8 Blatt - Festkörperphysik 2 - XPS Spektroskopie an Aluminium

8.1 (Photonenenergie der Al K_α Strahlung)

Es sind aus den angegebenen Werten für die Bindungsenergien die Photonenenergie der Al K_α Strahlung zu bestimmen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} E_{KL_{II}} &= (1559.6 - 72.95)\ \text{eV} = 1486.65\,\text{eV} \\ E_{KL_{III}} &= (1559.6 - 72.55)\ \text{eV} = 1487.05\,\text{eV} \end{aligned}$$

wobei die Literaturwerte mit

$$\begin{aligned} E_{KL_{II}} = K_{\alpha 1} &= 1486.3\,\text{eV} \\ E_{KL_{III}} = K_{\alpha 2} &= 1486.7\,\text{eV} \end{aligned}$$

gegeben sind. Wir erhalten also einen Unterschied von $\Delta E = 0.35$ für beide Werte. Der Unterschied ergibt sich vermutlich daraus, dass wir hierbei nicht beachten, dass wir einen ionisierten Zwischenzustand besitzen, was ein effektives Abschirmpotential bietet, welches die Bindungsenergien schwächt. Koopman's Theorem gilt also nicht vollständig und kann nur als Näherung betrachtet werden. (Auch der Endzustand ist ionisiert.)

8.2 (Al Augerübergänge)

Es wurden die folgenden Augerlinien gefunden:

$$\begin{aligned} L_{II,III}VV &: 68\,\text{eV} \\ KL_IL_{II,III} &: 1345\,\text{eV} \\ KL_{II,III}L_{II,III} &: 1396\,\text{eV} \end{aligned}$$

Mit der $Z+1$-Korrektur:

$$E_{Kin} = E_{B1} - E_{B2} - E_{B3} - \frac{1}{2}\left[E_{B2}^{Z+1} - E_{B2} + E_{B3}^{Z+1} - E_{B3}\right]$$

erhalten wir (Verwendung von S.160 Skript table 2.2 - electron binding energies, sowohl für Si als auch für Al):

$$\begin{aligned} E_{B1}E_{B2}E_{B3} &: \text{Augerlinie} \\ L_{II}VV &: 72.9\,\text{eV} \\ L_{III}VV &: 72.5\,\text{eV} \\ KL_IL_{II} &: 1338.9\,\text{eV} \\ KL_IL_{III} &: 1339.4\,\text{eV} \\ KL_{II}L_{III} &: 1386.8\,\text{eV} \\ KL_{II}L_{II} &: 1386.3\,\text{eV} \\ KL_{III}L_{III} &: 1387.3\,\text{eV} \end{aligned}$$

Die Abweichungen der Werte werden zum Teil an den verwendeten tabellierten Werten hängen. Dazu ist dies auch nur eine Näherung (Z+1-Näherung). Ein weiterer möglicher Grund sind die Screeningeffekte (wir haben ein ionisierten Zustand), die in der Z+1-Näherung versucht werden zu berücksichtigen. Auf Grund der geringen Energieauflösung bzw. hohen Unsicherheit, ist eine vollständige Bennenung nicht möglich und das Ergebnis muss bei dem oben angegebenen verbleiben, da zwischen L_{II} und L_{III} hier nicht unterschieden werden kann.

8.3 (Aufspaltung der 2p Linie des Al)

Die Aufspaltung der 2p Linie folgt daraus, dass wir für $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ nicht identische Zustände erhalten. Die Bindungsenergien sind leicht unterschiedlich. Die Intensitätsverhältnisse ergeben sich über die Multiplizität $2j+1$, wobei wir somit ein Verhältnis von $2:4$ bei $p_{1/2}:p_{3/2}$ erwarten. Die Begründung liegt hier in der Anzahl der möglichen Zustände, wobei $3/2$ in 4 und $1/2$ in 2 Niveaus aufspaltet. Die in der linken Abbildung gefitteten Peaks liefern ein Verhältnis von $5:9$ für die Höhen (kann man hier grob benutzen). Dies entspricht ca. einem Verhältnis von $1:1.8$, was gut mit der Erwartung von $1:2$ übereinstimmt.

8.4 (Plasmonenanregungen)

Die Plasmonenfrequenz ist gegeben über

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m_e \varepsilon_0}$$

wobei umstellen die Bestimmung der Ladungsträgerdichte n ermöglicht:

$$n = \frac{m_e \varepsilon_0}{e^2} \omega_p^2 = \frac{m_e \varepsilon_0}{e^2 \hbar^2} \left(\hbar \omega_p\right)^2$$

Hier können wir nun die Naturkonstante und $\hbar\omega_p = 15.5\,\mathrm{eV} = 2.48 \cdot 10^{-18}\,\mathrm{J}$ einsetzen und erhalten:

$$n = 1.74 \cdot 10^{29}\,\frac{1}{\mathrm{m}^3}$$

Betrachten wir nun zum Vergleich 3-wertiges Al im kubisch flächenzentrierten Gitter mit der Gitterkonstanten $a = 4.05\,\text{Å} = 4.05 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$. Die Anzahl der Atome in der Elementarzelle ergibt sich mit $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$, wobei wir dreiwertiges Al betrachten, d.h. wir besitzen also $N = 12$ Elektronen je Elementarzelle. Das Volumen der Elementarzelle beträgt

$$V = a^3 = 6.64 \cdot 10^{-29}\,\mathrm{m}^3$$

Damit folgt also eine Ladungsträgerdichte von

$$n = \frac{N}{V} = 1.81 \cdot 10^{29}\,\frac{1}{\mathrm{m}^3}$$

Der Vergleich zeigt eine relativ geringe Abweichung, von nur ca. 4%.