

# Numerische Berechnung von Wirkungsquerschnitten im Zentralfeldmodell

Martin Frigge

Diplomarbeit im Fachbereich Physik  
Physikalisches Institut



Mai 2011



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Motivation</b>	<b>5</b>
1.1 Einführung . . . . .	5
1.2 Beispiel für die Anwendung von Wirkungsquerschnitten . . . . .	6
1.3 Relativistische Rechnungen . . . . .	8
<b>2 Berechnung relativistischer Wirkungsquerschnitte</b>	<b>9</b>
2.1 Energiedifferentielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	11
2.2 Darwin-Wellenfunktionen . . . . .	13
2.3 Einige grundlegende Relationen . . . . .	14
2.4 Analytische Berechnung der Winkelintegrale . . . . .	16
2.4.1 Berechnung der Ausdrucks $ I_0 ^2$ . . . . .	17
2.4.2 Berechnung des Ausdrucks $ I_z ^2$ . . . . .	18
<b>3 Numerische Umsetzung und verwendeten Unterprogramme</b>	<b>21</b>
3.1 Berechnung der 3j-Symbole . . . . .	21
3.2 Berechnung der gebundenen Atom-Zustände ( $R_{nl}$ ) . . . . .	23
3.3 Berechnung der ungebundenen Atom-Zustände ( $R_{el}$ ) . . . . .	26
3.4 Berechnung der sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen . . . . .	30
3.5 Berechnung der sphärischen Hankeltransformation . . . . .	31
<b>4 Das Hauptprogramm dsigmadE</b>	<b>35</b>
4.1 Aufbau . . . . .	35
4.2 Ergebnisse . . . . .	38
<b>5 Diskussion</b>	<b>44</b>
<b>6 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>47</b>
<b>Anhang A: Berechnung zur Aufspaltung der Matrixelemente</b>	<b>48</b>
<b>Anhang B: Ergänzung zu Kapitel 2.4</b>	<b>51</b>
<b>Anhang C: Spezielle 3j-Symbole</b>	<b>55</b>
<b>Anhang D: Berechnung der Normierungsfaktoren</b>	<b>57</b>



# 1 Motivation

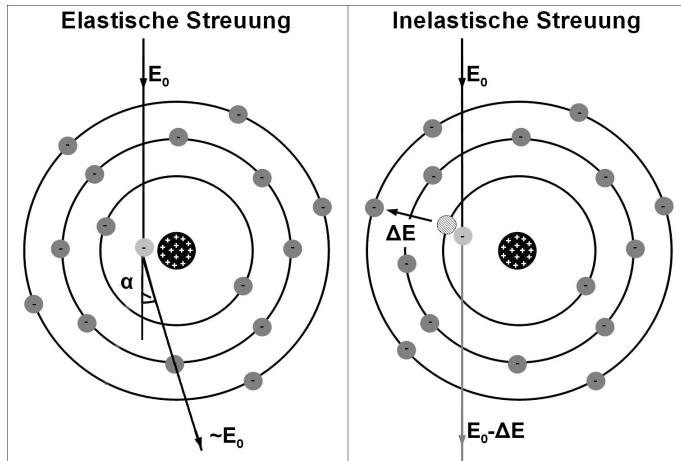
In der Nanotechnologie ist es von großem Interesse, Proben auf Nanometerskalen hinsichtlich ihrer chemischen Zusammensetzung zu untersuchen. In der Elektronenmikroskopie ist dies mittels Elektronenenergieverlust-Spektroskopie möglich. Dabei werden inelastisch gestreute Elektronen (Abb. 1.1) mit Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit untersucht. Zur Auswertung der erhaltenen Spektren werden so genannte Wirkungsquerschnitte berechnet. Für diese Rechnungen werden üblicherweise Programme verwendet, die auf nicht-relativistischen Ansätzen beruhen. In heutiger Standard-Softwarepaketen ist zum Beispiel das Programm „SigmaK“ von Egerton [8] enthalten. Darin werden die für große Geschwindigkeiten abweichenden Energiebeziehungen durch sogenannte kinematische Korrekturen berücksichtigt, aber nicht die Retardierungseffekte und die magnetische Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Mit zunehmender Energie der einfallenden Elektronen gilt es zu hinterfragen, ob voll-relativistische Ansätze nötig sind, um das Verhalten der schnellen Elektronen genügend genau beschreiben zu können. Rechnungen auf Basis des Wasserstoffmodells von Knippelmeyer [3] zeigen, dass solche voll-relativistischen Ansätze bei heute üblichen Beschleunigungsspannungen einen deutlichen Einfluss haben. Mit der Diplomarbeit von Pokropka [18] konnten diese Ergebnisse auf das Zentralfeldmodell ausgeweitet werden. Diese voll-relativistischen Ansätze sind darüber hinaus bis heute nicht weiter verfolgt worden. Das erstellte Programm beruht ebenfalls auf dem Zentralfeldmodell und der Formalismus ist weitestgehend dem Pokropkas nachvollzogen. Allerdings werden die Werte für das Atompotential und die Wellenfunktionen selbstkonsistent berechnet und nicht wie zuvor ein genähertes Potential vorausgesetzt. Die vorliegende Arbeit soll auch eine gut nachvollziehbare Einführung in den nötigen Formalismus und das erstellte Programm bieten, daher sind einige Rechnungen ausführlicher dargelegt als es für eine Diplomarbeit üblich ist, um einem Nachfolger den Einstieg in die Materie zu erleichtern. In einigen Formeln sind sich kürzende Faktoren zur besseren Nachvollziehbarkeit der Rechnungen durchgestrichen dargestellt. Außerdem sind im Anhang diverse Rechnungen ausführlich aufgeführt.

## 1.1 Einführung

In dieser Arbeit werden Wirkungsquerschnitte für die inelastische Streuung eines einfallenden Elektrons an einem gebundenen Atomelektron berechnet. Diese Wirkungsquerschnitte haben die Dimension einer Fläche und werden in der Elektronenmikroskopie üblicherweise in  $\text{cm}^2$  angegeben. Sie beschreiben eine effektive Trefferfläche, die proportional zur Wahrscheinlichkeit des Streuprozesses ist und von den Quantenzahlen und Energien der beiden beteiligten Elektronen abhängt.

## 1.2 Beispiel für die Anwendung von Wirkungsquerschnitten

Wirkungsquerschnitte werden in der Elektronenmikroskopie benötigt, um die chemische Zusammensetzung einer Probe aus Elektronenenergieverlust-Spektren zu gewinnen. In einem Energieverlust-Spektrum werden die Elektronen nach der Streuung detektiert und nach ihrem Energieverlust aufgetragen (Abb. 1.2). Um ein solches Spektrum zu erstellen wird eine Probe mit Elektronen einer Energie von typischerweise 80-400 keV bestrahlt. Die einfallenden Elektronen wechselwirken mit den Probenatomen wobei sie je nach Art der Wechselwirkung einen Teil ihrer Energie abgeben, wie in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt ist.



**Abbildung 1.1:** Schematische Darstellung des Streuprozesses. Ein eindringendes Elektron mit der Energie  $E_0$  erfährt eine Ablenkung durch die Nähe zum positiv geladenen Atomkern (links) bzw. einen Energieverlust  $\Delta E$  durch Wechselwirkung mit einem Atomelektron (rechts). [1]

Elektronen können elastisch gestreut werden wobei sie eine Richtungsänderung, aber nahezu keinen Energieverlust erfahren. Diese Elektronen bilden den so genannte Zero-Loss-Peak, wie er in Abbildung 1.2 dargestellt ist. Stoßen die einfallenden Elektronen unelastisch mit den Atomelektronen, geben sie einen Teil ihrer kinetischen Energie an die gebundenen Elektronen ab. Solange die Energie kleiner als die Ionisationsenergie des Atoms ist können die Atomelektronen nur in freie, höherliegende Energieniveaus angeregt werden (Interbandanregung). Damit können die einfallenden Elektronen keine beliebige Energie abgeben sondern nur diskrete Energiebeträge, die den Differenzen der Energieniveaus entsprechen. Übersteigt die übertragene Energie die Ionisationsenergie werden Atomelektronen der äußeren Schalen herausgeschlagen. Diese Anregung ins Kontinuum ist für beliebige Energieüberträge möglich.

Die Intensität im Spektrum (Abb. 1.2) nimmt für steigende Energieverluste tendenziell ab. Bei den Ionisationsenergien sämtlicher Atomelektronen gibt es deutliche Intensitätsanstiege, die so genannten Ionisationskanten. In diesen Bereichen findet ein Übergang von nur diskret möglichen hin zu kontinuierlich möglichen Energieüberträgen statt. Somit steigt die Anzahl der freien Zustände, in die das Atomelektron angehoben werden kann, um ein Vielfaches. Damit steigt auch die Wahrscheinlichkeit für einen Streuprozess mit eben diesem Atomelektron und dem entsprechenden Energieverlust. Die Ionisationsenergien sind für jedes Element verschieden. Durch einen Vergleich der im Energieverlust-Spektrum gewonnenen Werte für die Position der Ionisationskanten mit Literaturwerten können die in der Probe vorhandenen Elemente bestimmt werden. Die Anzahl an

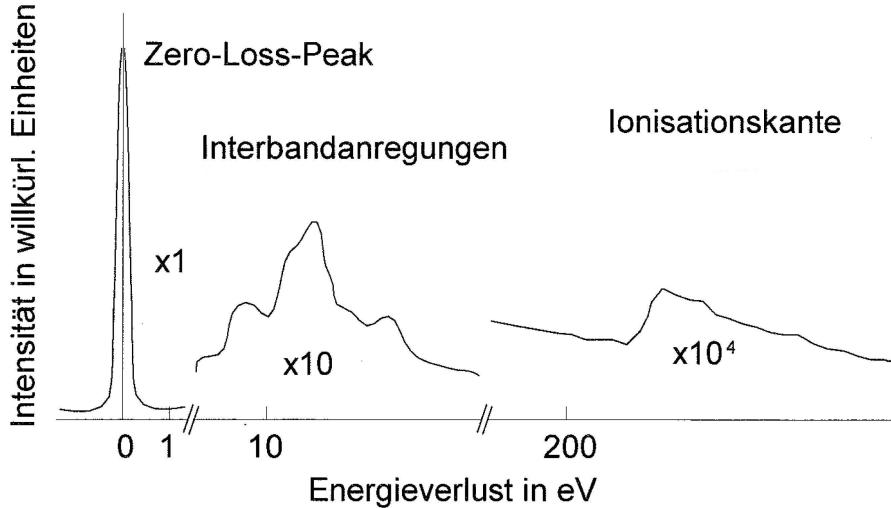


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung eines Elektronenenergieverlust-Spektrums. [2]

Atomen eines Elements in einem beleuchteten Probenbereich ist proportional zur Anzahl der an diesem Element gestreuten Elektronen. Diese Anzahl ist in erster Näherung proportional zum Flächeninhalt unter einer für dieses Element charakteristischen Ionisationskante. Durch Abziehen des Untergrundes werden experimentelle Einflüsse in den Messdaten berücksichtigt. Der Untergrund im Spektrum entsteht zum Beispiel durch Streuung der Elektronen an dem Mikroskop. Er wird nach einem Potenzgesetz aus dem Verlauf des Spektrums vor der Ionisationskante extrapoliert. Für den Zusammenhang von Zählrate bzw. die Intensität  $I$  und der Anzahl  $N$  der Atome im vom Elektronenstrahl beleuchteten Volumen kann man schreiben

$$I = JN\sigma\eta ,$$

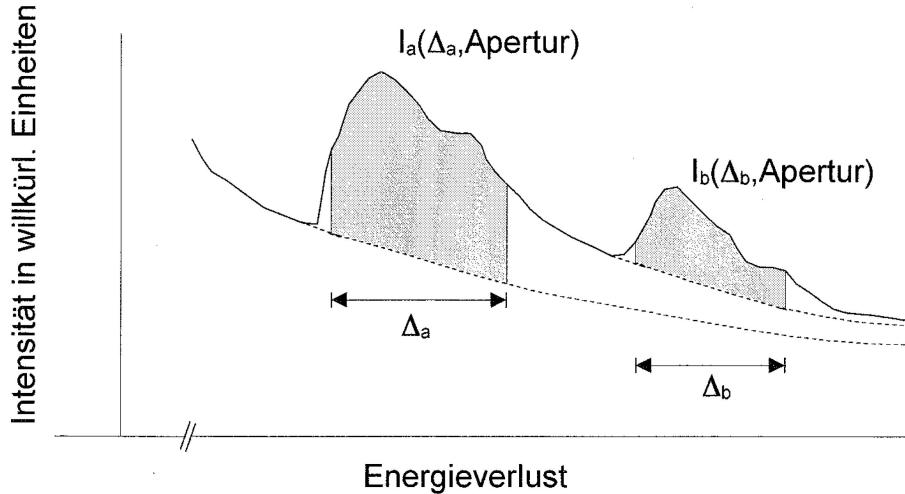
wobei  $J$  der Teilchenstrom im Strahl,  $\sigma$  der Wirkungsquerschnitt und  $\eta$  die Effizienz des Detektors ist. Um die chemische Zusammensetzung einer Probe bestimmen zu können betrachtet man das Verhältnis der Intensitäten für die betreffenden Elemente. Somit kürzen sich die Apparatur abhängigen Parameter heraus. Angenommen eine Probe besteht aus den Elementen a und b, so erhält man die Relation

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{I_a\sigma_b}{I_b\sigma_a} .$$

Hier stehen  $N_a$ ,  $N_b$  für die Anzahl der Atome a und b,  $I_a$ ,  $I_b$  für die Fläche unter deren entsprechenden Kanten und  $\sigma_a$ ,  $\sigma_b$  für deren Wirkungsquerschnitte. In Abbildung 1.3 ist dieser Fall anschaulich dargestellt. Die Wirkungsquerschnitte geben die Wahrscheinlichkeit an, dass ein Elektron mit einem Energieverlust im Bereich des Energiefensters  $\Delta_a$  bzw.  $\Delta_b$  gestreut wird und den Detektor erreicht. Das Elektron muss also unter einem bestimmten Raumwinkel gestreut werden, damit es von der nachfolgenden Blende erfasst und somit detektiert werden kann.

$$\sigma = \int_{E_k}^{E_k + \Delta} \int_{Apertur} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} d\omega dE .$$

Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  ist somit der über das betreffende Energieintervall und dem betreffenden Raumwinkel integrierte doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt  $\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE}$ .



**Abbildung 1.3:** Schematische Darstellung zur quantitativen Analyse eines Elektronenenergieverlust-Spektrums. Der extrapolierte Untergrund ist gestrichelt dargestellt und in grau unterlegt sind die zur Verhältnisbildung relevanten Flächen. [2]

### 1.3 Relativistische Rechnungen

In nicht-relativistischen Ansätzen wird die auf Vakuumlichtgeschwindigkeit normierte Geschwindigkeit  $\beta = \frac{v}{c}$  vernachlässigt. Moderne Elektronenmikroskope arbeiten mit Beschleunigungsspannungen von einigen hundert kV, wodurch die einfallenden Elektronen sehr hohe Geschwindigkeiten erreichen. Bei einer Elektronenenergie von 200 keV haben die Elektronen eine Geschwindigkeit von  $2,08 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$ , was etwa 70% der Lichtgeschwindigkeit entspricht. Nicht-relativistische Ansätze können daher keine vollständige Beschreibung des Streuprozesses für diese Beschleunigungsspannungen liefern.

In derzeitigen Standardprogrammen zur Analyse der Messdaten werden „kinematisch korrigierte“ anstatt voll-relativistische Wirkungsquerschnitte berechnet. „Kinematisch korrigiert“ bedeutet, dass relativistische Ausdrücke für Energie und Impuls in nicht-relativistische Gleichungen eingesetzt werden. Damit wird der Einfluss von Retardierungseffekten und die magnetische Wechselwirkung zwischen dem Atomelektron und dem einfallenden Elektron außer Acht gelassen. Retardierungseffekte sind Effekte, die durch zeitliche Verzögerung auf Grund der endlichen Lichtgeschwindigkeit entstehen.

In dieser Arbeit wird ein Ansatz mit voll-relativistischen Gleichungen gewählt um diese Effekte bei der Berechnung von Wirkungsquerschnitten zu berücksichtigen. Damit können genauere Ergebnisse aus den experimentellen Daten gewonnen werden.

## 2 Berechnung relativistischer Wirkungsquerschnitte

Die Basis für die Rechnungen ist die Propagatortheorie und die relativistische Dirac Gleichung. Damit kann die Streumatrix berechnet werden. Sie beschreibt die zeitliche Entwicklung der an dem Streuprozess beteiligten Teilchen unter Berücksichtigung ihres Wechselwirkungspotentials. Bildet man davon das Betragsquadrat und teilt es durch die Zeit, die der Übergang vom Anfangs- in den Endzustand dauert, so erhält man die Übergangsrate. Daraus lässt sich der Wirkungsquerschnitt berechnen, indem auf die Stromdichte des einfallenden Elektrons normiert wird. Eine ausführliche Herleitung ist in der Diplomarbeit von Knippelmeyer [2] zu finden.

Für die weiter gehenden Überlegungen müssen zunächst noch einige Annahmen diskutiert werden:

- Die Proben sind dünner als die mittlere freie Weglänge der einfallenden Elektronen, sodass in guter Näherung Einfachstreuung angenommen werden kann.
- Der Einfluss der Nachbaratome wird vernachlässigt, daher kann ein atomares Modell für den Streuprozess genutzt werden.
- Es wird angenommen, dass das einfallende Elektron nur mit dem angeregten Atomelektron wechselt und der Einfluss der übrigen Atomelektronen vernachlässigbar ist. Daher kann das Atomelektron durch eine Einteilchen-Wellenfunktion beschrieben werden.
- Nimmt man an, dass das Atomelektron nur in Kontinuum-Zustände, nicht aber in diskrete Zustände angehoben wird, so kann der Endzustand allein durch Kontinuum-Wellenfunktionen beschrieben werden.
- Die einfallenden Elektronen haben typischerweise Energien größer als 100 keV und die ionisierten Elektronen Energien im Bereich 10-100 eV. Die Energie des ionisierten Atomelektrons ist also um wenigstens drei Größenordnungen kleiner als die Energie des gestreuten Elektrons, sodass Austauscheffekte in guter Näherung vernachlässigbar sind.
- Das einfallende Elektron ist aufgrund seiner großen Geschwindigkeit nur kurzzeitig im Potential des Atomelektrons und die Energie des einfallenden Elektrons ist sehr viel größer als die des Wechselwirkungspotentials. Somit genügt es, die Streumatrix in erster Näherung bezüglich des Wechselwirkungspotentials zu betrachten.

Damit erhalten wir einen Ausdruck, der von den ebenen Dirac-Wellenfunktionen des Atomelektrons vor und nach dem Streuvorgang, sowie vom Viererpotential des elektromagnetischen Feldes  $A^\mu = \left( \frac{\Phi}{c}, \vec{A} \right)$  abhängt [2]. Hier ist  $\Phi$  das Skalarpotential und  $\vec{A}$  das Vektorpotential.

Unter Coulomb-Eichung ist das skalare Potential gleich dem statischen Coulomb- Potential. Das Vektorpotential beinhaltet in diesem Fall das magnetische Potential und den Retardierungsanteil aus dem Coulomb-Potential. Die Streumatrix lässt sich somit aufteilen, in einen Teil, dem das statische Coulomb-Potential zugrunde liegt, und einen zweiten Teil, der den Einfluss des Vektorpotentials beinhaltet. Somit kann der Wirkungsquerschnitt ebenfalls in zwei Teile zerlegt werden,

wobei das erste Matrixelement  $\langle m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle$  den Coulombanteil und das zweite  $\langle m | \vec{\alpha} \vec{t} e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle$  den Anteil aus dem Vektorpotential enthält [2].

$$\frac{d\sigma(\Omega, \Delta E)}{d\Omega} = \alpha^2 \cdot \frac{4 \cdot k_i^2}{\beta_i^2} \cdot \frac{k_f}{k_i} \cdot \frac{1}{2} \sum_{s_n, s_m} \left| \frac{1}{q^2} \langle m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle - \frac{\vec{t} \vec{\beta}_i}{q^2 - (\frac{\Delta E}{hc})^2} \langle m | \vec{\alpha} \vec{t} e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle \right|^2 \quad (2.1)$$

Hier wurde über die Spinanfangszustände ( $|n\rangle$ ) gemittelt und über die Spinendzustände ( $|m\rangle$ ) summiert. Üblicherweise werden unpolarisierte Elektronen im Experiment verwendet, daher ist der Spinanfangszustand nicht fest definiert. Außerdem ist der Zustand des Elektrons nach dem Streuprozess dem Experiment ebenfalls nicht zugänglich. Summation über alle möglichen Endzustände umfasst auch denjenigen, in den das Elektron überführt wurde.  $\Delta E$  ist der Energieverlust, den das einfallende Elektron während des Streuvorgangs erlitten hat und  $\vec{r}$  die Ortskoordinate des Elektrons.  $\alpha$  ist die Feinstrukturkonstante, mit  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ . Für die auf die Vakuumslichtgeschwindigkeit  $c$  normierte Geschwindigkeit des einfallenden Elektron gilt

$$\vec{\beta}_i = \frac{\vec{v}_i}{c} = \frac{\vec{p}_i c}{E_i}. \quad (2.2)$$

Die Vektoren  $\vec{k}_i$  und  $\vec{k}_f$  stehen für die Wellenzahlvektoren des einfallenden Elektrons vor und nach dem Streuprozess, wie aus der Abbildung 2.1 deutlich wird.  $\vec{t}$  ist ein Einheitsvektor, der senkrecht zu  $\vec{q}$  ist, wobei  $\vec{q} = \vec{k}_i + \vec{k}_f$  gilt.  $\vec{\alpha}$  repräsentiert die Dirac-Matrizen, die in Anhang A genauer definiert sind. Die Indizes  $s_n, s_m$  in der Summe stehen hier für die Spinzustände des Anfangs- und Endzustandes.  $\Delta E$  ist der Energieverlust.

Es wird von einer unelastischen Streuung der Elektronen ausgegangen, wie es in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt ist.

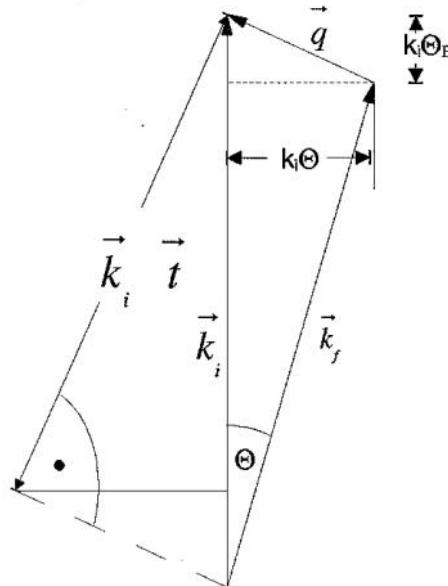


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des unelastischen Streuprozesses. [3]

Da die beiden Terme in Gleichung (2.1) wegen der unterschiedlichen Auswahlregeln für die Matrixelemente nicht interferieren [4], kann die Gleichung umgeschrieben werden zu

$$\frac{d\sigma(\Omega, \Delta E)}{d\Omega} = \alpha^2 \cdot \frac{4 \cdot k_i^2}{\beta_i^2} \cdot \frac{k_f}{k_i} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sum_{s_n, s_m} \left\{ \frac{1}{q^4} \left| \langle m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle \right|^2 + \left( \frac{\vec{t}\vec{\beta}_i}{q^2 - (\frac{\Delta E}{\hbar c})^2} \right)^2 \left| \langle m | \vec{\alpha} \vec{t} e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle \right|^2 \right\}. \quad (2.3)$$

Es ergeben sich zwei Terme, von denen der erste den Anteil aus der statischen Coulomb- Wechselwirkung enthält und den kinematisch korrigierten nichtrelativistischen Rechnungen entspricht. Der zweite Term beinhaltet die Retardierungseffekte und die magnetische Wechselwirkung zwischen den Elektronen.

## 2.1 Energiedifferentielle Wirkungsquerschnitte

Mit Hilfe von einfachen geometrischen Überlegungen kann der energiedifferentielle Wirkungsquerschnitt berechnet werden. Aus der Impulserhaltung  $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  folgt der Zusammenhang zwischen  $q^2$  und dem Streuwinkel

$$q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \Theta, \quad (2.4)$$

wie es in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Für die Integration über den Raumwinkel gilt

$$d\Omega = d\phi \sin \Theta d\Theta = 2\pi \sin \Theta d\Theta.$$

Somit erhält man unter Verwendung von  $k_i \approx k_f$  den Zusammenhang

$$2q dq = dq^2 = k_i^2 2 \sin \Theta d\Theta = \frac{k_i^2}{\pi} d\Omega \quad \text{bzw.} \quad d \ln q = \frac{dq}{q} = \frac{1}{2q^2} \frac{k_i^2}{\pi} d\Omega. \quad (2.5)$$

Die Integration über den Raumwinkel ist somit auf eine Integration über ein q-Gitter zurückgeführt. Dies erweist sich als zweckmäßig für die numerische Berechnung der Matrixelemente. Die Integrationsgrenzen werden aus der Energie- und Impulserhaltung bestimmt, wie Egerton [8, S. 208-210] gezeigt hat. Ist  $E_0$  die kinetische Energie eines einfallenden Elektrons und  $\vec{p} = \hbar \vec{k}_i$  sein Impuls, dann ist die relativistische Gesamtenergie des Elektrons

$$W = E_0 + m_0 c^2 = [(m_0 c^2)^2 + p^2 c^2]^{\frac{1}{2}} = [(m_0 c^2)^2 + \hbar^2 k_i^2 c^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.6)$$

Unter Energieerhaltung führt der Energieverlust  $\Delta E$  bei einem Streuvorgang zu der Gesamtenergie

$$E_{tot} = W - \Delta E = [(m_0 c^2)^2 + \hbar^2 k_f^2 c^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.7)$$

mit dem Impuls  $\vec{k}_f$  nach dem Streuprozess. Einsetze von Gleichung (2.6) in Gleichung (2.7) gibt

$$\begin{aligned} k_f^2 &= k_i^2 - 2\Delta E \left( \frac{m_0^2}{\hbar^4} + \frac{k_i^2}{\hbar^2 c^2} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2 c^2} \\ &= k_i^2 - 2\gamma m_0 \frac{\Delta E}{\hbar^2} + \frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2 c^2}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

mit dem relativistischen Korrekturfaktor  $\gamma = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$ . Durch Multiplikation mit dem Bohrschen Radius  $a_0$  und der Relation für die Rydbergenergie  $E_{Ry} = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2}$  erhält man daraus (vgl. [8, Gl. 3.139])

$$(k_f a_0)^2 = (k_i a_0)^2 - \frac{\Delta E}{E_{Ry}} \left( \gamma - \frac{\Delta E}{2m_0 c^2} \right).$$

Durch Umformen der Gleichung (2.6) bekommt man den Wert für das Quadrat des Wellenzahlvektors des einfallenden Elektrons (vgl. [8, Gl. 3.140])

$$(k_i a_0)^2 = \frac{E_0}{E_{Ry}} \left( 1 + \frac{E_0}{2m_0 c^2} \right).$$

Aus der Impulserhaltung folgt für den kleinsten q-Wert  $q_{min} = k_i - k_f$  bzw.

$$(q a_0)_{min}^2 = ((k_i a_0) - (k_f a_0))^2 = \frac{(\Delta E)^2}{4E_{Ry} T} + \frac{(\Delta E)^3}{8\gamma^3 E_{Ry} T^2} + \dots \quad (2.9)$$

Außerdem folgt unter Verwendung der Impulserhaltung mit Gleichung (2.4) für den maximalen Wert des q-Gitters

$$\begin{aligned} (q a_0)_{max}^2 &= (k_i a_0)^2 + (k_f a_0)^2 - 2(k_i a_0)(k_f a_0) \cos \theta \\ &= ((k_i a_0) - (k_f a_0))^2 + 2(k_i a_0)(k_f a_0) - 2(k_i a_0)(k_f a_0) \cos \theta \\ &= (q a_0)_{min}^2 + 2(k_i a_0)(k_f a_0)(1 - \cos \theta) \\ &= (q a_0)_{min}^2 + 4(k_i a_0)(k_f a_0) \sin^2 \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Ausgehend von paralleler Beleuchtung der Probe ist  $\theta$  der maximale Streuwinkel, bis zu dem die Elektronen auf dem Detektor auftreffen. Für größere Winkel stoßen die Elektronen auf Blenden im Mikroskop. Dieser Winkel wird auch Spektrometer-Akzeptanzwinkel genannt.

Die Wellenfunktion des Kontinuumzustandes wird auf die Energie  $e$  in Hartree normiert (Kap. 3.3), daher muss der Wirkungsquerschnitt aus Formel (2.3) noch mit  $de = \frac{1}{2 \cdot E_{Ry}} d\Delta E$  multipliziert werden. Der energiedifferentielle Wirkungsquerschnitt lässt sich damit und der Relation (2.5) schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} &= \alpha^2 \cdot \frac{4 \cdot \pi}{\beta_i^2} \frac{2d\ln q}{2 \cdot E_{Ry}} \cdot \frac{1}{2} \\ &\cdot \sum_{s_n, s_m} \left\{ \frac{1}{q^2} |< m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n >|^2 + q^2 \left( \frac{\vec{t}\vec{\beta}_i}{q^2 - (\frac{\Delta E}{\hbar c})^2} \right)^2 |< m | \vec{\alpha} t e^{i\vec{q}\vec{r}} | n >|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

## 2.2 Darwin-Wellenfunktionen

Die Wellenfunktionen  $|m\rangle, |n\rangle$  aus Gleichung (2.11) sind Dirac-Wellenfunktionen. Für  $E_n, E_m \ll m_0 c^2$  hat Darwin [5] gezeigt, dass sich die voll-relativistischen Dirac-Gleichungen näherungsweise durch den Ansatz sogenannter Darwin-Wellenfunktionen (2.12) lösen lassen.

$$\begin{aligned} \varphi_{n+\frac{1}{2}}(\vec{r}) &= N_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{pmatrix} \Psi_n(\vec{r}) \\ \varphi_{n-\frac{1}{2}}(\vec{r}) &= N_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ -\frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \Psi_n(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Diese Darwin-Wellenfunktionen bestehen aus einem Normierungsfaktor ( $N_n$ ) und einem vierdimensionalen Vektor-Operator, der auf eine Schrödinger-Wellenfunktion  $\Psi_n(\vec{r})$  wirkt. Da im Zentralfeldmodell ein radialsymmetrisches Potential zugrunde liegt, lässt sich  $\Psi_n(\vec{r})$  in einen Winkelanteil  $Y_{lm}(\varphi, \theta)$  und einen Radialanteil  $R_{nl}(r)$  zerlegen

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\varphi, \theta) R_{nl}(r) . \quad (2.13)$$

Mit diesem Ansatz für die Wellenfunktionen ( $|m\rangle, |n\rangle$ ) lassen sich die Matrixelemente aus Gleichung (2.11) nach ihren Spinzuständen zerlegen in

$$\begin{aligned} P_{\pm\pm} &= \int \varphi_{k\pm\frac{1}{2}}^*(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \varphi_{n\pm\frac{1}{2}}(\vec{r}) d^3r \\ P_{\pm\pm}^\alpha &= \int \varphi_{k\pm\frac{1}{2}}^*(\vec{r}) \vec{\alpha} \vec{t} e^{i\vec{q}\vec{r}} \varphi_{n\pm\frac{1}{2}}(\vec{r}) d^3r , \end{aligned} \quad (2.14)$$

wobei  $\varphi_{k\pm\frac{1}{2}}$  der Kontinuumzustand und  $\varphi_{n\pm\frac{1}{2}}$  der gebundene Zustand ist. Der Index  $\alpha$  kennzeichnet die Summanden die aus dem relativistischen Term, in dem die Dirac-Matrizen enthalten sind, hervorgehen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann die z-Achse auf den q-Vektor gelegt werden. Damit ist  $\vec{t}$  ein Vektor, der in der x-y-Ebene liegt und es ergibt sich, wie in Anhang A näher ausgeführt,

$$\begin{aligned} P_{++} = P_{--} &= N_n N_k \left[ \left( I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right) - iq \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_z \right] \\ P_{-+} = P_{+-}^* &= -i N_n N_k q \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_{x+iy} \end{aligned}$$

$$P_{++}^\alpha = P_{--}^\alpha = -iN_n N_k \frac{\hbar}{2mc} [(t_x - it_y) I_{x+iy} + (t_x + it_y) I_{x-iy}]$$

$$P_{+-}^\alpha = (-P_{-+}^\alpha)^* = -N_n N_k q \frac{\hbar}{2mc} (t_x + it_y) I_0$$

mit den Matrixelementen

$$I_0 = \int \Psi_{kl'm'}^*(\vec{r}) e^{iqz} \Psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r$$

$$I_{x\pm iy} = \int \Psi_{kl'm'}^*(\vec{r}) e^{iqz} \left( \frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r$$

$$I_z = \int \Psi_{kl'm'}^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r$$

$$I_\Delta = \int \Psi_{kl'm'}^*(\vec{r}) e^{iqz} \Delta \Psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r , \quad (2.15)$$

die jeweils die Schrödinger-Wellenfunktionen enthalten. Für die Summe über die Betragsquadrate der Matrixelemente ergibt sich

$$\frac{1}{2} \sum_{s_n, s_m} |< m | e^{iqz} | n >|^2 = \frac{1}{2} \left( |P_{++}|^2 + |P_{--}|^2 + |P_{+-}|^2 + |P_{-+}|^2 \right)$$

$$= |P_{\pm\pm}|^2 + |P_{\pm\mp}|^2$$

$$\frac{1}{2} \sum_{s_n, s_m} |< m | \vec{a} \vec{t} e^{iqz} | n >|^2 = \frac{1}{2} \left( |P_{++}^\alpha|^2 + |P_{--}^\alpha|^2 + |P_{+-}^\alpha|^2 + |P_{-+}^\alpha|^2 \right)$$

$$= |P_{\pm\pm}^\alpha|^2 + |P_{\pm\mp}^\alpha|^2 . \quad (2.16)$$

Für die Betragsquadrate der einzelnen Summanden erhält man, wie in Anhang A gezeigt wird,

$$|P_{\pm\pm}|^2 = N_k^2 N_n^2 \left[ \left| I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right|^2 + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^4 q^2 |I_z|^2 \right.$$

$$\left. - 2 \operatorname{Re} \left\{ iq \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \left( I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right) I_z^* \right\} \right]$$

$$|P_{\pm\mp}|^2 = N_k^2 N_n^2 \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^4 q^2 |I_{x+iy}|^2$$

$$|P_{\pm\pm}^\alpha|^2 = N_k^2 N_n^2 2 \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 |I_{x+iy}|^2$$

$$|P_{\pm\mp}^\alpha|^2 = N_k^2 N_n^2 \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 q^2 |I_0|^2 . \quad (2.17)$$

## 2.3 Einige grundlegende Relationen

Zur Auswertung der Matrixelemente werden die Wellenfunktionen und e-Funktionen als Produkte von Radialanteil und Winkelfunktionen dargestellt. Somit können die Winkelanteile mit den in diesem Kapitel aufgeführten Beziehungen analytisch gelöst werden.

Die Exponentialfunktion in den Matrixelementen kann nach sphärischen Besselfunktionen  $j_L(qr)$  zerlegt werden [6, Gl. 5.8.3]

$$e^{i\vec{q}\vec{r}} = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L i^L j_L(qr) Y_{LM}^* \left( \frac{\vec{q}}{q} \right) Y_{LM} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right), \quad (2.18)$$

mit den Kugelflächenfunktionen  $Y_{LM}$ . Da das Bezugssystem so gelegt wird, dass  $\vec{q} = q\vec{e}_z$  und damit  $M = 0$  gilt, kann Gleichung (2.18) vereinfacht werden zu

$$e^{iqz} = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} i^L j_L(qr) Y_{L0}^* \left( \frac{\vec{q}}{q} \right) Y_{L0} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right). \quad (2.19)$$

Das Integral über drei Kugelflächenfunktionen ergibt (vgl. [6, Gl. 4.6.3])

$$\begin{aligned} < Y_{l'm'} | Y_{LM} | Y_{lm} > &= (-1)^{m'} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l'-m'} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) Y_{LM} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) Y_{lm} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) \\ &= (-1)^{m'} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m' & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Für die sogenannten 3j-Symbole gilt nach [7, S. 1056]

$$\begin{pmatrix} l' & L & l \\ m' & -M & m \end{pmatrix} = \frac{(-i)^{l+l'+L}}{\sqrt{2L+1}} < ll'mm'|LM>,$$

wobei die Clebsch-Gordan-Koeffizienten  $< ll'mm'|LM>$  reell und nur dann ungleich Null sind, wenn die Auswahlregeln

$$< ll'mm'|LM> = \begin{cases} \text{reell,} & \text{wenn } m+m'=M \text{ und } |l-l'| \leq L \leq l+l' \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.21)$$

erfüllt sind. Ist  $m = m' = M = 0$ , dann gilt nach [6, Gl. 3.7.14]

$$\begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0, \quad \text{wenn } l'+L+l \text{ ungerade.} \quad (2.22)$$

Zu Gleichung (2.20) sei noch angemerkt, dass nach [6, Gl. 2.5.6]

$$< Y_{l'm'} | = (Y_{l'm'})^* = (-1)^{m'} Y_{l'-m'}$$

gilt. Die Orthogonalitätseigenschaft besagt (vgl. [6, Gl. 3.7.8]), dass

$$\sum_{m,m'} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ m' & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l \\ m' & M' & m \end{pmatrix} = (2L+1)^{-1} \delta_{LL'} \delta_{MM'} . \quad (2.23)$$

Weiter gilt nach [6, Gl. 2.5.30]

$$Y_{L0} \left( \frac{\vec{q}}{q} \right) = \left( \frac{2L+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos \theta). \quad (2.24)$$

Für  $\vec{q} = q \cdot \vec{e}_z$  ist  $\theta = 0$  und damit  $P_l(\cos \theta) = P_l(1) = 1$  vereinfacht sich Gleichung (2.24) zu

$$Y_{L0} \left( \frac{\vec{q}}{q} \right) = \left( \frac{2L+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.25)$$

Für eine bessere Übersichtlichkeit wird im Folgenden die Notation geändert, es gilt:

$$|Y_{lm}\rangle = |l m\rangle.$$

Eine weitere wichtige Relation ist (vgl. [6, S. 98-99])<sup>1</sup>

$$\langle l' m' | \nabla_\mu | l m \rangle = (-1)^{l'} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & \mu & m \\ l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \langle l' 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle. \quad (2.26)$$

Dabei ist  $\langle l' 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle$  nur für  $l' = l \pm 1$  von Null verschieden mit

$$\begin{aligned} \langle l + 1 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle &= \frac{l + 1}{[(2l + 1)(2l + 3)]^{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \\ \langle l - 1 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle &= \frac{l}{[(2l - 1)(2l + 1)]^{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l + 1}{r} \right), \end{aligned} \quad (2.27)$$

wobei

$$\nabla_0 = \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{und} \quad \nabla_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (2.28)$$

die sphärischen Komponenten des Nablaoperators sind.

## 2.4 Analytische Berechnung der Winkelintegrale

In diesem Kapitel wird die Berechnung der einzelnen Betragsquadrate aus Formel (2.17) ausgeführt, wie sie in der Diplomarbeit von Pokroppa [18] beschrieben ist. Dazu werden die in Abschnitt 2.3 aufgeführten Relationen verwendet. In diesem Kapitel ist zu beachten, dass mit dem Ausdruck  $|\tilde{I}_\alpha|^2$  nicht nur die Bildung des Betragsquadrates von  $I_0$  gemeint ist, sondern auch die Mittelung und Summation über Anfangs- und Endzustände enthalten ist. Es gilt der Zusammenhang:

$$|\tilde{I}_\alpha|^2 = 2(2l+1) \sum_{l'} \frac{1}{2l+1} \sum_m \sum_{m'} |I_\alpha|^2$$

---

<sup>1</sup>Bei Edmonds gibt es einen Druckfehler in der Gleichung. Die Herleitung führt auf den Wert „ $l'$ “ anstatt „ $m'$ “ für den Exponent des Faktors „ $-1$ “.

Wie Anfangs erwähnt, sind in den Gleichungen einige sich kürzende Faktoren durchgestrichen dargestellt, um die Rechnungen besser nachvollziehen zu können. Zur besseren Übersicht sind die Berechnungen der Ausdrücke  $|I_0 - (\frac{\hbar}{4mc})^2 I_\Delta|^2$ ,  $|I_{x+iy}|^2$  und  $\operatorname{Re} \left\{ i \left( I_0 - (\frac{\hbar}{2mc})^2 I_\Delta \right) I_z^* \right\}$  im Anhang B aufgeführt.

### 2.4.1 Berechnung der Ausdrucks $|I_0|^2$

Einsetzen von (2.19) in (2.15) ergibt

$$I_0 = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} R_L i^L Y_{L0}^* < Y_{l'm'} | Y_{L0} | Y_{lm} >, \quad (2.29)$$

wobei  $R_L = \int_0^\infty R_{el'}(r) j_L(gr) R_{nl}(r) r^2 dr$  ist. Unter Verwendung von (2.20) bekommt man

$$I_0 = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} R_L i^L Y_{L0}^* (-1)^{m'} \cdot \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m' & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.30)$$

Ebenso wie in Kapitel 1 über die Spinzustände summiert bzw. gemittelt werden musste, wird hier zusätzlich zur Bildung des Betragsquadrates über die Anfangszustände gemittelt ( $\frac{1}{2l+1} \sum_m$ ) und die Endzustand summiert ( $\sum_{m'}$ )

$$\begin{aligned} |\hat{I}_0|^2 &= \frac{1}{2l+1} \sum_m \sum_{m'} |I_0|^2 \\ &= 4^2 \pi^2 \sum_{L,L'}^{\infty} R_L R_{L'} i^L (i^{L'})^* Y_{L0}^* Y_{L'0} (-1)^{2m'} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi} \right] \cancel{\frac{1}{2l+1}} \\ &\quad \cdot \sum_m \sum_{m'} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m' & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l \\ -m' & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= 4^2 \pi^2 \sum_L^{\infty} R_L^2 i^L (i^L)^* |Y_{L0}|^2 \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)}{4\pi} \right] \cancel{\frac{1}{2L+1}} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

wobei im letzten Schritt Gl. (2.23) verwendet wurde. Mit (2.25) erhält man daraus

$$|\hat{I}_0|^2 = 4^2 \pi^2 \sum_L^{\infty} R_L^2 i^L (i^L)^* \frac{2L+1}{4\pi} \left[ \frac{(2l'+1)}{4\pi} \right] \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \quad (2.32)$$

Schließlich muss noch über die Drehimpulse ( $l'$ ) der Endzustände summiert und mit der Besetzungszahl  $B_{nl} = 2(2l+1)$  multipliziert werden.

$$\begin{aligned} |\tilde{I}_0|^2 &= 2(2l+1) \sum_{l'} \left| \hat{I}_\alpha \right|^2 \\ &= 2(2l+1) \sum_{L,l'} R_L^2 i^L (i^L)^* (2L+1) (2l'+1) \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Nach Gleichung (2.21) und (2.22) ist das 3j-Symbol nur dann nicht Null, wenn  $|l - l'| \leq L \leq l + l'$  und  $l' + L + l$  gerade ist.

#### 2.4.2 Berechnung des Ausdrucks $|I_z|^2$

Äquivalent zur vorherigen Berechnung setzt man (2.19) in (2.15) ein und erhält

$$I_z = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} j_L(qr) i^L Y_{L0}^* R_{el'} \langle Y_{l'm'} | Y_{L0} \frac{\partial}{\partial z} | Y_{lm} \rangle R_{nl}. \quad (2.34)$$

Durch Multiplizieren einer geeigneten Eins ( $\sum_{l'',m''} |l'' m'' \rangle \langle l'' m''|$ ) kann der Ausdruck  $\langle Y_{l'm'} | Y_{L0} \frac{\partial}{\partial z} | Y_{lm} \rangle$  geschrieben werden als

$$\langle l'm' | Y_{L0} \frac{\partial}{\partial z} | lm \rangle = \sum_{l'',m''} \langle l'm' | Y_{L0} | l''m'' \rangle \langle l''m'' | \nabla_\mu | lm \rangle.$$

Um die folgenden Rechnungen allgemeingültig zu halten, wird statt der Ableitung nach  $z$  der Ausdruck  $\nabla_\mu$  verwendet (vgl. (2.28)). Dabei ist  $\mu = \pm 1$  oder 0 entsprechend der gewünschten Ableitung. Der zweite Faktor in der Summe ist nach (2.26) nur dann ungleich Null, wenn  $l'' = l \pm 1$  ist. Damit kann die gesamte Summe vereinfacht werden zu

$$\begin{aligned} \sum_{l'',m''} \langle l'm' | Y_{L0} | l''m'' \rangle \langle l''m'' | \nabla_\mu | lm \rangle \\ = \langle l'm' | Y_{L0} | l+1m+\mu \rangle \langle l+1m+\mu | \nabla_\mu | lm \rangle \\ + \langle l'm' | Y_{L0} | l-1m+\mu \rangle \langle l-1m+\mu | \nabla_\mu | lm \rangle. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Hier kann der jeweils erste Faktor in den beiden Summanden mittels (2.20) und der zweite mit Hilfe der Gleichung (2.26) gelöst werden. Für die ersten Faktoren erhält man

$$\begin{aligned} & \langle l' m' | Y_{L0} | l+1 m + \mu \rangle \\ &= (-1)^{m+\mu} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m-\mu & 0 & m+\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+3)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \langle l' m' | Y_{L0} | l-1 m + \mu \rangle \\ &= (-1)^{m+\mu} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m-\mu & 0 & m+\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l-1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.36) \end{aligned}$$

wobei hier ausgenutzt wurde, dass nach Gleichung (2.21)  $m' = m + \mu$  gelten muss. Für die zweiten Faktoren ergibt sich

$$\langle l+1 m + \mu | \nabla_\mu | l m \rangle = (-1)^l \frac{\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ -m-\mu & \mu & m+\mu \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \langle l+1 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle$$

und

$$\langle l-1 m + \mu | \nabla_\mu | l m \rangle = (-1)^l \frac{\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ -m-\mu & \mu & m+\mu \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \langle l-1 0 | \nabla_0 | l 0 \rangle. \quad (2.37)$$

Speziell für  $\mu = 0$  erhält man die ersten Faktoren direkt aus Gleichung (2.36). Die zweiten Faktoren lassen sich mit den im Anhang C aufgeführten 3j-Symbolen und der Gleichung (2.27) lösen zu

$$\langle l+1 m | \nabla_0 | l m \rangle = -(-1)^{l+m} \left[ \frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right)$$

und

$$\langle l-1 m | \nabla_0 | l m \rangle = -(-1)^{l+m} \left[ \frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right).$$

Einsetzen in die Gleichung für  $I_z$  (2.34) gibt

$$\begin{aligned}
 I_z = & -(-1)^l \left[ \frac{4\pi(2l'+1)}{(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_L i^L Y_{L0}^* (2L+1)^{\frac{1}{2}} \\
 & \cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ (l+1)^2 - m^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \right. \\
 & \left. + \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ l^2 - m^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] \right\} , \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] &= \int_0^\infty R_{el'}(r) j_L(qr) \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) R_{nl}(r) r^2 dr \\
 \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] &= \int_0^\infty R_{el'}(r) j_L(qr) \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) R_{nl}(r) r^2 dr .
 \end{aligned}$$

Bilden des Betragsquadrates, Mitteln über die Anfangszustände und Summieren über die Endzustände führt zu

$$\begin{aligned}
 |\tilde{I}_z|^2 = & \frac{B_{nl}}{2l+1} \sum_{l'} \sum_{m=-l'}^{l'} (-1)^{2l+2} \left[ \frac{4\pi(2l'+1)}{(2l+1)} \right] \\
 & \cdot \sum_{L,L'} i^L \left( i^{L'} \right)^* \frac{\sqrt{(2L+1)(2L'+1)}}{4\pi} (2L+1)^{\frac{1}{2}} (2L'+1)^{\frac{1}{2}} \\
 & \cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
 & \cdot \left\{ (l+1)^2 - m^2 \right\} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right]' \\
 & + \left. \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
 & \cdot \left\{ l^2 - m^2 \right\} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right]' \\
 & + 2 \left( \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
 & \cdot \left. \sqrt{\left\{ l^2 - m^2 \right\} \left\{ (l+1)^2 - m^2 \right\}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right]' \right\} .^2 \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

Nach Gleichung (2.21) und (2.22) sind die drei Summanden für unterschiedliche Kombinationen der Drehimpulsdice gleich Null. Der erste ist zum Beispiel nur dann ungleich Null, wenn  $|l+1-l'| \leq L \leq l+1+l'$  und  $l'+L+l+1$  gerade ist.

---

<sup>2</sup>Nach den Ausführungen von Pokroppa [18] wird der dritte Summand subtrahiert, die Herleitung zeigt aber wie hier dargelegt die Addition des Terms.

# 3 Numerische Umsetzung und verwendeten Unterprogramme

Da nach den analytischen Überlegungen zur Berechnung des Wirkungsquerschnittes aus Kapitel 2 nur die Winkelanteile nicht aber die Radialanteile gelöst werden können, müssen letztere numerisch berechnet werden. Für die Berechnung des Wirkungsquerschnittes wurde ein Hauptprogramm in der Programmiersprache C++ geschrieben, das auf frei verfügbaren Unterprogrammen beruht. Die meisten Unterprogramme sind in C++ übersetzt und als Routinen eingebunden worden. Die einzige Ausnahme ist das Unterprogramm zur Berechnung der gebundenen Zustände, es wurde in Fortran belassen und muss vor der eigentlichen Rechnung ausgeführt werden. Die berechneten Daten werden anschließend vom Hauptprogramm eingelesen.

Für die Auswertung der Winkelanteile müssen einige 3j-Symbole berechnet werden, dazu wird das erste aufgeführte Unterprogramm eingebunden. Die Auswertung der Radialanteile benötigt zum einen die Radialwellenfunktionen für die gebundenen und ungebundenen Zustände, sowie eine Routine zur Berechnung des Integrals. Letzteres wird mittels einer Hankeltransformation berechnet. Für die Berechnung der ungebundenen Zustände muss das Atompotential bekannt sein. Außerdem sind zur Normierung der ungebundenen Zustände sphärische Besselfunktionen erforderlich.

In diesem Kapitel werden die verwendeten Unterprogramme näher beschrieben.

## 3.1 Berechnung der 3j-Symbole

Die zur Berechnung der Winkelanteile wichtigen 3j-Symbole, wie sie im Kapitel 2.3 aufgeführt sind, werden in der Routine *threej* berechnet. Für diese Routine wurde ein Programm von Wei [9] als Vorlage verwendet. Das Programm berechnet aus den 6 Eingabewerten Werten,  $m_1, m_2, m_3$  und  $j_1, j_2, j_3$  das entsprechende 3j-Symbol nach der Formel

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{-m_3, m_1 + m_2} \cdot (-1)^{j_1 - j_2 - m_3} \cdot \Delta(j_1 j_2 j_3) \cdot \left[ \frac{\binom{2j_1}{j_1 - j_2 + j_3} \binom{2j_2}{j_1 + j_2 - j_3} \binom{2j_3}{-j_1 + j_2 + j_3}}{\binom{2j_1}{j_1 + m_1} \binom{2j_2}{j_2 + m_2} \binom{2j_3}{j_3 + m_3}} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \sum_k (-1)^k \binom{j_1 + j_2 - j_3}{k} \binom{j_1 - j_2 + j_3}{j_1 - m_1 - k} \binom{-j_1 + j_2 + j_3}{j_2 + m_2 - k} \quad (3.1)$$

$$\text{mit } \Delta(j_1 j_2 j_3) = \left[ \frac{(j_1 + j_2 - j_3)! (j_1 - j_2 + j_3)! (-j_1 + j_2 + j_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{und } \binom{n}{k} = \frac{n!}{k! (n-k)!}.$$

Für die Summationsgrenzen gilt

$$I_1 \leq k \leq I_2,$$

$$\text{mit } I_1 \equiv \max(0, j_1 - j_2 + m_2, j_2 - j_3 - m_1)$$

$$\text{und } I_2 \equiv \min(j_1 + j_2 - j_3, j_1 - m_1, j_2 + m_2).$$

Nach den Auswahlregeln für 3j-Symbole sind diese gleich Null, wenn (vgl. Gl. (2.21))

$$|m_i| > j_i \quad \text{für } i = 1, 2, 3,$$

$$m_1 + m_2 \neq -m_3,$$

$$|l_1 - l_2| > l_3$$

$$\text{und } l_1 + l_2 < l_3$$

ist. Werden diese Auswahlregeln von den Eingabewerten nicht erfüllt, gibt das Programm ohne weitere Rechnungen Null aus. Für alle übrigen Kombinationen von Eingabewerten sind eine Reihe von Binomialkoeffizienten von ganzen Zahlen zu berechnen, wie aus der Formel (3.1) ersichtlich ist. Für große  $j$ -Werte werden diese Zahlen sehr groß, daher wurde für die Zahlen eine numerisch günstigere Darstellung zur Rechnung gewählt, die im Folgenden näher beschrieben wird.

Für numerische Multiplikation und Division mit großen Integer-Werten ist es üblich, die Zahlen nach Vielfachen von Primzahlen zu zerlegen. Es ist zum Beispiel  $30 = 2 \cdot 3 \cdot 5$  oder  $6936 = 2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 17 \cdot 17 = 2^3 \cdot 3 \cdot 17^2$ . Die Exponenten der Primzahlen werden in einem Array gespeichert und es wird nur noch mit den Exponenten anstelle der großen Zahlen gerechnet. So ist zum Beispiel  $6936 = 1^0 \cdot 2^3 \cdot 3^1 \cdot 5^0 \cdot 7^0 \cdot 11^0 \cdot 13^0 \cdot 17^2 = (0, 3, 1, 0, 0, 0, 0, 2, 0, \dots, 0)$ . Diese Darstellungen ist numerisch sinnvoll, da eine Multiplikation oder Division großer Zahlen zur Addition bzw. Subtraktion kleiner Zahlen wird und dadurch viel schneller berechnet werden kann. Es ist zum Beispiel  $30 \cdot 6936 = 2^4 \cdot 3^2 \cdot 5^1 \cdot 17^2 \equiv (0, 3 + 1, 1 + 1, 0 + 1, 0, 0, 0, 2, 0, \dots, 0) = (0, 4, 2, 1, 0, 0, 0, 2, 0, \dots, 0)$ .

Zur Addition und Subtraktion großer Zahlen ist es numerisch sinnvoll, die Zahlen als eine Summe von Vielfachen einer Basis zu schreiben. Das Binärsystem ist wohl das bekannteste System dieser Art, hier ist die Zahl 2 die Basis. Eine Zahl wird also wie folgt dargestellt:  $6 = 0 \cdot 2^n + \dots + 0 \cdot 2^3 + 1 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 0 \cdot 2^0 \equiv (0, \dots, 0, 1, 1, 0)$ . Ebenso kann die Basis jede beliebige Zahl sein. In diesem Programm ist die Basis zu 32768 gewählt, damit die Arrays möglichst klein bleiben aber trotzdem möglichst große Zahlen darstellen werden können. Um alle Zahlen darstellen zu können, sind in diesem Fall auch negative Exponenten nötig. Eine Addition oder Subtraktion großer Zahlen wird damit zur Addition bzw. Subtraktion von 1 und 0. Für den Wert  $1+1=2$  wird der entsprechende Eintrag gleich Null gesetzt und zu dem nächst höheren eine Eins addiert. Zum Beispiel ist  $6+12 \equiv (0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0) + (0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, 0) \equiv (0, \dots, 0, 1, 0, 0, 1, 0)$ .

Für den Faktor vor der Summe in der Gleichung (3.1) wird mit der Primfaktor-Zerlegung gerechnet

und zur Berechnung der Summe werden die Zahlen über Vielfache der Basis 32768 dargestellt. Das Programm ist stichprobenartig mit den von Wei [9] abgegebenen Werten überprüft worden. Zum Beispiel

$$\begin{pmatrix} 15 & 30 & 40 \\ 2 & 2 & -4 \end{pmatrix} = -0.01908158$$

Des Weiteren ist es mit analytisch einfach berechenbaren Werten nach Edmonds [6] Formel (3.7.9) getestet worden, wie zum Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix} = 0.4472136 = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

## 3.2 Berechnung der gebundenen Atom-Zustände ( $R_{nl}$ )

Wie eingangs erwähnt, werden zur Auswertung der Radialanteile die gebundenen radialen Wellenfunktionen ( $R_{nl}$ ) des Atoms und zur Berechnung der ungebundenen Zustände das Atompotential benötigt. Die Indizes  $n$  und  $l$  stehen für die Haupt- und Nebenquantenzahl. Das Programm „wavegen.f“ gibt eine selbstkonsistente Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für die  $R_{nl}$  des Atoms und das Atompotential auf einem exponentiellen Gitter aus.

Die Grundlage des Programms ist von Hamann [11] übernommen. Es wurde in der Arbeitsgruppe von Herrn Krüger (Institut für Festkörpertheorie, WWU Münster) geringfügig verändert. In die Eingabedatei „wavegen.dat“ werden die Kernladungszahl  $Z$  des zu untersuchenden Elementes und dessen Besetzungszahl eingetragen. Für Kohlenstoff sieht die Eingabedatei wie folgt aus:

```
6.
1 0 1. 1.
2 0 1. 1.
2 1 1. 1.
```

Die erste Zeile enthält die Ordnungszahl  $Z$ . In der darunter anschließenden Tabelle sind in der ersten Spalte die Hauptquantenzahl  $n$  und in der zweiten die Drehimpulsquantenzahl  $l$  und in den folgenden zwei Spalten die Besetzungszahlen aufgeteilt nach Spinrichtung einzutragen. Da für die Berechnung des Wirkungsquerschnittes die Wellenfunktionen nicht spinaufgespalten benötigt werden, ist die Anzahl der Elektronen gleichmäßig auf die beiden Spinrichtungen zu verteilen. Die zu Grunde liegende Formel des Programms ist die radiale Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) + \left( \frac{l(l+1)}{2r^2} + (V(r) - E_{nl}) \right) u_{nl}(r) = 0 \quad (3.2)$$

Das Potential hat die Form  $V(r) = -\frac{Z}{r} + V_{coulomb}(r) + V_{xc}(r)$ , wobei  $V_{coulomb}(r) = \int \frac{n(r')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3 r'$  ist und das Austausch-Korrelations-Potential ( $V_{xc}(r)$ ) in lokaler Dichteapproximation nach Perdew [12] berechnet wird. Für die Energie und das Potential wird die Einheit Hartree verwendet.

Der Anfangswert für das Potential  $V(r)$  ist das sogenannte Thomas-Fermi-Potential

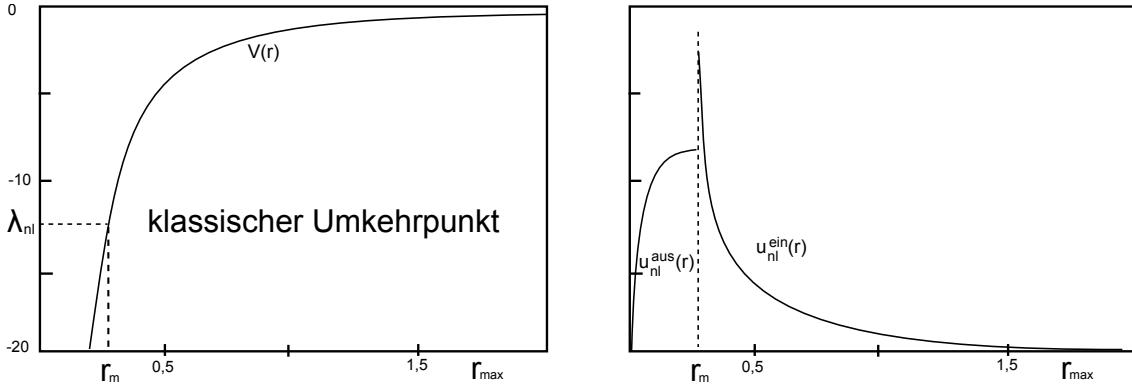
$$V(r) = V_{Thomas-Fermi}(r) = \frac{-Z}{r} e^2 \Phi\left(\frac{r}{b}\right)$$

mit  $\Phi(0) = 0$  und  $\Phi(\infty) = 0$ . In der numerischen Umsetzung nach Letter [14] ist

$$V(r) = \frac{Z}{r} \left[ 1 + 0.02747x^{\frac{1}{2}} + 1.243x - 0.1486x^{\frac{3}{2}} + 0.2302x^2 + 0.007298x^{\frac{5}{2}} + 0.006944x^3 \right]^{-1}$$

mit  $x = \frac{r}{b}$  für  $b = \frac{0.8853}{Z^{\frac{1}{3}}}$ .

Für einen vorgegebenen Energie-Eigenwert ( $\lambda_{nl}$ ) wird, wie in Abbildung 3.1 dargestellt, die Wellenfunktion durch Auswärtsintegration ( $u_{nl}^{aus}$ ) und Einwärtsintegration ( $u_{nl}^{ein}$ ) berechnet.



**Abbildung 3.1:** Zur Verdeutlichung der selbstkonsistenten Rechnung. (persönliche Mitteilung Krüger)

Die Integration wird nach „Adam’s Extrapolation / Interpolation Formula“ nach Abramowitz [13, S. 896] durchgeführt. Dann wird  $u_{nl}^{ein}$  neu skaliert, sodass  $u_{nl}^{ein}$  und  $u_{nl}^{aus}$  bei  $r_m$  den gleichen Wert haben. Anschließend wird die Wellenfunktion normiert. Aus der Unstetigkeit der Ableitung wird eine Korrektur für  $\lambda_{nl}$  mit der Formel

$$\Delta\lambda_{nl} = \frac{u_{nl}^{ein}(r_m)}{2} \left( \frac{du_{nl}^{aus}(r_m)}{dr} - \frac{du_{nl}^{ein}(r_m)}{dr} \right).$$

berechnet. Mit dem korrigierten Eigenwert wird die Wellenfunktion erneut berechnet und wieder eine Korrektur für den Eigenwert bestimmt, bis der Korrekturwert genügend klein ist. Aus den so ermittelten Eigenwerten und Wellenfunktionen wird das Atom-Potential neu berechnet und dann die Berechnung der Wellenfunktionen erneut begonnen. Nach hundert Iterationen werden alle Werte ausgegeben.

Die Wellenfunktionen werden auf einem exponentiellen Gitter mit  $mmax = 2^{13}$  Punkten berechnet. Für die Gitterpunkte gilt  $r_i = r_0 \cdot a_{mesh}^i$  mit  $r_0 = \frac{1}{160 \cdot Z}$  und  $a_{mesh} = (45 \cdot 160 \cdot Z)^{\frac{1}{mmax}}$  gerechnet.  $Z$  ist die Kernladungszahl des Atoms. Das Gitter ist dimensionslos und kann durch Multiplikation mit dem Bohrschen Radius ( $a_0$ ) in die gewünschte Längeneinheit umgerechnet werden. Die Größe  $a_{mesh}$  ist so gewählt, dass der maximale Wert für den Radius  $r_{mmax} \geq 45$  au (atomic units) beträgt. Dieser Abstand zum Kern ist ausreichend, da die zu berechnenden Wellenfunktionen bis zu dieser Entfernung auf Null abgeklungen sind. Die Anzahl der Netzpunkte ist so gewählt, dass der Abstand der Gitterpunkte genügend klein ist, um die schnelle Oszillation der später benötigten Kontinuum-Wellenfunktionen berechnen zu können.

Zur Ausgabe der Werte erstellt das Programm drei Dateien. In der Datei „r\_v\_value.dat“ werden  $mmax$ ,  $a_{mesh}$ ,  $Z$ ,  $r_i$  und die Potentialwerte in Hartree ausgegeben. Die

Dateien „waveup.dat“ und „wavedown.dat“ sind ohne Spinaufspaltung äquivalent. In diesen Dateien werden in der ersten Zeile die Energiedifferenzen in eV ausgegeben und darunter die Wellenfunktionen für alle besetzten Zustände. Die Abbildungen 3.2 und 3.3 zeigen die numerisch berechneten radialen Wellenfunktionen für Silizium.

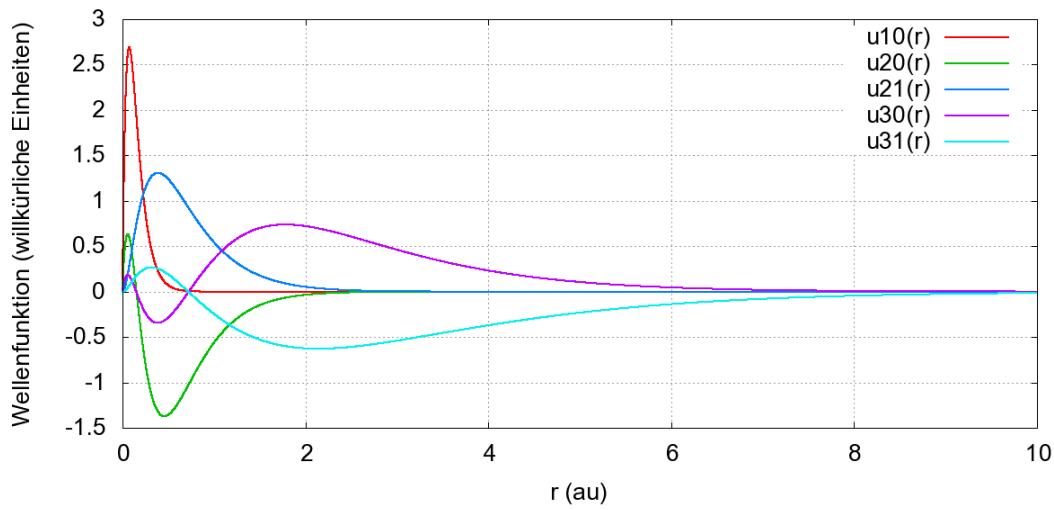


Abbildung 3.2: Radiale Wellenfunktionen ( $u_{nl}(r) = r \cdot R_{nl}(r)$ ) für Si.

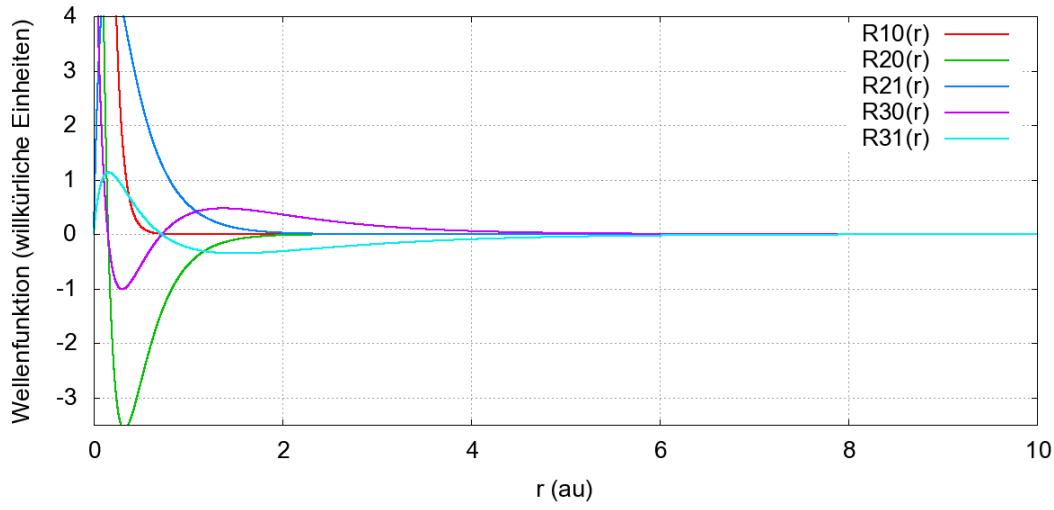


Abbildung 3.3: Radiale Wellenfunktionen ( $R_{nl}(r)$ ) für Si.

Abbildung 3.4 zeigt das numerisch berechnete Atom-Potential für Silizium, dass zur Berechnung der Kontinuum- Wellenfunktionen verwendet wird.

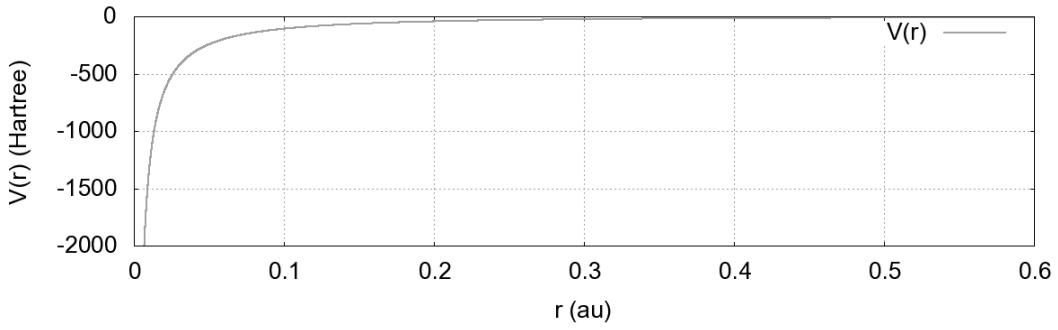


Abbildung 3.4: Numerisch berechnetes Atom-Potential für Si.

### 3.3 Berechnung der ungebundenen Atom-Zustände ( $R_{el}$ )

Das Unterprogramm „contwave“ berechnet die Kontinuumzustände  $R_{el}$ , die zur Auswertung der Radialintegrale nötig sind. Die Indizes  $e$  und  $l$  stehen für die Energie und den Drehimpuls des Elektrons. Ausgangspunkt ist wie zuvor in Kapitel 3.2 die radiale Schrödinger-Gleichnung:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} u_{el \text{ nicht normiert}}(r) + \left( \frac{l(l+1)}{2r^2} + (V(r) - e) \right) u_{el \text{ nicht normiert}}(r) = 0 \quad (3.3)$$

Das Programm „wavegen.f“ (Kap. 3.2) berechnet die Werte für das Potential  $V(r)$ . Diese Werte werden vom Hauptprogramm an die Funktion „contwave“ übergegeben. Einfache Auswärtsintegration der Schrödinger-Gleichung für fest vorgegebene Werte für  $e$ ,  $l$  und  $V(r)$  liefert die nicht normierte Kontinuum-Wellenfunktionen  $R_{el \text{ nicht normiert}}$  zu diesen Quantenzahlen. Die Werte für die Energie und den Drehimpuls werden vom Hauptprogramm durch ein Start-Wert  $emin$ , eine Energiedifferenz  $einc$  und die Anzahl der zu berechnenden Energiewerte  $emax$  vorgegeben.

Die auf diese Weise berechneten Wellenfunktionen müssen schließlich noch normiert werden. Da sie für  $r \rightarrow \infty$  nicht verschwinden, wird, wie es Cowan [15, Kap. 18] ausführt, auf ein sehr kleines Energieintervall ( $\Delta$ ) normiert:

$$\int_{\Delta} \int_0^{\infty} u_{el}(r) u_{e'l}(r) dr de = \int_{\Delta} \delta(e - e') de = \begin{cases} 0, & \text{wenn } e' \text{ außerhalb } \Delta, \\ 1, & \text{wenn } e' \text{ innerhalb } \Delta, \end{cases} \quad (3.4)$$

wobei die Funktion  $u_{el}$  mit dem Normierungsfaktor ( $c_e$ ) geschrieben werden kann als

$$u_{el}(r) = c_e \cdot r \cdot R_{el}(r) .$$

Dabei ist  $r \cdot R_{el}(r)$  die auf die Amplitude im Unendlichen normierte Wellenfunktion. Es gilt

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \cdot R_{el}(r) \propto \cos(qr + \delta) \text{ mit } q = \sqrt{2}e . \quad (\text{e in Hartree})$$

Das Verhalten für kleine  $r$  entspricht dem eines gebundenen Zustandes, es kann also geschrieben werden

$$\lim_{r \rightarrow 0} r \cdot R_{el}(r) = c_1 r^l + c_2 r^{l+1} + \dots .$$

Multiplikation der radialen Schrödinger-Gleichung (3.3) mit  $R_{e'l}(r)$  und Umformen des ersten Terms nach

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} u_{el}(r) = -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R_{el}(r)$$

ergibt

$$-\frac{R_{e'l}(r)}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R_{el}(r) + \left( \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right) R_{el}(r) R_{e'l}(r) = 2e \cdot R_{el}(r) R_{e'l}(r) . \quad (3.5)$$

Dabei ist das Potential und die Energie ( $e$ ), wie in der numerischen Umsetzung, in der Einheit Hartree einzusetzen. Im Folgenden wurde  $e'$  in Gleichung (3.5) für  $e$  eingesetzt und von (3.5) subtrahiert und anschließend über den Radius integriert:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{(e-e')} \int_0^\infty \left[ R_{el}(r) \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R_{e'l}(r) - R_{e'l}(r) \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R_{el}(r) \right] dr \\ &= \int_0^\infty r^2 R_{el}(r) R_{e'l}(r) dr . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Durch partielle Integration und anschließender Integration über  $e$  erhält man mit  $de = qdq$

$$\begin{aligned} \int_\Delta \int_0^\infty u_{el}(r) u_{e'l}(r) dr de &= \int_\Delta c_e c_{e'} \cdot \int_0^\infty r^2 R_{el}(r) R_{e'l}(r) dr q dq \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \int_\Delta \frac{c_e c_{e'} q}{2(q-q')} \sin \{(q-q')r + \delta - \delta'\} dq . \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist Null, wenn  $q'$  nicht in  $\Delta$  enthalten ist. Ist  $q'$  in  $\Delta$  enthalten, folgt

$$\begin{aligned} \int_\Delta \int_0^\infty u_{el}(r) u_{e'l}(r) dr de &= \frac{c_e^2 q}{2} \lim_{r \rightarrow \infty} \int_\Delta \frac{\sin(q-q')r}{q-q'} dq \\ &= \frac{c_e^2 q}{2} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin xr}{x} dx \\ &= \frac{\pi c_e^2 q}{2} . \end{aligned}$$

Damit erhält man für die normierte Wellenfunktion (vgl. [15, Gl. 18.27])

$$u_{el} = \frac{2^{\frac{1}{4}}}{\pi^{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{4}}} \cdot r \cdot \hat{R}_{el} .$$

Es bleibt  $r \cdot \hat{R}_{el}$ , die auf die Amplitude im Unendlichen normierte Wellenfunktion, zu bestimmen. Nach Nolting [16, Kap. 6] lassen sich im Kontinuum die Wellenfunktionen durch sogenannte sphärische Besselfunktionen  $j_L(r)$  und sphärische Neumannfunktionen  $n_L(r)$  der Ordnung  $L = l$  darstellen:

$$j_L(r) = (-r)^L \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^L \frac{\sin r}{r} \quad \text{und} \quad n_L(r) = -(-r)^L \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^L \frac{\cos r}{r} . \quad (3.7)$$

Das numerische Vorgehen zur Berechnung dieser Funktionen wird im Kapitel 3.4 näher erläutert. Für einen potentialfreien Raum erhält man

$$R_{el}(r) = \alpha_l j_l(qr) + \beta_l n_l(qr) \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2e} .$$

Für diese Gleichung kann die Amplitude für  $r \rightarrow \infty$  mit dem Verhalten von  $j_l$  und  $n_l$  für  $r \rightarrow \infty$  nach [16, Gl. 6.125 und 6.126]

$$\lim_{r \rightarrow \infty} j_l(qr) = \frac{1}{qr} \sin\left(qr - \frac{l\pi}{2}\right) \quad \text{und} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} n_l(qr) = -\frac{1}{qr} \cos\left(qr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

angegeben werden. Daraus folgt für die Wellenfunktion

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{el}(r) = \frac{\alpha_l}{q \cos \delta_l} \sin\left(qr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad \text{mit} \quad \delta_l = \tan^{-1}\left(-\frac{\beta_l}{\alpha_l}\right).$$

Die Vorfaktoren  $\alpha_l$  und  $\beta_l$ , werden über die Anschlußbedingungen

$$R_{numerisch}(r_a) = R_{analytisch}(r_a) \quad \text{und} \quad \left. \frac{d}{dr} R_{numerisch}(r) \right|_{r=r_a} = \left. \frac{d}{dr} R_{analytisch}(r) \right|_{r=r_a}$$

an einem beliebigen Punkt  $r_a$ , an dem das Atom-Potential zu Null abgeklungen ist, bestimmt. Damit bekommt man

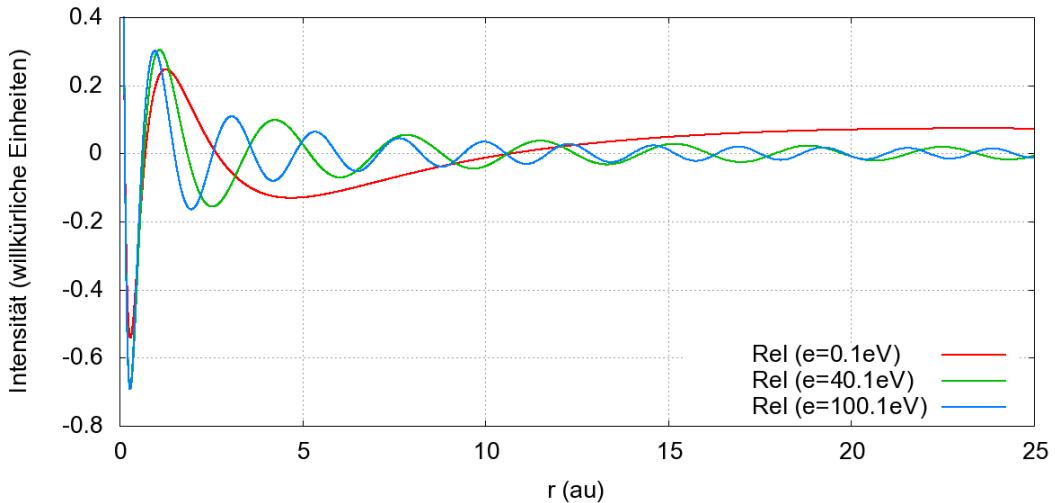
$$\alpha_l = \{R_{el} - \beta_l n_l(qr)\} \frac{1}{j_l(qr)} \quad \text{und} \quad \beta_l = \frac{\left[ \frac{d}{dr} R_{el} - \frac{R_{el} \frac{d}{dr} j_l(qr)}{j_l(qr)} \right]}{\left[ \frac{d}{dr} n_l(qr) - n_l(qr) \frac{\frac{d}{dr} j_l(qr)}{j_l(qr)} \right]}.$$

Zusammenfassend ergibt sich die normierte Wellenfunktion für ungebundene Zustände für die Energie  $e$  in Hartree aus

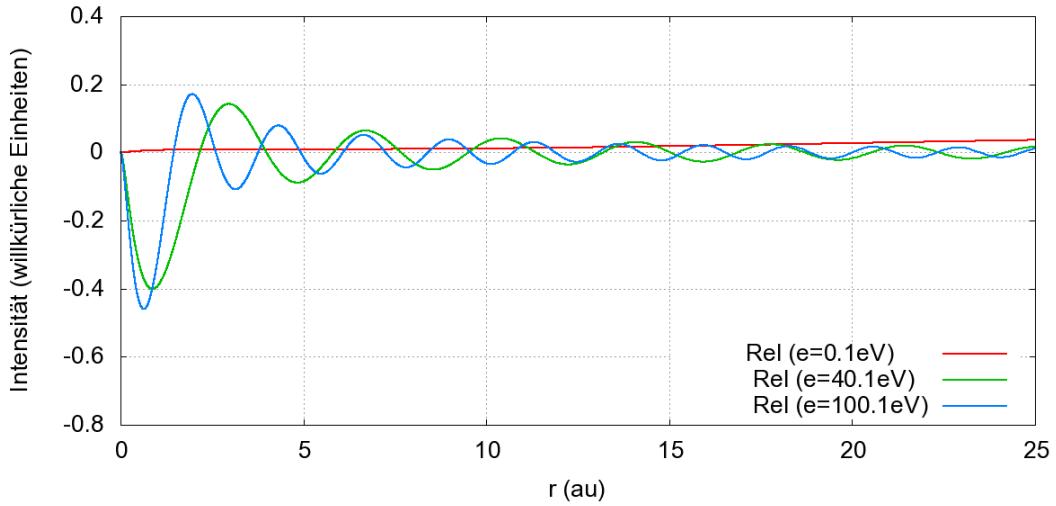
$$R_{el}^{\text{normiert}} = \frac{u_{el}}{r} = \frac{2^{\frac{1}{4}}}{\pi^{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{4}}} \cdot \frac{q \cos \delta_l}{\alpha_l} \cdot R_{el}^{\text{nicht normiert}}.$$

In allen anderen Kapiteln dieser Arbeit wird auf den Index „normiert“ verzichtet und lediglich  $R_{el}$  für die vollständig normierte Wellenfunktion geschrieben.

In den Abbildungen 3.5 und 3.6 sind auf die zuvor beschriebene Weise normierte radiale Kontinuum-Wellenfunktionen für einige Energie- und Drehimpulswerte dargestellt.

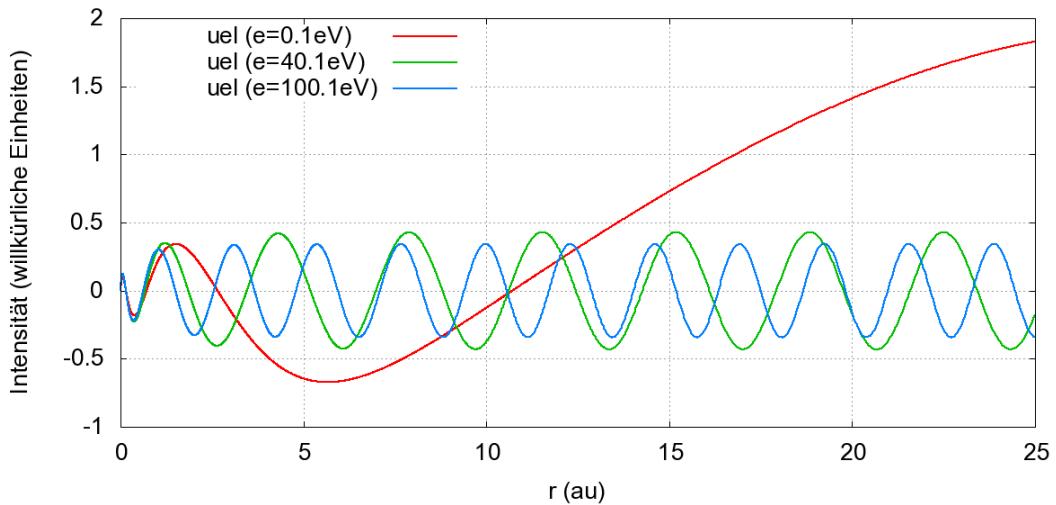


**Abbildung 3.5:** Radiale Wellenfunktionen ( $R_{el}$ ) für ungebundene Zustände mit der Energie  $e$  und einem Drehimpuls  $l = 0$  des Elektrons für Si.

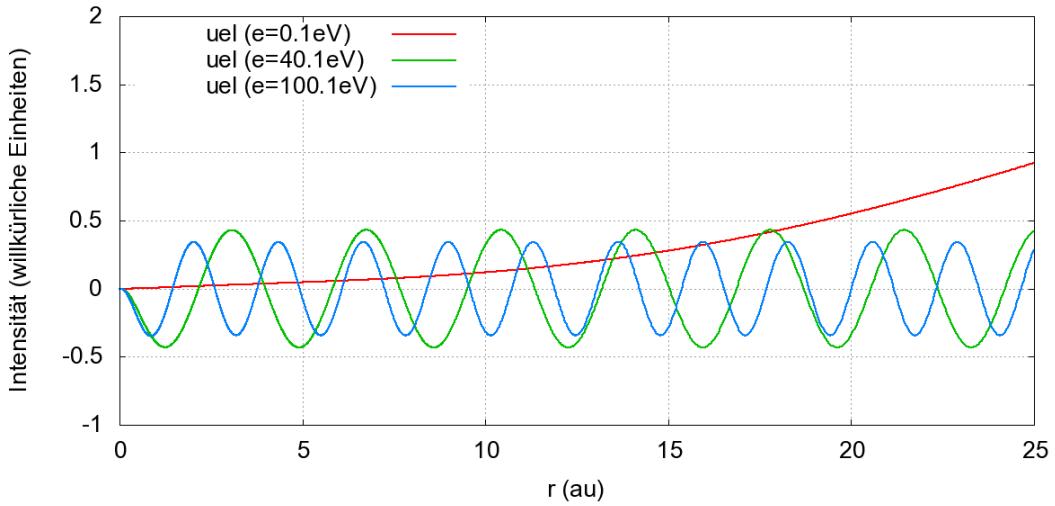


**Abbildung 3.6:** Radiale Wellenfunktionen ( $R_{el}$ ) für ungebundene Zustände mit der Energie  $e$  und einem Drehimpuls  $l = 2$  des Elektrons für Si.

In Abbildung 3.7 und 3.8 sind anstatt  $R_{el}$  die Werte für  $u_{el}$  aufgetragen. Hier ist sehr gut zu sehen, dass die Funktionen für große Argumente gleichmäßig und mit konstanter Amplitude schwingen. Für kleine Energien setzt dieses Verhalten erst bei sehr großen Werten für  $r$  ein und ist daher für 0,1 eV bei  $r=25$  au noch nicht zu sehen.



**Abbildung 3.7:** Radiale Wellenfunktionen ( $u_{el} = r \cdot R_{el}$ ) für ungebundene Zustände mit der Energie  $e$  und einem Drehimpuls  $l = 0$  des Elektrons für Si.



**Abbildung 3.8:** Radiale Wellenfunktionen ( $u_{el} = r \cdot R_{el}$ ) für ungebundene Zustände mit der Energie  $e$  und einem Drehimpuls  $l = 2$  des Elektrons für Si.

### 3.4 Berechnung der sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen

Für die Normierung der ungebundenen Atom-Zustände  $R_{el}$  sind sphärische Besselfunktionen  $j_L(r)$  und sphärische Neumannfunktionen  $n_L(r)$  der Ordnung  $L$  zu berechnen.

$$j_L(r) = (-r)^L \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^L \frac{\sin r}{r} \quad \text{und} \quad n_L(r) = -(-r)^L \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^L \frac{\cos r}{r} \quad (3.8)$$

Die Neumannfunktion wird auch Weberfunktion oder Besselfunktion 2. Art genannt. Das Programm zur Berechnung dieser Funktionen beruht auf der Routine SPHFUN von Ardill und Moriarty [10]. Aus den Eingabewerten für  $r$  und  $L$  werden nach den bei Abramowitz [13] aufgeführten Näherungsformeln die entsprechenden Bessel- und Neumannfunktionen berechnet. Dabei wird der Funktionswert der Besselfunktion und der Wert für die Neumannfunktion als Parameter an das Hauptprogramm übergeben. Für kleine Ordnungen und große Argumente werden die Formeln (10.1.8) und (10.1.9) in [13] als Grundlage benutzt. Sind die Ordnungen groß und die Funktionswerte klein, liegen die Formeln (10.1.2) und (10.1.3) den Rechnungen zu Grunde. Für Ordnungen kleiner Null wird die Formel (10.1.15) numerisch ausgewertet.

Es können Besselfunktionen bis zur Ordnung 50 im Bereich von -100 bis 100 berechnet werden [10]. Abbildung 3.9 zeigt die mit dieser Routine berechneten Bessel- und Neumannfunktionen für einige L-Werte.

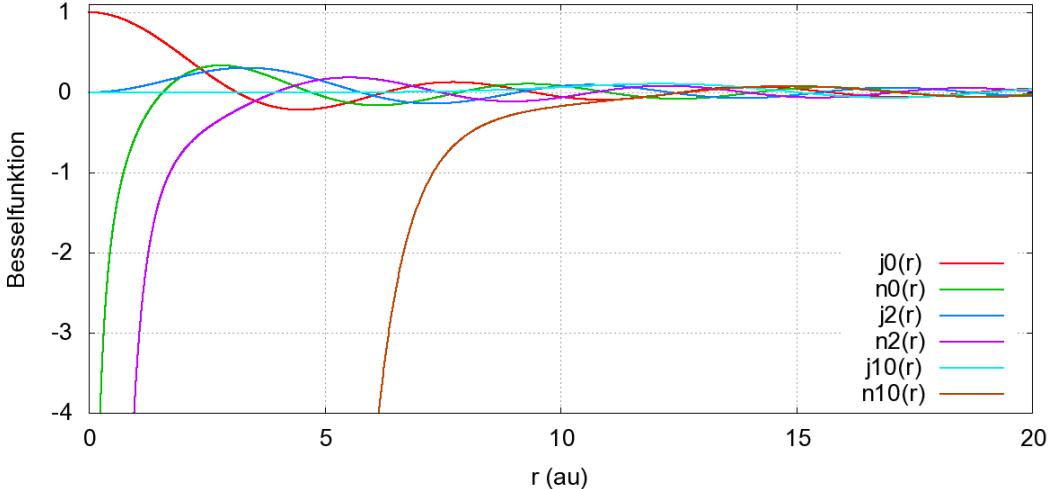


Abbildung 3.9: Numerisch berechnete sphärische Bessel- ( $j_L$ ) und Neumannfunktionen ( $n_L$ ).

### 3.5 Berechnung der sphärischen Hankeltransformation

Die Radialintegrale in den Matrixelementen werden über die so genannte sphärische Hankeltransformation  $g(q)$  oder auch sphärische Besseltransformation ausgewertet. Diese hat die Form

$$g(q) = \int_0^\infty j_L(qr) f(r) r^2 dr , \quad (3.9)$$

wobei  $j_L(qr)$  eine sphärische Besselfunktion ist, wie sie in Kapitel 3.4 beschrieben ist. Die Funktion  $f(r)$  ist in der Anwendung für diese Arbeit die Multiplikation der radialen Wellenfunktionen für gebundene und ungebundene Zustände in Verbindung mit einem weiteren Faktor oder Ableitungsoperator. Zum Beispiel:

$$f(r) = R_{el} \cdot R_{nl} \quad \text{oder} \quad f(r) = R_{el} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) R_{nl} .$$

Das Programm zur Berechnung der Hankeltransformation beruht auf dem Programm „LSFBTR“ (Logarithmic Scale Fourier Bessel TRansform) von Talman [17]. Das Integral wird auf einem exponentiellen q-Gitter mit  $2^N$  Gitterpunkten ausgewertet. Dazu werden im Hauptprogramm die Werte für  $f(r)$ , der Wert L, das radiale Gitter und die zur Charakterisierung des q-Gitters wichtigen Werte an das Unterprogramm übergeben. Das q-Gitter berechnet sich analog zum radialen Gitter nach  $q_i = q_{min} \cdot a_{mesh}^i$  und besteht ebenfalls aus  $2^{13}$  Gitterpunkten.

Durch den Wechsel auf ein exponentielles Gitter mit  $r = e^\rho$  und  $q = e^k$ , kann  $g(q)$  als eine Kreuzkorrelation aufgefasst werden:

$$g(e^k) = \int_{-\infty}^{\infty} j_L(e^{\rho+k}) f(e^\rho) e^{3\rho} d\rho . \quad (3.10)$$

Damit ist das Integral über eine Fourier Hin- und Rücktransformation zu berechnen. Es ist numerisch sinnvoll (3.10) umzuformen in

$$g(e^k) = e^{(m-\frac{3}{2})k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(\frac{3}{2}-m)(k+\rho)} j_L(e^{k+\rho}) e^{(m+\frac{3}{2})\rho} f(e^\rho) d\rho . \quad (3.11)$$

Hier ist  $m$  ein frei wählbarer Parameter in den Grenzen  $0 \leq m \leq L$ . Mit dem Faltungstheorem

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x+y) g(y) dy = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \tilde{f}(k) \tilde{g}(-k) dk ,$$

wobei  $\tilde{f}$  und  $\tilde{g}$  die Fouriertransformierten von  $f$  und  $g$  sind, kann die Gleichung weiter umgeschrieben werden zu

$$g(e^k) = 2\pi e^{(m-\frac{3}{2})k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} M_{L,m}(t) \Phi_m(t) dt \quad (3.12)$$

$$= 4\pi e^{(m-\frac{3}{2})k} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{ikt} M_{L,m}(t) \Phi_m(t) dt . \quad (3.13)$$

Hier ist

$$\begin{aligned} \Phi_m(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt} e^{(\frac{3}{2}+m)x} f(e^x) dx \quad \text{und} \\ M_{L,m}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} e^{(\frac{3}{2}-m)x} j_L(e^x) dx \\ &= (8\pi)^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^p \left( \frac{j-1}{2-it} \right) \prod_{j=1}^l \left( 2j-l+m-\frac{1}{2}+it \right)^{-1} \\ &\cdot \left[ \cos\left(\frac{p\pi}{2}\right) e^{i(\phi_1-\phi_2)} + \sin\left(\frac{p\pi}{2}\right) e^{i(\phi_1+\phi_2)} \right] \end{aligned}$$

mit

$$\phi_1 = \arg \left[ \Gamma \left( \frac{1}{2} - it \right) \right] \quad \text{und} \quad \phi_2 = \tan^{-1} \left( \tanh \frac{\pi t}{2} \right) .$$

Numerisch wird die Fouriertransformation über die sogenannte Fast-Fourier-Transform (FFT) nach

$$y_m = \sum_{n=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i n m}{N}} x_n$$

berechnet.

Die Hankeltransformation wird nach folgendem Schema berechnet:

Für  $L \leq 1$  und kleine  $k$ -Werte wird Gleichung (3.10) numerisch berechnet. Die Funktion  $f(r)$  wird mit  $e^{3\rho} = r^3$  multipliziert und davon die FFT berechnet. Die erhaltenen Werte werden mit der FFT der Besselfunktion multipliziert und dieser Wert durch erneute FFT zurücktransformiert. Sonst wird Gleichung (3.13) numerisch ausgewertet und dabei  $m = L$  für kleine  $k$ -Werte und  $m = 0$  für große  $k$ -Werte verwendet. Es wird der Punkt der besten Übereinstimmung der Lösung für große und kleine  $k$ -Werte ermittelt. Die Ausgabe der Routine ist ein entsprechender Zusammenschnitt aus den Lösungen für große und kleine  $k$ -Werte. Vor der zweiten FFT wird die zweite Hälfte der Funktion gleich Null gesetzt, da so nach empirischen Analysen bessere Ergebnisse erzielt werden

können [17].

Die Werte für die FFT der Besselfunktion sowie für  $M_{L,m}$  werden nur beim ersten Aufruf oder nach Änderung der Gitterparameter berechnet und für alle weiteren Rechnungen gespeichert. Diese Berechnung wird in einer separaten Routine

„INITIALIZE“ durchgeführt.

Die Berechnung der Phase  $\phi_1$  wird nach einer Idee von Weickenmeier (persönliche Mitteilung) über die Berechnung einer Gammafunktion, wie sie bei Abramowitz [13, Gl. 6.1.27] zu finden ist, durchgeführt.

$$\arg \left[ \Gamma \left( \frac{1}{2} + iy \right) \right] = y\Psi \left( \frac{1}{2} \right) + \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{2y}{1+2n} - \arctan \left( \frac{2y}{1+2n} \right) \right)$$

Dabei ist  $\Psi \left( \frac{1}{2} \right) = -1,9635100260$ . Die Summe wird bis zum vierfachen des Imaginärteils,  $n = 4 \cdot y$ , oder mindestens bis  $n = 10$  berechnet und die Restsumme nach der Eulerschen Summenformel ([13, Gl. 3.6.27]) bzw. die Koeffizienten darin nach der Euler-MacLaurin Summenformel ([13, Gl. 3.6.28]) ausgewertet und addiert.

Die Routine wird wie bei Talman [17] beschrieben mittels eines analytisch auswertbaren Ausdrucks getestet. Für eine Funktion

$$f_l(r) = r^l e^{-ar}$$

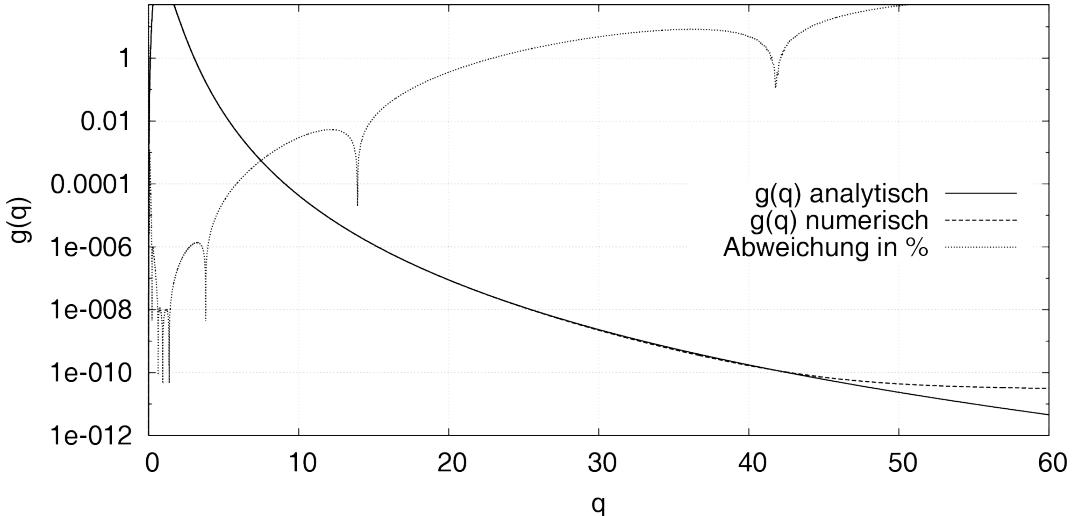
ist

$$g_l(q) = \int_0^{\infty} j_L(qr) f_l(r) r^2 dr = 2(l+1)! a (2k)^l (a^2 + k^2)^{-(l+2)} .^1$$

Abbildung 3.10 zeigt die analytische Lösung und numerische Berechnung von  $f_l(r)$  für  $a = 1$  und  $l = 5$ . Außerdem ist dort die Abweichung in Prozent ebenfalls mit aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass diese für den in dieser Arbeit relevanten Bereich bis etwa  $q=10$  weit unter einem Prozent liegt. Das in dieser Rechnung verwendete Gitter im Ortsraum  $r_i$  ist wie für die Berechnung des Wirkungsquerschnittes nach Kapitel 3.2 definiert. Der dazu benötigte Wert Z ist willkürlich gleich 14 gesetzt. Für die Darstellung in Abbildung 3.10 sind zwei Rechnungen für verschiedene große Minimalwerte im reziproken Raum  $q_{min}$  nötig. Mit  $q_{min} = 1,6701 \cdot 10^{-5}$  sind hier die Funktionswerte für kleine q-Werte bis  $q = 2,4708 \cdot 10^{-3}$  berechnet und mit  $q_{min} = 2,4787 \cdot 10^{-3}$  die Funktionswerte für größere q-Werte. So können die Funktionen hier über den gesamten relevanten q-Werte Bereich angegeben werden.

---

<sup>1</sup>In der hier aufgeführten Formel für  $g_l(q)$  ist ein Druckfehler aus [17] berücksichtigt. Es muss, wie auch aus dem Quelltext von Talman hervor geht,  $k^l$  durch  $(2k)^l$  ersetzt werden.



**Abbildung 3.10:** Analytische Lösung und numerische Berechnung einer Hankeltransformation nach Gleichung (3.5) für  $f_5(r) = r^5 e^{-r}$  im Vergleich.

Es sei noch darauf hingewiesen, dass bei der Routine für die schnelle Hankeltransformation bei q-Werten größer als 15 Probleme mit der Numerik auftreten (persönliche Mitteilung Weickenmeier). Dies wird in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt, da nur kleine Akzeptanzwinkel betrachtet werden und somit die q-Werte genügend klein sind. In dem „MATRIX“-Programm von Weickenmeier [21] wird in der Routine „MANLQA“ (MANager for Larg Q Approximation) eine Lösung für große q-Werte approximativ ermittelt.

# 4 Das Hauptprogramm dsigmaDE

## 4.1 Aufbau

Das Hauptprogramm verwendet die zuvor aufgeführten Unterprogramme für die Berechnung des energiedifferentiellen Wirkungsquerschnittes.

Die Eingabewerte für das Programm sind (Abb. 4.1):

- die Kernladungszahl  $Z$  und die Quantenzahlen  $n$  und  $l$  der Schale, für die der Wirkungsquerschnitt berechnet werden soll
- der Akzeptanzwinkel  $\alpha$  in mrad
- der Energiebereich, dazu ist der gewünschte minimale Energieverlust  $emin$  abzüglich der Bindungsenergie in eV, die Schrittweite der Energiewerte  $einc$  in eV und die maximale Anzahl an Energiewerten  $emax$  anzugeben
- der maximale Drehimpuls  $llmax$  für die Kontinuumzustände
- die Energie der einfallenden Elektronen  $E_{kin}$  in keV

Die Kantenenergie wird gleich der Bindungsenergie der entsprechenden Elektronen gesetzt und in dem Programm „wavegen.f“ (vgl. Kap. 3.2) berechnet und anschließend im Hauptprogramm eingelesen.

Die grundlegende Formel, nach der das Programm den Wirkungsquerschnitt berechnet, ist in Gleichung (2.11) angegeben. Da für die Wellenzahlen  $k_i$  und  $k_f$  bzw. die Differenz  $q$  und den Radius  $r$  atomare Einheiten verwendet werden, ist  $q$  durch  $Q = q \cdot a_0$  und  $r$  durch  $\tilde{r} = \frac{r}{a_0}$  zu substituieren. Mit der Relation (2.16) erhält man aus Gleichung (2.11)

$$\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} = \frac{\alpha^2 \cdot 4 \cdot \pi}{\beta_i^2} \frac{a_0^2 \cdot d \ln Q}{E_{Ry}} \cdot \left\{ \frac{1}{Q^2} \left( |\tilde{P}_{++}|^2 + |\tilde{P}_{+-}|^2 \right) + \left( \frac{Q \vec{t} \vec{\beta}_i}{Q^2 - (\frac{\Delta E}{\hbar c} a_0)^2} \right)^2 \left( |\tilde{P}_{++}^\alpha|^2 + |\tilde{P}_{+-}^\alpha|^2 \right) \right\} . \quad (4.1)$$

Hier sei noch einmal auf die Relation

$$|\tilde{P}_\alpha|^2 = 2(2l+1) \sum_{l'} \frac{1}{2l+1} \sum_m \sum_{m'} |P_\alpha|^2 ,$$

wie sie in Kapitel 2.4 eingeführt wurde, hingewiesen. Die Betragsquadrate werden nach Gleichung (2.17) berechnet. Aufgrund der Ableitungen nach  $r$  in den Radialintegralen und da  $\frac{d}{dr} = \frac{1}{a_0} \frac{d}{d\tilde{r}}$  ist, ist der Faktor  $a_0$  in den Gleichungen zu berücksichtigen. Es ist demnach

$$\begin{aligned} I_{x \pm iy}(q) &= \frac{1}{a_0} I_{x \pm iy}(Q) \\ I_z(q) &= \frac{1}{a_0} I_z(Q) \\ I_\Delta(q) &= \frac{1}{a_0^2} I_\Delta(Q) . \end{aligned}$$

Für die Berechnung der Normierungsfaktoren  $N_n$  der Darwin-Wellenfunktionen aus Gleichung (2.12) ist die Gleichung

$$\int d^3r \varphi_{n+\frac{1}{2}}(\vec{r})^* \varphi_{n+\frac{1}{2}}(\vec{r}) = 1$$

zu lösen. Mittels partieller Integration erhält man zwei numerisch auszuwertende Ausdrücke (Anhang D). Für gebundenen Zustände ergibt sich

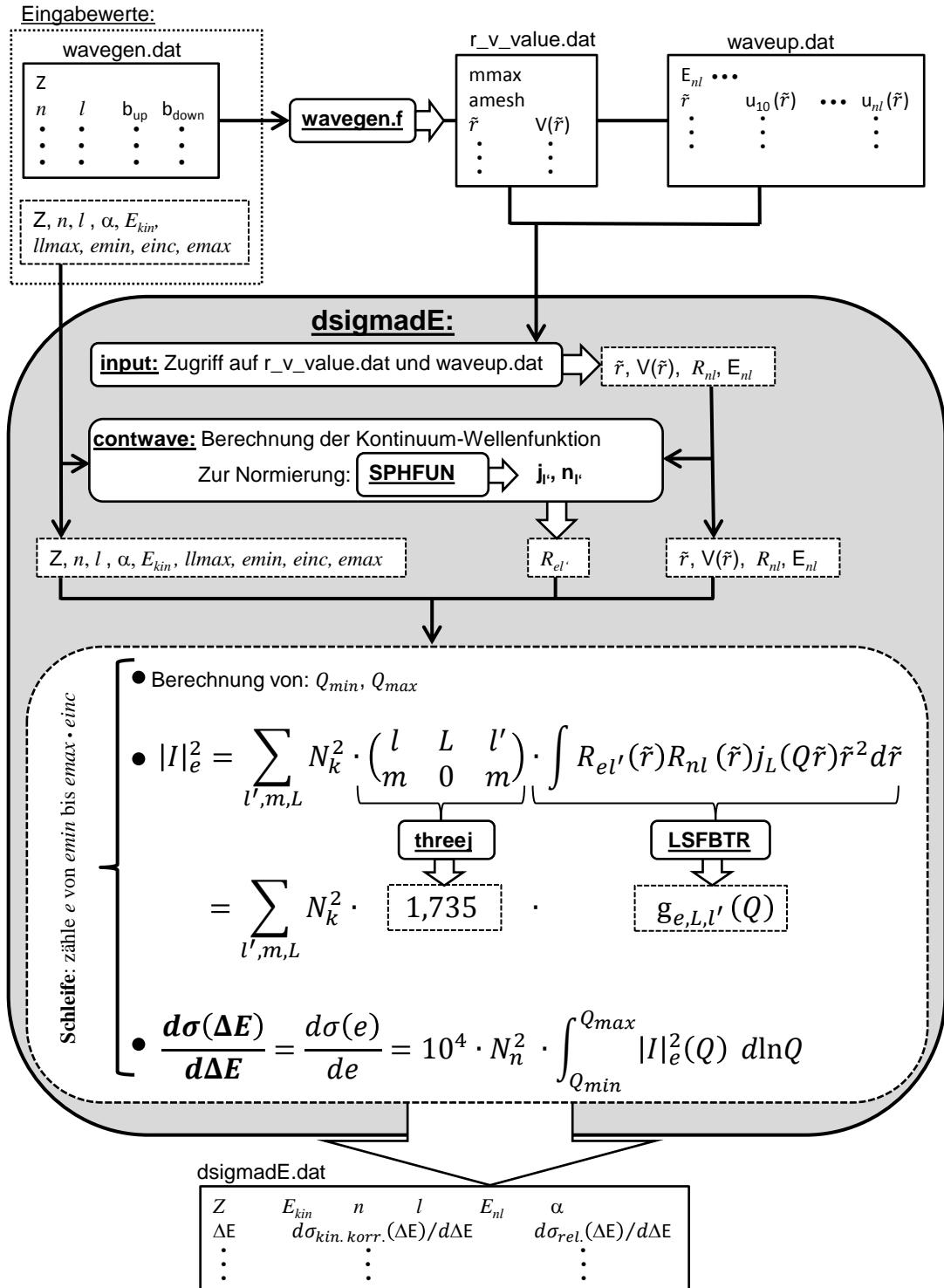
$$N_n^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\hbar}{2mc a_0}\right)^2 2 \cdot \left(E_{n,l} - 4\pi \int \tilde{r}^3 (R_{n,l}(\tilde{r}))^2 d\ln \tilde{r}\right)}$$

und für Kontinuumzustände

$$N_k^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\hbar}{2mc a_0}\right)^2 2 \cdot \left(e - 4\pi \int \tilde{r}^3 (R_{e,l'}(\tilde{r}))^2 d\ln \tilde{r}\right)} .$$

Dabei sind die Energiewerte und das Potential in Hartree einzusetzen. Der Normierungsfaktor für gebundene Zustände  $N_n$  hängt von der Hauptquantenzahl  $n$  und der Drehimpulsquantenzahl  $l$  ab. Da diese beiden Werte fest vorgegeben werden, kann am Ende der Rechnung mit  $N_n$  multipliziert werden. Der Normierungsfaktor für die Kontinuumzustände ist von der Energie und von dem Drehimpuls abhängig. Über diese beiden Werte wird in dem Hauptprogramm summiert, daher muss  $N_k$  für jeden Summanden einzeln berechnet werden.

Der Verlauf der Rechnung ist in Abbildung 4.1 anschaulich dargestellt. Die Datei „wavegen.dat“ enthält Informationen über die Kernladungszahl Z, über die Quantenzahlen  $n$  und  $l$  und über die Besetzungszahlen für Spin up  $b_{up}$  und für Spin down  $b_{down}$  des Elementes, für das der Wirkungsquerschnitt berechnet werden soll. Das Programm „wavegen.f“ liest diese Datei ein und schreibt die Werte für die entsprechenden gebundenen radialen Wellenfunktionen  $u_{nl} = r \cdot R_{nl}$ , für das Potential V und für das verwendete radiale Gitter  $\tilde{r}$  in die Dateien „r\_v\_value.dat“ und „waveup.dat“. Durch die Routine „input“ werden die Werte aus den beiden Dateien eingelesen. In der anschließend aufgerufenen Routine „contwave“ werden die radialen Kontinuum-Wellenfunktionen  $R_{el'}$  berechnet. Dann beginnt eine Schleife, die den gewünschten Energierbereich durchläuft. In dieser Schleife werden die Werte für die Q-Integration berechnet und die Matrixelemente nach den Gleichungen aus Kapitel 2.4 durch Summation über  $l'$ ,  $m$  und  $L$  ausgewertet. Für jeden Summanden werden das Quadrat des Normierungsfaktors  $N_k$ , die entsprechenden 3j-Symbole in der Routine „threej“ und die Hankeltransformationen in der Routine „LSFBTR“ berechnet und anschließend aufsummiert. Daraus ergeben sich die in Kapitel 2.4 aufgeführten Betragsquadrate  $|I|^2$  für den jeweiligen Energiewert. Mit diesen Werten können die Betragsquadrate aus Gleichung (2.17) berechnet werden. Anschließend wird die Q-Integration über die so gewonnenen Ausdrücke ausgeführt.



**Abbildung 4.1:** Anschauliche Darstellung zum Verlauf der Rechnung. Abgerundete Boxen symbolisieren Unterprogramme bzw. mit gestricheltem Rand Programmabschnitte. In den eckigen Boxen stehen Ein- und Ausgabewerte angeordnet, wie in den entsprechenden Dateien. Gestrichelte eckige Boxen umrahmen Werte, die in Variablen zwischengespeichert werden.

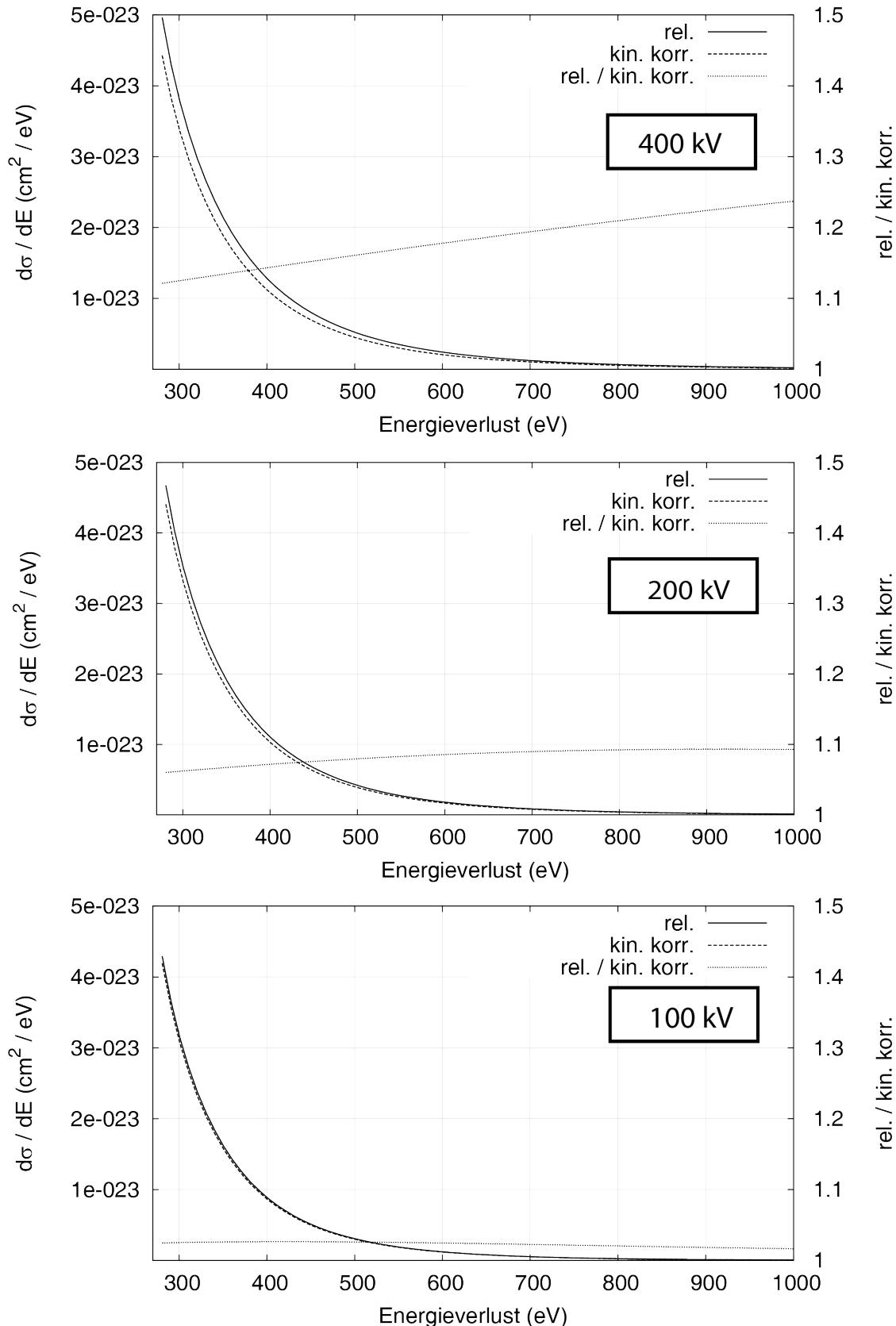
Die Berechnung für jeden einzelnen Energieverlust endet mit der Multiplikation des Quadrates des Normierungsfaktors  $N_n$ . Da der Bohrsche Radius im Programm in Meter angegeben ist muss der erhaltene Wert mit dem Faktor  $10^4$  multipliziert werden, um den Wirkungsquerschnitt in der Einheit  $cm^2$  bzw. für den energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt in  $\frac{cm^2}{eV}$  anzugeben. In der Ausgabedatei „*dsigmadE.dat*“ sind ab der zweiten Zeile die relativistischen und kinematisch korrigierten Wirkungsquerschnitte für die jeweiligen Energieverluste  $\Delta E$  angegeben. In der ersten Zeile stehen die charakterisierenden Parameter für die Rechnung.

Zur Optimierung der Laufzeit des Programms wird das diskrete Q-Gitter für alle Hankeltransformationen gleich belassen. Damit können zwar die nach (2.9) und (2.10) berechneten theoretischen Q-Grenzen  $(q a_0)_{min}$  und  $(q a_0)_{max}$  nicht exakt eingehalten werden, aber es müssen auch die zeit-aufwändigen Rechnungen in der Routine „INITIALIZE“ (Kap. 3.5) nur einmal ausgeführt werden. Die so berechneten Wirkungsquerschnitte weichen nur unwesentlich von den Rechnungen mit veränderten Q-Gittern ab und die Rechenzeit wird etwa um den Faktor 10 verkürzt. Für die untere Grenze der Q-Integration  $Q_{min}$  wird der zu  $(q a_0)_{min}$  nächst kleinere Wert des diskreten Q-Gitters ermittelt und für die obere Grenze  $Q_{max}$  der zu  $(q a_0)_{max}$  nächst kleinere Wert.

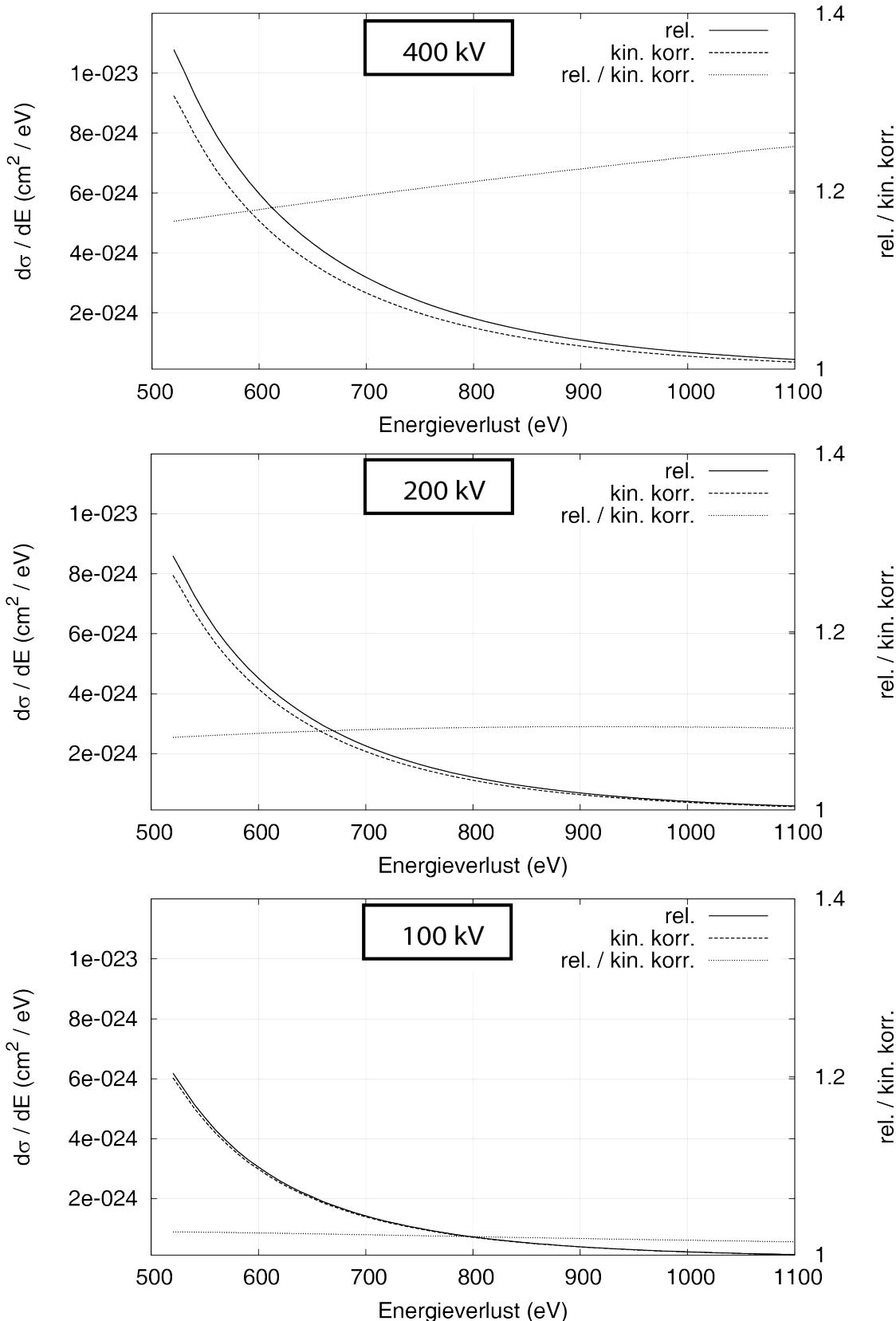
## 4.2 Ergebnisse

In den Abbildungen 4.2 - 4.4 sind die Ergebnisse für die energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitte für K-Schalen-Ionisation für Kohlenstoff, Sauerstoff und Silizium angegeben. Die Auswahl dieser Elemente soll den am häufigsten benötigten Bereich an Energieverlusten abdecken. Es sind jeweils voll-relativistische und kinematisch korrigierte Werte, sowie das Verhältnis beider Werte aufgetragen. Die Differenz zwischen beiden Werten nimmt wie zu erwarten mit zunehmender Beschleunigungsspannung zu, da sich bei größeren Geschwindigkeiten die relativistischen Effekte, die durch den zusätzlichen Term berücksichtigt werden, stärker auswirken. Bei einer Beschleunigungsspannung von 200 kV ist der relative Unterschied zwischen voll-relativistischen und kinematisch korrigierten Werten mit 6-9% gut erkennbar und bei 400 kV mit 12-30% noch deutlicher. Für 100 kV überlagern sich die Graphen dagegen nahezu und zeigen nur einen Unterschied von etwa 2%. Des Weiteren ist zu bemerken, dass der relative Unterschied auch für steigende Energieverluste größer wird. Außerdem ist in Abbildung 4.4 der Wirkungsquerschnitt zum Vergleich für zwei verschiedene Akzeptanzwinkel gezeigt. Demnach liefert der zusätzliche Term für kleinere Akzeptanzwinkel einen größeren Beitrag. Bei 400 kV ist der relative Unterschied von voll-relativistischen zu kinematisch korrigierten Werten für 20 mrad um 10-18% kleiner als der Wert für 3 mrad. Bei 100 kV und 200 kV ist der Unterschied zwischen 3 mrad und 20 mrad diesbezüglich nur marginal.

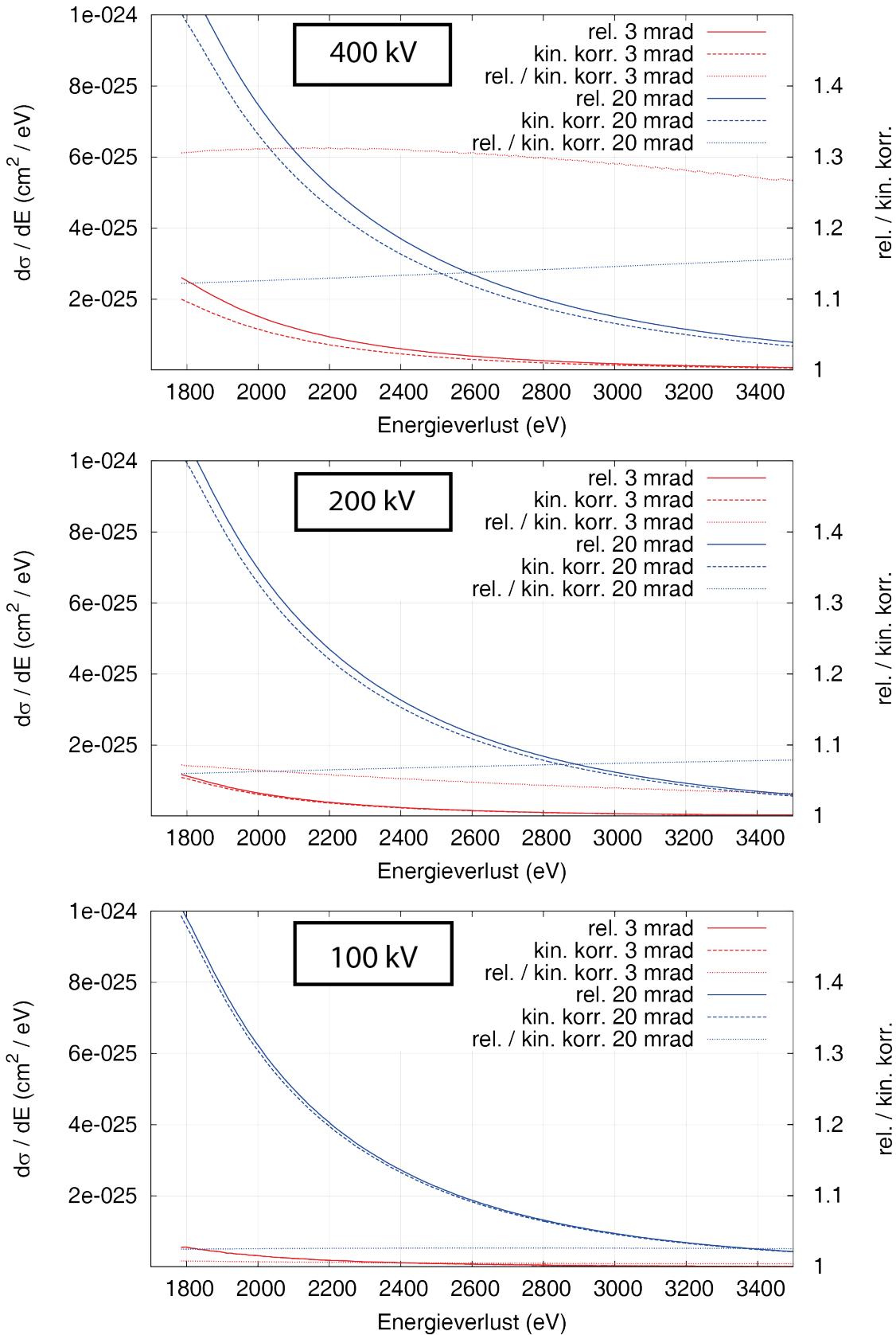
Die Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigen die Ergebnisse für die energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitte für L<sub>2,3</sub>-Schalen-Ionisation von Magnesium und Silizium. Damit ist die Anregung der Atomelektronen aus den 2p Orbitalen verbunden. Die entsprechenden Quantenzahlen sind dafür  $n = 2$  und  $l = 1$ . Auch hier wirken sich die relativistischen Effekte, die durch den zusätzlichen Term berücksichtigt werden, mit zunehmender Beschleunigungsspannung stärker aus. Im Vergleich zur K-Schalen-Ionisation sind die relativen Unterschiede zwischen voll-relativistischen und kinematisch korrigierten Wirkungsquerschnitten etwas kleiner. Bei 400 kV beträgt der Unterschied 6-15%, für 200 kV 3-7% und bei 100 kV knapp 2%.



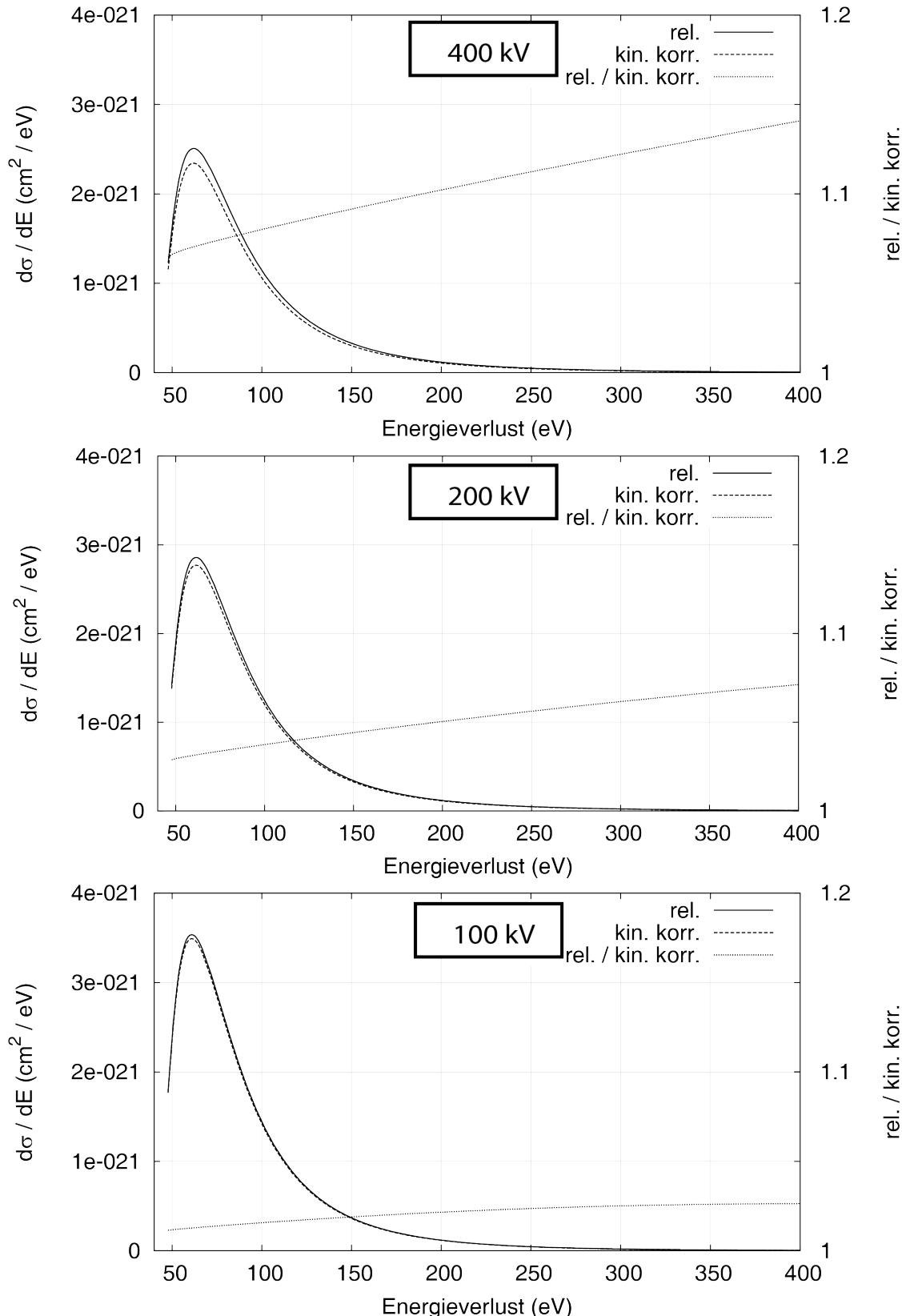
**Abbildung 4.2:** Relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte nach dem Zentralfeldmodell für K-Schalen Ionisation von Kohlenstoff bei 3 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich beider Rechnungen ist ebenfalls das Verhältnis aus beiden Werten aufgetragen.



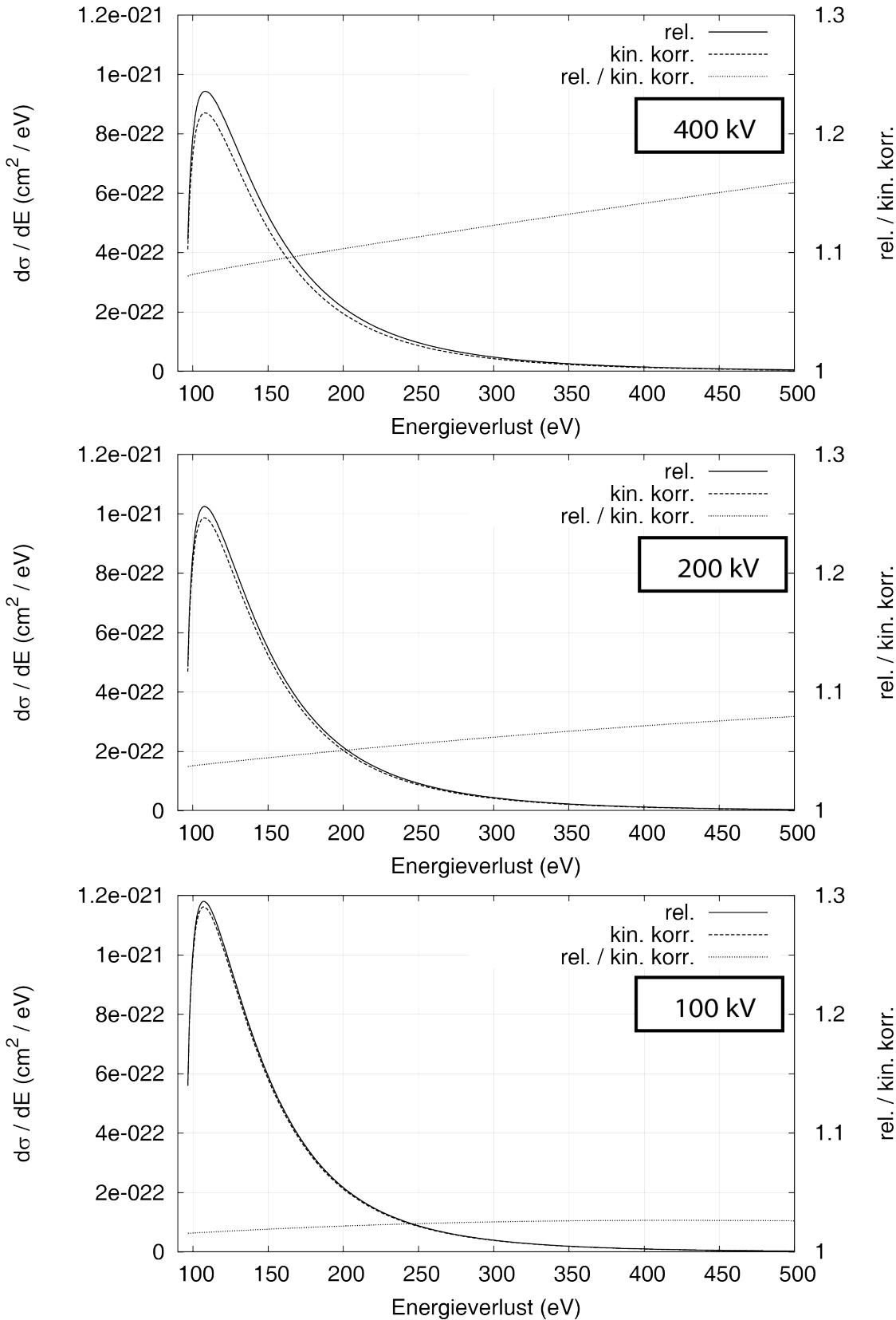
**Abbildung 4.3:** Relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte nach dem Zentralfeldmodell für K-Schalen Ionisation von Sauerstoff bei 3 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich beider Rechnungen ist ebenfalls das Verhältnis aus beiden Werten aufgetragen.



**Abbildung 4.4:** Relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte nach dem Zentralfeldmodell für K-Schalen Ionisation von Silizium bei 3 mrad und 20 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich ist ebenfalls das Verhältnis aus relativistischer und kinematisch korrigierter Rechnung für beide Akzeptanzwinkel aufgetragen.



**Abbildung 4.5:** Relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte nach dem Zentralfeldmodell für L-Schalen Ionisation von Magnesium bei 3 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich beider Rechnungen ist ebenfalls das Verhältnis aus beiden Werten aufgetragen.



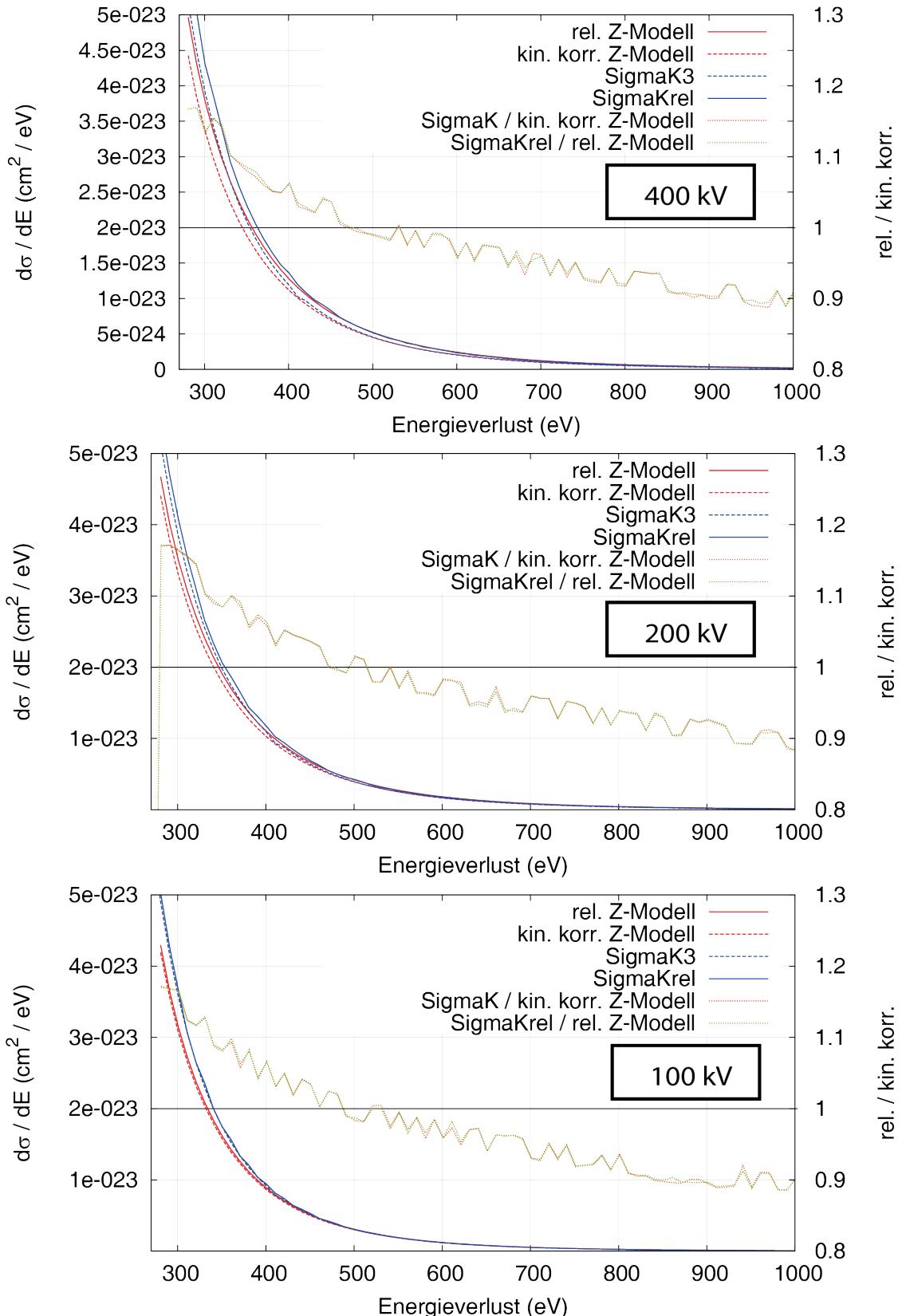
**Abbildung 4.6:** Relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte nach dem Zentralfeldmodell für L-Schalen Ionisation von Silizium bei 3 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich beider Rechnungen ist ebenfalls das Verhältnis aus beiden Werten aufgetragen.

## 5 Diskussion

Die Ergebnisse für K-Schalen Ionisation zeigen, dass die durch voll-relativistische Gleichungen berücksichtigten Effekte, magnetische Wechselwirkung und Retardierungseffekte, ab einer Beschleunigungsspannung von 200 kV einen deutlichen Einfluss haben.

Ein Vergleich der Ergebnisse mit Rechnungen auf der Grundlage des Wasserstoffmodells ist in der Abbildung 5.1 dargestellt. Die nicht relativistischen, kinematisch korrigierten Werte sind mit dem Programm „SigmaK3“ von Egerton [8, Anhang B.6] berechnet. Für die Berechnung der voll-relativistischen Wirkungsquerschnitte nach dem Wasserstoffmodell ist das Programm „SigmaKrel“ von Knippelmeyer [2] verwendet worden. In beiden Programmen wird, um das Wasserstoffmodell an Kernladungszahlen  $Z$  größer eins anzupassen, ein Korrekturfaktor für  $Z$  eingeführt. Damit wird der Abschirmung der Kernladung durch die Elektronenhülle Rechnung getragen. Dieser Faktor ist in beiden Programmen gleich 0,5 gewählt, wie es bei Egerton [8] angegeben ist. Die nach dem Wasserstoffmodell berechneten Werte sind für Verlustenergien um 300 eV etwa 15% größer und bei Verlustenergien um 900 eV etwa 15% kleiner als die Ergebnisse aus den Zentralfeldrechnungen (Abb. 5.1). Diese Abweichung in den Ergebnissen gilt für den Vergleich beider voll-relativistischer Werte miteinander sowie für den Vergleich beider kinematisch korrigierter Werte miteinander. So- wohl die Größenordnung als auch der Verlauf für beide Modelle stimmen überein.

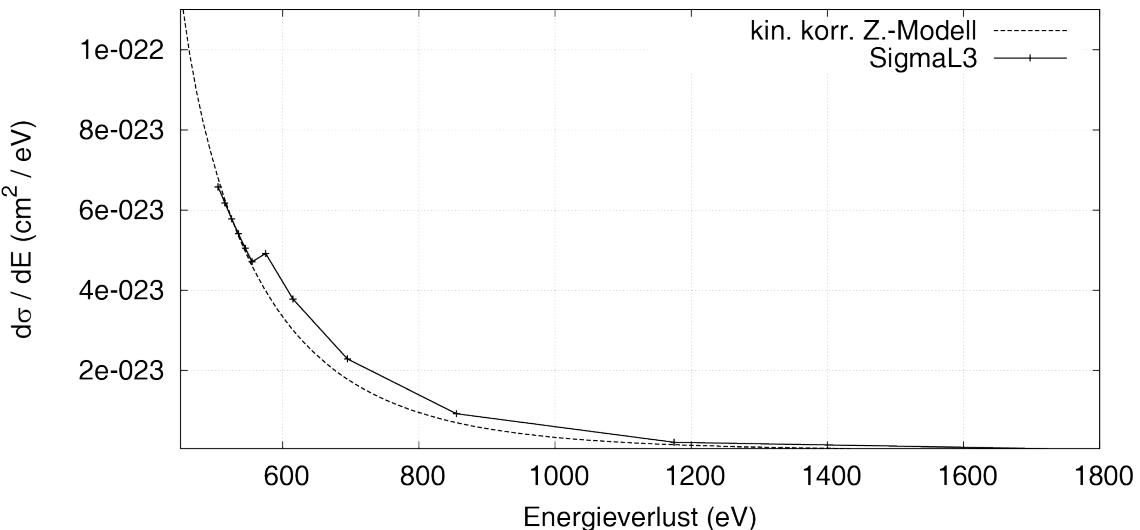
Den beiden verglichenen Rechnungen liegen verschiedene Potentiale zu Grunde. Daher ist eine Abweichung in den Ergebnissen zu erwarten. Das in dieser Arbeit verwendete Potential wird aus einer selbstkonsistenten Lösung der Schrödinger-Gleichung in lokaler Dichteapproximation berechnet und dem Wasserstoffmodell liegt ein Coulomb-Potential zu Grunde. Um den Einfluss der Potentiale näher untersuchen zu können, müsste das Potential für die Zentralfeldrechnung entsprechend um einen asymptotischen Anteil erweitert werden. Diese Überlegungen konnten aus Zeitgründen im Rahmen dieser Arbeit nicht betrachtet werden.



**Abbildung 5.1:** Vergleich von relativistischen und kinematisch korrigierten Wirkungsquerschnitten berechnet nach dem Zentralfeldmodell (rot) und dem Wasserstoffmodell (blau) für K-Schalen Ionisation von Kohlenstoff bei 3 mrad Akzeptanzwinkel für verschiedene Beschleunigungsspannungen. Zum besseren Vergleich beider Modelle ist ebenfalls das Verhältnis aus beiden Werten aufgetragen.

Im Vergleich zu den Werten nach Pokroppa [18] liegen die Ergebnisse um einen Faktor von etwa 1,7 für Magnesium und 1,2 für Silizium höher. Auch hier liegt wie beim Vergleich mit dem Wasserstoffmodell ein anderes Potential zu Grunde, ein Green-Sellin-Zachor Potential [19]. Allerdings sind die großen Abweichungen dennoch überraschend. Eine Erklärung für den deutlichen Unterschied beider Rechnungen konnte im Rahmen dieser Arbeit aus Zeitgründen nicht gefunden werden. Einsetzen eines Green-Sellin-Zachor Potentials in das in dieser Arbeit erstellte Programm könnte Aufschluss über die Auswirkungen der verschiedenen Potentiale geben. Insgesamt ist bei dem Vergleich der Wirkungsquerschnitte aber zu erkennen, dass Verlauf und Größenordnung auch für L-Schalen Ionisation im Wesentlichen übereinstimmen und somit die Ergebnisse diesbezüglich bestätigt werden.

Eine weitere Bestätigung für die berechneten Werte liefert der Vergleich des kinematisch korrigierten Wirkungsquerschnitts für L-Schalen Ionisation mit dem Programm „SigmaL3“ von Egerton [8, Anhang B.7]. Dieses Programm beruht wie „SigmaK3“ auf dem Wasserstoffmodell und berechnet den Wirkungsquerschnitt für L-Schalen Ionisation nach kinematisch korrigierten Ansätzen. Abbildung 5.2 zeigt in Tendenz und Größenordnung eine gute Übereinstimmung beider Rechnungen.



**Abbildung 5.2:** Vergleich von kinematisch korrigierten Wirkungsquerschnitten berechnet nach dem Zentralfeldmodell, wie es in dieser Arbeit beschrieben ist und dem Wasserstoffmodell für L-Schalen Ionisation von Titan ( $Z=22$ ) bei 10 mrad Akzeptanzwinkel für 80 kV Beschleunigungsspannung.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Programm erstellt, dass den energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt für inelastische Streuung von Elektronen auf der Grundlage des Zentralfeldmodells berechnet. Der verwendete Formalismus beruht auf voll-relativistischen Gleichungen, sodass voll-relativistische und kinematisch korrigierte Wirkungsquerschnitte berechnet werden können.

Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass die durch voll-relativistische Gleichungen berücksichtigten Effekte, magnetische Wechselwirkung und Retardierungseffekte, ab einer Beschleunigungsspannung von 200 kV einen deutlichen Einfluss haben. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass das in dieser Arbeit erstellte Programm im Vergleich zu bisherigen Rechnungen realistische Werte liefert.

Mit dem erstellten Programm kann der voll-relativistische Wirkungsquerschnitt für K-Schalen Ionisation, für L-Schalen Ionisation und prinzipiell auch für höhere Schalen berechnet werden. Damit sollte es möglich sein, die chemische Zusammensetzung einer Probe mit einem Elektronenmikroskop bei hohen Beschleunigungsspannungen zuverlässiger zu ermitteln. Aufgrund der Wahl des Zentralfeldmodells ist dies auch für Elemente die typischerweise nicht nach K-Schalen Ionisation bestimmt werden möglich.

Ein nächster Schritt könnte die experimentelle Bestätigung dieser Werte für die Wirkungsquerschnitte sein. Dazu könnte zum Beispiel ein winkelauflöstes Spektrum für Silizium bei einem Energieverlust von 1840 eV (Silizium K-Schalen-Ionisationsenergie) bei verschiedenen Beschleunigungsspannungen aufgenommen und mit entsprechenden Wirkungsquerschnitten verglichen werden. Dabei sollte sich der Verlauf für steigende Beschleunigungsspannungen qualitativ ändern [20].

# Anhang A: Berechnung zur Aufspaltung der Matrixelemente

Im Folgenden ist die Aufspaltung der Matrixelemente mit dem Ansatz der Darwin-Wellenfunktionen näher ausgeführt. Die Summe über die Spinzustände in Gleichung (2.11) kann mit (2.14) ausgeschrieben werden.

$$\frac{1}{2} \sum_{s_n, s_m} | \langle m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle |^2 = \frac{1}{2} (|P_{++}|^2 + |P_{--}|^2 + |P_{+-}|^2 + |P_{-+}|^2) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{s_n, s_m} | \langle m | \vec{a} \vec{t} e^{i\vec{q}\vec{r}} | n \rangle |^2 = \frac{1}{2} (|P_{++}^\alpha|^2 + |P_{--}^\alpha|^2 + |P_{+-}^\alpha|^2 + |P_{-+}^\alpha|^2) \quad (\text{A.2})$$

Die einzelnen Summanden lassen sich durch mehrfache partielle Integration berechnen, wie es am Beispiel  $P_{++}$  und  $P_{-+}^\alpha$  hier gezeigt wird. Zuvor sollte noch gesagt sein, dass die Wellenfunktionen für gebundene Zustände im Unendlichen gleich null sind, da dort die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Elektron gleich Null ist. Deshalb verschwinden sämtliche Stammfunktionen, die bei den partiellen Integrationen entstehen und werden daher nur im ersten Rechenschritt mit angeführt.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_n N_k} P_{++} \\ &= \int \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{1}{2mc} \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2mc} \frac{-\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{pmatrix} \Psi_k^*(\vec{r}) \right\} e^{iqz} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{pmatrix} \Psi_n(\vec{r}) \right\} d^3 r \\ &= I_0 + 0 + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \left[ \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) \right]_{-\infty}^{\infty} \\ &\quad - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \Psi_k^*(\vec{r}) \left[ iqe^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) + e^{iqz} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_n(\vec{r}) \right] dr^3 \\ &\quad + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \frac{\partial}{\partial x} \Psi_k^*(\vec{r}) \left[ e^{iqz} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(\vec{r}) - e^{iqz} i \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n(\vec{r}) \right] dr^3 \\ &\quad + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int -i \frac{\partial}{\partial y} \Psi_k^*(\vec{r}) \left[ e^{iqz} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n(\vec{r}) + e^{iqz} i \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n(\vec{r}) \right] dr^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= I_0 - iq \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_z + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_n(\vec{r}) dr^3 \\
&\quad - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n(\vec{r}) dr^3 - \cancel{\left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} i \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \Psi_n(\vec{r}) dr^3} \\
&\quad + \cancel{\left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int i \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \Psi_n(\vec{r}) dr^3} - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi_n(\vec{r}) dr^3 \\
&= I_0 - iq \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_z - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta
\end{aligned}$$

Die Bildung des Betragsquadrates führt zu

$$|P_{++}|^2 = N_k^2 N_n^2 \left[ \left| I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right|^2 + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^4 q^2 |I_z|^2 \right] \quad (\text{A.3})$$

$$- 2 \operatorname{Re} \left\{ \left( I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right) \cdot iq \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_z^* \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Für  $P_{\pm\pm}^\alpha$  muss zunächst der Ausdruck  $\vec{\alpha}\vec{t}$  genauer beschrieben werden. Der Vektor  $\vec{t}$  ist ein Einheitsvektor in x-y-Richtung (vgl. 2.2) und die drei Komponenten von  $\alpha$  enthalten die Dirac'schen Matrizen ( $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ). Es gilt

$$\vec{t} = \sin \varphi \vec{e}_x + \cos \varphi \vec{e}_y = \begin{pmatrix} t_x \\ t_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

mit

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned}
\vec{\alpha}\vec{t} &= t_x \alpha_1 + t_y \alpha_2 = t_x \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + t_y \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & t_x - it_y \\ 0 & 0 & t_x + it_y & 0 \\ 0 & -t_x - it_y & 0 & 0 \\ -t_x + it_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Es folgt daraus

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N_n N_k} P_{-+}^{\alpha} &= \int \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2mc} \frac{-\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \Psi_k^*(\vec{r}) \right\} \\
&\cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & t_x - it_y \\ 0 & 0 & t_x + it_y & 0 \\ 0 & -t_x - it_y & 0 & 0 \\ -t_x + it_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{iqz} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{pmatrix} \Psi_n(\vec{r}) \right\} d^3 r \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_k^*(\vec{r}) \\ \frac{1}{2mc} \frac{-\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_k^*(\vec{r}) \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_k^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (t_x - it_y) e^{iqz} \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_n(\vec{r}) \\ (t_x + it_y) e^{iqz} \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) \\ 0 \\ (-t_x + it_y) e^{iqz} \Psi_n(\vec{r}) \end{pmatrix} \\
&= \int \left[ \Psi_k^*(\vec{r}) (t_x + it_y) e^{iqz} \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) + \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_k^*(\vec{r}) (t_x + it_y) e^{iqz} \Psi_n(\vec{r}) \right] d^3 r \\
&= \frac{1}{i} \frac{\hbar}{2m} (t_x + it_y) \left\{ \underbrace{\int d^3 r \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r})}_{-\int d^3 r \Psi_k^*(\vec{r}) iqe^{iqz} \Psi_n(\vec{r})} + \left[ \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) \right]_0^\infty \right. \\
&\quad \left. - \underbrace{\int d^3 r \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r})}_{\int d^3 r \Psi_k^*(\vec{r}) e^{iqz} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r})} \right\} \\
&= -q \frac{\hbar}{2m} (t_x + it_y) I_0.
\end{aligned}$$

Bildet man über diesen Ausdruck schließlich noch das Betragsquadrat, wie es für die Berechnung des Wirkungsquerschnitts erforderlich ist, bekommt man

$$|P_{-+}^{\alpha}|^2 = N_k^2 N_n^2 \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 q^2 |I_0|^2. \quad (\text{A.5})$$

Dazu sei noch einmal darauf hingewiesen, dass  $\vec{t}$  ein Einheitsvektor ist und daher  $|\vec{t}| = 1$  ist, woraus sich der Zusammenhang

$$|(t_x + it_y)|^2 = (t_x - it_y) \cdot (t_x + it_y) = t_x^2 + t_y^2 = |\vec{t}|^2 = 1$$

ergibt.

## Anhang B: Ergänzung zu Kapitel 2.4

Im Folgenden ist die analytische Berechnung der Betragsquadrate der Matrixelemente ergänzend zum Kapitel 2.4 aufgeführt.

**Berechnung des Ausdrucks**  $\left| I_0 - \left( \frac{\hbar}{2m_e c} \right)^2 I_\Delta \right|^2$

Der Winkelanteil des Ausdrucks  $\left| I_0 - \left( \frac{\hbar}{4mc} \right)^2 I_\Delta \right|^2$  kann über die Relation

$$H\Psi_{nlm} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi_{nlm} = E_n \Psi_{nlm}$$

$$\nabla^2 \Psi_{nlm} = \frac{-2m_e}{\hbar^2} (E_n - V(r)) \Psi_{nlm}$$

auf  $|I_0|^2$  zurückgeführt werden. Es ergibt sich

$$I_\Delta = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \frac{-2m_e}{\hbar^2} R_{E-V} i^L Y_{L0}^* \langle Y_{l'm'} | Y_{L0} | Y_{lm} \rangle . \quad (\text{B.1})$$

Damit bekommt man

$$\begin{aligned} \left| \tilde{I}_0 - \left( \frac{\hbar}{2m_e c} \right)^2 \tilde{I}_\Delta \right|^2 &= 2(2l+1) \sum_{L,l'}^{\infty} \left\{ R_L + \frac{1}{2m_e c^2} R_{E-V} \right\}^2 \\ &\cdot i^L (i^L)^* (2L+1) (2l'+1) \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 . \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Hierbei ist  $R_{E-V} = \int_0^\infty (E_n - V(r)) R_{el'}(r) j_L(qr) R_{nl}(r) r^2 dr$  und es gelten die Summationsgrenzen wie für (2.33).

**Berechnung des Ausdrucks**  $|I_{x+iy}|^2$

Setzt man die Näherung der e-Funktion (2.19) in die zweite Zeile von (2.15) ein, so erhält man

$$I_{x+iy} = 4\pi (-\sqrt{2}) \sum_{L=0}^{\infty} j_L(qr) i^L Y_{L0}^* R_{el'} \langle Y_{l'm'} | Y_{L0} | \nabla_{+1} Y_{lm} \rangle R_{nl} .$$

Wie in der Berechnung für  $I_z$  multipliziert man eine geeignete Eins und erhält zwei Summanden mit je zwei Faktoren, wie in (2.35). Für  $\mu = +1$  erhält man mit Gleichung (2.36)

$$\begin{aligned} & < l' m' | Y_{L0} | l+1 m+1 \\ &= (-1)^{m+1} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+3)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & < l' m' | Y_{L0} | l-1 m+1 > \\ &= (-1)^{m+1} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l-1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} . \end{aligned}$$

Aus der Gleichung (2.27) und den 3j-Symbolen aus Anhang C ergibt sich

$$< l+1 m+1 | \nabla_{+1} | l m > = +(-1)^{l+m} \left[ \frac{(l+m+1)(l+m+2)}{2(2l+1)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right)$$

und

$$< l-1 m+1 | \nabla_{+1} | l m > = -(-1)^{l+m} \left[ \frac{(l-m-1)(l-m)}{2(2l-1)(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) .$$

Dies eingesetzt in die Gleichung für  $I_{x+iy}$  ergibt

$$\begin{aligned} I_{x+iy} &= (\cancel{-1}) (\cancel{\sqrt{2}}) (-1)^l \left[ \frac{4\pi(2l'+1)}{2(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_L i^L Y_{L0}^* (2L+1)^{\frac{1}{2}} \\ &\cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \{(l+m+1)(l+m+2)\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \right. \\ &\left. - \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \{(l-m-1)(l-m)\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] \right\} . \end{aligned}$$

---

Analog zu den vorherigen Rechnungen wird das Betragsquadrat gebildet, über die Anfangszustände gemittelt und über die Endzustände summiert.

$$\begin{aligned}
|\tilde{I}_{x+iy}|^2 &= \frac{B_{nl}}{2l+1} \sum_{l'} \sum_{m=-l'}^{l'} \left( \sqrt{2} \right)^2 (-1)^{\frac{2\pi i}{2} (2l'+1)} \\
&\cdot \sum_{L,L'} i^L \left( i^{L'} \right)^* \frac{\sqrt{(2L+1)(2L'+1)}}{4\pi} (2L+1)^{\frac{1}{2}} (2L'+1)^{\frac{1}{2}} \\
&\cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
&\cdot \{(l+m+1)(l+m+2)\} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right]' \\
&+ \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\cdot \{(l-m-1)(l-m)\} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right]' \\
&- 2 \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ -m-1 & 0 & m+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\left. \cdot \{(l+m+1)(l+m+2)(l-m-1)(l-m)\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right]' \right\}. \quad (\text{B.3})
\end{aligned}$$

Ebenso wie für  $|I_z|^2$  können für die drei Summanden mit Gleichung (2.21) und (2.22) unterschiedliche Kombinationen der Drehimpulswerte ausgeschlossen werden, da für diese eines der 3j-Symbole gleich Null ist. Der zweite Summand ist zum Beispiel nur dann nicht Null, wenn  $|l-1-l'| \leq L' \leq l-1+l'$  und  $l'+L'+l-1$  gerade ist.

### Berechnung des Ausdrucks $\operatorname{Re} \left\{ i \left( I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta \right) I_z^* \right\}$

Aus Gleichung (2.30) und (B.1) folgt

$$\begin{aligned}
I_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 I_\Delta &= 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \left\{ R_L + \frac{1}{2m_e c^2} R_{E-V} \right\} i^L Y_{L0}^* (-1)^m \\
&\cdot \left[ \frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Aus Gleichung (2.38) wiederum ergibt sich

$$\begin{aligned}
I_z^* &= -(-1)^l \left[ \frac{4\pi (2l'+1)}{(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_L' \left( i^{L'} \right)^* Y_{L'0} (2L'+1)^{\frac{1}{2}} \\
&\cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \{(l+1)^2 - m^2\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right] \right. \\
&+ \left. \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \{l^2 - m^2\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Damit erhält man nach Mitteln über die Anfangszustände und Summieren über die Endzustände den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 & Re \left\{ i \left( \tilde{I}_0 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \tilde{I}_\Delta \right) \tilde{I}_z^* \right\} \\
 &= \frac{B_{nl}}{2l+1} \sum_{l'} \sum_{m=-l'}^{l'} \sum_{L,L'} i i^L \left( i^{L'} \right)^* (-1)^{l+m+1} (2l'+1) (2L+1) (2L'+1) \\
 &\quad \cdot \left\{ R_L + \frac{1}{2m_e c^2} R_{E-V} \right\} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &\quad \cdot \left\{ \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ (l+1)^2 - m^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right]' \right. \\
 &\quad \left. + \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L' & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ l^2 - m^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right]' \right\}. \quad (\text{B.4})
 \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist nach (2.21) und (2.22) nur für  $|l - l'| \leq L \leq l + l'$  und  $l' + L + l$  gerade ungleich Null. Für die beiden Summanden bekommt man entsprechend der darin auftretenden 3j-Symbolen weitere Kombinationen von Drehimpulsen, für die der jeweilige Summand Null ergibt.

## Anhang C: Spezielle 3j-Symbole

Hier sind die in Kapitel 2 verwendeten speziellen 3j-Symbole angegeben. Sie lassen sich mit der Formel (3.7.10), der Tabelle 2 auf Seite 149 und den Symmetrieeigenschaften (Formel 3.7.4 bis 3.7.6) aus [6] berechnen.

$$\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{l-1} \left[ \frac{2(l+1)^2}{(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} = (-1)^{l+m-1} \left[ \frac{2(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ -m \mp 1 & \pm 1 & m \end{pmatrix} = (-1)^{l\pm m} \left[ \frac{(l \pm m + 1)(l \pm m + 2)}{(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^l \left[ \frac{2l^2}{(2l-1)2l(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} = (-1)^{l+m} \left[ \frac{2(l-m)(l+m)}{(2l-1)2l(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} l-1 & 1 & l \\ -m \mp 1 & \pm 1 & m \end{pmatrix} = (-1)^{l\pm m} \left[ \frac{(l \mp m - 1)(l \mp m)}{(2l-1)2l(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Um den Rechenweg genauer zu beschreiben wird im Folgenden die Berechnung eines Ausdrucks näher ausgeführt. Zunächst führt einmal zyklisch und einmal antizyklisch Vertauschen und das Vorzeichen aller m-Werte ändern zu

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} l+1 & 1 & l \\ -m+1 & -1 & m \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & l & l+1 \\ -1 & m & -m-(-1) \end{pmatrix} \\ &= \cancel{(-1)^{l+1+1+\cancel{l}}} \begin{pmatrix} 1 & l+1 & l \\ -1 & -m-(-1) & m \end{pmatrix} = \cancel{(-1)^{l+1+1+\cancel{l}}} \begin{pmatrix} 1 & l+1 & l \\ 1 & -1-(-m) & -m \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Damit erhält man die Form, wie sie Formel (3.7.10) in [6] hat und danach ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} 1 & l+1 & l \\ & -1-(-m) & -m \end{pmatrix} = (-1)^{-1+l+1-m} \\
 & \cdot \left[ \frac{2!(-1+l+1+l)!(1+l+1-m)!(l+m)!}{(1+l+1+l+1)!(1-(l+1)+l)!(1+l+1-l)!(-1+l+1+m)!(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 & = (-1)^{l-m} \left[ \frac{2!(2l)!(l-m+2)!(\cancel{l+m})!}{(2l+3)!9!\cancel{2!}(\cancel{l+m})!(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 & = (-1)^{l-m} \left[ \frac{(2l)!(l-m)!(l-m+1)(l-m+2)}{(2l)!(2l+1)(2l+2)(2l+3)\cancel{(l-m)!}} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 & = (-1)^{l-m} \left[ \frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}$$

## Anhang D: Berechnung der Normierungsfaktoren

Im Folgenden ist die Berechnung der Normierungsfaktoren der Darwin- Wellenfunktionen beispielhaft für  $N_n$  näher ausgeführt. Ausgehen von der Normierungsbedingung

$$\int d^3r \varphi_{n+\frac{1}{2}}(\vec{r})^* \varphi_{n+\frac{1}{2}}(\vec{r}) = 1$$

erhält man

$$\int d^3r N_n^2 \begin{pmatrix} \Psi_n^*(\vec{r}) \\ 0 \\ -\frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n^*(\vec{r}) \\ -\frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_n^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_n(\vec{r}) \\ 0 \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n(\vec{r}) \\ \frac{1}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_n(\vec{r}) \end{pmatrix} = 1 .$$

Ausführen des Skalarproduktes und anschließende partielle Integration führt zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_n^2} &= \int d^3r \Psi_n \Psi_n^* + 0 + \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \cancel{\int} \\ &\cdot \int d^3r \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n + \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n + \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n + i \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n - i \frac{\partial}{\partial y} \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n \right\} \\ &= 1 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \\ &\cdot \int d^3r \left\{ \Psi_n^* \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_n + \Psi_n^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n + \Psi_n^* \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi_n + i \Psi_n^* \cancel{\frac{\partial}{\partial x}} \cancel{\frac{\partial}{\partial y}} \Psi_n - i \Psi_n^* \cancel{\frac{\partial}{\partial y}} \cancel{\frac{\partial}{\partial x}} \Psi_n \right\} \\ &= 1 - \left( \frac{\hbar}{2mc} \right)^2 \int d^3r \{ \Psi_n^* \nabla^2 \Psi_n \} . \end{aligned}$$

Der Übergang zu atomaren Einheiten für den Radius gibt wegen der zweifachen Ableitung den Faktor  $\frac{1}{a_0^2}$ . Aus der Schrödinger-Gleichung erhält man die Relation,

$$-\nabla^2 \Psi_n = 2 (E_n - V(r)) \Psi_n$$

für Energie und Potential in Hartree und Radius in au. Damit erhält man

$$\begin{aligned}\frac{1}{N_n^2} &= 1 + \left( \frac{\hbar}{2m c a_0} \right)^2 \int d^3r \Psi_n^* 2 (E_n - V(r)) \Psi_n \\ &= \left( \frac{\hbar}{2m c a_0} \right)^2 2 \left( E_n - \int d^3r \Psi_n^* \Psi_n V(r) \right) \\ &= \left( \frac{\hbar}{2m c a_0} \right)^2 2 \left( E_n - 4\pi \int d \ln r r^3 (R_{n,l}(r))^2 V(r) \right).\end{aligned}$$

In der numerischen Umsetzung wird nach Trapezregel Integriert und das Integral wird zur Summe. Dabei ist nur bis zum Wert  $r_a$  zu summieren, da das Potential für größere Argumente gleich Null ist.

$$N_n^2 = \frac{1}{1 + \left( \frac{\hbar}{2m c a_0} \right)^2 2 \cdot \left( E_{n,l} - 4\pi \sum_{r=0}^{r_a} r^3 (R_{n,l}(r))^2 \ln a_{mesh} \right)}$$

Die Rechnung für  $N_k$  ist analog auszuführen. Beide Faktoren haben nur einen relativ geringen Einfluss auf das Endergebnis, da sie mit etwa 0,99 nur um etwa ein Prozent von Eins abweichen.

# Literaturverzeichnis

- [1] Epping, M.: „Erstellung von Elementverteilungsbildern zur Lokalisation vom Phosphor im Corynebacterium glutamicum  $\Delta$ mcbR“, Diplomarbeit Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2010
- [2] Knippelmeyer, R.: „Relativistische Betrachtung der unelastischen Streuung von Elektronen für die Anwendung in der Transmissionselektronenmikroskopie“, Diplomarbeit Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 1996
- [3] Knippelmeyer, R., P. Wahlbring, H. Kohl: „Relativistic ionisation cross section for use in microanalysis“, Ultramicroscopy **68** (1997) 25
- [4] Fano, U.: „Differential Inelastic Scattering of Relativistic Charged Particles“, Physical Review **102** (1956) 385
- [5] Darwin, C. G.: „The Wave Equations of the Electron“, Proc. Royal Soc. **118** (1928) 654
- [6] Edmonds, A. R.: „Drehimpulse in der Quantenmechanik“, Bibliographisches Institut (Mannheim, 1964)
- [7] Messiah, A.: „Quantum Mechanics Vol. II“, North-Holland (Amsterdam, 1961)
- [8] Egerton, R.F.: „Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope“, Second Edition, Plenum Press (New York, 1996)
- [9] Wei, L.: „Unified approach for exact calculation of angular momentum coupling and recoupling coefficients“, Comp. Phys. Comm. **120** (1999) 222
- [10] Ardill, R.W.B. and Moriarty, K.J.M.: „Spherical Bessel functions  $j_L$  and  $n_L$  of integer order and real argument“, Comp. Phys. Comm. **14** (1978) 261
- [11] Hamann, D.R.: „Generalized norm-conserving pseudopotentials“, Phys. Rev. B **40** (1989) 2980
- [12] Perdew, J.P. and A. Zunger: „Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems“, Phys. Rev. B **23** (1981) 5048
- [13] Abramowitz, M. and I.A. Stegun: „Handbook of mathematical functions with Formulas, Graphs and mathematical tables“, Dover (New York, 1965)
- [14] Latter, R.: „Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential“, Phys. Rev. **99** (1955) 510
- [15] Cowan, R.D.: „The theory of atomic structure and spectra“, University of California Press (Berkeley, 1981)

- [16] Nolting, W.: „Grundkurs Theoretische Physik 5/2“, 6. überarbeitete Auflage, Springer (Berlin, 2006)
- [17] Talmam, J.D.: „LSFBTR: A subroutine for calculation spherical Bessel transforms“, Comp. Phys. Comm. **30** (1983) 93
- [18] Pokropka, F.: „Berechnung von relativistischen Wirkungsquerschnitten im Rahmen des Zentralfeldmodells für die Anwendung von EELS“, Diplomarbeit Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 1999
- [19] Green, A.E.S., D.L. Sellin und A.S. Zachor: „Analytic independent-Particle Model for Atoms“, Phys. Rev. **184** (1969) 1
- [20] Kurata, H., P. Wahlbring, S. Isoda und T. Kobayashi: „Importance of Relativistic Effect on Inelastic Scattering Cross-section for Quantitative Microanalysis“, Micron **28** (1997) 381
- [21] Weickenmeier, A.: „Berechnung von energiegefilterten elektronenmikroskopischen Beugungsdiagrammen“, Dissertation Hochschule Darmstadt, 1991

## Danksagung

Für das Vertrauen in meine Fähigkeit, der Aufgabenstellung dieser Arbeit gewachsen zu sein, und für die fachliche und sehr nette Betreuung möchte ich Herrn Prof. Dr. Helmut Kohl danken. Ebenso gilt mein Dank Prof. Dr. Peter Krüger, der sich für meine Fragen ebenfalls wann immer es nötig war die Zeit genommen hat.

Meiner Arbeitsgruppe danke ich für das lockere und sehr angenehme Arbeitsklima und für manchen Rat bei fachlichen Fragen.

Meinen Eltern und meiner Oma danke ich vor allem für die finanzielle aber auch sonstige Unterstützung während des gesamten Studiums.

Ebenfalls ein großer Dank gilt meinem Bruder, der mir mit schwierigen aber auch heiteren physikalischen Diskussionen oftmals weiter geholfen hat und mir auch sonst wann immer ich ihn brauchte zur Seite stand.

Meiner Freundin möchte ich für ihre fachliche, sehr kritische Beurteilung meiner Arbeit danken und noch viel mehr für die Motivation und den Ausgleich den sie mir gegeben konnte.

Außerdem danke ich meinen Mitbewohnern für die vielen Jahre des Zusammenhaltens. Die angenehme Atmosphäre in unserer Wohnung hat mir die nötige Entspannung während des Studienleben gegeben.

Allen Freunden möchte ich dafür danken, dass sie in dieser Zeit sowohl fachlich wie auch menschlich für mich da waren.

Vielen, vielen Dank!

## Erklärung

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Diplomarbeit selbstständig angefertigt und alle benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben habe.

Münster, den 27. Juni 2011

Martin Frigge