# 

# Diplomarbeit

# Inka Lauter

Institut für Kernphysik der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main

 $03.\ 12.\ 2007$ 

### Erklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet und sämtliche Stellen, die benutzten Werken im Wortlaut oder dem Sinne nach entnommen sind, mit Quellen bzw. Herkunftsangaben kenntlich gemacht habe.

Frankfurt am Main, den 03. Dezember 2007

...für meine Eltern und für meinen Freund ...

# Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung 1			
	1.1	Naturkonstanten, Atomare Einheiten und Umrechnungsfaktoren			
2	The	eoretische Grundlagen			
	2.1	Festkörper	5		
	2.2	Viel-Teilchen-Theorie	8		
	2.3	Supraleitung	11		
		2.3.1 BCS-Theorie	13		
	2.4	Hochtemperatursupraleitung	16		
		2.4.1 Struktur von Hochtemperatursupraleitern	16		
		2.4.2 Modellsysteme der Hochtemperatursupraleitung	19		
		2.4.3 Die SO(5)-Theorie der Hochtemperatursupraleitung	21		
	2.5	Photoemission von Oberflächen	21		
		2.5.1 Das Drei-Stufen-Modell	24		
		2.5.2 Das Ein-Stufen-Modell	28		
	2.6	Grundlagen der Doppel-Photoemission	29		
3	3 Experiment				
	3.1	Kammer			
	3.2	Vakuumsystem	34		
	3.3	Kryostat			
	3.4	4 Einbau und Präparation der Probe			
	3.5	5 Messmethode			
		3.5.1 Spektrometer	38		
		3.5.2 Detektor	42		
	3.6	Datenaufnahme	45		
	3.7	Synchrotron	47		
		3.7.1 Synchrotronstrahlung	47		
		3.7.2 Messplatz 3m-NIM-1 am BESSY	48		

4	Datenanalyse				
	4.1	Kalibrierung des Detektors	52		
4.2 Resortierungsalgorithmus					
		4.2.1 Resortierung von Signalen	55		
		4.2.2 Rekonstruktion von Signalen	56		
	4.3	Kalibrierung des Spektrometers	57		
5	5 Ergebnisse und Interpretation				
	5.1	Ergebnisse aus Einfach-Photoemission	62		
5.2 Ergebnisse aus Doppel-Photoemission					
	5.3	Vergleich zwischen Doppel-Photoemission oberhalb und unter- halb der Sprungtemperatur			
6	Zus	Zusammenfassung und Ausblick			
Ał	obild	ungsverzeichnis	81		
Li	Literatur				
Da	Danksagung				

## 1. Einleitung

Wer es aber verachtet, von der Wissenschaft zu kosten, der bekommt auch von der Freude nichts zu kosten, die sie bereitet. Aristoteles, Protreptikos

Der Photoeffekt ist ein physikalisches Phänomen, das von Wilhelm Hallwach, einem Schüler von Heinrich Hertz, 1887 erstmals entdeckt und durch Albert Einstein 1905 [EIN05] genauer beschrieben wurde. 1921 erhielt dieser hierfür seinen Nobelpreis. Einsteins Theorie zum Photoeffekt bekam aber erst mit der Quantenphysik ein gesichertes Fundament. Mit Hilfe moderner Experimente (z. B. Photoelektronenspektroskopie<sup>1</sup> (*PES*)) ist es heutzutage möglich schnell ablaufende Prozesse, wie beispielsweise den Photoeffekt, im Detail zu untersuchen.

Bei dem in dieser Arbeit durchgeführten Experiment wurden Elektronen, die beim Beschuss mit Synchrotronstrahlung von einem Festkörper (einem Hochtemperatursupraleiter) emittiert wurden, mit Hilfe der Photoemissionsspektroskopie (*PES*) untersucht. Um zu klären welche physikalischen Prozesse bei der *PES* im Festkörper ablaufen, wird in der theoretischen Festkörperphysik die *Viel-Teilchen-Theorie* verwendet.

Um zu verstehen, was genau bei einer Reaktion, die in einem Experiment beobachtet wird, passiert, ist es nötig die gemessenen Daten mit einer Theorie zu vergleichen. Da im Bereich der Hochtemperatursupraleiter die bestehenden Theorien zurzeit noch kontrovers diskutiert werden, wäre es möglich mit

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Bei der Photoelektronenspektroskopie werden durch elektromagnetische Strahlung (z.B. Synchrotronstrahlung) Elektronen aus einem Material herausgelöst. Die Bestimmung der kinetischen Energie dieser Elektronen erlaubt Rückschlüsse auf (u.a.) die elektronische Beschaffenheit des untersuchten Festkörpers.

Hilfe dieses Experiments zu zeigen welche Theorie die wahrscheinlichere ist. In dem Experiment, mit dem sich diese Arbeit befasst, wurden bei der Photoelektronenspektroskopie eines Hochtemperatursupraleiters (*HTSL*) Messdaten – sowohl im nicht supraleitenden, als auch im supraleitenden Bereich des HTSLs – gesammelt, um diese miteinander zu vergleichen und gegebenenfalls Unterschiede abzugrenzen. Das Ziel dabei ist, Korrelationen zwischen den Elektronen im Festkörper nachzuweisen.

M. Hattass zeigte in seiner Dissertation [HAT04], dass Elektronen innerhalb eines metallischen Festkörpers (Kupfer) auf verschiedene Weise miteinander korreliert sein können. Neben diesen Korrelationen wird im Supraleiter noch eine weitere Art der Korrelation erwartet. Beim Beschuss der Probe – bei einer Temperatur unterhalb der Sprungtemperatur – mit Synchrotronstrahlung im Bereich von 10-30  $eV^2$ , wird zusätzlich das Herauslösen von im Grundzustand korrelierter Elektronenpaare, so genannter Cooper-Paare (kondensierte Elektronenpaare (Quasipartikel)), erwartet. Die Cooper-Paare sollten sich auf Grund ihrer speziellen Winkel- und Impulsrelation von nichtkondensierten Elektronen abgrenzen lassen (Kapitel 5).

Oftmals wird in der Festkörperphysik die elektronische Struktur von Festkörpern mit ARPES (Angle Resolved Photoemission Spektroskopie) untersucht. ARPES bietet eine winkel- und energieaufgelöste Messung bei kleiner Raumwinkelabdeckung. Wegen des kleinen Raumwinkelbereichs ist eine koinzidente Messung von Elektronen nicht möglich. Diese Art von Spektroskopie liefert jedoch eine hohe Energieauflösung und eignet sich daher zum Vergleich der theoretischen/ berechneten mit den gemessenen Bandstrukturen (Kapitel 2.1) des jeweiligen Festkörpers. Um eine koinzidente Messung von Elektronen möglich zu machen, wie es bei dem vorliegenden Experiment verlangt wird, muss der Raumwinkelbereich, innerhalb welchem Elektronen nachgewiesen werden können, vergrößert werden. Daher wurde bei diesem Versuch das Detektor-Spektrometer-System COLTRIMS (Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy) verwendet. Dieses System wird bereits seit Jahren in der Atomphysik zur koinzidenten Messung von Elektronen und Ionen genutzt. Neben der winkel- als auch der energieaufgelösten Messung, die auch ARPES bietet, liegt der Vorteil bei COLTRIMS in einer Raumwinkelabdeckung von bis zu  $2\pi$ . Nachteil ist jedoch die schlechtere Energieauflösung im Vergleich zu ARPES, wodurch detailliertere Untersuchungen der Bandstruktur der Festkörper nicht möglich sind (Kapitel 5.1).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Bei dieser Energie werden nur Elektronen aus dem Valenzband erwartet, bei der der Auger-Elektronen-Zerfall noch keine Rolle spielt.

## 1.1 Naturkonstanten, Atomare Einheiten und Umrechnungsfaktoren

#### Naturkonstanten

$m_e$	Elektronenmasse	$9.10938 \cdot 10^{-31}$	kg
e	Elementarladung	$1.60218 \cdot 10^{-19}$	C = As
c	Lichtgeschwindigkeit	299792458	${ m m}{ m s}^{-1}$
h	<b>Planck-Konstante</b> ( $h = 2\pi\hbar$ )	$6.6260755\cdot 10^{-34}$	Js

### Umrechnungsfaktoren von SI-Einheiten in atomare Einheiten

Größe	Atomare Einheit (a.u.)	System International (SI)
Masse	$1 a.u. = 9.10938 \cdot 10^{-31} kg$	$1 \ kg = 1/9.10938 \cdot 10^{-31}$ a.u.
Länge	$1 \ a.u. = 0,529177 \cdot 10^{-10} \ m$	$1 m = 1,8897 \cdot 10^{10} a.u.$
Zeit	$1 a.u. = 2,4189 \cdot 10^{-17} m$	$1 \ s = 4,1341 \cdot 10^{16} \ a.u.$
Spannung	1 a.u. = 27,212 V	1 V = 0,0367 a.u.
Geschwindigkeit	$1 \ a.u. = 2,1877 \cdot 10^6 \ \frac{m}{s}$	$1 \frac{m}{s} = 4,5706 \cdot 10^{-7} a.u.$
Energie	$1 a.u. = 27,212 eV = 4.3598 \cdot 10^{-18} J$	$1 \ eV = 0,0367 \ a.u.$
Impuls	$1 \ a.u. = 1,992798 \cdot 10^{-24} \ kg\frac{m}{s}$	$1 \ kg\frac{m}{s} = 5,0181 \cdot 10^{23} \ a.u.$

#### Vorsätze für Einheiten

Symbol	Name	Wert	Symbol	Name	Wert
Y	Yotta	$10^{24}$	d	Dezi	$10^{-1}$
Z	Zetta	$10^{21}$	с	Zenti	$10^{-2}$
E	Exa	$10^{18}$	m	Milli	$10^{-3}$
Р	Peta	$10^{15}$	$\mu$	Mikro	$10^{-6}$
Т	Tera	$10^{12}$	n	Nano	$10^{-9}$
G	Giga	$10^{9}$	р	Piko	$10^{-12}$
Μ	Mega	$10^{6}$	f	Femto	$10^{-15}$
k	Kilo	$10^{3}$	а	Atto	$10^{-18}$
h	Hekto	$10^{2}$	Z	Zepto	$10^{-21}$
da	Deka	$10^{1}$	у	Yokto	$10^{-24}$

## 2. Theoretische Grundlagen

Es gibt nichts Praktischeres als eine gute Theorie. I. Kant

In diesem Kapitel sollen die theoretischen Grundlagen, welche zum Verständnis des Experiments erforderlich sind, dargestellt werden.

Hierzu wird zunächst die Grundlage zum Verständnis der Energielevels im Festkörper (vom freien Atom ausgehend) gegeben. Darüber hinaus wird ein Überblick über die in der Festkörperphysik verwendete Nomenklatur und ein Einblick in den Aufbau von Festkörpern verschafft.

In den darauf folgenden Abschnitten wird sowohl die Viel-Teilchen-Theorie, auf der die theoretische Festkörperphysik basiert, dargelegt, als auch die Theorien zur Supraleitung sowie der Hochtemperatursupraleitung näher erläutert und das untersuchte Material beschrieben. In den letzten beiden Abschnitten dieses Kapitels wird auf die Photoemission im Allgemeinen und auf die Grundlagen der Doppelphotoemission eingegangen.

### 2.1 Festkörper

Innerhalb eines Atoms unterliegen die Elektronen einem vom Atomkern ausgehenden Potential sowie den Potentialen, die sie untereinander ausüben. Die Elektronen besetzen auf Grund ihrer Aufenthaltswahrscheinlichkeiten verschiedene Energieniveaus, welche mit Hilfe der Quantenmechanik berechnet werden können. Nähert man zwei Atome einander, so überlappen sich ihre Potentiale und ihre Energieniveaus spalten durch die Kopplungsenergie in jeweils zwei Niveaus auf [MAY97]. Nähert man nun noch ein drittes und viertes Atom an, so spalten sich die Energieniveaus dementsprechend immer weiter auf. Setzt man dieses Verfahren so oft fort, bis man in den Bereich der Größenordung der Anzahl von Atomen in einem Festkörper kommt, also  $10^{23}$ , entsteht aus den überlappenden Niveaus ein kontinuierliches Energieband. (Abb. 2.1).



**Abbildung 2.1:** Wenn Atome aneinander gereiht werden, spalten alle Niveaus entsprechend der Anzahl der miteinander wechselwirkenden Potentiale auf (b). Bei einer sehr großen Anzahl von Atomen entstehen aus den überlappenden Niveaus Energiebänder (a). Elektronen auf niedrigeren Niveaus sind stärker an ihr Atom gebunden. Infolgedessen ist die Wechselwirkung mit Nachbaratomen geringer, was zu einer nicht nennenswerten Aufspaltung dieser Energieniveaus und somit zu schmalen Energiebändern führt. [MAY97]

Die Größe der Aufspaltung, also die Breite des Energiebandes, hängt sowohl von der Stärke der Bindung der Elektronen an ihr Atom, als auch von der Distanz der Atome zueinander ab. Diese nimmt Einfluss auf die Stärke der Wechselwirkung der einzelnen Elektronen im Hinblick auf die umgebenen Atome. Die Gesamtheit dieser einzelnen Bänder, die aus den einzelnen Energieniveaus hervorgehen und die alle erlaubten Energiewerte der Elektronen im Festkörper einnehmen, nennt man Bandstruktur. Die Bänder können völlig getrennt sein oder auch überlappen, das hängt sowohl von den atomaren Niveaus, als auch von der Geometrie des Festkörpers ab.

Wenn Atome kondensieren, bilden sie in der Regel eine kristalline Struktur (s.u. *Kristallgitter*). Die Anordnung der Atome im Kristall ist dabei periodisch. Das bedeutet, dass dem Festkörper eine Elementarzelle<sup>1</sup> zu Grunde liegt, aus der, durch wiederholte Aneinanderreihung mehrerer dieser gleich aufgebauten Zellen, der gesamte Kristall hervorgeht. Eine solche Zelle, die nur einen Gitterpunkt in ihrem Zentrum enthält, nennt man *Wigner-Seitz-Zelle*.

Eine Elementarzelle kann in verschiedener Weise gewählt werden. Die üb-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Eine Elementarzelle ist die kleinstmögliche Zelle innerhalb eines Festkörpers, die die volle Symmetrie des Gitters darstellt und durch die, durch wiederholte Translation in alle drei Raumrichtungen, ein Kristallgitter aufgebaut werden kann.



Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der ersten Elementarzelle (Brilloinzone) bei einem kubischen Gitter.

liche<sup>2</sup> Definition sieht folgendermaßen aus; die Zelle wird durch die Mittelsenkrechten zwischen dem Punkt,  $\Gamma$ , (k = 0) und dem nächsten Punkt, M, des reziproken Gitters gebildet. Diese Verbindungslinie,  $\Sigma$ , ist die Hypothenuse eines rechtwinkligen Dreiecks. Der dritte Punkt, X, dieses Dreiecks wird mit den andern beiden Punkten über die gleichlangen Seiten,  $\Delta$  und Z, verbunden (Abb.2.2). Diese Einheitszelle wird auch erste Brillouinzone genannt und ist ein Polyeder im Impulsraum.

Der Kristallimpuls  $\vec{k}$  eines Teilchens wird in der Festkörperphysik als Vektor im reziproken Gitter mit dem Gittervektor  $\vec{G}$  angegeben.

Energieeigenwerte die zwischen den Bändern liegen, können nicht von den Elektronen eingenommen werden.

Über die Bandstruktur eines Festkörpers lassen sich Rückschlüsse auf seine elektronischen Eigenschaften ziehen. Das Valenzband ist das oberste besetzte Band. Alle Bänder darunter, gehen aus vollbesetzten Unterschalen hervor und sind infolgedessen voll besetzt. Ist das Valenzband voll besetzt, spricht man von einem Isolator. Ist es nicht vollbesetzt, so spricht man von einem Leiter.

Innerhalb eines nicht vollbesetzten Valenzbandes kann ein Elektron kontinuierlich Energie aufnehmen, also zur Leitung von Strom beitragen. Der Energiebereich innerhalb dessen ein Elektron Energie aufnehmen kann, wird als Leitungsband bezeichnet.

Bei so genannten Halbleitern ist das Valenzband voll besetzt. Dicht darüber liegt ein unbesetztes Band. Bei genügend hoher Temperatur können durch thermische Energie, Elektronen in dieses Band (das Leitungsband) gehoben werden. Man spricht hierbei von "intrinsischer Leitfähigkeit". Unterhalb dieser Temperatur ist der Halbleiter ein Isolator. Auf Grund dieser Temperaturabhängigkeit nimmt die Leitfähigkeit eines Halbleiters mit der Temperatur zu. Ein metallischer Leiter hingegen weist bei Erhöhung der

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Bei den Hochtemperatursupraleitern hat sich eine etwas andere Konvention durchgesetzt (Kapitel 2.4.1). Das hat jedoch keinen Einfluss auf die hier näher erläuterten, generellen Eigenschaften, dieser speziellen Elementarzelle.

Temperatur einen umgekehrten Zusammenhang auf. Mit den Hintergründen dieses Zusammenhanges, welche sich erst auf quantenmechanischer Ebene veranschaulichen lassen, befasst sich Kapitel 2.3.1. Da sich Elektronen innerhalb des Leitungsbandes völlig frei bewegen können, führt dies zur Modellvorstellung des freien Elektronengases. Dieses Modell geht von der Vorstellung aus, dass sich die Leitungselektronen innerhalb eines Rechteckpotentials, welches durch die Berandung des Festkörpers begrenzt ist, frei bewegen können.

### Kristallgitter

Es gibt zwei- und dreidimensionale Gittertypen.

Wie bereits erwähnt, lässt sich in jedem Kristallgitter eine Zelle finden, die mit allen anderen identisch und daher invariant gegenüber Translation ist. Zusätzlich können die Gitter ebenfalls invariant gegenüber Drehung und Spiegelung sein. In Abhängigkeit davon gegenüber welcher dieser Operationen das Gitter invariant ist, sind die Gittertypen wiederum in so genannte *Bravais-Gitter* unterteilt. Dabei wird vorausgesetzt, dass die gegenüberliegenden Flächen der Elementarzelle parallel zueinander sind.

Die Unterteilung erfolgt über ...

– die Gleich- bzw. Ungleichheit der Seitenlängen (quadratisch oder rechteckig),

 darüber, ob der Winkel innerhalb der Elementarzelle rechtwinklig ist oder nicht (rechtwinklig, hexagonal etc.)

– und darüber, ob die Elementarzelle ein Atom, entweder innerhalb ihrer Flächen (flächenzentriert), oder in ihrem Zentrum (raumzentriert), einschließt.

Im Dreidimensionalen ist das Bravaisgitter *orthorhombisch*, wenn  $a \neq b \neq c$  ist und die Winkel innerhalb der Zelle 90° betragen. Als *tetragonal* bezeichnet man es, wenn  $a = b \neq c$  ist und die Winkel ebenfalls rechtwinklig sind.

### 2.2 Viel-Teilchen-Theorie

Möchte man die Wechselwirkungen innerhalb eines Zwei-Teilchen-Systems beschreiben, ist das relativ einfach. Doch jenseits des Zwei-Teilchen-Problems wird es in der Physik recht schnell kompliziert und die Bewegungsgleichungen lassen sich nicht mehr exakt für alle Konstituenten lösen. So scheint die Beschreibung eines Festkörpers, der in der Regel aus mehr als 10<sup>23</sup> Teilchen besteht, zunächst aussichtslos.

Aufbauend auf der Quantenmechanik und der Quantenstatistik, ist es jedoch möglich, solche Viel-Teilchen-Systeme zu beschreiben. Die Theorie dazu wird als "Viel-Teilchen-Theorie" bezeichnet, welche im folgenden näher erläutert wird.

Ein Festkörper setzt sich aus positiv geladenen Kernen, Rumpfelektronen und Valenzelektronen zusammen. Die Rumpfelektronen befinden sich in Kernnähe und sind fest gebunden, wohingegen die Valenzelektronen aus nicht abgeschlossenen Schalen stammen und unter anderem für die Festkörperbindung zuständig sind [NOLT7].

Da die Eindeutigkeit der Aufteilung in Rumpf und Valenzelektronen dabei nicht gegeben ist, stellt dieses Modell bereits eine Näherung dar. Die Summe aus Kern und Rumpfelektronen werden auch als Gitterionen bezeichnet. Der zugehörige Hamilton-Operator sieht wie folgt aus:

$$H = H_e + H_i + H_{ei} \tag{2.1}$$

Dabei repräsentiert  $H_e$  das Teilsystem der Elektronen,  $H_i$  das der Ionen und  $H_{ei}$  spiegelt die Wechselwirkung der beiden Teilsysteme untereinander wieder.

Ausgeschrieben sieht der Hamilton-Operator also folgendermaßen aus:

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\widehat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j}^{i\neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$
(2.2)

$$+\sum_{\alpha=1}^{N_i} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta}^{\alpha\neq\beta} V_i \left( \vec{R}_{\alpha} - \vec{R}_{\beta} \right)$$
(2.3)

$$+\sum_{i=1}^{N_e}\sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{ei}\left(\vec{r_i} - \vec{R}_{\alpha}\right)$$
(2.4)

Der erste Summand stellt die *kinetische Energie der Elektronen* dar, der zweite ihre *Coulomb-Wechselwirkung*, der dritte die *kinetische Energie der Kerne*, der vierte die *Kern-Kern-Wechselwirkung* und der fünfte die *Elektron-Kern-Wechselwirkung*.

 $\vec{r}$  und  $\vec{R}$  stehen für die Ortskoordinaten der Elektronen und Kerne und e ist die Elementarladung. Aufsummiert wird über die Summe der Elektronen  $N_e$  und über die Summe der Kerne  $N_i$ .  $V_i$  und  $V_{ei}$  repräsentieren die Coulombkräfte zwischen den beteiligten Teilchen.

Die Kern-Kern-Wechselwirkung  $(H_{ii})$  ist verantwortlich dafür, dass die Gleichgewichtslagen der Ionen ein streng periodisches Kristallgitter definieren. Die Ionen schwingen um diese Gleichgewichtslage, ihre Energien

sind quantisiert. Das dazugehörige Elementarquant heißt Phonon. Die Wechselwirkung bedarf also noch einer weiteren Unterteilung in:

$$H_{ii} = H_{ii}^{(0)} + H_p \tag{2.5}$$

Hierbei bestimmt  $H_{ii}^{(0)}$  beispielsweise die Festkörperbindung und  $H_p$  die Gitterdynamik.

Bei der Wechselwirkung beider Teilsysteme untereinander, der Elektron-Kern-Wechselwirkung  $H_{ei}$ , ist ebenfalls eine weitere Aufteilung zweckmäßig.

$$H_{ei} = H_{ei}^{(0)} + H_{ep} \tag{2.6}$$

Dabei steht  $H_{ei}^{(0)}$  für die Wechselwirkung der Elektronen mit Ionen, welche sich im Gleichgewicht befinden und  $H_{ep}$  für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

Um das Gleichungssystem (Gl. 2.1) zu lösen, bedarf es jedoch verschiedener Näherungen, bei denen einige Teilsysteme von vornherein vernachlässigt werden können.

Bei der *Born-Oppenheimer-Näherung* [BOR27] wird das Gitter als starr angenommen, da die Kerne im Vergleich zu den Elektronen sehr schwer und somit auch deutlich langsamer als diese sind. Infolgedessen kann die Schwerpunktsbewegung der Kerne vernachlässigt werden.

Diese Näherung kann aber nur auf Systeme angewendet werden, in denen die Kopplung der Elektronen an die Phononen keine wesentliche Rolle spielt. Sie gilt also nicht für Systeme die Supraleitung aufweisen.

Ebenfalls eine Näherung stellt das so genannte *Jellium-Modell* dar. Dieses ist vor allem auf breite Energiebänder (Kapitel 2.1) anwendbar und gilt deshalb näherungsweise für (z.B.) die Leitungselektronen der Alkalimetalle. Die Ionen bilden bei diesem Modell einen homogen verschmierten Hintergrund, die Kristallstruktur wird also vernachlässigt. Die Bloch-Funktionen<sup>3</sup>, die einen Teil der Lösung der Eigenwertgleichung darstellen, werden in diesem Fall zu ebenen Wellen. Das bedeutet, dass die Elektronen eine über den gesamten Kristall verteilte konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzen. Daher ist dieses Modell weder auf schmale Energiebänder, noch auf die Hochtemperatursupraleitung anwendbar. Die Elektronen in schmalen Energiebändern haben Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, nämlich nahe ihres eigenen Atomrumpfes, auf Grund der Stärke der Bindung an ihr Atom und der damit verbundenen geringen Wechselwirkung mit den Nachbaratomen

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Bloch-Funktionen sind die allgemeinste Lösung der stationären Schrödingergleichung für das Modell eines kristallinen Festkörpers.

#### (Kapitel 2.1).

In dem Kapitel 2.4.2 werden die heute gebräuchlichsten Modelle, die zur Beschreibung der Hochtemperatursupraleitung genutzt werden, vorgestellt.

In der Festkörperphysik dient das Bändermodell zur quantenmechanischen Beschreibung von elektronischen Energiezuständen und definiert so die elektrisch leitenden Eigenschaften eines Festkörpers. Die Bandstruktur beschreibt die Zustände von Elektronen und Löchern eines kristallinen Festkörpers im Impulsraum und ist normalerweise im reduzierten Zonenschema dargestellt. Damit ist gemeint, dass die Bänder außerhalb der ersten Brillouinzone in diese zurückgefaltet werden, indem man den geeigneten reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  nutzt. Wegen der Translationsinvarianz des Gitter-Potentials  $V(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \vec{T}$  [KIT99], sind nur Lösungen einer bestimmten Form für die Schrödingergleichung möglich, weil die Lösung der Wellengleichung Eigenfunktionen des Translationsoperators und der Schrödingergleichung sind:

$$P\left(\vec{T}\right)\Psi_{k}\left(\vec{r}\right) = \Psi_{k}\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = e^{i\vec{k}\vec{T}}\Psi_{k}\left(\vec{r}\right)$$
(2.7)

und

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\left(\vec{r}\right)\right]\Psi_k\left(\vec{r}\right) = E\left(\vec{k}\right)\Psi_k\left(\vec{r}\right)$$
(2.8)

 $E(\vec{k})$  gibt hierbei die Bandstruktur wieder.

Lösungen dieses Typs bezeichnet man allgemeinhin als Blochfunktionen [[BLO29],[KIT99]].  $\Psi_k(\vec{r})$  und  $E(\vec{k})$  sind Funktionen von  $\vec{k}$  und besitzen somit die gleiche Periodizität wie das Gitter. Somit reicht es aus die Eigenschaften des Systems nur in der ersten Brillouinzone zu betrachten.

### 2.3 Supraleitung

Als Supraleitung wird der widerstandsfreie Stromtransport bezeichnet. Ursache für den Widerstand bei normalen Leitern sind Stöße der Elektronen mit den Atomrümpfen. Auf die quantenmechanische Beschreibung dieser Stöße wird innerhalb des Abschnitts über die BCS-Theorie näher eingegangen.

1908 schaffte es der Physiker *Heike Kammerlingh-Onnes*<sup>4</sup>, Helium zu verflüssigen (bei 4,2 K). 1911 hatte er die Möglichkeit geschaffen, Materialien mit Hilfe des Heliums auf 1,7 K abzukühlen. Seine Untersuchungen an Quecksilber bestätigten die zu der Zeit bestehende Theorie, dass der Widerstand

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>(1853-1926) in Leiden

linear mit der sinkenden Temperatur abnehmen müsse. Bei einer Temperatur von 4,2 K verschwand der Widerstand jedoch völlig. Das widersprach gänzlich allen Vermutungen.

Dieses Phänomen nannte er Supraleitung.

Die ersten theoretischen Modelle zur Supraleitung erschienen allerdings erst 20 Jahre nach ihrer Entdeckung. 1933 entdeckten die deutschen Physiker F. W. Meißner und R. Ochsenfeld eine fundamentale Eigenschaft des supraleitenden Zustandes. Sie erkannten, dass ein Magnetfeld aus dem Inneren eines Supraleiters immer verdrängt wird. Ein Supraleiter ist somit ein idealer Diamagnet. Bekannt wurde diese Eigenschaft unter dem Namen Meißner-Ochsenfeld-Effekt.

In den dreißiger Jahren machten die Brüder *Fritz* und *Heinz London* den Ansatz, die Supraleitung durch die Erweiterung der Maxwellschen Gleichungen und den thermodynamischen Theorien zu deuten. 1949 gelang es den russischen Physikern *W. L. Ginzburg* und *L. D. Landau* die Theorie der thermodynamischen Phasenübergänge so zu erweitern, dass es möglich wurde die fundamentalen Eigenschaften der Supraleiter zu erklären.

1957 entstand eine Theorie, die die mikroskopischen Ursachen des Phänomens Supraleitung, zumindest im Bereich der Tieftemperatur, zufrieden stellend klärte und eine quantenmechanische Erklärung lieferte: die *BCS*-*Theorie*.

Zusammenfassend lässt sich der supraleitende Zustand folgendermaßen charakterisieren:

– Unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  verschwindet der Widerstand schlagartig.

– Unterhalb eines kritischen Magnetfeldes  $H_c$  wird der magnetische Fluss vollständig aus dem Supraleiter verdrängt. Der Supraleiter verhält sich also ideal diamagnetisch.

– Oberhalb einer kritischen Stromdichte  $j_c$  findet der Übergang zu einem normalen Leiter statt. Die Aufrechterhaltung der Supraleitung ist infolgedessen durch die Stromdichte begrenzt.

In der Supraleitung wird zwischen Supraleitern erster und zweiter Art<sup>5</sup> unterschieden. Sie unterscheiden sich nicht im Mechanismus der Supraleitung (beide Arten zeigen ähnliche thermische Eigenschaften beim Übergang vom supraleitenden zum normalleitenden Zustand), jedoch ist der Meißner-Ochsenfeld-Effekt für beide Arten sehr verschieden [KIT99]. Ein Supraleiter erster Art verdrängt ein Magnetfeld, bis zu einer kritischen Feldstärke  $H_c$ ,

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Es gibt auch noch Supraleiter dritter Art, die sich von den Supraleitern zweiter Art nur durch ihre extrem hohe kritische Feldstärke unterscheiden.

vollständig. Oberhalb dieser Feldstärke dringt das Magnetfeld ein und die Supraleitung wird zerstört. Bei Supraleitern zweiter Art gibt es eine untere kritische Feldstärke  $H_{c1}$ . Bis zu dieser wird der magnetische Fluss ebenfalls vollständig verdrängt. Oberhalb  $H_{c1}$  wird das Feld nur teilweise verdrängt und es kommt zur Ausbildung von so genannten Flussschläuchen. Ein Flussschlauch ist ein Bereich in dem die magnetischen Feldlinien durch den Supraleiter geführt werden. Im Kern dieser Flussschläuche befindet sich ein kleiner Bereich in dem das Material nicht supraleitend ist. Erst ab einer höheren, zweiten kritischen Feldstärke  $H_{c2}$ , dringt der Fluss vollständig ein und die Supraleitung verschwindet.

Ursache für dieses unterschiedliche Verhalten von Supraleitern erster und zweiter Art, auf ein von außen angelegtes Magnetfeld, ist die mittlere freie Weglänge der Leitungselektronen im normalleitenden Zustand.

Da eine tiefergehende Beschreibung dieses Phänomens über den eigentlichen Inhalt dieser Arbeit hinausginge, möchte ich an dieser Stelle auf die Literatur [KIT99] verwiesen, in welcher das Thema eingehend behandelt.

### 2.3.1 BCS-Theorie

Die Basis der BCS-Theorie<sup>6</sup> gründet auf der Bindung zweier Elektronen zu einem so genannten *Cooper-Paar*.

Phänomenologisch betrachtet, zieht ein Elektron, bedingt durch die Coulombkräfte<sup>7</sup>, positive Atomrümpfe zu sich heran. Das hat eine lokale Gitterpolarisation zur Folge. Das System aus Elektron und polarisierten Atomrümpfen nennt man auch Polaron (Abb. 2.3).



Abbildung 2.3: Elektronen Paarbindung im Atomgitter [KAT99]

Diese Gitterpolarisation wirkt wie eine positive Ladung und kann ihrerseits

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Benannt nach den amerikanischen Physikern John Bardeen, Leon N. Cooper, J. Robert Schrieffer

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Die Coulombkraft ist proportional der Größe der Ladung und umgekehrt proportional dem Quadrat der Abstände.

ein anderes Elektron zu sich heran ziehen. Das bedeutet, dass über das Gitter eine gegenseitige indirekte Anziehung beider Elektronen erfolgt, eine so genannte *dynamische Polarisation*. Folgende Bedingung müssen durch beide Elektronen erfüllt sein, damit die Coulombabstoßung übertroffen werden kann. Sowohl der Impuls  $\vec{p}$ , als auch der Spin<sup>8</sup>  $\vec{s}$  der beiden Elektronen müssen antiparallel zueinander sein. Desweiteren darf der Abstand zwischen den beiden Elektronen nicht zu klein sein. Ein solches durch dynamische Polarisation gebundenes Elektronenpaar (e- ,  $\vec{p}$ ,  $\vec{s}$ ; e- ,  $-\vec{p}$ ,  $-\vec{s}$ ) heißt *Cooper-Paar* (Abb. 2.4) [KAT99].



Abbildung 2.4: Cooper-Paar, dargestellt im Feynman-Diagramm [KAT99]

Als *Kohärenzlänge* des Cooper-Paares wird der maximale Abstand der beiden Elektronen bezeichnet bei dem die Bindung noch wirksam ist. Die Kohärenzlänge ist abhängig von der mittleren freien Weglänge (Kapitel 2.5.1) der Elektronen im normalleitenden Zustand.

Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter wird im Allgemeinen Modell durch den Austausch von *virtuellen Phononen* beschrieben. Virtuell deshalb, weil sie nur während der kurzen Korrelationszeit zwischen den beiden Elektronen auftreten. Diese Phononen stellen die kurzzeitige Erzeugung einer Gitterschwingung dar.

Der supraleitende Zustand lässt sich auf diesem anschaulichen Weg jedoch noch nicht deuten. Eine Erklärung liefert erst die quantenmechanische Betrachtungsweise. Ein Elektron ist ein Fermion. Es hat also einen halbzahligen Spin und unterliegt der *Fermi-Dirac-Statistik*. Diese besagt, dass keine zwei Teilchen ein und denselben Zustand besetzen dürfen. Da sich bei dem Cooper-Paar die halbzahligen, antiparallelen Spins zu einem Gesamtspin von 0 addieren, gehört es zu der Teilchengruppe der Bosonen. Diese unterliegen

 $<sup>^8 \</sup>rm Der$  Spin bezeichnet den Eigendrehimpuls des Elektrons. Dieser ist quantisiert und hat entweder den Wert +1/2 oder -1/2.

der Bose-Einstein-Statistik wechselwirkungsfreier Teilchen. Sie treten also nicht in Wechselwirkung mit dem Gitter und können alle gleichzeitig ein und denselben quantenmechanischen Zustand einnehmen. Daher lässt sich die Gesamtheit der Cooper-Paare (Bose-Einstein-Kondensat) im Gitter durch eine einzige Wellenfunktion beschreiben. Durch die nicht vorhandene Wechselwirkung mit den Gitterionen, ist der Stromfluss verlustfrei.

Bei der Kopplung der Elektronen wird ein Teil der kinetischen Energie in Bindungsenergie umgesetzt. Das hat zu Folge, dass sich alle Cooper-Paare in einem gemeinsamen Energieniveau befinden, welches unterhalb der Fermi-Energie liegt (Die Fermi-Energie gehört zu den Elektronen mit der höchsten Energie.). Auf Grund dessen entsteht im Bändermodell um die Fermi-Energie  $E_F$  eine Energielücke der Breite  $E_g$  (Abb. 2.5).



Abbildung 2.5: Bändermodell eines Supraleiters [KAT99]

Die Bindungsenergie eines Cooper-Paares beträgt  $10^{-3}$  eV und kann somit durch genügend große thermische Energie des Gitters aufgebrochen werden. Oberhalb dieser thermischen Energie bzw. der dementsprechenden kritischen Temperatur  $T_c$ , verschwindet folglich der supraleitende Zustand. Auf Grund der Abhängigkeit der Cooper-Paare von der thermischen Energie des Gitters, kann die BCS-Theorie in dieser Form nur auf metallische Supraleiter, bis hinauf zu einer maximalen Sprungtemperatur  $T_c$  von etwa 40 K, angewendet werden.

### 2.4 Hochtemperatursupraleitung

Hochtemperatursupraleiter (HTSL) sind extreme Supraleiter zweiter Art (Kapitel 2.3). Vor 1986 lag die höchste erreichte Sprungtemperatur von Supraleitern bei 23,2 K (Nb<sub>3</sub>Ge (1973)). Man glaubte im Allgemeinen nicht daran, dass diese Temperatur noch wesentlich weiter überschritten werden könnte. Im Jahre 1986 jedoch machten die Schweizer Physiker J. G. Bednorz und K. A. Müller die Entdeckung, dass Supraleitung in Kupferoxidverbindungen (Kuprate) zu finden ist [BUR92]. 1987 wurden sie hierfür mit dem Nobelpreis ausgezeichnet.

Ein Unterschied zwischen metallischen und kupferoxidhaltigen Materialien besteht unter anderem darin, dass beim Metall ein Isotopen-Effekt zu beobachten ist. Der Isotopen-Effekt wurde von *E. Maxwell* und *C. A. Reynolds* 1937 entdeckt. Er beschreibt die Abhängigkeit der Sprungtemperatur  $T_c$  von der Isotopenmasse einer metallischen Probe. Kuprate weisen kaum einen solchen Effekt auf. Dies ist ein wichtiger Hinweis darauf, dass die anziehende Wechselwirkung der Elektronen in HTSL nicht durch Phononenaustausch oder andere vom Gitter abhängigen Mechanismen vermittelt wird, wie es bei metallischen Supraleitern der Fall ist.

Um die Modelle der Hochtemperatursupraleitung, die zur Zeit in der theoretischen Festkörperphysik zur Anwendung kommen, vorstellen zu können, wird im Folgenden zunächst auf die allgemeine Struktur von Hochtemperatursupraleitern eingegangen. Dies geschieht am Beispiel von dem Material  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ , welches in dem, dieser Arbeit zu Grunde liegenden, Experiment untersucht wurde.

### 2.4.1 Struktur von Hochtemperatursupraleitern

Wie alle Kuprate ist  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  (auch Bi2212 oder BSCCO genannt) schichtartig aus Kupferoxidebenen und isolierenden Zwischenschichten aufgebaut (Abb. 2.6).

Die Kupferoxidebenen bestimmen mit ihrer quasizweidimensionalen Physik die elektronischen und magnetischen Eigenschaften.

Durch chemische Dotierung wird aus dem Mott-Isolator<sup>9</sup> (undotierter HTSL) ein Hochtemperatursupraleiter. Mit chemischer Dotierung ist das Einbringen von Fremdatomen gemeint, welche eine andere Elektronenanzahl haben als das ursprüngliche Atom. Von einer n-Dotierung spricht man, wenn das

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Als Mott-Isolator werden Materialien bezeichnet, die nach dem Bändermodell (Kapitel 2.2) eigentlich elektrisch leitend sein sollten, sich aber im Experiment als Isolator erweisen.



**Abbildung 2.6:** Darstellung der Kristallstruktur von Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+ $\delta$ </sub> (Bi2212). Sie setzt sich zusammen aus BiO<sub>2</sub>-Doppellagen und Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>x</sub>-Blöcken. Die Sauerstoff-Atome sind in den Pyramiden der Bi2212-Struktur in den Eckpunkten angeordnet. [MÜL00]

Fremdatom mehr Elektronen mitbringt, als das ursprüngliche Atom, im umgekehrten Fall spricht man von p-Dotierung. Die chemische Dotierung findet in den Zwischenschichten statt.

Undotierte Kuprate sind antiferromagnetisch<sup>10</sup> und werden oberhalb einer bestimmten Temperatur, der Néel-Temperatur, paramagnetisch<sup>11</sup>. Bei der so genannten optimalen Dotierung wird die maximale Sprungtemperatur erreicht. Bei Bi2212 liegt diese bei  $T_c$ = 92 K [LEG03]. Die Kristallstruktur von Bi2212 ist orthorhombisch (Kapitel 2.1). Die Einheitszelle hat die Dimensionen  $a \approx b = 5.4 \text{ } A$  und c = 30.7 A. c ist die Richtung senkrecht zu den Kupferoxidebenen. Als Rahmen für Rechnungen und Messungen dient die so genannte pseudotetragonale Einheitszelle (Kapitel 2.1). Pseudotetragonal deshalb, weil a  $\approx$  b ist und sie sich daher leicht von der raumzentrierten tetragonalen Struktur unterscheidet. Gegenüber der orthorhombischen Einheitszelle ist diese um 45° gedreht und besitzt folgende Dimensionen: a = b = 3.83 A.

In Abbildung 2.7 ist sowohl die zweidimensionale Brillouinzone in der

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Bei antiferromagnetischen Materialien sind die Spins der Atome mit einem konstanten, von Null verschiedenen Drehwinkel zueinander ausgerichtet. Im einfachsten Fall ist dieser Drehwinkel 180°, so dass die Spins benachbarter Atome antiparallel zueinander stehen.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Paramagnetische Substanzen lassen sich in einem externen Magnetfeld magnetisieren und verstärken dieses.



**Abbildung 2.7:** a) Die orthorhombische und pseudotetragonale Einheitszelle von Bi2212 in der Cu-O-Ebene und b) die dazu korrespondierende Brillouinzonen. c) Pseudotetragonale Brillouinzone von Bi2212, im erweiterten Zonenschema [BAN99].

Kupferoxid-Ebene dargestellt, als auch ihre dreidimensionale Entsprechung. Folgende Konvention hat sich für die Punkte (*Hochsymmetriepunkte*), durch die die Einheitszelle aufgespannt wird, im Impulsraum durchgesetzt.  $M = (\Pi, 0), X/Y = (\Pi, \pm \Pi)$  und  $Z = (2\Pi, 0)$ . Ergebnisse der Modellrechnung der Bandstrukturen (*Local Density Approximation* (LDA)-Bandtrukturrechnungen) von Bi2212 sind in Abbildung 2.8 a) dargestellt. In Abbildung 2.8 b) ist die Fermifläche dargestellt. Sie zeigt die Paralellimpulsverteilung der Elektronen mit der höchsten Energie, der Fermi-Energie (vgl. Kapitel 2.3.1).



**Abbildung 2.8:** LDA-Bandstrukturrechnung für Bi2212 a) Die Bandstruktur [KRA88] b) und die Fermifläche [MAS88].

### 2.4.2 Modellsysteme der Hochtemperatursupraleitung

Wie in Kapitel 2.2 bereits angesprochen, bedarf es zur Lösung gekoppelter Schrödingergleichungen, wie der Gleichung 2.1, gewisse Näherungen. Bei der Hochtemperatursupraleitung werden Modelle benötigt, die die geringe Beweglichkeit der Elektronen, auf Grund des starken Gitterpotentials, berücksichtigen.

Eine gute Näherung für die Hochtemperatursupraleitung stellt die so genannte "Tight-Binding-Näherung" dar. Diese fungiert als Grundlage für das *Hubbard-Modell* ist. In diesem Modell wird von einem starken Gitterpotential und einer geringen Beweglichkeit der Elektronen ausgegangen. Obwohl dieses Modell das einfachste Modell ist, an dem das Zusammenspiel der kinetischen Energie, Coulombwechselwirkung, Pauli-Prinzip und Gitterstruktur studiert werden kann, liegt die exakte Lösung des Hubbard-Modells bis heute nicht vor ([NOLT7]).

Der derzeitigen Auffassung nach, findet die wesentliche Physik der Hochtemperatursupraleiter (*HTSL*) in den zentralen Kupferoxidebenen statt, welche in allen HTSL enthalten sind (Kapitel 2.4).

Der Physiker *P. W. Anderson* schlug 1987 das zweidimensionale Einband-Hubbard-Modell zur Beschreibung der Dynamik der Elektronen in den Kupferoxidebenen vor [AND87]. Der Hamilton-Operator des Systems sieht folgendermaßen aus:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} a^{\dagger}_{i,\sigma} a_{j,\sigma} + U \sum_{n} a^{\dagger}_{n\uparrow} a_{n\uparrow} a^{\dagger}_{n\downarrow} a_{n\downarrow}$$
(2.9)

 $\langle i, j \rangle$  bedeutet, dass nur über benachbarte Gitterplätze aufsummiert wird.  $a_{j,\sigma}$  ist dabei der Vernichtungsoperator [GREI4] und  $a_{i,\sigma}^{\dagger}$  der dazugehörige Erzeugungsoperator. t ist das so genannte "hopping"- oder auch Transfer-Integral<sup>12</sup>. U ist das Maß für die Coulombabstoßung zweier Elektronen am selben Platz. Der erste Term steht also für die kinetische Energie, der zweite beinhaltet die Coulomb-Abstoßung.

Darüber hinaus gibt es noch andere Hamilton-Operator-Modelle, die sich auf das Hubbard Modell stützen. Zum Beispiel wird beim t-J-Modell, welches von dem Physiker *P. W. Anderson* [AND59] eingeführt wurde, um Mott-Isolatoren zu beschreiben, der Term, der für die Coulombabstoßung im Einband-Hubbard-Modell steht, durch einen anderen Term ersetzt. Dieser berücksichtigt, dass im Falle von Mott-Isolatoren echte Ladungsfluktuationen durch starke Coulomb-Abstoßung verhindert und stattdessen virtuelle La-

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>Das *"hopping"-Integral* reguliert die Wahrscheinlichkeit des *"Hüpfens"* der Elektronen zu benachbarten Gitterplätzen.

dungsfluktuationen induziert, werden. Aus einer störungstheoretischen Behandlung des Hubbard-Modells erhält man, bei moderater Dotierung<sup>13</sup> für eine starke Coulombabstoßung U >> t:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j,\sigma} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \hat{S}_j$$
(2.10)

Dabei ist  $J = 4t_2/U$  und  $\hat{S}_{i,j}$  steht für die Spinoperatoren. Bei diesem Modell werden Doppelbesetzungen, also zwei Elektronen an einem Platz, vernachlässigt. Eine ausführliche Beschreibung desselben ist in [DÜR02], [SCH98] und [DEM04] zu finden.

Während es bei dem t-J-Modell schwierig ist höhere Dotierungen von HTSL zu berücksichtigen, kann die in diesem Zusammenhang wichtige Rolle der Sauerstoffatome innerhalb der CuO<sub>2</sub>-Ebenen, in einem so genannten Dreiband-Hubbard-Modell, auch Emery-Modell genannt, berücksichtigt werden.

In diesem Modell werden der Gleichung 2.9 noch Terme hinzugefügt, die berücksichtigen, dass der Ladungstransfer über ein "Hüpfen" zwischen Cuund O-Plätzen energetisch begünstigt ist. Darüber hinaus wird ebenfalls berücksichtigt, dass die Sauerstoffatome die Abstände zwischen den Kupferatomen vergrößern. Eine ausführliche Beschreibung ist zum Beispiel in [LEG03], [DÜR02] oder auch [LYN99] zu finden. Der Hamilton-Operator sieht für dieses Modell folgendermaßen aus:

$$\hat{H} = E_d \sum_i \hat{d}_i^{\dagger} \, \hat{d}_i + E_p \sum_j \hat{p}_j^{\dagger} \, \hat{p}_j - t_{Cu-O} \sum_{\langle i,m \rangle} \left[ \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} p_{i+m} + (k.k.) \right]$$
(2.11)

+ 
$$(t_{O-O}/2) \sum_{\langle j,m' \rangle} \left[ \hat{p}_{j\sigma}^{\dagger} p_{j+m'} + (k.k.) \right] + U_{dd} n_{j+} n_{j-}$$
 (2.12)

Hierbei kennzeichnet i die Lagen des Kupfers und j die Lagen des Sauerstoffs im Gitter. m kennzeichnet die benachbarten Lagen des Kupfers und m' die benachbarten Lagen des Sauerstoffs. Es gibt zwei Hopping Parameter,  $t_{Cu-O}$  und  $t_{O-O}$ . d ist der Vernichtungsoperator für die Kupferlagen und p der entsprechende für die Sauerstofflagen. k.k. steht für komplex konjugiert.

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>Dotierung macht aus einem Mott-Isolator einen Hochtemperatursupraleiter (meistens durch p-Dotierung). Ob dabei die unterzähligen Elektronen, die so genannten Löcher, auch Deffektelektronen genannt, zum Phänomen der Supraleitung beitragen, ist noch nicht geklärt. (Kapitel 2.4.3)

### 2.4.3 Die SO(5)-Theorie der Hochtemperatursupraleitung

Zurzeit existieren mehrere Theorien über den Mechanismus der Hochtemperatursupraleitung. Einig scheint man sich nur in dem Punkt zu sein, dass die BCS-Theorie nicht zur Erklärung ausreicht, da sie bei Temperaturen oberhalb von 40 K die Existenz von Supraleitung, auf Grund der thermischen Energie des Gitters, verneint.

Zudem kann, wegen des kaum vorhandenen Isotopen-Effekts, eine anziehende Wechselwirkung durch Phononen ausgeschlossen werden. Wahrscheinlich ist, dass ebenfalls ein Paarzustand mit  $\hat{S} = 0$  für die Supraleitung verantwortlich ist. Seit 1997 gibt es eine Theorie [ZHA97] zur Hochtemperatursupraleitung, die von S. C. Zhang entwickelt wurde. Die so genannte SO(5)-Theorie.

Diese geht von der Beobachtung aus, dass die Hochtemperatursupraleiter sich im Wesentlichen durch die Dotierung, von ihren antiferromagnetischen Ausgangsmaterialien, unterscheiden. Daher nimmt man an, dass die Supraleitung und der Antiferromagnetismus eine gemeinsame Ursache haben.

Die SO(5)-Theorie wurde erstmalig von S. C. Zhang auf Supraleiter angewendet. Die Zhang'sche Theorie besagt, dass sich die Ladungsträger vorwiegend in Kupferoxid-Ebenen bewegen, die von zweidimensional vernetzten CuO<sub>2</sub>-Einheiten aufgespannt werden. Jede Einheit trägt dabei ein effektives magnetisches Moment mit dem Spin 1/2, welches vom Cu-Atom stammt [MÜL00]. Benachbarte Spins sind bestrebt ein Singulett zu bilden. Bei hohen Temperaturen liegen diese Singulett-Paare völlig ungeordnet vor (Spin-Flüssigkeit) [APL04]. In dieser Theorie wird davon ausgegangen, dass der supraleitende Zustand durch kondensierte Loch-Paare gebildet wird. (Eine Vertiefung dieser Theorie bietet [DEM04])

Eine abschließende Beurteilung, welche Theorien zur Hochtemperatursupraleitung die Wahrscheinlichste ist, die der Elektronenpaarbildung oder die der Lochpaarbildung, ist noch nicht möglich, da beide Theorien zur Zeit kontrovers diskutiert werden und somit Gegenstand aktueller Forschung sind.

### 2.5 Photoemission von Oberflächen

Der Photoeffekt spielt in vielen Bereichen der Physik eine wichtige Rolle. Zum Beispiel erhält man durch Spektroskopie der Photoelektronen einen Zugang zu den Bindungsenergien bzw. Energieeigenwerten eines Systems. Bei bekannter Energie des eingestrahlten Photons,  $E_{photon}$  und gemessener kinetischer Energie,  $E_{kin}$ , kann auf die Zustände des gebundenen Systems,  $E_b$ , zurückgeschlossen werden. Die Gleichung hierzu lautet;

$$E_{kin} = E_{photon} - E_b \tag{2.13}$$

In der Atomphysik steht die Photoionisation<sup>14</sup> von Atomen und Molekülen im Vordergrund. Hierbei dient das Vakuum-Level als Referenz für die Bindungsenergien. In der Festkörperphysik hingegen beziehen sich die Bindungsenergien auf das Fermi-Niveau, also auf den höchstbesetzten Zustand. Für die gemessene kinetische Energie der Elektronen außerhalb des Festkörpers folgt daraus, dass diese zusätzlich um die Austrittsarbeit  $W_{\Phi}$  (engl. "work function") erniedrigt ist;

$$E_{kin} = E_{photon} - E_b - W_\Phi \tag{2.14}$$

Um die gebundenen Elektronenzustände in einem Festkörper vollständig zu beschreiben benötigt man, zusätzlich zu ihren Bindungsenergien, auch noch ihren Impuls p, bzw. den Wellenzahlvektor k. Durch die Darstellung der Bindungsenergien, in Abhängigkeit zum Wellenzahlvektor, erhält man einen Zugang zu der Bandstruktur des Festkörpers. Die vollständige Formel, für die kinetische Energie der Photoelekronen aus einem Festkörper, lautet somit:

$$E_{kin} = E_{photon} - E_b(k) - W_\Phi \tag{2.15}$$

Die Abhängigkeit der Bindungsenergie vom Wellenzahlvektor lässt sich, für ein freies Elektronengas, wie folgt angeben:

$$E_b = E_0 - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$
(2.16)

 $E_0$  bezeichnet das untere Ende des Valenzbandes. Die Abhängigkeit der Bindungsenergien vom Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  ist jedoch, wegen der Beeinflussung der Bewegung der Elektronen durch die Kristallstruktur des Festkörpers, wesentlich komplizierter (vgl. Kapitel 2.5.1).

Die Energieverteilung der Elektronen hängt stark von ihrem Austrittswinkel ab. Diese Winkelabhängigkeit spiegelt die fundamentalen Symmetrien des Kristalls wieder.

Auf Grund der Impulserhaltung ist es nicht möglich Photoemission an einem

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>Von *Ionisation* spricht man dann, wenn bei der Emission eines Photoelektrons ein freies Ion zurückbleibt. Ein Festkörper hingegen bleibt auch nach Emission mehrerer Photoelektronen - zumindest auf einer genügend langen Zeitskala - praktisch elektrisch neutral. Daher spricht man bei Festkörpern von *Photoemission*.

absolut freien Elektronengas zu beobachten. Das zeigen die folgenden Gleichungen [HÜF95]:

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_f^2 - k_i^2 \right)$$
 (2.17)

Dabei stehen i und f jeweils für Anfangs und Endzustand.

Es gilt  $k_i = k_f - \kappa$  mit  $\kappa$  als Wellenzahlvektor des Photons. Dies verwendet in 2.17 ergibt:

$$E_{f} - E_{i} = \frac{\hbar^{2}}{2m} \left( 2|k_{f}||\kappa|\cos(k_{f},\kappa) - \kappa^{2} \right)$$
(2.18)

$$=E_{f}\frac{\kappa}{k_{f}}\left(2\cos\left(k_{f},\kappa\right)-\frac{\kappa}{k_{f}}\right)<<\hbar\omega$$
(2.19)

Daraus folgt  $\kappa/k_f \ll 1$ . Aus diesem Grund ist eine optische Anregung nicht möglich, sofern der (Rückstoß-)Impuls nicht von Etwas aufgenommen wird. Bei der Photoionisation eines freien Atoms geschieht dies durch das zurückbleibende Ion, wohingegen bei der Photoemission von Festkörpern, der Impuls von dem Gitter aufgenommen wird.

Der Streuvektor (Impulsübertrag) kann nur diskrete Werte annehmen und ist mit dem reziproken Gittervektor  $\vec{G}$  identisch [KIT99]. So folgt für den Wellenzahlvektor im Endzustand  $\vec{k}_f = \vec{k}_i + \vec{G}$ . Dies führt bei der Photoemission zu diversen Konsequenzen für die beobachtbaren Zustände. In Abb. 2.9 erhält man einen Überblick über ein Experiment, bei dem das Photoelektron senkrecht zur Oberfläche nachgewiesen wird ("normal-emission-Experiment").



**Abbildung 2.9:** Schematische Darstellung des Photoemissionsprozesses im vollständigem bzw. reduziertem Zonenschema (entnommen aus [HÜF95]).

Für dieses System ist der reziproke Gittervektor  $\vec{G}$ :

$$\vec{G} = (2\Pi/a, 0, 0)$$
 (2.20)

Das Gitter ist in diesem Fall kubisch, wobei a für den Gitterabstand steht.

Für die Bandstruktur wurde hier ein Elektronengas gewählt, welches nur eine schwache Wechselwirkung mit dem Gitter aufweist ("nearly free electron gas"). Aus dem fest vorgegebenen Energiebetrag von  $\hbar\omega$  ergeben sich nur wenige erlaubte Übergänge. Durch Variation der Photonenenergie kann bei einem "normal-emission-Experiment" die Bandstruktur vollständig abgebildet werden.

In der theoretischen Festkörperphysik gibt es zwei Modelle, anhand derer die Abläufe der Photoemission beschrieben werden können. Zum einen gibt es das Drei-Stufen-Modell, das die beobachteten Effekte eher auf phänomenologischer Basis untersucht und zum anderen das Ein-Stufen-Modell, welches einen weniger anschaulichen Charakter besitzt.

### 2.5.1 Das Drei-Stufen-Modell

Das Drei-Stufen-Modell ist besonders hilfreich bei der Interpretation experimenteller Daten. Bei diesem Modell kann man die Emission eines Photoelektrons in drei Teilschritte untergliedern (Abb. 2.10).

(i) Anregung des Elektrons durch ein Photon, (ii) Transport des Elektrons zur Oberfläche ohne inelastische Streuung, (iii) Austritt des Elektrons durch die Oberfläche ins Vakuum. Die Wahrscheinlichkeit des primären Photoemissions-Prozesses  $I(E, \hbar\omega)$  ist somit ein Produkt aus drei Faktoren [LYN99];

$$I(E, \hbar\omega) = P(E_f, \hbar\omega) T(E_f) X(E_f)$$
(2.21)

Die einzelnen Faktoren bezeichnen von links nach rechts die oben genannten einzelnen Stufen des Prozesses. E steht für die kinetische Energie außerhalb des Festkörpers und  $E_f$  steht dabei für die Energie des emittierten Elektrons innerhalb des Festkörpers. Die Beziehung zwischen E und  $E_f$  findet sich in Abbildung 2.11.

Da einige angeregte Elektronen den Festkörper auch noch nach inelastischer Streuung mit anderen Elektronen verlassen können, führt dies zu einem sekundären Photoemissions-Prozess  $I'(E, \hbar\omega)$ , der sich als Untergrund unter dem primären Spektrum darstellt.



Abbildung 2.10: Schematische Darstellung der Photoemission von einer Festkörperoberfläche im Drei-Stufen-Modell.

#### (i) Anregung des Elektrons im Festkörper

Im Falle einer einzelnen Welle ist die Amplitude des elektrischen Feldes in einer Tiefe z, unterhalb der Oberfläche des Festkörpers, gegeben mit:

$$\tilde{t} E_A \exp\left(-\alpha/2\right)$$
 (2.22)

Wobei  $\tilde{t}$  ein komplexer Fresnel<sup>15</sup>-Koeffizient ist, der für die Transmission durch die Oberfläche steht.  $\alpha$  ist der Absorbtionskoeffizient und  $E_A$  die Amplitude des elektrischen Feldes des Photonenstrahls.

Die Anregung geschieht also durch ein Photon, welches ein Elektron aus dem Valenzband in einen unbesetzten Zustand hebt (Abb. 2.11 a)). Die Übergangswahrscheinlichkeit wird mit "Fermis Goldener Regel" [GREI4] berechnet:

$$w_{i \to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \Psi_f \right| \hat{H}_{WW} \left| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \rho \left( E \right)$$
(2.23)

#### (ii) Transport des Elektrons durch den Festkörper zur Oberfläche

Auf dem Weg an die Oberfläche verliert das Elektron, durch elastische und inelastische Stöße mit dem Gitter, Energie. Der Verlust von Elektronen auf dem Weg zur Oberfläche wird durch eine mittlere freie Weglänge  $\lambda(E,k)$  beschrieben. Diese liegt, bei Elektronen der Energie von 10 bis 100 eV, bei 3-20  $\stackrel{\circ}{A}$  <sup>16</sup> [LEG03]. Folgende Formel beschreibt die mittlere freie Weglänge

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Mit Hilfe fresnelscher Formeln berechnet man den Reflexions- bzw. Transmissionsgrad elektromagnetischer Wellen. Sie beschreiben das Verhältnis der reflektierten bzw. transmittierten Amplitude zu der Amplitude der einfallenden Welle. Sie werden aus dem Maxwellschen Gleichungen hergeleitet.

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Für Bi2212 liegt die mittlere freie Weglänge, unter Berücksichtigung der zweidimensionalen Struktur, in derselben Größenordnung [HED01]. Das bedeutet, dass fast der gesamte Photostrom von Elektronen aus der ersten Kupferoxid-Doppelebene stammt.



**Abbildung 2.11:** a) Optische Anregung eines Valenzelektrons im reduzierten Zonenschema b) Kinetische Energie  $E_{kin}$  des Photoelektrons im Vakuum als Funktion seines Wellenvektors  $p/\hbar$ .

[HÜF95]:

$$\lambda(E,k) = \tau v_g = \frac{\tau}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$
(2.24)

Es wird angenommen, dass die Stoßfrequenz  $\tau$  lediglich eine Funktion der Energie ist.  $v_g$  beschreibt die Gruppengeschwindigkeit im Endzustand.

#### (iii) Austritt des Elektrons ins Vakuum

Beim Austritt ins Vakuum kann das Verhalten eines Elektrons analog zur Brechung eines Lichtstahls, beim Übergang in ein Medium mit geringerem Brechungsindex, durch das Snellius-Gesetz beschrieben werden. Dieses besagt, dass eine Welle ihre Richtung ändert, wenn sie von einem transparentem Medium in ein anderes transparentes Medium übergeht. Da bei dieser Analogie eine einfache Potentialstufe am Übergang angenommen wird, stellt diese Betrachtungsweise eine deutliche Vereinfachung dar.

Die Photoelektronen bewegen sich zwar (quasi-) frei, mit einer Energie von  $E = E_i + \hbar \omega$ , durch den Festkörper, befinden sich aber tatsächlich in einem Potentialtopf V.

$$V = E_{Fermi} + W_{\Phi} = E_{Vakuum} - E_0 \tag{2.25}$$

Um den Kristall verlassen zu können, muss der Impuls des Photoelektrons in Richtung der Oberflächennormalen groß genug sein, um die Potentialbarriere  $\Phi$  überwinden zu können. Somit müssen die Elektronen folgende Bedingung erfüllen:

$$\frac{\hbar^2}{2m}K_{\parallel}^2 \ge E_{Vakuum} - E_0 \tag{2.26}$$

Elektronen die dieser Bedingung nicht genügen, können den Festkörper nicht verlassen, da sie an der Grenzschicht eine Totalreflektion erfahren (Abb. 2.12).

Hat ein Photoelektron den Austritt ins Vakuum geschafft, kann es als freies Elektron detektiert werden (Abb. 2.11 b).



**Abbildung 2.12:** Geometrische Konstruktion des Fluchtkegels für das einfache Modell der Oberfläche. Von der verfügbaren Impuls-Kugel mit Radius  $|\vec{k}|$  wird der Anteil  $\sqrt{2m/\hbar^2(E_V - E_0)}$  abgeschnitten. Der verbliebene Winkelbereich definiert den Öffnungswinkel des Fluchtkegels [HÜF95]. Der Winkelbereich  $0 \le \theta \le \theta_{krit}$  bildet einen Kegel. Wobei  $\theta_{krit}$ der Winkel ist, unter dem Elektronen einer festen Energie  $E_f - e_0$  im Festkörper, diesen noch verlassen können. Dieser Kegel wird daher auch *Flucht-Kegel* bzw. escape cone genannt. Er hat einen wichtigen Einfluss auf die innerhalb dieser Arbeit zu betrachtende Doppelphotoemission und die damit einhergehende Interpretation von Koinzidenzspektren [HAT04]

Die Barriere wirkt lediglich auf die senkrechte Komponente (z-Richtung) der Bewegung, die Komponente parallel zur Oberfläche bleibt erhalten. Die Komponenten von  $\vec{k}$  lassen sich wie folgt berechnen:

$$k_{\parallel} \begin{bmatrix} a^{-1} \\ A \end{bmatrix} = \frac{1}{\hbar} p_{\parallel} = \sqrt{2mE/\hbar^2} \sin\left(\theta\right) \cdot \left(\sin\left(\phi\right)x + \cos\left(\phi\right)y\right)$$
(2.27)

$$mit\sqrt{2mE/\hbar^2} = 0,512\sqrt{E/eV} A^{o^{-1}}$$
 (2.28)

Für ein System, das in der Ebene der Oberfläche als zweidimensional angenommen werden kann (wie es bei Kupratsupraleitern der Fall ist), in denen also  $k\perp$  zu jedem  $k_{||}$  konstant ist, ist der Elektronenimpuls mit der Gleichung 2.27 bereits bestimmt.

Anhand Abb. 2.12 lässt sich die Brechung an der Oberfläche auch anschaulich verstehen; von der verfügbaren Impulskugel wird der Anteil  $\sqrt{2m/\hbar^2(E_v - E_o)}$  abgeschnitten.

Mit Hilfe des Drei-Stufen-Modells lässt sich die Impulskomponente  $k_{\perp}$  bestimmen. Dazu wird der Verlauf des Endzustandsbandes  $E_f$  durch eine parabelförmige Energie-Impuls-Relation genähert. Die Parabel ist gegenüber der freien Elektronenparabel um die Energie  $E_0$  abgesenkt sowie um den Impuls eines reziproken Gittervektors  $G_{\perp}$  versetzt. Dies trägt dem Impulsverlust Rechnung, den das Elektron beim Durchtritt durch die Oberfläche erfährt:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} (k + G_\perp) - |E_0|$$
 (2.29)

 $E_0$  entspricht der Energieposition an der Unterkante des Valenzbandes und wird auch als inneres Potential bezeichnet.

Für die Impulskomponente  $k_{\perp}$  gilt:

$$k_{\perp} \begin{bmatrix} o^{-1} \\ A \end{bmatrix} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{E \cos^2\theta + E_0 + \Phi} - G_{\perp}$$
(2.30)

#### 2.5.2 Das Ein-Stufen-Modell

Das in Kapitel 2.5.1 erläuterte Drei-Stufen-Modell bietet die Möglichkeit den komplizierten Prozess der Photoemission auf eine anschauliche Weise zu verstehen. Allerdings macht dieses Modell zum Teil sehr einfache Annahmen. Vor allem vernachlässigt es die Interferenz zwischen der Emission von tieferen Atomlagen mit der Oberflächenemission und beschreibt das Entkommen der Elektronen durch die Oberfläche mit nur einem einfachen Transmissionsfaktor.

Zudem ergeben sich auf Grund der geringen Oberflächentiefe, die untersucht wird, konzeptionelle Probleme, da der Transport zur Oberfläche und der Austritt durch diese, nicht voneinander zu trennen sind.

Im Drei-Stufen-Modell werden außerdem die energieabhängigen Wahrscheinlichkeiten zwischen 0 für Reflektion und 1 für Transmission an der Oberfläche, nicht berücksichtigt [LYN99].

Diese Schwierigkeiten in der Berechnung führten letztendlich zum Ein-Stufen-Modell.

Dieses geht von der Anregung eines Anfangszustandes (Blochwelle im Kristall) und von einem Endzustand in der Nähe der Oberfläche aus und berücksichtigt, dass bei winkelaufgelösten Messungen die parallele Komponente des Wellenvektors um einen reziproken Gittervektor vergrößert sein könnte. Im Bild des Ein-Stufen-Modells ist die Endzustands-Wellenfunktion gegeben mit:

$$\Psi_f = G H' \Psi_i \tag{2.31}$$

H' entspricht dem Hamiltonoperator wie er auch im Drei-Stufen-Modell verwendet wird. G ist die komplexe Green'sche Funktion für ein Elektron im wechselwirkenden System und beinhaltet ebenso den Effekt, welchen das Potential des Kristalls ausübt.  $\Psi_i$  und  $\Psi_f$  sind die Anfangs- und Endzustands-Wellenfunktionen.

Neben der Einfach-Photoemission kommt es bei einer Photoelektronenspektroskopie auch zur Doppel-Photoemission. Die Koinzidenzwahrscheinlichkeit liegt dabei bei lediglich  $1x10^{-6}$  [HAT04]. Im Folgenden wird dieser Prozess näher erläutert.

### 2.6 Grundlagen der Doppel-Photoemission

Bei Untersuchungen der Doppelphotoionisation an Atomen und Molekülen unterscheidet man zwischen zwei *kohärenten* Prozessen.

In Abb. 2.13 sind die Feynman-Diagramme niedrigster Ordnung dargestellt, die zur Photoemission zweier Elektronen führen. Dabei symbolisiert die unterbrochene Linie die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die Wellenlinie die Photon-Elektron-Wechselwirkung.

In Abb. 2.13 a) ist der Prozess dargestellt, bei dem die Wechselwirkung der

beiden Elektronen im Grundzustand stattfindet, bevor das Photon einkoppelt. Dieser Prozess wird auch *"shake off"* genannt. Er tritt dann auf, wenn das erste Elektron den Kern sehr schnell verlässt und das effektive Kernpotential dadurch in einer Weise ändert, die dafür sorgt, dass ein zweites Elektron den Kern verlassen kann.

In Abb. 2.13 b) ist der Prozess dargestellt, bei dem die Wechselwirkung im Endzustand stattfindet. Dieser Prozess wird als *TS1* (*two-step-one*) bezeichnet. Hierbei wird das Photon von einem Elektron absorbiert, welches daraufhin mit einem anderen Elektron kollidiert und diesem genug Energie überträgt, damit es ebenfalls das Atom verlassen kann.



**Abbildung 2.13:** Feynman-Diagramme niedrigster Ordnung zur Doppel-Photoemission. a) Die Wechselwirkung der Elektronen findet im Grundzustand statt, vor Einkopplung des Photons ("ground state correlation", *"shake-off*"); b) Absorption des Photons durch eines der Elektronen im Grundzustand und anschließender Wechselwirkung im Endzustand ("final State interaction", *FSI*) [SCH03].

Zusätzlich zu diesen beiden oben erläuterten kohärenten Prozessen tritt bei der Photoemission von Festkörpern noch ein *inkohärenter* Prozess auf (Abb. 2.14). Bei diesem wird ein Photon von einem Elektron absorbiert, welches auf seinem Weg an die Oberfläche mit den anderen Elektronen des Valenzbandes zusammenstößt. Wenn dabei die Abgabe der kinetischen Energie an eines der gestoßenen Elektronen ausreicht, so dass dieses die Oberflächenbarriere überwinden kann und darüberhinaus das stoßende Elektron selbst soviel kinetische Energie behält, um ebenfalls die Barriere zu überwinden, emittieren beide ins Vakuum. Im Prinzip handelt es sich hierbei um eine Sekundärelektronenkaskade, die keinerlei Informationen mehr über den ursprünglichen Prozess enthält.

Der Prozess der kohärenten Emission, bei der die Wechselwirkung der Elektronen nur im Endzustand mit einbezogen wird, ist sehr gut in [BER98] wiedergegeben. Welcher der beiden kohärenten Prozesse dominiert, hängt stark von der eingestrahlten Photonenenergie ab. Je höher die Photonenener-


**Abbildung 2.14:** Feynman-Diagramm niedrigster Ordnung zur Doppel-Photoemission. Inkohärenter Beitrag: ein Elektron absorbiert das Photon und streut nach einer Wegstrecke mit einem zweiten Elektron. Die Phaseninformation geht hierbei verloren [SCH03].

gie, desto dominanter der "shake- off"-Prozess [DÖR04]. Bei dem vorliegenden Experiment wurden die Photonenenergien so gewählt, dass der "shake-off"-Prozess noch keine Rolle spielen sollte, wenn sich der Prozess im Festkörper analog zu dem im Atom verhält.

Grundsätzlich ist zu erwarten, dass sowohl kohärente, als auch inkohärente Prozesse zum Doppel-Photoemissions-Signal bei der Photoemission von Festkörpern beitragen. Bisher existiert jedoch noch kein Modell, welches alle Rechnungen dieser Effekte mit einbezieht, so dass Abschätzungen über die relative Intensität der Prozesse noch nicht vorliegen.

Eine Doppel-Photoemission kann auch als Einfach-Photoemission eines Quasipartikels<sup>17</sup> behandelt werden. Beispiel für ein Quasipartikel ist ein Cooper-Paar. Dabei ist das Spektrum des Quasipartikels abhängig von dem internen Freiheitsgrad, der die Wechselwirkung der beiden Elektronen untereinander charakterisiert [BER98].

Die Physiker A. Kouzakov und J. Berakdar haben die Winkelverteilung von Cooper-Paaren errechnet (Abb. 2.15 b) oben), wie sie aus einem "normalen" Supraleiter ( $V_3Si$ ) emittiert werden [KOU03]. Dabei ergab sich eine "backto-back"-Relation für die Paare. Das bedeutet, dass die Elektronen mit, vom Betrag her, gleichem aber entgegengesetztem Parallelimpuls und in einem Winkel von 180° zueinander und gleichem Winkel  $\theta$  (Winkel in Flugrichtung) erwartet werden.

In Abbildung 2.15 a) ist eine schematische Darstellung der Doppel-Photoemission von einem Cooper-Paar gezeigt. In Abbildung 2.15 b) ist die Winkelverteilung des jeweils zweiten Elektrons dargestellt, bei festem Winkel für das erste Elektron. Im oberen Teil der Abbildung ist die Verteilung

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Ein Quasipartikel ist ein System aus wechselwirkenden Partikeln, dass sich als Einheit quasi wie ein freies Teilchen verhält. Das Konzept der Quasipartikel dient in der Festkörperphysik dazu das quantenmechanische Mehrkörperproblem zu vereinfachen.



**Abbildung 2.15:** a) Schematische Darstellung des Doppel-Photoemissionsprozesses.  $\omega$  steht für das einfallende Photon. Die beiden Pfeile zeigen eine mögliche Emissionsrichtung der emittierten Elektronen; mit den jeweiligen Energien  $(E_1, E_2)$ , den Spins  $(\sigma_1, \sigma_2)$  und den Winkeln zur Emissionsrichtung  $(\theta_1, \theta_2)$  b) Elektronen-Paar Winkelverteilung des Supraleiters  $V_3Si$  als Funktion von  $\theta_2$  bei festgehaltenem  $\theta_1 = 45^\circ$ .  $E_1 = E_2 = \omega/2 \approx 10,63 \ eV$ . oben: Korrelierte Paare (CP), unten: Unkorrelierte Paare (UP) [KOU03].

eines korrelierten Elektronenpaares zu sehen und im unteren, im Vergleich dazu, die eines nicht-korrelierten Paares. Hier wird deutlich, dass sich die Emission eines Cooper-Paares anhand einer solchen Verteilung (in der Analyse der Daten in dieser Arbeit) von den nicht-korrelierten Paaren abgrenzen lassen sollte.

Im Experiment ergibt sich neben den bisher erwähnten drei Doppel-Photoemissionsprozessen natürlich noch die Möglichkeit der (quasi gleichzeitigen) Emission durch Absorption von zwei Photonen.

Die Erzeugung dieser falschen Koinzidenzen ist ein nicht linearer Prozess, da sich die Wirkungsquerschnitte der Einzel-Photonemissionen multiplizieren. Die Rate der echten Koinzidenzen wächst hingegen linear mit der Intensität. Da der Prozess der Doppel-Photoemission durch zwei Photonen nicht von den anderen Prozessen zu unterscheiden ist, wird er z.B. durch eine gering gewählte Photonenrate weitestgehend unterdrückt, (Koinzidenzwahrscheinlichkeit << 1).

# 3. Experiment

Der Grund und Boden, auf dem alle unsere Erkenntnisse und Wissenschaften ruhen, ist das Unerklärliche.

Arthur Schopenhauer, Über Philosophie und ihre Methode

Ein Experiment durchzuführen, das darauf ausgelegt ist korrelierte Elektronenemission zu messen, birgt hohe Anforderungen an das Spektrometer/Detektorsystem und an das Datenaufnahme-System.

Eine zusätzliche Schwierigkeit liegt darin, dass die Koinzidenzwahrscheinlichkeit sehr gering gegenüber der Einzelelektronenemission ist (Kapitel 2.6). Um dies zu kompensieren, benötigt man eine hohe Anzahl an untersuchten Photoemissionsereignissen, die mit der Aufnahme einer großen Datenmenge einhergeht. In den folgenden Abschnitten wird ein Überblick über die UHV-Kammer<sup>1</sup> und deren Bestandteile gegeben. Desweiteren wird das Datenaufnahmesystem und seine Funktionsweise näher erläutert. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels werden die Strahlungsquelle, welche den für den Versuch benötigten Photonenstrahl lieferte, und der Messplatz beschrieben.

### 3.1 Kammer

Bei dem vorliegenden Experiment ist eine UHV-Kammer verwendet worden, die von S. Voss entworfen und den Anforderungen an das Experiment ideal

 $<sup>^1 {\</sup>rm Ultrahochvakkum}$ -Kammer: UHV bezeichnet ein Vakuum im Bereich von  $10^{-9}$  -  $10^{-12}$  mbar.

angepasst wurde.

Sie besteht aus einem 60cm langen Rohr (Durchmesser 25 cm), an dessen einer Seite der Transferarm für den Probenwechsel angebracht ist. An der anderer Seite befindet sich das Spektrometer/Detektorsystem. Dieses schließt etwa in der Mitte der Kammer mit der Probe ab, welche in einen Kryostaten eingeschraubt wird. Dieser bietet thermischen Kontakt und erlaubt somit eine Kühlung der Probe.



Abbildung 3.1: Darstellung der UHV-Kammer.

# 3.2 Vakuumsystem

Um ein Experiment durchzuführen, in dem einzelne Elektronen nachgewiesen werden sollen, muss es im Vakuum stattfinden. Das liegt daran, dass die Elektronen einen gewissen Bereich durchqueren bevor sie detektiert werden können. Dabei streuen sie an Atomen und Molekülen. Je besser das Vakuum ist, desto weniger Teilchen enthält das Restgas, welche durch Kollision mit den Elektronen ionisiert werden können. Die Ionisation von Restgasmolekülen und -atomen führt zu falschen Messergebnissen. Die Probenoberfläche hat eine vom Vakuum – also vom Restgas – abhängige Lebensdauer. Mit Lebensdauer ist die Wiederbesetzungszeit gemeint, nach der die Oberfläche des Materials durch Atome bzw. Moleküle (welche aus dem Restgas stammen) besetzt wurde. Durch Ionisation dieser Fremdatome/moleküle, wären die Messergebnisse verfälscht und nicht verwertbar.

Die Lebensdauer des Materials, das untersucht wurde, wurde vom Hersteller, bei einem Vakuum von  $1x10^{-9}$  mbar, mit ca. 1 s angegeben. Mit jeder Größenordnung verlängert sich die Lebensdauer um eine zehner Potenz.

Das Material ist Teil eines "Pins" und wurde mit Hilfe von Torr-Seal auf einen Probenhalter geklebt. Der Pin wird im Vakuum gebrochen, danach ist die Oberfläche ungeschützt und Restgasatome können sich auf ihr absetzen.

Um eine möglichst lange Lebensdauer der Probe zu ermöglichen ist ein Vakuum im hohen  $1x10^{-11}$  mbar Bereich angestrebt worden. Damit konnte die Probe im Prinzip mehrere Tage genutzt werden. Da jedoch für die Dauer der Wiederbesetzungszeit keine exakten Daten vorliegen und darüber hinaus die Messzelle (Ionivac IM540) für den Druckbereich <  $5x10^{-10}$  mbar während der Strahlzeit Fehlermeldungen anzeigte, wurde die Probe täglich gewechselt. Dies geschah um sicher zu stellen, dass die Probe bei der Messung oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur gleich bleibende Qualität besaß.

Für das Vorvakuumsystem ist eine Scroll-Pumpe verwendet worden, die einen Druckbereich von  $1x10^{-3}$  mbar erreicht. Zum Erreichen des Hochvakuums wurden eine kleine (50 l/sec) und eine große (700 l/sec) Turbomolekularpumpe verwendet. Ab einem Druck von  $5x10^{-10}$  mbar unterstützte eine Titansupplimationspumpe das Vakuumsystem. Diese pumpt reaktive Gase wie z. B. Wasserstoff.

Zwischen Kammer und Beamline wurde ein Kollimator installiert, an dem eine separate Vorpumpe und eine Turbomolekularpumpe (200 l/sec) angeschlossen wurden. Mit Hilfe dieser Konstruktion und eines eingebauten Ventils konnte man die Kammer auch nach dem Ausheizen an die Beamline anschließen. Dieses war in diesem Experiment aus zeitlichen Gründen notwendig. Außerdem ließ sich in den Kollimator ein Filter einschieben, der dazu beitragen kann die höheren Harmonischen aus dem Strahl herauszufiltern. Zudem konnte man durch den Einbau einer Kupferblende eine differentielle Pumpstufe erstellen, die im Falle einer verschmutzten Beamline das Vakuum in der Kammer schützt. Beides wurde bei der Strahlzeit am "BESSY" nicht genutzt, da diese einen eigenen Filter für die höheren Harmonischen besitzt und ein stabiles Vakuum im  $10^{-10}$  mbar-Bereich aufweist.

### 3.3 Kryostat

Es wurde ein Kryostat verwendet, welcher den Anforderungen (die eine UHV-Kammer stellt) entsprechend, mit den nötigen Durchführungen und Flanschen nachgerüstet wurde. Er wurde mit Hilfe eines Hebers an einen 100 l Helium-Dewar angeschlossen. Am Ende des Kryostaten ist ein L-förmiger Kupferblock befestigt, der für eine gute Wärmeleitung zur Probe sorgt. In die Spitze dieses Kopfes, ebenfalls in einem aus Kupfer angefertigten Halter, wurde die Probe mittels eines am Transferarm befestigten Werkzeugs eingeschraubt (Abb. 3.1). Auf diese Weise wurde gewährleistet, dass die Probe nahezu die gleiche Temperatur besaß wie der Kupferblock, in den diese eingeschraubt wird. Die Temperatur wurde mittels eines Widerstandsthermometers (*Pt1000*) und eines Thermoelements (*Diode – Lake Shore DT500 DI 13*) überprüft. Der Kryostat konnte mit Hilfe eines Manipulators in alle drei Raumrichtungen bewegt werden.

Durch den Kryostaten konnte der Kaltkopf in Abhängig von der Höhe des Helium-Durchflusses nahezu auf die Temperatur flüssigen Heliums (4 K) gekühlt werden. Die Sprungtemperatur des Materials, an dem gemessen wurde, liegt bei 85 K. Deshalb wurden bei der Messung Temperaturen angestrebt, die sowohl oberhalb als auch unterhalb dieses Wertes liegen.

## 3.4 Einbau und Präparation der Probe

Innerhalb der Kammer sind zwei Magazine untergebracht, in die jeweils sechs Proben eingeschraubt werden können. Eines der Magazine ist direkt am Kaltkopf befestigt. Da dieser bewegt werden kann (Kapitel 3.3) können die einzelnen Proben direkt vor den Transferarm gebracht werden. Das zweite Magazin hängt beweglich an einem Flansch mit Wellbalg, der von außen vor das Werkzeug des Transferarms gebracht werden kann (Abb. 3.2).

Das Werkzeug am Transferarm wurde auf die Probenhalterung aus Edelstahl gesteckt. Von außen konnte man über eine magnetgelagerte Durchführung, die mit dem Werkzeug verbunden ist, die Probenhalterung in den Kupferblock (innerhalb des Kaltkopfes) drehen. Die Probe, welche auf einem "Pin" sitzt und die mit Hilfe von *Torr-Seal* auf die Aluminium-Probenhalter geklebt wurde, wurde im Vakuum gespalten. Dies geschah indem der "Pin" entweder am Spektrometer oder am Kaltkopf – unter Zuhilfenahme des Manipulators – abgebrochen wurde.



Abbildung 3.2: Aufnahme der beiden Magazine und des Kaltkopfes (von der Seite des Transferarms aus gesehen).

## 3.5 Messmethode

Bei der genutzten Messmethode werden Elektronen, unter Einsatz eines homogenen, elektrischen Feldes, auf einen Detektor geleitet. Das elektrische Feld wird aufgebaut, indem an eine Anordnung von elektrisch leitenden Platten entsprechende Spannung angelegt wurden.

Durch das Feld werden die Elektronen beschleunigt und auf ein Micro-Channal-Plate (MCP) geleitet, welches als Elektronenvervielfacher dient (Kapitel 3.5.2). Auf diese Weise entsteht durch jedes Elektron, welches das MCP trifft, eine Elektronenwolke, die auf eine *Delayline-Anode* geleitet wird. Diese liegt auf einem höheren Potential als das MCP und zieht infolgedessen die Elektronen an. Eine Delayline-Anode besteht aus einem Signal- und einem Referenzdraht. Der Referenzdraht dient zur Rauschunterdrückung (Auf diese wird in Kapitel 3.6 näher eingegangen.). Die beiden Drähte sind isoliert voneinander und äquidistant um eine Trägerplatte gewickelt sind. Trifft nun die Wolke auf den Signaldraht erzeugt sie einen Spannungspuls der sich zu beiden Richtungen des Drahtes hin ausbreitet (Abb. 3.5.2). Aus der Messung des Laufzeitunterschiedes dieser beiden Pulse läßt sich der Ort, an dem das Elektron aufgetroffen ist, bestimmen.

Aus der Flugzeit der Elektronen und ihren Auftrefforten auf dem Detektor, erhält man Impulse, über die man Energien sowie Winkel, etc. (Kapitel 4) berechnen kann. Als Flugzeit wird der Zeitraum zwischen dem Emittieren eines Elektrons aus dem Festkörper und dem Auftreffen auf dem Detektor, bezeichnet.

Für diesen Versuch ist es von besonderer Bedeutung Doppelphotoemission nachzuweisen. Das heißt, der Detektor muss in der Lage sein mehrere Elektronen in kurzer Zeit nachzuweisen. Man spricht in diesem Fall von Multi-Hit-fähigen Detektoren. Spektrometer/Detektorsysteme, welche diesem Anspruch genügen, werden bereits vielfach in der Atomphysik zur Untersuchung von Gastargets verwendet und sind unter dem Namen "Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroskopy" (*COLTRIMS*) ([DÖR00], [ULL03]) bekannt. In der modernen Atomund Molekülphysik werden beispielsweise langsame und schnelle Ion-Atomoder Ion-Molekül-Stöße mit Hilfe dieser Technik untersucht (z.B. [MOS99], [SCH05], [SCH06].

Im Folgenden wird im Detail auf die Spezifikationen des bei diesem Versuch verwendeten Systems eingegangen.

#### 3.5.1 Spektrometer

Bei der Planung eines Spektrometers müssen zwei Faktoren bedacht werden. Man muss um eine hohe Ortsauflösung zu erreichen dafür Sorge tragen, dass die Elektronen möglichst den gesamtem Detektor ausleuchten und das bei einer Raumwinkelabdeckung, in Bezug auf die Probe, von nahezu  $2\pi$ .

Gleichzeitig möchte man eine möglichst breite Flugzeitverteilung erreichen, da diese zu einer höheren Energieauflösung führt. In Experimenten ohne Supraleiter erhält man eine Verbesserung der Flugzeitauflösung (bei gleichzeitiger Raumwinkelabdeckung von nahezu  $2\pi$ ), indem man ein solenoidales Magnetfeld überlagert. Dabei werden die Elektronen auf Kreisbahnen gelenkt und innerhalb des Spektrometers gehalten. Auf diese Weise läßt sich die Flugstrecke, also die Länge des Spektromerters, erweitern. Eine Verlängerung des Spektrometers ohne Überlagerung eines Magnetfeldes hätte zur Folge, dass die Elektronen die vom Festkörper aus gesehen in einem flachen Winkel zur Oberfläche starten, das Spektrometer verlassen würden und somit kein Elektronennachweis im Bereich von  $2\pi$  erreicht werden kann.

Die Überlagerung mit einem Magnetfeld ist bei einem Supraleiter auf Grund des Meissner-Ochsenfelds-Effekts (Kapitel 2.3) nicht möglich, da dieser die Verdrängung des magnetischen Flusses innerhalb der Probe zur Folge hätte. Dies hätte Auswirkung auf die Flugbahnen, vor allem der langsamen Elektronen und würde daher zu einer fehlerhaften Berechnung der Startimpulse führen. Um der geforderten Winkelabdeckung gerecht zu werden, mußte das Spektrometer infolgedessen sehr kurz konzipiert werden.

Das Spektrometer selbst besteht aus 6 Kupferplatten, deren Innendurchmesser 105 mm und deren Außendurchmesser 140 mm betragen. Die Dicke der Platten beträgt 1 mm. Die Kupferplatten selbst sind auf 6 Keramikstangen gesteckt, die wiederum auf einer Aluminiumplatte (Innendurchmesser 105 mm, Außendurchmesser 140 mm, Dicke 5 mm) befestigt sind. Diese sitzt



Abbildung 3.3: Darstellung des Spektrometer-Detektor-System.

auf einer 1 mm dicken Edelstahlplatte (Innendurchmesser 40 mm, Aussendurchmesser 140 mm) und schließt mit dem Kupferblock ab, in welchem die Probe befestigt ist (Kapitel 3.3 und Kapitel 3.4).

Die Kupferplatten werden durch 5 mm (bei der 5 mm dicken Platte sind es  $\approx 2,5$  mm) lange Keramikhülsen<sup>2</sup> äquidistant voneinander positioniert und über Widerstände (100  $k\Omega$ ) elektrisch miteinander verbunden. Der Abstand der letzten Platte (von der Probe aus gesehen) zum daran anschließenden Gitter beträgt nur 2 mm, um somit den gleichen Abstand zwischen Gitter und letzter Spektrometerplatte zu gewährleisten, wie er auch bei den übrigen Platten untereinander besteht.

Das Gitter besteht aus einem feinmaschigem (200  $\mu$ m) Edelstahlnetz, das in einem Edelstahlring (Innendurchmesser 105 mm, Außendurchmesser 140 mm, Dicke 5 mm) befestigt ist. Die Beschleunigungsstrecke beläuft sich somit auf 47,8 mm, in der ein homogenes elektrisches Feld anliegt. Das Feld, in dem Bereich zwischen Gitter und MCP (5 mm), ist etwa sieben Mal größer als das Feld innerhalb der Spektrometerplatten. Diese Nachbeschleunigung wird für die Nachweiseffizienz der Elektronen auf dem MCP benötigt. Relevant wird dieser Aspekt bei der Auswertung der Daten und der diesbezüglich durchgeführten Kalibrierung des Spektrometers. Details hierzu sind in Kapitel 4.3 zu finden.

Eine der Kupferplatten ist eine Spezialanfertigung, da sie zusätzlich zwei rechteckige Blenden (einander gegenüberliegend angeordnet und horizontal ausgerichtet) besitzt, welche jeweils ein Loch aufweisen. Durch sie gelangt die Synchrotronstrahlung auf die Probe. Beim Aufbau des Experiments kann zudem, durch diese Öffnungen, die richtige Positionierung der Probe, im Fokus der Synchrotronstrahlung, kontrolliert werden. Wenn man in einem

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Die Hülsen sind mit Germanium bedampft, um eine elektroststatische Aufladung zu verhindern.

Winkel von 20° durch das Fenster in der Kammer hindurchblickt, müssen Mittelpunkt des Fensters, Mittelpunkt des Lochs (einer der Blenden in der Spezialplatte) und die Probe auf einer Linie liegen. Oder umgekehrt, wenn man zur Kontrolle beispielsweise ein Stück Papier vor das Fenster hält muss die Reflektion des Synchrotronstrahls in der Mitte des Fensters liegen. Eine Reflektion erhält man bei der Oten Ordnung des Synchrotronstrahls. Bei dieser Einstellung enthält dieser alle verfügbaren Wellenlängen, auch die im sichtbaren Bereich. Den sichtbaren Anteil des Lichts kann man zur optischen Kalibrierung der Probe nutzen, um diese genau in den Fokus des Lichts zu positionieren. Sieht man keine Reflektion, wird sie durch eine der Blenden in der Spezialplatte abgeschirmt, was bedeutet, dass das Spektrometer um einige Grad verdreht ist und nachjustiert werden muss (Abb.3.4).



Abbildung 3.4: Darstellung des Spektrometers. Es ist die Strahlführung durch die Blenden, in der speziell angefertigten Spektrometerplatte, auf die Probe zu erkennen.

Um die Flugbahnen der Elektronen zu simulieren sind in Abbildung 3.5 die Flugbahnen unter verschiedenen Bedingungen dargestellt.

Wie bereits erwähnt, wird das elektrische Feld innerhalb des Spektrometers von keinem künstlichen Magnetfeld überlagert. Um das Erdmagnetfeld zu kompensieren wurde ein aus drei (quadratischen) Helmholzspulen bestehender Käfig verwendet. Somit erfahren die Elektronen nur die Coulombkraft  $\vec{F_e}$  welche durch folgende Formel beschrieben wird.

$$\vec{F}_e = q \cdot \vec{E} = m \cdot \vec{a} \tag{3.1}$$

Dabei ist q die Ladung, m die Masse und  $\vec{a}$  die Beschleunigung des Teilchens.  $\vec{E}$  repräsentiert das elektrische Feld. Dieses verläuft in Richtung der Spek-



**Abbildung 3.5:** a) Elektronenverteilung auf dem Detektor bei 20,5 eV Startenergie. Es ist zu erkennen, dass nicht der ganze Raumwinkel von 2II nachgewiesen werden kann. b) Die Starenergie der Elektronen beträgt ebenfalls 20,5 eV, jedoch ist der Winkel so eingeschränkt  $(-53^{\circ} - +53^{\circ})$  dass alle Elektronen in diesem Bereich den Detektor erreichen. c) In dieser Simulation wird die maximale Energie (5,9 eV) dargestellt bei der noch der volle Raumwinkel von 2II abgedeckt werden kann. Die rote Linie stellt die Fläche des Detektors dar.

trometerachse. Innerhalb der Beschleunigungsstrecke *s* gelten also folgende Bewegungsgleichungen.

$$s = \frac{1}{2}at^2 + vt \tag{3.2}$$

$$t = -\frac{v}{a} \pm \sqrt{\frac{v^2}{a^2} + \frac{2s}{a}}$$
(3.3)

Rechnet man in atomaren Einheiten (a.u.) (Kapitel 1.1), was bei Rechnungen dieser Art empfehlenswert ist, sieht die Herleitung der Startenergie E aus einer gemessenen Flugzeit folgendermaßen aus:

$$E = 0, 5 \cdot m \cdot v_0^2 \tag{3.4}$$

Bei dieser Versuchsanordnung werden die Startenergien über die Impulse berechnet. Diese wiederum werden aus den gemessenen Flugzeiten und den Auftrefforten bestimmt (ebenfalls in a.u.):

$$p_x = \frac{x \cdot m_e}{tof} \tag{3.5}$$

$$p_y = \frac{y \cdot m_e}{tof} \tag{3.6}$$

$$p_z = m_e \frac{s}{tof} - \frac{qE_{feld}}{2} \cdot tof$$
(3.7)

Hierbei entspricht *s* der Beschleunigungsstrecke,  $E_{feld}$  dem elektrischen Feld und *tof* der gemessenen Flugzeit. *q* steht für die Ladung eines Elektrons und ist demnach in atomaren Einheiten 1.

### 3.5.2 Detektor

Bei der Wahl des Detektors ist die Doppelhitakzeptanz des Systems von besonderer Bedeutung. Für dieses Experiment wurde deshalb eine Hexanode von der Firma RoentDek verwendet. Diese bietet den Vorteil einer verbesserten Doppelhitakzeptanz, also einer verkürzten "Totzeit", gegenüber einer quadratischen Anode. Mit "Totzeit" wird das Zeitfenster bezeichnet innerhalb dessen keine zwei Signale getrennt voneinander registriert werden können. Mit der Hexanode wurden drei Micro-Channal-Plates kombiniert, um eine möglichst hohe und homogene Elektronenvervielfältigung zu erreichen.

#### **Micro-Channel-Plates**

Das MCP ist ähnlich dem Photomultiplier ein Sekundärelektronenvervielfacher, bei dem jedoch die Information über den Auftreffort des nachzuweisenden Teilchens erhalten bleibt.



Abbildung 3.6: Schematische Darstellung eines Micro Channal Plates [SOB88].

Ein Micro-Channal-Plate (Abb.3.6) besteht aus vielen parallel zueinander angeordneten Bleiglaskanälen, etwa 100000/cm<sup>2</sup>, mit einem Durchmesser von  $25\mu$ m. Die MCPs sind mit einer hochohmigen Metall-Legierung beschichtet, welche eine geringe Austrittsarbeit für Elektronen besitzt.

Zwischen Vorder- und Rückseite des dreilagigen MCP-Systems wird eine Spannung von 2700V angelegt. Dies bewirkt eine Verstärkung von

#### $1x10^6 - 1x10^7$ :

Durch das Auftreffen eines Elektrons (oder jedes anderen Teilchens, das mehr Energie als die Austrittsarbeit der Elektronen in der Innenbeschichtung mitbringt), werden aus der Beschichtung der Glaskanäle Elektronen herausgelöst, die ihrerseits, angetrieben durch die Spannung zwischen Vorder- und Rückseite der Platten, Elektronen herauslösen. Somit entsteht eine Elektronenlawine (Abb. 3.7). Die Ausdehnung der am Ende der MCPs austretenden Elektronenwolke liegt bei einigen Kanaldurchmessern.



Abbildung 3.7: Schematische Darstellung einer Elektronenlawine in einem Kanal des Micro-Channal-Plates.

Der ganze Prozess geschieht in wenigen Nanosekunden. Wenn Elektronen aus dem MCP herausgelöst werden, fließen Elektronen aus der Spannungsquelle nach. Dieses "Nachfließen" der Elektronen aus der Spannungsquelle erzeugt einen kurzen messbaren Spannungsabfall in der Versorgungsquelle, welcher durch einen Kondensator (C) ausgekoppelt wird. Gleichzeitig bestimmt dieser Puls den Zeitpunkt des elektronischen Nachweises eines Teilchens.

Bei der Anordnung von MCP's unterscheidet man zwischen der *Chevron-Anordnung*, bei der zwei MCP übereinander und um 180° gedreht angeordnet sind und der *Z-Stack-Anordnung*, bei der drei MCPs (ebenfalls um 180° gedreht) übereinander liegen (Abb. 3.8). Bei diesem Experiment wird die Z-Stack-Anordnung genutzt.



Abbildung 3.8: a) Chevron-Anordnung b) Z-Stack-Anordnung

### Hexagonale Delayline-Anode

Wie eingangs erwähnt, wurde bei diesem Experiment eine hexagonale Anode genutzt. Sie besteht aus drei Lagen von um 60° zueinander gedrehten Delaylines (siehe Abb.3.9). Die dritte Lage bietet redundante Möglichkeiten der Detektion, was zur Folge hat, dass ein Ereignis detektiert wird, welches sonst innerhalb der *Totzeit* von zwei Lagen verloren gegangen wäre.



Abbildung 3.9: a)Darstellung – b) Rückansicht – c) Fotographie der Hexanode [ROE07]

Die Hauptprobleme bei der Mehrfachhitmessung liegen zum einen darin, dass mehrere Hits innerhalb einer kurzen Zeit auftreffen und dadurch die Reihenfolge der Anodensignale unter Umständen falsch zugeordnet werden können. Damit ist gemeint, dass beispielsweise ein Signal des zweiten Elektrons, dem ersten Elektron zugeordnet wird. Zum anderen kann es passieren, dass Ereignisse, auf Grund der Totzeit in dem Datenaufnahmesystem, nicht detektiert werden oder zu schwache Signale nicht erfasst werden.

Darüber hinaus können an den Enden der Anodendrähte Interferenzen auftreten, die fälschlicherweise als Signale detektiert werden können. Diese müssen daher aussortiert werden. Details hierzu liefert Kapitel 4.1.



Abbildung 3.10: Spannungsteiler für die Versorgung der Hexanode.

Die Elektronenwolke, die aus dem Stapel der MCPs austritt, wird von der Hexanode angezogen, da diese auf einem etwas höheren Potential liegt als die MCPs. Zusätzlich wird mit Hilfe eines Spannungsteilers (Abb. 3.10) für einen Potentialunterschied innerhalb der Hexanode gesorgt. Dadurch liegt die zweite Lage der Anode auf einem etwas höheren Potential als die erste und die dritte wiederum auf einem etwas höheren Potential als die zweite. Somit ist gewährleistet, dass auch die letzte Lage noch soviel Elektronen empfängt, dass es für ein genügend großes Signal ausreicht. Zudem gehört zu jedem Draht ein Referenzdraht, der zum Signaldraht parallel gewickelt ist. Damit die Signaldrähte von den Elektronen bevorzugt werden, liegen diese auf einem leicht höheren Potential als die Referenzdrähte, was ebenfalls durch den Spannungsteiler erreicht wird.

Die Signale der Signal- und Referenzdrähte werden bereits beim Auskoppeln differenziert (z.B. durch Differenzverstärker oder, wie im vorliegenden Experiment, durch Pulstransformatoren), um Influenzsignale wie z.B. die kapazitive Kopplung des MCP-Signals mit den Drähten oder auch Elektrosmog, die auf beiden Drähten vorhanden sind, zu eliminieren. Dies geschieht mit Hilfe der parallel verlaufenden Signal- und Referenzdrähte. Sie stellen eine so genannte *Lecherleitung* dar, also eine dispersionsarme Hochfrequentleitung.

Die Signale, die durch den Signaldraht verlaufen, werden auf den Referenzdraht übertragen, auf dem ein entgegengesetzt gepoltes Signal induziert wird. Durch Differenzbildung der Signale der beiden Drähte werden die Signale, die auf beiden gleichermaßen vorhanden sind, also die Störungen, herausgefiltert. Der Detektorpuls bleibt dabei unverändert.

Von dort gelangen die so gefilterten Signale in die Eingänge der Digitizerkarten, wo die analogen Signale unter Berücksichtigung der Nullunterdrückung digitalisiert und in Datenpaketen auf die Festplatte geschrieben wurden. Die Nullunterdrückung bewirkt, dass das elektronische Rauschen nicht mitgeschrieben wird. Dies geschieht indem ein Schwellenwert gesetzt wird, unterhalb dessen keine "echten" Signale zu erwarten sind.

## 3.6 Datenaufnahme

Zur Datenaufnahme wurde ein Digitalisierer, analog zu einem digitalen Oszilloskop, (*Flash-ADC*) der Firma Acqiris verwendet. Es besteht aus drei DC271 Digitizerkarten, von denen jede Karte 4 Kanäle besitzt. Jeder Kanal hat eine Bandbreite von 1GHz und eine Auflösung von 8 Bit [ACQ07]. Die Bandbreite gibt darüber Auskunft bis zu welcher Frequenz ein Signal noch in das Gerät eingelesen wird. Darüber hinaus verfügt jeder Kanal über eine Abtastrate (*sampling rate*) von 1 GS/s, kann also 1 Punkt pro Nanosekunde



**Abbildung 3.11:** Schematische Darstellung der Laufzeitsumme: Durch die Berechnung der Differenz der Laufzeiten  $x_1$  und  $x_2$  kann mit einem entsprechenden Umrechnungsfaktor der Auftreffort bestimmt werden (Kapitel 4.1).

aufzeichnen.

Die Bestimmung von Zeiten geschieht anhand einer internen Uhr mit einer Genauigkeit im Picosekundenbereich. Das System nutzte das MCP-Signal vom Detektor, um auf Ereignisse zu triggern. Die Kanalbelegung der 3 Digitizerkarten sah wie folgt aus:

 Mit BUNCHMARKER ist ein Signal gemeint, dass vom Synchrotron geliefert wird und den genauen Zeitpunkt eines Lichtblitzes des Synchrotrons angibt (Kapitel 3.7).

- RATEMETER gibt darüber Auskunft, wie hoch die Rate von Photonen zum Zeitpunkt der Messung war.

## 3.7 Synchrotron

Die Arbeit mit Synchrotronstrahlung ist aus der Grundlagenforschung nicht mehr wegzudenken. Dabei wurde diese zunächst nur als unerwünschter Nebeneffekt bei der Speicherung hochenergetischer Teilchen wahrgenommen. Im Laufe der Entwicklung wurden jedoch schnell die Vorteile deutlich. Das Synchrotron liefert eine intensive Quelle elektromagnetischer Strahlung vom Infrarot- bis in den Röntgenbereich.

### 3.7.1 Synchrotronstrahlung

Synchrotronstrahlung besteht aus elektromagnetischen Wellen. Sie entsteht bei der Beschleunigung von geladenen Teilchen (z.B. Elektronen, Positronen oder Ionen). In einem Synchrotron halten Dipolmagneten die Teilchen auf einer geschlossenen Bahn gespeichert und liefern die zur Emission von Synchrotronstrahlung nötige Beschleunigung der geladenen Teilchen. Auf Grund der relativistischen Geschwindigkeit der Teilchen ist die abgegebene Strahlung stark tangential zur Bahnkurve hin fokussiert. Zur Fokussierung des Teilchenstroms werden höherpolige Magneten eingesetzt, die der Divergenz des Teilchenstroms entgegenwirken.

Die Energie, welche die Teilchen durch die Abgabe der Synchrotronstrahlung verlieren, wird mit Hilfe von *Hohlraumresonatoren* wieder ausgeglichen. Im inneren eines Hohlraumresonators werden eintretende Wellen verlustarm reflektiert und somit verstärkt. Diese Art von Beschleunigung bewirkt, dass die Teilchen in Pakete unterteilt sind. Auf Grund der unvermeidbaren Streuung an Restgasmolekülen, trotz eines Ultrahochvakuums im Ring, kommt es zu einem Verlust von Teilchen. Aus diesem Grund nimmt der Strom im Speicherring mit der Zeit ab und Teilchen müssen nachgefüllt werden.

So genannte Undulatoren und Wiggler (spezielle Anordung von Dipolmagneten) werden eingesetzt, um die Intensität der Strahlung zu erhöhen. Sie bestehen aus einer Folge von Dipolmagneten, die dem Partikelstrahl eine Wellenbewegung aufzwingen. Dabei strahlt jeder Bogen in dieselbe Richtung, wodurch sich die Lichtintensitäten überlagern. Bei Undulatoren führen Interferenzeffekte zu einer, gegenüber dem Wiggler quadratisch höheren Intensität und einer quasi monochromatischen Strahlung. Die durch den Wiggler erzeugte Strahlung besitzt ein kontinuierliches Spektrum.

Die Strahlung ist in der ebene des Synchrotrons linear polarisiert. Ein großer Vorteil einiger Synchrotrone liegt darin, dass sie sowohl im Single-, als auch im Multibunchverfahren<sup>3</sup> genutzt erden können. Im Single-Bunch-Modus

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Mit "bunch" ist ein einzelnes Paket geladener Teilchen gemeint.

umlaufen einzelne Pakete der geladen Teilchen das Synchrotron in einem genau definierten zeitlichen Abstand. Es ist auch möglich, dass nur ein Paket geladener Teilchen das Synchrotron durchläuft. Das ist vom jeweiligen Speicherring abhängig (Auf das Prinzip des Singlebunch-Modus hat es keinen Einfluss.). Der *Single-Bunch-Modus* macht eine Flugzeitmessung möglich, da durch den Abstand der einzelnen Pakete die Ereignisse, welche im Experiment aufgezeichnet werden, zeitlich separiert werden können. Infolgedessen kann man jedem Ereignis einen Zeitpunkt zuordnen an dem es stattgefunden hat.

Im Multibunch-Modus ist der Abstand der Pakete der geladenen Teilchen sehr klein, dafür ist die Intensität der Synchrotronstrahlung höher. Dieser Modus ist also für Experimente in denen eine hohe Intensität an Synchrotronstrahlung benötigt wird von Vorteil.

Die Synchrotronstrahlung verlässt den Speicherring in Strahlrohren und gelangt über Spiegel und Monochromatoren zu den einzelnen Messplätzen [BES07].

#### 3.7.2 Messplatz 3m-NIM-1 am BESSY

Das hier vorgestellte Experiment wurde am BESSY (Berliner Elektronenspeicherring für Synchrotronstrahlung) in Berlin durchgeführt (Abb. 3.12), am Messplatz 3M-NIM-1 (Abb. 3.13).

Zum Zeitpunkt der Messung wurde der Speicherring im Singlebunch-Modus betrieben. Das war nötig, damit genügend Abstand (800ns) zwischen den einzelnen Paketen der geladenen Teilchen bestand, um aufeinander folgende Ereignisse bei der Messung voneinander separieren zu können.

Die Frequenz der umlaufenden Pakete lag bei ca. 1,25 MHz, die Eventrate bei 1,5 kHz. Damit ergibt sich eine Wahrscheinlichkeit von  $1, 2 \cdot 10^{-3}$  für die Emission eines Elektrons pro Puls und entsprechend ein Verhältnis von zufälligen Koinzidenzen, von zwei Elektronen die von zwei verschiedenen Photonen ausgelöst wurden, zum ersten Elektronennachweis von  $1, 2 \cdot 10^{-6}$ . Dies ist deutlich geringer als die theoretisch zu erwartende Wahrscheinlichkeit des zu untersuchenden ( $\gamma, 2e$ ) Prozesses, die im Prozentbereich liegen sollte.



**Abbildung 3.12:** Darstellung des gesamten Speicherrings am BESSY (Berlin). Der schwarze Pfeil deutet auf die von uns genutzte Beamline [BES07].



Abbildung 3.13: Schematische Darstellung des Messplatzes 3m-NIM-1 am Bessy [BES07]

# 4. Datenanalyse

Wie müßig sind doch wissenschaftliche Betrachtungen.

Leo N. Tolstoi, Tagebücher, 1889

Pro nachgewiesenem Elektron wurden 7 Signale gemessen. 6 Anodensignale, eines für jedes Ende der drei Anodendrähte und das MCP-Signal.

Die Datenanalyse wurde mit Hilfe des Programmpakets "Root" durchgeführt. Die Datenpakete (Kapitel 3.6) werden von einem Programm eingelesen und die digitalisierten Detektorsignale über einen Software Constant Fraction Discriminator (CFD) analysiert. Die Funktionsweise eines CFDs stellt sich folgendermaßen dar: Das Eingangssignal wird in zwei Komponenten aufgeteilt. Eine Komponente bleibt unverändert und die andere wird invertiert und um eine vorher eingestellte Zeit verzögert. Danach werden beide Komponenten addiert und der erste Nulldurchgang mit positiver Ableitung wird als Auslösezeitpunkt definiert. Über verschiedene Parameter<sup>1</sup> wird eingestellt ab wann ein Ereignis als ein solches gewertet wird und ab wann es nicht als Auslösezeitpunkt für ein Ereignis verwendet wird (z.B. können auf diese Weise Nachschwinger oder eine Störung in der Elektronik Weise von einem echten Ereignis unterschieden werden.). Im Software Constant Fraction werden die vom Acqiris digitalisierten Pulse nach der gleichen Funktionsweise analysiert. Ein Vorteil des Software CFDs ist, dass man noch im Nachhinein Veränderungen an den oben genannten Parametern vornehmen kann. Anschließend arbeitet die Root-Software ausschließlich mit den durch die zuvor beschriebene Methode extrahierten Zeitwerten.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Delay, Fraction, Walk und Threshold. Näheres hierzu in Kapitel 5.2.

Aus der Messung erhält man Zeiten, relativ zu einem Startsignal (in diesem Fall das *MCP-Signal*). Anhand dieser müssen die Flugzeiten (*TOF*) und Auftrefforte bestimmt werden. Aus diesen Flugzeiten und Orten werden die Startimpulse der emittierten Elektronen bestimmt (Gleichungen 3.5 - 3.7). Aus den Impulsen lassen sich wiederum die Startenergie und der Emissionswinkel des jeweiligen Elektrons berechen.

Die Bestimmung der Flugzeiten und der Orte ist von verschiedenen Kalibrationsparametern des Detektors und des Spektrometers abhängig. Eine genaue Abstimmung der verschiedenen Parameter ist demnach äußerst wichtig. Wie man diese bestimmt und welchen Einfluss sie auf die Auswertung haben, wird in diesem Kapitel erläutert.

### 4.1 Kalibrierung des Detektors

Die wesentlichen Parameter des Detektors sind die Summenlaufzeiten der Signale auf den jeweiligen Anodenwicklungen, die relativen Zeitoffsets sowie die Skalenfaktoren zur Umrechnung der Detektorlaufzeiten in tatsächliche Orte auf dem Detektor in mm.

Gerade bei der hexagonalen Anode sind diese Parameter von großer Bedeutung (Kapitel 3.5.2), da bei der Rekonstruktion von fehlenden Detektorsignalen auf die Detektorparameter zurückgegriffen wird. Grund für ein fehlendes Detektorsignal kann die "Totzeit in der Zeit" des Detektors sein. Dadurch können zeitlich schnell aufeinander folgende Ereignisse nicht mehr getrennt detektiert werden. Auch die "Totzeit im Ort", wodurch zwei Ereignisse die örtlich gesehen nah beieinander liegen nicht getrennt voneinander registriert werden können, kann zum Verlust eines Signals führen. Ebenso kann aber auch ein zu kleines Signal Ursache für das Fehlen eines Signals sein. Aus diesem Grund müssen alle Parameter akkurat sein, denn ansonsten könnten Ereignisse reproduziert werden, die in Wirklichkeit nicht da waren.

Zur Kalibrierung des Detektors werden die Messdaten<sup>2</sup> verwendet.

#### Laufzeitsummen

Zur Bestimmung der Laufzeitsummen nutzt man folgende Information:

$$sum = x_1 + x_2 - 2mcp$$
 (4.1)

Hierbei stehen  $x_{1,2}$  für die Zeitpunkte, an denen die jeweiligen Signale einer Wicklung an den Anodenenden angekommen (Abb. 3.5.2) sind und *mcp* für den Zeitpunkt des dazugehörigen Signals des MCP's. Aufgetragen werden die

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Sie bestehen größtenteils aus Einzelelektronenereignissen.

Werte innerhalb eines dafür erstellten Spektrums (Abb.4.1).

#### Offset

Bei einer Hexanode kommt es zu einem zeitlichen Offset der dritten Lage, zu den beiden anderen Lagen. Der Grund hierfür ist, dass zwei der drei Anodenlagen linear unabhängig voneinander sind. Die dritte ist linear abhängig und muss mit Hilfe einer mathematischen Methode auf solche Weise mit den beiden anderen abgestimmt werden, dass sie die gleichen Informationen wie die anderen Lagen liefert.

Abweichungen können zusätzlich durch unterschiedliche Kabellängen nach Abgriff der Signale am Detektor auftreten. Um das zeitliche Offset zu bestimmen, wird für jedes Ereignis die zeitliche Differenz der Mitte der dritten Lage, zu der Mitte der beiden anderen Lagen, bestimmt.



**Abbildung 4.1:** Kalibrierung der Detektorparameter: Logarithmische Darstellung eines Spektrums der Laufzeitsummen einer der Anodenlagen. Die Laufzeitsumme für Ein-Elektronen-Ereignisse liegt bei  $\approx$  98 ns. Die Laufzeiten für Ereignisse, die aus Mehr-Elektronen-Ereignissen stammen, sind als Schulter zur positiven Achse hin sichtbar. Die weiteren Strukturen stammen aus Reflektionen oder werden durch das Fehlen eines der Signale verursacht.

#### Skalenfaktoren

Skalenfaktoren werden benötigt um die Laufzeiten der jeweiligen Lagen, die in *ns* gemessen werden, in einen Ort auf dem Detektor umzurechen, der in *mm* angegeben wird. Anhand der einzelnen Skalenfaktoren wird die "Größe" (in *mm*) der Anodenlagen aufeinander abgestimmt. Dazu wird zunächst einer der drei Skalenfaktor als fest angenommen. In der späteren Kalibrierung wird dieser feste Skalenfaktor so gesetzt, dass die Umrechnung in mm der tatsächlichen Größe des Detektors in mm entspricht (Diese Kalibrierung geschieht graphisch, mit Hilfe eines dafür angefertigten Spektrums.) Bei der ersten Kalibrierung ist zunächst aber nur die relative Skalierung der Anoden-Lagen untereinander relevant. Zu dem festen Skalenfaktor einer der Lagen werden die Skalenfaktoren der beiden anderen Lagen solange verändert bis die Abweichung des Ortes minimal wird. Dieses iterative Verfahren wird mit Hilfe zweier unabhängiger Berechnungsmethoden durchgeführt. Die Werte werden in ein zweidimensionales Diagramm eingetragen, wobei die Werte der jeweiligen Skalenfaktoren gegen die Ortsabweichung der beiden unabhängigen Berechnungsmethoden aufgetragen werden. Dabei liegt die beste Übereinstimmung im Bereich des Minimums (Abb.4.2).



**Abbildung 4.2:** Es werden zwei unabhängige Methoden zur Bestimmung der Positionen der einzelnen Ereignisse verwendet. Aufgetragen sind die jeweiligen Kombinationen von Skalenfaktoren gegen ihre relative Ortsdifferenz für die beiden Berechnungsmethoden. Die beste Übereinstimmung liegt im Bereich des Minimums.

### 4.2 Resortierungsalgorithmus

Wie bereits erwähnt, kommt es wegen der kurzen Flugzeitdifferenzen der Elektronen unter Umständen zur Veränderung der Signalreihenfolge an den Enden der Verzögerungsleitung. Das ist leicht ersichtlich, wenn man bedenkt, dass der zeitliche Abstand des Eintreffens der Elektronen am Detektor maximal etwa 20ns (Zeit zwischen Eintreffen des schnellsten und eines langsamsten Elektrons) beträgt, während die Laufzeit der Signale im Bereich von etwa 90ns liegt. Daher ist es nötig eine Korrektur der Signalreihenfolge vorzunehmen. Zu diesem Zweck wurde von A. Czasch [CZA02] ein Algorithmus entwickelt, der jedes einzelne Ereignis auf seine Summenlaufzeit hin überprüft und dadurch eine verkehrte Signalreihenfolge korrigiert. Da bei diesem Vorgang auf die unter Kapitel 4.1 erwähnten detektorspezifischen Parameter zugegriffen wird, wird deutlich wie wichtig die genaue Kalibrierung der Werte ist.

Wie in Kapitel 3.6 bereits erwähnt, wird in diesem Experiment zur Datenaufnahme das Acqiris-System genutzt. Bei diesem wird mit einem Software Constant Fraction Discriminators gearbeitet. Mit dem gleichen Algorithmus wie oben beschrieben, können auch einzelne Signale, die möglicherweise durch die Totzeit der Signalaufnahme (etwa 5-10 ns) nicht direkt gemessen werden konnten, rekonstruiert werden. Bei der Datenaufnahme kann es zur Überlappung von Pulsen kommen. Auch auf diese Weise verloren gegangenen Pulse können mit dem Algorithmus rekonstruiert werden. Signale bestehen in der Regel aus dem tatsächlichen Puls, evtl. Nachschwingern und Rauschen (Das Rauschen wurde bereits vor der Datenanalyse durch ein spezielles Verfahren eliminiert (Kapitel 3.6)). Um sicherzustellen, dass nicht auf Nachschwinger oder andere Störungen getriggert wird, muss man einen Wert einstellen ab dessen Höhe ein Puls als ein echtes Ereignis gewertet wird und somit in die weitere Analyse übernommen wird. Dieser Wert wird als Nulldurchgang (oder auch "walk") bezeichnet. Pulse die darunter liegen werden somit abgeschnitten und nicht mit in die weitere Analyse übernommen. Es ist darauf zu achten, dass bei der Einstellung des Software Constant Fraction kein zu niedriger Wert für den Nulldurchgang gewählt wird, da dies (durch das Triggern auf Nachschwinger) die Qualität der aufgenommenen Daten verringert und das Risiko falscher Rekonstruktion erhöht.

Im Folgenden wird das Rekonstruktionsprinzip des Algorithmus näher erläutert.

### 4.2.1 Resortierung von Signalen

Im besten Fall sind alle 6 Anoden- und 1 MCP-Signal für ein Zwei-Elektronenereignis vorhanden. In diesem Fall muss vom Programm nur die Reihenfolge der Signale überprüft werden. Dies geschieht anhand eines Summenvergleichs:

$$sum = x_{1_{signal1}} + x_{2_{signal1}} - 2mcp_{Ereignis1}$$

$$(4.2)$$

$$sum = x_{1_{signal2}} + x_{2_{signal2}} - 2mcp_{Ereignis2}$$

$$(4.3)$$

Stimmen die Summen nicht mit den vorgegebenen Laufzeitsummen überein, überprüft das Programm die verschiedenen Kombinationsmöglichkeiten.

$$sum = x_{1_{signal2}} + x_{2_{signal1}} - 2mcp_{Ereignis1}$$

$$(4.4)$$

usw.

Ist eine passende Kombination gefunden, werden die Signale den jeweiligen Ereignissen richtig zugeordnet.

### 4.2.2 Rekonstruktion von Signalen

Ein häufigeres Problem bei der Datenanalyse besteht darin, dass Ereignisse, die örtlich gesehen nah beieinander liegen und zeitlich gesehen (im Rahmen der Auflösung) gleichzeitig auftreffen, nicht nachgewiesen werden können. Der sowohl örtliche, als auch zeitliche Abstand zwischen zwei Ereignissen in denen diese nicht getrennt registriert werden können, wird Totzeit genannt. Durch Optimierung der *Constant Fraction Parameter* lässt sich diese verringern (Kapitel 5.2).

Die fehlenden Signale werden gefunden, indem man zunächst den aufgezeichneten Signalsatz mit den Summenzeiten vergleicht. Hat man einen passenden Satz gefunden, müssen die übrigen Signale zum zweiten, nicht vollständig gemessenen Elektron, gehören.

Fehlt beispielsweise ein MCP Signal, kann es dann mit Hilfe der Zeitsumme rekonstruiert werden.

$$mcp = \frac{1}{2} \left( x_1 + x_2 - sum \right)$$
 (4.5)

Auf diese Weise kann also, sofern alle Signale der Anodendrähte vorhanden sind, die z.B. Totzeit des MCP's auf Null reduziert werden.

Auf ähnliche Weise können auch fehlende Anodensignale rekonstruiert werden, sofern die MCP-Signale vorhanden sind. An dieser Stelle kommt der große Vorteil der Hexanode zum Tragen. Ereignisse die auf einer der ersten beiden Drahtlagen auf Grund ihrer geringen zeitlichen Differenz, nicht nachgewiesen werden konnten, können in der dritten Lage möglicherweise wieder separiert sein. Bei der quadratischen Ausführung der Delay-Line-Anode wäre das zweite Ereignis verloren.

### 4.3 Kalibrierung des Spektrometers

Genauso wichtig wie die Parameter des Detektors sind die Parameter des Spektrometers. Mit Hilfe dieser Größen werden aus den gemessenen Flugzeiten und den Auftrefforten die Startimpulse der Elektronen berechnet. Im Prinzip ließen sich diese auch aus der Messung der angelegten Spannung, der Kabellängen, der Länge der Beschleunigungsstrecke usw. erhalten, jedoch liegt darin auch ein gewisser Fehler, den man umgehen kann indem man die Parameter aus Kalibrierungsmessungen herleitet.

#### Bestimmung der absoluten Flugzeit

Die absolute Flugzeit (bzw. der Zeitoffset gegenüber der tatsächlichen Startzeit der Elektronen) lässt sich mit Hilfe des Photonenpeaks (Abb. 4.3) bestimmen. Dieser kann deshalb als Startpunkt für die Flugzeit der Elektronen gesetzt werden, weil Photonen quasi masselos  $(\frac{h}{c\lambda})$  sind und sich infolgedessen mit Lichtgeschwindigkeit bewegen. Sie kommen z.B. als Streulicht der Synchrotronstrahlung vor und kommen (auf der in dieser Messung betrachteten Zeitskala) instantan am Detektor an.



Abbildung 4.3: a) Rohdaten der Flugzeit incl. Zeitoffset b) Rohdaten der Flugzeiten mit korrigiertem Zeitoffset

#### Bestimmung der elektrischen Feldstärke

Zum einen kann die Feldstärke über die angelegte Spannung U und die Spektrometerlänge s berechnet werden, zum anderen kann sie aus Messungen mit verschiedenen Photonenenergien hergeleitet werden.

Dazu wurden an einer Probe Messungen bei konstanter Spannung ( $\approx 35$  V) und unterschiedlichen Photonenenergien (25 eV, 10 eV, 8 eV, 6 eV) durchgeführt. Dieses Verfahren ist allerdings nur bedingt im Fall der Photoemission von Oberflächen anwendbar<sup>3</sup>, da die Kalibrierung über einen Vergleich der zu erwartenden Flugzeiten (durch Rechnung mit Gleichungen 3.5 bis 3.7) mit

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Das Verfahren eignet sich im wesentlichen zur Kalibrierung des Spektrometers bei Versuchen an Gasen.

den gemessenen Flugzeiten stattfindet. Durch die Emission aus dem relativ breiten Valenzband sind in den Spektren keine scharfen Linien vorhanden, was eine gewisse Ableseungenauigkeit mit sich bringt. Hinzu kommt noch die relativ schlechte Energieauflösung. Bei Betrachtung der Rohdaten der Kalibrierungsmessung stellte sich heraus, dass etwas bei der Einstellung der Photonenenergien nicht korrekt funktionierte, da die Flugzeiten der schnellsten Elektronen zwischen 6 eV und 10 eV zu nah beieinander liegen. Es wirkt so, als sei der Schlitten des Monochromators, der die Wellenlänge der Synchrotronstrahlung einstellt, hängen geblieben, was bei dieser Beamline, wie im Nachhinein ermittelt werden konnte, schon mehrfach vorgekommen ist. Da keine anderen Vergleichsmessung vorliegen, wurde zur Bestimmung der elektrischen Feldstärke der eingangs erwähnte Weg über die Messung der Spektrometerlänge s gewählt. Ein Problem dabei war, dass die Beschleunigungsstrecke im Grunde genommen in zwei Strecken aufgeteilt werden muss. Zum Einen in den Bereich zwischen Probe und Gitter  $s_1 = 47,8 mm$  und zum Anderen in den Bereich zwischen Gitter und Frontplatte  $s_2 = 5 mm$ . Die Spannung  $U_1$  am Gitter lag bei  $\approx 35$  V, die Spannung  $U_2$  an der Frontplatte bei  $\approx 200$  V.



**Abbildung 4.4:** a) Photonenpeak bei 0 ns, Peak der Sekundärelektronen aus dem Gitter bei 1, 3 ns (Einstellungen; Spannung am Gitter:  $\approx 35$  V, Spannung an der Frontplatte:  $\approx 200$  V Photonenenergie: 25 eV)

Den Einfluss der zweiten Beschleunigungsstrecke kann man an dem Peak erkennen, der an der positiven Seite des Photonenpeaks zu sehen ist (Abb.4.4). Dieser kommt dadurch zustande, dass die emittierten Elektronen aus dem Festkörper, Elektronen aus dem Gitter herausschlagen können, falls sie auf dessen Stege treffen [JAL02]. Dieser Sekundärelektronenprozess ist unerwünscht und verfälscht die Flugzeitmessung, da sich Ereignisse der Elektronen aus dem Festkörper mit denen des Sekundärelektronenprozesses überlagern. Errechnet man die Flugzeiten dieser Sekundärelektronen, unter Berücksichtigung der oben genannten, angelegten Spannungen mit Hilfe der Formel 3.2, erhält man für die schnellsten Elektronen aus dem Gitter, die mit 51 eV<sup>4</sup> starten, einen Wert von  $\approx 0,77$  ns und für die langsamsten Elektronen, die mit 0 eV starten, einen Wert von  $\approx 1,31$  ns. Wie in Abb.4.4 zu erkennen ist, liegt besagter Peak in dem errechneten Bereich, unter Berücksichtigung, dass der Photonenpeak eine Verteilung von 1 ns aufweist, die sich auch auf die Verteilung des Sekundärelektronenpeaks niederschlägt.

Zwar überlagern die Sekundärelektronen aus dem Gitter das Spektrums der Flugzeitmessung, allerdings bleibt der Wert für die Flugzeit der schnellsten Elektronen aus dem Festkörper unbeeinflusst. Diesen Wert kann man somit zur Bestimmung der elektrischen Feldstärke nutzen. Dazu wurden die gemessenen Werte für die Flugzeiten der schnellsten Elektronen, bei verschiedenen Absaugspannung, mit den unter Verwendung der Formel 3.2 errechneten Werten, verglichen. Wenn man die Nachbeschleunigung nach dem Gitter berücksichtigt, sollten die schnellsten Elektronen aus dem Festkörper, die das Gitter mit 55,5 eV<sup>5</sup> erreichen, eine zusätzliche Flugzeit von  $\approx 0,76$  ns beinhalten (ebenfalls unter Verwendung der oben genannten angelegten Spannungen).

Ein Vergleich der Daten ergab, dass die gemessenen Werte mit den errechneten Werten übereinstimmen, wenn bei der Gesamtlänge des Spektrometers von 50 mm und bei der am Gitter angelegten Spannung von 38 V ausgegangen wird. Das entspricht einem Feld von 7,6 V/cm.

Abbildung 4.5 zeigt die Flugzeitverteilung einer Messung.



**Abbildung 4.5:** a) Flugzeitverteilung aus Einfach-Photoemission bei  $\hbar\omega = 25$  eV, integriert über alle Emissionswinkel. Die beiden Linien zeigen den Bereich in dem die "echten" Photoelektronen laut Berechnung ankommen sollen. Der Pfeil zeigt das Maximum der Sekundärelektronen an, welches durch die Elektronen erzeugt wird, die aus dem Gitter herausgelöst werden. Der Beitrag der höheren Harmonsichen ist im Spektrum als Schulter bei 12 ns zu erkennen. Zur besseren Veranschaulichung ist die y-Achse logarithmisch dargestellt.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Energie der schnellsten Elektronen aus dem Festkörper (20,5 eV), zusätzlich zur aufgenommenen Energie innerhalb des Feldes (35 eV) und abzüglich der Austrittsarbeit des Gitters (4,5 eV).

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>35 eV auf Grund der zugeführten Energie durch die Beschleunigung innerhalb des elektrischen Feldes und 20,5 eV auf Grund ihrer Startenergie

Die beiden Linien in Abbildung 4.5 grenzen den Bereich ein, in dem die schnellsten und langsamsten Elektronen, die aus dem Festkörper starten, laut Berechnung erwartet werden, wenn man von einem Feld von den oben genannten 7,6 V/cm ausgeht. Der Beitrag der höheren Harmonsichen ist im Spektrum als Schulter bei 12 ns zu erkennen.

# 5. Ergebnisse und Interpretation

Nur der Irrtum ist unser Teil, und der Wahn ist unsere Wissenschaft.

G.E.Lessing

In dem dieser Arbeit zu Grunde liegenden Experiment wurden Messungen an Oberflächen von  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  (Bi2212) Einkristallen durchgeführt. Dabei wurden die Kristalle mit Photonen einer Energie im Bereich von 6 eV bis 25 eV beschossen und die dabei emittierten Elektronen in einem Raumwinkel von nahezu  $2\pi$  energie -und winkelaufgelöst nachgewiesen.

Die Kristalle sind leicht überdotiert und besitzen somit eine Sprungtemperatur von  $\approx 85$  K (Kapitel 2.4.1). Der Lichteinfall der Synchrotronstrahlung auf die Probe fand unter einem Winkel von 20° Grad entlang der y-Achse statt (Abb. 5.1). Ziel des Experiments war es, korrelierte Elektronenpaare nachzuweisen.

Photoemission von Elektronenpaaren ist sowohl experimentell, als auch theoretisch, schwerer zu analysieren, als beispielsweise der Auger-Elektronen-Prozess, da die beiden emittierten Elektronen eine sehr ähnliche Energie besitzen und kein diskretes Energiespektrum aufzeigen [BIE87].

In diesem Kapitel wird die Aufbereitung der Daten erläutert.

Hierzu wurden im ersten Schritt die Einfach-Emissionen analysiert. Danach wird auf die Aufbereitung der Daten, in Hinblick auf die Doppelphotoemission, eingegangen und zuletzt werden die ausgewerteten Ereignisse, welche oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur gesammelt wurden, miteinander verglichen.

Nach den Messungen wurden die Proben auf ihre Oberfläche hin untersucht,



Abbildung 5.1: Geometrie der Mess-Anordnung. Der Lichteinfall liegt bei 20° zur x-Achse in der xy-Ebene.

um festzustellen wie gut sie im Vakuum gebrochen wurden. Da speziell eine Probe diesbezüglich recht gut aussah, wurde die Analyse der Daten zunächst für diese Probe durchgeführt und die nötigen Kalibrierungsparameter auf diese abgestimmt.

### 5.1 Ergebnisse aus Einfach-Photoemission

In Abb. 5.2 a) ist die für Bi2212 spezifische Energieverteilung dargestellt (Berechnung) [CAM02]. Dabei entspricht 0 eV der Fermienergie. (Innerhalb der Messung: 20.5 eV;  $E_{fermi} = E_{photon} - W_{\Phi}$ ).

Bei 3,5 eV (dementsprechend 17 eV = 20, 5 - 3, 5 eV) liegt das Maximum der Verteilung aus dem Valenzband. In Abb. 5.2 b) ist im Vergleich dazu eine Messung der Energieverteilungskurve von Bi2212 [HÜF95] dargestellt.

Ein Vergleich der Energieverteilungskurve der gemessenen Probe mit der errechneten Kurve für Bi2212 zeigt im supraleitenden Zustand im Bereich von 14,5 - 20,5 eV eine Häufung von Ereignissen (Abb. 5.3 b)). Ein Vergleich mit der Messung oberhalb der Sprungtemperatur zeigt jedoch keine nennenswerte Häufung von Ereignissen (Abb. 5.3 a)). Das lässt darauf schließen, dass die Probe oberhalb der Sprungtemperatur entweder schlecht oder vielleicht auch gar nicht getroffen wurden.

Um die Probe mit Hilfe des Manipulators im Fokus des Photonenstrahls



**Abbildung 5.2:** a) Energieverteilungskurve von Bi2212 (errechnet nach dem Dreiband-Modell (2.4.2)) [CAM02] b) Energieverteilungskurve (UPS; Ultraviolet photoelectron spectroscopy/ Valenzbandspektroskopie) von Bi2212 (gemessen bei  $\hbar \omega = 21, 2 \ eV$ ) [HÜF95]



**Abbildung 5.3:** Vergleich der errechneten Energieerteilungskurve von Bi2212 [CAM02] mit der Energieverteilungen der untersuchten Probe im a) nicht supraleitenden Zustand und b) supraleitenden Zustand (Die y-Achsen wurden einander angepasst.)

zu positionieren wurden die nötigen Einstellung bei der Oten Ordnung des Strahls durchgeführt. Das bedeutet, dass neben den Wellenlängen die zur Messung benötigt wurden, auch Wellenlängen im sichtbaren Bereich vorhanden waren. Die geringe Größe der Proben machte die Einstellung schwierig, zudem konnte es passieren, dass der Fokus bei der Filterung der Wellenlängen, also der Umstellung auf nur eine Wellenlänge, leicht verschoben wurde. Dies konnte dazu führen, dass die Probe nicht mehr in der Mitte, sondern eher am Rand, oder auch gar nicht mehr getroffen wurde. Dies führte wiederum dazu, dass die Elektronen den Festkörper nicht an der erwarteten Stelle verließen und so die Startimpulse falsch berechnet wurden.

Zudem musste die Position der Probe bei Veränderung der Temperatur nachjustiert werden, da sich der Probenhalter bei Wärme ausdehnte und das die Position der Probe änderte. Dadurch lässt sich erklären warum die Probe oberhalb der Sprungtemperatur weniger gut und unterhalb der Sprungtemperatur besser getroffen wurde. Während der Messungen selbst, gab es keine Möglichkeit festzustellen, ob die Proben sicher im Fokus des Photonenstrahls lagen.

#### Korrektur des Detektormittelpunkts

Zu Abweichungen zwischen dem Schwerpunkt der Verteilung und dem tatsächlichen Detektormittelpunkt kann es kommen, wenn die vom Festkörper emittierten Elektronen auf ihrer Bahn zum Detektor von äußeren Feldern abgelenkt werden. Mit Hilfe eines aus drei Helmholzspulen bestehenden Käfigs<sup>1</sup>, wurde versucht das Erdmagnetfeld, welches erheblicher Verursacher<sup>2</sup> einer solchen Ablenkung sein kann, zu kompensieren. Dieses war allerdings nicht in allen Raumrichtungen vollständig möglich, da der Käfig nur in einem kleinen Bereich ein homogenes Feld schuf.

Aus diesem Grund war es nötig den Detektormittelpunkt so zu verschieben, dass der Schwerpunkt der Verteilung mit dem Detektormittelpunkt übereinstimmt.

Im ersten Schritt wird dazu eine optische Abschätzung der Abweichung vom tatsächlichen Mittelpunkt durchgeführt. Dazu wird ein zweidimensionales Spektrum gefüllt in welchem das Detektorabbild gegen die Zählrate dargestellt ist (Abb. 5.4).



Abbildung 5.4: a) Detektorbild ohne Korrektur. Die Kreise haben ihren Ursprung im Mittelpunkt (Radius  $\approx 12 mm$ ), b) Vergrößerung des Ausschnitts ohne Korrektur, c) Ausschnitt mit Korrektur.

Ohne diese Korrektur werden die Impulse falsch rekonstruiert.

Die nötige Optimierung der Daten wird darüber hinaus über ein weiteres Spektrum erreicht. In diesem ist der Winkel  $\phi$  gegen die Energie aufgetragen: Der Winkel  $\phi$  ist der Winkel in Detektorebene (Abbildung 5.1). In einem Spektrum aus Einfach-Emissionen, in dem der Winkel  $\phi$  gegen die Energie

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Der Käfig war quadratisch, somit hatten die rechteckigen Spulen für ein Helmholtzspulenpaar keinen optimalen Abstand zueinander.

 $<sup>^2 {\</sup>rm Je}$  langsamer die Elektronen sind, desto größer ist die Beeinflussung durch äußere Felder.

aufgetragen ist, ist eine gerade Kante im Bereich der Fermikante (energiereichste Elektronen aus dem Festkörper; 20,5 eV), zu erwarten, da diese winkelunabhängig ist. Daher lässt sich durch Optimierung dieser Kante der Mittelpunkt der Verteilung, zumindest der schnellen Elektronen, bestimmen. Da langsamere Elektronen in höherem Maße durch äußere Felder abgelenkt werden, kann der Einfluss des Erdmagnetfeldes nur bedingt für diese korrigiert werden.

In Abbildung 5.5 sind sechs Spektren gezeigt, in denen der Winkel  $\phi$  gegen die Energie aufgetragen ist. In *a*) ist die Verteilung gezeigt, die sich nach Verschieben des Detektormittelpunktes über optische Abschätzung ergibt. *b*),*c*),*e*) und *f*) zeigen die Veränderungen nach Verschieben des Mittelpunkts entlang der x- (*b*),*c*)) bzw. y-Achse (*e*),*f*)) um 3 mm. Über einen anschließenden iterativen Prozess, bei dem die Werte für die Abweichung des Detektormittelpunkts so verändert werden, dass die Energieverteilung eine Gerade an der Fermikante aufweist, erreicht man schließlich eine optimierte Kalibrierung wie sie in *d*) zu sehen ist.



**Abbildung 5.5:** Spektren in denen der Winkel  $\phi$  (Winkel in der Detektorebene) gegen die Energie der jeweiligen Elektronen dargestellt ist **a**) Durch optische Abschätzung erreichte nicht ganz homogene Verteilung entlang der Energien **b**),**c**) Verschieben des Mittelpunkts um 3 mm in positive bzw. negative x-Richtung **e**),**f**) Verschieben des Mittelpunkts um 3 mm in positive bzw. negative y-Richtung **d**) optimale Kalibrierung des Detektormittelpunkts

Der Winkel  $\theta$  ist der Winkel zur Spektrometerachse. Dabei liegt 0° entlang der Achse in Flugrichtung der Elektronen und 90° entspricht dem maximalen Winkel, in welchem die Elektronen den Festkörper verlassen können.

Wie in Abbildung 5.6 zu erkennen ist, werden ab einem Winkel von  $\approx 50^{\circ}$  nicht mehr alle Elektronen oberhalb gewisser Energien erfasst. Das liegt daran, dass die Elektronen, die oberhalb dieses Winkels und mit relativ hoher Energie den Festkörper verlassen, nicht mehr vom elektrischen Feld innerhalb des Spektrometers erfasst und auf den Detektor gelenkt werden können (vgl. Simulation der Elektronenverteilung; Kapitel 4.3).



**Abbildung 5.6:** Spektren in denen der Winkel  $\theta$  (Winkel zur Spektrometerachse) gegen die Energie des jeweiligen Elektrons aufgetragen ist. In a) ist die Detektorgröße nicht optimiert in b) hingegen optimiert. Die gestrichelte Linie zeigt die Lage der Fermikante an.

Dieses Spektrum wird auf ähnliche Weise zur Kalibrierung verwendet wie das Spektrum " $\phi$  gegen Energie". Auch hier muss eine Kante bei 20,5 eV sichtbar sein. Zunächst war diese Kante verbogen (Abbildung 5.6 a)). Indem durch Variation der Skalenfaktoren die Größe des Detektors kalibriert wurde, konnte die Kante "gerade gezogen" werden (Abbildung 5.6 b)). Das lässt sich folgendermaßen (anschaulich) erklären; die Elektronen die weiter vom Mittelpunkt entfernt sind, weisen durch den vergrößerten Parallelimpuls eine höhere Energie auf. Verkleinert man den Detektor liegen alle Ereignisse näher zum Mittelpunkt und weisen somit einen geringeren Energiebetrag auf.

### Impulsverteilung

Bei Gastargets ist, bei den jeweils gegeneinander aufgetragenen Impulskomponenten, eine so genannte Impulskugel darstellbar.

Beim Festkörper ist diese "Kugel" nur bei den Impulskomponenten  $p_x$  gegen  $p_y$  vollständig vorhanden. Bei den Impulskomponenten, die gegen  $p_z$  aufgetragen sind, ist nur maximal ein Halbkreis zu erkennen, zu höheren Energien auch noch weniger. Das liegt zum Einen an den, in den Festkörper hinein


**Abbildung 5.7:** Impulskomponenten gegeneinander aufgetragen; a)  $p_x$  gegen  $p_y$ b)  $p_x$  gegen  $p_z$  c)  $p_y$  gegen  $p_z$ 

startenden, Elektronen, wodurch kein Elektron mit negativem z-Impuls<sup>3</sup> nachgewiesen werden kann und zum Anderen an den Elektronen, die auf Grund ihrer hohen Energie ab einem bestimmten Parallelimpuls das Spektrometer verlassen und somit ebenfalls nicht mehr nachgewiesen werden können.

Wie in Abbildung 5.7 a) zu erkennen, liegen in die Ereignisse von  $p_x$  gegen  $p_y$ , wie erwartet, auf einer Kugelfläche. Der eingezeichnete Kreis liegt bei 1,23 a.u., dass entspricht einer Energie von 20,5 eV. Da Elektronen die mit 20,5 eV und einem maximalen Parallelimpuls starten, nicht nachgewiesen werden können, liegen die detektierten Ereignisse bei maximal  $\approx$  0,9 a.u. (11 eV). In Abbildung 5.7 b) und c) ist der Effekt, dass die Möglichkeit einen Raumwinkel von 2 $\Pi$  abzudecken mit zunehmender Startenergie der Elektronen kleiner wird, deutlich zu erkennen. Ebenso ist zu sehen, dass die Ereignisse, die nachgewiesen werden können, auf einer Kugelfläche liegen.

#### Fermifläche

In vielen Veröffentlichungen von Messungen mit ARPES wird die Fermifläche von Festkörpern dargestellt. In Abbildung 5.8 a) ist die Fermifläche von Bi2212 dargestellt, wie sie aus ARPES Messungen gewonnen wurde [LEG03].

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Impuls Richtung Spektrometerachse.



**Abbildung 5.8:** a) Fermifläche (ARPES-Messung) [LEG03] b) Fermifläche 19, 5 - 20, 5 eV (COLTRIMS-Messung)

Auf Grund der hohen Energieauflösung bei ARPES können sehr feine Ausschnitte aus der Energieverteilung gewählt und so der Festkörper bis hin zur kompletten Bandstruktur dargestellt werden. Wie eingangs erwähnt, ist das bei einer Messung mit COLTRIMS nicht möglich, da mit der verbesserten Doppelhitakzeptanz eine Verschlechterung der Energieauflösung einhergeht. Um dieses zu verdeutlichen, stellt die Abbildung 5.8 b) die Fermifläche mit COLTRIMS gemessen dar. Auf Grund der Energieauflösung von  $\pm 1$  eV ist ein Bereich von 19,5 - 21,5 eV gewählt worden.

Wegen der schlechten Energieauflösung kann auch nicht bestimmt werden wo die Hochsymmetriepunkte (Kapitel 2.4.1) zu finden sind. Somit ist eine Klärung der Orientierung der Probe bei dieser Auflösung nicht möglich.

Die Ergebnisse der Analyse der Ein-Elektron-Ereignisse zeigt, dass sich einige Kalibrierungsparamter nicht genau genug bestimmen ließen. Diese Problematik hätte durch die Messung bei verschiedenen Photonenenergien zum Teil umgangen werden können.

Die übrigen Proben wurden mit den gleichen Parametern analysiert. Die Ergebnisse zeigen, dass bei diesen kein klarer "cut-off" bei 20.5 eV zu erkennen ist. Die verwaschene Fermikante ließe sich dadurch erklären, dass die Proben eventuell am Rand getroffen wurden. Das hätte eine falsche Berechnung der Startimpulse zur Folge und somit eine fehlerhafte Berechnung der Startenergien.

In Abbildung 5.9 und 5.10 sind die Energieverteilungskurven aller untersuchten Proben dargestellt. Probe 4 ist die Probe an der die vollständige Analyse durchgeführt wurde.



**Abbildung 5.9:** Energieverteilungskurven der Proben 1 bis 3 a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur

### 5.2 Ergebnisse aus Doppel-Photoemission

Der Schwerpunkt dieser Untersuchung lag auf der Messung von Doppel-Photoemissionen. Neben der Nutzung des für diesen Zweck geeigneten



**Abbildung 5.10:** Energieverteilungskurven der Proben 4 bis 6 a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur

Spektrometer- Detektorsystems, wurde zur Datenaufnahme ein Flash ADC verwendet (Kapitel 3.6). Bei diesem konnte die Pulsfindung über die Methode des Constant-Fraction-Algorithmus in der späteren Auswertung vorgenommen werden. Vorteil bei dieser Art der Auswertung ist eine Verringerung der Totzeit innerhalb derer keine zwei Pulse getrennt voneinander registriert werden können, gegenüber der herkömmlichen Methode bei der bereits bei der Messung die zur Pulsfindung nötigen Parameter (delay, fraction, walk und threshhold) eingestellt werden.

In Abbildung 5.11 ist zum Vergleich das Spektrum der *Totzeit* gegen die *Totzeit im Ort* dargestellt. Abbildung 5.11 a) zeigt das Spektrum mit schlecht eingestellten *Constant Fraction Parametern* und Abb. 5.11 b) zeigt die glei-

che Analyse mit optimierten Parametern. Es ist eine deutliche Verbesserung zu erkennen.



**Abbildung 5.11:** Totzeit gegen die Totzeit im Ort mit a) schlechten Contant Fraction Parametern und b) optimierten Parametern.

In Abbildung 5.12 ist ein Doppelpuls auf einem der Anodenlayer dargestellt. Mit optimierten Constant Fraction Einstellungen (Abb. 5.12 a)) wird der Puls als doppelter Puls erkannt, mit schlechter eingestellten Parametern (Abb. 5.12 b)) nur als einzelner Puls.



**Abbildung 5.12:** Doppelpuls mit a) guten und b) schlechten "constant fraction" Einstellungen.

Aus diesen Bildern wird ersichtlich wie wichtig die richtigen Einstellungen für die Doppelpuls-Findung sind, denn die Ergebnisse werden in der weiteren Analyse dem Resortierungsalgorithmus übergeben (Kapitel 4.2). Werden an dieser Stelle Pulse nicht oder falsch erkannt, hat dies Einfluss auf die Analyse der Doppel-Photoemission, was wiederum die Interpretation der Spektren, welche aus diesen Daten erstellt werden, unmöglich machen kann.

Bei der Untersuchung von Doppel-Photoemission sind die in Kapitel 2.6 er-

wähnten kohärenten Prozesse von Bedeutung. Daher ist es wichtig festzustellen, ob die emittierten doppelten Elektronen noch Informationen über den ursprünglichen Prozess enthalten, oder ob diese aus einer Sekundärelektronenkaskade stammen. Folglich müssen Spektren erstellt werden, die die kohärenten Prozesse, z.B. durch setzen von Bedingungen, unter denen die Spektren gefüllt werden, hervorheben.

In der Arbeit von M. Hattass [HAT04] wurde wie auch schon in vorangegangenen Experimenten, mit vorgeschriebener Emissiongeometrie folgende Abhängigkeit gezeigt.

$$E_{sum} \le \hbar\omega - 2W_{\Phi} \left( W_{\Phi} : Austrittsarbeit \right)$$
(5.1)

Diese Abhängigkeit ist auch in den Ergebnissen der Analyse der dieser Arbeit zu Grunde liegenden Messdaten zu erkennen (Abb. 5.13), wenn auch nicht besonders gut.



**Abbildung 5.13:** a) Zwei-Elektronen-Energiespektrum bei  $\hbar\omega = 25$  eV, integriert über alle Emissionswinkel. Die Schwelle der Paar-Energie liegt bei  $\approx 16$  eV. Sie ist durch die Linie gekennzeichnet. b) Summenenergie der Zwei-Elektronen-Korrelation

Es wäre eine definierte Grenze bei  $E_{sum} \leq \hbar \omega - 2W_{\Phi}(W_{\Phi} : Austrittsarbeit)$ , also 16 eV, zu erwarten. In Abbildung 5.13 b) ist die Summenenergie der Zwei-Elektronen-Korrelation dargestellt. In dieser wird deutlich, dass die Grenze bei 16 eV ausgeschmiert ist. Das lässt sich auf die Energieauflösung zurückführen, die sich mit abnehmender Startenergie noch zunehmend verschlechtert, zudem aber auch auf falsch rekonstruierte doppelte Ereignisse, die die tatsächliche Verteilung überlagern.

In Abbildung 5.14 a) ist die Fermifläche bei der Doppel-Photoemission zwischen 15,5 und 16,5 eV ( $E_{fermi/doppelemission} = E_{photon} - 2\dot{W}_{\Phi} \pm 0, 5 eV$ ) dargestellt. Als Bedingung ist gesetzt, dass die Summe der beiden Elektronen zwischen 15,5 und 16,5 eV liegen muss. Das Spektrum ist sowohl mit den ersten als auch mit den zweiten Ereignissen gefüllt.

Im Vergleich dazu zeigt Abbildung 5.14 b) noch einmal die Fermifläche der Einfach-Photoemission (zwischen 19,5 und 21,5 eV).



**Abbildung 5.14:** a) Fermifläche aus Doppel-Photoemissionen (15,5 - 16,5 eV). b) Fermifläche aus Einfach-Photoemission (19,5 - 21,5 eV). (COLTRIMS)

### 5.3 Vergleich zwischen Doppel-Photoemission oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur

Abschließend sollen die Aufteilung des Parallelimpulses, die Winkelverteilung und die Fermifläche oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur, miteinander verglichen werden.

In dem Kapitel über die Einfach-Photoemission ist erwähnt, dass die Probe an der die gesamte Analyse durchgeführt wurde oberhalb der Sprungtemperatur wahrscheinlich nicht optimal getroffen wurde. Dennoch wird an dieser Stelle ein Vergleich der Daten vorgenommen und Interpretationen versucht.

Auf Grund der verschiedenen Elektronenkorrelationen innerhalb des Festkörpers ist es von Bedeutung verschiedene Bedingungen zu setzen, unter denen Spektren mit Ereignissen gefüllt werden.

Unterhalb der Sprungtemperatur wäre zu erwarten, dass vermehrt Cooper-Paare aus dem Festkörper emittiert werden. Es wird vermutet, dass die Elektronen des Paares einen vom Betrag her gleichen, aber entgegengesetzten Parallelimpuls haben. Aus diesem Grund ist ein dreidimensionales Spektrum gefüllt worden, in dem die Fermiflächen, erstellt aus den ersten und zweiten Ereignissen, miteinander addiert wurden (Abbildung 5.15).



**Abbildung 5.15:** Darstellung der Summenimpulse beider Elektronen in der Ebene, parallel zur Oberfläche, erstellt aus den ersten und zweiten Ereignissen a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur.

Da die Parallelimpulse den gleichen Betrag aber in entgegengesetzten Richtungen aufweisen, sollte unterhalb der Sprungtemperatur ein Peak in der Mitte bei  $p_x = 0$  a.u.,  $p_y = 0$  a.u. zu erkennen sein, der aber leider nicht sichtbar ist.

Im supraleitenden Zustand sollte sich auf Grund der "back to back"-Relation<sup>4</sup> der Cooper-Paare, eine Häufung entlang der Diagonalen zeigen, in denen die Summe der Winkel des ersten und des zweiten Elektrons 180° ergeben (Abb. 5.16).

Die eingezeichneten Linien kennzeichnen den Bereich indem die Summe der Winkel 180° ergibt. Leider ist in dieser Darstellung kein Unterschied zu erkennen.

Zur besseren Darstellung ist in Abbildung 5.17 die Summe in einem zweidimensionalen Spektrum gezeigt.

In dieser Darstellung sollte unterhalb der Sprungtemperatur eine Häufung von Ereignissen bei 180° und -180° erkennbar sein. Aber auch hier wird kein Unterschied deutlich.

Zuletzt sind die Fermiflächen oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur dargestellt (Abbildung 5.18). Auch in dieser Darstellung sollte sich im supraleitenden Zustand des Festkörpers eine "back to back"-Relation der

 $<sup>^4</sup>$ Damit ist gemeint, dass die beiden Elektronen eines Cooper-Paares in einem Winkel von 180° auf dem Detektor ankommen, da sie auf Grund ihrer Abstoßung untereinander einen größtmöglichen Abstand suchen.

5.3. Vergleich zwischen Doppel-Photoemission oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur



**Abbildung 5.16:** Winkel  $\phi$  des ersten und zweiten Elektrons gegeneinander aufgetragen ( $\hbar\omega$  = 25 eV) a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur. Die Linien zeigen den Bereich indem die Summe der Winkel des ersten und des zweiten Elektrons 180° ergibt.



**Abbildung 5.17:** Addition aus Winkel  $\phi$  des ersten und zweiten Elektrons a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur, gegen die Zählrate aufgetragen. Die Linien zeigen den Bereich indem die Summe der Winkel des ersten und des zweiten Elektrons 180° ergibt.

Cooper-Paare zeigen.

Aber auch in diesen Spektren ist kein signifikanter Unterschied zu erkennen.

Beim Vergleich der Doppel-Photoemission oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur sind keine schlüssigen Ergebnisse zu finden.

Unter anderem ist eine Erklärung hierfür, die nicht besonders gute Energieauflösung. Diese lässt sich auf die kurze Flugzeitverteilung zurückführen. Zudem konnten die Proben nicht optimal kalibriert werden, weil Messungen zur Kalibrierung fehlen. Ebenso scheint das Erdmagnetfeld ein beeinflussender Faktor gewesen zu sein, trotz des Versuchs es mit einem Gegenfeld zu kompensieren.

Darüberhinaus verfälschen Sekundärelektronen aus dem Gitter die Energie-



**Abbildung 5.18:** Fermifläche der doppelten Elektronen (Energiebereich 15,5-16,5 eV) a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur.

#### verteilung.

Dies alles führte dazu, dass die gewählten Schnitte bei 15,5 - 16,5 eV viele Ereignisse enthalten die dort nicht wirklich "hingehören" und eine Interpretation der Spektren daher nicht möglich machen.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

Es gibt kein größeres Hindernis des Fortgangs in den Wissenschaften, als das Verlangen, den Erfolg davon zu früh verspüren zu wollen.

Georg Christoph Lichtenberg, Sudelbücher

#### ZUSAMMENFASSUNG

Ziel des Experiments war es korrelierte Elektronen in einem Hochtemperatursupraleiter nachzuweisen. Darüber hinaus sollten die Daten die oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur gesammelt wurden, miteinander verglichen werden.

Für die Photoemissionsmessung wurde, statt des in der Festkörperphysik gebräuchlichen ARPES-Systems, das in der Atomphysik zur Anwendung kommende COLTRIMS-System verwendet. Der Vorteil liegt in der Mehrfachhitakzeptanz des Detektors und der damit verbundenen Möglichkeit korrelierte Elektronen koinzident nachzuweisen.

Die Probe wurde mit Synchrotronstrahlung im Bereich von 6 eV - 25 eV beschossen. Die herausgelösten Elektronen wurden durch ein homogenes elektrostatisches Feld auf den orts- und zeitauflösenden Detektor beschleunigt. Durch Messung der Flugzeiten und Auftrefforte der Elektronen konnten die Startimpulse rekonstruiert werden.

Das Experiment wurde am Berliner Elektronenspeicherring für Synchrotronstrahlung (BESSY) durchgeführt. Das untersuchte Material bestand aus einer Serie von Bi2212 Einkristallen, die nacheinander in die Messanordnung eingebracht und im Ultra-Hoch-Vakuum untersucht wurden. Bei der Auswertung der Daten ergaben sich Probleme in der Kalibrierung von Spektrometer- und Detektorparametern, da Kalibrierungsmessungen fehlen. Zudem konnte das Erdmagnetfeld nicht optimal kompensiert werden, was Einflüsse auf die Flugbahn der Elektronen (gerade der langsamen) hatte. Durch vorangegangene Experimente ist eine Maximalenergie von Elektronenpaaren von  $E_1 + E_2 = \hbar \omega - 2W_{\Phi}(W_{\Phi} : Austrittsarbeit)$  zu erwarten. Im Bereich der Auflösung ist dieses auch in diesem Experiment erkennbar. Beim Vergleich der Doppel-Photoemission oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur sind keine schlüssigen Ergebnisse zu finden. Wesentliche Ursachen hierfür sind im Folgenden genannt:

- Die Probe wurde eventuell nicht gut genug getroffen.

- Die Parameter zur Kalibrierung sind nicht optimal.

Die Energieauflösung ist nicht gut genug.

 Die Sekundärelektronen aus dem Gitter haben die Energieverteilung aus dem Festkörper überlagert.

- Das Erdmagnetfeld wurde nicht optimal kompensiert.

Abschließend sei gesagt, dass nicht auszuschließen ist Unterschiede von Bi2212 oberhalb und unterhalb der Sprungtemperatur mit den in diesem Versuch genutzten Techniken sichtbar zu machen, nur müssen einige Verbesserungen vorgenommen werden.

#### AUSBLICK

In Zukunft könnte bei Messungen an Bi2212 ein *"Temperaturstabilisierter Probenhalter"*, wie er bereits bei Elektronenrastermikroskopen verwendet wird [YAT97], eingesetzt werden. Der Vorteil läge darin, dass die Probe ihre Position bei unterschiedlichen Temperaturen nicht mehr ändert und somit eine Kalibrierung pro Probe ausreichen würde.

Bevor dieser neue Probenhalter zum Einsatz kommt, ist es mittelfristig, in weiteren Experimenten dieser Art, geplant, Messungen an Blei durchzuführen. Bei diesem Material liegt der Vorteil in der Größe der Probe. Wie in Kapitel 5.1 beschrieben, bestand ein unvermeidbares Problem darin, nicht genau bestimmen zu können, ob der HTSL Bi2212, welcher nur eine geringe Größe besitzt, vom Photonenstrahl getroffen wurde.

Ein Nachteil bei Blei liegt darin, dass dieser ein Supraleiter erster Art ist

und somit eine sehr niedrige Sprungtemperatur besitzt (7.2 K). Das stellt erhöhte Anforderungen an den Kryostaten und die Abschirmung der Probe vor Wärmeleitung. Als Alternative zu Blei käme Niob in Frage, da es, für einen Supraleiter erster Art, eine relativ hohe Sprungtemperatur besitz (9.2 K). Bei diesem Material ist jedoch die Reinigung der Oberfläche problematischer als bei Blei. Bei beiden geschieht dies im ersten Schritt über so genanntes "sputtern" mit hochenergetischen Argon-Ionen. Dabei wird ein Teil der Oberfläche abgetragen, wodurch eine unregelmäßige Oberfläche entsteht. Im zweiten Schritt wird die Oberfläche durch erhitzen des Materials wieder "ausgeheilt". Das Problem bei Niob ist, dass es schnell oxidiert, sehr widerstandsfähig ist und infolgedessen sehr hohe Temperaturen benötigt, bei denen die Oberfläche ausgeheilt wird, was eine zusätzliche Anforderung an den Aufbau des Experiments darstellt.

Ein weiteres Problem bei Supraleitern erster Art ist, dass sie im Gegensatz zu HTSL nicht als zweidimensional angenommen werden können und dadurch die Berechnung schwieriger wird.

Das Problem der schlechten Energieauflösung kann nicht wie in anderen Experimenten durch ein längeres Spektrometer behoben werden, da, ohne zusätzliche Überlagerung eines Magnetfeldes, dies zur Folge hätte einen kleineren Raumwinkelbereich abzudecken. Dies wiederum hätte Auswirkungen auf den Nachweis von korrelierten Elektronen, da gerade die Cooper-Paare in einem großen Abstand zueinander, also mit einem großen Zwischenwinkel, erwartet werden.

Möglich wäre eventuell der Einsatz eines parabelförmigen elektrischen Feldes. Ob dies eine nennenswerte Verbesserung für zukünftige Experimente bringt, muss noch in Simulationen überprüft werden. Vorteil bei dieser Art Feld ist es, dass kein Gitter mehr benötigt wird und somit das Problem der Sekundärelektronen, die aus diesem herausgeschlagen werden, ganz umgangen werden kann.

Bei Nutzung des bisherigen Feldes muss der Abstand zwischen Gitter und MCP verringert werden, damit das Emissionsspektrum, das durch die Sekundäremission aus dem Gitter verursacht wird unter das Emissionsspektrum aus dem Festkörper geschoben wird.

Um der Problematik des nicht optimal kompensierten Erdmagnetfelds in nächsten Experimenten entgegen zu wirken, wurde ein neuer "Helmholtz-Käfig" konzipiert. Im Gegensatz zum vorherigen sind bei diesem die Spulen rund (nicht quadratisch) und in einem optimalen Abstand zueinander angeordnet (Abb. 6.1), was ein verbessertes homogenes Magnetfeld im Bereich der Probe und des Spektrometer/Detektorsystems erzeugen soll. Bei der Analyse von korrelierten Elektronen ist es vor allem wichtig, dass Doppelpulse auf den unterschiedlichen Detektorlagen auch als solche erkannt werden. In Kapitel 5.2 wurde der "Constant Fraction Algorithmus" genauer erläutert, mit Hilfe dessen die Totzeit verbessert werden kann. Ein noch größeren Vorteil könnte da ein anderer Algorithmus bringen der in der Arbeitsgruppe der Universität von Rouen (Frankreich) entwickelt wurde [COS05].

Gerade die Klasse der HTSL wirft im Bereich der Elektronenkorrelation noch sehr viele Fragen auf, die vielleicht in Zukunft mit Hilfe von COLTRIMS im Zusammenhang mit oben genannten Verbesserungen beantwortet werden können.



Abbildung 6.1: Darstellung des experimentellen Aufbaus mit verbessertem "Helmholtzkäfig".

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Wenn Atome aneinander gereiht werden, spalten alle Niveaus entsprechend der Anzahl der miteinander wechselwirkenden Potentiale auf (b). Bei einer sehr großen Anzahl von Atomen entstehen aus den überlappenden Niveaus Energiebänder (a). Elektronen auf niedrigeren Niveaus sind stärker an ihr Atom gebunden. Infolgedessen ist die Wechselwirkung mit Nachbara- tomen geringer, was zu einer nicht nennenswerten Aufspaltung dieser Energieniveaus und somit zu schmalen Energiebändern	C
2.2	Schematische Darstellung der ersten Elementarzelle (Brilloin- zone) bei einem kubischen Gitter.	7
2.3	Elektronen Paarbindung im Atomgitter [KAT99]	13
2.4	Cooper-Paar, dargestellt im Feynman-Diagramm [KAT99]	14
2.5	Bändermodell eines Supraleiters [KAT99]	15
2.6	Darstellung der Kristallstruktur von $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi2212). Sie setzt sich zusammen aus $BiO_2$ -Doppellagen und $Sr_2CaCu_2O_x$ -Blöcken. Die Sauerstoff-Atome sind in den Pyra- miden der Bi2212-Struktur in den Eckpunkten angeordnet. [MÜL00]	17
2.7	a) Die orthorhombische und pseudotetragonale Einheitszelle von Bi2212 in der Cu-O-Ebene und b) die dazu korrespondie- rende Brillouinzonen. c) Pseudotetragonale Brillouinzone von Bi2212, im erweiterten Zonenschema [BAN99]	18
2.8	LDA-Bandstrukturrechnung für Bi2212 a) Die Bandstruktur [KRA88] b) und die Fermifläche [MAS88]	18
2.9	Schematische Darstellung des Photoemissionsprozesses im voll- ständigem bzw. reduziertem Zonenschema (entnommen aus	റെ
	[погајј	23

2.10	Schematische Darstellung der Photoemission von einer Festkör- peroberfläche im Drei-Stufen-Modell	25
2.11	a) Optische Anregung eines Valenzelektrons im reduzierten Zo- nenschema b) Kinetische Energie $E_{kin}$ des Photoelektrons im Vakuum als Funktion seines Wellenvektors $p/\hbar$ .	26
2.12	Geometrische Konstruktion des Fluchtkegels für das einfache Modell der Oberfläche. Von der verfügbaren Impuls-Kugel mit Radius $ \vec{k} $ wird der Anteil $\sqrt{2m/\hbar^2(E_V - E_0)}$ abgeschnitten. Der verbliebene Winkelbereich definiert den Öffnungswinkel des Fluchtkegels [HÜF95]. Der Winkelbereich $0 \le \theta \le \theta_{krit}$ bildet einen Kegel. Wobei $\theta_{krit}$ der Winkel ist, unter dem Elektronen einer festen Energie $E_f - e_0$ im Festkörper, diesen noch verlas- sen können. Dieser Kegel wird daher auch <i>Flucht-Kegel</i> bzw. <i>escape cone</i> genannt. Er hat einen wichtigen Einfluss auf die innerhalb dieser Arbeit zu betrachtende Doppelphotoemission und die damit einhergehende Interpretation von Koinzidenz- spektren [HAT04]	27
2.13	Feynman-Diagramme niedrigster Ordnung zur Doppel- Photoemission. a) Die Wechselwirkung der Elektronen findet im Grundzustand statt, vor Einkopplung des Photons ("ground state correlation", <i>"shake-off"</i> ); b) Absorption des Photons durch eines der Elektronen im Grundzustand und anschließender Wechselwirkung im Endzustand ("final State interaction", <i>FSI</i> ) [SCH03].	30
2.14	Feynman-Diagramm niedrigster Ordnung zur Doppel-Photoemiss Inkohärenter Beitrag: ein Elektron absorbiert das Photon und streut nach einer Wegstrecke mit einem zweiten Elektron. Die Phaseninformation geht hierbei verloren [SCH03]	sion. 31
2.15	a) Schematische Darstellung des Doppel-Photoemissionsprozesses $\omega$ steht für das einfallende Photon. Die beiden Pfeile zeigen eine mögliche Emissionsrichtung der emittierten Elektronen; mit den jeweiligen Energien ( $E_1, E_2$ ), den Spins ( $\sigma_1, \sigma_2$ ) und den Winkeln zur Emissionsrichtung ( $\theta_1, \theta_2$ ) b) Elektronen-Paar Win- kelverteilung des Supraleiters $V_3Si$ als Funktion von $\theta_2$ bei festgehaltenem $\theta_1 = 45^\circ$ . $E_1 = E_2 = \omega/2 \approx 10,63 \ eV$ . oben: Kor- relierte Paare (CP) unten: Unkorrelierte Paare (UP) [KOU03]	5.
		J L

3.1	Darstellung der	UHV-Kammer.	•	•	•	•••	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	3	64
-----	-----------------	-------------	---	---	---	-----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

3.2	Aufnahme der beiden Magazine und des Kaltkopfes (von der Seite des Transferarms aus gesehen).	37
3.3	Darstellung des Spektrometer-Detektor-System.	39
3.4	Darstellung des Spektrometers. Es ist die Strahlführung durch die Blenden, in der speziell angefertigten Spektrometerplatte, auf die Probe zu erkennen.	40
3.5	a) Elektronenverteilung auf dem Detektor bei 20,5 eV Start- energie. Es ist zu erkennen, dass nicht der ganze Raumwinkel von $2\Pi$ nachgewiesen werden kann. b) Die Starenergie der Elek- tronen beträgt ebenfalls 20,5 eV, jedoch ist der Winkel so einge- schränkt ( $-53^{\circ} - +53^{\circ}$ ) dass alle Elektronen in diesem Bereich den Detektor erreichen. c) In dieser Simulation wird die maxi- male Energie (5,9 eV) dargestellt bei der noch der volle Raum- winkel von $2\Pi$ abgedeckt werden kann. Die rote Linie stellt die Fläche des Detektors dar.	41
3.6	Schematische Darstellung eines Micro Channal Plates [SOB88].	42
3.7	Schematische Darstellung einer Elektronenlawine in einem Ka- nal des Micro-Channal-Plates	43
3.8	a) Chevron-Anordnung b) Z-Stack-Anordnung	43
3.9	a)Darstellung – b) Rückansicht – c) Fotographie der Hexanode [ROE07]	44
3.10	Spannungsteiler für die Versorgung der Hexanode.	44
3.11	Schematische Darstellung der Laufzeitsumme: Durch die Be- rechnung der Differenz der Laufzeiten $x_1$ und $x_2$ kann mit einem entsprechenden Umrechnungsfaktor der Auftreffort bestimmt werden (Kapitel 4.1).	46
3.12	Darstellung des gesamten Speicherrings am BESSY (Berlin). Der schwarze Pfeil deutet auf die von uns genutzte Beamline [BES07].	49
3.13	Schematische Darstellung des Messplatzes 3m-NIM-1 am Bes- sy [BES07]	49

4.1	Kalibrierung der Detektorparameter: Logarithmische Darstel- lung eines Spektrums der Laufzeitsummen einer der Anoden- lagen. Die Laufzeitsumme für Ein-Elektronen-Ereignisse liegt bei $\approx$ 98 ns. Die Laufzeiten für Ereignisse, die aus Mehr- Elektronen-Ereignissen stammen, sind als Schulter zur positi- ven Achse hin sichtbar. Die weiteren Strukturen stammen aus Reflektionen oder werden durch das Fehlen eines der Signale verursacht.	53
4.2	Es werden zwei unabhängige Methoden zur Bestimmung der Positionen der einzelnen Ereignisse verwendet. Aufgetragen sind die jeweiligen Kombinationen von Skalenfaktoren gegen ihre relative Ortsdifferenz für die beiden Berechnungsmetho- den. Die beste Übereinstimmung liegt im Bereich des Minimums.	54
4.3	a) Rohdaten der Flugzeit incl. Zeitoffset b) Rohdaten der Flug- zeiten mit korrigiertem Zeitoffset	57
4.4	a) Photonenpeak bei 0 <i>ns</i> , Peak der Sekundärelektronen aus dem Gitter bei 1,3 <i>ns</i> (Einstellungen; Spannung am Gitter: $\approx 35$ V, Spannung an der Frontplatte: $\approx 200$ V Photonenenergie: 25 eV)	58
4.5	a) Flugzeitverteilung aus Einfach-Photoemission bei $\hbar \omega = 25 \text{ eV}$ , integriert über alle Emissionswinkel. Die beiden Linien zei- gen den Bereich in dem die "echten" Photoelektronen laut Be- rechnung ankommen sollen. Der Pfeil zeigt das Maximum der Sekundärelektronen an, welches durch die Elektronen erzeugt wird, die aus dem Gitter herausgelöst werden. Der Beitrag der höheren Harmonsichen ist im Spektrum als Schulter bei 12 ns zu erkennen. Zur besseren Veranschaulichung ist die y-Achse logarithmisch dargestellt.	59
5.1	Geometrie der Mess-Anordnung. Der Lichteinfall liegt bei $20^{\circ}$ zur x-Achse in der xy-Ebene	62
5.2	a) Energieverteilungskurve von Bi2212 (errechnet nach dem Dreiband-Modell (2.4.2)) [CAM02] b) Energieverteilungskurve (UPS; Ultraviolet photoelectron spectroscopy/ Valenzbandspektroskopie) von Bi2212 (gemessen bei $\hbar \omega = 21, 2 \ eV$ ) [HÜF95]	63

5.3	Vergleich der errechneten Energieerteilungskurve von Bi2212 [CAM02] mit der Energieverteilungen der untersuchten Probe im a) nicht supraleitenden Zustand und b) supraleitenden Zu- stand (Die y-Achsen wurden einander angepasst.)	63
5.4	a) Detektorbild ohne Korrektur. Die Kreise haben ihren Ursprung im Mittelpunkt (Radius $\approx 12 mm$ ), b) Vergrößerung des Ausschnitts ohne Korrektur, c) Ausschnitt mit Korrektur	64
5.5	Spektren in denen der Winkel $\phi$ (Winkel in der Detektorebe- ne) gegen die Energie der jeweiligen Elektronen dargestellt ist <b>a</b> ) Durch optische Abschätzung erreichte nicht ganz homogene Verteilung entlang der Energien <b>b</b> ), <b>c</b> ) Verschieben des Mittel- punkts um 3 mm in positive bzw. negative x-Richtung <b>e</b> ), <b>f</b> ) Ver- schieben des Mittelpunkts um 3 mm in positive bzw. negative y-Richtung <b>d</b> ) optimale Kalibrierung des Detektormittelpunkts	65
5.6	Spektren in denen der Winkel $\theta$ (Winkel zur Spektrometerach- se) gegen die Energie des jeweiligen Elektrons aufgetragen ist. In a) ist die Detektorgröße nicht optimiert in b) hingegen opti- miert. Die gestrichelte Linie zeigt die Lage der Fermikante an.	66
5.7	Impulskomponenten gegeneinander aufgetragen; a) $p_x$ gegen $p_y$ b) $p_x$ gegen $p_z$ c) $p_y$ gegen $p_z$	67
5.8	a) Fermifläche (ARPES-Messung) [LEG03] b) Fermifläche $19, 5 - 20, 5 eV$ (COLTRIMS-Messung)	68
5.9	Energieverteilungskurven der Proben 1 bis 3 a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur	69
5.10	Energieverteilungskurven der Proben 4 bis 6 a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur	70
5.11	Totzeit gegen die Totzeit im Ort mit a) schlechten Contant Frac- tion Parametern und b) optimierten Parametern	71
5.12	Doppelpuls mit a) guten und b) schlechten "constant fraction" Einstellungen	71
5.13	a) Zwei-Elektronen-Energiespektrum bei $\hbar \omega = 25$ eV, integriert über alle Emissionswinkel. Die Schwelle der Paar-Energie liegt bei $\approx 16$ eV. Sie ist durch die Linie gekennzeichnet. b) Summen- energie der Zwei-Elektronen-Korrelation	72

5.14 a) Fermifläche aus Doppel-Photoemissionen (15,5 - 16,5 eV). b) Fermifläche aus Einfach-Photoemission (19,5 - 21,5 eV). (COL- TRIMS)	73
5.15 Darstellung der Summenimpulse beider Elektronen in der Ebe- ne, parallel zur Oberfläche, erstellt aus den ersten und zweiten Ereignissen a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur.	74
5.16 Winkel $\phi$ des ersten und zweiten Elektrons gegeneinander aufgetragen ( $\hbar\omega$ = 25 eV) a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur. Die Linien zeigen den Bereich indem die Summe der Winkel des ersten und des zweiten Elektrons 180° ergibt.	75
5.17 Addition aus Winkel $\phi$ des ersten und zweiten Elektrons a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur, gegen die Zählrate aufgetragen. Die Linien zeigen den Bereich indem die Summe der Winkel des ersten und des zweiten Elektrons 180° ergibt.	75
5.18 Fermifläche der doppelten Elektronen (Energiebereich 15,5- 16,5 eV) a) oberhalb und b) unterhalb der Sprungtemperatur.	76
6.1 Darstellung des experimentellen Aufbaus mit verbessertem "Helmholtzkäfig"	80

## Literatur

#### [ACQ07] www.acqiris.com

- [AND59] P. W. Anderson, "New Approach to the Theory of Superexchange Interactions", Phy. Rev. 115 (1959) 2
- [AND87] P. W. Anderson, "The Resonating Value Bound State in La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> and Superconductivity", Science 235 (1987) 1196
- [APL04] S. S. Aplesnin, "Two-dimensional quantum spin liquid with S=1/2 spins interacting with acoustic phonons", Physics Letters A 333(2004) 446-449
- [BAN99] A. Bansil, L. Lindroos, Importance of Matrix Elements in the ARPES Spectra of BISCO" Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 5154
- [BER98] J. Berakdar, "Emission of correlated electron pairs following single-photon absorption by solods and surfaces", Phys. Rev. B 58 (1998) 9808
- [BES07] www.bessy.de
- [BIE87] H. W. Biester, M. J. Besnard, G. Dujardin, L. Hellner, E. E. Koch, "Photoemission of Pairs of Electrons from Rare-Gas Solids", Phys. Rev. Lett.59 (1987) 1277
- [BLO29] F. Bloch, "Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern", Dissertation, Uni Leipzig (1929)
- [BOR27] M. Born, J. Oppenheimer, "Zur Quanentheorie der Molekeln", Ann. Phys. 84 (1927) 457
- [BUR92] G. Burns "*High-Temperature Superconductivity*" Academic Press, Inc. (1992)
- [CAM02] J.C.Campuzano, M.R. Norman, M.Randeria "Photoemission in the High T<sub>c</sub> Superconductors" Dept. Of Physics, University of Illinois at Chicago (2002)
- [COS05] G. Da Costa, F. Vurpillot, A. Bostel, M. Bouet, B. Deconihout, "Design of a delay-line position-sensitive detector with improved performance" Review of scientific instruments Vol.76 (2005) 13304

- [CZA02] O. Jagutzki, A. Cerezo, A. Czasch, R. Dörner, M. Hattaß, M. Huang, V. Mergel, U. Spillmann, K. Ullmann-Pfleger, T. Weber, H. Schmidt-Böcking, G. D. W. Smith, "Multiple Hit Readout of a Microchannel Plate Detector With a Three-Layer Delay-Line Anode", IEEE Transact. on Nucl. Science, 49(2002) 2477
- [DEM04] E. Demler, W. Hanke, S.-C. Zhang, "SO(5) theory of antiferromagnetism and superconductivity", Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 909
- [DÖR00] R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshammer, H. Schmidt-Böcking,"Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy: a 'momentum microscope' to view atomic collision dynamics", Physics Reports 330 (2000) 96
- [DÖR04] R. Dörner, H. Schmidt-Böcking, T. Weber, T. Jahnke, M. Schöffler, A. Knapp, M. Hattass, A. Czasch, L. Ph. H. Schmidt, O. Jagutzki, "Double ionization by one and many photons", Radiation Physics and Chemistry 70 (2004) 191-206
- [DÜR02] C. Dürr, "Analyse der besetzten elektronischen Zustände in Sr<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> mittels winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie", Dissertation, Uni Dresden (2002)
- [EIN05] A. Einstein "Über einen die Erzeugung des Lichts betreffenden heuristischen Gesichtspunkt", Ann. Phys, (Germany) 17(1), (1905), 132-148
- [GREI4] W. Greiner "Quantenmechanik Einführung Bd.4" Harry Deutsch Verlag (2005)
- [HAT04] M. Hattass, "Koinzidenz-Spektroskopie an Oberflächen: Zwei-Elektronen-Emission von Cu(111)", Dissertation, Uni Frankfurt a.M. 2004
- [HED01] L. Hedin, J. D. Lee, "Resistivity as a function of temperature for models with hot spots on the Fermi surface", Phys. Rev. B 64 (2001) 115109
- [HÜF95] S. Hüfner, "Photoelectron Spectroscopy", Springer Verlag, Berlin, 1995
- [JAL02] T. Jalowy, "Auf der Spur von Dynamik und Evolution der Sekundärionenemission von Oberflächen bei Beschuss mit schnellen Atomen", Dissertation Uni Frankfurt a.M. (2002)
- [KAT99] M. Kathke, "Seminararbeit: Supraleitung Seminarleitung; Prof. Samm", Fachhochschule Achen (1999)
- [KIT99] C. Kittel, "Einführung in die Festkörperphysik", Oldenbourg Verlag, München, 1999
- [KOU03] K. A. Kouzakov, J. Berakdar, "Photoinduced Emission of Cooper Pairs from Superconductors", Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 257007

- [KRA88] H. Krakauer, W. E. Picket "Effect of bismuth on high-T<sub>c</sub> cuprate superconductors: Electronic structure of Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>", Phy. Rev. Lett. **60** (1988) 1665
- [LYN99] D. W. Lynch, C. G. Olson, "Photoemission Studies of High-Temperature Superconductors", Iowa State University, (1999) Cambridge University Press
- [LEG03] S. Legner, "Die Fermifläche des Kupratsupraleiters  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ : Ergebnisse der winkelaufgelösten Photoemissionsspektroskopie", Dissertation, TU Dresden (2003)
- [MAS88] S. Massida, J. Yu, A. J. Freeman, "Electronic structure and properties of Bi2Sr2CaCu2O8, the third high-Tc superconductor", Physica C 152 (1988) 251
- [MAY97] T. Mayer-Kuckuk, "Atomphysik", Teubner Stuttgart (1997)
- [MOS99] R. Moshammer, P. D. Fainstein, M. Schulz, W. Schmitt, H. Kollmus, R. Mann, S. Hagmann, J. Ullrich "Initial State Dependence of Low-Energy Electron Emission in Fast Ion Atom Collisions", Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 4721
- [MÜL00] C. Müller, "Der Einfluß der Mikrostruktur auf die supraleitenden Eigenschaften von  $Bi_{2+y}Sr_{2-x}Ca_{0,9+x}Cu_2O_{8+\delta}$ -Einkristallen", Dissertation, Universität Stuttgart (2000)
- [NOLT7] W. Nolting, "Grundkurs Theoretische Physik 7; Viel-Teilchen-Theorie", Springerverlag 5. Auflage (2002)
- [ROE07] www.roentdek.com
- [SCH98] J.-M. Schlipf, "Magnetismus und Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell", Dissertation, Universität Augsburg (1998)
- [SCH03] W. Schattke, "Solid-State Photoemission and Related Methods: Theorie and Experiment" Verlag Wiley (2003)
- [SCH05] H. Schmidt-Böcking, M.S. Schöffler, T. Jahnke, A. Czasch, V. Mergel, L. Schmidt, R. Dörner, O. Jagutzki, M. Hattass, Th. Weber, E. Weigold, H.T. Schmidt, R. Schuch, H. Cederquist, Y. Demkov, C. Whelan, A. Godunov, J. Walters, "Many-particle fragmentation processes in atomic and molecular physics new insight into the world of correlation" NIMB 233 (2005) 3-11
- [SCH06] M. S. Schöffler, "Grundzustandskorrelationen und dynamische Prozesse untersucht in Ion-Helium-Stößen", Dissertation(2006)
- [SOB88] S. E. Sobottka und M. B. Williams, Delay line readout of microchannel plates" IEEE trans Nucl. Sci., 35, (1988), 348
- [ULL03] J. Ullrich, R. Moshammer, A. Dorn, R. Dörner, L. Ph. Schmidt, H. Schmidt-Böcking, Recoil-ion and electron momentum spectroscopy: reactionmicroscopes", Rep. Prog. Phys. 66 (2003) 1463

- [ZHA97] S. C. Zhang, "A Unified Theory Based on SO(5) Symmetry of Superconductivity and Antiferromagnetism", Science 275 (1997) 1089
- [YAT97] J. T. Yates, Jr., "Experimental Innovations In Surface Science", S.60ff, Springer Verlag (1997)

## Danksagung

Mein besonderer Dank gilt ...

 Prof. Reinhard Dörner; Seine Vorlesungen im dritten und vierten Semester legten den Grundstein für meine Entscheidung die Diplomarbeit in dieser Arbeitsgruppe zu erarbeiten. Dass es nun letztendlich eher ein festkörperphysikalisches Thema geworden ist, ist ebenfalls ihm zu verdanken, da seine Begeisterung für diese Art Versuch regelrecht ansteckend war. Vielen Dank, Reinhard, für dein Vertrauen in mich, obwohl ich nicht regelmäßig im Institut sein konnte.

*Prof. Horst Schmidt-Böcking*, für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe und seine motivierende Begeisterung für die Physik.

- der Arbeitsgruppe insgesamt; die mich sehr herzlich aufgenommen hat. Jeder einzelne war jederzeit dazu bereit meine Fragen zu beantworten. Ob via Skype, Email, Telefon oder, wie leider viel zu selten, in Person. Letzteres wurde ja durch meinen Beruf, durch den ich dankenswerterweise mein Studium finanzieren konnte, erschwert. Gerade deswegen bin ich begeistert wie viel Verständnis ihr mir entgegengebracht habt. Danke
- Stefan Voss und Robert Wallauer; ohne deren Unterstützung diese Diplomarbeit nicht möglich gewesen wäre. Stefans Begeisterung für dieses Thema scheint grenzenlos und seine Ideen und Vorschläge regen die Phantasie an und waren Motivation.

Roberts ausgeglichene, besonnene Art zeigten mir stets den roten Faden in dieser Arbeit.

- *Till Jahnke;* den ich ständig mit den, in seinen Augen, wohl merkwürdigsten Fragen gelöchert habe und der eine eiserne Geduld mit mir bewies. Seine Fähigkeit Zusammenhänge in Bildern zu erklären ist bemerkenswert und hat mir sehr geholfen.
- *Lutz Foucar;* Ohne Lutz Hilfe säße ich heute noch ahnungslos vor dem Quellcode des Auswertprogramms. Vielen Dank dafür und für die Erläuterungen bezüglich Acquiris und für die geduldige Beantwortung all meiner Fragen. Ich kann Dir gar nicht genug danken.

*Klaus Ullmann-Pfleger;* danke ich für seine Geduld bezüglich meines Laptops (der ihn doch sehr häufig an den Rand seiner Geduld geführt hat) und für seine Hilfe bei den übrigen Computerproblemen.

*Birte Ullrich;* für die vielen netten Gespräche, vor allem während der Nachtschichten.

Sascha Vogel; der zwar nicht zu unserer Arbeitsgruppe gehört, aber der 5 Semester lang mein Tutor in theoretischer Physik war. Ohne seine Begabung Wissen, gerade innerhalb der theoretischen Physik, zu vermitteln wäre ich wahrscheinlich nicht in der Physik geblieben. Vielen Dank.

 Meiner großen Familie und besonders meinen Eltern, die stets an mich glauben und die mir beigebracht haben an mich selbst zu glauben. Ohne Eure Geduld, Euer Vertrauen und ohne die Werte die ihr mir vermittelt habt, wäre ich nicht der Mensch der ich heute bin. Dafür bin ich Euch sehr dankbar.

Ein besonderes Dankeschön geht vor allem an meine Schwester *Ines*, die es beim Korrekturlesen nicht allzu einfach gehabt haben wird.

• *Stefan Endres – meinem Freund;* der mich über die ganze Zeit, von meiner Wahl der Arbeitsgruppe an, über die Tiefen und Höhen dieser Arbeit begleitet hat. Danke