

Kapitel 3

Augerprozeß

3.1 Physikalische Aspekte der Emission der Auger-elektronen

Entsteht in einem Atom unter der Einwirkung der elektromagnetischen Strahlung oder beim Elektronen- bzw. Ionenbeschuß ein Loch im Rumpfniveau, kehrt das angeregte Atom in den energetisch günstigeren Grundzustand durch den Übergang eines Elektrons vom höher liegenden Niveau in die vorhandene Lücke zurück. Die überschüssige Energie kann dabei in Form eines charakteristischen Röntgenquantens emittiert werden. Es ist auch ein strahlungsloser Übergang möglich, bei dem die Energie auf ein anderes Elektron übertragen wird, das den Kristall mit einer bestimmten kinetischen Energie verläßt. Pierre Auger [1] fand 1925 bei Wilson-Kammer-Aufnahmen der Ionisierung von Edelgasen durch Röntgenstrahlen solche Elektronen und gab für ihre Entstehung die richtige Erklärung. Der Augerübergang wird gewöhnlich durch Elektronenniveaus der im Augerprozeß beteiligten Elektronen in der spektroskopischen Notation bezeichnet.

Da die Existenz eines Rumpfloches eine Bedingung für den Augerübergang ist, muß die Wechselwirkung zwischen dem bei der Ionisierung des Atoms ausgeschlagenen Elektron und dem restlichen Elektronensystem zur Zeit des Austretens des Augerelektrons berücksichtigt werden. Die andere Frage betrifft die Relation zwischen der Lebensdauer des Rumpfloches und der Zeit der Abschirmung des Loches (Relaxation des Systems im Potential des Loches). Es gibt Versuche, ein theoretisches Modell zu erstellen, das im Rahmen der Vielteilchentheorie alle Prozesse im einheitlichen Bild beschreibt [48, 49]. In den meisten Fällen ist jedoch die Anregungszeit ($t < 10^{-17}$ s) viel kleiner als die Lebensdauer des Loches ($\tau > 10^{-15}$ s), und die Relaxationszeit t_r beträgt etwa 10^{-16} s. Ausnahmen

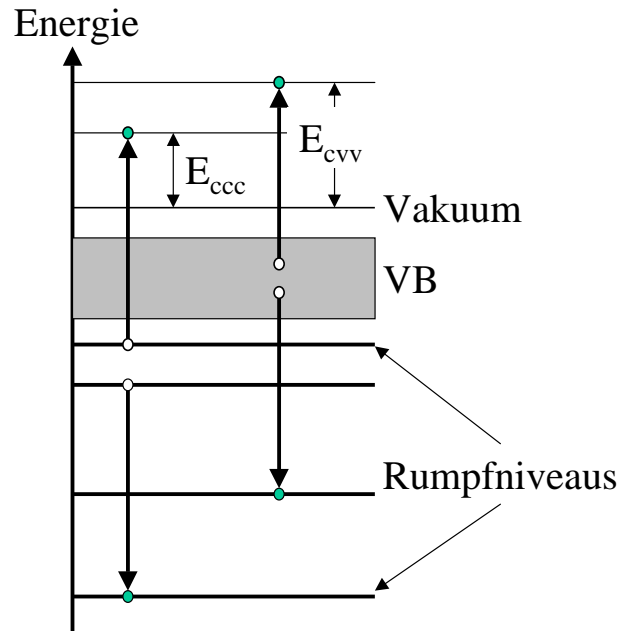


Abb. 3.1: Augerzerfall. Schematische Darstellung eines CCC- und eines CVV-Prozesses (siehe Text).

sind die Anregung sehr tief liegender Rumpfniveaus mit Bindungsenergien $E_b > 10$ keV und die Schwellenanregungen. Da $t \ll t_r \ll \tau$, gelingt es, den Ionisationsprozeß im Atom und den Augerprozeß unabhängig zu behandeln (sogenanntes *two-step* Modell der Augeremission). Die folgende Diskussion beschränkt sich auf solche Fälle.

Hat ein Atom im Anfangszustand ein Loch im Rumpfniveau c und im Endzustand zwei Löcher in den Niveaus i und j , dann gilt folgendes aus der Energieerhaltung

$$E(c) = E(i, j) + E_{\text{AE}}, \quad (3.1)$$

wobei $E(c)$ und $E(i, j)$ die Gesamtenergien der oben genannten Systeme und E_{AE} die kinetische Energie des Augerelektrons sind. Die Bindungsenergie des i -ten Elektronenzustandes resultiert aus der Differenz der Energien des Systems im Grundzustand E und des Systems mit dem ionisierten Niveau i $E(i)$ und ist gleich der Energie des Einelektronenniveaus mit dem entgegengesetzten Vorzeichen:

$$E_b^i = E(i) - E = -\varepsilon_i. \quad (3.2)$$

Dementsprechend gilt für E_{AE} :

$$E_{\text{AE}} = E(c) - E(i, j)$$

$$\begin{aligned}
&= [E - E(j)] - [E - E(c)] - [E(i, j) - E(j)] \\
&= -E_b^j + E_b^c - \tilde{E}_b^i,
\end{aligned} \tag{3.3}$$

wobei \tilde{E}_b^i die Bindungsenergie des i -ten Niveaus beim vakanten j -Niveau ist. Um die Relaxationsprozesse wie Reaktion der Elektronenzustände im Valenzband beim vorhandenen Loch im Elektronensystem zu berücksichtigen, führt man einen zusätzlichen Term R_A ein. Somit erhält man für die Energie des Augerelektrons:

$$E_{\text{AE}} = \varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_c + R_A. \tag{3.4}$$

An den intensivitätsstärksten Augerübergängen sind die atomaren Rumpfniveaus beteiligt. Aufgrund starker Wechselwirkung zwischen den Rumpflöchern und der Spin-Bahn-Aufspaltung der Rumpflöcher weisen solche Übergänge meist eine ausgeprägte Multiplett-Struktur auf, die durch die Gesamtquantenzahlen eines Mehrelektronensystems charakterisiert wird. Solche *core-core-core* (CCC) Augerspektren haben einen rein atomaren Ursprung. Kinetische Energie dieser CCC-Augerelektronen resultiert aus der Differenz der Energien der beteiligten atomaren Rumpfständen, was den Prozeß als elementspezifisch kennzeichnet.

Die Information über die lokale Elektronenstruktur im Festkörper kann aus den Augerspektren mit Beteiligung der Valenzelektronen gewonnen werden. Solche *core-core-valence* (CCV) und *core-valence-valence* (CVV) Übergänge sind meist schwächer in der Intensität als CCC-Übergänge und ihre Linienbreite erstreckt sich über die Valenzbandbreite, daher erfordert ihre Messung hohes Auflösungsvermögen der Spektrometer. Beim CVV-Augerprozeß entstehen im Valenzband des Festkörpers zwei Löcher, deren Coulomb-Abstoßung die Relaxationseffekte bestimmt, die letztendlich die Form der Augerspektren beeinflussen. Einfache Metalle haben ein breites Valenzband, daher sind die Loch-Zustände nicht lokalisiert und Ihre Wechselwirkungsenergie kann vernachlässigt werden. Eine ganz andere Situation entsteht, wenn das Valenzband verhältnismäßig schmal ist. In diesem Fall sind die Loch-Zustände am Emitter der Augerelektronen lokalisiert und ihre Wechselwirkungsenergie im Endzustand ist groß. Besonders stark werden solche Zwei-Loch-Effekte bei den d-Metallen am Ende der Reihe der Übergangsmetalle. Je enger das d -Band ist, desto weniger geeignet ist die Verwendung der Zustandsdichte im Valenzband für die Beschreibung der Form der Augerspektren. Man spricht davon, daß ein *band-like* Spektrum in ein atomares Spektrum übergeht. Es wurde am Beispiel des L_3VV -Spektrums von Kupfer jedoch gezeigt [50], daß, obwohl das experimentell beobachtete Spektrum des Kristalls durch atomare Multiplett-Struktur interpretiert werden kann, es sich von den

Spektren der freien Atome durch die energetische Verschiebung und die relative Intensität einiger Multiplett-Linien unterscheidet, was auf seinen kristallinen Ursprung hinweist.

Im Festkörper ausgelöste Augerelektronen besitzen eine mittlere freie Weglänge λ , die durch inelastische Verluste bestimmt wird. Dadurch haben die aus dem Festkörper emittierten Elektronen eine endliche Austrittstiefe. Eine Zusammenstellung experimenteller λ -Werte in Abhängigkeit von der Energie für verschiedene Materialien in Abb. 3.2 zeigt ein Minimum bei 50-200 eV und näherungsweise eine \sqrt{E} -Abhängigkeit zwischen 200-2000 eV [51]. Die Materialabhängigkeit ist über weite Energiebereiche nur schwach ausgeprägt.

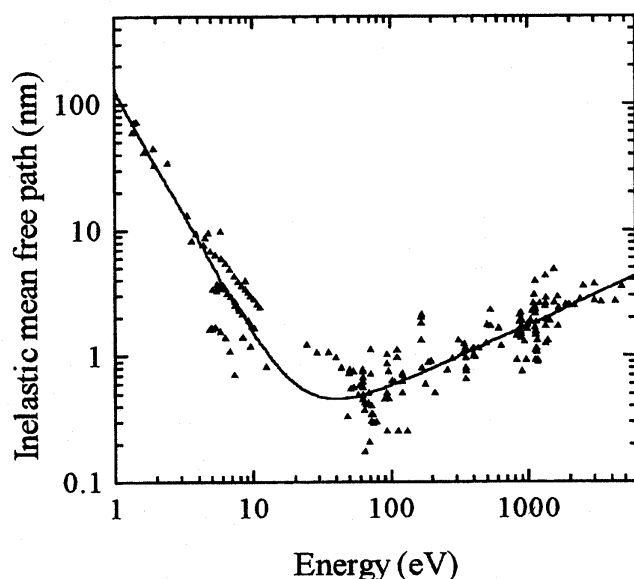


Abb. 3.2: Freie Weglänge für Elektronen in verschiedenen Materialien als Funktion der kinetischen Energie (nach [51]).

Für die Elektronen mit der kinetischen Energie von 50-200 eV ist demnach die Austrittstiefe auf einige Atomlagen beschränkt. Im weiteren wird dieses Energieintervall als Bereich kleiner oder niedriger Energien bezeichnet. Bei solchen kinetischen Energien reduziert sich die Information über die Struktur auf den Oberflächenbereich. Damit ist die Beugung der niederenergetischen Photo- und Augerelektronen mit ihrer großen Sensitivität zu Bindungslängen und der Sorte der streuenden Atome eine hervorragende Methode zur Untersuchung der Oberflächenstruktur, vergleichbar mit LEED (Low Energy Electron Diffraction). Jedoch ist AED zusätzlich noch elementspezifisch.

3.2 Übergangsmatrixelemente beim Augerprozeß

Als Anfangszustand wird ein Mehrelektronenzustand mit einem Loch im Rump fzustand $|c\rangle$ und zwei besetzten Rump fzuständen $|i\rangle, |j\rangle$, die in den Augerprozeß einbezogen sind (siehe Abb. 3.1), betrachtet. Nach dem erfolgten Augerübergang hat man im Endzustand zwei Löcher $|i\rangle$ und $|j\rangle$ und ein auslaufendes Augerelektron $|f\rangle$. Das Matrixelement für den Augerübergang wird durch den folgenden Ausdruck beschrieben [52]:

$$\begin{aligned} M(f, c|i, j) &= \langle f, c|v_c|(ij - ji)\rangle \\ &= \langle f, c|v_c|i, j\rangle - \langle f, c|v_c|j, i\rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Sieht man zunächst vom Spinanteil der Wellenfunktion ab, so ist der erste Term in (3.5) der Erwartungswert der Coulomb-Wechselwirkung

$$\langle f, c|v_c|i, j\rangle = \iint \varphi_f^*(\mathbf{r})\varphi_c^*(\mathbf{r}')\frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\varphi_i(\mathbf{r}')\varphi_j(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'. \quad (3.6)$$

Den zweiten Summanden in (3.5) nennt man Austausch-Term. Er entsteht aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Elektronen

$$\langle f, c|v_c|j, i\rangle = \iint \varphi_f^*(\mathbf{r})\varphi_c^*(\mathbf{r}')\frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\varphi_j(\mathbf{r}')\varphi_i(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'. \quad (3.7)$$

Im Zentralpotential lassen sich die Funktionen φ als Produkte von Radialfunktionen $\phi(r)$ und Kugelflächenfunktionen $Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ darstellen (siehe 2.18). Das Coulomb-Potential kann man ebenfalls nach Kugelflächenfunktionen entwickeln

$$v_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\Lambda} \frac{8\pi}{2\lambda + 1} \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} Y_{\Lambda}^*(\hat{\mathbf{r}}') Y_{\Lambda}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.8)$$

mit $\Lambda = (\lambda, \mu)$. Somit erhält man für das Auger-Übergangsmatrixelement

$$\begin{aligned} \langle f, c|v_c|i, j\rangle &= \sum_{\Lambda} R_{\Lambda}(c, i|j, f) \\ &\times \int d\Omega Y_{L_f}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\Lambda}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L_j}(\hat{\mathbf{r}}) \int d\Omega' Y_{L_c}^*(\hat{\mathbf{r}}') Y_{\Lambda}^*(\hat{\mathbf{r}}') Y_{L_i}(\hat{\mathbf{r}}'). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Explizite Ausdrücke für die Radial- und Winkelintegrale befinden sich im Anhang A.3.

3.3 Darstellungen der Augermatrixelemente

Für die Beschreibung der spinaufgelösten AED muß der Spin der im Augerprozeß beteiligten Elektronen berücksichtigt werden. Da in dieser Arbeit der Augerprozeß betrachtet

wird, der nach der Absorption eines Photons erfolgt, wird das primäre *core*-Loch als ein Spin-Bahn aufgespaltener Zustand in der $(jl\mu)$ -Darstellung (2.45) unter Berücksichtigung von (A.14) beschrieben:

$$|c\rangle = |c_+\rangle\chi_+ + |c_-\rangle\chi_-. \quad (3.10)$$

Zwei Löcher im Endzustand $\{i, j\}$ können entweder einem Rumpfniveau oder dem Valenzband angehören. Gewöhnlich wird die Beschreibung von $\{i, j\}$ durch eine Slater-Determinante benutzt, dann hat das Augermatrixelement die Form (3.5). Für die Auswertung des Augermatrixelementes muß zunächst die Darstellung der Eielektronenfunktionen $|i\rangle$ und $|j\rangle$ bestimmt werden. Dem jeweiligen physikalischen System angepaßt, können die $|lm\sigma\rangle$ -Funktionen (2.46), die Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses $|jl\mu\rangle$ im Fall der *core*-Niveaus mit ausgeprägter Spin-Bahn Wechselwirkung oder die Eigenfunktionen der Gittersymmetriegruppe für die im Kristallfeld aufgespaltenen Niveaus als Basis dienen.

Wie bei der Photoelektronenbeugung wird angenommen, daß bei der Streuung des Augerelektrons σ eine gute Quantenzahl ist. Dann kann das emittierte Augerelektron als Summe über Kugelwellen (oder unterschiedlichen Kanäle) mit Quantenzahlen L und σ charakterisiert werden. Somit gilt für den partiellen Beitrag $|f_{L\sigma}\rangle$ die Gleichung (2.46).

Zwei Löcher $|i\rangle$ und $|j\rangle$ im Endzustand lassen sich im Zentralpotential unabhängig von der Darstellung nach Kugelflächenfunktionen entwickeln:

$$|i\rangle = \sum_{m_i\sigma_i} C_{m_i\sigma_i}^{\gamma_i} \phi_i(r) |l_i m_i\rangle \chi_{\sigma_i} \equiv \sum_{m_i\sigma_i} C_{m_i\sigma_i}^{\gamma_i} |m_i\rangle \chi_{\sigma_i}, \quad (3.11)$$

$$|j\rangle = \sum_{m_j\sigma_j} C_{m_j\sigma_j}^{\gamma_j} \phi_j(r) |l_j m_j\rangle \chi_{\sigma_j} \equiv \sum_{m_j\sigma_j} C_{m_j\sigma_j}^{\gamma_j} |m_j\rangle \chi_{\sigma_j}. \quad (3.12)$$

Die Matrix $C(l) = \{C_{m\sigma}^{\gamma}\}_{kn}$ der Ordnung $2(2l+1)$ bestimmt die Darstellung des Zustandes $|i\rangle$ bzw. $|j\rangle$. Für

- $\gamma = (lm\sigma)$ ist $C(l)$ die Einheitsmatrix $\delta_{m_k, m_n} \delta_{\sigma_k, \sigma_n}$,
- $\gamma = (jl\mu)$ sind die Elemente der Matrix $C(l)$ entsprechende Koeffizienten der Spinordarstellung,
- die Basisfunktionen der Gittersymmetriegruppe sind die Elemente von $C(l)$ entsprechende Symmetrisierungskoeffizienten.

Unter Benutzung von (3.5) und nach Ausführung der Summation über die Spinvariablen ergibt sich für $M(L\sigma, c|i, j)$ ¹:

$$M(L\sigma, c|i, j) = \sum_{m_i\sigma_i} \sum_{m_j\sigma_j} C_{m_i\sigma_i}^{\gamma_i} C_{m_j\sigma_j}^{\gamma_j} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} & \times \left[\langle fc_+|v|m_i m_j\rangle \delta_{\sigma_f\sigma_j} \delta_{\sigma_i+} - \langle fc_+|v|m_j m_i\rangle \delta_{\sigma_f\sigma_i} \delta_{\sigma_j+} \right. \\ & \left. + \langle fc_-|v|m_i m_j\rangle \delta_{\sigma_f\sigma_j} \delta_{\sigma_i-} - \langle fc_-|v|m_j m_i\rangle \delta_{\sigma_f\sigma_i} \delta_{\sigma_j-} \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

3.4 Abhängigkeit der Spinpolarisation des Augerelektrons vom Spinzustand des Lochpaares

Bei der bisherigen Beschreibung des Augermatrixelementes in den Abschnitten 3.2 und 3.3 werden die Korrelationen im Zwei-Loch-Zustand $\{i, j\}$ nicht berücksichtigt, die für Augerprozesse einiger Atome sehr stark sind und zur Energieaufspaltung einzelner Multiplett-Komponenten im Augerspektrum führen. Enthält der Zwei-Teilchen Hamilton-Operator keine Spinanteile, werden die gemeinsamen Eigenzustände des Zwei-Teilchen Systems in einen Ortsanteil $|\Phi_2\rangle \equiv \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ und einen Spinanteil faktorisieren [54]:

$$|\Psi_2\rangle = |\Phi_2\rangle |SM_S\rangle \quad (3.15)$$

Der Spinanteil kann exakt angegeben werden. Zwei Spin 1/2-Teilchen können zu einem Gesamtspin $S = 0$ oder $S = 1$ koppeln. Die zugehörigen vier möglichen Spinzustände sind $|00\rangle$; $|1-1\rangle$; $|10\rangle$; $|11\rangle$.

Es ergibt sich ein Singulett

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_+^{(2)}\chi_-^{(1)}) \quad (3.16)$$

und ein Triplett:

$$|1-1\rangle = \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \quad (3.17)$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_+^{(2)}\chi_-^{(1)}) \quad (3.18)$$

$$|11\rangle = \chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} \quad (3.19)$$

¹Index f , der für Endzustand steht, wird im weiteren für bessere Übersichtlichkeit durch die ihn charakterisierenden Quantenzahlen L und σ ersetzt

Der Singulett-Zustand ist offensichtlich antisymmetrisch gegenüber Teilchenvertauschung, der Triplett-Zustand symmetrisch. Da der Gesamtzustand $|\Psi_2\rangle$ des Zwei-Elektronen-Systems auf jeden Fall antisymmetrisch sein muß, koppelt $|00\rangle$ mit einem symmetrischen und $|1M_S\rangle$ mit einem antisymmetrischen Ortsanteil:

$$|\Psi_2^{(S)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|m_i\rangle^{(1)} |m_j\rangle^{(2)} + |m_i\rangle^{(2)} |m_j\rangle^{(1)} \right) |00\rangle = |\Phi_2^{(+)}\rangle |00\rangle \quad (3.20)$$

$$|\Psi_2^{(T)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|m_i\rangle^{(1)} |m_j\rangle^{(2)} - |m_i\rangle^{(2)} |m_j\rangle^{(1)} \right) |1M_S\rangle = |\Phi_2^{(-)}\rangle |1M_S\rangle \quad (3.21)$$

Hier deutet sich eine bemerkenswerte Korrelation zwischen der Symmetrie der Ortswellenfunktion und dem Spin S an. Gehören zu $|\Phi_2^{(+)}\rangle$ und $|\Phi_2^{(-)}\rangle$ unterschiedliche Energien, so ist eine gewisse Spineinstellung energetisch bevorzugt, und das, obwohl der Hamilton-Operator selbst spinunabhängig sein kann.

Bei der Augeremission äußert sich dieser Effekt in der energetischen Trennung der Triplett- und Singulett Komponenten des Augerpeaks, die man experimentell messen kann. Auch die Spinpolarisation der beiden Komponenten kann unterschiedliches Vorzeichen aufweisen, wie in [37] und [55] gezeigt wurde. So entsteht eine Quelle für spinpolarisierte Elektronen.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Darstellung der Augermatrixelemente für die Beschreibung der Spinpolarisation der einzelnen Multiplett-komponenten des Augerspektrums folgenderweise erweitert. Da Eigenfunktionen des Triplett- bzw. Singulett-Zustandes keine Slater-Funktionen sind, sondern (3.20) und (3.21), haben die Matrixelemente im Augerprozeß bei Multiplettaufspaltung nicht die einfache Form wie in (3.5) und (3.13). Offensichtlich lassen sich die $|1-1\rangle$ - und $|11\rangle$ -Komponenten des Matrixelements zum Triplett-Zustand ebenfalls aus der Formel (3.13) berechnen, während Singulett- und die $|10\rangle$ -Triplett Komponenten bei dieser Beschreibung des Matrixelements gemischt auftreten. Um sie zu separieren, sind die Faktoren bei (3.20) und (3.21) für die $|10\rangle$ -Triplett Komponente mit der Darstellung für zwei Teilchen mit dem entgegengesetzten Spin durch Slater-Determinanten zu vergleichen. Es gibt zwei Möglichkeiten A und B , um die Slater-Determinanten zu konstruieren:

$$|\Psi_2^A\rangle = |m_i\rangle^{(1)} \chi_+^{(1)} |m_j\rangle^{(2)} \chi_-^{(2)} - |m_i\rangle^{(2)} \chi_+^{(2)} |m_j\rangle^{(1)} \chi_-^{(1)} \quad (3.22)$$

$$|\Psi_2^B\rangle = |m_i\rangle^{(1)} \chi_-^{(1)} |m_j\rangle^{(2)} \chi_+^{(2)} - |m_i\rangle^{(2)} \chi_-^{(2)} |m_j\rangle^{(1)} \chi_+^{(1)}. \quad (3.23)$$

Der Vergleich liefert:

$$\begin{aligned} |\Psi_2^{(S)}\rangle &= \frac{1}{2} (|\Psi_2^A\rangle - |\Psi_2^B\rangle) \\ |\Psi_2^{(T)}\rangle &= \frac{1}{2} (|\Psi_2^A\rangle + |\Psi_2^B\rangle). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Somit gilt unter Benutzung von (3.24) für das Augermatrixelement

$$\begin{aligned}
M^{(S)}(L\sigma, c|i, j) &= \langle f, c|v|\Psi_2^{(S)}\rangle \\
&= \frac{1}{2} [\langle f, c|v|\Psi_2^A\rangle - \langle f, c|v|\Psi_2^B\rangle] \\
&= \frac{1}{2} [M^A(L\sigma, c|i, j) - M^B(L\sigma, c|i, j)] \\
M^{(T)}(L\sigma, c|i, j) &= \langle f, c|v|\Psi_2^{(T)}\rangle \\
&= \frac{1}{2} [\langle f, c|v|\Psi_2^A\rangle + \langle f, c|v|\Psi_2^B\rangle] \\
&= \frac{1}{2} [M^A(L\sigma, c|i, j) + M^B(L\sigma, c|i, j)].
\end{aligned} \tag{3.25}$$

3.5 Intensität der Augeremission

Die Anordnung bei einem winkelaufgelösten AED-Experiment ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Am Ort des Detektors wird das emittierte Augerelektron analog dem Photoelektron durch eine auslaufende Kugelwelle (2.44) beschrieben, deren Amplitude nun durch das Augermatrixelement bestimmt wird. Die Intensität der Elektronen ist proportional zum Quadrat der Wellenfunktion

$$I_{\sigma, cij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mu_i \mu_j} \left| \sum_L B_{L\sigma}(\mathbf{k}) M(L\sigma, c|i, j) \right|^2. \tag{3.26}$$

Die Summation ist über alle entarteten Niveaus der Zustände $|i\rangle$ und $|j\rangle$ durchzuführen. Formel (3.26) beschreibt die Intensität des Augerelektrons zu einem speziellen Loch $|c\rangle$. Ist dieses Loch infolge eines Photoionisationsprozesses entstanden, dann können die unterschiedlichen entarteten Zustände von $|c\rangle$ je nach Polarisation des Photons mit der unterschiedlichen Wahrscheinlichkeit angeregt werden. Diese Wahrscheinlichkeit erhält man aus (2.49) nach der Integration über alle Richtungen und Spinorientierungen des Photoelektrons:

$$w_c(\mathbf{u}, \hbar\omega) = \int d\Omega I_{c, \sigma}(\mathbf{k}) = \sum_L |M_{Lc}^\sigma|^2. \tag{3.27}$$

Für die Gesamtintensität der Augerelektronen ist (3.26) mit dem Gewicht (3.27) zu multiplizieren und über alle entarteten Niveaus μ_c sowie über verschiedene Gitterplätze \mathbf{R}_0 zu summieren. Somit ergibt sich

$$I_{\sigma, cij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_0} \sum_{\mu_c} w_c \sum_{\mu_i \mu_j} \left| \sum_L B_{L\sigma}^{\mathbf{R}_0}(\mathbf{k}) M(L\sigma, c|i, j) \right|^2 = \sum_{\mathbf{R}_0} \langle \mathcal{M}_\sigma^2 \rangle_{ij}. \tag{3.28}$$

$M(L\sigma, c|i, j)$ ist das Augermatrixelement (3.13 oder 3.25), das vom Spin der im Augerprozeß beteiligten Elektronen abhängt. Die Spinpolarisation der Augeremission wird von den berechneten spinabhängigen Intensitäten abgeleitet:

$$P_{\text{AES}} = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}}. \quad (3.29)$$

Für den Fall des CVV-Prozesses muß die Beschreibung der Intensitätsverteilung der Augerelektronen bezüglich der Energieverteilung der Augerelektronen erweitert werden. Unter der Annahme, daß die Augermatrixelemente von der Energie der Zustände im Valenzband unabhängig sind [53], gilt:

$$I_{\sigma}(E_f, \mathbf{k}) = \sum_{g_1 g_2} \langle \mathcal{M}_{\sigma}^2 \rangle_{g_1 g_2} \int D_{g_1}(E_f + E_c - \varepsilon) D_{g_2}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.30)$$

wobei $D_g(\varepsilon)$ die lokale partielle Zustandsdichte (DOS) im Valenzband ist. Index g steht für Quantenzahlen des Valenz-Zustandes. Um die Integralintensitäten des betrachteten CVV-Überganges zu erhalten, muß die Spektralintensität (3.30) über die Energiebreite des Valenzbandes integriert werden. Es ergibt sich

$$I_{\sigma}(\mathbf{k}) = \int I_{\sigma}(E_f, \mathbf{k}) dE_f = \sum_{g_1 g_2} n_{g_1} n_{g_2} \langle \mathcal{M}_{\sigma}^2 \rangle_{g_1 g_2}, \quad (3.31)$$

wobei n_g die Besetzungszahl des entsprechenden Valenzbandes ist. Für die integrale Spinpolarisation setzt man die Integralintensitäten (3.31) in (3.29) ein. Für einen CCC-Prozeß gilt $n_{g_1} = \delta_{g_1 c_i}$ und $n_{g_2} = \delta_{g_2 c_j}$. Somit geht die Gleichung (3.31) in (3.28) über.