Weise zur Aufklärung der geometrischen, chemischen und magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers beitragen kann. Der Erfolg der Methode basiert einerseits auf der ständigen Erweiterung und Verbesserung der theoretischen Konzepte und andererseits auf der engen Wechselwirkung zwischen Experiment und Theorie.

11 Literatur

- [1] K. Siegbahn, U. Gelius, H. Siegbahn, and E.Olsen, Phys. Lett. 32A (1970) 221.
- [2] C.S. Fadley, Prog. Surf. Sci. 16 (1984) 275; Physica Scripta T17 (1987) 39, and references therein.
- [3] C.S. Fadley in *Synchrotron Radiation Research: Advances in Surface and Interface Science*, Vol.I, p.421, Ed. R.Z. Bachrach, Plenum Press, New York, 1992.
- [4] A.M. Bradshaw and D.P. Woodruff, in *Applications of Synchrotron Radiation: High-Resolution Studies of Molecules and Molecular Adsorbates on Surfaces*, Ed. W. Eberhardt, Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [5] W.F. Egelhoff, Jr., in *Ultrathin Magnetic Structure I: An Introduction to Electronic, Magnetic, and Structural Properties*, p. 220, Eds. J.A.C. Blanc and B. Heinrichs, Springer-Verlag Berlin, 1994.
- [6] S.A. Chambers, Adv. Phys. 40 (1991) 357; Surf. Sci. Rep. 16 (1992) 261, and references therein.
- [7] D.P. Woodruff and A.M. Bradshaw, Rep. Prog. Phys. 57 (1994) 1029, and references therein.
- [8] M. Sagurton, E.L. Bullock, and C.S.Fadley, Surf. Sci. 182 (1987) 287, and references therein.
- [9] S.Y. Tong and J.Tang, Phys. Rev. B 25 (1982) 6526.
- [10] J.J. Barton, C.C. Bahr, Z. Hussain, S.W. Robey, J.G. Tobin, L.E. Klebanoff, and D.A.Shirley, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 272; J.J. Barton, S.W. Robey, and D.A. Shirley, Phys. Rev. B34 (1986) 778.
- [11] P.J. Orders and C.S. Fadley, Phys. Rev. B 27 (1983) 781; E.L. Bullock, C.S. Fadley, and P.J. Orders, Phys. Rev. B 28 (1983) 4867).
- [12] M. Sagurton, E.L. Bullock, and C.S.Fadley, Phys. Rev. B 30 (1984) 7332.
- [13] Ph. Hofmann and K.M. Schindler, Phys. Rev. B 47 (1993) 13 941, Ph. Hofmann, K.-M. Schindler, S. Bao, A.M. Bradshaw, and D.P. Woodruff, Nature 368 (1994) 131.
- [14] J.J. Barton, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 1356.
- [15] C.S. Fadley, Prog. Surf. Sci. 54 (1997) 341, and references therein.
- [16] P.M. Len, J.D. Denlinger, E. Rotenberg, S.D. Kevan, B.P. Tonner, Y. Chen, M.A. Van Hove, and C.S. Fadley, Phys. Rev. B 59 (1999) 5857, and references therein.
- [17] S.Y. Tong, Surf. Sci. 433-435 (1999) 32.
- [18] H.P. Bonzel, Prog. Surf. Sci. 42 (1993) 219.
- [19] J. Osterwalder, P. Aebi, R. Fasel, D. Naumovic, P. Schwaller, T. Kreutz, L. Schlapbach, T. Abukawa, and S. Kono, Surf. Sci. 331-333 91995) 1002.

- [20] A. Liebsch, Phys. Rev. B 13 (1976) 544.
- [21] J.B. Pendry, J. Phys. C: Solid State Physics 8 (1975) 2413.
- [22] B.W. Holland, J. Phys. C: Solid State Physics 8 (1975) 2679.
- [23] S.Y. Tong, C.H. Li, and A.R. Lubinsky, Phys. Rev. Lett. 39 (1977) 498; C.H.Li, A.R.Lubinsky, S.Y.Tong, Phys. Rev. B 17 (1978) 3128.
- [24] H. Wu, C.Y. Ng, T.P. Chu, and S.Y. Tong, Phys. Rev. B 57 (1998) 15 476.
- [25] P. Rennert, phys. stat. sol. (b) 105 (1981) 213.
- [26] T. Fujikawa, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 2747.
- [27] J.J. Barton and D.A.Shirley, Phys. Rev. B 32 (1985) 1906.
- [28] D.K. Saldin, G.R. Harp, and X. Chen, Phys. Rev. B 48 (1993) 8234.
- [29] S. Kono, S.M. Goldberg, N.F.T. Hall, and C.S. Fadley, Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 1831.
- [30] M.-L. Xu and M.A. Van Hove, Surf. Sci. 207 (1989) 215; M.-L.Xu, J.J. Barton, and M.A. Van Hove, Phys. Rev. B 39 (1989) 8275.
- [31] W.F. Egelhoff, Jr., J. Vac. Sci. Technol. A5 (1987) 1684, Phys. Rev. Lett. 59 (1987) 559.
- [32] S.Y. Tong, H.C. Poon, D.R. Snider, Phys. Rev. B 32 (1985) 2096.
- [33] M. Sagurton, E.L. Bullock, R. Saiki, A. Kaduwela, C.R. Brundle, C.S. Fadley, and J.J.Rehr, Phys. Rev. B 33 (1986) 2207.
- [34] J. Mustre de Leon, J.J. Rehr, C.R. Natoli, C.S. Fadley, and J. Osterwalder, Phys. Rev B39 (1989) 5632.
- [35] H.C. Poon, D. Snider, and S.Y. Tong, Phys. Rev. B 33 (1986) 2198.
- [36] H. Daimon, H. Ito,S. Shin, and Y. Murata, J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 3488.
- [37] V. Fritzsche and P. Rennert, phys. stat. sol. (b) 142 (1987) 15.
- [38] J.J. Barton and D.A. Shirley, Phys. Rev. A32 (1985) 1019.
- [39] J.J. Barton and D.A. Shirley, Phys. Rev. B 32 (1985) 1892.
- [40] V. Fritzsche and P. Rennert, Acta Universitatis Wratislaviensis 937 (1986) 59; phys. stat. sol. (b) 135 (1986) 49.
- [41] V. Fritzsche, J.Phys.: Condens. Matter 2 (1990) 1413.
- [42] J. Rehr and R.C. Albers, Phys. Rev. B 41 (1990) 8139.
- [43] A.P. Kaduwela, D.J. Friedman, and C.S. Fadley, J. Electr. Spectr. 57 (1991) 223.
- [44] V. Fritzsche, phys. stat. sol. (b) 147 (1988) 485; V. Fritzsche, Surf. Sci. 213 (1989) 648.
- [45] V. Fritzsche, J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 58 (1992) 299.

- [46] St. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1995.
- [47] C.S. Fadley, M.A. Van Hove, Z. Hussain, and A.P. Kaduwela, *J. Electr. Spectr. Relat. Phenom.* 75 (1995) 273, and refernces therein.
- [48] B. Sinković, D.J. Friedman, and C.S. Fadley, *J. Magn. Magn. Mater.* 92 (1991) 301; B.D. Hermsmeier, C.S. Fadley, B. Sinković, M.O. Krause, J. Jimenez-Mier, P. Gerard, T.A. Carlon, S.T. Manson, and S.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 12 425, and references therein.
- [49] G. van der Laan, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 240.
- [50] N.A. Cherepkov and V.V. Kuznetsov, *J. Phys.: Condens. Matter* 8 (1996) 4971.
- [51] F.U. Hillebrecht, C. Roth, H.B. Rose, W.G. Park, E. Kisker, and N.A. Chrepkov, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 12 182.
- [52] J.G. Menchero, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 993.
- [53] F.U. Hillebrecht, H.B. Rose, T. Kinoshita, Y.U. Idzerda, G. van der Laan, R. Denecke, and L. Ley, *Phys. Rev. Lett* 75 (1995) 2883; R. Schellenberg, E. Kisker, A. Fanelisa, F.U. Hillebrecht, J.G. Menchero, A.P. Kaduwela, C.S. Fadley, and M.A. Van Hove, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 14 310, and references therein.
- [54] G. van der Laan, E. Arenholz, E. Navas, A. Bauer, and G. Kaindl, *Phys. Rev. B* 53 (1996) R5998.
- [55] J.G. Menchero, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 1001; *Phys. Rev. B* 55 (1997) 5505.
- [56] P. Weinberger, *Electron Scattering Theory for Ordered and Disordered Matter*, Clarendon press, Oxford, 1990.
- [57] H. Ebert, V. Popescu, and D. Ahlers, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 7156; T. Huhne and H. Ebert, *Sol. State Commun.* 109 (1999) 577.
- [58] A. Ankudinov and J.J. Rehr, *Phys. Rev. B* 56 (1997) R1712;
- [59] M. Fluchtmann, M. Grass, J. Braun, and G. Borstel, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 9564; M. Grass, J. Braun, and G. Borstel, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 14 827.
- [60] J. Henk, A.M.N. Niklasson, and B. Johansson, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 13 986.
- [61] A. Messiah, *Quantenmechanik*, Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1979.
- [62] J.G. Menchero, Thesis, LBNL Berkeley (USA), 1997.
- [63] P. Ziesche and G. Lehmann, *Ergebnisse der Elektronentheorie der Metalle*, Akademie-Verlag, Berlin, 1983.
- [64] M.A. Van Hove, W.H. Weinberg, and C.-M. Chan, *Low-Energy Electron Diffraction*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986
- [65] *Handbook of Mathematical Functions*, Ed. M. Abramowitz and I.A. Stegun, Dover Publications, Inc., New York, 1972.

- [66] C.S. Fadley in *Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications*, Vol.2, Ed. C.R. Brundle and A.D. Baker, Academic Press, London-New York- San Francisco, 1978.
- [67] C. Pirri, U. Kafader, G. Gewinner, and P. Wetzel, *Sol. State Commun.* 89 (1994) 313.
- [68] M.P. Seah and W.A. Dench, *Surf. Interf. Anal.* 1 (1979) 2.
- [69] J.M. Ziman, *Prinzipien der Festkörpertheorie*, Akademie-Verlag, Berlin, 1974.
- [70] P. Rennert, *J. Phys.: Condens. Matter* 4 (1992) 4315; O. Speder and P. Rennert, *Physica B* 208/209 (1995) 157.
- [71] T. Fujikawa, M. Yimagawa, and T. Miyanaga, *J. Phys. Soc. Jpn.* 64 (1995) 2047; T. Yanagawa and T. Fujikawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* 65 (1996) 1832.
- [72] V. Fritzsche, *Surf. Sci.* 269-270 (1992) 787; V. Fritzsche, O. Knauff, and H.P. Bonzel, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 10 643.
- [73] A.V. Poiarkova and J.J. Rehr, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 948; N. Van Hung and J.J. Rehr, *Phys. Rev. B* 56 (1997) 43.
- [74] J.B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction*, Academic Press, London and New York, 1974.
- [75] W. Mönch, *Semiconductor Surfaces and Interfaces*, Springer, Berlin, 1993.
- [76] C. Nowak, Thesis, Technische Universität Berlin, 1995.
- [77] M.A. Van Hove, S.Y. Tong, and M.H. Elconin, *Surf. Sci.* 64 (1977) 85.
- [78] R.S. Saiki, A.P. Kaduwela, M. Sagurton, J. Osterwalder, D.J. Friedman, C.S. Fadley, and C.R. Brundle, *Surf. Sci.* 282 (1993) 33; S.W. Robey, J.J. Barton, C.C. Bahr, G. Liu, and D.A. Shirley, *Phys. Rev. B* 35 (1987) 1108.
- [79] S.A. Chambers and V.A. Loebis, *Phys. Rev. Lett.* 63 (1989) 640.
- [80] L.Q. Wang, E.A. Schach von Wittenau, Z.G. Li, L.S. Wang, Z.Q. Huang, and D.A. Shirley, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 1292.
- [81] C.B. Duke, *Surface Properties of Electronic Materials*, Eds. D.A. King and D.P. Woodruff, Elsevier, New York, 1988.
- [82] C.B. Duke, R.J. Meyer, and P. Mark, *J. Vac. Sci. Technol.* 17 (1988) 971, and references therein.
- [83] J.P. LaFemina, *Surf. Sci. Rep.* 16 (1992) 133, and references therein.
- [84] W.F. Egelhoff, Jr., *Surf. Sci. Rep.* 6 (1987) 253, and references therein.
- [85] W.K. Ford, T. Guo, K.-J. Wan, and C.B. Duke, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 11 896, and references therein.
- [86] W.G. Schmidt, F. Bechstedt, and G.P. Srivastava, *Surf. Sci. Rep.* 25 (1996) 141, and references therein.

- [87] U. Fano, Phys. Rev. 178 (1969) 131, Phys. Rev. 184 (1969) 250.
- [88] J. Kessler, *it Polarized Electrons*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1976.
- [89] U. Heinzmann, G. Schönhense, and J. Kessler, J. Phys. B 13 (1980) L153.
- [90] G. Schönhense, Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 679.
- [91] Ch. Roth, F.U. Hillebrecht, W.G. Park, H.B. Rose, and E. Kisker, Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 1963.
- [92] Ch. Roth, T. Kinoshita, H.B. Rose, F.U. Hillebrecht, and E. Kisker, Surf. Rev. Lett. 4 (1997) 911.
- [93] K. Starke, A.P. Kaduwela, Y. Liu, P.D. Johnson, M.A. Van Hove, C.S. Fadley, V. Chakarian, E.E. Chaban, G. Meigs, and C.T. Chen, Phys. Rev. B 53 (1996) R10 544.
- [94] H. Daimon, T. Nakatani, S. Imada, S. Suga, Y. Kagoshima, and T. Miyahara, Jpn. J. Appl. Phys. 32 (1993) L1480.
- [95] C. Westphal, A.P. Kaduwela, C.S. Fadley, and M.A. Van Hove, Phys. Rev. B 50 (1994) 6203.
- [96] A.P. Kaduwela, H. Xiao, S. Thevuthasan, C.S. Fadley, and M.A. Van Hove, Phys. Rev. B 52 (1995) 14 927.
- [97] H. Daimon, T. Nakatani, S. Imada, and S. Suga, Rev. Sci. Instrum. 66 (1995) 1510; J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 76 (1995) 55.
- [98] A. Oelsner, G.H. Fecher, M. Schickedanz, and G. Schönhense, Surf. Sci. 433-435 (1999) 53.
- [99] E.D. Tober, R.X. Ynzunza, F.J. Palomares, Z. Wang, Z. Hussain, M.A. Van Hove, and C.S. Fadley, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 2085.
- [100] L. Baumgarten, C.M. Schneider, F. Schäfers, H. Petersen, and J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 492.
- [101] C.M. Schneider and J. Kirschner, Crit. Rev. Solid State and Mat. Sci. 20 (1995) 179, and references therein.
- [102] Ch. Roth, F.U. Hillebrecht, H.B. Rose, and E. Kisker, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 3479.
- [103] F.U. Hillebrecht and W.D. Herberg, Z. Phys. B 93 (1994) 299.
- [104] F.U. Hillebrecht, H.B. Rose, T. Kinoshita, Y.U. Idzerda, G. van der Laan, R. Denecke, and L. Ley, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 2883.
- [105] M.A. Van Hove, A.P. Kaduwela, H. Xiao, W. Schattke, and C.S. Fadley, J. Electron. Spectr. Relat. Phenom. 80 (1996) 137.
- [106] H.B. Rose, Thesis, Universität Düsseldorf, 1996; A. Fanelisa, Thesis, Universität Düsseldorf, 1996; H.B. Rose, T. Kinoshita, Ch. Roth, F.U. Hillebrecht, and E. Kisker, Surf. Rev. Lett. 4 (1997) 915.
- [107] U. Gradmann and G. Waller, Surf. Sci. 116 (1982) 539.

- [ch01] P. Rennert, **A. Chassé**, Exp. Technik der Physik 35 (1987) 27.
- [ch02] Y. Chen, F.J. Garcia de Abajo, **A. Chassé**, R.X. Ynzunza, A.P. Kaduwela, M.A. Van Hove and C.S. Fadley, Phys. Rev. B 58 (1998) 13121.
- [ch03] O. Speder, P. Rennert, and **A. Chassé**, Surf. Sci. 331-333 (1995) 1383.
- [ch04] **A. Chassé**, L. Niebergall, P. Rennert, I. Uhlig, and T. Chassé, Surf. Sci. (in press).
- [ch05] **A. Chassé**, N. Nowak, L. Niebergall, P. Rennert, W. Braun, W. Richter, D.R.T. Zahn, Surf. Sci. 352-354 (1996) 94-98.
- [ch06] C. Nowak, **A. Chassé**, W. Braun, W. Richter, I.T. Mc Govern, D.R.T Zahn, J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 80 (1996) 143-146.
- [ch07] C. Nowak, J. Krujatz, A. Märkl, C. Meyne, **A. Chassé**, W. Braun, W. Richter, and D.R.T. Zahn, Surf. Sci. 331-333 (1995) 619.
- [ch08] C. Nowak, **A. Chassé**, A. Hempelmann, W. Richter, E. Dudzik, R. Whittle, I.T. Mc Govern, W. Braun, and D.R.T. Zahn, Surf. Sci. 307-309 (1994) 685.
- [ch09] T. Schröter, **A. Chassé**, I. Eckhardt, K. Tiedtke, N. Wagner, D.R.T. Zahn, C. Nowak, A. Hempelmann, and W. Richter, Surf. Sci. 307-309 (1994) 650.
- [ch10] P. Rennert, **A. Chassé** and W. Mück, Surf. Rev. Lett. 4 (1997) 907.
- [ch11] P. Rennert, W. Hergert, W. Mück and **A. Chassé**, Surf. Rev. Lett. 4 (1997) 1263.
- [ch12] **A. Chassé** and P. Rennert, J. de Physique IV France 7 (1997) C2-427.
- [ch13] P. Rennert, W. Mück, and **A. Chassé**, Phys. Rev. B 53 (1996) 14262; Surf. Sci. 357-358 (1996) 260.
- [ch14] P. Rennert, W. Hergert, W. Mück, and **A. Chassé**, Surf. Rev. Lett. 4 (1997) 1263.
- [ch15] P. Rennert, **A. Chassé**, and L. Niebergall, Surf. Sci. (accepted, Oct.99).
- [ch16] P. Rennert, **A. Chassé**, T. Nakatani, K. Nakatsuji, H. Daimon, and S. Suga, J. Phys. Soc. Jpn. 66 (1997) 396-400.
- [ch17] C.M. Schneider, U. Pracht, W. Kuch, **A. Chassé**, and J. Kirschner, Phys. Rev. B 54 (1996) R15 618.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, daß ich die Arbeit selbständig und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln erstellt habe.

(Dr. Angelika Chassé)

Halle, den 9. Dezember 1999.

CURRICULUM VITAE

Dr. Angelika Chassé

Tabellarischer Lebenslauf

Persönliche Daten

Name, Vorname: Chassé, Angelika (geb. Kleine)
Akad. Grad: Dr. rer. nat.
Geburtsdatum: 22.5.1957
Geburtsort: Thale
Nationalität: Deutsch
Wohnort: 06108 Halle, Martinstr. 25
Familienstand: verheiratet, ein Kind (geb. 31.7.1981)

Ausbildung und Qualifikation

1963-73 Polytechnische und Erweiterte Oberschule, Thale
1973-75 Spezialklassen für Mathematik und Physik, MLU Halle-Wittenberg
1975 Abitur, Spezialklassen, MLU Halle-Wittenberg
1975-80 Physikstudium, Sektion Physik, MLU Halle-Wittenberg
1980 Diplom in Physik, Sektion Physik, MLU Halle-Wittenberg
1980-84 Forschungsstudium, Sektion Physik, MLU Halle-Wittenberg
1984 Promotion in Physik, MLU Halle-Wittenberg

Berufsweg

1984-88 Wissenschaftlicher Assistent (befristet), FB Physik, MLU Halle
Seit 1988 Wissenschaftlicher Assistent (unbefristet), FB Physik, MLU Halle

Dienstanschrift

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Fachbereich Physik FG Theorie
Friedemann-Bach-Platz 6
D-06108 Halle (Saale)
Tel.: +345 5525436 Fax: +345 5525446
Email: chase@physik.uni-halle.de

Halle, den 9. Dezember 1999

(Dr. Angelika Chassé)