

**Manifestation
magnetischer Phasenübergänge
in Auger Elektronen
und Auftrittspotential-Spektroskopie**

**Manifestation of Magnetic Phase Transitions
in Auger Electron and Appearance Potential Spectroscopy**

Gerhard Geipel

IPP 9/96

Dezember 1992

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

Dezember 1992

Kurzfassung

Sowohl die Auger-Elektronen-, als auch die sogenannte Auftrittspotential-Spektroskopie (AES bzw. APS) sind seit langem etablierte Methoden, wenn es um die Elementanalyse an Festkörpern geht. Die Frage jedoch, wie erhaltene Spektren zu verstehen sind, wenn das untersuchte System einen magnetischen Phasenübergang aufweist, ist bislang nicht adäquat behandelt worden.

Kollektiver Magnetismus, Supraleitung und Metall-Isolator-Übergänge sind Beispiele typischer Korrelationseffekte in Übergangsmetallen, deren 3d- und 4f-Bänder wesentlich für diese verantwortlich sind. Es werden Modelle vorgestellt und ausgewertet, die von der Annahme ausschließlich *intraatomarer* Coulomb-Wechselwirkungen ausgehen und eine realitätsnahe Beschreibung dieser Vielteilchenphänomene liefern können. Resultierende magnetische Phasen werden mit Hilfe der *Einteilchen-Spektraldichte* diskutiert.

Doch beruhen AES und APS auf der simultanen Anregung *zweier* Quasiteilchen; ihre gemeinsame Schlüsselfunktion ist daher die *Zweiteilchen-Spektraldichte*. Um nun herauszufinden, wie sich darin die Information über den elektronischen Zustand der Materie manifestiert, kann man die Zweiteilchen- in ein Funktional der Einteilchen-Spektraldichte umwandeln und nach einfachem Multiplizieren mit einem thermodynamischem Faktor AE- und AP-Intensitäten explizit ausrechnen. Ein wichtiger Gedanke ist dabei, daß sowohl die für den Magnetismus mit entscheidende Coulombwechselwirkung zwischen den 3d- oder 4f-Elektronen, als auch die AE- bzw. AP-Anregung in dominanter Weise *lokal* ist. Das legt bei der Diskussion der Spektren die Unterteilung der Korrelationen in *direkte* nahe, die unmittelbar zwischen den Teilchen wirken, und *indirekte*, bei denen die Wechselwirkung der AE- bzw. AP-Partner mit dem restlichen Elektronensystem zum Tragen kommt.

Indirekte Korrelationen bewirken eine gewisse „Grobstrukturierung“ aller Spektren und werden mit der magnetischen Ordnung in Zusammenhang gebracht. Ihre Auswirkung auf AES bzw. APS wird quantitativ beschreibbar, wenn man das Temperaturverhalten der Zweiteilchen-Spektren mit dem der Quasiteilchen-Zustandsdichten vergleicht, die aus der Einteilchen-Spektralfunktion abgeleitet werden. Wenn das System aus mindestens zwei Bändern besteht, so ist darüberhinaus eine „spinaufgelöste“ Spektroskopie möglich. Die direkten Korrelationen verursachen u.U. stabil gebundene, durch das Kristallgitter propagierende Zweiteilchen-Zustände mit sehr hohem spektralen Gewicht, die als Satelliten in Erscheinung treten.

¹Diese Arbeit ist identisch mit einer Dissertation gleichen Titels, die im Dezember 1992 an der Universität Bayreuth eingereicht wurde.

December 1992

Abstract

Auger electron spectroscopy (AES) and appearance potential spectroscopy (APS) have long been well-established methods of elemental analysis of solids, but the problem of correctly understanding the spectra yielded by probes showing magnetic phase transitions has not been adequately treated up to now.

Collective magnetism, superconductivity and metal insulator transitions are typical examples of correlation effects in transition metals, these being mainly caused by 3d- and 4f-subbands. The models introduced and evaluated assume onsite (*intraatomic*) Coulomb interactions, thereby providing a realistic description of such many-body phenomena. The different magnetic states resulting are discussed by means of the *one-particle spectral weight function (SWF)*.

In AES and APS, however, *two* quasiparticles are excited simultaneously and both spectroscopies are based on the *two-particle SWF*, which they have in common. In order to find out in what manner the information on the electronic state of matter is manifested in the spectra, one may express this function in terms of the one-electron SWF. In the last step, the AE and AP intensities are obtained simply by multiplying it by a respective thermodynamic factor. It is an important assumption that the Coulomb interaction between the 3d- or 4f-electrons, which is very important for the existence of spontaneous magnetic ordering, is predominantly *local* like the central two-particle excitation process. So it is reasonable to divide the electron correlations into *direct* ones between the two excited particles, and *indirect* ones resulting from the interactions in the residual electron system.

Indirect correlations cause the rough structure of all spectra and the collective spin order. Their influence on AES and APS is made evident by comparing their temperature behaviour with that of the quasiparticle density of states which is derived from the one-particle SWF. If the system consists of more than one electron band, "spin-resolved" spectroscopy becomes possible. The direct correlations, under certain circumstances, are responsible for tightly bound two-particle states appearing as satellites which take away almost the full spectral weight.

¹This report is identical with a thesis with the same title which was submitted to the University of Bayreuth in December 1992.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Das Lander-Modell	7
1.2	Zweiteilchenanregungen und elektronische Korrelationen	10
1.3	Allgemeines zur Zweiquasiteilchen-Spektroskopie	14
1.4	Ein- und Zweiteilchenpart	19
2	AES und APS am nicht entarteten System	21
2.1	Das Modell	21
2.2	Der Zweipol-Ansatz	23
2.3	Die Einquasiteilchen-Zustandsdichte	31
2.4	Zweiquasiteilchen-Spektroskopie	38
2.5	AES und APS am paramagnetischen Band	49
2.6	Der Phasenübergang in den Zweiteilchen-Spektren	56
3	Exakte Aussagen	72
3.1	Das Multiband-Modell	72
3.2	Die Multiband-Linienform	75
3.3	Summenregeln und Korrelationen	76
3.4	APS an leeren Bändern	77
3.5	Exakte AP-Intensitäten	83
3.6	AES an vollständig gefüllten Bändern	93
3.7	Exakte AE-Intensitäten	95
4	Das magnetische Multiband-System	101
4.1	Die Multiband-Zweiteilchen-Spektraldichte	101
4.2	Gekoppelte Einquasiteilchen-Zustandsdichten	111

4.3	Modellparameter und magnetische Phasenübergänge	113
4.4	Einteilchenanregungen im Zweiband-System	119
4.5	Gekoppelte Zweiteilchen-Spektraldichten	122
4.6	Spinaufgelöste Zweiteilchen-Intensitäten	128
4.7	Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen	137
5	Resümee und Ausblick	139
5.1	Zusammenfassung	139
5.2	Weiterführende Aspekte	141
	Abbildungsverzeichnis	143
	Literaturverzeichnis	146

Kapitel 1

Einleitung

Die Auger-Elektronen- und die Auftrittspotential-Spektroskopie (AES und APS) haben neben ihrer Anwendung zur Elementanalyse zunehmend an Bedeutung als Untersuchungsmethoden für elektronische Zustände in Festkörpern und an Festkörperoberflächen gewonnen [1]–[7].

Weil die mittlere freie Weglänge von Elektronen im Festkörper bei kinetischen Energien von einigen hundert eV in der Größenordnung von 1 nm liegt [8] können beide Zweiteilchen-Spektroskopien zur Untersuchung der geometrischen Nahordnung an Festkörperoberflächen eingesetzt werden [9, 10]. Auch die Analyse der chemischen Umgebung im Hinblick auf Zustand und Energie der Bindung sind wichtige Anwendungsgebiete. In diesem Felde wird AES zwar häufiger angewendet [11, 12] als APS, weil bei letzterer Spektroskopie die Empfindlichkeit für den Elementnachweis stark variiert, doch stellt APS bei speziellen Anwendungen eine wertvolle Ergänzung dar, wie z.B. bei der Analyse von Stahllegierungen [13].

In jüngster Zeit hat sich das Interesse an spinaufgelösten Messungen an magnetischen Materialien verstärkt, und die beiden Zweiteilchen-Spektroskopien rücken als mögliche Informationsquellen über elektronische Korrelationseffekte und damit als Komplement zu Einelektronen-Spektroskopien wie z.B. der spinaufgelösten inversen Photoemission in den Vordergrund. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich auf die theoretische Behandlung von Zweiteilchenanregungen in idealen, kristallinen Festkörpern, an denen ein Corezustand und das Valenzband beteiligt sind. Für solche Prozesse hat sich in der Auger-Elektronen-Spektroskopie das Kürzel „CVV“ eingebürgert. Abb. 1.0.a zeigt vereinfachte Energieschemata der elementaren Übergänge jeweils bei AES bzw. APS. Bei einem CVV-AE-Prozeß geht man von einem Atom aus, das in einem inneren Core ionisiert worden ist. Dieser Core-Lochzustand liege bei der Energie E_{Core} . μ ist das chemische Potential. Ein Elektron mit der Energie $E(k_1)$ aus dem besetzten Teil des Valenzbandes rekombiniert mit dem Core-Loch und hebt in einem strahlungslosen Übergang ein anderes Elektron über das Vakuumniveau E_{Vac} , das sich zuvor in einem Zustand mit der Energie $E(k_2)$ befand und welches nun das System mit der kinetischen Energie E_{kin} verläßt. Bei einer AP-Anregung dagegen trifft ein Primärelektron mit der Energie E_{kin} auf das System und nimmt unter Energieverlust einen Zustand mit der Energie $E(k_2)$ innerhalb des unbesetzten Teils des Valenzbandes an. Wenn die kinetische Energie einen gewissen Schwellenwert übersteigt, so ist die Anregung eines inneren Elektrons in einen Zustand mit der Energie $E(k_1)$ möglich.

Aufgrund der Elementarprozesse hat man von AES bzw. APS Informationen über elek-

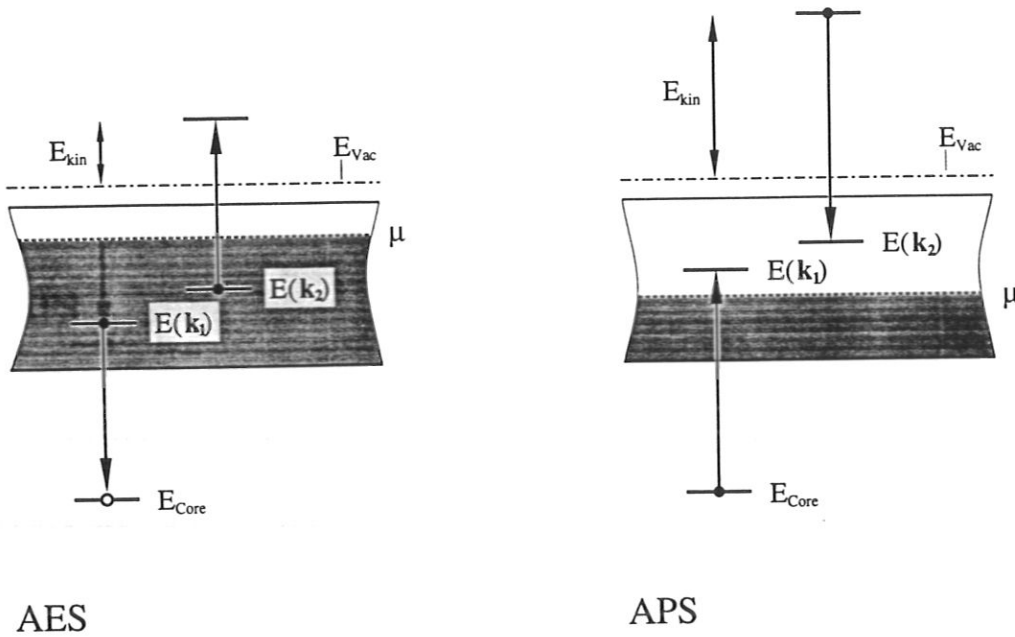


Abbildung 1.0.a: Elementare Anregungsprozesse für AES und APS (nach [14]).

tronische Zweiteilchenzustände zu erwarten. Die beiden angeregten Elektronen (APS) bzw. Löcher (AES) können im allgemeinen miteinander wechselwirken, und weil die Coulombabstoßung zwischen den Teilchen für magnetische Ordnung von Bedeutung ist, erhebt sich die Frage, ob man mit AES und APS nicht sogar einen direkten Zugang zu Korrelationseffekten in der Hand hat und auf welche Weise die Wechselwirkung zwischen den Elektronen die Spektren beeinflusst. Sind aber AES und APS gut genug verstanden, um aus gegebenen Zweiteilchenspektren Schlüsse auf den Mechanismus ziehen zu können, der bei einem gegebenen System für Kollektivphänomene sorgen kann und der damit für den makroskopischen Zustand der Probe entscheidend ist? Inwieweit erlaubt der theoretische Stand bei AES oder APS zuverlässige Aussagen über Resultate von Messungen an magnetischen Systemen?

Die folgenden Darlegungen haben die Zielsetzung, zur Beantwortung der eben genannten Fragestellungen beizutragen, indem man von einem Modellsystem mit bekanntem magnetischen Phasenübergang ausgeht und versucht, dessen Verhalten in errechneten AE- und AP-Spektren wiederzufinden. Bevor eine Kapitelübersicht gegeben wird, sollen einige Grundbegriffe im Rahmen dieser Einleitung erläutert werden.

Um den Aufwand überschaubar zu halten, liegt der Schwerpunkt der Abhandlung auf Bandferromagneten, Systemen also, deren elektrische und magnetische Eigenschaften von ein und derselben Gruppe wechselwirkender itineranter Elektronen getragen werden [15]. Zu den bedeutenden physikalischen Grundgrößen, anhand derer sich Bandmagnete charakterisieren lassen, gehört neben der Wechselwirkung zwischen den Teilchen die noch genauer zu diskutierende Einelektronen-Zustandsdichte.

1.1 Das Lander-Modell

Die Vorstellung, daß AES — genauer: der CVV-Prozeß — Informationen über den besetzten Teil der Eielektronen-Zustandsdichte liefern könnte, ist schon recht alt. Sie geht auf eine Arbeit von Lander zurück, der Auger-Intensitäten als die Selbstfaltung der besetzten Zustandsdichte interpretierte [16].

Amelio [17] war vermutlich der erste, der für diese Behauptung eine experimentelle Bestätigung fand, indem er die Zustandsdichte von Si durch Entfaltung der $L_{23}VV$ -Auger-Linienform gewinnen konnte. In komplementärem Sinne würde man von APS erwarten, den *unbesetzten* Teil der Zustandsdichte des Valenzbandes ableiten zu können. Dies demonstrieren Arbeiten von Dose und Mitarbeitern [18]–[22].

APS und AES wären also im Grunde nichts anderes als einfache Untersuchungsmethoden für *Einteilchengrößen* und damit gewissermaßen nur Konkurrenten für die (inverse) Photoemissionsspektroskopie (PES(IPE)). Ein anderer wichtiger Punkt ist die Bedeutung von Korrelationseffekten im wechselwirkenden Elektronensystem für die Zweiteilchenspektren. Um beide Aspekte genauer untersuchen zu können, werden zunächst die wichtigsten Vorbedingungen genannt, die zum Lander-Modell geführt haben.

Vorübergehend sei angenommen, daß Korrelationen keine Rolle spielen. Dann läßt sich an Abb. 1.0.a ein sehr einfaches Energieerhaltungsgesetz ablesen:

$$E_{kin} + (E_{Vac} - E(k_2)) = E(k_1) - E_{core} \quad (1.1.1)$$

E_{Core} bzw. E_{Vac} ist die Energie des Core- bzw. Vakuum-Niveaus. Normalerweise betrachtet man die Intensität der Auger-Elektronen als Funktion ihrer kinetischen Energie:

$$E_{kin} = (E(k_1) + E(k_2)) - (E_{Vac} + E_{Core}) \quad (1.1.2)$$

Die letzte Klammer in (1.1.2) wird als Konstante angesehen, die lediglich den Energienullpunkt betrifft.

Alle Auger-Übergänge, die die gleiche Summe von Einteilchen-Energien aufweisen,

$$E = E(k_1) + E(k_2), \quad (1.1.3)$$

gehören zu ein und derselben kinetischen Energie des Auger-Elektrons, welches im Meßprozeß nachgewiesen wird [14]. Die Linienform ist dann durch eine gewichtete Summation aller solcher Prozesse gegeben,

$$I_{AES}(E) = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} |M_{CVV}(E(\mathbf{k}_1), E(\mathbf{k}_2))|^2 \cdot \delta(E - E(\mathbf{k}_1) - E(\mathbf{k}_2)), \quad (1.1.4)$$

wobei M_{CVV} das Matrixelement der Übergangswahrscheinlichkeit ist. Mit Hilfe der Blochzustandsdichte wechselwirkungsfreier Elektronen (Bloch density of states: BDOS),

$$\rho_0(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x - E(\mathbf{k})), \quad (1.1.5)$$

läßt sich die Glg. (1.1.4) umschreiben:

$$I_{AES}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |M_{CVV}(x, E-x)|^2 \rho_0(x) \rho_0(E-x). \quad (1.1.6)$$

Man erhält das bekannte Lander-Resultat, wenn man annimmt, daß das Matrixelement für alle Energien des besetzten Teils des Valenzbandes einen konstanten, endlichen Wert besitzt, während es dagegen bei allen Energien im unbesetzten Teil verschwindet:

$$I_{AES}^L(E) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\rho}_0(x) \bar{\rho}_0(E-x) \quad . \quad (1.1.7)$$

$\bar{\rho}_0$ ist die Dichte *besetzter* Blochzustände. Die Lander-Formel besagt also, daß das Auger-Spektrum durch die Selbstfaltung der besetzten „freien“ BDOS gegeben ist. Sollte sie korrekt sein, so erhielte man in der Tat durch bloßes Entfalten der Auger-Linienform die Einelektronen-Zustandsdichte.

Mit APS als der zu AES „inversen“ Spektroskopie würde man dementsprechend *unbesetzte* Zustände im Energieband des Festkörpers ausmessen. Die elementare Anregung ist derjenigen für AES sehr ähnlich, wie auch Abb. 1.0.a zeigt; man bräuchte nur die Einteilchen-Energien $E(k_1)$ und $E(k_2)$ in den unbesetzten Valenzbandteil zu legen und die Richtungen des Übergangs umzukehren. Im Grunde entspricht so der Anfangszustand bei AES dem Endzustand bei APS — und umgekehrt. Deshalb lassen sich alle für die Lander-Formel geltenden Überlegungen mit der gleichen Berechtigung auf die APS-Linienform übertragen [14]:

$$I_{APS}^L(E) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho_0^*(x) \rho_0^*(E-x) \quad . \quad (1.1.8)$$

ρ_0^* ist die Dichte unbesetzter Blochzustände.

Die Gln. (1.1.7) und (1.1.8) sind offenbar eine wichtige Motivation für die Anwendung von AES und APS in der Festkörperphysik. Etliche z.T. folgenschwere Vereinfachungen spielen darin eine wichtige Rolle:

1) Die vom emittierten Auger-Elektron ausgehende Störung des restlichen Systems wird vernachlässigt („sudden approximation“). Auch wird angenommen, daß bei AES und ebenso bei APS der elementare Anregungsprozeß aus dem Grundzustand des betreffenden Atoms heraus erfolgt. Eine solche Näherung ist solange unproblematisch, wie das Energieband keine Zeit hat, auf den plötzlich am Atomort erfolgenden Ladungswechsel zu reagieren, bis das nachgewiesene Teilchen das System verlassen hat. Eine ausführliche qualitative Diskussion findet sich z.B. in Ref. [7].

2) Des weiteren wird angenommen, daß das Core-Loch (Anfangszustand bei AES, Endzustand bei APS) die Spektren nicht beeinflusst. Zu dieser recht groben Vereinfachung gibt es experimentelle Gegenbeispiele, die eine Abhängigkeit der AE-Spektren vom Anfangszustand belegen [23]. Das Core-Loch stellt, zumindest lokal, eine erhebliche Störung des Valenzbandes dar. Cini schlägt eine Behandlung dieses Effekts auf der Grundlage eines statischen Core-Elektron-Potentials vor, an dem die Bandelektronen gestreut werden [24]. Die endliche Lebensdauer des Core-Zustandes ließe sich am einfachsten berücksichtigen, indem man die theoretisch erhaltene Linienform mit einer Lorentzfunktion faltet.

Natta und Joyes [25] haben einen etwas komplizierteren Ansatz aufgestellt, der auch Abschirmeffekte des Elektronengases berücksichtigt; andere Korrelationen werden dafür jedoch außer acht gelassen. Es gibt gewisse Parallelen zur Röntgenemissionsspektroskopie an Metallen, wo bereits exakte Resultate vorliegen [26].

3) Die Übergangsmatrixelemente sind in Wirklichkeit weder vom Wellenvektor, noch von der Energie unabhängig. Inwieweit dies eine Rolle spielt, muß von Fall zu Fall überprüft werden. In Materialien wie z.B. Si und Al, bei denen sich nach dem Auger-Übergang zwei Löcher im sp-Valenzband befinden, hat sich deren Bedeutung bereits erwiesen [27]. Man konnte zeigen, daß Matrixelemente, die zwei p-Wellenfunktionen involvieren (p-p-Prozesse), weit größer sind, als diejenigen mit s-p- oder s-s-Termen [28]. Infolgedessen müßte die Auger-Linienform eher durch die Selbstfaltung partieller, p-artiger Zustandsdichten dargestellt werden können, als durch die Selbstfaltung der vollen Valenzband-Zustandsdichte [29]. Plausibel ist auch, daß in hybridisierten Valenzbändern aufgrund bestimmter Auswahlregeln gewisse Übergänge gegenüber anderen bevorzugt auftreten. Ein Beispiel dafür ist Al [30].

Zur Ergänzung sei noch erwähnt, daß sich aufgrund von Symmetrieeigenschaften der Matrixelemente aus den Spektren Informationen über die geometrische Nahordnung gewinnen lassen [31].

4) Die vollkommene Vernachlässigung der Wechselwirkungen zwischen den Elektronen ist der wohl gravierendste Mangel der Lander-Formel (1.1.7) bzw. (1.1.8). Dabei läßt sich zwischen einem direkten Einfluß auf Korrelationseffekte — aufgrund der Wechselwirkung zwischen den beiden angeregten Elektronen oder Löchern — und einer *indirekten* Wirkung unterscheiden, die der Anwesenheit des restlichen wechselwirkenden Elektronensystems zu verdanken ist. Im vollständig gefüllten oder leeren Band treten indirekte Korrelationseffekte nicht auf [32, 33], während man im teilweise besetzten System mit beiden Phänomenen zu rechnen hat. Dieser Punkt wird weiter unten noch ausführlicher behandelt.

Es wird oft gesagt, daß ein großer Vorteil von APS und AES eben gerade in ihrer Aussagekraft über elektronische Korrelationen bestünde und sich daher ihre Anwendung auf Festkörper empfehlen würde. Dann aber erscheinen Modelle, welche Korrelationen bereits vom Ansatz her außer acht lassen, für die Beschreibung von Zweiteilchen-Spektroskopien völlig ungeeignet. Dem Lander-Modell und seiner weiten Verbreitung muß man andererseits zwei Dinge zugute halten: Bei manchen Materialien paßt die Vorstellung von der selbstgefalteten Zustandsdichte recht gut [23, 34, 35, 36], während bei Systemen, an denen sie eindeutig versagt [29, 35], [37]–[45], kaum jemals klar besprochen wird, auf welche Weise und durch welche Korrelationen die Abweichungen zustandekommen. Leider ist es bislang unmöglich, *vor* einer Untersuchung zu entscheiden, ob elektronische Korrelationen bedeutungslos (also schwach genug) sind, oder nicht. Bereits existierende Interpretationen von AE- oder AP-Spektren beziehen sich lediglich auf die Einelektronen-Zustandsdichten und basieren auf Bandstrukturechnungen. Diesen Resultaten fehlt letztlich die „predictive power“. Deshalb besteht Bedarf an einer Theorie über AES und APS, die für alle Korrelationsstärken gültig ist.

5) Die Entartung der Bänder wird nicht berücksichtigt. Bei den meisten Systemen von Interesse besteht das Valenzband nicht nur aus einem einfachen s-Band, sondern außerdem aus einem entarteten d-Band-Komplex. Also ist es fragwürdig, ob — wenn überhaupt — die Beziehungen (1.1.7) und (1.1.8) auf die *gesamte* Zustandsdichte angewendet werden sollten.

1.2 Zweiteilchenanregungen und elektronische Korrelationen

Powell entdeckte an CVV-Spektren von Ag erhebliche Abweichungen [35] von entsprechenden Vorhersagen des Lander-Modells und wies auf die Erzeugung unbesetzter, am Atomort lokalisierter Zustände hin. Dies initiierte theoretische Überlegungen, die sich mit dem Zusammenhang zwischen der AES-Linienform und lokal auftretenden elektronischen Wechselwirkungen im Festkörper befassten.

In einer frühen Arbeit von Cini [46] wird eine Berechnung der Zweiteilchen-Zustandsdichte vorgestellt, die unter der Voraussetzung exakt ist, daß das Energieband zu Beginn des Elementarprozesses vollständig besetzt ist und sich durch den folgenden Hamiltonoperator beschreiben läßt:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 . \quad (1.2.1)$$

Hierbei soll — im Formalismus der zweiten Quantisierung — der erste Summand H_0 ,

$$H_0 = U n_{0\sigma} n_{0-\sigma} , \quad (1.2.2)$$

die Abstoßung mit der Coulombenergie U zwischen den beiden Löchern erfassen, die der Auger-Prozeß an dem Atom erzeugt hat, das sich am Gitterplatz 0 befindet. $n_{0\sigma}$ ist der Anzahloperator für ein Loch an der Stelle 0 mit dem Spin σ . Die Möglichkeit, daß nach der Anregung jedes Loch durch den Kristall diffundiert, wird durch den Term H_1 zum Ausdruck gebracht:

$$H_1 = \sum_{i,\sigma} (T_{i0} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + T_{0i} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) ; \quad (1.2.3)$$

T_{i0} ist das Matrixelement für das „Hüpfen“ eines Teilchens vom Gitterplatz 0 auf die Stelle i ; $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ($c_{i\sigma}$) ist der Operator für die Erzeugung (Vernichtung) eines Loches mit dem Spin σ am Platz i . Das Energieband wird durch H_2 repräsentiert:

$$H_2 = \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i,j \neq 0}} T_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} . \quad (1.2.4)$$

Für den Fall, daß alle Hopping-Matrixelemente verschwinden, gilt:

$$H_1 = H_2 = 0 ; \quad (1.2.5)$$

die beiden Löcher können sich vom Ursprung nicht fortbewegen, so daß der einzige Eigenzustand $|00\rangle$ des Systems bekannt ist. Hebt man (1.2.5) wieder auf, so wird das Elektronensystem die Eigenzustände $|m\rangle$ annehmen können. Daher läßt sich für die AES-Linienform schreiben [46]:

$$I_{AES}(E) = \sum_m |(00|m)|^2 \delta(E - \varepsilon_m) . \quad (1.2.6)$$

Mit Hilfe der Definitionsgleichung für deren Fouriertransformierte,

$$\begin{aligned} I_{AES}(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) \langle 00 | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | 00 \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) I_{AES}(t) , \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

mit

$$I_{AES}(t) = \sum_n \frac{(-it/\hbar)^n}{n!} \langle 00 | H^n | 00 \rangle, \quad (1.2.8)$$

leitet Cini auf der Grundlage der Operatoren in (1.2.1) – (1.2.4) die folgende exakte Integralgleichung ab:

$$I_{AES}(t) = D_0(t) - \frac{i}{\hbar} U \int_0^t dt' I_{AES}(t') D_0(t - t'). \quad (1.2.9)$$

Auf die Details der Ableitung soll hier nicht weiter eingegangen werden. $D_0(t)$ ist das Quadrat der lokalen, fouriertransformierten Einteilchen-Zustandsdichte, was gleichbedeutend mit der Selbstfaltung $D_0(E)$ der *energieabhängigen* Zustandsdichte $\rho(E)$ ist:

$$D_0(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) \rho(E - x). \quad (1.2.10)$$

Bei verschwindender Coulombabstoßung erhielte man aus der Integralgleichung letztlich die Lander-Formel (1.1.7). Für endliche Werte von U ist Glg. (1.2.9) zumindest numerisch auswertbar, vorausgesetzt, die Eielektronen-Zustandsdichte ist gegeben. Das stellt jedoch weiter kein Problem dar, weil letztere mit den Hopping-Matrixelementen T_{ij} , in denen die Information über die Kristallstruktur steckt, festliegt [47]. Cini demonstriert [46], daß die aus (1.2.9) erhaltene und nach der Energie zurücktransformierte Linienform empfindlich und in nicht trivialer Weise vom Quotienten aus U und der Breite des Energiebandes abhängt.

In einer späteren Publikation [48] wird H_0 durch einen Wechselwirkungsoperator ersetzt, der die möglicherweise unterschiedlichen magnetischen Quantenzahlen der beiden unbesetzten atomaren Zustände berücksichtigt. Es wird auch darauf hingewiesen, daß anstelle von H_1 und H_2 ein Einteilchen-Operator gewählt werden kann, der für die Beschreibung eines konkret vorliegenden Elektronensystems angemessen erscheint. Geht man aber in dem voll besetzten Band von einem *freien* Elektronengas aus, das das Atom, welches im Auger-Prozess „ionisiert“ wird, nicht beeinflusst [48], so läßt sich eine exakte Bestimmungsgleichung für die AES-Linienform aufstellen, die (1.2.9) formal gleicht. Die darin auftretenden Größen sollten nur nach der magnetischen Quantenzahl und dem Bahndrehimpuls der Valenzschale des durch den Übergang ausgezeichneten Atoms unterschieden werden. Darauf wird hier der Einfachheit halber verzichtet. Cini löst die (1.2.9) entsprechende Integralbeziehung durch Laplacetransformation und erhält:

$$I_{AES}(E) = \frac{D_0(E)}{[1 - U F_0(E)]^2 + [\pi U D_0(E)]^2}. \quad (1.2.11)$$

$F_0(E)$ ist die Hilberttransformierte von $D_0(E)$:

$$F_0(E) = \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{D_0(E')}{E - E'}. \quad (1.2.12)$$

Liegt die untere Kante des Energiebandes bei ε_0 , die obere bei ε_1 , so ist $D_0(E)$ gemäß der Glg. (1.2.10) im Bereich

$$2\varepsilon_0 \leq E \leq 2\varepsilon_1$$

von Null verschieden. Mit der Darstellung der δ -Distribution,

$$\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} \delta(x), \quad (1.2.13)$$

erhält man bei Energien außerhalb des o.g. Intervalls aus der Auger-Linienform (1.2.11):

$$I_{AES}(E) \Rightarrow \frac{1}{U} \delta(1 - UF_0(E)). \quad (1.2.14)$$

Bei Energien $E > 2\varepsilon_1$ fällt $F_0(E)$ wie $1/E$ ab. Man kann sich klarmachen, daß $F_0(E > 2\varepsilon_1)$ umso kleiner sein muß, je größer die Breite $W = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$ des Bandes ist. Ist also der Quotient U/W groß genug, so besteht das Spektrum aus zwei Teilen, einem „bandartigen“ Part und einem δ -Peak-förmigen „Satelliten“. Letzterer wird von Cini als lokalisierter, gebundener Zwei-Löcher-Zustand interpretiert [48].

Mit der soeben umrissenen Theorie ist nicht ohne Erfolg versucht worden, solche CVV-Spektren zumindest ansatzweise zu verstehen, die durch die Eigenschaften breiter Elektronenbänder [49] und/oder durch Anregungen atomarer Multipletts in Festkörpern [50, 36] zustande kommen. Die Übertragung der in [46] und [48] entwickelten Modellvorstellungen auf magnetische Elektronensysteme ist jedoch sehr problematisch:

1) Voll besetzte (und vollkommen leere) Valenzbänder sind unmagnetisch! Eine unter diesen Voraussetzungen aufstellbare *exakte* Theorie ist zwar von großem Reiz, im Falle eines Bandferromagneten wird man jedoch nicht umhin können, teilweise gefüllte Energiebänder zu diskutieren. Approximationen werden dann nicht zu vermeiden sein.

2) Der in Ref. [46] und für die Herleitung der Glg. (1.2.11) auch in Ref. [48] verwendete Hamiltonoperator H_2 , Glg. (1.2.4), beschreibt ein System, in welchem die Elektronen nicht miteinander wechselwirken. In einem Band, das zu kollektiver Ordnung in der Lage ist, existieren jedoch mehr oder weniger starke Korrelationen, denen man mit der Wahl eines adäquat erscheinenden Operators Rechnung zu tragen hat. Beispielsweise wird im Hubbard-Modell, [51, 52, 53], die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen berücksichtigt, welche an jedem Gitterplatz möglich ist. Dieses Modell ist bereits früh Gegenstand intensiver Untersuchungen gewesen [54, 55]. Unter der Voraussetzung kurzreichweitiger, intraatomarer Wechselwirkungen eignet es sich für die Diskussion typischer Eigenschaften itineranter Bandferromagnete, wie z.B. dem ($T = 0K$)-Moment, der kritischen Temperatur oder dem Curie-Weiß-Verhalten in hervorragender Weise. Mit einem in gewisser Hinsicht erweiterten Hubbard-Hamiltonoperator ist in jüngster Zeit eine annähernd perfekte Beschreibung des klassischen Bandferromagneten Ni gelungen [56, 57]. Die dazu entwickelte Vielteilchentheorie gelangt teilweise auch in dieser Arbeit zur Anwendung.

3) Der Operator H_0 , Glg. (1.2.2), wird verwendet, um das im Auger-Prozeß ionisierte Atom hervorzuheben. Damit ist im System ein Gitterplatz ausgezeichnet, und die Theorie läßt sich einer Situation anpassen, wie sie in einem Kristall mit einem Fremdatom oder z.B. auch bei einem Festkörper mit einem Chemisorbat vorliegen kann. Im Prinzip ist ein single-impurity-Problem gegeben. Wenn aber das System nur aus physikalisch gleichwertigen Gitterstellen besteht, so läßt sich H_0 in dem Modell, das mit den Gleichungen (1.2.1) – (1.2.4) aufgestellt ist, nur noch dann rechtfertigen, wenn der Endzustand des Auger-Prozesses durch den Hamiltonoperator mit beschrieben werden soll. Cini schlägt sogar vor [48], den *vollständigen* Auger-Prozeß, der zu Anfang die Erzeugung eines unbesetzten Core-Zustandes mit einschließt, als Störung aufzufassen. Der physikalische Gehalt eines solchen

Modells soll hier zwar nicht in Frage gestellt werden. Doch stellt die vielteilchentheoretische Behandlung des itineranten Bandferromagnetismus allein bereits ein anspruchsvolles Problem dar: im wesentlichen muß eine Einteilchen-Spektralfunktion berechnet werden. Für AES ist darüber hinaus die Kenntnis der Zweiteilchen-Spektralfunktion erforderlich, ebenso für APS. Es erscheint daher sinnvoll, beide Aufgaben in getrennten Schritten zu lösen. Dieser Möglichkeit wurde bisher nur selten Beachtung geschenkt [14, 32, 33, 58].

Üblicherweise wird versucht, Zweiteilchen-Greenfunktionen als Funktionale von Einteilchengrößen auszudrücken [14, 24, 59, 32, 60, 61, 62]. In Ref. [24], die ein effektives single-impurity-Problem mit einem teilweise gefüllten Energieband zum Gegenstand hat, geschieht diese Zerlegung mit Hilfe der Leiterapproximation [63]. Das Einteilchen-Spektrum wird mit einer T -Matrix berechnet [64]. Dabei werden ausschließlich *freie* Einteilchen-Propagatoren verwendet; kollektive Anregungen können also nicht berücksichtigt werden. Aus dem gleichen Grunde ist diese Theorie nicht selbstkonsistent und zudem auf sehr kleine Loch- bzw. Elektronendichten, gleichbedeutend mit einem fast vollen bzw. fast leeren Band, beschränkt [65, 66].

Auch Trégliá et al. benutzen die Leiternäherung [67, 68]. Zu einer Modifikation des Hubbard-Modells wird die Einteilchen-Selbstenergie mit Hilfe einer Störungsentwicklung bis zur zweiten Potenz von U gewonnen. Dadurch eignet sich diese Theorie zwar für beliebige Teilchendichten, nicht jedoch für große Kopplungsstärken U/W . Die Anwendbarkeit auf die eigentlich interessierenden hochkorrelierten Systeme ist also nicht gegeben. Ein entscheidender Mangel ist auch die Nicht-Selbstkonsistenz, insbesondere im Hinblick auf das chemische Potential als Funktion der Bandbesetzung.

Drchal und Kudrnovský [59] entwarfen eine Kombination aus einer selbstkonsistenten T -Matrix-Näherung und der Leiterapproximation, die für alle Teilchendichten und Kopplungsstärken gültig ist. Ihre Arbeit bestätigt die Wichtigkeit der Selbstkonsistenz, selbst bei Metallen mit einer so geringen Lochkonzentration wie Ni.

Insgesamt entsteht der Eindruck, daß die Bedeutung von Korrelationseffekten in Energiebändern längst erkannt ist und Überlegungen darüber angestellt werden, wie deren Auswirkungen auf Zweiteilchen-Spektren beschrieben werden können, — wenn auch in der Literatur der Schwerpunkt eindeutig auf AES gelegt worden ist und sich kaum Aussagen über APS finden lassen. Es gibt einige wenige, aber sehr wichtige Punkte, die in den bisherigen Betrachtungen unterschätzt oder ganz außer acht gelassen worden sind. So zeigt der von Cini gefundene Satellit keine Dispersion und wird deshalb als ein lokal gebundener Zustand angesehen [48]. Diese Deutung, welche Nolting für wechselwirkende Elektronensysteme widerlegen kann [14], wird in anderen Veröffentlichungen selten verifiziert oder zumindest dahingehend erörtert, wie Auftreten und Gestalt dieser Struktur mit den Modelleigenschaften des Energiebandes zusammenhängen.

In keiner Arbeit, mit Ausnahme von [14], erscheint eine Temperaturabhängigkeit der Vielteilchengrößen; man verwendet lediglich Grundzustandsformalismen ($T = 0K$). Streng genommen, ist damit jeglicher Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Resultaten ausgeschlossen; Messungen finden nun einmal bei endlicher Temperatur statt. Natürlich bietet eine reine ($T = 0K$)-Rechnung auch keine Möglichkeit, in den Spektren magnetischer Systeme Phasenübergänge zu diskutieren. Im übrigen werden in den hier erwähnten Arbeiten ausschließlich para- oder unmagnetische Bänder behandelt. Außer in [67] und [14] erscheint nirgendwo eine Spinabhängigkeit; ferromagnetische Lösungen sind also von vornherein aus-

geschlossen.

Wie weiter unten dargelegt wird, gibt es im Hubbard-Modell bzw. in seinen Modifikationen für die Existenz spontaner Magnetisierung dezidierte Bedingungen. Sie betreffen neben der Temperatur sowohl die Bandbesetzung, als auch die Kopplungsstärke und die Blochzustandsdichte freier Elektronen. Deshalb ist es günstig, für das Einteilchen-Spektrum eine in sich abgeschlossene Theorie zu formulieren, die keine Einschränkungen der Modellparameter erfordert.

Das Problem der Berechnung von *Zweiteilchen-Spektren* läßt sich hiervon unabhängig bearbeiten. Wichtig ist dabei der Zusammenhang zwischen AES bzw. APS und der Vielteilchentheorie.

1.3 Allgemeines zur Zwei quasiteilchen-Spektroskopie

Eine weithin akzeptierte Annahme ist die Dominanz *intraatomarer* AE- und AP-Übergänge. Die beiden angeregten Elektronen oder Löcher befinden sich am selben Gitterplatz — aus dem einfachen Grund, weil der Core-Zustand wegen der durch starke Abschirmeffekte sehr kurzreichweitigen Coulombwechselwirkung der Elektronen in einem schmalen Valenzband [33, 34, 7] lokalisiert ist.

Deshalb erscheint es zweckmäßig, den zentralen Prozeß der An- oder Abregung im Energieband durch einen Operator zu beschreiben, der lokal wirkt:

$$\begin{aligned} Z_2 &:= c_{im\sigma}^+ c_{im'\sigma'}^+ \leftrightarrow \text{APS} \quad , \\ Z_{-2} &:= c_{im'\sigma'} c_{im\sigma} \leftrightarrow \text{AES} \quad , \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

Dies wird im folgenden auch mit Z_r abgekürzt; der Index r , $r = \pm 2$, bezieht sich auf die Änderung der Anzahl an Elektronen im Valenzband. $c_{im\sigma}^+$ ($c_{im\sigma}$) ist der Wannier-Operator, der am Gitterplatz R_i ein Elektron mit Spin σ erzeugt (vernichtet), das zum Teilband m gehört. Also erzeugt (vernichtet) Z_2 (Z_{-2}) am i -ten Gitterplatz ein Elektronenpaar, so wie es dem zentralen AP- (AE-) Prozeß in Abb. 1.0.a entspricht. Mit diesen einfachen Definitionen lassen sich für ein großkanonisches System einige nützliche und exakte Relationen ableiten [14]. Mit Ξ ,

$$\Xi = \sum_{N_e} \sum_n \exp[-\beta E_n(N_e)] \quad , \quad (1.3.2)$$

ist die großkanonische Zustandssumme des Festkörpers bei der Temperatur T gegeben, $\beta = (k_B T)^{-1}$. N_e ist die Anzahl der Elektronen. $|E_n(N_e)\rangle$ ist ein Eigenzustand, in welchem sich das System mit der Wahrscheinlichkeit

$$\Xi^{-1} \exp[-\beta E_n(N_e)]$$

befindet. Dann gibt der Ausdruck

$$\Xi^{-1} \exp[-\beta E_n(N_e)] |\langle E_m(N_e + r) | Z_r | E_n(N_e) \rangle|^2$$

die Wahrscheinlichkeit für einen durch Z_r bewirkten Übergang

$$|E_n(N_e)\rangle \Rightarrow |E_m(N_e + r)\rangle$$

bei fester Temperatur an. Die Gesamtheit all solcher Übergänge bei einer Anregungsenergie im Intervall $[E, E + dE]$ liefert die Linienform:

$$I^{(r)}(E) = \Xi^{-1} \sum_{N_e} \sum_{m,n} \exp[-\beta E_n(N_e)] |\langle E_m(N_e + r) | Z_r | E_n(N_e) \rangle|^2 \delta(E - (E_m(N_e + r) - E_n(N_e))) \quad (1.3.3)$$

Die δ -Distribution sorgt für die Energieerhaltung, so daß die Differenzen $E_m - E_n$ den Energieänderungen entsprechen, die im System auftreten, wenn r Elektronen (Quasiteilchen) entnommen oder hinzugefügt werden.

Die zentrale Größe der hier aufzubauenden Vielteilchentheorie ist die Spektraldichte A_r , die einen direkten Bezug zum Experiment haben soll und daher in geeigneter Weise in Zusammenhang mit der Linienform gebracht werden muß. Eine hierfür „passende“ Definition ist mit

$$A^{(r)}(t, t') := \frac{1}{2\pi} \langle [Z_r^+(t), Z_r(t')]_{-\varepsilon} \rangle \quad (1.3.4)$$

gegeben. Die Operatoren stehen in der Heisenberg-Darstellung und wirken zu verschiedenen Zeiten t und t' . Der Vorzeichenfaktor ε kennzeichnet dabei entweder den Kommutator ($\varepsilon = +$) oder Antikommutator ($\varepsilon = -$). Die Fouriertransformierte der Zweizeit-Spektralfunktion ist durch die Beziehung

$$A^{(r)}(t, t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(t - t')\right) A^{(r)}(E) \quad (1.3.5)$$

definiert. Nach dem Einschleiben eines vollständigen Satzes von Eigenzuständen läßt sich der thermodynamische Erwartungswert in $A^{(r)}(E)$ formal auswerten [69], und man erhält die sogenannte Lehmann-Darstellung der Spektraldichte:

$$A^{(r)}(E) = \frac{\hbar}{\Xi} \sum_{N_e} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |\langle E_m(N_e + r) | Z_r | E_n(N_e) \rangle|^2 (1 - \varepsilon e^{-\beta E}) \delta(E - (E_m(N_e + r) - E_n(N_e))). \quad (1.3.6)$$

Der Vergleich von (1.3.6) mit (1.3.3) führt sodann auf die gesuchte Verbindung zwischen $A^{(r)}$ und $I^{(r)}$:

$$I^{(r)}(E) = \frac{e^{\beta E}}{e^{\beta E} - \varepsilon} \cdot A^{(r)}(E). \quad (1.3.7)$$

Die Beziehung

$$Z_{-r} = Z_r^+ \quad (1.3.8)$$

hat die wichtige Symmetrie

$$I^{(r)}(E) = e^{\beta E} I^{(-r)}(-E) \quad (1.3.9)$$

zur Folge, insbesondere auch

$$A^{(r)}(E) = -A^{(-r)}(-E), \quad (1.3.10)$$

wie man sich mit Hilfe von (1.3.6) und durch Umbenennung der Summationsindizes leicht klarmacht. Man braucht also nur eine der beiden Spektraldichten zu berechnen. Normalerweise macht man dem zentralen Prozeß entsprechend die Festlegung:

$$\varepsilon = +, r = \pm 2 \text{ für AES, APS,} \quad (1.3.11)$$

aber diese Konvention ist nicht zwingend. Sie wird der rechentechnischen Bequemlichkeit wegen getroffen und soll ab jetzt feststehen.

Wie Glg. (1.3.3) erkennen läßt, ist die Linienform positiv definit; weil der Vorfaktor auf der rechten Seite der Glg. (1.3.7), wegen (1.3.11), am Energienullpunkt einen Vorzeichenwechsel hat,

$$\frac{e^{\beta E}}{e^{\beta E} - 1} := v_{|r|=2}^{\epsilon=\pm} \begin{cases} < 0 & \text{für } E < 0 \\ > 0 & \text{für } E > 0 \end{cases} , \quad (1.3.12)$$

gilt für $A^{(2)}(E)$:

$$A^{(2)}(E) \begin{cases} \leq 0 & \text{für } E < 0 \\ \geq 0 & \text{für } E > 0 \end{cases} . \quad (1.3.13)$$

Am Nullpunkt der Energie selbst muß die Kommutator-Spektraldichte verschwinden, wie Glg. (1.3.6) erkennen läßt:

$$(1 - e^{-\beta E}) \stackrel{E=0}{=} 0 \implies A^{(2)}(0) = 0 . \quad (1.3.14)$$

Nun sei noch eine letzte Vereinbarung getroffen, die die Symmetrierelation (1.3.8) ausnutzt. Sie betrifft die Wählbarkeit des Energienullpunktes. Die Energiedifferenzen in der δ -Distribution von (1.3.6) lassen sich abschätzen:

$$\begin{aligned} E_m(N_e + r) - E_n(N_e) &\equiv E_m(N_e) - E_n(N_e) + E_m(N_e + r) - E_m(N_e) \\ &\approx \varepsilon_{mn}(N_e) - r\mu(N_e) . \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

ε_{mn} sind die Anregungsenergien im N_e -Teilchensystem, μ ist das chemische Potential. Die Indizierung nach m und n wird im folgenden unterdrückt. Faßt man nun die Beziehungen (1.3.7) und (1.3.9) zusammen und benutzt (1.3.15), so erhält man:

$$I^{APS}(E - 2\mu) = \underbrace{\frac{\exp(\beta(E - 2\mu))}{\exp(\beta(E - 2\mu)) - 1}}_{v_{APS}} \cdot \frac{1}{\hbar} A^{(2)}(E - 2\mu) , \quad (1.3.16)$$

und

$$I^{AES}(2\mu - E) = \underbrace{\frac{1}{\exp(\beta(E - 2\mu)) - 1}}_{v_{AES}} \cdot \frac{1}{\hbar} A^{(2)}(E - 2\mu) . \quad (1.3.17)$$

$A^{(2)}$ ist also gewissermaßen die „Mutterfunktion“ beider Spektroskopien; es bedarf offensichtlich keiner getrennten Theorien zum besetzten und unbesetzten Teil des Valenzbandes, [14], sondern nur einer konsequenten, physikalisch plausiblen Untersuchung und Auswertung der energieabhängigen Zweiteilchen-Spektraldichte. Abb. 1.3.a veranschaulicht diesen Sachverhalt noch einmal schematisch. Die im ersten Teilbild mit v_{AES} und v_{APS} abgekürzten thermodynamischen Vorfaktoren filtern gewissermaßen aus $A^{(2)}$ I_{AES} und I_{APS} heraus. Das ist in Teil (b) der Abbildung dargestellt.

Man erkennt auch deutlich, daß sich beide Linienformen am Energienullpunkt (2μ) ein wenig überschneiden. Das ist eine Folge der Temperaturabhängigkeit von v_{AES} und v_{APS} . Bei $T = 0K$ verschwindet dieser gemeinsame Energiebereich, denn dann werden die beiden Konversionsfaktoren zu Stufenfunktionen:

$$\begin{aligned} v_{AES}(E - 2\mu) &\stackrel{T \rightarrow 0}{\implies} -\Theta(2\mu - E) , \\ v_{APS}(E - 2\mu) &\stackrel{T \rightarrow 0}{\implies} \Theta(E - 2\mu) . \end{aligned} \quad (1.3.18)$$

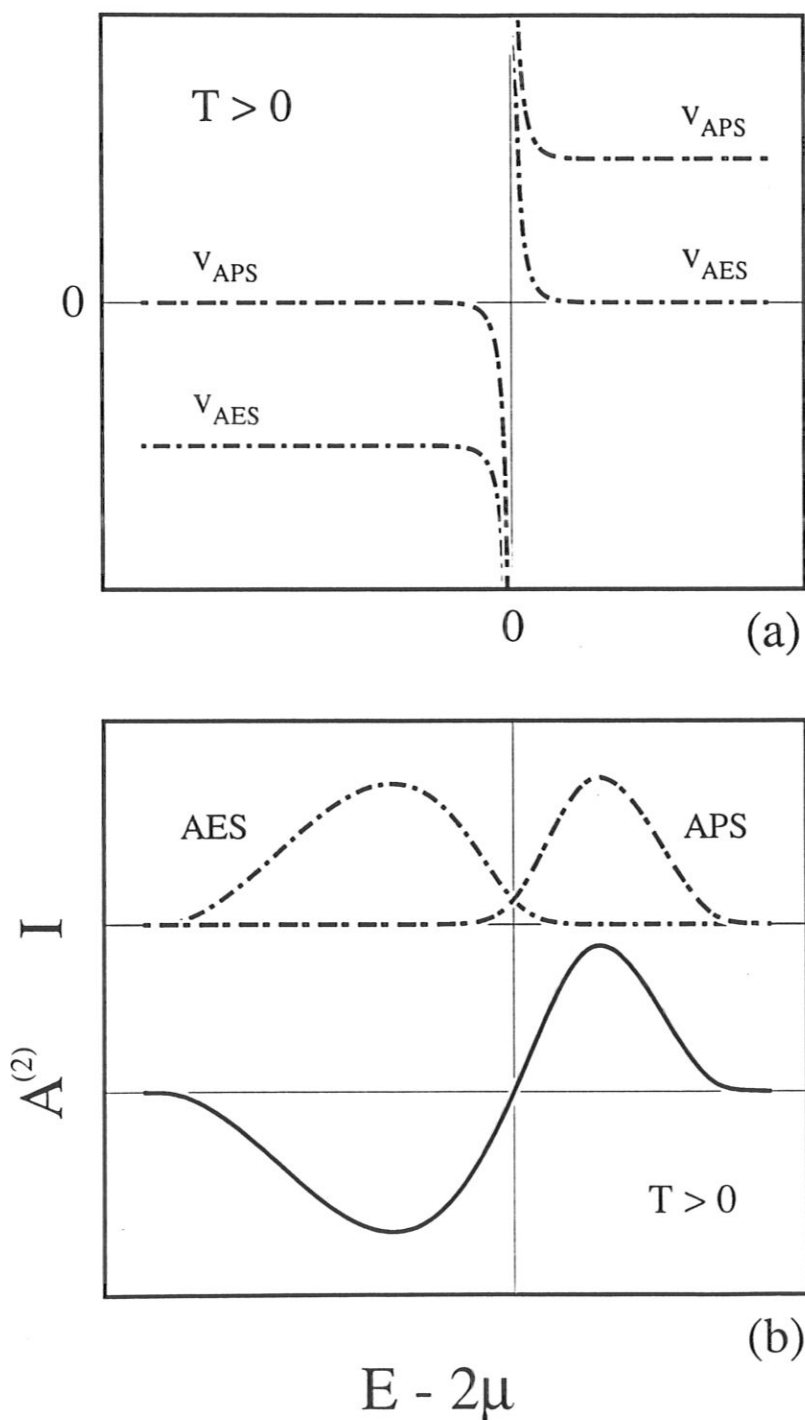


Abbildung 1.3.a: (a) Thermodynamische Vorfaktoren als Funktion der Energie bei fester Temperatur. (b) Schematische Darstellung der Spektraldichte und der AE- und AP-Linienform.

Das AE-Signal endet in diesem Fall genau dort, wo die AP-Linienform beginnt. Beide Eigenschaften der verschiedenen Intensitäten wird man bei der späteren konkreten Auswertung wiederfinden. Natürlich hängt auch $A^{(2)}$ von T ab, so daß die Temperaturdynamik der Spektren nicht allein an v_{AES} oder v_{APS} liegt.

Aus (1.3.6) und (1.3.7) läßt sich noch eine recht nützliche Summenregel ableiten [14]. Im nullten Moment der Linienform, welches gelegentlich auch „totale Intensität“ genannt wird, wird die Integration über E trivial, und weil sich $v_{|r|}$ und die Differenzenklammer in $A^{(r)}$ gerade zu Eins kompensieren, wird nur noch der thermodynamische Erwartungswert des ersten Summanden des Kommutators gebildet. So erhält man:

$$I_{tot}^{(r)} =: \int_{-\infty}^{+\infty} dE I^{(r)}(E) = \langle Z_r^+ Z_r \rangle . \quad (1.3.19)$$

Für die beiden möglichen Zweiteilchen-Spektroskopien spezifiziert, wird aus (1.3.19):

$$I_{tot}^{AES} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE I^{AES}(2\mu - E) = \langle n_{m\sigma} n_{m'\sigma'} \rangle , \quad (1.3.20)$$

sowie:

$$\begin{aligned} I_{tot}^{APS} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE I^{APS}(E - 2\mu) \\ &= 1 - \langle n_{m\sigma} \rangle - \langle n_{m'\sigma'} \rangle + \langle n_{m\sigma} n_{m'\sigma'} \rangle . \end{aligned} \quad (1.3.21)$$

Dabei wurden die Fermionen-Vertauschungsregeln angewandt; $n_{m\sigma} = c_{m\sigma}^+ c_{m\sigma}$ ist der Besetzungszahl-Operator für ein Elektron mit Spin σ im Band m . Die Beziehungen (1.3.16) und (1.3.17) lassen sich mit Hilfe von Glg. (1.3.19) zu einer Summenregel für die Spektraldichte zusammenfassen:

$$I_{tot}^{AES} - I_{tot}^{APS} + 1 = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE A^{(2)}(E - 2\mu) + 1 = \langle n_{m\sigma} \rangle + \langle n_{m'\sigma'} \rangle . \quad (1.3.22)$$

Wie später erkennbar sein wird, stehen die beiden Besetzungsdichten in (1.3.22) am Anfang der modellhaften Auswertung und sind von der Zweiteilchen-Spektraldichte unabhängig. Mit (1.3.22) ist deshalb eine einfache Möglichkeit gegeben, die Güte stellenweise unvermeidbarer Approximationen zu testen, die man an $A^{(2)}$ vornehmen muß, wenn das System teilweise gefüllte Bänder aufweist.

Totale AE- oder AP-Intensitäten liefern die sogenannte „Dichte-Dichte-Korrelation“ $\langle n_{m\sigma} n_{m'\sigma'} \rangle$, deren Bedeutung im Zusammenhang mit Modell-Bandferromagneten demonstriert werden wird. Anhand von Glg. (1.3.19) wird offensichtlich, daß erst integrierte Zweiteilchen-Spektren mit ($|r| > 1$) Zugang zu solchen höheren Korrelationsfunktionen haben, was auch dahingehend verstanden werden mag, daß AES und APS mehr als nur „finger-print“-Methoden sind.

1.4 Ein- und Zweiteilchenpart

Die näherungsweise Berechnung der Zweiteilchen-Spektralfunktion mit Hilfe der Einteilchen-Spektraldichte, die bereits eine gewisse Tradition hat [24, 33, 34, 59, 70, 71, 14], soll für korrelierte Elektronensysteme durchgeführt werden. Weil diese im Falle ihrer teilweisen Besetzung eine Temperaturabhängigkeit erwarten lassen, bildet die Grundlage der für die Zerlegung verwendeten diagrammatischen Vertexkorrekturmethode der Matsubaraformalismus. Die Einteilchen-Propagatoren sollen die volle Information über mögliche Kollektivphänomene des Systems enthalten können.

Ein weiterer Schritt besteht in der Aufstellung eines Modells, welches die Effekte zeigt, die mit AES und APS untersucht werden sollen. Damit ist nicht nur kollektiver Magnetismus gemeint; der Schwerpunkt kann auch auf andere typische Eigenschaften von 3d- und 4f-Systemen gelegt werden, wie z.B. Metall-Isolator-Übergänge, Supraleitung, etc. — Mit dem gegebenen Modell hat man nunmehr die Einteilchen-Spektraldichte zu ermitteln. Ist dieses Problem (approximativ) gelöst, so ist zusammen mit dem Resultat der Vertexkorrekturmethode die Zweiteilchen-Spektralfunktion bekannt.

Im zweiten Kapitel der vorliegenden Arbeit wird der soeben skizzierte „Zwei-Stufen-Aufbau“ der Theorie an einem Einband-System erprobt, welches man im Rahmen des Hubbard-Modells betrachtet. Mit Hilfe der Momentenmethode [72, 73, 74] wird die spinabhängige Einteilchen-Zustandsdichte selbstkonsistent errechnet. An ihr lassen sich in Abhängigkeit von der Gitterstruktur sowie den Modellparametern Kopplungsstärke, Besetzungsdichte des nicht entarteten Bandes und der Temperatur die magnetische Ordnung und ein eventueller Phasenübergang ablesen. Zudem entfällt eine Einschränkung der Modellparameter auf bestimmte Intervalle. Es ist auch nicht nötig, sich auf ein bestimmtes Material festzulegen. Die Zweiteilchen-Spektralfunktion wird durch eine Leiterapproximation dargestellt, welche durch die Verwendung „angekleideter“ Einteilchen-Propagatoren modifiziert ist und die unmittelbare Wechselwirkung zwischen den beiden angeregten Elektronen oder Löchern exakt berücksichtigt. Dagegen kommt in der Einteilchen-Selbstenergie die Wechselwirkung zwischen dem Teilchenpaar und dem restlichen Elektronensystem zum Tragen. So können ganz allgemein elektronische Korrelationseffekte und deren Einfluß auf die Linienformen studiert werden. — Unter Umständen auftretende Satelliten lassen sich zwar als gebundene, jedoch *nicht* als lokalisierte Zustände auffassen. Zuletzt werden Korrelationsfunktionen diskutiert, die man aus integrierten AE- und AP-Spektren erhält.

Realistische Elektronensysteme wie Fe, Co, Ni, etc. weisen entartete 3d-Teilbänder auf, die deren physikalische Eigenschaften dominieren. Um der Entartung Rechnung tragen zu können, muß der Hubbard-Hamiltonoperator in geeigneter Weise erweitert werden. Dies wird am Anfang des dritten Kapitels vorgestellt. Neben dem bereits bekannten Term der Intra-Band-Wechselwirkung mit dem Coulombmatrixelement U treten Operatoren in Erscheinung, welche zwei Arten der Inter-Band-Wechselwirkung repräsentieren. Sie haben die Bedeutung einer in gewissem Sinne „klassischen“ Kopplung zwischen Elektronen verschiedener Teilbänder bzw. einer „effektiven“ Elektron-Magnon-Streuung. Der unmittelbare Einfluß dieser Terme auf AE- bzw. AP-Spektren wird an einem Zweiband-System demonstriert, indem diesem jede Möglichkeit zu kollektiver Ordnung genommen wird. Das ist bei unmagnetischen Bändern gegeben, die entweder vollkommen leer oder vollständig besetzt sind. Die einzige Wechselwirkung besteht dann zwischen den angeregten AP-Elektronen bzw. den beiden AE-Löchern. Temperaturabhängigkeiten entfallen. Approximative Methoden brauchen

nicht angewandt zu werden; die hierfür aufgestellte Bewegungsgleichung der Zweiteilchen-Greenfunktion läßt sich in beiden Fällen exakt lösen. Weitere exakte Aussagen sind die im vorigen Abschnitt bereits angesprochenen Summenregeln. Außerdem wird gezeigt, welche Größen in entarteten Systemen für die *Spinunterscheidbarkeit* in AE- und AP-Spektren verantwortlich sind, falls die (teilweise gefüllten) Bänder ferromagnetisch ordnen.

Obwohl bei den in der Natur vorkommenden Ferromagnetika die Matrixelemente der Interband-Wechselwirkung offenbar bedeutend kleiner sind als die Intraband-Kopplungsstärke U/W [75, 57, 76], läßt sich doch ein deutlicher Einfluß auf magnetische Eigenschaften im Hinblick auf die Curietemperatur und das ($T = 0K$)-Moment feststellen. Der Grund liegt in der durch die Interbandterme bewirkten Kopplung der Teilbänder. Das vierte Kapitel stellt ein Phasendiagramm des ferromagnetischen Zweiband-Systems vor. Es wurde auf der Grundlage eines effektiven Multiband-Hubbard-Modells erstellt, welches sich von dem Modell des vorangehenden Kapitels nur durch eine mean-field-Behandlung der Interbandoperatoren unterscheidet, die zu „renormierten“ Einteilchen-Energien führt und eine wesentlich einfachere Anwendung der selbstkonsistenten Momentenmethode auf das Bandsystem gestattet. Die mit der modifizierten Leiterapproximation erhaltene Spektralfunktion muß nach Bändern und Spins der am Zweiteilchen-Prozeß beteiligten Teilchen indiziert werden. Für mehrere Werte der Elektronendichte werden spinunterschiedene AE- und AP-Linienformen in Zusammenhang mit den dazugehörigen Einteilchen-Spektren diskutiert. Die Differenzen spinaufgelöster totaler Intensitäten lassen eine direkte Proportionalität zur Magnetisierung erkennen.

Schließlich wird im fünften Kapitel noch einmal eine Zusammenfassung und ein Ausblick auf mögliche weiterführende Untersuchungen gegeben.

Kapitel 2

AES und APS am nicht entarteten System

Ausgehend vom s-Band-Hubbard-Modell wird für verschiedene Kopplungsstärken, Bandbesetzungen und Temperaturen das Einquasiteilchen-Spektrum berechnet, wobei unter bestimmten Bedingungen ein para-/ferromagnetischer Phasenübergang erhalten wird. Die Zweiteilchen-Spektraldichte wird mit Hilfe der modifizierten Leiterapproximation [14] in ein Funktional der Einteilchen-Spektralfunktion umgewandelt. Auger-Elektronen und Aufttrittspotential-Linienformen werden simultan errechnet, die Grenzen des Lander-Modells der Selbstfaltung aufgezeigt und Korrelationsfunktionen diskutiert.

2.1 Das Modell

Das zur Beschreibung des itineranten Bandferromagnetismus am meisten verwendete Modell wird J. Hubbard [51, 52, 53] zugeschrieben. Seine wesentliche Annahme geht von einem schmalen Energieband aus, in welchem bei relativ geringer Beweglichkeit der Elektronen ausgeprägte Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den einzelnen Gitterplätzen gegeben sind. Für das der Einfachheit halber als nicht entartet betrachtete großkanonische System läßt sich der folgende Hamiltonoperator aufstellen:

$$H = \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i,j=1\dots N}} (T_{ij} - \mu\delta_{ij})c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma} + \frac{1}{2}U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}n_{i-\sigma}; \quad (2.1.1)$$

$c_{i\sigma}^{\dagger}(c_{i\sigma})$ ist der Operator für die Erzeugung (Vernichtung) eines Elektrons mit dem Spin σ am Gitterplatz R_i , und $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}$ der Operator für die Teilchenzahl. N ist die Anzahl der Gitterplätze. T_{ij} ist das Hopping-Matrixelement, welches dem Springen eines Elektrons vom Gitterplatz j an die Stelle i zugeordnet wird. Üblicherweise nimmt man an, daß i und j nächste Nachbarn sind; die Hopping-Matrixelemente lassen sich bei schmalbandigen Systemen in guter Näherung aus atomaren Wellenfunktionen berechnen („tight binding approximation“, siehe z.B. [69]). Die Verbindung zu den Blochenergien $\varepsilon(\mathbf{k})$ wird durch die

Beziehung

$$T_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{1.B.Z.}} \varepsilon(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)) \quad (2.1.2)$$

hergestellt; die Summation erstreckt sich über die 1. Brillouin-Zone. In $\varepsilon(\mathbf{k})$ bzw. T_{ij} geht die Gitterstruktur ein, die für die Modelleigenschaften mit von entscheidender Bedeutung ist und deshalb bei der späteren Auswertung berücksichtigt werden muß. Der dazu erforderliche mathematische Aufwand kann jedoch dann relativ klein gehalten werden, wenn an gewissen Stellen auftretende Summationen über den Wellenvektor durch einfachere Integrationen über die Energie ersetzt werden können. Voraussetzung dafür ist, daß sich die jeweils summierte Größe als Funktional der Blochenergie darstellen läßt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) &\Rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(\varepsilon(\mathbf{k})) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(z = \varepsilon(\mathbf{k})) \right) \delta(z - \varepsilon(\mathbf{k})) = \int_{-\infty}^{\infty} dz g(z) \rho_0(z). \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Für das letzte Integral in Glg. (2.1.3) wurde die Definition (1.1.5) der BDOS ausgenutzt. Es wird sich herausstellen, daß die Kristallstruktur zuletzt *ausschließlich* über die Blochzustandsdichte in die Modellrechnung Eingang findet. Man kann sich nun auf einen bestimmten Gittertyp hin spezialisieren, indem man $\rho_0(E)$ entsprechend festlegt. Weil der Schwerpunkt dieser Arbeit jedoch mehr auf dem allgemeinen Studium der Korrelationseffekte in d- und f-Valenzband-Systemen liegt, erscheint es eher ratsam, als BDOS eine einfachere Funktion zu wählen, welche nur wenige, dafür aber typische Merkmale von charakteristischen Übergangsmetall-Zustandsdichten hat. Die (normierte) „Kirchturm“-BDOS hat die Form:

$$\rho_0(E) = \sum_{\nu=1}^4 \Theta(E - E_{\nu}) \Theta(E_{\nu+1} - E) [\alpha_{\nu} E + \beta_{\nu}], \quad (2.1.4)$$

mit

$$E_{\nu} = \frac{W}{4}(\nu - 1)$$

$$\alpha_{\nu} = \begin{cases} \frac{2}{W^2}, & \nu = 1 \\ 0, & \nu = 2 \\ \frac{10}{W^2}, & \nu = 3 \\ \frac{-12}{W^2}, & \nu = 4 \end{cases}, \quad \beta_{\nu} = \begin{cases} 0, & \nu = 1 \\ \frac{1}{2W}, & \nu = 2 \\ \frac{-9}{2W}, & \nu = 3 \\ \frac{12}{W}, & \nu = 4 \end{cases}, \quad (2.1.5)$$

dargestellt in Abbildung 2.1.a.

Die Coulombwechselwirkung tritt ausschließlich in Gestalt des intraatomaren Matrixelementes U in Erscheinung; zwei Elektronen „spüren“ sich also nur dann, wenn sie sich an demselben Gitterplatz aufhalten. Da es sich bei dem Modell-Elektronensystem um ein s-Band handelt, müssen die beiden Teilchen unterschiedliche Spins aufweisen. Die mittlere Dichte n an Elektronen pro Gitterplatz ist ein weiterer wichtiger Parameter, wobei man sich auf Translationssymmetrie beschränkt, so daß dieser Erwartungswert unabhängig von i ist:

$$n = \sum_{\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \quad 0 \leq n \leq 2. \quad (2.1.6)$$

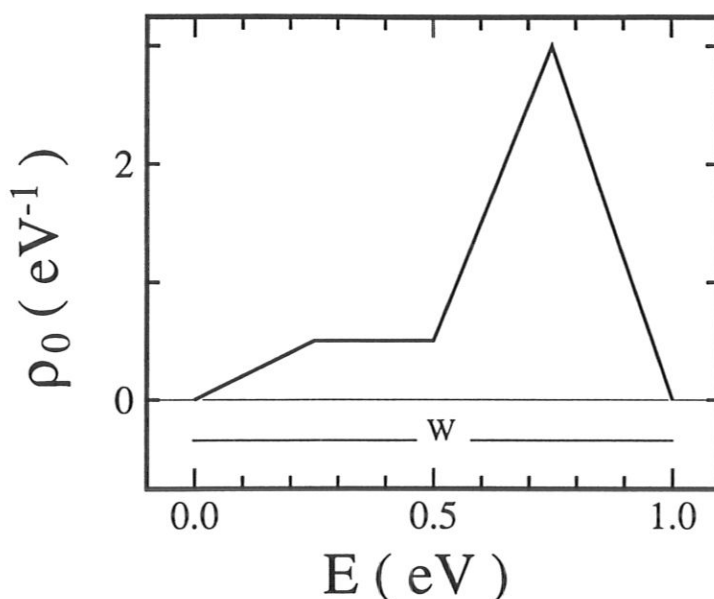


Abbildung 2.1.a: Die Bloch'sche Modell-Zustandsdichte (siehe Text).

Eine andere Ordnung als die para- oder ferromagnetische ist damit ausgeschlossen. Die Differenz der spinabhängigen Besetzungsdichten ist ein einfacher Ausdruck für die Bandpolarisation:

$$m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}. \quad (2.1.7)$$

Damit ist der wohl einfachste denkbare Rahmen aufgestellt, um im Zusammenspiel von kinetischer Energie, Kristallstruktur, Pauli-Prinzip und Kopplungsstärke U/W magnetische Phasen zu untersuchen, wobei W die Breite des freien Blochbandes ist,

2.2 Der Zweipol-Ansatz

Die zentrale Größe in der Modellauswertung, die Eielektronen-Spektraldichte, läßt sich in der Ortsdarstellung mit Wannieroperatoren definieren:

$$A_{ij\sigma}^{(1)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t-t')\right) \left\langle [c_{i\sigma}(t), c_{j\sigma}^{\dagger}(t')]_{+} \right\rangle. \quad (2.2.1)$$

Ihre Fouriertransformierte $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E)$ ist aus den Blochoperatoren $c_{\mathbf{k}\sigma}$ und $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ aufgebaut:

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)) A_{ij\sigma}^{(1)}(E) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t-t')\right) \left\langle [c_{\mathbf{k}\sigma}(t), c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(t')]_{+} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Im Rahmen des sog. „Quasiteilchen-Konzeptes“ [77, 78] wird nach einer anschaulichen Beschreibung von Vielteilchensystemen gesucht. Diese Suche besteht im Prinzip darin, das

System wechselwirkender Teilchen formal durch ein Gas von nicht wechselwirkenden „Quasiteilchen“ zu ersetzen. In einem Gas freier Elektronen ist die Anzahl N_e durch den Ausdruck

$$N_e = 2N \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \rho_0(E) \quad (2.2.3)$$

gegeben. Der Faktor 2 berücksichtigt die Spinartung, $f_-(E)$ ist die Fermifunktion:

$$f_-(E) = [\exp(\beta(E - \mu)) + 1]^{-1}. \quad (2.2.4)$$

Auf das „Quasiteilchen-Gas“ kann man die Beziehung (2.2.3) übertragen, indem man sie als Definitionsgleichung einer *Quasiteilchen-Zustandsdichte* $\rho_\sigma(E)$ (Quasiparticle Density of States, QDOS) *wechselwirkender* Elektronen auffaßt:

$$N_e = N \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \rho_{\sigma}(E). \quad (2.2.5)$$

Für die mittlere, spinabhängige Besetzungsdichte kann man nun auch schreiben:

$$n_{\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \rho_{\sigma}(E). \quad (2.2.6)$$

Es gibt einen einfachen Zusammenhang zwischen $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E)$ und $\rho_{\sigma}(E)$ [77]:

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu). \quad (2.2.7)$$

Dabei wird das Spektraltheorem ausgenutzt [77]. An ρ_{σ} und n_{σ} lassen sich die Phasen und das Temperaturverhalten des Hubbard'schen Systems für einen umfassenden Modellparameterbereich diskutieren. Dazu muß zunächst einmal eine möglichst gute Näherung für $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$ gefunden werden. Dafür hat sich die Momentenmethode als ein erfolgreiches Mittel bewährt [72, 73, 74]. Mit Hilfe von exakt berechenbaren, spektralen Momenten werden die Einteilchen-Anregungsenergien und spektralen Gewichte selbstkonsistent berechnet. Die Methode geht in drei Schritten vor:

1) Es muß versucht werden, die allgemeine Struktur von $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$ zu „erraten“, wobei man sich von exakt gelösten Grenzfällen, wie z.B. dem Zweipunkt-Modell [79], spektralen Zerlegungen oder Summenregeln leiten lassen kann, aber auch schlicht von physikalischer Intuition. Hinweise gibt die der Glg. (1.3.6) analoge Lehmann-Darstellung der Spektraldichte:

$$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E) = \frac{\hbar}{\Xi} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left| \langle E_n | c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} | E_m \rangle \right|^2 (1 + e^{\beta E}) \delta(E - (E_n - E_m)). \quad (2.2.8)$$

An dieser liest man ab, daß nur solche Anregungsenergien möglich sind, bei denen dem System ein Teilchen entweder hinzugefügt oder entnommen wird. Bei verschwindender Blochbandbreite, $W \rightarrow 0$, sind alle Elektronen lokalisiert. Ist T_0 der Blochband-Schwerpunkt,

$$T_0 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dE E \rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (2.2.9)$$

so sind nur Anregungen mit den Energien

$$E_n - E_m = T_0 \text{ und } E_n - E_m = T_0 + U \quad (2.2.10)$$

möglich, je nachdem, ob ein zusätzliches (σ)-„Testelektron“ auf einen leeren Gitterplatz trifft oder aber auf eine Stelle, die bereits mit einem ($-\sigma$)-Teilchen besetzt ist. Andere Fälle schließt das Pauli-Prinzip aus.

Bei endlichem W ermöglicht das Hopping der itineranten Bandelektronen eine Änderung der Anzahl doppelt besetzter Gitterstellen; bei Hinzufügen des Testteilchens eröffnen sich deshalb weit mehr „Anregungskanäle“, die bei den Energien

$$E_n - E_m = T_0 + d \cdot U, \quad d \text{ ganzzahlig,} \quad (2.2.11)$$

liegen. $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E)$ muß demnach aus vielen, durch U separierten Peaks bestehen. Man kann erwarten, daß es neben den Hauptstrukturen bei T_0 und $T_0 + U$ umso weniger „Satellitenpeaks“ mit großen Werten von d gibt, je größer die Coulombabstoßung und je kleiner das Hopping-Matrixelement sind. Das ist physikalisch einsehbar, weil sich das System in der Tendenz, seine freie Energie zu minimieren, gegen große Energieänderungen sträubt. Harris und Lange konnten zeigen [80], daß bereits die spektralen Gewichte der Strukturen von der Ordnung $d = 2$ bzw. $d = -1$ mit dem Faktor $(W/U)^4$ skalieren und größere Beträge von d zu noch höheren Potenzen führen. So sollte im Bereich moderater bis starker Kopplung, $U/W \gtrsim 1$, $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E)$ von lediglich zwei Peaks dominiert sein [81]. Dieser Sachverhalt kommt in dem „Zweipol-Ansatz“ der \mathbf{k} -abhängigen Einelektronen-Spektraldichte zum Ausdruck:

$$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E) = \hbar \sum_{j=1}^2 \alpha_{j\sigma}(\mathbf{k}) \delta(E - E_{j\sigma}(\mathbf{k}) + \mu). \quad (2.2.12)$$

Die Gewichtungsfaktoren $\alpha_{j\sigma}$ und die Quasiteilchen-Energien $E_{j\sigma}$ sind freie, noch zu bestimmende Parameter. Der Einfachheit halber wird eine mögliche Quasiteilchen-Dämpfung vernachlässigt, so daß wegen der dann reellen $E_{j\sigma}$ auch die Einteilchen-Selbstenergie reell sein wird. Würde man die Lebensdauereffekte der Quasiteilchen berücksichtigen, hätte man anstelle der δ -Peaks im Ansatz (2.2.12) eher Lorentzkurven zu erwarten. — An dieser Stelle soll nicht unerwähnt bleiben, daß die durch die kinetische Energie im Ortsraum bedingte Unbestimmtheit zu einem „Ausschmieren“ der Peaks führt. Die ortsabhängige Spektraldichte $A_{ij\sigma}^{(1)}(E)$ besteht somit aus „Bändern“, deren Breite durch die maximale Hopping-Energie T_{ij} gegeben wird. Im \mathbf{k} -Raum verschwindet natürlich diese Unbestimmtheit, da mit \mathbf{k} auch die kinetische Energie festgelegt ist. — Gleichung (2.2.12) sollte also einen recht realistischen Ansatz für die Spektraldichte des Hubbard-Modells darstellen.

2) Im zweiten Schritt der Momentenmethode wird über die unbekanntenen Größen in (2.2.12) $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$ sogenannten „spektralen Momenten“ $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)}$ des Hubbard-Modells angepaßt. Dabei nutzt man die Tatsache aus, daß es für $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)}$ zwei äquivalente Ausdrücke gibt [81]. Einerseits gilt, unabhängig vom gesuchten $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)) M_{ij\sigma}^{(n)}(t, t') \Big|_{t, t'}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.2.13)$$

mit dem ortsabhängigen Moment der Ordnung n :

$$M_{ij\sigma}^{(n)}(t, t') = \left\langle \left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^{n-p} c_{i\sigma}(t) \quad , \quad \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \right)^p c_{j\sigma}^+(t') \right]_+ \right\rangle, \quad (2.2.14)$$

$$0 \leq p \leq n$$

Die Heisenberg'sche Bewegungsgleichung,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(t) = [C, H]_-(t), \quad (2.2.15)$$

macht aus den Zeitableitungen in (2.2.14) für gleiche Zeiten Vielfachkommutatoren [69]:

$$M_{ij\sigma}^{(n)}(t = t') = \left\langle \left[\underbrace{[\dots [c_{i\sigma}, H]_-, H]_-, \dots, H]_-}_{(n-p)\text{-fach}}, \underbrace{[H, \dots, [H, [H, c_{j\sigma}^+]_-]_- \dots]_-}_{p\text{-fach}} \right]_+ \right\rangle. \quad (2.2.16)$$

Andererseits läßt sich in (2.2.14) auch eine Fouriertransformation nach der Energie durchführen, wobei die Zeitableitungen zuletzt berücksichtigt werden dürfen. Das Resultat wird in (2.2.13) eingesetzt und liefert für $t = t'$ unmittelbar:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE E^n A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E). \quad (2.2.17)$$

Diese ebenfalls exakte Relation stellt die Verbindung zu der Spektraldichte her. Jede Näherung an die Einteilchen-Spektralfunktion kann getestet, jeder Ansatz für $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$ ausgeführt werden, wenn man die rechte Seite von (2.2.17) mit den Momenten vergleicht, die man aus (2.2.16) erhalten und gemäß (2.2.13) in den Impulsraum zurücktransformiert hat. Der Zweipol-Ansatz in (2.2.12) erfordert für die Bestimmung seiner vier unbekanntenen Größen die ersten vier spektralen Momente:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= 1, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} &= \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + U n_{-\sigma}, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} &= [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2 + 2U n_{-\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] + U^2 n_{-\sigma}, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} &= [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^3 + 3U n_{-\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2 \\ &\quad + U^2 [2n_{-\sigma} + n_{-\sigma}^2 [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]] \\ &\quad + U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma})(B_{\mathbf{k}-\sigma} - \mu) + U^3 n_{-\sigma}. \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

Es wurde Translationssymmetrie des Gitters angenommen, wie in (2.1.6). Ein ganz wesentlicher Vorteil dieses Verfahrens liegt in seinem nicht störungstheoretischen Charakter begründet, so daß sich seine Anwendbarkeit besonders auf Systeme mit möglichem Phasenübergang empfiehlt. Die Berechnung aller Momente ist jedoch wegen der mit höherer Ordnung rasch kompliziert werdenden Ausdrücke zuletzt recht mühselig.

Für die beiden Strukturen des Einteilchen-Spektrums lassen sich nunmehr die Quasiteilchen-Energien $E_{1,2\sigma}(\mathbf{k})$,

$$\begin{aligned} E_{1,2\sigma}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} (B_{\mathbf{k}-\sigma} + U + \varepsilon(\mathbf{k})) \\ &\mp \frac{1}{2} \sqrt{(B_{\mathbf{k}-\sigma} + U - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + 4U n_{-\sigma} (\varepsilon(\mathbf{k}) - B_{\mathbf{k}-\sigma})}, \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

und die spektralen Gewichte $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,2)}$ angeben:

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} &= \frac{E_{1\sigma}(\mathbf{k}) - B_{\mathbf{k}-\sigma} - U(1 - n_{-\sigma})}{E_{1\sigma}(\mathbf{k}) - E_{2\sigma}(\mathbf{k})}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} &= \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma} + U(1 - n_{-\sigma}) - E_{2\sigma}(\mathbf{k})}{E_{1\sigma}(\mathbf{k}) - E_{2\sigma}(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

Aus (2.2.12) wird nach einigen Umformungen der neue, explizite Ausdruck für die Ein-elektronen-Spektraldichte gewonnen:

$$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E) = \hbar \delta(E + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, E)); \quad (2.2.21)$$

diese Funktion unterscheidet sich von der des freien Systems durch die (reelle) Einteilchen-Selbstenergie:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = U n_{-\sigma} \frac{E + \mu - B_{\mathbf{k}-\sigma}}{E + \mu - B_{\mathbf{k}-\sigma} - U(1 - n_{-\sigma})}. \quad (2.2.22)$$

Die sog. „Bandkorrektur“ $B_{\mathbf{k}-\sigma}$, die im vierten Moment $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)}$ auftritt,

$$B_{\mathbf{k}-\sigma} = B_{-\sigma}^{(S)} + B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)}, \quad (2.2.23)$$

faßt höhere Gleichzeit-Korrelationsfunktionen zusammen und muß noch bestimmt werden. Doch läßt sich ihre Bedeutung für eine eventuelle magnetische Ordnung bereits grob einschätzen. $B_{-\sigma}^{(S)}$ ist spin-, jedoch nicht \mathbf{k} -abhängig:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})(B_{-\sigma}^{(S)} - T_0) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N T_{ij} \langle c_{i-\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma} (2n_{i\sigma} - 1) \rangle, \quad (2.2.24)$$

bei $B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)}$ dagegen ist auch eine Abhängigkeit vom Wellenvektor festzustellen:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N T_{ij} F_{ij-\sigma} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)). \quad (2.2.25)$$

Offensichtlich verschwindet $B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)}$, wenn bezüglich \mathbf{k} in der Brillouin-Zone gemittelt wird:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)} = 0; \quad (2.2.26)$$

den Schwerpunkt der Quasiteilchenbänder kann $B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)}$ daher nicht verändern, wegen ihrer \mathbf{k} -Abhängigkeit jedoch deren Breite beeinflussen. Sie ist dafür verantwortlich, daß sich ein gewisses U -abhängiges „Gap“ in der QDOS bei kleiner werdender Kopplungsstärke ($U/W \lesssim 0.8$) schließt. $F_{ij-\sigma}$ ist die Abkürzung für:

$$F_{ij-\sigma} = \langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle - n_{-\sigma}^2 - \langle c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma}^{\dagger} c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle + \langle c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i-\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma} c_{i\sigma} \rangle. \quad (2.2.27)$$

Eine Spinabhängigkeit ist in den beiden letzten Termen nicht vorhanden und in der Dichtekorrelation $\langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle - n_{-\sigma}^2$ nur schwach ausgeprägt; dort kann sie mit einer einfachen Molekularfeld-Entkopplung zum Verschwinden gebracht werden. Der Einfluß der Spins auf die Bandbreiten-Korrektur ist demnach so gering, daß diese Größe in stark korrelierten Systemen vernachlässigt werden kann [72, 73, 74].

Besondere Beachtung verdient dagegen die Größe $B_{-\sigma}^{(S)}$, die eine spinabhängige Verschiebung der Bandschwerpunkte bewirkt und für spontane ferromagnetische Ordnung daher von

entscheidender Wichtigkeit ist. Dies soll im Zusammenhang mit dem abschließenden Schritt der Momentenmethode etwas ausführlicher diskutiert werden.

3) Die letzte Stufe ist die Herstellung der *Selbstkonsistenz* zwischen den Quasiteilchengrößen und den Modellparametern. Dieses — durchaus nichttriviale — Vorhaben gelingt, weil alle höheren Korrelationsfunktionen in $B_{\mathbf{k}-\sigma}$ auf die Einelektronen-Spektraldichte zurückführbar sind, was für die spinabhängige Bandverschiebung sogar exakt möglich ist:

$$n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) B_{-\sigma}^{(S)} = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - T_0) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \left[\frac{2}{U} (E - \varepsilon(\mathbf{k})) - 1 \right] A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E - \mu). \quad (2.2.28)$$

Der Beweis [82] für Glg. (2.2.28) sei hier kurz skizziert. Laut Spektraltheorem [77] gilt:

$$\langle c_{i-\sigma}^{+}(t) c_{j-\sigma}(t') \rangle_{t=t'} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t')} f_{-}(E) A_{ji-\sigma}^{(1)}(E) \Big|_{t=t'}. \quad (2.2.29)$$

Die Anwendung des Operators $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ und anschließendes Setzen von $t = t'$ liefern einerseits:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{i-\sigma}^{+}(t) c_{j-\sigma}(t') \rangle \Big|_{t=t'} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE E f_{-}(E) A_{ji-\sigma}^{(1)}(E), \quad (2.2.30)$$

und andererseits, aufgrund der Bewegungsgleichung (2.2.15):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{i-\sigma}^{+}(t) c_{j-\sigma}(t') \rangle \Big|_{t=t'} = \sum_l (T_{il} - \mu \delta_{il}) \langle c_{l-\sigma}^{+} c_{j-\sigma} \rangle + U \langle c_{i-\sigma}^{+} c_{j-\sigma} n_{i\sigma} \rangle. \quad (2.2.31)$$

Man kann nun die Glgn. (2.2.30) und (2.2.31) zusammensetzen und den Erwartungswert $\langle c_{i-\sigma}^{+} c_{j-\sigma} \rangle$ durch die Spektraldichte im \mathbf{k} -Raum ausdrücken:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}, l} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l)} (T_{il} - \mu \delta_{il}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E) + U \langle c_{i-\sigma}^{+} c_{j-\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \\ \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) E A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E). \end{aligned} \quad (2.2.32)$$

Man multipliziert beide Seiten mit T_{ij}/N , summiert über i und j und stellt (2.2.32) um:

$$\begin{aligned} \frac{U}{N} \sum_{i,j} T_{ij} \langle c_{i-\sigma}^{+} c_{j-\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \\ \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) E A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E) \\ - \frac{1}{N^2\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i,j,l} T_{ij} (T_{il} - \mu \delta_{il}) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l)} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E). \end{aligned} \quad (2.2.33)$$

Nutzt man neben $T_{ij} = T_{ji}$ die Beziehung (2.1.2) aus, so läßt sich die Fouriertransformation des Subtrahenden in (2.2.33) ausführen; man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{U}{N} \sum_{i,j} T_{ij} \langle c_{i-\sigma}^+ c_{j-\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \\ \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E) \cdot \frac{1}{U} (E + \mu - \varepsilon(\mathbf{k})) . \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

Also ist gerade

$$\begin{aligned} n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) B_{-\sigma}^{(S)} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} T_{ij} (2 \langle c_{i-\sigma}^+ c_{j-\sigma} n_{i\sigma} \rangle - \langle c_{i-\sigma}^+ c_{j-\sigma} \rangle) \\ = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) A_{\mathbf{k}-\sigma}^{(1)}(E) \left[\frac{2}{U} (E + \mu - \varepsilon(\mathbf{k})) - 1 \right] , \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

wenn man auf den ersten Summanden auf der linken Seite von (2.2.35) die Beziehung (2.2.34) anwendet und für den Term $\langle c_{i-\sigma}^+ c_{j-\sigma} \rangle$ nochmals das Spektraltheorem benutzt. Die Behauptung (2.2.28) erhält man nach der Substitution $E + \mu \rightarrow E$.

Die Bedeutung der spinabhängigen Bandverschiebung läßt sich mit Hilfe von (2.2.21) augenfällig demonstrieren. Wenn man die Bandbreiten-Korrektur vernachlässigt, gilt:

$$B_{\mathbf{k}-\sigma} \Rightarrow B_{-\sigma}^{(S)} . \quad (2.2.36)$$

Via (2.2.7) ergibt sich mit Hilfe von (1.1.5) sowie (2.1.3) aus (2.2.21) und (2.2.22) ein einfacher Ausdruck für die QDOS:

$$\begin{aligned} \rho_{-\sigma}(E) &= \rho_0(E - \Sigma_{-\sigma}(E - \mu)) \\ &= \rho_0 \left(E - U n_{\sigma} \cdot \frac{E - B_{\sigma}^{(S)}}{E - B_{\sigma}^{(S)} - U(1 - n_{\sigma})} \right) . \end{aligned} \quad (2.2.37)$$

Das mit den Beziehungen (2.2.21), (2.2.28), (2.2.37), (2.2.22) und (2.2.36), sowie (2.2.4) und (2.2.6) gegebene System kann für alle Bandbesetzungen n , Kopplungsstärken und Temperaturen *selbstkonsistent* gelöst werden, wenn man $\rho_0(E)$ vorgibt. Eine Lösung mit $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ bedeutet *spontanen* Ferromagnetismus!

In Abb. 2.2.a ist die Glg. (2.2.37) schematisch wiedergegeben. Die Einteilchen-Selbstenergie weist eine Singularität $E_{\infty}^{(\sigma)}$ auf,

$$E_{\infty}^{(\sigma)} = B_{\sigma}^{(S)} + U(1 - n_{\sigma}) , \quad (2.2.38)$$

die zu einer Aufspaltung des ursprünglichen Blochbandes in zwei getrennte Quasiteilchen-Subbänder führt. Man nennt diese gelegentlich auch „Hubbard-Bänder“. Die physikalische Interpretation, die an gegebener Stelle noch vertieft wird, ist die, daß ein durch den Kristall propagierendes Quasiteilchen zum unteren Subband gehört, wenn es vornehmlich über unbesetzte Gitterplätze hüpfte. Trifft es jedoch auf ein anderes, spinantiparalleles Teilchen, entspricht das der Situation zweier miteinander wechselwirkender Elektronen, bei der es zur

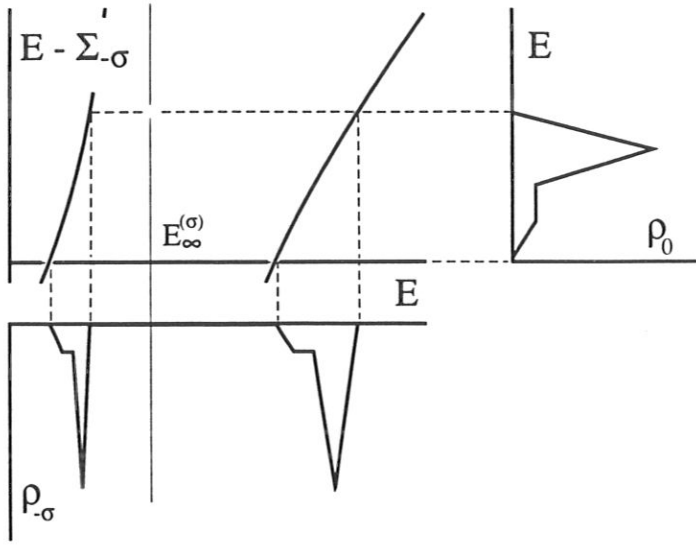


Abbildung 2.2.a: Schematische Darstellung der Beziehung (2.2.37).

Coulombabstoßung U kommt. In einem solchen Prozeß hat man das Quasiteilchen daher dem oberen Hubbard-Band zuzuordnen. Zur unmittelbaren Elektron-Elektron-Wechselwirkung kommt es vor allem im mehr als halb gefüllten System ($n > 1$). In diesem Falle gibt es — unter der Voraussetzung realistischer Temperaturen — keine unbesetzten Plätze. Die Breite des Quasiteilchen-Gaps skaliert mit U , was auch an den Quasiteilchen-Energien, Glg. (2.2.19), ablesbar ist.

Wenn sich die Singularität $E_{\infty}^{(\sigma)}$ verschiebt, ändert sich der Verlauf von $E - \Sigma_{-\sigma}$ in Abb. 2.2.a. Das hat zur Folge, daß sich der Schwerpunkt des Quasiteilchen-Spektrums, das in dem Teildiagramm links unten dargestellt ist, verlagert. Wenn eine selbstkonsistente ferromagnetische Lösung vorliegt, dann gibt es unterschiedliche Singularitäten für jeden Spin, $E_{\infty}^{(\sigma)} \neq E_{\infty}^{(-\sigma)}$, und demzufolge auch verschiedene Spinspektren. Weil diese natürlich ein gemeinsames chemisches Potential haben und das System dementsprechend mit Elektronen bevölkert wird, ergibt sich eine Spinvorzugsrichtung und damit eine von Null verschiedene Magnetisierung, Gln. (2.1.7) und (2.2.6). Man kann zeigen [69], daß eine solche Situation nur dann möglich ist, wenn die Bandverschiebung für jeden Spin unterschiedliche Werte annimmt; andernfalls existiert *nur* die paramagnetische Lösung:

$$B_{\sigma}^{(S)} \neq B_{-\sigma}^{(S)} \quad \Longleftrightarrow \quad n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}. \quad (2.2.39)$$

Die Bandverschiebung fehlt in den Quasiteilchen-Energien der ersten Hubbard'schen Arbeit [51]; an deren Stelle tritt lediglich T_0 , Glg. (2.2.9). Für normale Zustandsdichten wird keine magnetische Lösung gefunden. Im Grenzfall unendlich großer Coulombabstoßung $U \rightarrow \infty$, der Ferromagnetismus begünstigen sollte, kann man diesen Sachverhalt leicht an Gleichung (2.2.19) erkennen, wenn man dort $B_{\mathbf{k}-\sigma}$ gegen T_0 ersetzt und von einem weniger als halb gefüllten System $n < 1$ ausgeht. Dann ist nur das untere Quasiteilchen-Band besetzt und hat einen spinunabhängigen Schwerpunkt $T_{1\sigma}$:

$$T_{1\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} E_{1\sigma}(\mathbf{k}) = (1 - n_{-\sigma}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) + T_0 n_{-\sigma} = T_0. \quad (2.2.40)$$

In Zusammenhang mit Glg. (2.2.37) ist dies gleichbedeutend mit übereinstimmenden QDOS, $\rho_{\sigma} = \rho_{-\sigma}$ oder Paramagnetismus.

Es fällt auf, daß für jeden Wert von U/W ein Quasiteilchen-Gap existiert, insbesondere schließt es sich nicht kontinuierlich mit abnehmender Kopplungsstärke, wie man dies vom physikalischen Verständnis her erwarten würde. Es verschwindet lediglich im Fall hebbarer Singularität, also bei

$$n_{\sigma} = 1, \quad \text{oder} \quad U = 0.$$

Diesem im Hinblick auf magnetische Phasenübergänge nicht gravierenden Manko schafft die Bandbreiten-Korrektur Abhilfe. In den anschließend präsentierten Einquasiteilchen-Spektren wurde $B_{\mathbf{k}-\sigma}^{(W)}$ im Rahmen der Momentenmethode mit Hilfe einer tight-binding-Näherung mitberücksichtigt, um die Gültigkeit der AES/APS-Theorie auch bei schwacher Kopplung zu gewährleisten und einen späteren Vergleich mit dem Lander-Modell zu ermöglichen. Ihre detaillierte Berechnung findet sich in [83] und soll hier nicht mehr im einzelnen vorgeführt werden.

2.3 Die Einquasiteilchen-Zustandsdichte

Die im letzten Abschnitt entwickelte Theorie zum Hubbard-Modell ist für beliebige Temperaturen, mehrere Kopplungsstärken und Bandbesetzungen n mit der kirchturmartigen Blochzustandsdichte ausgewertet. Letztere ist in (2.1.5) definiert. Außerdem wurde mit (2.1.6) Translationssymmetrie vorausgesetzt, so daß nur noch der para- oder ferromagnetische Vielteilchenzustand diskutiert werden kann. Es stellt sich heraus, daß die paramagnetische Phase ($n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{1}{2}n$) stets eine mögliche *mathematische Lösung* ist, unabhängig von T , n , U/W und ρ_0 . Doch erscheint innerhalb gewisser Parameterregionen eine zusätzliche ferromagnetische Phase ($n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$), welche zwar stabiler als die paramagnetische Lösung, jedoch streng an Bedingungen gebunden ist.

Für einen ferromagnetischen Grundzustand müssen die Kopplungsstärke, die Bandbesetzung und die Dichte an Löchern ($2 - n$) simultan kritische Werte überschreiten:

$$\frac{U}{W} > \left(\frac{U}{W} \right)_{crit}, \quad (2.3.1)$$

$$n > n_{crit}, \quad (2.3.2)$$

$$(2 - n) > (2 - n)_{crit}. \quad (2.3.3)$$

Die kritischen Werte hängen ihrerseits von der aktuellen Gitterstruktur, also von $\rho_0(E)$, ab. Diesen Teilbedingungen entsprechend ist die Auswertung gegliedert.

Im Bereich schwacher Kopplung ($U < W$) gibt es noch keinen Ferromagnetismus, denn die erste Teilbedingung in (2.3.1) wird nicht erfüllt. Dieser Fall wird im oberen Teil (a) der Abb. 2.3.a an der Quasiteilchen-Zustandsdichte für $U/W = 0.3$ mit drei verschiedenen Werten der Bandbesetzung demonstriert. Hier ist die Kopplung noch zu schwach, um eine spinabhängige Bandverschiebung zu bewirken, und so gibt es in einem solchen System nur die paramagnetische Phase. Dennoch führt bereits eine derart kleine Coulomb-Kopplung zu einer im Vergleich mit der freien („steep“) Zustandsdichte bemerkenswert verzerrten QDOS.

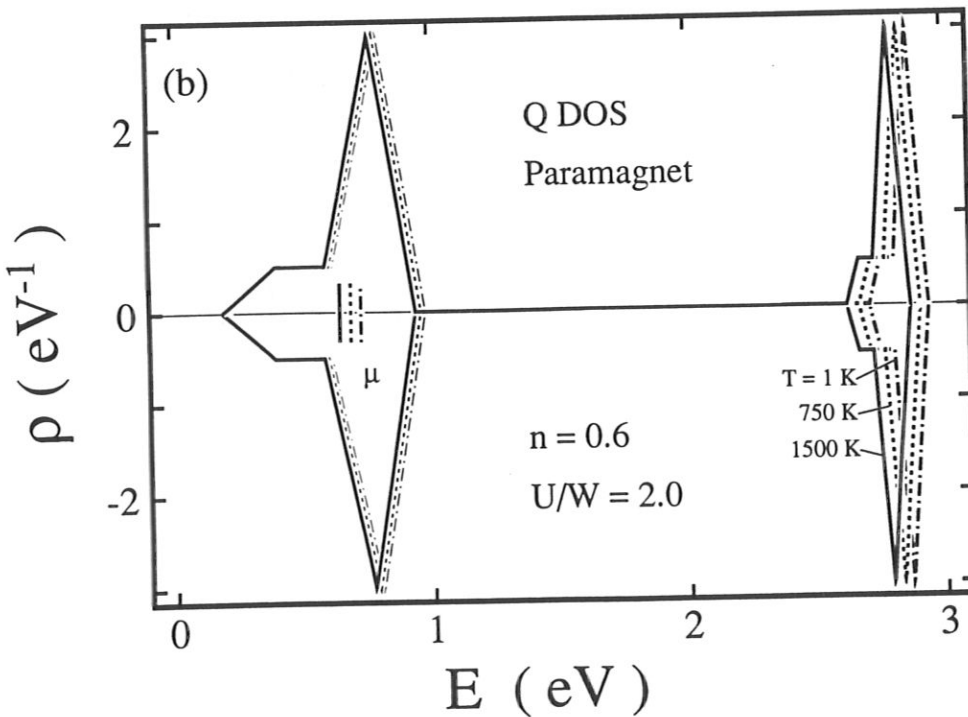
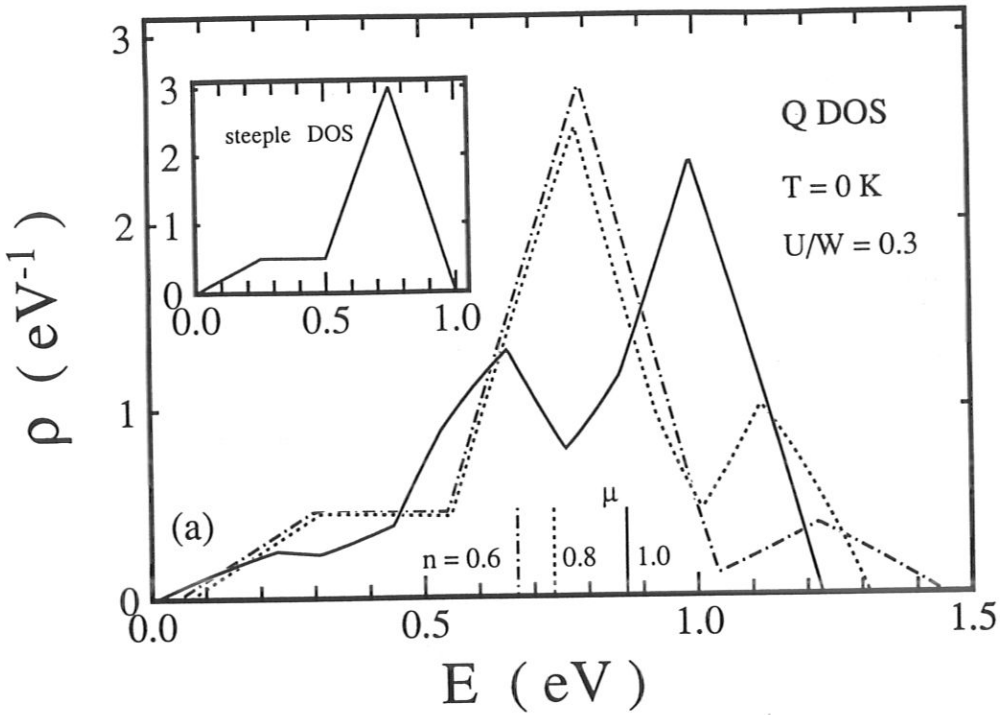


Abbildung 2.3.a: Die Quasiteilchen-Zustandsdichte in Abhängigkeit von der Energie. (a): Schwach gekoppeltes, paramagnetisches Elektronensystem ($U/W = 0.3$) bei $T = 0$ K für drei Werte der Bandbesetzung. (b): Stark korreliertes, paramagnetisches System bei verschiedenen Temperaturen. Die Striche markieren das chemische Potential μ . Die Einfügung in (a) zeigt nochmals die BDOS des nicht wechselwirkenden Systems, identisch mit Abb. 2.1.a, zum Vergleich.

Eine nennenswerte Temperaturabhängigkeit wird nicht gefunden, dafür aber zeigt sich eine starke Beeinflussung durch n . Die markante Einkerbung der QDOS bei etwa 1 eV ($n = 0.8, 1.0$) bzw. bei 0.8 eV ($n = 0.6$) läßt bereits ahnen, daß sich bei größerem U/W ein Quasiteilchen-Gap ausbilden wird. Im stark korrelierten System ist dies der Fall. Teilabbildung (b) zeigt das System in einer Kopplung von $U/W = 2$ und mit weniger als halber Bandfüllung ($n = 0.6$). Nun ist die Situation so, wie sie in Abb. 2.2.a schon einmal skizziert wurde. Typisch ist die Ausbildung zweier getrennter Quasiteilchen-Subbänder, deren Abstand in der Größenordnung von U liegt. Die Unterstrukturen sind für jeden Spin (\uparrow oder \downarrow) gleich. Es existiert also keine ferromagnetische Lösung. Obwohl die Kopplungsstärke relativ hoch ist, ja sogar beliebig groß gewählt werden kann, stellt sich ausschließlich Paramagnetismus ein. Das liegt daran, daß für eine asymmetrische BDOS $\rho_0(E)$, wie sie hier zugrunde gelegt ist, der kritische Wert von n bei etwa halber Bandfüllung ($n_{crit} \approx 1$) liegt [83], aber in diesem Beispiel nicht erreicht wird. Die Forderung (2.3.1) ist also erfüllt, nicht jedoch (2.3.2). Erwähnenswert ist auch, daß jede Substruktur deutlich schmaler ist, als das ursprüngliche Blochband. Erst die Summe der Breiten für jeweils eine Spinrichtung beträgt in etwa W . Das ändert nichts an der Normierung aller Zustandsdichten, weil mit dem „Einschalten“ der Wechselwirkung gegenüber dem freien System keine neuen Zustände hinzugekommen sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_0(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_{\sigma}(E) = 1. \quad (2.3.4)$$

Die Erhaltung der Norm wird bereits durch das erste spektrale Moment $M_{k\sigma}^{(0)}$ in (2.2.18) gewährleistet, wovon man sich durch Kombination von (2.2.17) und (2.2.7) mit (2.2.37) leicht überzeugt.

Weil das Elektronensystem weniger als halb besetzt ist, liegt das chemische Potential im Bereich des niederenergetischen Hubbard-Bandes. Mit steigender Temperatur verringert es sich um einige 10 meV. Dies erklärt sich im wesentlichen aus dem Verhalten der Fermi-Funktion und der Gestalt der QDOS. Bei $T = 1K$ ist $f_-(E)$ praktisch eine Stufenfunktion. Dagegen verläuft sie bei hoher Temperatur flacher, so daß auch die bei höherer Energie liegenden Zustände des unteren Hubbard-Bandes besetzt werden, wo andere Werte der Zustandsdichte gegeben sind. Um die Erhaltung der Teilchenzahl ($n = 0.6$) zu garantieren, liegt nun das chemische Potential entsprechend der geänderten Situation, — die Abhängigkeit $\mu = \mu(n, T)$ gehört zu den typischen Eigenschaften *selbstkonsistenter* Lösungen. Doch ist die Temperaturdynamik des ungeordneten Systems nur von geringem Interesse.

Ferromagnetismus wird in der Tat erst dann möglich, wenn alle drei Ungleichungen (2.3.1) – (2.3.3) erfüllt werden. Hierzu muß einerseits ein mehr als halbgefülltes Band vorliegen ($1 < n_{crit} \leq n$), andererseits muß U einen bestimmten kritischen Wert U_{crit} bei festem W überschreiten. U_{crit} zeigt überdies eine schwache Abhängigkeit von n ; die Erfahrung zeigt, daß die Coulombenergie stets in der Größenordnung der Blochbandbreite liegen sollte ($U \approx W$), die hier und im folgenden auf 1 eV festgesetzt wird.

Die kritische Lochdichte führt zu einer oberen Schranke von n . Teil (a) der Abb. 2.3.b zeigt die Magnetisierung m als Funktion von n am Nullpunkt der Temperatur. Aus diesem Diagramm ist bei jeweils festgehaltener Kopplungsstärke die *maximale* Elektronenkonzentrationen, mithin die kritische Lochdichte ablesbar. Beim kleinsten Quotienten U/W ist der größtmögliche Wert von n , der zu einer ferromagnetischen Lösung führt, anhand von $m(T = 0) \rightarrow 0$ gegeben und liegt bei etwa 1.6, die kritische Lochdichte $(2 - n)_{crit}$ demnach

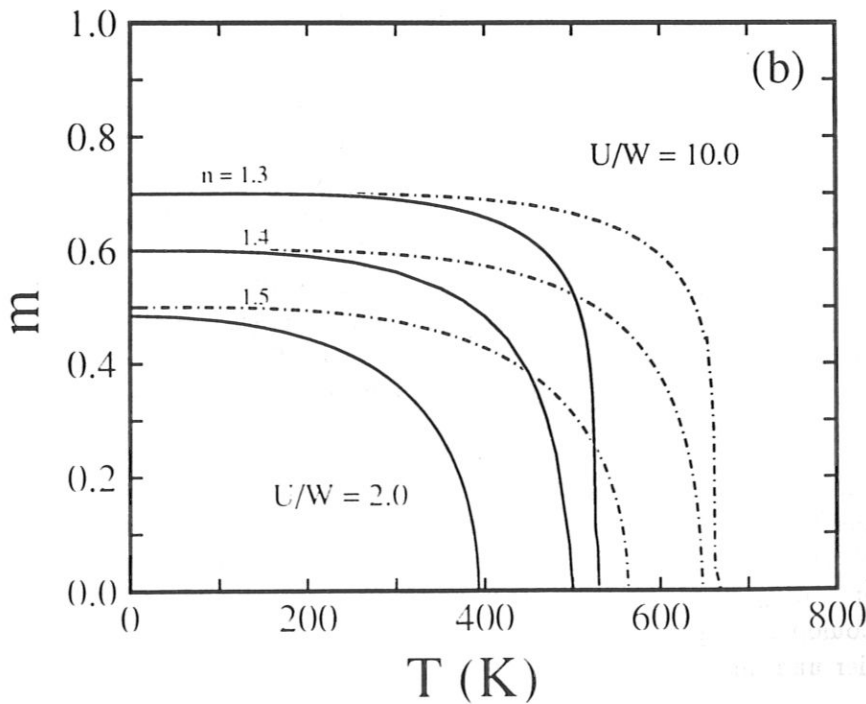
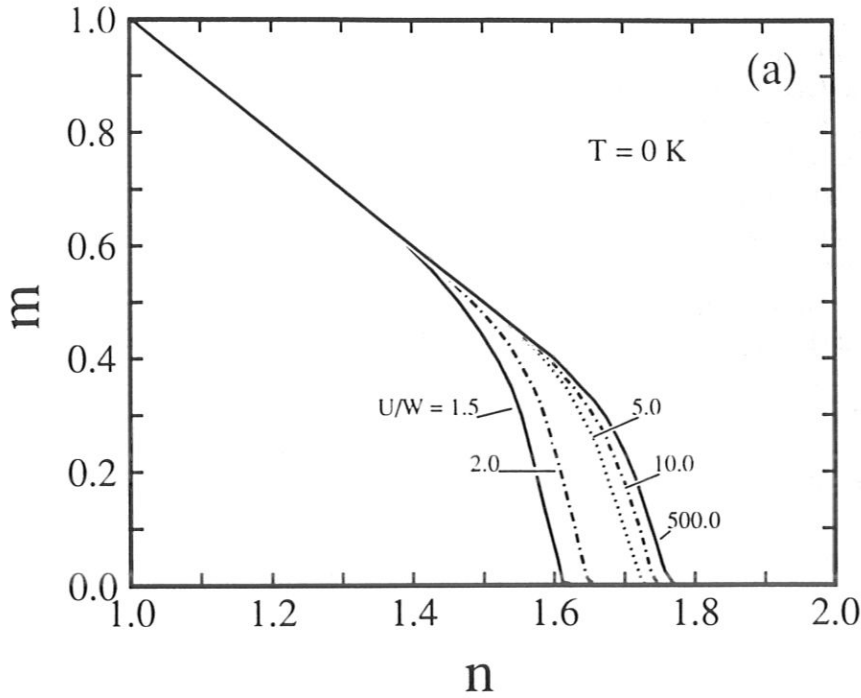


Abbildung 2.3.b: (a): Die ($T = 0$)-Polarisation $m = \langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle$ in Abhängigkeit von der Bandfüllung n — zur BDOS in Abb. 2.1.a — für verschiedene Werte der Coulombkoppelung U/W . (b): spontane Magnetisierung als Funktion der Temperatur für drei verschiedene Bandfüllungen. Durchgezogene Linien: $U/W = 2$, der entsprechende Verlauf für $U/W = 10$ ist strichpunktiert eingezeichnet.

bei etwa 0.4. Sie sinkt monoton mit U/W , und man erkennt, daß die höchste Elektronendichte in der Grenze unendlicher Kopplungsstärke bei einem Wert von ungefähr 1.8 „sättigen“ muß. Die niedrigste kritische Lochdichte, die sich erreichen läßt, wenn man die BDOS gemäß 2.1.a verwendet, liegt also bei etwa 0.2. Die größte erreichbare Magnetisierung oder *ferromagnetische Sättigung* des Systems, $(m_{max}(T=0)) = 2 - n$, ist in der Region $1 < n < 1.4$ bereits dann anzutreffen, wenn nur mäßig starke Kopplungen ($U/W \geq 1.5$) eingesetzt werden. Dieser Bereich an Elektronenkonzentrationen wächst mit U/W , im Grenzfall $U \rightarrow \infty$ findet sich gesättigter Ferromagnetismus sogar noch bei $n \approx 1.7$.

Ist $n < n_{crit}$ oder $(2 - n) < (2 - n)_{crit}$, erscheint grundsätzlich nur die paramagnetische Phase. Aus dem so skizzierten Phasendiagramm wird nun das System bei zwei Kopplungsstärken und drei Werten für die Bandbesetzung betrachtet.

Die im Teil (b) der Abb. 2.3.b gezeigten Magnetisierungskurven in Abhängigkeit von der Temperatur ähneln bereits sehr dem Verhalten von in der Natur vorkommenden Systemen, wie z.B. des typischen Bandferromagneten Ni [56]. Bei festem n , das die Bedingungen (2.3.1) und (2.3.2) erfüllt, wächst die Curietemperatur T_C mit der Kopplungsstärke und sättigt jeweils bei einem endlichen Wert. Mit der hier verwendeten „Kirchturm“-BDOS liegt der maximal erreichbare Curiepunkt noch deutlich unter 1000 K. Auch dieses Resultat kommt der Realität ziemlich nahe.

Der folgende Teil der Auswertung bezieht sich auf die mittlere Magnetisierungskurve bei $n = 1.4$ und $U/W = 2$. In die Einteilchen-Selbstenergie gehen die spinabhängigen Größen Bandbesetzung und Bandverschiebung unmittelbar ein, wie aus den Gln. (2.2.23) und (2.2.22) hervorgeht. Deshalb spiegelt sich das magnetische Verhalten des Systems direkt in der Temperaturabhängigkeit der QDOS. In Abb. 2.3.c lassen sich drei verschiedene Einflüsse elektronischer Korrelationen auf $\rho_\sigma(E)$ ausmachen. Eine ihrer Wirkungen besteht in der Aufspaltung der QDOS in zwei Quasiteilchen-Subbänder. Dies passiert bei allen Temperaturen und Bandbesetzungen und bedeutet längst noch keinen Ferromagnetismus, siehe Abb. 2.3.a. Die Kopplungsstärke darf nicht zu klein sein, sonst sorgt die Bandbreiten-Korrektur $B_{k\sigma}^{(W)}$ in der Selbstenergie für das Verschmelzen beider Strukturen. Der Abstand der Schwerpunkte beider Subbänder beträgt in etwa U für jede Spinrichtung und ändert sich kaum mit der Temperatur.

Getrennte Quasiteilchen-Subbänder darf man nicht mit der magnetischen „Austauschspaltung“ verwechseln. Diese ist der zweite Effekt, den Elektronenkorrelationen verursachen. Gemeint ist eine zusätzliche Veränderung der Breite einer jeden Unterstruktur, die es nur bei Temperaturen unterhalb des Curiepunktes gibt ($T < T_C$). Die „Spinaufspaltung“ läßt sich mit Hilfe der Quasiteilchen-Energien $E_{1,2\sigma}(\mathbf{k})$ definieren:

$$\Delta_j(\mathbf{k}) = \Delta_j(\mathbf{k}, T) := [E_{j1}(\mathbf{k}) - E_{j\uparrow}(\mathbf{k})](T). \quad (2.3.5)$$

j bezeichnet die nieder- bzw. hochenergetische Quasiteilchenstruktur ($j = 1, 2$). Δ_j beträgt stets lediglich einige zehntel eV, wie man aus dem Teildiagramm (a) in 2.3.c abliest. Das erklärt den ausgesprochen realistischen Wert für T_C in dieser Modellrechnung ($T_C = 501K$), im Gegensatz zu entsprechenden Resultaten des Stoner-Modells [73], bei dem die Bänder starr und in der Breite unverändert gegeneinander verschoben sind, was im allgemeinen zu Curietemperaturen führt, die mindestens eine Größenordnung zu hoch liegen.

Die Fläche unter $\rho_\sigma(E)$ ist für jede Temperatur und jeden Spin aufgrund der Normierung der Dichten gleich, [Glg. (2.3.4)]. Weil das System aber entsprechend dem chemischen Potential μ mit Elektronen besetzt wird, stehen für jede Spinsorte unterschiedlich viele Zustände zur

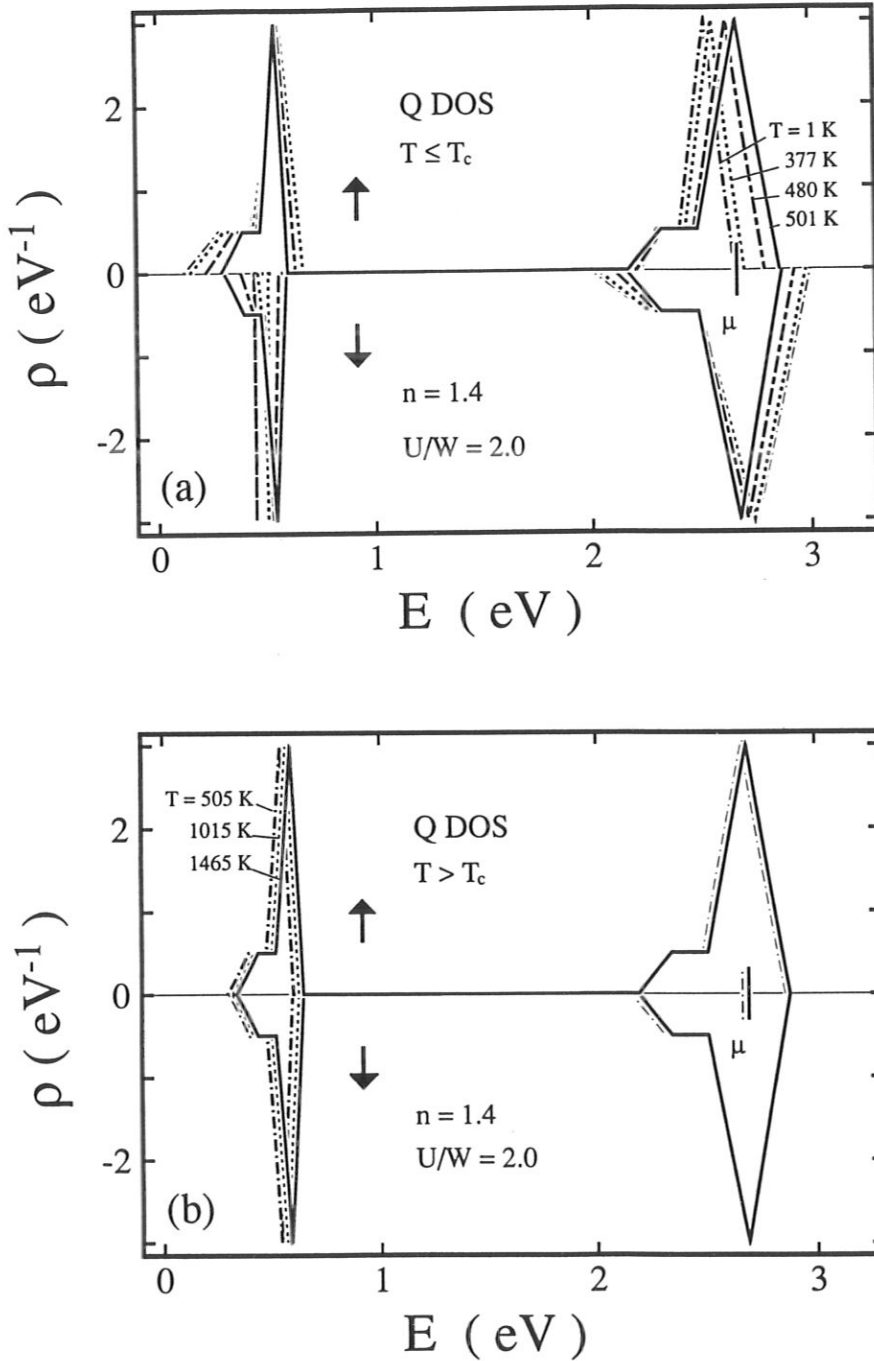


Abbildung 2.3.c: Die QDOS' als Funktion der Energie des stark korrelierten, ferromagnetischen Elektronensystems bei verschiedenen Temperaturen; (a): unterhalb der Curietemperatur von $T_C = 501\text{ K}$, (b): oberhalb T_C . Die oberen Bildhälften zeigen jeweils die \uparrow -, die unteren die \downarrow -Zustandsdichten.

Verfügung [Glg. (2.2.6)]. Also resultiert daraus ein magnetisches Moment, z.B. für $T = 1K$ (strichpunktierte Linien). Wie man Abb. 2.3.b entnehmen kann, sättigt das System am Nullpunkt der Temperatur, d.h. $\langle n_{\downarrow} \rangle = 0.4$, und $\langle n_{\uparrow} \rangle = 1.0$. Das bedeutet auch, daß jeder Gitterplatz mit einem Spin- \uparrow -Quasiteilchen besetzt ist; das obere \uparrow -Subband liegt darum vollkommen unterhalb von μ . Die Lochdichte von 0.6 pro Gitterplatz ist vollständig spin- \uparrow -polarisiert. Da es für ein Spin- \downarrow -Elektron keine Möglichkeit gibt, einen leeren Gitterplatz zu finden, muß das untere \downarrow -Quasiteilchen-Subband verschwinden, siehe Abb. 2.3.c.

Was passiert mit der QDOS, wenn sich die Temperatur ändert? Mit steigender Temperatur gleichen sich die Flächen unter einer jeden Substruktur beider Spinrichtungen einander an. Das magnetische Moment muß also sinken, und bei $T = 501K$ ist es offensichtlich gerade verschwunden — die Curietemperatur ist nun erreicht. Die Flächenstücke unter den QDOS' skalieren im stark gekoppelten System grob mit den spektralen Gewichtungsfaktoren,

$$\begin{aligned} \alpha_{1\sigma}(\mathbf{k}) &\approx \alpha_{1\sigma} \approx 1 - n_{-\sigma}; \\ \alpha_{2\sigma}(\mathbf{k}) &\approx \alpha_{2\sigma} \approx n_{-\sigma}; \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

nur bei schwachen bis moderaten Kopplungen ergibt sich eine ausgeprägte \mathbf{k} -Abhängigkeit.

Hier liegt ein wesentlich feinerer Mechanismus vor, der für eine magnetische Ordnung im Hubbard-System sorgt, als die einfache Verschiebung undeformierter Bänder in der Stoner'schen Näherung. Erwähnenswert ist auch die teilweise Umkehrung der Austauschspaltung $\Delta_j(\mathbf{k}, E)$ bei ein und demselben \mathbf{k} . Offenbar liegen einige Zustände der Minorität ($\sigma = \downarrow$) energetisch *unterhalb* der Majorität; \mathbf{k} -aufgelöste Photoemissionsexperimente an Ni liefern deutliche Hinweise darauf, daß es eine solche Situation an gewissen Punkten der Brillouin-Zone tatsächlich gibt [56, 57, 84, 85, 86].

Der dritte Korrelationseffekt betrifft alle Bandbreiten gemeinsam; alle Quasiteilchen-Strukturen sind bei genügend großer Coulombenergie ($U > W$) schmaler als das ursprüngliche Blochband. Das chemische Potential ändert sich über alle Temperaturen hinweg kaum, und jenseits des Curiepunktes ($T > T_C$) zeigen die QDOS eine relativ geringe, gleichförmige Verschiebung zu höheren Energien. Die drei letztgenannten Eigenschaften konnten bereits am reinen Paramagneten ($n = 0.6$) beobachtet werden [Teil (b) in Abb. 2.3.a].

Hiermit finden Entwurf und Auswertung der Einteilchentheorie einen vorläufigen Abschluß. Im Hinblick auf die spätere Diskussion von Zweiteilchen-Spektren erscheint auch noch eine andere Klassifizierung der Korrelationen sinnvoll.

Die Kollektivphänomene, Phasenübergänge bzw. von der Temperatur abhängigen Veränderungen in den Einquasiteilchen-Subbändern kommen durch das Elektronensystem als Ganzes zustande; die sie verursachenden Korrelationen sollen im folgenden als *indirekt* bezeichnet werden. Indirekte Korrelationen lassen sich gewissermaßen „ausschalten“, indem das System vollständig von Elektronen besetzt oder ganz von ihnen entleert wird.

Mit der *direkten* Korrelation soll dagegen die unmittelbare, im Rahmen der hier benutzten Modelle auch lokal oder intraatomar genannte Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung gemeint sein. Direkte Korrelationen treten nur in freien Systemen nicht auf.

Bei der im folgenden Abschnitt dargelegten AES-/APS-Theorie, bei der letztlich konkrete Intensitäten interessieren, wird $\rho_{\sigma}(E)$ als Input-Größe gebraucht. Die QDOS ist deshalb die Verbindung zwischen Vielteilchenphänomenen und Zweiteilchen-Spektroskopie.

2.4 Zweiquasiteilchen-Spektroskopie

Teilweise gefüllte Systeme zeigen in wichtigen Einteilchengrößen eine mehr oder weniger deutliche Temperaturabhängigkeit. Entsprechendes läßt sich natürlich auch den Spektroskopien AES und APS unterstellen. Ein sehr allgemeines Resultat wurde bereits mit der „thermodynamischen Konversion“ der Zweiteilchen-Spektraldichte, s. Glgn. (1.3.16) und (1.3.17) zu AE- und AP-Intensitäten erhalten; ein Temperatureffekt ist demnach in der Überschneidung der hochenergetischen AE- mit der niederenergetischen AP-Linienform zu sehen. Das kann aber nicht die einzige Information sein, nachdem doch gerade in der QDOS para- und ferromagnetische Phasen unterschieden werden können. Die weit wichtigere T -Dynamik hat man von $A^{(2)}(E)$ selbst zu erwarten.

Die entscheidende Prägung der Einteilchentheorie der letzten Abschnitte war die a priori-Information über die Spektraldichte des Hubbard-Modells; sie hat zum Zweipol-Ansatz motiviert. Ein ähnliches Vorhaben mit der Zweiteilchen-Spektraldichte stößt jedoch rasch an ernstzunehmende technische Grenzen.

Geht man von der QDOS des stark korrelierten Systems aus, so müssen durch den zentralen AP-(AE-)Prozeß zwei Quasiteilchen erzeugt (vernichtet) werden, von denen eines dem Quasiteilchen-Subband ($j\sigma$) angehört, das andere dagegen dem ($j'\sigma'$). Demnach sind die vier Kombinationen

$$(a): [1 \uparrow -1 \downarrow], (b): [1 \uparrow -2 \downarrow], (c): [2 \uparrow -1 \downarrow], (d): [2 \uparrow -2 \downarrow]$$

möglich, und auf der Energieachse sind vier nicht notwendig voneinander getrennte Strukturen von $A^{(2)}$ zu erwarten. So haben die „überkreuzten“ Kombinationen (b) und (c) überlappende Energieintervalle, wie Abb. 2.3.c erkennen läßt. In Analogie zur Einteilchentheorie könnte man also an einen Vierpol-Ansatz an $A^{(2)}(E)$ denken, in welchem mit der Momentenmethode vier spektrale Gewichtsfaktoren und Anregungsenergien zu ermitteln wären.

Doch ist bereits an der einfachen Einteilchen-Spektraldichte aufgefallen, daß die spektralen Momente mit wachsender Ordnung rasch kompliziert werden. Hier nun würde man deren acht benötigen, noch dazu an einer höheren Spektralfunktion, wobei nicht einmal Quasiteilchen-Dämpfung berücksichtigt wäre. Die Aufstellung eines Selbstkonsistenz-Gleichungssystems im dritten Schritt der Momentenmethode ist zwar mathematisch möglich, dürfte aber aufgrund der mit den spektralen Momenten entstandenen höheren Korrelationsfunktionen, die wiederum auf die ursprüngliche Zweiteilchen-Spektraldichte zurückgeführt werden müssen, insgesamt am technischen Aufwand scheitern.

Auch die Orientierung am Lander-Modell ist kein überzeugender Ausgangspunkt für eine Zweiquasiteilchen-Theorie, wie schon durch die einleitenden Abschnitte nahegelegt wird. So soll im folgenden eine Berechnung vorgestellt werden, welche zwar ohne Approximationen nicht auskommt, gleichwohl für alle Temperaturen, Coulombenergien und Bandbesetzungen näherungsweise gültig sein dürfte. Sie führt zu einem überraschend einfachen Ausdruck für die Zweiteilchen-Spektraldichte, deren wesentlicher Input die Einteilchengrößen $\rho_\sigma(E)$ und n_σ sind.

Ausgangspunkt ist der elementare Anregungsprozeß für AES oder APS. Wegen der lokalen Anregung im s-Band-Hubbard-System schreibt das Pauli-Prinzip vor, daß die beiden Teilchen (Löcher) antiparallelen Spin haben müssen. Die Zweiteilchen-Spektralfunktion hat

deshalb die einfache Gestalt:

$$A^{(2)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp\left(\frac{i}{\hbar} E(t-t')\right) \cdot \frac{1}{2\pi} \left\langle [(c_{i-\sigma} c_{i\sigma})(t) (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i-\sigma}^{\dagger})(t')]_{-} \right\rangle. \quad (2.4.1)$$

Die für die Berücksichtigung der T -Abhängigkeit zur Anwendung gelangende Diagrammtechnik nach Matsubara [63, 78, 87] liefert keine direkte Information über die Spektraldichte oder die ihr äquivalente retardierte oder avancierte Greenfunktion, sondern zunächst über die Zweielektronen-Matsubarafunktion $\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0)$:

$$\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}_0} \int_{-\infty}^{\hbar\beta} d\tau \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0 \tau\right) \left\langle c_{\mathbf{k}-\sigma}(\tau) c_{\mathbf{q}-\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{q}-\mathbf{p}_0}^{\dagger}(0) c_{\mathbf{p}_0-\sigma}^{\dagger}(0) \right\rangle. \quad (2.4.2)$$

Doch kann man die durch eine einfache Ersetzung des Energiearguments,

$$iE_0 \rightarrow E + i0^+,$$

erzielbare formale Übereinstimmung der Spektraldarstellungen der Matsubara- und der retardierten Greenfunktion [78] ausnutzen. Dadurch läßt sich $\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0)$ zuletzt in die retardierte Greenfunktion $G_{\mathbf{q}}^{(2)}$ transformieren und die gesuchte Zweielektronen-Spektralfunktion aus der folgenden Beziehung erhalten:

$$A^{(2)}(E) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{q}} \Im \left\{ G_{\mathbf{q}}^{(2)}(E + i0^+) \right\}. \quad (2.4.3)$$

Da die Matsubara-Methode von rein imaginären Zeiten ausgeht, aber mit der reellen Größe $\tau = it$ arbeitet, stehen die Konstruktionsoperatoren in modifizierter Heisenberg-Darstellung:

$$c(\tau) = \exp\left(\frac{1}{\hbar} H \tau\right) c(0) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} H \tau\right), \quad (2.4.4)$$

und wegen der Periodizität der Matsubarafunktion ist ihr Energieargument diskretisiert:

$$E_0 = 2n_0 \frac{\pi}{\beta}, \quad n_0 \text{ ganzzahlig.} \quad (2.4.5)$$

Bei APS oder AES werden Fermionenpaare erzeugt oder vernichtet; E_0 ist also die Matsubaraenergie für Bosonen.

Diagramme für den Erwartungswert in (2.4.2) haben eine allgemeine Struktur, wie sie in Abb. 2.4.a gezeigt ist. Typisch sind die vier externen Linien, die Einteilchen-Matsubarafunktionen bedeuten; E_1 bzw. E_2 sind somit Fermionen-Matsubaraenergien:

$$E_{1,2} = \frac{\pi}{\beta} (2n_{1,2} + 1). \quad (2.4.6)$$

Ein Diagramm n -ter Ordnung besteht aus n Vertizes (gestrichelte Linien) und $(2n + 2)$ Propagatoren (durchgezogene Linien) [78] [Abb. 2.4.b]. Sie wird auf folgende Art und Weise in eine konkrete Funktion in Abhängigkeit von Wellenzahl, Energie und Spin übersetzt:

(1) Zu jedem Vertex gehört ein Faktor $\frac{-1}{\hbar^2 \beta} U$. Impuls und Energie bleiben erhalten. An jedem Vertexpunkt gilt Spinerhaltung; die Spinabhängigkeit von $\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0)$ ist hier nur formal. $E_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{l}}, \dots$ sind Fermionen-Matsubaraenergien [Glg. (2.4.6)].

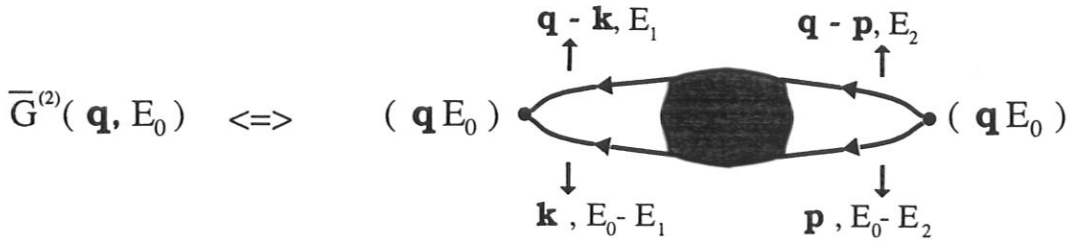


Abbildung 2.4.a: Das allgemeine Diagramm der Zweiteilchen-Matsubarafunktion für das Einband-System.

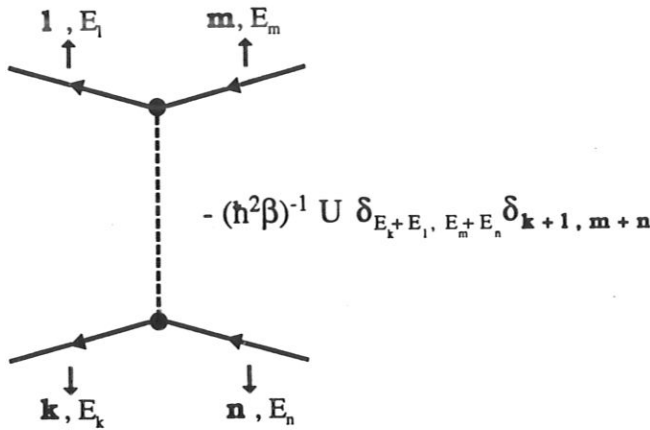


Abbildung 2.4.b: Das allgemeine Vertexdiagramm.

(2) Einfache Propagatoren tragen mit der freien Einteilchen-Matsubarafunktion bei:

$$\bar{G}_{0\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}_i, E_i) = \frac{\hbar}{iE_{\mathbf{k}_i} - \varepsilon(\mathbf{k}_i) + \mu}, \tag{2.4.7}$$

mit einem zusätzlichen Faktor $\exp\left(\frac{i}{\hbar} E_{\mathbf{k}} 0^+\right)$, falls der Propagator am selben Vertex beginnt und endet.

(3) Über alle „inneren“ Wellenzahlen \mathbf{k}_i bzw. Energien $E_{\mathbf{k}_i}$, einschließlich $E_{1,2}$ bzw. \mathbf{k} , ist zu summieren, außer über \mathbf{q} und E_0 .

(4) Geschlossene Schleifen von der Anzahl S erhalten den zusätzlichen Faktor $\frac{(-1)^S}{N\hbar\beta}$.

Man könnte nun den Ausdruck $\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0)$ approximieren, indem man alle Diagramme der Art wie in Abb. 2.4.a bis zu einer endlichen Ordnung zusammenfaßt. Das würde konventioneller Störungstheorie entsprechen. Es bietet sich jedoch die Möglichkeit, die direkten Korrelationen zwischen den Teilchen im Endzustand exakt zu berücksichtigen, indem man alle für den Zweiteilchen-Prozeß relevanten Beiträge in einer unendlichen geometrischen Teilreihe aufsummiert.

Zu diesem Zweck sei ein sogenannter „Vertexpart“ eingeführt. Es ist der Teil eines Diagramms mit zwei Anschlüssen für weitere Propagatoren. Abb. 2.4.c zeigt drei Beispiele. Ein Vertexpart wird „irreduzibel“ genannt, wenn es unmöglich ist, von diesem ein Selbstenergie-diagramm einer Einteilchen-Funktion abzuspalten. Das ist in den Beispielen (a) und (b)

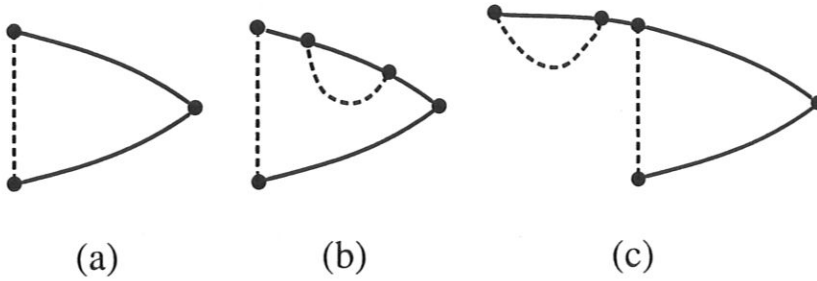


Abbildung 2.4.c: Einfache Diagramme des Vertexparts.

der Fall, bei (c) dagegen nicht; dieses Diagramm ist reduzibel. Die Abb. 2.4.d zeigt eine Vertexfunktion, die man sich aus allen irreduziblen Vertexparts aufgebaut denken muß.

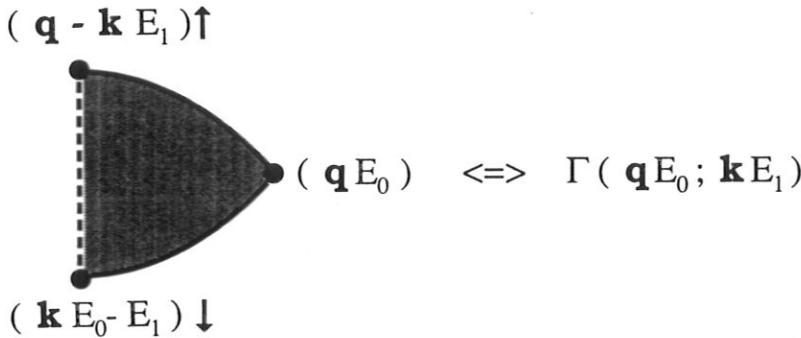


Abbildung 2.4.d: Die allgemeine diagrammatische Darstellung der Vertexfunktion.

$\bar{G}_q^{(2)}$ läßt sich mit Hilfe der Vertexfunktion $\Gamma(qE_0; kE_1)$ darstellen, wie in Abb. 2.4.e gezeigt ist.

Indem man $\bar{G}_q^{(2)}$ nun ausschließlich aus irreduziblen Diagrammen zusammensetzt, ist zunächst nirgendwo ein Selbstenergieanteil enthalten, mit welchem man Streuprozessen zwischen den Elektronen oder Löchern im Endzustand Rechnung tragen kann. Dies kann in approximativer Weise dadurch geschehen, daß man alle freien Einteilchen-Linien durch „volle“ („angekleidete“) Propagatoren, d.h. durch die Einteilchen-Matsubarafunktionen des wechselwirkenden Systems ersetzt. Indirekte Korrelationen, die im Rahmen des Hubbard-Modells bereits mit Hilfe der Einteilchen-Selbstenergie erfaßt sind, werden dadurch berücksichtigt. Durch diese Modifikation in der Matsubaratechnik verliert das Resultat von Kadanoff, nach

$$\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0) = \begin{array}{c} \bar{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^{(1)}(E_1) \\ \text{---} \nearrow \text{---} \\ \text{---} \searrow \text{---} \\ \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(1)}(E_0 - E_1) \end{array} \bar{\Gamma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1)$$

Abbildung 2.4.e: Die diagrammatische Darstellung der angekleideten Zweiteilchen-Matsubarafunktion durch die Vertexfunktion.

dem für die Berechnung von Zweiteilchen-Zustandsdichten kleine Elektronen- oder Lochkonzentrationen günstig sind [66], für das hier angestrebte Ziel seine Relevanz.

Die eigentliche diagrammatische Entwicklung besteht in der näherungsweise Zerlegung der Vertexfunktion in „Leiterdiagramme“ (ladder approximation, LA). Das wird in der ersten Zeile der Abb. 2.4.f demonstriert.

$$\begin{array}{c} \approx \bullet + U \text{---} \text{---} \text{---} + U \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \\ = \bullet + U \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

direkte indirekte Korrelationen

Abbildung 2.4.f: Die „modifizierte“ Leiterapproximation an der Vertexfunktion, Ref. [14]. Ihre Modifikation besteht in der Verwendung voller statt freier Einteilchen-Propagatoren

Andere Diagramme, die dadurch entstehen, daß eine Propagatorlinie durch ein komplizierteres Diagramm ersetzt wird, etwa in der Art, die in Abb. 2.4.c von Beispiel (a) nach (b) führt, erscheinen nicht, da solche Beiträge bereits implizit in den angekleideten Propagatoren enthalten sind. Jeder Summand in der Entwicklung unterscheidet sich daher vom nächsten nur durch einen Vertex und zwei angekleidete Einteilchen-Propagatoren. Die damit gegebene unendliche geometrische Reihe, die in der zweiten Zeile zu einem geschlossenen Ausdruck zusammengefaßt ist, summiert implizit wesentlich mehr Graphen auf, als durch eine explizite Zerlegung der Vertexfunktion nach freien Propagatoren erreicht werden kann.

Die algebraische Übersetzung des Diagramms in 2.4.e lautet, wobei die Regel (2) der

Modifikation der LA entsprechend abzuändern ist:

$$-\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0) = -\frac{1}{\hbar\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, E_1} \bar{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{q} - \mathbf{k}, E_1) \bar{G}_{-\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}, E_0 - E_1) \cdot \Gamma(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1). \quad (2.4.8)$$

Die modifizierte Leiterapproximation am Vertexpart [Abb. 2.4.f] liefert:

$$\Gamma(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1) = 1 + \frac{1}{\hbar\beta} \frac{-1}{\hbar} \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \Gamma(\mathbf{q}E_0; \mathbf{p}E_2) \bar{G}_{-\sigma}^{(1)}(\mathbf{p}, E_0 - E_2) \bar{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{q} - \mathbf{p}, E_2). \quad (2.4.9)$$

Auf der rechten Seite erscheinen \mathbf{k} und E_1 nicht; das ist eine Folge der Unabhängigkeit des Coulombmatrixelementes U von der Wellenzahl. Die Zweiteilchen-Selbstenergie läßt sich an (2.4.9) unmittelbar ablesen:

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0) = -\frac{1}{\hbar^2\beta} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \bar{G}_{-\sigma}^{(1)}(\mathbf{p}, E_0 - E_2) \bar{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{q} - \mathbf{p}, E_2), \quad (2.4.10)$$

und wegen (2.4.9) vereinfacht sich die Impuls- und Energieabhängigkeit der Funktion Γ :

$$\Gamma(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1) = \Gamma(\mathbf{q}, E_0). \quad (2.4.11)$$

So kommt man schließlich zu:

$$\Gamma(\mathbf{q}, E_0) = 1 + U \bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0) \cdot \Gamma(\mathbf{q}, E_0). \quad (2.4.12)$$

Die letzte Gleichung stellt man um:

$$\Gamma(\mathbf{q}, E_0) = \frac{1}{1 - U \bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)}, \quad (2.4.13)$$

und erhält durch Einsetzen in (2.4.8):

$$\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0) = \frac{-\hbar \bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)}{1 - U \bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)}. \quad (2.4.14)$$

Die Schlüsselgröße $\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)$ wird auch Polarisationspropagator genannt [78] und ist die einfachste denkbare Zweiteilchen-Greenfunktion im wechselwirkenden System, diagrammatisch dargestellt in Abb. 2.4.g.

Geschrieben mit „nackten“ Einteilchenpropagatoren führt sie auf die Dichtekorrelation des freien Systems, aus der bei $T = 0$ die bekannte Selbstfaltung der BDOS wird. In der hier entwickelten Theorie ist das Lander-Modell also enthalten. Um den vollen Polarisationspropagator zu berechnen, geht man von der Spektraldarstellung der Einteilchen-Matsubarafunktion aus:

$$\bar{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}; E_i) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E')}{iE_i - E'}, \quad (i = 1, 2). \quad (2.4.15)$$

$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$ ist die Eielektronen-Spektraldichte, die bereits aus der Auswertung des Hubbard-Modells bekannt ist. An dieser Stelle ist ein wichtiges Ziel der AES-/APS-Theorie im Grunde

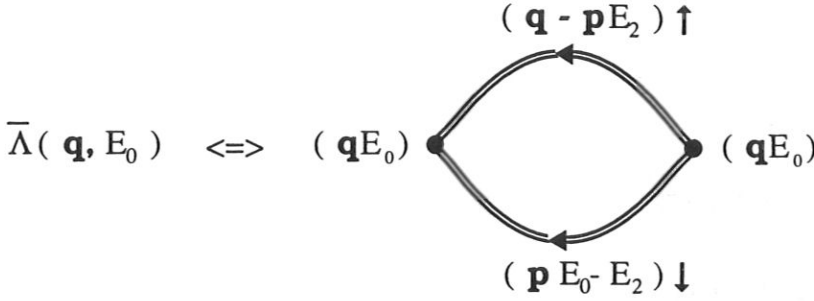


Abbildung 2.4.g: Der Polarisationspropagator.

erreicht: die Zurückführung der Zweiteilchen-Spektraldichte auf ein Funktional von Eielektronengrößen. Einsetzen von (2.4.15) in (2.4.10) liefert:

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0) = -\frac{1}{\hbar^2 \beta N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \iint_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{A_{\mathbf{p}-\sigma}^{(1)}(E')}{i(E_0 - E_2) - E'} \cdot \frac{A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}\sigma}^{(1)}(E'')}{iE_2 - E''}. \quad (2.4.16)$$

Für die Summation über E_2 bietet sich die allgemeine Beziehung (2.4.17) [63] an:

$$\frac{1}{\hbar\beta} \sum_{E_2} F(iE_2) = -\frac{1}{2\pi i \hbar} \int_C d\hat{E} \frac{F(\hat{E})}{1 + \exp(\beta \hat{E})}. \quad (2.4.17)$$

Wenn das Jordan'sche Lemma erfüllt ist, was in (2.4.16) sicher gegeben ist, läßt sich der Integrationsweg C , der die Pole von F auf der imaginären Achse umschließt, gegen die Kontur \bar{C} austauschen. Die Abbildung 2.4.h stellt dies schematisch dar. Im Innengebiet von \bar{C} weist der Integrand zwei Pole auf. Man hat auszuführen:

$$I = \frac{1}{2\pi i \hbar^2} \int_{\bar{C}} d\hat{E} \frac{1}{1 + \exp(\beta \hat{E})} \cdot \left(\frac{-1}{\hat{E} + E' - iE_0} \right) \cdot \frac{1}{\hat{E} - E''}, \quad (2.4.18)$$

wofür der Residuensatz liefert:

$$I = \frac{1}{\hbar^2} \left\{ \frac{1}{1 + \exp(\beta E'')} \cdot \left(\frac{1}{E'' + E' - iE_0} \right) + \frac{1}{1 + \exp(i\beta E_0) \exp(-\beta E')} \cdot \left(\frac{1}{iE_0 - E' - E''} \right) \right\}. \quad (2.4.19)$$

Da E_0 ein Bose-Quant ist [Glg. (2.4.5)], gilt $\exp(i\beta E_0) = 1$. Also erhält man mit I ,

$$I = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{iE_0 - E' - E''} \{1 - f_-(E' + \mu) - f_-(E'' + \mu)\}, \quad (2.4.20)$$

ein Zwischenergebnis für $\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)$:

$$\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0) = \frac{1}{\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{p}} \iint_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{A_{\mathbf{p}-\sigma}^{(1)}(E') A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}\sigma}^{(1)}(E'')}{iE_0 - E' - E''} \cdot (1 - f_-(E' + \mu) - f_-(E'' + \mu)). \quad (2.4.21)$$

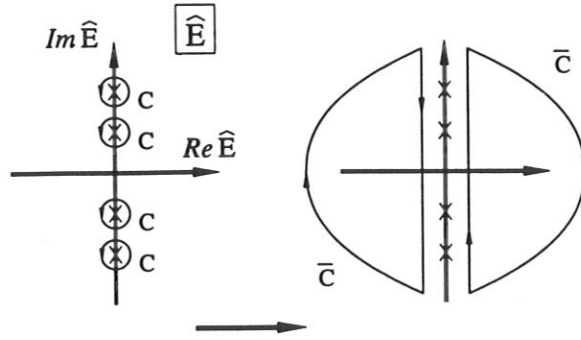


Abbildung 2.4.h: Zur Integrationskontur in Gleichung (2.4.17) (aus Ref. [14]).

Auf der rechten Seite erscheinen Fermifunktionen. $\bar{\Lambda}(\mathbf{q}, E_0)$ ist natürlich eine Matsubarafunktion wie $\bar{G}^{(2)}(\mathbf{q}, E_0)$. Die oben angekündigte Transformation in die *retardierte* Greenfunktion durch die Ersetzung $iE_0 \rightarrow E + i0^+$ liefert:

$$\Lambda(\mathbf{q}, E - 2\mu) = \frac{1}{\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{p}} \iint_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{A_{\mathbf{p}-\sigma}^{(1)}(E' - \mu) A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}\sigma}^{(1)}(E'' - \mu)}{E + i0^+ - E' - E''} \cdot (1 - f_-(E') - f_-(E'')) , \quad (2.4.22)$$

wobei die Energieargumente den Gln. (1.3.16) bzw. (1.3.17) entsprechend verändert wurden. Die Beziehung (2.4.22) läßt sich so noch nicht mit Hilfe der im letzten Abschnitt explizit errechneten Einquasiteilchen-Zustandsdichte auswerten. Dazu ist als letztes noch die \mathbf{p} -Summation zu bearbeiten. Das betrifft den Ausdruck:

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{q}}(E', E'') &= \frac{1}{\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}-\sigma}^{(1)}(E' - \mu) \cdot A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}\sigma}^{(1)}(E'' - \mu) \\ &= \frac{1}{\hbar^2 N^2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{k}, \mathbf{p}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i} A_{\mathbf{p}-\sigma}^{(1)}(E' - \mu) \cdot A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E'' - \mu) . \end{aligned} \quad (2.4.23)$$

Die erste Zeile von Glg. (2.4.23) geht in die zweite in einfacher Weise über, indem man eine Darstellung des Kronecker-Delta ausnutzt:

$$\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{p}, \mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i} . \quad (2.4.24)$$

Man kann nun, anstatt wie auf der rechten Seite von Glg. (2.4.23) über alle Gitterplätze \mathbf{R}_i über alle „Schalen“ summieren, die ein herausgegriffenes Atom umgeben. Δ_n sei der Ortsvektor vom Ursprung ($\mathbf{R}_0 = \mathbf{o}$) zu einem Atom in der n -ten Schale. Dann schreibt sich Glg. (2.4.23) wie folgt:

$$K_{\mathbf{q}}(E', E'') = \sum_{n, \Delta_n} e^{i\mathbf{q} \cdot \Delta_n} \rho_{-\sigma}^{(n)}(E') \rho_{\sigma}^{(n)}(E'') . \quad (2.4.25)$$

Mit $\rho_\sigma^{(n)}(E)$ ist die „modifizierte“ Quasiteilchen-Zustandsdichte definiert worden:

$$\rho_\sigma^{(n)}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \Delta_n) A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu), \quad (2.4.26)$$

welche natürlich für jedes der z_n Atome in der n -ten Schale die gleiche ist. Man kann einen Strukturfaktor $\gamma_n(\mathbf{q})$ einführen,

$$\gamma_n(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_n} \sum_{\Delta_n} \exp(i\mathbf{q} \cdot \Delta_n), \quad \gamma_0(\mathbf{q}) = 1, \quad (2.4.27)$$

und ihn im Ausdruck für $K_{\mathbf{q}}$ verwenden:

$$K_{\mathbf{q}}(E', E'') = \sum_n z_n \gamma_n(\mathbf{q}) \rho_{-\sigma}^{(n)}(E') \rho_\sigma^{(n)}(E''). \quad (2.4.28)$$

In Übereinstimmung mit der tight-binding-Näherung für die elektronischen Überlappintegrale T_{ij} im Hubbard-Modell kann man annehmen, daß die Summanden in (2.4.28) mit wachsendem Schalenradius $|\Delta_n|$ sehr rasch kleiner werden. Deshalb sollte es genügen, von der n -Summation lediglich die ersten beiden Terme mit $n = 0$ und $n = 1$ mitzunehmen:

$$K_{\mathbf{q}}(E', E'') \approx \rho_{-\sigma}(E') \rho_\sigma(E'') + \alpha^* \cdot (\varepsilon(\mathbf{q}) - T_0) \rho_{-\sigma}^{(1)}(E') \rho_\sigma^{(1)}(E''). \quad (2.4.29)$$

α^* ist durch den Vergleich mit (2.4.28) direkt ersichtlich und beim Vorliegen einer konkreten Kristallstruktur exakt angebar:

$$\alpha^* = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}) - T_0} \sum_{\Delta_1} \exp(i\mathbf{q} \cdot \Delta_1) = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}) - T_0} \cdot \frac{z_1}{\alpha W}; \quad (2.4.30)$$

die Konstante α ist mit der BDOS und der unteren Kante $\varepsilon(\mathbf{o})$ des Blochbandes gegeben:

$$\rho_0(T_0 - \alpha W) = \rho_0(\varepsilon(\mathbf{o})) \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.4.31)$$

Da die Theorie jedoch eher allgemein ausgewertet werden soll und hierfür eine modellhafte BDOS (2.1.5) verwendet wird, kann man α^* ebenso gut als Korrekturfaktor auffassen. Er soll die mit (2.4.29) gegenüber (2.4.28) erfolgte Vernachlässigung höherer Terme kompensieren. Das geschieht am Schluß durch die Anpassung von α^* an die allgemeine Summenregel (1.3.22) anhand fertiger AE- und AP-Spektren. $\rho_\sigma(E)$ ist die bereits errechnete QDOS. Für die modifizierte Einquasiteilchen-Zustandsdichte wird noch der Ausdruck

$$\rho_\sigma^{(1)}(E) = \frac{1}{N\hbar} \cdot \frac{1}{(\varepsilon(\mathbf{o}) - T_0)} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - T_0) A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu) \quad (2.4.32)$$

benötigt. Mit Hilfe des Resultates der Momentenmethode für $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E)$, (2.2.21), läßt sich (2.4.32) umformulieren:

$$\rho_\sigma^{(1)}(E) = \frac{1}{N\hbar} \cdot \frac{1}{(\varepsilon(\mathbf{o}) - T_0)} \sum_{\mathbf{k}} [E - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, E - \mu) - T_0] A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu). \quad (2.4.33)$$

In [83] wird gezeigt, daß die Abhängigkeit vom Wellenvektor in den Einteilchengrößen $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, E - \mu)$ und $A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu)$ aufgrund der Relation

$$B_{-\sigma}^{(W)}(\mathbf{k}) = B_{-\sigma}^{(W)}(\varepsilon(\mathbf{k})), \quad (2.4.34)$$

sowie der Glg. (2.2.21) ausschließlich in den Blochenergien steckt. Das gilt auch, wenn man (2.4.33) mit (2.4.29) kombiniert und das Ergebnis in (2.4.22) einsetzt. Diese beiden letzten Schritte sollen — der Übersichtlichkeit halber abweichend von [83] — bei *vernachlässigter* Bandbreiten-Korrektur vorgeführt werden. Die Einteilchen-Selbstenergie ist dann wegen der Gln. (2.2.23) und (2.2.22) \mathbf{k} -unabhängig, daher vereinfacht sich die Beziehung (2.4.33) zu:

$$\begin{aligned} \rho_\sigma^{(1)}(E) &= \frac{1}{N\hbar} \cdot \frac{1}{(\varepsilon(\mathbf{o}) - T_0)} \sum_{\mathbf{k}} (E - \Sigma_\sigma(E - \mu) - T_0) A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}(E - \mu) \\ &= \frac{E - \Sigma_\sigma(E - \mu) - T_0}{(\varepsilon(\mathbf{o}) - T_0)} \rho_\sigma(E), \end{aligned} \quad (2.4.35)$$

wobei für die zweite Zeile Glg. (2.2.7) angewandt wurde. Einsetzen von (2.4.35) in (2.4.29) ergibt:

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{q}}(E', E'') &\approx \rho_{-\sigma}(E') \rho_\sigma(E'') \\ &\cdot \left(1 + \alpha^* \frac{\varepsilon(\mathbf{q}) - T_0}{[\varepsilon(\mathbf{o}) - T_0]^2} \cdot (E' - \Sigma_{-\sigma}(E') - T_0) (E'' - \Sigma_\sigma(E'') - T_0) \right). \end{aligned} \quad (2.4.36)$$

Wenn man (2.4.36) in (2.4.22) einsetzt, so bieten sich die Definition $\varepsilon(\mathbf{q}) =: z$ und die Anwendung des „ ρ_0 “-Tricks an, Glg. (2.1.3). Weil ferner Λ eine (retardierte) Zweiteilchen-Greenfunktion ist, läßt sie sich in einen Real- und einen Imaginärteil zerlegen. Es gilt somit:

$$\Lambda(\mathbf{q}, E - 2\mu) = \Lambda(z = \varepsilon(\mathbf{q}); E - 2\mu) = H(E; z) + iN(E; z). \quad (2.4.37)$$

Die Kramers-Kronig-Relation [63, 78] setzt diese beiden Teile zueinander in Beziehung:

$$H(E; z) = -\frac{1}{\pi} \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{N(E'; z)}{E - E'}, \quad (2.4.38)$$

so daß im Grunde nur die Kenntnis des Imaginärteils vonnöten ist. Mit $N(E; z)$ ist abgekürzt worden:

$$N(E; z) = \pi \cdot (D_0(E) + (z - T_0)D_1(E)), \quad (2.4.39)$$

mit der Faltungsfunktion $D_0(E)$,

$$D_0(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{-\sigma}(x) \rho_\sigma(E - x) (1 - f_-(x) - f_-(E - x)), \quad (2.4.40)$$

und mit der Faltungskorrekturfunktion $D_1(E)$, welche direkt auf den zweiten Term in Glg. (2.4.29) zurückgeht:

$$D_1(E) = \alpha^* \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{-\sigma}^{(1)}(x) \rho_\sigma^{(1)}(E - x) (1 - f_-(x) - f_-(E - x)). \quad (2.4.41)$$

Abschließend fehlt noch der Realteil von Λ , den man (2.4.38) entnimmt:

$$H(E; z) = -(F_0(E) + (z - T_0) F_1(E)) ; \quad (2.4.42)$$

die Funktionen $F_0(E)$ und $F_1(E)$ bedeuten:

$$F_{0,1}(E) = \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{D_{0,1}(E')}{E - E'} . \quad (2.4.43)$$

Der Zweiteilchen-Part der Theorie ist nun — im Rahmen des s-Band-Hubbard-Modells — vollständig, denn (2.4.3), (2.4.14) und (2.4.37) legen zusammen die Zweielektronen-Spektralfunktion fest:

$$\begin{aligned} A^{(2)}(E - 2\mu) &= \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \Im \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \delta(\varepsilon(\mathbf{q}) - z) \cdot \frac{-\Lambda(\varepsilon(\mathbf{q}), E - 2\mu)}{1 - U\Lambda(\varepsilon(\mathbf{q}), E - 2\mu)} \right\} \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_0(z) \frac{N(E; z)}{[1 + UH(E; z)]^2 + U^2 N^2(E; z)} . \end{aligned} \quad (2.4.44)$$

In der letzten Zeile wurde (2.1.3) angewandt. Wie man (2.4.39) und (2.4.42) entnimmt, ist die z -Abhängigkeit des Integranden nicht besonders kompliziert; da man in den meisten Fällen die BDOS als Polygon angeben kann [Glg. (2.1.4)], ist das Integral in (2.4.44) sogar analytisch ausführbar. Wenn die Coulombabstoßung verschwindet, vereinfacht sich (2.4.44) wegen der Definition (2.2.9) des Blochband-Schwerpunktes zu:

$$A^{(2)}(E - 2\mu) \stackrel{U \equiv 0}{=} \hbar D_0(E) . \quad (2.4.45)$$

Einerseits bedeutet Glg. (2.4.45), daß *direkte* Korrelationen erst dann zum Tragen kommen, wenn die Zweiteilchen-Spektraldichte aus den Funktionen $D_{0,1}(E)$ und $F_{0,1}(E)$ gebildet wird. Andererseits erhält man mit Glgn. (2.2.22), (2.2.37) und (2.4.40) für $D_0(E)$:

$$D_0(E) \stackrel{\Sigma_{\sigma}(E) = \Sigma_{-\sigma}(E) = 0}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_0(E) \rho_0(E - x) (1 - f_{-}(x) - f_{-}(E - x)) . \quad (2.4.46)$$

Für ein freies System am Nullpunkt der Temperatur reduziert sich $A^{(2)}(E - 2\mu)$ demnach auf die Selbstfaltung des besetzten bzw. unbesetzten Teils der BDOS. Zusammen mit den „thermodynamischen Konversionen“ (1.3.17) bzw. (1.3.16) und (1.3.18) liegen also die AE- bzw. AP-Intensitäten des Lander-Modells vor, und $D_0(E)$ könnte man im gewissen Sinne als Spektraldichte des Selbstfaltungsmodells auffassen.

Die Subbänder, aus denen das Einquasiteilchen-Spektrum besteht, sind bereits im vorangegangenen Abschnitt gezeigt worden. Wenn deren untere Kanten bei $E_{i\sigma}$ liegen und ihre Breiten mit $W_{i\sigma}$ gegeben sind, so werden $D_0(E)$ und $D_1(E)$ lediglich in den Energiebereichen

$$E_{i\sigma} + E_{j-\sigma} \leq E \leq E_{i\sigma} + W_{i\sigma} + E_{j-\sigma} + W_{j-\sigma} , \quad (i, j) = (1, 2) , \quad (2.4.47)$$

von Null verschieden sein. Eine Darstellung der δ -Distribution,

$$\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \stackrel{\varepsilon \rightarrow 0^{\pm}}{=} \pm \delta(x) , \quad (2.4.48)$$

erkennt man im Integral in (2.4.44) wieder. Ist E außerhalb der in (2.4.47) definierten Energiebereiche, so gilt:

$$\begin{aligned} (N(E; z) \Rightarrow 0^\pm)_E &\sim A^{(2)}(E - 2\mu) \Rightarrow A_S^{(2)}(E - 2\mu), \\ A_S^{(2)}(E - 2\mu) &= \pm \frac{\hbar}{U} \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_0(z) \delta(1 + UH(E; z)) \\ &= \pm \frac{1}{U^2 |F_1(E)|} \rho_0 \left(\frac{1 - UF_0(E)}{UF_1(E)} + T_0 \right). \end{aligned} \quad (2.4.49)$$

+: APS; -: AES, gemäß Glg. (1.3.13).

Das ist die Spektraldichte des Satelliten. Sein tatsächliches Auftreten hängt von dem Verhalten der Hilberttransformierten $F_0(E)$ und $F_1(E)$ und damit implizit von allen Modellgrößen ab. Die mittlere Zeile in (2.4.49) läßt im Argument der δ -Distribution erkennen, daß die Kopplungsstärke den größten Einfluß hat, ähnlich wie beim „Cini-Satelliten“ (1.2.14). Der entscheidende Unterschied zum Resultat von Cini [48] besteht jedoch in der Dispersion der Struktur, wie man in der dritten Zeile von (2.4.49) leicht sehen kann. Ursache dafür ist die Abhängigkeit der Zweielektronen-Greenfunktion $G_q^{(2)}$ vom Wellenvektor, über den gemäß Beziehung (2.4.3) summiert werden muß, um die Zweiteilchen-Spektraldichte zu erhalten.

2.5 AES und APS am paramagnetischen Band

Die AES-/APS-Theorie soll für eine Auswahl von Modellparametern nunmehr konkret ausgewertet werden. Der Ausgangspunkt ist derselbe, wie bei der Berechnung der Einteilchen-Spektren. Temperatur, chemisches Potential, Bandbesetzung und Kopplungsstärke haben selbstkonsistent die QDOS festgelegt. Sie bilden den „Input“ für $A^{(2)}(E - 2\mu)$.

Das schwach gekoppelte System ($U/W = 0.3$), erstmals vorgestellt in Teil (a) der Abb. 2.3.a, zeigt für keinen der Werte von n Ferromagnetismus. Die QDOS weist bereits deutliche Veränderungen mit der Bandbesetzung auf, ein Korrelationsgap gibt es aber noch nicht.

Abb. 2.5.a zeigt die entsprechenden AE- und AP-Intensitäten bei $T = 0$. Die zugrundeliegende Zweielektronen-Spektraldichte $A^{(2)}(E)$ ist für $E \leq 2\mu$ negativ, für $E \geq 2\mu$ dagegen positiv. Die thermodynamischen Konversionsfaktoren v_{AES} und v_{APS} , mit denen man die entsprechenden Linienformen gewinnt, sind am Nullpunkt der Temperatur einfache Sprungfunktionen [Glg. (1.3.18)]. Also erscheint $I^{AES}(E - 2\mu, T = 0K)$ ausschließlich bei Energien $E - 2\mu \leq 0$, $I^{APS}(E - 2\mu, T = 0K)$ dagegen im Bereich $E - 2\mu \geq 0$. Bezeichnet man mit E_0 bzw. W_0 die untere Kante bzw. die Breite des paramagnetischen Quasiteilchenbandes, das bei $T = 0$ bis zu dem mit der Fermienergie zusammenfallenden chemischen Potential μ besetzt ist, so ist die Breite des AE-Spektrums durch $2(\mu - E_0)$ und die der AP-Linienform durch $2(W_0 + E_0 - \mu)$ gegeben. Mit steigender Bandbesetzung wächst das integrierte AE-Spektrum auf Kosten des AP-Anteils, weil sich μ zu höheren Energien hin verschiebt. Die Gleichungen (1.3.20) und (1.3.21) lassen dieses komplementäre Verhalten beider totaler Intensitäten direkt erkennen:

$$I_{tot}^{AES} = \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle, \quad (2.5.1)$$

$$I_{tot}^{APS} = 1 - n + \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle. \quad (2.5.2)$$

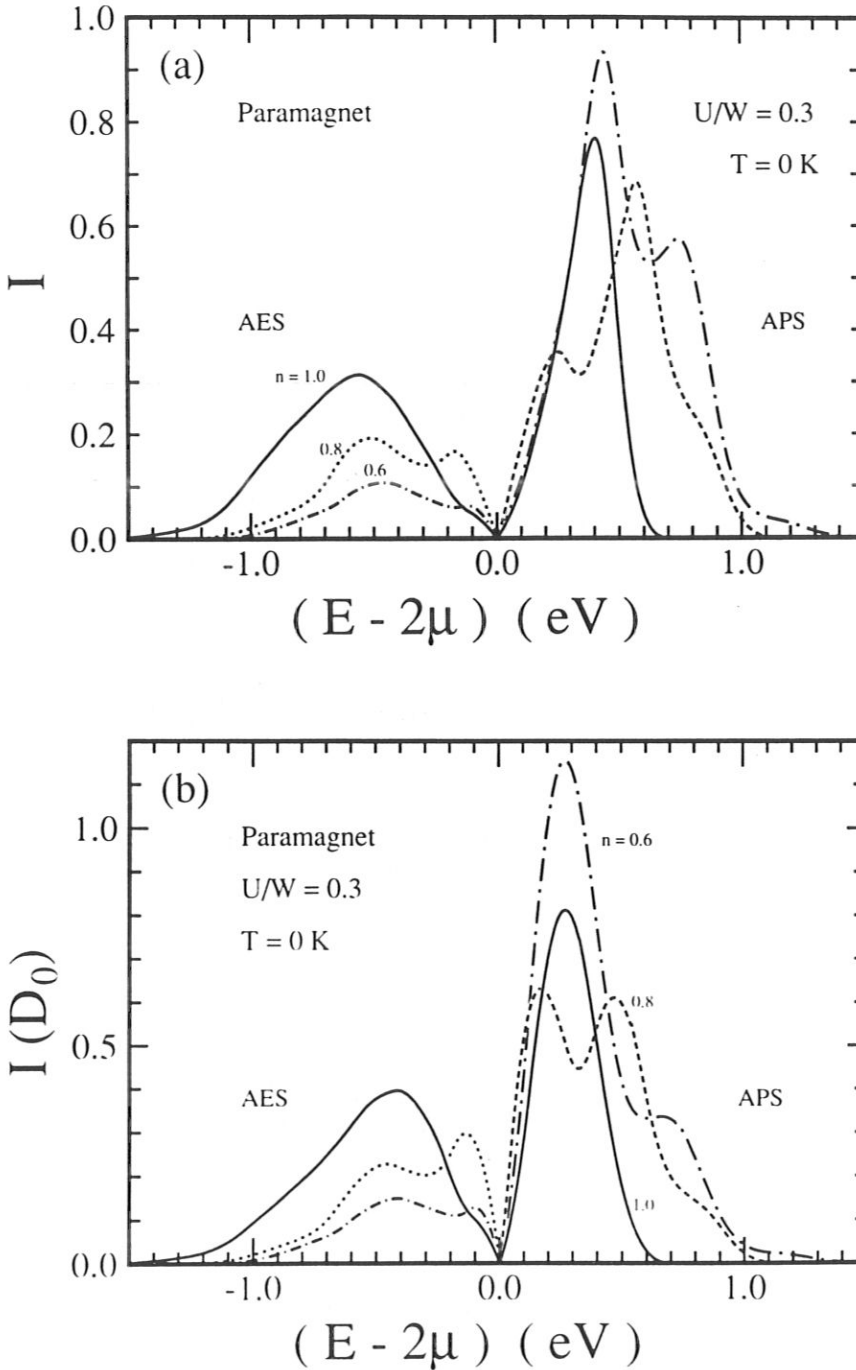


Abbildung 2.5.a: Die Auger Elektronen- und Auftrittspotential-Intensitäten als Funktion der Energie für das schwach gekoppelte, paramagnetische Energieband; $U/W = 0.3, T = 0$. Punktierte, strichpunktierte bzw. durchgezogene Linien gehören zu Werten der Bandbesetzung von jeweils $n = 0.8, 0.6$ bzw. 1.0 ; (a): berechnet mit der Zweiteilchen-Spektralfunktion, (b): nach dem Modell der Selbstfaltung.

Die Dichte–Dichte–Korrelation $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ steigt im schwach gekoppelten System monoton mit n . Zum Vergleich zeigt Teil (b) der Abb. 2.5.a die aus der einfachen Faltung D_0 , Glg. (2.4.40) abgeleitete Intensität $I(D_0(E))$. Mit dem thermodynamischen Faktor v_{AES} bzw. v_{APS} aus Glg. (1.3.18) erhält man:

$$I_{T=0K}(D_0) = \pm\Theta(\pm(E - 2\mu)) D_0(E - 2\mu), \quad (+: APS; -: AES). \quad (2.5.3)$$

Wie bereits im vorigen Abschnitt gesagt, liegt bei verschwindendem Coulombmatrixelement mit $I_{T=0K}(D_0(E))$ entsprechend der Beziehung (2.4.46) tatsächlich eine *Selbstfaltung* vor. $D_0(E)$ läßt stets die direkte Korrelation zwischen den beiden angeregten Elektronen oder Löchern außer acht. Offensichtlich ist diese im System mit schwacher Kopplung noch nicht bedeutsam, wie der Vergleich zwischen den Teilabbildungen (a) und (b) zeigt.

Die Spektren mit (Teil (a)) und ohne direkte Korrelation (Teil (b)) zeigen weitgehende Ähnlichkeiten, woraus geschlossen werden kann, daß das einfache Modell der Selbstfaltung [16] die physikalische Situation bei nicht zu hoher Kopplungsstärke noch recht gut beschreibt. In diesem Fall müßte die Entfaltung der AE- bzw. AP-Spektren zu recht zuverlässigen Aussagen über den besetzten bzw. unbesetzten Teil der QDOS führen. Man sollte aber nicht vergessen, daß die QDOS selbst große Unterschiede gegenüber der freien Einelektronendichte $\rho_0(E)$ aufweisen kann [Teil (a) in Abb. 2.3.a].

Im Regime starker Kopplung hat sich die Situation drastisch geändert, da nun das Einteilchen-Spektrum aus zwei Quasiteilchen-Subbändern zusammengesetzt ist, wie dies Teil (b) der Abb. 2.3.a für das Beispiel ($U/W = 2$, $n = 0.6$) veranschaulicht. Zusätzliche Spinaufspaltung tritt bei weniger als halbgefülltem Band ($n < 1$) noch nicht auf, so daß Ferromagnetismus hier ausgeschlossen ist.

Die beiden Quasiteilchen-Subbänder verursachen *drei* getrennte Unterstrukturen in der Spektraldichte $A^{(2)}(E - 2\mu)$. Wie man aus (2.4.44) ersehen kann, müssen deren Energiebereiche mit denjenigen der Faltungsgröße $D_0(E - 2\mu)$ zusammenfallen [Abb. 2.5.b, Teil (a)].

Mit $\rho_{1,2\sigma}$ seien die Substrukturen der QDOS, mit $E_{1,2}$ deren untere Kanten, und mit $W_{1,2}$ deren Breiten bezeichnet. Der niederenergetische Part von $D_0(E)$ wird von den indirekten Korrelationen des unteren Subbandes verursacht, das von der Faltung $\rho_{1\uparrow} * \rho_{1\downarrow}$ festgelegt wird. Ihr gehört der Energiebereich

$$2(E_1 - \mu) \leq E - 2\mu \leq 2(E_1 + W_1 - \mu) \quad (2.5.4)$$

an. Dem Intervall

$$2(E_2 - \mu) \leq E - 2\mu \leq 2(E_2 + W_2 - \mu) \quad (2.5.5)$$

läßt sich die hochenergetische Struktur zuordnen. Sie wird durch $\rho_{2\uparrow} * \rho_{2\downarrow}$ bestimmt. Der intermediäre Peak setzt sich aus den gemischten Kombinationen $\rho_{1\uparrow} * \rho_{2\downarrow} + \rho_{1\downarrow} * \rho_{2\uparrow}$ zusammen, deren Energieintervalle größtenteils überlappen. Sie nehmen den Energiebereich

$$E_1 + E_2 - 2\mu \leq E - 2\mu \leq E_1 + W_1 + E_2 + W_2 - 2\mu \quad (2.5.6)$$

ein. Der oszillierenden Funktion $D_1(E)$, Glg. (2.4.41), können die gleichen Intervalle zugeordnet werden. Die Tatsache, daß $D_1(E)$ nicht einfach als *additive* Korrektur von $D_0(E)$ gesehen werden darf, ist auf die q -Abhängigkeit des Nenners der Zweiteilchen-Matsubarafunktion in Glg. (2.4.14) zurückzuführen. Darum wird $D_1(E)$ getrennt gezeigt.

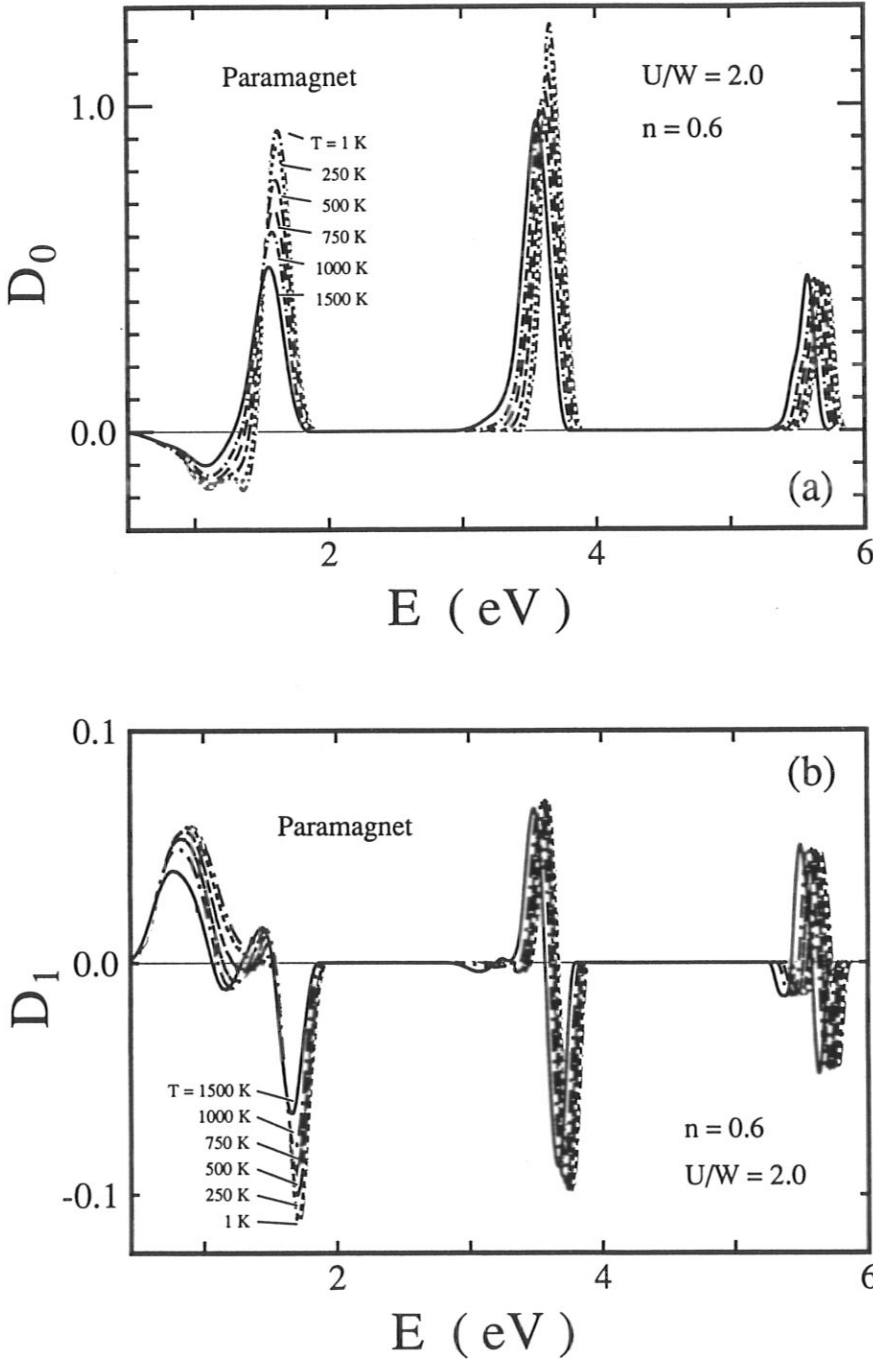


Abbildung 2.5.b: (a): Die Selbstfaltungsspektraldichte $D_0(E)$ gemäß Glg. (2.4.39) im stark korrelierten System ($U/W = 2$, $n = 0.6$) bei verschiedenen Temperaturen ($T = 1 \dots 1500\text{K}$). (b): wie (a), jedoch für die Selbstfaltungskorrektur $D_1(E)$, Glg. (2.4.40).

$D_0(E)$ und $D_1(E)$ zeigen eine deutliche, jedoch keine dramatische Temperaturabhängigkeit, die in der Hauptsache auf das Verhalten von μ und den dazugehörigen Verschiebungen der QDOS [Abb. 2.3.a, Teil (b)] zurückgeht.

Die fundamentale Zweiteilchen-Spektraldichte wird durch die Real- und Imaginärteile der retardierten Greenfunktion $\Lambda(\mathbf{q}, E - 2\mu)$ in (2.4.22) bestimmt. Der Imaginärteil wird durch $D_0(E)$ und $D_1(E)$ festgelegt, während man für den Realteil die Hilberttransformierten $F_{0,1}(E)$, Glg. (2.4.43), benötigt. Diese Funktionen zeigen in den Bereichen, in denen $D_0(E)$ und $D_1(E)$ nicht verschwinden, Abb. 2.4.b, charakteristische Oszillationen. Außerhalb jener Intervalle haben sie ein asymptotisches Verhalten:

$$F_{0,1}(E) \xrightarrow{E \rightarrow \pm\infty} 0. \quad (2.5.7)$$

Ihre Temperaturabhängigkeit folgt aus dem Verhalten von $D_{0,1}(E)$, Abb. 2.5.b. $F_0(E)$ und $F_1(E)$ sind in der vorliegenden Theorie Hilfsgrößen ohne unmittelbare physikalische Bedeutung; im Lander-Modell erscheinen sie nicht.

An den AE- und den AP-Intensitäten des hochkorrelierten Paramagneten lassen sich etliche bemerkenswerte Charakteristika erkennen, Abb. 2.5.d, Teil (a). Beim weniger als halbgefüllten Band ($n < 1$) besteht das AP-Spektrum aus drei Strukturen, während das AE-Signal nur eine Linie aufweist. Dies läßt sich allein der durch indirekte Korrelationen bewirkten Aufspaltung des Energiebandes in zwei Quasiteilchen-Subbänder zuschreiben. Das große Gap zwischen ihnen, Abb. 2.3.a, Teil (b), verhindert die Besetzung des oberen Subbandes, selbst bei relativ großen Temperaturen ($T \gtrsim 1000K$). Es gibt in beiden Subbändern unbesetzte Zustände, welche Elektronenpaar-Anregungen ermöglichen. So kommt es zu den drei AP-Peaks.

Besetzte Zustände gibt es nur im unteren Subband, so daß nur dort Lochpaare gebildet werden können. Daher existiert nur *eine* AE-Linienform. Die durch $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ entsprechend der Glg. (2.5.1) gegebene totale AE-Intensität ist vergleichsweise klein, da die Bandelektronen wegen der großen intraatomaren Coulombwechselwirkung Doppelbesetzungen soweit wie möglich vermeiden. Die Möglichkeit, an ein und demselben Gitterplatz *zwei* Löcher zu erzeugen, wird somit verringert. Die deutliche Überschneidung zwischen der AE- und der niederenergetischen AP-Linienform ist ein Effekt der thermodynamischen Konversionsfaktoren. Darauf wurde bereits im ersten Kapitel hingewiesen. Er wird mit der Temperatur stärker und läßt sich dahingehend interpretieren, daß mit wachsendem T mehr und mehr unbesetzte Einteilchen-Zustände, die sonst oberhalb des chemischen Potentials anzusiedeln sind, mit Elektronen bevölkert werden. Damit steigt die Wahrscheinlichkeit für Lochpaar-Anregungen bei Energien $E > 2\mu$. Andererseits werden in zunehmendem Maße die besetzten Teile der Subbänder entleert. Dort werden dann APS-Anregungen möglich.

Auf den ersten Blick ähneln die aus den Faltungintegralen abgeleiteten Intensitäten $I(D_0)$ im zweiten Teil der Abb. 2.5.d sehr den im Teil (a) dargestellten Resultaten, vorausgesetzt, man verwendet die korrekte Vielteilchen-QDOS, Abb. 2.3.a, Teil (b). Ebenso wie im „vollen“ Modellspektrum, gibt es neben einer AE-Linienform drei AP-Strukturen. Diese Aufteilung des Spektrums ist den schon erwähnten indirekten Korrelationen im wechselwirkenden Elektronensystem zuzuschreiben. Im Detail zeigt die volle Modellrechnung erhebliche Abweichungen von der Spektraldichte des Selbstfaltungsmodells. Der Grund dafür sind die direkten Korrelationen, welche besonders auf die AP-Kurven großen Einfluß ausüben.

So verursachen sie eine extrem scharfe Niederenergiestruktur, die in der Einfügung in der Abb. 2.5.d, Teil (a), noch einmal auf einer anderen Skala gezeigt ist. Ihre Höhe übertrifft die

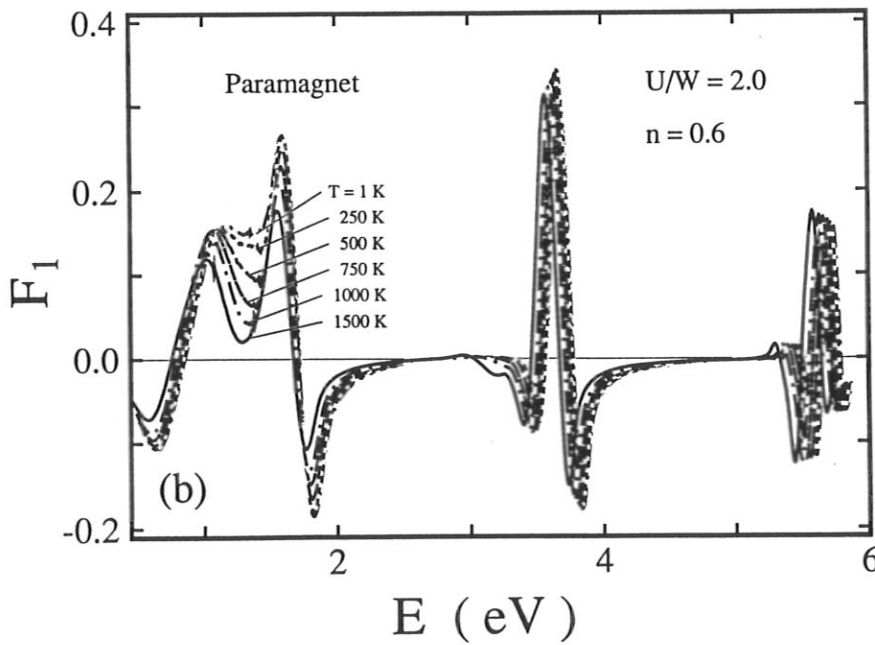
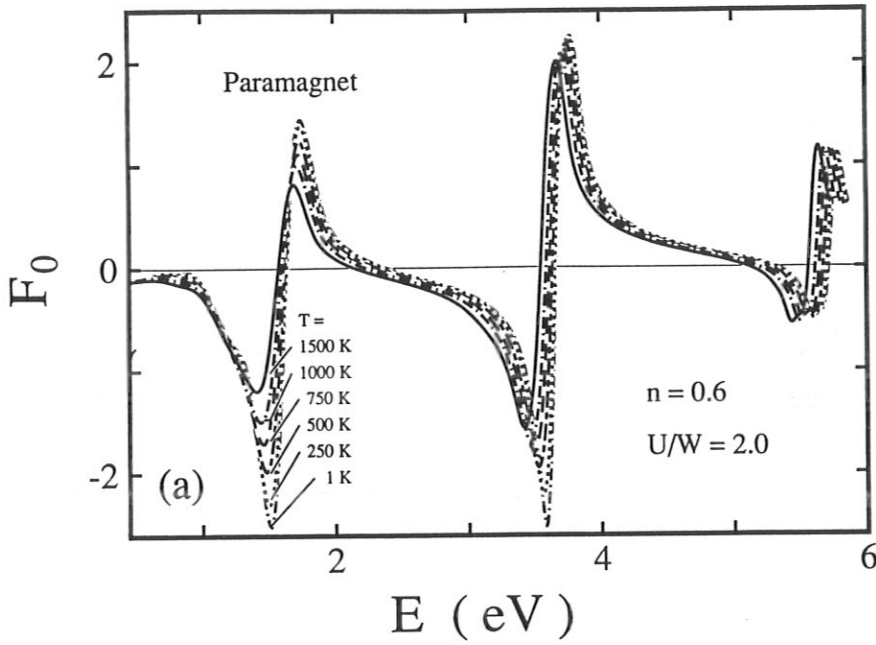


Abbildung 2.5.c: Wie Abb. 2.5.b, jedoch für die jeweiligen Hilberttransformierten $F_0(E)$ und $F_1(E)$ der Funktionen $D_{0,1}(E)$.

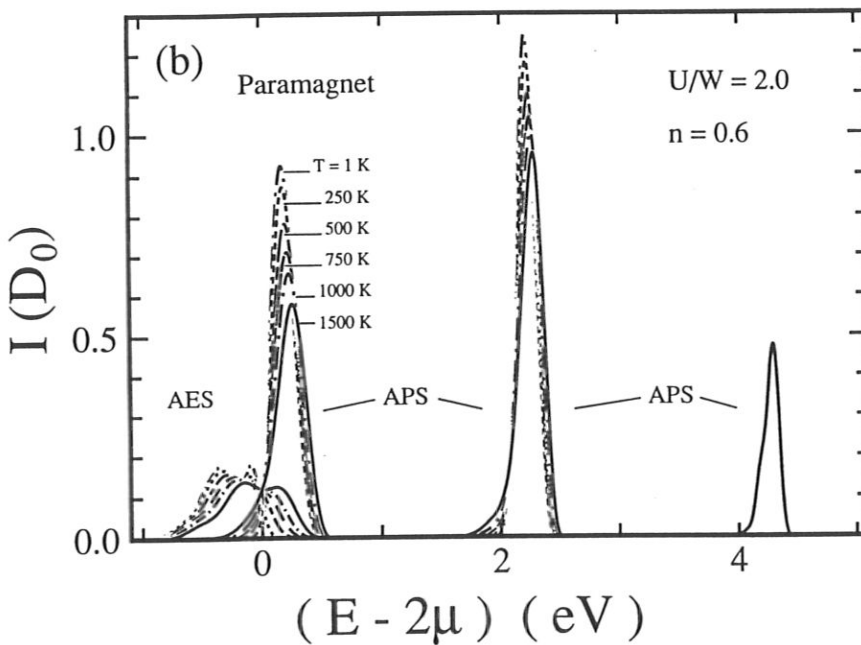
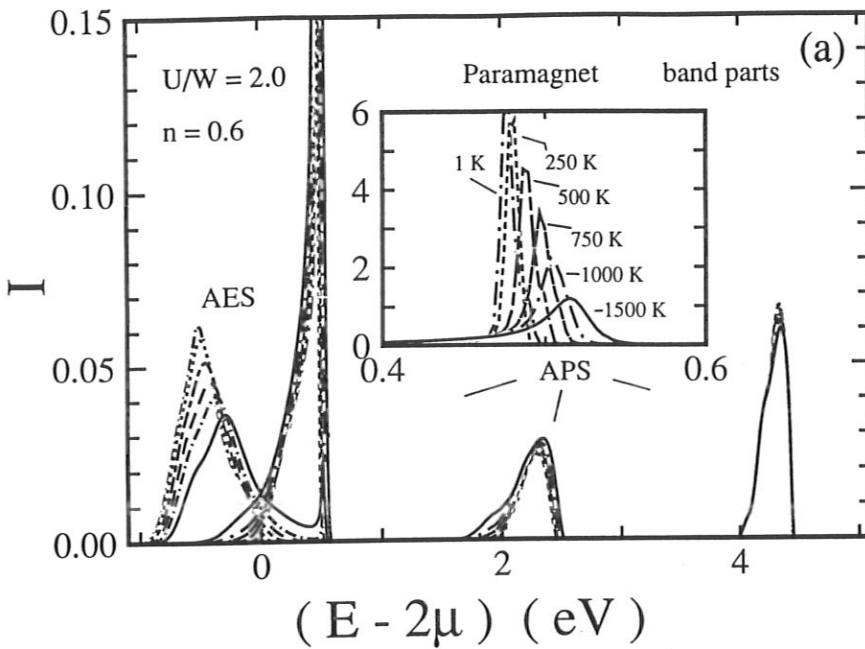


Abbildung 2.5.d: Die AE- und AP-Intensitäten als Funktionen der Energie im stark korrelierten paramagnetischen System ($U/W = 2$, $n = 0.6$) bei verschiedenen Temperaturen ($T = 1 \dots 1500\text{K}$). (a): Volle Modellrechnung gemäß (2.4.44). Die Einfügung zeigt den niederenergetischen APS-Peak auf einer anderen Skala. (b): Zum Vergleich die direkt aus der Faltung D_0 abgeleiteten Intensitäten des selben Systems.

der AE-Linie um mindestens zwei Größenordnungen. Mit steigender Temperatur schrumpft diese, ohne daß sich die Fläche unterhalb der AP-Struktur in nennenswertem Maße verändert.

Die beiden anderen AP-Signale sind mit dem AE-Spektrum vergleichbar und von ihrem Temperaturverhalten her weniger interessant. Auffällig ist deren wesentlich geringeres Gewicht im Verhältnis zum Niederenergie-Peak und zu den Strukturen $I(D_0)$. Der Grund hierfür sind Satelliten. Sie sind eine Besonderheit des Modellspektrums, werden ebenfalls von direkten Korrelationen verursacht und befinden sich außerhalb der durch (2.5.4) – (2.5.6) definierten Energiebereiche. In letztere fallen die gerade besprochenen Strukturen, die man wegen ihres Zusammenhangs mit den Faltungsintegralen der Einelektronen-Subbänder auch „bandartig“ nennen kann.

Ein Satellit wird einem Endzustand zugeordnet, bei dem die beiden AP-Elektronen (bzw. AE-Löcher) anschließend *nicht* über verschiedene Gitterplätze durch den Kristall propagieren, sondern sich wie ein gebundener, jedoch nicht *lokal gebundener* Zustand verhalten. Dieser ist umso stabiler, je größer die unmittelbare Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen ist, weil dem (\uparrow, \downarrow) -Quasiteilchenpaar der direkte Stoßpartner fehlt, welcher es ihm erlauben würde, in einem energie- und impulserhaltenden Prozeß zu zerfallen. Da im Rahmen des s-Band-Hubbard-Modells jeder Gitterplatz höchstens von zwei Elektronen besetzt sein darf und stark abgeschirmte Coulombpotentiale angenommen werden, so daß sich Ladungsträger auf verschiedenen Plätzen nicht „sehen“ können, propagiert das (\uparrow, \downarrow) -Teilchen annähernd wechselwirkungsfrei durch das System. So erklärt sich die auffallende Ähnlichkeit zwischen dessen Energiedispersion und der BDOS, Abb. 2.5.e. Sobald der Satellit erscheint, führt dieser praktisch das gesamte spektrale Gewicht mit sich, wie man durch Vergleichen der Skalen in den Abbn. 2.5.d und 2.5.e feststellen kann.

Die hochenergetischen Strukturen, die in Teil (b) der Abb. 2.5.e gezeigt sind, entsprechen solchen Situationen, in denen beide AP-Elektronen aus dem oberen Hubbard-Band stammen. Dagegen kommt bei den mittleregetischen Peaks [Teil (a)] ein AP-Partner aus dem unteren, der andere aus dem oberen Subband. Außerdem ist eine deutliche Temperaturabhängigkeit zu erkennen.

2.6 Der Phasenübergang in den Zweiteilchen-Spektren

Die Möglichkeiten für das Auftreten ferromagnetischer Ordnung wurden in Verbindung mit den Abbildungen 2.3.b und 2.3.c diskutiert. Dem Modellelektronensystem wird die kirkurtmartige Blochzustandsdichte zugrunde gelegt [Abb. 2.1.a]. Bei weniger als halbgefülltem Band ($n < 1$) gibt es noch keinen spontanen Magnetismus, unabhängig von der Größe der Coulombkopplung. Ein magnetischer Grundzustand ist dagegen möglich, wenn bei mehr als halber Bandfüllung ($n > 1$) die Kopplungsstärke *und* die Lochkonzentration $2 - n$ kritische Werte überschreiten [Abb. 2.3.b, Teil (a)].

Im folgenden werden AE- und AP-Spektren am System mit den Modellparametern $U/W = 2$ und $n = 1.4$ untersucht. Diese Daten simulieren grob die Situation im ferromagnetisch aktiven obersten Ni-3d-Teilband [56, 57]. Die temperaturabhängige QDOS wurde bereits in Abb. 2.3.c vorgestellt. Das chemische Potential verändert sich nur sehr wenig mit T . Es liegt innerhalb des oberen Quasiteilchen-Subbandes, denn im mehr als halb gefüllten System kommt es zwangsläufig zu Doppelbesetzungen. Ebenso, wie beim stark korrelierten

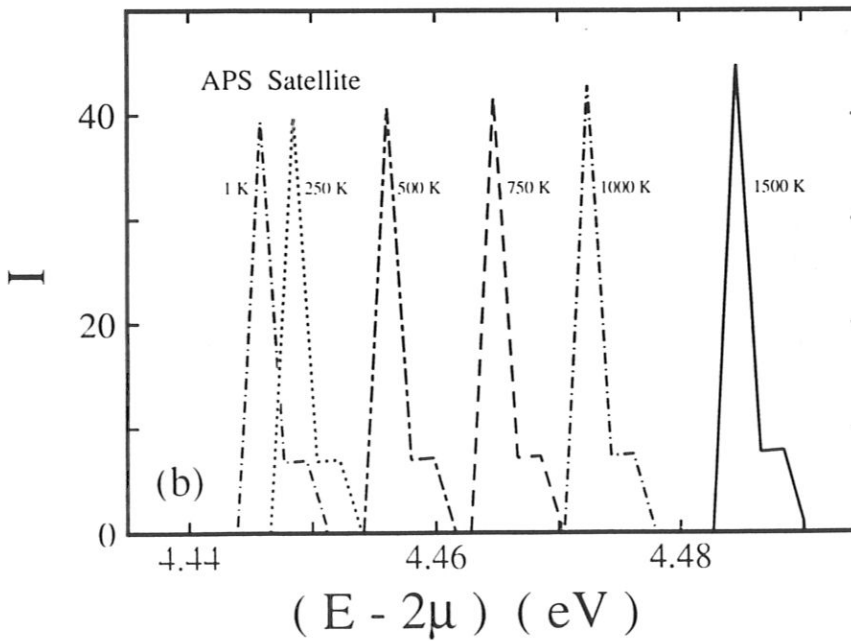
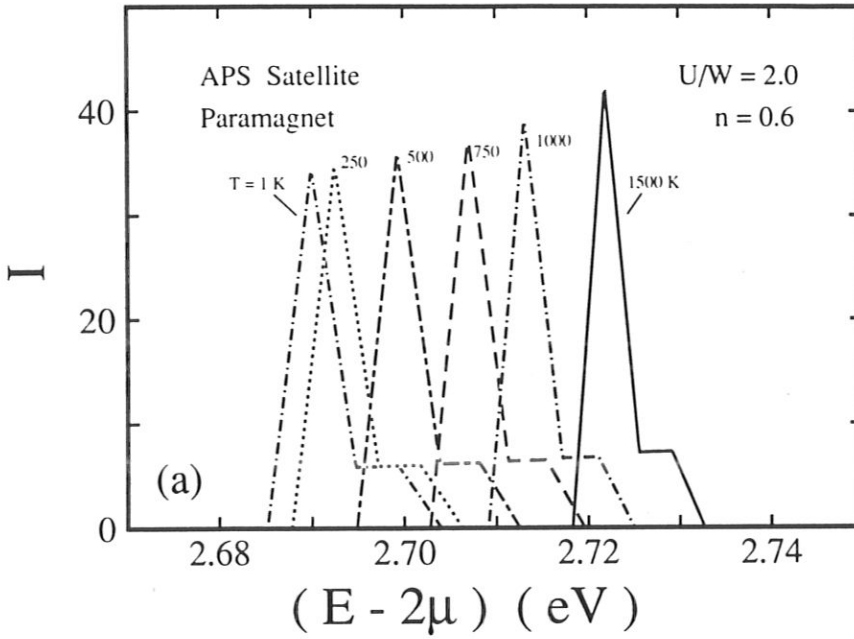


Abbildung 2.5.e: Die AP-Satelliten zur Abb. 2.5.d als Funktionen der Energie für verschiedene Temperaturen ($T = 1 \dots 1500\text{K}$). Sie gehören entweder zu den (a) mittlereenergetischen, oder (b) hochenergetischen bandartigen Linienformen des AP-Spektrums.

Paramagneten trägt die Faltung $D_0(E)$ infolge des für jeden Spin in zwei Unterstrukturen gesplitteten Quasiteilchenspektrums in drei voneinander getrennten Energiebereichen bei. Die unteren Kanten seien mit $E_{1(2)\sigma}(T)$ bezeichnet; die Breite eines jeden Spin-Subbandes sei $W_{1(2)\sigma}(T)$. Breiten und Unterkanten hängen natürlich sowohl vom Spin als auch von der Temperatur ab. Die eben erwähnten Energiebereiche lassen sich für die Region niedriger ($i = 1$) und hoher Energien ($i = 2$) angeben:

$$E_{i\uparrow} + E_{i\downarrow} \leq E \leq E_{i\uparrow} + W_{i\uparrow} + E_{i\downarrow} + W_{i\downarrow}, \quad (i = 1, 2). \quad (2.6.1)$$

Dem entspricht die Kombination (Faltung) von ausschließlich niederenergetischen oder ausschließlich hochenergetischen QDOS-Subbändern,

$$\rho_{i\uparrow} * \rho_{i\downarrow}, \quad i = 1, 2.$$

Dementsprechend ordnet man dem intermediären Part die beiden „Mischkombinationen“, $\rho_{1\uparrow} * \rho_{2\downarrow}$ und $\rho_{1\downarrow} * \rho_{2\uparrow}$, zu. Die Einzelintervalle überschneiden sich weitgehend; jenseits der Curietemperatur kommen sie zur völligen Überdeckung. Für den mittlereenergetischen Peak läßt sich daher schreiben:

$$\min_{\sigma}(E_{1\sigma} + E_{2-\sigma}) \leq E \leq \max_{\sigma}(E_{1\sigma} + W_{1\sigma} + E_{2-\sigma} + W_{2-\sigma}). \quad (2.6.2)$$

Die niederenergetische Faltung $\rho_{1\uparrow} * \rho_{1\downarrow}$ verschwindet beim ferromagnetisch gesättigten System, weil es in diesem Fall keine einfach besetzten Gitterplätze mit einem Spin- \downarrow -Teilchen gibt. Die hochenergetische Kombination $\rho_{2\uparrow} * \rho_{2\downarrow}$ erlaubt dagegen keine APS-Anregung mehr, weil das ($2 \uparrow$)-Subband voll besetzt ist. Für zwei zusätzliche spinantiparallele AP-Elektronen würde also nur noch ein $2 \downarrow$ -, jedoch kein $2 \uparrow$ -Niveau mehr zur Verfügung stehen. Somit ist verständlich, warum bei $T = 1K$ in Abb. 2.6.a, Teil (a) sowohl die ganze niederenergetische Struktur von $D_0(E)$ (keine AES-Anregung möglich), als auch ihr positiver Part im hochenergetischen Intervall (kein AP-Signal) verschwinden müssen. Dieser Befund überträgt sich auf die Faltungskorrektur $D_1(E)$ [Abb. 2.6.b].

Die Temperaturdynamik von $D_{0,1}(E)$ ist wesentlich ausgeprägter, als beim reinen Paramagneten. Verantwortlich hierfür ist die nun hinzugekommene, T -abhängige Spinaufspaltung der Quasiteilchen-Subbänder. Wenn die Temperatur bis zum Curiepunkt steigt, wachsen die niederenergetischen Strukturen $D_0(E)$ und $D_1(E)$ heraus, weil das $1 \downarrow$ -Subband erscheint, mit T an Breite zunimmt, und es daher zunehmend leichter wird, ($1 \uparrow - 1 \downarrow$)-AES-Anregungen zu erzeugen.

Hochenergetische ($2 \uparrow, 2 \downarrow$)-APS-Elektronenpaare werden ebenfalls ermöglicht, weil das $2 \uparrow$ -Subband mit steigender Temperatur entleert wird, indem es durch seine Verbreiterung mit seiner oberen Kante über das chemische Potential rutscht. Infolgedessen nimmt auch die einzige AP-Struktur in $D_0(E)$ und $D_1(E)$ zu.

Auch für $T > T_C$ reagieren die beiden Faltungsgrößen noch deutlich auf Temperaturänderung. Die Peaks bei niedriger und mittlerer Energie zeigen dann eher Verlagerungen zu höheren Energien hin. Darin spiegelt sich das Verhalten der QDOS, vor allem das ihrer unteren Subbänder, wieder. Andererseits ist die T -Abhängigkeit des Hochenergie-Peaks bei etwa $E = 2\mu$ ein Effekt der Fermifunktionen in den Glgn. (2.4.40) und (2.4.41).

Die Eigenschaften von $D_{0,1}(E)$ übertragen sich auf deren Hilberttransformierte $F_{0,1}(E)$, siehe Abbn. 2.6.c, 2.6.d, so daß diese Funktionen ausschließlich durch indirekte Korrelationen im wechselwirkenden Elektronensystem festgelegt sind.

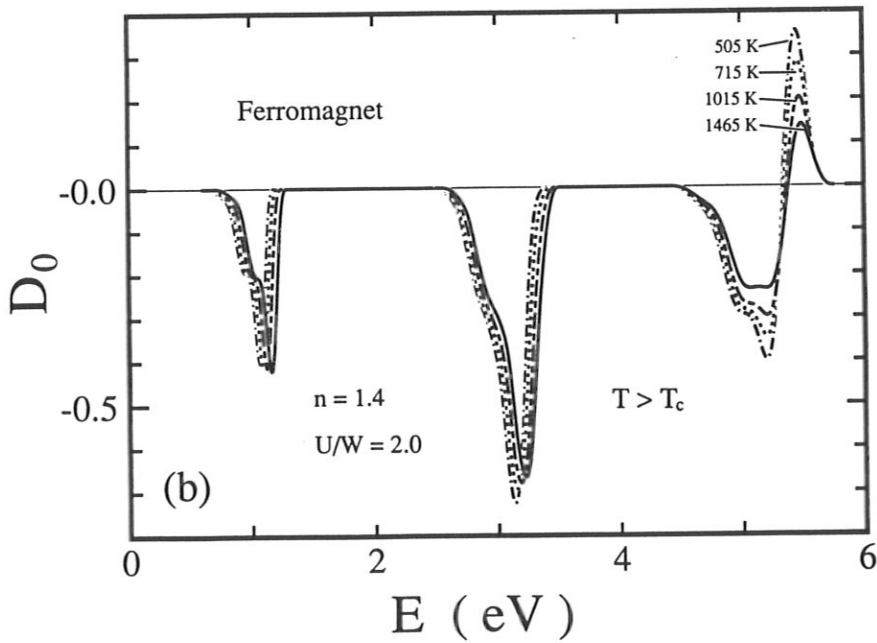
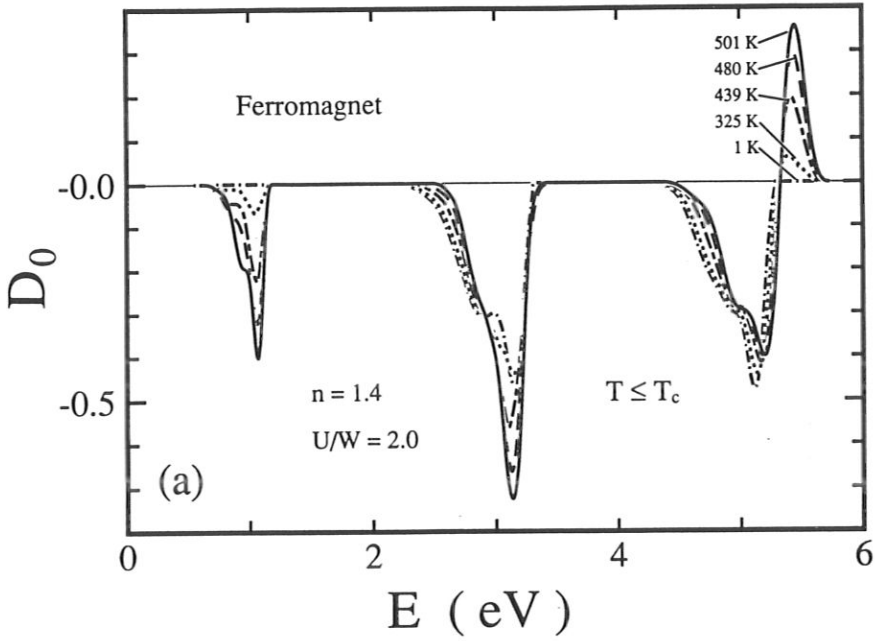


Abbildung 2.6.a: Die Faltungsspektraldichte $D_0(E)$ als Funktion der Energie des ferromagnetischen Systems (siehe auch Abb. 2.3.c und Gleichung (2.4.40)) bei verschiedenen Temperaturen. (a): $T \leq T_C = 501K$, (b): $T > T_C$.

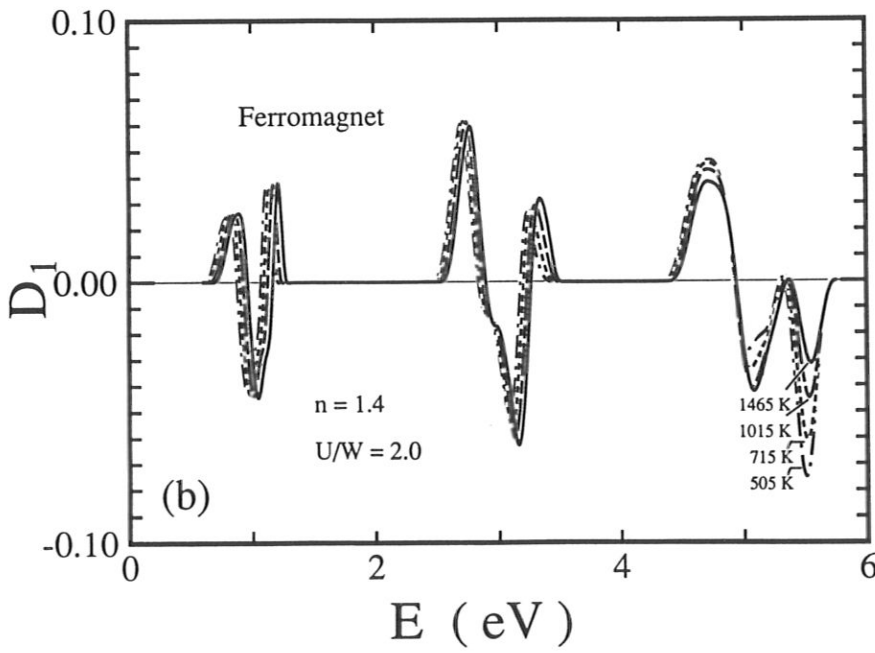
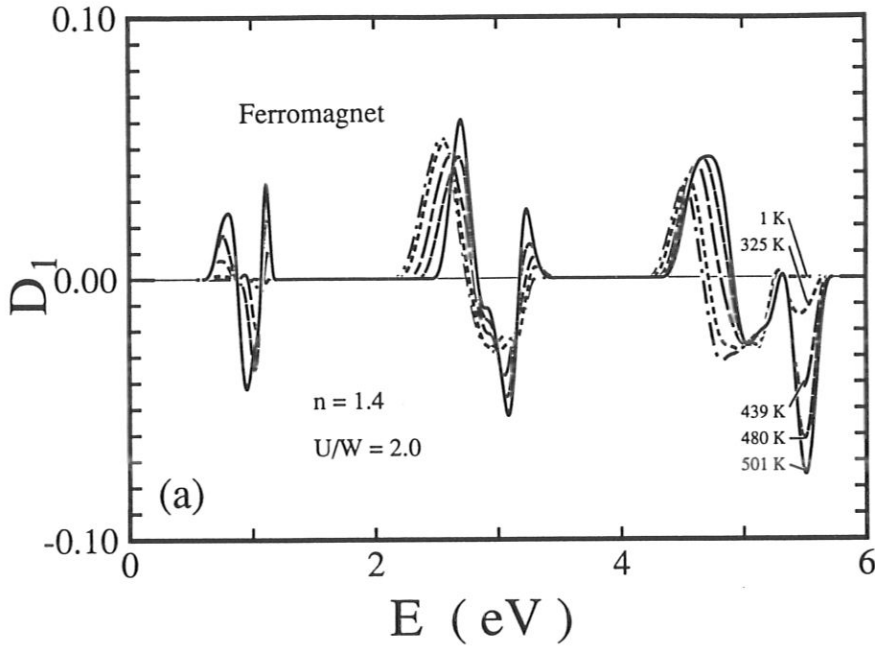


Abbildung 2.6.b: Wie Abb. 2.6.a, jedoch zur Faltungskorrektur $D_1(E)$ (siehe auch Gleichung (2.4.41)).

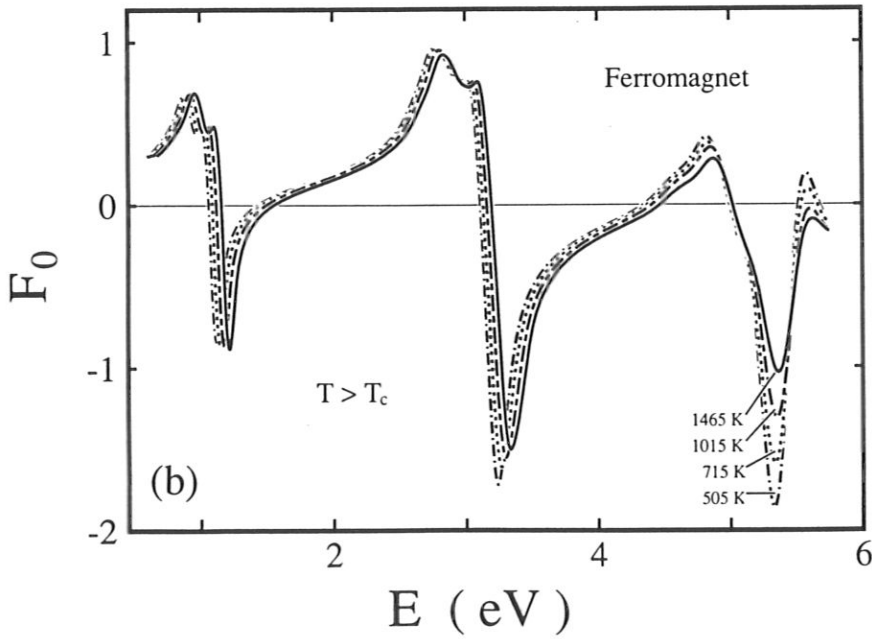
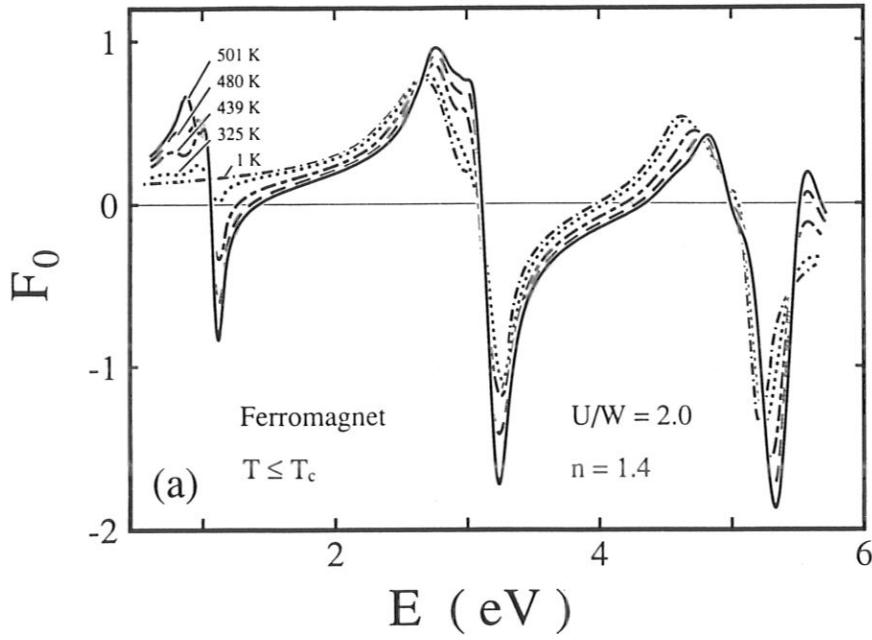


Abbildung 2.6.c: Wie Abb. (2.6.a), jedoch für die entsprechende Hilberttransformierte $F_0(E)$ der Funktion $D_0(E)$.

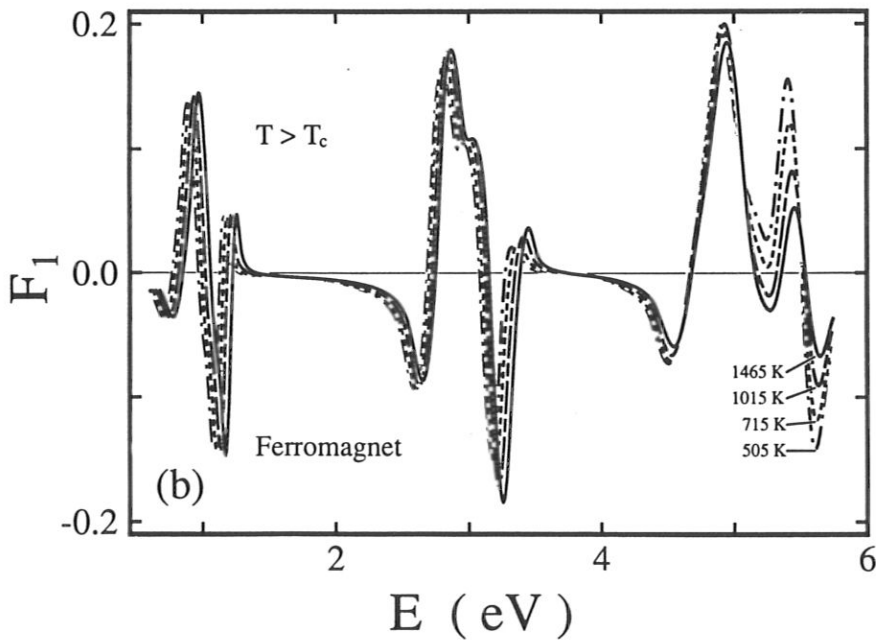
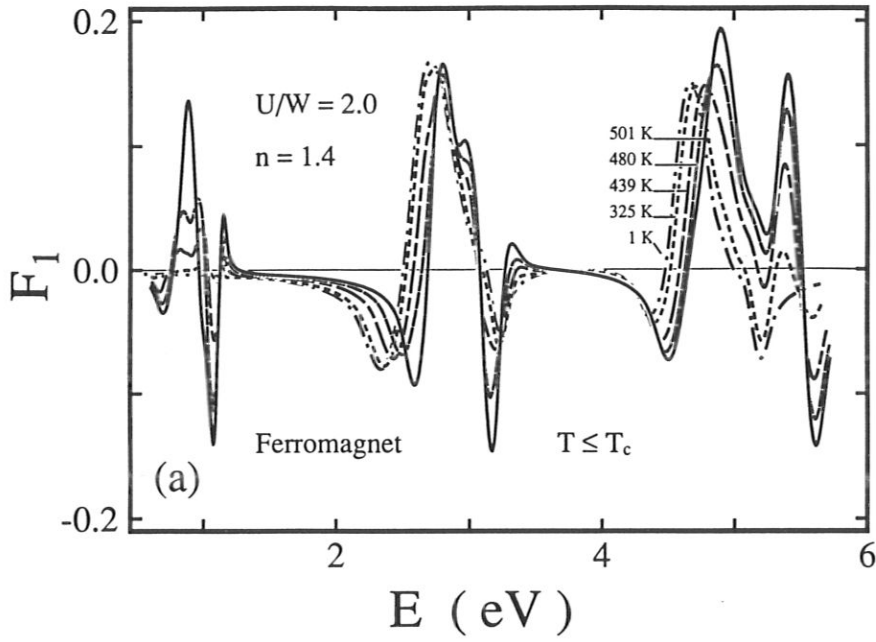


Abbildung 2.6.d: Wie Abb. (2.6.b), jedoch für die entsprechende Hilberttransformierte $F_1(E)$ der Funktion $D_1(E)$.

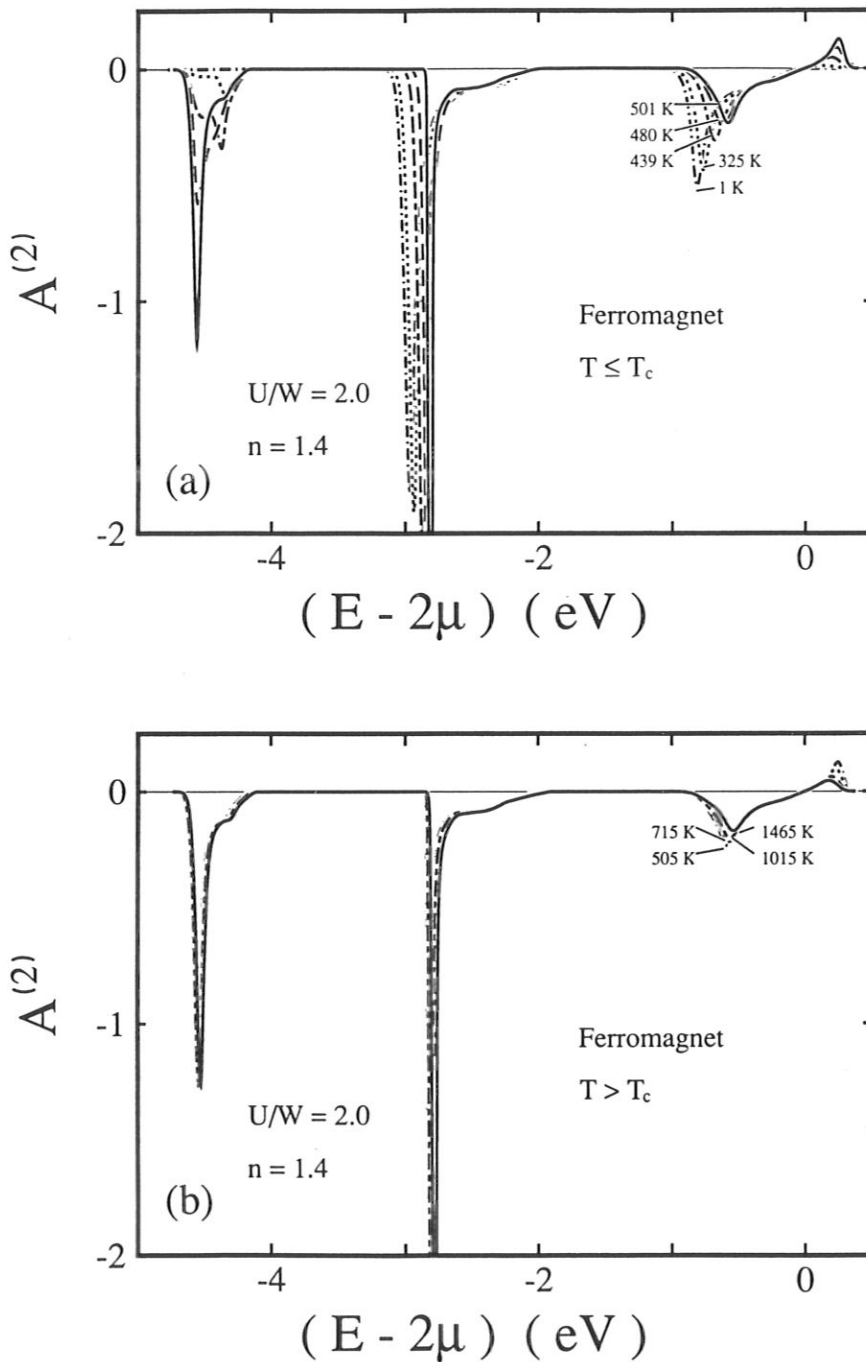


Abbildung 2.6.e: Die Zweiteilchen-Spektraldichte $A^{(2)}$ als Funktion der Energie des ferromagnetischen Systems, entsprechend Abb. 2.3.c, für verschiedene Temperaturen. (a): $T \leq T_C = 501K$, (b): $T > T_C$.

Die Abb. 2.6.e zeigt die aus den Funktionen $D_{0,1}(E)$ und $F_{0,1}(E)$ gebildete Zweiteichen-Spektraldichte. Der ausgesprochen scharfe intermediäre Peak weist auf eine Resonanz des Integranden in (2.4.44) hin. Eine solche Situation stellt sich ein, kurz bevor sich von der bandartigen Struktur ein Satellit abspaltet. Hier ist dieser noch „virtuell“. Er ist hauptsächlich für den erheblichen Unterschied zwischen $A^{(2)}(E - 2\mu)$ und der Selbstfaltungsspektraldichte, Abb. 2.6.a, verantwortlich.

Zweiteilchen-Spektraldichten, die man an einem System mit größerer Kopplungsstärke berechnete, würden einen AES-Satelliten aufweisen. Im nächsten Kapitel wird demonstriert, daß Satelliten nicht „plötzlich“ auftauchen, sondern sich, in Abhängigkeit vom Kopplungsparameter, vom bandartigen Part gewissermaßen „abschnüren“ können.

Aus der zentralen Größe der Theorie, $A^{(2)}(E - 2\mu)$, die in einem Experiment natürlich nicht direkt beobachtbar ist, werden mit (1.3.16) und (1.3.17) die AE- und AP-Intensitäten abgeleitet. Die Ergebnisse für den Modell-Bandferromagneten sind in den Abbildungen 2.6.f und 2.6.h dargestellt.

Die AP-Linienform, Abb. 2.6.f, ist recht einfach strukturiert. Da das chemische Potential in den oberen Spin-Subbändern liegt, ist die Anregung zweier AP-Elektronen nur in dem noch darüber liegenden Teil des oberen Subbandes möglich.

Am Nullpunkt der Temperatur weist der Ferromagnet kein AP-Signal auf, denn es ist unmöglich, in dem hier diskutierten ferromagnetisch gesättigten System zwei Elektronen mit entgegengesetzten Spins im unbesetzten Teil des Quasiteilchenspektrums anzuregen. Alle leeren Zustände sind \downarrow -polarisiert! Mit steigender Temperatur und einsetzender Demagnetisierung erscheinen unbesetzte \uparrow -Zustände. So wachsen Höhe und Fläche der AP-Struktur mit T und erreichen maximale Werte bei $T = T_C$. In der paramagnetischen Phase, ($T > T_C$), bleibt I_{tot}^{APS} in etwa konstant, die Linienform wird jedoch breiter. Infolgedessen sinkt das Peak-Maximum mit steigender Temperatur. Der Curiepunkt des Systems ist demnach gerade dann erreicht, wenn die Höhe des AP-Signals maximal wird.

Das Anwachsen der Breite der Linien wird durch die Tatsache erklärt, daß mit wachsender Temperatur auch der Energiebereich größer wird, in welchem die beiden angeregten \uparrow - und \downarrow -Elektronen mit endlicher Wahrscheinlichkeit unbesetzte Zustände vorfinden. Daher dehnt sich der AP-Peak nach kleineren Energien, $E < 2\mu$, hin aus.

Der Einfluß direkter Korrelationen auf das AP-Spektrum wird durch den Vergleich von Abb. 2.6.f mit den aus der Selbstfaltungsspektraldichte gewonnenen AP-Intensitäten offenbar. Man erkennt zwar ein ähnliches Temperaturverhalten im Hinblick auf die Peakhöhe, Abb. 2.6.g; die völlige Vernachlässigung der direkten Korrelationen führt aber auf sehr viel breitere Linienformen und auf höhere totale AP-Intensitäten I_{tot}^{APS} .

Das Auger-Spektrum am mehr als halbvollen Band erweist sich als etwas komplizierter [Abb. 2.6.h]. Aufgrund der Lage von μ im oberen Quasiteilchen-Subband gibt es bedeutend mehr Möglichkeiten zur Anregung von Lochpaaren. Daher beobachtet man drei AE-Linien, im Abstand von etwa $U \approx 2eV$.

Bemerkenswert ist das Temperaturverhalten der niederenergetischen Struktur. Sie ist bei $T = 1K$ vollkommen unterdrückt, weil das untere Spin- \downarrow -Hubbard-Band verschwindet,

$$\rho_{1\downarrow}(E, T=0K) = 0.$$

Das ist am Einquasiteilchen-Spektrum bereits diskutiert worden, Abb. 2.3.c. Aus dem

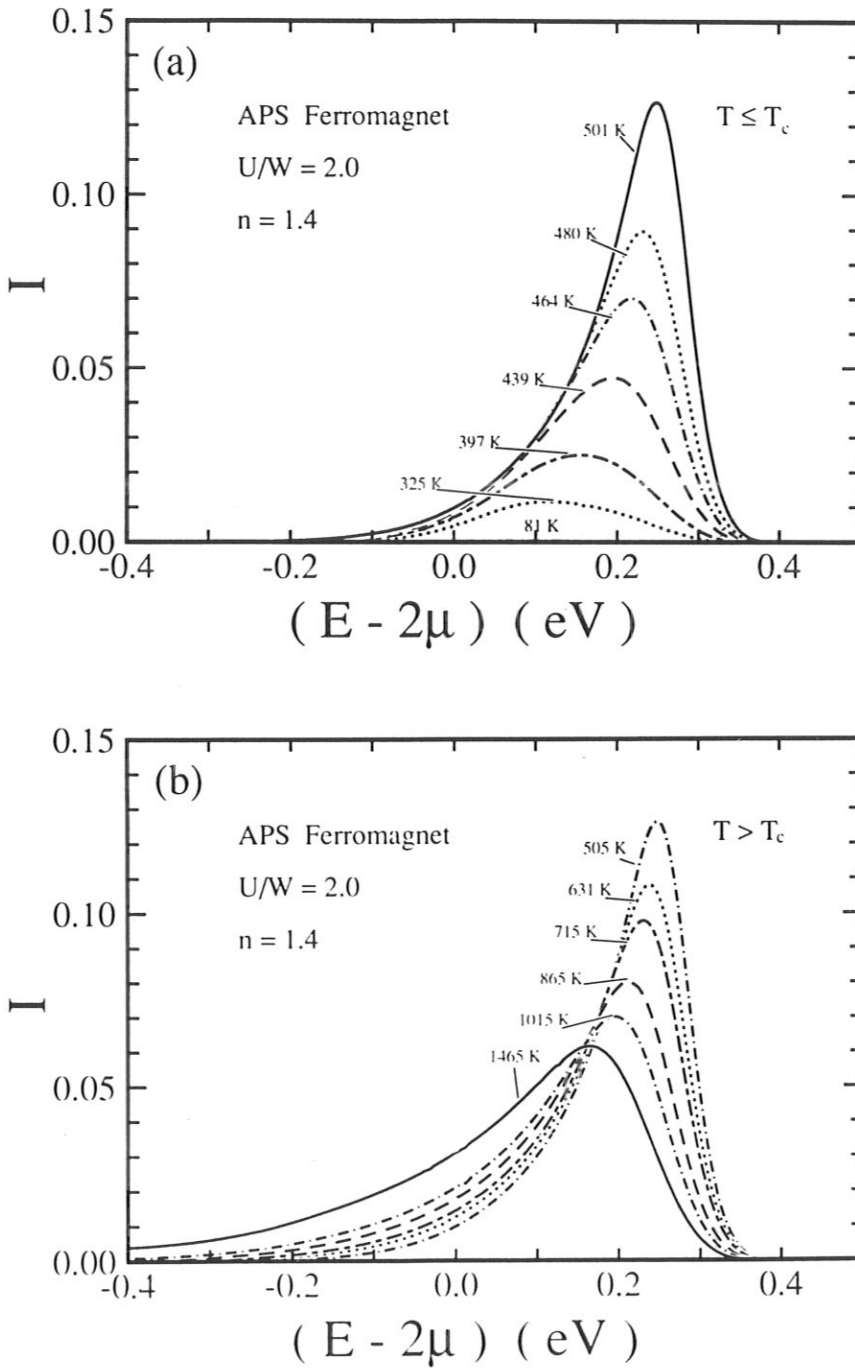


Abbildung 2.6.f: Die AP-Intensitäten als Funktionen der Energie bei verschiedenen Temperaturen für das hochkorrelierte ferromagnetische Elektronensystem (siehe auch Abb. 2.3.c). (a): $T \leq T_C = 501K$, (b): $T > T_C$.

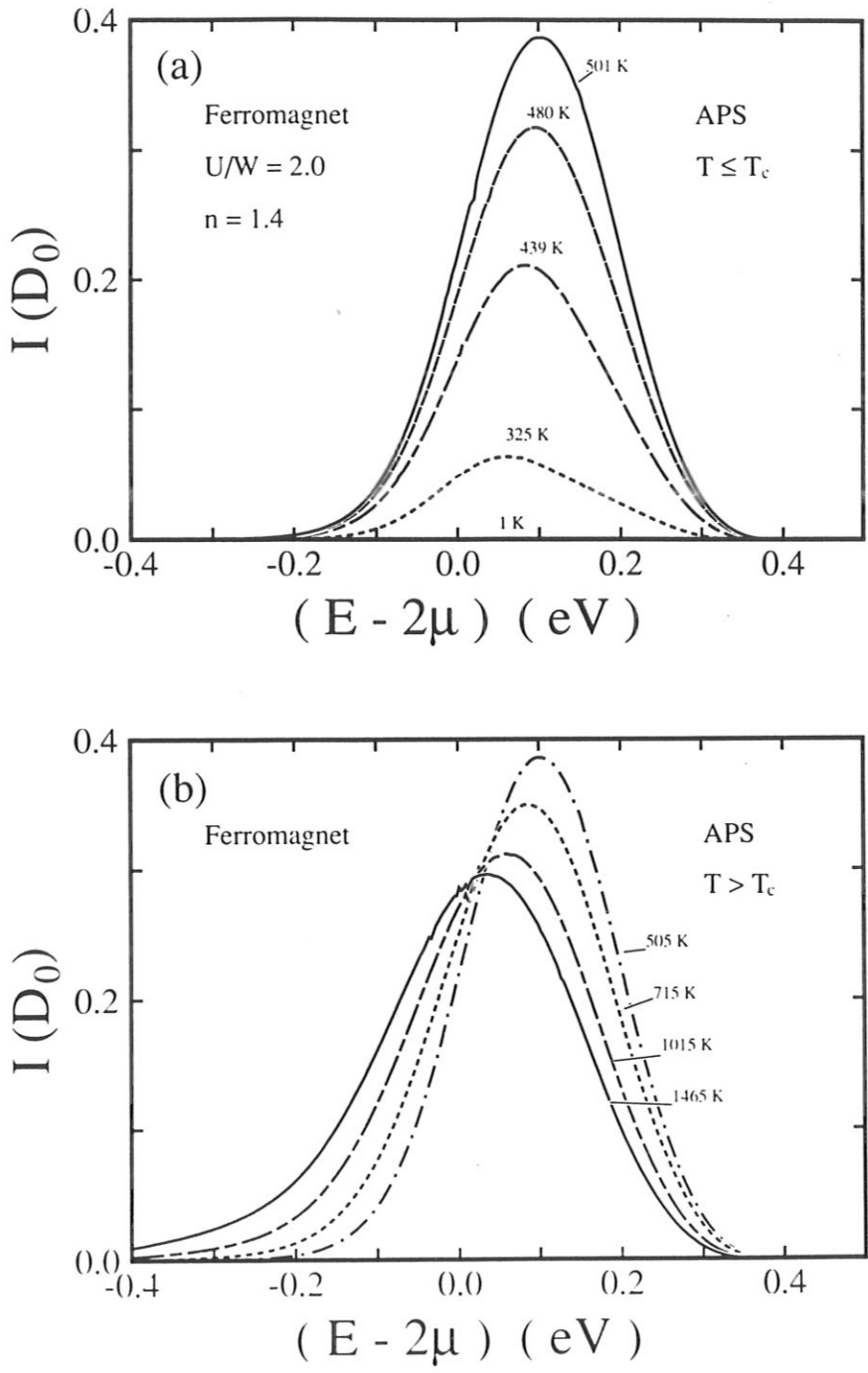


Abbildung 2.6.g: · Wie Abb. 2.6.f, jedoch nach dem Lander-Modell berechnet.

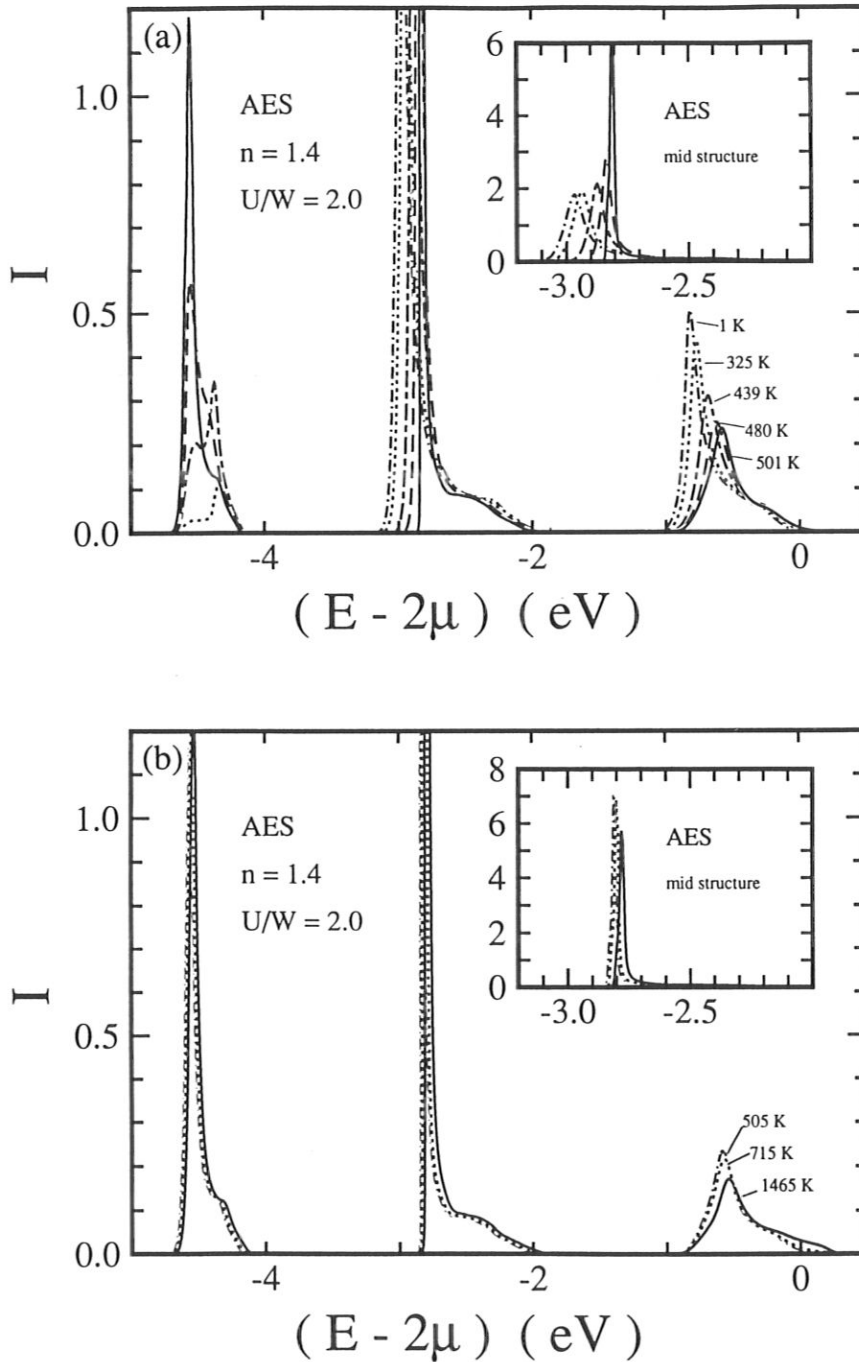


Abbildung 2.6.h: Die AE-Intensität als Funktion der Energie des hochkorrelierten Ferromagneten bei verschiedenen Temperaturen (siehe auch Abb. 2.3.c). (a): $T \leq T_C = 501\text{K}$, (b): $T > T_C$. Die Einfügung in jedem Teilbild zeigt jeweils den mittlere energetischen Peak auf einer anderen Skala.

gleichen Grunde erfährt die mittlere AE-Linie eine deutliche Intensitätsminderung, wie man an der Einfügung in Abb. 2.6.h (a) erkennt, da sie von den „gemischten“ Faltungen $\rho_{1\uparrow} * \rho_{2\downarrow}$ und $\rho_{1\downarrow} * \rho_{2\uparrow}$ bestimmt ist.

Im Gegensatz zum weniger als halbvollen Energieband des hochkorrelierten Paramagneten ($U/W = 2$, $n = 0.6$), dessen Spektrum in den Abbn. 2.5.d und 2.5.e gezeigt ist, findet sich unter den Linienformen des Ferromagneten ($U/W = 2$, $n = 1.4$) kein Satellit. Es kündigt sich ein solcher jedoch am Peakverhalten der mittleren Struktur an, und zwar am ausgeprägtesten bei Temperaturen um den Curiepunkt, dagegen erst relativ schwach bei niedrigen T -Werten. Anscheinend ist die magnetische Ordnung bei diesen Modellparametern für Satelliten eher ungünstig. Das ist auch verständlich, denn bei niedrigen Temperaturen stehen weder für die Bildung gebundener ($2 \uparrow, 1 \downarrow$)-Quasiteilchenpaare genug Spin-1 \downarrow -Löcher, noch für die umgekehrte Kombination ($1 \uparrow, 2 \downarrow$) ausreichende Dichten an Spin-2 \downarrow -Löchern zur Verfügung. — In mehr als halbgefüllten, ferromagnetisch gesättigten Einband-Systemen kann es im übrigen auch keine AP-Satelliten geben, da keine unbesetzten Gitterplätze existieren, über die der „Zweiquasiteilchen-Zustand“ propagieren könnte.

Vernachlässigt man direkte Korrelationen, indem man nur die Selbstfaltungsspektraldichte berücksichtigt, erhält man wesentlich weichere AE-Linienformen, Abb. 2.6.i.

Die großen Unterschiede zu den AE-Strukturen in Abb. 2.6.h lassen es aussichtslos erscheinen, den besetzten Teil der Einteilchenzustandsdichte ermitteln zu können, indem man das AE-Spektrum einfach entfaltet.

Eine der interessantesten Informationen, die man aus den errechneten AE- und AP-Spektren gewinnen kann, sind die totalen Intensitäten. Sie stellen Summenregeln dar, die sich direkt aus der Lehmann-Darstellung der Spektraldichte $A^{(2)}(E)$ ablesen lassen. Die Dichte-Dichte-Korrelation für das itinerante Bandlelektronensystem liegt mit (2.5.1) und (2.5.2) vor. Mit Hilfe der (ortsabhängigen) Spinoperatoren σ_i^+ , σ_i^- und σ_i^z ,

$$\begin{aligned} \sigma_i^+ &= c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}, \\ \sigma_i^- &= c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow}, \\ \sigma_i^z &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} z_{\sigma} n_{i\sigma} \quad , \quad (z_{\uparrow} = 1, z_{\downarrow} = -1), \end{aligned} \quad (2.6.3)$$

lassen sich die Gleichungen (2.5.1) und (2.5.2) umschreiben:

$$\langle \sigma_i^+ \sigma_i^- \rangle = \frac{1}{2}(n + m) - I_{tot}^{AES} = 1 - \frac{1}{2}(n - m) - I_{tot}^{APS}, \quad (2.6.4)$$

$$\langle \sigma_i^- \sigma_i^+ \rangle = \frac{1}{2}(n - m) - I_{tot}^{AES} = 1 - \frac{1}{2}(n + m) - I_{tot}^{APS}. \quad (2.6.5)$$

Es sei nochmals betont, daß die Beziehungen über die höheren Korrelationsfunktionen, (2.5.1), (2.5.2) und (2.6.3) – (2.6.5), im Sinne der allgemeinen Bemerkungen zur Zweiquasiteilchen-Spektroskopie *modellfrei* sind. Für die totalen Intensitäten I_{tot}^{AES} und I_{tot}^{APS} werden dagegen die Integrale über *errechnete* Spektren eingesetzt. Damit erhält man die in Abb. 2.6.j gezeigten Resultate.

In der ferromagnetischen Sättigung findet man bei $T = 0$ für die Korrelation $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ den Wert 0.4, während dagegen $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ verschwindet. Letzteres bedeutet, daß es im mehr als halb

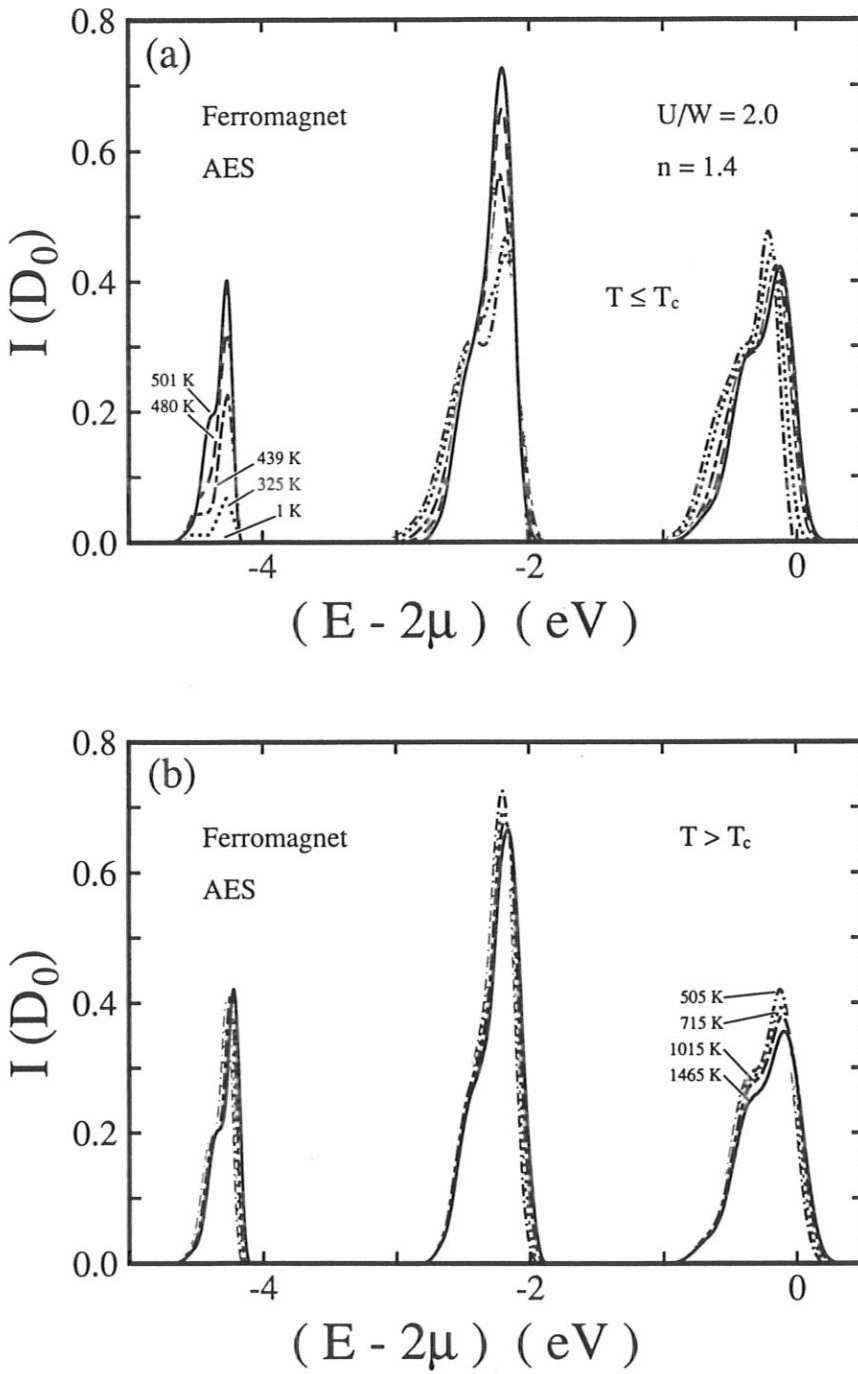


Abbildung 2.6.i: Wie Abb. 2.6.h, jedoch mit der Selbstaltungsspektraldichte berechnete Intensitäten.

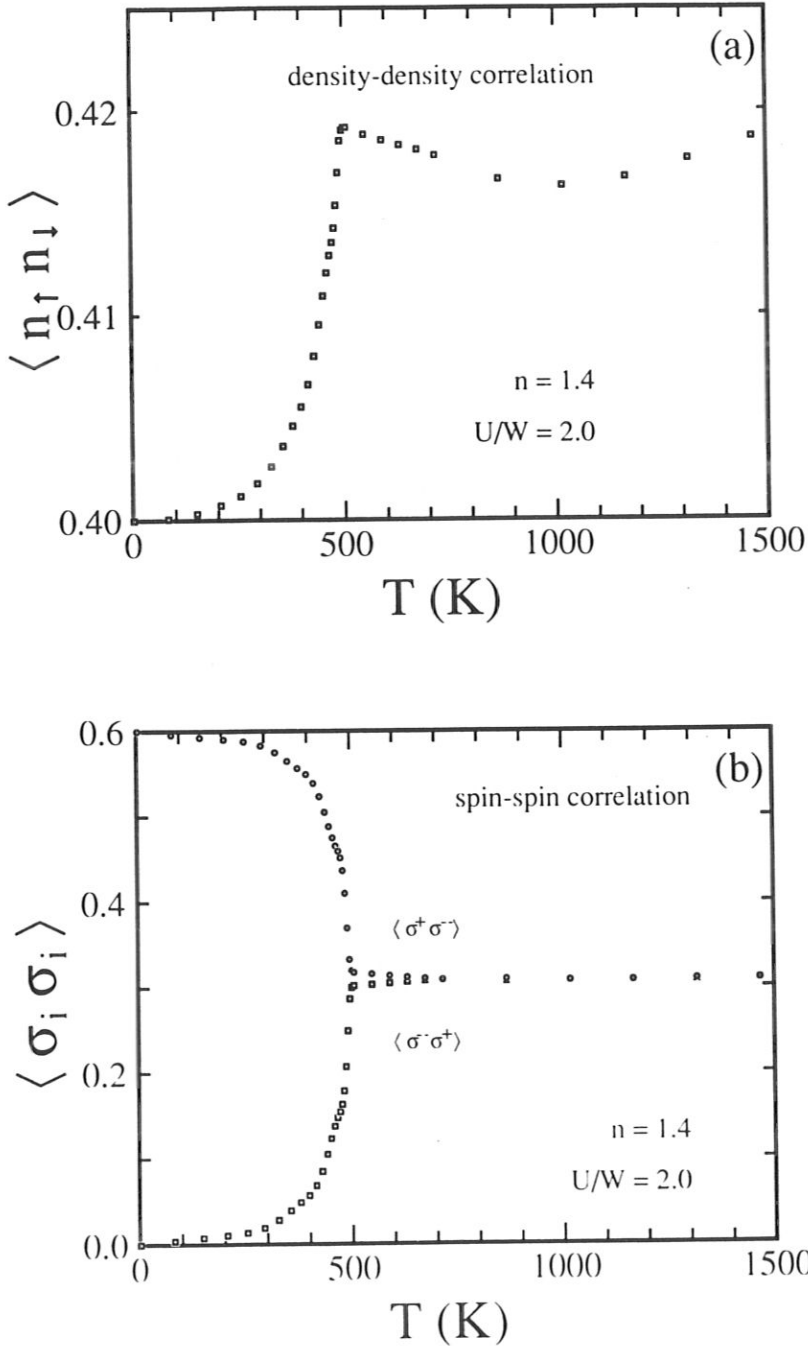


Abbildung 2.6.j: (a): Die Dichte-Dichte-Korrelation als Funktion der Temperatur des stark korrelierten Ferromagneten (siehe auch Abb. 2.3.c), abgeleitet aus integrierten AP-(AE-)Intensitäten, gemäß Glg. (2.5.1) bzw. (2.5.2). (b): Die Spin-Spin-Korrelation als Funktion der Temperatur desselben Systems, gemäß den Glgn. (2.6.4) und (2.6.5).

gefüllten System in der Sättigung unmöglich ist, einen Spin der Minorität „umzuklappen“, da es keine unbesetzten Majoritätszustände gibt. Umgekehrt gibt $\langle \sigma^+ \sigma^- \rangle$ am Nullpunkt gerade die maximale ferromagnetische Polarisation an, und zwar in Übereinstimmung mit der Magnetisierungskurve aus Teil (b) der Abb. 2.3.a. Das Temperaturverhalten der lokalen Spinkorrelationsfunktion ähnelt auffallend dem eines lokalen Heisenberg-Ferromagneten.

Damit bleibt festzuhalten, daß AES und APS für die Bestimmung solcher informativen Korrelationsgrößen recht nützliche Hilfsmittel sind.

Der Einfluß elektronischer Korrelationen auf AE- und AP-Spektren des Einband-Hubbard-Systems ist nunmehr untersucht worden. Als recht sinnvoll hat sich dabei die Unterscheidung zwischen direkten und indirekten Korrelationen herausgestellt; erstere betreffen die unmittelbare Wechselwirkung zwischen den lokal angeregten Elektronen (Löchern) im AP-(AE)-Prozeß. Mit letzteren war die Interaktion dieser Teilchen mit dem restlichen, wechselwirkenden Elektronensystem gemeint.

Um die Frage, auf welche Art und Weise sich magnetische Phasenübergänge in AE- bzw. AP-Spektren manifestieren, zu beantworten, ist zunächst die Möglichkeit spontaner ferromagnetischer Ordnung im Rahmen des Hubbard-Modells mit Hilfe der selbstkonsistenten Momentenmethode am Einquasiteilchen-Spektrum untersucht worden. Mit diesem wurde die Zweiteilchen-Spektralfunktion bestimmt, aus der die Auger-Elektronen- und Auftretspotential-Intensitäten ableitbar sind.

Die Vernachlässigung der direkten Korrelationen führte auf sichtbare Unterschiede zwischen den aus der Selbstfaltungsspektraldichte abgeleiteten und den aus der vollen Modellrechnung gewonnenen Intensitäten. Bei schwacher Kopplung ($U/W < 1$), die keinen Bandferromagnetismus ermöglicht, hat das Lander-Modell unter der Voraussetzung eine Berechtigung, daß als Einteilchengröße eine korrekt bestimmte QDOS verwendet wird.

Bei hochkorrelierten Systemen spaltet sich jedes nichtentartete Band in zwei Quasiteilchen-Subbänder auf, die durch ein Gap von etwa der Breite U voneinander getrennt sind. Beim weniger als halb gefüllten Band ($n < 1$) erhält man ein AE-Signal und mehrere AP-Linien, im Falle mehr als halber Bandfüllung ($n > 1$) dagegen drei AE-Strukturen und nur ein AP-Signal. Eine hinreichend große Kopplungsstärke ermöglicht außerhalb der bandartigen Regionen das Auftreten von Satelliten, die durch direkte Korrelationen zwischen den angeregten Elektronen oder Löchern verursacht werden. Die Satelliten bedeuten die stabile Propagation zweier eng aneinander gebundener Teilchen durch das Gitter. Sie führen im Vergleich zur restlichen bandartigen Linienform beinahe das gesamte spektrale Gewicht mit sich und werden kaum durch andere Teilchen gestreut. Daher ähnelt ihre Struktur derjenigen der Blochzustandsdichte.

Bei Systemen mit ferromagnetischer Phase zeigen AE- und AP-Intensitäten markante Temperaturabhängigkeiten. Insbesondere verschwinden am Nullpunkt der Temperatur gewisse Strukturen infolge der magnetischen Sättigung. Die integrierten AE- und AP-Spektren machen höhere Korrelationsfunktionen wie die Dichte-Dichte oder Spin-Spin-Korrelation und deren Temperaturabhängigkeit direkt zugänglich.

Kapitel 3

Exakte Aussagen

Die physikalischen Eigenschaften realistischer Ferromagnetika wie Fe, Co und Ni werden vor allem durch ihre entarteten 3d-Teilbänder bestimmt. Neben der aus dem s-Band-Hubbard-Modell bekannten Coulombabstoßung zwischen Elektronen aus demselben Band werden zusätzlich sogenannte „Interband“-Wechselwirkungen zwischen den Teilchen verschiedener Teilbänder möglich. Der zu deren Beschreibung geeignet erscheinende Hamiltonoperator, der in diesem Kapitel vorgestellt wird, läßt anhand seiner Coulombmatrixelemente eine Fülle neuer Phänomene erwarten. Zunächst soll vor allem der Einfluß der verschiedenen direkten Korrelationen auf AE- und AP-Spektren untersucht werden, ohne zugleich Kollektivphänomene mit in Betracht ziehen zu müssen. Dazu eignen sich die beiden Spezialfälle des vollständig besetzten und leeren Elektronensystems, dessen Zweiteilchen-Spektraldichte exakt angebar ist.

3.1 Das Multiband-Modell

Etliche stark korrelierte Systeme, wie z.B. der Bandferromagnet Ni [56, 57], der Heisenberg-Ferromagnet EuO [88] und der antiferromagnetische Mott-Isolator NiO [76] konnten mit einer gewissen Erweiterung des Hubbard-Modells erfolgreich beschrieben werden. In der üblichen Zerlegung des Hamiltonoperators H ,

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.1.1)$$

enthält der Einteilchenoperator H_0 die Information über die Mehrbandstruktur:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, m, \sigma} \varepsilon_m(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}m\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}m\sigma} = \sum_{i, j, m, \sigma} T_{ij}(m) c_{im\sigma}^\dagger c_{jm\sigma}. \quad (3.1.2)$$

$c_{im\sigma}^\dagger$ ($c_{im\sigma}$) ist der Erzeuger (Vernichter) in Wannier-Darstellung; die Blochenergien $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ sind die Fouriertransformierten der Hopping-Integrale $T_{ij}(m)$. Der Index m nummeriert die Matrixelemente und Operatoren in zweiter Quantisierung nach den für Vielteilcheneffekte relevanten Bändern. Für den Operator H_1 wird vereinfachend angenommen, daß die Coulomb-Potentiale im Kristall stark abgeschirmt sind, so daß man sich auf zwei Terme intraatomarer Wechselwirkungen beschränken kann [89], die für den Magnetismus bedeutend

sind:

$$H_1 = \sum_{\substack{i,\sigma,\sigma' \\ m,m'}} (U_{mm'} c_{im\sigma}^+ c_{im'\sigma'}^+ c_{im'\sigma'} c_{im\sigma} + J_{mm'} c_{im\sigma}^+ c_{im'\sigma'}^+ c_{im\sigma} c_{im'\sigma'}) . \quad (3.1.3)$$

H_1 läßt sich unter Ausnutzung der Fermionen-Vertauschungsregeln umschreiben. Mit Hilfe des spinunabhängigen Besetzungszahloperators \hat{n}_{im} ,

$$\hat{n}_{im} = \sum_{\sigma} n_{im\sigma} = \sum_{\sigma} c_{im\sigma}^+ c_{im\sigma} , \quad (3.1.4)$$

erhält man:

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2} \sum_{i,m,\sigma} (U_{mm} + J_{mm}) n_{im\sigma} n_{im-\sigma} \\ &- \sum_{\substack{i,m,m' \\ m \neq m'}} J_{mm'} \left\{ \frac{1}{4} \sum_{\sigma\sigma'} z_{\sigma} z_{\sigma'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} c_{im\sigma}^+ c_{im-\sigma} c_{im'-\sigma}^+ c_{im'\sigma} \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,m,m' \\ m \neq m'}} \left(U_{mm'} - \frac{1}{2} J_{mm'} \right) \hat{n}_{im} \hat{n}_{im'} . \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Unter der Annahme, daß die Teilbänder vollkommen äquivalent sind, läßt sich die Abhängigkeit vom Bandindex unterdrücken. Man definiert zum Zwecke einfacherer Notation die folgenden Matrixelemente:

$$\begin{aligned} U &= U_{mm} + J_{mm} , \\ \bar{U} &= (1 - \delta_{mm'}) \left(U_{mm'} - \frac{1}{2} J_{mm'} \right) , \\ J &= (1 - \delta_{mm'}) J_{mm'} . \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Aufgrund der Vereinfachungen, die auf (3.1.3) bzw. (3.1.6) führen, gilt das Multiband-Modell nur für eine Gruppe aus schmalen Valenzbändern, wie sie mit dem d-Band-Komplex typischer Übergangsmetalle vorliegt. Die Vernachlässigung der sp-Bänder ist für die Einquasiteilchen-Spektren wegen der starken Abschirmungseffekte der in hohem Maße delokalisierten sp-Elektronen kaum von Bedeutung. Im Rahmen des Modells wäre die wirksame Kopplungsstärke zu gering, um am magnetischen Phasenübergang entscheidend mitzuwirken. Es wäre allenfalls mit einer durch spontane Magnetisierung vonseiten der d-Bänder hervorgerufenen Polarisation der sp-Bänder zu rechnen.

Schwieriger ist die Situation im Falle der Zweiteilchen-Spektroskopien AES und APS zu beurteilen, weil durchaus Prozesse zum Signal beitragen können, bei denen eines der beiden angeregten Teilchen oder Löcher aus dem sp-, das andere dagegen aus einem d-Band stammt. Streng genommen, müßten daher die oben definierten Koppelkonstanten mit Bandindizes versehen werden, ($U_m, J_{mm'}, \bar{U}_{mm'}$). Da jedoch das Interesse mehr an der qualitativen Beschreibung von Systemen mit Korrelationseffekten liegt, soll dieser Aspekt hier nicht weiter verfolgt werden.

Mit der Glg. (3.1.5) wird die Wechselwirkung H_1 in drei charakteristische Teiloperatoren zerlegt:

$$H_1 = H_U + H_J + H_{\bar{U}} . \quad (3.1.7)$$

Der erste Operator erfaßt die *Intraband*-Wechselwirkung:

$$H_U = \frac{1}{2} U \sum_{i,m,\sigma} n_{im\sigma} n_{im-\sigma} ; \quad (3.1.8)$$

es ist der bereits bekannte Wechselwirkungsterm des s-Band-Hubbard-Modells; der Operator wirkt nur dann, wenn die beiden Elektronen demselben Teilband angehören und antiparallele Spins aufweisen. Für eine spontane magnetische Ordnung ist H_U von entscheidender Bedeutung. Abhängig von der Größe des Matricelementes in verschiedenen Materialien sorgt H_U für eine Auftrennung eines jeden Teilbandes m in zwei, etwa durch U separierte Quasiteilchen-Subbänder [56, 57, 72, 73, 74]. Man rechnet z.B. beim 4f-System EuO mit $U \approx 10eV$ [88], ähnlich wie beim Gd ($U \approx 11eV$, [90]) und beim 3d-System Ni mit $6eV$ [56]. Unter gewissen Bedingungen bezüglich U , der Bandbesetzung und der Gitterstruktur (ρ_0) kann, wie für das Einband-System bereits geschildert, jedes Subband eine zusätzliche Spinaufspaltung und damit spontane magnetische Ordnung zeigen [83].

Der zweite Term in (3.1.7) bedeutet eine *Interband-Austausch*-Wechselwirkung. Sie läßt sich kompakt formulieren, wenn man m -abhängige Spinoperatoren für Bandelektronen benutzt,

$$\begin{aligned} \sigma_{im}^z &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} z_{\sigma} n_{im\sigma} , \\ \sigma_{im}^+ &= c_{im\uparrow}^+ c_{im\downarrow} , \\ \sigma_{im}^- &= c_{im\downarrow}^+ c_{im\uparrow} , \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

und mit ihrer Hilfe einen „effektiven“, lokalisierten Spin S_{im} definiert,

$$S_{im} = \sum_{m'} (1 - \delta_{mm'}) \sigma_{im'} , \quad (3.1.10)$$

den ein Elektron aus dem Teilband m am Gitterplatz R_i „sieht“, und der sich aus den Spins der Elektronen *aller anderen* Teilbänder m' , $m' \neq m$ zusammensetzt.

Der Gebrauch dieser Spinoperatoren verleiht H_J formal die Gestalt der Wechselwirkung im sf-Modell [88, 91]. Man beschreibt damit eine „effektive“ Elektronen-Magnon-Streuung [89]:

$$H_J = -J \sum_{i,m} \sigma_{im} \cdot S_{im} . \quad (3.1.11)$$

Der dritte Summand in (3.1.7) hat die Bedeutung einer *direkten Interband*-Wechselwirkung, bei der ein Elektron aus dem m -ten Teilband mit allen anderen Elektronen wechselwirkt, nicht jedoch mit denjenigen aus dem eigenen Teilband:

$$H_{\bar{U}} = \frac{1}{2} \bar{U} \sum_{\substack{i,m,m' \\ m \neq m'}} \hat{n}_{im} \hat{n}_{im'} . \quad (3.1.12)$$

Außer bei Mott-Isolatoren [76] ist $H_{\bar{U}}$ wegen seiner Unabhängigkeit vom Spin für den kollektiven Magnetismus nicht entscheidend.

3.2 Die Multiband-Linienform

Wenn man von einem System ausgeht, das aus d Teilbändern besteht, die mit $m = 1, 2, \dots, d$ durchnummeriert seien, so sind im zentralen AE- oder AP-Prozeß nicht nur Anregungen spinantiparalleler Teilchen, sondern verschiedene „Konfigurationen“ $(mm', \sigma\sigma')$ möglich, deren Anzahl lediglich durch das Pauli-Prinzip begrenzt wird:

$$(m, \sigma) \neq (m', \sigma'). \quad (3.2.1)$$

Zu jeder Konfiguration läßt sich eine „partielle“ Zweiteilchen-Spektraldichte angeben:

$$A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp\left(\frac{i}{\hbar}E(t-t')\right) \cdot \frac{1}{2\pi} \left\langle \left[(c_{im'\sigma'} c_{im\sigma})(t), (c_{im\sigma}^+ c_{im'\sigma'}^+)(t') \right]_- \right\rangle. \quad (3.2.2)$$

Im thermodynamischen Erwartungswert auf der rechten Seite erkennt man die in der Glg. (1.3.1) definierten Operatoren für den zentralen Prozeß wieder. Die Relationen (1.3.16) und (1.3.17) gelten allgemein, daher lassen sich aus $A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E)$ partielle Intensitäten K ableiten:

$$K_{i\ m\sigma}^{(APS)m'\sigma'}(E-2\mu) = \frac{1}{\hbar} \frac{\exp(\beta(E-2\mu))}{\exp(\beta(E-2\mu)) - 1} \cdot A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E-2\mu), \quad (3.2.3)$$

$$K_{i\ m\sigma}^{(AES)m'\sigma'}(2\mu-E) = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\exp(\beta(E-2\mu)) - 1} \cdot A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E-2\mu). \quad (3.2.4)$$

Sehr wichtig ist die im Vergleich zur Spektroskopie am Einband-System neu hinzugekommene Spinabhängigkeit gewisser Beiträge. Dies wird klar, wenn man die Partialintensitäten ordnet:

Konfigurationen, die aus Teilchen gleicher Teilbänder bestehen, müssen aufgrund von Glg. (3.2.1) antiparallele Spins aufweisen; dies führt auf den *Intraband-Part* der Intensität:

$$I_{AES}^{(0)}(\pm(E-2\mu)) = \sum_m K_{i\ m\sigma}^{APS\ m-\sigma}(\pm(E-2\mu)). \quad (3.2.5)$$

Für $d = 1$ reduziert sich (3.2.5) auf die bekannte Form der Intensitäten des Einband-Systems. Falls jeder der AE-(AP-)Partner aus einem anderen Teilband stammt, jedoch gleiche Spins vorliegen, kann man vom *spindiatagonalen*, oder einfacher vom *diagonalen Interband-Part* sprechen:

$$I_{AES}^{(\sigma,\sigma')}(\pm(E-2\mu)) = \sum_{\substack{m,m' \\ m \neq m'}} K_{i\ m\sigma}^{APS\ m'\sigma'}(\pm(E-2\mu)). \quad (3.2.6)$$

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen unterschiedlicher Spins aus verschiedenen Teilbändern führt auf den *nichtdiagonalen Interband-Part*:

$$I_{AES}^{(\sigma,-\sigma')}(\pm(E-2\mu)) = \sum_{\substack{m,m' \\ m \neq m'}} K_{i\ m\sigma}^{APS\ m'-\sigma'}(\pm(E-2\mu)). \quad (3.2.7)$$

Der Intraband-Intensität entspricht eine Situation, wie sie in (3.1.8) durch H_U beschrieben wird. Die beiden anderen Operatoren der Wechselwirkung, $H_{\bar{U}}$ und H_J , tragen gemeinsam zu den Interband-Linienformen bei. Die interessantere dieser beiden Größen ist $I^{(\sigma,\sigma)}$, denn sie

ermöglicht es, *spinunterscheidbare* Intensitäten zu berechnen, indem man sich *einen* der beiden Spins festgehalten, d.h. im Experiment präpariert denkt. Im Falle einer „Spinauflösung“ in der Zweiteilchen-Spektroskopie gibt es ungleiche Diagonalanteile,

$$I_{AES}^{(\sigma,\sigma)}(\pm(E-2\mu)) \neq I_{AES}^{(-\sigma,-\sigma)}(\pm(E-2\mu)) , \quad (3.2.8)$$

beispielsweise bei ferromagnetischer Ordnung. Im Falle $d = 1$ verschwindet $I^{(\sigma,\sigma)}$ identisch wegen Glg. (3.2.1); spinunterschiedene Zweiteilchen-Spektroskopie an Einband-Systemen ist also unmöglich.

Nicht nur der Intraband-Part, sondern auch die nichtdiagonale Partialintensität ist stets spininvariant, wie man aus (3.2.7) erkennt, indem man die Summationen über die Teilbänder miteinander vertauscht:

$$I_{AES}^{(\sigma,-\sigma)}(\pm(E-2\mu)) = I_{AES}^{(-\sigma,\sigma)}(\pm(E-2\mu)) , \quad (3.2.9)$$

Insgesamt besteht die spinaufgelöste Linienform $I^{(\sigma)}$ aus allen drei Beiträgen:

$$I_{AES}^{(\sigma)}(\pm(E-2\mu)) = \left[I_{AES}^{(0)} + I_{AES}^{(\sigma,\sigma)} + I_{AES}^{(\sigma,-\sigma)} \right] (\pm(E-2\mu)) , \quad (3.2.10)$$

und die spinsummierten Anteile werden einfach durch den Ausdruck

$$I_{AES}(\pm(E-2\mu)) = \sum_{\sigma} I_{AES}^{(\sigma)}(\pm(E-2\mu)) \quad (3.2.11)$$

beschrieben.

In den Relationen (3.2.5) – (3.2.11) wurde dem System Translationssymmetrie unterstellt; andernfalls wären alle betreffenden Terme vom Gitterplatz abhängig.

3.3 Summenregeln und Korrelationen

Die allgemeine Beziehung (1.3.19) wertet man für das Multiband-System aus und erhält so die Summenregeln integrierter AE- bzw. AP-Partialintensitäten:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE K_i^{(APS)m'\sigma'}(E) = 1 - \langle n_{im\sigma} \rangle - \langle n_{im'\sigma'} \rangle + \langle n_{im\sigma} n_{im'\sigma'} \rangle , \quad (3.3.1)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE K_i^{(AES)m'\sigma'}(E) = \langle n_{im\sigma} n_{im'\sigma'} \rangle . \quad (3.3.2)$$

Man kann spinunterschiedene totale AE- und AP-Intensitäten $Y_{AES}^{(\sigma)}$ und $Y_{APS}^{(\sigma)}$ definieren,

$$Y_{AES}^{(\sigma)} := \int_{-\infty}^{\infty} dE I_{AES}^{(\sigma)}(2\mu - E) , \quad (3.3.3)$$

$$Y_{APS}^{(\sigma)} := \int_{-\infty}^{\infty} dE I_{APS}^{(\sigma)}(E - 2\mu), \quad (3.3.4)$$

und Ausdrücke für Spinpolarisationen und Teilchendichten einführen:

$$m = \langle m_i \rangle, \quad m_i = \sum_{m,\sigma} z_{\sigma} n_{im\sigma}, \quad (3.3.5)$$

$$n_{\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle, \quad n_{i\sigma} = \sum_m n_{im\sigma}, \quad (3.3.6)$$

$$n = \langle n_i \rangle, \quad n_i = \sum_{m,\sigma} n_{im\sigma}. \quad (3.3.7)$$

Nach dem Einsetzen der Glgn. (3.2.5) – (3.2.7) in (3.2.11) bzw. (3.2.10) läßt sich die Glg. (3.3.3) bzw. (3.3.4) mit Hilfe der Beziehung (3.3.2) auswerten. Dies führt auf den Zusammenhang zwischen Y_{AES} bzw. $Y_{AES}^{(\sigma)}$ und der Dichte–Dichte–Korrelation [89]:

$$Y_{AES} = \langle n_i n_i \rangle - n, \quad (3.3.8)$$

$$Y_{AES}^{(\sigma)} = \langle n_{i\sigma} n_i \rangle - n_{\sigma}. \quad (3.3.9)$$

Die totale AP-Intensität gewinnt man durch entsprechendes Vorgehen mit der Glg. (3.3.1):

$$Y_{APS} = (4d - 2)(d - n) + \langle n_i n_i \rangle - n, \quad (3.3.10)$$

$$Y_{APS}^{(\sigma)} = d(2d - n - 1) + \langle n_i n_i \rangle - n_{\sigma}(2d - 1). \quad (3.3.11)$$

Die Differenzen D_{AES} bzw. D_{APS} totaler Intensitäten werden bei der späteren Diskussion des ferromagnetisch ordnenden Mehrband-Systems wichtig:

$$D_{AES} = Y_{AES}^{(1)} - Y_{AES}^{(l)} = \langle m_i n_i \rangle - m, \quad (3.3.12)$$

$$D_{APS} = Y_{APS}^{(1)} - Y_{APS}^{(l)} = \langle m_i n_i \rangle - m(2d - 1). \quad (3.3.13)$$

Diese beiden Terme eröffnen die Möglichkeit, direkt an die Information über die Magnetisierung des Systems zu gelangen, wenn man die Differenzen kombiniert:

$$D_{AES} - D_{APS} = 2m(d - 1). \quad (3.3.14)$$

Die Erörterung von kollektiver Ordnung im teilweise bevölkerten Zweiband-System wird am Schluß des vierten Kapitels auf die Beziehungen (3.3.10) – (3.3.13) zurückgreifen.

3.4 APS an leeren Bändern

Die Zweiteilchen-Spektraldichte $A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E)$ leerer Bänder läßt sich exakt berechnen. Verschwindende Teilchendichte erreicht man formal durch $\mu \rightarrow -\infty$, so daß sich die Beziehung (3.2.3) vereinfacht:

$$K_i^{(APS)m'\sigma'}(E - 2\mu) \stackrel{\mu \rightarrow -\infty}{=} \frac{1}{\hbar} A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu). \quad (3.4.1)$$

Aufgrund des thermodynamischen Vorfaktors in (3.2.4) verschwinden in dieser Grenze alle AE-Partialintensitäten:

$$K_{i \quad m \sigma}^{(AES)m' \sigma'}(2\mu - E) \stackrel{\mu \rightarrow -\infty}{=} 0. \quad (3.4.2)$$

Die μ -Abhängigkeit der Spektralfunktion ist nur formaler Natur, wie noch zu sehen sein wird. Für eine exakte Modellrechnung bietet sich die Methode der Bewegungsgleichungen [78] der folgenden retardierten Kommutator-Zweiteilchen-Greenfunktion an:

$$D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) = \langle\langle c_{im\sigma} c_{jm'\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}. \quad (3.4.3)$$

Im Term $c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+$ erkennt man den Operator des in Glg. (1.3.1) definierten zentralen Prozesses wieder. Wegen der ausschließlich intraatomaren Anregung sorgt das Pauli-Prinzip bei Gleichheit der Teilchen in Spin und Band für das Verschwinden von $D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E)$, denn es gilt natürlich die Operator-Identität:

$$c_{xm\sigma}^+ c_{xm\sigma}^+ = c_{xm\sigma} c_{xm\sigma} \equiv 0. \quad (3.4.4)$$

Für die letztlich interessierende Spektraldichte, Glg. (3.2.2), wird nur die bezüglich der Gitterindizes diagonale Komponente benötigt:

$$A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu) = -\frac{1}{\pi} \Im \left\{ D_{iim\sigma}^{im'\sigma'}(E - 2\mu) \right\}. \quad (3.4.5)$$

Nach längerer Rechnung hat man die Bewegungsgleichung für $D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E)$ aufgestellt:

$$\begin{aligned} (E + 2\mu) D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \sum_l \left[T_{jl}(m') D_{ixm\sigma}^{lxm'\sigma'}(E) + T_{il}(m) D_{lxm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \right] = \\ \hbar \delta_{xj} \langle c_{im\sigma} c_{jm\sigma}^+ \rangle - \hbar \delta_{xi} \langle c_{im'\sigma'}^+ c_{jm'\sigma'} \rangle + U \Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) + \\ \frac{1}{2} \bar{U} Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \frac{1}{2} J R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - J \left[V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) + W_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \right]. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

Diese exakte Beziehung enthält einige „höhere“ Greenfunktionen:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) &= \langle\langle c_{im\sigma} (n_{im-\sigma} + n_{jm'-\sigma'}) c_{jm'\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}, \\ Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) &= \langle\langle c_{im\sigma} N_{im}^{jm'} c_{jm'\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}, \\ R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) &= \langle\langle c_{im\sigma} M_{im\sigma}^{jm'\sigma'} c_{jm'\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}, \\ V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) &= \langle\langle c_{im-\sigma} P_{im\sigma} c_{jm'\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}, \\ W_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) &= \langle\langle c_{im\sigma} P_{jm'\sigma'} c_{jm'-\sigma'}; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{ret}. \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

Die Abkürzungen bedeuten:

$$N_{im}^{jm'} = \sum_{\nu,\sigma} (1 - \delta_{\nu m}) n_{i\nu\sigma} + \sum_{\nu,\sigma} (1 - \delta_{\nu m'}) n_{j\nu\sigma}, \quad (3.4.8)$$

$$M_{im\sigma}^{jm'\sigma'} = \sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) (n_{i\nu\sigma} - n_{i\nu-\sigma}) + \sum_{\nu'} (1 - \delta_{\nu' m'}) (n_{j\nu'\sigma'} - n_{j\nu'-\sigma'}), \quad (3.4.9)$$

$$P_{im\sigma} = \sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) c_{i\nu-\sigma}^+ c_{i\nu\sigma}. \quad (3.4.10)$$

Die Bewegungsgleichung (3.4.6) vereinfacht sich im ($n = 0$)-Fall drastisch, wenn man die jeweilige Definition jeder einzelnen retardierten Kommutator-Greenfunktion ausnutzt. Dazu ist es zweckmäßig, von ihrer Energie- in deren Zeitdarstellung überzugehen:

$$\langle\langle A; B \rangle\rangle_E^{ret} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{iE(t-t')} \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{ret}, \quad (3.4.11)$$

die Operatoren stehen in der zeitabhängigen Heisenberg-Darstellung und wirken zu verschiedenen Zeiten t und t' :

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (3.4.12)$$

Die Kommutator-Greenfunktion im Integranden von (3.4.11) ist wie folgt definiert [78]:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{ret} = -i\Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_- \rangle; \quad (3.4.13)$$

Man kann sich nun die Tatsache zunutze machen, daß ein Operator in der zweiten Quantisierung auf einen „Ket“-Vektor so wirkt, wie sein Adjungierter auf einen „Bra“-Vektor, und umgekehrt. Die Wirkung des Operators für die Besetzungszahl ist wegen seiner Hermitizität auf beide Vektoren die gleiche. In der Zweizeiten-Greenfunktion $\Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ liefert z.B. der Erwartungswert

$$\langle (c_{im\sigma} (n_{jm'-\sigma'} + n_{im-\sigma}) c_{jm'\sigma'}) (t) (c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+) (t') \rangle$$

wegen des Operatorenproduktes $(c_{im\sigma} n_{jm'-\sigma'})(t)$,

$$(c_{im\sigma} n_{jm'-\sigma'})(t) = (n_{jm'-\sigma'} c_{im\sigma})(t), \quad (3.4.14)$$

nur dann einen Beitrag, wenn $n_{jm'-\sigma'}(t)$ am Gitterplatz j ein $(m' - \sigma')$ -Elektron „vorfindet“. Da aber der Bra-Vektor $\langle (0) |$ des ansonsten leeren Systems bekannt ist und der nach links wirkende Operator $c_{im\sigma}(t)$ ein $(m\sigma)$ -Elektron an der Stelle i erzeugt, ist dies gleichbedeutend mit der Aussage:

$$\langle (0) | (c_{im\sigma} n_{jm'-\sigma'}) (t) \stackrel{n=0}{=} \langle (0) | c_{im\sigma}(t) \cdot \delta_{ij} \delta_{mm'} \delta_{\sigma-\sigma'}. \quad (3.4.15)$$

Dagegen verschwindet stets der folgende Beitrag:

$$\langle (0) | (c_{im\sigma} n_{im-\sigma}) (t) \stackrel{n=0}{=} 0,$$

denn es wird am Ort i kein $(m - \sigma)$ -Elektron erzeugt, das von $n_{im-\sigma}(t)$ „abgefragt“ werden kann. Die zweiten Summanden in den Kommutatoren sowohl von $\Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ als auch von $D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ müssen verschwinden, da in unbesetzten Bändern keine Elektronen mehr vernichtet werden können. Das ist allen Greenfunktionen dieses Abschnittes gemeinsam:

$$\langle (c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+) (t') A(t) \rangle \stackrel{n=0}{=} 0. \quad (3.4.15)$$

Damit hat sich $\Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ vereinfacht, zuletzt erhält man:

$$\Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=0}{\longrightarrow} \delta_{ij} \delta_{mm'} \delta_{\sigma-\sigma'} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E). \quad (3.4.16)$$

In ähnlicher Art und Weise geht man mit allen anderen Greenfunktionen vor; z.B. verschwinden bei $R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ alle Beiträge im Term

$$\left\langle \left(c_{im\sigma} M_{im\sigma}^{jm'\sigma'} c_{jm'\sigma'} \right) (t) \left(c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \right) (t') \right\rangle ,$$

die mit der Summation über den Bandindex ν zusammenhängen:

$$\langle (0) | \left(c_{im\sigma} \sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) [n_{i\nu\sigma} - n_{i\nu-\sigma}] \right) (t) \stackrel{n=0}{=} \langle (0) | \left(c_{im\sigma} \sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) \delta_{\nu m} \right) (t) = 0 . \quad (3.4.17)$$

Betrachtet man dagegen die ν' -Summation, ergibt sich für den ersten Summanden von $R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ der Erwartungswert:

$$\delta_{ij} (1 - \delta_{mm'}) (\delta_{\sigma\sigma'} - \delta_{\sigma-\sigma'}) \cdot \left\langle \left(c_{im\sigma} c_{jm'\sigma'} \right) (t) \left(c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \right) (t') \right\rangle ,$$

und man erhält zuletzt die vereinfachte Greenfunktion in Abhängigkeit von der Energie:

$$R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=0}{\rightarrow} \delta_{ij} (1 - \delta_{mm'}) z_{\sigma} z_{\sigma'} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) . \quad (3.4.18)$$

z_{σ} ist der bereits aus der Glg. (2.6.3) bekannte Vorzeichenfaktor für den Spin. Aus der Greenfunktion $Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ wird schließlich:

$$Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=0}{\rightarrow} \delta_{ij} (1 - \delta_{mm'}) D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) , \quad (3.4.19)$$

und $V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ verschwindet sogar:

$$V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=0}{\rightarrow} 0 . \quad (3.4.20)$$

$W_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ vereinfacht sich zwar ebenfalls, läßt sich jedoch als einzige Greenfunktion nicht auf (3.4.3) zurückführen. Es resultiert:

$$W_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=0}{\rightarrow} \delta_{ij} \delta_{\sigma-\sigma'} (1 - \delta_{mm'}) \hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) ; \quad (3.4.21)$$

die Funktion $\hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E)$ unterscheidet sich von der Definition (3.4.3) nur in den Spinindizes:

$$\hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) = \langle \langle c_{im-\sigma} c_{jm'-\sigma'} ; c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+ \rangle \rangle_E^{ret} . \quad (3.4.22)$$

Setzt man die eben gewonnenen Resultate in (3.4.6) ein, lautet die neue Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} (E + 2\mu) D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \sum_l \left[T_{jl}(m') D_{ixm\sigma}^{lxm'\sigma'}(E) + T_{il}(m) D_{lxm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \right] = \\ \hbar \delta_{xj} \delta_{ij} + \delta_{ij} U_{mm'}^{\sigma\sigma'} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \delta_{ij} J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{D}_{lxm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \end{aligned} \quad (3.4.23)$$

Die verschiedenen Matrixelemente der Coulombwechselwirkung wurden dabei zu verallgemeinerten Matrixelementen zusammengefaßt:

$$U_{mm'}^{\sigma\sigma'} = U \delta_{mm'} \delta_{\sigma-\sigma'} + (1 - \delta_{mm'}) (\bar{U} - \frac{1}{2} J z_{\sigma} z_{\sigma'}) , \quad (3.4.24)$$

$$J_{mm'}^{\sigma\sigma'} = J \delta_{\sigma-\sigma'} (1 - \delta_{mm'}) . \quad (3.4.25)$$

Um (3.4.23) zu lösen, wird noch die Bewegungsgleichung von $\hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E)$ benötigt. Man erhält diese mit der gleichen Prozedur, die auf (3.4.6) geführt hat und diskutiert die sich ergebenden höheren Greenfunktionen gemäß der Situation leerer Bänder ebenso, wie es oben an zwei Beispielen bereits demonstriert wurde. Das Ergebnis ist:

$$(E + 2\mu) D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \sum_l \left[T_{jl}(m') \hat{D}_{ixm\sigma}^{lxm'\sigma'}(E) + T_{il}(m) \hat{D}_{lxm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \right] = -\hbar \delta_{xj} \delta_{ij} \delta_{\sigma-\sigma'} \delta_{mm'} + \delta_{ij} U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) - \delta_{ij} J_{mm'}^{\sigma\sigma'} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E). \quad (3.4.26)$$

Mit (3.4.23) und (3.4.26) hat man ein geschlossenes Gleichungssystem für D und \hat{D} aufgestellt. Man löst es mit Hilfe einer Fouriertransformation,

$$D_{\mathbf{k}xm\sigma}^{p xm'\sigma'}(E) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i + \mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_j)}, \quad (3.4.27)$$

indem man \hat{D} eliminiert. Mit den Gln. (3.4.5) und (3.4.1) erhält man das exakte Endresultat für den Fall leerer Bänder:

$$K_i^{(APS)m'\sigma'}(E - 2\mu) = -\frac{1}{\pi} (1 - \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'}) \cdot \Im \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) \left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) \right]}{\left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) \right]^2 - \left[J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) \right]^2} \right\}. \quad (3.4.28)$$

Der *Intraband-Part* nach Glg. (3.4.28) weist eine formale Übereinstimmung des Ausdruckes auf der rechten Seite mit dem Integranden im Resultat (2.4.44) für das nicht entartete System auf. Die Größe $\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E)$,

$$\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [E + i0^+ - \varepsilon_m(\mathbf{k}) - \varepsilon_{m'}(\mathbf{q} - \mathbf{k})]^{-1}, \quad (3.4.29)$$

nimmt im leeren Multiband-System so die Rolle des Polarisationspropagators ein¹. Für eine gegebene Gitterstruktur kann $\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E)$ exakt berechnet und damit Glg. (3.4.28) im Prinzip ausgewertet werden. Weil das Hauptinteresse jedoch am allgemeinen Einfluß elektronischer Korrelationen auf APS und AES liegt, ohne dabei auf ein bestimmtes Material hin festgelegt zu sein, wird die Wellenvektor-Summation im Rahmen der tight-binding-Näherung ausgeführt. Wenn man mit diesem Problem ebenso verfährt, wie mit dem gleichen in der Beziehung (2.4.23) gegebenen und Glg. (2.4.24) anwendet, so läßt sich eine Summation über Gitterplätze durch eine solche über die das Ursprungsatom umgebenden „Schalen“ ersetzen:

$$\begin{aligned} \Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E) &= \frac{1}{N^2} \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{p}} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i} [E + i0^+ - \varepsilon_m(\mathbf{p}) - \varepsilon_{m'}(\mathbf{k})]^{-1} \\ &= \sum_{n, \Delta_n} e^{i\mathbf{q} \cdot \Delta_n} \int \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \rho_{0m}^{(n)}(x) \rho_{0m'}^{(n)}(y) [E + i0^+ - x - y]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4.30)$$

¹Setzt man in Glg. (2.4.22) $n = 0$ und damit formal $\mu \rightarrow -\infty$, so wird $\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E)$ für den Fall $d = 1$, $m = m'$ wegen der im leeren Band verschwindenden Einteilchen-Selbstenergie reproduziert, s. Gln. (2.2.7), (2.2.21) und (2.2.22). Die mit dem Matsubaraformalismus erhaltenen AP-Intensitäten des leeren, nicht entarteten Systems sind in den partiellen Intraband-Linienformen von Glg. (3.4.28) offenbar enthalten.

In Glg. (3.4.30) erscheinen *modifizierte BDOS*:

$$\rho_{0m}^{(n)}(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \Delta^n} \delta(x - \varepsilon_m(\mathbf{q})) . \quad (3.4.31)$$

Wie im Abschnitt 2.4 bereits begründet wurde, bricht man die Summation über n in Glg.(3.4.30) nach dem ($n = 1$)-Term ab. Für die Funktion $\rho_{0m}^{(1)}(E)$ erhält man:

$$\rho_{0m}^{(1)}(E) = \frac{E - T_{0m}}{\varepsilon_{0m} - T_{0m}} \rho_{0m}(E) . \quad (3.4.32)$$

Diese entspricht der modifizierten QDOS $\rho_{\sigma}^{(1)}(E)$ in der Glg. (2.4.33). Mit ε_{0m} , T_{0m} bzw. W_{0m} werden die untere Kante, der Schwerpunkt bzw. die Breite des m -ten Blochbandes bezeichnet. Man kann die Tatsache ausnutzen, daß durch die Approximation die einzige Abhängigkeit des Polaristionspropagators vom Wellenvektor in den Blochenergien steckt. Dadurch läßt sich die \mathbf{q} -Summation in Glg. (3.4.28) mittels (2.1.3) in einfachere Integrationen über die Energie umwandeln. Das numerisch auswertbare Resultat für die APS-Partialintensität lautet:

$$K_{i m \sigma}^{(APS)m' \sigma'}(E - 2\mu) = -\frac{1}{\pi} (1 - \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'}) \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_{0m}(z) \frac{A_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) + B_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z)}{(C_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z))^2 + (D_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z))^2} . \quad (3.4.33)$$

Die Abkürzungen bedeuten:

$$\begin{aligned} A_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= N_m^{m'}(E; z) \left[1 - 2U_{mm'}^{\sigma\sigma'}, H_m^{m'}(E; z) \right] , \\ B_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= N_m^{m'}(E; z) \cdot \\ &\quad \left[\left(H_m^{m'}(E; z) \right)^2 + \left(N_m^{m'}(E; z) \right)^2 \right] \left[\left(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 + \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 \right] , \\ C_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= 1 - 2U_{mm'}^{\sigma\sigma'}, H_m^{m'}(E; z) + \\ &\quad \left[\left(H_m^{m'}(E; z) \right)^2 - \left(N_m^{m'}(E; z) \right)^2 \right] \left[\left(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 - \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 \right] , \\ D_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= 2N_m^{m'}(E; z) \left[U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - \left(\left(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 - \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 \right) H_m^{m'}(E; z) \right] . \end{aligned} \quad (3.4.34)$$

$H_m^{m'}(E; z)$ und $N_m^{m'}(E; z)$ sind die Real- und Imaginärteile des Polarisationspropagators, Glg. (3.4.29):

$$\begin{aligned} H_m^{m'}(E; z) &= \left(F_m^{m'} \right)_0(E) + (z - T_{0m}) \left(F_m^{m'} \right)_1(E) , \\ N_m^{m'}(E; z) &= -\pi \left[\left(D_m^{m'} \right)_0(E) + (z - T_{0m}) \left(D_m^{m'} \right)_1(E) \right] . \end{aligned} \quad (3.4.35)$$

Die Größen $(D_m^{m'})_0(E)$ und $(D_m^{m'})_1(E)$ sind mit den Glgn. (2.4.40) und (2.4.41) vergleichbare, für das unbesetzte Mehrbandsystem verallgemeinerte Faltungen:

$$\left(D_m^{m'} \right)_0(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho_{0m}(E') \rho_{0m'}(E - E') , \quad (3.4.36)$$

$$\left(D_m^{m'}\right)_1(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho_{0m}(E') \rho_{0m'}(E - E') \cdot \alpha^* \frac{(E' - T_{0m})(E - E' - T_{0m'})}{(\varepsilon_{0m} - T_{0m})(\varepsilon_{0m'} - T_{0m'})}. \quad (3.4.37)$$

$(F_m^{m'})_0(E)$ und $(F_m^{m'})_1(E)$ sind die Hilberttransformierten:

$$\left(F_m^{m'}\right)_{0,1}(E) = \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{\left(D_m^{m'}\right)_{0,1}(E)}{E - E'}. \quad (3.4.38)$$

α^* versteht sich als Korrekturfaktor zur Kompensation der in der tight-binding-Näherung in (3.4.33) gegenüber (3.4.28) erfolgten Vernachlässigung höherer Terme aus modifizierten Zustandsdichten. Er wird an die Summenregel (3.3.10) angepaßt, d.h. in diesem Fall an:

$$Y_{APS}^{(n=0)} \stackrel{!}{=} 2d(2d - 1). \quad (3.4.39)$$

Wie bei der Spektraldichte des Einband-Systems, so gibt es auch hier einen „bandartigen“ Anteil, und zwar im Energiebereich:

$$\varepsilon_{0m} + \varepsilon_{0m'} \leq E \leq \varepsilon_{0m} + W_{0m} + \varepsilon_{0m'} + W_{0m'}. \quad (3.4.40)$$

Der Bruch des Integranden von (3.4.33) läßt sich mit der Darstellung (2.4.48) der δ -Distribution vergleichen, man erhält so die partielle Linienform für einen möglichen, außerhalb der mit (3.4.40) abgegrenzten „Bandregion“ liegenden Satelliten:

$$I_i^{(APS)m'\sigma'}(E - 2\mu) = \frac{1}{2|(F_m^{m'})_1(E)|} \quad (3.4.41)$$

$$\left[\frac{1}{(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - J_{mm'}^{\sigma\sigma'})^2} \rho_{0m} \left(T_{0m} + \frac{1}{(F_m^{m'})_1(E)} \left(\frac{1}{U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - J_{mm'}^{\sigma\sigma'}} - (F_m^{m'})_0(E) \right) \right) + \frac{1}{(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} + J_{mm'}^{\sigma\sigma'})^2} \rho_{0m} \left(T_{0m} + \frac{1}{(F_m^{m'})_1(E)} \left(\frac{1}{U_{mm'}^{\sigma\sigma'} + J_{mm'}^{\sigma\sigma'}} - (F_m^{m'})_0(E) \right) \right) \right].$$

Wenn man die jeweiligen Blochzustandsdichten ρ_{0m} der d Teilbänder vorgibt, so lassen sich für beliebige U , \bar{U} und J partielle AP-Intensitäten angeben. In der nun folgenden Diskussion hat die korrekte Beurteilung der Wirkungsweise der drei Coulombkonstanten in dem Modellsystem eine höhere Priorität, als eine Darstellung mit realitätsnahen Werten. Letzteres wird an anderer Stelle bei Systemen mit möglichem Phasenübergang durchgeführt.

3.5 Exakte AP-Intensitäten

Die vorliegende Theorie wurde für ein aus zwei Teilbändern ($d = 2$, $(m, m') = (1, 2)$) bestehendes System ausgewertet. Zur Vereinfachung wird angenommen, daß die beiden BDOS' von gleicher Struktur sind und gleiche Breiten $W_{01} = W_{02} = 1eV$ aufweisen, wie es in Abb. 3.5.a dargestellt ist. Die Schwerpunkte sind gegeneinander um $\Delta T_0 = T_{02} - T_{01} = 0.2eV$ verschoben. Die unteren Bandkanten liegen jeweils bei $\varepsilon_{01} = 0$ bzw. $\varepsilon_{02} = 0.2eV$. Damit werden typische Übergangsmetall-Zustandsdichten simuliert.

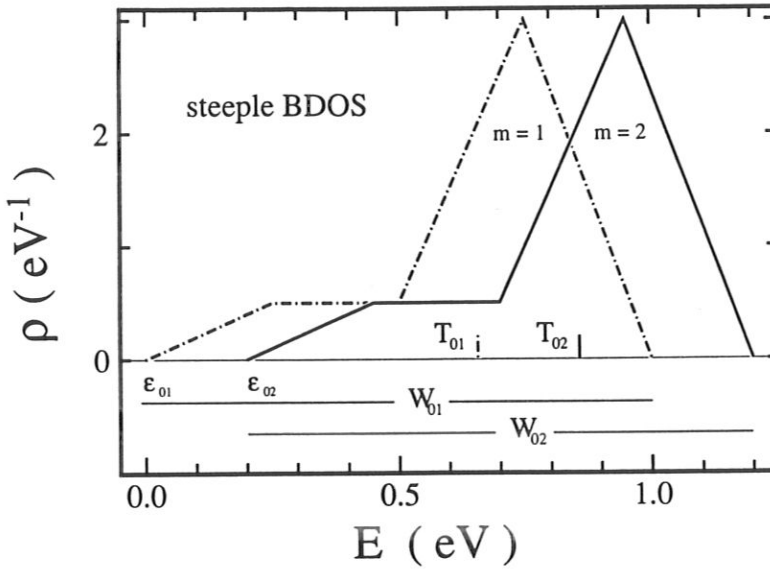


Abbildung 3.5.a: Die BDOS', ρ_{0m} , $m = 1, 2$ als Funktionen der Energie

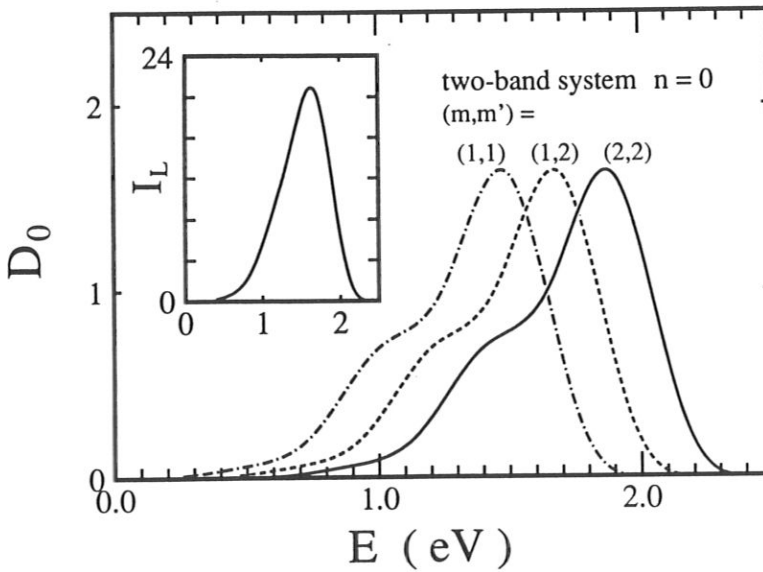


Abbildung 3.5.b: Die Selbstfaltungsspektraldichte $(D_m^{m'})_0$ als Funktion der Energie. Zur Konfiguration $(m, m') = (2, 2)$ gehört die durchgezogene Linie, zu $(m, m') = (1, 2)$ die gestrichelte und zu $(m, m') = (1, 1)$ die strichpunktierte Kurve. Die Einfügung zeigt die summierte ($n = 0$)-AP-Intensität nach der Lander-Theorie.

Abbildung 3.5.b zeigt das Faltungsintegral $(D_m^{m'})_0(E)$, Gleichung (3.4.36) entsprechend, für die möglichen Konfigurationen der Teilbänder. Da beide Blochzustandsdichten den gleichen Verlauf haben, besitzen $(D_1^1)_0(E)$, $(D_2^2)_0(E)$ und $(D_1^1)_0(E) = (D_2^2)_0(E)$ die gleiche Gestalt und sind lediglich starr gegeneinander verschoben. An dieser Stelle bietet sich ein Vergleich mit der Lander-Theorie an, derzufolge sich die $(n = 0)$ -AP-Intensität aus den einfachen Faltungen der BDOS' zusammensetzt:

$$\begin{aligned} I_L(E) &= 4 \sum_{m,m'} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho_{0m}(E') \rho_{0m'}(E - E') \\ &= 4(D_1^1)_0(E) + 4(D_2^2)_0(E) + 8(D_1^1)_0(E). \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

Der Faktor 4 stammt von der Summation über den Spin. Direkte Korrelationen zwischen den beiden angeregten AP-Elektronen werden durch I_L vernachlässigt. Die Einfügung in Abb. 3.5.b zeigt eine ziemlich strukturlose Kurve. Die unmittelbare Elektron-Elektron-Wechselwirkung kommt erst dann zum Tragen, wenn man die Partialintensität aus der Selbstfaltungsspektraldichte und der Faltungskorrektur $(D_m^{m'})_1(E)$, Glg. (3.4.37), zusammensetzt. Die letztere wird in Abb. 3.5.c gezeigt.

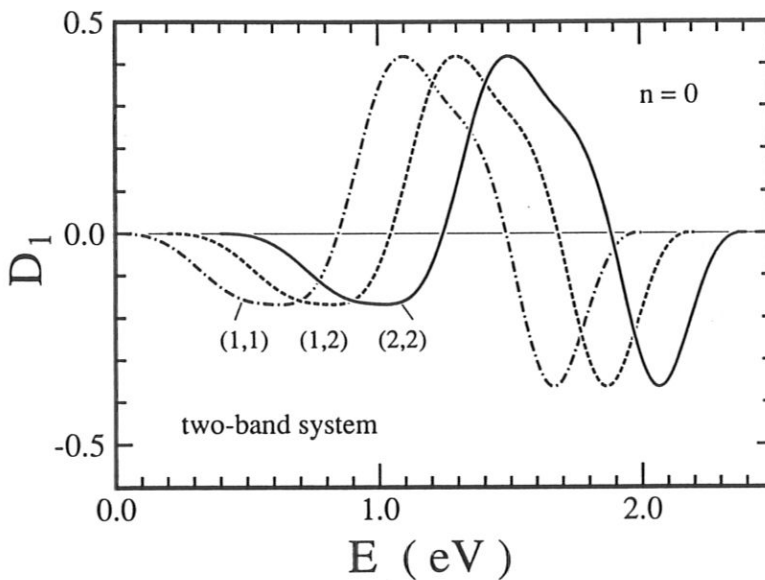


Abbildung 3.5.c: Die Faltungskorrektur $(D_m^{m'})_1$ als Funktion der Energie. Die Konfigurationen $(m, m') \in (1, 2)$ sind wie in Abb. 3.5.b gekennzeichnet.

Deren oszillierendes Verhalten schwächt ihren Einfluss auf die resultierende Linienform zwar etwas ab, doch ist $(D_m^{m'})_1(E)$ zusammen mit den Hilberttransformierten für das AP-Spektrum von großer Bedeutung.

Die Funktionen $(F_m^{m'})_{0,1}(E)$ sind in Abb. 3.5.d dargestellt. In der mit (3.4.40) eingrenzten Region der bandartigen Linienformen erkennt man charakteristische Oszillationen. Außerhalb jenes Band-Intervalls nähern sich alle Hauptwert-Integrale asymptotisch der Nulllinie. Die Faltungsgrößen und Hilberttransformierten hängen von der direkten Korrelation zwischen den beiden angeregten Elektronen nicht ab, weil diese Funktionen aufgrund der Voraussetzung leerer Bänder ausschließlich durch die BDOS festgelegt sind. Im Falle teil-

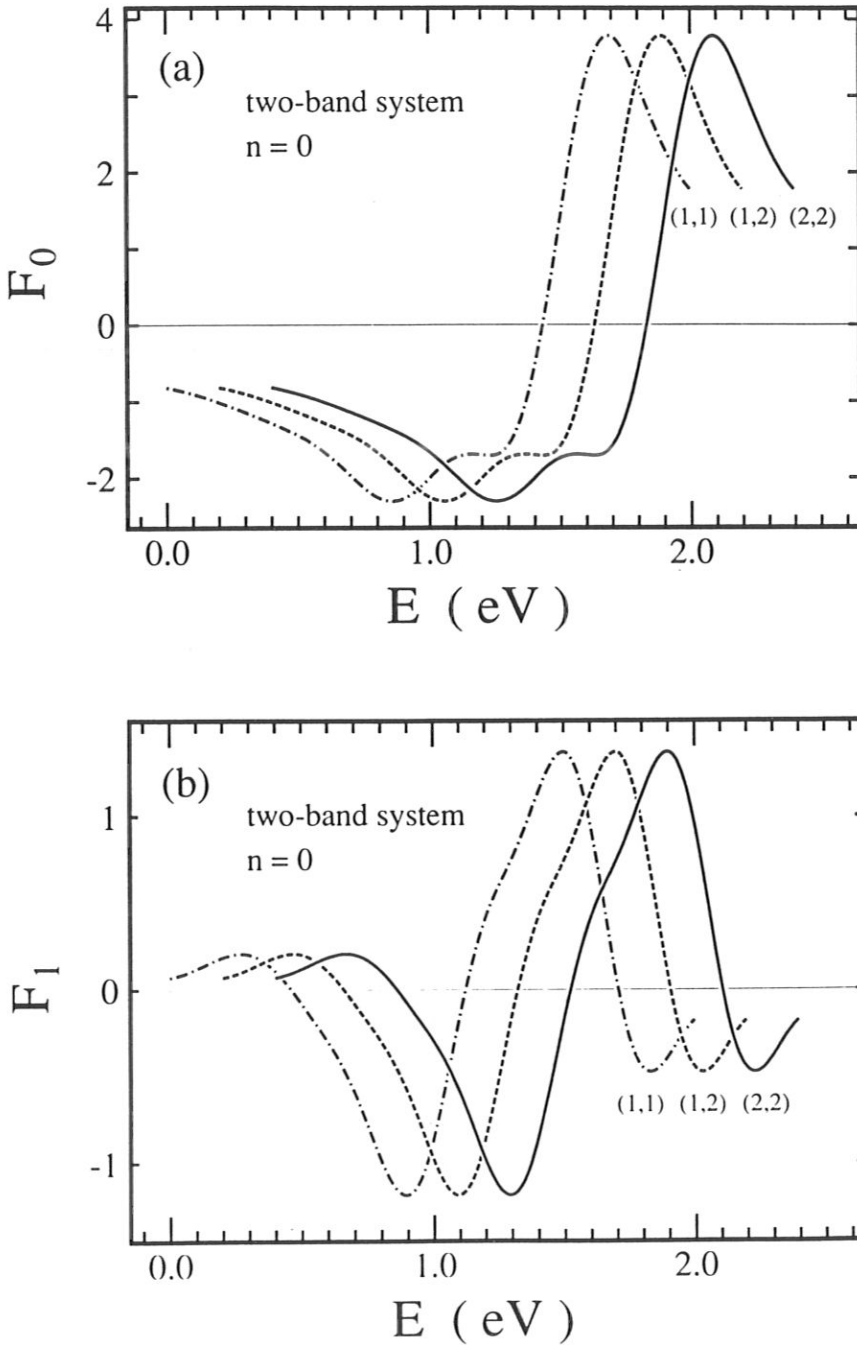


Abbildung 3.5.d: (a): Hilberttransformierte $(F_m^m)_0$ der Faltung $(D_m^m)_0$ in Abhängigkeit von der Energie. Die Konfigurationen sind wie in Abb. 3.5.b gekennzeichnet. (b): Wie (a), jedoch die Hilberttransformierte von $(D_m^m)_1$.

weise gefüllter Bänder hat man $\rho_{0m}(E)$ durch entsprechende QDOS' zu ersetzen und damit indirekte Korrelationen zu berücksichtigen [83].

Abb. 3.5.e demonstriert die Beeinflussung der AP-Intensität $I_{APS}^{(n=0)}$ durch die direkten Korrelationen. Die Parameter sind auf $U = 2eV$, $\bar{U} = 1.5eV$ und $J = 0.175eV$ festgesetzt worden. Mit $W_{0m} = 1eV$ liegt demnach eine starke Kopplung vor. Das Spektrum besteht aus mehreren getrennten Teilen. Man findet eine breite, bandartige Kurve, die Zustände repräsentiert, bei denen die beiden AP-Elektronen nach der Anregung an verschiedenen Gitterplätzen anzutreffen sind [Teil (a) der Abb. 3.5.e]. Jede in Glg. (3.4.33) definierte Partialintensität $K_{i m \sigma}^{(APS)m' \sigma'}$ trägt in ihrem jeweiligen Energiebereich bei. Wenn die effektiven Kopplungsstärken $U_{mm'}^{\sigma \sigma'}$ und $J_{mm'}^{\sigma \sigma'}$ gewisse kritische Werte überschreiten, treten zusätzlich Satelliten auf, die wegen der hohen Coulomb-Kopplung nicht in einem energieerhaltenden Prozeß zerfallen können.

Im Gegensatz zum Einband-System sind die Satelliten verschiedenartiger Herkunft, je nach dem, ob die intraatomar angeregten Elektronen demselben ($m = m'$) oder verschiedenen Subbändern ($m \neq m'$) angehören. Im ersten Fall müssen beide Teilchen antiparallele Spins annehmen, während es in der alternativen Situation die Möglichkeit einer „diagonalen“ (σ, σ) Struktur und zweier „nichtdiagonaler“ ($\sigma, -\sigma$) Beiträge gibt. Die physikalische Bedeutung der unterschiedlichen Signalformen soll im folgenden erläutert werden.

Die beiden Hochenergiepeaks im zweiten Teilbild werden der (intraatomaren) Intra-band-Coulomb-Wechselwirkung U zugeschrieben. Der Abstand zwischen ihnen ist etwa doppelt so groß wie die relative Abweichung ΔT_0 der beiden Blochbänder gegeneinander. Der höhere der beiden Niederenergie-Peaks in 3.5.e, Teil (b), gehört zur diagonalen Interband-Intensität $I_{APS}^{(\sigma, \sigma)}$, Glg. (3.2.6), und wird durch Elektronen mit parallelen Spins aus verschiedenen Teilbändern verursacht. Dafür ist die direkte Interband-Wechselwirkung verantwortlich, zu welcher sowohl H_U [Glg. (3.1.12)], als auch, über den Ising-artigen Summanden ($\sigma_{im}^z \sigma_{im'}^z$), der Operator der Austauschwechselwirkung H_J [Glg. (3.1.11)] beitragen. An den Definitionsgleichungen (3.4.24) und (3.4.25) läßt sich zusammen mit (3.4.41) die für den direkten Interband-Satelliten wirksame Kopplung $\bar{U} - J/2$ ablesen.

Wenn die beiden angeregten Elektronen verschiedener Teilbänder antiparallele Spins haben, tragen sie zur nichtdiagonalen Interband-Intensität $I_{APS}^{(\sigma, -\sigma)}$ bei, Glg. (3.2.7). Entsprechend den Termen von H_1 [Glg. (3.1.5)] wird die Wechselwirkung zwischen den AP-Partnern von einem „Spin-Austausch“ ($\sigma_{im}^\pm \sigma_{im'}^\mp$) begleitet, oder nicht ($\sigma_{im}^z \sigma_{im'}^z$). Zusätzlich wirkt der spinunabhängige direkte Interbandterm mit der Größe \bar{U} . Anhand der exakten Green'schen Bewegungsgleichungen läßt sich ablesen, daß der Isingterm mit ($\sigma_{im}^z \sigma_{im'}^z$) einen Satelliten hervorbringt, für den die Kopplung $\bar{U} - J/2$ wirksam ist. Darum fällt der „Ising-Satellit“ genau mit dem direkten Interband-Satelliten $I_{APS}^{(\sigma, \sigma)}$ zusammen. Der andere Peak mit Spin-Austausch ($\sigma_{im}^\pm \sigma_{im'}^\mp$), den man auch als „Spin-Flip-Satelliten“ bezeichnen kann, erscheint in der Gleichung (3.4.41) mit der Kopplungsenergie $\bar{U} + 3J/2$ und liegt deshalb etwas höher. Deshalb erscheinen zwei spin-nichtdiagonale Interband-Satelliten. Der Spin-Flip- und der Ising-Satellit haben einen Abstand von etwa $2J$ voneinander. Dieser Wert wird natürlich nicht genau eingehalten, da die energetische Lage der Satelliten entscheidend von dem Verhalten der Hilberttransformierten bestimmt wird; für Energien weit genug von den Grenzen der mit (3.4.40) angegebenen Bandregion ist deren Verlauf bereits recht gut linear.

Sobald Satelliten erscheinen, führen sie den überwiegenden Anteil an spektralem Gewicht mit sich, wie der Vergleich der Ordinatenachsen in Abb. 3.5.e demonstriert. Außerdem

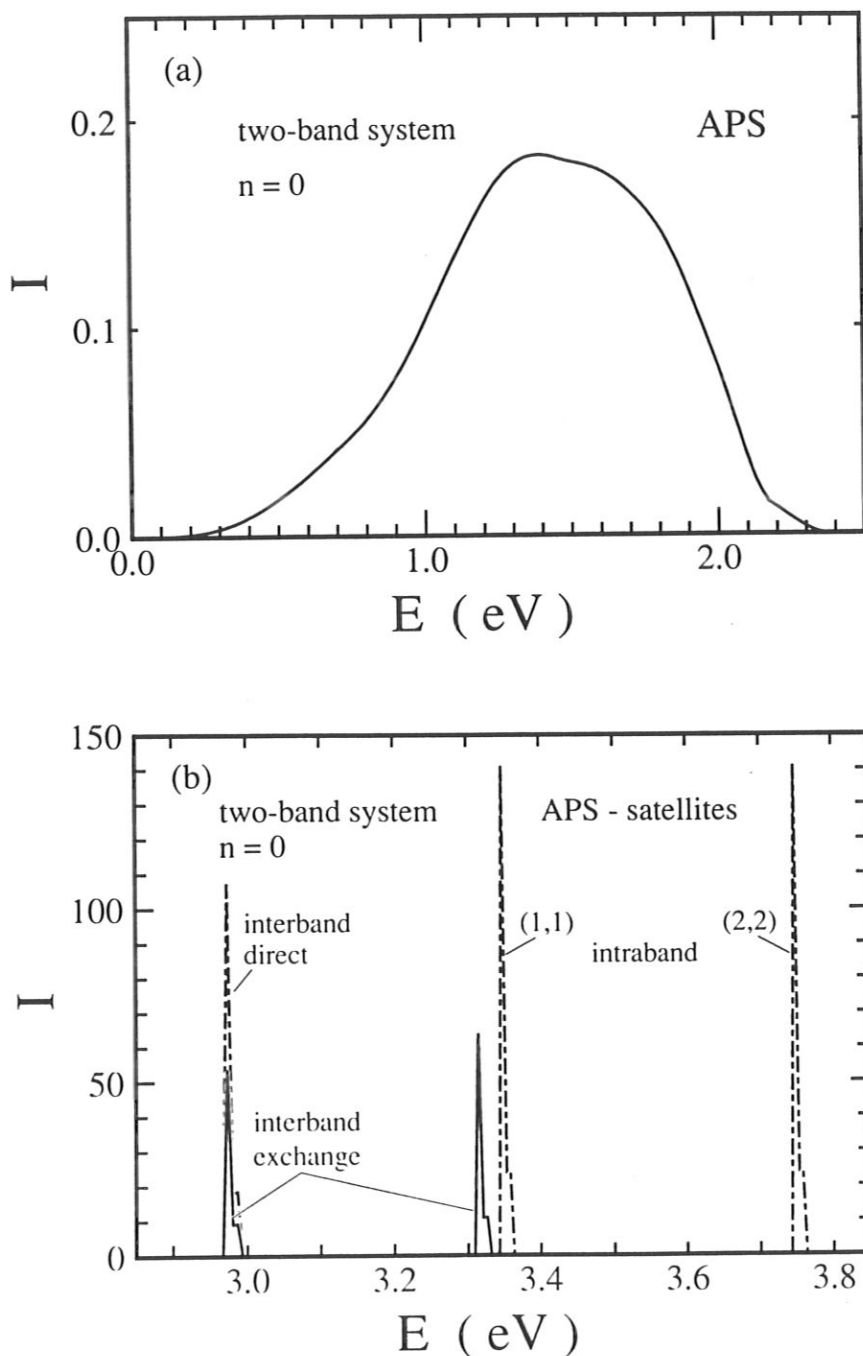


Abbildung 3.5.e: Die exakte AP-Intensität des leeren Zweiband-Systems ($n = 0$). Die Parameter sind: $U = 2\text{eV}$, $\bar{U} = 1.5\text{eV}$, und $J = 0.175\text{eV}$. (a): Bandartige Linienform, (b): Satelliten aufgrund verschiedener Korrelationen, und zwar der Intraband-Korrelation, die bei den Konfigurationen $(m, m') = (1, 1)$, $(2, 2)$ auftritt (mittel- und hochenergetische, strichpunktiierte Strukturen), sowie der Interband-Korrelation ohne Spin-Flip (untere strichpunktiierte Kurve), bzw. mit Spin-Flip (durchgezogene Linien).

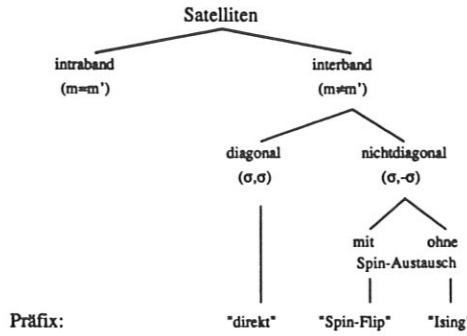


Abbildung 3.5.f: Übersicht: Die im Mehrband-System möglichen Satelliten.

bewegen sie sich mit zunehmender Kopplungsstärke vom bandartigen Spektrum fort. Das gilt für jede der drei in Betracht gezogenen Coulombenergien U , J und \bar{U} , vorausgesetzt, sie überschreiten jeweils einen kritischen Wert. Den Abstand zwischen beiden Strukturen kann man als ein Maß für die wirksame Kopplungsstärke auffassen.

Abb. 3.5.g zeigt verschiedene AP-Spektren, die sich lediglich aufgrund des Wertes der Interband-Wechselwirkung \bar{U} unterscheiden. Die mit durchgezogenen Linien eingezeichneten Intra-band-Satelliten werden von der \bar{U} -Variation natürlich nicht betroffen. Dagegen verschieben alle Interband-Satelliten monoton mit \bar{U} zu höheren Energien; ihr spektrales Gewicht nimmt dabei simultan zu, begleitet von der Abnahme des bandartigen Spektrums. An dem in der Einfügung von 3.5.g gezeigten Interband-Austauschsatelliten fällt auf, daß der Abstand zwischen der jeweiligen Ising- und der Spin-Flip-Struktur von \bar{U} kaum abhängt.

Satelliten tauchen nicht plötzlich, wie „aus dem Nichts“ auf! Im Gegenteil läßt sich mit der hier dargelegten Theorie deren „Geburt“ im Detail veranschaulichen, wie dies in Abb. 3.5.h für den diagonalen Interband-Satelliten $I_{APS}^{(\sigma, \sigma)}$ getan ist. Bei einem relativ geringen Wert der Kopplungsstärke von $(\bar{U} - J/2)/W_{0m} \approx 0.6$ spaltet sich der Interband-Satellit ab, und der bandartige Teil des Spektrums fällt gewissermaßen in sich zusammen. Die gesamte AP-Intensität leerer Bänder hat nur bei sehr schwachen Kopplungen eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Integral der Selbstfaltung, das noch als Einfügung in Abb. 3.5.b zu sehen ist.

Im Teil (a) der Abb. 3.5.h ähnelt die Gestalt der $(\bar{U} = 0.1eV)$ -Kurve noch dem Verlauf von $(D_1^2)_0(E)$ in Abb. 3.5.b, denn die wirksame Kopplung für die direkte Interband-Intensität ist mit $\bar{U} - J/2 = 0.0125eV$ praktisch noch nicht vorhanden.

Bereits ein Wert von $\bar{U} = 0.3eV$ verformt das Signal. Mit steigendem \bar{U} konzentriert sich die (gleichbleibende) Fläche unter der direkten Interband-Linienform in einem Peak am hochenergetischen Ende, der sich mit Änderung von $\bar{U} = 0.5eV$ auf $\bar{U} = 0.6eV$ verschmälert und an Höhe gewinnt. Für diese beiden Werte zeigt das untere Teilbild (b) von 3.5.h die Spektren wiederholt, jedoch mit anderen Skalen. Bei nur wenig weiter erhöhtem \bar{U} „schnürt“ sich der scharfe Peak gewissermaßen zu höheren Energien hin ab. Gleichzeitig fällt der in seiner Breite unveränderte Bandpart des Spektrums auf einen in diesem Maßstab nicht mehr darstellbaren Rest zusammen. Die „Geburt“ des diagonalen Interband-Satelliten ist vollzogen.

Abb. 3.5.i veranschaulicht die \bar{U} -Abhängigkeit der Interband-Austauschintensität $I_{APS}^{(\sigma, -\sigma)}$ [Glg. (3.2.7)]. Ab einem Wert von $\bar{U} \geq 0.35eV$ erscheint zunächst der Spin-Flip-Peak,

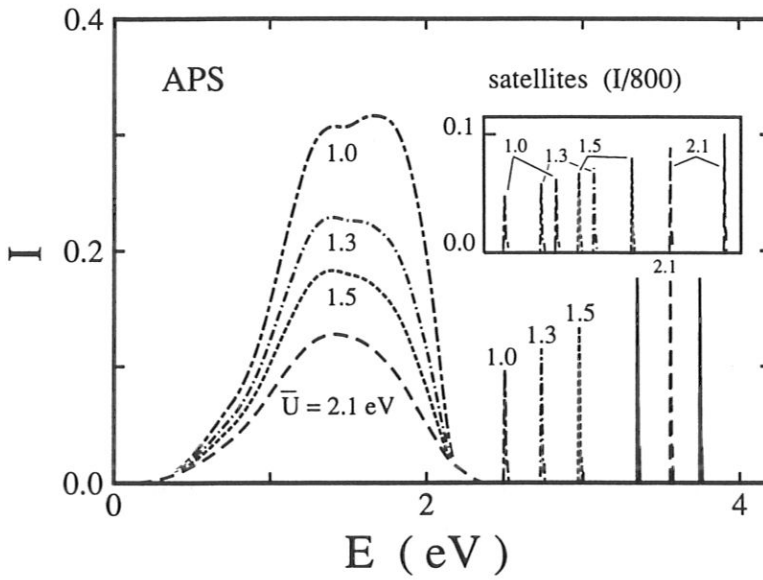


Abbildung 3.5.g: Die AP-Intensität am leeren Zweiband-System ($n = 0$) als Funktion der Energie für verschiedene Werte der direkten Coulomb-Wechselwirkung \bar{U} . Die Parameter $U = 2\text{eV}$ und $J = 0.175\text{eV}$ werden festgehalten. Man beachte, daß alle Satelliten in dieser Abbildung um den Faktor 800 gestaucht sind. Die durchgezogenen Linien zeigen die durch \bar{U} unbeeinflussten Intraband-Satelliten. Die anderen Peaks gehören zu diagonalen (σ, σ) -Interband-Strukturen. Eingetragene \bar{U} -Werte kennzeichnen die jeweilige Zugehörigkeit von Satellit und Bandanteil. Der besseren Deutlichkeit halber sind die nichtdiagonalen $(\sigma, -\sigma)$ -Interband-Satelliten ausschließlich in der Einfügung gezeigt (Peaks nach oben verschoben, Positionen und Höhen unverändert).

während der Ising-Satellit dazu $\bar{U} \geq 0.7\text{eV}$ benötigt.

Die Abbn. 3.5.j und 3.5.g lassen eine beachtliche Abhängigkeit der Interband-AP-Intensitäten von J erkennen. In Abb. 3.5.j wird ausschließlich der direkte Interband-Beitrag $I_{APS}^{(\sigma, \sigma)}$ an der Gesamtlinienform gezeigt. Wie die effektive Kopplung von $\bar{U} - J/2$ bereits erwarten läßt, wirken \bar{U} und J in gewisser Hinsicht einander entgegengesetzt. In den Kurven sind nunmehr die Parameter $U = 2\text{eV}$ und $\bar{U} = 0.2\text{eV}$ festgehalten. Für verschwindendes J erscheint der Diagonalsatellit auf der hochenergetischen Seite des Spektrums, gemäß der direkten Interband-Wechselwirkung \bar{U} . Mit steigendem J verringert sich aber gerade der Betrag der effektiven Kopplung, und so taucht der Satellit zunächst in den bandartigen Teil des Spektrums ein. Bei hinreichend starker Austauschwechselwirkung, d.h. genügend großem $|\bar{U} - J/2|$, taucht er auf der niederenergetischen Seite wieder auf. Das geschieht bei $J = 4.0\text{eV}$, und man kann erkennen, daß der Diagonalsatellit und die bandartige Linienform eben noch miteinander verschmolzen sind.

Die Abb. 3.5.k zeigt die Wirkung von J auf den Interband-Austauschbeitrag $I_{APS}^{(\sigma, -\sigma)}$ zur gesamten Intensität. Für $J = 0$ besteht die wirksame Kopplung nur aus \bar{U} ; demzufolge gibt es nur einen Austauschsatelliten, und zwar auf der hochenergetischen Seite. Bei endlichem J dagegen spaltet sich der Satellit auf, entsprechend den effektiven Wechselwirkungsenergien $\bar{U} - J/2$ und $\bar{U} + 3J/2$. Der Ising-Satellit fällt stets mit dem direkten Interband-Satelliten von Abb. 3.5.j zusammen, beide haben gleichartige Verhaltensweisen. Die obere

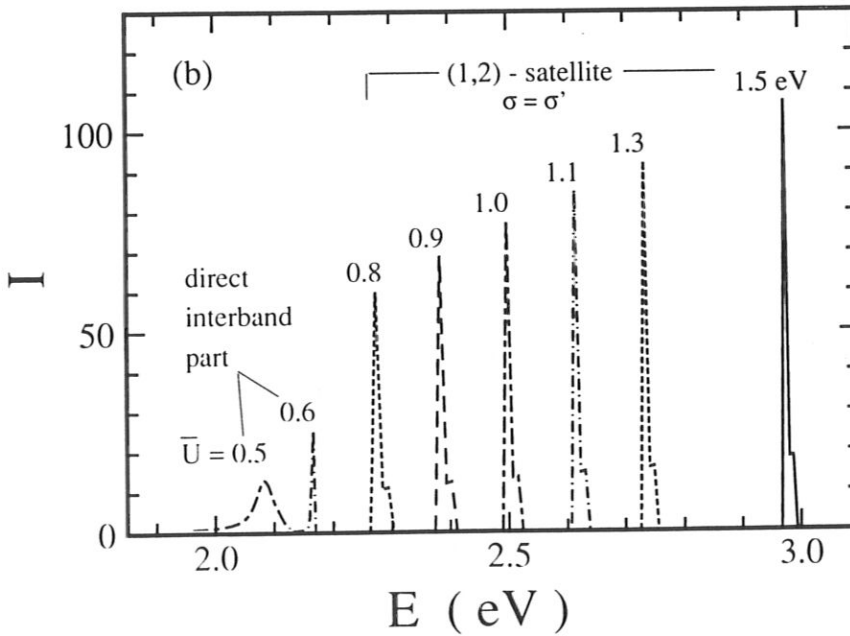
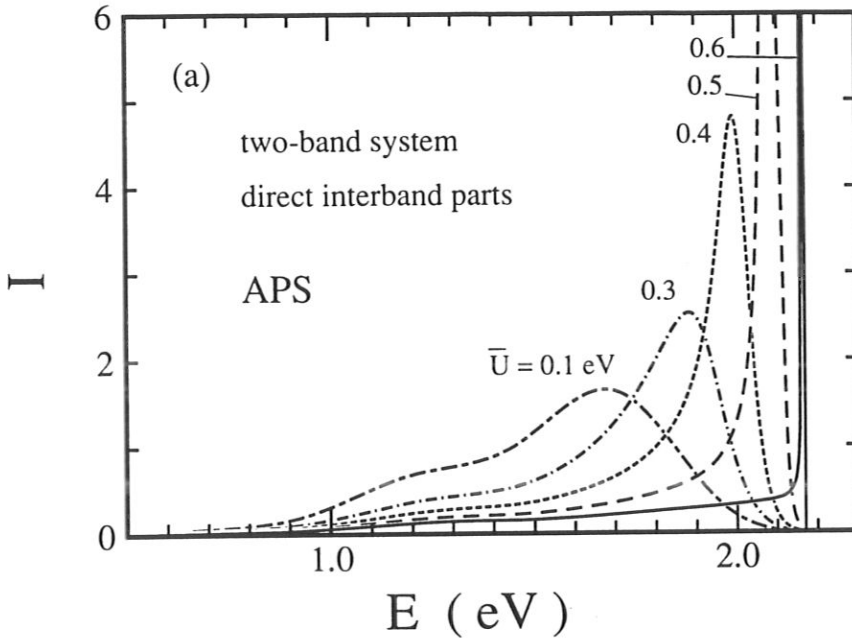


Abbildung 3.5.h: Diagonaler Anteil der Interband-AP-Intensität für das leere Band als Funktion der Energie, und dies für verschiedene Werte der direkten Interband-Wechselwirkung \bar{U} . Die anderen Parameter sind festgehalten ($U = 2\text{eV}$, $J = 0.175\text{eV}$).

(a): Das bandartige Spektrum bei schwachen \bar{U} -Kopplungen.

(b): Ab $\bar{U} \geq 0.6\text{eV}$ spaltet der diagonale Satellit ab. Zugleich wird der Bandanteil des Spektrums für die hier verwendete Skala zu klein, um noch sichtbar dargestellt werden zu können.

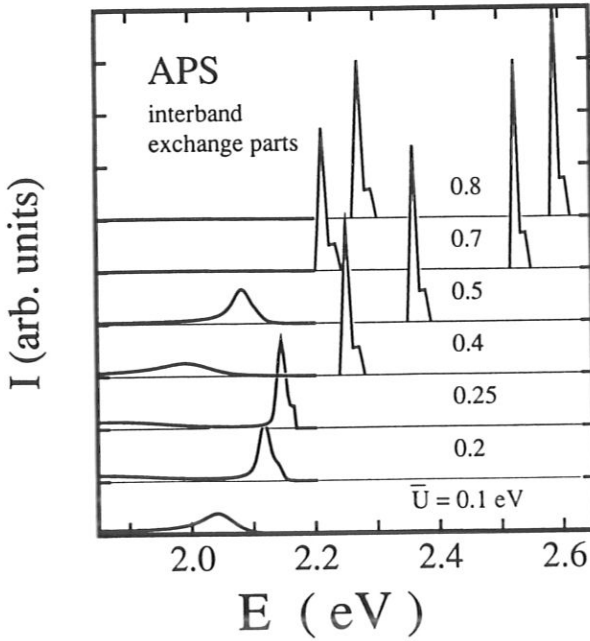


Abbildung 3.5.i: Nichtdiagonale AP-Intensität $I_{APS}^{(\sigma,-\sigma)}$ des leeren Zweiband-Systems ($n = 0$) als Funktion der Energie für verschiedene Werte der direkten Interband-Kopplung \bar{U} . Die anderen Parameter sind festgehalten; $U = 2\text{eV}$, $J = 0.175\text{eV}$. Satelliten, die sich vollkommen vom bandartigen Spektrum abgespalten haben (ab $\bar{U} \geq 0.4\text{eV}$), sind um das 4-fache gestaucht eingezeichnet.

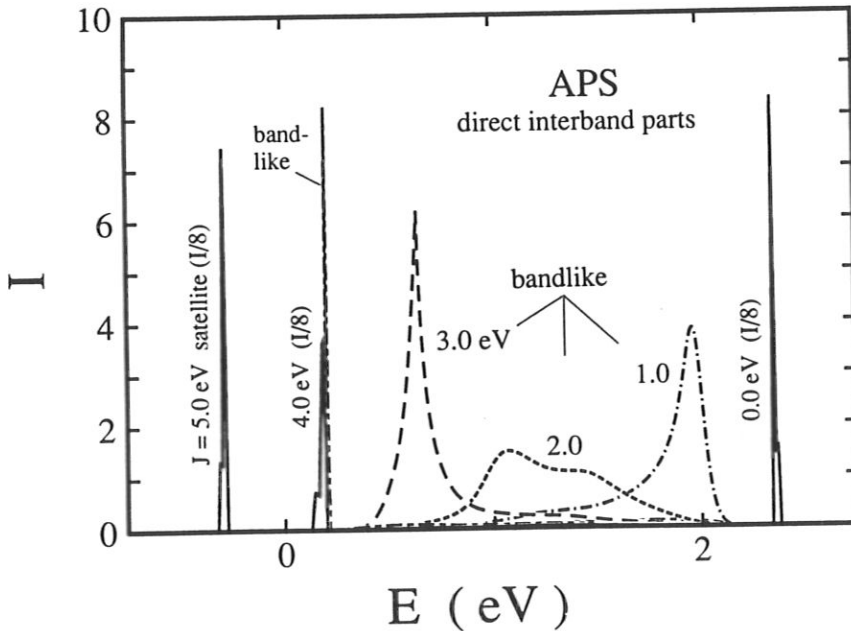


Abbildung 3.5.j: Diagonale Interband-AP-Intensität $I_{APS}^{(\sigma,\sigma)}$ des leeren Zweiband-Systems in Abhängigkeit von der Energie für verschiedene Werte der Interband-Austauschwechselwirkung J . Alle anderen Parameter sind festgehalten; $U = 2\text{eV}$, $\bar{U} = 0.8\text{eV}$. Die Intensitäten der Satelliten sind relativ zum bandartigen Teil der Spektren um das 8-fache reduziert.

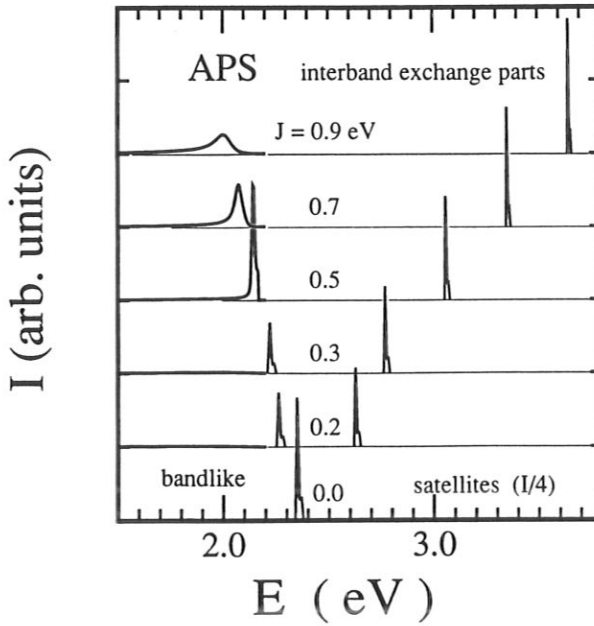


Abbildung 3.5.k: Interband-Austauschintensität $I_{APS}^{(\sigma, -\sigma)}$ des leeren Zweiband-Systems als Funktion der Energie, und zwar für verschiedene Werte der Interband-Austauschwechselwirkung J . Alle anderen Parameter sind festgehalten; $U = 2eV$, $\bar{U} = 0.8eV$. Die Satelliten sind, soweit sie sich von der bandartigen Linienform völlig getrennt haben, um das 4-fache gestaucht eingezeichnet.

Struktur ist ein Spin-Flip-Peak. Wie man an den unterschiedlichen wirksamen Kopplungen abliest, vergrößert sich der Abstand zwischen dem Satelliten mit und demjenigen ohne Spin-Austausch etwa wie $2J$. Ist J groß genug ($J \geq 0.45eV$), so taucht der Ising-Peak in die bandartige Linienform ein, während sich die Spin-Flip-Struktur von derselben fortbewegt.

3.6 AES an vollständig gefüllten Bändern

Der andere exakt lösbare Grenzfall liegt mit vollständig gefüllten Energiebändern vor ($n_m = 2, n = 2d$); das chemische Potential liegt formal im unendlichen, $\mu \rightarrow \infty$. Alle Partialintensitäten lassen sich an (3.2.3) und (3.2.4) ablesen; es gilt:

$$K_i^{(APS)m'\sigma'}(E - 2\mu) \stackrel{\mu \rightarrow \infty}{=} 0; \quad (3.6.1)$$

in besetzten Bändern lassen sich natürlich keine AP-Elektronenpaare mehr unterbringen. Aufgrund des thermodynamischen Vorfaktors gilt dagegen für die partielle AE-Intensität:

$$K_i^{(AES)m'\sigma'}(E - 2\mu) \stackrel{\mu \rightarrow \infty}{=} -\frac{1}{\hbar} A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu). \quad (3.6.2)$$

Sowohl die exakte Bewegungsgleichung (3.4.6) für $D_{izm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E)$, als auch die Beziehungen (3.4.11) - (3.4.13) gelten allgemein. Man hat die höheren Zweizeit-Kommutator-Greenfunktionen für den Fall $n = 2d$ zu diskutieren. Alle Erwartungswerte mit rechts stehenden

Erzeugungsoperatoren verschwinden, weil im Ket-Vektor $|(2d)\rangle$ keine zusätzlichen Teilchen mehr erzeugt werden können:

$$c_{xm\sigma}^+(t') |(2d)\rangle \stackrel{n=2d}{=} 0. \quad (3.6.3)$$

Deshalb braucht man lediglich die Subtrahenden der von t und t' abhängenden Kommutatoren in Γ, Q, R, V bzw. W und der ursprünglichen Greenfunktion D miteinander zu vergleichen. Ferner hat man zu beachten:

$$\langle n_{jm\sigma} \rangle \stackrel{n=2d}{=} 1, \quad (3.6.4)$$

denn jeder Gitterplatz weist die maximale Anzahl an Elektronen auf. Also gilt z.B., mit der Definition (3.4.8):

$$\langle N_{im}^{jm'} \rangle \stackrel{n=2d}{=} 4(d-1). \quad (3.6.5)$$

Dieser Erwartungswert erniedrigt sich dann, wenn entweder am Gitterplatz i zuvor ein Elektron vernichtet wird, das nicht aus dem Teilband m stammt, oder ein Elektron am Gitterplatz j , welches nicht dem Teilband m' angehört. In der Zweizeiten-Greenfunktion $Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ erscheint der Ausdruck

$$- \left\langle (c_{xm'\sigma'}^+ c_{xm\sigma}^+) (t') (c_{im\sigma} N_{im}^{jm'} c_{jm'\sigma'}) (t) \right\rangle.$$

Also erhält man aufgrund (3.6.5) für das voll besetzte System die Vereinfachung:

$$Q_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=2d}{\longrightarrow} [4(d-1) - \delta_{ij}(1 - \delta_{mm'})] D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E). \quad (3.6.6)$$

Für $V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(t, t')$ diskutiert man den Zustand:

$$\begin{aligned} & \left(c_{im-\sigma} \left[\sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) c_{i\nu-\sigma}^+ c_{i\nu\sigma} \right] c_{jm'\sigma'} \right) (t) |(2d)\rangle \\ &= -\delta_{ij} \delta_{\sigma-\sigma'} \left(c_{im-\sigma} \sum_{\nu} (1 - \delta_{\nu m}) \delta_{\nu m'} c_{jm'\sigma'}^+ c_{jm'\sigma'} c_{jm'-\sigma'} \right) (t) |(2d)\rangle \\ &= -\delta_{ij} \delta_{\sigma-\sigma'} (1 - \delta_{mm'}) (c_{im-\sigma} n_{jm'\sigma'} c_{jm'-\sigma'}) (t) |(2d)\rangle. \end{aligned} \quad (3.6.7)$$

Der Operator $n_{jm'\sigma'}(t)$ läßt sich den Vertauschungsregeln für Fermionen gemäß an $c_{jm'-\sigma'}(t)$ „vorbeiziehen“ und liefert am Ket-Vektor des voll besetzten Systems den Eigenwert 1. Damit ergibt sich nach Rücktransformation auf die Energie zuletzt:

$$V_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) \stackrel{n=2d}{\longrightarrow} -\delta_{ij} (1 - \delta_{mm'}) \delta_{\sigma-\sigma'} \hat{D}_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E). \quad (3.6.8)$$

Auf ähnliche Art und Weise findet man für die anderen Greenfunktionen:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) & \stackrel{n=2d}{\longrightarrow} [2 - \delta_{ij} \delta_{mm'} \delta_{\sigma-\sigma'}] D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E), \\ R_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) & \stackrel{n=2d}{\longrightarrow} -\delta_{ij} (1 - \delta_{mm'}) z_{\sigma} z_{\sigma'} D_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E), \\ W_{ixm\sigma}^{jxm'\sigma'}(E) & \stackrel{n=2d}{\longrightarrow} 0. \end{aligned} \quad (3.6.9)$$

Man setzt die Beziehungen (3.6.6), (3.6.8) und (3.6.9) in (3.4.6) ein, stellt eine Bewegungsgleichung für \hat{D} auf, vereinfacht weitere sich ergebende Greenfunktionen in vollkommener

Analogie zu den bisher dargestellten Überlegungen und gewinnt zuletzt das Endergebnis:

$$K_i^{(AES)m'\sigma'}(E - 2\mu) = \frac{1}{\pi} (1 - \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'}) \cdot \Im \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E) [1 + U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E)]}{[1 + U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E)]^2 - [J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E)]^2} \right\}, \quad (3.6.10)$$

mit dem Polarisationspropagator $\Lambda_{mm'}^{(2d)}$.

$$\Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [E + i0^+ - 2U - 4(d-1)\bar{U} - \varepsilon_m(\mathbf{k}) - \varepsilon_{m'}(\mathbf{q} - \mathbf{k})]^{-1}. \quad (3.6.11)$$

$\Lambda_{mm'}^{(2d)}(\mathbf{q}, E)$ wird wegen der Zielsetzung, allgemein die Bedeutung direkter Korrelationen zu untersuchen, wie $\Lambda_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, E)$ im Rahmen der tight-binding-Näherung berechnet. Das Resultat gleicht der Beziehung (3.4.33) bis auf zwei Unterschiede. Die verallgemeinerten Coulombmatrixelemente haben umgekehrte Vorzeichen:

$$(U_{mm'}^{\sigma\sigma'}, J_{mm'}^{\sigma\sigma'}) \longrightarrow (-U_{mm'}^{\sigma\sigma'}, -J_{mm'}^{\sigma\sigma'}). \quad (3.6.12)$$

Außerdem ist die Energie gegen den folgenden Ausdruck zu ersetzen:

$$E \longrightarrow E - 2U - 4(d-1)\bar{U}. \quad (3.6.13)$$

Der konstante Summand η_0 ,

$$\eta_0 = U + 2(d-1)\bar{U}, \quad (3.6.14)$$

resultiert aus der Tatsache, daß in einem voll besetzten System jedes Elektron aus dem m -ten Teilband sowohl mit einem spinantiparallelen Partner aus demselben Band, als auch mit den übrigen $2d - 2$ Teilchen wechselwirkt. Die BDOS' $\rho_{0m}(E)$ sind daher um den Energiebetrag η_0 gegenüber den Zustandsdichten im ($n = 0$)-Fall verschoben.

3.7 Exakte AE-Intensitäten

Die numerische Auswertung der exakten ($n = 2d$)-AES-Theorie konzentriert sich wie im Fall $n = 0$ auf das einfache Zweiband-System ($d = 2$) mit den wie in Abb. 3.5.a gezeigten Teilbändern. Das chemische Potential läßt sich formal auf den Wert $\mu = \varepsilon_{02} + W_{02} + \eta_0$ festlegen. Das ist die obere Kante der höher liegenden BDOS. Die nun folgende Auswertung ist mit der vorangegangenen weitgehend vergleichbar. Bei festgehaltener Intraband-Wechselwirkung $U = 2eV$ sowie den in Abb. 3.5.a entnehmbaren Kenngrößen wurde jeweils eine der beiden Interband-Kopplungen \bar{U} oder J verändert.

Die großen Ähnlichkeiten zwischen den AP-Spektren des leeren Systems und AES an vollen Bändern verwundert natürlich nicht. Es gibt aber auch deutliche Unterschiede. Die großen Intraband-Kopplungsstärken führen auch hier zu Satelliten; diese erscheinen nun auf der niederenergetischen Seite des Bandspektrums, das im folgenden Energie-Intervall liegt:

$$\varepsilon_{0m} + \varepsilon_{0m'} - \eta_0 \leq E - 2\mu \leq \varepsilon_{0m} + W_{0m} + \varepsilon_{0m'} + W_{0m'} - \eta_0. \quad (3.7.1)$$

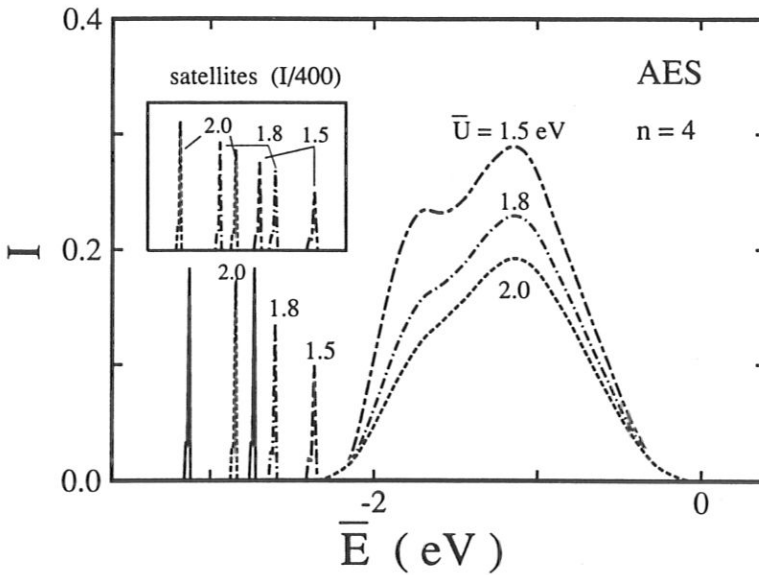


Abbildung 3.7.a: Die AE-Intensität des voll besetzten Zweiband-Systems ($n = 4$) als Funktion der Energie $\bar{E} = E - (U + 2(d - 1)\bar{U})$ für verschiedene Werte der direkten Interband-Wechselwirkung \bar{U} . Die übrigen Parameter sind festgehalten; $U = 2\text{eV}$, $J = 0.175\text{eV}$, siehe auch Abb. 3.5.a. Die Satelliten sind 400-fach verkleinert abgebildet und die Intraband-Satelliten (durch \bar{U} unbeeinflusst) dabei in durchgezogenen Linien gezeigt. Die nichtdiagonalen Satelliten ($\sigma, -\sigma$) sind aufwärts verschoben und als Einfügung dargestellt, jedoch in Position und Höhe unverändert.

Die beiden Intraband-Satelliten [Abb. 3.7.a] erscheinen wie in den ($n = 0$)-AP-Spektren durch einen Energiebetrag von etwa $2\Delta T_0$ getrennt.

Weitere Satelliten gehören zu den Interband-Wechselwirkungen \bar{U} und J . Jeder dieser (m, m')-Peaks gehört zu einem intraatomar gebundenen Zwei-Loch-Zustand, wobei ein Loch aus dem Subband m , der andere AE-Partner dagegen aus dem m' -ten Subband stammt. Zum bandartigen Spektrum tragen dagegen Löcher bei, die unmittelbar, nachdem sie lokal angeregt worden sind, unabhängig voneinander über verschiedene Gitterplätze propagieren. Weil Satelliten fast das gesamte spektrale Gewicht mit sich führen, ist der Einfluss direkter Korrelationen vor allem an diesen auszumachen. Demgegenüber ist das Verhalten des Bandparts vernachlässigbar, dessen Intensität bis auf einen kleinen Rest zusammenfällt.

Die direkte Interband-Intensität, Glg. (3.2.6), wird Löchern mit parallelen Spins aus unterschiedlichen Teilbändern zugeordnet. Die wirksame Kopplung ist $(\bar{U} - J/2)$ und verursacht einen Satelliten, wenn ihr Betrag hinreichend groß ist.

Bei der nichtdiagonalen Linienform $I_{AES}^{(\sigma, -\sigma)}$ haben die beiden AE-Teilchen aus den unterschiedlichen Teilbändern entgegengesetzte Spins, daher gilt ($J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \neq 0$). Es können sogar zwei Satelliten entstehen, abhängig davon, ob bei der gebundenen Lochpaar-Anregung die Spins ausgetauscht werden oder nicht [Spin-Flip-Satellit: $(\bar{U} + 3J/2)$, Ising-Satellit: $(\bar{U} - J/2)$]. Zwischen beiden besteht ein energetischer Abstand von ungefähr $2J$, wobei der Spin-Flip-Peak niedriger liegt, weil die verallgemeinerten Coulombmatrixelemente im Vergleich zu den ($n = 0$)-AP-Spektren das umgekehrte Vorzeichen tragen.

Ebenso wie im APS-Fall, so fallen auch hier der Ising- und der Diagonal-Satellit exakt zusammen. Die Abb. 3.7.a veranschaulicht die \bar{U} -Abhängigkeit der gesamten AE-Intensität, Glg. (3.2.11), wenn die Interband-Austauschkopplung J bei 0.175 eV liegt und auch alle anderen Parameter konstant sind. Die Interband-Satelliten bewegen sich mit steigendem \bar{U} vom bandartigen Spektrum fort und gewinnen dabei an spektralem Gewicht. Die mit durchgezogenen Linien dargestellten Intraband-Satelliten werden durch \bar{U} natürlich nicht beeinflusst, sondern nur von U . Auch der Abstand zwischen den beiden Interband-Austauschpeaks zeigt keine merkliche \bar{U} -Abhängigkeit, wie an der Einfügung in Abb. 3.7.a zu erkennen ist.

In der Abb. 3.7.b ist die Entstehung eines (σ, σ) -Interband-Satelliten zu beobachten. Bei $\bar{U} = 0.1eV$ findet man erneut die Situation vor, daß die wirksame Interband-Kopplung $\bar{U} - J/2$ beinahe verschwindet und so $I_{AES}^{(\sigma, \sigma)}$ der einfachen Selbstfaltung noch sehr nahe kommt. Steigendes \bar{U} dagegen deformiert die Linienform, gezeigt im Teil (a), und ab $\bar{U} \approx 1.3eV$ spaltet der direkte (1,2)-Interband-Satellit ab. Im Teil (b) der Abb. 3.7.b ist seine Verlagerung mit wachsendem \bar{U} zu niedrigen Energien hin zu erkennen.

Der kritische Wert von \bar{U} , oberhalb dessen der Satellit als eigenständige Struktur anzusehen ist, ist etwa zweimal so hoch, wie beim entsprechenden AP-Spektrum in Abb. 3.5.h. Diese nicht strenge Äquivalenz zwischen den Resultaten für volle und leere Bänder ist den asymmetrischen BDOS' zuzuschreiben, die eine genaue Teilchen-Loch-Symmetrie verhindern.

Abb. 3.7.c läßt die \bar{U} -Abhängigkeit der nichtdiagonalen Interband-Intensität $I_{AES}^{(\sigma, -\sigma)}$ erkennen. Wählt man $2J < W_{0m} + W_{0m'}$ und kleine Werte von \bar{U} , so besteht das Spektrum ausschließlich aus der bandartigen Linienform. Übersteigt \bar{U} etwa 1 eV, erscheint zunächst der einem Spin-Flip-Prozeß zuzuordnende Satellit. Der Ising-Peak stellt sich erst ab einem höheren \bar{U} -Wert ($\bar{U} \geq 1.4eV$) ein. Wegen $J = 0.175eV$ befinden sich beide Peaks auf der niederenergetischen Seite des Bandspektrums.

Abschließend sei die J -Abhängigkeit des Interband-Beitrag zur exakten AES-Gesamtlinienform demonstriert.

Abbildung 3.7.d zeigt für die diagonale Interband-Intensität den Gegenspieler-Charakter der Coulombgrößen \bar{U} und J . Es gibt erneut große Ähnlichkeiten zu den AP-Spektren in Abb. 3.5.j. Weil J in die wirksame Kopplung $(\bar{U} - J/2)$ negativ eingeht, wird der (σ, σ) -Interband-Satellit mit steigendem J von der linken Seite her ins Bandspektrum „hineingetrieben“ und „durchwandert“ es gewissermaßen, bis dieser auf der hochenergetischen Seite wieder erscheint. Das ist bei etwa $J \geq 2.5eV$ der Fall. Die Parameter U und \bar{U} sind festgehalten, ebenfalls die anderen Grundgrößen, wie sie aus Abb. 3.5.a ersichtlich sind.

Der zweite Effekt von J ist die Vergrößerung des Gaps zwischen den beiden $(\sigma, -\sigma)$ -Satelliten. Der Nicht-Spin-Flip-Peak (Ising-Satellit) koinzidiert mit dem bereits in Abb. 3.7.d gezeigten (σ, σ) -Satelliten und verlagert sich mit J zu größeren Energien. Die Bewegung des Spin-Flip-Peaks ist dem entgegengesetzt. Wenn J einen gewissen Wert übersteigt, ($J \geq 2.5eV$), geschieht es sogar, daß der Ising- und der Spin-Flip-Satellit auf *verschiedenen* Seiten des Bandspektrums erscheinen.

Die hierzu erforderliche Parameterkonstellation $(U, \bar{U}) = (2, 0.8)eV$, $J \geq 2.5eV$ mag unrealistisch sein, zumindest, was die beiden Austauschkopplungen betrifft ($J > \bar{U}$). Aber an dieser Stelle, wo es um exakte Aussagen geht, ist die Frage nach einer angemessenen

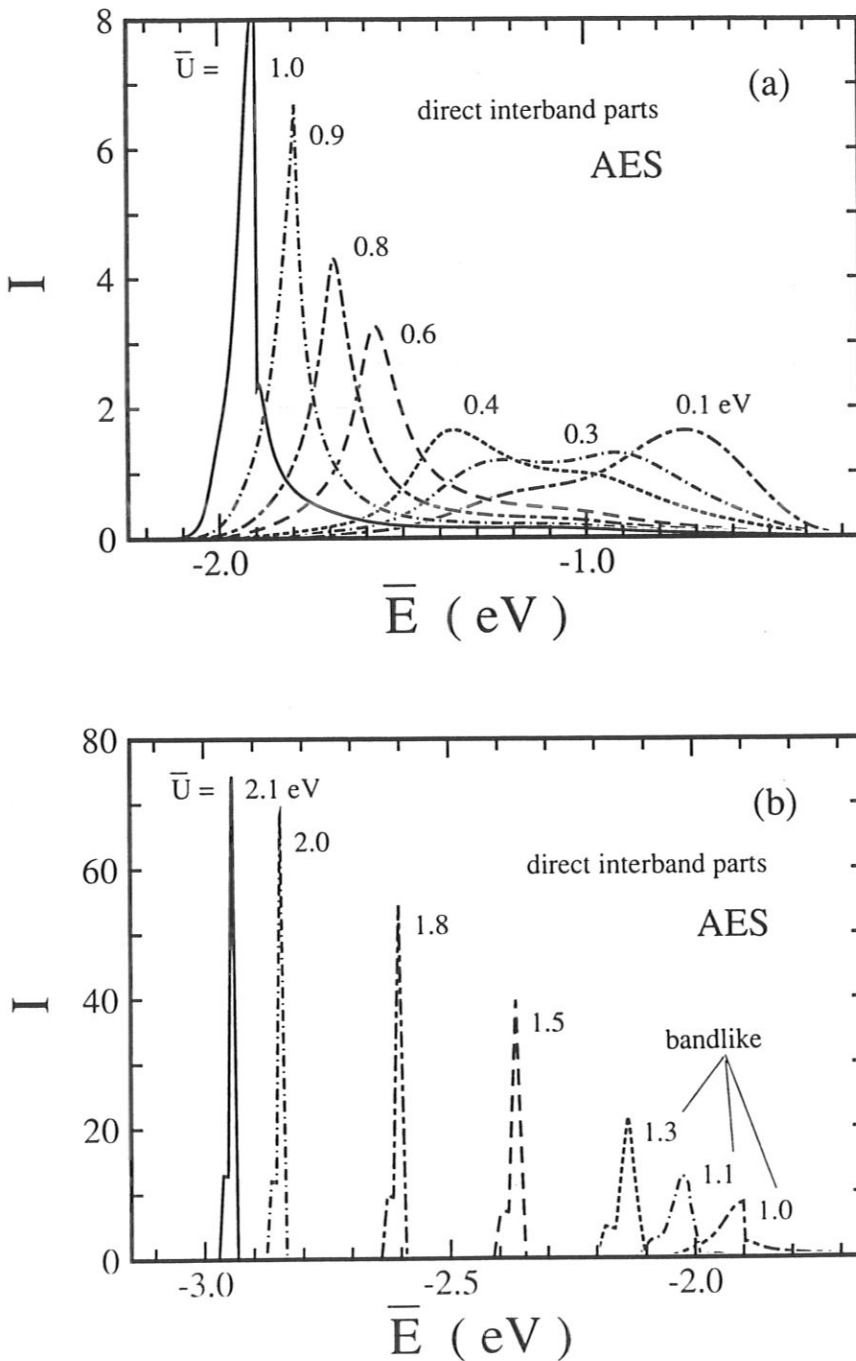


Abbildung 3.7.b: Diagonale Interband-AE-Intensität des voll besetzten Zweiband-Systems als Funktion der Energie, und zwar für verschiedene Werte von \bar{U} . Die übrigen Parameter bleiben fest: $U = 2\text{eV}$, $J = 0.175\text{eV}$. (a): Die Bandspektren bei schwacher, direkter Interband-Kopplung. (b): Für $\bar{U} > 1.3\text{eV}$ spaltet der Diagonalsatellit ab. Dabei verkleinert sich der bandartige Teil soweit, daß er auf der hier verwendeten Skala nicht mehr erkennbar ist.

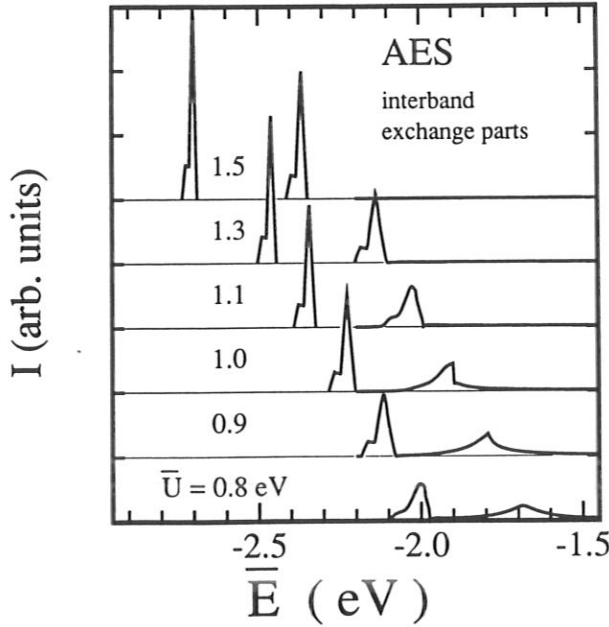


Abbildung 3.7.c: Nichtdiagonale AE-Intensität $I_{AES}^{(\sigma,-\sigma)}$ des voll besetzten Zweiband-Systems ($n = 4$) als Funktion der Energie $\bar{E} = E - (U + 2(d - 1)\bar{U})$ bei verschiedenen Werten der Interband-Kopplung \bar{U} . Neben $U = 2\text{eV}$ und $J = 0.175\text{eV}$ sind auch alle übrigen Parameter festgehalten.

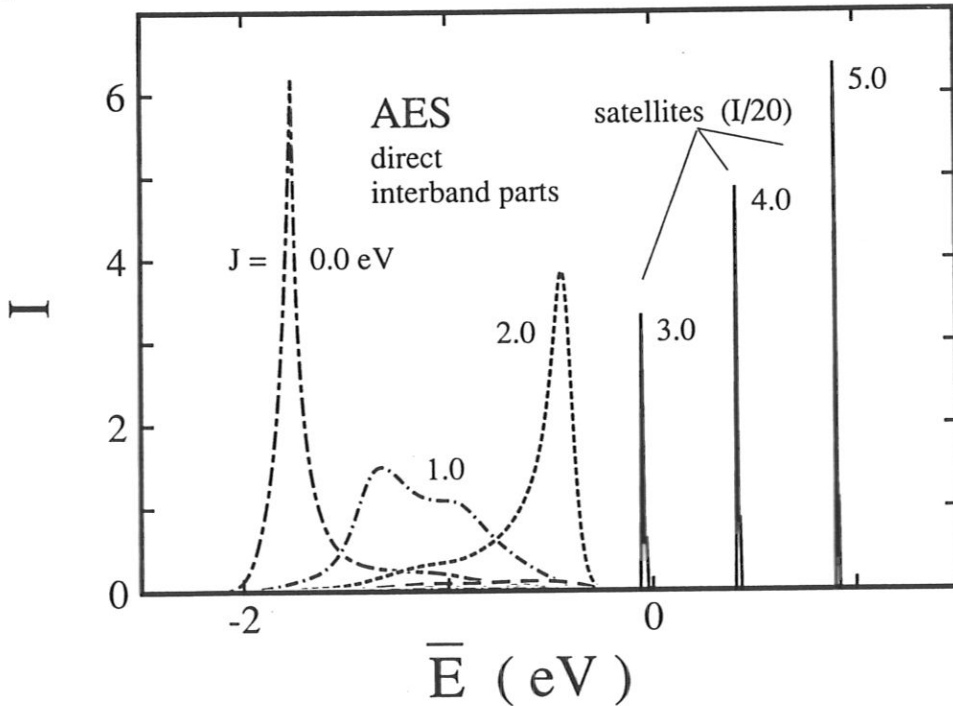


Abbildung 3.7.d: Diagonale AE-Intensität des besetzten Zweiband-Systems ($n = 4$) als Funktion der Energie $\bar{E} = E - (U + (2(d - 1)\bar{U})$ bei verschiedenen Werten der Interband-Austauschwechselwirkung J . Die übrigen Parameter sind auf $U = 2\text{eV}$, $\bar{U} = 0.8\text{eV}$ und gemäß Abb. 3.5.a festgelegt worden.

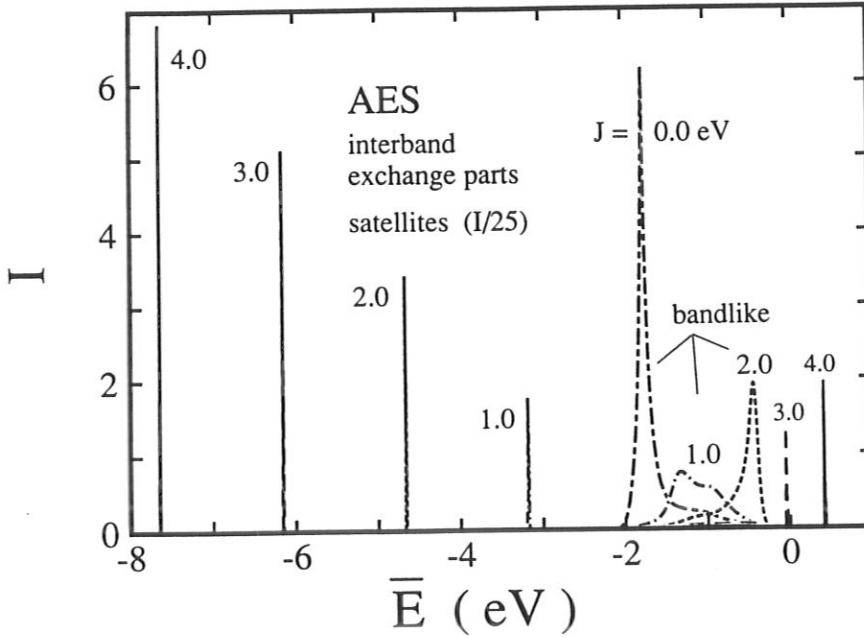


Abbildung 3.7.e: Nichtdiagonale Interband-AE-Intensität $I_{AES}^{(\sigma,-\sigma)}$ des voll besetzten Zweiband-Systems ($n = 4$) als Funktion der verschobenen Energie $\bar{E} = E - (U + 2(d-1)\bar{U})$ für verschiedene Werte der Interband-Austauschkopplung J . Parameter: $U = 2\text{eV}$ und $\bar{U} = 0.8\text{eV}$. Alle gezeigten Satelliten sind um das 25-fache gestaucht.

Festlegung der Modellgrößen auch nicht relevant. Vielmehr sind die Ergebnisse ein Beleg für die unvernachlässigbare Bedeutung elektronischer Korrelationen in den Zweiteilchenspektren. Man kann natürlich auch exakte (AE-)AP-Signale berechnen, die aus mehr als nur zwei vollen bzw. leeren Teilbändern bestehen, doch würde zu den bisher erbrachten Befunden nichts wesentlich Neues hinzukommen. Bei sehr schwachen Kopplungen würde sich das Spektrum nur aus einem relativ formlosen, breiten Bandpart zusammensetzen. Größere Kopplungsstärken jedoch würden dieses deformieren und zuletzt die Abspaltung etlicher Satelliten provozieren. Jedes Teilband m , ($m = 1, \dots, d$) ist in der Lage, abhängig von U/W_{0m} einen Intraband-Satelliten hervorzubringen. Jedes Paar Teilbänder ((m, m') , $m \neq m'$) kann darüber hinaus drei Interband-Satelliten erzeugen, wenn $(\bar{U} - J/2)/W_{0m}$ und $(\bar{U} + 3J/2)/W_{0m}$ kritische Beträge überschreiten. Einer der Interband-Peaks erscheint dann, wenn die beiden angeregten Löcher oder Elektronen parallele Spins haben, die beiden anderen findet man im Falle antiparalleler Spinstellung. Der sog. Ising-Satellit (ohne Spin-Flip) fällt dabei stets mit dem direkten Interband-Satelliten zusammen. Beide haben die Kopplung $\bar{U} - J/2$.

Es erscheint aber fraglich, ob die Vielfalt an Strukturen, welche hier gezeigt wurde, in einem Experiment tatsächlich beobachtbar ist, denn die unvermeidbare Faltung der „Rohspektren“ mit der Apparatefunktion muß zu einem drastischen Ausschmieren aller Linienformen führen, so daß z.B. die charakteristischen Unterschiede zwischen Satellit und Bandpart weitgehend verwischt werden. Dies wird im Laufe des nächsten Kapitels an einem Beispiel demonstriert.

Kapitel 4

Das magnetische Multiband-System

Der teilweise gefüllte Valenzbandkomplex, der mit in der Natur vorkommenden Magnetika gegeben ist, erfordert für das Studium des Zusammenhanges zwischen kollektiver Ordnung und der Spinunterscheidbarkeit der Zweiteilchen-Spektren die simultane Berücksichtigung direkter und indirekter Korrelationen. Das grundsätzliche Verfahren zur Berechnung der Zweiteilchen-Spektraldichte wird durch die Tatsache der Kopplung der Teilbänder zwar nicht geändert, jedoch in allen Stufen verkompliziert [92].

4.1 Die Multiband-Zweiteilchen-Spektraldichte

Die fundamentale Größe der AES- und APS-Theorie läßt sich durch eine ähnliche Vertexkorrekturmethode berechnen, die in Abschnitt 2.4 [83] zur Anwendung gekommen ist. Der Ausgangspunkt ist der Zusammenhang zwischen der eigentlich interessierenden Zweiteilchen-Spektralfunktion und der retardierten Greenfunktion $G_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E + i0^+)$:

$$A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{q}} \Im \left\{ G_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E + i0^+) \right\}. \quad (4.1.1)$$

Da man mit Temperatureffekten zu rechnen hat, wird zunächst die Zweiteilchen-Matsubara-funktion $\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0)$,

$$\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0 \tau\right) \left\langle c_{\mathbf{k}m'\sigma'}(\tau) c_{\mathbf{q}-\mathbf{k}m\sigma}(\tau) c_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}^{\dagger}(0) c_{\mathbf{p}m'\sigma'}^{\dagger}(0) \right\rangle, \quad (4.1.2)$$

diagrammatisch entwickelt. Alle Operatoren stehen in ihrer modifizierten Heisenberg-Darstellung, Glg. (2.4.4).

Das charakteristische, allgemeine Diagramm von $\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0)$ in Abb. 4.1.a trägt an seinen festgehaltenen vier äußeren Linien und zwei äußeren Vertexpunkten im Unterschied zur Abb. 2.4.a zusätzlich Band- und Spinindizes. Antiparallelität der Spins wird nicht mehr verlangt, denn die beiden lokal angeregten Teilchen dürfen verschiedenen Teilbändern

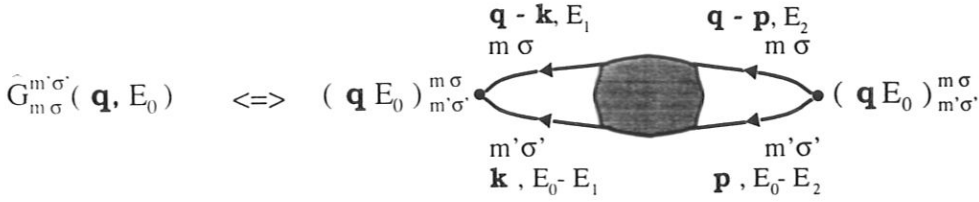


Abbildung 4.1.a: Allgemeines Diagramm der Zweiteilchen-Matsubarafunktion für das Zweiband-System.

angehören. $E_0(E_{1,2})$ sind die bereits aus Glg. (2.4.5) bzw. (2.4.6) bekannten Bosonen- bzw. Fermionen-Matsubaraenergien.

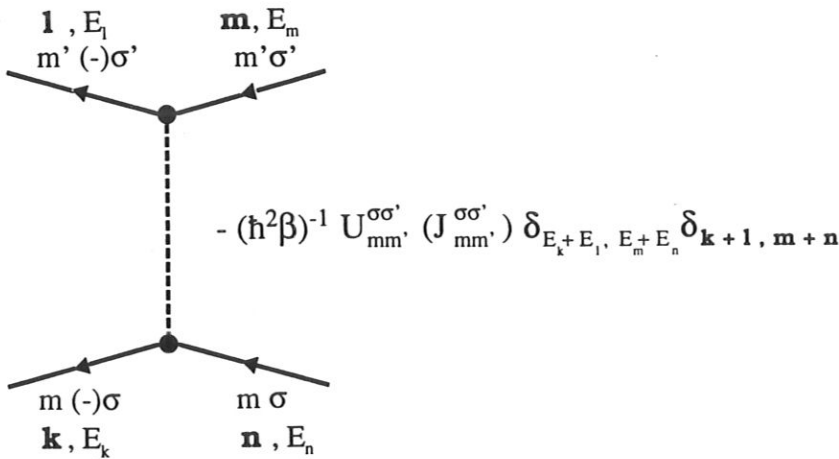


Abbildung 4.1.b: Das allgemeine Multiband-Vertezdiagramm.

Das Diagramm n -ter Ordnung besteht aus n Vertizes (gestrichelte Linien) und $2n + 2$ Ein- teilchenpropagatoren (durchgezogene Linien). Die Regeln für deren Übersetzung in konkrete Funktionen in Abhängigkeit von Energie und Wellenvektor sind aufgrund der Indizierungen nach Band und Spin nunmehr abgewandelt [63, 78]:

(1) Jeder Vertex erhält den Faktor

$$-\frac{1}{\hbar^2 \beta} U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \quad \text{oder} \quad -\frac{1}{\hbar^2 \beta} J_{mm'}^{\sigma\sigma'} ;$$

es gelten Energie- und Impulserhaltung. Die verallgemeinerten Coulombmatrixelemente $U_{mm'}^{\sigma\sigma'}$ bzw. $J_{mm'}^{\sigma\sigma'}$ sind in Glg. (3.4.24) bzw. (3.4.25) definiert. Am jeweiligen Vertex- punkt wirkt $U_{mm'}^{\sigma\sigma'}$ spinerhaltend, während ihn dagegen $J_{mm'}^{\sigma\sigma'}$ gerade umkehrt, was man aus der Definition (3.4.25) ersehen kann. Alle inneren Energien (E_k, E_l, \dots) sind Fermionen- Matsubaraenergien.

(2) Propagatoren bedeuten „freie“ Einteilchen-Matsubarafunktionen:

$$\left(\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}\right)^{(0)}\left(\mathbf{k}_i E_{\mathbf{k}_i}\right)=\hbar \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'}\left(i E_{\mathbf{k}_i}-\varepsilon_m\left(\mathbf{k}_i\right)+\mu\right)^{-1} . \quad (4.1.3)$$

Dieser Ausdruck ist mit einem zusätzlichen Faktor $\exp\left(\frac{i}{\hbar} E_{\mathbf{k}_i} 0^+\right)$ zu versehen, falls der Propagator an dem selben Vertex beginnt und endet.

(3) Über alle inneren Wellenvektoren und Energien $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}, \mathbf{p}, E_{\mathbf{k}_i}, E_1, E_2$ ist zu summieren, nicht jedoch über \mathbf{q} und E_0 .

(4) Die Anzahl S geschlossener Schleifen ist durch einen Faktor $\frac{(-1)^S}{N\hbar\beta}$ zu berücksichtigen. Am allgemeinen $\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}$ -Diagramm läßt sich der Abb. 2.4.d analog eine Vertexfunktion definieren; an Abb. 4.1.c erkennt man, daß festen, externen Punkte sowohl Spin- als auch Bandindizes tragen.

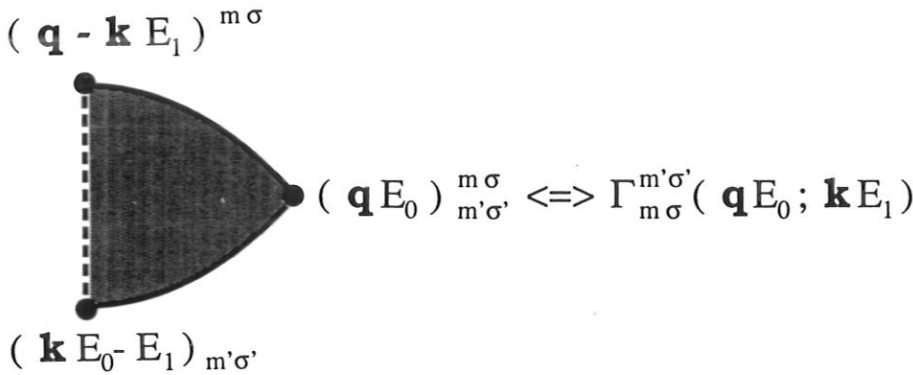


Abbildung 4.1.c: Die Vertexfunktion Γ (ohne Spin-Flip).

Man approximiert die Zweiteilchen-Matsubarafunktion parallel zur Vorgehensweise in Abschnitt 2.4. Die Vertexfunktion denkt man sich in eine unendliche, aus irreduziblen Vertexparts bestehende Teilreihe zerlegt, was bedeutet, daß sich von keinem der Summanden ein Selbstenergiendiagramm einer Einteilchen-Matsubarafunktion abspalten läßt, s. Abb. 2.4.c. Die direkten Korrelationen aufgrund der Intra- und Interband-Wechselwirkungen werden mit dieser Methode exakt berücksichtigt. Um auch den für Kollektivphänomene verantwortlichen indirekten Korrelationen Rechnung zu tragen, modifiziert man die Diagrammentwicklung durch das Ersetzen freier durch angekleidete Einteilchen-Propagatoren. Die Darstellung der gesuchten Funktion $\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0)$ zeigt die Abb. 4.1.d. Ihre „Übersetzung“ lautet:

$$\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q} E_0)=\frac{1}{\hbar\beta N} \sum_{\mathbf{k}, E_1} \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k} m\sigma}^{(1)}\left(E_1\right) \hat{G}_{\mathbf{k} m'\sigma'}^{(1)}\left(E_0-E_1\right) \Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}\left(\mathbf{q} E_0 ; \mathbf{k} E_1\right) . \quad (4.1.4)$$

$\hat{G}^{(1)}$ ist die angekleidete Einteilchen-Matsubarafunktion, die die Information über die kollektive Ordnung enthält. Die Einteilchen-Selbstenergie ist noch an gegebener Stelle näherungsweise zu berechnen.

Wegen der Prozesse, bei denen sich der Spin an einem Vertexpunkt umkehrt, wird man neben der in Glg. (4.1.4) auftretenden Vertexfunktion auch die in der Abb. 4.1.e diagrammatisch dargestellte Größe $\tilde{\Gamma}_{m-\sigma}^{m'\sigma'}\left(\mathbf{q} E_0 ; \mathbf{k} E_1\right)$ zu berechnen haben. Dies geschieht in beiden

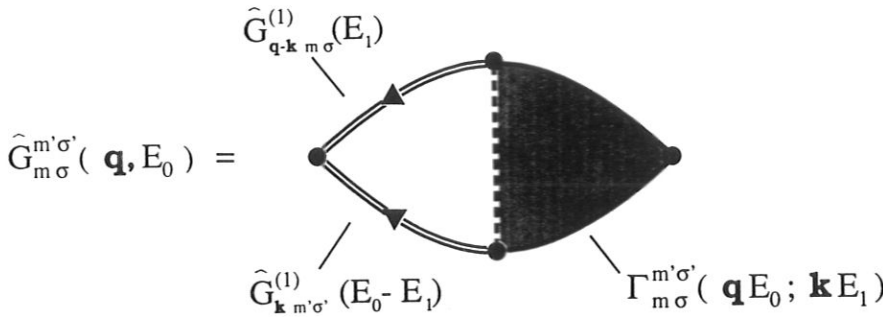


Abbildung 4.1.d: Diagrammatische Darstellung der Zweiteilchen-Matsubarafunktion mit Hilfe der Vertexfunktion und zweier angekleideter Einteilchen-Matsubarafunktionen.

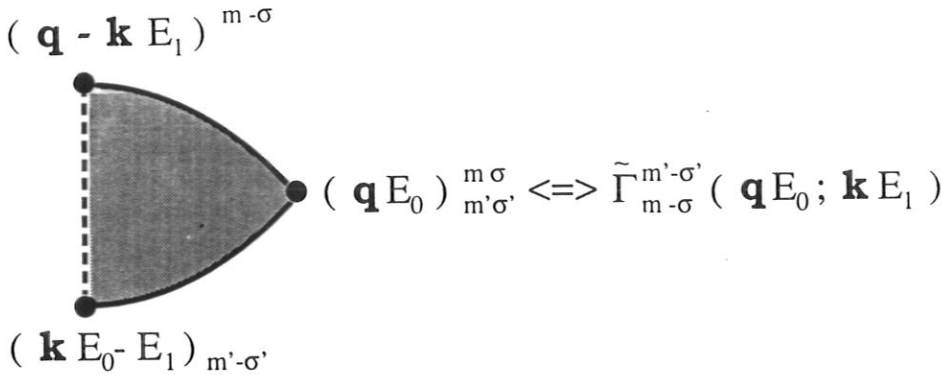


Abbildung 4.1.e: Die Vertexfunktion $\tilde{\Gamma}$ (mit Spin-Flip).

Fällen mit Hilfe der modifizierten Leiterapproximation, welche man im Abschnitt 2.4 erläutert findet. Die Abb. 4.1.f zeigt diese geometrische Zerlegung an der Vertexfunktion ohne das Umklappen der Spins.

Die algebraische Übersetzung lautet:

$$\Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(qE_0; kE_1) = \tag{4.1.5}$$

$$1 + \left(-\frac{1}{\hbar^2\beta} U_{mm'}^{\sigma\sigma'}\right) \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \hat{G}_{\mathbf{p}m'\sigma'}^{(1)}(E_0 - E_2) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}^{(1)}(E_2) \Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(qE_0; \mathbf{p}E_2) +$$

$$1 + \left(-\frac{1}{\hbar^2\beta} J_{mm'}^{\sigma\sigma'}\right) \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \hat{G}_{\mathbf{p}m'-\sigma'}^{(1)}(E_0 - E_2) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m-\sigma}^{(1)}(E_2) \tilde{\Gamma}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(qE_0; \mathbf{p}E_2).$$

In gleicher Weise erhält man den Ausdruck für die Vertexfunktion mit Spin-Flip, den Abb. 4.1.g zeigt:

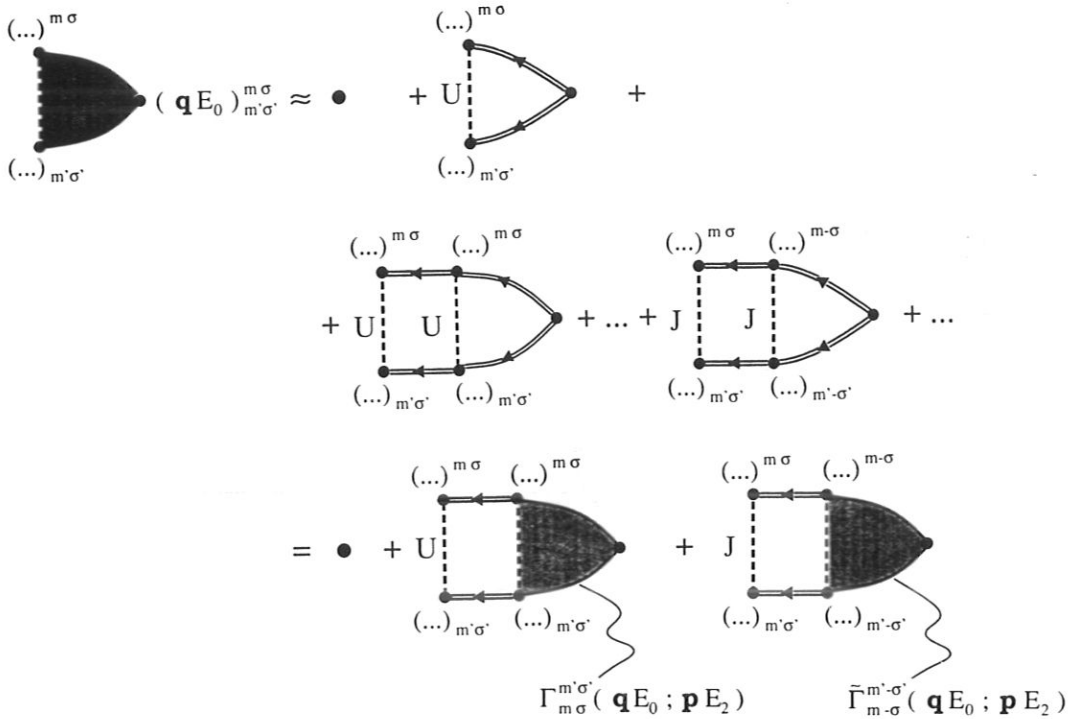


Abbildung 4.1.f: Die modifizierte Leiterapproximation an der Vertexfunktion Γ .

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1) = & \quad (4.1.6) \\ & \left(-\frac{1}{\hbar^2\beta}J_{mm'}^{\sigma\sigma'}\right) \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \hat{G}_{\mathbf{p}m'\sigma'}^{(1)}(E_0 - E_2) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}^{(1)}(E_2) \Gamma_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{p}E_2) + \\ & \left(-\frac{1}{\hbar^2\beta}U_{mm'}^{\sigma\sigma'}\right) \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \hat{G}_{\mathbf{p}m'\sigma'}^{(1)}(E_0 - E_2) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m-\sigma}^{(1)}(E_2) \Gamma_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{p}E_2). \end{aligned}$$

Offensichtlich sind beide Vertexfunktionen nicht $(\mathbf{k}E_1)$ -abhängig, wie man an den rechten Seiten der Gln. (4.1.5) und (4.1.6) erkennt:

$$\begin{aligned} \Gamma_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1) & \Rightarrow \Gamma_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0), \\ \tilde{\Gamma}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0; \mathbf{k}E_1) & \Rightarrow \tilde{\Gamma}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0). \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

Dies vereinfacht die Beziehungen (4.1.5) und (4.1.6) noch erheblich. Ähnlich wie in Glg. (2.4.10) führt man einen Polarisationspropagator ein, der im Mehrband-System von Band und Spin abhängt und den Abb. 4.1.h diagrammatisch darstellt.

$$\hat{\Lambda}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}, E_0) = -\frac{1}{\hbar^2\beta} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \hat{G}_{\mathbf{p}m'\sigma'}^{(1)}(E_0 - E_2) \hat{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}^{(1)}(E_2). \quad (4.1.8)$$

Man beachte auch hier, daß im Vergleich mit der Abb. 2.4.g an die Stelle spinantiparalleler Teilchen (Löcher) die allgemeinere Forderung (3.2.1) getreten ist. Mit Glg. (4.1.8) lassen sich (4.1.5) und (4.1.6) einfacher formulieren:

$$\Gamma_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0) \cdot \left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}, E_0)\right] = 1 + J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}, E_0) \cdot \tilde{\Gamma}_{m'\sigma}^{m\sigma}(\mathbf{q}E_0), \quad (4.1.9)$$

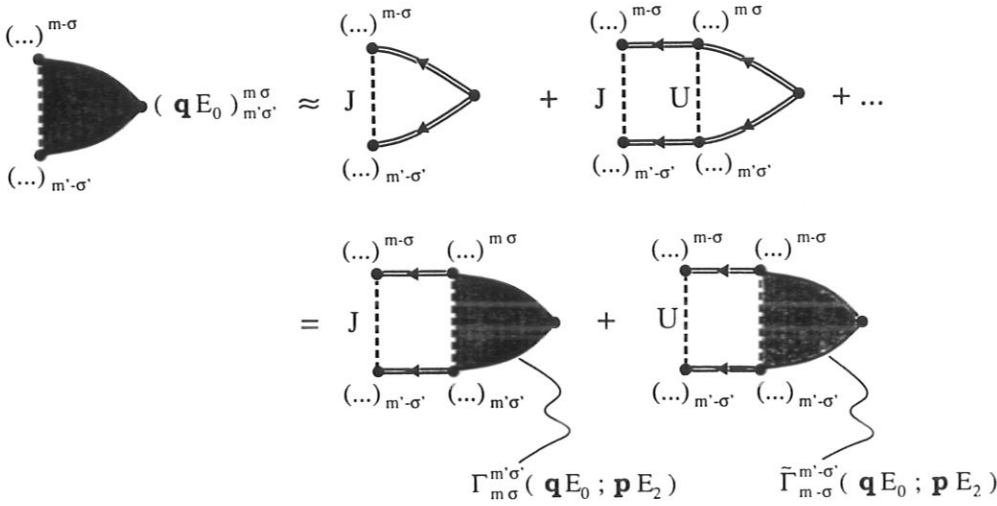


Abbildung 4.1.g: Die modifizierte Leiterapproximation an der Spin-Flip-Vertexfunktion $\tilde{\Gamma}$.

$$\tilde{\Gamma}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(\mathbf{q}E_0) \cdot \left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \right] = J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \cdot \hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \cdot \Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}E_0). \quad (4.1.10)$$

Die Darstellung der Zweiteilchen-Matsubarafunktion in der Glg. (4.1.4) ist mit dem Gleichungssystem (4.1.9) und (4.1.10) in $\Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}$ und $\tilde{\Gamma}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}$ vollständig. Man löst die beiden letzten Relationen nach $\Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}E_0)$ auf und setzt das Resultat in Glg. (4.1.4) ein. Das ergibt:

$$\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) = \hbar \hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \cdot \Gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) = \frac{\hbar \left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \right] \hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0)}{\left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \right] \cdot \left[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{\Lambda}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) \right] - (J_{mm'}^{\sigma\sigma'})^2 \left(\hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'} \hat{\Lambda}_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)(\mathbf{q}, E_0)}. \quad (4.1.11)$$

Im letzten Schritt der Aufgabe, die Zweiteilchen-Spektraldichte zu ermitteln, hat man den Polarisationspropagator mit Hilfe von Einteilchengrößen auszudrücken. Man benutzt den Zusammenhang zwischen der Einteilchen-Matsubarafunktion und der Eielektronen-Spektraldichte:

$$\hat{G}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{A_{\mathbf{k},\sigma}(E')}{iE_1 - E'}. \quad (4.1.12)$$

Das wird in Glg. (4.1.8) ausgenutzt und führt auf:

$$\hat{\Lambda}_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E_0) = -\frac{1}{\hbar^2 \beta N} \sum_{\mathbf{p}, E_2} \iint_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{A_{\mathbf{p}m'\sigma'}(E') A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}(E'')}{[i(E_0 - E_2) - E'] [iE_2 - E'']}. \quad (4.1.13)$$

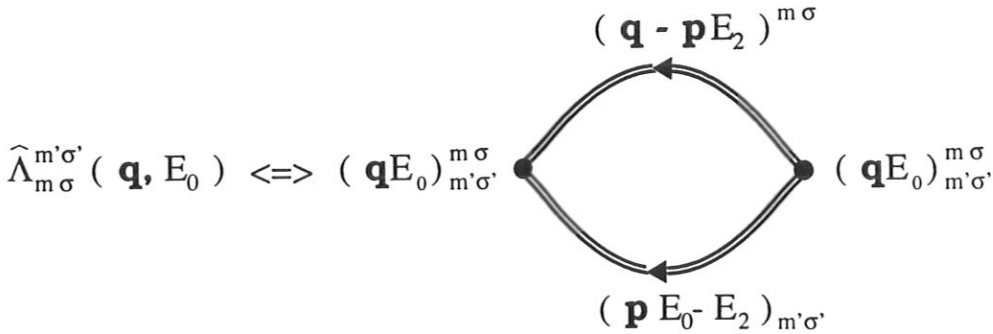


Abbildung 4.1.h: Der Spin- und Band-abhängige Polarisationspropagator, Glg. (4.1.8).

Für die Summation über die Matsubaraenergien wendet man (2.4.17) und den Residuensatz an [14] und erhält nach der Transformation in die retardierten Funktionen als Zwischenergebnis:

$$\Lambda_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E - 2\mu) = \frac{1}{\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{A_{\mathbf{p}m'\sigma'}(E' - 2\mu) A_{\mathbf{q}-\mathbf{p}m\sigma}(E'' - 2\mu)}{E - E' - E'' + i0^+} (1 - f_-(E') - f_-(E'')). \quad (4.1.14)$$

Um sich nicht an kristallspezifische Besonderheiten zu binden, was aber kein ernstzunehmendes Hindernis für die Auswertung der Theorie bedeuten würde, nimmt man die Summation über \mathbf{p} in (4.1.14) mit Hilfe der tight-binding-Näherung in Angriff; parallel zu der mit den Beziehungen (2.4.25) – (2.4.31) durchgeführten Prozedur erhält man für den Polarisationspropagator:

$$\Lambda_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E - 2\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' (1 - f_-(E') - f_-(E'')) \cdot \left[1 + (\varepsilon_m(\mathbf{q}) - T_{0m}) \gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(E', E'') \right] \frac{\rho_{m'\sigma'}(E') \rho_{m\sigma}(E'')}{E - E' - E'' + i0^+}. \quad (4.1.15)$$

$\rho_{m\sigma}(E)$ ist die vom Bandindex abhängige QDOS:

$$\rho_{m\sigma}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}m\sigma}(E - \mu). \quad (4.1.16)$$

Die Funktion $\gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(x, y)$ ist wie folgt definiert:

$$\gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(x, y) = \alpha^* (x - \Sigma_{m'\sigma'}(x) - T_{0m'}) (y - \Sigma_{m\sigma}(y) - T_{0m}); \quad (4.1.17)$$

Der wichtige Korrekturfaktor α^* ist bereits für das nicht entartete System im zweiten Kapitel diskutiert worden, er wird an die aus den Glgn. (3.3.9) und (3.3.11) zusammengesetzte exakte Summenregel angepaßt:

$$\sum_{\sigma} \left[Y_{APS}^{(\sigma)} - Y_{AES}^{(\sigma)} \right] \stackrel{!}{=} (4d - 2)(d - n). \quad (4.1.18)$$

Die Vernachlässigung der höheren Terme aus modifizierten Zustandsdichten, s. Glg. (2.4.26), wird dadurch kompensiert.

$\Sigma_{m\sigma}(E)$ ist die Selbstenergie eines (m, σ) -Elektrons, welche sich im Rahmen der Momentenmethode unter der Voraussetzung vernachlässigter Quasiteilchen-Dämpfung als reell und vom Wellenvektor unabhängig herausstellt. Man findet auch, daß die Wellenvektor-Abhängigkeit des Polarisationspropagators ausschließlich in den Blochenergien $\varepsilon_m(\mathbf{q})$ steckt:

$$\Lambda_{m\sigma}^{m'\sigma'}(\mathbf{q}, E - 2\mu) = \Lambda_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z = \varepsilon_m(\mathbf{q}), E - 2\mu); \quad (4.1.19)$$

daher lassen sich mit Hilfe der freien BDOS alle dreidimensionalen \mathbf{q} -Summationen durch eindimensionale Integrationen über die Energie ersetzen [92]. Man zerlegt die Zweiteilchen-Greenfunktion Λ in ihren Real- und Imaginärteil:

$$\Lambda_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E - 2\mu) = H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E) + iN_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E). \quad (4.1.20)$$

Aufgrund der Dirac'schen Identität läßt sich $N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E)$ direkt der Gleichung (4.1.15) entnehmen, man erhält:

$$N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E) = \pi \left[\left(D_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_0(E) + (z - T_{0m}) \left(D_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \right]. \quad (4.1.21)$$

$H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E)$ gewinnt man mit Hilfe der Kramers-Kronig-Relation:

$$\begin{aligned} H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E) &= -\frac{1}{\pi} \mathbf{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E')}{E - E'} \\ &= - \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_0(E) + (z - T_{0m}) \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \right]. \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

Die Funktionen $(F_{m\sigma}^{m'\sigma'})_{0,1}(E)$ sind die Hilberttransformierten der Faltungsintegrale $(D_{m\sigma}^{m'\sigma'})_{0,1}(E)$:

$$\begin{aligned} \left(D_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_0(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{m\sigma}(x) \rho_{m'\sigma'}(E - x) (1 - f_-(x) - f_-(E - x)), \\ \left(D_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{m\sigma}(x) \rho_{m'\sigma'}(E - x) \gamma_{m\sigma}^{m'\sigma'}(x, E - x) \cdot (1 - f_-(x) - f_-(E - x)). \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

Setzt man die Gln. (4.1.19) - (4.1.23) in (4.1.11) bzw. (4.1.1) ein, so hat man die partiellen Zweielektronen-Spektraldichten $K_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu)$ festgelegt und erhält das der Glg. (3.4.33) ähnelnde numerisch auswertbare Ergebnis:

$$K_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_{0m}(z) \frac{A_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) + B_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z)}{[C_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z)]^2 + [D_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z)]^2}. \quad (4.1.24)$$

Mit A, B, C und D wurden folgende Ausdrücke abgekürzt:

$$\begin{aligned} A_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= N_{mm'}^{m'\sigma'}(z; E) \\ &\left[U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left(\left(N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right)^2 + \left(H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right)^2 \right) + 1 - 2U_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 \left[\left(N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) \right)^2 + \left(H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) \right)^2 \right], \\
C_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= 1 - 2U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \cdot \left[H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) + H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right] + \\
&\quad \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} \cdot \left[H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) - N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right], \\
D_{mm'}^{\sigma\sigma'}(E; z) &= N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) \left[U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \right] + \\
&\quad N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E) \left[U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E) \right], \\
\kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} &= \left(U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 - \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2. \tag{4.1.25}
\end{aligned}$$

Sie reproduzieren der Reihe nach alle mit (3.4.34) aufgelisteten Definitionen und das Resultat (3.4.33) im Grenzfall voller bzw. leerer Bänder.

Zu jeder partiellen Spektraldichte $K_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu)$ benötigt man auch die Faltungen und Hauptwertintegrale der Konfiguration $(mm', -\sigma - \sigma')$. Das vergrößert den Aufwand, die Glg. (4.1.24) im Hinblick auf mögliche Satelliten zu untersuchen, obwohl dazu ausschließlich die Darstellung der δ -Distribution, Glg. (2.4.48), vonnöten ist. Wenn man vom in Abschnitt 3.1 vorgestellten Multiband-Modell ausgeht und eine starke Intraband-Kopplung annimmt, so kann erwarten, daß das m - und σ -abhängige Einquasiteilchen-Spektrum wegen H_U in zwei Quasiteilchen-Subbänder aufgespalten sein wird, deren untere Kanten bei den Energien $E_{1(2)m\sigma}$ liegen und deren Breiten mit $W_{1(2)m\sigma}$ bezeichnet sein sollen. Wegen der Faltungsgrößen $N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z; E)$ bzw. $N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z; E)$ muß der bandartige Bereich der partiellen Spektraldichte $K_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E - 2\mu)$ in den folgenden Energieintervallen liegen, welche teilweise überlappen können:

$$\begin{aligned}
E_{im\sigma} + E_{jm'\sigma'} &\leq E \leq E_{im\sigma} + E_{jm'\sigma'} + W_{im\sigma} + W_{jm'\sigma'}, \\
E_{im-\sigma} + E_{jm'-\sigma'} &\leq E \leq E_{im-\sigma} + E_{jm'-\sigma'} + W_{im-\sigma} + W_{jm'-\sigma'}, \\
(i, j) &= (1, 2). \tag{4.1.26}
\end{aligned}$$

Diese Beziehungen gelten für die Faltung nieder- oder hochenergetischer Quasiteilchen-Subbänder. Für die *gemischten* Kombinationen beachtet man die beiden Bereiche:

$$\begin{aligned}
\min_{\sigma} (E_{1m\sigma} + E_{2m'\sigma'}) &\leq E \leq \max_{\sigma} (E_{1m\sigma} + W_{1m\sigma} + E_{2m\sigma} + W_{2m'\sigma'}), \tag{4.1.27} \\
\min_{\sigma} (E_{1m-\sigma} + E_{2m'-\sigma'}) &\leq E \leq \max_{\sigma} (E_{1m-\sigma} + W_{1m-\sigma} + E_{2m-\sigma} + W_{2m'-\sigma'}).
\end{aligned}$$

Der *Intraband-Satellit* erfordert gleiche Teilbänder und daher antiparallele Spins,

$$\sigma' = -\sigma, \quad m' = m. \tag{4.1.28}$$

Dann ist es nicht von Bedeutung, welches der beiden Funktionale N die Rolle des Kleinheitsparameters ε gemäß Glg. (2.4.48) einnimmt, denn wegen (4.1.28) gilt:

$$N_{m\sigma}^{m-\sigma}(z, E) \equiv N_{m-\sigma}^{m\sigma}(z, E). \tag{4.1.29}$$

Es resultiert die folgende Spektraldichte:

$$A_{im\sigma}^{(S)m-\sigma}(E - 2\mu) = \pm \frac{1}{U^2 |(F_{m\sigma}^{m-\sigma})_1(E)|} \rho_{0m} \left(T_{0m} - \frac{1}{(F_{m\sigma}^{m-\sigma})_1(E)} \left(\frac{1}{U} + (F_{m\sigma}^{m-\sigma})_0(E) \right) \right). \tag{4.1.30}$$

Für AES gilt das negative Vorzeichen. Beim *diagonalen Interband-Satelliten* sind die Spins parallel, daher müssen die Teilbandindizes verschieden sein. Dies wird durch die beiden Konfigurationen

$$(mm', \sigma\sigma), \quad \text{und} \quad (mm', -\sigma - \sigma); \quad m \neq m',$$

gewährleistet. In Glg. (4.1.24) kann daher $N_{m\sigma}^{m'\sigma}(z, E)$ oder $N_{m-\sigma}^{m'-\sigma}(z, E)$ zum Kleinheitsparameter werden. Wenn E außerhalb jedes der mit Glg. (4.1.26) und (4.1.27) genannten Energiebereiche liegt, stellt sich eine der beiden folgenden Situationen ein:

$$\begin{aligned} N_{m\sigma}^{m'\sigma}(z, E_{>,<}) = 0 \quad \wedge \quad N_{m-\sigma}^{m'-\sigma}(z, E) \begin{matrix} E > E > \\ E < E < \end{matrix} \Rightarrow 0, \\ N_{m-\sigma}^{m'-\sigma}(z, E_{>,<}) = 0 \quad \wedge \quad N_{m\sigma}^{m'\sigma}(z, E) \begin{matrix} E > E > \\ E < E < \end{matrix} \Rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.1.31)$$

$E_{>,<}$ kennzeichnet die obere („>“) oder untere („<“) Kante des von $N_{m\pm\sigma}^{m'\pm\sigma}$ stammenden Bandanteils. — Im paramagnetischen System werden die beiden o.g. Konfigurationen vom Spin unabhängig. Dann vereinfachen sich die Gleichungen in (4.1.25) und (4.1.24) auf die aus dem dritten Kapitel bekannte Form, und der diagonale Interband-Satellit des Paramagneten hat genau die gleiche Form, wie der direkte Peak im voll besetzten oder leeren Mehrbandsystem, s. Glg. (3.4.41).

Der *nichtdiagonale Interband-Satellit* besitzt die spinantiparallele Konfiguration:

$$(mm', \sigma\sigma') = (mm', \sigma - \sigma), \quad m \neq m'. \quad (4.1.32)$$

Anstelle von Glg. (4.1.31) gilt:

$$\begin{aligned} N_{m\sigma}^{m'-\sigma}(z, E_{>,<}) = 0 \quad \wedge \quad N_{m-\sigma}^{m'\sigma}(z, E) \begin{matrix} E > E > \\ E < E < \end{matrix} \Rightarrow 0, \\ \text{oder} \quad N_{m-\sigma}^{m'\sigma}(z, E_{>,<}) = 0 \quad \wedge \quad N_{m\sigma}^{m'-\sigma}(z, E) \begin{matrix} E > E > \\ E < E < \end{matrix} \Rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.1.33)$$

Nach einiger Rechnung findet man für diagonale und nichtdiagonale Interband-Satelliten die gleiche Gestalt:

$$A_{i m\sigma}^{(S)m-\sigma}(E - 2\mu) = \pm \sum_{i=1}^2 \alpha_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z_i(E), E) \frac{\rho_{0m}(z_i(E))}{|\Omega_{mm'}^{\sigma\sigma'}(z_i(E), E)|}, \quad (+:\text{APS}, -:\text{AES}). \quad (4.1.34)$$

Es bedeuten:

$$\alpha_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E) = \begin{cases} \frac{[1 - U_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z, E)]^2}{U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m-\sigma}^{m'\sigma'}(z, E)}, & \text{falls} \quad N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z, E_{>,<}) = 0 \\ & \wedge N_{m-\sigma}^{m'\sigma'}(z, E \gtrless E_{>,<}) \Rightarrow 0 \\ \frac{(J_{mm'}^{\sigma\sigma'})^2 (H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E))^2}{U_{mm'}^{\sigma\sigma'} - \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E)}, & \text{falls} \quad N_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E_{>,<}) = 0 \\ & \wedge N_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z, E \gtrless E_{>,<}) \Rightarrow 0 \end{cases}, \quad (4.1.35)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{mm'}^{\sigma\sigma'}(z, E) = & U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) + \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \right] \\ & - \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) H_{m\sigma}^{m'\sigma'}(z, E) + \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) H_{m-\sigma}^{m'-\sigma'}(z, E) \right]. \end{aligned} \quad (4.1.36)$$

$$\begin{aligned}
 z_{1,2}(E) = T_{0m} & - \left[2\kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \right]^{-1} \\
 & \cdot \left[U_{m\sigma}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) + \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \right] \right. \\
 & + \kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_0(E) \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) + \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_0(E) \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \right] \\
 & \mp \left\{ \left[\kappa_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_0(E) - \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_0(E) \right] \right. \right. \\
 & + \left. \left. U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \left[\left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) - \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \right] \right]^2 \right. \\
 & \left. + 4 \left(J_{mm'}^{\sigma\sigma'} \right)^2 \left(F_{m\sigma}^{m'\sigma'} \right)_1(E) \left(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma'} \right)_1(E) \right\}^{1/2}. \quad (4.1.37)
 \end{aligned}$$

Insgesamt sind die Ausdrücke wegen der notwendigen Berücksichtigung der Spinabhängigkeit komplizierter geworden. Es ist jedoch nach wie vor unschwer zu erkennen, daß es beim Interband-Austauschsatelliten zwei Kopplungen, $\bar{U} - J/2$ und $\bar{U} + 3J/2$, gibt. Deshalb hat man zwischen einem Ising- und einem Spin-Flip-Peak zu unterscheiden.

Wenn das System ferromagnetisch ordnet, sind die spindigonale Konfigurationen natürlich nicht äquivalent, so daß der zu diesen gehörende Satellit eine Doppelstruktur besitzen kann. Man findet:

$$\begin{aligned}
 A_{i m\sigma}^{(S)m'\sigma}(E - 2\mu) & = A_1^{(S)}(E - 2\mu) + A_2^{(S)}(E - 2\mu), \\
 A_1^{(S)}(E - 2\mu) & \propto \rho_{0m} \left(T_{0m} - \frac{1}{(\bar{U} - J/2)(F_{m\sigma}^{m'\sigma})_1(E)} - \frac{(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma})_0(E)}{(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma})_1(E)} \right), \\
 A_2^{(S)}(E - 2\mu) & \propto \rho_{0m} \left(T_{0m} - \frac{1}{(\bar{U} - J/2)(F_{m-\sigma}^{m'-\sigma})_1(E)} - \frac{(F_{m\sigma}^{m'\sigma})_0(E)}{(F_{m\sigma}^{m'\sigma})_1(E)} \right). \quad (4.1.38)
 \end{aligned}$$

4.2 Gekoppelte Einquasiteilchen-Zustandsdichten

Die Resultate aus der Modellrechnung am s-Band-Hubbard-System lassen sich nicht auf die magnetischen Eigenschaften eines aus mehreren Teilbändern bestehenden Elektronensystems übertragen. Jeder der in den Gln. (3.1.8) – (3.1.12) definierten Wechselwirkungsoperatoren H_U , H_J und $H_{\bar{U}}$ hat einen bestimmten Einfluß auf das Einquasiteilchen-Spektrum. Die grundlegende Arbeit von Nolting [75] zeigt, daß die Intraband-Wechselwirkung H_U entscheidend dafür ist, daß spontane Magnetisierung überhaupt in Erscheinung tritt. $H_{\bar{U}}$ und H_J sind für die kollektive Ordnung zwar nicht unmittelbar verantwortlich [56, 57], modifizieren aber magnetische Kenndaten, wie weiter unten näher erläutert wird. Der für die Beschreibung des Multiband-Magneten verwendete Hamiltonoperator wird aus (3.1.2) und (3.1.3) zusammengesetzt; mit Hilfe der Fermionen-Vertauschungsregeln läßt sich der Operator der Wechselwirkung in kompakter Form angeben:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m, m' \\ i, \sigma, \sigma'}} \left\{ U_{mm'}^{\sigma\sigma'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma'} + J_{mm'}^{\sigma\sigma'} c_{im'-\sigma}^+ c_{im-\sigma}^+ c_{im\sigma} c_{im'\sigma'} \right\}. \quad (4.2.1)$$

Weil das Interesse an der Vielteilchentheorie der Zweiteilchen-Spektren vorrangig auf die Erkennbarkeit magnetischer Phasenübergänge gerichtet ist, braucht die Berechnung der für AES und APS als Input benötigten QDOS' nicht zu aufwendig gestaltet zu werden. Eine mean-field-Behandlung des Operators H_1 hat in [56] zu exzellenten Ergebnissen für Ni geführt; diese Näherung soll daher übernommen werden. Man erhält durch sie einen Hamiltonoperator mit einem effektiven Multiband-Hubbard-Term:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, m, \sigma} \varepsilon_{m\sigma}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}m\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}m\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i, m\sigma} n_{im\sigma} n_{im-\sigma}. \quad (4.2.2)$$

Die Größe $\varepsilon_{m\sigma}(\mathbf{k})$ ist die *renormierte* Blochenergie:

$$\varepsilon_{m\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_m(\mathbf{k}) + \bar{U} (n - \langle n_m \rangle) - \frac{1}{2} J z_\sigma \langle p_m \rangle. \quad (4.2.3)$$

Es muß hervorgehoben werden, daß die Vereinfachung (4.2.2) ausschließlich für die Bestimmung der Einteilchenfunktionen vorgesehen ist. An der Zweiteilchen-Spektraldichte ließe sich diese Approximation nicht rechtfertigen. Interband-Wechselwirkungen sind für direkte Korrelationen zu bedeutsam, um vernachlässigt werden zu dürfen. Die thermodynamischen Erwartungswerte in Glg. (4.2.3) müssen selbstkonsistent mit Hilfe des Spektraltheorems [69, 63] bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \langle n_m \rangle &= \sum_{\sigma} \langle n_{im\sigma} \rangle, \\ \langle p_m \rangle &= \sum_{m'\sigma'} (1 - \delta_{mm'}) z_{\sigma'} \langle n_{im'\sigma'} \rangle, \\ \langle n_{im\sigma} \rangle &= \frac{1}{N\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) A_{\mathbf{k}m\sigma}(E - \mu). \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

Das mit dem effektiven Hubbard-Hamiltonoperator gegebene Vielteilchenproblem wird mit Hilfe der gleichen selbstkonsistenten Momentenmethode und dem gleichen Ansatz für die nach Teilbändern separierte Einteilchen-Spektraldichte gelöst, die bereits am Einband-System mit Erfolg angewandt worden ist. Die Einteilchen-Selbstenergie $\Sigma_{m\sigma}(E)$ ist wegen der vernachlässigten Quasiteilchen-Dämpfung im Zweipol-Ansatz der Einteilchen-Spektralfunktion \mathbf{k} -unabhängig und reell:

$$\Sigma_{m\sigma}(E) = U \langle n_{m-\sigma} \rangle \frac{E + \mu - B_{m-\sigma}}{E + \mu - B_{m-\sigma} - U(1 - \langle n_{m-\sigma} \rangle)}. \quad (4.2.5)$$

Der Term $B_{m-\sigma}$ ist mit Glg. (2.2.24) vergleichbar und enthält höhere Erwartungswerte:

$$\langle n_{m-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{m-\sigma} \rangle) (B_{m-\sigma} - T_{0m}^{(\sigma)}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} (1 - \delta_{ij}) T_{ij\sigma}(m) \langle c_{im-\sigma}^\dagger c_{jm-\sigma} (2n_{im\sigma} - 1) \rangle. \quad (4.2.6)$$

$T_{0m}^{(\sigma)}$ ist der Schwerpunkt des renormierten Blochbandes:

$$T_{0m}^{(\sigma)} = T_{0m} - \frac{1}{2} J z_\sigma \langle p_m \rangle + \bar{U} (n - \langle n_m \rangle). \quad (4.2.7)$$

Die Korrelationsfunktionen, die mit der Berechnung der freien Parameter des Zweipol-Ansatzes im zweiten Schritt der Momentenmethode auftreten, lassen sich, wie im Abschnitt

2.2 dargelegt wurde, im Rahmen der tight-binding-Näherung oder sogar *exakt* mit Hilfe der Eielektronen-Spektraldichte $A_{\mathbf{k}m\sigma}(E)$ ausdrücken. Letzteres gilt für die spinabhängige Bandverschiebung $B_{m-\sigma}$, welche für die Existenz der stabilen ferromagnetischen Phase entscheidend ist. Ausgehend von der allgemeinen Form von $A_{\mathbf{k}m\sigma}(E)$,

$$A_{\mathbf{k}m\sigma}(E) = \hbar \delta(E + \mu - \varepsilon_{m\sigma}(\mathbf{k}) - \Sigma_{m\sigma}(E)), \quad (4.2.8)$$

ist die Bandverschiebung ein Funktional der Selbstenergie und der QDOS:

$$\langle n_{m-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{m-\sigma} \rangle) [B_{m-\sigma} - T_{0m}^{(-\sigma)}] = \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) [E - \Sigma_{m-\sigma}(E - \mu) - T_{0m}^{(-\sigma)}] \left[\frac{2}{U} \Sigma_{m-\sigma}(E - \mu) - 1 \right] \rho_{m-\sigma}(E). \quad (4.2.9)$$

Wegen der \mathbf{k} -unabhängigen und reellen Eiteilchen-Selbstenergie kann man die QDOS mit Hilfe der zum Teilband gehörenden BDOS ausdrücken:

$$\rho_{m\sigma}(E) = \rho_{0m} \left(E + \frac{1}{2} z_{\sigma} J \langle p_m \rangle - \bar{U}(n - \langle n_m \rangle) - \Sigma_{m\sigma}(E) \right). \quad (4.2.10)$$

Der Erwartungswert $\langle p_m \rangle$ setzt sich aus den Magnetisierungen aller Teilbänder *außer dem m -ten* zusammen, s. Glg. (4.2.4). Das m -te Teilband wird also von den anderen Bändern durch J polarisiert. Dagegen beschreibt der Term mit \bar{U} , wie das Band m von der Teilchendichte in den übrigen Teilbändern beeinflusst wird; seine Bedeutung kommt darum der einer klassischen Coulomb-Wechselwirkung nahe.

Mit den Beziehungen (4.2.3) – (4.2.10) liegt ein geschlossenes, gekoppeltes Gleichungssystem vor, welches für beliebige Temperaturen und Bandbesetzungen n ($0 \leq n \leq 2d$) selbstkonsistent lösbar ist. Wenn man im Teilband m ungleiche Spindichten erhält,

$$\langle n_{m\uparrow} \rangle \neq \langle n_{m\downarrow} \rangle,$$

so liegt kollektiver Ferromagnetismus vor.

4.3 Modellparameter und magnetische Phasenübergänge

Das Zweiband-System, das in Abb. 3.5.a skizziert wurde, soll nun untersucht werden. Es simuliert eine Situation, wie sie in Übergangsmetallen und ihren Legierungen typischerweise gegeben ist. Natürlich ist eine Erweiterung auf mehr als nur zwei Teilbänder stets möglich; der erhöhte Rechenaufwand erbringt jedoch keine qualitativ neuen Resultate. Es ist nicht nötig, grundsätzlich alle existierenden Teilbänder in die Rechnung einzubeziehen; beispielsweise sind bei Ni, das noch immer Gegenstand intensiver Forschung ist [57, 76], die drei unteren 3d-Bänder vollständig besetzt und damit magnetisch inaktiv. Erst das vierte, zweithöchste Teilband weist eine geringe Lochdichte auf, und das etwas mehr als halb gefüllte fünfte Band bestimmt im wesentlichen die magnetische Ordnung.

Die folgenden Betrachtungen betreffen eher allgemeine Eigenschaften, die für etliche Übergangsmetalle typisch sind. Der Einfachheit halber werden beide Blochband-Breiten

W_{01} und W_{02} auf 1 eV belassen. Die Modellparameter U , J und \bar{U} , die Verschiebung der beiden BDOS-Schwerpunkte ΔT_0 sowie n und T haben ihren spezifischen Einfluß auf die magnetische Ordnung. Sie bilden ein sechsdimensionales Phasendiagramm, wobei durch die Wahl gleicher Blochband-Breiten nicht mehr berücksichtigt werden muß, daß im Prinzip zu jedem Coulombmatrixelement zwei unterschiedliche Kopplungsstärken gehören, z.B. für die Intraband-Wechselwirkung U/W_{01} und U/W_{02} . Doch ist es nicht nötig, den Phasenraum vollständig auf die möglichen para-/ferromagnetischen Übergänge hin abzutasten, denn die Bedingungen für Ferromagnetismus im Einband-System, (2.3.1) – (2.3.3), gelten auch für gekoppelte Bänder, so daß man für das Verständnis des Multiband-Ferromagneten mit wenigen Modellparametern auskommt.

Zunächst beobachtet man, daß die Bandbesetzung der ferromagnetischen Ordnung Restriktionen auferlegt: unterhalb einer kritischen Teilchen- bzw. Lochdichte gibt es keinen Phasenübergang; n_{crit} und $(2 - n)_{crit}$ hängen nicht nur von den beiden BDOS' $\rho_{0m}(E)$, $m = 1, 2$, sondern auch von den drei Coulombmatrixelementen ab. Die Intraband-Kopplung U muß einen bestimmten kritischen Wert überschreiten, um spontane Kollektivordnung zu ermöglichen. Vom Matrixelement J der Interband-Wechselwirkung ist als sicher anzunehmen, daß es etwa eine Größenordnung kleiner als U ist [56, 57, 75, 76].

$$J \ll U. \quad (4.3.1)$$

J wirkt im Einquasiteilchen-Spektrum als zusätzliche, starre Verschiebung $\frac{1}{2}z_\sigma J \langle p_m \rangle$ der Substrukturen, wie aus Glg. (4.2.10) ablesbar ist. Für einen Phasenübergang reicht dieser an die Bandverschiebung im Stoner-Modell erinnernde Effekt nicht aus, es sei denn, (4.3.1) wird verletzt. Doch lehrt die Erfahrung mit der Auswertung des Stoner'schen Einband-Hamiltonoperators [93], daß dies bis zu einem Wert von $J/W_{0m} \simeq 0.4$, verglichen mit starker Intraband-Kopplung ($U/W_{0m} > 1$), nicht der Fall ist.

Das Coulombmatrixelement \bar{U} ist für eine nicht gleichförmige Verteilung der Elektronen über prinzipiell gleichberechtigte Teilbänder verantwortlich. Es verursacht dadurch in gewissem Sinne eine „orbitale Polarisierung“, die man in [76] ausführlicher diskutiert findet. Das gemeinsame Wechselspiel von \bar{U} und U erklärt das verblüffende physikalische Verhalten der antiferromagnetisch ordnenden sog. „Mott-Isolatoren“ ebenso, wie die Isolator-Eigenschaften der 3d-Übergangsmetall-Monoxide (z.B. NiO). Für Ferromagnetismus ist \bar{U} weniger wichtig, weil der dazu gehörende Operator der Wechselwirkung nicht vom Spin abhängt¹. Im folgenden wird deshalb $\bar{U} = 0$ gesetzt.

Mit der Schwerpunktverschiebung ΔT_0 wird im wesentlichen eine unterschiedliche Besetzungsdichte in den Teilbändern erreicht. Diese Größe beeinflusst zwar nicht das magnetische „Verhalten“ des einzelnen Teilbandes, gleichwohl ändern sich die magnetischen Kenndaten des Gesamtsystems.

In der Auswertung der Einteilchen-Spektraldichte entsprechend den im Abschnitt 4.2 dargelegten Schritten und der im Abschnitt 2.2 vorgestellten Momentenmethode ergeben sich unter bestimmten Bedingungen ferromagnetische Lösungen im Zweiband-System. Sie erweisen sich als stabiler als die stets existierende paramagnetische Ordnung. Abb. 4.3.a zeigt eine Zusammenfassung der Ergebnisse. Die selbstkonsistent errechnete Curietemperatur ist jeweils als Funktion der Elektronendichte n aufgetragen. Sobald U einen kritischen

¹siehe Glgn. (3.1.4) und (3.1.12). Aus Glg. (4.2.10) ist zu ersehen, daß durch \bar{U} alle Quasiteilchen-Strukturen starr in dieselbe Richtung verschoben werden, so daß es unter Umständen eine Tendenz zu Phasenübergängen erster Ordnung gibt.

Wert übersteigt, der in der Größenordnung von W_{0m} liegt, wird Ferromagnetismus möglich, vorausgesetzt, n liegt zwischen einer oberen und einer unteren Grenze.

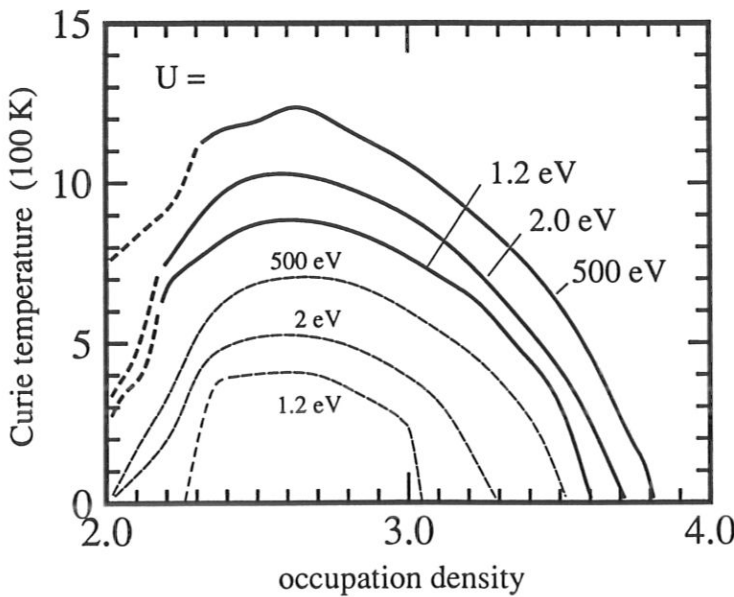


Abbildung 4.3.a: Curietemperatur T_C als Funktion der Elektronenkonzentration n , ($0 \leq n \leq 2d$, $d = 2$) zu drei verschiedenen Werten der Intraband-Kopplung U . Dicke Linien gehören zu den Parametern $\Delta T_0 = J = 0.2 \text{ eV}$, dünne Linien zu $\Delta T_0 = J = 0$. Es gilt überall $W_{01} = W_{02} = 1 \text{ eV}$.

Offensichtlich wächst die magnetische Region mit U . T_C steigt bei gegebenem n mit U monoton, sättigt jedoch bei einem endlichen Wert. Im gekoppelten ($J = 0.2 \text{ eV}$) Modell-Zweiband-Ferromagneten haben alle Curietemperaturen realistische Werte. Der höchste T_C -Wert von etwa 1300 K erscheint zwischen 60 und 70 % der maximalen Bandfüllung ($n = 2.4 \dots 2.8$). Es konnte gezeigt werden [83], daß ein Energieband mit asymmetrischer BDOS keine ferromagnetische Ordnung ermöglicht, wenn es weniger als halb gefüllt ist. Das überträgt sich in gewissem Sinne auf das Zweiband-System. Den Interband-Wechselwirkungen ist es zu verdanken, daß ferromagnetische Lösungen auch im Bereich $1.7 < n < 2$ existieren. Dort gibt es eine starke Tendenz zu Phasenübergängen erster Ordnung, ebenso für Werte im Bereich $2 < n < 2.4$. Erweiterte Modellrechnungen, die in der Nähe halber Bandfüllung ($n = 2$) durchgeführt wurden [73, 74], lassen dort *Antiferromagnetismus* erwarten. Da dieser Fall mit der vorliegenden Untersuchung ausgeschlossen ist, müssen alle Betrachtungen, soweit sie das gekoppelte Zweiband-System betreffen, auf das Intervall $2.4 < n < 4$ beschränkt bleiben. Zur Ergänzung zeigen die dünnen Linien in Abb. 4.3.a das Phasendiagramm des *entkoppelten* Zweiband-Systems ($J = 0$). Zusätzlich ist die Verschiebung der beiden BDOS' aufgehoben, ($\Delta T_0 = 0$), so daß die Teilbänder physikalisch gleichberechtigt sind und gleiche Elektronenkonzentrationen aufweisen. Daher kann man die dünnen Linien auch als Phasendiagramm des Einband-Systems interpretieren, wenn man die Abszissenwerte halbiert.

Es resultieren weitgehend ähnliche Kurven, doch gibt es zum gekoppelten System zwei signifikante Unterschiede. Der Bereich kritischer Besetzungsdichte, innerhalb dessen Ferromagnetismus existiert, ist viel kleiner, und zum anderen sind die Curietemperaturen gesunken. Beide Effekte lassen sich im Zusammenhang mit J und ΔT_0 erklären. Abb. 4.3.b zeigt die temperaturabhängige Magnetisierung des Zweiband-Systems bei einer Besetzungszahl von

$n = 3.1$ bei verschiedenen Werten von J , aber gleicher Intra-Band-Kopplung U bzw. Verschiebung der Blochbandschwerpunkte. Die gestrichelten Kurven geben die Polarisationen der Teilbänder wieder und die durchgezogenen Linien den Summenwert. Deutlich ist zu erkennen, daß J nicht nur das ($T = 0$)-Moment erhöht, wobei ab $J = 0.1 \text{ eV}$ das System ferromagnetisch sättigt, sondern daß auch die Curietemperatur steigt, wenn J einen Wert von etwa 0.02 eV überschreitet.

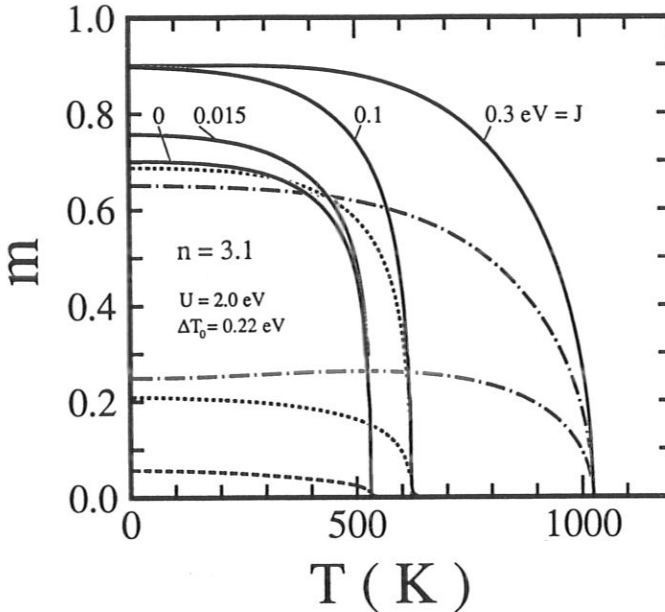


Abbildung 4.3.b: Die Magnetisierung des Zweiband-Systems als Funktion der Temperatur für verschiedene Werte der Interband-Kopplung J . Die Parameter sind: $n = 3.1$, $U = 2 \text{ eV}$, $\Delta T_0 = 0.22 \text{ eV}$ und wie in Abb. 3.5.a angegeben. Gestrichelte Linien geben die Magnetisierung der einzelnen Teilbänder wieder. Die Magnetisierungskurve für $J = 0$ fällt beinahe mit derjenigen des oberen Teilbandes bei $J = 0.015 \text{ eV}$ zusammen.

Bei verschwindender Interband-Kopplung ($J = 0$) wird die Magnetisierung anscheinend nur von einem Teilband getragen; das andere ist dagegen magnetisch inaktiv. Das bedeutet, daß die beiden Bänder verschiedene Elektronendichten aufweisen, von denen eine außerhalb des Intervalls kritischer Teilchendichten liegt. Geht man von der erreichten Curietemperatur von etwa 530 K aus, so läßt die dazu passende Phasenkurve in Abb. 4.3.a (dünne 2 eV -Linie) für das magnetische aktive Teilband eine Besetzungszahl von etwa 1.3 erwarten. Dem anderen Band ist die restliche Dichte von 1.8 Elektronen pro Gitterplatz zuzurechnen. Dieser, allein durch ΔT_0 verursachte Effekt wird durch Abb. 4.3.c bestätigt. Die unterste, strichpunktierte Linie stellt die Teilbandbesetzung n_2 bei verschwindender Interband-Kopplung dar und liegt in der Tat bei 1.3 . In der ferromagnetischen Phase sind die Besetzungszahlen nur schwach temperaturabhängig. Das untere, magnetisch inaktive Teilband wird von der oberen, spontan ordnenden Struktur polarisiert und seine Spinminoritätsdichte aufgrund der Wirkung von J zu einem Teil über das chemische Potential hinausgedrückt.

Das führt zu einer Umladung der Teilbänder. Das energetisch unten liegende Band ($m = 1$) entleert sich; die Besetzungsdichten n_1 und n_2 nähern sich mit steigendem J deshalb einander an. Dieser Prozeß unterstützt das Anwachsen des magnetischen ($T = 0$)-Moments. Die durch den J -Term in (4.2.10) erzeugte Verschiebung der Spin- \uparrow - gegenüber den Spin- \downarrow -Dichten muß durch den Einfluß der Temperatur wieder rückgängig gemacht werden. Das

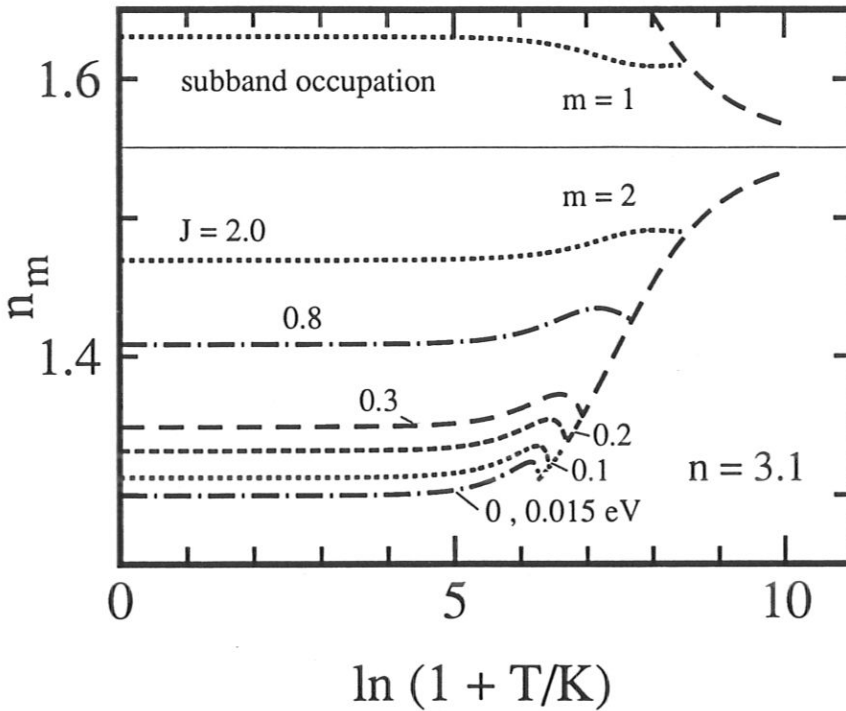


Abbildung 4.3.c: Die Besetzungszahlen der Teilbänder im Zweiband-System als Funktion der logarithmierten Temperatur für verschiedene Werte von J . Alle übrigen Parameter sind wie in Abb. 4.3.b bzw. Abb. 3.5.a gewählt. Die durchgezogene dünne Linie markiert die halbe Bandbesetzung ($n/2 = 1.55$).

erklärt die mit J erhöhten T_C -Werte. Bei zu großen Werten der Interband-Kopplung, gleichbedeutend mit einer Verletzung der Bedingung (4.3.1), würde der Term $\frac{1}{2}z_\sigma J(p_m)$ in die Größenordnung von U gelangen und die Physik des Ferromagneten dominieren und z.B. zu unrealistisch hohen Curietemperaturen führen.

In der folgenden Auswertung wurden die BDOS' der Abb. 3.5.a entsprechend gewählt. Abb. 4.3.d zeigt das Temperaturverhalten des Elektronensystems mit spontaner Magnetisierung bei einer Intraband-Kopplung von 2 eV für mehrere Werte der Bandbesetzung. Diese m/T -Kurven gehören zum Phasendiagramm in Abb. 4.3.a. Für $n = 2.6$ hat das Verhalten der Magnetisierung noch wenig Ähnlichkeit mit einer Brillouinfunktion. Die eher rechteckige Charakteristik läßt die Tendenz zum Phasenübergang erster Ordnung klar erkennen. Der Grund dafür ist der, daß die beiden Teilbänder nur wenig mehr als halb gefüllt sind ($n_1 \approx 1.4$, $n_2 \approx 1.2$). Die Kurve zu $n = 3.2$ paßt eher zu einem typischen Bandferromagneten.

Mit der Bandfüllung von $n = 3.6$ befindet man sich dicht am äußeren Ende der ($U = 2eV$)-Phasenlinie. In der Nähe der kritischen Bandbesetzung, die hier für das spontane Ordnen die obere Grenze ist, erreicht das System längst nicht mehr die magnetische Sättigung.

Interessant ist der Fall $n = 3.44$. Wenn für die Intraband-Kopplung $U/W_{0m} = 6$ gewählt wird, so erhält man eine beinahe perfekte Ni-Simulation! Man findet ein ($T = 0$)-Moment von $0.56 \mu_B$ und eine Curietemperatur von 629 K — in verblüffender Übereinstimmung mit den experimentell gefundenen Daten ($\mu(T=0) = 0.56 \mu_B$, $T_C = 631 K$ [94]). Außerdem sorgt die Festlegung auf $U/W_{0m} = 6$ für die korrekte Position des bekannten Ni-Satelliten [56, 57].

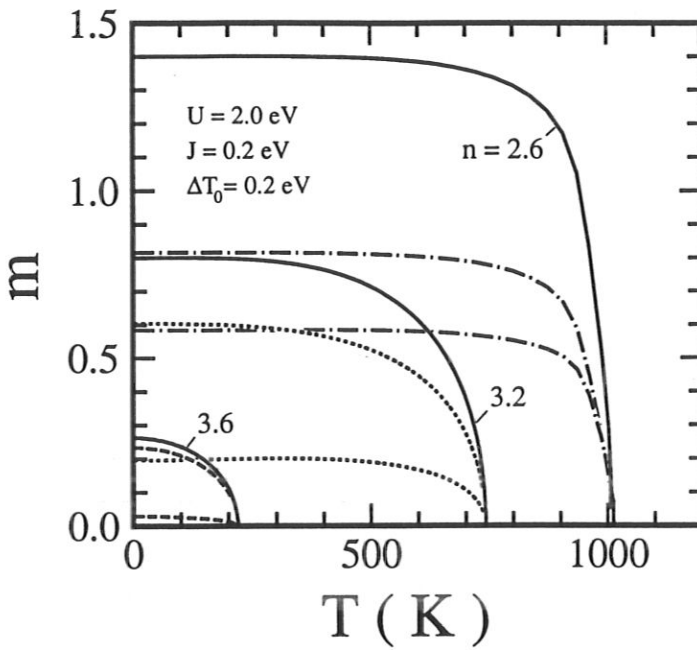


Abbildung 4.3.d: Die spontane Magnetisierung des Zweiband-Systems als Funktion der Temperatur für verschiedene Werte der Bandbesetzung ($n = 2.6, 3.2, 3.6$). Die festgehaltenen Parameter sind: $U = 2 \text{ eV}$, $J = 0.2 \text{ eV}$, $\Delta T_0 = 0.2 \text{ eV}$; die übrigen gleichen denen in Abb. 3.5.a. Durchgezogene Linien zeigen die Gesamtmagnetisierung; die partiellen Magnetisierungen der Teilbänder sind gestrichelt eingezeichnet.

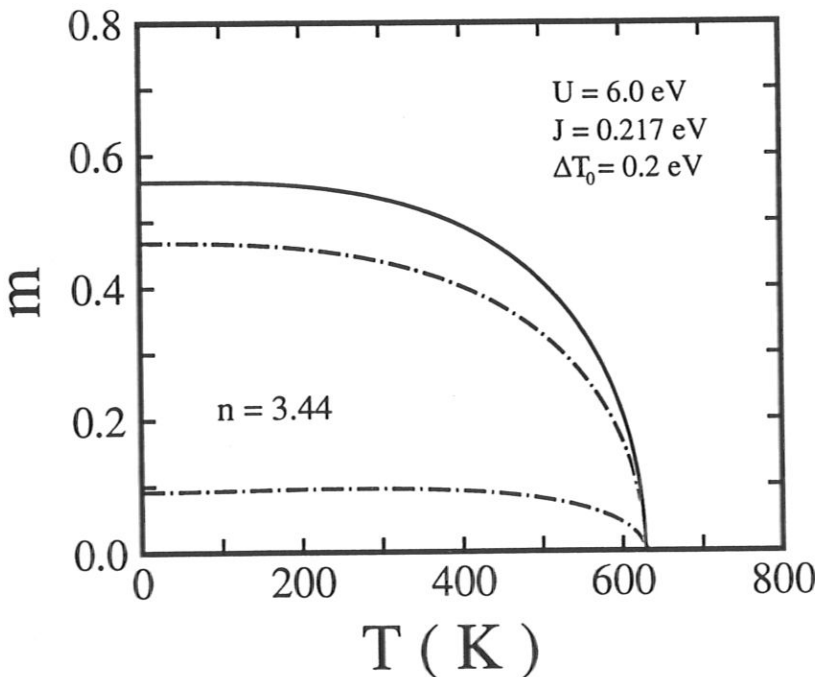


Abbildung 4.3.e: Wie Abb. 4.3.d, jedoch mit den Parametern $U = 6 \text{ eV}$ und $n = 3.44$. Die Polarisierungen der Teilbänder bei $T = 0 \text{ K}$ (0.09 bzw. 1.47) gleichen den auf Bandstrukturrechnungen basierenden Resultaten in [56] und [88].

4.4 Einteilchenanregungen im Zweiband-System

Das magnetische Verhalten des wechselwirkenden Elektronensystems wird aus der Temperaturabhängigkeit der QDOS' abgeleitet. Einige Charakteristika sind für die spätere Diskussion der Zwei quasiteilchen-Spektren von Bedeutung. Um die Darstellung übersichtlich zu halten, wurden neben der Ni-Simulation ausschließlich Punkte ausgesucht, die in Abb. 4.3.a zur 2 eV-Phasenlinie gehören.

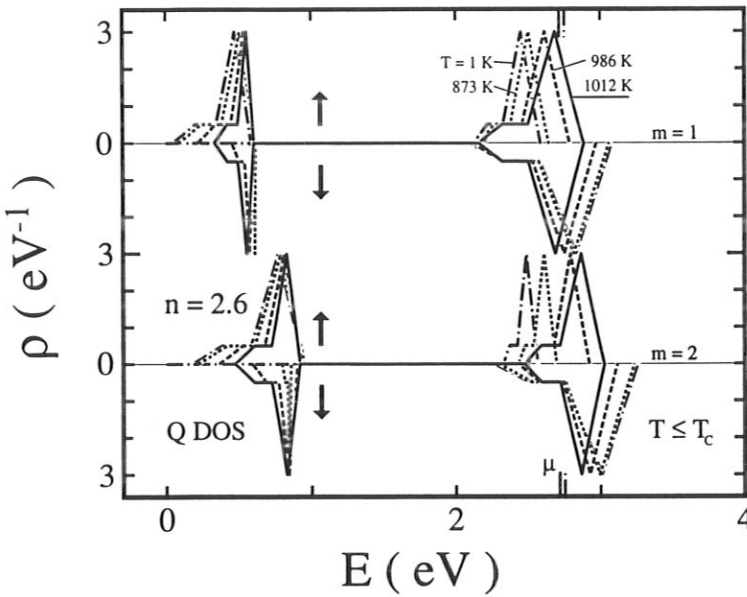


Abbildung 4.4.a: Die Quasiteilchen-Zustandsdichte der gekoppelten Teilbänder für die Bandbesetzung $n = 2.6$ als Funktion der Energie; obere Hälfte: Teilband $m = 1$, untere Hälfte: Teilband $m = 2$. Die QDOS ist für vier verschiedene Temperaturen eingezeichnet; durchgezogene Linien: $T = T_C = 1012K$, gestrichelt: $T = 986K$, punktiert: $T = 873K$, strichpunktiert: $T = 1K$. Das chemische Potential μ ist an beiden Abszissenachsen markiert. Die übrigen Parameter sind: $U = 2eV$, $J = \Delta T_0 = 0.2eV$, und $W_{01} = W_{02} = 1eV$.

Die starken Intraband-Korrelationen erzeugen in jedem der untereinander gekoppelten Teilbänder zwei verschiedene Arten der Aufspaltung. Die größere der beiden, die bereits im Abschnitt 2.2 grob interpretiert wurde, liegt etwa bei U und bleibt für alle Temperaturen bestehen, vorausgesetzt, daß das Energieband nur teilweise gefüllt ist. Hat ein Elektron die Möglichkeit, sich bevorzugt über die Gitterplätze zu bewegen, die nicht bereits von Teilchen aus dem gleichen Teilband vorbesetzt sind, so wird es Zustände aus dem unteren Quasiteilchen-Subband annehmen. Wenn dagegen das propagierende (m, σ) -Elektron mit einem spinantiparallelen $(m, -\sigma)$ -Partner zusammentrifft, muß dafür die zusätzliche Wechselwirkungsenergie U aufgebracht werden. Dieser Einteilchenprozeß gehört zum oberen Subband. Das erklärt die Größenordnung der Distanz zwischen den beiden korrelationsaufgespaltenen „Hubbard-Bändern“. Daneben gibt es auch virtuelle Übergänge, die sich der einfachen Deutung entziehen und der Grund dafür sind, daß dieser Abstand nicht genau die Größe U aufweist. Andernfalls würde z.B. anstelle Glg. (2.2.19) für die Quasiteilchen-Energie $E_{2\sigma}(k)$

gelten:

$$E_{2\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + U. \quad (4.4.1)$$

Doch kann die Fläche unter jedem Quasiteilchen-Subband im wesentlichen mit der Wahrscheinlichkeit dafür in Verbindung gebracht werden, daß das hüpfende (m, σ) -Elektron auf einen leeren $(m, -\sigma)$ -Gitterplatz trifft, oder nicht.

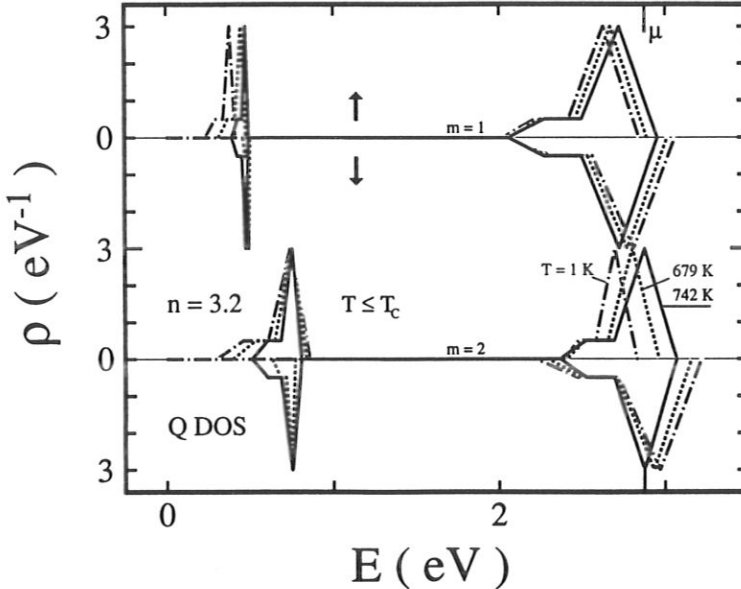


Abbildung 4.4.b: Wie Abb. 4.4.a, jedoch für die Bandbesetzung $n = 3.2$ bei den Temperaturen: $T = T_C = 742\text{K}$ (durchgezogene Linien), $T = 679\text{K}$ (gepunktelt), und $T = 1\text{K}$ (strichpunktiert). Man beachte, daß am Nullpunkt der Temperatur alle \uparrow -Zustände voll besetzt sind. Die dazugehörige m/T -Kurve findet man in Abb. 4.3.d.

Die unteren Substrukturen werden mit wachsender Bandbesetzung schmaler und nehmen bei Elektronendichten $n > 3.4$ ungeachtet der übrigen Parameter sogar nadelförmige Gestalt an, da es in einem solchen Fall unwahrscheinlich ist, daß ein propagierendes Elektronen einen Gitterplatz findet, an dem es nicht mit einem anderen Elektron aus demselben Teilband wechselwirken muß. Unter den bereits erläuterten Bedingungen, welche in den gezeigten Beispielen erfüllt sind, verursacht die spinabhängige Bandverschiebung $B_{m-\sigma}$, Glg. (4.2.9), bei niedrigen Temperaturen eine zusätzliche Spinaufspaltung an jedem Quasiteilchen-Subband.

Bei Elektronendichten von $n = 2.6$ bzw. 3.2 und bei der Ni-Simulation ($n = 3.44$) sind alle \uparrow -Zustände am Nullpunkt der Temperatur voll besetzt, $\langle n_{m\uparrow} \rangle = 1$, s. Abbn. 4.4.a, 4.4.b und 4.4.d. Dies bedeutet ferromagnetische Sättigung. Weil ein \downarrow -Elektron nur noch mit \uparrow -Teilchen vorbesetzte Gitterplätze vorfindet, verschwindet die niederenergetische \downarrow -QDOS. Sie erscheint dagegen bei $n = 3.6$, da bei $T = 0$ keine Sättigung eintritt, s. Abb. 4.4.c.

Die Spinaufspaltungen der Subbänder bei $T = 0$ sind stets von der Größenordnung einiger zehntel eV, was realistische Curietemperaturen garantiert. Die T -Abhängigkeit der QDOS macht sich auf zweierlei Art und Weise bemerkbar. Es kommt sowohl zu einer Schwerpunktsverschiebung der spinabhängigen Einquasiteilchen-Spektren, als auch zu einer bemerkenswerten Veränderung der Bandbreiten. Die hochenergetischen Spin- \uparrow -Hubbard-Bänder werden

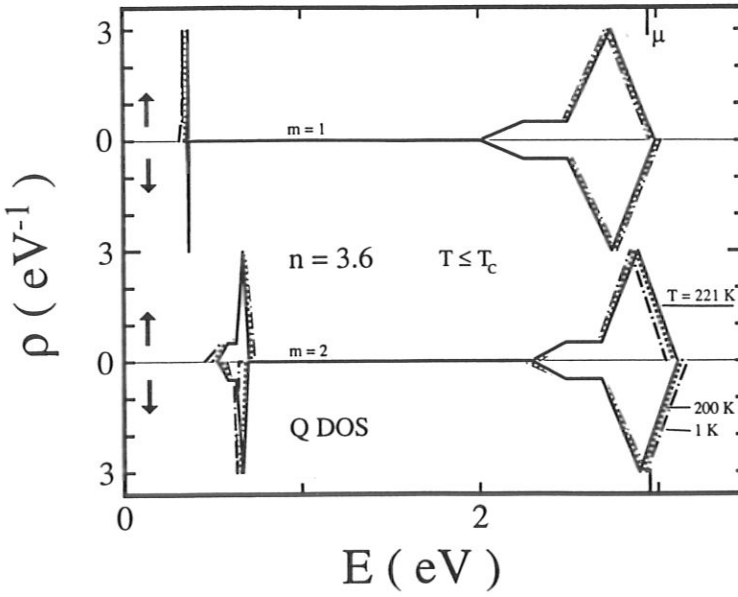


Abbildung 4.4.c: Wie Abb. 4.4.b, jedoch für die Bandbesetzung $n = 3.6$ bei den Temperaturen: $T = T_C = 221 \text{ K}$ (durchgezogene Linien), $T = 200 \text{ K}$ (punktiert), und $T = 1 \text{ K}$ (strichpunktiert). Man beachte die nadelförmige Quasiteilchenstruktur des zweiten Teilbandes bei niedrigen Energien.

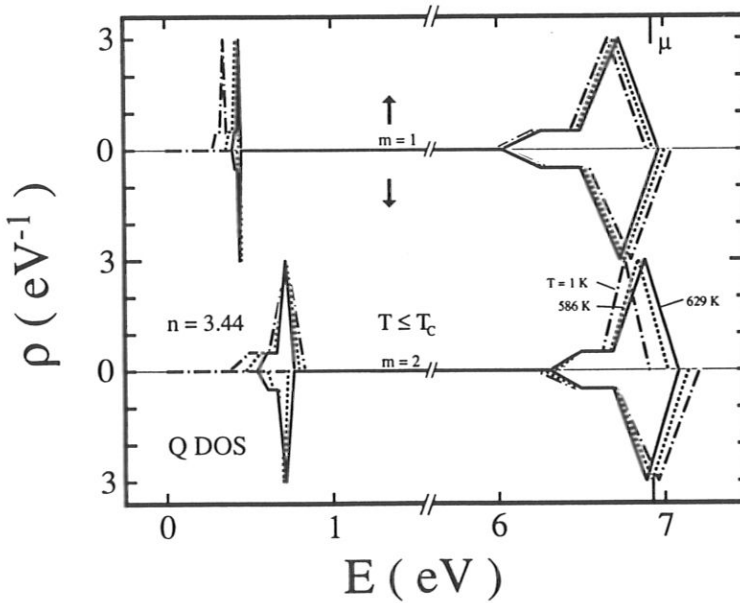


Abbildung 4.4.d: Das Quasiteilchenspektrum zu $n = 3.44$ als Funktion der Energie bei den Temperaturen: $T = T_C = 629 \text{ K}$ (durchgezogene Linien), $T = 586 \text{ K}$ (punktiert), sowie $T = 1 \text{ K}$ (strichpunktiert). Die übrigen Parameter sind: $U = 6 \text{ eV}$, $J = 0.217 \text{ eV}$, $W_{01} = W_{02} = 1 \text{ eV}$, $\Delta T_0 = 0.2 \text{ eV}$. Die Energieskala ist gespalten; das Quasiteilchen-Gap liegt in der Größenordnung von U . Das energetisch tiefer liegende Band ($m = 1$) ist bei einer Teilchendichte n_1 von etwa 1.91 lediglich polarisiert und würde, für sich allein genommen, nicht spontan magnetisieren.

mit abnehmender Temperatur schmaler, denn die Wahrscheinlichkeit für ein Majoritätselektron, mit einem Elektron der Minorität zu wechselwirken, wird mit steigender Spinpolarisation herabgesetzt. Aus demselben Grund werden die niederenergetischen \uparrow -Strukturen breiter. Für die \downarrow -Spektren gilt jeweils das genaue Gegenteil.

An den schmalen niederenergetischen ($m = 1$)-Quasiteilchenstrukturen fällt die Verschiebung ihrer Schwerpunkte auf, die vor allem vom spinabhängigen J -Term, Glg. (4.2.10), verursacht wird. Das ist bei allen Elektronendichten $n > 3$ gut zu erkennen, s. Abb. 4.4.b - 4.4.d. In diesen Fällen ist die Elektronenkonzentration im ersten Teilband so hoch ($n > 1.8$), daß dieses zu spontaner Magnetisierung unfähig ist und demzufolge ohne die Interband-Kopplung kein eigenes magnetisches Moment zeigen würde.

Bei der Gesamtkonzentration von $n = 2.6$ findet man die Teilband-Besetzungszahlen $n_1 \approx 1.4$ bzw. $n_2 \approx 1.2$ vor, die innerhalb der kritischen Grenzen für die Existenz spontaner Magnetisierung liegen. Also tragen beide Teilbänder aktiv zur kollektiven Ordnung bei. Dementsprechend bestehen zwischen den Quasiteilchen-Spektren zu ($m = 1$) und ($m = 2$) große Ähnlichkeiten. Mit wachsender Temperatur gleichen sich die Hubbard-Bänder in jedem Teilband bis zum Erreichen des Curiepunktes einander an.

4.5 Gekoppelte Zweiteilchen-Spektraldichten

Die partiellen Zweiteilchen-Spektraldichten sind für die vier im vorangehenden Abschnitt diskutierten Bandbesetzungen berechnet worden. Das Pauli-Prinzip erlaubt wegen der lokalen Anregung nur sechs physikalisch verschiedene Konfigurationen ($mm', \sigma\sigma'$). In den Abbildungen 4.5.a - 4.5.d sind die Funktionen $A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E)$ getrennt dargestellt. Die Abhängigkeit vom Ortsindex i ist wegen der angenommenen Translationssymmetrie des Gitters nur rein formaler Natur.

An der Stelle $E = 2\mu$, an welcher AE- und AP-Intensitäten ineinander übergehen, hat jede partielle Spektraldichte einen Vorzeichenwechsel. Das ist im Abschnitt 1.3 ausführlich besprochen worden. Die durch indirekte Korrelationen bewirkte Aufspaltung eines jeden Einquasiteilchen-Spektrums in Subbänder führt bei jeder Konfiguration zu drei separierten Strukturen. Der niedrigste Part entspricht Situationen, bei denen beide Teilchen Zustände in den unteren Quasiteilchen-Subbändern besetzen. Stammt eines der beiden Teilchen aus einem oberen, das andere aus einem unteren Subband, so gehört der Zweiteilchen-Prozeß zur mittleren Struktur. Der Hochenergieanteil, in welchem bei allen gezeigten Fällen der Vorzeichenwechsel liegt, repräsentiert AE- oder AP-Anregungen in die oberen Subbänder der QDOS'. Der paarweise Abstand zwischen den Schwerpunkten der drei Strukturen liegt aufgrund des Abstandes zwischen den Hubbard-Bändern in der Nähe von U . Auch die Temperaturabhängigkeit des Zweiteilchen-Spektrums ist auf das Verhalten der QDOS' zurückzuführen. Dies wird aus dem paarweisen Vergleich zwischen den Abbildungen dieses und des vorangehenden Abschnittes ersichtlich.

Bei einer Elektronendichte von $n = 3.6$ erreicht das System keine ferromagnetische Sättigung, s. Abb. 4.4.c, so daß das untere \downarrow -Hubbard-Band des zweiten Teilbandes nicht verschwindet. Daher gibt es am Temperaturnullpunkt eine niederenergetische ($2\uparrow, \downarrow$)-Struktur, die in Abb. 4.5.c zu sehen ist.

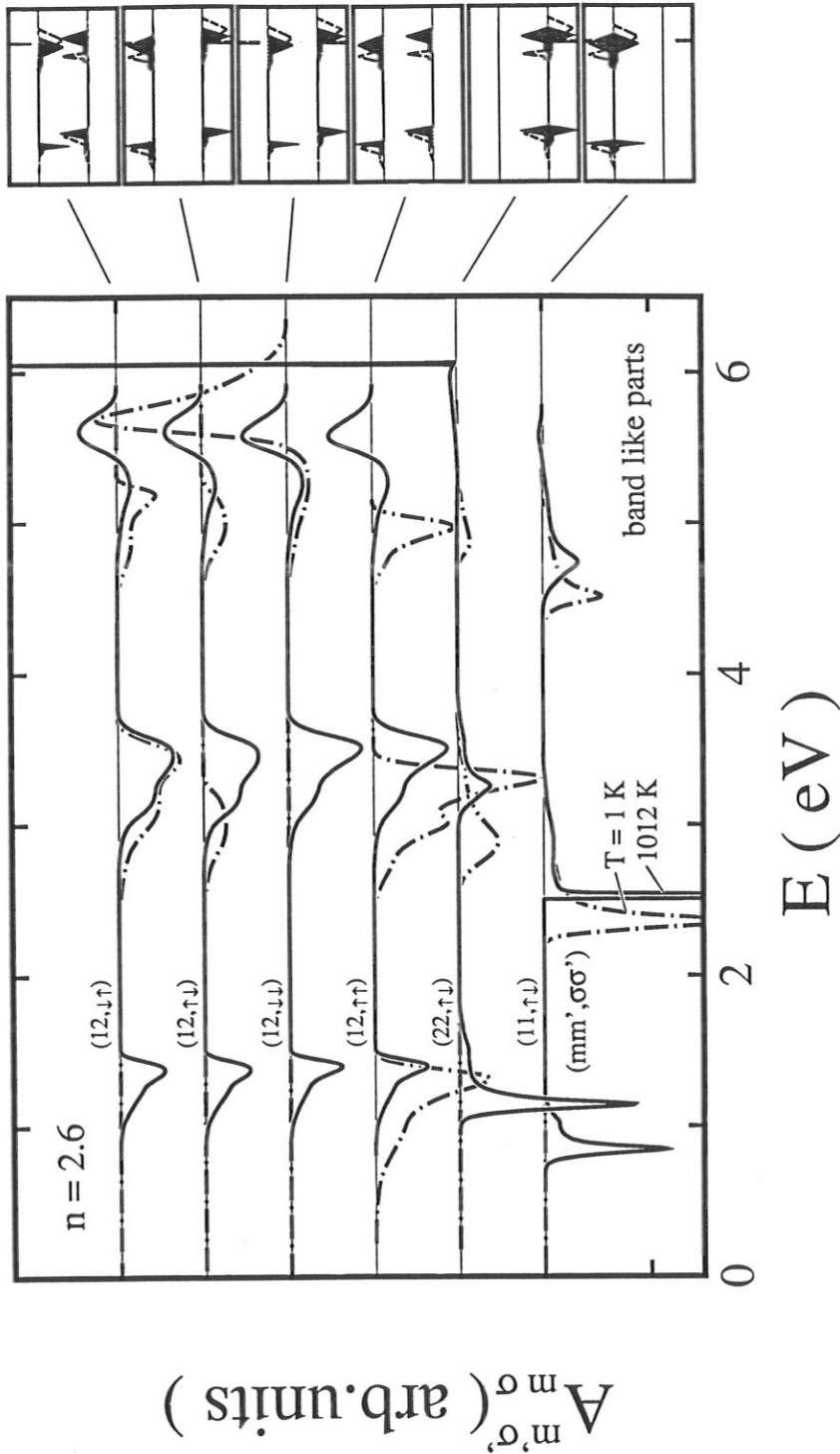


Abbildung 4.5.a: Die Zweiteilchen-Spektraldichte in willkürlichen Einheiten als Funktion der Energie zur Bandbesetzung $n = 2.6$ für zwei verschiedene Temperaturen; durchgezogene Linien: $T = T_C = 1012K$, strichpunktiert: $T = 1K$. Die Parameter sind: $U = 2eV$, $J = \Delta T_0 = 0.2eV$, $W_{01} = W_{02} = 1eV$; s. auch Abb. 4.4.a. Der Ortsindex ist wegen der Translationssymmetrie unterdrückt. Zu jeder Konfiguration $(mm', \sigma\sigma')$ findet sich am rechten Bildrand eine verkleinerte Darstellung der QDOS' für die gleichen Temperaturen; $T = T_C$: schraffiert, $T = 1K$: nicht schraffiert, es sind nur diejenigen Substrukturen eingezeichnet, die zu der Zweiteilchen-Spektralfunktion der angegebenen Konfiguration gehören.

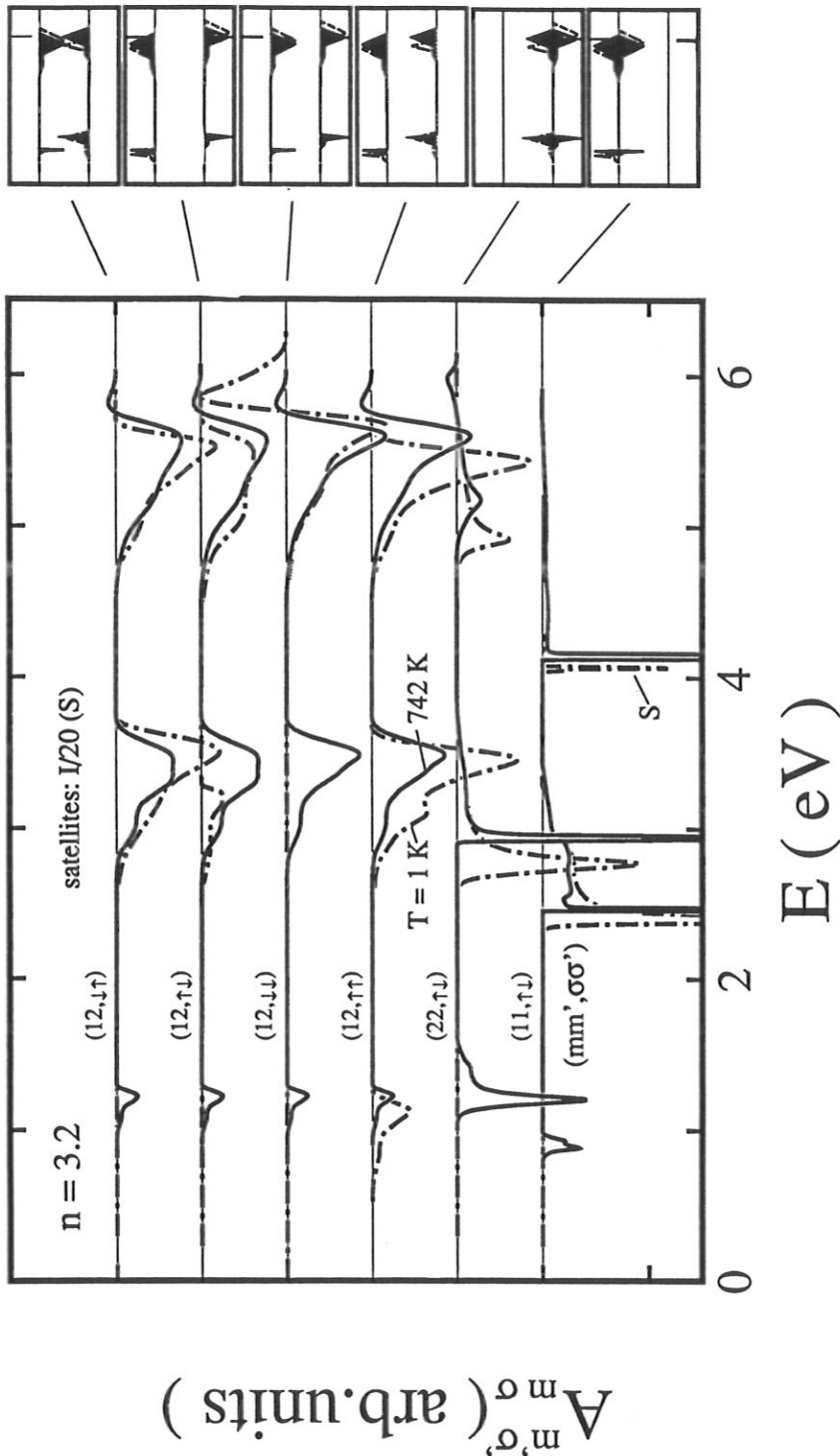


Abbildung 4.5.b: Die Zweiteilchen-Spektraldichte $A_{m\sigma}^{m'\sigma'}$ in willkürlichen Einheiten als Funktion der Energie zur Bandbesetzung $n = 3.2$ für die Temperaturen: $T = T_C = 742 \text{ K}$ (durchgezogene Linien) und $T = 1 \text{ K}$ (strichpunktiert). Die übrigen Parameter gleichen denen in Abb. 4.5.a. Am rechten Bildrand werden in verkleinerter Darstellung die für die jeweilige Konfiguration von A relevanten Teile der QDOS' gezeigt, siehe auch Abb. 4.4.b. Der mit „S“ gekennzeichnete Peak ist ein Satellit. Er ist 20-fach verkleinert eingezeichnet.

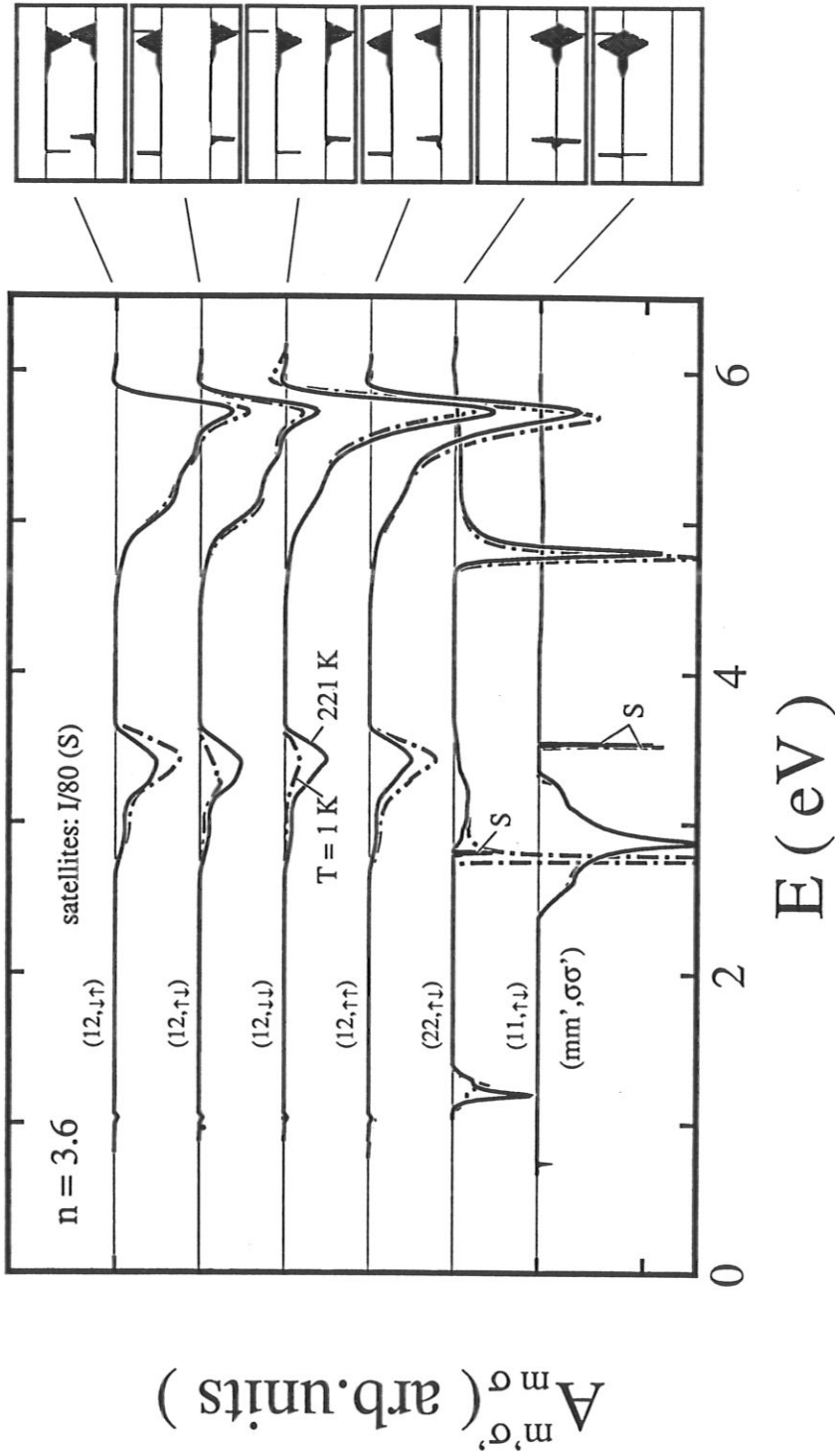


Abbildung 4.5.c: Wie Abb. 4.5.b, jedoch zur Bandbesetzung $n = 3.6$ für die Temperaturen $T = T_C = 221\text{K}$ (durchgezogene Linien) und $T = 1\text{K}$ (strichpunktirt). Die beiden Intra-band-Satelliten (S) sind 80-fach verkleinert dargestellt.

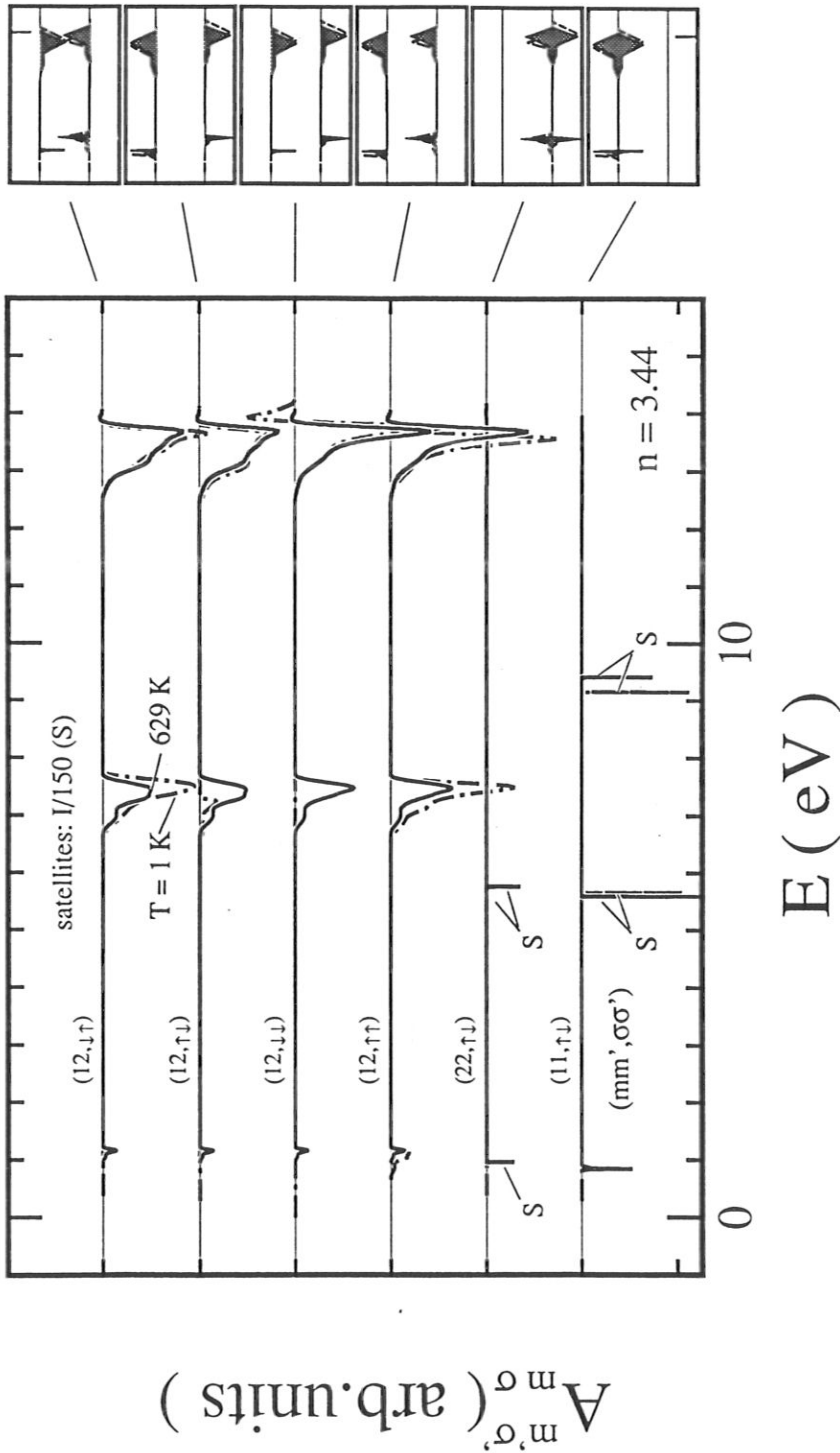


Abbildung 4.5.d: Wie Abb. 4.5.c, jedoch zur Bandbesetzung $n = 3.44$ für die Temperaturen $T = T_C = 629\text{K}$ (durchgezogene Linien) und $T = 1\text{K}$ (strichpunktiert). Die Parameter sind: $U = 6\text{eV}$, $J = 0.217\text{eV}$, $W_{01} = W_{02} = 1\text{eV}$, $\Delta T_0 = 0.2\text{eV}$. Die Höhen der Satelliten (S) sind um den Faktor 150 reduziert. Man beachte ferner die gegenüber den Abbn. 4.5.a - 4.5.c geänderte Energieskala.

Wenn alle verfügbaren \uparrow -Zustände bei $T = 0$ besetzt sind, so lassen sich nur noch \downarrow -Elektronen ins Valenzband-System anregen. Intraband-Beiträge sind wegen des Pauli-Prinzips nicht möglich. Der positive Teil von $A_{im\sigma}^{m'\sigma'}(E)$ tritt am Nullpunkt bei den Besetzungsdichten 2.6, 3.2 sowie der Ni-Simulation deshalb ausschließlich bei der Interband-Konfiguration $(mm', \sigma\sigma') = (12, \downarrow\downarrow)$ in Erscheinung, s. Abb. 4.5.a, 4.5.b und 4.5.d.

Die direkten Korrelationen sind für „exzitonartige“ Zweiteilchenzustände mit der gleichen physikalischen Bedeutung, wie sie bereits im zweiten Kapitel diskutiert wurde, entscheidend. Wenn die Energie der Teilchenpaare außerhalb des bandartigen Energiebereiches liegt, gibt es keine Möglichkeit, in einem energierhaltenden Streuprozess zu zerfallen, und es kommt zu einem Satelliten. Dessen Auftreten hängt zwar von der jeweils wirksamen Kopplungsstärke ab, doch auch n und sogar die Temperatur haben einen gewissen Einfluß. Jeder Satellitenpeak zeigt eine deutliche Dispersion. Sobald er sich von der bandartigen Region abgespalten hat, führt er den überwiegenden Anteil des spektralen Gewichts mit sich.

Am Beispiel $n = 3.44$ in der Abb. 4.5.d findet man etliche Intraband-Satelliten in verschiedenen Energiebereichen. Der niederenergetische Satellit aus dem zweiten Teilband tritt erst bei Temperaturen ab dem Curiepunkt in Erscheinung; die ihm ähnelnde ($m = 1$)-Niederenergie-Struktur ist lediglich ein scharf gepeakter Bandpart, der kurz davor ist, einen solchen abzuspalten. Bei $T = 0$ kommt es in keinem Teilband zu einer gebundenen niederenergetischen AE-Anregung. Dazu fehlt jeweils die untere Quasiteilchen- \downarrow -Struktur, wie aus Abb. 4.4.d hervorgeht.

Mittelenergetische Intraband-Satelliten der Ni-Simulation sind sowohl für $m = 1$ als auch für $m = 2$ möglich, jedoch im zweiten Teilband deutlich schwächer als diejenigen des ersten. Sie bestehen aus den Anregungen aus dem unteren Spin- \uparrow - und dem oberen Spin- \downarrow -Hubbard-Band. Die beiden Peaks verlagern sich mit steigender Temperatur wenig, aber deutlich erkennbar. Durch die Demagnetisierung kommt es in jedem Teilband zur Ausbildung des unteren \downarrow -Subbandes, so daß es bei höheren Temperaturen jeweils zwei gemischte Kombinationen gibt. Der Verfasser hält es für nicht ausgeschlossen, daß es bei geeigneter Wahl der Parameter zu erheblichen Verzerrungen intermediärer Satelliten oder sogar im gewissen Sinne zur Ausbildung von „Doppelstrukturen“ kommen kann. Die üblicherweise beobachtete Ähnlichkeit mit der BDOS würde unter diesen Umständen verlorengehen, weil jede der beiden Mischkombinationen für sich allein satellitenrelevant wäre.

Die beiden hochenergetischen ($m = 1$)-Intraband-Satelliten in Abb. 4.5.d bestehen aus Lochpaaranregungen in den oberen ($m = 1$)-Einteilchen-Substrukturen. Im Fall $n = 2.6$, Abb. 4.5.a, beobachtet man eine starke Deformation in der ($m = 2$)-Intraband-Konfiguration auf der AP-Seite. Dabei handelt es sich um einen Satelliten im Moment seiner Abspaltung.

Eine andere Situation liegt im intermediären ($m = 1$)-Intraband-Part des gleichen Systems vor. Mit steigender Temperatur bildet sich der noch bandartige Peak stärker heraus. Eine Gleichheit von \uparrow - und \downarrow -Subbändern eines Teilbandes begünstigt offenbar die Entstehung von Intraband-Satelliten bei mittlerer Energie. Die intermediäre Linienform im Beispiel $n = 3.2$ zeigt die gleiche Tendenz, s. Abb. 4.5.b. Vergleicht man sie mit dem hochenergetischen ($m = 1$)-Intrabandpart, wo bei $T = 1K$ ein Satellit bereits abgespalten ist, findet man ein zum mittelenergetischen AE-Signal entgegengesetztes Verhalten mit der Temperatur, denn bei $T = T_C$ ist der Satellit gerade ins bandartige Spektrum eingedrungen. Offenbar spielt die erhebliche Veränderung der oberen Spin- \uparrow - und Spin- \downarrow -Substruktur für seine Ent-

stehung die entscheidende Rolle, s. Abb. 4.4.b. Das zweite Teilband, das aufgrund der Schwerpunktsverschiebung der BDOS' eine deutlich geringere Elektronenkonzentration aufweist, ist noch weit davon entfernt, einen hochenergetischen Intraband-AE-Satelliten auszubilden, zeigt aber eine ähnliche Tendenz wie das erste Teilband.

Allgemein läßt sich festhalten, daß eine Verminderung der Elektronendichte die Bedingungen für AE-Satelliten verschlechtert. Gebundene Zweiteilchen-Zustände werden, wie schon im dritten Kapitel gezeigt wurde, von direkten Korrelationen in weit stärkerem Ausmaß beeinflusst, als durch indirekte Korrelationen, die in Grenzfällen wie dem Übergang vom bandartigen Peak zum Satelliten beobachtbar sind. Ein anderes Beispiel dafür wird im nächsten Abschnitt an der Ni-Simulation gezeigt.

Die Temperaturdynamik des Systems bei einer Bandbesetzung von $n = 3.6$ ist im Vergleich zu den bisher gezeigten Beispielen eher gering, s. Abb. 4.5.c. Das beinahe voll besetzte erste Teilband ($n_1 \approx 1.97$) führt dazu, daß die partielle Spektraldichte der Intraband-Konfiguration ($11, \uparrow\downarrow$) wegen der günstigeren Möglichkeit von Lochpaaranregungen in den beiden oberen Quasiteilchen-Subbändern, s. Abb. 4.4.c, durch eine intermediäre Linienform und durch einen hochenergetischen Satelliten dominiert wird. Die mittlere energetische Struktur verdankt ihre Existenz den nadelförmigen unteren ($m = 1$)-Subbändern des Einquasiteilchen-Spektrums, welche gemischte Kombinationen mit den oberen Substrukturen ermöglichen. Der hochenergetische, AE-seitige Satellit ist eine erneute Demonstration der Bedeutung direkter Korrelationen und der Unzulänglichkeit des Lander-Modells. Dieses hätte speziell für die hochenergetische ($m = 1$)-Intensität eine breite, bandähnliche Linienform vorhergesagt. Davon ist hier überhaupt nichts zu sehen. Mit dem Steigen der Temperatur bis in die Nähe des Curiepunktes beobachtet man das „Abschnüren“ des mittlere energetischen ($22, \uparrow\downarrow$)-Satelliten, Abb. 4.5.c. Das ist hauptsächlich der Ausprägung des unteren ($m = 2$)- \downarrow -Hubbard-Bandes zuzuschreiben, s. Abb. 4.4.c. Als eigenständige, vom Bandpart getrennte Struktur erscheint der Peak erst ab $T = T_C$. In diesem Beispiel ist offenbar die Existenz beider gemischter ($m = 2$)-Kombinationen wichtig.

4.6 Spinaufgelöste Zweiteilchen-Intensitäten

Aus der Zweiteilchen-Spektraldichte gewinnt man mit den Gln. (1.3.16) und (1.3.17) die temperaturabhängigen AE- und AP-Linienformen. Erst am Mehrbandsystem ist die Anregung von Teilchenpaaren mit *parallelen* Spins möglich. Aus den Abbn. 4.4.a – 4.4.d geht hervor, daß es für \uparrow - und \downarrow -Elektronen bei Temperaturen unterhalb des Curiepunktes unterschiedliche Einquasiteilchen-Spektren gibt; daher unterscheiden sich auch die Faltungsgintegrale Spin- \uparrow - und Spin- \downarrow -paralleler Konfigurationen:

$$N_{1\uparrow}^{2\uparrow}(z, E) = N_{2\uparrow}^{1\uparrow}(z, E) \neq N_{1\downarrow}^{2\downarrow}(z, E) = N_{2\downarrow}^{1\downarrow}(z, E). \quad (4.6.1)$$

Im Ferromagneten führen im allgemeinen auch die nichtdiagonalen Konfigurationen zu unterschiedlichen Faltungen:

$$N_{1\sigma}^{2-\sigma}(z, E) \neq N_{2\sigma}^{1-\sigma}(z, E); \quad (4.6.2)$$

doch tragen zu der in Glg. (3.2.10) nach Inter- und Intraband-Beiträgen aufgeschlüsselten spinaufgelösten Intensität $I_{AES}^{(\sigma)}$, die in den Abbn. 4.6.a – 4.6.d gezeigt wird, alle nichtdia-

gonalen Partiallinienformen gemäß Glg. (3.2.7) bei. Somit ist die diagonale Partialintensität $I_{APS}^{(\sigma,\sigma)}$ die alleinige Ursache für die Spinunterscheidbarkeit der Spektren.

Für das Beispiel der Bandfüllung $n = 2.6$, Abb. 4.6.a, ergibt sich eine besonders ausgeprägte T -Abhängigkeit. Bei ferromagnetischer Sättigung erscheint keine niederenergetische Spin- \downarrow -AE-Struktur, weil beide unteren \downarrow -Hubbard-Bänder verschwinden, Abb. 4.4.a. Wie bereits gesagt wurde, ist dies auf die Tatsache zurückzuführen, daß bei $T = 0$ das \uparrow -Quasiteilchen-Band voll besetzt ist. Daher ist auch das AP-Spektrum am Nullpunkt vollständig Spin- \downarrow -polarisiert. Intraband-Satelliten sind unter dieser Bedingung nicht möglich. Mit steigender Temperatur verringern sich die Unterschiede zwischen den Spin- \uparrow - und den Spin- \downarrow -Spektren, bis am Curiepunkt deren Gleichheit erreicht ist. Die Ausbildung des scharfen AE-Peaks in der mittlereenergetischen Struktur ist gut zu beobachten; an den einzelnen Linienformen lassen sich alle Details den sie erzeugenden Konfigurationen zuordnen, wenn man die Spektren mit den partiellen Spektraldichten aus Abb. 4.5.a vergleicht. Die bereits erwähnte Abspaltung des intermediären AE-Satelliten ist an diesem Bild ebenso zu sehen, wie der $(22, \uparrow\downarrow)$ -AP-Peak in der Nähe der Curietemperatur. Überall dort, wo keine Spinabhängigkeit auszumachen ist, obwohl das System ferromagnetisch ordnet, besteht die Linienform aus Intraband- oder nichtdiagonalen Interband-Beiträgen.

Auch in den in Abb. 4.6.b gezeigten Spektren zur Bandbesetzung $n = 3.2$ äußert sich die ferromagnetische Sättigung in der \uparrow -Polarisation der niederenergetischen AE-Linienformen und der vollkommenen \downarrow -Polarisation des AP-Signals. Die Spinunterschiede in den AE-Signalen sind nicht mehr so groß wie im Fall $n = 2.6$. Das ist natürlich auf die Temperaturabhängigkeit der Einquasiteilchen-Spektren in Abb. 4.4.b zurückzuführen. Mit zunehmender Bandbesetzung nehmen die AP-Intensitäten insgesamt zugunsten der AE-Spektren ab. In ihnen wiederum findet man mit n eine Zunahme der hochenergetischen Strukturen auf Kosten der anderen. Dieser Trend setzt sich in den Spektren für $n = 3.44$ bzw. $n = 3.6$ in den Abbn. 4.6.d bzw. 4.6.c fort. Je mehr man sich der Situation des voll besetzten Bandes nähert, desto ähnlicher müssen alle hochenergetischen Linienformen in ihrer Gestalt sowie ihrer energetischen Lage den im 3. Kapitel präsentierten Resultaten werden. So kann man z.B. als sicher annehmen, daß mit steigendem n , $n \geq 3.6$, der mittlereenergetische $(22, \uparrow\downarrow)$ -Satellit wieder verschwinden muß. Das hat in den verschwindenden unteren Hubbard-Bändern die gleiche Ursache, die im Beispiel $n = 3.6$ das Auftreten des intermediären ($m = 1$)-Intraband-Satelliten verhindert, der aufgrund des Temperaturverhaltens der mittlereenergetischen Linienformen bei den Bandbesetzungen $n = 2.6$ und $n = 3.2$ zu erwarten wäre.

Eine andere nicht triviale Beobachtung ist die, daß der „embryonale“ intermediäre $(22, \uparrow\downarrow)$ -Satellit in den Spektren der Abb. 4.6.b mitten aus dem bandartigen Bereich der Linienform herauszuwachsen scheint und nicht, wie die bisherige Erfahrung zeigt, an einer ihrer Kanten. Doch das ist nur ein scheinbarer Widerspruch, denn die restlichen Signale stammen aus Beiträgen der anderen Inter- und Intraband-Konfigurationen, die energetisch teilweise unter dem ($m = 2$)-Intrabandpart liegen, s. Abb. 4.5.b.

Die AE-Spektren der Ni-Simulation zeigen wegen der hohen Coulombabstoßung ($U = 6eV$) eine Vielzahl an Intraband-Satelliten, nun auch im Niederenergie-Teil, s. Abb. 4.6.d. Die beiden intermediären Peaks der Konfigurationen $(11, \uparrow\downarrow)$ und $(22, \uparrow\downarrow)$ verlagern sich in Abhängigkeit von der Temperatur in entgegengesetzte Richtungen. Dieser im Vergleich zur Temperaturdynamik der übrigen Teile des Spektrums recht kleine Effekt hängt mit indirekten Korrelationen zusammen und kann nicht unmittelbar mit Details in den Einquasiteilchen-Spektren in Verbindung gebracht werden. — Wegen der geringen Anzahl besetzter

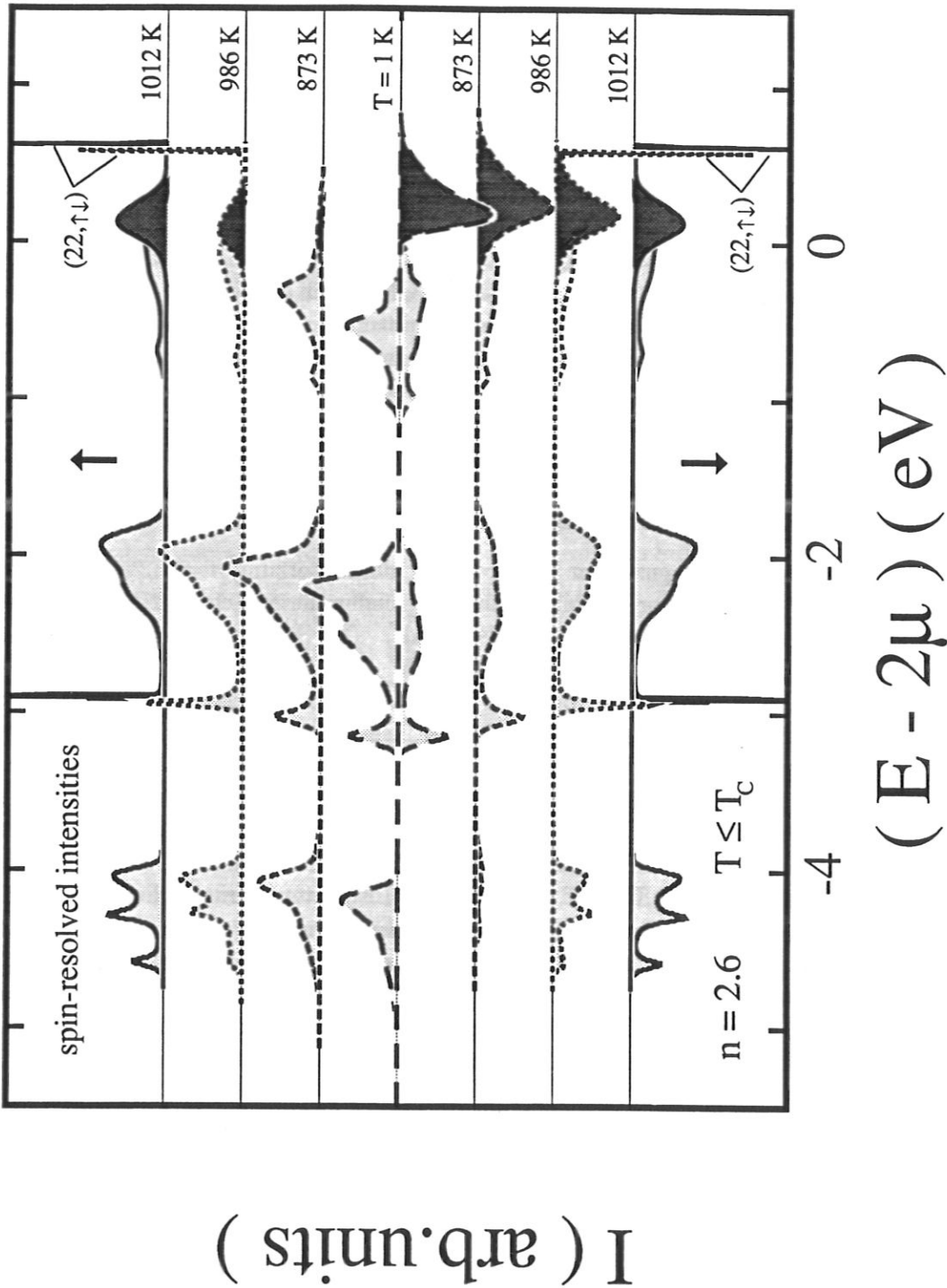


Abbildung 4.6.a: Die spinaufgelöste AE- und AP-Intensität $I_{APS}^{(\sigma)}$ (Glg. (3.2.10)) in willkürlichen Einheiten als Funktion der Energie $E - 2\mu$ (μ ist das chemische Potential) zur Bandbesetzung $n = 2.6$ für vier verschiedene Temperaturen $T \leq T_C = 1012\text{K}$. In der oberen Bildhälfte ist $\sigma = \uparrow$, in der unteren $\sigma = \downarrow$. AP-Intensitäten sind dunkel, AE-Linienformen nur leicht schraffiert. Satelliten werden durch zusätzliche Bezeichnung der sie erzeugenden Konfiguration ($mm', \sigma\sigma'$) hervorgehoben. Wenn es nicht anders angegeben ist, sind alle übrigen Parameter die gleichen, wie in Abb. 4.5.a.

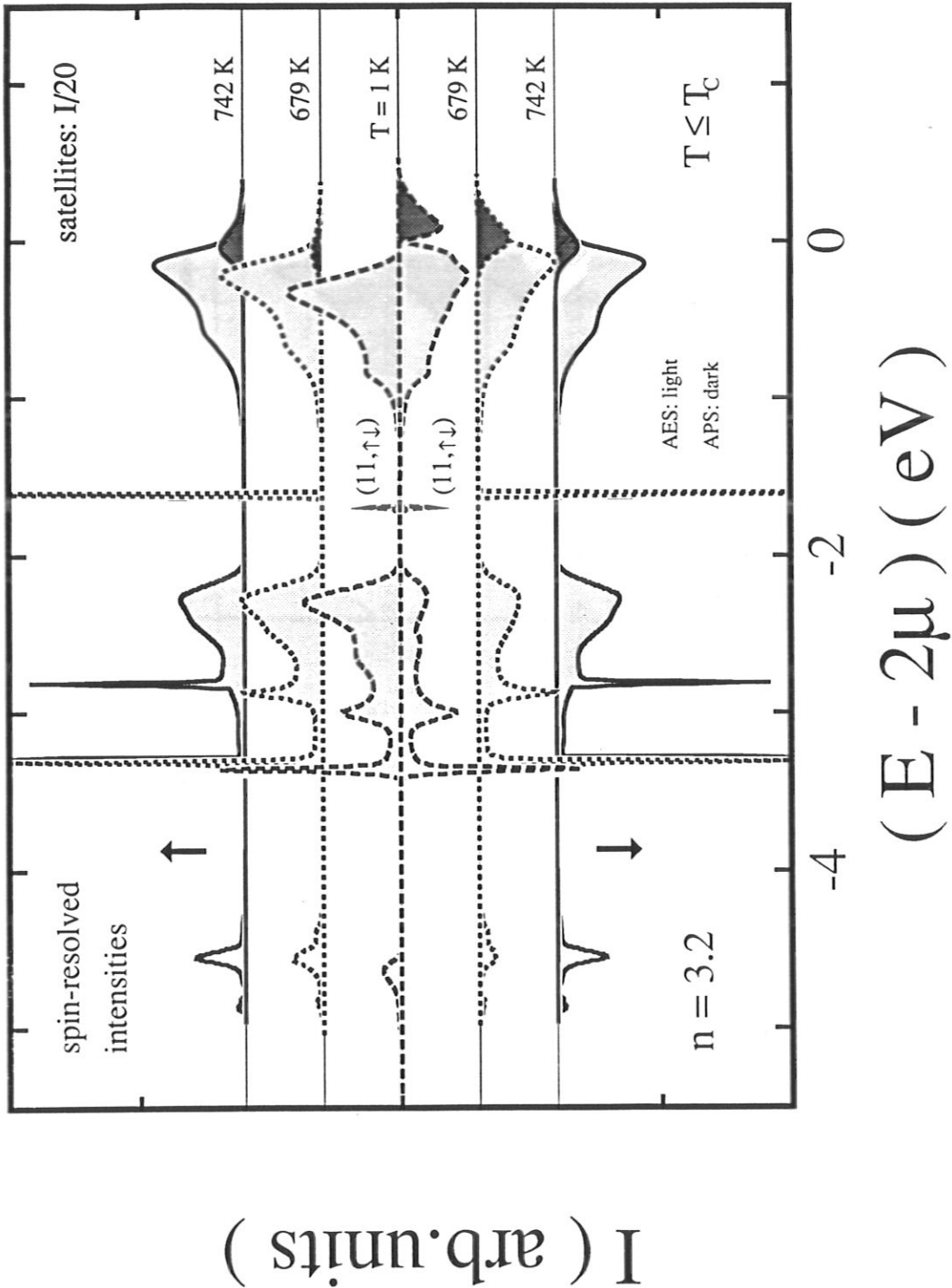


Abbildung 4.6.b: Wie Abb. 4.6.a, jedoch zur Bandbesetzung $n = 3.2$ für verschiedene Temperaturen $T \leq T_C = 742K$. Mit dunklen Flächen sind AP-, mit heller Schraffur AE-Intensitäten hervorgehoben. Die einzigen Satelliten für $\sigma = \uparrow$ und $\sigma = \downarrow$, sie gehören zur Konfiguration $(mm', \sigma\sigma') = (11, \uparrow\downarrow)$, sind 20-fach verkleinert eingezeichnet.

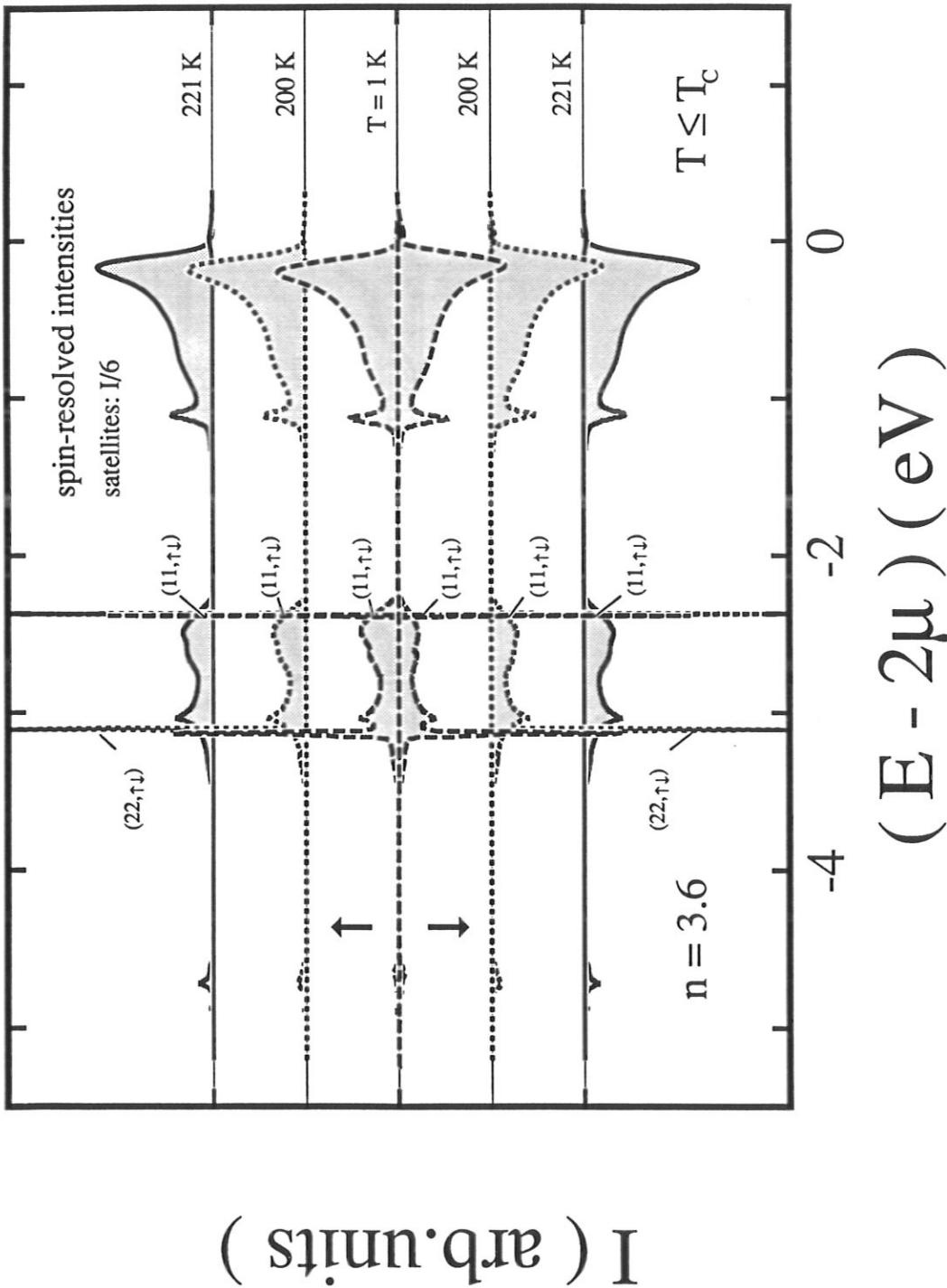


Abbildung 4.6.c: Wie Abb. 4.6.b, jedoch zur Bandbesetzung $n = 3.6$ für drei verschiedene Temperaturen $T \leq T_C = 221\text{K}$. Die Satelliten sind nach ihrer Konfiguration $(mm', \sigma\sigma')$ und entsprechend der Temperatur gekennzeichnet, bei der sie auftreten; z.B. gibt es den $(22, \uparrow\downarrow)$ -Satelliten auf diesem Bild nur bei $T = 221\text{K}$, dagegen treten die $(11, \uparrow\downarrow)$ -Peaks bei allen Werten von T auf.

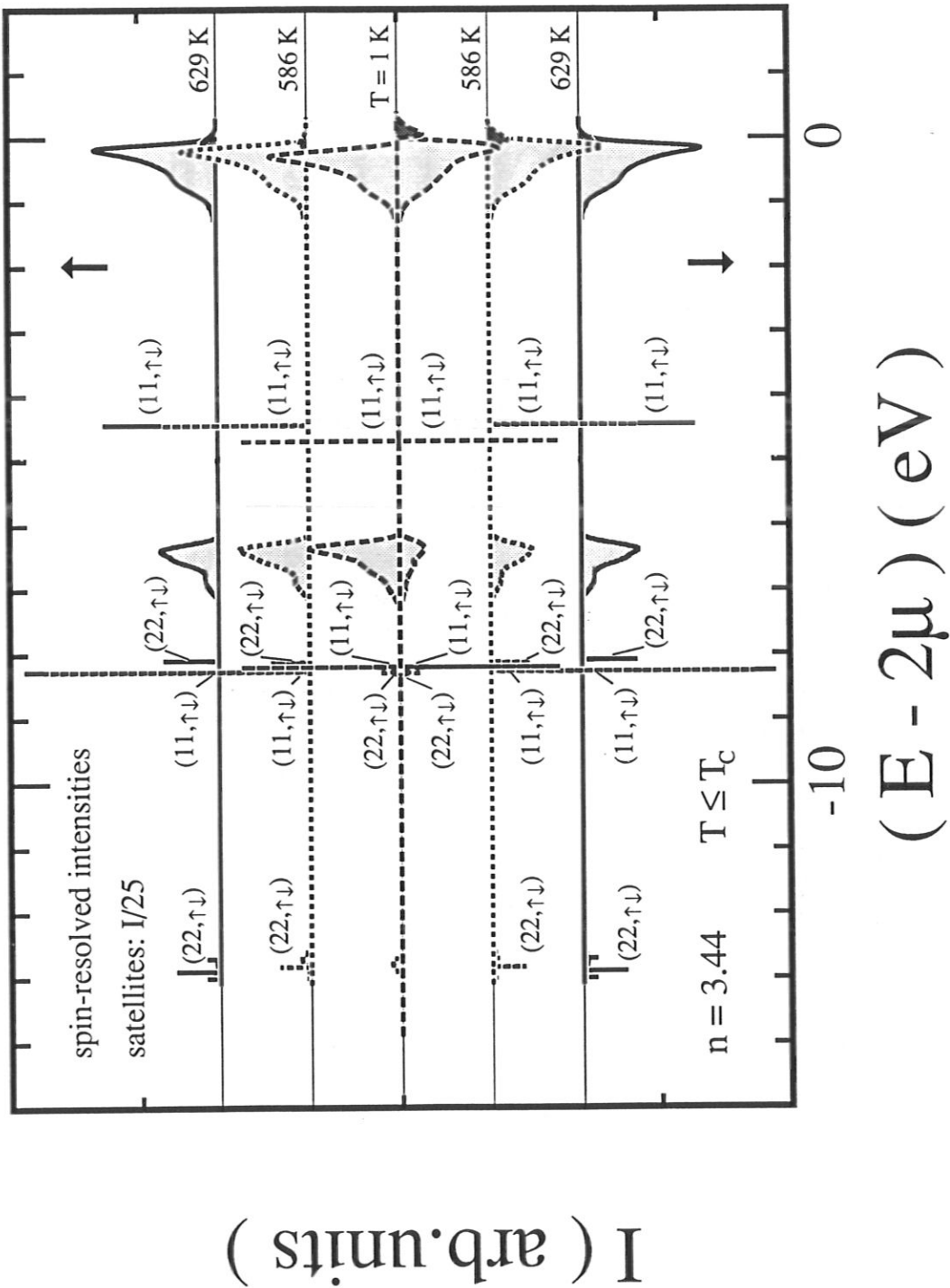


Abbildung 4.6.d: Wie Abb. 4.6.c, jedoch zur Bandbesetzung $n = 3.44$ für drei verschiedene Temperaturen $T \leq T_C = 629K$. Die übrigen Parameter gleichen denen der Abb. 4.5.d. Die obere Bildhälfte zeigt $I_{APS}^{(\uparrow)}$, die untere $I_{APS}^{(\downarrow)}$. Alle Satelliten sind 25-fach verkleinert dargestellt. Man beachte ferner die gegenüber den Abbn. 4.6.a - 4.6.c veränderte Energieskala.

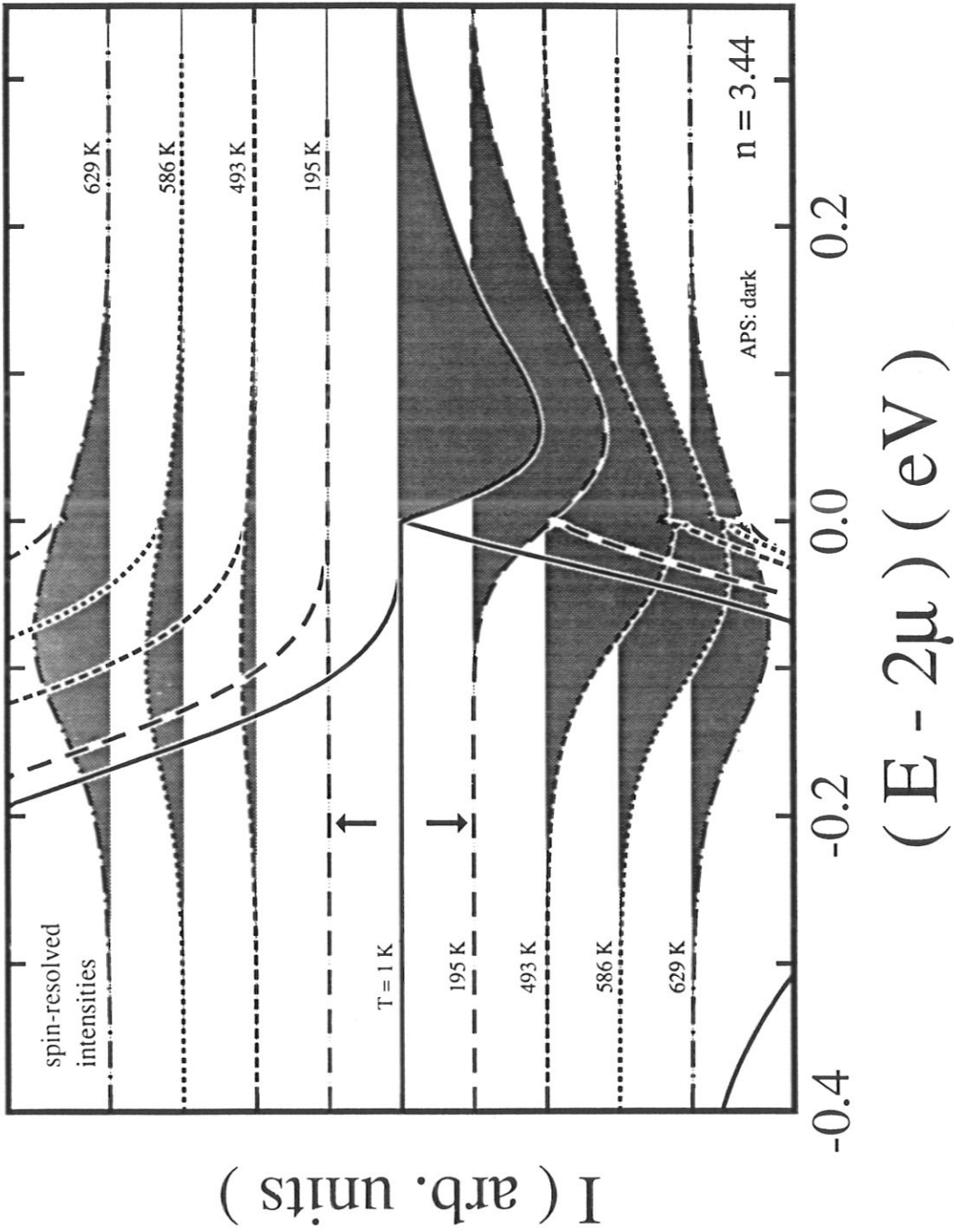


Abbildung 4.6.e: Wie Abb. 4.6.d, jedoch für den APS-Anteil bei den Temperaturen $T \leq T_C = 629\text{K}$, auf vergrößerter Energieskala. Die in die obere und untere Bildhälfte eintauchenden Kurven sind die Ausläufer von AE-Linienformen.

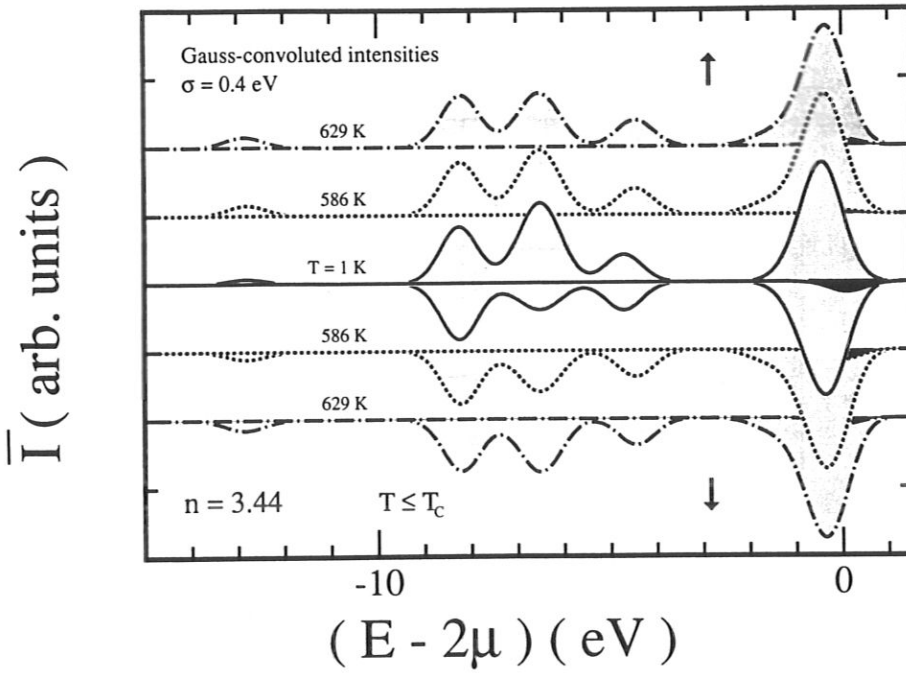


Abbildung 4.6.f: Die spinaufgelösten Intensitäten aus Abb. 4.6.d ($n = 3.44$, $T_C = 629$ K), gefaltet mit einer Gaußfunktion mit der Halbwertsbreite (FWHM) von 0.4 eV.

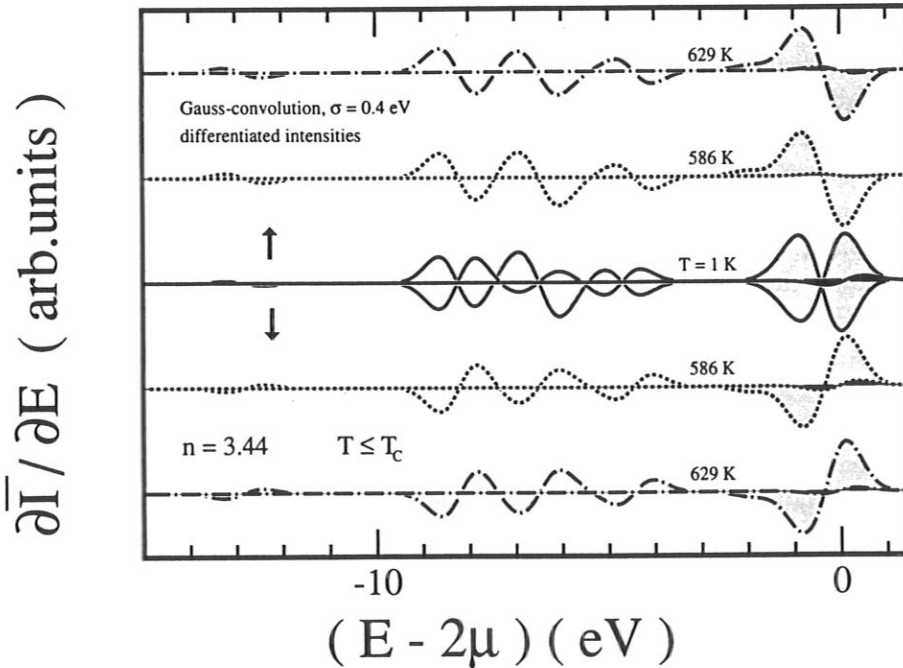


Abbildung 4.6.g: Wie Abb. 4.6.f, jedoch nach einfacher Ableitung der spinaufgelösten Intensität nach der Energie für drei verschiedene Temperaturen $T \leq T_C = 629$ K.

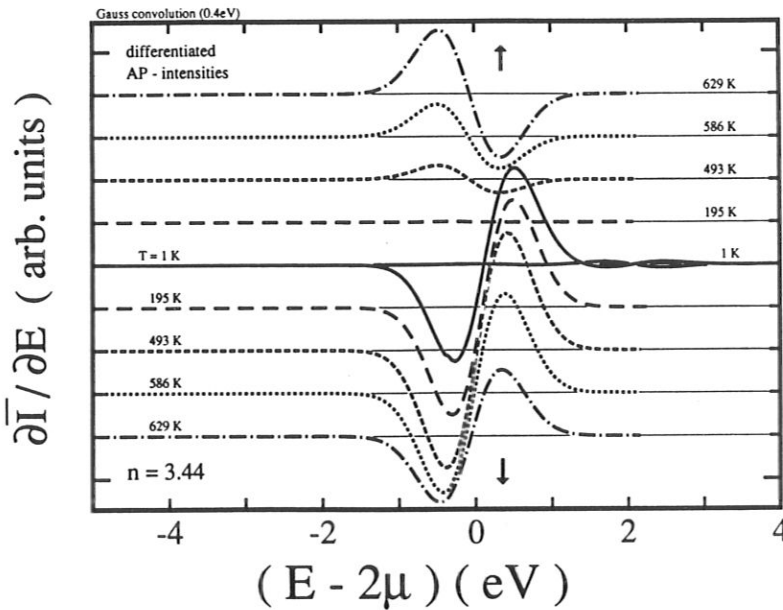


Abbildung 4.6.h: Wie Abb. 4.6.g, jedoch ausschließlich für den AP-Anteil.

Zustände treten AP-Satelliten nicht auf. Die AP-Intensitäten sind, der hohen Bandbesetzung entsprechend, sehr klein; um die Abhängigkeiten von Temperatur und Spin klarer herauszustellen, werden sie in Abb. 4.6.e in vergrößertem Maßstab gezeigt.

Mit dem Zweiband-System bei $n = 3.44$ und den anderen in den Abbn. 4.3.d und 3.5.a genannten Parametern ist eine überraschend realitätsnahe Ni-Simulation gelungen, was Effekte betrifft, welche ausschließlich vom 3d-Komplex verursacht werden und die damit natürlich für die magnetischen Eigenschaften des Ni gilt. Spinaufgelöstes APS an Ni wird ein sehr schwaches Signal liefern, sofern beide angeregte Elektronen 3d-Zustände besetzen. Kürzlich durchgeführte spinaufgelöste APS-Experimente [95] haben ergeben, daß die Linienform von Interband-(3d,sp)-Beiträgen dominiert ist, deren 3d-Anteil für die Temperaturabhängigkeit sorgt. Ein unmittelbarer Vergleich der hier diskutierten Resultate mit dem Experiment ist daher nicht möglich. Um Mißverständnisse zu vermeiden, sei an dieser Stelle betont, daß die in den Abbn. 4.6.a - 4.6.e präsentierten AE- und AP-Linienformen „Rohspektren“ sind, die in einem Experiment wegen etlicher Nebeneffekte nicht direkt zugänglich wären (Einfluß des lokalen Core-Zustandes, apparative Unsicherheiten, u.a.). Um in qualitativer Weise einen der wichtigsten experimentellen Einflüsse auf die Rohspektren, nämlich die Auswirkung der Apparatefunktion zu simulieren, wurden die Spektren zu $n = 3.44$ und $U = 6\text{eV}$ mit einer Gaußfunktion der Halbwertsbreite von 0.4 eV gefaltet, s. Abb. 4.6.f.

Damit wäre eine außerordentlich gute Auflösung gegeben, die bei Messungen dieser Art dicht an der Grenze des zur Zeit technisch Machbaren liegt [96]. Die breiten Peaks, die bei Energien um etwa -4.5, -8,3 bzw. -13.0 eV zentriert sind, stammen von Satelliten, s. Abb. 4.6.d. Insbesondere der Vergleich mit den intermediären AE-Intensitäten in Abb. 4.6.f zeigt, daß die in den Rohspektren sehr verschiedenen Signalformen nach der im Experiment unvermeidbaren Faltung mit der Apparatefunktion zu breit ausgedehnten Strukturen werden. Sie sind von *bandartigen* Linienformen kaum noch zu unterscheiden; Feinheiten in den Spektren werden in der Simulation des Experimentes bis zur Unkenntlichkeit verwischt. Weil Halbwertsbreiten in der Realität oftmals ungünstiger als der in Abb. 4.6.f gewählte Wert

sind, besteht aus der Sicht des Verfassers wenig Hoffnung, die detaillierten Aussagen der vorliegenden Theorie an Meßresultaten vollständig zu überprüfen. Eine zusätzliche Komplikation in der Frage nach der Vergleichbarkeit der Theorie mit dem Experiment besteht in der bei AES- und APS-Messungen üblicherweise angewendeten Modulationstechnik [97, 98], die auf nach der Energie abgeleitete Intensitäten führt. Die so gewonnenen Spektren der Ni-Simulation sind in den Abbn. 4.6.g und 4.6.h zu sehen.

Wann immer jedoch Korrelationseffekte in den Rohspektren dominieren, ist dies auch in den gefalteten Linienformen erkennbar, zumindest durch asymmetrische Strukturen bei ungünstigen Werten der Halbwertsbreite. Das gilt auch für die einfach abgeleiteten Intensitäten. Ein Zurückgreifen auf das simple Lander-Modell ist also auch dann unbegründet, wenn durch experimentelle Nebeneffekte ein Teil der in den Zweiteilchen-Intensitäten steckenden Information verdeckt ist.

4.7 Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen

Basierend auf (1.3.20) und (1.3.21) sind in Abschnitt 3.3 exakte und modellfreie Beziehungen zwischen integrierten AE-/AP-Intensitäten und gewissen Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen dargelegt worden, s. Gln. (3.3.8) – (3.3.13).

Im Teil (a) der Abb. 4.7.a wird im Fall $n = 2.6$ und der Ni-Simulation belegt, daß die Temperaturabhängigkeit der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $\langle n_i n_i \rangle / n^2$ nur in der unmittelbaren Umgebung der Curietemperatur signifikant wird. Eine RPA-Entkopplung dieses Erwartungswertes,

$$\langle n_i n_i \rangle \rightarrow \langle n_i \rangle^2 = n^2, \quad (4.7.1)$$

würde dagegen den T -unabhängigen Wert 1 liefern. Für das vollbesetzte System wäre dieses Ergebnis exakt, doch kommt es mit abnehmender Elektronenkonzentration zu steigenden Abweichungen von (4.7.1).

Im Teil (a) der Abb. 2.6.j wird dieselbe Korrelationsfunktion im Fall des Einband-Systems gezeigt, denn für das nichtentartete s -Band gilt:

$$\langle n_i n_i \rangle \equiv 2 \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle. \quad (4.7.2)$$

Die Dichte-Dichte-Korrelation verhält sich in beiden Fällen qualitativ ähnlich, doch nimmt diese Funktion im Zweiband-System weit größere Werte als im einfacheren Beispiel 2.6.j an. Der Grund dafür liegt einerseits in der starken intraatomaren Wechselwirkung, aufgrund der sich Elektronen aus demselben Teilband soweit wie möglich zu meiden versuchen, andererseits in der sehr kleinen Interband-Austauschgröße J . Letztere ermöglicht erst die deutliche Vergrößerung der Dichte-Dichte-Korrelation, denn die Abstoßung zwischen Elektronen aus verschiedenen Teilbändern ist wegen der Ungleichung (4.3.1) geringer.

Ein erstaunliches Ergebnis erhält man, wenn man die Magnetisierung-Dichte-Korrelation als Funktion der Zweiband-Magnetisierung aufträgt, s. Teil (b) der Abb. 4.7.a. Man erkennt das beinahe identische Temperaturverhalten von $\langle m_i n_i \rangle$ und m . Das mag auf den ersten Blick nicht überraschen, weil die RPA-Entkopplung eine solche Abhängigkeit gerade vorhersagt:

$$\langle m_i n_i \rangle (T) \rightarrow n \cdot m(T). \quad (4.7.3)$$

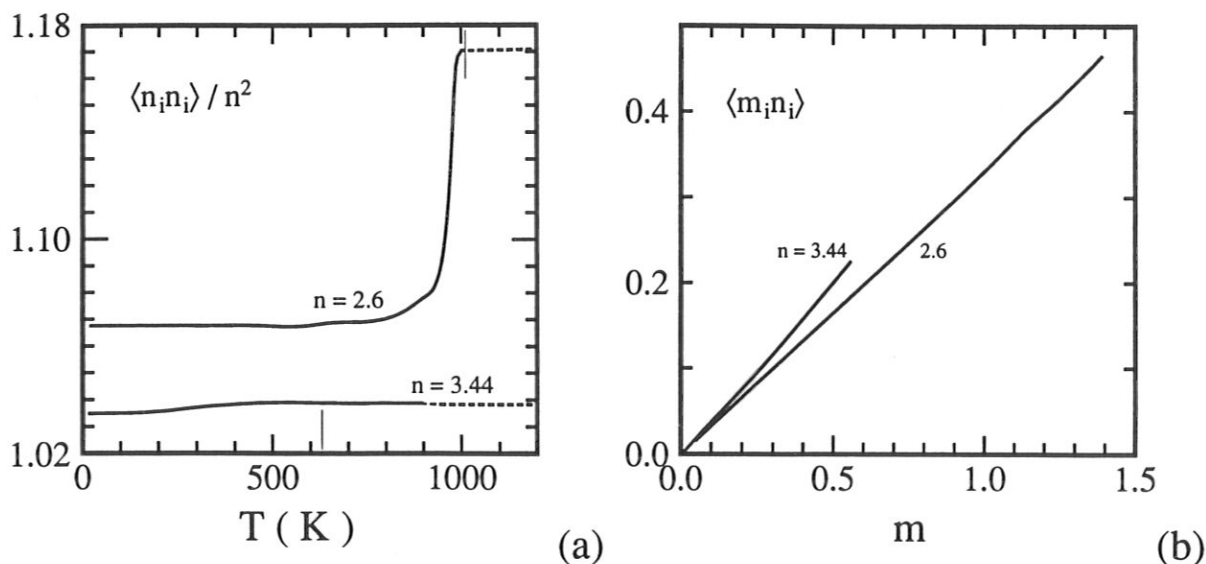


Abbildung 4.7.a: (a): Die Dichte-Dichte-Korrelation in Abhängigkeit von der Temperatur für die Bandbesetzung $n = 2.6$ und die Ni-Simulation. Der jeweilige Curiepunkt ist mit einer dünnen Markierung versehen.

(b): Die Magnetisierung-Dichte-Korrelation als Funktion der Magnetisierung m für die gleichen Beispiele wie im Teil (a). Alle übrigen Parameter sind wie in Abb. 4.4.a bzw. Abb. 4.4.d festgelegt.

Demnach sollte man eine Proportionalität zwischen $\langle m_i n_i \rangle$ und m in der Größenordnung von n erwarten dürfen. Dies findet man jedoch nicht bestätigt.

Aufgrund der exakten Beziehungen (3.3.12) und (3.3.13) im dritten Kapitel erscheint es nicht naheliegend, mit lediglich einer der beiden spinaufgelösten Spektroskopien direkt an Aussagen über die Magnetisierung des Systems gelangen zu können. Wenn das Elektronensystem aus nur einem Band besteht, ist dieses sogar sicher, da es dann wegen des Pauli-Prinzips keine diagonalen Partialintensitäten und damit auch keine Spinauflösung gibt:

$$D_{AES}^{d=1} = D_{APS}^{d=1} \equiv 0. \quad (4.7.4)$$

Doch dieser Sachverhalt ist im Zweiband-System differenziert zu sehen, denn man findet mit Teil (b) der Abb. 4.7.a in der Tat:

$$D_{APS}^{d=1} = Y_{APS}^{(1)} - Y_{APS}^{(l)} \propto m(T). \quad (4.7.5)$$

Kapitel 5

Resümee und Ausblick

5.1 Zusammenfassung

In den vorangegangenen Kapiteln ist der Einfluß elektronischer Korrelationen auf Auger-Elektronen- und Auftritts-Potential-Linienformen untersucht worden. Die gegenüber der Anwendung in der Elementanalyse relativ neuartige Zielsetzung, mit Hilfe von AES und APS die elektronische Struktur von Festkörpern zu untersuchen, wirft die Frage auf, welche Größen diese Untersuchungstechniken zugänglich machen.

Der zentrale Prozeß ist ohne Zweifel eine lokale Zweiteilchen-Anregung, die den Unterschied zu den geläufigeren Einteilchen-Spektroskopien IPE und PES bildet. Die Interpretation von Zweiteilchen-Spektren wird grundsätzlich dadurch verkompliziert, daß zu den *indirekten* elektronischen Korrelationen, die für Kollektivphänomene maßgeblich sind und die Einquasiteilchen-Zustandsdichte festlegen, noch die *direkte* Wechselwirkung zwischen den angeregten Elektronen oder Löchern hinzukommt. Diese Erschwernis hat aber auch den Vorteil, neue Einblicke in die durch Korrelationen verursachten Erscheinungen zu gewähren.

Die gemeinsame Ursprungsfunktion, auf die sich AES und APS simultan zurückführen lassen, ist die Zweiteilchen-Spektraldichte, für deren physikalisches Verständnis zwei Problemfelder relevant sind:

- (A) Wie kann in einer dem wechselwirkenden Elektronensystem angemessenen Weise die Zweiteilchen-Spektraldichte abgeleitet werden?
- (B) In welcher Weise wird sie durch unvermeidbare und z.T. experimentell bedingte Randeffekte modifiziert?

Die vorliegende Arbeit, die teilweise bereits publiziert worden ist, [83, 89], behandelte ausschließlich Frage (A) und das dadurch aufgeworfene komplexe Vielteilchenproblem. Dessen Bearbeitung teilt sich schematisch in drei Schritte auf:

Für das System, dessen elektronische Struktur weitgehend durch Korrelationsphänomene dominiert wird, benötigt man zunächst eine glaubwürdige Modellvorstellung. Es ist wohl bekannt, daß die große Vielfalt magnetischer Materialien bis zum heutigen Tage nur durch etliche, sehr unterschiedliche Modelle beschrieben werden kann, von denen jedes einen stark eingeschränkten Gültigkeitsbereich hat. Die Auswahl des Modells ist ein ernstzunehmender Punkt, wenn das Studium auf die Erkennbarkeit magnetischer Phasenübergänge in der

Zweiteilchen-Spektraldichte hin ausgerichtet sein soll.

Der s -Band-Hubbard-Hamiltonoperator wurde für ein System gewählt, das aus einem einzigen Energieband besteht. Damit sind in einem einfachen Rahmen bereits die für eine magnetische Ordnung im itineranten Elektronensystem entscheidenden Modellparameter eingeführt worden. Es sind dies die intraatomare Kopplungsstärke, die Teilchendichte, die BDOS und die Temperatur. Um eine Beschreibung der der Realität näher liegenden Multiband-Systeme zu ermöglichen, wurde ein in gewisser Hinsicht verallgemeinertes Modell des Magnetismus verwendet, in welchem die Teilbänder gekoppelt sind, so daß neben den Intra- auch Interband-Wechselwirkungen berücksichtigt werden können. Das Multiband-Modell hat seine Tauglichkeit [75] bereits an so verschiedenartigen Magnetika wie Ni [56, 57], NiO [76] und EuO [88, 99, 100] unter Beweis gestellt.

Der nächste Schritt des theoretischen Aufbaus besteht in der Berechnung der Zweiteilchen-Spektraldichte, indem man sie in ein Funktional von Einteilchen-Größen umwandelt. Da teilweise mit Elektronen gefüllte Systeme eine Temperaturabhängigkeit erwarten lassen, wurde eine Zerlegung in modifizierte Leiterdiagramme im Matsubaraformalismus durchgeführt, die direkte Korrelationen exakt und indirekte Korrelationen näherungsweise mit Hilfe angekleideter Einteilchen-Propagatoren berücksichtigt. — Für voll besetzte bzw. leere Elektronensysteme läßt sich die Zweiteilchen-Spektraldichte dagegen exakt angeben. Diese beiden nichttrivialen Grenzfälle unmagnetischer Bänder erlaubten das ausschließliche Studium der Auswirkungen direkter Korrelationen auf AE- bzw. AP-Spektren und dienten außerdem als Test für die approximativen Ergebnisse im allgemeinen Fall beliebiger Temperaturen und Elektronenkonzentrationen. Die vorliegende Zweiteilchen-Theorie erwies sich in diesen beiden Grenzfällen als exakt.

Die Einteilchen-Selbstenergie im kollektiv ordnenden System wird in der dritten Stufe approximativ bestimmt. Diese enthält die Information über die magnetische Ordnung; die damit verbundene Einquasiteilchen-Zustandsdichte ist die konkrete Eingangsgröße für die Zweiteilchen-Spektralfunktion. Mit Hilfe einer selbstkonsistenten Methode spektraler Momente wurde demonstriert, daß sowohl das Einband-, als auch das Multiband-Modell paraferromagnetische Phasenübergänge mit realistischen Curietemperaturen zeigen, wenn in Abhängigkeit von der BDOS sowohl die Intra-band-Kopplungsstärke einen kritischen Wert überschreitet als auch die Bandbesetzung innerhalb kritischer Grenzen liegt. Die Kopplung zwischen den Teilbändern des Mehrband-Systems beeinflußt zwar das magnetische Moment bei verschwindender Temperatur und die Lage des Curiepunktes, doch ist diese für die Existenz der ferromagnetischen Phase allein nicht ausschlaggebend.

Die resultierenden AE- und AP-Spektren des hochkorrelierten Modellsystems zeigten vor allem in der ferromagnetischen Phase eine bemerkenswerte Temperaturabhängigkeit, die in Zusammenhang mit den Einquasiteilchen-Zustandsdichten zu bringen und damit leicht auf den magnetischen Zustand des Systems zurückführbar war. Das Mehrband-System erlaubte wegen der Möglichkeit, Elektronen oder Löcher mit parallelen Spins anzuregen, die Spinauflösung der AE- und AP-Linienformen; der Übergang von der ferro- in die paramagnetische Phase konnte bei jedem Modellbeispiel eindeutig identifiziert werden. Der kritische Punkt ließ sich darüberhinaus an den von der Temperatur abhängigen Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen ablesen. Sie wurden aus integrierten AE- und AP-Spektren, den sog. totalen Intensitäten gewonnen. Da diese modellunabhängig sind und exakte Summenregeln darstellen, hat man in ihnen nützliche Kriterien zur Hand, um die in Modellrechnungen i.a. unvermeidbaren Approximationen zu testen.

Satelliten sind als gebundene Zweiteilchen-Zustände interpretierbar, welche durch das Gitter propagieren, ohne in einem impuls- oder energierhaltenden Prozeß zerfallen zu können. Sie werden durch direkte Korrelationen verursacht. Die im Falle ihres Auftretens relativ große Kopplungsstärke ist der Grund für ihre Stabilität. Satelliten dominieren das Spektrum; die breiteren, bandartigen Strukturen fallen bis auf einen unbedeutenden Rest zusammen. Diese Resultate sind die größten gefundenen Abweichungen im Vergleich mit dem konventionellen Selbstfaltungsmodell. An solchen Systemen erscheint es unmöglich, durch einfaches Entfalten der AE- oder AP-Linienformen Informationen über die Einteilchen-Zustandsdichten erhalten zu können.

Angesichts der als Input benötigten Parameter und Größen stellt sich die Frage, auf welche Art und Weise die spezielle Wahl einer BDOS die Resultate beeinflusst. Die Antwort läßt sich in drei Punkte aufteilen.

Man stellt fest, daß die Hubbard-Bänder des Einquasiteilchen-Spektrums der BDOS des jeweiligen Teilbandes ähneln. Das ist auf das Verhalten der Einteilchen-Selbstenergie zurückzuführen, die im hochkorrelierten System die Ursache des Quasiteilchen-Gaps ist. Die Strukturen des Einquasiteilchen-Spektrums übertragen sich auf die D -Funktionen und damit auf die fertigen Linienformen. Durch ihren der Faltung ähnlichen Charakter haben die D -Funktionen eine glättende Wirkung, so daß feinere Details in der BDOS für AES und APS solange irrelevant sind, wie keine Satelliten auftreten, die eine der BDOS ähnelnde Gestalt besitzen.

Entscheidend für die Beeinflussung der Zweiteilchen-Spektren durch die BDOS ist deren Bedeutung für einen magnetischen Phasenübergang. Die im zweiten Kapitel ausführlich diskutierten Bedingungen für die Existenz einer selbstkonsistenten ferromagnetischen Lösung sind für verschiedene Gitterstrukturen unterschiedlich. Ein krasses Beispiel ist eine BDOS mit rechteckiger Gestalt. Das System bleibt selbst bei beliebig hoher Intraband-Kopplungsstärke bei jeder Bandbesetzung paramagnetisch [101]!

Jedoch behalten die hier dargelegten allgemeinen Befunde über typische Charakteristika in AES und APS ihre Gültigkeit.

5.2 Weiterführende Aspekte

Eine naheliegende Ergänzung, die dem Grundaufbau der Theorie keinerlei Erweiterung abverlangen würde, bietet sich in numerischen Auswertungen mit realistischen Zustandsdichten an. An anderer Stelle ist bereits gesagt worden, daß experimentelle Hinweise dafür vorliegen [92], daß bei Ni eines der beiden angeregten AP-Elektronen aus dem sp -Band stammen kann. Um in einer Modellrechnung dieser Möglichkeit zu entsprechen, müßte man zu den partiellen Ni-3d-BDOS', die bereits von Nolting et al. [56] für die Untersuchung von Einquasiteilchen-Anregungen verwendet worden sind, die sp -Zustandsdichte hinzuaddieren. Die sp -Elektronen sind in so hohem Maße delokalisiert, daß die wirksame Intraband-Kopplung zu schwach ist, um zu einer spontanen Magnetisierung des sp -Bandes zu führen; man hat aufgrund von Interband-Wechselwirkungen eine Polarisierung durch die beiden oberen ferromagnetisch ordnenden 3d-Teilbänder zu erwarten. Die Spinaufspaltung des sp -Bandes beim Ni ist mit Hilfe der IPE experimentell nachgewiesen worden [102]. Da der größte Teil des sp -Bandes oberhalb des 3d-Komplexes liegt, werden vor allem andere AP-Spektren zu finden sein, die wegen

der großen sp -Bandbreite im Vergleich zu den Strukturen bei der Ni-Simulation weit ausgehnter sein werden. Wegen der relativ kleinen sp -Kopplungsstärken wird es jedoch keine AP-Satelliten geben. Die AE-Intensitäten werden durch die Anwesenheit des sp -Bandes kaum beeinflusst werden.

Neue Ergebnisse, vor allem in Hinblick auf direkte Korrelationen, wird es in AES dann geben, wenn man im Gegensatz zu den hier präsentierten Auswertungen zum Zweiband-System alle fünf $3d$ -Teilbänder berücksichtigt. In den indirekten Korrelationen werden nach wie vor die beiden oberen $3d$ -Teilbänder dominieren, da die übrigen wegen ihrer Lage weit unterhalb des chemischen Potentials bei realistischen Temperaturen vollständig gefüllt sind und daher in den Einquasiteilchen-Spektren weder in Hubbard-Bänder aufspalten noch polarisiert sein werden.

Die oben formulierte Fragestellung (B) geht über die Zielsetzung dieser Darlegung hinaus. Zu den wichtigsten Problemen, die auftreten, wenn das Valenzbandsystem nicht mehr isoliert betrachtet werden soll, gehören Eigenschaften und Einfluß des notwendig mit angeregten Core-Zustandes. Das Core-Loch (Core-Elektron) ist als eine bedeutende Störung des Valenzbandes aufzufassen [23] – [25], welche insbesondere die Zweiteilchen-Spektren von $4f$ -Systemen deutlich modifiziert [103, 104] und sicher nicht vernachlässigt werden darf, wenn ein quantitativer Vergleich zwischen Theorie und Experiment angestrebt wird. Die bisher dargelegte Theorie würde dazu in jedem Schritt erheblichen Veränderungen unterworfen werden müssen. So muß der Hamiltonoperator einen zusätzlichen Wechselwirkungsterm enthalten, der den Übergang eines Elektrons aus einem Core-Zustand ins Valenzband berücksichtigt (APS), oder umgekehrt die Rekombination eines unbesetzten Core-Niveaus durch ein Teilchen aus dem Energieband (AES). Also betrifft der „zentrale Prozeß“ drei Teilchen, so daß man eine Dreiteilchen-Matsubarafunktion zu errechnen hat. Für den Fall sehr kleiner Teilchendichten und unendlicher Lebensdauer des angeregten Core-Loches lassen sich Argumente dafür finden [24, 26, 105], dieses Problem durch eine Faktorisierung in eine Zweiteilchen-Matsubarafunktion und einen Core-Elektron-„Propagator“ zu vereinfachen. Eine andere Simplifikation liegt darin, in einer diagrammatischen Entwicklung nur das durch den Core-Zustand dargestellte Potential durch eine geeignete Renormierung der Vertexfunktionen zu berücksichtigen [26].

Folgt man dem Weg, den Natta und Joyes vorgeschlagen haben [25] und der auf den Arbeiten zur Photoemission von Nozieres et al. [106, 107] und Nozieres und De Dominicis [26] basiert, müßte einer praktischen Durchführbarkeit der erweiterten Theorie die Berechnung des Matrixelementes der Wechselwirkung zwischen dem Core und dem Valenzband vorangehen. Dabei ist entscheidend, welcher Core-Zustand am AE-/AP-Prozeß im Valenzband teilnimmt; an dieser Stelle können Abhängigkeiten des Core-Valenzband-Überganges vom Wellenvektor und vom Spin des einfallenden Elektrons das Problem zusätzlich verkomplizieren [27, 29, 30]. Im Falle des Ni kann z.B. diskutiert werden, welche Rolle eine eventuelle Spinaufspaltung des $2p_{3/2}$ -Niveaus, das für eines der beiden Elektronen bei einer AP-Anregung in Frage kommt [7, 108], für die Spinunterscheidbarkeit der Spektren spielt. Abschirmeffekte zwischen dem Core-Niveau und dem Valenzband müssen außerdem mit einbezogen werden, was die Bestimmung einer Dielektrizitätsfunktion erforderlich macht.

Cini und D'Andrea [109] diskutieren die Bedeutung energetisch tief liegender Core-Löcher für die Entstehung von *Plasmonen* im Valenzband. Wegen ihrer hohen Energien zwischen 5 und 25 eV kommen sie als Stoßpartner für Satelliten in Frage und können für einen möglichen Zerfallsmechanismus gebundener Zweiteilchen-Zustände in Betracht gezogen werden.

Abbildungsverzeichnis

1.0.a	Elementare Anregungsprozesse	6
1.3.a	Thermodynamische Vorfaktoren und Spektraldichte	17
2.1.a	BDOS	23
2.2.a	BDOS \rightarrow QDOS	30
2.3.a	QDOS des Einband-Paramagneten	32
2.3.b	($T = 0$)-Polarisation und spontane Magnetisierung	34
2.3.c	QDOS des Einband-Ferromagneten	36
2.4.a	Allgemeines Diagramm der Zweiteilchen-Matsubarafunktion	40
2.4.b	Allgemeines Vertexdiagramm	40
2.4.c	Einfache Diagramme des Vertexparts	41
2.4.d	Diagrammatische Darstellung der Vertexfunktion	41
2.4.e	Angekleidete Zweiteilchen-Matsubarafunktion	42
2.4.f	Modifizierte Leiterapproximation	42
2.4.g	Polarisationspropagator	44
2.4.h	Integrationskontur	45
2.5.a	AE- und AP-Intensitäten des Paramagneten	50
2.5.b	Selbstfaltungsspektraldichte und Selbstfaltungskorrektur	52
2.5.c	Hauptwertintegrale $F_0(E)$ und $F_1(E)$	54
2.5.d	AE- und AP-Intensitäten des stark korrelierten Paramagneten	55
2.5.e	AP-Satelliten	57
2.6.a	Funktion $D_0(E)$ des Einband-Ferromagneten	59
2.6.b	Funktion $D_1(E)$ des Einband-Ferromagneten	60
2.6.c	Funktion $F_0(E)$ des Einband-Ferromagneten	61
2.6.d	Funktion $F_1(E)$ des Einband-Ferromagneten	62
2.6.e	Zweiteilchen-Spektraldichte des Einband-Ferromagneten	63

2.6.f	AP-Intensitäten des Einband-Ferromagneten	65
2.6.g	AP-Intensitäten nach Lander	66
2.6.h	Auger Intensitäten des Ferromagneten	67
2.6.i	AE-Intensitäten nach Lander	69
2.6.j	Einband-Korrelationsfunktionen	70
3.5.a	Zweiband-BDOS	84
3.5.b	Zweiband-Selbstfaltungsspektraldichte	84
3.5.c	Zweiband-Faltungskorrektur	85
3.5.d	Zweiband-Hilberttransformierte	86
3.5.e	Exakte Zweiband-AP-Intensität	88
3.5.f	Mögliche Satelliten im Mehrband-System	89
3.5.g	Exakte AP-Intensität: \bar{U} -Variation	90
3.5.h	Direkte AP-Intensitäten: \bar{U} -Variation	91
3.5.i	Nichtdiagonale AP-Intensitäten: \bar{U} -Variation	92
3.5.j	Diagonale AP-Intensitäten: J -Variation	92
3.5.k	Nichtdiagonale AP-Intensitäten: J -Variation	93
3.7.a	Exakte Zweiband-AE-Intensität	96
3.7.b	Diagonale AE-Intensität: \bar{U} -Variation	98
3.7.c	Nichtdiagonale AE-Intensität: \bar{U} -Variation	99
3.7.d	Diagonale AE-Intensität: J -Variation	99
3.7.e	Nichtdiagonale AE-Intensität: J -Variation	100
4.1.a	Allgemeines Diagramm der Zweiband-Zweiteilchen-Matsubarafunktion .	102
4.1.b	Allgemeines Multiband-Vertexdiagramm	102
4.1.c	Vertexfunktion Γ (ohne Spin-Flip)	103
4.1.d	Angekleidete Zweiband-Zweiteilchen-Matsubarafunktion	104
4.1.e	Vertexfunktion $\tilde{\Gamma}$ (mit Spin-Flip)	104
4.1.f	Leiterapproximation für Γ	105
4.1.g	Leiterapproximation für $\tilde{\Gamma}$	106
4.1.h	Polarisationspropagator — abhängig von Spin und Band	107
4.3.a	Phasendiagramm	115
4.3.b	Magnetisierung des Zweiband-Systems: J -Variation	116

4.3.c	Umladung zwischen Teilbändern	117
4.3.d	Spontane Magnetisierung: n -Variation	118
4.3.e	Ni-Simulation	118
4.4.a	QDOS: $n = 2.6$	119
4.4.b	QDOS: $n = 3.2$	120
4.4.c	QDOS: $n = 3.6$	121
4.4.d	QDOS: Ni-Simulation	121
4.5.a	Zweiteilchen-Spektraldichte: $n = 2.6$	123
4.5.b	Zweiteilchen-Spektraldichte: $n = 3.2$	124
4.5.c	Zweiteilchen-Spektraldichte: $n = 3.6$	125
4.5.d	Zweiteilchen-Spektraldichte: Ni-Simulation	126
4.6.a	Spinaufgelöste Intensität: $n = 2.6$	130
4.6.b	Spinaufgelöste Intensität: $n = 3.2$	131
4.6.c	Spinaufgelöste Intensität: $n = 3.6$	132
4.6.d	Spinaufgelöste Intensität: Ni-Simulation	133
4.6.e	Spinaufgelöstes AP-Spektrum: Ni-Simulation	134
4.6.f	Faltung mit Gaußfunktion	135
4.6.g	Faltung von $\frac{\partial I}{\partial E}$ mit Gaußfunktion	135
4.6.h	Faltung von $\frac{\partial I_{APS}}{\partial E}$ mit Gaußfunktion	136
4.7.a	Korrelationsfunktionen im Zweiband-System	138

Literaturverzeichnis

- [1] R. Weissmann und K. Müller, Surf. Sci. **105**, 251, 1981
- [2] R. L. Park und J. E. Houston, J. Vac. Sci. Technol. **11**, 1, 1974
- [3] J. Kirschner, in „Electron Spectroscopy for Surface Analysis“, Vol. 4, in „Topics in Current Physics“, Ed. : H. Ibach et al. , Springer, Berlin, 1977
- [4] J. C. Fuggle, in „Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Application“, Ed. : C. R. Brundle und A. D. Baker, Academic, New York, 1981, S.85-152
- [5] D. Weightman, Rep. Prog. Phys. **45**, 753, 1982
- [6] G. Ertl und J. Küppers, „Low Energy Electrons and Surface Chemistry“, in „Monographs in Modern Chemistry“, Vol.4, Weinheim, 1974
- [7] S. W. Schulz, Dissertation, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt, 1986
- [8] C. J. Powell, Surf. Sci. **44**, 29, 1974
- [9] G. E. Laramore, Phys. Rev. B **18**, 5254, 1978
- [10] P. T. Cohen, T. L. Einstein, Y. Fukuda und R. L. Park, Appl. Surf. Sci. **1**, 538, 1978
- [11] American Society for Testing and Materials, „Standard practice for elemental identification by Auger electron spectroscopy“ (E827-88), SIA Surface Interface Anal. **14**, 419, 1988
- [12] T. W. Haas, J. T. Grant und G. J. Dooley, III, Appl. Phys. **43**, 1853, 1972
- [13] T. W. Haas, J. T. Grant und M. P. Hooker, Appl. Surf. Sci. **2**, 433, 1979
- [14] W. Nolting, Z. Phys. B - Cond. Matter **80**, 73, 1990
- [15] W. Nolting, „Quantentheorie des Magnetismus“, Bd.1, Teubner, Stuttgart, 1986
- [16] J. J. Lander, Phys. Rev. **91**, 1382, 1953
- [17] G. F. Amelio, Surf. Sci. **22**, 301, 1970
- [18] V. Dose und H. Scheidt, Appl. Phys. **19**, 19, 1979
- [19] V. Dose und Th. Fauster, Appl. Phys. **20**, 299, 1979
- [20] V. Dose, Th. Fauster und H. -J. Gossmann, J. Comput. Phys. **41**, 34, 1981

- [21] V. Dose, Th. Fauster und H. Scheidt, *J. Phys. F* **11**, 1801, 1981
- [22] V. Dose und H. Scheidt, *Phys. Status Solidi B* **103**, 247, 1981
- [23] A. M. Baro, M. Salmeron und J. M. Rojo, *J. Phys. F* **5**, 826, 1975
- [24] M. Cini, *Surf. Sci.* **87**, 483, 1979
- [25] M. Natta und P. Joyes, *J. Phys. Chem. Solids* **31**, 447, 1970
- [26] P. Nozieres und C. T. De Dominicis, *Phys. Rev.* **178**, 1097, 1969
- [27] P. J. Feibelman, E. J. McGuire und K. C. Pandey, *Phys. Rev. B* **15**, 2202, 1977
- [28] C. O. Almbladh, A. L. Morales und G. Grossmann, *Phys. Rev B* **39**, 3489, 1989, und darin genannte Referenzen
- [29] K. C. Pandey, *Phys. Rev. B* **14**, 1577, 1976
- [30] J. E. Houston, *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 255, 1975
- [31] G. E. Laramore, *Phys. Rev. B* **18**, 5254, 1978
- [32] G. Sawatzky, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 504, 1977
- [33] G. Sawatzky und A. Lenselink, *Phys. Rev. B* **21**, 1790, 1980
- [34] P. A. Bennett, J. C. Fuggle, F. U. Hillebrecht, A. Lenselink und G. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **27**, 2194, 1983
- [35] C. J. Powell, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 1179, 1973
- [36] T. E. Gallon und J. B. Nuttel, *Surf. Sci.* **53**, 698, 1975
- [37] L. Yin, I. Adler, T. Tsang, M. H. Chen und B. Crasemann, *Phys. Lett. A* **46**, 113, 1973
- [38] S. P. Kowalczyk, R. A. Pollack, F. R. McFeely, L. Ley und D. A. Shirley, *Phys. Rev. B* **8**, 2387, 1973
- [39] P. J. Bassett, T. E. Gallon, J. A. D. Matthew und M. Prutton, *Surf. Sci.* **35**, 63, 1973
- [40] E. Antonides, E. C. Janse und G. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **15**, 1669, 1977
- [41] H. H. Madden, D. M. Zehner und J. R. Noonan, *Phys. Rev. B* **17**, 3074, 1978
- [42] A. C. Parry-Jones, P. Weightman und P. T. Andrews, *J. Phys. C* **12**, 1587, 1979
- [43] C. J. Powell, *Solid State Commun.* **26**, 557, 1978
- [44] L. I. Yin, T. Tsang und I. Adler, *Phys. Rev B* **15**, 2974, 1977
- [45] J. E. Houston, *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 255, 1975
- [46] M. Cini, *Solid State Commun.* **20**, 605, 1976
- [47] F. Cyrot-Lackmann, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, 300, 1972
- [48] M. Cini, *Solid State Commun.* **24**, 681, 1977

- [49] P. J. Feibelman, E. J. McGuire und K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett. **36**, 1154, 1976
- [50] M. Salmeron, A. M. Baro und J. M. Rojo, Phys. Rev. B **13**, 4348, 1976
- [51] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **276**, 238, 1963
- [52] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **277**, 237, 1964
- [53] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **281**, 401, 1964
- [54] J. Kanamori, Progr. Theor. Phys. **30**, 275, 1963
- [55] M. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159, 1963
- [56] W. Nolting, W. Borgiel, V. Dose und Th. Fauster, Phys. Rev. B **40**, 5015, 1989
- [57] W. Borgiel und W. Nolting, Z. Phys. B - Cond. Matter **78**, 241, 1990
- [58] M. Cini, J. Phys. : Cond. Matter **1**, SB55, 1989
- [59] V. Drchal und J. Kudrnovský, J. Phys. F: Met. Phys. **14**, 2443, 1984
- [60] M. Kotrla und V. Drchal, J. Phys. : Cond. Matter, im Druck
- [61] M. Kotrla und V. Drchal, J. Phys. : Cond. Matter **1**, 4783, 1989
- [62] C. Presilla und F. Sacchetti, J. Phys. F **17**, 779, 1987
- [63] A. L. Fetter und J. D. Walecka,
„Quantum Theory of Many-Particle Systems“, McGraw-Hill, New York, 1971
- [64] D. Pines, in „Frontiers in Physics“, Benjamin, New York, 1962, S.65ff
- [65] V. M. Galitskii, JETP **34**, 151, 1958
- [66] „Quantum Statistical Mechanics“,
Ed. : L. P. Kadanoff und G. Baym, Benjamin, New York, 1962, Kapitel 13, S.182ff
- [67] G. Trégliä, M. C. Desjonquères, F. Ducastelle und D. Spanjaard,
J. Phys. C **14**, 4347, 1981
- [68] G. Trégliä, F. Ducastelle und D. Spanjaard, Phys. Rev. B **21**, 3729, 1980
- [69] W. Nolting, „Quantentheorie des Magnetismus“, Bd.2, Teubner, Stuttgart, 1986
- [70] A. M. Oles, G. Trégliä, D. Spanjaard und R. Jullien, Phys. Rev. B **34**, 5101, 1986
- [71] M. Cini, J. Phys. Cond. Matter **1**, SB55, 1989
- [72] G. Geipel und W. Nolting, Phys. Rev. B **38**, 2608, 1988
- [73] W. Nolting und W. Borgiel, Phys. Rev. B **39**, 6962, 1989
- [74] J. Braun, W. Nolting und G. Borstel, Surf. Sci. **251/252**, 22, 1991
- [75] W. Nolting, in „Electronic Structure in Solids“ (Proc. 20st Int. Symp.),
Ed. : P. Ziesche und H. Eschrig, Akad. Berlin, 1991, S.109

- [76] W. Nolting, L. Haurert und G. Borstel, Phys. Rev. B **46**, 4426, 1992
- [77] s. Ref. [69], Anhang B
- [78] W. Nolting, „Grundkurs: Theoretische Physik, 7: Vielteilchentheorie“, Neufang-Zimmermann-Verlag, Ulmen, 1990
- [79] s. Ref. [69], S. 232ff
- [80] A. B. Harris und R. V. Lange, Phys. Rev. **157**, 295, 1967
- [81] W. Nolting, Z. Phys. **255**, 25, 1972
- [82] W. Nolting, priv. Mitteilung
- [83] W. Nolting, G. Geipel und K. Ertl, Phys. Rev. B **44**, 12197, 1991
- [84] K. P. Kämper, Dissertation, RWTH Aachen, 1989
- [85] K. P. Kämper, W. Schmitt und G. Güntherodt, Phys. Rev. B **42**, 10696, 1990
- [86] J. Braun, W. Nolting und G. Borstel, Surf. Sci. **251/252**, 22, 1991
- [87] T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. **14**, 351, 1955
- [88] W. Nolting, W. Borgiel und G. Borstel, Phys. Rev. B **37**, 7663, 1988
- [89] W. Nolting, G. Geipel und K. Ertl, Phys. Rev. B **45**, 5790, 1992
- [90] J. K. Lang, Y. Baer und P. A. Cox, J. Phys. F **11**, 121, 1981
- [91] W. Nolting, Phys. Status Solidi B **96**, 11, 1979
- [92] W. Nolting, G. Geipel und K. Ertl, to be published
- [93] G. Geipel und W. Nolting, unveröffentlicht
- [94] M. I. Darby, Brit. J. Appl. Phys. **18**, 1415, 1967
- [95] M. Vonbank, K. Ertl und V. Dose, to be published
- [96] R. Drube und K. Ertl, priv. Mitteilung
- [97] G. Shinoda, T. Suzuki und S. Kato, Phys. Rev. **95**, 840, 1954
- [98] J. E. Houston und R. L. Park, Rev. Sci. Instr. **43**, 1437, 1972
- [99] W. Nolting, G. Borstel und W. Borgiel, Phys. Rev. B **35**, 7015, 1987
- [100] W. Nolting, G. Borstel und W. Borgiel, Phys. Rev. B **35**, 7025, 1987
- [101] W. Nolting und W. Borgiel, unveröffentlicht
- [102] K. Starke, K. Ertl, M. Donath und V. Dose, Vac. **41**, 755, 1990
- [103] H. Hinkers, R. Stiller und H. Merz, Phys. Rev. B **40**, 10594, 1989
- [104] W. von der Linden und V. Dose, priv. Mitteilung, to be published

- [105] D. C. Langreth, Phys. Rev. B **1**, 471, 1970
- [106] B. Roulet, J. Gavoret und P. Nozieres, Phys. Rev. **178**, 1072, 1969
- [107] P. Nozieres, J. Gavoret und B. Roulet, Phys. Rev. **178**, 1084, 1969
- [108] H. Merz und K. Ertl, priv. Mitteilung
- [109] M. Cini und A. D'Andrea, Phys. Rev. B **29**, 6450, 1984

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. V. Dose bedanken für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und die angenehme Zusammenarbeit bei der Anfertigung dieser Arbeit. Sein reges Interesse an ihrem Fortgang und seine ständige Diskussionsbereitschaft waren stets eine wichtige Hilfe für mich.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. W. Nolting. Sein intensives, kritisches Engagement, das oft über Fragen zur Physik hinausreichte, und sein gern gegebener freundschaftlicher Rat waren und sind mir ein Vorbild. Er war auch unter schwierigen Rahmenbedingungen zu vorausschauenden und wertvollen Anregungen bereit und hat auf vielfache Weise nachhaltig zum Gelingen der vorliegenden Arbeit beigetragen.

Herrn Dr. Karl (Charly) Ertl möchte ich meinen aufrichtigen Dank für viele Diskussionen und ungezählte Hilfeleistungen aussprechen. Seine Fähigkeit, sowohl komplizierte als auch scheinbar einfache Zusammenhänge zu hinterfragen und transparent zu machen, hat mir das Verständnis und das Lösen so manch einer Problemstellung erleichtert. Auch Herrn Dr. Markus Donath bin ich sowohl für viele nützliche und freundschaftliche Kommentierungen und Hinweise als auch für manch angenehme private Stunde zu Dank verpflichtet.

Meinem treuen Freund Dr. Reinhard Drube danke ich sehr herzlich für seine große und geduldige Hilfe bei den Tücken von Hard- und Software aller Art. Er hat nicht nur demonstriert, wie einfach sich beinahe unüberwindliche Hindernisse mit unkonventionellen Strategien in Luft auflösen lassen, sondern mir auch in wunderbaren Abenden in Oper und Theater das *andere* Leben außerhalb des Promotionsstudiums gezeigt.

Einen brüderlichen, von ganzem Herzen kommenden Dank möchte ich auch Herrn Dipl.-Phys. Hendrik Geipel für seine wertvolle und tatkräftige Unterstützung beim Erlernen und Anwenden der Textverarbeitung sagen, ohne die eine zügige Bearbeitung der redaktionellen Aufgaben kaum möglich gewesen wäre. Ein tief empfundener Dank gilt meinen Eltern, die mich nicht nur in der Endphase der Arbeit in großzügiger Weise sowohl moralisch als auch finanziell unterstützten.

Weiterhin möchte ich mich bei Frau Marianne Hansen für ihre das übliche Maß weit übersteigende Kompetenz beim Korrekturlesen des Manuskripts sehr herzlich bedanken. Frau Gabriele Daube und Frau Sylvia Seitz gehört ebenso mein herzlichstes Dankeschön für ihre bewunderungswürdige Langmut bei den umfangreichen Tipparbeiten.

Zum Schluß bleibt mir die angenehme Pflicht, Herrn Manfred (Pauli) Hunger für die sehr willkommene technische Beratung, Herrn Heise und Herrn Kloser für das akkurate Anfertigen der Fotokopien und nicht zuletzt allen Mitgliedern des Institutes für Plasmaphysik für das positive, familiäre Arbeitsklima zu danken.