



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

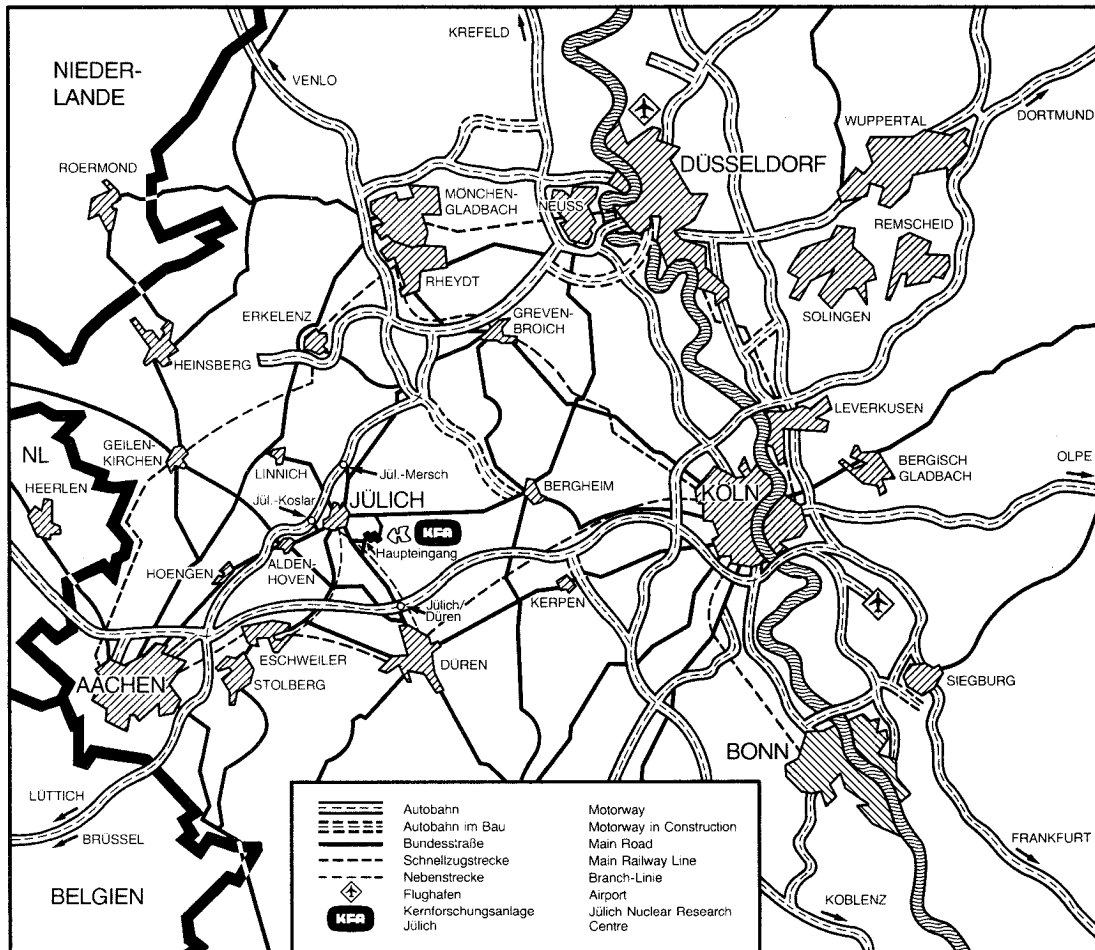
**Institut für Grenzflächenforschung
und Vakuumphysik**

**Spinpolarisierte Photoemission
an Pt(111)**

von

H.P. Oepen

**Jül - 1970
Januar 1985
ISSN 0336-0885**



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 1970

Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik Jül - 1970

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

Spinpolarisierte Photoemission an Pt(111)

von

H.P. Oepen

D 82 (Diss. T. H. Aachen)

Abstract

We report on a new kind of photoelectron spectroscopy: the spin- and momentum-resolved photoemission from nonmagnetic solids using circularly polarized synchrotron radiation. Some aspects of the possibility of this new technique are demonstrated in photoemission from Pt(111).

In normal emission the sign of the spinpolarization vector, which is oriented along the surface normal, allows to determine double group symmetries of the relativistic band structure along the Δ -direction of platinum. Moreover it is shown, that the spinpolarized photoelectron spectroscopy is suitable for the investigation of critical points, like band-crossing and -anticrossing, of bandstructures along high symmetry directions.

For emission in a mirror plane of the crystal the orientation of the polarization vector is determined. It is demonstrated that direct interband transitions cause polarization vectors lying in the mirror plane. In contrast to normal emission, however, there does not exist any quantization axis for the spinpolarization vector to be aligned with. The determination of the polarization vector includes a strong progress of this technique over common photoelectron spectroscopy investigations. The orientation is related to relative phases and magnitudes of distinct matrix elements in the optical excitation process. In case of mirror emission it will allow to derive precise information on the hybridization of electronic states due to spin-orbit interactions. For quantitative results the relativistic scattering formalism has to be applied to the photoemission process.

The influence of the transmission process in photoemission is shown explicit. Intensity asymmetries, that means different energy distributions for the excitation with light of opposite helicity, are measured for the first time. These asymmetries are caused by spin-dependent scattering in the surface layers during transmission into vacuum.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Experimentelles	4
2.1 Experimenteller Aufbau am Synchrotron	5
2.2 Goniometerkammer	7
2.3 Spektrometersystem	9
2.3.1 Energieanalysator	15
2.3.2 Datenerfassung	17
2.4 Erläuterungen zum Meßvorgang	19
3. Theoretische Betrachtungen zur spinpolarisierten Photoemission	21
3.1 Der Anregungsprozeß	22
3.2 Der Transmissionsprozeß	31
4. Ergebnisse und Diskussion	39
4.1 Intensitätsverteilungen der Photoelektronen in Normalemission	39
4.2 Spinpolarisation der Photoelektronen in Normal- emission	47
4.3 Spinpolarisierte Photoemission in einer Kristall- spiegelebene von Pt(111)	51
4.3.1 Intensitäts- und Polarisationsverteilungen	54
4.3.2 Diskussion der Polarisationsvektoren	64
4.3.3 Interpretation der Messungen im Rahmen des Anregungsprozesses des Dreistufenmodells	70
4.4 Intensitätsasymmetrie bei der Photoemission außer- halb von Kristallspiegelebenen	73
5. Zusammenfassung	78
6. Quellenverzeichnis	80

1. Einleitung

Die Photoelektronenspektroskopie basiert auf der Entdeckung des lichtelektrischen Effekts vor rund 100 Jahren /1-3/ und dessen quantenhypothetischer Erklärung durch A. Einstein /4/. Während mehrerer Jahrzehnte wurde die Meßmethode vorwiegend in der Atom- und Kernphysik angewendet. Erst in den späten 60er Jahren erfuhr die Anwendung der Photoelektronenspektroskopie auf Festkörper eine Renaissance, die durch die wichtige experimentelle Arbeit von Gobel et al. /5/ eingeleitet wurde. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigten, daß ein Teil des Photoemissionsspektrums durch direkte Übergänge in der Bandstruktur zu erklären ist. Kane /16/ erkannte die Bedeutung dieses Ergebnisses und wies auf die Möglichkeit der experimentellen Überprüfung von Bandstrukturen hin. Diese Beobachtungen ließen neue theoretische Beschreibungen des Photoemissionsprozesses folgen /7-14/. Damit war letztlich der Grundstein für eine stürmische Entwicklung der Photoelektronenspektroskopie gelegt. Durch Verbesserung der Spektrometer hinsichtlich Energie- und insbesondere der Winkelauflösung, erlaubten die experimentellen Ergebnisse immer genauere Aussagen über Dispersionsverhalten der Elektronenzustände im Festkörper zu machen. Mitte der 70er Jahre wurde die Entwicklung dieser Methode durch die Verwendung der Synchrotronstrahlung als Lichtquelle nochmals beschleunigt. Mittels der Synchrotronstrahlung hatte man nicht nur eine Lichtquelle variabler Wellenlänge zur Hand, sondern durch Ausnutzung der Polarisation der Strahlung konnte man Symmetrieuntersuchungen, wie sie Dietz et al. /19/ mit konventionellen Lichtquellen erstmalig zeigten, sehr einfach durchführen. Dies ermöglichte neben der experimentellen Untersuchung von Banddispersionen auch deren Symmetriestimmung. Die Methode ist jedoch streng nur bei Materialien mit verschwindend geringer Spin-Bahn-Wechselwirkung anwendbar.

Die ersten Experimente zur spinpolarisierten Photoemission an unmagnetischen Materialien wurden von der Gruppe um F. Meier durchgeführt /20-22/. Es handelt sich bei diesen Messungen um eine Ausbeutespektroskopie, bei der auf eine Winkel- und Energieauflösung verzichtet wird. Entsprechend dieser Einschränkung sind die Ergebnisse aus den Messungen an Übergangsmetallen /21,22/ recht unbefriedigend. Die fehlende Winkelauflösung hatte zur Folge, daß keine einzelnen direkten Übergänge in der Bandstruktur untersucht wer-

den konnten und in den Messungen jeweils eine Vielzahl möglicher Übergänge erfaßt wurden. Die Messungen ergaben nur kleine Polarisationswerte der photoemittierten Elektronen. Es konnte zwar die Existenz von spinpolarisierten Photoelektronen demonstriert werden, aber die Gültigkeit von Symmetrierauswahlregeln, wie sie von Wöhlecke und Borstel /23/ vorhergesagt wurden, konnte nicht eindeutig bewiesen werden.

Ziel dieser Arbeit war, mit Hilfe eines neu zu entwickelnden Spektrometers, das die Polarisationsanalyse mit der impuls aufgelösten, konventionellen Photoelektronenspektroskopie kombiniert, die Photoemission aus unmagnetischen Materialien zu untersuchen. Als erstes waren die Bandstruktur-Symmetrien für die Anregung in hochsymmetrischen Kristallrichtungen zu bestimmen, wobei der Vorteil gegenüber der Untersuchung am Gold /22/ in der impuls aufgelösten Spektroskopie und in der Verwendung der Synchrotronstrahlung lag. Weiter ermöglichte die Impulsauflösung erstmalig, die spinpolarisierte Photoemission außerhalb der Oberflächennormalen zu untersuchen. Da in diesem Fall die direkten Übergänge nicht mehr entlang hochsymmetrischer Richtungen stattfinden, gelten Symmetrierauswahlregeln nicht mehr. Es war nicht geklärt, ob in diesem Falle überhaupt spinpolarisierte Photoelektronen existieren. Die nächste Frage war die nach dem Einfluß der Oberfläche bei der Emission der Elektronen ins Vakuum. Es sollte untersucht werden, ob solche Effekte, die durch den Transmissionsprozeß verursacht werden, in der spinpolarisierten Photoemission beobachtet werden können.

Diese Experimente sollen die Möglichkeiten und Vorteile der spinpolarisierten Photoemission demonstrieren. Sie sollen vor allem zeigen, daß diese Untersuchungsmethode zusätzliche Informationen zur konventionellen Spektroskopie liefert.

Ähnliche Experimente zur spinpolarisierten Photoemission wurden in letzter Zeit auch von anderen Gruppen /24,25/ in Angriff genommen. Dies verdeutlicht das allmählich wachsende Interesse an der, um die Polarisationsanalyse erweiterten, impuls aufgelösten Photoelektronenspektroskopie.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Im 2. Kapitel wird auf wesentliche Komponenten des Experimentes etwas näher eingegangen. Im Kapitel 3 wer-

den die theoretischen Konzepte behandelt, die zum Verständnis der Messungen und deren Diskussion benötigt werden. Im Kapitel 4.1 werden Intensitätsverteilungen der Photoelektronen in Normalemission von Pt(111) für verschiedene Photonenenergien behandelt und mit Bandstrukturechnungen verglichen. Kapitel 4.2 handelt von den Polarisationsmessungen in Normalemission. Im Kapitel 4.3 werden die Messungen innerhalb einer Kristallspiegelebene diskutiert und schließlich zeigt Kapitel 4.4 ein erstes Beispiel für die Einflußnahme der Polarisation der angeregten Elektronen im Festkörper auf die Intensitätsverteilung.

2. Experimentelles

Für die Untersuchung von elektronischen Eigenschaften eines unmagnetischen Festkörpers mit der Methode der spinpolarisierten Photoemission braucht man zirkular polarisiertes Licht (siehe Kapitel 3.1). Wie auch in der konventionellen Photoelektronenspektroskopie ist es von großem Vorteil, wenn man eine durchstimmbare Lichtquelle verwenden kann. Letzteres kann nur durch die Synchrotronstrahlung als Photonenquelle erfüllt werden. Am Elektronen-Speicherring BESSY in Berlin wurde von der Arbeitsgruppe Heinzmann (FHI) ein Monochromator errichtet, der zirkular polarisierte und monochromatisierte Synchrotronstrahlung liefert. An diesem 6,3 m Normal-Inzidenz-Monochromator (6,3 m NIM) wurden die Experimente, über die in dieser Arbeit berichtet wird, durchgeführt. Bei diesem Monochromator wird die Eigenschaft der Synchrotronstrahlung, daß das abgestrahlte Licht außerhalb der Bahnebene elliptisch polarisiert ist, ausgenutzt. Die Strahlung besitzt oberhalb und unterhalb der Synchrotronbahnebene entgegengesetzte Helizität. Innerhalb der Ebene ist sie vollständig linear polarisiert /2/. Durch horizontale Blenden, die in vertikaler Richtung bewegbar sind, kann im Monochromator der gewünschte Teil der Strahlung separiert werden. Typische Werte für die Zirkularität bei den Experimenten waren $P_z \geq 92\%$. Die Dispersion betrug 0,33 nm/mm. Der Monochromatoraustrittsspalt liegt 20 mm vor der Probe. Er kann bei Bedarf, wie zum Beispiel den Messungen im senkrechten Abgriff, wegbewegt werden. Im Experiment wurde eine Spaltbreite von 3,5 mm benutzt. Im Bereich zwischen 100 nm und 300 nm wurde für einen 2 mm breiten Austrittsspalt ein Photonenfluß von $\sim 5 \cdot 10^{10}$ Photonen/sec (zirkular polarisiert) bei einem Synchrotronstrahlstrom von 100 mAmp gemessen. Zu höheren Photonenenergien nimmt der Photonenfluß stark ab und hat zwischen 60 nm und 75 nm eine um ca. drei Größenordnungen verminderte Intensität. Bei 50 nm wurde nochmals ein Anstieg des Photonenflusses auf $\sim 2 \cdot 10^{10}$ Photonen/sec verzeichnet. Die genaue spektrale Verteilung der vom Monochromator gelieferten Lichtintensität ist in /3/ zu finden. Weitere Einzelheiten zum Monochromator kann man bei Eysers et al. /4/ nachlesen.

2.1 Experimenteller Aufbau am Synchrotron

In Figur 2.1 ist der experimentelle Aufbau am Speicherring BESSY wiedergegeben. Der verwendete Monochromator ist nicht im Bild. An den Monochromator schließt sich unmittelbar die Hauptkammer an. Diese enthält zwei Spektrometer, die getrennt zur Messung verwendet werden können. Im unteren Teil der Kammer befindet sich der LEED-Spinpolarisationsdetektor, der je nach Bedarf in die Meßposition, die Synchrotronebene, hochgefahren oder in eine Warteposition, 200 mm unterhalb dieser Ebene, abgesenkt werden kann (unter Vakuum). Ähnlich verhält es sich mit dem 2. Spektrometer der Arbeitsgruppe Heinzmann. Dieses ragt von oben in die Meßkammer und kann nach oben weg bewegt werden. An die Hauptkammer schließt sich die Präparationskammer an. In dieser befindet sich ein rasterbares Augerspektrometer, das eine Ortsauflösung von $\sim 10 \mu\text{m}$ besitzt /5/. Weiterhin ist die Kammer mit einem LEED-System /6/ ausgestattet. Zur Reinigung der Probe ist eine Ionenkanone /7/ vorgesehen. Zusätzlich kann die Probe durch eine indirekte Heizung über Wärmestrahlung und/oder Elektronenbeschuß auf über 1200°C aufgeheizt werden.

Die Probe wird mit einem Manipulator von der Präparationskammer in die Hauptkammer und umgekehrt transferiert. Der Manipulator (in Fig. 2.1 links angedeutet) erlaubt eine Drehung der Probe um ihre Normalenachse.

Hauptkammer und Präparationskammer sind durch einen Ganzmetall-Pendelschieber /8/ voneinander trennbar. Das ermöglichte eine Präparation der Platinprobe bei höheren Drücken, z.B. beim Heizen in O_2 oder Säubern mittels Ionenbeschuß, ohne Beeinflussung des Vakuums in der Hauptkammer. Die erzielten Enddrücke in beiden Kammern waren, bei geschlossenem Ventil zum Monochromator, kleiner $1 \cdot 10^{-10}$ mbar. Im Meßbetrieb stieg er meist, wegen schlechterer Vakua im Monochromator und Speicherring, auf $2\text{-}3 \cdot 10^{-10}$ mbar an.

Beide Kammern waren zweifach mit μ -Metall ausgekleidet, um störende Magnetfelder zu unterdrücken. Außerdem wurden sämtliche Bauteile aus unmagnetischen Materialien gefertigt. Um das gesamte System befanden sich Helmholtz-Spulen, mit denen das Magnetfeld in der Kammer noch weiter kompensiert wer-

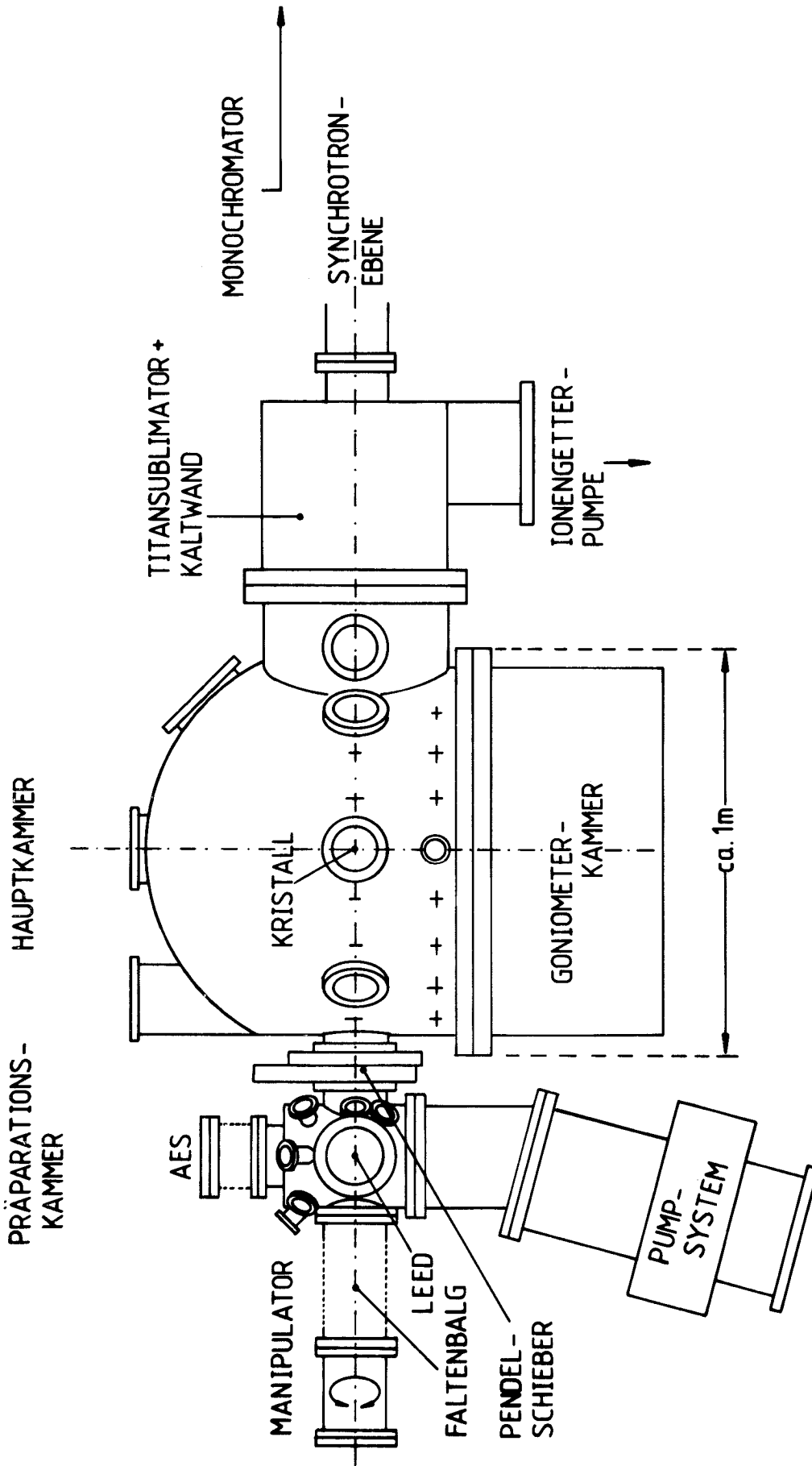


Fig. 2.1: Schematischer Experiment-Aufbau bei BESSY

Bei der Messung befindet sich der Kristall in der Mitte der Hauptkammer. Das Licht fällt von rechts entlang der Mittelachse auf den Kristall. Zur Probencharakterisierung kann der Manipulator im vorderen Teil geknickt werden, so daß die Probe vor das Auger-Spektrometer (AES) und das LEED-System positioniert werden kann. Die Präparationskammer besitzt ein separates, konventionell erhältliches, kombiniertes Pumpsystem /9/. Die gesamte Apparatur ist fest mit dem Monochromator verbunden. Dieser schließt sich unmittelbar auf der rechten Seite der Hauptkammer an.

den konnte. Die Magnetfelder konnten so im Bereich der Probe auf Werte um 10 mGauß reduziert werden.

2.2 Goniometerkammer

Der LEED-Spinpolarisationsdetektor ist in der Goniometerkammer, mit der die untere Hälfte der Meßkammer bezeichnet wird, untergebracht. Diese Halbkammer ist über einen 35"-Wheeler-Flansch vom oberen Teil, der fest bei BESSY installiert ist, trennbar. Einen Schnitt durch diese Kammer zeigt Fig. 2.2.

Die gesamte Meßvorrichtung ist auf einer Edelstahlplatte gelagert. Diese Platte kann über drei Spindeln angehoben oder abgesenkt werden. Auf diesen Hubtisch sind zwei Drehkränze übereinander angebracht. Sie sind auf Glaskugeln gelagert. Auf dem untersten Drehteller ist der Haltewinkel für das Spektrometer besfestigt. Der Detektor ist darin oben drehbar um die Achse 2 gelagert. Der obere Drehkranz ermöglicht von außen die Einkopplung der Schwenkbewegung um die Achse 2. Dies erlaubt, wie wir weiter unten sehen werden, die Messung der dritten Polarisationskomponente der Photoelektronen. Die Schwenkung wird folgendermaßen durchgeführt. Der untere Drehteller wird arretiert und der obere von außen gedreht. Durch die Innenverzahnung des oberen Drehkranzes überträgt sich die Drehung auf die Welle am Haltewinkel. Diese überträgt die Bewegung auf das obere Kegelrad, das dann das Spektrometer um die Mittelachse der Einschuboptik (Achse 2) dreht. Bewegt man beide Drehteller gleichzeitig, dreht sich das Spektrometer um die Mittelachse des Wheeler-Flansches (Achse 1) und damit um die Probe. Für die Drehteller existieren zwei getrennte Dreheinkopplungen.

Zentrisch sind Flansche von unten im Hubtisch eingeschweißt, die zur Spannungsversorgung und Auskopplung der Signale aus dem Vakuumgefäß dienen. Die Anbringung in der Mitte gewährleistet zum einen die volle Beweglichkeit des Spektrometers. Zum zweiten konnten dadurch die auch im Vakuum abgeschirmten Meßleitungen so kurz wie möglich gehalten werden. Dies war notwendig, da die Kapazität der Signalleitung, laut Hersteller /10/, einen Wert von 30 pF nicht überschreiten durfte.

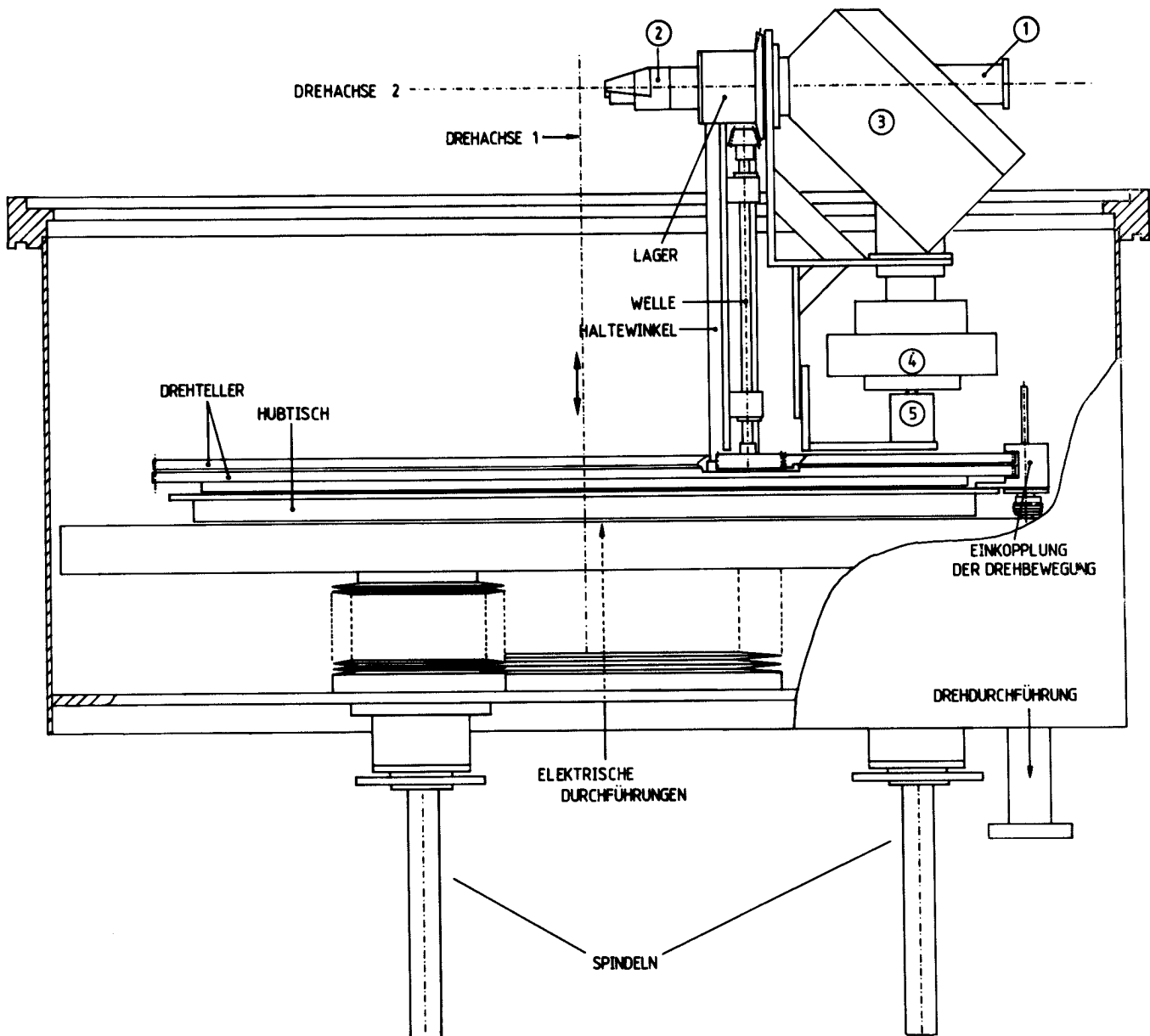


Fig. 2.2: Goniometerkammer

Schematische Ansicht im Schnitt durch die Kammer mit dem LEED-Spinpolarisationsdetektor

- 1 = Öffnung auf dem Außenzylinder des Analysators für den Lichtdurchtritt
- 2 = Transportlinse
- 3 = Energieanalysator
- 4 = Spinpolarisationsanalysator
- 5 = Halterung für den Wolfram-Kristall

Die Faltenbälge liegen alle innerhalb der Vakuumkammer. Sie sind zwischen Kammerboden und Hubtisch eingeschweißt. Die Atmosphärenseite liegt jeweils auf der Balginnenseite. Die elektrischen Durchführungen (gestrichelter Pfeil) sitzen innerhalb des großen Faltenbalgs auf in den Hubtisch eingesetzten Flanschen. Das System ist mit drei Spindeln, die gleichzeitig über einen gemeinsamen Kettenantrieb betätigt werden, ausgestattet. Eine Spindel ist in dieser Ansicht verdeckt.

2.3 Spektrometersystem

Die Funktionsweise des Spektrometersystems soll an Hand des Prinzipbildes in Fig. 2.3 erklärt werden. Es ist der Fall der Normalemission dargestellt. Das zirkularpolarisierte, monochromatisierte Licht fällt dabei durch das Spektrometer auf die Probe. Als Austrittsspalt des Monochromators dient in dieser Anordnung die Eintrittsöffnung des Spektrometersystems. Die Photoelektronen von der Probe werden mittels der Transportlinse (5 zylindrische Elemente) in die virtuelle Eintrittsblende des Energieanalysators abgebildet. Eine reale Analysatoreintrittsöffnung verbietet sich wegen des großen Lichtstrahlquerschnitts innerhalb der gesamten Transportlinse (siehe auch Kapitel 2.4). Als Energieanalysator verwenden wir ein 60°-Segment eines Zylinderspiegelanalysators. Die Energieselektion ist mit einer gleichzeitigen Umlenkung des Elektronenstrahls um 90° verbunden. Die aus dem Analysator austretenden Elektronen werden mit einer aus drei zylindrischen Elementen bestehenden Optik auf den Wolframkristall fokussiert und gleichzeitig auf die benötigte Streuenergie beschleunigt. Die am Wolframkristall gebeugten Elektronen durchlaufen eine konventionelle LEED-Gitteranordnung /11/, die die Separation der elastisch gebeugten Elektronen ermöglicht. Mittels zweier hintereinandergeschalteter Vielkanalplatten /12/ werden die gebeugten Strahlen verstärkt und über eine Widerstandsplatte /10/ orts aufgelöst nachgewiesen.

Zur Bestimmung der Polarisation der Elektronen werden die Intensitäten von komplementären LEED-Reflexen verglichen. Es gilt, z.B. für die (2,0)-Strahlen:

$$P = \frac{1}{A_{(2,0)}} \cdot \frac{I_{(2,0)} - I_{(\bar{2},0)}}{I_{(2,0)} + I_{(\bar{2},0)}}$$

I = Intensität der LEED-Reflexe

A = Asymmetriefunktion

Die Asymmetriefunktion A wurde von Kirschner /13/ für verschiedene LEED-Reflexe und Streuenergien zwischen 50 und 150 eV bestimmt. Der optimale Arbeitspunkt des Detektors liegt, unter Verwendung der (2,0)-Strahlen, bei einer Streuenergie von 104,5 eV /14/. Diese Werte wurden übernommen.

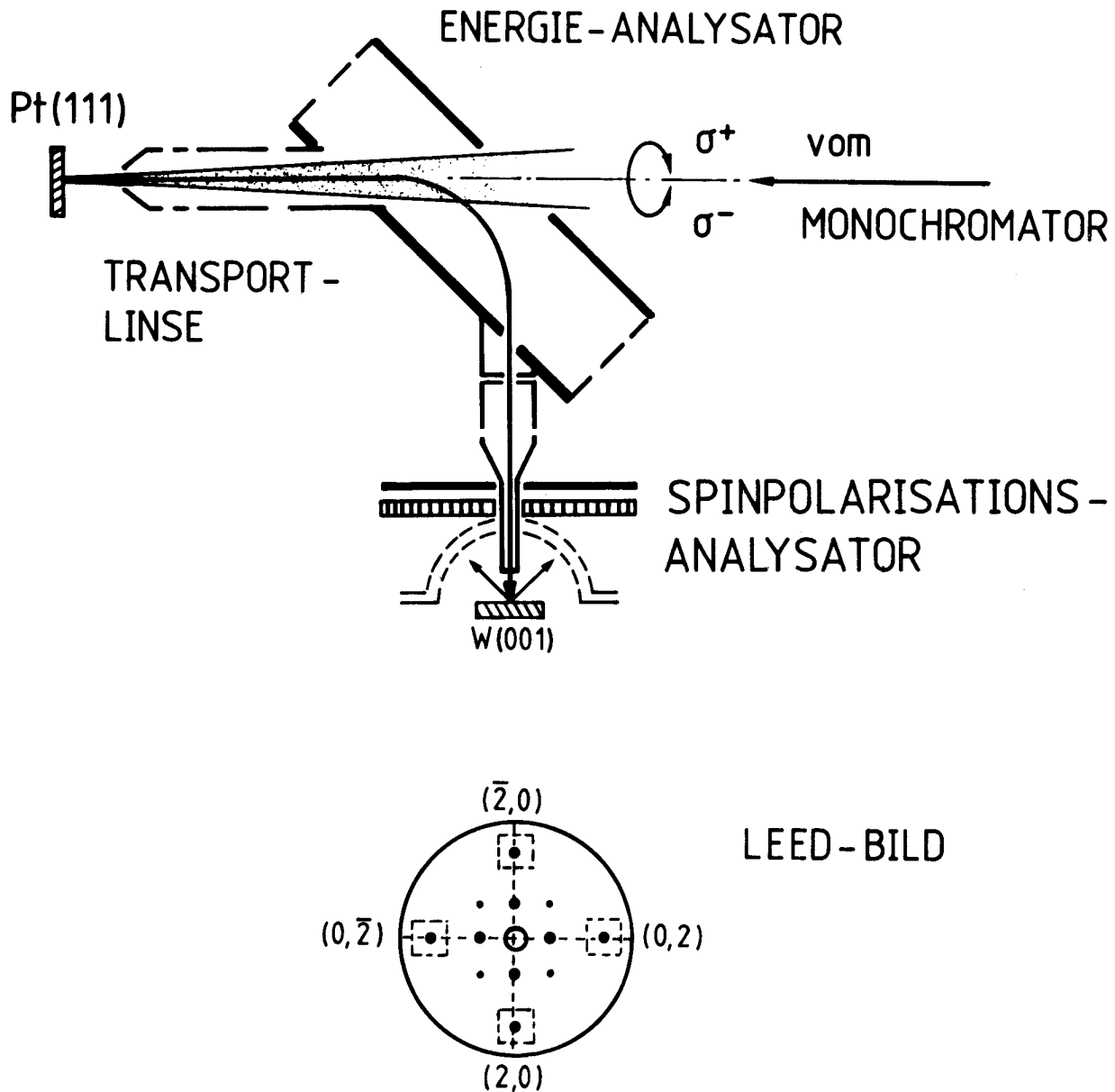


Fig. 2.3: Schemabild des Spektrometersystems

Das Bild zeigt einen Schnitt durch die Mittelebene des Detektors. Es ist der Fall der Messung in Normalemission dargestellt, bei der die zirkularpolarisierte Synchrotronstrahlung durch den Detektor auf die Probe fällt. Vom Energieanalysator sind der äußere und innere Zylinder sowie Randfeldkorrektur-elemente angedeutet. Der Spinpolarisationsanalysator (in Fig. 2.2 mit 4 bezeichnet) besteht, von unten nach oben, aus: Wolframkristall, LEED-Gitter, zwei Vielkanalplatten (gestrichelt) und der Widerstandsplatte (schwarz).

Das LEED-Bild zeigt die Beugungsfigur in Elektronenbewegungsrichtung betrachtet. Die $(2,0)$ - und $(\bar{2},0)$ -Reflexe liegen vor bzw. hinter der Blattebene, also in einer Ebene senkrecht zum Schnitt. Die Quadrate sollen die elektronisch erfaßten Bereiche symbolisieren, innerhalb derer die vier Zähler für die $(2,0)$ - und $(0,2)$ -Strahlen Ereignisse registrieren.

Mit einer solchen Intensitätsasymmetrie-Messung wird der Polarisationsgrad bezüglich einer ausgezeichneten Richtung bestimmt. Diese wird durch die LEED-Geometrie eindeutig festgelegt. Die Polarisationskomponente, die gemessen wird, steht senkrecht auf der Streuebene, die durch die beiden zur Polarisationsbestimmung benutzten LEED-Strahlen ausgezeichnet ist /14/. Durch die Messung der Intensitätsasymmetrie der (2,0)- und (0,2)-Reflexe bietet das Spektrometer die Möglichkeit, gleichzeitig zwei zueinander senkrechte Polarisations-Komponenten zu bestimmen. (Die Achsen sind im LEED-Bild der Fig. 2.3 gestrichelt eingezeichnet.)

An Hand von Fig. 2.3 kann man die durch die LEED-Symmetrie festgelegten Komponenten auf die Geometrie am Platinkristall übertragen. Durch die (0,2)-Strahlen wird die Polarisationskomponente, die senkrecht zur Oberflächennormalen und senkrecht zur Blattebene steht, bestimmt. Die Intensitätsasymmetrie der (2,0)-Strahlen ist proportional zur Polarisationskomponente, die parallel zur Oberflächennormalen liegt. Diese Komponente kann nur deshalb nachgewiesen werden, weil im Energieanalysator die Elektronen um 90° abgelenkt werden. Der Spin der Elektronen wird in schwachen elektrischen Feldern nicht beeinflusst /15/. Die beiden Polarisationskomponenten werden, entsprechend ihrer Orientierung bezüglich der Elektronenbewegungsrichtung bei der Emission, als longitudinal bzw. transversal bezeichnet.

Durch die Möglichkeit, das Spektrometersystem zu schwenken, kann man verschiedene im Raum orientierte Polarisationskomponenten transversaler Art bestimmen. Insbesondere in der Position, die Fig. 2.2 und 2.3 zeigen, wird die transversale Polarisationskomponente gemessen, die parallel zur Synchrotronebene liegt. Durch Schwenken des Detektors um 90° (um Achse 2) kann man die auf der Synchrotronebene senkrecht stehende Komponente bestimmen. Die longitudinale Polarisationskomponente ist von der geschwenkten Stellung unabhängig und immer gleich. Man hat folglich die Möglichkeit, drei senkrecht zueinander stehende Polarisationskomponenten zu bestimmen. Somit kann ein beliebig im Raum orientierter Polarisationsvektor gemessen werden.

Einige photographische Ansichten des Spektrometers sind in Fig. 2.4 - 2.6 zusammengestellt. Die Bilder zeigen das Spektrometer in den oben beschriebenen, ausgezeichneten Schwenkpositionen.

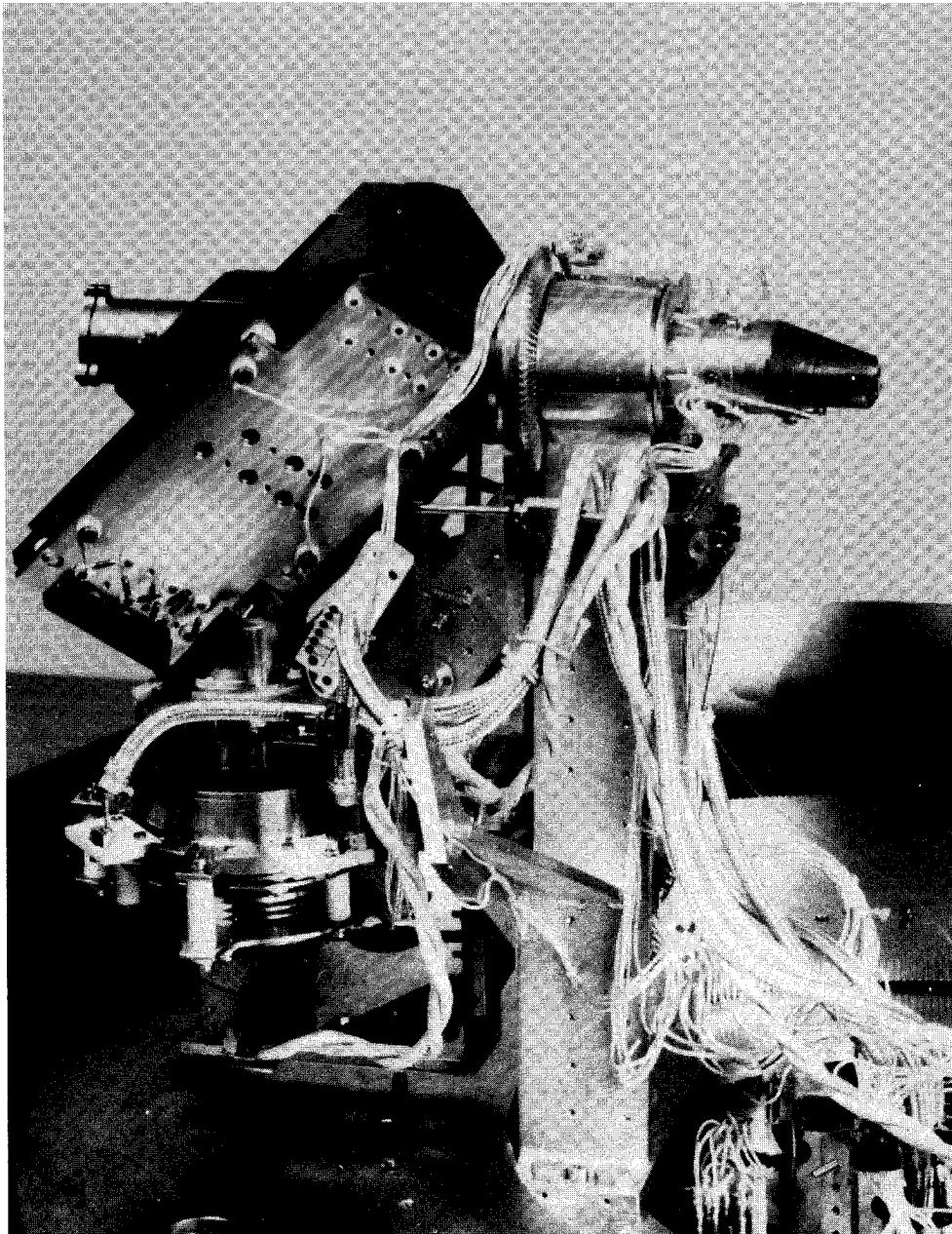


Fig. 2.4: Spektrometersystem

In der Seitenansicht erkennt man, im Vergleich mit Fig. 2.2 und 2.3, die Transportlinse, die sich teilweise im oberen Lager befindet. Links davon sieht man den Energieanalysator mit seitlicher Abdeckung. Darunter schließt sich der Spinpolarisationsanalysator an. Die weißen Keramikplatten dienen zur Befestigung der Widerstandsplatte. Auf diesen Keramiken befinden sich die Kondensatoren für die orts aufgelöste Signalauskopplung. Man erkennt weiter den Haltewinkel, der auf dem unteren Drehteller befestigt ist. Am oberen Teil des Haltewinkels befindet sich das Kegelrad, das zur Schwenkung des Detektors dient. Am unteren rechten Bildrand sieht man die elektrischen Anschlüsse aus dem im Hubtisch eingeschweißten Flanschstutzen herausragen.

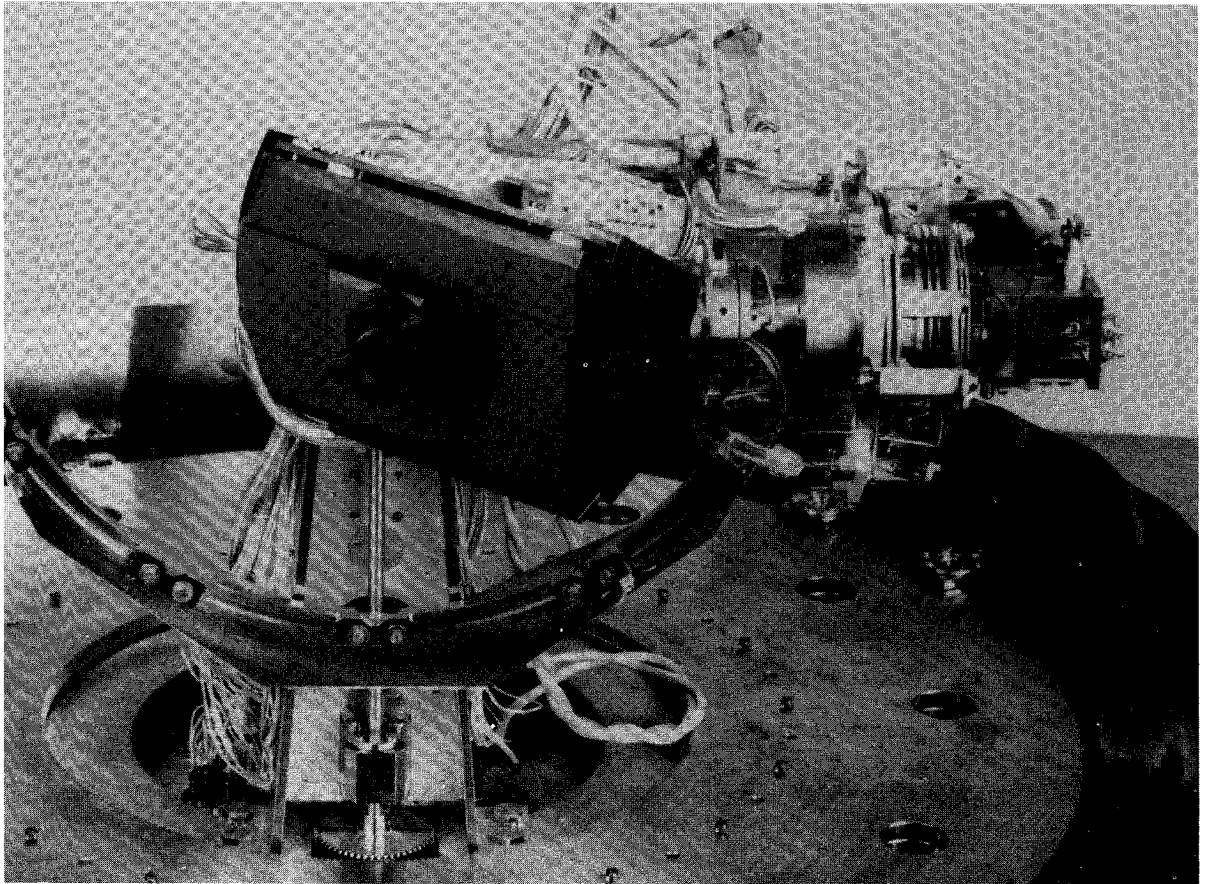


Fig. 2.5: Spektrometersystem um 90^0 geschwenkt

Man blickt auf die Rückseite des Energieanalysators mit der Öffnung für den Lichtdurchtritt. Man erkennt einige Details des Spinpolarisationsanalysators. Ganz rechts sieht man den LEED-Kristallträger, der eine Nachjustierung des Wolframkristalls unter Vakuum ermöglicht. Der Kristall kann, wie bei einem Goniometer, um zwei senkrecht zueinander stehende Achsen in der Kristalloberfläche gekippt werden. Weiter in Richtung Energieanalysator folgen LEED-Gitter, Korrekturringe /18/, Halterung für die Vielkanalplatten und Halterung für die Widerstandsplatte.

Im unteren Teil des Bildes sieht man die beiden Drehteller. Die Innenverzahnung des oberen Drehtellers greift in das Zahnrad am unteren Ende der Welle, die am Haltewinkel befestigt ist.

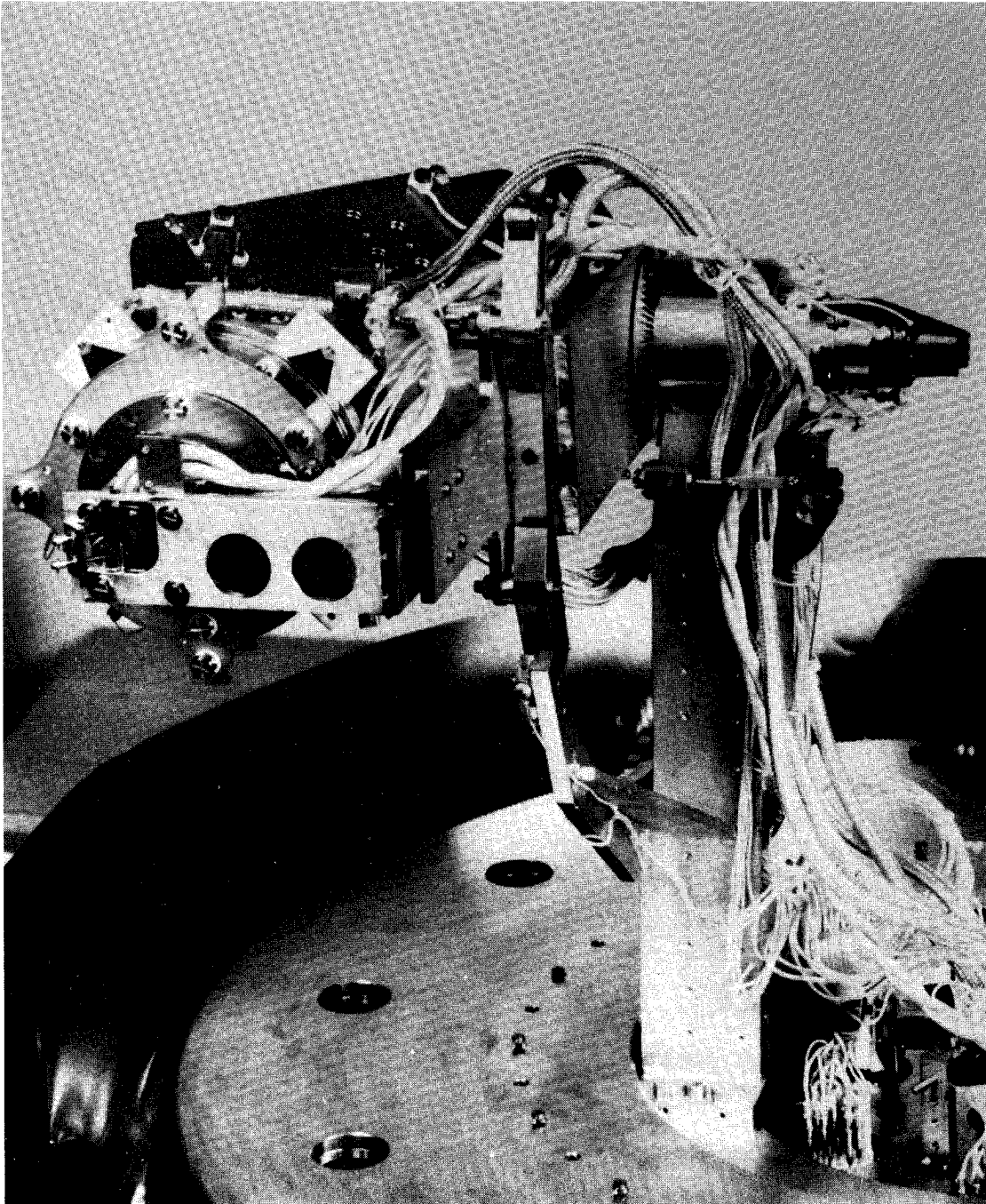


Fig. 2.6: Spektrometersystem

Das Bild zeigt aus einer anderen Ansicht das Spektrometer in der um 90° geschwenkten Position. Man blickt von unten auf den Spinpolarisationsanalysator. Man sieht Teile der Widerstandsplatte (schwarze Dreiecke) mit ihrer Befestigung an den Keramikplatten.

2.3.1 Energieanalysator

Als Energieanalysator wird ein 60°-Segment eines Zylinderspiegelanalysators verwendet. Da das Licht zum einen senkrecht auf den Kristall fallen, aber andererseits auch die Photoelektronen in Normalemission analysiert werden sollten, waren Modifikationen am Spektrometer vorzusehen, die einen Lichtdurchtritt durch den Analysator erlaubten. Dazu mußte im äußeren Zylinder eine Öffnung gelassen werden. Außerdem konnte keine Eintrittsblende für den Energieanalysator benutzt werden, da die Lichtkonvergenz im Bereich des Analysators-Eintritts einen freien Durchgang von > 10 mm verlangte.

Um speziell diesen letzteren Mangel zu beheben, wurde mit Hilfe eines Simulationsprogramms die Arbeitsweise des Analysators studiert und die Möglichkeiten, eine virtuelle Eintrittsblende zu verwenden, untersucht. Ausgehend von analytischen Formeln /16/ für die Bewegung eines Elektrons in einem zylindersymmetrischen Feld, wurde ein Programm entwickelt, das es erlaubte, sämtliche experimentellen Parameter der in den Analysator eintretenden Elektronen, wie etwa Eintrittswinkel, Quellfläche und Energie, zu variieren und den Einfluß auf die Auflösung und Abbildungseigenschaften des Analysators zu studieren. Unter der zusätzlichen Bedingung einer Ablenkung der Elektronen um 90° erwies es sich als günstig, den Analysator so zu betreiben, daß er eine 1:1 Abbildung eines Gegenstandes macht. Gegenstand und Bild liegen dabei beide in der Zylindermittelachse. Unter diesen Bedingungen ist es möglich, durch Verwendung von Divergenzbegrenzenden Blenden vor der Austrittsblende eine virtuelle Eintrittsöffnung zu definieren. Diese Aperturblenden wurden den berechneten Trajektorien, für den Fall einer vorhandenen Eintrittsblende, angepaßt. Damit ergab sich aus den Rechnungen eine Spektrometerkonstante

$$c = \frac{E}{\Delta U \cdot e} = 1,22$$

E = Durchlaßenergie

ΔU = Spannungsdifferenz zwischen innerem und äußerem Zylinder

für folgende Spektrometerabmessungen:

R_i = innerer Zylinderradius = 30 mm

R_a = äußerer Zylinderradius = 90 mm

W_0 = Abstand von Gegenstands- und Bildpunkt auf der Zylinderachse = 188,2 mm

Die Energieauflösung wurde für die experimentell benutzte Austrittsblenden-
größe, $r_{B1.} = 0,05 \cdot R_i$, zu 2 % (volle Breite bei halbem Maximum) berechnet.
Die Winkelauflösung war, laut Rechnung, $< \pm 5^\circ$.

Testmessungen ergaben eine Energieauflösung von 1.7 % und eine Spektrome-
terkonstante von $C = 1,235$. Die bessere Energieauflösung im Test ist auf
eine geringere Divergenz des in das Spektrometer eintretenden Elektronen-
strahls verglichen mit dem Wert, der der Rechnung zugrunde gelegt wurde,
zurückzuführen. Die Winkelakzeptanz wurde nicht überprüft, kann aber wegen
der Aperturblenden nicht oberhalb von 5° liegen.

Im oben geschilderten Betriebsmode wird nicht die für Zylinderspiegelanaly-
satoren mögliche Fokussierung 2. Ordnung genutzt /16/. In Fokussierung 2.
Ordnung wird nämlich aus einem runden Gegenstand ein elliptisches Bild er-
zeugt. Die Abbildung eines in der Ebene, die der Ansicht der Figur 2.3 ent-
spricht, ausgedehnten Gegenstands erfolgt energiedispersiv an einer anderen
Stelle hinter dem Analysator als die eines, in einer zu diesem Schnitt
senkrechten Ebene, ausgedehnten Gegenstandes. Ein Blendensystem zur Defini-
tion der virtuellen Eintrittsöffnung könnte nicht mehr benutzt werden, ohne
erhebliche Intensitätsverluste hinnehmen zu müssen. Außerdem würde für die
weitere Abbildung kein echter Bildpunkt existieren, was zu schlechteren
Beugungsbedingungen am Wolfram-Kristall führen würde. Aus diesen Gründen
wurde ein Arbeitspunkt gewählt, der etwas von der Fokussierung 2. Ordnung
abweicht.

Die Öffnung im äußeren Zylinder verursacht Feldverzerrungen im Analysator.
Um diese im Bereich der Elektronenbahnen möglichst klein zu halten, wurde
der Radius des äußeren Zylinders so groß wie möglich gewählt. Außerdem wur-
den über die Öffnung 0,1 mm dicke Molybdän-Drähte gespannt, um den Durch-
griff von Störfeldern klein zu halten.

2.3.2 Datenerfassung

Das LEED-Bild wird über eine kommerziell erhältliche Anordnung /10/, bestehend aus einer Widerstandsplatte und Nachweiselektronik, erfaßt. Dieses System wurde für die Datenerfassung um einen Analog-Digital-Wandler und einem 7-Kanalzähler erweitert. Die gesamte Anordnung ist in Form eines Blockschaltbildes in Fig. 2.7 dargestellt.

Die Widerstandsplatte ist oben skizziert. Sie besitzt vier Abgriffe, an denen unmittelbar im Vakuum vier identische Kondensatoren angebracht sind. Die nachfolgende, ortsauflösende Elektronik bestimmt, über vier ladungsempfindliche Vorverstärker, die in einer vorgegebenen Zeit auf die Kondensatoren geflossene Ladung. Durch Bilden verschiedener Verhältnisse der zur Ladung proportionalen vier Signale aus den Vorverstärkern kann der Ort eines Ereignisses lokalisiert werden /10/. Entsprechend dieser Koordinaten gibt die Elektronik zwei Spannungen, die auf zwei senkrecht zueinander stehenden Koordinatenachsen (x,y) bezogen sind, heraus. Über eine veränderliche Nachweisschwelle erlaubt das Gerät zusätzlich, Untergrund und Signal voneinander zu trennen. Wenn ein Signal oberhalb einer vorgegebenen Schwelle liegt, gibt die Elektronik einen Steuerimpuls ab. Die x- und y-Signale werden digitalisiert (Analog-Digital-Wandler) und auf den Eingang der Zähl-einrichtung gegeben. Sie liegen simultan an sieben Zählern. Jeder dieser Zähler enthält zwei, durch ein logisches "UND" gekoppelte, Fensterdiskriminatoren. Man stellt an jedem dieser Zähler für das x- und y-Signal jeweils eine untere und obere Schwelle (Fenster) ein. Gibt die ortsauflösende Elektronik der Widerstandsplatte einen Steuerimpuls ab, so werden in allen Zählern gleichzeitig die x- und y-Signale mit den Sollwerten verglichen. Liegt sowohl x- als auch y-Signal innerhalb eines eingestellten Fensters, wird das Ereignis im betreffenden Zähler registriert. Die Einstellung dieser Fenster erfolgt mit dem auf einem Oszillographen sichtbar gemachten LEED-Bild. Mit Hilfe dieser Anordnung können die Intensitäten der einzelnen LEED-Reflexe ermittelt werden. Es wurden gleichzeitig die (2,0)-, (0,2)-, (1,0)-Reflexe registriert und zusätzlich die Gesamtintensität aufgenommen. Die (2,0)- und (0,2)-Reflexe dienten zur Bestimmung der Polarisation (siehe Kapitel 2.3). Die (1,0)-Strahlen wurden zur Überprüfung der apparativen Asymmetrie benutzt, da die (1,0)-Strahlen für die verwendete Streuanordnung

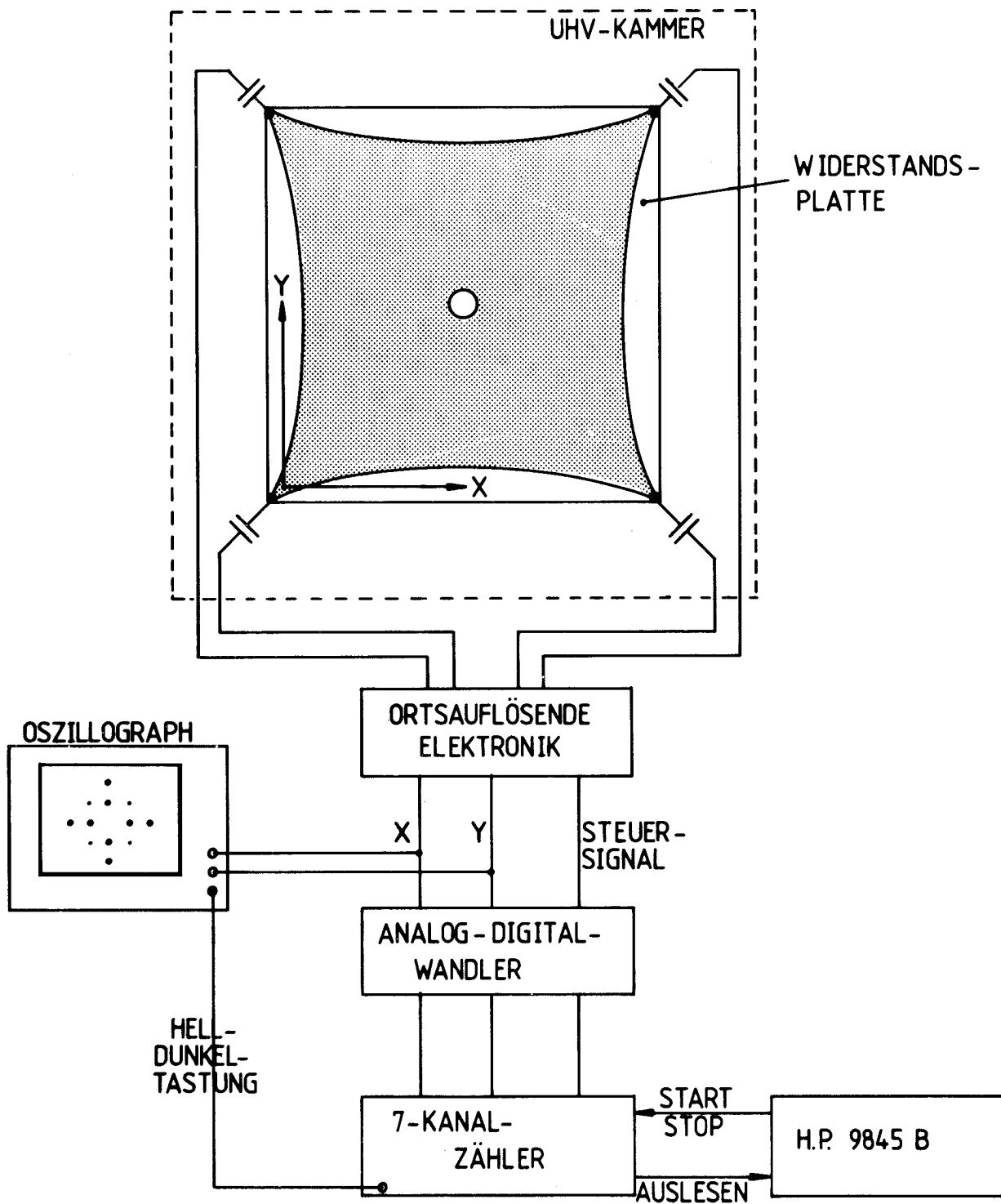


Fig. 2.7: Blockschaltbild der Signalauskopplung

eine verschwindend geringe Polarisationsempfindlichkeit /12/ besitzen. Die Zähler werden von einem Tischrechner /17/ ausgelesen und wieder auf Null gesetzt. Die Meßzeitintervalle sind vom Rechner aus wählbar.

2.4 Erläuterungen zum Meßvorgang

Um Verteilungskurven aufzunehmen, wurden von einer programmierbaren Spannungsquelle bestimmte Potentiale im Spektrometer geändert. Eine detailliertere Beschreibung des Betriebsmodes findet man bei Hünlich /18/. Der Energiesanalysator wurde bei konstanter Auflösung, also mit fester Durchlaßenergie, betrieben. Der gesamte Meßvorgang wurde vom Tischrechner aus gesteuert.

Es wurde jeweils ein volles Spektrum, von typisch 150 Meßpunkten, bei Zählzeiten von ~ 1 sec pro Punkt aufgenommen. Energieverteilung und Asymmetrie wurden simultan auf dem Bildschirm dargestellt und im Rechner zwischengespeichert. Es konnte so jeder einzelne Durchlauf kontrolliert werden. Die einzelnen Durchläufe wurden, wenn sie in Ordnung waren, zu den vorhergehenden hinzuaddiert. Die Wahl dieses Meßverfahrens hatte zwei Vorteile:

- i) während des kurzen Zeitraumes (2,5 Minuten für einen Durchlauf), sind die Meßbedingungen einfacher konstant zu halten
- ii) es gehen die schon abgespeicherten Daten nicht verloren, wenn, aus irgendwelchen Gründen, ein Durchgang gestört wurde.

Je nach Intensität wurden zwischen 10 und 20 solcher Einzelmessungen gemacht. In den polarisationsempfindlichen LEED-Reflexen konnten in Intensitätsmaxima bis zu 2000 Ereignisse/sec pro Reflex registriert werden. Die Zählrate hing dabei natürlich vom Synchrotron-Strahlstrom und der verwendeten Photonenenergie ab. Die angegebene Zählrate bezieht sich auf einen gespeicherten Strom von 150 mAmp und eine Photonenenergie $h\nu \leq 13$ eV.

Die Sauberkeit der Kristalloberflächen konnte während des Experiments an Hand des LEED-Bildes (Wolfram-Kristall) und des Photoemissionsspektrums

(Platin) überprüft werden. Der Wolframkristall wurde in Zeitabständen von ca. 15 min auf $\sim 1200^{\circ}\text{C}$ und etwa jede Stunde auf $\sim 2200^{\circ}\text{C}$ geheizt, um Verunreinigungen durch CO respektive Sauerstoff zu beseitigen. Der Platin-kristall wurde meist nur während einer neuen Elektroneneinspeisung in den Speicherring präpariert (typisch alle 2 - 3 Stunden). Die Sauberkeit der Platinoberfläche wurde mittels Auger-Analyse überprüft.

3. Theoretische Betrachtungen zur spinpolarisierten Photoemission

Die spinpolarisierte Photoemission ist eine neue Methode, um die elektronischen Eigenschaften von Festkörpern zu untersuchen. Auch die Theorie steht bei der Beschreibung der Spinphänomene noch am Anfang. Bisher beschränkt sie sich auf die Behandlung von Teilprozessen im Rahmen eines Dreistufenmodells. Eine angemessene Theorie sollte aber den Prozeß in einem Einstufenmodell behandeln. Als Endzustände muß man dabei relativistische "zeitinvertierte LEED-Zustände" ansetzen. Durch diesen Ansatz berücksichtigt man Beugungseffekte, die an der Grenzfläche Festkörper-Vakuum auftreten und die die Spinpolarisation der Photoelektronen beeinflußt. Solche relativistischen LEED-Zustände werden heute schon von Feder /1/ zur Beschreiben von Spineffekten in der Beugung niederenergetischer Elektronen verwendet. Die Theorie sollte außerdem die Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Feld relativistisch beschreiben, da diese relativistische Beschreibung des Anregungsprozesses Spinumkehr-Prozesse beim Übergang erfaßt. Eine solche umfassende Theorie wurde kürzlich in Angriff genommen /2/. Da eine vollständige Beschreibung noch nicht vorhanden ist, werden wir auf das einfachste Modell der Photoemission, das Dreistufenmodell, zurückgreifen. Dies erlaubt eine physikalisch anschauliche Diskussion der Polarisations-effekte bei der Photoemission.

Das Dreistufenmodell, das zuerst von Fan /3/ vorgeschlagen und später von anderen Gruppen /4,5,6/ verfeinert wurde, zerlegt die Photoemission aus Festkörpern in folgende Teilprozesse:

- a) den Anregungsprozeß
- b) den Transport des angeregten Elektrons zur Oberfläche
- c) die Transmission durch die Oberfläche ins Vakuum.

Im Prinzip können alle drei Stufen zu einer Spinpolarisation der gemessenen Photoelektronen führen. So kann beispielsweise der Transport zur Oberfläche bei einem Festkörper ohne Inversionszentrum eine Spinpolarisation der Photoelektronen bedingen. Für solche Kristalle gilt die Kramers-Entartung $E(\underline{k}, \uparrow) = E(-\underline{k}, \uparrow)$, was heißt, daß entgegengesetzte Spinzustände bei einer festen Energie bei $\underline{k}$ und $-\underline{k}$ zu finden sind. Beim Transport der angeregten

Elektronen zur Oberfläche findet über die Gruppengeschwindigkeit eine Spinselektion statt. Da die Gruppengeschwindigkeit für $\underline{k}$ und $-\underline{k}$ entgegengesetzt gleich sind, können nämlich nur Elektronen mit $\underline{k}$ oder $-\underline{k}$ zur Oberfläche gelangen und emittiert werden. Diese Elektronen sollten also wegen der Kramers-Entartung spinpolarisiert sein /7/. Eine experimentelle Überprüfung dieser Hypothese steht noch aus.

In unmagnetischen Kristallen mit einem Inversionszentrum gilt

$$E(\underline{k}, \uparrow) = E(\underline{k}, \downarrow).$$

Es sind also alle Bänder wenigstens zweifach entartet und können mit Elektronen entgegengesetzter Spineinstellung besetzt werden. Weiter folgt daraus, daß der Grad der Entartung nur gradzahlig sein kann. Für solche Kristalle können spinpolarisierte Photoelektronen nur durch (i) den Anregungsprozeß und/oder (ii) die Transmission durch die Oberfläche /8/ verursacht werden. Die theoretische Vorhersage von Spinpolarisation durch den Anregungsprozeß wurde zuerst von Koyama & Merz /9,10/ und von Reyes & Helman /11/ gemacht. Eine ausführliche Behandlung findet man im Übersichtsartikel von Borstel & Wöhlecke /7/.

Im folgenden Unterkapitel werden wir auf die theoretische Behandlung der Polarisierungseffekte durch die Anregung näher eingehen. Danach werden die Transmissionseffekte eingehender diskutiert.

3.1 Der Anregungsprozeß

Durch Absorption eines Photons kann ein Elektron aus einem Anfangszustand ψ_i in einen Endzustand ψ_f angeregt werden. Die Intensität der Anregung ist proportional zur Übergangswahrscheinlichkeit $|\langle \psi_f | 0 | \psi_i \rangle|^2$. In Störungsrechnung 1. Ordnung ergibt sich an einem Punkt $\underline{k}$ der Brillouinzone

$$I(E_f) \sim \delta(E_f - E_i - h\nu) \cdot |\langle \psi_f | 0 | \psi_i \rangle|^2 \quad (3.1)$$

0 = Störoperator

I = Intensität

Der erste Faktor beinhaltet die Energieerhaltung. Im Dreistufenmodell setzt man als Wellenfunktionen ψ_f und ψ_i Grundzustands-Blochspinoen an.

Zur Bestimmung der Polarisation der angeregten Elektronen muß man deren Wellenfunktion kennen /12/. Für die Anregung aus einem bestimmten Anfangszustand ψ_i^μ ergibt sich als allgemeinsten Endzustand $\phi_f^\mu(E_f, \underline{k})$ eine Linearkombination aller erreichbaren Endzustände. Man erhält

$$\phi_f^\mu(E_f, \underline{k}) = \sum_{\nu} \langle \psi_f^\nu(E_f, \underline{k}) | 0 | \psi_i^\mu(E_i, \underline{k}) \rangle \psi_f^\nu(E_f, \underline{k}) \delta(E_f - E_i - h\nu) \quad (3.2)$$

$\psi_i^\mu(E_i, \underline{k})$ durchläuft alle möglichen μ -Anfangszustände, die bei E_i und $\underline{k}$ existieren. Die δ -Funktion entspricht wieder den Energieerhaltungssatz. Sie separiert in der Summation alle die zu einem festen E_f gehörenden Endzustandswellenfunktionen. Die Elektronen im Endzustand $\phi_f^\mu(E_f, \underline{k})$ sind vollständig polarisiert, da in Gleichung (3.2) Wellenfunktionen superponiert werden. Die daraus resultierende Blochwelle ist durch eine feste Spinfunktion $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ bestimmt. a und b errechnen sich dabei aus Gleichung (3.2).

Gibt es μ verschiedene Anfangszustände bei gleichem E_i und $\underline{k}$, so erhält man, entsprechend Gleichung (3.2), μ verschiedene Endzustände. Diese besitzen keine feste Phasenbeziehung untereinander, da sie durch Anregung aus unabhängigen Eigenzuständen entstehen. Deshalb muß man die Gesamtheit aller Elektronen bei E_f und $\underline{k}$ als ein statistische Gemisch von μ Untersystemen betrachten. In diesem Fall ergibt sich die Polarisation des Ensembles als gewichtete Addition der Polarisationsvektoren $\underline{p}^\mu$ der Einzelsysteme, die reine Spinzustände darstellen. Es gilt

$$\underline{P} = \sum_{\mu} g_{\mu} \underline{P}^{\mu} \quad (3.3)$$

$$g_{\mu} = \frac{I^{\mu}(E_f, \underline{k})}{\sum_{\mu} I^{\mu}(E_f, \underline{k})}$$

I^{μ} = Intensität oder Besetzungstärke des μ -ten Teilsystems

In der Quantenmechanik verwendet man häufiger den Dichteformalismus. Darin läßt sich Gleichung (3.3) schreiben als

$$\underline{P} = \frac{\text{Spur } (\underline{\rho}_f \underline{\sigma})}{\text{Spur } (\underline{\rho}_f)} \quad (3.4)$$

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \underline{\sigma}_x \\ \underline{\sigma}_y \\ \underline{\sigma}_z \end{pmatrix}$$

wobei $\underline{\rho}_f$ die Dichtematrix des Elektronen-Ensembles ist. Sie setzt sich aus den Dichtematrizen der Untersysteme

$$\underline{\rho}_f^{\mu} = |\phi_f^{\mu}\rangle \langle \phi_f^{\mu}| \quad (3.5)$$

zusammen. Es ergibt sich

$$\underline{\rho}_f = \sum_{\mu} \underline{\rho}_f^{\mu} \quad (3.6)$$

Die Diskussion der Gleichung (3.4) gestattet, unter Ausnutzung von Zeitumkehrbarkeit und Inversionssymmetrie, einige allgemeingültige Aussagen /12/. Diese sind im Folgenden aufgelistet.

Für die Anregung an einer beliebigen Stelle $\underline{k}$ der Brillouinzone in einem unmagnetischen Kristall mit Inversionszentrum gilt:

1. Man kann nur spinpolarisierte Photoelektronen erwarten, wenn man zirkularpolarisiertes Licht benutzt, und zwar

2. nur dann, wenn die Spin-Bahn-Wechselwirkung nicht vernachlässigbar klein ist.
3. Beim Umschalten der Lichtzirkularität geht der Polarisationsvektor in sein Negatives über.
4. Liegen Lichteinfalls- und Elektronenemissionsrichtung in einer Spiegelebene des Kristalls, so liegt der Polarisationsvektor ebenfalls in der Spiegelebene.

Das Problem wird sehr viel überschaubarer, wenn man die Anregung in hochsymmetrischen Richtungen betrachtet. Es können dann Symmetriebetrachtungen angestellt werden, die die Gleichungen (3.2) - (3.6) sehr vereinfachen. Dies soll anschließend für die Anregung entlang der Δ -Richtung vorgeführt werden.

Wir betrachten die Normalemission aus einem Pt(111)-Kristall. Wir nehmen ein kartesisches Koordinatensystem an, dessen z-Achse deckungsgleich mit der $[111]$ -Richtung des Kristalls ist. Die positive z-Richtung sei parallel zur Oberflächennormalen. Zirkularpolarisiertes Licht falle senkrecht auf die Oberfläche. Damit ist das Auftreten eines Oberflächenphotoeffekts, wie ihn Feibelman /13/ beschrieben hat, auszuschließen. Der Operator in Gleichung (3.1) und (3.2) kann dann in der Dipolnäherung durch

$$0 \approx A \cdot (x \pm iy)$$

A = Betrag des Vektorpotentials im Inneren des Kristalls

beschrieben werden. Eine dazu äquivalente Darstellung in Kugelflächenfunktionen ist

$$0 \approx A \cdot Y_1^{\pm 1}.$$

Die Beschränkung auf die Hauptsymmetrierichtungen der Kristalle erlaubt, die Elektronenwellenfunktionen näher zu spezifizieren. Die einzelnen Bänder der Bandstruktur $E_n(\underline{k})$ werden durch die Angabe der irreduziblen Darstellung $\{n\}$ der dem Vektor $\underline{k}$ zugehörenden Punktgruppe charakterisiert. Diese Be-

zeichnung gibt die Symmetrie des Bandes an der betreffenden Stelle der Brillouinzone an. Die Blochwelle als Eigenzustand des Elektrons besitzt genau diese Symmetrie. Bei Materialien mit hoher Kernladungszahl führt die Spin-Bahn-Wechselwirkung zur Aufspaltung von entarteten Bändern der nicht-relativistischen Bandstruktur. Die Symmetrie der Bänder wird dann durch Doppelgruppen beschrieben. Die Klassifizierung bezieht sich nicht mehr auf eine reine Ortssymmetrie, sie beinhaltet zusätzlich die Wechselwirkung von Bahndrehimpuls mit dem Eigendrehimpuls (Spin) des Elektrons. Anschaulich erlauben die Kenntnis der Doppelgruppen die explizite Angabe der Kombination von Spin-Funktionen und Symmetrianteilen der Ortswellenfunktionen. Die Kopplungskoeffizienten, äquivalent zu den Clebsch-Gordon-Koeffizienten in der Atomphysik, sind für die einzelnen Punktgruppen in der Literatur tabelliert /14/.

Für die $[111]$ -Richtung kubisch flächenzentrierter Kristalle gibt es in der nichtrelativistischen Bandstruktur, d.h. ohne Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung, nur zwei verschiedene Bandsymmetrien. Das sind in der Einzelgruppennotation Λ_1 und Λ_3 . Die Λ_3 -Bänder sind vierfach entartet. Sie werden unter Einschalten der Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgespalten in Λ_6^3 und $\Lambda_4^3\Lambda_5^3$. Die Λ_1 -Bänder werden zu Λ_6^1 . In dieser Bezeichnung gibt der untere Index die Doppelgruppe und der obere die Einzelgruppe an. Λ_6 ist eine zweidimensionale irreduzible Darstellung. Sie erlaubt eine Entwicklung der Blochwellen nach der Basis der Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ /15/. Hingegen entsteht $\Lambda_4^3\Lambda_5^3$ aus zwei eindimensionalen irreduziblen Darstellungen Λ_4 und Λ_5 . Wegen der Zeitumkehrinvarianz sind beide aber energetisch entartet. Deshalb faßt man sie zusammen. Sie lassen sich, wegen ihres eindimensionalen Charakters, nicht mehr nach den Spinfunktionen separieren, wie wir weiter unten am konkreten Beispiel für Pt(111) sehen werden.

In der Atomphysik führen die Symmetrien der Elektronenwellenfunktionen zu Auswahlregeln für optische Dipolübergänge. Diese sind $\Delta l = \pm 1$ und $\Delta m_j = 0, \pm 1$. l ist die Drehimpuls- und m_j die "magnetische" Quantenzahl. Um diese sehr gebräuchlichen Auswahlregeln auch auf den Anregungsprozeß beim Platin anwenden zu können, entwickeln wir die Blochspinoren o.B.d.A. nach Kugelflächenfunktionen. Da für die Symmetriebetrachtungen nur Spin- und Winkelanteil der Wellenfunktionen interessieren, wird der Radialanteil in

dieser Betrachtung weggelassen. Figur 3.1 zeigt in einem Ausschnitt aus der Bandstruktur von Platin die Δ -Richtung mit den obersten Valenzbändern und dem untersten Leitungsband. Das Leitungsband wurde, der besseren Darstellung wegen, energetisch tiefer eingezeichnet. Rechts daneben sind die Blochspinoren für die Elektronen in den verschiedenen Bändern als Linearkombination von Kugelflächenfunktionen dargestellt /16/. Die eckigen Klammern beschreiben die zu einem festen E und $\underline{k}$ gehörenden beiden Eigenzustände. Die exakte Linearkombination ist für die folgenden Betrachtung nicht wichtig. Deshalb wurden die zur entsprechenden Spinfunktion gehörenden Kugelflächenfunktionen nur in der Form einer Aufzählung dargestellt. Die Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ beziehen sich auf die z -Achse des vorne festgelegten Koordinatensystems. Es bedeutet $|\alpha\rangle$ eine Ausrichtung des Spins bezüglich der $+z$ -Richtung. Das Band, in das die Elektronen angeregt werden, sei das unterste Leitungsband. Es hat Δ_6^1 Charakter. Für die Valenzbänder kommen Δ_6^1 , Δ_6^3 und $\Delta_4^3 \Delta_5^3$ als Symmetrien vor. Der Übergang $\Delta_6^1 \rightarrow \Delta_6^1$ ist in der angenommenen Geometrie streng dipolverboten /17/. Weil dieser Übergang nicht auftritt, wurde auf die Darstellung der Wellenfunktion eines solchen Valenzbandes verzichtet. Der Lichtoperator wird durch Y_1^{-1} beschrieben. Da die Lichtausbreitung in $-z$ -Richtung erfolgt, wird damit Licht positiver Helizität repräsentiert. Die Auswahlregeln ergeben sich für diese Darstellung des Lichtoperators aus den Orthogonalitätseigenschaften der Kugelflächenfunktionen. Diese ergeben:

$$Y_{\ell}^m \xrightarrow{Y_1^{-1}} Y_{\ell \pm 1}^{m-1}$$

Es sind also von Y_{ℓ}^m unter Einwirkung des Störoperators Y_1^{-1} nur Übergänge nach $Y_{\ell \pm 1}^{m-1}$ möglich. Das ist vollkommen analog den oben zitierten Auswahlregeln aus der Atomphysik. Betrachten wird nun in Figur 3.1 den Übergang $\Delta_6^3 \rightarrow \Delta_6^1$. Wegen der Orthogonalität der Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ gibt es keinen Übergang von einem $|\alpha\rangle$ -Anfangszustand in einen $|\beta\rangle$ -Endzustand und umgekehrt. Dies gilt nur in der nichtrelativistischen Näherung für den Störoperator. Wegen der Auswahlregeln für ℓ und m findet man außerdem nur die Emission aus einem der möglichen Anfangszustände (siehe Pfeile in Figur 3.1). Beide Bedingungen zusammengekommen verursachen, daß es nur einen Endzustand der Form, wie in Gleichung (3.2) gezeigt, gibt. Daraus sieht man unmittelbar, ohne explizite Lösung der Gleichungen (3.2) - (3.6), daß man im Endzustand vollständig polarisierte Elektronen bekommt. Der Polarisations-

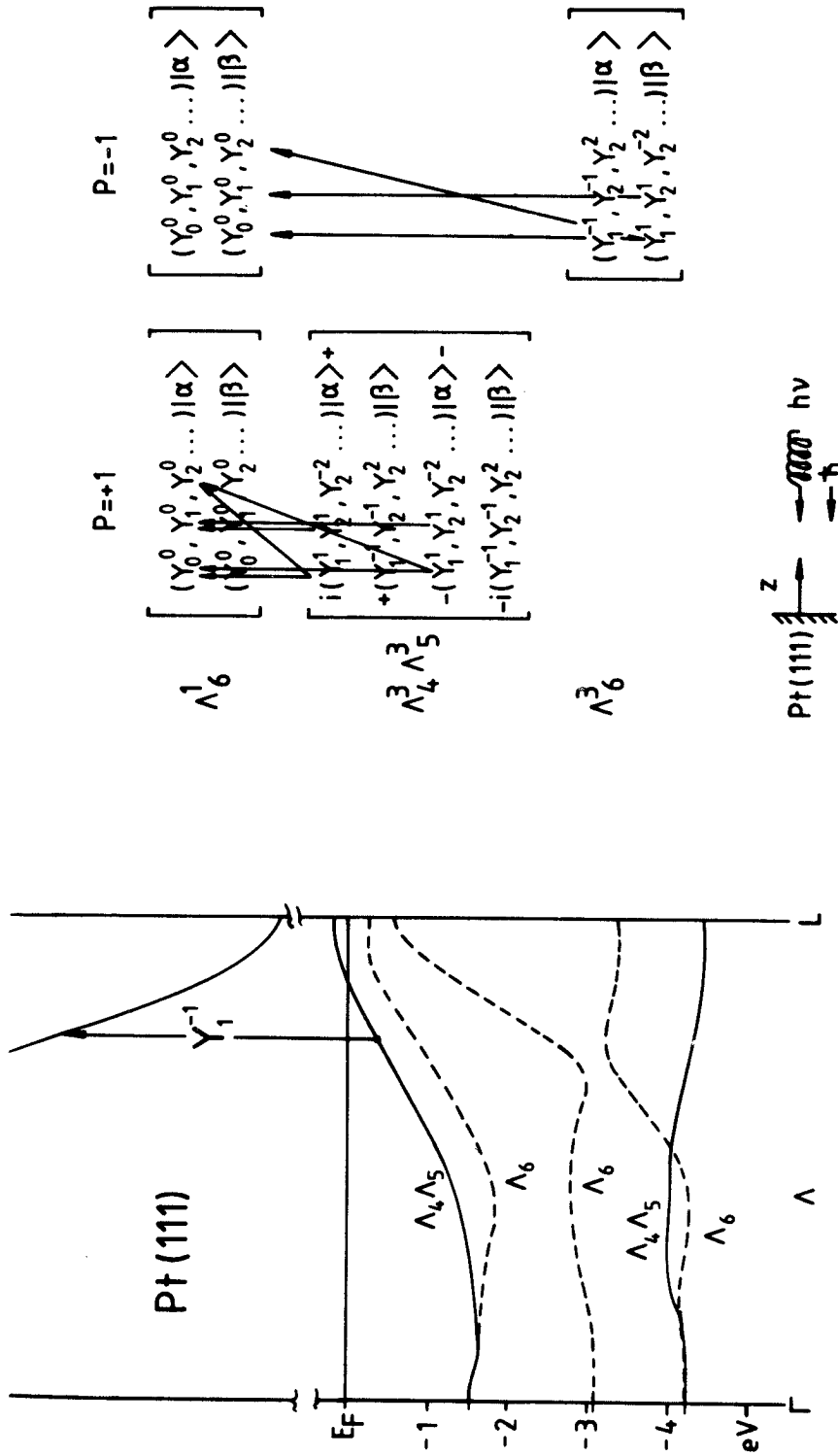


Fig. 3.1: Platin-Bandstruktur entlang der Δ -Richtung und zugehörige Wellenfunktionen für die Elektronen der verschiedenen Bänder

Die Blochspinoren sind nach Kugelflächen-Funktionen entwickelt. Es sind die Wellenfunktionen für die auftretenden Bandsymmetrien dargestellt. Die Polarisationswerte $P = \pm 1$ oberhalb der Blochspinoren gibt die aus Symmetrieüberlegungen abgeleitete Polarisation für die darunter gezeichneten Übergänge, bei der Anregung mit Licht positiver Helizität, an.

tionsvektor ist antiparallel zur Oberflächennormalen orientiert. Ähnliche Betrachtungen zeigen, daß die Anregung aus dem $\Lambda_4^3 \Lambda_5^3$ -Band mit Licht gleicher Helizität zur entgegengesetzten Polarisierung führt (siehe Figur 3.1). Obwohl man das Resultat unmittelbar aus der Darstellung erkennt, soll an diesem Übergang der Formalismus aus Gleichungen (3.2) - (3.6) demonstriert werden.

Die Orthogonalität der Spinfunktionen bedingt, daß in der Linearkombination für den Endzustand (Gleichung 3.2) nur jeweils einer der beiden Endzustände auftritt. Da die Anregung aber aus zwei Anfangszuständen möglich ist, erhält man zwei unabhängige Teilsysteme, die keine feste Phasenbeziehung (inkohärent) besitzen. Deshalb treten zwei Wellenfunktionen gemäß Gleichung (3.1) auf:

$$\phi_f^1 = i \langle A_f | Y_1^{-1} | A_i \rangle | A_{f,\alpha} \rangle = i M_A | A_{f,\alpha} \rangle$$

$$\phi_f^2 = - \langle A_f | Y_1^{-1} | A_i \rangle | A_{f,\alpha} \rangle = - M_A | A_{f,\alpha} \rangle$$

A_f, A_i repräsentieren die Linearkombinationen der Kugelflächenfunktionen

Die Dichtematrizen der beiden Zustände sind:

$$\underline{\rho}_f^1 = \begin{pmatrix} |M_A|^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \underline{\rho}_f^2 = \begin{pmatrix} |M_A|^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und somit ergibt sich für die Dichtematrix des Gesamtensembles:

$$\underline{\rho}_f = \begin{pmatrix} 2|M_A|^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Polarisationskomponenten berechnen sich nach der Gleichung (3.4).

$$p_x = \frac{\text{Sp} (\underline{\rho}_f \cdot \underline{\sigma}_x)}{\text{Sp} \underline{\rho}_f} = 0$$

$$p_y = \frac{\text{Sp} (\underline{\rho}_f \cdot \underline{\sigma}_y)}{\text{Sp} \underline{\rho}_f} = 0$$

$$p_z = \frac{\text{Sp} (\underline{\rho}_f \cdot \underline{\sigma}_z)}{\text{Sp} \underline{\rho}_f} = \frac{2|M_A|^2}{2|M_A|^2} = 1$$

mit $\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Es ergibt sich also eine vollständig polarisierte Elektronengesamtheit. Wenn die ins Leitungsband angeregten Elektronen emittiert werden, muß man im Außenraum spinpolarisierte Photoelektronen erwarten. Wie man an Hand dieser Betrachtungen gesehen hat, hängt das Vorzeichen der Polarisation von der Symmetrie des Anfangszustandes ab.

An diesem speziellen Beispiel (Fig. 3.1) kann man sich die ersten drei allgemein gültigen Aussagen, die oben zitiert wurden, verdeutlichen.

- i) Betrachten wir die Anregung mit Licht negativer Helizität. Der Lichtoperator wird durch γ_1^{+1} repräsentiert. Man erhält beispielsweise für den Übergang $\Delta_6^3 \rightarrow \Delta_6^1$ wegen der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen nur Anregung von $|\alpha\rangle$ nach $|\alpha\rangle$ (siehe Figur 3.1). Für $\Delta_4^3 \Delta_5^3$ hingegen gibt es nur mögliche Übergänge von $|\beta\rangle$ nach $|\beta\rangle$. Damit erhält man also die entgegengesetzte Polarisation, wenn man die Lichthelizität umdreht.
- ii) Liegen die Bänder dicht beieinander, so daß man sie in der Emission nicht mehr trennen kann, wird die Polarisation drastisch reduziert. Sie wird im wesentlichen durch die Größe der Aufspaltung relativ zur Energieauflösung bestimmt. Hat man keine Spin-Bahn-Wechselwirkung, oder ist sie vernachlässigbar klein, so gibt es keine Kopplung zwischen Spin- und Winkelfunktionen. In diesem Fall gehört zu beiden Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ die gleiche Linearkombination geeigneter

Ortswellenfunktionen. Bei der Anregung erhält man deshalb zwei vollkommen identische Übergänge in reine $|\alpha\rangle$ - und $|\beta\rangle$ -Endzustände. Mit Gleichung (3.3) ergibt sich deshalb immer die Gesamtpolarisation Null.

- iii) Die zu erwartende Polarisation bei der Anregung mit linearpolarisiertem Licht läßt sich leicht mit Hilfe einer geeigneten Zerlegung des Lichtoperators aus den obigen Ergebnissen ableiten. Linearpolarisiertes Licht, dessen elektrischer Feldvektor in der x,y-Ebene liegt, läßt sich als kohärente Überlagerung von rechts- und linkszirkularem Licht darstellen. Unter Anwendung von i) folgt deshalb mit Figur 3.1, daß man Übergänge in $|\alpha\rangle$ - und $|\beta\rangle$ -Spinzustände des Endbandes erwarten muß. Da die Übergangsstärken für Anregung aus einem Anfangsband gleich sind /16,18/, erhält man wieder mit Gleichung (3.3) eine verschwindende Gesamtpolarisation. Das gleiche gilt für die Anregung mit unpolarisiertem Licht.

Abschließend sei noch erwähnt, daß die Symmetrierauswahlregeln nicht an eine spezielle Wahl geeigneter Ortsbasisfunktionen gekoppelt ist. Wöhlecke und Borstel /16/ haben gezeigt, daß für die Anregung entlang hochsymmetrischer Richtungen der Brillouin-Zone rein gruppentheoretische Überlegungen zu diesen Ergebnissen führen.

3.2 Der Transmissionsprozeß

Selbst wenn man von der Anregung her keine Spinpolarisation erwarten darf, ist es nicht ausgeschlossen, in der Photoemission polarisierte Elektronen zu erhalten /8/. Diese können durch spinabhängige Beugungseffekte beim Durchgang durch die Oberfläche verursacht werden. Der zu Grunde liegende physikalische Mechanismus ist die Spin-Bahn-Wechselwirkung des gestreuten Elektrons mit dem Streuzentrum, den Atomrümpfen in der Oberfläche. Da die Stärke der Spin-Bahn-Wechselwirkung proportional zu Z [Z = Kernladungszahl des Streuzentrums] ist, erwartet man starke Polarisationseffekte durch Streuung nur bei schweren Materialien. Da die physikalische Beschreibung dieses Streuprozesses allgemein recht bekannt ist, möchte ich auf eine detailliertere Behandlung verzichten. Eine schöne Darstellung für freie Atome

findet man bei Kessler /19/. Die spinabhängigen Beugungseffekte bei der Emission ins Vakuum sind ähnlich denen bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Festkörperoberflächen /20,21/. Zur Beschreibung und Diskussion des Einflusses der Transmission auf die Polarisation soll deshalb der Streuformalismus des spinpolarisierten LEED's herangezogen werden.

Durch einen Streuprozess wird ein Elektron des Spinzustandes χ_1 in einen anderen Spinzustand χ_2 gestreut. Der Übergang wird durch eine spinabhängige Streumatrix $\underline{\underline{S}}$ beschrieben. $\underline{\underline{S}}$ ist eine 2x2 Matrix. Es gilt

$$\chi_2 = \underline{\underline{S}} \chi_1 \quad (3.7)$$

Diese Gleichung gilt für die Streuung eines einzelnen Elektrons und für die Streuung von vollständig polarisierten Elektronen. Hat man ein statistisches Gemisch von Elektronen in verschiedenen reinen Spinzuständen, so kann man die Streuung wieder vereinfachend mittels des Dichteformalismus beschreiben. Der Polarisationsvektor $\underline{P'}$ nach der Streuung läßt sich schreiben als:

$$\underline{P'} = \frac{\text{Spur} [(\underline{\underline{S}}(1+\underline{P}^0 \cdot \underline{\sigma})\underline{\underline{S}}^+) \cdot \underline{\sigma}]}{\text{Spur} (\underline{\underline{S}}(1+\underline{P}^0 \cdot \underline{\sigma})\underline{\underline{S}}^+)} \quad (3.8)$$

$\underline{P}^0$ = Polarisationsvektor vor der Streuung

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$$

Der Nenner in Gleichung (3.8) beschreibt die Intensität der Elektronengesamtheit nach der Streuung. Die Gleichung (3.8) gilt nur für den Fall der elastischen Streuung. Der Streuwinkel unter dem $\underline{P'}$ beobachtet wird, geht als Parameter in $\underline{\underline{S}}$ ein. Ebenfalls hängt $\underline{\underline{S}}$ von E_{kin} und dem Einfallswinkel ab. Die Formel (3.8) wurde zuerst für die Atomstreuung abgeleitet. $\underline{\underline{S}}$ ist dann durch die Streueigenschaften des Atoms bestimmt. Diese Gleichung läßt sich auch für die Beugung niederenergetischer Elektronen an Einkristalloberflächen verwenden. In diesem Fall fließen in $\underline{\underline{S}}$ nicht nur die Streueigenschaften des einzelnen Atoms ein, sondern die Streumatrix enthält auch

den Einfluß der Vielfachstreuung in der Oberfläche. Über diese Vielfachstreuung wird indirekt die Kristallsymmetrie des Festkörpers berücksichtigt. $\underline{S}$ läßt sich nicht analytisch angeben. Durch aufwendige Rechenverfahren, die denen konventioneller relativistischer LEED-Theorien entsprechen, wird $\underline{S}$ ermittelt. Trotz dieser Komplexität der Streumatrix, kann man aus Gleichung (3.8) einige interessante Eigenschaften ableiten. Dazu entwickeln wir die Streumatrix nach einem vollständigen System von 2x2-Matrizen. Es bieten sich die Pauli-Spinmatrizen an /22/:

$$\underline{S} = a \cdot \underline{1} + \underline{b} \cdot \underline{\sigma} \quad (3.9)$$

a = komplex

$\underline{b}$ = dreikomponentiger, komplexer Vektor

a und $\underline{b}$ sind Funktionen von E_{kin} , $\underline{k}_0$ und $\underline{k}$ für eine fest vorgegebene Kristalloberfläche. $\underline{k}_0$ entspricht dem Wellenzahlvektor des Elektrons vor der Streuung, $\underline{k}$ dem nach der Streuung.

Betrachten wir die Streuung in einer Spiegelebene. Zur Vereinfachung der Rechnung und der Übersichtlichkeit wegen wählen wir ein kartesisches Koordinatensystem mit der x-Achse in Elektronenbewegungsrichtung und der z-Achse senkrecht zur Kristallspiegelebene. Die Streumatrix muß bei Streuung in einer Spiegelebene ebenfalls spiegelsymmetrisch sein. Dies ist aber nur dann erfüllt, wenn die Komponenten von $\underline{b}$ parallel zur Spiegelebene verschwinden /22/, da sich die Spinmatrizen wie Pseudovektoren unter Spiegelung transformieren. Deshalb besitzt $\underline{S}$ folgende einfache Form:

$$\underline{S} = a \cdot \underline{1} + b_z \cdot \underline{\sigma}_z \quad b_x = b_y = 0 \quad (3.10)$$

Mit Hilfe dieser Entwicklung kann man aus Gleichung (3.8) einige wichtige Erkenntnisse über den Einfluß des Transmissionsprozesses, ohne explizite Kenntnis von $\underline{S}$, ableiten. Wir wollen einen Spezialfall, der für die spätere Diskussion der Meßergebnisse wichtig ist, betrachten. Es soll die Streuung von Elektronen, die einen innerhalb der Spiegelebene liegenden Polarisationsvektor besitzen, diskutiert werden. Der Anfangsvektor $\underline{p}^0$ besitzt also in dem von uns gewählten Koordinatensystem nur eine x- und y-Komponente:

$$\underline{p}^0 = \begin{pmatrix} p_x^0 \\ p_y^0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\underline{p}^0$ = Polarisationsvektor vor der Streuung

Daraus wird nach der Streuung, unter Verwendung der speziellen Form von $\underline{S}$ (Gleichung (3.10)) und der Gleichung (3.8):

$$\underline{p}' = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} e p_x^0 + d p_y^0 \\ e p_y^0 - d p_x^0 \\ c \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

mit

$$N = |a|^2 + |b_z|^2$$

$$e = |a|^2 - |b_z|^2$$

$$d = 2 \operatorname{Im} (a^* b_z)$$

$$c = 2 \operatorname{Re} (a b_z^*)$$

Es fällt auf, daß man nach der Streuung drei Komponenten erwarten muß. Vom Polarisationsgrad vor der Streuung hängen nur die beiden Komponenten in der Spiegelebene ab. Die auftretende Komponente senkrecht zur Spiegelebene entsteht alleine durch die spinabhängige Transmission. Sie ist unabhängig vom Polarisationsvektor vor der Streuung, wenn dieser in der Spiegelebene liegt. Der Betrag hängt von der kinetischen Energie der Photoelektronen und von ihren Wellenzahlvektoren vor und nach der Streuung ab. Der Polarisationsvektor in der Spiegelebene ändert bei der Transmission seine Richtung und seinen Betrag. Der Winkel, um den die Spiegelebenenkomponente des Polarisationsvektors nach der Streuung gegenüber $\underline{p}^0$ gedreht ist, ergibt sich aus dem Skalarprodukt von

$$\underline{p}^0 \text{ und } \underline{p}'_{\text{Sp.}} = \begin{pmatrix} p_x' \\ p_y' \\ 0 \end{pmatrix} :$$

$$\cos \alpha = \frac{\underline{p}^0 \cdot \underline{p}'_{\text{Sp.}}}{|\underline{p}^0| \cdot |\underline{p}'_{\text{Sp.}}|} = \frac{e}{\sqrt{e^2 + d^2}}$$

Der Betrag des Drehwinkels ist also unabhängig von der Anfangspolarisation. Die Größe des Drehwinkels hängt nur von den Streubedingungen ab. Den Drehsinn kann man aus dem Vektorprodukt von $\underline{p}^0$ und $\underline{p}'_{Sp}$ ermitteln. Es gilt:

$$\frac{\underline{p}^0 \times \underline{p}'_{Sp}}{|\underline{p}^0| \cdot |\underline{p}'|} = \frac{d}{\sqrt{e^2+d^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Das heißt auch der Drehsinn (Vorzeichen des Vektorprodukts) ist unabhängig von $\underline{p}^0$ und wird nur durch die Streubedingungen (E_{kin} , $\underline{k}_0$, $\underline{k}$) bestimmt. Dieses Ergebnis für die Streuung in einer Spiegelebene ist vollkommen analog zur spinpolarisierten Elektronenstreuung an freien Atomen /19/. Diese Analogie trifft aber nur für die Spiegelebene zu.

Wir wollen, hinsichtlich der Messungen an Platin, die senkrechte Emission aus einer (111)-Fläche eines kubisch flächenzentrierten Gitters betrachten. In der Normalemission liegt der Elektronenstrahl gleichzeitig in drei Spiegelebenen, die einen Winkel von 60° miteinander bilden. $\underline{S}$ muß deshalb spiegelsymmetrisch zu allen drei Ebenen sein. Diese Bedingung kann aber nur erfüllt werden, wenn b zu Null wird. Mit der Gleichung (3.8) ergibt sich dann unmittelbar: $\underline{p}' = \underline{p}^0$. Es ändert sich also in der Normalemission die Polarisation beim Durchgang durch die Oberfläche nicht. Dies ist ein sehr wichtiges Ergebnis, weil in dieser Geometrie die Spinpolarisation nur durch die Anregung verursacht wird.

Aus Beugungsexperimenten mit spinpolarisierten Elektronen ist bekannt, daß die Streuung von Elektronen entgegengesetzter Polarisation zu Intensitätsunterschieden in den gebeugten Strahlen führen kann /23/. Man bezeichnet die normierte Differenz der beiden Intensitäten als die Intensitätsasymmetrie:

$$A(\underline{p}^0) = [I(\underline{p}^0) - I(-\underline{p}^0)] / [I(\underline{p}^0) + I(-\underline{p}^0)] \quad (3.12)$$

Mit Hilfe der Formeln (3.8) und (3.9) läßt sich die Intensitätsasymmetrie auch schreiben als

$$A(\underline{p}^0) = \underline{c} \cdot \underline{p}^0 / (|\underline{a}|^2 + |\underline{b}|^2) = \underline{A} \cdot \underline{p}^0 \quad (3.13)$$

$$\underline{c} = 2 \operatorname{Re} (\underline{a} \cdot \underline{b}^*) + i (\underline{b}^* \times \underline{b})$$

$\underline{A}$ bezeichnet man als Asymmetrievektor. Man beachte, daß die beobachtete Asymmetrie neben der Anfangspolarisation auch wieder von den experimentellen Parametern E_{kin} , $\underline{k}_0$, $\underline{k}$ und der Kristallsymmetrie abhängt. Mit Gleichung (3.13) folgt:

Im allgemeinen sollte man immer eine Intensitätsasymmetrie erhalten, wenn spinpolarisierte Elektronen an einer Grenzfläche gestreut werden. Dabei ist es gleich, ob es sich um LEED- oder Photoemissionsexperimente handelt. Das bedeutet speziell für die Photoemission, daß man beim Umschalten von σ^+ - auf σ^- -Licht oder umgekehrt, verschiedene Intensitätsverteilungen erwarten muß.

Die Ausnahme bildet wieder die Normalemission und unter gewissen Bedingungen auch die Emission innerhalb einer Kristallspiegelebene. In der Normalemission hatten wir oben gezeigt, daß $\underline{b} \equiv 0$ gilt. Daraus ergibt sich, wie man mit Gleichung (3.13) leicht sieht, daß keine Intensitätsasymmetrie auftreten kann. Innerhalb einer Spiegelebene läßt sich, unter Ausnutzung von

$$\underline{b} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_z \end{pmatrix}$$

zeigen, daß die Intensitätsasymmetrie nur von der senkrecht auf der Spiegelebene stehenden Komponente abhängt. Aus (3.13) läßt sich mit

$$\underline{p}^0 = \begin{pmatrix} p_x^0 \\ p_y^0 \\ p_z^0 \end{pmatrix}$$

zeigen, daß gilt

$$A(\underline{p}^0) = \frac{C}{N} \cdot p_z^0 \quad (3.14)$$

$$C = 2 \operatorname{Re} (\underline{a} \cdot \underline{b}_z^*) ; \quad N = |\underline{a}|^2 + |b_z|^2$$

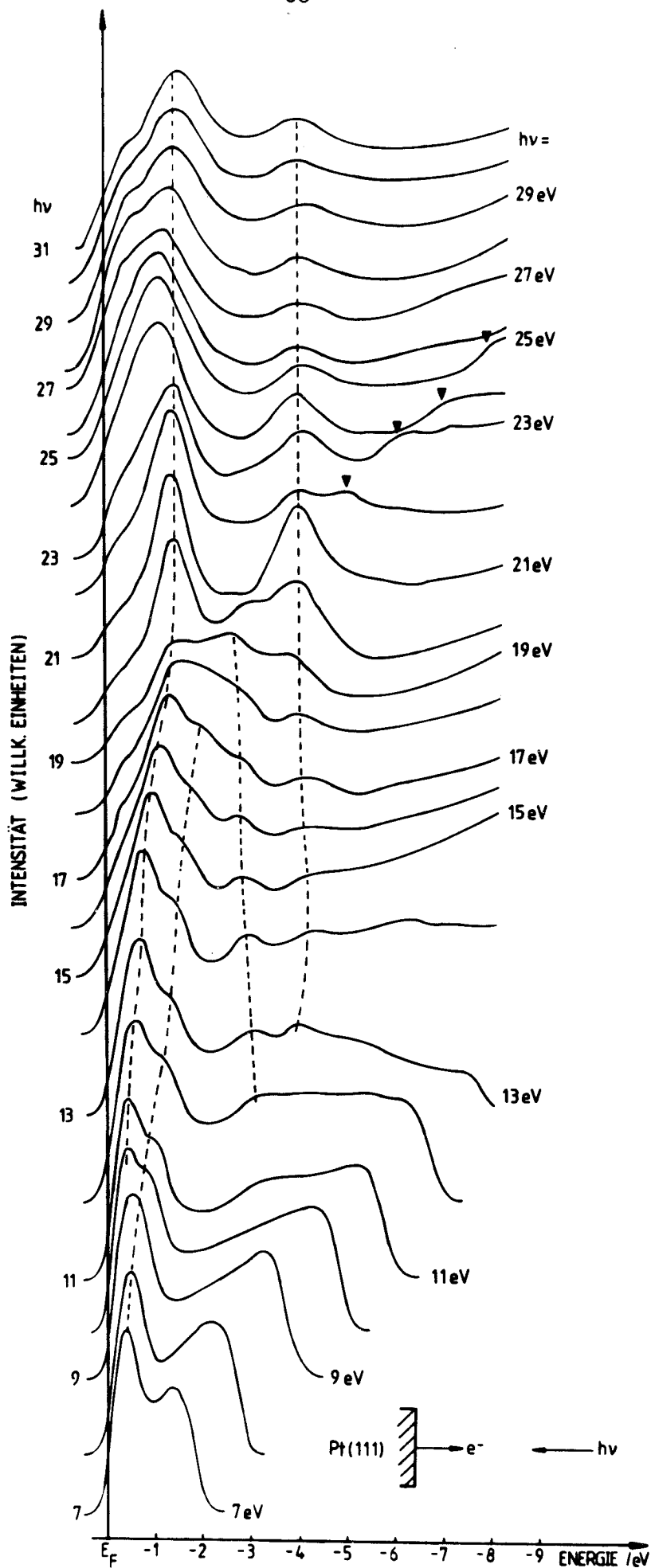
Die Intensitätsasymmetrie hängt also in diesem Fall von der Polarisationskomponente, die senkrecht auf der Spiegelebene steht, ab. Oder anders ausgedrückt, besagt Gleichung (3.14), daß der Asymmetrievektor bei der Streuung in der Spiegelebene senkrecht zu dieser Ebene steht.

Da sich die Polarisation bei der Anregung mit Licht entgegengesetzter Zirkularität umdreht (Kapitel 3.1), kann man mit Hilfe der Formel (3.14) für die Photoemission in einer Kristallspiegelebene folgende Aussage gewinnen.

Durch Messungen von Intensitätsverteilungen für σ^+ - und σ^- -Licht kann man überprüfen, ob durch den Anregungsprozeß eine Senkrechtkomponente (zur Spiegelebene) vorhanden ist. Findet man für verschiedene Photonenenergien keine Intensitätsasymmetrie, so kann man damit die Aussage 4 des Kapitels 3.1 über die Lage des Spinpolarisationsvektors bei der Anregung innerhalb einer Spiegelebene bestätigen. Umgekehrt gestattet das Verschwinden von Intensitätsasymmetrien das Auffinden von Spiegelebenen, unter der Voraussetzung der Gültigkeit von Aussage 4 in Kapitel 3.1).

Zusammenfassend ergibt sich für den Einfluß der Transmission auf die Spinpolarisation der Photoelektronen

1. In der Normalemission beeinflußt die Transmission die photoemittierten Elektronen hinsichtlich ihrer Polarisation nicht.
2. Bei allen davon abweichenden Geometrien darf die Transmission nicht vernachlässigt werden.
3. Die Transmission kann neben einer Änderung des Polarisationsvektors auch die Intensitätsverteilung beeinflussen.



4. Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse unserer Messungen am Pt(111) vorgestellt und im Rahmen der theoretischen Konzepte des vorherigen Kapitels diskutiert. Im Abschnitt 4.1 werden die winkel- und energieaufgelösten Intensitätsmessungen der Normalemission besprochen und mit Platin-Bandstruktur-Berechnungen verglichen. Im darauffolgenden Abschnitt wird die Spinpolarisation der Photoelektronen für senkrechte Emission behandelt. Im Teil 4.3 betrachten wir detaillierter die Photoemission unter schrägem Abgriff in einer Spiegelebene des Kristalls an Hand von Intensitäts- und Polarisationsmessungen. Schließlich, im letzten Teil, werden wir ein Beispiel diskutieren, bei dem der Spin der Elektronen auf die Intensitätsverteilung Einfluß nimmt.

4.1 Intensitätsverteilungen der Photoelektronen in Normalemission

Wir haben die Intensitätsverteilung der Photoelektronen für Photonenenergien von 7 eV bis 31 eV gemessen. Die Ergebnisse findet man in Fig. 4.1. In dieser Darstellung sind die Intensitätsverteilungen über der Anfangsenergie der Photoelektronen aufgetragen. Die Verteilungskurven sind auf ihr jeweiliges Maximum normiert. Die Lage der Fermienergie wurde durch Differentiation der Spektren ermittelt. Sie wurde an der Stellung der größten Steigung in der hochenergetischen Flanke festgelegt. Die Abweichung der Einzelwerte für die Fermienergie vom Mittelwert, der aus allen Werten berechnet wurde, war kleiner 0,15 eV, also deutlich besser als die Energieauflösung des Spektrometers (~ 400 meV in den Intensitätsverteilungsmessungen).

Fig. 4.1: Intensitätsverteilungskurven in Normalemission für Photonenenergien zwischen 7 und 31 eV bei senkrechtem Lichteinfall

Die Anregung erfolgte mit zirkularpolarisierter Synchrotronstrahlung. Die Verteilungskurven sind auf ihr jeweiliges Maximum normiert. Es wurden entsprechende Maxima bei verschiedenen Photonenenergien verbunden (gestrichelte Linien). Die Abszisse gibt die Anfangsenergie bezogen auf das Fermi-Niveau an ($E_F = 0$). Die Markierungen beziehen sich auf die Diskussion im Text.

Den Maxima der Intensitätsverteilungen werden direkte Übergänge aus verschiedenen Anfangsbändern zugeordnet. Diese Annahme berücksichtigt die Energieerhaltung (siehe Gleichung 3.1) und die Erhaltung des Wellenzahlvektors. Damit erhält man aus der Auftragung der Figur 4.1 über die Lage der Maxima die energetischen Abstände der Valenzbänder von der Fermienergie für die verschiedenen Anregungsenergien. Der Anregungsort im $\underline{k}$ -Raum kann nicht exakt angegeben werden, da bei der Emission ins Vakuum eine Unstetigkeit in der Senkrechtkomponente des Wellenzahlvektors auftritt (senkrecht zur Oberfläche). Diese Unstetigkeit verbietet den Rückschluß, vom außen bestimmten Elektronenimpuls, auf den $\underline{k}$ -Vektor des emittierten Elektrons im Innenraum. Nur durch aufwendige experimentelle Methoden kann man Übergänge im $\underline{k}$ -Raum exakt lokalisieren. Einige dieser Methoden werden ausführlich in Übersichtsartikeln von Himpsel /1,2/ und Plummer und Eberhardt /3/ behandelt.

Wir haben zur Lokalisierung der Übergänge im $\underline{k}$ -Raum eine häufig verwendete semiempirische Methode gewählt. Diese geht von einem existierenden Endband aus und legt den Übergang an der Stelle fest, wo der Abstand zwischen Valenzband und angenommenem Leitungsband gerade der eingestrahlten Photonenenergie entspricht. Man nimmt bei Metallen meist als Endband parabelförmige, "freie Elektronen"-ähnliche Bänder an. Man paßt ein solches Band dem untersten Leitungsband, das aus Bandstrukturberechnungen übernommen wird, an. Dieser Ansatz führt meist zu guter Übereinstimmung zwischen experimentell bestimmter und berechneter Valenzbanddispersion. Physikalisch ist die Annahme eines parabelförmigen Endbandes folgendermaßen zu verstehen:

Der Zustand, in dem sich das Elektron nach der Anregung befindet, ist kein stationärer Zustand, was das Dreistufenmodell implizit voraussetzt. Das angeregte Elektron besitzt nur eine endliche Lebensdauer und verliert durch inelastische Wechselwirkung mit dem Festkörper Energie. Die Wahrscheinlichkeit für einen Verlustprozeß steigt mit zunehmender Energie. Sie wird maximal bei Elektronenenergien zwischen 50 eV und 100 eV /4/. Verläßt man das einfache Bild des Dreistufenmodells und erfaßt die inelastische Streuung durch die Einführung von komplexen Wellenzahlvektoren für die Blochspinoren des Endzustandes, so gelangt man zu einem Zweistufenmodell der Photoemission, bei dem die Anregung und der Transport zur Oberfläche zusammengefaßt wird. Die Auswirkung einer solchen realistischeren Annahme auf die Leitungsbänder haben kürzlich Hora und Scheffler für die Δ -Richtung bei Palla-

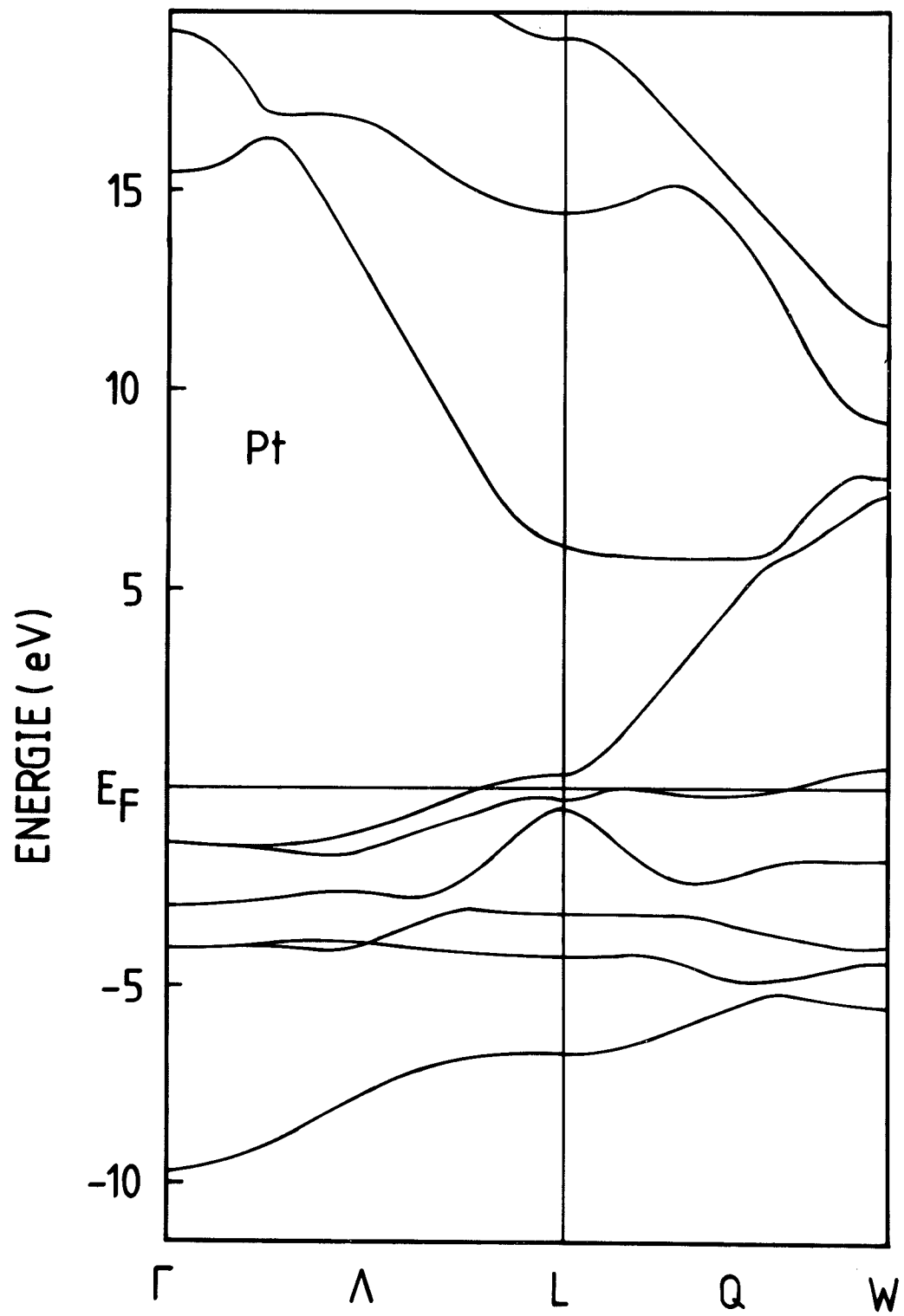


Fig. 4.2: Platin-Bandstrukturausschnitt nach /6/

dium berechnet /5/. Die Rechnungen zeigen, daß die Dispersion der Leitungs-
bänder stark gegenüber der Grundzustandsbandstruktur geändert werden. Als
wesentliches Ergebnis erhalten sie, daß für die Photoemission nur ein Lei-
tungsband relevant ist. Dieses Endband ist parabelförmig und zeigt bei
kleinen Energien einen ähnlichen Verlauf wie das Grundzustandsleitungsband.
Große Abweichungen von den Grundzustandsleitungsbandern findet man bei ho-
hen Energien, wo die Wahrscheinlichkeit für inelastische Wechselwirkung
größer wird. Das Ergebnis der Rechnung kann man recht anschaulich erklären.
Mit zunehmender Wahrscheinlichkeit für inelastische Prozesse wird die mitt-
lere freie Weglänge sehr klein. Bei Energien von 20 eV (-100 eV) ist sie
typisch von der Größenordnung der Gitterkonstanten /4/. Die Elektronen, die
ohne Energieverlust zur Emission gelangen, merken kaum noch etwas von der
Periodizität des Festkörpers. Die Aufspaltung der Bänder, die durch die Be-
wegung des Elektrons im unendlich ausgedehnten periodischen Potential ver-
ursacht wird, wird aufgehoben. Der Endzustand wird wieder ähnlich dem Zu-
stand eines freien Elektrons.

Wir haben ebenfalls eine Parabel an das unterste Leitungsband der berechne-
ten Bandstruktur /6/, unter Verwendung der Methode der kleinsten Quadrate,
angepaßt. Für diese Näherung wurde der Verlauf des Bandes im mittleren Be-
reich der Δ -Richtung, da wo die Aufspaltung der Bänder durch die Zonenrän-
der noch nicht auftritt, gewählt (siehe Fig. 4.2). Die erhaltene "freie
Elektronen"-Parabel wird durch die effektive Masse $m_{\text{eff}}^* = 1,135 m_e$ und dem
Scheitelpunkt der Parabel (das innere Potential) $V_0 = -1,5$ eV (bezogen auf
die Fermienergie) bestimmt.

Mit Hilfe dieses Endbands und den experimentell bestimmten Energien des An-
fangszustands läßt sich jeder Übergang unter Berücksichtigung der Energie-
(Gleichung 3.1) und $\underline{k}$ -Erhaltung eindeutig im $\underline{k}$ -Raum lokalisieren. Den auf
diese Art erhaltenen Verlauf der Valenzbänder haben wir in Fig. 4.3 im ent-
sprechenden Bandstrukturausschnitt eingetragen. Die Kreuze zeigen das expe-
rimentelle Ergebnis, die durchgezogenen Linien die von Borstel berechnete
Bandstruktur. Mit Hilfe der in Fig. 4.3 angegebenen Photonenenergien kann
man die Kreuze den Maxima der Spektren in Fig. 4.1 zuordnen. Zur Vereinfachung
der weiteren Diskussion nummerieren wir die Bänder, gemäß ihrem
Schnittpunkten mit der Energieachse am L-Punkt, mit steigender Energie von
1 bis 6 (siehe Fig. 4.3).

Pt

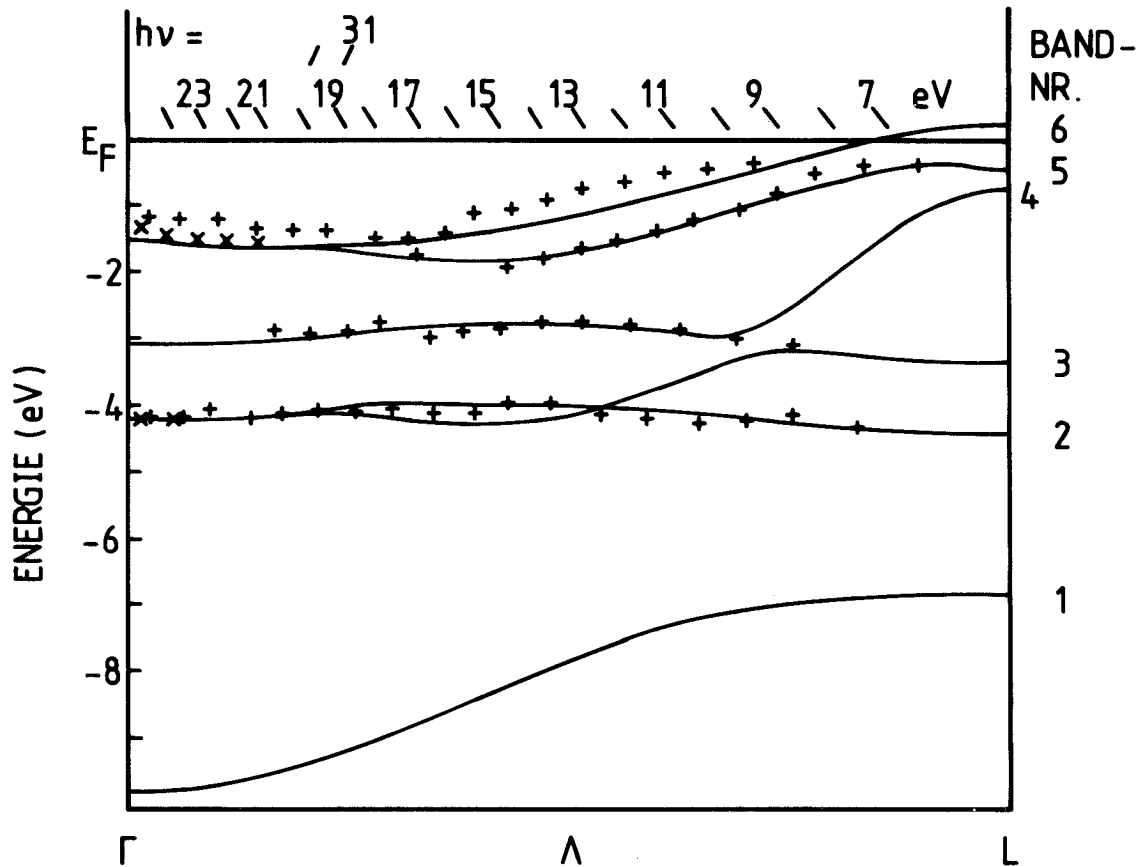


Fig. 4.3: Vergleich von berechneter Bandstruktur /6/ mit experimentellen Werten (Kreuze)

Die durch "+" gekennzeichneten Werte entsprechen direkten Übergängen in der zweiten Brillouin-Zone. Die "x" geben die ermittelte Valenzbanddispersion beim direkten Übergang in der dritten Brillouin-Zone an. Auf der rechten Seite sind die Bänder von unten nach oben durchnummeriert. Die Striche bei den Photonenenergien oberhalb der Fermienergie erlauben die Zuordnung der eingetragenen Werte zu den Spektren in Fig. 4.1.

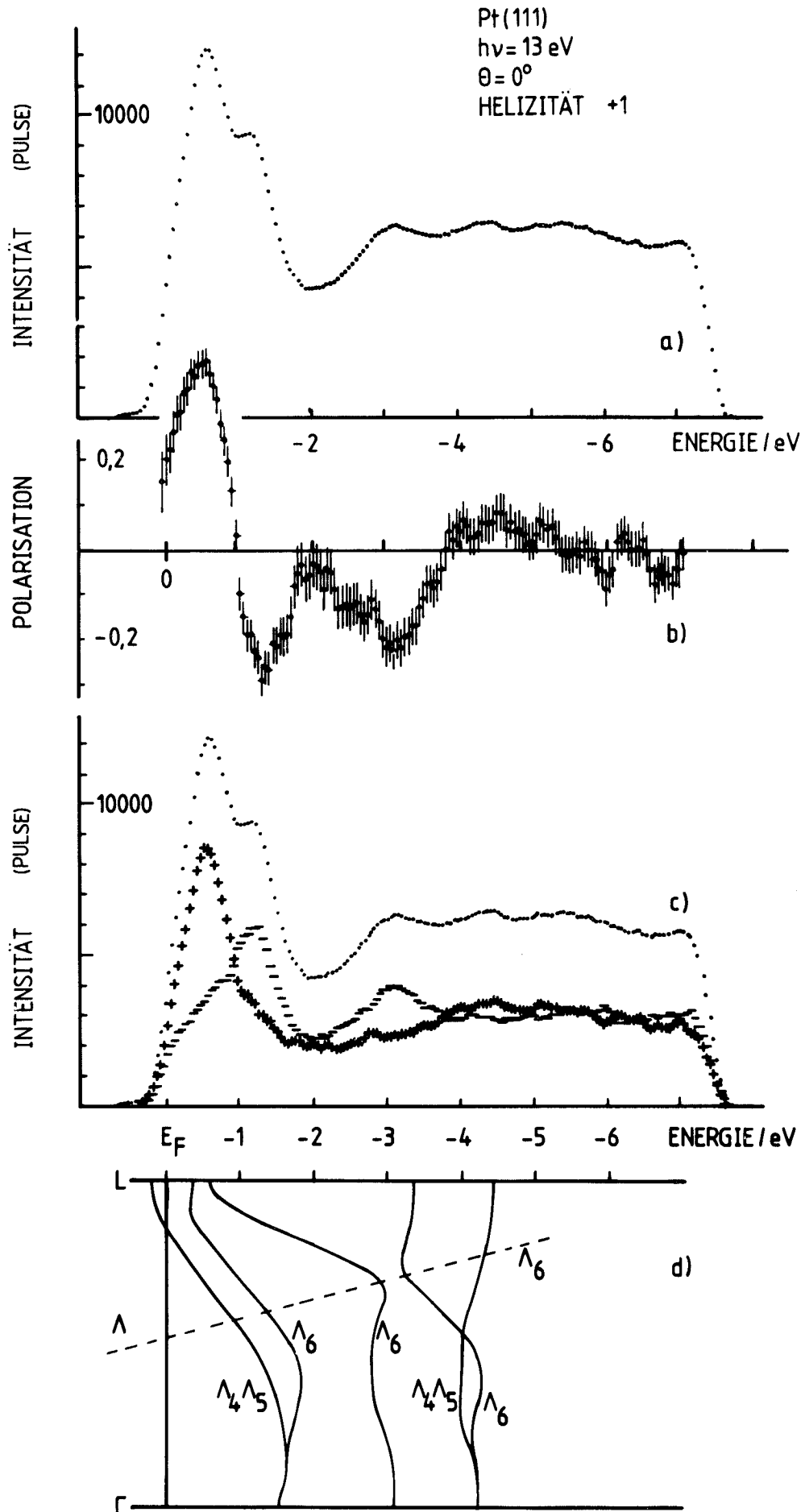
Man sieht, daß Experiment und Theorie gut übereinstimmen. Auffällig ist, daß es keine Übergänge aus dem untersten Valenzband (Band 1) oder aus bestimmten Bereichen der Bänder 3 und 4 gibt. Der Grund dafür ist, daß gewisse Übergänge streng dipolverboten sind. Das Band 1 und das Endband haben beide Λ_6^1 -Charakter. Die Anregung aus einem Λ_6^1 -Band in ein Band derselben Symmetrie ist, wie in Kapitel 3.1 erwähnt, verboten. Deshalb findet man keine Emission aus Band 1. Ähnliches gilt für entsprechende Bereiche der Bänder 3 und 4. Band 3 und 4 besitzen gleiche Symmetrie, Λ_6 , weshalb sie sich nicht kreuzen dürfen /7/. Es entsteht durch Hybridisierung ein Abstoßungspunkt. Im Bereich um diesen Punkt ändern sich die Ortswellenfunktionen der beiden Bänder stetig bei gleichbleibender Gesamtsymmetrie. So besitzt das 4. Band im Bereich zwischen Γ und dem Hybridisierungspunkt Λ_6^3 -Charakter. Es ändert seine Symmetrie in der Nähe des Abstoßungspunktes und geht stetig bei Fortschreiten in Richtung L-Punkt in ein Λ_6^1 -Band über. Umgekehrt verhält es sich mit Band 3, das von Λ_6^1 nach Λ_6^3 übergeht. Da der Übergang $\Lambda_6^1 \rightarrow \Lambda_6^1$ verboten ist, findet man keine Anregung vom 3. Band zwischen Γ und dem Abstoßungspunkt, respektive keinen Übergang aus Band 4 im k -Bereich zwischen diesem Punkt und L. Beim Band 4 vermißt man außerdem noch die Übergänge in der Nähe des Γ -Punktes. Aus Symmetriegründen sollten Übergänge auftreten. Das Fehlen dieses direkten Übergangs wird durch eine verschwindend kleine Übergangswahrscheinlichkeit verursacht. Ein Vorgriff sei an dieser Stelle erlaubt. Die Emission aus diesem Band in der Nähe des Γ -Punktes kann man in der Polarisationsmessung, trotz des kleinen Matrixelements, identifizieren (siehe z.B. Polarisationsmessung für $h\nu = 24$ eV in /6/).

Betrachten wir nochmals Fig. 4.1. Neben den Maxima, die man direkten Übergängen zuordnen kann, fallen noch weitere Strukturen auf. Die Spektren für $h\nu = 22$ eV - 25 eV zeigen im Bereich der inelastisch gestreuten Elektronen weitere Strukturen, die in Fig. 4.1 durch Dreiecke gekennzeichnet sind. Diese Strukturen treten bei einer festen kinetischen Energie der Photoelektronen auf. Man muß sie deshalb einer festen Endzustandsenergie zuordnen. Aus den Spektren berechnet sich diese Energie zu ~ 17 eV bezogen auf das Fermi-niveau. Sehen wir uns die Grundzustandsbandstruktur von Pt in der Δ -Richtung an, Fig. 4.2, so findet man bei ~ 17 eV oberhalb E_F im zweiten Leitungsband einen waagerechten Bandverlauf. Dieser verursacht eine hohe Zustandsdichte bei 17 eV im Bereich der unbesetzten Bänder. Diese spiegelt

sich in einem Intensitätszuwachs für die inelastisch gestreuten Elektronen wider. In dieser Interpretation stimmen wir mit Himpsel und Eastman /8/ überein, die ähnliches bei der Photoemission an Pd(111) fanden. Auch Mills et al. /9/ fanden diese Strukturen in ihren Spektren von Pt(111) (Fig. 3 in /9/), diskutierten diese aber nicht.

Bei der Fermienergie erkennt man in den meisten Spektren, besonders deutlich bei Photonenenergien zwischen $h\nu = 16 \text{ eV} - 23 \text{ eV}$, eine Schulter. Diese Struktur kann nicht durch Anregungen entlang der Λ -Richtung des Platins erklärt werden. Es handelt sich hierbei offensichtlich um Anteile aus Bereichen hoher Zustandsdichte der besetzten Bänder. Daß diese Elektronen in der Normalemission beobachtet werden, kann zwei Ursachen haben. Zum Ersten können indirekte Übergänge zu Endzuständen in der Λ -Richtung führen, zum Zweiten kann, wegen der endlichen Winkelauflösung, der Anteil direkter Übergänge aus anderen Bereichen der Brillouinzone erfaßt werden. Wie Berechnungen zur Winkelauflösung zeigen /10/, erhält man im Spektrum die größten Intensitäten bei Winkeln, die wenig unterhalb des maximalen Erhebungswinkels liegen. Deshalb ist es plausibel, wenn man starke Anteile aus der Q-Richtung mit hoher Zustandsdichte an der Fermi-Kante (siehe Fig. 4.2) in der senkrechten Emission bei endlicher Winkelauflösung erwarten muß. Wie stark dieser Anteil über die gesamte Intensitätsverteilung ist, kann nicht angegeben werden. Der Untergrund führt aber zu einer Verfälschung des Spektrums, wenn die Stärken eines direkten Übergangs von gleicher Größenordnung wie der Untergrund wird. Diesen Fall findet man am Anfang der Spektren von $h\nu = 24 \text{ eV} - 26 \text{ eV}$ (Fig. 4.1). Hier führt dies zu einer Verschiebung des ersten Maximums in Richtung Fermienergie.

Nachtrag: Eine kürzlich erhaltene, selbstkonsistente Bandstrukturrechnung von Fritsche /22/ zeigt leichte Abweichungen von der hier verwendeten Bandstruktur (nicht selbstkonsistent). Wesentliche Unterschiede findet man beim Band 6. In der Bandstruktur nach Fritsche liegt dieses Band im Mittel etwa um 150 meV höher. Damit zeigt sich, daß die geringe Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie bezüglich des 6. Bandes in Fig. 4.3 im wesentlichen durch die Bandstrukturrechnung zu erklären ist. Die anderen Valenzbänder sind, in dem von uns erfaßten k-Bereich, bei beiden Rechnungen fast identisch. Die Abweichungen liegen in der Größenordnung von einigen 10 meV.



4.2 Spinpolarisation der Photoelektronen in Normalemission

Wie schon in Kapitel 3 erwähnt, wird die Polarisation der Photoelektronen aus einem unmagnetischen Kristall in Normalemission durch den Anregungsprozeß bestimmt. Die Vorhersage von Wöhlecke und Borstel /11/ wurde für die Emission aus der (111)-Oberfläche beim Platin für Potonenenergien zwischen 7 eV und 24 eV überprüft /6/. Eine typische Messung soll hier im Detail diskutiert werden. Wir betrachten die Ergebnisse für die Anregung mit zirkular polarisiertem Licht von 13 eV. Das Licht fällt senkrecht auf den Kristall, wodurch Änderungen der Lichtpolarisation beim Eintritt in den Festkörper auszuschließen sind. Das Resultat der Messung ist in Fig. 4.4 dargestellt. Im obersten Diagramm sieht man die Intensitätsverteilung, wie wir sie schon in Kapitel 4.1 gesehen haben. Die Energieauflösung wurde bei den Polarisationsmessungen durch Herabsetzen der Durchlaßenergie des Energieanalysators verbessert. Deshalb sind im Vergleich zum vorherigen Abschnitt die Strukturen in der Verteilung besser aufgelöst. Die angegebene Pulszahl ist das arithmetische Mittel aus den beiden zur Polarisationsbestimmung verwendeten Beugungsreflexen.

Darunter ist für den gleichen Elektronenenergiebereich der gemessene Polarisationsgrad bezüglich der Oberflächennormalen aufgetragen. Positive Spinpolarisation bedeutet, daß der Polarisationsvektor von der Oberfläche wegzeigt. Die Fehlerbalken geben den einfachen statistischen Fehler an. Wie man sieht, zeigt die Polarisationsverteilung eine starke Energieabhängigkeit. Im wesentlichen fallen die Strukturen mit Maxima in der Intensitätsverteilung zusammen. Ausgenommen davon ist die Struktur zwischen -2 eV und -3 eV, die wir später genau diskutieren werden. Aus der gemessenen Intensitäts- und Polarisationsverteilung haben wir die spinaufgelösten Intensitäten entsprechend den Formeln

Fig. 4.4: Intensitäts- (a) und Polarisationsverteilung (b) der Photoelektronen in Normalemission

Teilbild c) zeigt die spinaufgelösten Intensitäten, die aus den Messungen (a) und (b) berechnet wurden. "+" bedeutet, daß der Polarisationsvektor parallel ("-") antiparallel) zur Oberflächennormalen orientiert ist. Die gepunktete Kurve gibt nochmals die Gesamtintensität, wie in Teilbild (a), wieder. Teilbild (d) zeigt den entsprechenden Ausschnitt aus der Platinbandstruktur. Die Fehlerbalken in der Polarisationskurve geben den einfachen statistischen Fehler der Messung an.

$$I_+ = \frac{I_{\text{ges.}}}{2} (1+p)$$

$$I_- = \frac{I_{\text{ges.}}}{2} (1-p)$$

$I_{\text{ges.}}$ = Gesamtintensität

berechnet. Diese sind im dritten Teilbild der Figur 4.4 aufgetragen. Sie zeigen, wie die Intensitätsverteilung aussähe, wenn nur Elektronen einer der beiden Spineinstellungen zur Emission gelangen würden. Insbesondere verdeutlichen diese Kurven, wie selektiv nur ganz bestimmte Übergänge Beiträge zur Emission von positiv (oder negativ) polarisierten Photoelektronen liefert. Dies demonstriert sehr deutlich die Gültigkeit von Auswahlregeln, wie sie in Kapitel 3.1 für die Anregung mit zirkular polarisiertem Licht dargelegt wurde.

Im untersten Teilbild der Figur 4.4 findet sich der entsprechende Ausschnitt aus der Bandstruktur. Es sind nur die Valenzbänder entlang Λ dargestellt. Um die Diskussion der Meßergebnisse innerhalb der Bandstruktur zu vereinfachen, wurde das Endzustandsband ebenfalls eingezeichnet. Es wurde um den Betrag der Photonenenergie zu tieferen Energien hin verschoben. Die Schnittpunkte dieses Bandes mit den Valenzbändern entspricht den Stellen, aus denen ein direkter Übergang mit Photonen von 13 eV möglich ist.

Im Vergleich der spinaufgelösten Intensitätsverteilungen (Fig. 4.4.c) mit der Bandstruktur im unteren Teilbild, kann man sofort die Symmetrie der Bänder angeben. Da das s-artige Endband Λ_6^1 -Charakter besitzt, kann man unmittelbar die Ergebnisse aus Kapitel 3.1 heranziehen. Es ergibt sich für die durch Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgespaltenen Bänder 5 und 6, daß das Band 6 $\Lambda_4^3 \Lambda_5^3$ -Charakter besitzt und das Band 5 Λ_6^3 -Symmetrie hat. Die gleichen Überlegungen führen zur Bestimmung der Symmetrien der anderen Bänder. Die Ergebnisse sind in dem Bandstrukturauszug im unteren Teilbild von Fig. 4.4 zu finden. Es sind nur die Doppelgruppenbezeichnungen eingetragen, da sich entlang eines Bandes die Ortssymmetrie ändern kann (siehe Kap. 4.1 und Diskussion weiter unten).

Somit kann man zusammenfassen, daß die Messungen die theoretischen Symmetriebetrachtungen qualitativ bestätigen. Von einer quantitativen Übereinstimmung läßt sich, wegen der Diskrepanz im vorhergesagten und experimentell bestimmten Polarisationsgrad, noch nicht sprechen. Es konnte in keiner der durchgeführten Messungen ein Polarisationswert oberhalb 55 % gefunden werden. Die zu geringe Polarisation im Experiment kann durch das Zusammenwirken zweier Effekte erklärt werden. Der erste Grund für die Reduktion liegt in der endlichen Winkelauflösung von $\pm 5^\circ$. Wie Simulationsrechnungen von Borstel /23/ zeigen, wird die Polarisation, durch die Erfassung von Elektronen außerhalb der Normalemission, auf Werte um 70 % reduziert. Dabei wurde ein Akzeptanzwinkel von $\pm 5^\circ$ angenommen. Der zweite Grund ist ein, vermutlich unpolarisierter, Untergrund, der auch schon in Kapitel 4.1 angesprochen wurde. Eine genauere Betrachtung des Verlaufs der Polarisationsverteilung bestätigt dies. Ein Indiz ist der Anstieg der Polarisation von der Fermikante bis zum ersten Intensitätsmaximum (Bild 4.4.b). Dies kann man sich leicht durch Umformen der Gleichung (3.3) veranschaulichen. Betrachtet man den Übergang aus Band 6, so gilt mit Gleichung (3.3):

$$\underline{P} = \sum_{\mu} g_{\mu} \underline{P}^{\mu} = g_6 \underline{P}_6 \quad (4.1)$$

$\underline{P}_6$ = Polarisation, die durch den Übergang von Band 6 in das betrachtete Endband bedingt ist.

Der Wichtungsfaktor war definiert als der Quotient aus der Intensität des speziell betrachteten Übergangs, hier aus Band 6, zur gesamten Intensität:

$$g_6 = \frac{I_6}{I_{\text{ges}}} = \frac{I_6}{I_6 + I_{\text{unt.}}} \quad (4.2)$$

$I_{\text{unt.}}$ = Intensitätsanteil, der nicht durch Anregung aus Band 6 verursacht ist

Damit ergibt sich für die Polarisation

$$\underline{P} = \underline{P}_6 \cdot \frac{1}{1 + \frac{I_{\text{unt.}}}{I_6}} \quad (4.3)$$

Wird beispielsweise die Intensität zwischen Fermienergie und erstem Maximum nur durch die Übergangsrate aus Band 6 bestimmt, so ist $I_{\text{unt.}} = 0$ zu setzen. Das bedeutet mit Gleichung (4.3), daß in diesem Bereich konstante Polarisation zu erwarten ist. Existiert aber ein konstanter Untergrund, dem der direkte Übergang überlagert ist, so sollte sich nach Gleichung (4.3) in der Polarisationsverteilung das Verhältnis der Stärken von unpolarisiertem und polarisiertem Anteil widerspiegeln. Es wird sich ein Maximum des Polarisationswertes beim Intensitätsmaximum ergeben. Genau das findet man beim ersten Maximum der Intensitätsverteilung in Fig. 4.4. Es weist deshalb auch die Polarisationskurve unserer Meinung nach auf einen nicht unerheblichen Untergrund hin.

Abschließend soll noch ein weiteres interessantes Ergebnis der Polarisationskurve diskutiert werden, nämlich das schon oben erwähnte dritte Polarisationsextremum. Während die ersten beiden Strukturen eine scharf ausgebildete, relativ schmale Form besitzen, ist dieses Extremum sehr breit. Bei genauerem Betrachten erkennt man, daß es aus zwei Strukturen besteht. Sieht man sich die zugehörige Anregungsstelle in der Bandstruktur an, so stellt man fest, daß der Anfangszustand beim Hybridisierungspunkt der Bänder 3 und 4 liegt. Diese Tatsache erklärt die Polarisationsstruktur. In der Polarisationsverteilung sieht man die Anregung aus beiden Bändern. Die Intensitätsverteilung hingegen zeigt nur ein Maximum, obwohl die Strukturen weit genug auseinander liegen, um vom Spektrometer aufgelöst werden zu können. Wie schon im Kapitel 4.1 erwähnt wurde, besitzt jeweils eines der Bänder Λ_6^1 -Charakter und darf deshalb in der Photoemission dieser experimentellen Anordnung nicht auftreten (Kapitel 3.1). Nur im Bereich des Abstoßungspunktes sollte man eine Mischung der Ortsymmetrien aus Stetigkeitsgründen finden. Lassen sich nun bei der Anregung aus dem Bereich des Hybridisierungspunktes Anteile aus beiden Bändern finden, so zeigt das die Existenz von Λ_6^3 -Ortsanteilen in beiden Bändern an. Damit beweist unsere Polarisationsmessung indirekt die Behauptung der Mischung von Λ_1 - und Λ_3 -Ortssymmetrien in den Bändern 3 und 4 am Hybridisierungspunkt. Geht man, durch Wahl anderer Photonenenergien, in der Anregung von diesem Punkt der Λ -Richtung weg, so sieht man jeweils nur eines der beiden Bänder in der spinpolarisierten Photoemission. Bei einer Photonenenergie von 11 eV findet man beispielsweise keine Emission aus dem 4. Band /10/ und bei $h\nu \geq 15$ eV keine Anteile aus dem Band 3 /12/. (Anmerkung: Bei der Anregung mit $h\nu = 11$ eV kann man in

der spinpolarisierten Photoemission die direkten Übergänge aus Band 2 und 3 auflösen /10/. In der reinen Intensitätsverteilung (Fig. 4.1) sind sie nicht eindeutig im niederenergetischen Teil des Spektrums zu identifizieren. Deshalb fehlen diese Übergänge auch in Fig. 4.3.)

Das letzte Beispiel verdeutlicht, daß die Polarisierung besser für die Untersuchung von kritischen Stellen der Bandstruktur geeignet ist, als herkömmliche Intensitätsverteilungsmessungen. Sie kann unter Umständen auch Übergänge mit sehr kleinen Übergangsraten eindeutig auflösen.

Da die Polarisierung bei der Anregung in ein festes Endband durch die Symmetrie des Anfangsbandes bestimmt wird, gestattet sie den Verlauf verschiedener Valenzbänder entlang einer Hauptrichtung der Brillouin-Zone zu verfolgen. Dies wird dann besonders interessant, wenn man Kreuzungspunkte von Bändern, die verschiedene Polarisierung der photoemittierten Elektronen bedingen, untersucht.

4.3 Spinpolarisierte Photoemission in einer Kristallspiegelebene von Pt(111)

In diesem Kapitel werden die ersten Messungen zur spinpolarisierten Photoemission vorgestellt, die sich mit der Emission außerhalb einer hoch symmetrischen Kristallrichtung beschäftigen. Wir beschränken uns auf die Photoemissionsuntersuchungen innerhalb einer Kristallspiegelebene, da in diesem Fall die Transmissionseffekte relativ einfach und überschaubar sind (siehe Kapitel 3.2). Dadurch wird es möglich, Anregung und Transmission qualitativ zu trennen und einige Aussagen über die zu untersuchende Bandstruktur zu gewinnen.

Im folgenden wird zuerst einmal die Verbindung zwischen Experiment und dem dadurch erfaßten Bereich des k -Raums hergestellt. In Kapitel 4.3.1 werden die Intensitätsverteilung und die Polarisationskomponenten innerhalb der Spiegelebene behandelt. Es werden an einigen ausgewählten Beispielen die Vorteile der spinpolarisierten Photoemission aufgezeigt. Als nächstes (Kapitel 4.3.2) werden wir dann die Polarisationsvektoren betrachten und qualitativ den Einfluß von Anregungs- und Transmissionseffekt diskutieren. In

Kapitel 4.3.3 schließlich wird ein Interpretationsansatz für die Messungen, der sich auf den Anregungsprozeß bezieht, gegeben.

Die Photoelektronen wurden, bei senkrechtem Lichteinfall, unter zwei verschiedenen Winkeln relativ zur Oberflächennormalen analysiert. Die Winkel waren 28° und 44° . 28° war der kleinste apparativ mögliche Winkel. Der Emissionswinkel von 44° wurde willkürlich festgelegt. Die Photonenenergie wurde zwischen 10 eV und 14 eV variiert. Die von Lichtausbreitungs- und Elektronenbeobachtungsrichtung aufgespannte Ebene war identisch mit einer Kristallspiegelebene. Im Speziellen wurden Übergänge in der TLUX-Spiegel-ebene erfaßt. Wegen der Unstetigkeit in $k_\perp$ haben wir wieder, wie in Kapitel 4.1, durch Annahme einer Endzustandsparabel die Lokalisierung der Übergänge vorgenommen. Wir haben eine Parabel mit dem gleichen Werten für effektive Masse und inneres Potential wie in der Normalemission angenommen. Aus den Gleichungen für die Energie eines freien Elektrons in einem Potential V_0 (bzw. $V = 0$) lassen sich, unter Ausnutzung der Stetigkeit der Parallelkomponente von $\underline{k}$ beim Übergang ins Vakuum, folgende Bedingungen ableiten:

$$\underline{k}_\parallel = \underline{k}_{\parallel 0} = \sin\theta \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{\text{Kin}}}$$

$$|\underline{k}_0| = \sqrt{\frac{2m_{\text{eff}}^*}{\hbar^2} (E_{\text{Kin}} + V_0)} \quad (4.4)$$

$$k_{\perp 0} = \sqrt{|\underline{k}_0|^2 - |\underline{k}_\parallel|^2}$$

$\underline{k}_0$ = $\underline{k}$ -Vektor im Festkörper

$\underline{k}$ = $\underline{k}$ -Vektor im Vakuum

E_{Kin} = kinetische Energie der Elektronen bezogen auf das Vakuumniveau

θ = Beobachtungswinkel bezüglich der Flächennormalen

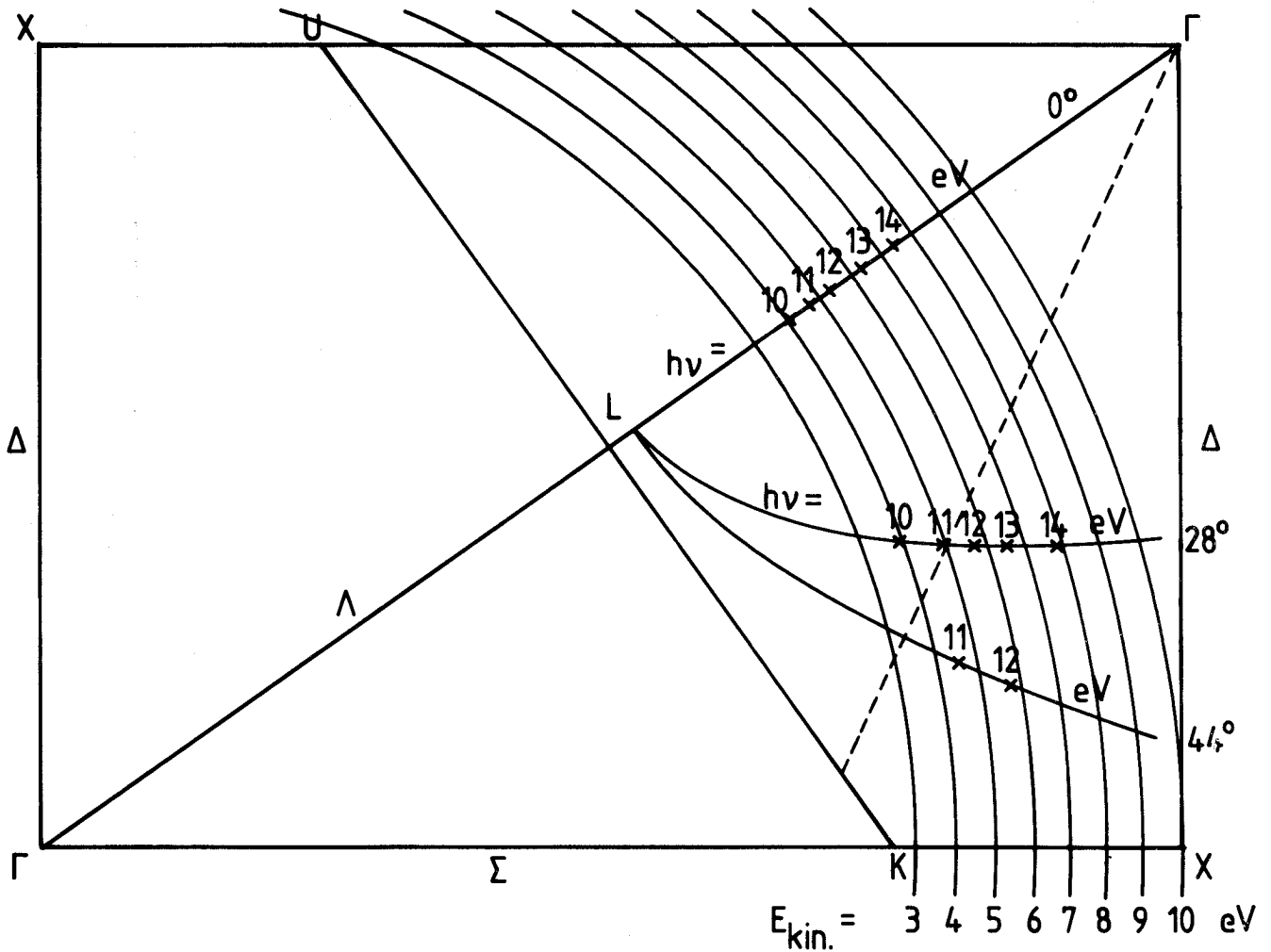


Fig. 4.5: Schnitt durch die Brillouin-Zone im periodischen Zonenschema

Der Schnitt verläuft entlang einer Spiegelebene der Pt(111)-Oberfläche. Es sind Ausschnitte aus der 1. und 2. Brillouin-Zone gezeichnet. Die beiden eingezeichneten Parabeln zeigen die aus Gleichung (4.4) berechneten k -Vektoren der angeregten Elektronen, die unter den beiden Winkeln $\theta = 28^\circ$ und 44° im Außenraum beobachtet werden können. Die angegebenen kinetischen Energien beziehen sich auf das Vakuumniveau. Als Austrittsarbeit wurde 5,6 eV angesetzt. Die Kreuze auf den Parabeln geben die k -Vektoren des direkten Übergangs aus Band 5 an. Eingetragen sind die aus den Spektren von $h\nu = 10$ eV - 14 eV bei 28° bestimmten kinetischen Energien (siehe Fig. 4.7). Für 44° wurden die Werte für $h\nu = 10$ eV und 11 eV eingetragen. Die gestrichelte Gerade zeigt den Schnitt durch die Spiegelebene entlang dessen die Bandstruktur der Fig. 4.6 berechnet wurde.

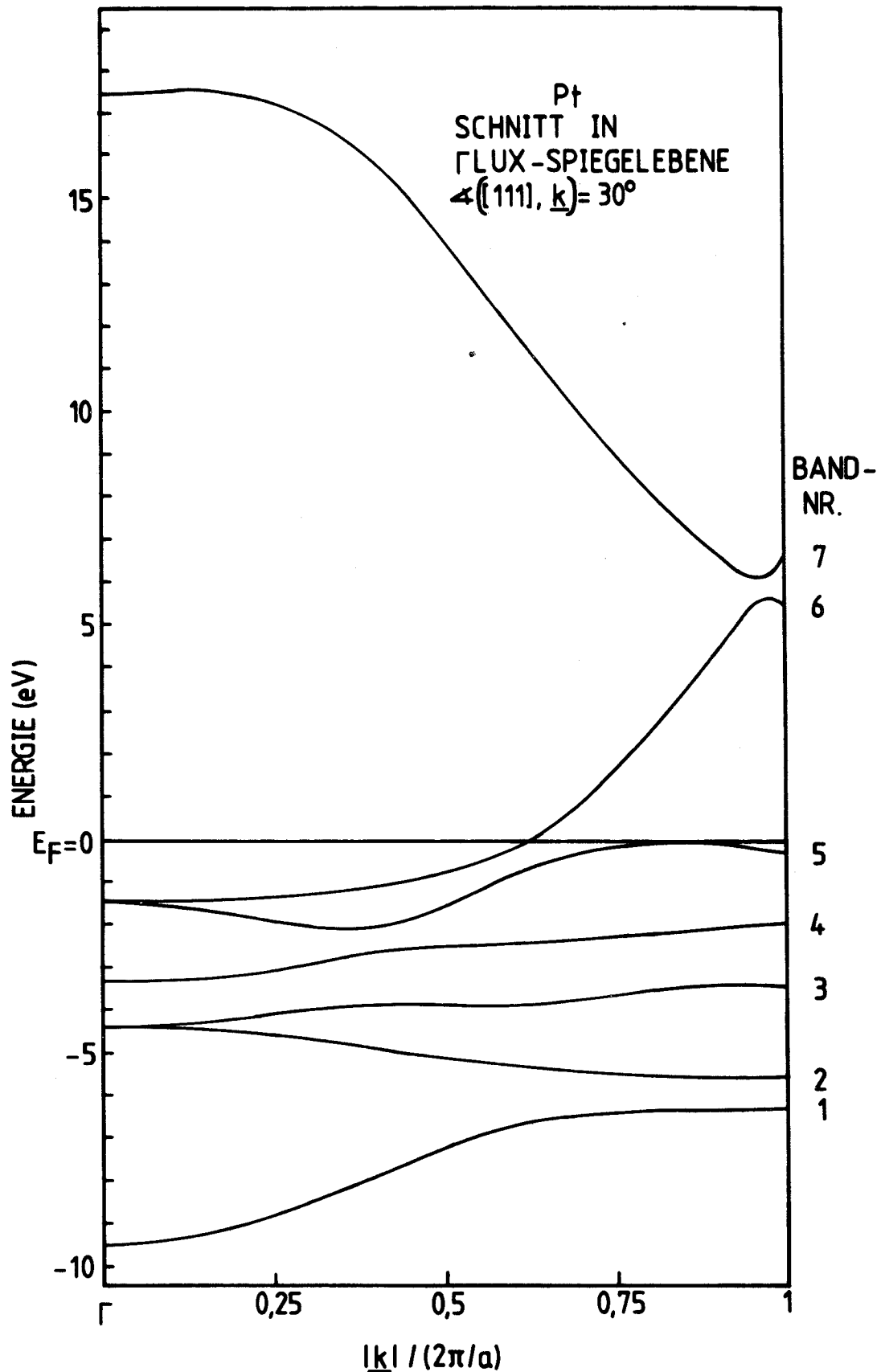


Fig. 4.6: Platin-Bandstrukturausschnitt

Der Ausschnitt zeigt die Bandstruktur entlang einer Linie, die mit der $[111]$ -Richtung einen Winkel von 30° bildet und innerhalb der FLUX-Spiegel-ebene liegt (siehe auch Fig. 4.5). Die Bandstruktur wurde mit Hilfe eines LCAO-OPW Interpolationsrechenverfahrens [13] ermittelt. Auf der rechten Seite sind die Bänder, zur Vereinfachung der Diskussion, nummeriert.

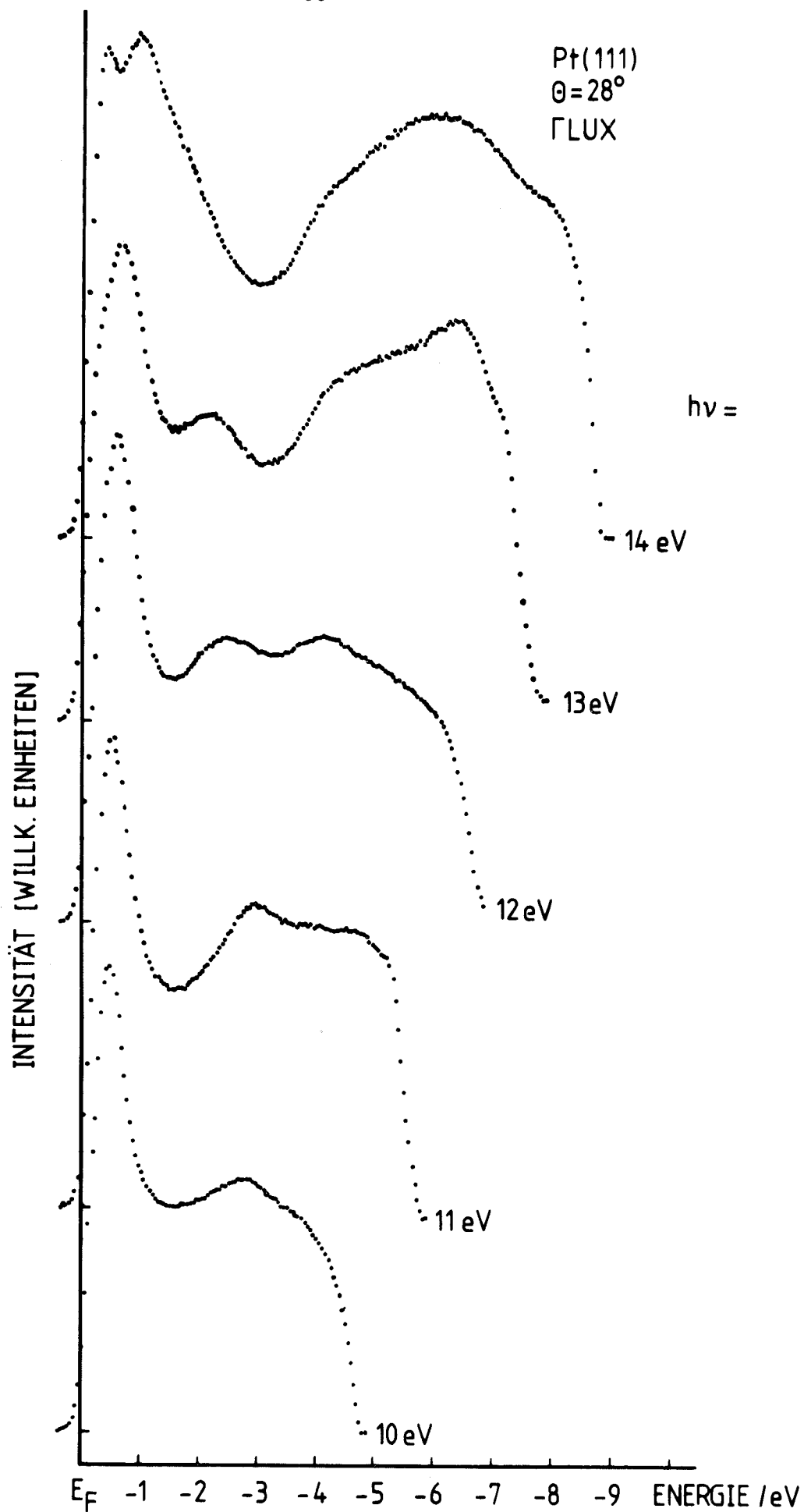
Unter Verwendung dieser Gleichungen konnten die in der 2. Brillouin-Zone liegenden Parabeln ermittelt werden (Fig. 4.5). Die Parabeln entsprechen den Endzuständen im Festkörper, die im Außenraum unter den gegebenen experimentellen Bedingungen beobachtet werden können. Daneben sind das auch die $\underline{k}$ -Vektoren, an denen ein direkter Übergang, der im Außenraum an Hand der gemessenen Spektren identifiziert ist, stattfinden kann.

Nachdem nun der erfaßte Bereich des $\underline{k}$ -Raums näher spezifiziert ist, interessiert die Frage, wie sich die Bandstruktur ändert, wenn man aus der Λ -Richtung in eine beliebige Richtung im $\underline{k}$ -Raum übergeht. Aus der Kenntnis der tendenziellen Änderung lassen sich schon wesentliche Hinweise für eine Interpretation der Messung gewinnen. In Fig. 4.6 findet man die Bandstruktur für die in Fig. 4.5 eingezeichnete Gerade, die einen Winkel von 30° mit der $[111]$ -Richtung bildet /13/. Die gezeigte Bandstruktur wurde mit Hilfe einer LCAO-OPW-Interpolationsrechnung erhalten. Als Anpassungsgrößen gingen in die Rechnung die Parameter aus der RAPW-Bandstruktur für die Hauptsymmetrierichtungen ein.

Gegenüber der Λ -Richtung findet man einige markante Änderungen, die sich in den Messungen widerspiegeln sollten. Als erstes erkennt man, daß das oberste Valenzband (Band 6) eine stärkere Dispersion besitzt. Auf Grund dessen verschiebt sich sein Schnittpunkt mit der Fermi-Energie in Richtung auf den Γ -Punkt zu. Wegen des fast unveränderten Verlaufs des Endbandes muß man deshalb den Einsatz der Emission aus dem 6. Band bei höheren Photonenenergien als in der senkrechten Emission erwarten. Daneben besitzen die Bänder 3 und 4 eine stark veränderte $E(\underline{k})$ -Abhängigkeit. Entgegen der Λ -Richtung zeigen sie kaum Dispersion. Die Bänder 1, 2, 5 und 7 sind fast unverändert gegenüber der Λ -Richtung in ihrem $E(\underline{k})$ -Verlauf.

4.3.1 Intensitäts- und Polarisationsverteilungen

In Fig. 4.7 sind für die Emission unter 28° die Intensitätsverteilungen bei verschiedenen Photonenenergien dargestellt. Man erkennt bei $h\nu = 14$ eV den Einsatz der Emission aus einem Valenzband, das die Fermi-Energie kreuzt. Aus der Kenntnis der Bandstruktur der Fig. 4.6 läßt sich dieser Übergang



der Anregung aus dem 6. Band (oberstes Valenzband) zuordnen. Damit müssen die Intensitätsmaxima nahe der Fermi-Kante für Photonenenergien unterhalb 14 eV durch Anregungen aus dem 5. Band verursacht werden. Die weiteren Strukturen ordnet man den Übergängen aus den tiefer liegenden Valenzbändern zu. Diese üblichen Interpretationen der Intensitätsverteilung erweisen sich als nur teilweise richtig, wie man an Hand der zugehörigen Polarisationskomponenten innerhalb der Spiegelebene sieht. Die Fig. 4.8, 4.9 und 4.10 zeigen die Ergebnisse der Polarisationsmessungen einschließlich der zugehörigen Intensitätsverteilungen. Die beiden Polarisationskomponenten liegen innerhalb der Spiegelebene. Es handelt sich dabei um die Komponente parallel zur Beobachtungsrichtung ($\theta = 28^\circ$ zur Flächennormalen), die wir mit longitudinal (P_{long}) bezeichnen, und die dazu senkrechte (P_{trans}). Die Wahl dieses Koordinatensystems für die Zerlegung des Polarisationsvektors innerhalb der Spiegelebene ist experimentell bedingt (siehe Kapitel 2.3).

Anhand der Polarisation kann man den Einsatz der Emission, der aus Band 6 angeregten Elektronen, sehr gut verfolgen. Wie man bei 14 eV sieht, besitzen die longitudinalen Komponenten der ersten beiden Maxima entgegengesetztes Vorzeichen. Aus diesem Grund ist es einfach, beide Übergänge zu trennen. Vergleicht man die Spektren von P_{long} für die drei Photonenenergien, so sieht man, daß das erste Maximum bei $h\nu = 12$ eV und 13 eV dem zweiten Maximum bei $h\nu = 14$ eV zuzuordnen ist (in Fig. 4.8 bis 4.10 durch 5 gekennzeichnet). Das zeigt eindeutig, daß diese Photoelektronen durch Anregung aus dem gleichen Anfangsband verursacht werden. Ein Umschlag im Vorzeichen P_{long} findet man beim Übergang von $h\nu = 12$ eV nach 13 eV unmittelbar an der Fermi-Energie. Während bei $h\nu = 12$ eV keine Anzeichen für eine Anregung aus Band 6 zu finden sind, weist die starke positive Polarisation bei $h\nu = 13$ eV unmittelbar an der Fermi-Energie auf den Einsatz der Emission aus Band 6 hin. Die Anregung findet offensichtlich in unmittelbarer Nähe des Kreuzungspunktes von Band 6 mit der Fermi-Energie statt. Damit

Fig. 4.7: Intensitätsverteilung bei der Emission unter $\theta = 28^\circ$ innerhalb einer Kristallspiegelebene

Die Verteilungskurven wurden auf ihr jeweiliges Maximum normiert. Sie sind über der Anfangsenergie, bezogen auf die Fermienergie, aufgetragen.

zeigt die Polarisierung unzweifelhaft viel empfindlicher als die Intensitätsverteilung den Einsatzpunkt dieser Emission. Betrachtet man die Intensitätsverteilung in Fig. 4.9 genauer, so kann man tatsächlich eine Schulter auf der hochenergetischen Seite des ersten Maximums erkennen. Der energetische Abstand zwischen Schulter und dem Maximum ist etwa genau so groß wie der Abstand der beiden Maxima in Fig. 4.10. Deshalb wäre eine Auflösung von Seiten des Experimentes möglich. Der Übergang ist nur wegen seiner geringen Intensität bei $h\nu = 13$ eV nicht stärker ausgebildet. Gerade dieser Umstand zeigt wiederum den Vorteil einer zusätzlichen Polarisationsmessung.

Betrachten wir nun den durch 4 in den Bildern gekennzeichneten Übergang. Es handelt sich dabei um die Anregung der Elektronen aus dem 4. Band. Bei 14 eV zeigen beide Polarisationskomponenten, daß der Übergang, mit einer sehr geringen Übergangsrate, von der niederenergetischen Flanke des zweiten Maximums überdeckt wird. Er ist in der Polarisation eindeutig zu identifizieren. Interessant ist das Ergebnis bei $h\nu = 12$ eV. Die Polarisationskomponenten zeigen ein Maximum bei einer anderen Energie als die Struktur in der Intensitätsverteilung, die man diesem Übergang zuordnen würde. Wie wir bisher immer gesehen haben, sind die starken Strukturen in den Polarisationskurven mit direkten Übergängen in der Bandstruktur korreliert. Da die Streuung für die Spiegelebenenkomponenten nur eine Änderung der durch die Anregung verursachten Polarisationskomponenten bedingt, aber keine zusätz-

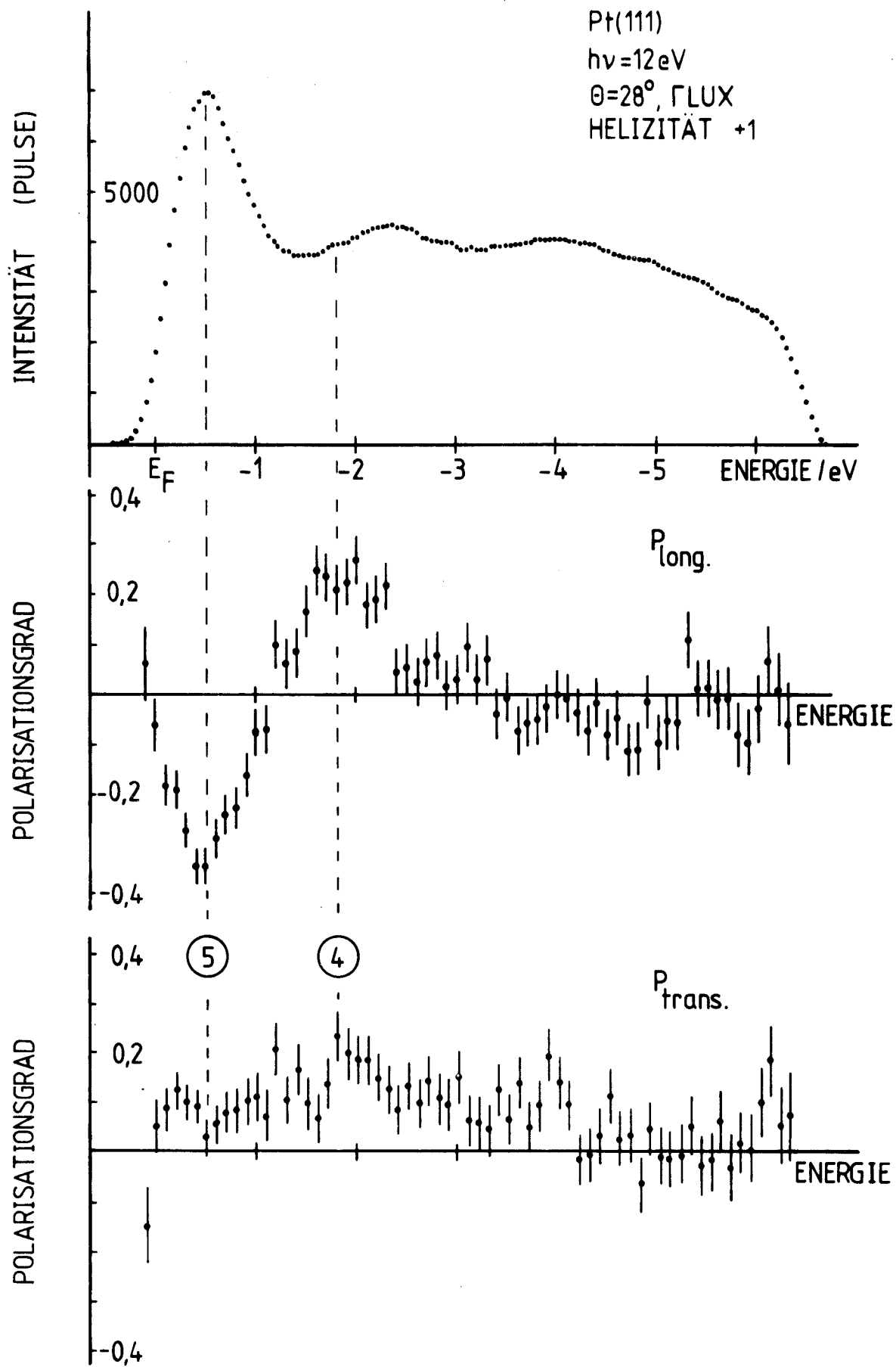
Fig. 4.8: Intensitätsverteilung und zugehörige Verteilung der Polarisationskomponenten innerhalb der Spiegelebene

Die Abszisse ist für alle drei Verteilungen gleich. Die Spektren sind als Funktion der Anfangsenergie bezogen auf E_F aufgetragen. Die Intensitätsangaben entsprechen dem arithmetischen Mittel der Intensitäten in den beiden (2,0)-Reflexen. Die Intensitätsverteilung wurde geglättet. Zur Ermittlung der Polarisationskomponenten wurden jeweils zwei Meßpunkte (Schrittweite 50 meV) zusammengefaßt, um den Fehler der einzelnen Meßpunkte zu reduzieren. Die Fehler berechnen sich aus dem einfachen statistischen Fehler der Gesamtzählraten in beiden LEED-Reflexen $/21/$.

P_{long} = longitudinale Polarisationskomponente

P_{trans} = transversale Polarisationskomponente

Die senkrechten, gestrichelten Linien verbinden die drei Meßkurven an den Stellen, denen man einen direkten Übergang zuordnen muß. Die Zahlen entsprechen der Nummer des Anfangsbandes (siehe auch Fig. 4.6) aus dem die Anregung erfolgt.



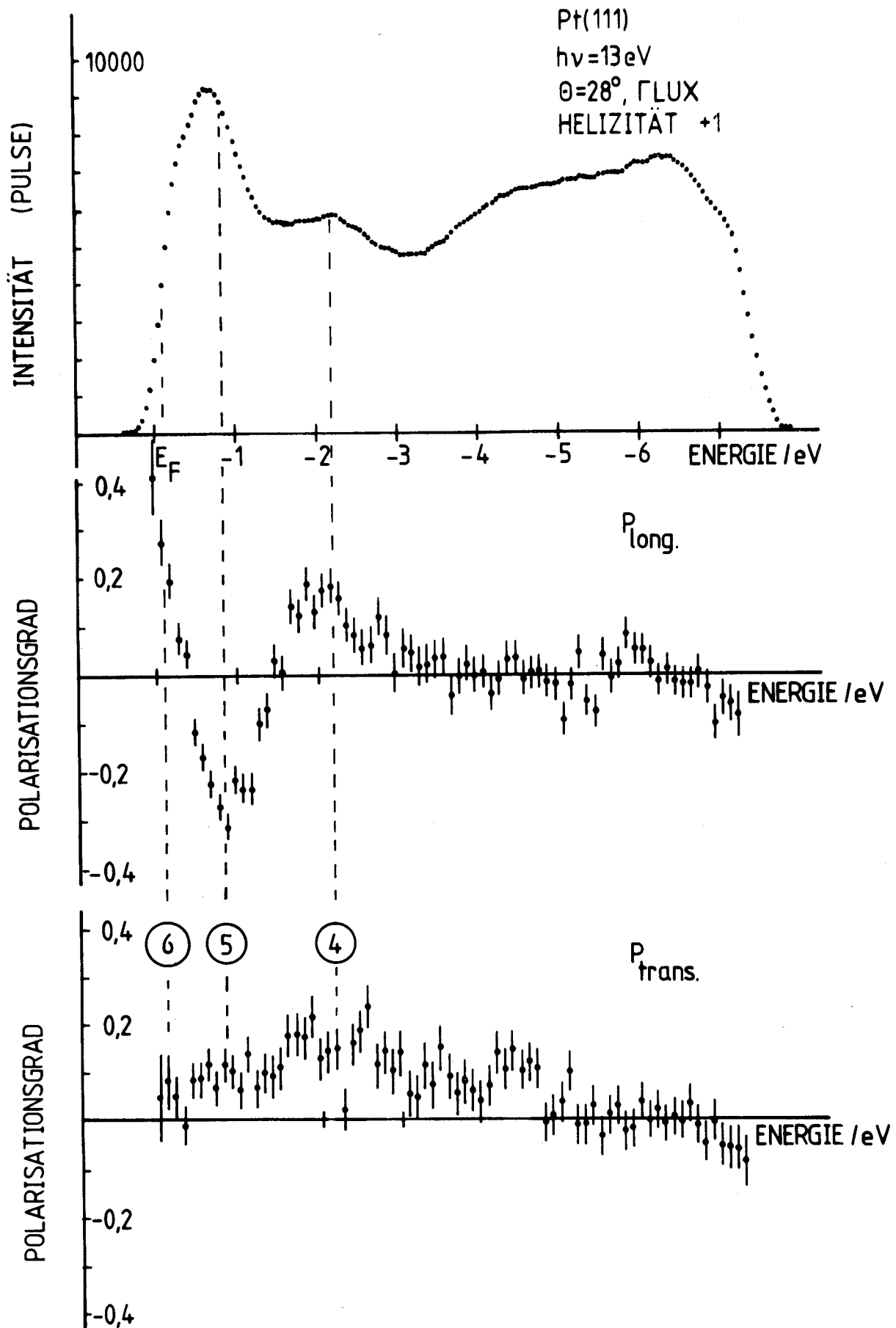


Fig. 4.9: wie Fig. 4.8; Photonenenergie $h\nu = 13 \text{ eV}$

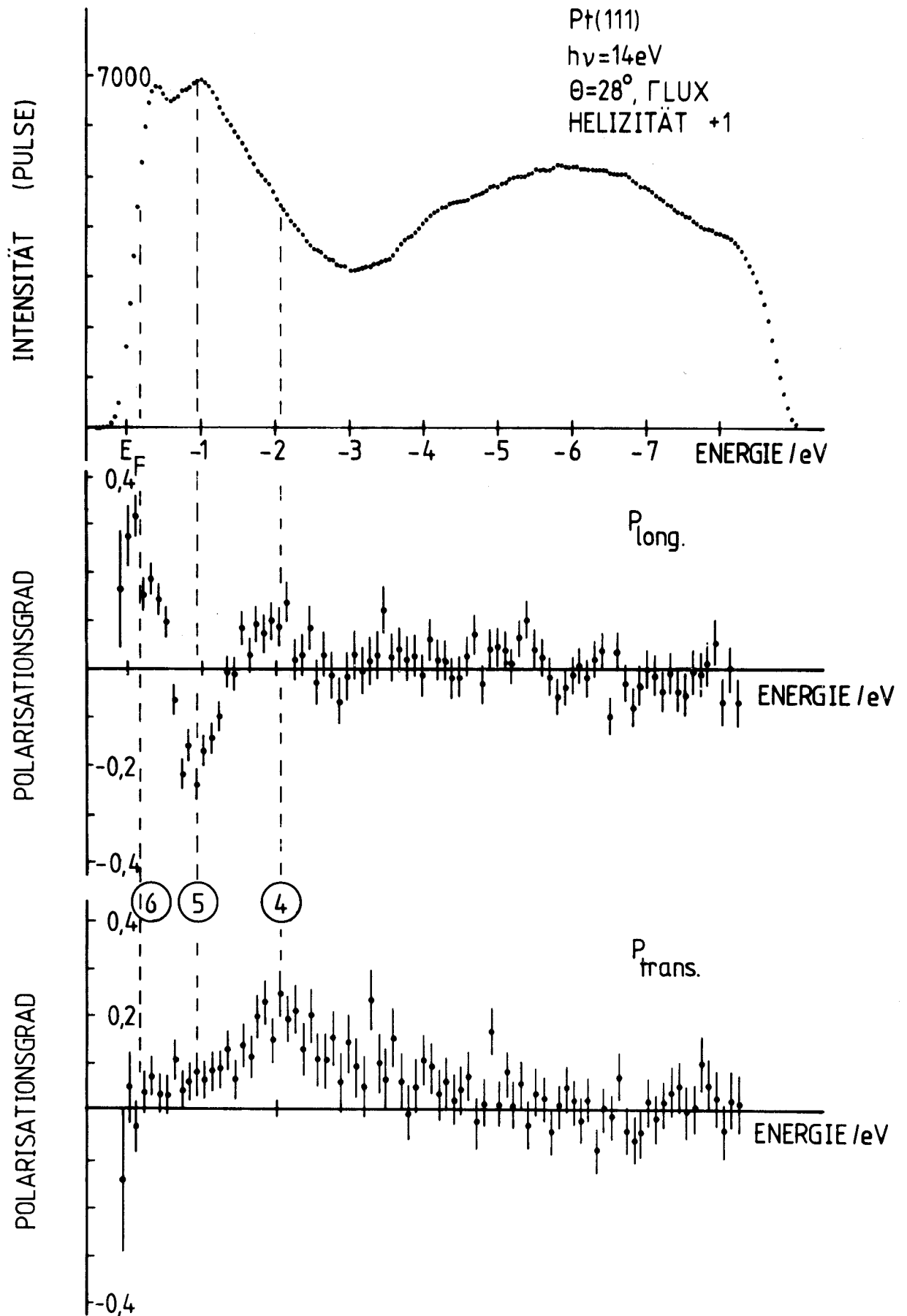


Fig. 4.10: wie Fig. 4.8; Photonenenergie $h\nu = 14 \text{ eV}$

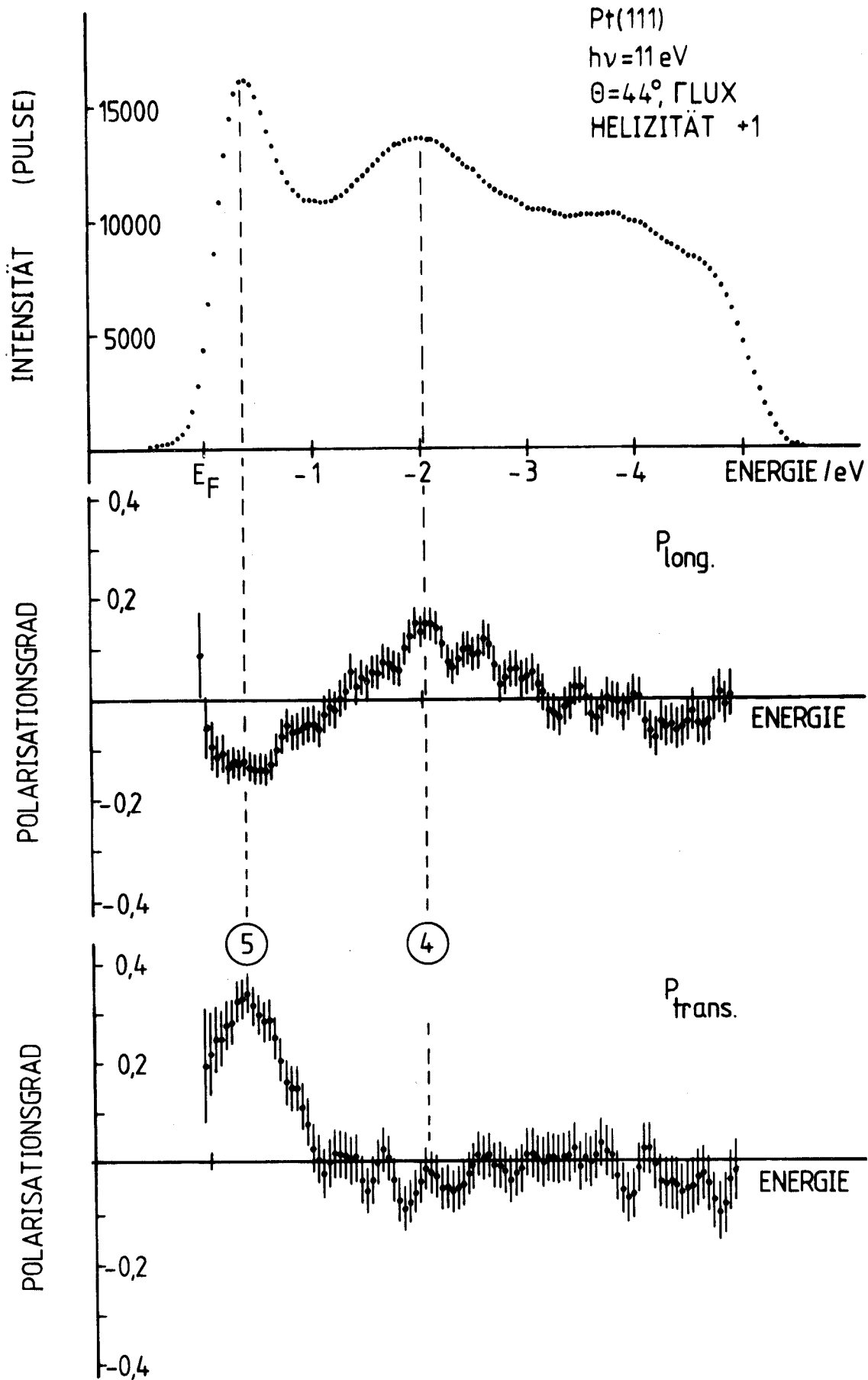


Fig. 4.11: Intensitätsverteilung und zugehörige Verteilung der Polarisationskomponenten innerhalb der Spiegelebene bei einer Photonenenergie $h\nu = 11 \text{ eV}$ und $\theta = 44^\circ$

Alle drei Kurven wurden geglättet (siehe auch Bildunterschriften zu Fig. 4.8)

liche Extrema erzeugt (siehe Kapitel 3.2 und 4.3.2), muß auch in diesem Fall der Übergang von Band 4 nach Band 7 an der Stelle des Polarisationsextremums lokalisiert werden. (Anmerkung: Man müßte eigentlich die spin aufgelösten Intensitäten zur Lokalisierung des Übergangs heranziehen. Da aber in diesem Fall andere direkte Übergänge mit hoher Polarisation, die zu einer Verschiebung des Polarisationsextremums führen könnte, energetisch weit genug abgetrennt sind, ist dieser Schluß zulässig.) Die Polarisation zeigt also, daß das Intensitätsmaximum zwischen -2 und -3 eV bei $h\nu = 12$ eV nicht durch den direkten Übergang verursacht wird. Er ist vielmehr einem kleinen Maximum bei etwas höheren Energien zuzuordnen. Wodurch das starke Intensitätsmaximum entsteht, ist noch ungeklärt. Es könnte sich dabei um Elektronen handeln, die einen indirekten Übergang gemacht haben, oder um solche, die inelastisch gestreut wurden (siehe auch Diskussion in Kapitel 4.1).

Abschließend soll noch ein Beispiel zur Emission unter 44° gezeigt werden (Fig. 4.11). Man sieht zwei Intensitätsmaxima, die mit zwei Extrema in der longitudinalen Polarisationskomponente korreliert sind. Die Vorzeichen dieser Polarisationskomponente deuten an, daß es sich wiederum um die Übergänge aus Band 5 und Band 4 handelt. Interessant hierbei ist die transversale Polarisation, die in diesem Fall den höchsten Polarisationsgrad besitzt. Entgegen der Untersuchung unter $\theta = 28^\circ$ findet man bei 4 nur einen sehr geringen transversalen Polarisationsgrad. Zum Verständnis dieser Ergebnisse ist es nötig, den Polarisationsvektor und seine Orientierung im Raum zu betrachten, was in Kapitel 4.3.2 gemacht wird.

Fassen wir zusammen:

1. Es zeigt sich auch hier wieder, wie im Fall der Emission aus hochsymmetrischen Richtungen, daß die spinpolarisierte Photoemission eine empfindlichere Untersuchungsmethode ist als die reine Intensitätsmessung.
2. Die Polarisationsmessung erlaubt bei verschiedenen Anregungsenergien eindeutige Zuordnung der Übergänge zueinander.
3. Die Polarisation kann auch hier wieder Übergänge schwacher Intensität auflösen.

4.3.2 Diskussion der Polarisationsvektoren

Wie im Theoriekapitel erläutert wurde, muß man im Dreistufenmodell zwischen der Polarisation der angeregten Elektronen im Festkörper und den im Außenraum gemessenen Polarisationsvektoren unterscheiden. Durch die Transmission wird die durch die Anregung bedingte Polarisation geändert. Für die Emission in einer Spiegelebene kann man aber recht einfach den Einfluß des Transmissionsprozesses ausnutzen, um Informationen über die Polarisation der Elektronen vor der Transmission zu erhalten. Durch Intensitätsmessungen kann man untersuchen, ob vor dem Transmissionsprozeß eine Polarisationskomponente senkrecht zur Spiegelebene vorhanden ist. Wie wir mit Gleichung (3.14) gesehen hatten, muß eine Intensitätsasymmetrie beim Umschalten der Lichthelizität auftreten, wenn $p_{\perp}^0 \neq 0$ ist (Polarisationskomponente senkrecht zur Spiegelebene). Diese Aussage trifft natürlich nicht zu, wenn der Asymmetrievektor 0 wird. Dies könnte beispielsweise eine Eigenschaft der Spiegelebene sein. Dieser singuläre Fall ist aber auszuschließen, was man aus spinpolarisierten LEED-Messungen an Pt(111) /16/ ableiten kann. Wie spinpolarisierte Photoemissionsuntersuchungen mit unpolarisiertem Licht am W(100) /14/ und Asymmetrieuntersuchungen mit dem Doppelstreuexperiment /15/ zeigen, ändern sich die Polarisationseffekte stark innerhalb von wenigen eV kinetischer Energie. Sie reagieren außerdem sehr empfindlich auf Winkeländerungen von nur wenigen Grad. Aus diesen Gründen kann man davon ausgehen, daß die Asymmetriefunktion nicht immer verschwindet, wenn man Untersuchungen bei verschiedenen Energien und Winkeln macht. Man darf also folgenden Schluß ziehen: Wenn man für verschiedene Photonenenergien und Emissionswinkel keine Intensitätsasymmetrien findet, muß mit Gleichung (3.14) gelten $p_{\perp}^0 = 0$. Diese Messungen haben wir durchgeführt. Es wurden die Intensitätsverteilungen für σ^+ - und σ^- -Licht für $h\nu = 10 \text{ eV} - 14 \text{ eV}$ bei $\theta = 28^\circ$ und 44° aufgenommen und miteinander verglichen. In keinem der untersuchten Fälle wurde eine Intensitätsasymmetrie für die Spiegelebenenemission gefunden. Daraus folgt mit den obigen Überlegungen, daß bei der Anregung mit zirkularpolarisiertem Licht $p_{\perp}^0 \equiv 0$ innerhalb der Spiegelebene gilt. Damit ist durch das Experiment die Aussage 4 der allgemeingültigen Symmetrieüberlegungen zum Anregungsprozeß (Kapitel 3.1) bewiesen.

Die angeregten Elektronen im Festkörper besitzen also vor der Emission ins Vakuum einen in der Spiegelebene liegenden Polarisationsvektor. Deswegen können wir die relativ einfache Gleichung (3.11) zur Beschreibung des Transmissionsprozesses verwenden. Die Konsequenz aus dieser Gleichung ist, daß die vollständige Information über den Anregungsprozeß in den beiden Spiegelebenenkomponenten, wie sie in Kapitel 4.3.2 schon teilweise vorgestellt wurden, enthalten ist. Die Transmission durch die Oberfläche verursacht eine Drehung des Polarisationsvektors innerhalb der Spiegelebene und eine Änderung des Betrags (Kapitel 3.2). Auf die Messungen der senkrechten Polarisationskomponente kann vorerst verzichtet werden, da sie von der Anfangspolarisation (Polarisation vor der Transmission) unabhängig ist.

Um die recht willkürliche Wahl der gemessenen Polarisationskomponenten zu eliminieren, ist es sinnvoll den Polarisationsvektor innerhalb der Spiegelebene als Funktion der Photoelektronenenergie aufzutragen. Dadurch wird es möglich, die Messungen unter verschiedenen Winkeln miteinander zu vergleichen. Eine solche Darstellung findet sich in Fig. 4.12. Im linken Teil des Bildes ist die experimentelle Anordnung nochmals skizziert. Das Spektrometer wird durch das LEED-Bild, mit den für diese beiden Polarisationskomponenten relevanten Reflexen, repräsentiert. Unter dem Beobachtungswinkel von 28° sind die Polarisationsvektoren für verschiedene Photoelektronenenergien aufgetragen. Die Energieskala ist die gleiche wie im parallel gezeichneten Intensitätsspektrum. Die eingezeichneten Polarisationsvektoren wurden an den markierten Stellen der Intensitätsverteilung aus den beiden gemessenen Polarisationskomponenten (siehe Fig. 4.9) berechnet.

Wie man an Fig. 4.12 sieht, dreht sich der Polarisationsvektor scheinbar beliebig innerhalb der Spiegelebene. Dieses Ergebnis ist verwunderlich besonders hinsichtlich der Resultate in Normalemission, wo der Polarisationsvektor entlang einer ausgezeichneten Richtung orientiert ist. Etwas Ähnliches hätte man sich auch für die Emission innerhalb der Spiegelebene vorstellen können. Als solche Quantisierungsachsen wären beispielsweise die Lichtausbreitungs- oder Elektronenemissionsrichtung denkbar gewesen. Das Ergebnis zeigt jedenfalls, daß dem nicht so ist. Zur weiteren Interpretation wollen wir uns auf die Diskussion der direkten, bzw. der als solcher identifizierten, Übergänge beschränken. Zum besseren Vergleich der Ergeb-

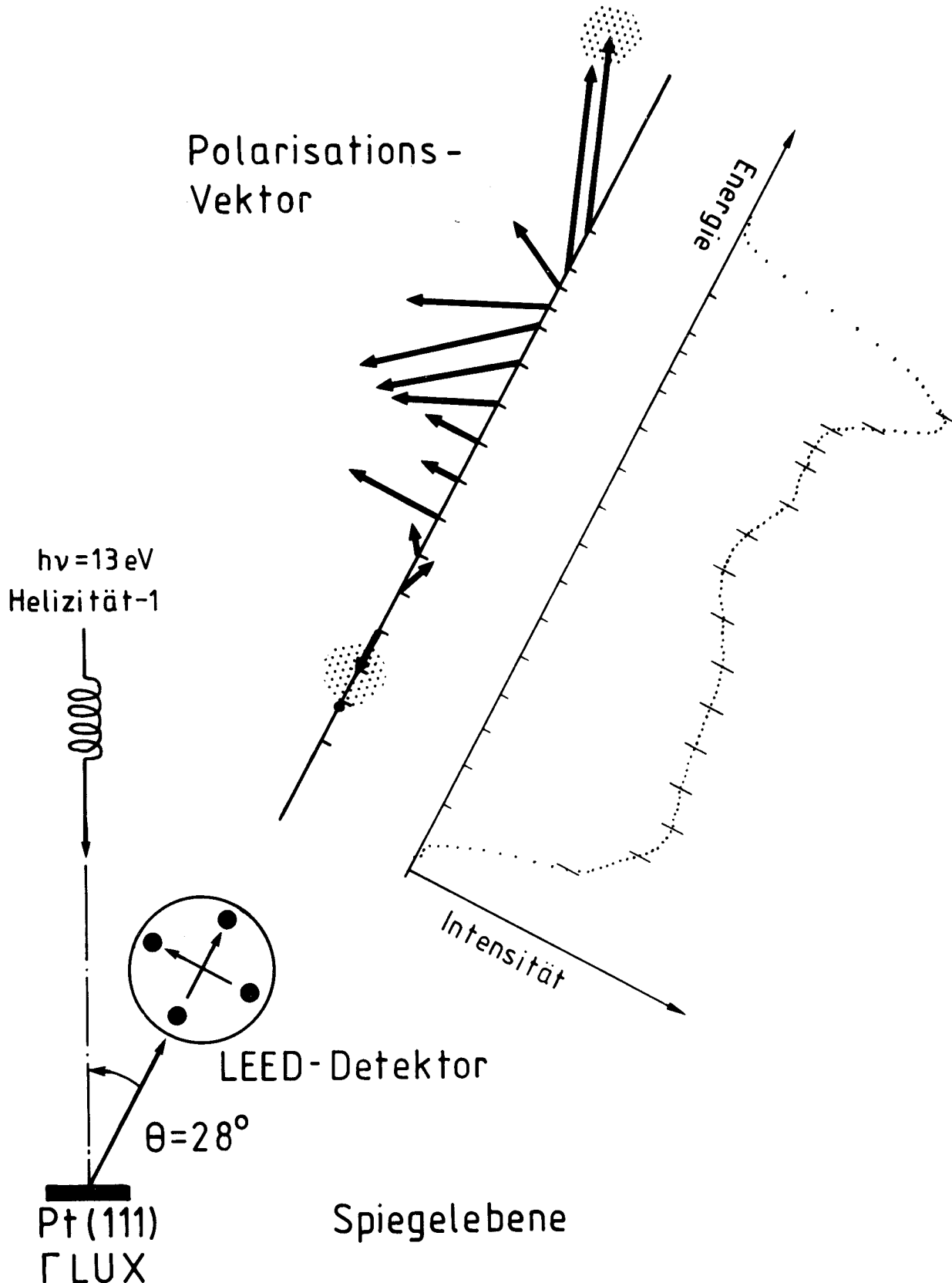


Fig. 4.12: Darstellung der Spiegelebenenkomponente des Polarisationsvektors

Die Polarisationsvektoren wurden für bestimmte Photoelektronenenergien aus P_{long} und P_{trans} berechnet. Die Stellen sind in der Intensitätsverteilung durch kleine Striche gekennzeichnet. Die Gerade, entlang der die Vektoren abgetragen sind, ist als Energieachse zu verstehen. Sie besitzt die gleiche Skalierung wie die Energieachse der Intensitätsverteilung. Sie gibt zusätzlich die Beobachtungsrichtung an. Die schattierten Bereiche geben den einfachen statistischen Fehler in der Bestimmung der einzelnen Komponenten an.

nisse bei verschiedenen Photonenenergien werden deshalb im folgenden nur die Polarisationsvektoren, die man direkten Übergängen zuordnen kann, betrachtet. In Fig. 4.13 sind diese nach Übergängen aus verschiedenen Anfangsbändern aufgeschlüsselt dargestellt. In den einzelnen Teilbildern ist jeweils der gleiche Übergang bei verschiedenen Anregungsenergie aufgetragen.

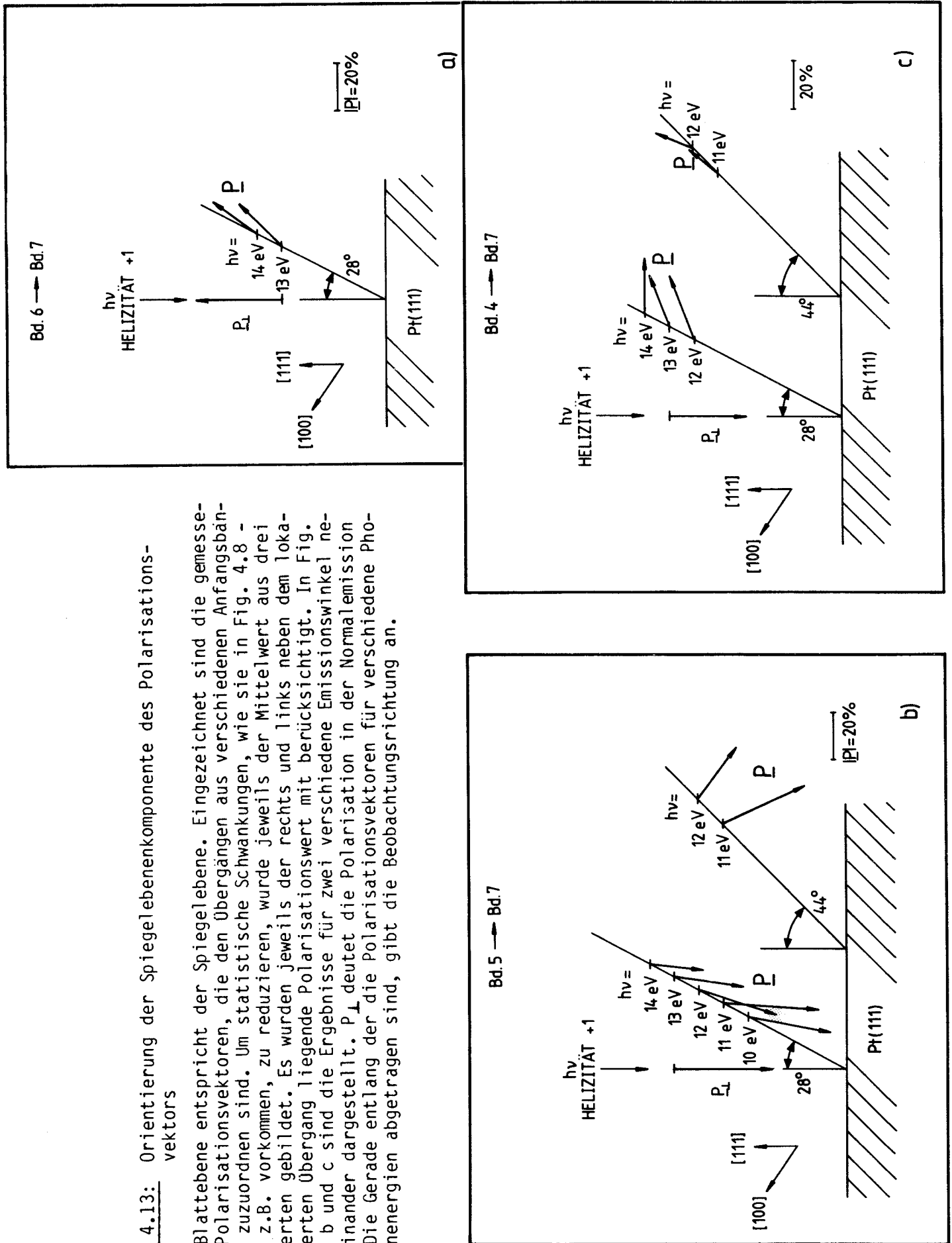
Es fällt unmittelbar auf, daß die Polarisationsvektoren für einen bestimmten Übergang unter einem festen Emissionswinkel fast identische Orientierung besitzen. Damit erlaubt diese Auftragung ebenfalls die Identifikation von Übergängen in Spektren zu verschiedenen Photonenenergien. Ähnliche Überlegungen erlauben auch die Zuordnung entsprechender Übergänge unter verschiedenen Emissionswinkeln. In diesem Fall muß man mit größerer Winkelabweichung in der Orientierung der Polarisationsvektoren rechnen, da die für den Transmissionsprozeß bestimmende Streugeometrie in beiden Fällen stark voneinander abweicht. Man sieht aber an Fig. 4.13 im Vergleich der Übergänge von Band 4 nach Band 7 und von Band 5 nach Band 7, daß die Polarisationsvektoren für beide Übergänge bei $\theta = 44^\circ$ in die gleiche Richtung um ähnliche Winkelbeträge gegenüber den Polarisationsvektoren bei $\theta = 28^\circ$ gedreht sind. Dies deutet auf einen nicht unerheblichen Einfluß des Transmissionsprozesses hin. Außerdem läßt es auf eine ähnliche Polarisationsvektororientierung im Festkörper wie bei $\theta = 28^\circ$ schließen.

Ein interessantes Ergebnis zeigt sich im Fall des direkten Überganges aus Band 5 nach Band 7. Bei diesen Messungen sieht man, daß die Vektoren fast die gleiche Orientierung wie in der Normalemission (in Fig. 4.13 durch $\underline{P}_\perp$ gekennzeichnet) haben. Bei ansteigender Photonenenergie nimmt der Betrag von $\underline{P}$ ab, die Orientierung bleibt aber unverändert. Die Abnahme von $\underline{P}$ ist mit dem größer werdenden Abstand des Anregungsortes von der Δ -Richtung (siehe Fig. 4.5) korreliert. Auf die Orientierung der Vektoren werden wir im nächsten Kapitel noch etwas näher eingehen.

Betrachtet man die verschiedenen direkten Übergänge bei einem festen Emissionswinkel, so sieht man für alle Anregungsenergien wieder, die schon oben im Zusammenhang mit Fig. 4.12 angesprochene, starke Änderung in der Orientierung der Polarisationsvektoren. Wir wollen nun einige Überlegungen an-

Fig. 4.13: Orientierung der Spiegelebenenkomponente des Polarisationsvektors

Die Blattebene entspricht der Spiegelebene. Eingezeichnet sind die gemessenen Polarisationsvektoren, die den Übergängen aus verschiedenen Anfangsbändern zuzuordnen sind. Um statistische Schwankungen, wie sie in Fig. 4.8 - 4.11 z.B. vorkommen, zu reduzieren, wurde jeweils der Mittelwert aus drei Meßwerten gebildet. Es wurden jeweils der rechts und links neben dem lokalisierten Übergang liegende Polarisationswert mit berücksichtigt. In Fig. 4.13 b und c sind die Ergebnisse für zwei verschiedene Emissionswinkel nebeneinander dargestellt. $P_{\perp}$ deutet die Polarisation in der Normalemission an. Die Gerade entlang der die Polarisationsvektoren für verschiedene Photonenenergien abgetragen sind, gibt die Beobachtungsrichtung an.



stellen, den Effekt im Rahmen des Dreistufenmodells zu erklären. Die erste, wichtige Frage, die sich aufdrängt, ist die, ob diese beliebige Orientierung schon durch den Anregungsprozeß verursacht wird oder erst durch den Transmissionsprozeß entsteht. Aufschlüsse darüber kann man aus den Messungen erhalten.

Nehmen wir einmal an, daß es, wie in der Normalemission, eine Quantisierungsachse gibt, bezüglich der die Polarisationsvektoren der angeregten Elektronen im Festkörper ausgerichtet sind. Finden wir nun in den Spektren zwei verschiedene Übergänge (aus verschiedenen Anfangsbändern) bei ungefähr der gleichen kinetischen Energie der Photoelektronen, so gelten für diese Elektronen bei der Transmission die gleichen Streubedingungen [$E_{\text{kin}_1} = E_{\text{kin}_2}$, $\frac{k_1}{k_2} = \frac{k_{01}}{k_{02}} \Rightarrow \frac{k_{01}}{k_{02}} = \frac{k_{01}}{k_{02}}$]. Da für eine feste Streugeometrie der Drehwinkel, um den der Polarisationsvektor innerhalb der Spiegelebene gedreht wird, unabhängig von $\underline{p}^0$ vor der Transmission ist, siehe Kapitel 3.2, müssen die Polarisationsvektoren auch nach der Transmission entlang einer Geraden ausgerichtet sein. An Hand der Fig. 4.7 - 4.10 kann man sehen, daß z.B. bei $\theta = 28^\circ$ für 14 eV der Übergang von Band 4 nach Band 7 bei der gleichen kinetischen Energie liegt wie der Übergang aus Band 5 nach Band 7 bei $h\nu = 13$ eV (ein weiteres Beispiel ist: 13 eV Band 4 nach Band 7 und 11 eV Band 5 nach Band 7). Sieht man sich die entsprechenden Polarisationsvektoren in Fig. 4.13 an, so liegen die keineswegs auf einer Geraden. Das heißt also, daß für diese beiden Übergänge die Polarisationsvektoren vor der Streuung nicht entlang einer ausgezeichneten Richtung liegen können. Da die Polarisationsvektoren eines speziellen Übergangs für alle erfaßten Photonenenergien ungefähr die gleiche Orientierung haben, kann man weiter aus dem speziellen Beispiel schließen, daß die Beeinflussung der Polarisationsvektoren durch die Transmissionseffekte wenigstens für $\theta = 28^\circ$ nur unwesentlich verschieden für alle betrachteten direkten Übergänge sein kann. Kleine Unterschiede in der Orientierung können eventuell durch Streueffekte verursacht sein. Für die Interpretation der Meßergebnisse bedeutet das aber, daß der Grund für die verschiedenen Orientierungen im Anregungsprozeß selber zu suchen ist.

4.3.3 Interpretation der Messungen im Rahmen des Anregungsprozesses des Dreistufenmodells

Unter Ausnutzung der Spiegelsymmetrie konnte als wesentliche Ursache für die scheinbar beliebige Orientierung des Polarisationsvektors der Anregungsprozeß ausgemacht werden. Es fragt sich nun, welche Informationen über die Eigenzustände der Kristallelektronen aus den Messungen erhalten werden können. Dazu sollen kurz die wesentlichen Überlegungen einer neuen theoretischen Behandlung der spinpolarisierten Photoemission außerhalb von hochsymmetrischen Richtungen durch Borstel /17/, die durch die vorliegenden Messungen angeregt wurden, skizziert werden.

Ausgehend von der Formel (3.4) läßt sich unter Ausnutzung von Inversionsymmetrie und Zeitumkehrbarkeit für die Emission in einer Kristallspiegelebene ein interessanter Zusammenhang zwischen den Blochspinoren der Elektronen im Valenzband und des gemessenen Polarisationsvektors in der Spiegelebene aufstellen. Der wesentliche Trick besteht darin, daß man die durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung verursachte Hybridisierung als Mischung von Wellenfunktionen aus verschiedenen energetisch benachbarten Bändern der nichtrelativistischen Bandstruktur beschreibt. Da diese sich nach Paritäten klassifizieren lassen, kann man dann Paritätsauswahlregeln für die Übergangsmatrixelemente anwenden. Der Anfangszustand eines Bandes 1 läßt sich schreiben als:

$$\begin{aligned} \psi_1^{i1} &= a \phi_\pi^{i1} |\uparrow\rangle + b \phi_\pi^{i1} |\downarrow\rangle + c \phi_{-\pi}^{i2} |\uparrow\rangle + d \phi_{-\pi}^{i2} |\downarrow\rangle \\ \psi_2^{i1} &= (JK) \psi_1^{i1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

π = Parität (+1 oder -1)

(JK) = Operatorprodukt von Inversions (J)- und Zeitumkehroperator (K)

Wobei ϕ_π^{i1} der Wellenfunktion des betrachteten Bandes im nichtrelativistischen Fall entspricht und $\phi_{-\pi}^{i2}$ die Wellenfunktion eines benachbarten Bandes mit entgegengesetzter Parität ist. Beide Wellenfunktionen beschreiben Elektronen im nichtrelativistischen Fall, für den zu beiden Spineinstellungen

$|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ die gleiche Ortswellenfunktion gehört (siehe Kapitel 3). Das Endband wird auch im relativistischen Fall als nur schwach hybridisiert angenommen, da es energetisch stark von anderen Bändern separiert ist und bei hohen Energien die Hybridisierung durch die inelastische Wechselwirkung (siehe Kapitel 4.1) aufgehoben wird /17/. Zur Emission tragen nur die Anteile gerader Parität des Endzustandes bei /18/. Mit diesen Annahmen lassen sich, unter Zerlegung des zirkular polarisierten Lichts in kohärente lineare Anteile, Paritätsauswahlregeln anwenden. Dies führt zu folgenden Beziehungen (für $\pi = +$):

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & b &= 0 \\ c &= ia \frac{1}{p} (P_{\text{long}} \cos\theta - P_{\text{tr}} \sin\theta) \\ d &= ia \frac{1}{p} (P_{\text{long}} \sin\theta + P_{\text{tr}} \cos\theta) \end{aligned} \quad (4.6)$$

θ = Emissionswinkel bezogen auf die Flächennormale

Das Ergebnis dieser theoretischen Betrachtung zeigt, daß man über die Polarisationsvektoren in der Spiegelebene eine direkte Aussage über die Mischung von Wellenfunktionen verschiedener Parität erhält.

Betrachten wir unter diesen theoretischen Aspekten die Messungen aus Fig. 4.13. Da die Polarisationsvektoren für $\theta = 28^\circ$ in ihrer Orientierung vornehmlich durch den Anregungsprozeß bestimmt sind, kann man aus diesen qualitativ etwas über die Hybridisierung der einzelnen Valenzbänder ableiten. Der Übergang von Band 5 nach Band 7 beispielsweise ergab einen Polarisationsvektor, der fast die gleiche Orientierung wie in Normalemission besaß. Mit den Werten für $h\nu = 11$ eV erhält man aus Gleichung (4.6):

$$c \approx ia$$

$$d \approx ia \quad 0.06$$

Setzt man diese Koeffizienten in Gleichung (4.5) ein, so ergibt sich als Anfangszustand ein fast vollständig nach einer Spineinstellung separierter Anfangszustand. Diese Eigenschaft der Wellenfunktion hatten wir auch aus

Symmetrieüberlegungen für das entsprechende Band in der Δ -Richtung gefunden. Es scheint sich folglich die Kopplung von Spin- und Ortsfunktion des 5. Bandes nicht wesentlich zu ändern, wenn man aus der Δ -Richtung in die FLUX-Spiegelebene übergeht. Ganz anders verhält es sich mit den Bändern 6 und 4, deren Wellenfunktionen sich stark ändern gegenüber der Δ -Richtung, was man schon leicht im Vergleich der Polarisationsvektoren für $\theta = 28^\circ$ mit der Normalemission sieht. Für den Übergang aus Band 4 nach Band 7 bei $h\nu = 13$ eV ergibt sich für die Entwicklungskoeffizienten

$$c = i a \cdot 0.35$$

$$d = i a \cdot 0.94 \quad .$$

In diesem Fall gibt es also eine nicht unerhebliche Beimischung von Wellenfunktionen mit entgegengesetzter Spineinstellung. Die beiden entarteten Zustände lassen sich also nicht mehr nach reinen Spinzuständen separieren. Die Abweichung von den Eigenschaften in der Δ -Richtung sind erheblich.

Diese Betrachtungen sind nur qualitativer Natur, da sie unter Vernachlässigung der Transmissionseffekte abgeleitet wurden. Die relativen Aussagen im Vergleich der Hybridisierung der Bänder untereinander, ist aber zulässig wegen der ähnlichen Streubedingungen unter diesem Beobachtungswinkel. Quantitative Aussagen können nur dann aus den Messungen erzielt werden, wenn die absolute Größe der Änderung durch die Transmission bekannt ist.

Aus dem gleichen Grund können die Änderungen beim Übergang zum Emissionswinkel von $\theta = 44^\circ$ nicht eindeutig geklärt werden. Es können sowohl der Anregungsprozeß als auch der Transmissionsprozeß für die geänderte Vektororientierung verantwortlich sein, wobei die Transmission wahrscheinlich den stärkeren Beitrag (Kapitel 4.3.2) liefert.

Abschließend fassen wir für die Emission innerhalb einer Spiegelebene zusammen:

1. Es tritt bei der Anregung keine Polarisationskomponente senkrecht zur Spiegelebene auf.

2. Die Komponenten des gemessenen Polarisationsvektors innerhalb der Spiegelebene zeigen keine bevorzugte Orientierungsrichtung.
3. Durch explizite Anwendung der Streusymmetrie muß man diese beliebige Orientierung des Polarisationsvektors auch für den Anregungsprozeß annehmen.
4. Damit beinhalten die Polarisationsmessungen die Information über die Hybridisierung der Anfangsbänder der Bandstruktur an Stellen der Brillouin-Zone, die von den Hauptsymmetrierichtungen abweichen.

4.4 Intensitätsasymmetrie bei der Photoemission außerhalb von Kristallspiegelebenen

Bei der Emission in der Normalen und der Spiegelebene wurden keine Intensitätsasymmetrien gefunden. Um zu zeigen, daß es sie aber in der spinpolarisierten Photoemission tatsächlich gibt, soll an einem ausgewählten Beispiel, der Emission außerhalb einer Spiegelebene, demonstriert werden, wie die Polarisation der angeregten Elektronen im Festkörper die im Außenraum beobachtete Intensitätsverteilung beeinflussen kann.

Bei senkrechtem Lichteinfall wurden unter verschiedenen azimuthalen (Φ) und polaren (Θ) Winkeln Intensitätsverteilungen für entgegengesetzte Lichthelizitäten aufgenommen und miteinander verglichen. Die Fig. 4.14 zeigt Messungen für eine Photonenenergie von 12 eV bei einem Polarwinkel von $\Theta = 44^\circ$ und einer azimuthalen Kristallstellung von $\Phi = 12.75^\circ$ (bezogen auf die Spiegelebene). Es handelt sich bei den Spektren um reine Intensitätsmessungen. Die mit "+" gekennzeichneten Kurven wurden mit Licht positiver Helizität beobachtet, die mit "-" bezeichnete Kurve gehört zur Anregung mit Licht negativer Helizität. Die beiden Intensitätsverteilungskurven wurden unmittelbar hintereinander aufgenommen. Die sonstigen experimentellen Randbedingungen waren vollkommen identisch in beiden Durchläufen.

Wie man sieht, ergeben sich für die entgegengesetzten Lichthelizitäten unterschiedliche Intensitätsverteilungen. Im unteren Teilbild der Fig. 4.14

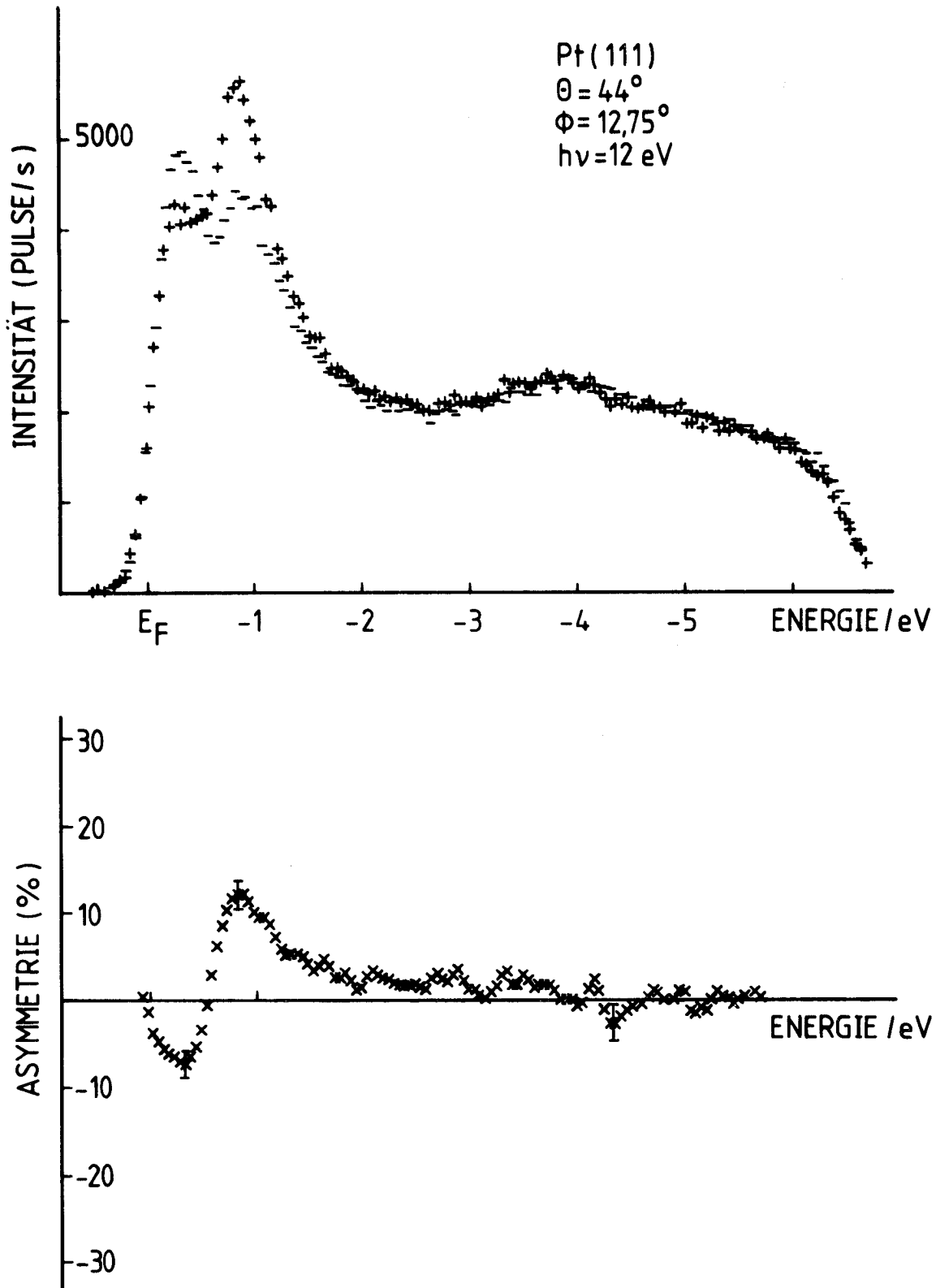


Fig. 4.14: Intensitätsverteilung für verschiedene Lichthelizitäten in der Photoemission außerhalb der Spiegelebene unter einem Beobachtungswinkel von $\theta = 44^\circ$

Die mit "+" (" - ") bezeichnete Kurve ist die Intensitätsverteilung für die Anregung mit Licht positiver (negativer) Helizität. Die beiden Intensitätsverteilungskurven wurden auf gleiche Lichtintensität normiert. Darunter findet man die aus den beiden oberen Kurven (geglättet) berechnete Intensitätsasymmetrie. Die eingezeichneten Fehler wurden aus den statistischen Fehlern der Intensitätsmessungen berechnet. Die Angabe des azimuthalen Drehwinkels ϕ bezieht sich auf die Spiegelebene.

ist die Asymmetrie aufgetragen. Sie wurde aus den beiden Intensitätsverteilungen entsprechend der Gleichung

$$A = \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-} \cdot 100 \% \quad (4.7)$$

I^+ , I^- = Intensität für die Anregung mit Licht positiver (negativer)
Helizität

berechnet. Im Bereich der ersten beiden Intensitätsmaxima findet man Asymmetriewerte um 10 %. Die beiden höchsten Werte für die Asymmetrie liegen energetisch an der gleichen Stelle wie die Intensitätsmaxima. Bei niedrigen Energien ist die Asymmetrie innerhalb der Fehlergrenzen Null.

Der Anregungsprozeß kann einen solchen Intensitätsunterschied nicht erklären, da die Übergangsraten für direkte Übergänge unabhängig von der Lichthelizität sind /17, 19/. Erinnern wir uns an die Polarisationsverteilungen, die alle eine gemeinsame Charakteristik besitzen, nämlich hohe Polarisationswerte im Bereich der direkten Übergänge und verschwindende Polarisation bei kleinen kinetischen Energien, so findet man diesen typischen Verlauf auch hier. Dies zeigt eindeutig den Zusammenhang zwischen der Polarisation der angeregten Elektronen im Festkörper und der gefundenen Intensitätsasymmetrie auf. Es kann also mit den Überlegungen aus Kapitel 3 nur der Transmissionsprozeß diesen Effekt verursachen. Damit haben wir also ein Beispiel für die in Kapitel 3.2 vorhergesagte Intensitätsasymmetrie gefunden.

Physikalisch erklärt sich der Effekt im Dreistufenmodell dadurch, daß die Transmissionswahrscheinlichkeit von der Polarisation abhängt. Diese unterschiedliche Transmissionswahrscheinlichkeit kann man sich mit Hilfe eines vereinfachenden Bildes aus der Atomstreuung /20/ verdeutlichen. Aus der Elektron-Atom-Streuung ist bekannt, daß der Streuquerschnitt für die Streuung in einen beliebigen Winkel vom Spinzustand des gestreuten Elektrons abhängt. Denken wir uns den von der Festkörperseite auf die Oberfläche treffenden Elektronenstrahl in zwei Untersysteme in reinen Spinzuständen entsprechend Gleichung (3.3) zerlegt. Die Intensität des Elektronenstrahls läßt sich dann schreiben als

$$I_a = (g_1(\uparrow) + g_2(\downarrow)) I_{\text{ges}}$$

g_1, g_2 = Besetzungsstärke der Spinzustände in Klammern

Die Wahl der Spinzustände sei o.B.d.A. auf das Streuproblem angepaßt. Bei der Umkehrung der Lichthelizität vertauschen die Besetzungsstärken (Kapitel 3.1), es folgt:

$$I_b = (g_2(\uparrow) + g_1(\downarrow)) I_{\text{ges}}$$

Wird nun, wie aus der Atomphysik bekannt, einer der beiden Spinzustände mit einer größeren Wahrscheinlichkeit in den Beobachtungswinkel gestreut (es sei $\sigma_{\uparrow}(\theta) > \sigma_{\downarrow}(\theta)$), so ergibt sich:

$$I'_a = (\sigma_{\uparrow} g_1 + \sigma_{\downarrow} g_2) I_{\text{ges}}$$

und
$$I'_b = (\sigma_{\uparrow} g_2 + \sigma_{\downarrow} g_1) I_{\text{ges}}$$

Bildet man die Asymmetrie:

$$A = \frac{I'_a - I'_b}{I'_a + I'_b}$$

so ergibt sich

$$A = \frac{(\sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow})}{(\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow})} \cdot \frac{g_1 - g_2}{g_1 + g_2} = \frac{(\sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow})}{(\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow})} \cdot p \quad .$$

Eine Asymmetrie tritt also dann auf, wenn $\sigma_{\uparrow}(\theta)$ und $\sigma_{\downarrow}(\theta)$ verschieden sind. Dieses simplifizierte Bild sollte nur als eine einfache Veranschaulichung des Effektes dienen. Es kann die tatsächliche Physik nur unvollkommen beschreiben, da es z.B. Vielfachstreuung oder die Oberflächenbarriere nicht berücksichtigt. Im quantenmechanischen Wellenbild kann man den Effekt, in Analogie zu spinpolarisiertem LEED, durch die spinabhängige Ankopplung von Blochspinoren an die Freien-Elektronenzustände des Vakuums in der Oberfläche erklären /21/.

In der Spiegelebene stand der Asymmetrievektor senkrecht zur Spiegelebene (siehe Kapitel 3.2) und konnte aufgrund dessen nur bei einer vorhandenen Polarisationkomponente $P_{\perp}^0$ zu Intensitätsasymmetrien führen. Bei der Emission außerhalb der Spiegelebene kann die Orientierung von $\underline{A}$ nicht explizit angegeben werden. Da in diesem Fall aber auch im allgemeinen alle drei Komponenten von $\underline{P}^0$ existieren, gibt es immer ein von Null verschiedenes Produkt $\underline{A} \cdot \underline{P}^0$ und folglich immer die Beeinflussung der Intensität durch die Anfangspolarisation.

Falls der Asymmetrievektor aus Experiment oder Theorie bekannt ist, kann diese Erscheinung zur Untersuchung der Polarisation der Elektronen im Festkörper verwendet werden. In diesem Fall fungiert der Photoemissionsprozeß als sein eigener Polarisationsdetektor.

Diese Intensitätsasymmetrien bei der spinpolarisierten Photoemission waren zu Beginn dieser Untersuchungen nicht bekannt, wurden aber von Kirschner /21/ vorhergesagt. Das hier vorgestellte Ergebnis ist das erste seiner Art. Die Konsequenzen aus diesem Effekt sind teilweise schon in diese Arbeit eingeflossen, aber bei weitem noch nicht mit diesen Überlegungen ausgeschöpft.

5. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit berichtet über erste impuls- und spinpolarisationsaufgelöste Photoemissionsexperimente mit zirkularpolarisierter Synchrotronstrahlung. Untersucht wurde die Photoemission aus Pt(111).

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, daß die Polarisationsmessung in vielen Fällen sehr viel empfindlicher ist als die Intensitätsmessung. Es konnte an mehreren Fällen demonstriert werden, daß über die Polarisationsverteilung auch direkte Übergänge von sehr geringer Übergangswahrscheinlichkeit aufzulösen sind. Daneben erlaubt die Polarisationsbestimmung die Identifikation spezieller direkter Übergänge in der Photoemissionsspektroskopie.

In Normalemission konnten durch die Messungen die Symmetrien der Valenzbänder der relativistischen Bandstrukturen für die Δ -Richtung beim Platin bestimmt werden. Es konnte für die Δ -Richtung des Platins gezeigt werden, daß für die Anregung mit zirkularpolarisiertem Licht die, auf gruppentheoretischen Überlegungen basierenden, Symmetrierauswahlregeln zutreffen.

Die Untersuchungen der Emission innerhalb einer Kristallspiegelebene erwiesen sich als sehr interessant. Während in der Normalemission die Polarisationsvektoren entlang einer ausgezeichneten Richtung orientiert sind, trifft dies in der Spiegelebenenemission nicht mehr zu. Es zeigte sich, daß die durch den Anregungsprozeß induzierten Polarisationsvektoren nur Komponenten innerhalb der Spiegelebene besitzen. Innerhalb dieser Ebene scheinen die Polarisationsvektoren beliebige Orientierung zu besitzen. Gerade dieser Umstand beinhaltet wesentliche neue Erkenntnisse, die aus diesen Messungen erhalten werden können. Die Orientierung der Polarisationsvektoren erlaubt Rückschlüsse auf die Hybridisierung der Elektronenwellenfunktionen in den verschiedenen Valenzbändern. Die spinpolarisierte Photoemission ermöglicht damit erstmalig, experimentell einen direkten Einblick in die Wellenfunktion von Elektronen bestimmter Valenzbänder zu erhalten. Eine quantitative Auswertung ist wegen fehlender Rechnungen zur relativistischen Streutheorie, die den Transmissionsprozeß beschreiben könnten, momentan noch nicht möglich.

Es wurden zum ersten Mal Intensitätsasymmetrien in der Photoemission beobachtet. Diese Untersuchungen zeigen die Bedeutung der Transmission durch die Oberfläche in der spinpolarisierten Photoemission. Die im Außenraum beobachtete Intensität kann unter gewissen experimentellen Bedingungen durch die Polarisierung der zur Emission gelangenden Elektronen beeinflusst werden. Dies gilt insbesondere auch für die konventionelle Photoelektronenspektroskopie an ferromagnetischen Kristallen.

6. Quellennachweis

Zu Kapitel 1:

- /1/ H. Hertz, Wied. Ann. 31, 983 (1887).
- /2/ W. Hallwachs, Wied. Ann. 37, 666 (1889).
- /3/ P. Lennard, Ann. Phys. 8, 149 (1902).
- /4/ A. Einstein, Ann. Phys. 17, 132 (1905).
- /5/ G.W. Gobeli, F.G. Allen und E.O. Kane, Phys. Rev. Lett. 12, 94 (1964).
- /6/ E.O. Kane, Phys. Rev. Lett. 12, 97 (1964).
- /7/ J. Adawi, Phys. Rev. A 134, 788 (1964).
- /8/ C.N. Berglund und W.E. Spicer, Phys. Rev. A 136, 1030 (1964).
- /9/ C.N. Berglund und W.E. Spicer, Phys. Rev. A 136, 1044 (1964).
- /10/ G.D. Mahan, Phys. Rev. B 2, 4334 (1970).
- /11/ G.D. Mahan, Phys. Rev. Lett. 24, 1068 (1970).
- /12/ W.L. Schaich und N.W. Ashcroft, Phys. Rev. B 3, 2452 (1971).
- /13/ C. Caroli, D. Lederer-Rozenblatt, B. Roul und D. Saint-Janus, Phys. Rev. B 8, 4552 (1972).
- /14/ P.J. Feibelman und D.E. Eastman, Phys. Rev. B 10, 4932 (1974).
- /15/ U. Gerhardt und E. Dietz, Phys. Rev. Lett. 26, 1477 (1971).
- /16/ B. Feuerbacher und B. Fitton, Phys. Rev. Lett. 30, 923 (1973).
- /17/ N.V. Smith und M.M. Traum, Phys. Rev. Lett. 31, 1247 (1973).
- /18/ N.V. Smith und M.M. Traum, Phys. Rev. B 11, 2087 (1975).
- /19/ E. Dietz, H. Becker und U. Gerhardt, Phys. Rev. Lett. 36, 1397 (1976).
- /20/ D.T. Pierce und F. Meier, Phys. Rev. B 13, 5484 (1976).
- /21/ P. Zürcher, F. Meier und N.E. Christensen, Phys. Rev. Lett. 43, 54 (1979).
- /22/ D. Pescia und F. Meier, J. Appl. Phys. 53, 2035 (1982).
- /23/ A. Wöhlecke und G. Borstel, Phys. Rev. B 23, 980 (1981).
- /24/ N. Smith, Bell Laboratories und B. Johnson, Elektronenspeicherring, Brookhaven, private Mitteilung von J. Kirschner
- /25/ R. Willis, Cambridge, am Elektronenspeicherring in Daresbury, private Mitteilung von J. Kirschner

Zu Kapitel 2:

- /1/ J. Schwinger, Phys. Rev. 75, 1912 (1949).
- /2/ "Synchrotron Radiations" ed. by C. Kunz, erschien in der Serie 'Topics in Current Physics', Springer-Verlag, Berlin 1979.
- /3/ A. Eyers, J. Kirschner, N. Müller, H.P. Oepen, F. Schäfers, G. Schönhense, U. Heinzmann, VIIIth International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, Jerusalem, August 1983.
- /4/ A. Eyers, Ch. Heckenkamp, F. Schäfers, G. Schönhense und U. Heinzmann, Nucl. Instrum. Meth. 208, 303 (1983).
- /5/ 10 KV Cylindrical Mirror Analyzer System, Varian.
- /6/ Spectraleed, Vacuum Generators.
- /7/ 3 keV Ion Bombardment Gun, Varian.
- /8/ Vatspring-Pendelschieber, VAT.
- /9/ TNB-X-Pumpsystem, Perkin-Elmer.
- /10/ SSL Model 239 G, Position Sensitive Detector Surface Science Laboratories, Inc.
- /11/ LEED-Gitter, Radian 0,9'-1,2', Physical Electronics Industries, Inc.
- /12/ Vielkanalplatten MCP 75, Galileo Electro-Optics Corp.
- /13/ R. Feder und J. Kirschner, Surf. Science 103, 75 (1981).
- /14/ J. Kirschner, Habilitationsschrift, RWTH Aachen, 1982.
- /15/ J. Kessler "Polarized Electrons", Springer-Verlag, Berlin (1976).
- /16/ H.Z. Sar-el, Rev. Sci. Instr. 38, 1210 (1967).
- /17/ Hewlett Packard 9845 B
- /18/ K. Hünlich, Diplomarbeit, RWTH Aachen, April 1984.

Zu Kapitel 3:

- /1/ R. Feder, Phys. Rev. Lett. 36, 598 (1982).
- /2/ Kooperation G. Thörner und G. Borstel, Universität Osnabrück und B. Ackermann und R. Feder, Universität Duisburg.
Anmerkung des Autors: Die Zusammenarbeit wurde zum Zeitpunkt der Fertigstellung der vorliegenden Arbeit abgebrochen.
- /3/ H.Y. Fan, Phys. Rev. 68, 43 (1945).
- /4/ H. Mayer und H. Thomas, Z. Physik 147, 419 (1957).
- /5/ C.N. Berglund und W.E. Spicer, Phys. Rev. 136, Phys. Rev. 136, 1030 (1964)
- /6/ C.N. Berglund und W.E. Spicer, Phys. Rev. 136, 1044 (1964)
- /7/ M. Wöhlecke und G. Borstel, "Spin-polarized photoelectrons and crystal symmetry" in: Optical Orientation, Hrsg. F. Meier und B.P. Zakharchenya, North-Holland, Amsterdam (1984).
- /8/ J. Kirschner, R. Feder und J.F. Wendelken, Phys. Rev. Lett. 47, 614 (1981).
- /9/ K. Koyama, Z. Physik B 22, 337 (1975).
- /10/ K. Koyama und H. Merz, Z. Phys. B 20, 131 (1975).
- /11/ J. Reyes und J.S. Helman, Phys. Rev. B 16, 4283 (1977).
- /12/ G. Borstel und M. Wöhlecke, Phys. Rev. B 26, 1148 (1982).
- /13/ P.J. Feibelman, Phys. Rev. Lett. 34, 1092 (1975).
- /14/ G.F. Koster, J.O. Dimmock, R.G. Wheeler und H. Statz, "Properties of the Thirty-Two-Point Groups", MIT Press, Cambridge, Mass. (1963).
- /15/ J.C. Slater, "Quantum Theory of Molecules and Solids", Vol. 2, "Symmetry and Energy Bands in Crystals", McGraw-Hill Book Company, New York (1965).
- /16/ M. Wöhlecke und G. Borstel, Phys. Rev. B 23, 980 (1981).
- /17/ G. Borstel und M. Wöhlecke, Phys. Rev. B 28, 3153 (1983).
- /18/ G.F. Koster, Phys. Rev. 109, 227 (1958).
- /19/ J. Kessler, "Polarized Electrons", Springer-Verlag, Berlin (1976).
- /20/ M.R. O'Neill, M. Kalsvaart, F.B. Dunning und G.K. Walters, Phys. Rev. Letters 34, 1167 (1975)
- /21/ N. Müller und D. Wolf, Am. Phys. Soc. II 21, 944 (1976).
- /22/ R. Feder, J. Phys. C 14, 2049 (1981).
- /23/ R. Feder und J. Kirschner, Surf. Science 103, 75 (1981).

Zu Kapitel 4:

- /1/ F.J. Himpsel, Advances in Physics 32, 1 (1983).
- /2/ F.J. Himpsel, Appl. Optics 19, 3961 (1980).
- /3/ E.W. Plummer und W. Eberhardt, Advances in Chemical Physics 49, 533 (1982).
- /4/ H. Ibach in: "Electron Spectroscopy for Surface Analysis", Hrsg. H. Ibach, erschienen in der Serie 'Topics in Current Physics', Springer-Verlag, Berlin (1977).
- /5/ R. Hora und M. Scheffler, Phys. Rev. B 29, 692 (1984).
- /6/ A. Eyers, E. Schäfers, G. Schönhense, U. Heinzmann, H.P. Oepen, K. Hünlich, J. Kirschner und G. Borstel, Phys. Rev. Lett. 52, 1559 (1984).
- /7/ C. Herring, Phys. Rev. 52, 365 (1937).
- /8/ F.J. Himpsel und D.E. Eastman, Phys. Rev. B 18, 5236 (1978).
- /9/ K.A. Mills, R.F. Davis, S.D. Kevan, G. Thornton und D.A. Shirley, Phys. Rev. B 22, 581 (1980).
- /10/ K. Hünlich, Diplomarbeit, RWTH Aachen, April 1984.
- /11/ M. Wöhlecke und G. Borstel, Phys. Rev. B 28, 980 (1981).
- /12/ Messungen aus /6/. Wegen der geringen Punktdichte bei den Messungen mit dem Mott-Detektor werden Feinstrukturen, wie hier diskutiert, nicht aufgelöst.
- /13/ G. Borstel, private Mitteilung
- /14/ J. Kirschner, R. Feder und J.F. Wendelken, Phys. Rev. Lett. 47, 614 (1981). Es läßt sich zeigen, daß innerhalb einer Spiegelebene gilt $|P| = |A|$, wobei P die Polarisation von primär unpolarisierten Elektronen nach der Streuung ist ($P = P_{\perp}$). Eine sehr prominente Anwendung dieser Gleichung findet man beim Doppelstreuexperiment /15/.
- /15/ J. Kirschner und R. Feder, Phys. Rev. Lett. 42, 1008 (1979).
- /16/ P. Bauer, Bericht, MPI für Plasmaphysik, IPP 9/34 (1980).
- /17/ G. Borstel, zur Veröffentlichung eingereicht.
- /18/ A. Goldmann, Vakuum-Technik 7, 204 (1982).
- /19/ G.F. Koster, Phys. Rev. 109, 227 (1958).
- /20/ J. Kessler, "Polarized Electrons", Springer-Verlag, Berlin (1976).
- /21/ J. Kirschner, Habilitationsschrift, RWTH Aachen, 1982.
- /22/ H. Eckardt et al., zur Veröffentlichung eingereicht bei J. Phys. F.
- /23/ G. Borstel, private Mitteilung.

Danksagung

Herrn Prof. Dr. H. Ibach danke ich verbindlichst für die Möglichkeit, die Arbeit im Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik durchführen zu können, sowie für seine stete Förderung und Unterstützung.

Für die Betreuung dieser Arbeit möchte ich mich bei Herrn Priv. Doz. Dr. J. Kirschner bedanken, dessen Anregungen und Ratschläge wesentlich zum Gelingen der Arbeit beitrugen. Seine ständige Diskussionsbereitschaft half bei der Klärung vieler Probleme.

Bei meinem Mitstreiter und Leidensgefährten, Herrn Cand. Dipl.-Phys. K. Hünlich, möchte ich mich ganz besonders bedanken. Seine moralische Unterstützung half, so manche Rückschläge zu überwinden. Seiner Besessenheit im Umgang mit Rechnern entsprangen viele nützliche Berechnungen zum Spektrometer und sämtliche Meß- und Auswertprogramme. Für seine Einsatzbereitschaft, auch während vieler Nächte, sei ebenfalls gedankt.

Herrn Prof. Dr. G. Borstel (Universität Osnabrück) danke ich für die Bereitstellung vieler, unveröffentlichter Daten. Seinem Interesse an den Ergebnissen dieser Arbeit verdanke ich viele Anregungen, die in die Interpretation einfließen.

Herrn Dipl.-Phys. G. Thörner (Universität Osnabrück) danke ich für die Zeit, die er in vielen fruchtbaren Diskussionsstunden für mich aufbrachte.

Des weiteren möchte ich allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Heinzmann, insbesondere Herrn Dipl.-Phys. A. Eysers, danken, deren unermüdliche Unterstützung in Berlin zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat.

Bedanken möchte ich mich auch bei der Konstruktionsabteilung und den Zentralwerkstätten der KFA für die Planung und Fertigung der Apparatur.

Den Herren der beiden Institutswerkstätten gilt mein Dank für die schnelle und sorgfältige Ausführung der Arbeiten.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn J. Larscheid für die Hilfe beim Aufbau der Apparatur.

Frau R. Hoven möchte ich für die guten Photoarbeiten danken.

Für die sorgfältige Reinschrift der Arbeit danke ich Frau D. Krüger.

