

Dies sind die Lehrvideos zum Versuch „Photoelektronenspektroskopie“ kurz PES. Des Ziel des Versuches ist es, die Bandstruktur eines Kristalls aufzuzeichnen. Die theoretischen Hintergründe werden in Form von Videos präsentiert:

## **01 Einleitung**

Wir betrachten den elektrischen Widerstand eines Stoffes bei einer Temperatur von 1 K. Dieser kann bei einem Metall bis zu  $10^{-10} \Omega \times \text{cm}$  klein, bei einem guten Isolator bis zu  $10^{22} \Omega \times \text{cm}$  groß sein. Die Widerstände können sich also um bis zu 32 Größenordnungen unterscheiden, ein Bereich, der so für keine gewöhnliche physikalische Eigenschaft von Festkörpern zu finden ist.

Das Modell des freien Elektrons vermag es zwar, Informationen über Phänomene wie die Wärmekapazität oder thermische und elektrische Leitfähigkeit von Metallen zu geben, jedoch versagt es beim Versuch den Unterschied zwischen Metallen, Halbmetallen, Halbleitern und Isolatoren zu erklären. Hier benötigen wir ein Modell, das die Bedingungen in einem Festkörper besser berücksichtigt. Dies ist das Bändermodell.

Untersuchen wir was passiert, wenn wir zwei Wasserstoffatome einander annähern:

Sind die Atome weit voneinander getrennt, so unterscheiden sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen um das jeweilige Atom nicht voneinander. Dies gilt immernoch, wenn wir die Atome einander annähern. Das heißt, dass dann das Betragsquadrat der gesamten Wellenfunktion symmetrisch zur Ebene zwischen den Atomen sein muss.

Wir betrachten die Wellenfunktion in einer Dimension. Sie hat ihr Maximum an den Orten der Atome. Für sie gibt es dann zwei Möglichkeiten: Sie kann antisymmetrisch oder symmetrisch bezüglich der Mittelsenkrechten sein.

Nähern wir die Atome nun weiter an, so addieren sich die Wellenfunktionen und im antisymmetrischen Fall ergibt sich eine Nullstelle zwischen den Atomen.

Bei der symmetrischen Wellenfunktion hingegen erhalten wir bei Annäherung einen von 0 verschiedenen Wert zwischen den Atomen.

Demnach ist auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im antisymmetrischen Fall zwischen den Atomen klein, während sie im symmetrischen Fall größer ist.

Für die Energie des Systems bedeutet das Folgendes: Wir sehen die beiden 1s Energieniveaus der Wasserstoffatome, wenn sie sich getrennt voneinander befinden. Für den Fall, dass sich die Elektronen zwischen den Atomen aufhalten, wird deren abstoßende elektrische Kraft abgeschirmt und es ergibt sich ein energetisch günstigerer Zustand als beim einzelnen Atom. Für diesen Fall binden sich Atome zum  $H_2$  Molekül.

Befinden sich die Elektronen jedoch außerhalb der Atome, so ist das Gegenteil der Fall. Die Gesamtenergie ist größer und die Atome binden sich nicht.

Demzufolge binden sich zwei Wasserstoffatome nur, wenn der Spin ihrer Elektronen gerade antiparallel ist. Wären die Spins parallel eingestellt, so würde nach dem Pauliprinzip von einem Elektron der niedrige, vom anderen der hohe Energiezustand besetzt werden und eine Bindung wäre nicht möglich.

Die Bindungsenergie ist abhängig vom Abstand und hier für die beiden Fälle der Wellenfunktion bei 2 Atomen dargestellt. Für den bindenden Fall sieht man ein Minimum im negativen Bereich. Dies ist der Gleichgewichtsabstand  $r_0$  der sich beim Wasserstoffmolekül einstellt. Im nichtbindenden Fall sehen wir kein Minimum.

Bei N- Atomen kommen weitere Aufspaltungen hinzu.

Damit finden wir beim Festkörper, der aus  $10^{23}$  Atomen besteht sehr viele dicht liegende Energieniveaus. Dies bezeichnen wir als Energieband.

Das Bändermodell beschreibt die Anordnung der Elektronen in Energiebändern. Zwischen diesen bestehen Energiebereiche, die die Elektronen nicht annehmen können: so genannte Bandlücken. Da Elektronen Fermionen sind, gehorchen sie dem Pauli-Prinzip, was besagt, dass zwei Elektronen nicht den exakt gleichen Energiezustand einnehmen dürfen. Sie müssen sich also auf den Energiebändern verteilen. Die Fermienergie beschreibt die höchste angenommene Energie im Grundzustand des Systems. Eine Besetzung kann derart erfolgen, dass ein Band nicht voll besetzt ist, oder so, dass das Band vollständig besetzt ist.

Das Band eines Metalls ist nicht vollständig besetzt, die Elektronen können auch kleine Energiebeträge aufnehmen und somit bei Anlegen eines elektrischen Feldes zum Stromfluss beitragen. Im Gegensatz dazu können die Elektronen im Isolator keine zusätzlichen Energiebeträge aufnehmen, da sie sonst in einem verbotenen Energiebereich wären. Er leitet den Strom nicht.

Die Bandstruktur offenbart eine Vielzahl an Informationen über den Stoff. Mit der Photoelektronenspektroskopie wird diese analysiert. In den folgenden Videos sollen nach dieser Einleitung zunächst die nötigen Grundlagen zur Beschreibung der Kristallstruktur von Festkörpern dargestellt werden. Anschließend wird das Bändermodell näher erläutert indem die Entstehung der Bandstruktur beschrieben wird.

Mit den erworbenen Kenntnissen kann dann die Funktionsweise Photoelektronenspektroskopie erläutert und auf die Auswertung der Ergebnisse eingegangen werden. Abschließend werden Versuchsaufbau und die im Praktikum verwendeten Geräte beschrieben.