

# Kapitel 5

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Theorie der winkel- und spinaufgelösten Augerelektronenbeugung auf ein breites Spektrum von Problemen der Oberflächenphysik angewendet. Die Berechnung der AED-Spektren erfolgte im Rahmen des Vielfachstreu-Cluster-Modells mit der vollen Drehimpulsentwicklung. Eine Erweiterung der Theorie besteht in der Berücksichtigung der Augermatrixelemente sowie der Dipolmatrixelemente bei der primären Anregung, was eine quantitative AED-Analyse wesentlich erleichtert. Damit ist es möglich, die Rechnungen für verschiedene Darstellungen der in den Augerprozess einbezogenen Elektronenzustände durchzuführen, und zwar  $(lm\sigma)$ -Darstellung,  $(jl\mu)$ -Darstellung, symmetrisierte  $(l\Gamma\sigma)$ -Darstellung mit den Basisfunktionen der kubischen Symmetriegruppe. Im Fall der Multiplett-Aufspaltung werden die Augermatrixelemente in der  $LS$ -Kopplung berechnet.

Die einzelnen Komponenten (oder beliebige Kombinationen der Komponenten) des Augerspektrums können separiert werden, wenn die Austauschaufspaltung, Spin-Bahn- oder Multiplett-Aufspaltung der Elektronenzustände vorliegt und die Zustände mit unterschiedlicher Symmetrie verschiedene spektrale Verhalten aufweisen. Außerdem ist es möglich, die Beiträge der einzelnen partiellen Komponenten der ausgehenden Augerwelle sowie den Einfluß partieller Beiträge zum Zustand des Rumpfloches (den Anfangszustand des Augerprozesses) zu untersuchen.

Im Rahmen dieser Theorie wurden die winkelaufgelösten  $KVV$ - Augerspektren und PED-Spektren der C(111)-Oberfläche sowohl für die ideale Oberflächenstruktur als auch für zwei verschiedene Modelle der Oberflächenrekonstruktion (nach Pandey und Tsai) untersucht. Es wurde gezeigt, daß die Intensität der Elektronenemission empfindlich zu den Änderungen in der Oberflächenstruktur ist. Die Unterschiede sind besonders deutlich für große Werte des Polarwinkels. Zusammen mit den experimentellen Messungen

geben die Ergebnisse der Rechnungen eine Möglichkeit zu entscheiden, welches Modell der Oberflächenrekonstruktion in der Wirklichkeit realisiert ist.

Die Struktur der CoO(111)- und CoO(001)-Schichten auf Au(111) und Ag(001) wurde durch den Vergleich der berechneten und gemessenen AED-Spektren für O-KVV- und Co-LMM-Übergänge untersucht. Aus relativ guter Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment kann man annehmen, daß beide Schichten bei einer Dicke über 5 Monolagen eine Stöchiometrie aufweisen, die der vom massiven CoO entspricht. Ein unerwartetes Minimum bei  $\theta = 45^\circ$  in der Polarwinkelverteilung von O-KLL entlang der [100]-Richtung im Kristall kann durch destruktive Interferenz im NaCl-Gitter bei Energien um 500 eV erklärt werden.

Am Beispiel der  $M_{2,3}VV$ -Spektren von Cu(001) und Ni(001) wurde gezeigt, daß die Beugung niederenergetischer Augerelektronen ( $E < 100$  eV) sehr empfindlich zu solchen Parametern wie Energie, Charakter der auslaufenden Welle, Vielfachstreuung der Elektronen ist. Der Einfluß der Bandstruktureffekte auf die Polarwinkelverteilung kann in diesem Energiebereich eine große Rolle spielen, besonders bei der Untersuchung der energieaufgelösten Spektren kann die variable Darstellung der Augermatrixelemente nützlich sein.

Die spin- und winkelaufgelösten  $L_3VV$  - Augerspektren von Fe wurden für eine reine Fe(001) Oberfläche und für die mit einer Übersicht von S bedeckten Fe Oberfläche mit den verschiedenen magnetischen Zuständen der Fe Atome in der Oberflächenschicht berechnet. Es stellte sich heraus, daß die Form der Winkelabhängigkeit der Intensität durch die Kristallstruktur bestimmt wird und auch durch die S-Monolage beeinflusst wird. Für die Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation ist die magnetische Streuung des Augerelektrons verantwortlich. Die Änderung des lokalen magnetischen Momentes des Fe-Atoms führt nur zur Änderung des mittleren Wertes der Spinpolarisation. Für die Auswertung des  $L_3VV$ -Augerspektrums von Fe ist es wichtig, die Bandstruktur der Fe-Valenzelektronen zu berücksichtigen, da die Energiebänder der  $T_{2g}$ - oder  $E_g$ -Symmetrie auch unterschiedliche Spinpolarisation haben.

Die Spinpolarisation der Multiplett-Komponenten des  $L_3M_{2,3}M_{2,3}$ -Augerspektrums von Cr(001) bei Anregung mit zirkular polarisierten Photonen konnte im Rahmen der im Abschnitt 3.4 entwickelten Darstellung der Augermatrixelemente erklärt werden. Die Spinpolarisation des Augerelektrons ist in einer komplizierter Weise mit der Polarisaton des Rumpfloches verbunden und zeigt das entgegengesetzte Vorzeichen für Singulett- und Triplett-Komponenten. Im wesentlichen wird sie durch die primäre Polarisaton der Rumpflöcher (Anfangszustand), die von der Anregungsenergie und dem magnetischen Mo-

ment der Atome abhängt, und eine starke  $LS$ -Kopplung der beiden Löcher im Endzustand bestimmt. Die Streuung der Augerelektronen im Kristallpotential modifiziert wesentlich ihre Spinpolarisation, dabei entspricht die Spinpolarisation bei großen  $\theta$ -Winkeln ( $\theta > 80^\circ$ ) der Spinpolarisation von Emittlern an der Oberfläche.

Die volle Einbeziehung des Augermatrixelementes in verschiedenen Darstellungen bei der Beschreibung der Augerelektronenbeugung stellt eine Erweiterung der Theorie dar. Dadurch ist es möglich, den Charakter der auslaufenden Augerwelle sowie die Interferenzen zwischen den einzelnen Kanälen im Endzustand zu berücksichtigen. Die Partialwellen  $L$  werden durch das Augermatrixelement unterschiedlich gewichtet, somit geht eine mögliche Anisotropie der auslaufenden Welle in die Betrachtung ein. Dieses Gewicht hängt von der Darstellung der Augermatrixelemente ab und ist besonders wichtig für die Berechnung der Spinpolarisation der AED-Spektren.