

UV-Photoelektronenspektroskopie (UPS)

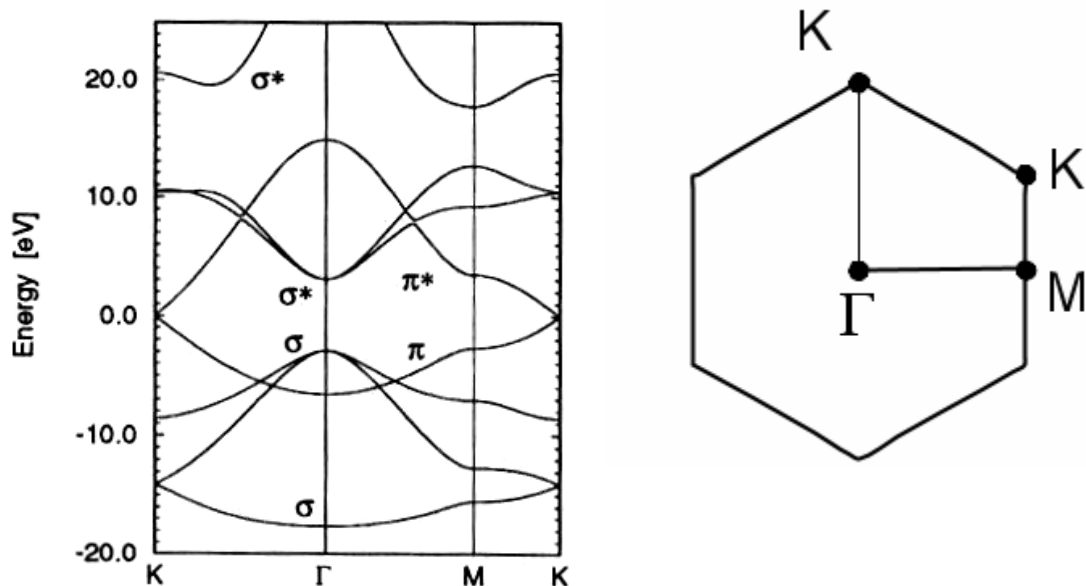
Ort: MZG, Raum 0.175

1. Einleitung

In diesem Versuch soll eine Standardmethode zur Aufklärung der elektronischen Struktur von Festkörpern, die winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie, demonstriert werden. Die zu untersuchende Probe ist einkristalliner Graphit. Es soll die Dispersionsrelation, d.h. die $E(\mathbf{k})$ -Relation des π -Bandes entlang zweier Hochsymmetrierichtungen in der Brillouinzone bestimmt werden.

Graphit ist ein Schichtkristall, der aus einzelnen Lagen von sp^2 -hybridisiertem Kohlenstoff aufgebaut ist. In der Nähe des Fermi-Niveaus befindet sich das besetzte π -Band, das (ebenso wie das unbesetzte π^* -Band) von den nicht hybridisierten p_z -Orbitalen gebildet wird. Die Dispersionsrelation dieses π -Bandes soll entlang der Γ -K und der Γ -M-Richtung gemessen werden (Abbildung 1).

Abbildung 1:



Bandstruktur der π - und σ -Zustände und Brillouinzone einer Graphitlage

2. Literatur

- M. Henzler, W. Göpel: *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Abschnitte 4.4 bis 4.6 (eher breite aber in Deutsch verfasste Einführung in die Spektroskopie an Oberflächen)
- H. Ibach (Editor): *Electron Spectroscopy for Surface Analysis*, Kapitel 5 (gute Einführung in das Thema)
- S. Hüfner: *Photoelectron Spectroscopy*, Kapitel 1.1, 1.2, 1.5 (gute Einführung in das Thema incl. Experimentelle Aspekte)
- M. Cardona, L. Ley: *Photoemission in Solids*, Kapitel 6.2 und 6.2 (Einführung in winkelaufgelöste UPS)

Die Literatur ist in limitierter Anzahl beim Betreuer ausleihbar.

3. Vorbereitung

Photoeffekt, Zusammenhang zwischen realem und reziprokem Raum, Brillouinzone, \mathbf{k} -Vektor, elektronische Bandstruktur, Beispiel einer realen Bandstruktur eines Festkörpers.

Skizzieren Sie die Struktur und die Einheitszelle (Wigner-Seitz-Zelle) einer Graphitschicht. Wie sieht die Brillouinzone dazu aus und wie ist sie orientiert?

Erklären Sie Aufbau und Funktionsweise eines hemisphärischen Elektronenanalysators.

Wie bestimmt man aus der kinetischen Energie E_{kin} und dem Emissionswinkel ϑ eines Photoelektrons die Parallelkomponente k_{\parallel} des Wellenzahlvektors? Welcher Zusammenhang besteht mit k_{\parallel} des Elektrons im Festkörper vor der Anregung?

4. Versuchsdurchführung und Auswertung

Versuchsbeginn nur mit dem Betreuer! Präparation der Probe und Starten der He-Lampe nur durch den Betreuer!

4.1 Präparation der Probe durch thermisches Anlassen (Betreuer).
Schleusen der Probe in die Messkammer.

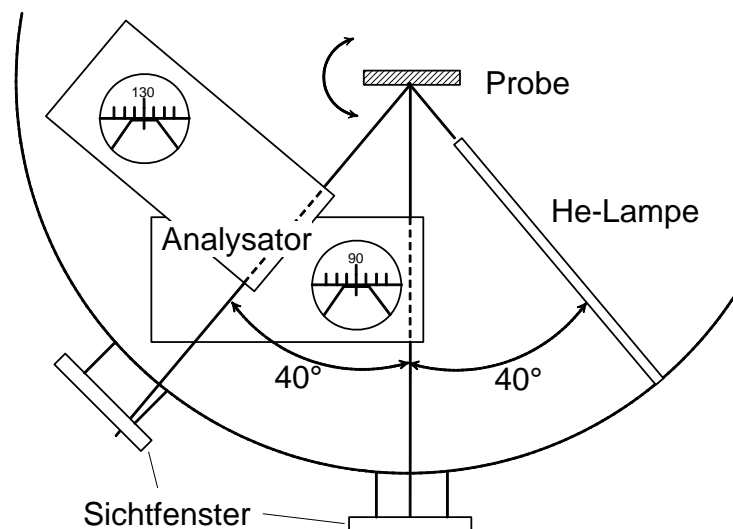
4.2 Starten der He-Lampe (Betreuer).

4.3 Einstellen des Azimutwinkels in Γ -K-Richtung anhand des Beugungsbildes langsamer Elektronen (LEED).

4.3 Justieren der Probe

Der Analysator wird auf einen Winkel von 130° gedreht (Anzeige im unteren, mittleren Fenster). Damit beträgt der Winkel des Analysators zum Licht 80° . Der Analysator besitzt eine Bohrung, so daß durch den Analysator auf die Probenoberfläche geblickt werden kann. Die Probe wird nun so gedreht, daß am rechten Rand des linken Sichtfensters das reflektierte Licht der He-Lampe sichtbar ist (Abb. 2). Unter Umständen muss dazu die Probe so verfahren werden, daß sich die Probenoberfläche am Schnittpunkt des Lichts – Sichtlinie Analysator befindet.

Abbildung 2:



In dieser Position (Einfallswinkel = Ausfallswinkel) beträgt der Polarwinkel (Emissionswinkel der Elektronen zur Oberflächennormalen) $\vartheta = 40^\circ$. Wird die Anzeige auf 90° gedreht, so ist $\vartheta = 0^\circ$ (normale Emission).

4.4 Photoemissionsmessungen

Starten des Messprogrammes.

4.4.1 Messen Sie zunächst das π -Band in Γ -K-Richtung:

Polarwinkel: $\vartheta = 30^\circ, 35^\circ, 40^\circ, 45^\circ, 50^\circ, 55^\circ, 58^\circ, 60^\circ, 63^\circ, 65^\circ, 70^\circ$

Bindungsenergiebereich: E Start 8 eV, E End -1 eV.

E Pass: 2 eV, Dwelltime: 1s, # of Data Points: 180, # of Scans 1.

4.4.2 Messen Sie nun das π -Band in Γ -M-Richtung. Dazu wird der neue Azimutwinkel erneut durch LEED eingestellt und die Probe dann wieder in die Messposition gefahren.

Die Messparameter sind die gleichen wie in 4.4.1

4.5 Bestimmung der Bindungsenergie

Um die Retardierungsspannung, die vom Rechner gemessen und abgespeichert wird, in die Bindungsenergie umzurechnen müssen Sie die Position des Fermi-Niveaus bestimmen. Dazu wird ein Spektrum einer Au-Probe aufgenommen.

E Start: 1 eV, E End: -1 eV, # of Data Points: 100, # of Scans: 4.

5. Auswertung und Diskussion

Bestimmen Sie aus den Spektren aus der kinetischen Energie E_{kin} und aus dem Polarwinkel ϑ die Dispersionsrelationen des π -Zustandes, d.h. $E_{\text{Bin}}(\mathbf{k}_{\parallel})$.

Berechnen Sie, bei welchem $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ der K- und der M-Punkt in der Brillouinzone von Graphit liegt (die Gitterkonstante, d.h. die Länge der Einheitsvektoren einer Graphitlage beträgt 2.46 \AA). Zeichnen Sie diese Punkte in ihre experimentell bestimmten Dispersionsrelationen ein. Sollten die gemessenen Dispersionsrelationen um diese Punkte herum symmetrisch sein?

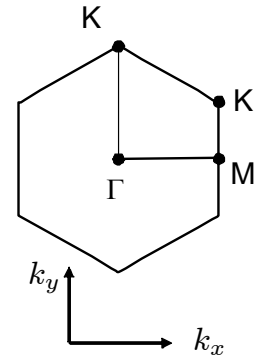
In der einfachsten Tight-Binding Näherung ist die Dispersionsrelation der p-Zustände einer Graphitlage gegeben durch:

$$E_{\text{Bin}}(\vec{k}) = \frac{-tw(\vec{k})}{1 + sw(\vec{k})},$$

$$w(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}$$

mit $t = -3.033$ eV, $s = 0.129$, $a = 2.46$ Å

Zeichnen Sie diesen Verlauf in ihre gemessenen Dispersionsrelationen mit ein.



Am K-Punkt sollten die π -Zustände das Fermi-Niveau berühren. Warum erreichen Sie das in Ihrer Messung nicht?