

University of Groningen

Electron dispersion relations in solids

Coehoorn, Reinder

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1985

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Coehoorn, R. (1985). *Electron dispersion relations in solids: angle resolved photoelectron spectroscopy and band structure calculations*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

Het doel van de vaste stof fysica is het vergaren van kennis over en inzicht in de fysische eigenschappen van vaste stoffen, zoals bijvoorbeeld de elektrische en thermische geleidbaarheid, de warmte capaciteit, de kristal structuur, het magnetisme, de licht absorptie en reflectie en de elasticiteit. Voor een goed begrip van deze eigenschappen is het nodig de elektronische structuur (de positie, bewegingen en energie van de elektronen) te kennen. De atomen in een vaste stof bestaan uit een kern met daaromheen schillen met elektronen. Elektronen in de binnenste schillen zijn sterk gebonden aan de kern, maar elektronen in de buitenste schil zijn relatief zwak gebonden. Zij kunnen gemakkelijk springen naar een van de buur atomen, of soms zelfs bijna vrij rondzwerven door het hele kristal. Deze elektronen zorgen voor een aantrekking, chemische binding, tussen de atomen, en bepalen de fysische eigenschappen van de stof. Dit proefschrift gaat over de posities, bewegingen en energietoestanden van de 'buitenelektronen'.

Een exacte theoretische aanpak van dit probleem is niet mogelijk. In één kubieke centimeter van een stof zitten meer dan 10^{23} elektronen, die elkaar afstoten omdat ze negatief zijn geladen. En volgens een principe in de quantum-mechanica mogen twee elektronen niet in dezelfde toestand zitten. Elektronen met dezelfde draai-beweging rond hun eigen as ('spin') blijven daarom uit elkaars buurt. Volgens de quantum-mechanica moeten de elektronen worden opgevat als golven, die elkaar kunnen uitdoven of versterken. In dit proefschrift is voor een theoretische beschrijving van de elektronische structuur een quantum-mechanische golfvergelijking opgelost, waarbij de volgende benadering is gemaakt: we beschouwen maar één elektron tegelijkertijd, en we brengen alleen de gemiddelde kracht van de andere elektronen op dat elektron in rekening. De veel zwaardere atoomkernen zitten op vaste plaatsen in het kristalrooster. Door gebruik te maken van de periodiciteit van het kristalrooster kan de berekening dan aanmerkelijk worden vereenvoudigd. De energie E van de elektronen hangt af van de *golfvector* \vec{k} , die de richting en de golflengte van de elektronengolf aangeeft. De relaties $E(\vec{k})$ heten *elektron dispersie relaties*, en de berekeningen *bandenstructuur berekeningen*. Voor deze berekeningen zijn tegenwoordig grote computerprogramma's beschikbaar, waarvan

dan ook dankbaar gebruik gemaakt werd.

Om te weten te komen in hoeverre de benaderingen die in deze berekeningen gemaakt worden juist zijn, kunnen we twee dingen doen: (1) Met behulp van de resultaten van bandenstructuur berekeningen fysische eigenschappen berekenen, en vergelijken met experimentele gegevens, en (2) De elektron dispersie relaties meten, en die vergelijken met de berekeningen. In het onderzoek zijn beide wegen gevolgd. De elektron dispersie relaties werden gemeten met behulp van 'hoek opgeloste ultraviolet fotoelektron spectroscopie', in het Engels afgekort als ARUPS.

In een ARUPS experiment worden door een bundel ultraviolet licht op een kristaloppervlak te laten vallen, buiten-elektronen uit de stof vrijgemaakt. Met een analysator en een detector wordt de energie en de bewegingsrichting van deze ontsnapte fotoelektronen bepaald. Omdat de energie van de lichtdeeltjes, 'fotonen', ook precies bekend is, kan de energie die de fotoelektronen oorspronkelijk in het kristal hadden gemakkelijk worden uitgerekend. De component van de golfvector evenwijdig aan het oppervlak, $\vec{k}_{//}$, kan ook direkt uit de metingen worden afgeleid, terwijl de loodrechte component k_{\perp} kan worden bepaald uit een analyse van metingen met verschillende fotonenergieën. Op weg naar de detector mag de energie en de richting van de fotoelektronen natuurlijk niet veranderen. Om ervoor te zorgen dat het kristal oppervlak gedurende lange tijd (uren) vrij van vreemde atomen blijft, zijn de experimenten uitgevoerd in een ultrahoog vacuüm (druk lager dan 10^{-12} atmosfeer).

In de inleiding (hoofdstuk 1) worden in het kort de mogelijkheden van onderzoek naar de elektronische structuur van vaste stoffen met ARUPS en bandenstructuur berekeningen geschetst.

Hoofdstuk 2 bevat een overzicht van de theorie van het fotoemissieproces, en een beschrijving van de experimentele opstelling.

In hoofdstuk 3 wordt de theorie van bandenstructuur berekeningen kort beschreven.

Hoofdstuk 4 bevat de resultaten van een bandenstructuur berekening voor mangaan-antimoon (MnSb), een ferromagnetisch metaal. Enkele berekende fysische eigenschappen worden vergeleken met experimentele gegevens. De covalente wisselwerking tussen Mn-3d en Sb-5p toestanden is in detail bestudeerd, en de vraag komt aan de orde waarom MnSb ferromagnetisch is, en niet anti-ferromagnetisch.

In hoofdstuk 5 wordt de berekende bandenstructuur van mangaanbismuth (MnBi) geanalyseerd, en vergeleken met die van MnSb . Veel aandacht is besteed aan het effect van spin-baan wisselwerking, in verband met de magneto-optische eigenschappen.

Resultaten van ARUPS experimenten aan cadmiumdijodide (CdI_2) worden in hoofdstuk 6 vergeleken met de berekende bandenstructuur. De overeenkomst is goed.

In hoofdstuk 7 worden resultaten van ARUPS experimenten en bandenstructuur berekeningen voor molybdeendiselenide (MoSe_2) gepresenteerd. Op een belangrijk punt blijkt de elektronische structuur anders te zijn dan tot nu toe werd gedacht.

Het effect van de sferische benadering voor de potentiaal rond een atoom op resultaten van bandenstructuur berekeningen van lagenverbindingen wordt besproken in hoofdstuk 8. Deze benadering leidt daar tot systematische fouten. De bandenstructuur van titaandiselenide (TiSe_2) is uitgebreid geanalyseerd.

Voor verbindingen als nikkeldichloride (NiCl_2) geven bandenberekeningen geen goede beschrijving van de excitatie spectra, zoals de ARUPS spectra. De benadering dat alleen de gemiddelde wisselwerking met andere elektronen in rekening wordt gebracht is hier zeer slecht. In hoofdstuk 9 wordt beschreven wat men wel van bandenberekeningen van stoffen als NiCl_2 kan leren.

13796
1985