

10 Blatt - Festkörperphysik 2 - Angle-resolved ultraviolet photoemission spectroscopy (ARUPS)

10.1 (Shockley-Oberflächenzustand auf Cu(111))

(a)

Es sind die Energiepositionen als Funktion des Winkels zu bestimmen.

Wir können die Peaks direkt aus dem Spektrum ablesen und erhalten damit folgende Tabelle (wobei hierbei $h\nu = 11.8 \text{ eV}$ angenommen wurde, d.h. die Photonenenergie der 1. Ar Linie)

Winkel θ	Peak Ar I/eV	Peak Ar II/eV
8.5	0.075 ± 0.010	0.289 ± 0.013
6.5	0.176 ± 0.020	0.383 ± 0.015
4.5	0.301 ± 0.012	0.505 ± 0.008
2.5	0.370 ± 0.004	0.559 ± 0.007
0.5	0.400 ± 0.002	0.596 ± 0.007
-1.5	0.383 ± 0.004	0.577 ± 0.007
-3.5	0.339 ± 0.009	0.540 ± 0.010
-5.5	0.264 ± 0.008	0.471 ± 0.019
-7.5	0.151 ± 0.013	0.358 ± 0.020

Die Peaks der 2. Ar Linie sind um $h\nu_1 - h\nu_2 = 0.21$ verschoben. Setzen wir diese als konstante Verschiebung an (vgl. **Aufgabe 2**, dort ist eine θ -Abhängigkeit zu erkennen), erhalten wir als neue Wertetabelle:

Winkel θ	Peak Ar I/eV	normiert Peak Ar II/eV
8.5	0.075 ± 0.010	0.079 ± 0.013
6.5	0.176 ± 0.020	0.173 ± 0.015
4.5	0.301 ± 0.012	0.295 ± 0.008
2.5	0.370 ± 0.004	0.349 ± 0.007
0.5	0.400 ± 0.002	0.386 ± 0.007
-1.5	0.383 ± 0.004	0.367 ± 0.007
-3.5	0.339 ± 0.009	0.330 ± 0.010
-5.5	0.264 ± 0.008	0.261 ± 0.019
-7.5	0.151 ± 0.013	0.148 ± 0.020

wobei sofort auffällt, das die zentralen Peaks eher abweichen als die äußeren (dies kann bei dieser geringen Anzahl an Messwerten aber auch ein zufälliger Ablesefehler sein).

(b)

Der Winkel θ_0 , der $k_{\parallel} = 0$ entspricht, ist zu bestimmen. Hierfür bestimmen wir zuerst über

$$k_{\parallel} = 0.511 \sqrt{E_{kin} [\text{eV}]} \sin \theta \left[\text{\AA}^{-1} \right] = 0.511 \sqrt{(E_B + h\nu - \Phi) [\text{eV}]} \sin \theta \left[\text{\AA}^{-1} \right]$$

die Wertetabelle für die k_{\parallel}

Winkel θ	$k_{\parallel} \text{Ar I} / \text{\AA}^{-1}$	$k_{\parallel} \text{normiert Ar II} / \text{\AA}^{-1}$
8.5	0.199	0.197
6.5	0.154	0.152
4.5	0.108	0.106
2.5	0.060	0.059
0.5	0.012	0.012
-1.5	-0.036	-0.036
-3.5	-0.084	-0.083
-5.5	-0.131	-0.129
-7.5	-0.177	-0.174

Ein parabolischer Fit

$$f(x) = ax^2 + bx + c = a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 - \frac{b^2}{4a} + c$$

an die Daten, liefert die fitting Parameter

$$\begin{aligned} a &= (8.23 \pm 0.26) \text{ eV \AA}^2 \\ b &= (0.019 \pm 0.034) \text{ eV \AA} \\ c &= (-0.397 \pm 0.0024) \text{ eV} \end{aligned}$$

Es ergibt sich der in Abbildung (1) befindliche Graph.

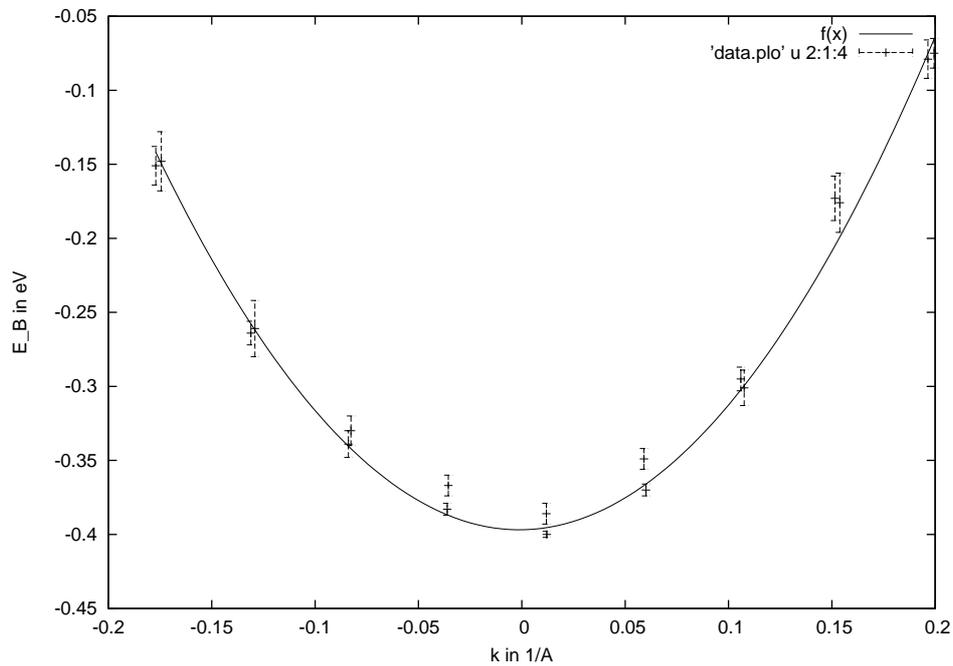


Figure 1: E_B geplottet über k_{\parallel} mit parabolischem Fit.

Wir können jetzt die Dispersionsrelation für den Oberflächenzustand betrachten, d.h. $k_{\perp} = 0$. Und es ergibt sich

$$E_B(k_{\parallel}) = E_{B,0} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}$$

Unser Fit im Vergleich zeigt:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m^*} &= a \\ c - \frac{b^2}{4a} &= E_{B,0} \\ k_{\parallel}^2 &= \left(x + \frac{b}{2a}\right)^2 \end{aligned}$$

Wir können nun Theorie und Experiment vergleichen und erwarten das Minimum der Parabel bei $k_{\parallel} = 0$, jedoch ist dies nicht genau der Fall, wodurch wir ein $k_0 = \frac{b}{2a} = (1.15 \pm 2.06) \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ einführen müssen. Aus diesem können wir jetzt durch umstellen und nutzen der Beziehung

$$k_{\parallel} = 0.511 \sqrt{(E_B + h\nu - \Phi) [\text{eV}]} \sin \theta \left[\text{\AA}^{-1} \right]$$

das θ_0 bestimmen:

$$\theta_0 = \arcsin \left(\frac{k_0 \left[\text{\AA}^{-1} \right]}{0.511 \sqrt{(E_{B,0} + h\nu - \Phi) [\text{eV}]}} \right) = (0.051 \pm 0.091)^\circ$$

(c)

Für $k_{\parallel} = 0$ ist die Bindungsenergie des Oberflächenzustandes zu bestimmen. Diese ist gegeben mit

$$E_{B,0} = c - \frac{b^2}{4a} \approx c = (-0.397 \pm 0.0024) \text{ eV}$$

(d)

Es ist die effektive Masse des Oberflächenbandes zu bestimmen. Wir können m^* bestimmen aus

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = a$$

umstellen und auf die Elektronenmasse normieren liefert

$$\frac{m^*}{m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e a} = (0.463 \pm 0.015)$$

10.2 (Abstand der Struktur aus den Argon Linien)

Wir können, um die Änderung des Abstandes in θ -Abhängigkeit, der durch die beiden Argon-Linien verursachten Struktur, zu bestimmen, unsere Werte aus der ersten Wertetabelle betrachten und den Abstand der Linien bestimmen:

Winkel θ	Abstand der Linien in eV
8.5	0.214
6.5	0.207
4.5	0.204
2.5	0.189
0.5	0.196
-1.5	0.194
-3.5	0.201
-5.5	0.207
-7.5	0.207

Wir sehen hier ein relativ schwaches winkelabhängiges Verhalten, wobei ein Wert von $h\nu_1 - h\nu_2 = 0.21$ eV erwartet wurde. Für das theoretische Verhalten betrachten wir:

$$E_{Kin} = E_B + h\nu - \phi$$

wobei wir den Oberflächenzustand betrachten, d.h. wir haben $E_B(k_{\parallel}) = E_{B,0} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}$ und

$$k_{\parallel} = 0.511 \sqrt{E_{kin} [\text{eV}]} \sin \theta \left[\text{\AA}^{-1} \right] = \sqrt{\frac{2mE_{Kin}}{\hbar^2}} \sin \theta$$

dies liefert also:

$$\begin{aligned} E_{Kin} &= E_{B,0} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{2mE_{Kin}}{\hbar^2} \sin^2 \theta + h\nu - \phi \\ E_{Kin} &= E_{B,0} + \frac{m}{m^*} E_{Kin} \sin^2 \theta + h\nu - \phi \\ E_{Kin}(\theta) &= \frac{E_{B,0} + h\nu - \phi}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)} \end{aligned} \quad (1)$$

Wir können den Abstand der Linien jetzt bekommen durch

$$E_{Kin,1} - E_{Kin,2} = \frac{E_{B,0} + h\nu_1 - \phi}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)} - \frac{E_{B,0} + h\nu_2 - \phi}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)} = \frac{h\nu_1 - h\nu_2}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)}$$

Hieraus sieht man sofort, dass der Winkelinfluss für unseren betrachteten Bereich gering ist. Dies folgt, da $\frac{m}{m^*} = 2.22$ und $\sin^2 \theta \ll 1$ für kleine θ . Damit wird der Nenner sich nur wenig von 1 unterscheiden und wir finden die wie in **Aufgabe 1.2** angenommene lineare Verschiebung von $h\nu_1 - h\nu_2$.

10.3 (Linienbreite in Abhängigkeit des Emissionswinkels)

Wir gehen aus von einer konstanten Winkelauflösung $\Delta\theta$. Es ist die Abhängigkeit der Linienbreite ΔE als Funktion des Emissionswinkels zu bestimmen. Wir gehen aus von (1). Es gilt für die Linienbreite (Fehler einer Funktion kann über die Ableitung der Funktion bestimmt werden, zudem wird nur der Winkelfehler betrachtet):

$$\Delta E_{Kin}(\theta) = \frac{\partial E_{Kin}(\theta)}{\partial \theta} \cdot \Delta \theta$$

Dies liefert also

$$\begin{aligned}
\Delta E_{Kin}(\theta) &= -\frac{E_{B,0} + h\nu - \phi}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)^2} \left(-\frac{2m}{m^*} \cos \theta \sin \theta\right) \cdot \Delta\theta \\
&= \frac{E_{B,0} + h\nu - \phi}{\frac{1}{2} \frac{m^*}{m} \left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)^2} \cos \theta \sin \theta \cdot \Delta\theta
\end{aligned}$$

wobei $\Delta\theta = const.$, d.h. wir haben eine Abhängigkeit von

$$\Delta E_{Kin}(\theta) \propto \frac{\cos \theta \sin \theta}{\left(1 - \frac{m}{m^*} \sin^2 \theta\right)^2}$$