

A Normierung und Symmetrisierung der Photoemissionsdaten

Wie bereits in den Kapiteln 4, 5 und 6 diskutiert, weisen Photoemissionsdaten, die über einen großen Winkel- und Photonenenergiebereich aufgenommen werden, zum Teil um Größenordnungen verschiedene Intensitäten auf. Das bedeutet, dass die Intensität I , die an einer Stelle \mathbf{k}_1 besetzten elektronischen Zuständen zuzuordnen ist — sie liegt hier deutlich über der Untergrundintensität —, an einem anderen Punkt \mathbf{k}_2 der Intensität des Untergrunds entspricht oder dort sogar niedriger ist. Selbst an gemäß der hexagonalen Symmetrie äquivalenten Punkten des Impulsraums kann dies der Fall sein.

Sollen Abbildungen erstellt werden, die einen Bereich mit einer derartig inhomogenen Intensitätsverteilung umfassen, führt dies zu weitreichenden Problemen bei der Darstellung. Selbst der gegenüber den üblichen Graustufenbildern stark erhöhte Kontrast von Falschfarbenbildern reicht oft nicht aus, um die interessierenden Strukturen der elektronischen Bänder und Fermiflächen sichtbar zu machen. Von besonderer Bedeutung ist dies bei Abbildungen der Dispersion von Fermikonturen senkrecht zur Probenoberfläche. Die gemessenen Intensitäten verändern sich bei der Variation der Photonenenergie drastisch, aufgrund stark unterschiedlicher Wirkungsquerschnitte der Photoemission. So müssen speziell bei den dreidimensionalen Abbildungen der Fermiflächen in Kapitel 6 Hunderttausende(!) gemessene Intensitäten aus Einzelspektren bei der Energie $E = E_F$ in Relation gebracht werden, sodass sie sich gemeinsam darstellen lassen. Intensitätswerte von besetzten elektronischen Zuständen und Untergrund müssen überall vergleichbar sein. Die Notwendigkeit leistungsfähiger numerischer Normierungsverfahren, die Form und spezifischen Merkmale der Fermiflächen unverfälscht belassen, liegt auf der Hand. Im Folgenden wird an einem Beispiel das von mir entwickelte und in Igor¹ implementierte Normierungsverfahren erläutert.

Abbildung A.1(a) zeigt den Schnitt der paramagnetischen Fermifläche von Gd mit der Γ MK-Ebene ($h\nu \approx 105$ eV). Es ist zu erkennen, dass selbst äquivalente Punkte der hexagonalen Brillouinzone unterschiedliche Intensitäten aufweisen. So sind beispielsweise die Intensitäten der Fermikonturen links der Γ M-Linie schwächer als rechts davon; in der oberhalb der MK-Linie anschließenden Brillouinzone zeigen die Fermikonturen eine deutlich geringere Intensität. Während der Messungen, wie sie an *Beamline* 7.0.1 der ALS durchgeführt werden, wird die

¹Entwicklerumgebung zur Darstellung und Analyse von Daten
(s. <http://www.wavemetrics.com>)

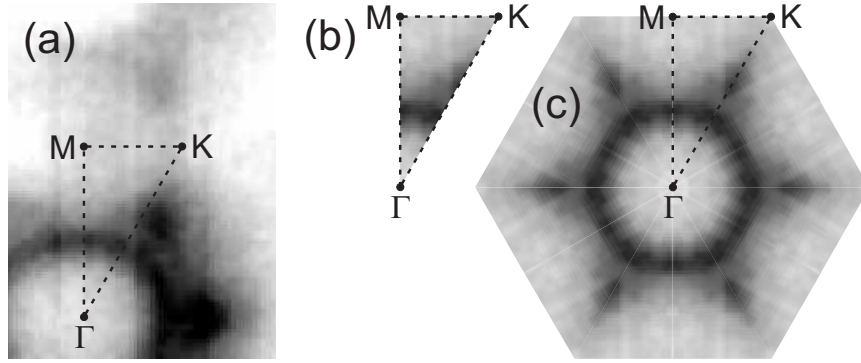


Abbildung A.1: Symmetrisierung der Photoemissionsdaten am Beispiel der Fermifläche von paramagnetischem Gd. (a) Zeigt Photoemissionsintensitäten für $E = E_F$ in der Γ MK-Ebene, gemessen bei einer Photonenenergie von $h\nu \approx 105$ eV. Dunkle Graustufen entsprechen einer hohen Intensität. Die Helligkeiten an äquivalenten Punkten im \mathbf{k} -Raum sind verschieden. Zur Vereinheitlichung des Datensatzes wird der irreduzible Teil der Brillouinzone betrachtet, in (b) abgebildet, welcher dem Dreieck Γ MK entspricht. Durch hexagonale Symmetrieoperationen wird ein Datensatz mit einheitlichen Photoemissionsintensitäten generiert (c).

Probe relativ zum Analysator und — hier entscheidend — auch relativ zum einfallenden Synchrotronlicht gedreht. Die Übergangsmatrixelemente der Photoemission hängen von der Orientierung der einkristallinen Probe zum Vektor der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} des einfallenden Lichts ab. Wie viele reziproke Gittervektoren beim Emissionsprozess ausgetauscht werden hat ebenfalls entscheidenden Einfluss auf die gemessene Intensität. Darüber hinaus führen auch Inhomogenitäten in der Ausleuchtung des Detektors, wie auch unterschiedliche Empfindlichkeiten an verschiedenen Stellen der *Channelplates*, zu unterschiedlichen Messwerten bei der Photoemissionsintensität.

Um für die Darstellungen Datensätze zu erzeugen, die möglichst einheitliche Intensitäten aufweisen, habe ich mich auf den irreduziblen Teil der hexagonalen Brillouinzone beschränkt. In dem in Abbildung A.1(a) gezeigten Schnitt durch die Fermifläche ist dies das von den Hochsymmetriepunkten Γ , M und K aufgespannte Dreieck, das in (b) separat dargestellt ist. Das Spiegeln des Dreiecks um die Γ M-Linie und Vervielfältigen und Drehen von Dreieck und Spiegelbild um 60° , 120° , 180° , 240° und 300° führt zu dem in (c) gezeigten Datensatz. Die Gd-Fermifläche ist gegenüber dieser Vorgehensweise invariant. Der so erzeugte Datensatz weist nun eine einheitliche Intensitätsverteilung auf. Die Intensitäten werden so renormiert, dass der höchsten gemessenen Intensität der Wert ,1‘ und der niedrigsten der Wert ,0‘ zugeordnet ist.

Wendet man dieses Verfahren auf alle zur Γ MK-Ebene parallelen Schnitte durch die hexagonale Brillouinzone an, so erhält man einen Datensatz mit vereinheitlichten Intensitäten, der die Fermikonturen originalgetreu wiedergibt. Auf diese Weise aufbereitete Datensätze dienen als Basis für die in Kapitel 6 gezeigten dreidimensionalen Abbildungen der Fermiflächen von Y, Gd, Tb und Dy.