

# Anhang A

## Mathematischer Anhang

### A.1 Kugelflächenfunktionen und Clebsch-Gordan Koeffizienten

In dieser Arbeit wird folgende Definition der Kugelflächenfunktionen benutzt [94]:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m e^{im\phi} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \quad (\text{A.1})$$

mit den zugeordneten Legendreschen Polynomen

$$P_l^m(\cos\theta) = (\sin\theta)^m \frac{d^m}{(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta) \quad (\text{A.2})$$

und den Bedingungen  $l \geq 0$  und  $m = 0, 1, \dots, l$ . Für  $m < 0$  gilt

$$Y_{lm} = (-1)^{|m|} Y_{l|m|}^* \quad (\text{A.3})$$

Hierbei sind  $\phi$  der Azimutwinkel in der  $xy$ -Ebene und  $\theta$  der Polarwinkel von der  $z$ -Achse aus gemessen. Damit ergibt sich

$$\phi \in (0, 2\pi) \quad , \quad \theta \in (0, \pi). \quad (\text{A.4})$$

Die Clebsch-Gordan Koeffizienten sind als Integral über drei Kugelflächenfunktionen definiert (siehe [94]):

$$C_{LL_1L_2} = \int d\Omega_{\mathbf{e}} Y_L(\mathbf{e}) Y_{L_1}^*(\mathbf{e}) Y_{L_2}^*(\mathbf{e}). \quad (\text{A.5})$$

Sie treten bei der Entwicklung von Produkten aus den Kugelflächenfunktionen auf:

$$Y_L(\mathbf{e}) Y_{L_1}^*(\mathbf{e}) = \sum_{L_2} C_{LL_1L_2} Y_{L_2}(\mathbf{e}). \quad (\text{A.6})$$

Die Glebsch-Gordan Koeffizienten sind ungleich Null nur für

$$l = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 2, \dots, l_1 + l_2 \quad (\text{A.7})$$

und

$$m = |m_1 \pm m_2| \quad \text{für} \quad \begin{cases} m_1 \geq 0 & \text{und} & m_2 \geq 0 & \text{oder} \\ m_1 < 0 & \text{und} & m_2 < 0 \end{cases} . \quad (\text{A.8})$$

$$m = -|m_1 \pm m_2| \quad \text{für} \quad \begin{cases} m_1 \geq 0 & \text{und} & m_2 < 0 & \text{oder} \\ m_1 < 0 & \text{und} & m_2 \geq 0 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Die für die Berechnung der Koeffizienten  $G_{L'L}$  aus (A.21) benötigten Integrale unterscheiden sich von den Clebsch-Gordan Koeffizienten dadurch, daß nur die mittlere der Kugelflächenfunktionen unter dem Integral komplex konjugiert ist. Diese Integrale lassen sich jedoch auf die Clebsch-Gordan Koeffizienten zurückführen.

$$\int d\Omega_{\mathbf{e}} Y_L(\mathbf{e}) Y_{L_1}^*(\mathbf{e}) Y_{L_2}(\mathbf{e}) = (-1)^{m_2} C_{LL_1L_2}. \quad (\text{A.10})$$

## A.2 Anregung der Photoelektronen. Winkel- und Spinanteil der Übergangsmatrixelemente

In der Dipolnäherung enthalten die Übergangsmatrixelemente im Winkelanteil einen Term  $\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{r}}$  mit  $\mathbf{u}$  als Polarisationsvektor und  $\hat{\mathbf{r}}$  als Einheitsvektor von  $\mathbf{r}$ . Dieses Skalarprodukt läßt sich durch eine Linearkombination von Kugelflächenfunktionen darstellen, wobei sich die Komponenten von  $\mathbf{u}$  auf das Koordinatensystem beziehen, in dem die Winkelargumente der Kugelflächenfunktionen eingefügt werden:

$$\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \sum_{m=-1}^1 c_m Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} c_{-1} &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(u_x + iu_y) \\ c_0 &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}}u_z \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$c_1 = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(u_x - iu_y).$$

Für einen Anfangszustand ohne Spin-Bahn-Aufspaltung erhält man für das Winkelintegral der Übergangsmatrixelemente

$$\langle lm | \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{r}} | l_c m_c \rangle = \int d\Omega \sum_{m_1=-1}^1 c_{m_1} Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{1m_1}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{Lc}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\text{A.13})$$

Es ist ein Integral über drei Kugelflächenfunktionen für das die Bemerkungen aus A.1 entsprechend gelten.

Der Winkel- und Spinanteil der Übergangsmatrixelemente aus (2.47) unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Aufspaltung hat eine zu (A.13) analoge Gestalt.

Für Elektronen gilt, da  $s = 1/2$ ,  $j = l + \sigma$  und  $\mu = m + \sigma$  ( $\sigma = \pm 1/2$ )

$$|j l \mu\rangle = a_{j,+} |l, \mu - 1/2\rangle \chi_+ + a_{j,-} |l, \mu + 1/2\rangle \chi_- \quad (\text{A.14})$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$j$	$a_{j,+}$	$a_{j,-}$
$l + 1/2$	$\sqrt{\frac{l + \mu + 1/2}{2l + 1}}$	$\sqrt{\frac{l - \mu + 1/2}{2l + 1}}$
$l - 1/2$	$-\sqrt{\frac{l - \mu + 1/2}{2l + 1}}$	$\sqrt{\frac{l + \mu + 1/2}{2l + 1}}$

Unter Benutzung von (A.14, A.13) und nach Ausführung der Spinsummation ergibt sich für  $\sigma = +1/2$  (Spin-auf)

$$\langle lm\sigma | \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{r}} | j_c l_c \mu_c \rangle = a_{j_c,+} \int d\Omega \sum_{m_1=-1}^1 c_{m_1} Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{1m_1}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_c, \mu_c - 1/2}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{A.15})$$

und für  $\sigma = -1/2$  (Spin-ab)

$$\langle lm\sigma | \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{r}} | j_c l_c \mu_c \rangle = a_{j_c,-} \int d\Omega \sum_{m_1=-1}^1 c_{m_1} Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{1m_1}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l_c, \mu_c + 1/2}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\text{A.16})$$

Auch in diesem Fall erhält man Integrale über drei Kugelflächenfunktionen, nur ein Vorfaktor kommt je nach betrachtetem Anfangszustand hinzu.

### A.3 Radial- und Winkelanteil der Augermatrixelemente

Der Radialteil in dem Augermatrixelement  $\langle f, c | v_c | i, j \rangle$  (3.9) hat folgende Form:

$$R_\lambda(c, i | j, f) = \frac{8\pi}{2\lambda + 1} \int_0^{R_{\text{MT}}} dr' \phi_c(r') \phi_i(r') \times \left[ \frac{1}{r'^{\lambda-1}} \int_0^{r'} dr r^{\lambda+2} \phi_j(r) \phi_f(r) + r'^{\lambda+2} \int_{r'}^{R_{\text{MT}}} dr \frac{1}{r^{\lambda-1}} \phi_j(r) \phi_f(r) \right]. \quad (\text{A.17})$$

Die radiale Funktionen  $\phi$  werden hier als reell angesehen. Für die Winkelintegrale in (3.9) gelten die Bemerkungen aus A.2. Sie lassen sich auch durch die  $3j$ -Symbole wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_1 Y_L^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_\Lambda(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L_j}(\hat{\mathbf{r}}) \int d\Omega_2 Y_{L_c}^*(\hat{\mathbf{r}}') Y_\Lambda^*(\hat{\mathbf{r}}') Y_{L_i}(\hat{\mathbf{r}}') = \\ & (-1)^{m+m_c+\mu} \frac{2\lambda+1}{4\pi} \sqrt{(2l+1)(2l_j+1)(2l_i+1)(2l_c+1)} \\ & \times \begin{pmatrix} l & \lambda & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \lambda & l_j \\ -m & \mu & m_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_c & \lambda & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_c & \lambda & l_i \\ -m_c & -\mu & m_i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Daraus ergeben sich die Auswahlregeln für den Augerübergang:

$$\begin{aligned} l_c + \lambda + l_i & \quad - \quad \text{gerade}; \quad |l_c - l_i| \leq \lambda \leq l_c + l_i \\ l + \lambda + l_j & \quad - \quad \text{gerade}; \quad |l_j - \lambda| \leq l \leq l_j + \lambda. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

## A.4 Streuung einer Kugelwelle. Mehrfachstreubeitrag

Für die Auswertung der Integrale in (2.41) wird die Greensche Funktion  $G_0$  in der Drehimpulsdarstellung (2.27) verwendet. Da im Argument von  $G_0$  und  $\Psi_0$  die Atompositionen  $\mathbf{R}_i$  vorkommen, benötigt man die Entwicklung von Hankelfunktion um ein Zentrum  $\mathbf{R}$ . Es gilt [43, Anhang A] für  $|\mathbf{R} + \mathbf{r}| > r$

$$h_l^+(k|\mathbf{r} + \mathbf{R}|) Y_L(\widehat{\mathbf{r} + \mathbf{R}}) = \sum_{L'} j_{L'}(kr) Y_{L'}(\hat{\mathbf{r}}) G_{L'L}(\mathbf{R}) \quad (\text{A.20})$$

mit

$$G_{L'L}(\mathbf{R}) = \sum_{L''} 4\pi i^{l''+l'-l} h_{l''}^+(kR) Y_{L''}^*(\hat{\mathbf{R}}) \int d\Omega_e Y_L(\mathbf{e}) Y_{L'}^*(\mathbf{e}) Y_{L''}(\mathbf{e}). \quad (\text{A.21})$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r}'_n + \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{R}_{n-1}) & = -ik \sum_{L_n} \sum_{L_{n-1}} j_{L_n}(kr'_n) Y_{L_n}(\hat{\mathbf{r}}'_n) \\ & \times G_{L_n L_{n-1}}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n-1}) j_{L_{n-1}}(kr_{n-1}) Y_{L_{n-1}}^*(\hat{\mathbf{r}}_{n-1}). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Für  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  (am Ort des Detektors) kann man  $G_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_n)$  unter Verwendung von asymptotischem Verhalten (2.23) durch

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_n) \sim -\frac{e^{ikr}}{r} \sum_{L_n} i^{-l_n} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} Y_{L_n}(\mathbf{k}) j_{L_n}(kr_n) Y_{L_n}^*(\hat{\mathbf{r}}_n) \quad (\text{A.23})$$

approximieren.

Die Streumatrizen  $t^{\mathbf{R}_n}$  werden ebenfalls in der Drehimpulsdarstellung eingesetzt (2.29). Unter Voraussetzung, daß sich die MT-Potentiale nicht überlappen, sind die radialen Integrationen auf  $r_n, r'_n < R_{MT}$  beschränkt. Somit ergibt jede Streuung folgende Terme

$$t_{l_n}^{\mathbf{R}_n} = -ik \int_0^{R_{MT}} dr_n r_n^2 \int_0^{R_{MT}} dr'_n r_n'^2 j_l(kr_n) t_l(r_n, r'_n) j_l(kr'_n). \quad (\text{A.24})$$

An Orten  $\mathbf{R}_1$ , wo die erste Streuung passiert, muß die Emitterwelle  $\Psi_0$  (2.38) entsprechend (A.20) um  $\mathbf{R}_1$  entwickelt werden:

$$\Psi_0(\mathbf{r}'_1 + \mathbf{R}_1) = -ik \sum_L \sum_{L_1} j_{l_1}(kr'_1) Y_{L_1}(\hat{\mathbf{r}}'_1) G_{L_1 L}(\mathbf{R}_1) M_L \quad (\text{A.25})$$

Mit Hilfe von (A.22) bis (A.25) läßt sich der Beitrag  $n$ -ter Ordnung von der Streuwelle (2.37) ausrechnen, und die Gesamtwellefunktion für PED als Produkt von Streupfadoperator und Matrixelement schreiben (2.42).