

Diplomarbeit

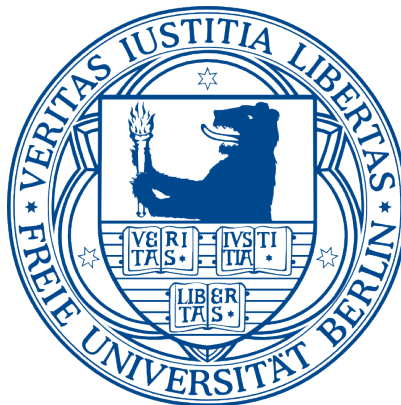
über das Thema

Entwicklung und Charakterisierung einer Elektronenlinse für abbildende Photoelektronenspektroskopie

vorgelegt von

Thomas Braun

Januar 2009



betreut von

Prof. Dr. Karsten Horn

Fachbereich Physik

Freie Universität Berlin

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Historisches: Der Photoeffekt und die Anfänge der Elektronenoptik	1
1.2	Photoelektronenspektroskopie	2
1.3	Aufgabe und Motivation	8
2	Theoretische Grundlagen	11
2.1	Photoeffekt in Festkörpern	11
2.2	Elektronenoptische Linsen	20
3	Hemisphärischer Elektronen-Energie-Analysator	31
3.1	Allgemeines	31
3.2	Halbkugelanalysator mit vorgeschalteter Elektronenlinse	35
4	Finite-Elemente-Simulationen von Elektronenlinsen	43
4.1	Grundlagen	43
4.2	Finite-Elemente-Modell des Analysators	46
4.3	Design eines neuen winkelaufgelösten Linsenmodus	50
5	Experimentelle Bestimmung der Linsenmoduseigenschaften	63
5.1	Transformation der Koordinatenachsen für ARPES-Messungen	63
5.2	Messungen mit der Winkelblende	75
6	Zusammenfassung und Ausblick	81
7	Literaturverzeichnis	85
A	Anhang	93
A.1	Alle berechneten Linsenpotentiale	93
A.2	Transformationsparameter	93
A.3	Eingabedatenformat ION	95
B	Danksagung	97
C	Lebenslauf	99
D	Änderungshistorie	101

1 Einleitung

1.1 Historisches: Der Photoeffekt und die Anfänge der Elektronenoptik

Jede Wissenschaft ist, unter anderem, ein Ordnen, ein Vereinfachen, ein Verdaulichmachen des Unverständlichen für den Geist.

Hermann Hesse (1877-1962), Das Glasperlenspiel [1]

Was dieses Unverständliche auch ist, ein Blitz bei einem Unwetter, der Grund für das Herunterfallen eines Apfels vom Baum oder aber das Herauslösen von Elektronen aus einem Metall durch Licht, hängt im hohen Maße vom Betrachter und seiner Zeit ab. Was dem Menschen von heute selbstverständlich erscheint, war es nicht immer, sondern musste entdeckt, reproduziert und erklärt werden.

Als solch ein Entdecker wird heute auch Heinrich Hertz (1857-84) gesehen. Er experimentierte im Jahre 1887 mit Funkenstrecken zur Untersuchung der elektrischen Schwingungen. Dabei stellte er fest [2], dass die Schlagweite der dazu verwendeten Funkenentladung erhöht wird, wenn man den negativen Pol der Funkenstrecke mit UV-Licht bestrahlt.¹ Erst einige Jahre zuvor, 1865, hatte James Clerk Maxwell (1831-79) seine elektrische und magnetische Felder beschreibenden Gleichungen in der heutigen Form veröffentlicht [4]. Deswegen ist es im historischen Kontext gesehen verständlich, dass die Hertz'sche Entdeckung näher experimentell untersucht werden musste. Diese nähere Untersuchung leistete Wilhelm Hallwachs (1859-1922), ein Schüler von Hertz. Er stellte fest, dass negativ geladene Teilchen aus einem mit ultraviolettem Licht bestrahlten Metall austreten und dieses sich bis zu einem, „Haltepotential“ genannten, Wert positiv auflädt [5]. Aufgrund dieser Forschung wurde der Effekt lange Zeit als „Hallwachs-Effekt“ bezeichnet. Die theoretische Erklärung erfolgte erst durch Albert Einstein im Jahre 1905 [6]. Er konnte zu dieser Zeit auf die Vorarbeiten von Max Planck (Wirkungsquantumshypothese [7]) und Joseph John Thomsons (Entdeckung des Elektrons [8]) zurückgreifen. Der Effekt, dass Photonen ein Elektron aus einem Atom heraus schlagen können, wird seitdem als *äußerer lichtelektrischer Effekt* oder *äußerer Photoeffekt* bezeichnet.

¹50 Jahre vor Hertz stellte schon Alexandre Edmond Becquerel (1820-91) fest, dass Sonnenlicht einen Einfluss auf Elektroden in Lösung hat, dieser Effekt wird im allgemeinen als Becquerel-Effekt [3] bezeichnet.

Einsteins Erklärung des Photoeffekts sah das Photon nicht als Welle, sondern als Teilchen an, im Gegensatz zur damals vorherrschenden Wellendeutung, die auch in den Maxwell'schen Gleichungen zum Ausdruck kommt. Diese unterschiedliche Betrachtungsweise der Photonen, allgemein als Welle-Teilchen-Dualismus bezeichnet, war dann auch der Grundstein der de Broglie'schen These, dass sich nicht nur Photonen als Welle oder Teilchen verhalten können, sondern auch mit Ruhemasse behaftete Teilchen [9] wie zum Beispiel Elektronen. Da sich demzufolge Photonen und Elektronen ähnlich verhalten können, lag eine Übertragung des Wissens der Lichtoptik auf geladene Teilchen nahe.

Erste Anfänge [10, 11] mit dem gezielten Ablenken von geladenen Teilchen mittels Magnetfeldern machte Hittorf 1869, wobei er diese für seine Untersuchung der elektrischen Leitfähigkeit von Gasen nur als Mittel zum Zweck benutzte. Die theoretischen Grundlagen wurden erst ein halbes Jahrhundert später von Hans Busch (1884-1973) in Jena gelegt. Seine Veröffentlichungen in den Jahren 1926/27 zeigten, dass sich Elektronen oder Kathodenstrahlen, wie sie er und viele der damaligen Physiker nannten, durch elektromagnetische Felder nicht nur gezielt ablenken lassen, sondern dass man aus einer Spule eine magnetische Linse, analog zu einer Linse in der Gauß'schen Lichtoptik, konstruieren kann [12, 13]. Dies war die Geburtsstunde eines neuen Zweiges in der Physik: der Elektronenoptik und -mikroskopie. Weitere grundlegende Arbeiten folgten: die Erfindung der Einzellinse (Standardlinse der Elektronenoptik) 1932 durch Brüche und Johannson [14], sowie einige Jahre später der wichtige theoretische Beweis durch Otto Scherzer [15], dass eine aberrationsfreie, also exakt durch Gauß'sche Optik beschreibbare, Abbildung in einem statischen, raumladungsfreien und rotationssymmetrischen Feld, prinzipiell nicht möglich² ist.

Aktuelle Fragestellungen in der Elektronenoptik kamen damals hauptsächlich aus den Bereichen Elektronenmikroskopie und Elektronenspektroskopie; ganz praktische Fragestellungen gab es auch hinsichtlich der weiteren Verbesserung von Braun'schen Röhren [18]. Obwohl das Gebiet der Elektronenmikroskopie weiterhin von großem Interesse ist (Ernst Ruska, Nobelpreis 1986 [19]), soll hier nur die Anwendung der Elektronenoptik in der Elektronenspektroskopie behandelt werden.

1.2 Photoelektronenspektroskopie

Zunächst sollen die Begriffe Spektroskopie und Mikroskopie erklärt und gegeneinander abgegrenzt werden.

Mikroskopie Sich aus den griechischen Wörtern *mikrós* »klein, gering« [20] und *skopós* »Beobachter, Wächter« [20] zusammensetzend, will die Mikroskopie Objekte vergrößern, um sie genauer betrachten zu können, als es das menschliche Auge allein vermag [21].

²Im Gegensatz zur Lichtoptik. Dort wurde schon 1733 die chromatisch korrigierte Linse, Achromat genannt, durch Chester Moor Hall erfunden [17]. Vereinfacht ausgedrückt hat der Lichtoptiker mehr Freiheitsgrade zur Korrektur der Aberrationen als der Elektronenoptiker.

Spektroskopie Von lat. *spectrum* »Erscheinung, Gestalt« [20] und griech. *skopós*, ist Spektroskopie das Betrachten und Messen der „Häufigkeits- bzw. Intensitätsverteilung eines [Strahlen]gemisches in Abhängigkeit von einer gemeinsamen Eigenschaft“³, zum Beispiel der Energie.

Die Mikroskopie will demnach das zu untersuchende Objekt im Realraum vergrößert abbilden, die Spektroskopie will die Verteilung einer bestimmten Eigenschaft messen.

Im konkreten und hier relevanten Fall der Elektronenspektroskopie sind die zu untersuchenden Objekte Elektronen und die zu messende Eigenschaft besteht in deren kinetischer Energie. Sind die zu untersuchenden Elektronen durch den Photoeffekt entstanden, spricht man von Photoelektronenspektroskopie (PES).

1.2.1 Typen von Elektronenspektrometern

Entsprechend ihres Funktionsprinzips lassen sich Elektronenspektrometer nach [22] in drei Gruppen einteilen:

- Flugzeitspektrometer
- Verzögerungsfeldanalysatoren
- Spiegel- und Ablenkanalysatoren

In einem *Flugzeitspektrometer* wird die Energie/Geschwindigkeit der Elektronen durch die Messung der benötigten Flugzeit einer bekannten Strecke, zum Beispiel einer Elektronenlinse, bestimmt. Aufgrund dieses Prinzips muss sowohl der Startzeitpunkt der Elektronen als auch der Auftreffzeitpunkt auf dem Detektor möglichst präzise bekannt sein. Deswegen sind dafür sowohl eine gepulste Anregungsquelle als auch ein Detektor mit möglichst hoher Zeitauflösung notwendig [24].

Verzögerungsfeldanalysatoren basieren auf einem elektrostatischen Verzögerungsfeld vor dem Detektor. Die Elektronen passieren dieses Verzögerungsfeld nur, wenn ihre kinetische Energie größer als dessen Potentialbarriere ist. Letztere wird variiert, damit die kinetischen Energien aller Elektronen bestimmt werden können. Das erhaltene Signal ist damit das Integral des Energiespektrums mit dem Potential des Verzögerungsfeldes als untere Grenze. Durch dieses Verhalten wirkt dieser Analysator als „Hochpassfilter“, und als solcher besitzt er wegen der mit abnehmender Energie stark zunehmenden Zahl an detektierten Elektronen ein schlechtes Signal-zu-Rausch Verhältnis. Verwendung findet dieser Typ vor allem bei einfachen spektroskopischen Aufgaben [22].

In den *Spiegel- und Ablenkanalysatoren* sind die Bahnen der Elektronen, und damit auch ihre Auftrefforte am Detektor, von ihrer Energie abhängig. Dadurch kann aus den Trajektorien auf die Energie der Elektronen geschlossen werden. Eine weitere Feineinteilung dieser größten Gruppe von Analysatoren kann durch den Typ der verwendeten Felder, magne-

³Stichwort *Spektrum* in [21]

tisch oder elektrisch, erfolgen, wobei in der Praxis zumeist statische Felder verwendet werden.

Magnetische Analysatoren waren schon Anfang des letzten Jahrhunderts in Benutzung [25]. Sie basieren auf einem senkrecht zur Elektronenbahn verlaufenden statischen Magnetfeld. Durch die Lorentz-Kraft bewegen sich die Elektronen, je nach ihrer kinetischen Energie, auf unterschiedlichen Kreisbahnen. Der Nachweis erfolgt im einfachsten Fall mittels einer Photoplatte. Die Detektion niederenergetischer Elektronen gestaltet sich aufgrund der Anforderung an die Abschirmung der magnetischen Streufelder schwierig. Daher sind heutzutage magnetische Analysatoren in der Elektronenspektroskopie vergleichsweise wenig verbreitet [26].

Die wichtigsten elektrostatischen Analysatoren sind der sphärische Ablenkanalysator, engl. *Spherical Deflection Analyzer*, und der Zylinderspiegelanalysator, engl. *Cylindrical Mirror Analyzer*. Letzterer besteht aus zwei konzentrischen Zylindern mit unterschiedlichem Radius und Potential. Die Quelle der Elektronen liegt auf der Symmetrieachse der Zylinder. Der Bahnverlauf der Elektronen geht vom Quellort durch den Eintrittsspalt im inneren Zylinder und nach dem Ablenken durch geeignete Potentiale wieder aus dem Zwischenzylinderbereich durch den Austrittsspalt im inneren Zylinder heraus. Da damit sowohl Quellort als auch Zielort auf der Symmetrieachse liegen, ist die Bezeichnung als Spiegel gerechtfertigt [27]. Bei einem sphärischen Ablenkanalysator verlaufen die Elektronenbahnen zwischen zwei konzentrischen Kugeloberflächen, welche entweder Halbkugeln (180°) oder kleinere Winkel (meistens 127°) beschreiben. Bei einem Halbkugelanalysator sind beide Kugeloberflächensegmente auf geeigneten Potentialen und damit können nur Elektronen mit bestimmten Energien den Analysator passieren. Der Analysatoreintritt wird dabei durch Eintrittsspalte begrenzt, mit diesen ist, wie bei einem optischen Prismen- oder Gitterspektrometer, die Energieauflösung und damit die Anzahl der passierenden Elektronen in gewissen Grenzen variabel. Die Energie der Mitten- trajektorie wird in diesem Zusammenhang auch Durchlassenergie, engl. *pass energy*, genannt. In vielen Fällen wird dem Halbkugelanalysator noch ein elektronenoptisches Linsensystem, das sowohl Fokussierungs-, Abbrems- als auch Beschleunigungsaufgaben übernimmt, vorgeschaltet. Dadurch erhöht sich die Luminosität⁴ des Analysators und er wird vielseitiger einsetzbar [28].

Da die vorliegende Diplomarbeit nicht nur einen Halbkugelanalysator als Teil des experimentellen Aufbaus verwendet, sondern auch seine physikalische Wirkungsweise im Detail analysiert, wird er in [Abschnitt 3.2](#) ab [Seite 35](#) ausführlich diskutiert.

1.2.2 Teilgebiete der Photoelektronenspektroskopie

Nach diesem Exkurs zu Elektronenspektrometern kommen wir nun zur Photoelektronenspektroskopie selbst. Zu Beginn der Arbeiten auf diesem Gebiet wurde sie vor allem dazu benutzt,

⁴Auch als *étendue* bezeichnet, wird dieser Gütefaktor eines Spektrometers in erster Näherung als Produkt der Eintrittsfläche und des Raumwinkels am Analysatoreintritt definiert [22].

ein Verständnis des Aufbaus des Atoms zu erhalten und dabei wurden heute allgemein bekannte Entdeckungen gemacht. Als Beispiel sei der Augereffekt genannt, welcher 1925 von Pierre Auger entdeckt wurde [29].⁵ Bei diesem strahlungslosen Übergang wird ein durch ein Photon oder Elektron erzeugtes Loch in der Schale eines Atom durch ein Elektron auf einer energetisch tiefer liegenden, also weiter außen liegenden, Schale aufgefüllt. Dabei wird kein Röntgenphoton emittiert, sondern die Energie strahlungslos an ein Elektron in einer weiter außen liegenden Schale abgegeben. Wenn dieses Elektron dann das Atom verlässt, hat es eine für das Element charakteristische Energie, die unabhängig von der anregenden Photonen- oder Elektronenenergie ist. Dieser Effekt kann, in Analogie zum Photoeffekt, auch mit einem virtuellen Photon erklärt werden, das im gleichen Atom wieder absorbiert wird. Deswegen wird er auch „innerer Photoeffekt“ genannt. Die Augerelektronenspektroskopie, eine in den Materialwissenschaften häufig verwendete Methode, basiert ganz auf diesem Effekt.

Die quantitative Untersuchung von Materialien mittels Photoelektronenspektroskopie setzte sich erst Anfang der sechziger Jahre durch, da sich hierfür sowohl die Probe als auch das Spektrometer im UHV (Ultrahochvakuum) befinden müssen. Zur Erzeugung von UHV mussten effiziente Pumpentypen geschaffen werden, zum Beispiel die Ionengetterpumpe oder die Turbomolekularpumpe, die 1958 [31, 32] durch die Firma Pfeiffer vorgestellt wurde. Diese Pumpentypen erlaubten es, zuverlässig und relativ einfach UHV zu erzeugen.

Die Photoelektronenspektroskopie wurde, historisch bedingt, in die Teilgebiete XPS (X-Ray Photo Electron Spectroscopy) und UPS (Ultraviolet Photo Electron Spectroscopy) unterteilt. Diese Unterteilung beruht auf der Verwendung unterschiedlicher Anregungsenergien. In der XPS verwendet man Röntgenstrahlung, wie zum Beispiel die Mg K_{α} -Linie bei 1253,6 eV und in der UPS Quellen mit ultravioletter Strahlung. Die in der UPS verwendeten Energien liegen deutlich unter 100 eV; meistens verwendet man die Helium-I und -II Linien bei 21,22 eV bzw. 40,81 eV. Da diese Unterscheidung historisch gewachsen ist und sich die Forschungsgebiete von XPS und UPS teilweise überlappen, ist eine Unterscheidung in Rumpfniveau- und Valenzband-Photoelektronenspektroskopie zeitgemäßer. Weiterhin hat die Synchrotronstrahlung mit ihrem durchstimmbaren Energiebereich die Unterscheidung in XPS und UPS hinfällig gemacht.

Pionierarbeit in der modernen Photoelektronenspektroskopie wurde von Kai Siegbahn und seinen Mitarbeitern etwa ab 1960 an der Universität von Uppsala geleistet [33]; er erhielt für diese Arbeiten 1981 den Nobelpreis in Physik [34]. Ihm gelang es einen neuen Halbkugelanalysator mit damals revolutionär guter Energieauflösung zu entwickeln. Damit wurden völlig neue Einblicke in die Struktur der Materie und chemischer Verbindungen möglich. Siegbahn und seine Mitarbeiter begründeten auch den englischen Begriff Electron Spectroscopy for Chemical Analysis (ESCA). Dahinter steckt die Idee, dass man durch Beobachtung der detaillierten Energie einer Rumpfniveaulinie den chemischen Zustand einer Probe bestimmen kann. Dabei treten je nach chemischem Zustand der Probe leichte Verschiebungen der Bindungsenergie, engl. *chemical shifts*, auf. Man kann also beispielsweise feststellen, in welchem

⁵Er wurde unabhängig auch von Lise Meitner im Jahre 1922 [30] beschrieben.

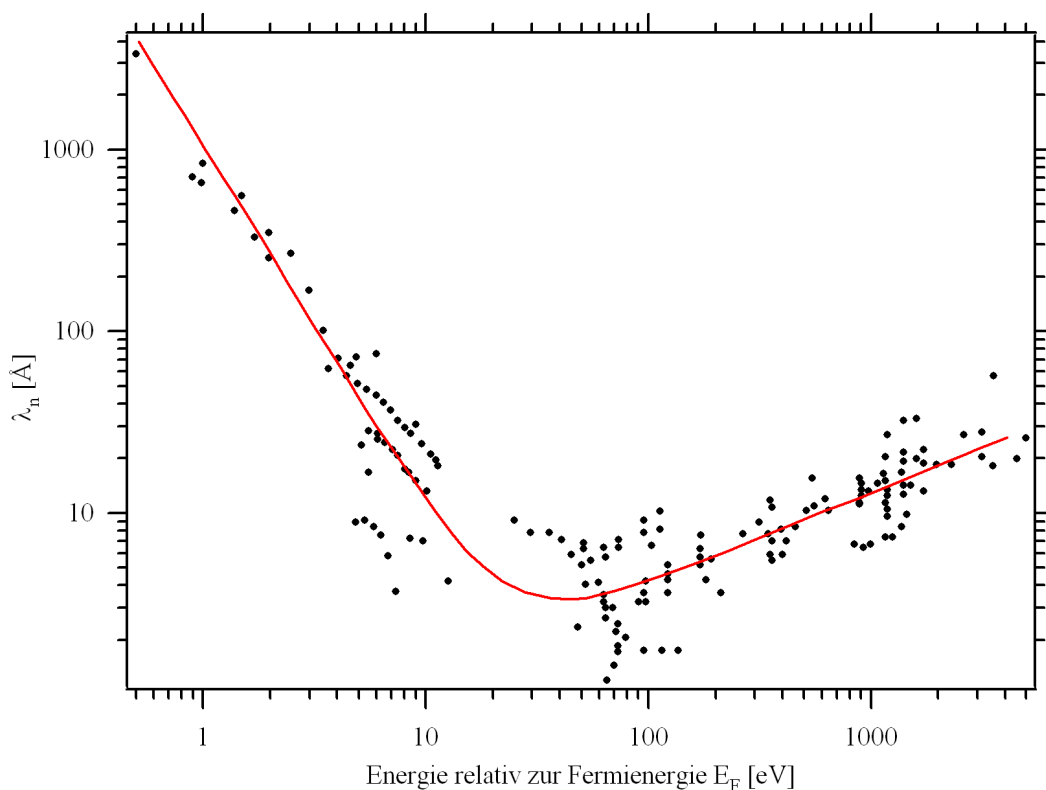


Abbildung 1.1: Die „Universelle Kurve“. Dargestellt sind die mittleren freien Weglängen λ_n der Elektronen in einem Material, als Funktion ihrer Energie E . Die schwarzen Punkte sind Messwerte verschiedener Elemente, und die rote Kurve die Ausgleichsfunktion aus [Gleichung 1.1](#). Abbildung nach [\[35\]](#).

Bindungszustand ein bestimmtes Atom vorliegt, ob in metallischer oder oxidierter Form. Vor allem auch quantitative Aussagen über die Zusammensetzung eines Materials sind mit dieser neuen Klasse von Spektrometern und diesem Ansatz möglich geworden. In der Oberflächenphysik ist die Photoelektronenspektroskopie als analytische Methode besonders weit verbreitet. Der Grund liegt in der großen Oberflächenempfindlichkeit der Methode, wie der folgende Abschnitt zeigt.

In [Abbildung 1.1](#) ist die mittlere freie Weglänge von Elektronen im Festkörper als Funktion ihrer kinetischen Energie dargestellt. Deutlich sichtbar ist die starke Energieabhängigkeit (doppelt logarithmische Skala) und das Minimum bei circa 40 eV mit einer mittleren freien Weglänge von circa 5 Å. Für Experimente in diesem Energiebereich, wie er für PES üblich ist, entstammt damit der überwiegende Teil der detektierten Photoelektronen den obersten Atomlagen, sprich der Oberfläche, der Probe. Die gemessenen Daten der mittleren freien Weglänge sind materialabhängig; man kann durch die verschiedenen Datenpunkte eine Ausgleichskurve („Universelle Kurve“) legen, die nach [\[35\]](#) durch

$$\lambda_n = 538aE^{-2} + 0,41a^{3/2}E^{1/2} \quad (1.1)$$

beschrieben wird. Wie erklärt sich die Form dieser „Universellen Kurve“? Das niederenergie-

tische Ende kann sehr gut mit

$$\lambda_n \propto E^{-2} \quad (1.2)$$

angenähert werden. Eine anschauliche Erklärung dafür geht von der Streuwahrscheinlichkeit $w \propto \lambda_n^{-1}$ eines angeregten Elektrons der Energie E aus, die etwas größer als das Fermi-Level E_F ist. Diese Wahrscheinlichkeit ist das Produkt aus der Anzahl der erreichbaren besetzten Zustände $\simeq E \cdot N(E_F)$ und der erreichbaren unbesetzten Zustände $\simeq E \cdot N(E_F)$, das heißt $w \propto E^2$. $N(E_F)$ ist die Anzahl der Elektronen mit der Fermi-Energie E_F . Damit folgt **Gleichung 1.2** unmittelbar [35, 37, 38]. Der qualitative Verlauf des hochenergetischen Endes lässt sich nach [39] durch theoretische Berechnungen der Streuung von Elektronen an Leitungsbandelektronen in Materialien mit fast freien Elektronenzuständen zeigen. Das Minimum der mittleren freien Weglänge lässt sich, im vereinfachten aber oft zutreffenden Modell der nahezu freien Elektronen, durch Erreichen der Plasmafrequenz und damit verbundener Elektronen-Plasmonenstöße erklären [41].

1.2.3 Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie

Eine große Bedeutung für viele Untersuchungen in der Festkörperphysik hat die winkelaufgelöste Photoemission in den letzten Jahrzehnten gewonnen. Dieser Zweig war jedoch auch historisch bedeutend, da viele frühen experimentellen Ergebnisse erst mit der Quantenmechanik und der Entdeckung des Welle-Teilchen-Dualismus erklärt werden konnten. Als Beispiel sei hier die Untersuchung von William Bragg im Jahre 1908 über die Vorwärts/Rückwärts-Asymmetrie bei der Photoemission von Elektronen aus einer dünnen Metallfolie erwähnt [42].

In der winkelaufgelösten Photoemission, auch als engl. Angular Resolved Photo Electron Spectroscopy (ARPES) bezeichnet, wird nicht nur die Intensität (proportional zur Anzahl der Photoelektronen) als Funktion der Photoelektronenenergie bestimmt, sondern auch noch zusätzlich die Austrittswinkel der Elektronen aus der Probe. Diese Methode erlaubt insbesondere die elektronische Struktur, also die Beziehung zwischen der Energie und den Wellenvektoren der Elektronen, was auch als Bandstruktur bezeichnet wird, im Festkörper zu bestimmen [43]. Der dabei erzeugte Datensatz, Intensität als Funktion der Elektronenenergie E und beider Winkel ϑ und β , kann dann in die Relationen $E(k_{\parallel, \vartheta})$ und $E(k_{\parallel, \beta})$ umgerechnet werden.

Abbildung 1.2 zeigt ein schematisches winkelaufgelöstes Photoemissionsexperiment. Dabei wird die Probe mit Photonen der Energie $h\nu$ angeregt und die dabei entstehenden Elektronen werden mit einem hemisphärischen Halbkugelanalysator detektiert. Die Winkeldispersion kann dabei im Allgemeinen entweder durch mechanisches Schwenken des Analysators erreicht werden oder aber sie findet in der Linse statt. In der **Abbildung 1.2** werden die Winkel in der Linse dispergiert. Dabei zeigen die grünen, schwarzen und violetten Strahlengänge Elektronen mit verschiedenen Austrittswinkeln ϑ_o . Die Elektronen werden in Abhängigkeit ihrer Energie und ihres Austrittswinkels ϑ_o auf den Detektor abgebildet. Der Winkel β_o ist durch die Probenkoordinaten definiert. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind die Winkel β_o

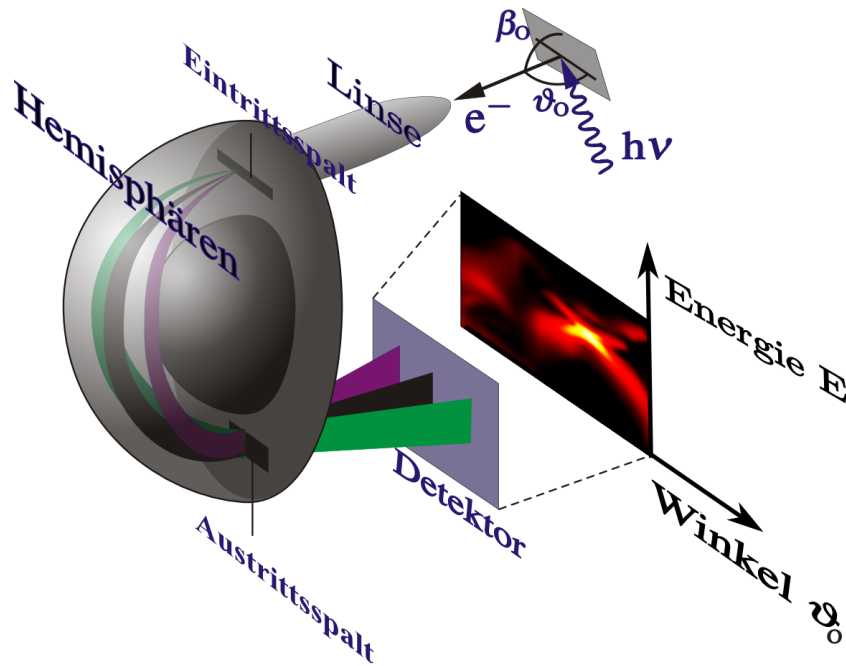


Abbildung 1.2: Schematisches ARPES-Experiment. Die Probe wird mit Photonen der Energie $h\nu$ angeregt und die Winkel des austretenden Elektrons ϑ_0 und β_0 aufgezeichnet.

und ϑ_0 in der Abbildung relativ zur Probenoberfläche definiert. Im Weiteren werden jedoch die Winkel β und ϑ betrachtet, welche relativ zur Probennormalen gemessen werden. Dabei gelten die Relationen $\beta = 90^\circ - \beta_0$ und $\vartheta = 90^\circ - \vartheta_0$.

1.3 Aufgabe und Motivation

Im Rahmen der vorliegenden Diplomarbeit sollte für einen bestehenden, kommerziellen Elektronen-Energie-Analysator ein neuer winkelaufgelöster Linsenmodus entwickelt werden, mittels dessen ein größerer Winkelbereich simultan erfasst werden kann. Damit sollte auch eine höhere Effizienz im Sinne kürzerer Messzeiten erreicht werden. Die Arbeit wurde in Kooperation mit dem Hersteller des Analysators, der Firma SPECS, durchgeführt.

Um ein möglichst breites Anwendungsspektrum zu ermöglichen, lässt sich der hemisphärische Halbkugelanalysator mit vorgeschalteter Linse in verschiedenen Betriebsmodi betreiben. Dabei kann winkelintegriert, also eine Intensität in Abhängigkeit der Energie $I(E)$, oder auch winkelaufgelöst, dann $I(E, \vartheta)$, gemessen werden. In diesen Betriebsmodi werden nur die Abbildungseigenschaften der Linse, nicht aber der Halbkugeln, variiert; sie werden deshalb als Linsenmodi bezeichnet. Im folgenden soll nun die spezielle Gruppe der winkelaufgelösten Linsenmodi betrachtet werden.

Für die Erfordernisse der winkelaufgelösten Spektroskopie ist es sinnvoll, verschiedene winkelauflösende Linsenmodi zur Verfügung zu haben. Diese unterscheiden sich durch den

Name	Winkelakzeptanz in ϑ -Richtung
High Angular Dispersion (HAD)	$\pm 3^\circ$
Medium Angular Dispersion (MAD)	$\pm 4^\circ$
Low Angular Dispersion (LAD)	$\pm 7^\circ$
Wide Angle Mode (WAM)	$\pm 13^\circ$

Tabelle 1.1: Winkelaufgelöste Linsenmodi für einen Analysator vom Typ „Phoibos“. Daten nach [44].

auf den Detektor abgebildeten Winkelbereich ϑ , das bedeutet bildlich gesprochen, dass man in den Winkelausschnitt herein- und herauszoomt. Damit ist es einerseits möglich, sehr feine Strukturen abzubilden und andererseits große Winkelbereiche schnell zu erfassen. Für den von der Firma SPECS entworfenen, und hier verwendeten Analysatortyp „Phoibos“ gab es bisher die in [Tabelle 1.1](#) aufgelisteten winkelaufgelösten Linsenmodi; der WAM (Wide Angle Mode)-Modus ist darin derjenige mit der größten Winkelakzeptanz. Eine große Winkelakzeptanz erlaubt es, dass man mit nur einer Aufnahme einen großen Winkelbereich abdecken und damit die Messzeit verkürzen kann. Das ist vor allem angesichts der Tatsache relevant, dass die Probe im UHV nur eine gewisse Zeitspanne sauber bleibt und die Messzeit damit eine sehr wichtige Rolle spielt. Ein weiterer Vorteil ist, dass für die Aufnahme des kompletten Theta-Bereichs von 180° weniger Scans gemacht werden müssen. Dabei ist es wie in der Panorama-Photographie üblich, die Bilder eines Theta-Scans überlappend aufzunehmen, um sie dann aneinanderzuheften (engl. *stitchen*). Dadurch ist die Anzahl der Nahtstellen geringer für den Fall, dass große Winkelbereiche (wie beim WAM) abgebildet werden.

Wie groß kann nun die Winkelakzeptanz eines von Grund auf neu konzipierten Linsenmodus gewählt werden? Eine obere Schranke für die Winkelakzeptanz ist durch die geometrische Anordnung von Linse und Probe gegeben. Bei einem Arbeitsabstand von x und einem Öffnungsradius des ersten Linsenelements von y ergibt sich mit [Abbildung 1.3](#) der halbe Öffnungswinkel ζ der Linse zu:

$$\zeta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \quad (1.3)$$

Im konkreten Fall hier ergibt sich dieser Winkel ζ zu $15,3^\circ$. Alle Elektronen mit $\vartheta > 15,3^\circ$ prallen damit auf die mechanischen Elemente der Linse und tragen nicht zur Winkelabbildung bei. Es gibt nun prinzipiell zwei Möglichkeiten diese obere Schranke anzuheben. Eine Möglichkeit wäre, die Linsengeometrie zu ändern, eine andere den Arbeitsabstand zu verringern. Der Entwurf einer vollständigen neuen Linse bedeutet jedoch einerseits einen enormen Aufwand und andererseits müssten für eine neue Linse auch alle bisherigen Linsenmodi neu berechnet werden. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit die mechanische Konstruktion unverändert gelassen und nur der Arbeitsabstand verkleinert.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuer winkelaufgelöster Linsenmodus mit einer Akzeptanz von etwa $\pm 18^\circ$ entworfen und im Experiment erfolgreich getestet. Der Entwurf und die theoretische Charakterisierung wird durch elektronenoptische Simulationen mit dem kommerziellen Finite-Elemente-Programm SIMION [45] durchgeführt.

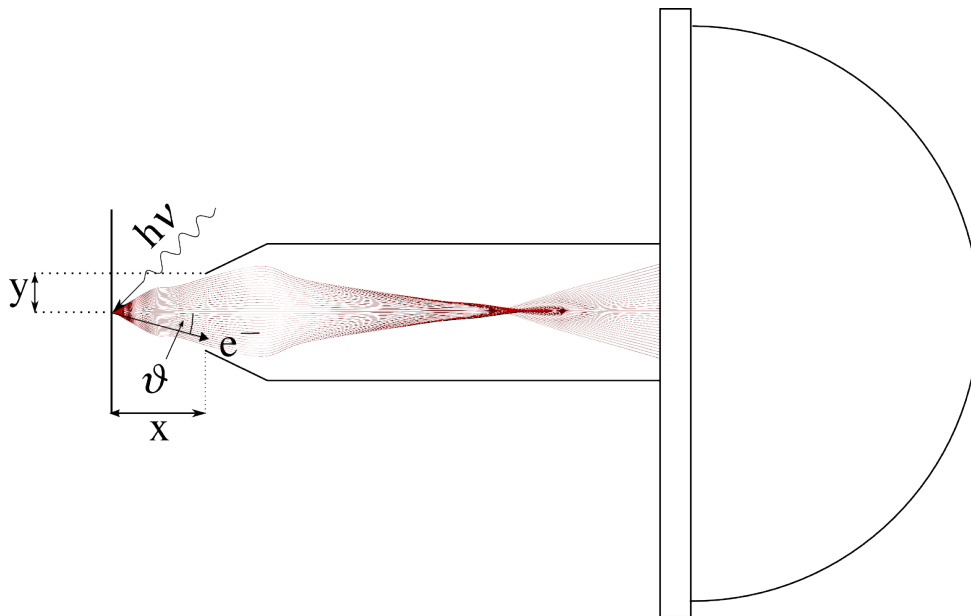


Abbildung 1.3: Schematische Zeichnung des Analysators mit dem Augenmerk auf den Arbeitsabstand x und den Öffnungsradius der Linse y . Die roten und schwarzen Elektronenbahnen deuten einen winkelaufgelösten Linsenmodus an.

Die Entscheidung für dieses Softwareprogramm wird durch die bisher sehr guten Erfahrungen mit dem Programm selbst und bezüglich der Übereinstimmung von Simulation und Experiment gestützt.

Die Arbeit soll sich weiterhin an den folgenden Fragestellungen orientieren:

- Was sind die elektronenoptischen Besonderheiten eines winkelaufgelösten Linsenmodus?
- Wie kann mit einem iterativen und in sich abgeschlossenen Optimierungsalgorithmus ein neuer winkelaufgelöster Linsenmodus von Grund auf neuentworfen werden?
- Wie gut ist die Übereinstimmung der Simulationen mit dem Experiment?

Das in der vorliegenden Arbeit umgesetzte Vorgehen umfasst die folgenden Schritte. Der erste ist die Definition geeigneter Parameter zur Beschreibung eines Linsenmodus, die Simulation des neuen Linsenmodus und die Verifikation seiner Funktionsfähigkeit in der Simulation. Mit diesem Wissen wird im zweiten Schritt der neue Linsenmodus unter gleichen Fragestellungen im Experiment untersucht und die Daten mit der Simulation verglichen. Im Folgenden wird der neu erstellte Linsenmodus in Anlehnung an den Wide Angle Mode (WAM) mit Super Wide Angle Mode (SWAM) bezeichnet.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen des Photoionisationsprozesses und der Elektronenoptik elektrostatischer Linsen erklärt.

2.1 Photoeffekt in Festkörpern

Beim Photoeffekt wird nach Einstein [6] ein Photon der Energie $E_{\text{photon}} = h\nu$ von einem gebundenen Elektron in einem Festkörper absorbiert,

$$h\nu = E_{\text{elektron, max}} + \Phi_{\text{Probe}}. \quad (2.1)$$

Dabei kann das Elektron für den Fall $E_{\text{photon}}(\text{min}) \geq \Phi_{\text{Probe}}$ den Festkörper verlassen und erst für $h\nu > E_{\text{photon}}(\text{min})$ ist der Photoeffekt möglich. Die Austrittsarbeit Φ_{Probe} ist die Energiedifferenz zwischen der Energie des höchsten besetzten Zustands im Festkörper und der des ersten unbesetzten Zustandes ($\hat{=}$ Vakuumlevel).

Wenn man nun zusätzlich die Bindungsenergie des Elektrons im Festkörper, das Elektronenspektrometer und seine Austrittsarbeit Φ_{sp} betrachtet, ergibt sich mit **Abbildung 2.1** folgender Zusammenhang:

$$E_{\text{kin}} + \Phi_{\text{Probe}} = h\nu - E_{\text{B}} \quad (2.2)$$

$$E_{\text{kin}} + \Phi_{\text{Probe}} = E'_{\text{kin}} + \Phi_{\text{sp}} \quad (2.3)$$

Mit dem Spektrometer wird der Parameter E'_{kin} gemessen. Ein Gleichsetzen und Umstellen der Gleichungen **2.2** und **2.3** ergibt

$$E_{\text{B}} = h\nu - E'_{\text{kin}} - \Phi_{\text{sp}}. \quad (2.4)$$

Damit kann nach der einmaligen⁶ Bestimmung der Analysatoraustrittsarbeit Φ_{sp} und der gemessenen kinetischen Energie E'_{kin} des Elektrons die Bindungsenergie des Elektrons E_{B} bestimmt werden. Man beachte, dass **Gleichung 2.4** unabhängig von der Austrittsarbeit der Probe und damit für alle Proben gültig ist.

⁶Dies macht entweder der Hersteller oder man kann sehr genau definierte Energien wie z.B. Photoemissionslinien von gasförmigen Atomen oder die Fermikante von Metallen bei tiefen Temperaturen zur Eichung benutzen.

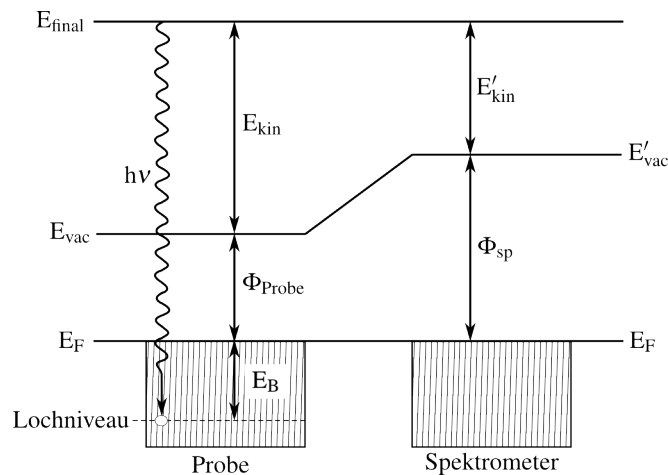


Abbildung 2.1: Energieniveaudiagramm des Photoeffekts mit Berücksichtigung des Spektrometers. Hierbei wird angenommen, dass sowohl die Probe als auch das Spektrometer an derselben Erde angeschlossen sind, und damit beide Fermilevel übereinstimmen. Abbildung nach [47].

2.1.1 Drei-Schritt-Modell nach Berglund und Spicer

Als phänomenologisches Modell zur Beschreibung des Photoemissionsprozesses hat sich das von Berglund und Spicer [48] entwickelte Drei-Schritt-Modell bewährt. Dieses Modell ist aus quantenmechanischer Sicht nicht zufriedenstellend, da der Photoemissionsprozess hierfür in einem Schritt beschrieben werden sollte, vom Eintreffen des Photons im Festkörper bis zum Verlassen des Elektrons aus dem Festkörper mit eventuell mehreren angeregten Atomen. Da dieses Ein-Schritt-Modell aber für viele Fälle zu kompliziert ist und sich das Drei-Schritt-Modell in der Praxis bewährt hat, wird im Folgenden nur letzteres beschrieben.

Im Drei-Schritt-Modell wird der Photoemissionsprozess in die folgenden Schritte unterteilt:

1. Optische Anregung eines Photoelektrons aus dem Festkörpervolumen
2. Bewegung des Photoelektrons zur Oberfläche des Festkörpers
3. Austritt des Photoelektrons ins Vakuum

Die gesamte Photoemissionsintensität ergibt sich damit als Produkt aus

1. der Übergangswahrscheinlichkeit des optischen Übergangs,
2. dem Inversen der Streuwahrscheinlichkeit bei der Bewegung zur Oberfläche und
3. der Austrittswahrscheinlichkeit des Photoelektrons aus dem Material ins Vakuum.

Optische Anregung eines Elektrons aus dem Festkörpervolumen

Der Übergang zwischen einem N -Teilchen-System im Ausgangszustand Ψ_i^N und einem der möglichen Endzustände Ψ_f^N kann sehr gut mit Fermi's Goldener Regel beschrieben werden. Dabei ergibt sich für die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{f,i}$

$$w_{f,i} \propto \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f^N | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Psi_i^N \rangle|^2 \delta(E_f^N - E_i^N - h\nu) \quad (2.5)$$

dabei ist $E_i^N = E_i^{N-1} - E_B^k$ die Energie des N -Teilchen Ausgangszustands, mit der Bindungsenergie E_B^k des Elektrons, seinem Wellenvektor \mathbf{k} und mit $E_f^N = E_f^{N-1} + E_{\text{kin}}$ der Energie des N -Teilchen-Endzustandes. Dabei ist E_{kin} die kinetische Energie des Elektrons im Vakuum. Die Wechselwirkung mit dem Photon der Energie $h\nu$ steckt in dem Wechselwirkungs-Hamiltonoperator \mathcal{H}_{int} . Dieser kann als Störung des Systems aufgefasst werden und lässt sich (bei Vernachlässigung von 2-Photoneneffekten, d.h. einer linearen Näherung im Vektorpotential \mathbf{A} und der Hamilton-Eichung $\Phi = 0$ [49]) schreiben als

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{e}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}). \quad (2.6)$$

Dabei bezeichnet \mathbf{p} den Elektronenimpuls. Mit der Vertauschungsrelation $[\mathbf{p}, \mathbf{A}] = -i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A}$ und der Dipol-Näherung $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, die besagt, dass sich das Vektorpotential über die atomaren Dimensionen nicht ändert, kann **Gleichung 2.6** geschrieben werden als

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{e}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} - i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A}) = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.7)$$

Es ist wünschenswert, die N -Teilchen-Wellenfunktionen Ψ_f^N und Ψ_i^N aus **Gleichung 2.5** in Wellenfunktionen des Photoelektrons und des $(N-1)$ -Teilchen-Systems zu separieren, da das Spektrometer Energie und Wellenvektor des Photoelektrons bestimmt. Diese Separation benötigt die Näherung, dass sich der Zustand des System während des Photoemissionsprozesses nicht ändert. Das heißt, das Photoelektron wird instantan aus dem System herausgelöst und es findet keine Wechselwirkung mehr nach dem Herauslösen statt; deswegen heißt diese Näherung im Englischen auch *sudden approximation*. Auch wenn sie streng genommen nur für hohe kinetische Energien der Elektronen gilt, hat sie sich auch für niedere kinetische Energien als sinnvoll erwiesen. Damit ergeben sich die Endzustände des N -Teilchen-Systems zu

$$\Psi_f^N = A \Phi_f^k \Psi_f^{N-1} \quad (2.8)$$

dabei sorgt der Operator A für eine antisymmetrisierte N -Teilchen-Wellenfunktion wie für Elektronen durch das Pauli-Prinzip gefordert. Φ_f^k ist die Photoelektronenwellenfunktion mit dem Wellenvektor \mathbf{k} und Ψ_f^{N-1} die Wellenfunktion des restlichen $(N-1)$ -Teilchen-Systems ohne das Photoelektronen. Dieser Zustand Ψ_f^{N-1} kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit als Eigenzustand Ψ_m^{N-1} des Systems mit dem Energieeigenwert E_m^{N-1} betrachtet werden. Man beachte, dass sich die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit in **Gleichung 2.5** als Summe über alle möglichen Endzustände $\Psi_{f=m}^{N-1}$ ergibt.

Für die Ausgangswellenfunktion des N -Teilchen-Systems wird wieder angenommen, dass sie sich als Produkt der $(N - 1)$ -Teilchen-Wellenfunktion und der Photoelektronenwellenfunktion darstellen lässt. Dies ist zum Beispiel der Fall für mittels Hartree-Fock-Rechnung berechnete N -Teilchen-Wellenfunktionen. Damit ergibt sich

$$\Psi_i^N = A \Phi_i^k \Psi_i^{N-1}. \quad (2.9)$$

Die Beziehung der $(N - 1)$ -Teilchen-Wellenfunktion und der N -Teilchen-Wellenfunktion kann auch mit dem Vernichtungsoperator c_k als

$$\Psi_i^{N-1} = c_k \Psi_i^N \quad (2.10)$$

geschrieben werden. Diese Schreibweise macht noch einmal deutlich, dass die Wellenfunktion Ψ_i^{N-1} kein Eigenzustand des $(N - 1)$ -Teilchen-Hamiltonoperators ist [43].

Nun kann das Matrixelement aus **Gleichung 2.5** geschrieben werden als

$$\langle \Psi_f^N | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Psi_i^N \rangle = \underbrace{\langle \Phi_f^k | \mathcal{H}_{\text{int}} | \Phi_i^k \rangle}_{\text{Dipolmatrixelement } M_{f,i}^k} \underbrace{\langle \Psi_m^{N-1} | \Psi_i^{N-1} \rangle}_{\text{Überlappintegral}} \quad (2.11)$$

Damit gilt für die gesamte Zahl erzeugter Elektronen im Festkörpervolumen als Funktion der kinetischen Energie E_{kin} und \mathbf{k} :

$$\sum_{f,i} w_{f,i} \propto \sum_{f,i} |M_{f,i}^k|^2 \sum_m \frac{|c_{m,i}|^2}{|\langle \Psi_m^{N-1} | \Psi_i^{N-1} \rangle|^2} \delta(E_{\text{kin}} + E_m^{N-1} - E_i^N - h\nu) \quad (2.12)$$

Dabei gibt $|c_{m,i}|^2$ die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen dem $(N - 1)$ -Teilchen Zustand Ψ_i^{N-1} nach dem Herauslösen des Elektrons und einem der Eigenzustände Ψ_m^{N-1} an [43].

Bewegung des Elektrons zur Oberfläche

Verschiedene Streumechanismen sind dafür verantwortlich, dass nicht alle Photoelektronen aus dem Festkörpervolumen die Oberfläche erreichen. Den größten Anteil an den Streuverlusten hat die Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Unter der Annahme einer räumlich isotropen Streurrate $1/\tau$, wobei τ die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen ist, und einer alleinigen⁷ Abhängigkeit von der Energie E kann die mittlere freie Weglänge der Elektronen ausgedrückt werden als

$$\lambda(E, k) = \tau \cdot v_g = \frac{\tau}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (2.13)$$

wobei $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ die Gruppengeschwindigkeit des Elektrons im Zustand Φ_f^k ist, und k der Betrag des Photoelektronenwellenvektors \mathbf{k} . Nach [48] kann gezeigt werden, dass das Verhältnis

⁷Dies stellt eine Näherung darstellt, hat sich aber wie **Abbildung 1.1** auf **Seite 6** zeigt, durchaus bewährt.

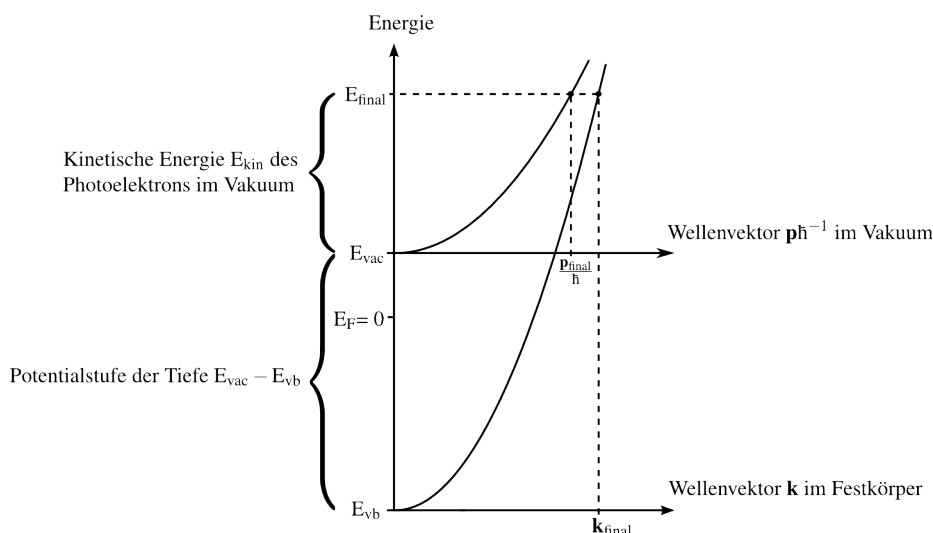


Abbildung 2.2: Freies Elektronenmodell für ein Elektron im Festkörper und im Vakuum. Die Wellenvektoren $\mathbf{k}_{\text{final}}$ und $\mathbf{p}_{\text{final}}\hbar^{-1}$ können durch den Schnitt der Parabeln mit der Energie E_{final} bestimmt werden. Abbildung nach [51].

$d(E,k)$ von erzeugten Photoelektronen, welche die Oberfläche verlassen, pro $\lambda(E,k)$ gerade durch

$$d(E,k) = \frac{\alpha\lambda(E,k)}{1 + \alpha\lambda(E,k)} \quad (2.14)$$

gegeben ist. Dabei ist α der optische Absorptionskoeffizient für Photonen bei der jeweiligen Photonenenergie $h\nu$. Für den Fall, dass die mittlere freie Weglänge $\lambda(E,k)$ sehr viel kleiner als die Eindringtiefe α^{-1} der Photonen ist, gilt nach [51]:

$$d(E,k) \approx \lambda(E,k) \cdot \alpha \quad (2.15)$$

Austritt der Elektronen ins Vakuum

Der Austritt der Elektronen aus dem Festkörper ins Vakuum kann in erster Näherung mit einer Treppenfunktion für den Potentialverlauf am Übergang beschrieben werden. Dies ist für ein freies Elektron in [Abbildung 2.2](#) abgebildet. Der Ursprung der Parabel liegt im Festkörper dabei an der unteren Valenzbandkante $E_{\text{vb}} < 0$ und im Vakuum bei E_{vac} . Damit beträgt der Potentialunterschied zwischen Festkörper und Vakuum $E_{\text{vac}} - E_{\text{vb}}$. Die Wellenvektoren $\mathbf{k}_{\text{final}}$ im Festkörper und $\mathbf{p}_{\text{final}}\hbar^{-1}$ im Vakuum lassen sich in diesem Bild durch den Schnittpunkt der beiden Parabeln mit einer Geraden bei der Energie $E_{\text{final}} = E_{\text{kin}} - E_{\text{vac}}$ berechnen. Dabei bezeichnet E_{final} die Endzustandsenergie, engl. *final state energy*, also die mit einem Spektrometer gemessene kinetische Energie eines Elektrons plus dessen Austrittsarbeit Φ_{sp} .⁸ Da man eine Austrittsebene betrachtet, gilt in dieser Translationsinvarianz parallel zu ihr und

⁸Siehe auch [Abbildung 2.1](#) auf [Seite 12](#).

damit wird k_{\parallel} beim Austritt aus dem Festkörper, bis auf reziproke Gittervektoren \mathbf{G} , erhalten.⁹ Nach **Abbildung 2.2** bedeutet dies, dass für die Überwindung der Potentialstufe die senkrechte Komponente k_{\perp} des Wellenvektors im Festkörper nicht beliebig klein sein kann. Als Formel ausgedrückt:

$$\frac{\hbar^2}{2m}k_{\perp}^2 \geq E_{\text{vac}} - E_{\text{vb}} \quad (2.16)$$

$$\Rightarrow k_{\perp, \text{final}} = \frac{\sqrt{2m(E_{\text{vac}} - E_{\text{vb}})}}{\hbar} \quad (2.17)$$

Die Elektronen mit $k_{\perp} < k_{\perp, \text{final}}$ werden also an der Potentialbarriere total reflektiert und können den Festkörper nicht verlassen [51].

Die Idee des „Austrittskonus“ kann anhand der **Abbildung 2.3** nachvollzogen werden. Darin sind die Beträge der Wellenvektoren bzw. Impulse als Kreissegmente eingezeichnet. Für ein Photoelektron im Vakuum ist jeder Wellenvektor $\mathbf{p}\hbar^{-1}$ erlaubt und damit ist der maximale Austrittswinkel $\vartheta = \vartheta_{\text{max}} = \pm\pi/2$. Dies ist in der Abbildung durch das dick gezeichnete Kreissegment verdeutlicht. Da beim Austritt aus der Oberfläche k_{\parallel} erhalten bleibt, kann mit der Projektion von $p_{\parallel, \text{max}} \cdot \hbar^{-1}$ ins Festkörpervolumen der Winkel ϑ'_{max} bestimmt werden. Bei diesem Winkel ϑ'_{max} gilt dann $k_{\perp} = k_{\perp, \text{final}}$. Auf diese Weise ergibt sich ein Bereich $|\vartheta'| < |\vartheta'_{\text{max}}|$, für den ein aus dem Festkörper kommendes Elektron die Potentialbarriere an der Oberfläche überwinden kann. Dieser Bereich wird als „Austrittskonus“ [51] bezeichnet.

Ein numerisches Bestimmen von ϑ' ist mit den aus **Abbildung 2.3** gewonnenen Beziehungen

$$\sin \vartheta' = \frac{k_{\parallel}}{|\mathbf{k}|} \quad (2.18a)$$

$$\sin \vartheta = \frac{p_{\parallel}}{|\mathbf{p}|} \quad (2.18b)$$

$$|\mathbf{k}| = \frac{\sqrt{2m(E_{\text{final}} - E_{\text{vb}})}}{\hbar} \quad (2.18c)$$

$$|\mathbf{p}| = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \quad (2.18d)$$

möglich. Mit $k_{\parallel} = p_{\parallel}\hbar^{-1}$ und den Gleichungen 2.18a-d erhält man

$$\frac{\sin \vartheta'}{\sin \vartheta} = \sqrt{\frac{E_{\text{kin}}}{E_{\text{final}} - E_{\text{vb}}}} \quad (2.19)$$

Diese Beziehung ist sehr ähnlich zum Snellius'schen Brechungsgesetz aus der Lichtoptik, nur dass auf der rechten Seite die Energien und nicht die Brechungsindizes der optischen

⁹Analog zum Verhalten einer elektromagnetischen Welle beim Übergang zwischen zwei Medien unterschiedlicher Dielektrizität [53].

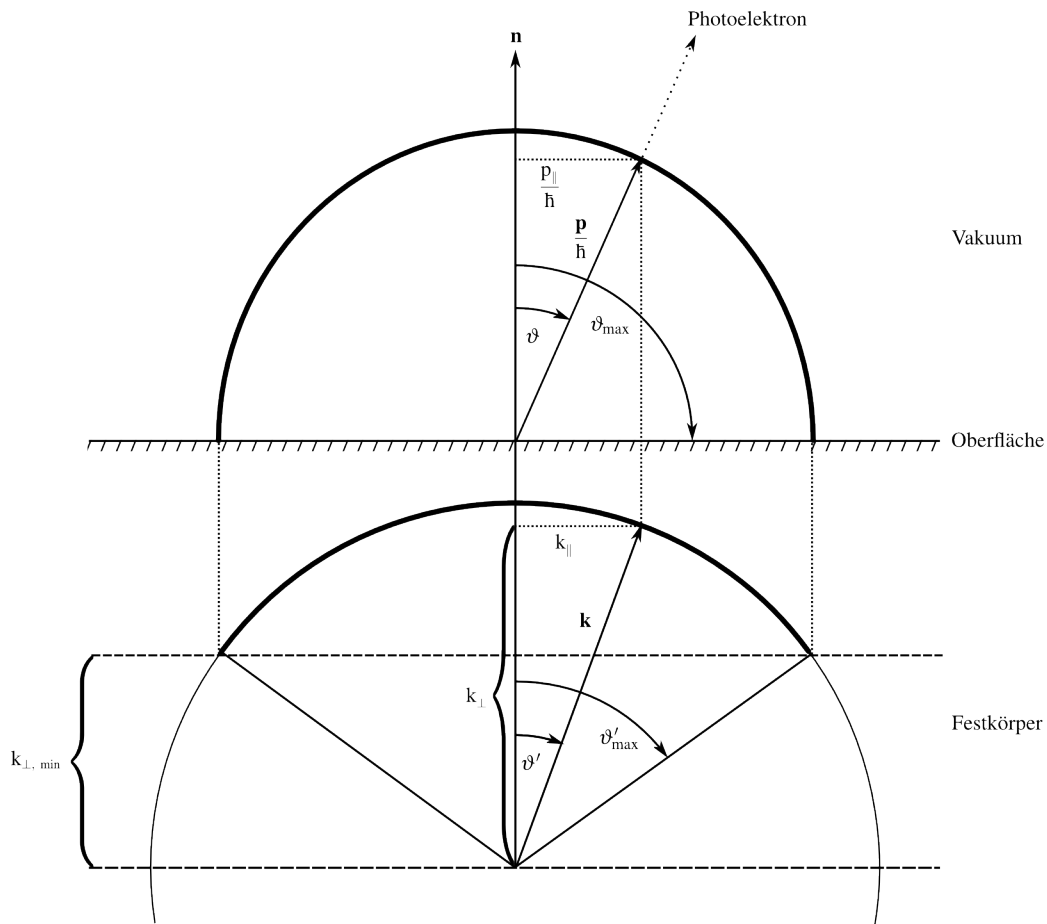


Abbildung 2.3: Der Austrittskonus im *free electron final state model*. Dabei beschreiben die dick gezeichneten Kreissegmente die möglichen Austrittskonen im Festkörper und Vakuum mit den Radien \mathbf{k} und $\mathbf{p}\hbar^{-1}$. Abbildung nach [51].

Medien stehen. An dieser Stelle ist es interessant, noch einmal die Energetik des Übergangs ins Vakuum zu betrachten. Im Vakuum gilt nach **Abbildung 2.2**:

$$E_{\text{kin}} = E_{\text{final}} - E_{\text{vb}} = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} = \frac{p_{\parallel}^2 + p_{\perp}^2}{2m} \quad (2.20)$$

und mit $k_{\parallel} = p_{\parallel}\hbar^{-1}$ ergibt das

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2m} (\hbar^2 k_{\parallel}^2 + p_{\perp}^2) \quad (2.21)$$

Da die senkrechte Komponente des Wellenvektors k_{\perp} in **Gleichung 2.21** nicht auftaucht, bedeutet dies, dass für ein beliebiges System in einem typischen Photoemissionsexperiment, bei dem man die Energie des Elektrons und seine (beiden) k_{\parallel} -Komponente(n) misst, k_{\perp} unbestimmt bleibt. Und damit kann man *nicht* den gesamten Wellenvektor \mathbf{k} des Photoelektrons im Festkörper aus den gemessenen Daten rekonstruieren. Bei der Annahme eines freien Elektrons

im Endzustand kann k_{\perp} dennoch berechnet werden [43]. Alternative Methoden, zum Beispiel die Kombination mit anderen experimentellen Daten wie in [54] beschrieben, sind in der Regel deutlich aufwändiger. Aus diesem Grund wird die Annahme einer freien Elektronendispersion sehr häufig auch für nicht-freie Elektronen verwendet [51, 55].

2.1.2 Bestimmung der Bandstruktur $E(\mathbf{k})$

Wie schon im letzten Kapitel angemerkt, ist die Bestimmung des vollständigen Wellenvektors \mathbf{k} der Elektronen im Festkörper nicht ohne weiteres aus der gemessenen Energie und den Austrittswinkeln ϑ, β , also $k_{\parallel, \vartheta}$ und $k_{\parallel, \beta}$ (siehe auch **Unterabschnitt 1.2.3**) möglich. Die Bestimmung der Energie des Elektrons als Funktion des vollständigen Wellenvektors \mathbf{k} , also die Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$ der Elektronen im Festkörper ist jedoch physikalisch und auch in der Anwendung von hohem Interesse. Die Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$ wird auch als Bandstruktur bezeichnet. War vor circa 40 Jahren die Silizium-Bandstruktur [56], vor allem aus Perspektive der entstehenden Halbleiterindustrie, interessant, werden gegenwärtig sehr häufig Hochtemperatur-Supraleiter [57] untersucht. Dabei verspricht das Wissen der Bandstrukturen von jetzigen Hochtemperatur-Supraleitern, die Bestimmung der Mechanismen der Hochtemperatursupraleitung und die Synthetisierung von neuen Supraleitern mit noch höheren Sprungtemperaturen. Dies ist vor allem für industrielle Anwendungen interessant ist.

Das Problem des nicht komplett bestimmten Wellenvektors \mathbf{k} wird in den meisten Fällen mit dem Modell des freien Elektrons im Endzustand, engl. *free electron final state*, approximiert. Mit dieser Annahme gilt nach **Abbildung 2.4** und [58] für die Energie des Elektrons:

$$E_{\text{final}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2} - |E_{\text{vb}}| \quad (2.22)$$

Aus praktischen Gründen nimmt man dabei als Messgeometrie die Normalemission, also $k_{\parallel} = 0$, an. Diese Gleichung enthält eine weitere Unbekannte, nämlich die Energie E_{vb} . Diese wird üblicherweise über das innere Potential $V_0 = E_{\text{vac}} + |E_{\text{vb}}|$ definiert. Das innere Potential wiederum kann entweder als Fitparameter in die Auswertung mit eingehen, oder es wird mit dem Potentialnullpunkt in theoretischen Bandstrukturkalkulationen identifiziert [59]. Da nun V_0 bestimmt ist, kann k_{\perp} ermittelt werden. Dazu wird ein Spektrum entlang der Kristallachse aufgenommen, entlang welcher k_{\perp} bestimmt werden soll. Ein Peak aus solch einem Spektrum ist in dem eingebetteten Graph im rechten Teil der **Abbildung 2.4** zu sehen. Das Spektrum ist so ausgerichtet, dass $E_{\text{kin}}(0) = E_{\text{vac}}$ gilt. An der Energie des Peaks E_{kin} wird ein Schnitt in die freie Elektronenparabel mit dem Fußpunkt E_{vb} gelegt. Die Parabel wird dann um die Anregungsenergie $h\nu$ nach unten verschoben. Dies liefert einerseits die schon bekannte Bindungsenergie des Elektronenzustands $E_{\text{B}} = h\nu - E_{\text{kin}}$ und, viel wichtiger, den Wellenvektor $\mathbf{k}_{\perp, \text{final}}$. Da dieser Zustand $\mathbf{k}_{\text{final}}$ eventuell noch außerhalb der ersten Brillouin-Zone liegt, muss er noch in diese verschoben werden:

$$\mathbf{k}_{\text{initial}} = \mathbf{k}_{\perp, \text{final}} \quad \text{mod } \mathbf{G} \quad (2.23)$$

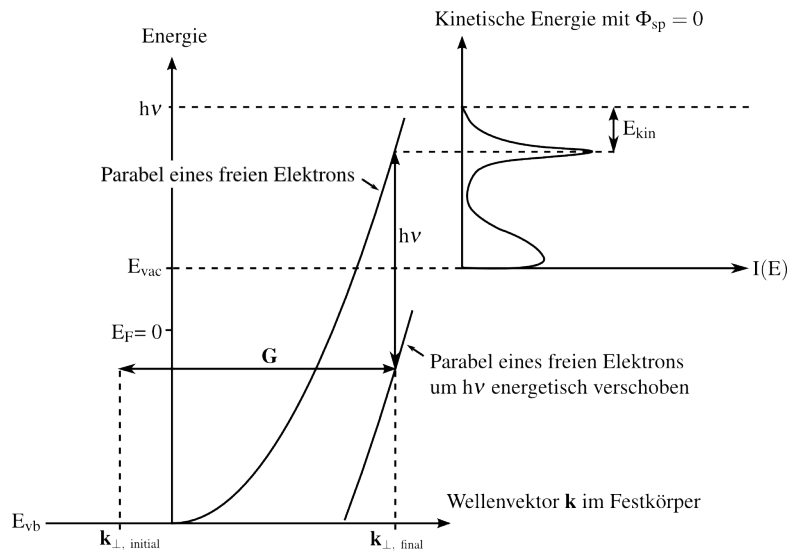


Abbildung 2.4: Bestimmung von k_{\perp} im Festkörper unter Verwendung des Modells des freien Elektrons im Endzustand. Abbildung nach [60].

Typischerweise [59] wird diese Auswertung für mehrere Peaks bei verschiedenen Anregungsenergien $h\nu$ gemacht. Mit den hier aufgezeigten Methoden ist es nun möglich, die Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ vollständig zu bestimmen.

2.1.3 Umrechnung von Winkel zu Wellenvektor bei einem ARPES-Experiment

Wie in [Abbildung 1.2](#) auf [Seite 8](#) zu sehen ist, werden bei einem winkelaufgelösten Photoemissionsexperiment (ARPES-Experiment) die Winkel ϑ , β und die kinetische Energie E der Elektronen gemessen. Die Umrechnung erfolgt für beide Winkel ϑ und β analog, deswegen wird sie hier exemplarisch nur für ϑ gezeigt.

In [Abbildung 2.5](#) ist die Geometrie für die folgende Rechnung dargestellt und es ergibt sich der Zusammenhang von ϑ und \mathbf{k} zu:

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} \\
 |\mathbf{k}| &= k = \sqrt{2mE\hbar^{-2}} \\
 k_{\parallel, \vartheta} &= k \cdot \sin \vartheta \\
 \implies k_{\parallel, \vartheta} &= \sqrt{2mE\hbar^{-2}} \sin \vartheta \tag{2.24}
 \end{aligned}$$

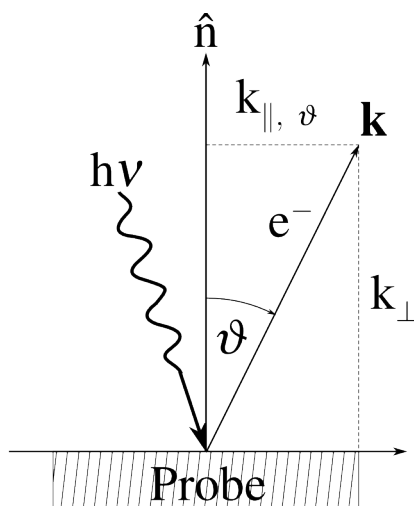


Abbildung 2.5: Darstellung der Relation von ϑ zu den Komponenten des Wellenvektors \mathbf{k} .

Die **Gleichung 2.24** ist damit die Grundlage der Auswertung jeder Bandstrukturaufnahme mittels winkelaufgelöster Photoemission [61, 62].

2.2 Elektronenoptische Linsen

Die Elektronenoptik, im Englischen allgemeiner als *charged particle optics* bezeichnet, beschäftigt sich mit der gezielten Manipulation von Bahnkurven geladener Teilchen. Diese gezielte Manipulation wird durch das Design der Potentialverläufe erreicht. Im allgemeinen Fall kann dazu eine Kombination aus statischen wie auch zeitlich variierenden elektrischen und magnetischen Feldern genutzt werden. Im weiteren Verlauf wird nur der hier relevante Fall der elektrostatischen Felder betrachtet. Dass mit diesen Feldern „Optik“ möglich ist, soll im Folgenden gezeigt werden.

2.2.1 Möglichkeit der optischen Abbildung

Das Fermat'sche Prinzip [63] sagt aus, dass ein Lichtstrahl den Weg einschlägt, bei welchem die Zeitdauer, und damit der geometrische Weg, am kleinsten ist. Mit Hilfe der Variationsrechnung ausgedrückt, muss demnach

$$\delta \int_A^B n(s) ds = 0 \quad (2.25)$$

gelten. Dabei bezeichnen A und B den Start und Endpunkt des Lichtstrahls und

$$n(s) = \frac{c_{\text{Vakuum}}}{v(s)} \quad (2.26)$$

den ortsabhängigen Brechungsindex. Mit diesem Prinzip können sehr viele lichtoptische Gesetze wie zum Beispiel Brechung und Reflexion beschrieben werden. Deswegen ist es berechtigt zu behaupten, dass, wenn das Fermat'sche Prinzip in einem System gültig ist, in diesem System auch „Optik“ in dem genannten Sinne möglich ist.

Aus der klassischen Mechanik ist das Hamilton'sche Prinzip, auch als das Prinzip der kleinsten Wirkung bezeichnet, bekannt. Es sagt aus, dass die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \underbrace{T}_{\text{kinetische Energie}} - \underbrace{V}_{\text{potentielle Energie}} \quad (2.27)$$

auf dem tatsächlich eingeschlagenen Weg extremal ist, und das bedeutet nach [65]:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = 0 \quad (2.28)$$

Im Falle der Elektrostatik ist, wie in jedem konservativen System, die Summe aus kinetischer und potentieller Energie eines Teilchens konstant [66]

$$T + V = \text{konst} \quad (2.29)$$

und damit ergibt sich zusammen mit **Gleichung 2.28**

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_1}^{t_2} (T - V) dt &= \delta \int_{t_1}^{t_2} T dt - \delta \int_{t_1}^{t_2} V dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} T dt - \delta \int_{t_1}^{t_2} (\text{konst} - T) dt \\ &= 2 \delta \int_{t_1}^{t_2} T dt \quad (\text{da die Variation einer Konstanten Null ist}) \end{aligned}$$

Analog gilt:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - V) dt = -2 \delta \int_{t_1}^{t_2} V dt$$

Das Hamilton'sche Prinzip kann damit geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt &= 2 \delta \int_{t_1}^{t_2} T dt = 2 \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} m v^2 dt \\ &= m \delta \int_{P_1}^{P_2} v ds \quad (\text{Variablensubstitution: } s(t)=t \cdot v, v dt=ds, P_{1,2}=t_{1,2}v) \end{aligned} \quad (2.30)$$

In der Elektrostatik gilt nach [68], dass die Geschwindigkeit v des Teilchens proportional zur Potentialdifferenz U zwischen Anfangs- und Endort ist, das heißt

$$v(s) \propto \sqrt{U(s)} \iff v(s) = k\sqrt{U(s)}. \quad (2.31)$$

In **Gleichung 2.30** eingesetzt ergibt das:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = m\delta \int_{P_1}^{P_2} \left(k\sqrt{U(s)} \right) ds \quad (2.32)$$

Wenn man nun den Brechungsindex $n(s)$ aus dem Fermat'schen Prinzip in **Gleichung 2.25** mit $k\sqrt{U(s)}$ identifiziert, ist in der Elektrostatik das Fermat'sche Prinzip, mit der Potentialverteilung $U(s)$ als brechende Elemente, gültig und damit ist die Bezeichnung Elektronenoptik berechtigt [69–71].

2.2.2 Bewegungsgleichung

Auch wenn das Hamilton'sche Prinzip die Trajektorie im elektrostatischen Feld \mathbf{E} eindeutig definiert, ist es für Berechnungen einfacher, die Lösungen der Bewegungsgleichung zu betrachten. Diese lautet für den statischen Fall ohne Magnetfelder:

$$\frac{d\mathbf{m}\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} \quad (2.33)$$

Das elektrische Feld \mathbf{E} ist mit dem elektrischen Potential Φ über $\mathbf{E} = -\text{grad}\Phi$ verknüpft. Wenn in dem betrachteten Raumvolumen keine Ladung vorhanden ist¹⁰, kann das Potential Φ mit Hilfe der Laplace-Gleichung

$$\text{div grad}\Phi = \Delta\Phi = 0 \quad (2.34)$$

bestimmt werden. Die Lösungen dieser partiellen Differentialgleichung werden nach [73] als harmonische Funktionen bezeichnet. Diese Funktionen haben die Eigenschaft, dass ihr Funktionswert an einer Stelle (x,y,z) als Mittelwert der Funktionswerte in der Nähe berechnet werden kann. Daraus folgt sofort die zweite Eigenschaft, nämlich dass die harmonischen Funktionen ihre Extremalwerte an den Rändern annehmen. Diese beiden Eigenschaften spielen für numerische Lösungen der Laplace-Gleichung eine sehr große Rolle [74].

Zur Bestimmung der Lösungen der Laplace-Gleichung, wie zur Lösung jeder Differentialgleichung, werden noch geeignete Randbedingungen benötigt. Dabei unterscheidet man Randbedingungen, welche das Potential Φ auf dem Rand des betrachteten Volumens angeben (Dirichlet-Typ), von Randbedingungen, welche die Ableitung des Potentials in Richtung der Oberflächennormalen angeben (Neumann-Typ) und Linearkombinationen aus beiden [73].

¹⁰Es sollte natürlich nicht auch außerhalb dieses Raumvolumens keinerlei Ladung vorhanden sein, da sonst $\Phi = 0$ gilt.

Mit diesen Randbedingungen ist die Lösung der Laplace-Gleichung eindeutig bestimmt. Das bedeutet auch, dass, wenn man (auf beliebigem Wege) eine Lösung gefunden hat, diese auch die einzige ist. In der Gesamtheit bedeutet dies, dass man bei geeigneten Randbedingungen für die Laplace-Gleichung das Potential Φ eindeutig bestimmen und damit die Elektronentrajektorie in diesem Raumbereich berechnen kann.

Für die meisten Elektrodenanordnungen in der Elektronenoptik ist eine analytische Lösung der Laplace-Gleichung nicht möglich. Deswegen wurden schon sehr früh, Anfang des letzten Jahrhunderts, eine von Fortescue und Farnsworth [75, 76] erfundene, und entscheidend von Estorff [77] verbesserte, experimentelle Methode zur Bestimmung des Potentialfeldes Φ entwickelt: der elektrolytische Trog [78, 79]. Bei diesem Verfahren wird ein skaliertes Modell der Elektrodenanordnung in ein Bad mit einem schwachen Elektrolyten gelegt. Dann werden die (skalierten) Spannungen an die jeweiligen Elektroden angelegt und mit einer Sonde das Potential in dem Elektrolyten vermessen. Mit diesen Daten kann man dann die Äquipotentiallinien der Elektrodenanordnung darstellen.

Dank leistungsfähiger Hard- und Software ist dieses experimentelle Verfahren heute nicht mehr nötig, da mit Simulationssoftware das Potential Φ und auch die Trajektorien mit großer Genauigkeit [80, 81] berechnet werden können.

2.2.3 Gauß'sche Dioptrik

Wenn man nun Äquipotentiallinien als brechende Flächen ansieht, erhält man die analoge Situationen wie in der Lichtoptik mit einem Linsensystem. Der größte Unterschied dabei ist, dass in einer lichtopischen Linse sich der Brechungsindex nur an den Grenzflächen der Linse ändert, in der Elektronenoptik sich hingegen das Potential kontinuierlich ändert. Für komplexere Systeme ist die Lösung der Bewegungsgleichung in Gleichung 2.33 analytisch nicht möglich. Eine daher sehr beliebte Näherung ist die, dass man nur achsennahe und zur optischen Achse wenig geneigte Strahlen betrachtet. Diese werden als paraxiale Strahlen bezeichnet. Damit können nach [82] folgende (äquivalente) Näherungen verwendet werden:

- Die Achse des einfallenden Elektronenbündels fällt mit der Symmetrieachse der Linse zusammen.
- Alle Brechungsebenen, Reflexionsebenen und Blenden besitzen Rotationssymmetrie.
- Alle auftretenden Winkel sind so klein, dass für sie die Kleinwinkelnäherung verwendet werden kann. Diese sagt aus, dass bei einer Taylorentwicklung der trigonometrischen Funktionen nur die linearen Terme berücksichtigt werden.

Man spricht dann von Gauß'scher Dioptrik [84].

Mit diesen Näherungen ergibt sich nach [85], dass für eine Einzellinse nur das Potential und seine Ableitungen auf der Achse in die Lösungen der Bewegungsgleichung eingehen. Damit zeigt sich hier ein wichtiger Unterschied zwischen der Lichtoptik und der Elektronenoptik: Ist

2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN

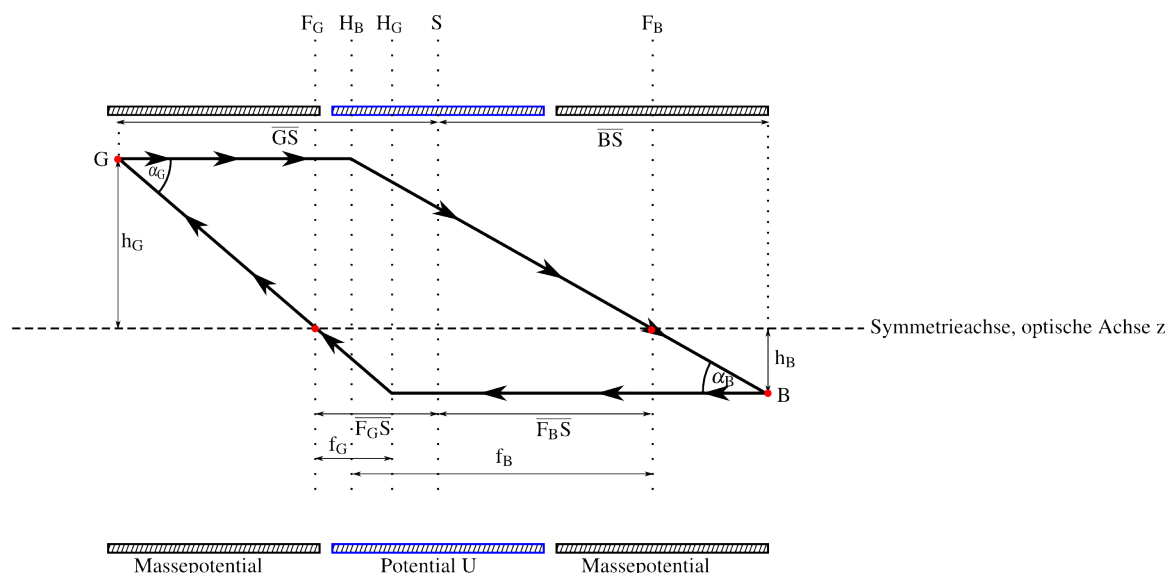


Abbildung 2.6: Hauptebenen und Kardinalpunkte einer Einzellenzlinse. Die Hauptebenen fallen dabei nicht, wie für eine „dünne“ Linse üblich, mit der Symmetrieebene S zusammen. Wenn die Ausdehnung der Linse in z -Richtung nicht vernachlässigbar ist, spricht man von einer „dicken“ Linse. Die dick gezeichneten Linien sind zwei asymptotische Strahlenverläufe. Die roten Punkte sind die vier Kardinalpunkte: Gegenstandspunkt, Bildpunkt und die beiden Fokuspunkte. Abbildung nach [87].

in der Lichtoptik sowohl die Form der Linsen als auch ihr Brechungsindex frei wählbar und unabhängig voneinander, so sind in der Elektronenoptik das Potential $\Phi(z)$ auf der z -Achse und die Form der Äquipotentiallinien voneinander abhängig, da die Form der Äquipotentiallinien auf der z -Achse durch höhere Ableitungen von $\Phi(z)$ vollständig bestimmt wird. Damit hat ein Elektronenoptiker weniger Freiheitsgrade im Design seiner Linsen als ein Lichtoptiker.

Die Gauß'sche Dioptrik soll am Beispiel einer Einzellenzlinse [14], der Standardlinse der elektrostatischen Elektronenoptik, demonstriert werden. Ihr Aufbau ist in **Abbildung 2.6** gezeigt. Dabei ist die Ebene S die Symmetrieebene des Systems und z die Symmetrieachse des Systems. Die Einzellenzlinse besteht, wie in **Abbildung 2.8a** zu sehen, aus mindestens einem Zylinderstück, auch Tubus genannt, das sich auf einem Potential U befindet. Die beiden Tuben links und rechts sind auf Massepotential, was für die Definition der Randbedingungen in der elektronenoptischen Simulationen notwendig ist. Die beiden dick gezeichneten Strahlen definieren durch ihre Schnittpunkte miteinander die Gegenstands- und Bildpunkte, und ihre Schnittpunkte mit der Symmetrieachse z definieren die Fokusebenen F_G und F_B . Die beiden Hauptebenen H_G und H_B sind durch die Schnittpunkte eines zur optischen Achse parallelen Strahls und eines Strahls durch den Brennpunkt definiert¹¹. Dabei liegen alle Ebenen parallel zur Symmetrieebene S . Die Entfernung zwischen der Symmetrieebene S und dem Gegenstandspunkt G bzw. dem Bildpunkt B ist in der Abbildung mit \overline{GS} bzw. \overline{BS} bezeichnet; ihr Abstand zur Symmetrieachse z ist h_G bzw. h_B , und der Öffnungswinkel beträgt α_G bzw. α_B . Der Abstand zwischen

¹¹Eine reale Trajektorie würde an dem Ort der Hauptebene gekrümmt sein.

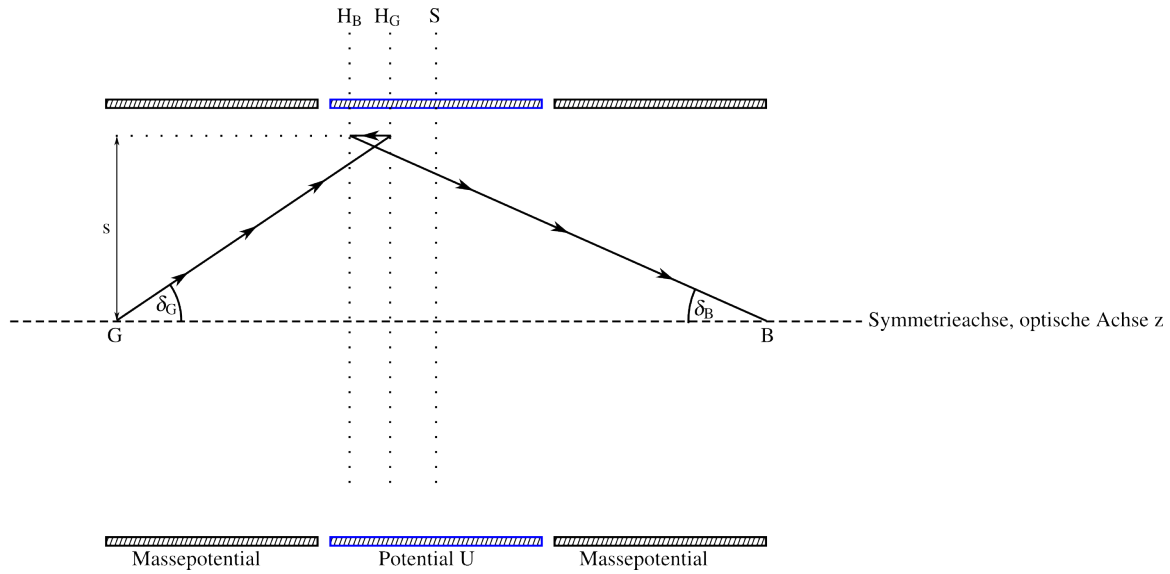


Abbildung 2.7: Einzellinse mit dem Augenmerk auf die Winkel δ_G und δ_B . Dabei wurde die Eigenschaft der Hauptebenen benutzt, dass diese sich gegenseitig punktweise wie (virtuelles) Bild und (virtueller) Gegenstand mit der Vergrößerung 1 aufeinander abbilden. Abbildung nach [88].

den Hauptebenen und den Fokusebenen wird als bildseitige Brennweite f_B und und gegenstandsseitige Brennweite f_G bezeichnet. Der Abstand der Fokusebenen zur Symmetrieebene S wird mit $\overline{F_G S}$ und $\overline{F_B S}$ bezeichnet.

Aus trigonometrischen Überlegungen in **Abbildung 2.6** folgt:

$$M_h = \frac{h_B}{h_G} = \frac{\frac{f_G}{\tan(90^\circ - \alpha_G)}}{\frac{\overline{GF_G}}{\tan(90^\circ - \alpha_G)}} = \frac{f_G}{\overline{GF_G}} \quad (2.35)$$

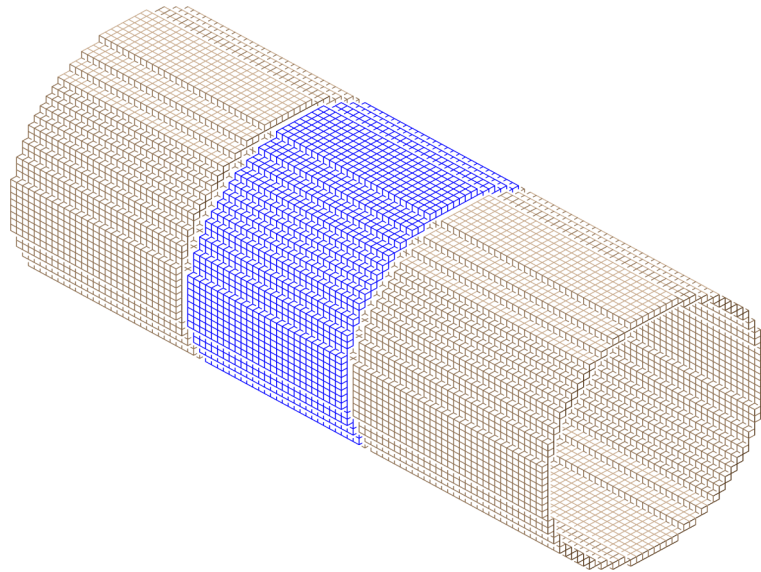
$$M_h = \frac{h_B}{h_G} = \frac{\overline{BF_B} \cdot \tan \alpha_B}{f_B \cdot \tan \alpha_B} = \frac{\overline{BF_B}}{f_B} \quad (2.36)$$

Dabei bezeichnet M_h die räumliche Vergrößerung. Analog lässt sich die Winkelvergrößerung M_δ mit **Abbildung 2.7** zu

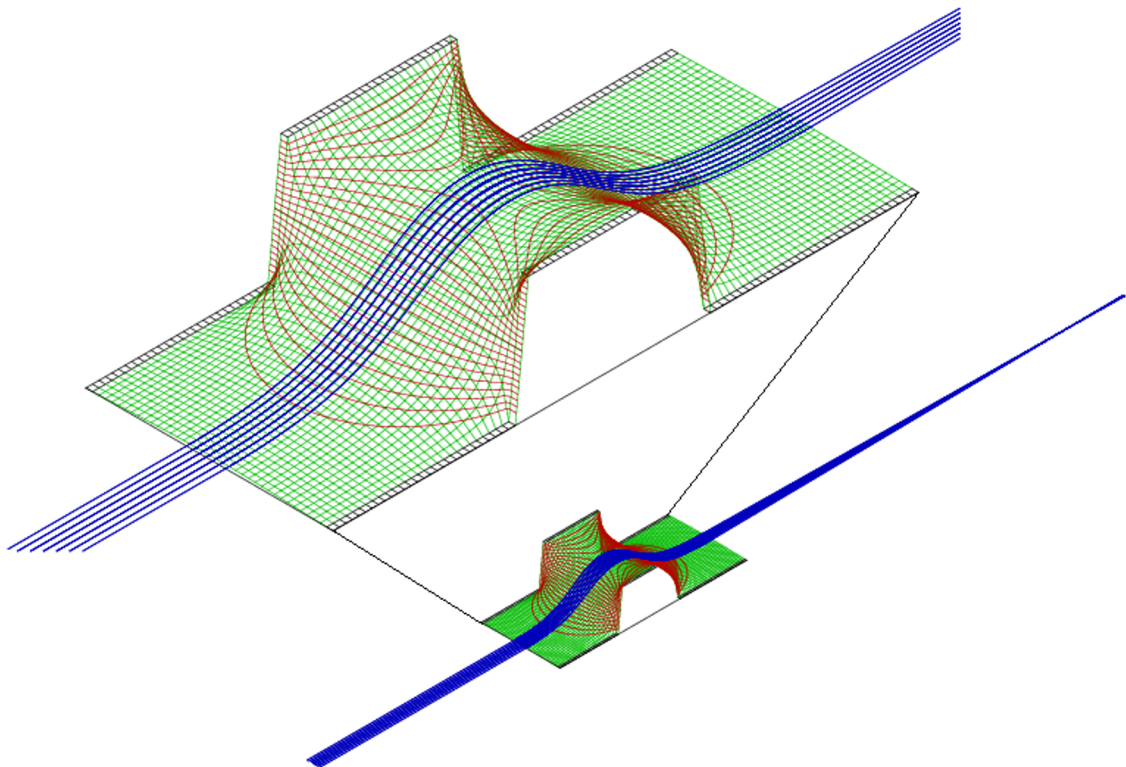
$$M_\delta = \frac{\delta_B}{\delta_G} = \frac{\arctan\left(\frac{s}{\overline{BH_B}}\right)}{\arctan\left(\frac{s}{\overline{GH_G}}\right)} \approx \frac{\overline{GH_G}}{\overline{BH_B}} \quad (2.37)$$

angeben. Beide Größen M_h und M_δ werden in **Unterabschnitt 4.2.2** für die theoretische Beschreibung eines winkelaufgelösten Linsenmodus benötigt.

Die Gauß'sche Dioptrik beschreibt die Elektronenoptik in linearer Näherung. Die dadurch auftretenden Fehler heißen analog zur Lichtoptik Aberrationen, von lat. *aberrant* »abirrend« [20]. Im folgenden sollen nun die in der elektrostatischen Elektronenoptik auftretenden Aberrationen näher behandelt werden.



a.) 3D-Ansicht einer Einzellinse. Der blaue Mittelteil ist auf dem Potential U und die beiden anderen Tuben sind geerdet.



b.) Potentialansicht der oben gezeigten Einzellinse. Dabei zeigt das grüne Gitter den Potentialverlauf und die roten Linien sind Äquipotentiallinien konstanten Abstands. Der Potentialverlauf hat die Form eines Sattels und die Elektronen werden hinter der Einzellinse fokussiert, da sie während ihres Fluges länger einer konvergierenden als einer divergierenden Kraft ausgesetzt sind.

Abbildung 2.8: Modell einer Einzellinse und ihre Potentialansicht. Beide Bilder sind mit dem Elektronenoptikprogramm SIMION und darin enthaltenen Beispieldaten erzeugt worden.

2.2.4 Aberrationen

Für die Berechnung der Aberrationen existieren zwei unterschiedliche Ansätze. Der erste besteht darin, die Näherungen der Gauß'schen Dioptrik dahingehend abzuändern, dass auch höhere Terme der Reihenentwicklung zur Lösung der Bewegungsgleichung beachtet werden. Diese Methode heißt *Bahnmethode* [89]. Der zweite Ansatz ist der Lichtoptik entlehnt und geht vom Fermat'schen Prinzip

$$\mathcal{E} = \int_A^B n(s) ds$$

der kürzesten geometrischen Weglänge aus. Ein Elektron oder Photon folgt einer Trajektorie, die den Wert \mathcal{E} des Integrals minimal¹² werden lässt. Die Idee, auch Seidel/Brunseikonal [69, 90] genannt, ist, dass man zwei infinitesimal unterschiedliche Trajektorien vergleicht, den Unterschied des Eikonals \mathcal{E} auswertet und dadurch Korrekturterme der Koordinaten gegenüber der Gauß'schen Abbildung erhält. Dabei identifiziert man die Koeffizienten der Korrekturterme mit aus der Lichtoptik bekannten Aberrationskoeffizienten. Diese Koeffizienten können dann auch, bei bekanntem Potential Φ , numerisch bestimmt werden [91]. In der Elektronenoptik mit rotationssymmetrischen,¹³ elektrostatischen Feldern sind dies nach [93] die folgenden sechs Typen:

Sphärische Aberration oder auch Öffnungsfehler Dieser Fehler tritt auf, wenn der Abstand des Elektronenstrahls zur optischen Achse z zu groß für die paraxiale Näherung in der Gauß'schen Dioptrik wird. Dabei ändert sich die Lage der Fokuspunkte auf der optischen Achse als Funktion des Abstandes der Strahlen zur optischen Achse z des Systems. Der Durchmesser des Strahls im Linsensystem wird dabei auch als Öffnung bezeichnet, daher der Name der Aberration. Sie kann durch kleine Blendenöffnungen reduziert werden.

Astigmatismus Die Abbildung ist für sagittale und meridionale Strahlen nicht gleich. Die meridionale Ebene wird von der optischen Achse und dem Hauptstrahl aufgespannt; die sagittale Ebene enthält den Hauptstrahl und steht senkrecht auf der meridionalen [94]. Es kommt bei der Abbildung zu einer Streckung des Bildes in einer der Koordinatenachsen, und damit ist die Abbildung nicht mehr symmetrisch in den beiden zur optischen Achse senkrechten Koordinatenachsen. Sie wird deswegen beim menschlichen Auge auch als Stabsichtigkeit [3] bezeichnet. Dieser Fehler verschwindet auf der optischen Achse, und nimmt mit größer werdendem Achsenabstand zu.

Bildfeldwölbung Diese Aberration ist ähnlich zum Astigmatismus, jedoch symmetrisch in den beiden Koordinaten. Die Bildebene ist nicht mehr plan sondern gekrümmt. Falls zusätzlich noch ein Astigmatismus auftritt, ergeben sich, wie in [Abbildung 2.10c](#) zu

¹²Streng genommen muss noch geprüft werden, dass die Lösung ein Minimum ist, da die Variationsrechnung lediglich zeigt das $n(s)$ den Wert \mathcal{E} des Integrals extremal macht.

¹³Falls die Rotationssymmetrie nicht streng erfüllt ist, treten weitere Aberrationen auf [92].

sehen, weiterhin eine gewölbte sagittale und eine gewölbte meridionale Bildfläche. Dieser Abbildungsfehler ist im elektronenoptischen Fall nach [95] deutlich stärker als im lichtoptischen. Siehe dazu auch [96].

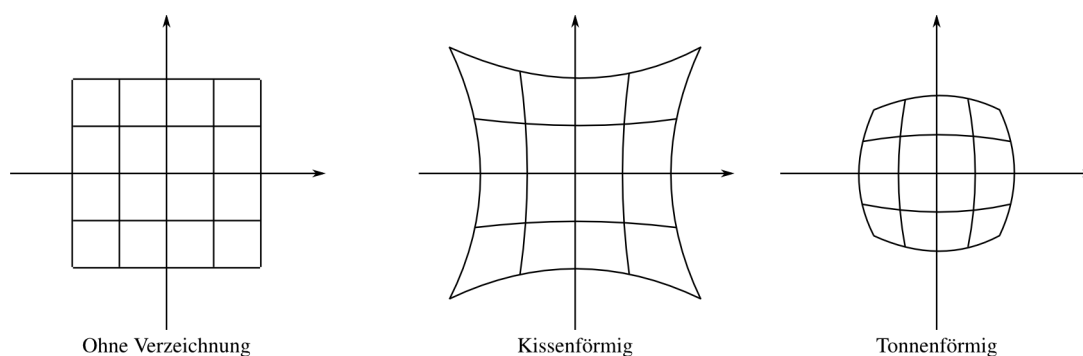
Verzeichnung Der Bildpunkt in der Gauß'schen Bildebene ist in radialer Richtung verschoben, die Bildebene selbst ist aber nicht verschoben und immer noch plan. Man unterscheidet dabei die kissenförmige und die tonnenförmige Verzeichnung. Dies entspricht einer Veränderung des Vergrößerungsmaßstabs über die Bildfläche hinweg.

Koma Die Abbildung von konzentrischen Kreisen wird dabei so verzerrt, dass sich die Radien der abgebildeten Kreise ändern und die Orte der Mittelpunkte um den Betrag des jeweils doppelten Bildradius verschieben. Dadurch erhält das Bild, siehe **Abbildung 2.9d**, einen „Schweif“ mit einem Öffnungswinkel von 60° . Falls das Strahlenbündel parallel zur optischen Achse einfällt, entspricht dieser Fehler der sphärischen Aberration. Ist das Strahlenbündel zur z -Achse geneigt, entsteht Koma. Analog zur sphärischen Aberration kann dieser Fehler, unter anderem, durch genügend kleine Blenden korrigiert werden.

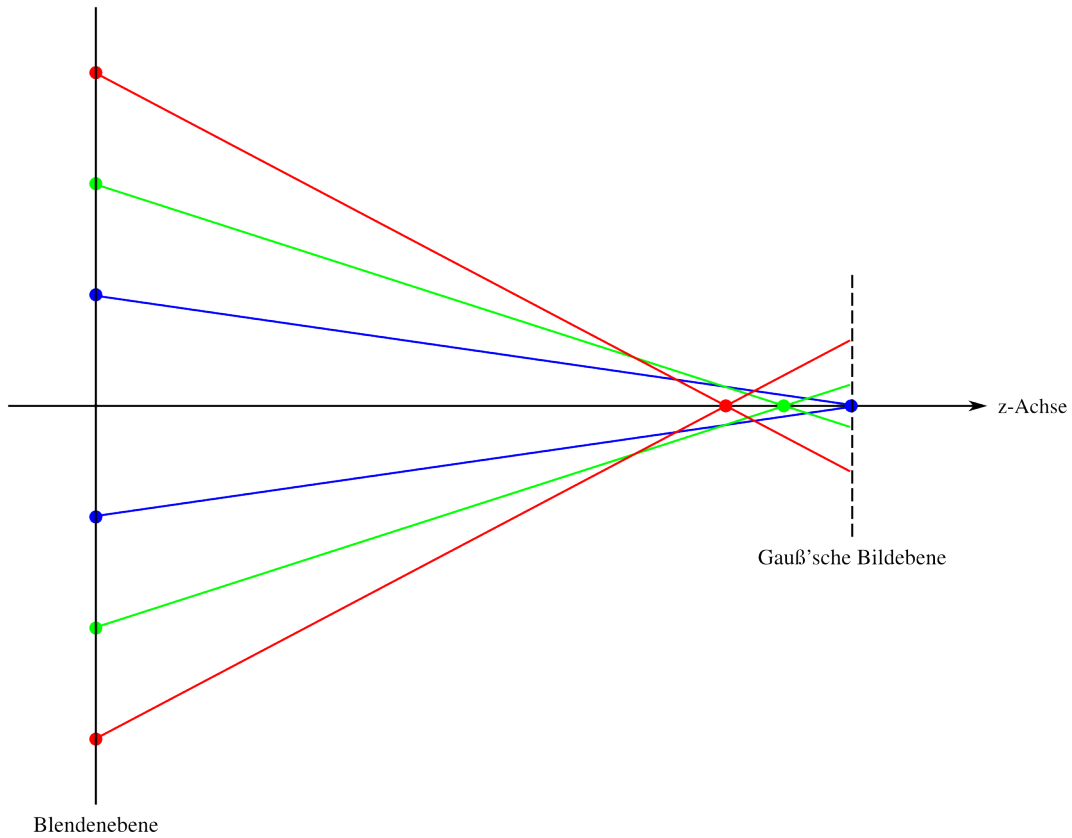
Diese Aberrationen werden auch als *geometrische Aberrationen* bezeichnet. Davon unabhängig ist die chromatische Aberration.

Chromatische Aberration Dieser Fehler tritt auf, wenn der Elektronenstrahl verschiedene Elektronenenergien enthält. Dann sind Fokus- und Bildpunkt von der Elektronenenergie abhängig und damit nicht für alle Elektronen des Strahls gleich.

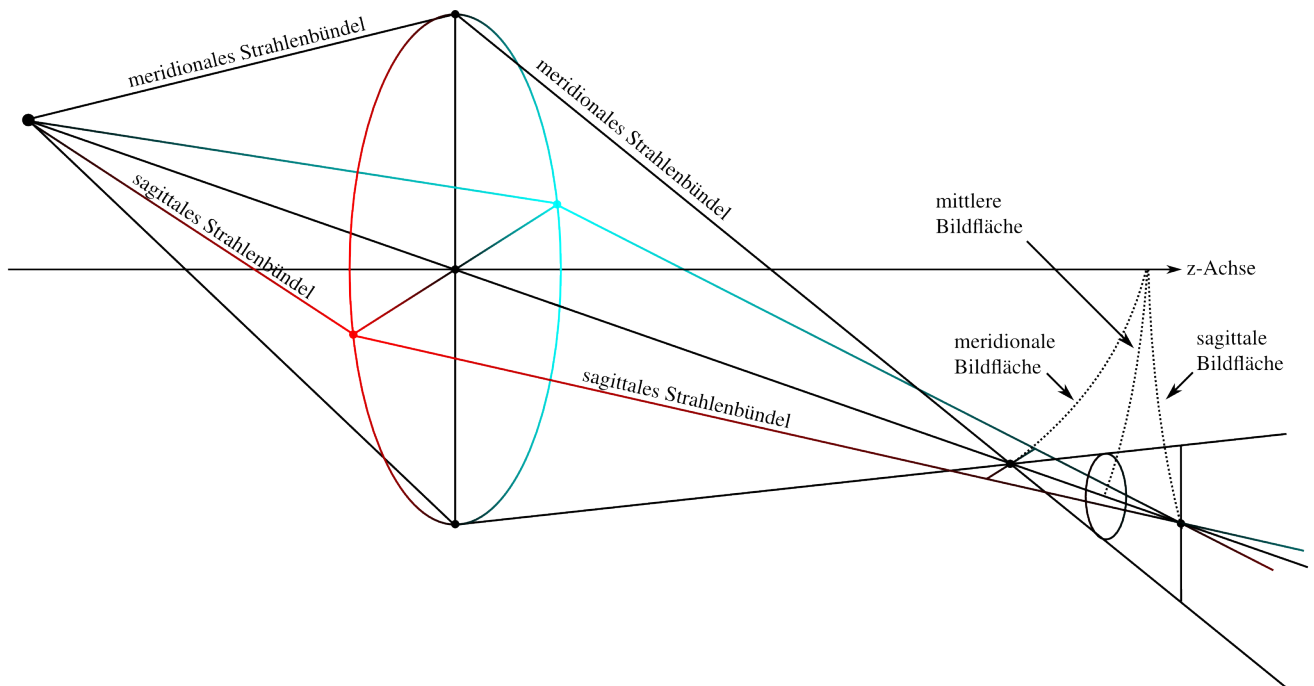
In den Abbildungen **2.9a-d** sind die geometrischen Aberrationen graphisch dargestellt. Alle Aberrationen können durch optimiertes Linsendesign, das heißt Design der Potentialverteilung in der Linse, minimiert werden. Eine vollständige Korrektur der sphärischen und chromatischen Aberration ist jedoch, im Gegensatz zur Lichtoptik, für rotationsymmetrische und raumladungsfreie Felder nach [15] prinzipiell nicht möglich.



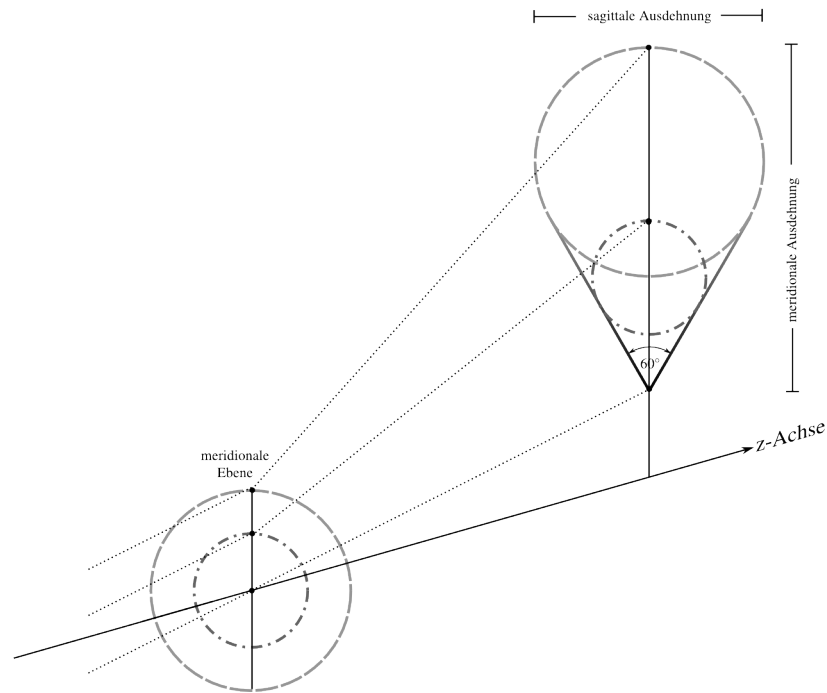
a.) Verzeichnung. Die Vergrößerung in der Bildebene hängt vom Abstand zur Bildmitte ab. Die Achsen verlaufen senkrecht zur optischen Achse z . Abbildung nach [93].



b.) Sphärische Aberration. Die Strahlen werden nur für kleine Abstände zur optischen Achse z auf die Gauß'sche Bildebene abgebildet. Abbildung nach [93].



c.) Astigmatismus und Bildfeldwölbung. Dabei werden sagittale und meridionale Strahlen in unterschiedliche Bildflächen abgebildet. Der Farbverlauf deutet die Dimension senkrecht zur Zeichenebene an. Abbildung nach [93].



d.) Koma. Konzentrische Kreise in der Blendenebene werden so abgebildet, dass ihre Mittelpunkte in der Bildebene von ihren jeweiligen Radien in der Blendenebene abhängen. Abbildung nach [93, 99, 100].

Abbildung 2.9: Schematische Darstellung verschiedener Aberrationen. Dabei bezeichnet die z -Achse die optische Achse der rotationssymmetrischen Linse, und alle nicht benannten Achsen stehen senkrecht zu dieser.

3 Hemisphärischer Elektronen-Energie-Analysator

3.1 Allgemeines

Dieses Kapitel soll einerseits den experimentellen Aufbau inklusive des hemisphärischen Halbkugelanalysators, kurz Analysator, erklären. Dies ist für das Verständnis der Simulationen unerlässlich.

Wie schon in [Unterabschnitt 1.2.2](#) kurz erwähnt, müssen Photoemissionsexperimente wegen der Oberflächenempfindlichkeit der Probe im UHV stattfinden. Aber selbst wenn die Probe an Luft sauber bleiben würde, würden die aus der Probe austretenden Elektronen nie mit ihrer unveränderten Austrittsenergie aus der Probe das Spektrometer erreichen, da sie sofort mit den Molekülen im umgebenden Gas stoßen würden. Selbst bei der unrealistischen Annahme von nur elastischen Stößen, würde der Austrittswinkel der Elektronen aus der Probe nicht erhalten bleiben, und damit jegliche winkelaufgelöste Messung unmöglich gemacht werden.¹⁴

Alle Experimente werden aus diesen Gründen in einer Vakuumkammer durchgeführt. Dabei ist der Druck üblicherweise, je nach Anforderung, zwischen $1 \cdot 10^{-8}$ mbar und $1 \cdot 10^{-11}$ mbar. Diesen Druckbereich erreicht man mit einer Kombination aus Turbomolekularpumpen, Ionengetterpumpen und Titansublimationspumpen. Für Drücke niedriger als $1 \cdot 10^{-9}$ mbar spielt der Wasserdampfanteil der Restgase in der Kammer eine dominante Rolle. Dieser Anteil wird nach [\[103\]](#) durch ein „Ausheizen“ genanntes Verfahren entfernt. Bei dieser Methode wird die ganze Kammer auf Temperaturen oberhalb 130°C gebracht und ein bis zwei Tage auf dieser Temperatur gelassen. Dadurch wird alles Wasser im Restgas, und damit indirekt auch von den Wänden, abgepumpt, da sich Kammervolumen und Wand immer im thermodynamischen Gleichgewicht befinden.

3.1.1 Elektronenkanone und Winkelblende

In [Abbildung 3.1](#) ist eine schematische Zeichnung der Kammergeometrie von oben zu sehen. Dabei sind nur die in dieser Arbeit relevanten Komponenten eingezeichnet. Die Elektronenkanone besteht aus einem Filament als Elektronenquelle, einer dreistufigen Elektronenlinse

¹⁴Außerdem kann der Analysator nach [\[101\]](#) nur bei Drücken von unterhalb $1 \cdot 10^{-7}$ mbar benutzt werden.

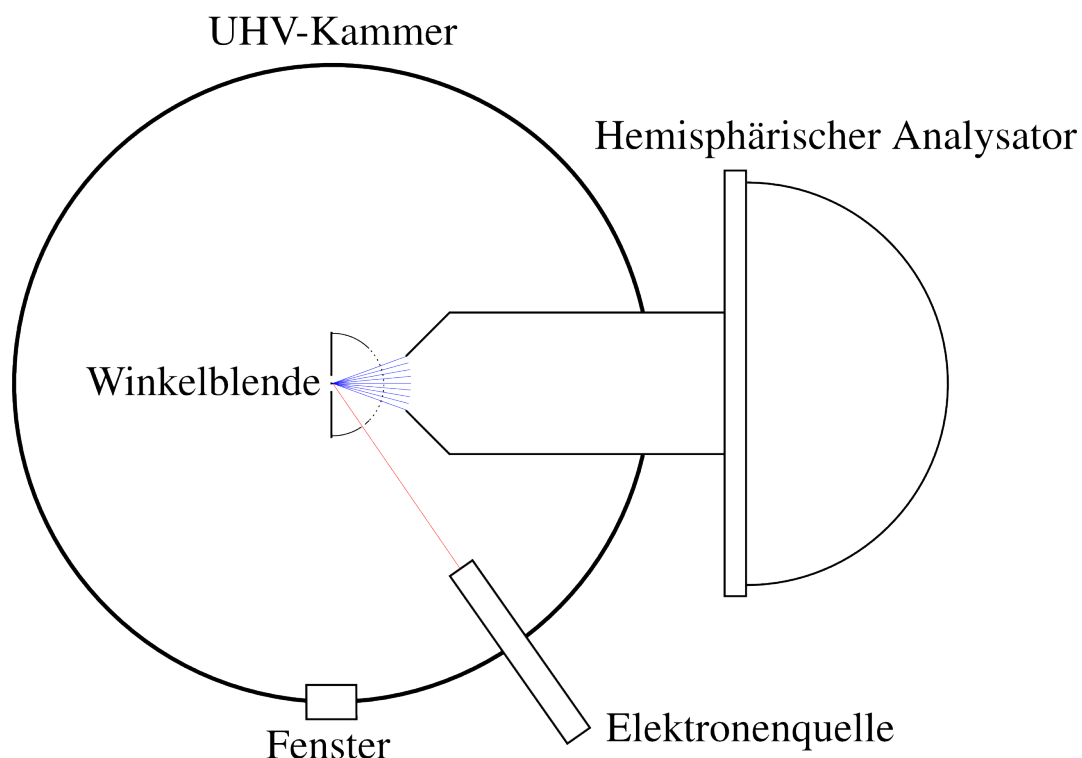


Abbildung 3.1: Schematische Kammergeometrie von oben. Das Fenster ist der Betrachterort aus **Abbildung 3.2**. Die Mitte der Elektronenquelle, der Winkelblende und der Analysatorlinse befinden sich dabei in einer Ebene.

zur Fokussierung, einem Wehnelt-Zylinder zur Elektronenflussregelung und zwei Paaren von je zwei Ablenkplatten. Diese Ablenkplatten sind hintereinander im rechten Winkel angeordnet und ermöglichen es, den Elektronenstrahl unabhängig in der Horizontalen und der Vertikalen zu verschieben und so eine genaue Justage des Elektronenstrahls vorzunehmen. Die so erzeugten Elektronen (in **Abbildung 3.1** rot eingezeichnet) werden dann auf ein Stück Metall, welches sich in der Mitte der Blende befindet und als Probe dient, gelenkt. Diese Probe ist $100\ \mu\text{m}$ breit, die horizontale Ausdehnung in **Abbildung 3.3c**, und hat eine plane Oberfläche.

Für Testzwecke des winkelaufgelösten Linsenmodus ist es erforderlich, Elektronen mit definierter Winkelstruktur zu erzeugen. Dies wird mit der oben genannten Winkelblende erreicht.¹⁵ Sie wird wie in **Abbildung 3.1** gezeigt vor dem Analysator montiert. An der Probe in der Winkelblende werden die rot eingezeichneten Elektronen aus der Elektronenquelle gestreut. Die dabei auftretenden Streuprozesse sind sowohl elastisch als auch inelastisch; man nutzt

¹⁵Eine ähnliche Winkelblende wird auch in [104] verwendet.

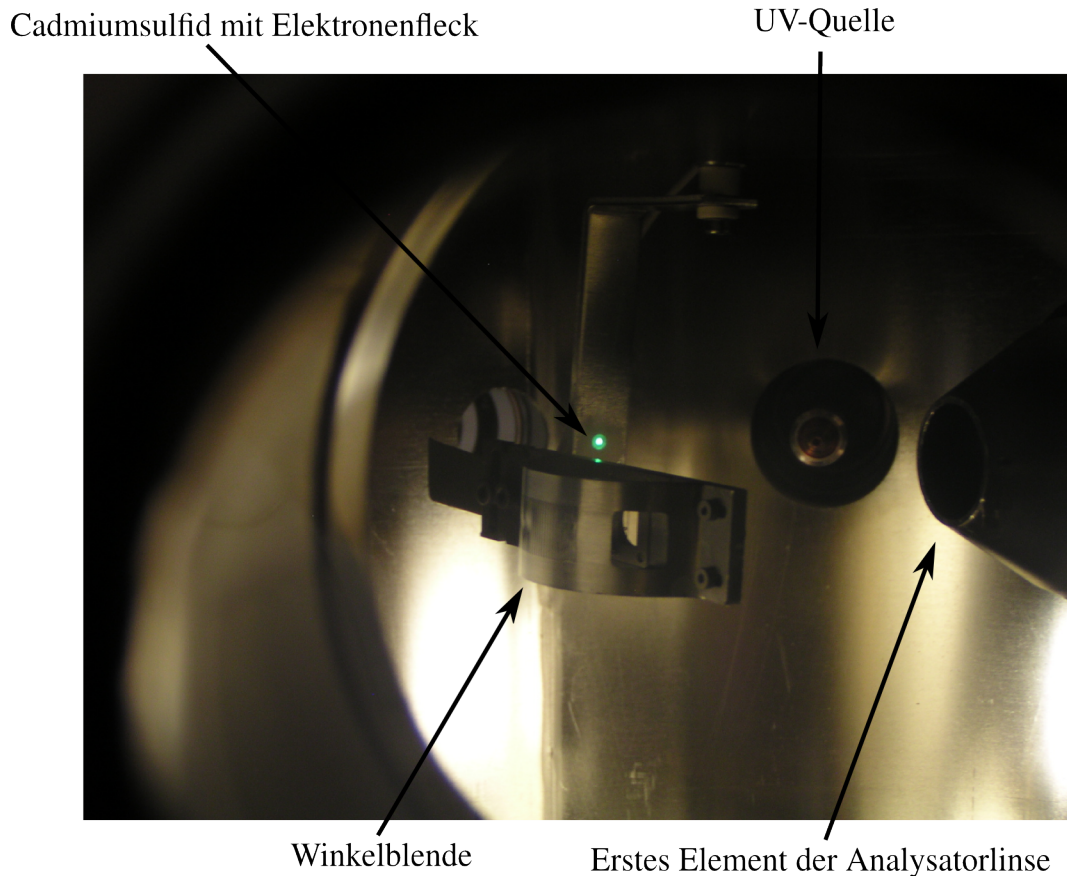


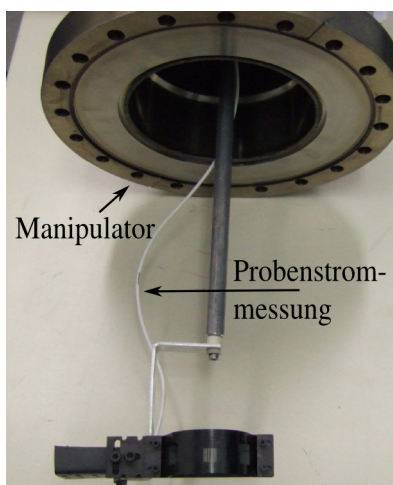
Abbildung 3.2: Die Kammer von innen. Dabei ist die Elektronenkanone zwischen Betrachter und dem Analysator wie in [Abbildung 3.1](#) gezeigt. Ein Teil der Winkelblendenhalterung wurde mit Cadmiumsulfid bestrichen. Dieses sendet bei Beschuss mit Elektronen sichtbares Licht aus (Kathodolumineszenz). Mit der Sichtbarkeit der Elektronen auf der Winkelblendenhalterung wurde die Justage der Winkelblende erheblich vereinfacht. In der Abbildung ist die Winkelblende so gedreht, dass die Höhe des Elektronenstrahls justiert werden kann.

aber nur die inelastisch gestreuten Elektronen, da ein unstrukturiertes Spektrum im allgemeinen besser geeignet ist. Die so gestreuten Elektronen treffen dann auf ein dünnes Molybdänblech mit gleichmäßig verteilten Schlitzen. Diese Schlitze sind in einem solchen Abstand, dass sie mit der Probenoberfläche als Referenzpunkt einen Abstand von 2° einnehmen (siehe [Abbildung 3.3](#)). Die hier verwendete und in den Abbildungen [3.1](#) und [3.3](#) gezeigte Winkelblende deckt einen Bereich von 52° ab, dabei ist in der Mitte der Blende ein Schlitz und kein Steg, damit auch Elektronen bei 0° die Winkelblende passieren können. Zur Unterdrückung von Sekundärelektronen, und damit die Winkelblende eine überall gleichgroße Austrittsarbeit besitzt, ist sie vollständig mit einer dünnen Graphitschicht überzogen.

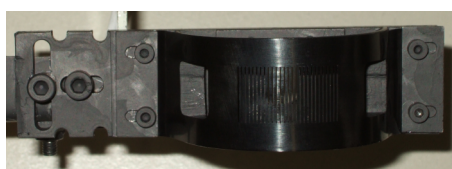
Die Winkelblende ist auf einem 3-Achsen Manipulator inklusive Drehdurchführung montiert. Dadurch ist es möglich, sie in allen drei Raumrichtungen zu bewegen und um den Probenort zu drehen. Ferner kann die Verkipfung der Winkelblende verändert werden, um kleine mecha-

3 HEMISPHERISCHER ELEKTRONEN-ENERGIE-ANALYSATOR

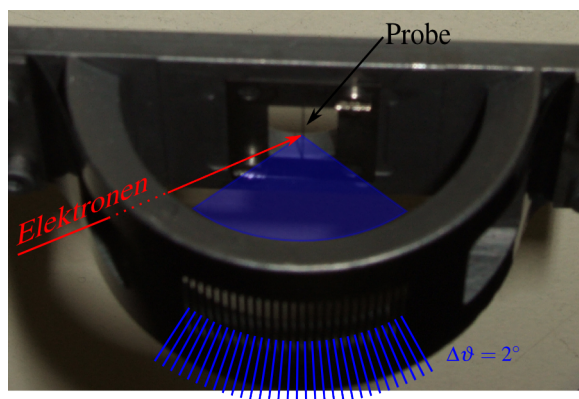
nische Abweichungen der Gesamtkonstruktion ausgleichen zu können. Das in **Abbildung 3.3** gezeigte weiße Kabel dient dazu, den Probenstrom der Winkelblende zu messen. Mit dieser Strommessung ist es möglich, unabhängig vom Analysator zu prüfen, ob die Elektronen aus der Quelle die Winkelblende erreichen.



a.) Winkelblende auf dem Manipulator montiert



b.) Frontalansicht der Winkelblende



c.) Strahlengang mit der Winkelblende

Abbildung 3.3: Winkelblende in drei verschiedenen Ansichten. **a.)** zeigt die Winkelblende auf dem Manipulator montiert, das weiße Kabel dient der Probenstrommessung. **b.)** zeigt die Frontansicht, vom Analysator aus gesehen. In **c.)** sind die Elektronenbahnen angedeutet. Dabei kommt der rote Strahl von der Elektronenquelle und fällt durch die seitliche Aussparung der Blende ein. Die gestreuten Elektronen fallen durch die Winkelblende (blau) und ergeben ein Muster im Abstand von 2° in Richtung Analysator.

3.2 Halbkugelanalysator mit vorgeschalteter Elektronenlinse

3.2.1 Überblick

In [Abbildung 3.4](#) ist ein CAD-Modell eines Analysators vom Phoibos-Typ zu sehen. Die dabei auftretenden Bauteile werden im Folgenden kurz erklärt. Sowohl die Hemisphären als auch die Linse werden in den nächsten Kapiteln aufgrund ihrer Relevanz separat dargestellt.

Arbeitsabstand Dies ist der für einen Linsenmodus konstante Abstand zwischen Probe und Linse.

Linsenelemente Die den Halbkugeln vorgeschaltete Elektronenlinse enthält 10 Linsenelemente, auch Tuben genannt. Die Potentiale dieser 10 Tuben definieren (zusammen mit der mechanischen Konstruktion) den verwendeten Linsenmodus. Die Bezeichnung erfolgt, wie in [Abbildung 3.4](#) angedeutet, mit T_1 bis T_{10} vom ersten konusförmigen Tubus beginnend.

Iris Dies ist eine Blende mit variablem Durchmesser. Sie dient nach [\[101\]](#) dazu, im nicht-winkelauflösenden Modus störende Randstrahlen zu eliminieren, und damit auch zur Begrenzung sphärischer Aberrationen.

Eintrittsspalt Da die Güte und Art der Abbildung der Halbkugeln von der räumlichen Verteilung der eintreffenden Elektronen abhängt, kann mit verschiedenen Spaltgrößen und -formen (gekrümmt oder gerade) diese räumliche Verteilung in gewissen Grenzen verändert werden.

Justagefenster Mit diesem Fenster kann man durch die Hemisphären und die Linse auf die Probe sehen. Da die Mitte dieses Fenster auf der optischen Achse der Linse liegt, kann man damit sehr gut die Position der Probe und des sichtbar gemachten Quellflecks prüfen.

Hemisphären Hierbei handelt es sich um zwei konzentrische Halbkugeln mit Radius R_1 und R_2 auf den Potentialen V_1 und V_2 . Das elektrische Feld zwischen den Halbkugeln ist nach [\[28\]](#)

$$E(r) = (V_1 - V_2) \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1} \frac{1}{r^2} \quad (3.1)$$

und hat den gleichen Verlauf wie ein Kugelkondensator, und damit einer Punktladung. Somit hat dieses Potential die typische $\frac{1}{r}$ -Abhängigkeit, wie sie auch in der klassischen Mechanik bei der Behandlung der Planetenbewegung auftritt [\[106\]](#). Deswegen sind die hier auftretenden Elektronenbahnen (unter Vernachlässigung von Randeffekten an den Hemisphärenrändern) auch Keplerbahnen.

3 HEMISPHERISCHER ELEKTRONEN-ENERGIE-ANALYSATOR

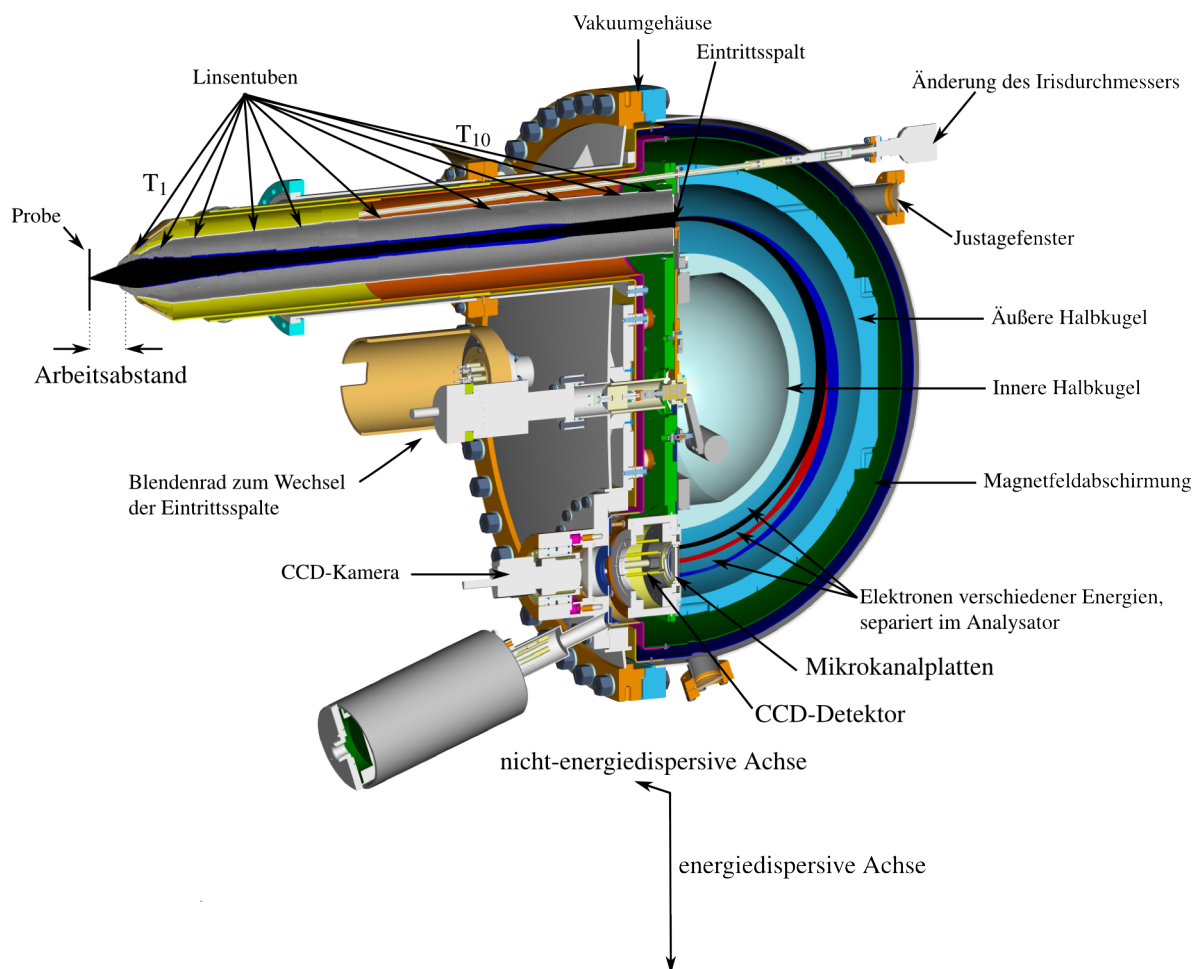


Abbildung 3.4: CAD-Modell eines Analysators vom Phoibos-Typ der Firma SPECS. Die unterschiedlichen Farben der Elektronen stehen für verschiedene Startenergien E_{kin} . Erläuterungen siehe Text.

Magnetfeldabschirmung Zur Reduzierung störender äußerer Magnetfelder, vor allem auch des Erdmagnetfeldes, ist der Analysator von einer Hülle aus hochpermeablem Material, μ -Metall genannt, umgeben. Dies führt die Magnetfeldlinien um das Innenvolumen des Analysators, und infolgedessen auch um die Elektronenbahnen herum [107].

CCD-Detektor Nach einer Abbildung in den Hemisphären werden die aus der Linse kommenden Elektronen im Detektor nachgewiesen. Dabei ist der hier verwendete Typ ein im Mikrometerbereich ortsauflösender Detektor, in dem die Elektronen mit zwei Mikrokanalplatten, engl. *channelplates*, vervielfacht (Verstärkungsfaktor nach [108] je $1 \cdot 10^4$) und dann auf einen Phosphorschirm gelenkt werden. Dieser Phosphorschirm ist auch kathodolumineszent. Die dabei entstehenden Photonen werden schlussendlich mit einer CCD-Kamera aufgenommen. Das so erhaltene zweidimensionale Bild hat eine

Abmessung von 640 Pixel in energiesdispersiver und 480 Pixel in nicht-energiesdispersiver Richtung. Die drei verschiedenfarbigen Elektronenstrahlen in [Abbildung 3.4](#) besit-

3.2 HALBKUGELANALYSATOR MIT VORGESCHALTETER ELEKTRONENLINSE

zen unterschiedliche kinetische Energien und werden in Richtung der energiedispersiven Achse, die aus diesem Grunde so heißt, in den Hemisphären energetisch dispergiert und damit separiert. Mit einer geeigneten Eichung kann das so aufgenommene Bild mit einer Energie- und Winkelskala in den physikalischen Einheiten [eV] und [°] versehen werden.

Wenn man nun mit der im letzten Kapitel beschriebenen Winkelblende und der Elektronenkanone ein Energie-Winkel-Bild mit dem CCD-Detektor aufnimmt, entsteht das Bild von **Abbildung 3.5**. Deutlich zu sehen sind die kontinuierlichen Linien in Energierichtung und die Streifen in Winkelrichtung; letztere kommen durch die im 2° -Abstand vorhandenen Schlitze der Winkelblende, siehe auch **Abbildung 3.3**, zustande. Zum Verständnis der Trapez-Form des Bildes ist eine tiefergehende Behandlung des Analysators angebracht.

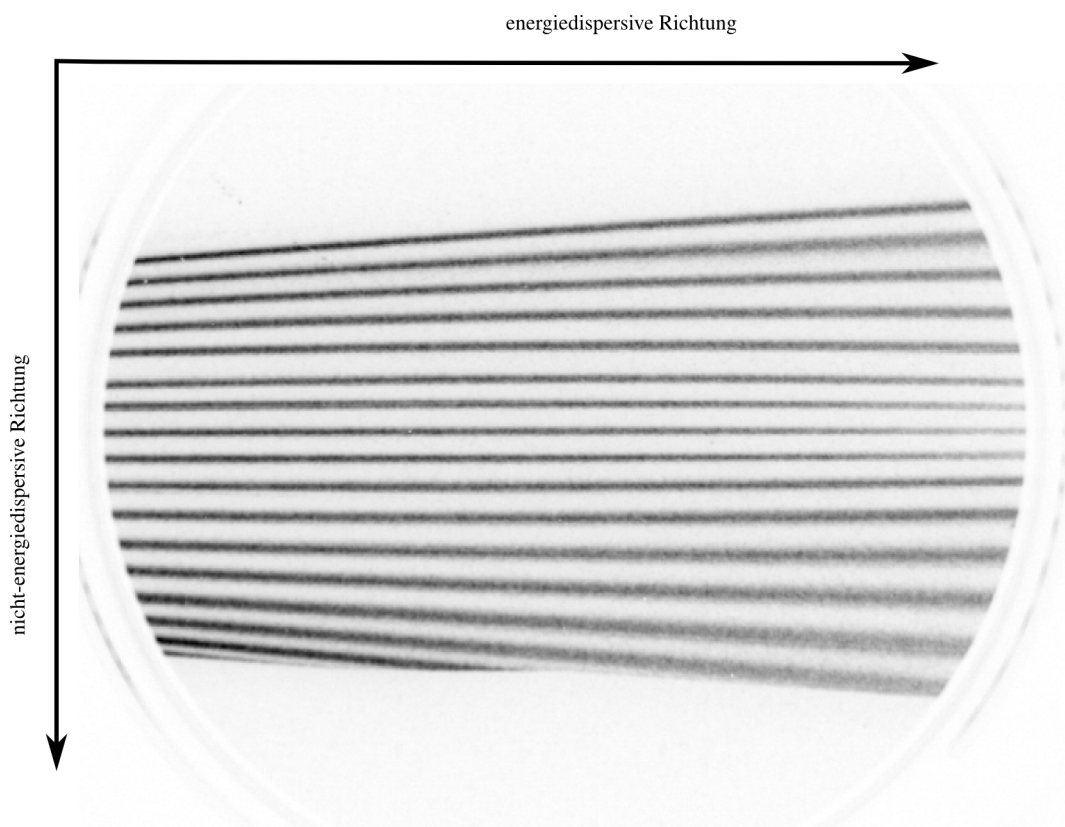


Abbildung 3.5: Beispielhafte Aufnahme eines Detektorbildes mit der Winkelblende. Die nicht-energiedispersive Richtung ist bei dem hier verwendeten Linsenmodus eine Winkelachse. Das bedeutet, dass die blauen Elektronenstrahlen aus **Abbildung 3.3** in der Linse und dem Analysator so abgebildet werden, dass sie winkelsepariert auf dem Detektor auftreffen. Da die Winkelblende nur Elektronen im 2° -Abstand durchlässt, entsteht dieses typische Muster.

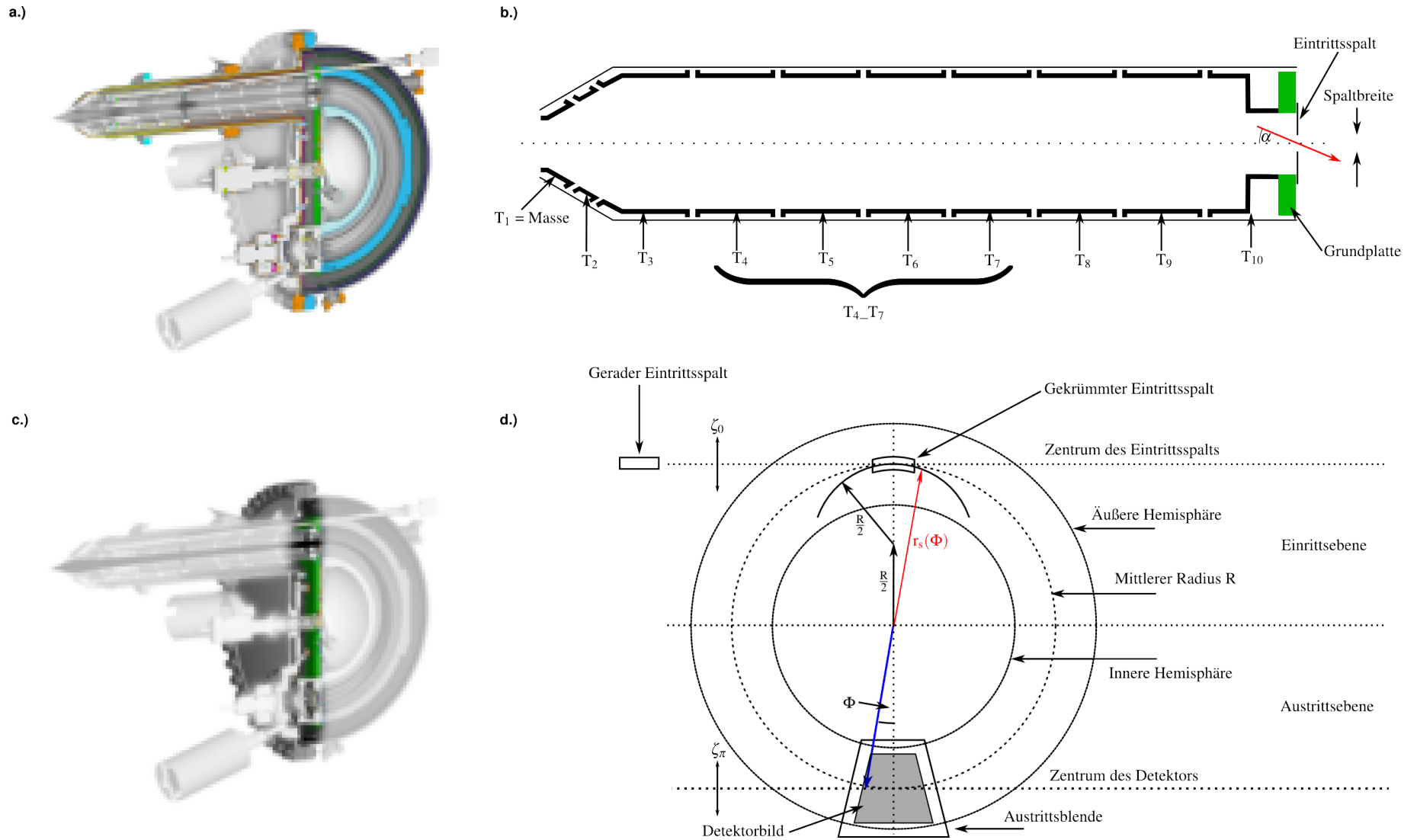


Abbildung 3.6: Detailzeichnungen des Analysators. In a.) ist die Schnittebene hervorgehoben. In dieser Ebene befindet sich der Querschnitt der Linse in b.). Darin sind die Linsentuben benannt. Der Eintrittsspalt ist angedeutet, und der Emittanzwinkel α zusammen mit einer Elektronenbahn (rot) eingezeichnet. Das grüne Rechteck ist die Grundplatte (das mechanische Teil auf dem die Hemisphären sitzen), die auch in a.) und c.) grün gezeichnet ist. In c.) ist die Eintritts- und Austrittsebene des Analysators zu sehen. Es sind auch beide Spalttypen und die Konstruktion der gekrümmten Spalte eingezeichnet (nach [109]). Dabei sind auch die Abstände vom Zentrum des Eintrittsspalts ζ_0 und des Austrittsspalt ζ_π aus Gleichung 3.2 eingezeichnet.

3.2.2 Die Hemisphären des Analysators

Die Hemisphären erzeugen ein elektrisches Potential der $\frac{1}{r}$ -Form. Mit diesem Potential werden in den Analysator eintretende Elektronen je nach ihrer kinetischen Energie verschiedene Keplerbahnen beschreiben. Die Hemisphären besitzen außerdem die Eigenschaft, einen Punkt in der Eintrittsebene wieder auf einen Punkt in der Austrittsebene abzubilden; diese Eigenschaft wird nach [28] als zwei-dimensional fokussierend bezeichnet.

Mit **Abbildung 3.6d** und der Bezeichnung der Energie der Mittentrajektorie als Durchlassenergie E_p ergibt sich nach Gleichung 9 aus [109] die genäherte Bewegungsgleichung für ein Elektron der Energie E in der Ebene zu:

$$\zeta_\pi = \zeta_0 - 2\alpha^2 + 2\frac{E - E_p}{E_p} \quad (3.2)$$

Der Winkel α wird als Emittanzwinkel bezeichnet. Es fällt dabei auf, dass ein Elektron, welches in der Mitte der Eintrittsebene mit der Energie E_p startet, nur für $\alpha = 0$ in die Mitte der Austrittsebene (das heißt $\zeta_\pi = \zeta_0$) abgebildet wird. Da die Mitte der Austrittsebene durch die Energie der Mittentrajektorie mit $E = E_p$ definiert ist, bedeutet dies, dass ein von Null verschiedener Winkel α die Teilchenenergie leicht verfälscht. Damit geht der Winkel α in die Energieauflösung¹⁶ ein. Die Minimierung dieses Winkels wird kann einerseits mit passenden Blenden in der Linse und andererseits durch eine geeignete elektronenoptische Abbildung in der Linse erreicht werden.

Die Form der Eintrittsspalte hat sowohl auf die Energieauflösung als auch auf die Art der Winkelabbildung einen Einfluss. Nach [109] und **Abbildung 3.6d** werden Elektronen mit gleicher kinetischer Energie, die sich in der Eintrittsebene auf einer Kurve der Form

$$r_s(\Phi) = R(2 - \sec \Phi) \quad (3.3)$$

befinden, in der Austrittsebene auf eine Gerade abgebildet. Das bedeutet, dass die vom Detektor gemessene Energieverteilung der Elektronen so deutlich schmaler ist als mit einem geraden Spalt. Hierbei bezeichnet R den Radius der Mittentrajektorie; und in linearer Näherung der **Gleichung 3.3** ergibt sich ein Kreissegment mit Radius $R/2$.

Bei einem winkelabbildenden Linsenmodus haben diese gekrümmten Spalte jedoch einen Nachteil. Durch die Krümmung der Spalte kommt es zu einer Fehlinterpretation der β -Winkelinformation¹⁷, die je nach Größe des Winkels und Analysatorradius R variiert. Qualitativ ist der Unterschied zwischen geraden und gekrümmten Spalten in den Abbildungen **3.7a-d** zu sehen. Diese Bilder wurden aus einer Simulation gewonnen. Dabei wurden die Startelektronen als Gitter mit konstantem Abstand in Energie und Winkelrichtung definiert, und der β -Winkel wurde gaußverteilt um 0° mit einer Halbwertsbreite von 5° variiert. Man sieht bei Verwendung der krummen Spalte, dass die vertikalen Linien, das sind die Elektronen konstanter Energie,

¹⁶Das ist die kleinste zu unterscheidende Energiedifferenz.

¹⁷In **Abbildung 1.2** auf **Seite 8** wurde der Winkel eingeführt.

in diesem Falle gerade sind. Das ist der im letzten Absatz dargestellte positive Effekt der gekrümmten Spalte auf die Energieauflösung. Dies ist der einzige offensichtliche Unterschied zwischen Bildern mit den gekrümmten und den geraden Spalten. Wenn man nun die Histogramme der β -Winkel von den Elektronen, welche den Analysator passieren konnten für gerade und krumme Spalte vergleicht, stellt man einen Unterschied fest. Das Histogramm der β -Winkel ist für den Fall der geraden Spalte symmetrisch um 0° . Das würde man auch aus Symmetriegründen vermuten. Für den Fall der gekrümmten Spalte ist die Akzeptanz für positive ¹⁸ β -Winkel größer. Dies bedeutet, dass das so aufgenommene Bild die Informationen der Probe unsymmetrisch in β wiedergibt. Dies ist ein Problem, da damit der Vergleich der Daten mit verschiedenen β -Winkeln deutlich erschwert oder eventuell gar unmöglich gemacht wird. Aus diesen Gründen werden für winkelaufgelöste Messungen in den meisten Fällen gerade Spalte verwendet, auch wenn dies auf Kosten der Energieauflösung geht.

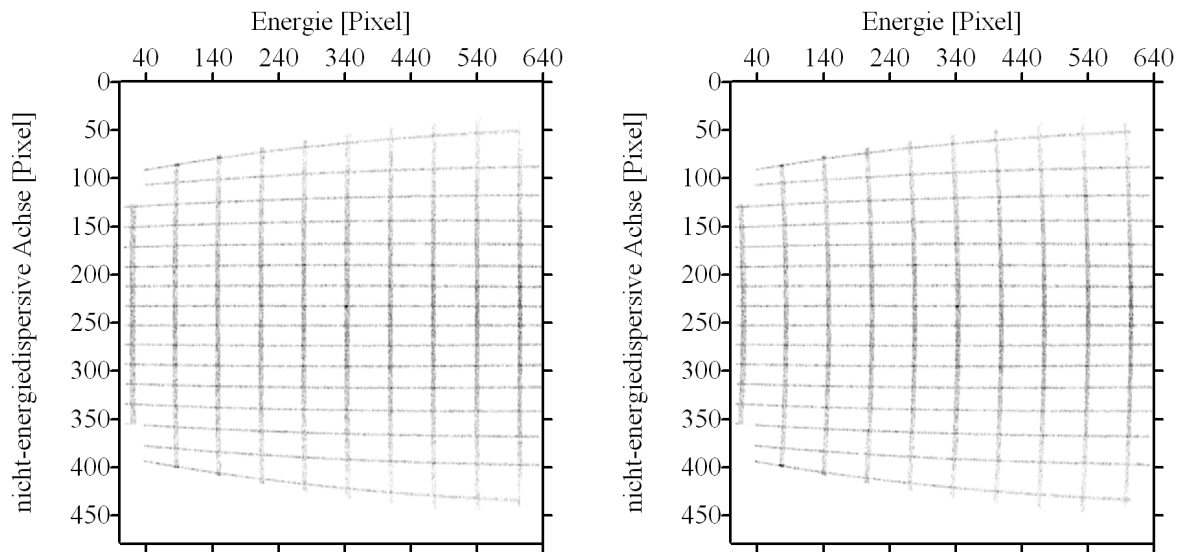
Eine weitere Eigenschaft der Hemisphärenabbildung ist der sogenannte *Trapez-Effekt*. Die Hemisphärenabbildung besteht einerseits aus der Punkt-zu-Punkt Abbildung des Eintrittsspalt auf die Austrittsebene und andererseits aus der energetischen Dispersion der Elektronen in den Hemisphären. Wenn nun Elektronen verschiedener Energien (und mit vereinfachend angenommenem $\alpha = 0$) vom Eintrittspalt ausgehend abgebildet werden, kann ihr Auftreffort in der Austrittsebene mit der in [Abbildung 3.6d](#) gezeigten Konstruktion (roter und blauer Vektorpfeil) berechnet werden. Die Energiedispersion des Analysators führt nun dazu, dass der Ort der Elektronen in der Austrittsebene in Richtung des blauen Pfeils, je nach ihrer Energie, verschoben ist. Dadurch ergibt sich die trapezoide Form des grauen Detektorbildes in [Abbildung 3.6d](#). Dieser Effekt ist damit eine intrinsische Eigenschaft der Hemisphärenabbildung und darf nicht mit der chromatischen Aberration in der Linseabbildung in einem winkelaufgelösten Modus, erkennbar an der energieabhängigen Krümmung der horizontalen Linien in den Abbildungen [3.7a](#) und [3.7b](#), verwechselt werden.

3.2.3 Die Linse

Die den Hemisphären vorgeschaltete Linse ist in [Abbildung 3.6b](#) schematisch dargestellt. Die ersten drei Linsenelemente sind konisch geformt, danach kommen sieben rotationssymmetrische Linsentuben. Für diese zehn Elemente sind nicht alle Potentiale frei wählbar, da T_1 immer auf Massepotential liegt, T_4 bis T_7 zu T_{4-7} zusammengeführt sind und der letzte Tubus T_{10} auf dem gleichen Potential wie die Grundplatte des Analysators liegt. Damit ergeben sich *fünf* freiwählbare Spannungen, nämlich T_2 , T_3 , T_{4-7} , T_8 und T_9 . Die Abbildungseigenschaften der Linse werden damit durch diese fünf Potentiale definiert. Dabei kommt dem Elektronenoptiker, nach [110], eine Besonderheit von elektrostatischen Elektronenlinsen zu Hilfe. Diese besagt, dass die Elektronenbahnen nur vom Quotienten aus kinetischer Energie der Elektronen am Startort und dem elektrischem Potential abhängt. Damit kann man, wenn die Energie der Elektronen um den Faktor k geändert wird, einfach die Potentiale auch um den Faktor k ändern und die Abbildungseigenschaften bleiben unverändert.

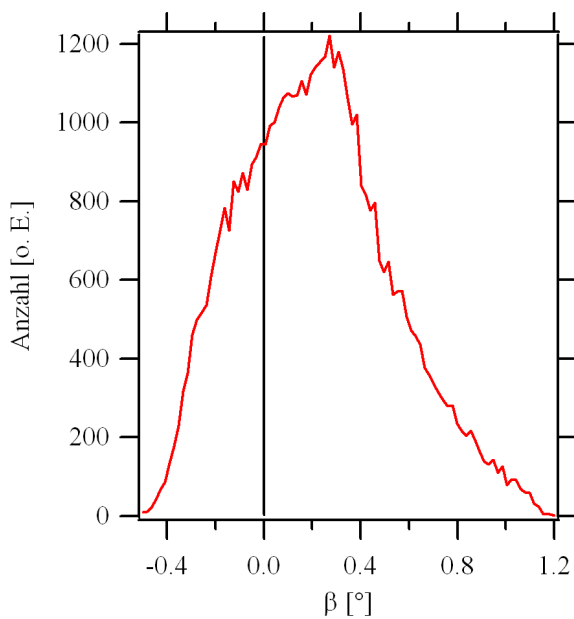
¹⁸Das sind Winkel in die entgegengesetzte Richtung wie die Spaltkrümmung. Intuitiv würde man in Spaltrichtung erwarten, der Grund dafür liegt in der Art Linsenabbildung.

3.2 HALBKUGELANALYSATOR MIT VORGESCHALTETER ELEKTRONENLINSE

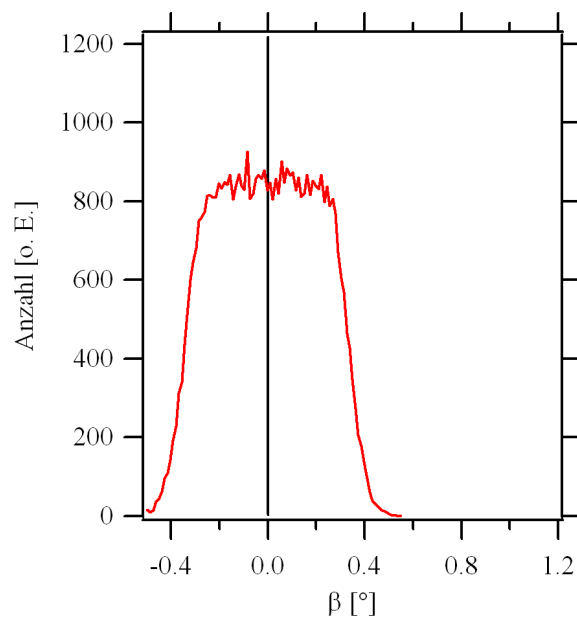


a.) Simuliertes Gitter mit einem krummen Spalt

b.) Simuliertes Gitter mit einem geraden Spalt



c.) Histogramm für den krummen Spalt



d.) Histogramm für den geraden Spalt

Abbildung 3.7: Vergleich von gekrümmten und geraden Eintrittsspalten. Für die Simulation wurden Elektronen in äquidistanten Energie- und Winkelschritten verwendet. Die Simulation verwendete den Wide Angle Mode als Linsenmodus und die Kombination $E_{kin} = 10\text{ eV}$ und $E_p = 20\text{ eV}$. Die Spaltbreite betrug jeweils 0,5 mm. Im Histogramm c.) ist deutlich die Asymmetrie um 0° zu erkennen.

Die Energie der Elektronen am Startort, also der Probe, wird dabei als E_{kin} bezeichnet und am Ende der Linse (Eintrittsebene des Analysators) als E_p . In diesem Zusammenhang wird das Verhältnis aus kinetischer Energie und Durchlassenergie E_p als Bremsfaktor, engl. *retarding ratio*,

$$\text{RR} = \frac{E_{\text{kin}}}{E_p} \quad (3.4)$$

bezeichnet. Damit ist einsichtig, dass die Abbildungseigenschaften der Linse nur vom Bremsfaktor RR abhängen. Aus diesem Grund werden die Spannungen der Linsenelemente $V(T_i)$ abhängig vom Bremsfaktor der Elektronen und eines nicht-linearen Faktors NL nach [111] als

$$V(T_i) = -E_{\text{kin}} + \text{NL}_i(\text{RR}) \cdot E_p \quad (3.5)$$

definiert. Und damit sind für einen Linsenmodus je fünf (NL,RR)-Tupel für jeden gewünschten Bremsfaktor anzugeben. Falls ein Bremsfaktor verwendet werden soll, der nicht definiert ist, wird ein kubischer, natürlicher Spline durch die Stützpunkte gelegt und der gewünschte NL-Wert so interpoliert.

Mit der Konstanz der Summe aus kinetischer Energie und potentieller Energie eines Elektrons im elektrostatischen Feld, siehe auch [Seite 21](#), bedeutet dies, dass ein $\text{NL} = 1$ die kinetische Energie des Elektrons E_p werden lässt. Aus diesem Grund ist der letzte Tubus T_{10} vor den Hemisphären für jeden Linsenmodus mit $\text{NL} = 1$ festgelegt.

Da der Potentialfußpunkt der Hemisphären nicht die Masse ist, ist die Mittenenergie in den detektierten Bildern, zum Beispiel in [Abbildung 3.5](#), nicht die Passenergie E_p sondern die kinetische Energie E_{kin} . Dabei ist E_{kin} die Energie, für welche die Linsenabbildung konzipiert ist.

4 Finite-Elemente-Simulationen von Elektronenlinsen

4.1 Grundlagen

Wie sehr viele Probleme in der Physik ist auch die analytische Berechnung der Elektronen-trajektorien in einer Elektronenlinse nur für wenige, einfache Fälle möglich. Aus diesem Grund ist die numerische Berechnung der Potentiale und Bahnen, also eine Simulation des realen Aufbaus, sehr üblich. Im Folgenden soll auf die hier verwendete Software namens SIMION [45] eingegangen werden. SIMION ist eine Raytracing-Software, das heißt man definiert eine Elektrodengeometrie und zugehörige Potentiale, und das Programm löst sowohl die Laplace-Gleichung in diesem Volumen, als auch die Bewegungsgleichung, und man kann dann den Verlauf der Teilchenbahnen verfolgen. Da man nicht nur die Bahnen visuell verfolgen will, sondern vor allem an quantitativen Aussagen interessiert ist, können alle Teilchenparameter der Elektronen zu verschiedenen Ereignissen mitprotokolliert werden. Außerdem können sowohl die Elektrodenpotentiale als auch die Parameter der Teilchen während der Simulation durch die integrierte Skriptsprache LUA [112] zu bestimmten Zeitpunkten beeinflusst werden. Letzteres ist vor allem für wiederholte Simulationen unter nur leicht veränderten Bedingungen nützlich.

Konstruktion der Elektrodengeometrie In SIMION kann man mehrere Elektrodenkonfigurationen (auch Instanzen oder engl. *potential array* genannt) zu einem Komplex (engl. *Workbench* genannt) zusammenfügen. Diese einzelnen Instanzen können verschiedene Symmetrien (Rotationssymmetrie, Spiegelsymmetrie an einer oder mehreren Achsen) besitzen. Die Wahl einer geeigneten Elektrodensymmetrie kann die Simulation beschleunigen und/oder den Speicherverbrauch der Instanz reduzieren. Man spricht von einem 2D-Array im Falle einer vorhandenen Symmetrie und von einem 3D-Array ohne jegliche Symmetrie. Die explizite Konstruktion der Elektrodengeometrie kann wahlweise durch den Import eines CAD-Modells oder eine expliziten Angabe der Elektroden und Nichtelektroden-Punkte im Programm selbst erfolgen. Letztere wird durch eine Technik namens „Konstruktive Festkörpergeometrie“ [113] ermöglicht. Dabei werden einfache geometrische Objekte wie Rechtecke, Ellipsen, Zylinder und ähnliches durch Mengenoperation wie Vereinigung, Schnitt und Differenz kombiniert. Da der Schachteltiefe keine Grenzen gesetzt sind, können damit beliebig komplizierte Geometrien konstruiert werden.

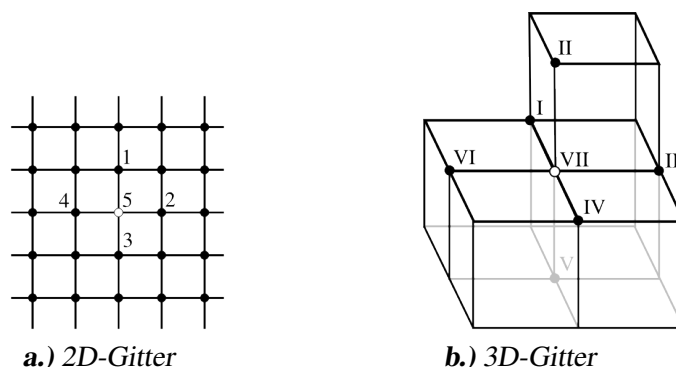


Abbildung 4.1: Veranschaulichung der nächsten Nachbarn im 2D/3D Fall. Dabei ist in a.) der betrachtete Punkt die 5 und in b.) die VII.

Numerische Lösung der Laplace-Gleichung SIMION benutzt die Finite-Elemente-Methode [45] zur numerischen Lösung der Laplace-Gleichung. Bei dieser Methode wird das zu untersuchende Volumen mit Hilfe eines Gitters diskretisiert. Dann ist jeder Gitterpunkt entweder ein Elektrodenpunkt mit Potential V oder aber ein Nicht-Elektrodenpunkt mit einem zu bestimmenden Potential. Die genaue Form des Gitters ist prinzipiell frei wählbar; in SIMION werden aber nur Gitter mit in allen Raumrichtungen gleichem Gitterabstand, also Quadrate oder Würfel, unterstützt. Die Laplace-Gleichung hat die besondere Eigenschaft, dass das Potential eines Raumpunktes durch den Mittelwert der Potentiale seiner Nachbarn definiert ist. Dies bedeutet nach [114] für ein zwei dimensionales Gitter wie in **Abbildung 4.1a**:

$$\Phi_5 = \frac{1}{4} [\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4]$$

Durch einen iterativen Ansatz der Form

$$\Phi_5^{n+1} = \frac{1}{4} [\Phi_1^n + \Phi_2^n + \Phi_3^n + \Phi_4^n]$$

kann das Potential des Punktes 5 im $(n+1)$ -Schritt aus den Potentialen der Nachbarn im n -ten Schritt bestimmt werden. Diese Iteration wird solange durchgeführt, bis die Differenz der Potentiale des $(n+1)$ -Schritt zum n -Schritt für alle Gitterpunkte kleiner als eine vorher definierte Schranke wird, und damit das Abbruchkriterium erreicht ist. Die Genauigkeit der vorgenommenen Modellierung des realen Potentialverlaufs kann am einfachsten durch Verkleinerung des Gitterabstands verbessert werden [114].

Das so bestimmte Potential kann in SIMION graphisch dargestellt werden. Zusätzlich können sowohl die Äquipotentiallinien als auch eine Ansicht der Potentiale als Höhenprofile, wie in **Abbildung 2.8b** auf **Seite 26** verwendet, angezeigt werden.

In SIMION gibt es die Möglichkeit, die Laplace-Gleichung für jede Elektrode mit unterschiedlichem Potential in der gesamten Instanz separat zu lösen und dann das gesamte Potential durch Superposition der Lösungen jeder Elektroden zu berechnen. Durch

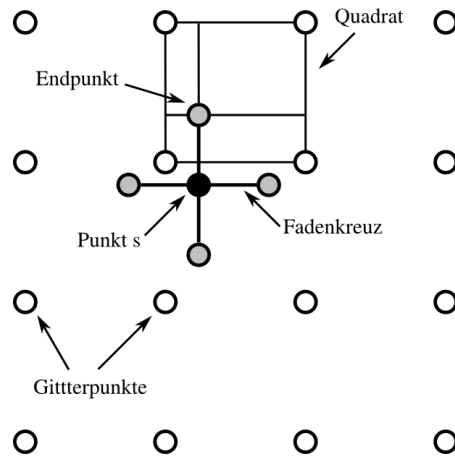


Abbildung 4.2: Berechnung des Potentials und seines Gradienten am Punkt s . Die Potentiale der Endpunkte (grau) werden durch lineare Interpolation im jeweiligen Quadrat bestimmt. Mit diesen Werten kann dann sowohl das Potential am Punkt s durch Mittelwertbildung, als auch der Gradient des Potentials bestimmt werden. Letzteres ist zur automatischen Anpassung der Schrittweite wichtig [45]. Abbildung nach [45].

die Linearität der Laplace-Gleichung kann das so bestimmte Potential im gesamten Volumen für alle Elektrodenspannungen reskaliert werden, ohne erneut die Laplace-Gleichung numerisch lösen zu müssen.

Numerisches Lösen der Bewegungsgleichung Da nun die Laplace-Gleichung für beliebige Elektrodenpotentiale gelöst werden kann, müssen nun noch die Elektronen-trajektorien berechnet werden. Dies beinhaltet das numerische Lösen der Bewegungsgleichung und wird in SIMION durch ein modifiziertes Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung [115] realisiert. Dazu muss im ersten Schritt das Potential am Ort und in der Nähe des Elektrons berechnet werden. Dabei wird, wie in **Abbildung 4.2** gezeigt, das Potential im Abstand einer halben Gitterkonstanten vom betrachteten Ort s durch lineare Interpolation bestimmt. Daraus können dann sowohl die Potentialgradienten in x - und y -Richtung, als auch das Potential am Punkt s selbst durch den Mittelwert der Potentiale an den Endpunkten bestimmt werden. Hat man die Potentiale damit bestimmt kann mit dem Runge-Kutta-Verfahren der neue Ort des Elektrons nach einem Zeitschritt t_{step} bestimmt werden. Die Länge der Zeitschritte wird von SIMION dynamisch angepasst, zum Beispiel an Stellen großer Trajektorienkrümmung [45]. Es kann auch durch den Benutzer anhand eines *qualitativen Trajektoriengütefaktors*, (T_{qual}) eine obere Schranke für die Länge der Zeitschritte gesetzt werden. In der vorliegenden Arbeit wurde $T_{\text{qual}} = 100$ gewählt; dies sorgt dafür, dass t_{step} so gesetzt wird, dass die Elektronen maximal eine Gitterkonstante weit ohne Neuberechnung der Trajektorie fliegen.

Ein- und Ausgabedateien In SIMION werde mehrere verschiedene Dateiformate zur Eingabe unterstützt. Das einfachste Format, ION genannt, besteht aus einer komma-separierten Liste, die alle Teilcheneigenschaften definiert; siehe **Tabelle A.1** auf **Seite 95** für eine vollständige Auflistung der Parameter. Damit ist es sehr einfach möglich, die

Elektronen mit einem Skript oder einem externem Programm zu erzeugen. Alle so definierten Eingabeparameter und diverse zusätzliche Parameter können auch zu bestimmten Ereignissen¹⁹ in SIMION in eine Ausgabedatei protokolliert werden. Die verwendeten Aufzeichnungsparameter können dann in einer Datei im REC-Format gespeichert werden. Für alle Simulation in der vorliegenden Arbeit wurde die gleiche REC-Datei verwendet, dabei wurden die Parameter Elektronennummer, Ereignistyp, Instanz, Ort x , Ort y , Ort z , Azimutwinkel, Elevationwinkel und Kinetische Energie gespeichert. Die so erzeugten Daten können dann nach Bedarf weiterverarbeitet werden.

4.2 Finite-Elemente-Modell des Analysators

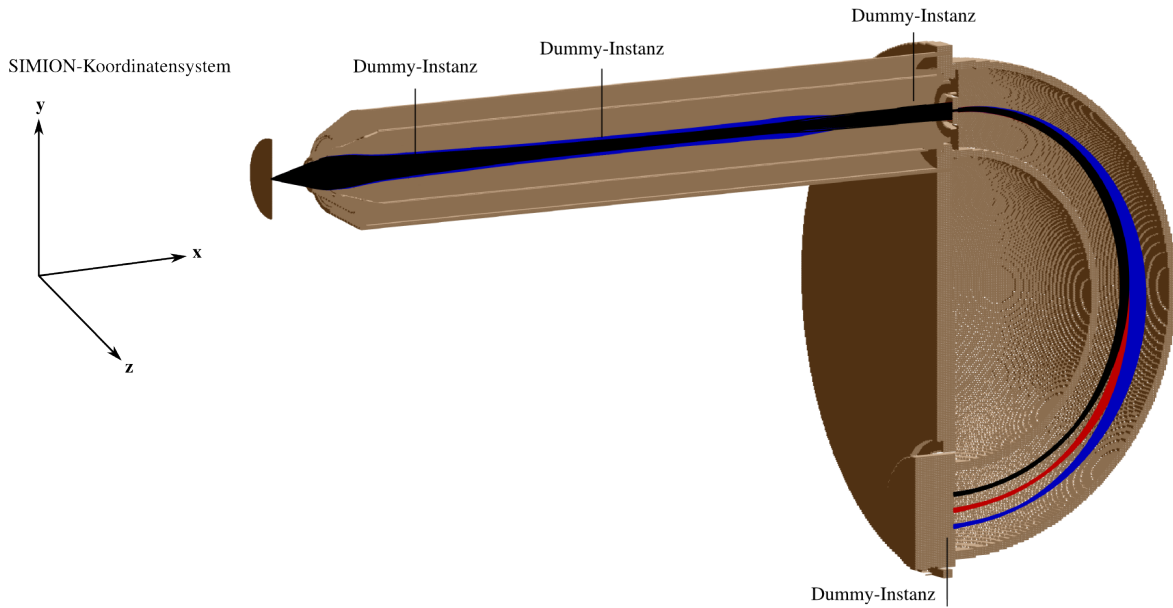
In [Abbildung 4.3a](#) ist ein SIMION-Modell des Analysators zu sehen, welches freundlicherweise von der Firma SPECS für diese Arbeit zur Verfügung gestellt wurde. Ein ähnliches Modell wurde von der Firma SPECS bereits vor dieser Diplomarbeit auf seine Genauigkeit untersucht [[111](#)].

Das Modell besteht aus zwei verschiedenen Instanzen: zum einen die 2D-Linseninstanz mit Zylindersymmetrie um die optische Achse und zum anderen die Hemisphäreninstanz als 3D-Modell und damit ohne jegliche Symmetrie. Der Übergang von der Linseninstanz zur Analysatorinstanz findet an der Eintrittsebene des Analysators statt. Dabei ist zu beachten, dass in SIMION die Potentiale zwischen den Instanzen nicht interpoliert werden, genauer gesagt findet keinerlei Interaktion zwischen den Instanzen statt. Das bedeutet, dass man bei der Konstruktion des Modells dafür sorgen muss, dass die Potentiale der beiden Instanzen an den Instanzengrenzen zueinander passen. Die Linseninstanz ist mit einer Gitterkonstanten von 0,25 mm modelliert und die Hemisphäreninstanz mit 2 mm.

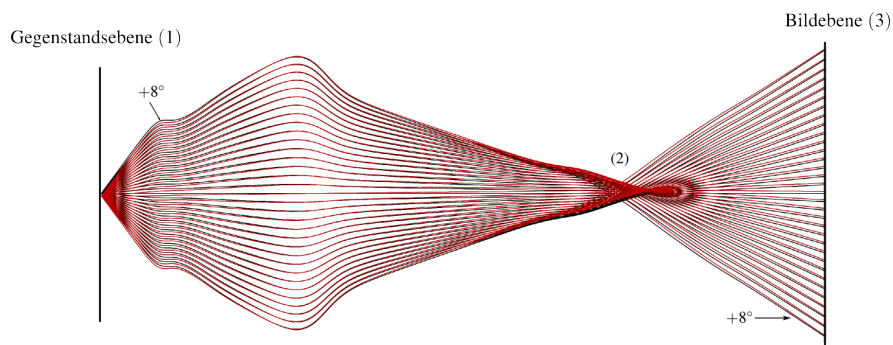
Im Vergleich zu einem realen Analysator sind einige Unterschiede im Modell vorhanden. Es wurden im Modell alle nicht-rotationsymmetrischen Blenden aus der Linse durch rotationsymmetrische mit maximal auftretendem Durchmesser ersetzt. Desweiteren wurde die Iris mit maximaler Öffnung modelliert. Im Analysator sind die Eintrittsspalte durch gerade Eintrittsspalte mit 7 mm Breite ersetzt und die Austrittsblende ist gar nicht modelliert. Alle diese Bauteile werden im Auswerteschritt nach der Simulation berücksichtigt. Dies hat den Vorteil, dass Parameter wie Eintrittsspaltbreite und Typ, oder auch Irisöffnung ohne erneute zeitintensive Simulationsläufe variiert werden können. Die nicht zylindersymmetrischen Blenden werden auch im Auswerteskript berücksichtigt. Die Außenkonturen des CCD-Detektors werden in der Simulation originalgetreu modelliert, nur die Größe der Mikrokanalplatten wurde, um eine höhere Genauigkeit als die der Gitterkonstante des Modells zu erhalten, größer modelliert als in der Realität. Für die Berechnungen im Auswerteschritt ist es nötig, die Ortskoordinaten, und eventuell die Winkel der Elektronen an den jeweiligen Stellen zu kennen. Leider ist es

¹⁹zum Beispiel Elektronenstart, Eintritt in eine Instanz, Auftreffen auf eine Elektrode, und andere.

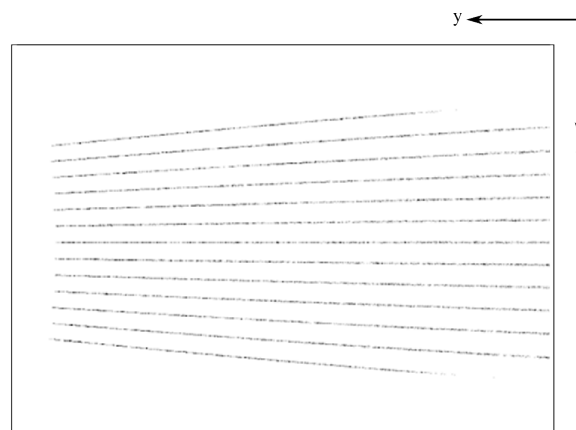
4.2 FINITE-ELEMENTE-MODELL DES ANALYSATORS



a.) Schnitt durch das SIMION-Modell des Analysators. Die unterschiedlichen Farben der Elektronen deuten die verschiedenen kinetischen Energien an.



b.) Strahlenverlauf (gestaucht) in der Linse für den Low Angular Dispersion Modus in der x - z -Ebene. Dabei ist die Gegenstandsebene die Probe und die Bildebene die Eintrittsebene der Hemisphären.



c.) Simuliertes Winkelstreifenmuster für den LAD-Modus und $RR = 0,5$.

Abbildung 4.3: Vom Modell des Analysators in **a.)** über den Strahlengang für einen winkelaufgelösten Linsenmodus in **b.)** zum Detektorbild in **c.)**.

in SIMION nicht möglich an mehreren beliebigen Koordinaten die Elektronenparameter aufzunehmen. Aus diesen Gründen ist es üblich [116], sehr dünne und potentialfreie Instanzen an diesen Stellen einzufügen, da SIMION beim Instanzenwechsel alle Parameter aufzeichnen kann. Diese Instanzen werden als Dummy-Instanzen bezeichnet.²⁰ Es muss darauf geachtet werden, dass die Dummy-Instanzen eine ganze Gitterkonstante der sie umgebenden Instanz groß sind und dass die Elektronentrajektorie an ihrer Stelle nicht merklich verfälscht wird. Letzteres ist äquivalent dazu, dass die Äquipotentiallinien der äußeren Instanz am Übergang zur Dummy-Instanz möglichst parallel zur Dummy-Instanz verlaufen sollten. Der Vergleich der Elektronenparameter am Ort des Detektors mit und ohne Dummy-Instanzen zeigt, dass die so erzeugten Abweichungen vernachlässigbar sind.

Die Dummy-Instanzen sind in **Abbildung 4.3** durch kleine vertikale Striche angedeutet. In dieser Abbildung ist auch das in SIMION benutzte Koordinatensystem angegeben. Im Folgenden werden die grundlegenden Eigenschaften eines winkelaufgelösten Linsenmodus dargestellt.

4.2.1 Winkelaufgelöste Linsenmodi

Die grundlegende Idee eines winkelaufgelösten Linsenmodus ist, dass der Austrittswinkel ϑ eines aus der Probe emittierten Photoelektrons neben der Bestimmung seiner kinetischen Energie mit aufgezeichnet wird. Da ein CCD-Detektor nur Ortsinformationen aufzeichnen kann, muss die Winkelinformation in eine Ortsinformation umgewandelt werden. Die zweite Dimension des CCD-Detektors wird zur Ortsbestimmung in energiedispersiver Richtung genutzt, daraus kann dann auf die Energie des Elektrons zurückgeschlossen werden.

Da die einzige Aufgabe der Hemispähren die Energiedispersion der Elektronen ist, muss die Winkelinformation in der Linse in eine Ortsinformation umgewandelt werden. In der **Abbildung 4.3b** ist der Strahlenverlauf von der Probe bis zur Linse für den schon existierenden Linsenmodus Low Angular Dispersion und den Bremsfaktor $RR = E_{\text{kin}}/E_p = 10\text{eV}/20\text{eV} = 0,5$ zu sehen. Dazu wurden Elektronen mit 10 eV kinetischer Energie und einem Winkelbereich von $\pm 8^\circ$ in $0,5^\circ$ -Schritten gestartet. Von diesen 33 Elektronen werden je ein Satz bei $z = 0\text{mm}$ (schwarz) und $z = 0,25\text{mm}$ (rot) gestartet. Die Verwendung von zwei verschiedenen Startorten imitiert den Effekt von einer endlichen Quellfleckgröße. Typische Quellfleckgrößen (in horizontaler Richtung) gehen dabei von 2mm ²¹, über $500\mu\text{m}$ ²² bis hinunter zu $30\mu\text{m}$ ²³, wobei für hinreichend schmale Eintrittspalte nur die Größe des Quellflecks in z -Richtung relevant ist. In **Abbildung 4.3b** starten die Elektronen von der Probe mit einer Winkelinformation (1), werden auf einen Zwischenfokus abgebildet (2) und werden am Ende der Linse (3), also am Eintrittsspalt des Analysators, so abgebildet, dass ihre Ortskomponente in z -Richtung von

²⁰Der Einsatz der Dummy-Instanzen erzwingt auch die Verwendung des Trajektoriengütefaktors $T_{\text{qual}} = 100$, da die Dummy-Instanzen nur eine Gitterkonstante breit sind.

²¹UV-Quelle „UVS 300“ der Firma SPECS [117]

²²UV-Quelle „UVS 300“ mit einer fokussierenden Kapillare [117]

²³Synchrotron BESSY, Beamline UE112 PGM-1 [118]

ihrem Startwinkel ϑ abhängt. Dabei sind die Winkel sowohl richtig sortiert (keine Überkreuzungen), als auch die Unterschiede in den Endorten für die roten und schwarzen Strahlen mit gleichen Startwinkeln ausreichend klein. Desweiteren ist der z -Abstand zwischen Elektronen mit verschiedenen Winkeln zwar nicht äquidistant, aber es wird auch nie ein bestimmter Abstand unterschritten. Diese Parameter werden bei der Entwicklung des neuen Linsenmodus genauer erklärt und quantitativ bestimmt.

Zur Beschreibung der Eigenschaften des Linsenmodus können in der Simulation die Startparameter der Elektronen, im Gegensatz zum Experiment, frei gewählt werden. Diese Elektronen können skriptgesteuert für verschiedene Quellfleckgrößen erzeugt werden. So erzeugte Elektronen besitzen in der y - z -Ebene eine 2-dimensionale Gaußverteilung mit der gewünschten Quellfleckgröße als Halbwertsbreite. Der β -Winkel wird gaußverteilt um 0° mit einer Halbwertsbreite von 5° variiert und ϑ in $1^\circ - 2^\circ$ -Schritten, mit einem Bereich je nach Linsenmodus, variiert. Die Startenergie der Elektronen wird dabei über einen den ganzen Detektor ausfüllenden Energiebereich variiert, das heißt von $E_{\text{kin}} - 0,08 \cdot E_p$ bis $E_{\text{kin}} + 0,08 \cdot E_p$. Die so simulierten Winkelstreifen sind in [Abbildung 4.3c](#) zu sehen. Die Simulation gibt das Experiment gut wider, was man durch Vergleich mit der [Abbildung 3.5](#) auf [Seite 37](#) erkennen kann.

In [Abbildung 4.3c](#) können auch einige grundlegenden Eigenschaften eines winkelaufgelösten Linsenmodus beobachtet werden:

Winkelakzeptanz Dies ist der akzeptierte Winkelbereich des Linsenmodus. In diesem Fall beträgt er $\pm 8^\circ$. Diese Eigenschaft ist direkt verküpft mit der Winkeldispersion.

Winkeldispersion Diese gibt in linearer Näherung die Beziehung zwischen Auftreffort z auf dem Detektor und dem Startwinkel ϑ an. Für den Low Angular Dispersion-Modus beträgt der Wert nach [\[44\]](#) $1,2 \text{ mm/deg}$.

Winkelauflösung Dies ist die kleinste zu unterscheidende Winkeldifferenz. Dieser Wert entspricht der Breite der Winkelstreifen aus [Abbildung 4.3c](#) in Grad. Wenn man den Anteil der Quellverteilung der Winkel ϑ herausrechnet, gibt dieser Wert die instrumentelle Verbreiterung durch den Analysator an. Aus diesem Grund sollte die Winkelauflösung möglichst klein sein. Ihr Wert hängt auch von der Quellfleckgröße ab.

4.2.2 Definition eines winkelaufgelösten Linsenmodus

Wenn man die [Abbildung 4.3c](#) als Beispiel für einen winkelaufgelösten Linsenmodus auffasst, kann man nun mit den Definitionen im Elektronenoptikkapitel auf [Seite 23](#) folgende idealisierten Eigenschaften eines winkelaufgelösten Linsenmodus festhalten:

1. Die aus der Gegenstandsebene, also der Probe, austretenden Elektronen sollen unabhängig von ihrem Abstand zur optischen Achse abgebildet werden.
2. Der Winkel in der Bildebene δ_B hat keinerlei Abhängigkeit zum Gegenstandswinkel δ_G .

3. Die Abbildung soll nur vom Gegenstandswinkel δ_G der Elektronen abhängen, und in der Bildebene soll die Bildgröße h_G eine streng monotone Funktion von δ_G sein.
4. Beide Eigenschaften müssen für alle von den Hemisphären akzeptierten Energien gelten.

Damit gilt für die räumliche Vergrößerung M_h und die Winkelvergrößerung M_δ :

$$M_h = \frac{h_B}{h_G} = \frac{\overline{BF_B}}{f_B} \stackrel{=}{\underbrace{\hspace{1.5cm}}} 0 \quad (4.1)$$

Bildseitiger Fokuspunkt f_B ist im Unendlichen

$$M_\delta = \frac{\delta_B}{\delta_G} = \frac{\overline{GH_G}}{\overline{BH_B}} \stackrel{=}{\underbrace{\hspace{1.5cm}}} 0 \quad (4.2)$$

Bildseitiger Fokuspunkt f_B ist im Unendlichen

Dazu kommt noch die Bedingung:

$$h_B = \underbrace{f(\delta_G)}_{\text{streng monotone Funktion}} \quad (4.3)$$

Die einfachste Form der Funktion $f(\delta_G)$ ist eine lineare Abhängigkeit; und dies ergibt:

$$h_B = \text{Da}1 \cdot \delta_G$$

mit der linearen Winkeldispersion $\text{Da}1$. Diese drei Eigenschaften 4.1-4.3 definieren einen winkelaufgelösten Linsenmodus vollständig.

Anschaulich kann ein winkelaufgelöster Linsenmodus auch mit einem lichtoptischen Analogon beschrieben werden. Dazu wird bei einer Sammellinse der Strahlenverlauf rückwärts, also vom Bild zum Gegenstand betrachtet, und zusätzlich für den Ort des Fokus nicht nur die optische Achse erlaubt, sondern die komplette Fokalebene.

An dieser Stelle soll auf einige äquivalente, aber unabhängig eingeführte und deswegen unterschiedlich benannte, Formelzeichen hingewiesen werden. Der in der Einzellinsenabbildung gegenstandsseitige Winkel δ_G entspricht dem Austrittswinkel ϑ der Elektronen aus der Probe und der bildseitige Winkel δ_B entspricht dem Emittanzwinkel α .

4.3 Design eines neuen winkelaufgelösten Linsenmodus

4.3.1 Das Optimierungsmodell

Mit den in den letzten Unterabschnitten aufgeführten Eigenschaften eines winkelaufgelösten Linsenmodus kann man nun einen neuen Linsenmodus entwerfen. Wie schon in [Abschnitt 1.3](#)

erwähnt, muss dazu erst einmal ein neuer Arbeitsabstand definiert werden. Dieser ist an sich frei wählbar. Einen gewissen Mindestabstand will man jedoch einhalten, damit man sowohl mit den anregenden Photonen die Probe erreicht, als auch den Manipulator, auf dem sich die Probe befindet, noch frei bewegen kann. Der neue Abstand wurde mit diesen Bedingungen auf 26,25 mm festgelegt. Dies ermöglicht nach [Gleichung 1.3](#) auf [Seite 9](#) einen maximalen Akzeptanzwinkel der Linse von $\pm 22,7^\circ$.

Für den Entwurf des neuen Linsenmodus wäre es wünschenswert, die analytische Lösung der Bewegungsgleichungen für die vorliegende Linse mit fünf frei wählbaren Potentialen zu lösen. Leider ist eine analytische Lösung für ein solch kompliziertes System nicht möglich und eine Näherungslösung, basierend auf paraxialer Näherung, würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Außerdem ist es fraglich, ob eine paraxiale Näherung überhaupt von ausreichender Güte wäre, da der Abstand der Elektronenbahnen zur optischen Achse stellenweise nicht zu vernachlässigen ist. Stattdessen wird ein anderer Ansatz verwendet, und zwar ein lokaler Optimierungsansatz [\[119\]](#). Konkret wird dabei eine Zielfunktion $f(x_i)$ definiert, dabei soll der Funktionswert $f|_{x_i}$ minimiert oder maximiert werden. Die Gesamtheit der Variablen der Zielfunktion definieren den Parameterraum X der Zielfunktion. Dieser Wertebereich ist in vielen Fällen noch aufgrund von Nebenbedingungen auf eine Teilmenge $A \subset X$ eingeschränkt. Die Optimierung selbst besteht dann darin, einen Teilbereich $S \subset A$ auszuwählen und in diesem nach einem Parametersatz x_i zu suchen, so dass $f|_{x_i}$ ein lokales Minimum oder Maximum in diesem Teilbereich S ist. Ein globaler Optimierungsansatz würde im gesamten Bereich A nach Extrema suchen.

Dieses Modell kann man nun auf das vorliegende Problem des Entwurfs eines neuen Linsenmodus übertragen. Diese Aufgabe kann wie folgt formuliert werden:

Suche fünf Linsenpotentiale x_i , so dass diese einen winkelaufgelösten Linsenmodus mit einer Winkelakzeptanz von etwa $\vartheta_{\text{LM, max}} = 18^\circ$ und optimaler Winkelauflösung ergeben.

Damit können die Bestandteile des Modells, wie in [Tabelle 4.1](#) angegeben, mit der Aufgabe hier identifiziert werden. Da der Parameterraum unbeschränkt ist, kann eine naive Suche des Optimums, wenn überhaupt, nur lokal gemacht werden. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit die schon im Vorhinein getroffene Beschränkung auf die lokale Optimierung gewählt. Zur Bestimmung des Gütefaktors in der Simulation sind neben den Linsenpotentialen auch Elektronen und die Hemisphärenspannungen nötig. Letztere sind aber nur durch die Angabe der Startenergie E_{kin} der Elektronen und der Passenergie E_p definiert und gehen damit als Konstante in die Zielfunktion $f(x_i)$ ein. Die Elektronen sollten, einmal definiert, auch als Konstante eingehen, damit die Vergleichbarkeit der Resultate gewährleistet ist. Die Wahl der Winkelauflösung als Gütefaktor kann damit begründet werden, dass sehr viele physikalische Fragestellungen in der winkelaufgelösten Photoemission eine hohe \mathbf{k} -Raumauflösung, und damit eine hohe Winkelauflösung, benötigen [\[43, 57\]](#).

Die verwendeten Startparameter der Elektronen müssen damit folgende Eigenschaften erfüllen:

- überdecken eines ausreichend großen Winkelbereichs,

Bezeichnung im Modell	Übertragung	Anzahl
Parameter	Linsenpotentiale	5
Wertebereich	alle Kombinationen der fünf Linsenpotentiale im Bereich von -3500 V bis $+3500\text{ V}$ ^a	unbeschränkt ^b
Nebenbedingungen	winkelauflösender Linsenmodus Winkelakzeptanz von circa 18° und andere	mehrere
Zielfunktion $f(x_i)$	elektronenoptische Abbildung durch Linse und Hemisphären	1
Zielfunktionswert $f _{x_i}$ (auch Gütefaktor genannt)	Winkelauflösung auf dem Detektor	1 ($f _{x_i}$ muss jedoch aus mehreren Werten berechnet werden, da die Winkelauflösung nicht über den Detektor konstant ist)

^aDas sind die Grenzen der Spannungsversorgung des Analysators.

^bStreng genommen stimmt das nicht, da die Schrittweite der Spannungsversorgung nicht beliebig klein ist. Mit einer Schrittweite nach [44] von 7 meV ergeben sich $\left(\frac{7000}{7 \cdot 10^{-3}}\right)^5 = 1 \cdot 10^{30}$ Möglichkeiten, was für praktische Untersuchungen durchaus als unendlich angesehen werden kann.

Tabelle 4.1: Identifizierung der im Optimierungsmodell vorhandenen Begriffe mit den Begriffen für einen winkelaufgelösten Linsenmodus.

- verschiedene Startorte zur Abschätzung des Einflusses der Quellfleckgröße auf die Abbildung und
- verschiedene Startenergien, da die Winkelabbildung über die gesamte Detektorfläche möglich sein muss.

Aus diesen Anforderungen heraus wurden die Elektronen wie folgt definiert:

- Startenergien von $E_{\text{kin}} - 0,05 \cdot E_p$, E_{kin} und $E_{\text{kin}} + 0,05 \cdot E_p$,
- Startorte von $z = 0\text{ mm}$ und $z = 0,25\text{ mm}$, sowie
- Startwinkel ϑ von 0° bis $21,5^\circ$ in $\Delta\vartheta_{\text{LM}} = 0,5^\circ$ Schritten; negative Winkel sind aus Symmetriegründen²⁴ nicht nötig.

Mit dieser Wahl des Optimierungsmodells müssen die dabei verwendeten Begriffe noch mit Leben erfüllt werden.

²⁴Das System aus Linse und Hemisphären ist um die Ebene aus optischer Achse und energiedispersiver Achse, also die x-y-Ebene in [Abbildung 4.3a](#) auf [Seite 47](#), spiegelsymmetrisch.

Auswahl des Teilbereichs S Für diesen Schritt wurde, von den Potentialen eines schon bekannten Linsenmodus (Wide Angle Mode) beginnend, durch manuelles Anpassen der fünf Linsenpotentiale ein Punkt im Parameterraum gesucht, der den gewünschten Winkelbereich mit den gerade eben definierten Elektronen akzeptiert. Dabei wurden keinerlei Nebenbedingungen verwendet und auch die Winkelauflösung nicht berücksichtigt. Damit konnte dieser Schritt vollständig manuell ohne aufwändige Auswertesoftware durchgeführt werden. Der Teilbereich S der Suche war damit als in der Umgebung U dieses empirisch gefundenen Punktes definiert.

Schrittweite Diese Umgebung U wurde nun durch die benötigte und einzusetzende Simulationszeit definiert. Bei dem dazu verwendeten Computer dauerten 16000 Kombinationen der fünf Linsenpotentiale rund einen Tag (24h) und dieser Bereich der 16000 Kombinationen wurde dann als Umgebung U definiert. Falls das Minimum der Winkelauflösung nicht in der Umgebung lag, sondern auf ihrem Rand, musste eine Umgebung gleicher Größe um diesen Randpunkt noch einmal abgesucht werden. Das wiederum vervielfachte die Simulationszeit. Falls das Minimum nun innerhalb der Umgebung lag, wurde mit einer deutlich kleineren Schrittweite eine Teilmenge T der Umgebung U ausgewählt und darin noch einmal nach einem Minimum gesucht. Das so gefundene Minimum wurde dann als lokales Minimum im Teilbereich S angesehen; damit ist der Optimierungsprozess für diesen Bremsfaktor beendet. Typische Schrittweiten für die grobmaschige Suche waren dabei $\Delta NL = 0,25$, womit sich die Zielfunktion $f(x_i)$ wesentlich änderte, und für die feinmaschige Suche $\Delta NL = 0,0025$. Diese, in den NL-Werten definierten, Schrittweiten wurden, mit [Gleichung 3.5](#) auf [Seite 42](#), in Spannungen umgerechnet und ergeben mit $E_p = 20\text{eV}$ einmal 5 V und bei der feinmaschigen Suche 0,05 eV.

Nebenbedingungen In der ausformulierten Definition der Optimierungsaufgabe auf [Seite 51](#) wurde als Nebenbedingung festgehalten, dass die Abbildung einem winkelaufgelösten Linsenmodus entsprechen soll. Diese abstrakte Forderung kann wie folgt beschrieben werden:

Winkelakzeptanz Es sollen alle Elektronen mit $\vartheta \leq \vartheta_{\text{LM, max}}$ auf den Detektor abgebildet werden.

Umkehrbare Winkelabbildung Alle Elektronen sollen so auf den Detektor auftreffen, so dass ihr Auftreffort in nicht-energiedispersiver Richtung z , vergleiche [Abbildung 4.3c](#) auf [Seite 47](#), eine streng monotone Funktion des Startwinkels ϑ ist. Das ist äquivalent dazu, dass die Funktion $z(\vartheta)$ im Bereich $\vartheta \leq \vartheta_{\text{LM, max}}$ umkehrbar ist.

Ausreichender Abstand der Winkelstreifen Die Bedingung der umkehrbaren Winkelabbildung ist insofern nicht ausreichend, als dass sie nur eine strenge Monotonie fordert. Falls der y -Abstand zweier Elektronen mit um $\Delta\vartheta_{\text{LM}}$ verschiedenen Startwinkeln sehr klein wird, kann dieser Abstand in der Realität nicht mehr aufgelöst werden. Aus diesem Grund muss ein Mindestabstand zwischen Elektronen mit um $\Delta\vartheta_{\text{LM}}$ verschiedenen Startwinkeln erzwungen werden. Dies ermöglicht auch, die Ausdehnung der Winkelstreifenmuster in z -Richtung zu beeinflus-

sen, was für eine gute Ausnutzung der zur Verfügung stehenden Detektorfläche notwendig ist.

Dies sind alle Nebenbedingungen für die Optimierung. Es fällt dabei insbesondere auf, dass die genaue Form eines Winkelstreifens nicht spezifiziert ist. Damit sind theoretisch alle möglichen Formen erlaubt. In der Praxis treten dabei jedoch nur einige ausgewählte Formen auf. Diese Feststellung ist für die spätere physikalische Eichung der Achsen des Detektorbildes von Bedeutung.

Zielfunktion $f(x_i)$ Die Abbildung $f(x_i)$ wird teils durch das Simulationsprogramm SIMION bewerkstelligt, und teils durch die Auswertung der dabei entstandenen Daten. Die Winkelauflösung wird dazu für Elektronen mit gleichen Startwinkeln, aber unterschiedlichem Startort aus dem Abstand der z -Koordinaten in mm in einen Abstand in Grad umgerechnet. Die Winkelauflösung kann mit dieser Definition im Idealfall auch Null sein. Der so gewonnene Wert hängt auch vom z -Abstand der Startelektronen ab. Da die Winkelauflösung für alle Winkel und Startorte berechnet werden kann, wird das Maximum aller berechneten Winkelauflösungen als endgültiger Gütefaktor verwendet.

4.3.2 Die Realisierung der Optimumssuche

Da jetzt ein Optimierungsmodell ausgewählt und die Übertragung auf die Entwicklung eines neuen winkelaufgelösten Linsenmodus gemacht wurde, muss das ganze noch umgesetzt werden. Die Umsetzung erfolgt dabei einerseits in SIMION zur Simulationen der Elektronentrajektorien und andererseits in einem selbstgeschriebenen Auswerteskript `calc.awk` in der Sprache AWK [120].

SIMION

In SIMION wäre es wünschenswert, alle Spannungskombinationen automatisch durchprobieren zu lassen, da ein manuelles Ändern der Spannungen bei im Schnitt 16000 Kombinationen pro Iterationsschritt und Bremsfaktor praktisch nicht möglich ist. Dies kann in SIMION umgesetzt werden [121], indem man verschiedenste Aktionen definieren und diese zu bestimmten Zeitpunkten oder Ereignissen eines Simulationslaufs ausführen lassen kann. Dazu wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein Skript `optimize.lua` geschrieben, das diese Funktionalität bietet. Ein kompletter Simulationslauf besteht dann aus den Schritten:

1. Angeben der Variationsbereiche $[NL_{min}, NL_{max}]$ der fünf Linsenpotentiale mit den zugehörigen Schrittweiten ΔNL in `optimize.lua`.
2. Verwenden der Standardelektronen, des Standardausgabeformats und Ausgabe der Daten in eine Datei.
3. Starten der Simulation. Ab diesem Schritt läuft alles ohne manuelle Eingriffe ab.
4. Setzen eines Spannungssatzes .

5. Ausgabe der Spannungen und NL-Parameter in die Ausgabedatei.
6. Start des Elektrons, dabei Aufnahme der relevanten Elektronenparameter beim Start, Instanzenwechsel und Auftreffen der Elektronen auf einer Elektrode.
7. Falls noch Spannungssätze übrig, weiter bei Punkt 4, ansonsten ist die Simulation beendet.

Dabei entstehen typischerweise Ausgabedateien mit 3 – 4 GB Größe. Diese dienen dann dem Auswerteprogramm `calc.awk`, welches im Rahmen dieser Diplomarbeit erstellt wurde, als Eingabe.

Auswerteprogramm `calc.awk`

Das Auswerteprogramm übernimmt bei der Optimierung die folgenden Aufgaben. Dabei werden diese Schritte sequentiell für jeden Spannungssatz abgearbeitet:

1. Einlesen der Elektronenparameter und Überführung in interne Datenstrukturen
2. Einlesen der Spannungen.
3. Testen, ob jedes Elektron auch wirklich den Detektor erreicht hätte. Das betrifft vor allem die in [Abschnitt 4.2](#) auf [Seite 46](#) erwähnten nicht-modellierten Bauteile wie diverse Blenden und die Eintrittsspalte. Dabei kann sowohl die Breite als auch der Typ der Eintrittsspalte variiert werden.
4. Testen, ob die Nebenbedingungen erfüllt sind, Berechnung der Winkelauflösung: falls dieser Wert kleiner als das bisherige Minimum ist, wird er als neues Optimum verwendet und es wird dieser Spannungssatz und alle berechneten Zwischenergebnisse gespeichert.

Falls nach dem Auswerten aller Spannungssätze ein Optimum gefunden wurde, werden der Spannungssatz, die erreichte Winkelauflösung und die Zwischenergebnisse der Nebenbedingungenberechnungen ausgegeben. Da die Schritte 3 und 4 von zentraler Bedeutung sind, werden sie im Folgenden genauer erläutert. In [Abbildung 4.4b](#) ist ein Detektorbild aus einem Simulationslauf zu sehen. Die in [Tabelle 4.2](#) aufgelisteten Daten kann man nun zur Berechnung der gewünschten Parameter verwenden.

Winkelakzeptanz Hier werden die z -Komponenten der Elektronen eines Startortes und einer Energie paarweise verglichen. Dabei ist die Winkelakzeptanz der Startwinkel des Elektrons, bei welchem das Vorzeichen des Abstandes in z -Richtung der n - und $(n + 1)$ -Elektronen nicht mehr mit dem des ersten und des zweiten übereinstimmt. Das heißt, es muss für jede Energie und jeden Startort gelten:

$$\forall \vartheta \leq \vartheta_{\text{LM, max, lokal}} : \text{sgn}[z_{n+1} - z_n] = \text{sgn}[z_2 - z_1]$$

$$\text{d. h. } \forall \vartheta \leq \vartheta_{\text{LM, max, lokal}} : \text{sgn}[\Delta z_{n+1,n}] = \text{sgn}[\Delta z_{2,1}]$$

In [Tabelle 4.2](#) ist dies für alle z erfüllt, deswegen ist die Winkelakzeptanz mindestens 5° . Aus den so berechneten sechs Winkelakzeptanzen (für die drei Energien und die zwei

Index	ϑ_0	y_0	z_0	$\vartheta_{0,25}$	$y_{0,25}$	$z_{0,25}$
11	5,0	-5,40	-2,91	5,0	-5,39	-2,80
10	4,5	-5,40	-2,60	4,5	-5,41	-2,49
9	4,0	-5,42	-2,30	4,0	-5,43	-2,17
8	3,5	-5,43	-2,00	3,5	-5,43	-1,87
7	3,0	-5,43	-1,70	3,0	-5,43	-1,56
6	2,5	-5,43	-1,41	2,5	-5,44	-1,27
5	2,0	-5,44	-1,13	2,0	-5,44	-0,98
4	1,5	-5,43	-0,84	1,5	-5,44	-0,69
3	1,0	-5,44	-0,56	1,0	-5,45	-0,41
2	0,5	-5,45	-0,28	0,5	-5,46	-0,12
1	0,0	-5,44	0,00	0,0	-5,46	0,16

Tabelle 4.2: Einige Elektronenparameter für die in *Abbildung 4.4a-b* gezeigten Graphen. Der Index gibt an, ob die Elektronen von der optischen Achse der Linse bei $z' = 0$ mm oder um $\Delta z = 0,25$ mm verschoben starten. Die y -Komponenten sind auf die Mitte des Detektors bezogen.

Startorte) wird dann deren Minimum als globale Winkelakzeptanz $\vartheta_{LM, \max}$ genommen. Nun muss noch überprüft werden, ob Elektronen mit Startwinkeln $\vartheta > \vartheta_{LM, \max}$ auf den Detektor getroffen sind. Falls ja, werden diese per Voraussetzung an die falschen z -Werte, nämlich in das gleiche Gebiet wie Elektronen mit kleinerem ϑ , abgebildet und damit ist in diesem Bereich keine Winkelabbildung möglich. Damit wäre der Spannungssatz nicht verwendbar.

Umkehrbare Winkelabbildung Durch diese Definition der Winkelakzeptanz ist die Winkelabbildung für alle $\vartheta < \vartheta_{LM, \max}$ umkehrbar.

Ausreichender Abstand der Winkelstreifen Die oben berechneten Abstände $\Delta z_{n,n+1}$ werden für alle Elektronen berechnet und mit dem Abstand $\Delta z_{2,1}$ für die Mittenenergie E_{kin} normiert; dies soll den Effekt systematischer Fehler der Simulation eliminieren. Das Minimum $\Delta z_{min, norm}$ der Abstände $\Delta z_{n,n+1}/\Delta z_{2,1}$ muss dann eine bestimmte Mindestgröße besitzen. Diese Mindestgröße wurde als empirischer Parameter eingeführt und ein Wert von $0,6 = 60\%$ hat sich als sinnvoll erwiesen. Dabei definiert dieser Wert anschaulich den Mindestabstand zwischen zwei Winkelstreifen zu 60% des Abstandes der Winkelstreifen bei der Mittenenergie E_{kin} und den Winkeln 0° und $0,5^\circ$. Falls der Mindestabstand unterschritten wird, wird der Spannungssatz auch verworfen.

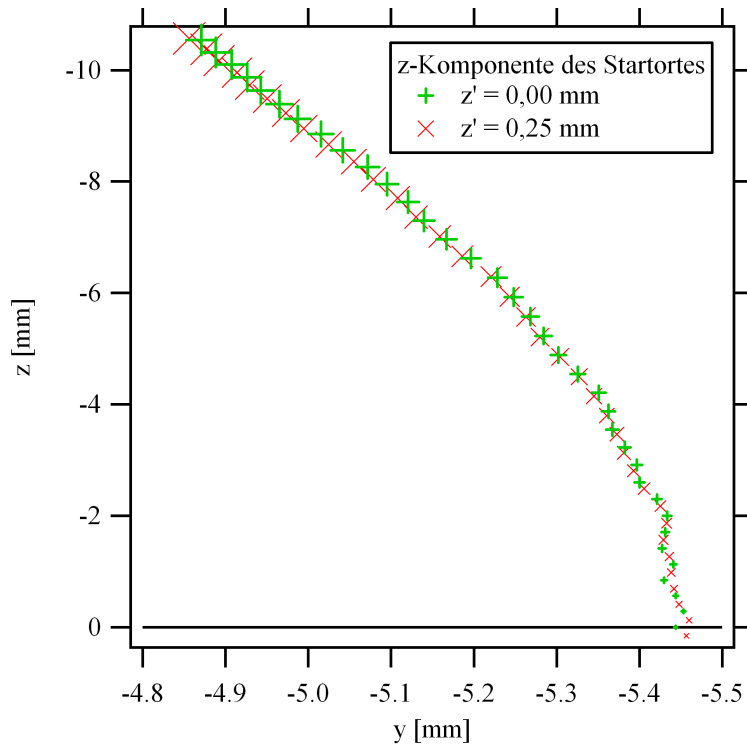
Winkelauflösung Aus den berechneten Abständen $\Delta z_{2,1}$ kann die lineare Winkeldispersion $Da1$ für jede Energie und den Startort $z' = 0,00$ mm zu

$$Da1 = \frac{\Delta z_{2,1}}{\Delta \vartheta_{LM}}, \quad (4.4)$$

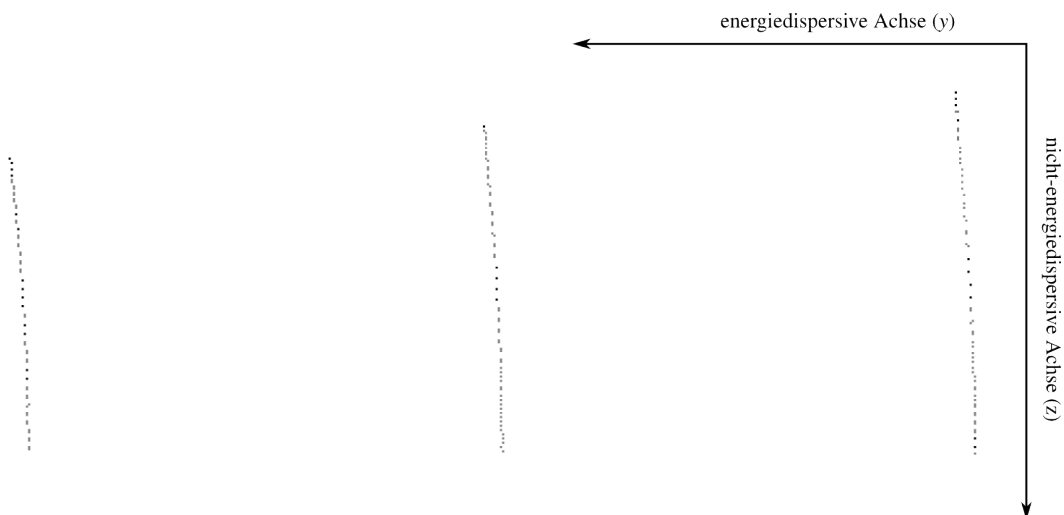
mit der Schrittweite $\Delta \vartheta_{LM}$ des Startwinkels, abgeschätzt werden. Die Winkelauflösung kann dann für jedes Elektronenpaar mit unterschiedlichen Startorten als

$$s_n = \frac{z_n(0,00 \text{ mm}) - z_n(0,25 \text{ mm})}{\Delta z_{2,1, norm}} \cdot \frac{1}{Da1_{min}} \quad (4.5)$$

4.3 DESIGN EINES NEUEN WINKELAUFGELÖSTEN LINSENMODUS



a.) Elektronenortskoordinaten auf dem Detektor mit der Mittenenergie E_{kin} in mm-Koordinaten. Dies ist ein mittiger Ausschnitt aus **Abbildung 4.4b**. Der Spannungssatz wurde nach drei Iterationen mit $\Delta NL = 0,25$ und einer Iteration mit $\Delta NL = 0,0025$ ermittelt. Auffällig dabei ist der von ϑ abhängige z -Abstand für die verschiedenen Startorte. Das Minimum dieses Abstandes liegt bei circa bei $z = 5$ mm bzw. $\vartheta = 9,5^\circ$. Die Größe der Symbole skaliert mit dem Startwinkel ϑ . Dieser läuft hierbei von 0° bis $17,5^\circ$ mit einer Schrittweite von $0,5^\circ$.



b.) Detektorbild eines Elektronensatzes aus der Optimierung, dabei wurden die Elektronen numerisch mit `calc.awk` auf den CCD-Chip der Kamera projiziert.

Abbildung 4.4: Detektorbild der zur Optimierung verwendeten Elektronen.

definiert werden. Dabei ist $Da1_{\min}$ das Minimum der drei linearen Winkeldispersionen $Da1$. Diese Definition von s_n hat einerseits den Vorteil, dass sich so s_n immer berechnen lässt, es also wohldefiniert ist, und es andererseits noch zusätzlich für sehr kleine $\Delta z_{2,1, norm}$ sehr groß wird. Darin steckt die Idee, dass, falls sich zwei Spannungssätze mit gleichem s_n nur in $\Delta z_{2,1, norm}$ unterscheiden, derjenige zu bevorzugen ist, der den größeren Wert von $\Delta z_{2,1, norm}$ hat, da bei diesem die Detektorfläche bzw. das Bild der CCD-Kamera besser ausgenutzt wird. Aus all diesen Werten s_n wird dann das Maximum der Winkelauflösung s_{\max} bestimmt. Dieser Wert heißt Gütefaktor und bei der Optimierung wird sein Minimum innerhalb des Optimierungsraumes gesucht.

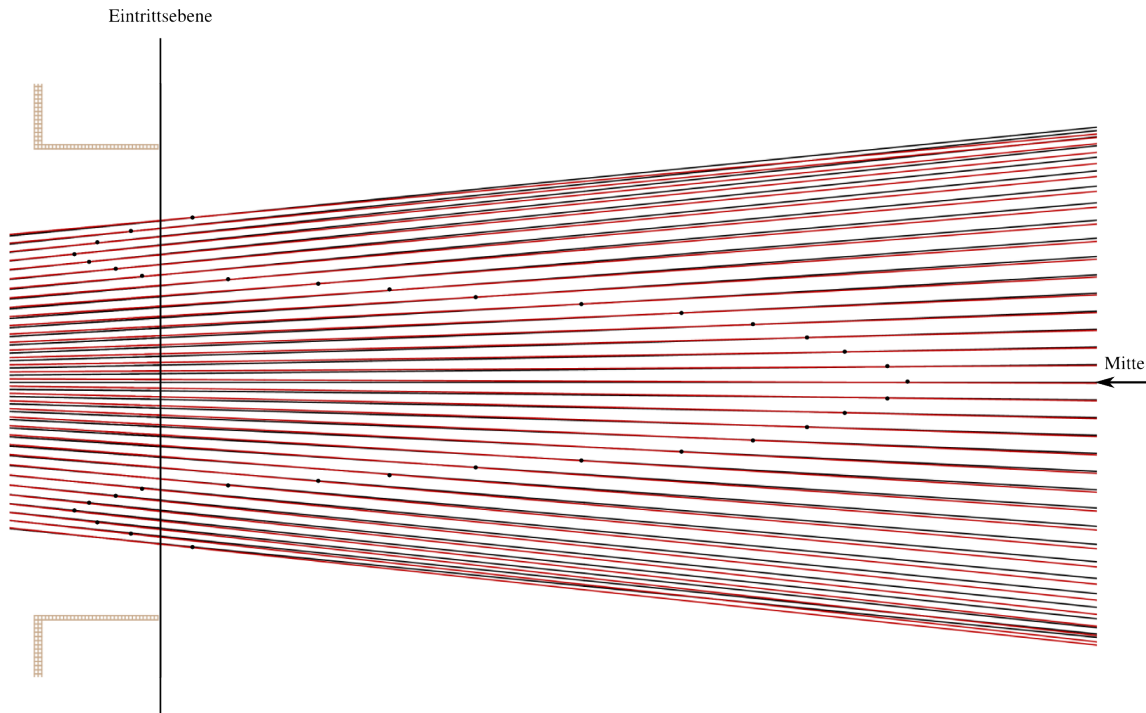
Auffälligkeiten der Optima

Bei der Bestimmung der Optima in der aufgezeigten Weise traten einige interessante Erscheinungen zu Tage. Wie man auch in [Abbildung 4.4a](#) sieht, ändert sich der Abstand $z_n(z' = 0,00 \text{ mm}) - z_n(z' = 0,25 \text{ mm})$, und damit die Winkelauflösung s_n als Funktion von ϑ . Eine gleichmäßige Winkelauflösung ist zwar aufgrund des Ansatzes der Minimierung des Maximums der Winkelauflösung nicht zu erwarten, der hier auftretende Effekt ist jedoch prinzipieller Natur. Da dieses Verhalten auch am Ende der Linse beobachtet wird, ist es eine Eigenschaft der Linsenabbildung. In [Abbildung 4.5a](#) ist ein beispielhafter Strahlenverlauf für Bremsfaktor $RR = 0,5$ zu sehen. Dabei deuten die schwarzen Punkte die Stellen an, an denen der z -Abstand, die vertikale Komponente in der Abbildung, der Elektronen verschiedener Startorte aber gleicher Startwinkel minimal ist. Es ist auch zu erkennen, dass die z -Abstände am Ort der Eintrittsebene die Verhältnisse am Detektor, vgl. [Abbildung 4.4a](#), widerspiegeln und damit die Winkelauflösung sich mit dem Winkel ϑ ändert. Jetzt stellt sich die Frage nach dem Ursprung dieses Abbildungsfehlers. Dazu ist es instruktiv, sich das Verhalten für größere Abstände z' von der optischen Achse am Probenort zu veranschaulichen. In [Abbildung 4.5b](#) ist dies für zusätzlich $z'_3 = 1 \text{ mm}$ gemacht. Man kann dabei zwei Effekte beobachten. Die Kurve der minimalen z -Abstände bleibt in ihrer Form erhalten, ändert jedoch am Rand deutlich ihre Form. Dabei wandern die schwarzen Punkte für negative z nach rechts und für positive nach links. Wie an der Eintrittsebene zu sehen, wird die Winkelauflösung mit diesem zusätzlichen Strahl, wie zu erwarten, schlechter. Das bedeutet, dass die Vergrößerung von z' einen Einfluss auf den Abbildungsfehler am Rand hat, jedoch nicht auf die prinzipielle Form der Kurve.

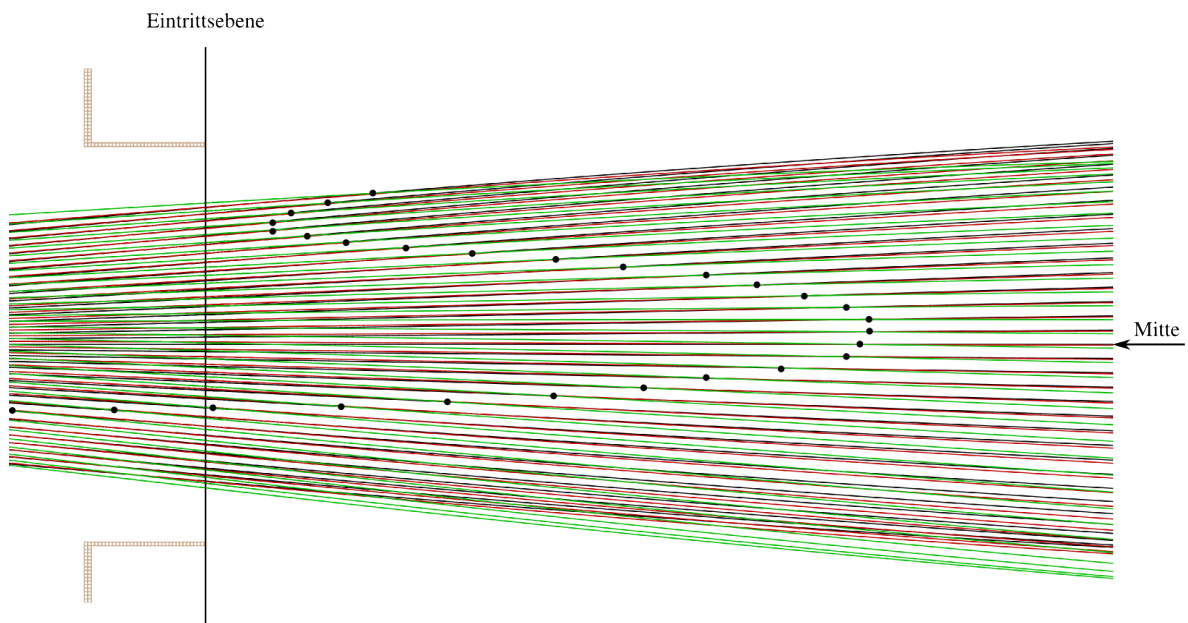
Jetzt kann man versuchen, den hier auftretenden Abbildungsfehler mit den in [Unterabschnitt 2.2.4](#) aufgezeigten Aberrationen zu identifizieren. Der Anteil des Abbildungsfehlers, der mit dem Abstand zur optischen Achse z' skaliert, kann mit der sphärischen Aberration identifiziert werden, da diese genau die Aberration durch einen nicht zu vernachlässigenden Achsenabstand z' beschreibt. Dieser Ansatz kann damit den Randeffect in [Abbildung 4.5b](#) erklären.

Der Hauptanteil des Abbildungsfehlers, und damit für die Form der Kurve verantwortlich, lässt sich durch die Bildfeldwölbung gut erklären. Dafür spricht einerseits, dass diese Aberration

4.3 DESIGN EINES NEUEN WINKELAUFGELÖSTEN LINSENMODUS



a.) Strahlenverlauf am Ende der Linse für die Startorte $z'_1 = 0,00 \text{ mm}$ (schwarz) und $z'_2 = 0,25 \text{ mm}$ (rot)



b.) Strahlenverlauf am Ende der Linse für die Startorte $z'_1 = 0,00 \text{ mm}$ (schwarz), $z'_2 = 0,25 \text{ mm}$ (rot) und $z'_3 = 1 \text{ mm}$ (grün)

Abbildung 4.5: Veranschaulichung der auftretenden Aberrationen. Dabei ist jeweils eine Projektion der Elektronenbahnen in die z - y -Ebene zu sehen. Dass der hier auftretende Abbildungsfehler kein Artefakt dieser Projektion ist, wurde überprüft. Die schwarzen Punkte deuten die Stellen minimalen z -Abstandes (vertikal im Bild) an.

die Bildebene krümmt [95], und andererseits dass diese Höhe der Aberration nach [90, 96] mit²⁵

$$\frac{\Phi''(x)}{\Phi^{\frac{3}{2}}(x)} \quad (4.6)$$

approximiert werden kann, und damit nur vom Potentialverlauf in x -Richtung abhängt. Da alle Elektronenbahnen mit verschiedenem z' einen ähnlichen Raumbereich der Linse überstreichen, ist die Bildfeldwölbung nicht (oder nur schwach) vom Startort abhängig.

Die Bildfeldwölbung als Nebenbedingung zur Optimumssuche zu verwenden, wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit auf verschiedene Weise versucht. Einerseits könnte man fordern, dass die gewölbte Bildschale ihren Ursprung an der Eintrittsebene hat und damit die Winkelauflösung bei $z = \vartheta = 0$ minimal ist. Dann ist jedoch das Maximum der Winkelauflösung, über das ganze Bild betrachtet, deutlich schlechter. Eine andere Idee ist, die über das Bild gemittelte Winkelauflösung als Gütefaktor zu verwenden. Dieser Versuch führte zu einem Spannungssatz mit zwar überall gleichmäßiger, aber deutlich schlechterer, Winkelauflösung. Aus diesen Gründen wurde das Maximum der Winkelauflösung als Gütefaktor beibehalten, obwohl dabei der Einfluss der Bildfeldwölbung nicht berücksichtigt wurde.

Eine weitere Auffälligkeit bei der Optimumssuche war der Einfluss der Linsenpotentiale T_2 und T_9 , siehe [Abbildung 3.6b](#) auf [Seite 38](#) für ihre Definition, auf die Winkelabbildung. Schon sehr kleine Änderungen verändern sowohl die Winkelakzeptanz als auch die Winkelauflösung sehr stark. Aus diesem Grund wurden in der letzten Iteration nur diese beiden Tubenpotentiale in Schritten von $\Delta NL = 0,0025$ variiert.

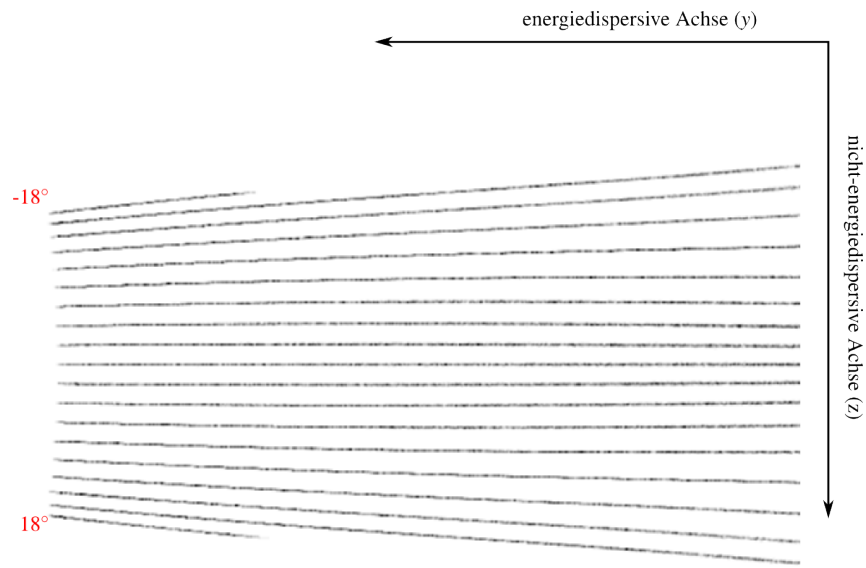
Dieser Optimierungsprozess wurde für den Bremsfaktorbereich von 0,2 bis 2,5 in $\Delta RR = 0,1$ Schritten durchgeführt. Dies ist in etwa der gleiche Bereich in dem der Wide Angle Mode definiert ist. Bei der Optimumssuche wurde, falls nötig, die zu erreichende Winkelakzeptanz stellenweise auf 17° bzw. $17,5^\circ$ erniedrigt, da so eine deutlich bessere Winkelauflösung erreicht werden konnte. Die so gewonnen Linsenpotentiale, als NL-Werte, sind in [Abschnitt A.1](#) auf [Seite 93](#) im Anhang vollständig aufgelistet. Dabei haben nicht alle Bremsfaktoren die gleiche Anzahl an Iterationsschritten durchlaufen. Da die Vorgehensweise der experimentellen Evaluation für alle Bremsfaktoren gleich ist, wurde im folgenden Kapitel nur der Bremsfaktor 0,5 diskutiert. Ein weiterer Grund ist außerdem, dass dieser die meisten Iterationsschritte durchlaufen hat.

Finale Tests in der Simulation

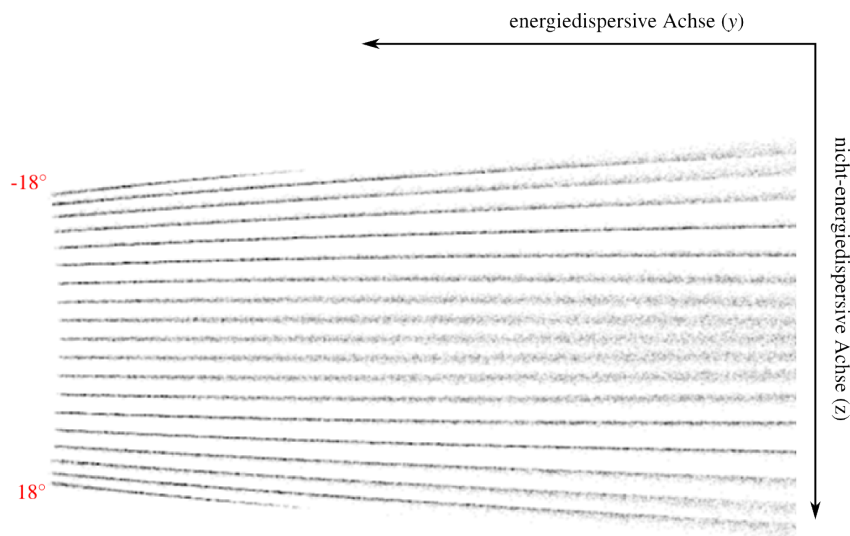
Während der Entwicklung dieses Optimierungsverfahrens wurden des Öfteren Winkelstreifenmuster mit verschiedenen Spotgrößen simuliert. Damit konnte man sich einen vergleichsweise anschaulichen Eindruck der Qualität des Spannungssatzes, und das heißt der Linsenabbildung, machen. In den [Abbildungen 4.6a-b](#) sind zwei Winkelstreifenmuster mit verschiedenen Quellfleckgrößen abgebildet. Da die ϑ -Winkel der Startelektronen nicht kontinuierlich, sondern

²⁵Die in [96] angegebene Koordinate z ist nach [90] die axiale Komponente eines rotationssymmetrischen Feldes.

4.3 DESIGN EINES NEUEN WINKELAUFGELÖSTEN LINSENMODUS



a.) Quellfleckgröße 0,1 mm



b.) Quellfleckgröße 0,7 mm

Abbildung 4.6: Super Wide Angle Mode (finaler Spannungssatz) bei $RR = 0,5$ mit verschiedenen Quellfleckgrößen (entspricht der Halbwertsbreite einer zwei-dimensionalen Gaußverteilung am Ort der Probe) von 0,1 mm und 0,7 mm. Die Winkel der Startelektronen gehen dabei von $\pm 18^\circ$ mit einer Schrittweite von 2° .

diskret bei 0° , $\pm 2^\circ$, $\pm 4^\circ$, ... verteilt sind, ist die Breite der Winkelstreifen ein direktes Maß für den Einfluss der Spotgröße auf die Winkelauflösung. Dabei ist deutlich die Energie- und Winkelabhängigkeit der Winkelauflösung zu sehen. Für kleine Winkel am höherenergetischen (rechten) Rand ist vor allem in **Abbildung 4.6b** die deutlich schlechtere Winkelauflösung zu bemerken. Weiterhin kann man in den Abbildungen auch visuell verifizieren, dass alle Bedingungen für einen winkelaufgelösten Linsenmodus erfüllt sind, und damit dieser Spannungssatz eine Winkelabbildung erzeugt.

Zuletzt soll auf eine spezielle Eigenschaft der so erzeugten winkelaufgelösten Linsenmodi zurück gekommen werden. Bei dem Design wurde absichtlich das Verhalten der Winkelstreifen in Energierichtung nur soweit wie nötig spezifiziert. Zusammen mit dem Trapez-Effekt des Analysators erzeugt dies eine nichtlineare Abhängigkeit zwischen dem Austrittswinkel ϑ der Elektronen aus der Probe und dem Auftreffort z bzw. seinem Äquivalent, der Pixelposition in nicht-energiesdispersiver Richtung. Da man in realen Messungen aber von der Pixelposition auf den Winkel schließen will, müssen die Achsen des Detektorbildes geeignet transformiert werden. Dies wird im nächsten Kapitel zusammen mit den experimentellen Resultaten vorgestellt.

5 Experimentelle Bestimmung der Linsenmoduseigenschaften

5.1 Transformation der Koordinatenachsen für ARPES-Messungen

Die Transformation der Pixelachsen ist für alle bisher verfügbaren winkelaufgelösten Linsemodi vom Hersteller des Analysators möglich. Aus diesem Grund, mussten die Parameter der Transformation auch für den neu erzeugten Linsenmodus Super Wide Angle Mode bestimmt werden. Da es einen nicht unerheblichen Unterschied macht, ob man ein transformiertes Bild betrachtet oder ein untransformiertes, ist es sinnvoll die Bezeichnung der Achsen in beiden Bildern zu unterscheiden. Im Folgenden werden daher die Achsen des untransformierten Bildes als Pixelachsen, und die des transformierten als physikalische Achsen bezeichnet. Dabei bezeichnen die Begriffe energiedispersiv und nicht-energiesdispersiv nur die Richtung in einem Detektorbild, jedoch nicht ob diese Achse transformiert ist oder nicht.

In der [Abbildung 5.1a](#) kann man sehr gut die prinzipielle Idee hinter der Transformation studieren. In diesem Winkelstreifenmuster geben die horizontalen Winkelstreifen bei 0° , $\pm 2^\circ$, $\pm 4^\circ$, $\pm 6^\circ$, ... die Koordinate auf der nicht-energiesdispersiven Achse an, die dem jeweiligen Startwinkel ϑ der Elektronen entspricht. Das durch die Winkelstreifen auf dem Detektor definierte Koordinatensystem des ϑ -Winkels ist damit ein krummliniges. Ein krummliniges Koordinatensystem ist vom physikalischen Standpunkt betrachtet natürlich äquivalent zu einem kartesischen, aber die damit dargestellten Daten sind deutlich schwieriger zu interpretieren und in der ARPES-Literatur werden üblicherweise kartesische Koordinatensysteme in Bandstrukturaufnahmen, also $E(k)$ -Plots, verwendet. Dieses krummlinige Koordinatensystem kann mit der Messsoftware in ein kartesisches Koordinatensystem umgerechnet werden. Dabei werden zwei Umrechnungsschritte in einem durchgeführt. Vom Auftreffort auf dem Detektor, genauer gesagt den Channelplates, in mm Einheiten über die Pixelpositionen auf der CCD-Kamera wird dann das ganze Bild in Energie [eV] und Winkel [$^\circ$] transformiert. Dabei ist sowohl die Vergrößerung des Kameraobjektivs relevant, als auch die Pixelgröße des CCD-Chips der Kamera. Diese Transformation von Pixel auf der nicht-energiesdispersiven Achse in Winkel bei fester Energie wird nach [\[122\]](#) durch ein Polynom 7. Grades beschrieben:

$$n[\text{Pixel}] = \frac{\text{Da}1[E] \cdot \vartheta + \text{Da}3[E] \cdot \vartheta^3 \cdot 10^{-2} + \text{Da}5[E] \cdot \vartheta^5 \cdot 10^{-4} + \text{Da}7[E] \cdot \vartheta^7 \cdot 10^{-6}}{M \cdot \text{Ps}} + \frac{n_{\text{total}}}{2} \quad (5.1)$$

Dieses Polynom ist, aufgrund der Spiegelsymmetrie des Analysators mit der energiedispersiven Achse und der Linsenachse als Spiegelebene, eine ungerade Funktion. Dies bedeutet, dass alle Koeffizienten gerader Potenzen gleich Null sind. In [Gleichung 5.1](#) gibt n den Pixelwert und ϑ den zugehörigen Winkel an. Der Parameter $Da1[E]$ ist die schon erwähnte lineare Winkeldispersion, vergleiche auch [Unterabschnitt 4.2.2](#), hier aber bei der Energie E . Die Terme $Da3[E]$ - $Da7[E]$ sind die nichtlinearen Anteile der Winkeldispersion; siehe auch [Tabelle 5.1](#) auf [Seite 66](#) für eine vollständige Auflistung der auftretenden Parameter und Variablen. Die energieabhängigen Parameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$ sind an den gleichen Energien definiert, wie auch die Elektronen für die Optimierungsläufe (siehe [Unterabschnitt 4.3.1](#)), also bei $E = E_{\text{kin}} - e_{\text{shift}} \cdot E_p$, E_{kin} , $E_{\text{kin}} + e_{\text{shift}} \cdot E_p$ mit $e_{\text{shift}} = 5\%$, dazwischen werden die Winkeldispersionen quadratisch interpoliert.

Auffallend an [Gleichung 5.1](#) ist, dass sie für die Umrechnung von Pixel zu Winkel noch nach ϑ aufgelöst werden muss. Für einen bestimmten Wert von n beinhaltet dies das Bestimmen der Nullstellen eines Polynoms 7. Grades. Da eine eindeutige Zuordnung zwischen Pixel und Winkel physikalisch zwingend erforderlich ist, müssen die Koeffizienten $Da1[E]$ - $Da7[E]$ so gewählt werden, dass genau eine Nullstelle existiert. Das heißt, die Polynomfunktion muss streng monoton steigend/fallend sein, und dies wurde schon beim Design des Linsenmodus, siehe [Unterabschnitt 4.2.2](#), berücksichtigt.

Die Umrechnung von Pixel zu Energie ist im Vergleich deutlich einfacher, da sie nach [\[122\]](#) nur aus der folgenden affinen Transformation besteht:

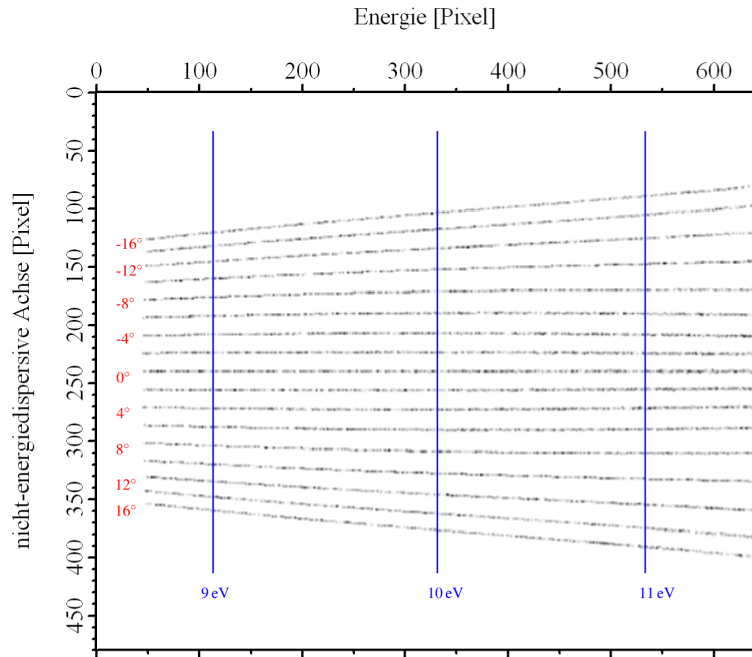
$$E = E_{\text{kin}} + De1 \cdot E_p \cdot M \cdot Ps \left(m - \frac{m_{\text{total}}}{2} \right) \quad (5.2)$$

Dabei ist m die Pixelkoordinate in energiedispersiver Richtung. Der Faktor $De1$ gibt die lineare Energiedispersion an, dies ist eine Konstante des Analysators und abhängig von dessen mittlerem Radius. In den Abbildungen [5.1a-b](#) ist ein Beispiel für ein Bilderpaar mit Pixel-Achsen (untransformiert) und Energie-Winkel-Achsen (transformiert) gezeigt. Das untransformierte Bild ist aus einer Simulation mit SIMION mit dem neuen Linsenmodus SWAM bei $RR = 0,5$ entstanden. Die Winkelstreifen sind nun äquidistant im Abstand von 2° und parallel zur Energieachse, das heißt das in diesem Bild auftretende Koordinatensystem ist kartesisch. Wie diese linsenmodusabhängigen Parameter $Da1 - Da7$ bestimmt werden können, ist im Folgenden gezeigt.

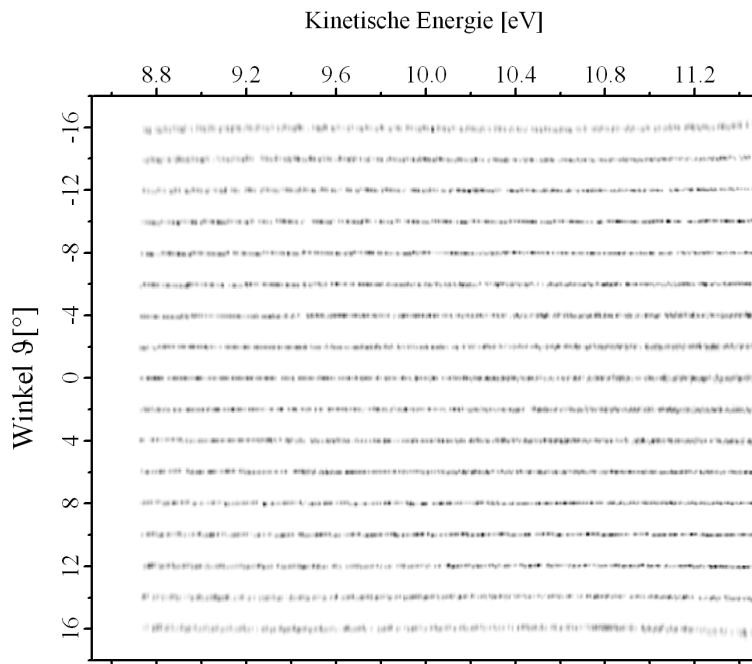
Bestimmung der Transformationsparameter aus der Simulation

Zur Bestimmung der Parameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$ muss mit dem Analysator ein Bild mit definierter Winkelstruktur aufgenommen werden. Dies kann entweder im Experiment mit der Winkelblende gemacht werden oder in der Simulation mit SIMION. Beide Wege werden hier besprochen und ihre Ergebnisse verglichen. Der große Vorteil der Simulation ist die gute Reproduzierbarkeit und der geringe Zeitaufwand. In der Simulation wird ein idealisiertes Experiment angenommen, und demzufolge gehen experimentelle Unabwägbarkeiten wie unexakte

5.1 TRANSFORMATION DER KOORDINATENACHSEN FÜR ARPES-MESSUNGEN



a.) Untransformiertes Bild



b.) Transformiertes Bild

Abbildung 5.1: Simuliertes Winkelstreifenmuster mit einem Quellfleck von 0,1 mm und 2° Abstand der Streifen. Das transformierte Bild b.) wurde aus a.) mit dem Programm *phoibos2d* der Firma SPECS transformiert. Der dazu notwendige Datensatz wurde aus den Simulationsdaten bestimmt.

Name	Zeichen	Einheit	Wert	Ursprung
Lineare Winkeldispersion	Da1[E]	mm/deg	0,5	Linsenmodusparameter
Nichtlinearer Anteil 3.Ordnung	Da3[E]	mm/deg ³	0,1	Linsenmodusparameter
Nichtlinearer Anteil 5.Ordnung	Da5[E]	mm/deg ⁵	0,01	Linsenmodusparameter
Nichtlinearer Anteil 7.Ordnung	Da7[E]	mm/deg ⁷	0,001	Linsenmodusparameter
Energieabstand	e_{shift}	ohne Einheiten	0,05	Linsenmodusparameter
Kinetische Energie	E_{kin}	eV	-	Messparameter
Durchlassenergie	E_p	eV	-	Messparameter
Lineare Energiedispersion	De1	mm ⁻¹	0,0033	Hemisphärenradius
Vergrößerung	M	ohne Einheiten	7,1	CCD-Detektor
Pixelgröße	Ps	μm	9,9	CCD-Kamera
Bildgröße (Energieachse)	m	Pixel	640	CCD-Kamera
Bildgröße (Winkelachse)	n	Pixel	480	CCD-Kamera

Tabelle 5.1: Transformationsparameter und -konstanten. Der Index E geht von 1 bis 3 und gibt die Energie der Definition der Parameter Da1[E]-Da7[E] an.

Ausrichtung der Komponenten, Herstellungstoleranzen der Winkelblende, Ausrichtung und Form des Elektronenkanonenstrahls und Restmagnetfelder nicht ein. Im Folgenden wird exemplarisch die Berechnung der Parameter Da1[E]-Da7[E] für die Mitteneenergie $E = E_{\text{kin}}$ aus Simulationsdaten durchgeführt.

Für SIMION wurden wieder Elektronendefinitionen im ION-Format erzeugt, dabei wurde ein 0,1 mm-Quellfleck angenommen. Der ϑ -Winkel der Elektronen wurde von 0° bis $\pm 16^\circ$ in 2° -Schritten variiert und β wurde, wie in [Unterabschnitt 3.2.2](#), gaußverteilt um 0° mit einer Halbwertsbreite von 5° variiert. Dazu wurde $E_{\text{kin}} = 10\text{eV}$ und $E_p = 20\text{eV}$ verwendet, und damit ein Bremsfaktor von 0,5. Die so entstandenen Daten können dann mit dem Auswerteprogramm `calc.awk` in ein Bild umgewandelt werden. Dazu wurde ein gerader Spalt mit 0,5 mm verwendet und das so erhaltene Bild hat dann die gleichen Pixelkoordinaten wie in einem realen Experiment. Dieses Bild ist in [Abbildung 5.1a](#) zu sehen, dabei sind die Energien der Definition der Da1-Da7 Parameter angegeben. Der nächste Schritt ist, dass bei diesen Energien $E - e_{\text{shift}} \cdot E_p, E_{\text{kin}}, E + e_{\text{shift}} \cdot E_p$ ein Linienprofil mit 10 Pixel Breite genommen wird. Diese Profile, bestehend aus mehreren Peaks, wurden dann mittels eines Multipeak-Fits in Igor mit einer Gaußverteilung als Modellfunktion gefittet. Für die Mitteneenergie E_{kin} ist dies in [Abbildung 5.2](#) gezeigt, dabei zeigt der eingebettete Graph mit blauen Symbolen das aus [Abbildung 5.1a](#) extrahierte Profil und die rote Kurve den Multi-Peakfit.

Als Ergebnis dieses Fits erhält man die Peakpositionen und ihre Standardabweichungen. Nun werden in einer nichtlinearen Regression mit der Modellfunktion aus [Gleichung 5.1](#) die Parameter Da1[E]-Da7[E] bestimmt. Dies zeigt [Abbildung 5.2](#). Wie man mit bloßem Auge, und auch Anhand des relativ kleinen χ^2 -Wertes sieht, ist die Fitqualität hoch und dies kann man auch anhand der kleinen Standardabweichungen der gefitteten Parameter in [Tabelle 5.2](#) erkennen. Mit so bestimmten Parametern wurde die [Abbildung 5.1b](#) durch Transformation von [Abbildung 5.1a](#) erzeugt.

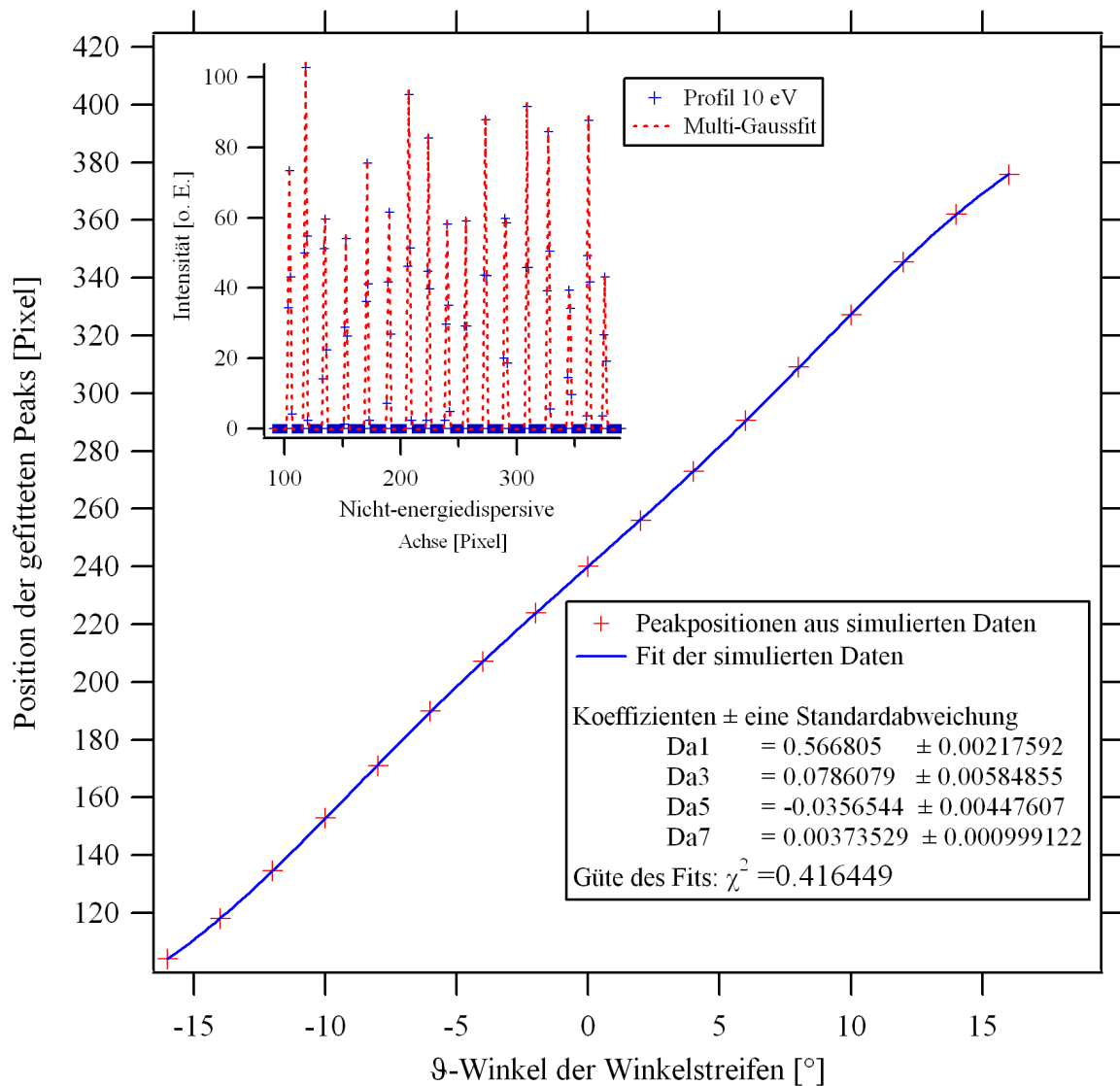


Abbildung 5.2: Nichtlineare Regression zur Bestimmung von $Da1[E]$ - $Da7[E]$ aus Simulationsdaten. Dazu wird im ersten Schritt bei den blau markierten Energien in [Abbildung 5.1a](#) ein Profil genommen und dieses Profil dann mit einem Multi-Gaußfit gefittet. Dies ist in dem eingebetteten Graphen zu sehen. Dann können die dadurch bestimmten Pixelpositionen der Peaks gegen den Startwinkel ϑ der Elektronen aufgetragen werden. Dies ist in dem großen Graphen mit den roten Kreuzen dargestellt. Diese Datenpunkte werden dann mit der Modellfunktion aus [Gleichung 5.1](#) gefittet und als Ergebnis erhält man die Parameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$.

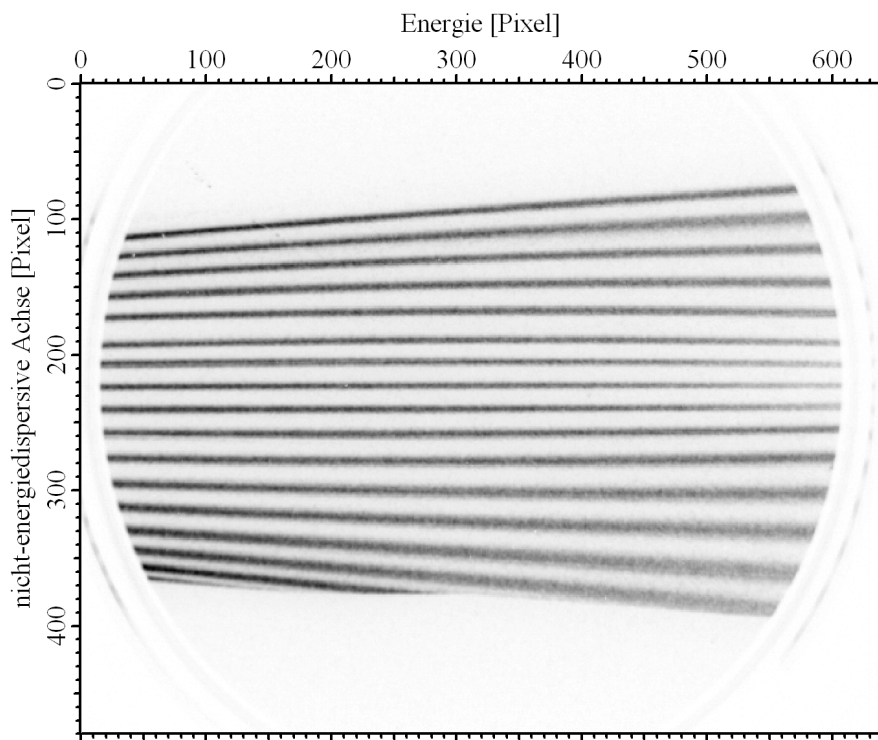


Abbildung 5.3: Experimentell aufgenommenes Bild mit der Winkelblende und dem Linsenmodus SWAM mit den Einstellungen: $RR = 0,5$, $E_{kin} = 10\text{eV}$, $E_p = 20\text{eV}$, $U_{det} = 1450\text{eV}$, $U_{screen} = 3000\text{eV}$, $I_{coil} = -35\text{mA}$, 10 Belichtungen mit je 1 s Belichtungszeit.

Bestimmung der Transformationsparameter aus realen Messdaten

Die Bestimmung der Transformationsparameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$ aus experimentell mit der Winkelblende aufgenommenen Daten ist eine Alternative zur Bestimmung der Parameter aus der Simulation. Die prinzipielle Vorgehensweise ist ganz analog zu der im vorangehenden Abschnitt beschriebenen.

Nach dem Extrahieren der Profile aus [Abbildung 5.3](#) ergibt sich ein Graph, wie in [Abbildung 5.4](#) gezeigt. Diesmal ist der ϑ -Winkel der Peaks aufgrund der Beschaffenheit der Winkelblende bekannt und man kann wieder die Pixelpositionen der Peaks über ihrem ϑ -Winkel auftragen. Dabei ist die Pixelposition des zentralen Streifens bei $\vartheta = 0$ nicht a priori bekannt; diese Unsicherheit wurde aber durch eine gewissenhafte Justage versucht zu minimieren. Diese Daten werden dann wieder mit dem Modell aus [Gleichung 5.1](#) analog zur Vorgehensweise im letzten Abschnitt gefittet. Die Fitqualität ist mit $\chi^2 = 4,6 \cdot 10^4$ deutlich schlechter als bei den simulierten Werten, dies ist auch gut in dem Graph [Abbildung 5.4](#) an den deutlichen Abweichungen der Fitkurve von den Datenpunkten erkennbar. Auch die zum Vergleich eingezeichnete gefittete Kurve aus [Abbildung 5.2](#) zeigt keine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

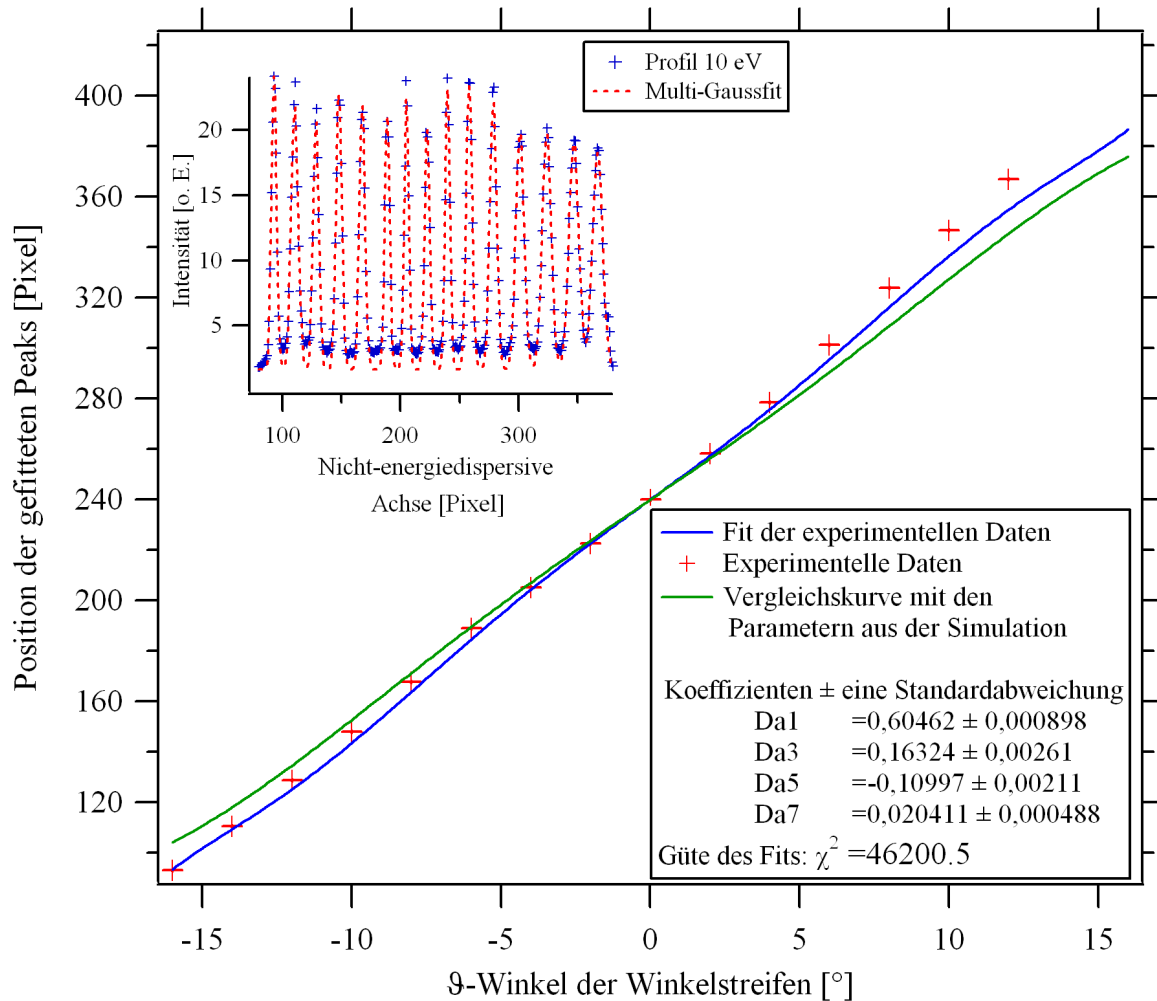


Abbildung 5.4: Nichtlineare Regression zur Bestimmung der Transformationsparameter mit Daten aus dem Experiment. Dazu muss im ersten Schritt ein Profil bei der gewünschten Energie genommen werden, dann dieses Profil gefittet werden (dies zeigt der kleine Bildausschnitt oben links) und dann nochmal ein Fit mit der Modellfunktion aus [Gleichung 5.1](#) gemacht werden.

Vergleich der verschiedenen Parametersätze

In [Tabelle 5.2](#) auf [Seite 70](#) sind die verschiedenen Winkeldispersionen aus der Simulation und dem Experiment einander gegenüber gestellt. Dabei fallen einige Dinge besonders auf. Die relativen Fehler der Fits der simulierten Daten sind immer deutlich kleiner als die der experimentellen Daten. Dies ist auch zu erwarten, ist doch die Simulation ein idealisiertes Experiment. Und die in der Simulation berechneten Elektronen weisen in den meisten Parametern eine Gaußverteilung auf. Desweiteren sind alle experimentell bestimmten Parameter immer größer als die aus der Simulation bestimmten. Dies zeigt sich auch, wenn man [Gleichung 5.1](#) mit den Parametern aus [Tabelle 5.2](#) für die drei Energien wie in den Abbildungen [5.6a-c](#) auf-

Profil	Parameter	Simulation	rel. Fehler %	Experiment	rel. Fehler %
9eV	Da1 [mm/deg]	0,5605(5)	0,03	0,610(1)	0,22
	Da3 [mm/deg ³]	0,0121(4)	3,6	0,073(4)	5,3
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0163(3)	2,0	-0,063(3)	5,0
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,00227(7)	3,3	0,011960(7)	6,1
10eV	Da1 [mm/deg]	0,5668(1)	0,03	0,604623(9)	0,15
	Da3 [mm/deg ³]	0,0786(3)	0,5	0,163243(3)	1,6
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0357(3)	0,8	-0,109973(2)	1,9
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,0037(6)	1,7	0,020411(5)	2,4
11eV	Da1 [mm/deg]	0,5288(1)	0,03	0,534422(1)	0,22
	Da3 [mm/deg ³]	0,1750(4)	0,2	0,458338(3)	0,8
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0585(3)	0,5	-0,290346(2)	1,0
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,00417(7)	1,7	0,053268(7)	1,2

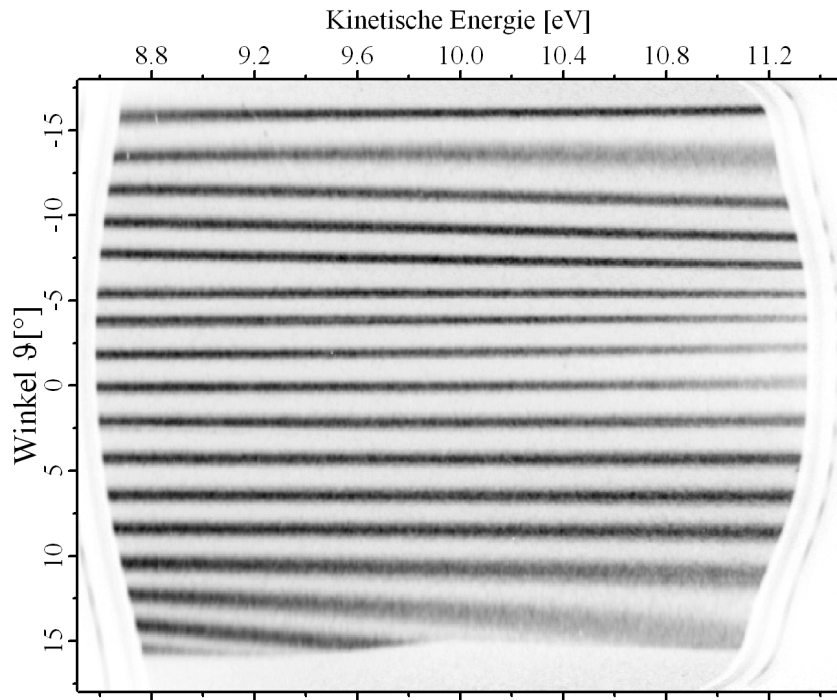
Tabelle 5.2: Vergleich der aus der Simulation und dem Experiment gewonnenen Parameter Da1[E]-Da7[E]. Die relativen Fehler sind dabei aus den ungerundeten Werten und ihrer Standardabweichungen bestimmt worden.

trägt. Die experimentelle Kurve (blau) weist eine größere Steigung auf, da beide Kurven bei 0° übereinstimmen und da beide ungerade Funktionen sind, ist für positive/negative ϑ die experimentelle Kurve größer/kleiner als die simulierte Kurve. Dies bedeutet anschaulich, dass bei gleichem Pixelwert ein Feature mit den experimentellen Parametern immer zu zahlenmäßig kleineren Winkeln ϑ hintransformiert wird. Da die Winkeldispersion Da als Einheit mm/deg besitzt, muss das mit den erwähnten größeren Werten von Da im experimentellen Fall einhergehen. In den transformierten Bildern 5.5a und 5.5b ist das daran zu erkennen, dass der überdeckte Winkelbereich mit den Simulationsparametern deutlich größer ist als mit den experimentellen. Der Abstand der verschiedenen Winkelstreifen ist im experimentellen Fall sehr nahe an dem Sollwert von 2°, dies liegt aber nur daran, dass die experimentellen Parameter Da aus diesem Bild bestimmt wurden.

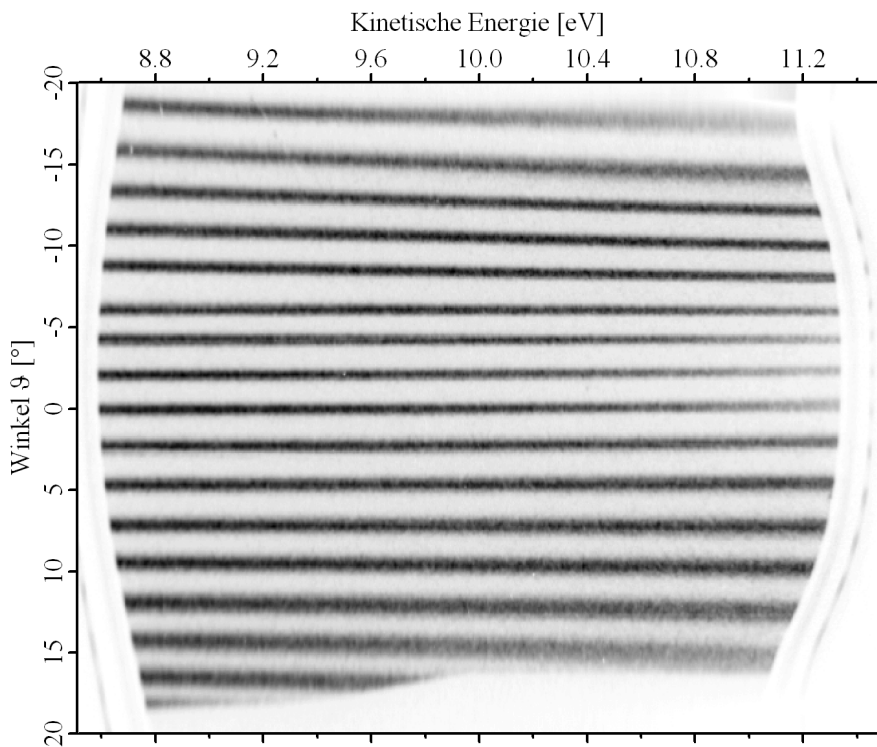
Nun stellt sich die Frage nach der Ursache dieses nicht zu vernachlässigenden Unterschieds. Ein Unterschied zwischen Simulation und Experiment ist die Verwendung der Winkelblende im Experiment. Es liegt nun nahe, die Simulationsparameter aus der Simulation inklusive Winkelblende zu bestimmen.

Die verwendete Winkelblende, siehe [Abbildung 3.3](#) auf [Seite 34](#), besitzt einen Radius von 20mm, auf dem die 200µm-Schlitze eingearbeitet sind. Damit die Symmetrie der Linse nicht geändert werden musste, wurde die Winkelblende in der Simulation als Halbkugel mit einem Radius von 20mm modelliert. Diese Halbkugel besteht in der Simulation aus einem Gitter. Dieses Gitter lässt alle Elektronen passieren, sorgt dazu aber für Feldfreiheit innerhalb der Winkelblende. Wenn man nun die Parameter Da1-Da7 mit einem neuen Simulationslauf inklusive eines Modells der Winkelblende berechnet, ändert sich die Winkeldispersion zu den in [Tabelle 5.3](#) angegebenen Werten. Graphisch ist der Unterschied der Parameter Da auch in

5.1 TRANSFORMATION DER KOORDINATENACHSEN FÜR ARPES-MESSUNGEN



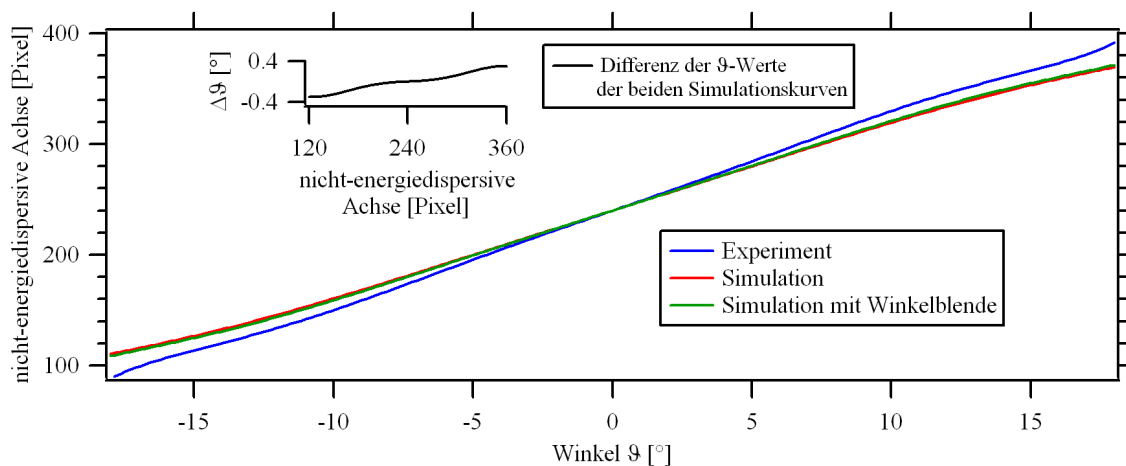
a.) Transformiert mit experimentell bestimmten Parametern.



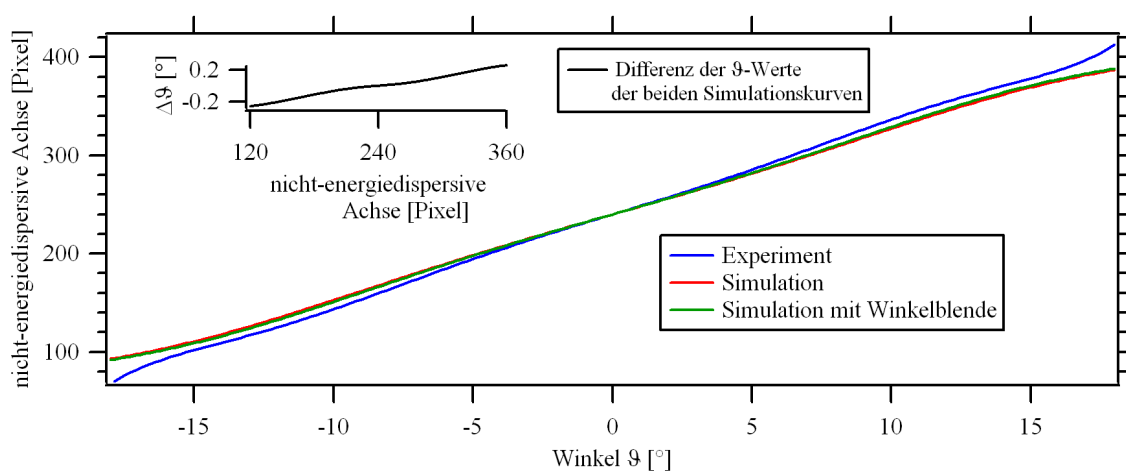
b.) Transformiert mit aus der Simulation bestimmten Parametern.

Abbildung 5.5: Vergleich der Wirkung der Transformation für experimentell und aus der Simulation bestimmte Parametersätze.

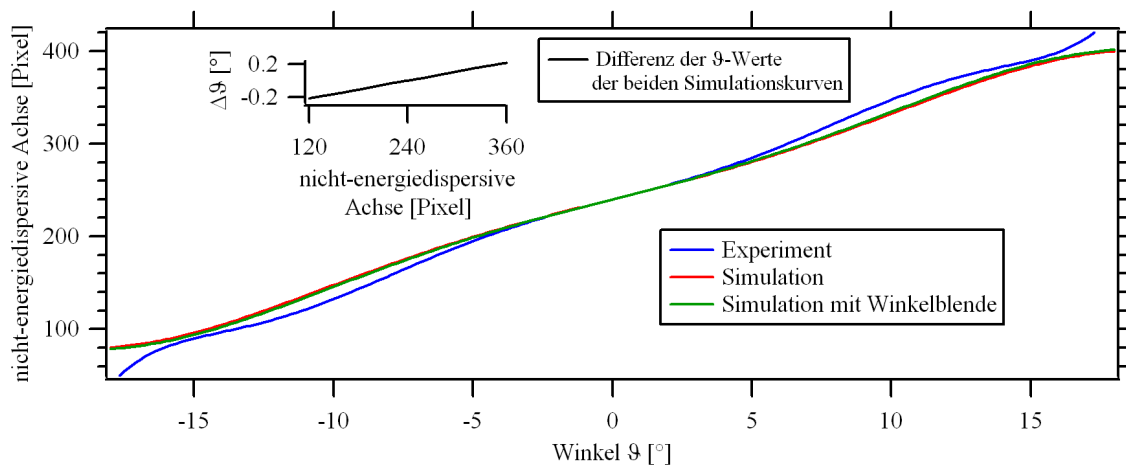
5 EXPERIMENTELLE BESTIMMUNG DER LINSENMODUSEIGENSCHAFTEN



a.) Profil bei 9 eV



b.) Profil bei 10 eV



c.) Profil bei 11 eV

Abbildung 5.6: Vergleich der Polynomfunktionen aus [Gleichung 5.1](#) für die aus dem Experiment und der Simulation bestimmten Parameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$. Der eingebettete Graph in der linken oberen Hälfte zeigt die θ -Differenz zwischen der Simulationskurve und der Simulationskurve mit Winkelblende.

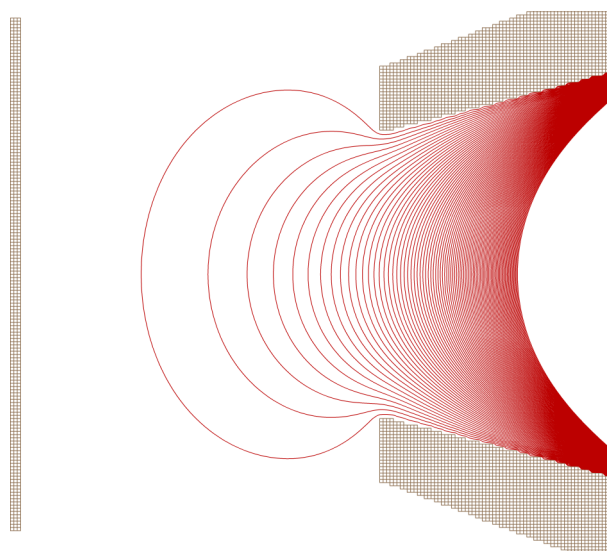
Profil	Parameter	Simulation	Fehler
9 eV	Da1 [mm/deg]	0,5637(2)	0,03
	Da3 [mm/deg ³]	0,0288(4)	1,5
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0268(3)	1,2
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,00405(7)	1,8
10 eV	Da1 [mm/deg]	0,5718(1)	0,03
	Da3 [mm/deg ³]	0,0936(4)	0,4
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0446(2)	0,6
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,00507(6)	1,2
11 eV	Da1 [mm/deg]	0,5350(1)	0,02
	Da3 [mm/deg ³]	0,1901(3)	0,2
	Da5 [mm/deg ⁵]	-0,0675(3)	0,4
	Da7 [mm/deg ⁷]	0,00552(7)	1,2

Tabelle 5.3: Transformationsparameter berechnet aus der Simulation inklusive Winkelblende.

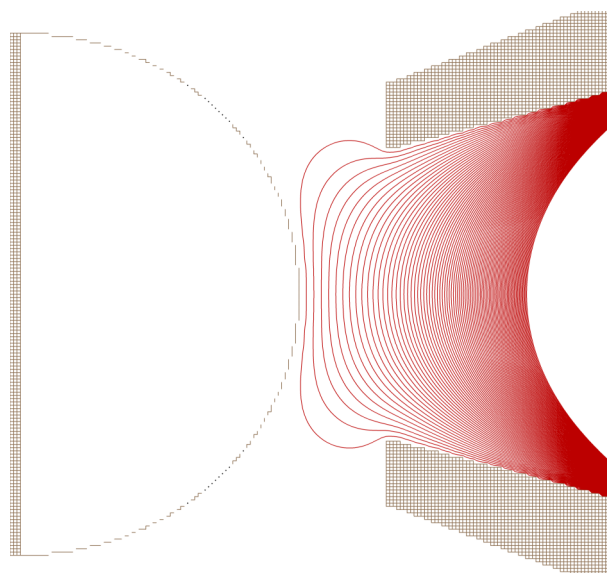
den Abbildungen 5.6 als grüne Kurve eingezeichnet. Da der Abstand zwischen den beiden Simulationskurven so gering ausfällt, ist die durch die verschiedenen Parameter Da entstehende Winkeldifferenz $\Delta\vartheta$ in den eingebetteten Graphen dargestellt. Die Simulationskurve mit Winkelblende liegt immer zwischen den simulierten (ohne Winkelblende) und den experimentellen Werten. Das bedeutet, dass die in der Simulation mitbetrachtete Winkelblende die Parameter Da etwas zu den experimentellen Ergebnissen hinverschiebt und damit die Tendenz die richtige Richtung aufweist. Der Einfluss ist aber dennoch zu gering, damit dies der alleinige Grund für die Abweichung von Simulation und Experiment sein kann.

Eine Ursache für die Änderung der Winkeldispersion mit der Winkelblende liegt in der Änderung des Feldverlaufs vor der Linse durch die Winkelblende. Dieser Effekt ist sowohl abhängig von der Entfernung zwischen Winkelblende und Linse, als auch von dem Potential des zweiten Tubus (der erste ist immer geerdet). Für den hier relevanten Fall mit dem Bremsfaktor 0,5 liegt der zweite Tubus auf 10,28 V, siehe auch [Abschnitt A.1](#) und [Gleichung 3.5](#). Ein Vergleich der Äquipotentiallinien in SIMION ist in den Abbildungen 5.7a-b im Bereich vor der Linse gezeigt. Dieser unterschiedliche Potentialverlauf beruht auf der Verwendung der Winkelblende als ideales Gitter, da dadurch das Innere der Winkelblende feldfrei ist. Nun könnte man annehmen, dass, wenn man Felddurchgriffe in die Winkelblende erlaubt, dieser Effekt sich ändert. Diese Vermutung konnte in einer Vergleichssimulation mit Felddurchgriff in die 200 μm Schlitze widerlegt werden.

Anschaulich kann [Abbildung 5.7b](#) dadurch erklärt werden, dass die Äquipotentiallinien vor der Winkelblende auf ein kleineres Volumen komprimiert werden. Dies bewirkt einen geänderten räumlichen Abstand der Linien und damit andere E -Feld-Vektoren wegen $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$, denn diese sind proportional zur auf geladene Teilchen wirkenden elektrischen Kraft. Das heißt der Bahnverlauf der Elektronen wird, vor allem für größere Winkel, durch die Präsenz der Winkelblende verändert.



a.) Äquipotentiallinien ohne Winkelblende.



b.) Äquipotentiallinien mit Winkelblende.

Abbildung 5.7: Darstellung des Feldverlaufs mit SIMION. Die roten Linien beschreiben Äquipotentiallinien im Abstand von 20 mV beginnend mit am linken Rand 20 mV. In dem Modell ist die braune Box am linken Rand die Probe, beziehungsweise Probe und Winkelblende, und im rechten Rand sieht man einen Teil des ersten Tubus der Linse.

An dieser Stelle ist eine Entscheidung nötig, welcher Datensatz für die Transformation verwendet werden soll. Zur Auswahl stehen die experimentellen Daten und die aus der Simulation (mit und ohne Winkelblende) bestimmten. Der experimentelle Datensatz verspricht zwar auf den ersten Blick eine sehr gute Winkelskala, hat aber den gravierenden Nachteil, dass dadurch

die Unzulänglichkeiten des Experiments in die Auswertung miteingehen. Sprich die Fehler des Experiments werden „wegtransformiert“. Dies kann und darf nicht das Ziel der Transformation sein. Außerdem wird die Aussagekraft der Daten geschmälert, da für ein unabhängiges Wiederholen des Experimentes dann auch andere Transformationsparameter verwendet werden würden und damit sehr wahrscheinlich die hier beschriebenen Ergebnisse nicht reproduziert werden können. Aus diesem Grund muss von einer Verwendung des experimentellen Datensatzes Abstand genommen werden.

Nun bleibt die Frage, welcher Simulationsdatensatz verwendet werden soll. Ein Anhaltspunkt für die Wahl sind die eingebetteten Graphen in den Abbildungen 5.6a-c auf Seite 72. Dort ist für eine gegebene Pixelposition vor der Transformation die durch die unterschiedliche Transformation entstandene Differenz $\Delta\vartheta$ aufgetragen. Dies ist ein Maß für die Verschiedenheit der Transformation. Es ist zu beobachten, dass der Betrag der Abweichungen einerseits wie zu erwarten symmetrisch um die Mitte bei 240 Pixel ist, und andererseits für große Winkel ϑ zunimmt. Letzteres kann auch mit der Komprimierung der Äquipotentiallinien, siehe letzter Abschnitt, erklärt werden. Die Differenzen sind für die 9eV-Elektronen doppelt so groß wie für die beiden anderen Energien, wo die Kurven fast den gleichen Verlauf besitzen.²⁶ Die Unterschiede der beiden Datensätze sind insgesamt betrachtet deutlich kleiner als die zwischen Simulation und Experiment. Im weiteren Verlauf werden nun die Parameter Da aus der Simulation ohne Winkelblende verwendet. Dies hat den Vorteil, dass auch reale Messungen ohne Winkelblende mit dem gleichen Datensatz transformiert werden können. Die ab hier verwendeten Transformationsparameter sind aus Gründen der Vollständigkeit in Abschnitt A.2 auf Seite 93 angegeben.

5.2 Messungen mit der Winkelblende

Die Geometrie der Kammer und die Position der Winkelblende kann Kapitel 3 entnommen werden. Für alle weiteren Messungen wurde ein krummer Schlitz mit 0,1 mm Breite verwendet. Der Analysator war ein Phoibos mit 150 mm mittlerem Radius; mit einem Modell dieses Analysators wurden auch die Simulationen durchgeführt.

5.2.1 Variation des Arbeitsabstandes

Im folgenden Experiment wurde der Arbeitsabstand zwischen Analysatorlinse und Winkelblende variiert. Dies sollte zum Einen den als Designgrundlage verwendeten Wert von 26,25 mm überprüfen und andererseits die Abhängigkeit der Winkelauflösung und der Winkelakzeptanz als Funktion des Arbeitsabstandes untersuchen. Dies ist vor allem im Hinblick auf Abweichungen vom idealen Arbeitsabstand interessant, was bei Experimenten durchaus auftreten kann.

²⁶An dieser Stelle darf nicht von einer Symmetrie in der Energie um $E_{\text{kin}} = 10\text{eV}$ ausgegangen werden.

Dazu wurde der Abstand der Winkelblende mittels der y-Achse des Manipulators in Schritten von 0,5 mm über einen Bereich von ca. 10 mm variiert und bei einem konstantem Bremsfaktor von $RR = E_{\text{kin}}/E_p = 10\text{eV}/20\text{eV} = 0.5$ jeweils ein Bild mit 10 Belichtungen und einer Belichtungszeit von 1 s aufgenommen. Die Detektorspannung wurde während der gesamten Messung konstant gehalten. Für jeden y-Wert wurde die Elektronenquelle sowohl in horizontaler als auch in vertikaler Richtung nachjustiert, bis das Bild scharf war.

Der von der Simulation bekannte Wert von 26,25 mm wurde im Experiment folgendermaßen eingestellt. Da die Maße der Winkelblende bekannt sind, wurde diese mit dem Manipulator soweit an den Analysator herangefahren bis sie ihn berührt hat. Danach wurde sie um das definierte Reststück von 6,25 mm in Richtung Kammermitte gefahren. Diese Prozedur wurde von zwei Personen mehrmals wiederholt. Nach dieser Justage wurde der so bestimmte Arbeitsabstand als 26,25 mm betrachtet. Diese Vorgehensweise wurde auch durch die Tatsache gestützt, dass die Sollposition des Probenortes, also der Vorderseite der Probe in der Winkelblende, in der Kammermitte sein sollte, was sowohl in Richtung der Elektronenkanone als auch senkrecht zur Linsenachse durch Messungen bestätigt werden konnte.

Die Winkelakzeptanz wurde durch Abzählen der Winkelstreifen an den Stellen $E_{\text{kin}} - e_{\text{shift}} \cdot E_p = 9\text{eV}$, $E_{\text{kin}} = 10\text{eV}$ und $E_{\text{kin}} + e_{\text{shift}} \cdot E_p = 11\text{eV}$ bestimmt. Diese Energien sind in **Abbildung 5.1a** auf **Seite 65** blau eingezeichnet und so gewählt, dass sie mit den in den Simulationen verwendeten Energien und den Energien, an denen die Transformationsparameter bestimmt wurden, übereinstimmen.

In **Abbildung 5.8** ist die Winkelakzeptanz als Funktion des Arbeitsabstandes dargestellt. Darin sind sowohl Daten aus dem Experiment zu sehen, als auch zum Vergleich der geometrische Öffnungswinkel aus **Gleichung 1.3**. Diese Kurve ist eine obere Schranke für die Winkelakzeptanz und man sieht deutlich, warum der ursprüngliche Arbeitsabstand von 40 mm für eine Winkelakzeptanz von bis zu 18° verkleinert werden musste. Beim Betrachten der **Abbildung** fallen einige Dinge ins Auge. Die Winkelakzeptanz ist für 9 eV über den gesamten Bereich konstant, für die beiden anderen Energien fällt sie, beginnend mit 26,25 mm, in zwei Stufen ab. Das Abfallen der Winkelakzeptanz mit steigendem Arbeitsabstand, wie aus der roten Kurve zu erwarten, kann damit im Falle der Profile bei 10 eV und 11 eV qualitativ bestätigt werden. Die Differenz zur theoretischen Obergrenze beträgt dabei immer mehr als 4° .

Von den Winkelstreifen bei 0° und $\pm 8^\circ$ in **Abbildung 5.1a** wurden bei den Energien E_{kin} , $E_{\text{kin}} \pm e_{\text{shift}} \cdot E_p$ ein Profil von 10 px Breite genommen und dann die Kurve mit einer Gaußkurve gefittet. Die so bestimmten Werte der Halbwertsbreite der Gaußpeaks wurde dann wie in den **Abbildungen 5.9a-c** gezeigt als Funktion des Arbeitsabstandes aufgetragen.

In allen drei Graphen zeigt sich der Trend, dass die Halbwertsbreite für den Mittelstreifen bei 0° klein im Vergleich zu den anderen beiden ist. Weiterhin ist die Halbwertsbreite dieses 0° -Streifens in **Abbildung 5.9c** nahezu unabhängig vom Arbeitsabstand; für die beiden anderen Energien nimmt sie sogar leicht ab. Der $+8^\circ$ -Streifen hat im Gegensatz dazu immer die größte Halbwertsbreite und den Trend, dass diese mit zunehmendem Arbeitsabstand anwächst. Der -8° -Streifen dagegen zeigt für alle drei Energien das gleiche Verhalten und steigt nur leicht mit dem Arbeitsabstand an. Die Messwerte für den Sollprobenabstand von 26,25 mm

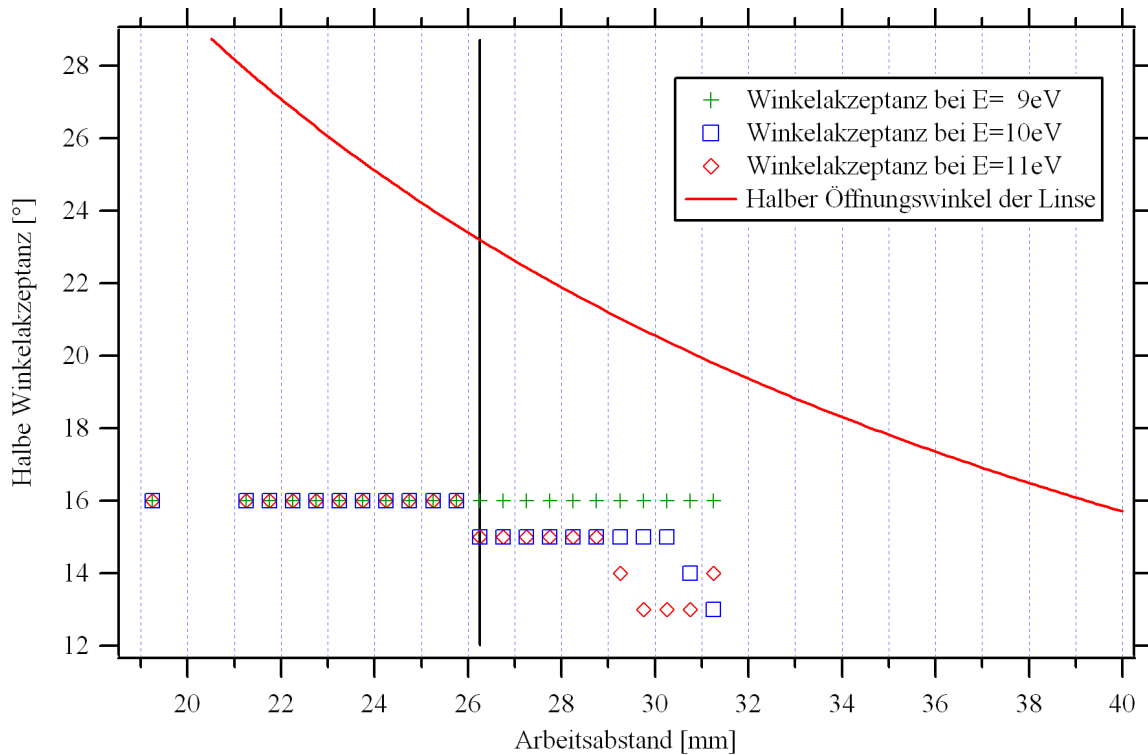
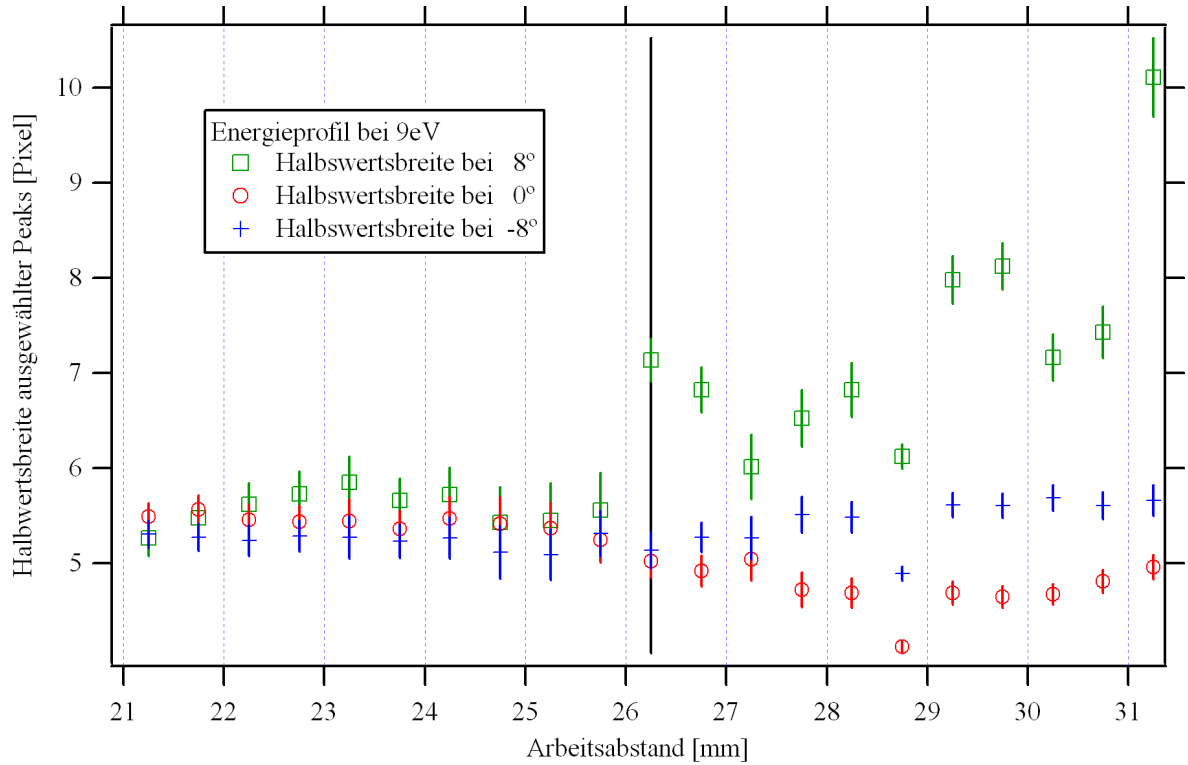


Abbildung 5.8: Winkelakzeptanz als Funktion des Arbeitsabstandes. Die senkrechte Linie bei 26,25 mm ist der für die Simulationen genutzte Arbeitsabstand. Der halbe Öffnungswinkel der Linse wurde aus [Gleichung 1.3](#) berechnet. Der Abstand der Winkelstreifen beträgt 2° , deswegen kann in der Abbildung der halbe Öffnungswinkel zum Vergleich aufgetragen werden.

fallen bei dem $+8^\circ$ -Streifen aus der Reihe und sollten als Ausreißer betrachtet werden. Dieser Ausreißer kann nicht dadurch erklärt werden, dass dies der erste Messpunkt oder der Umkehrpunkt der Bewegung des Manipulators ist, da der Manipulator vom größten zum kleinsten Wert gefahren wurde, um den Einfluß des mechanischen Spiels so klein wie möglich zu halten. Weiterhin ist das Verhalten der $\pm 8^\circ$ -Streifen nicht gleich, was aus Symmetriegründen zu erwarten wäre.

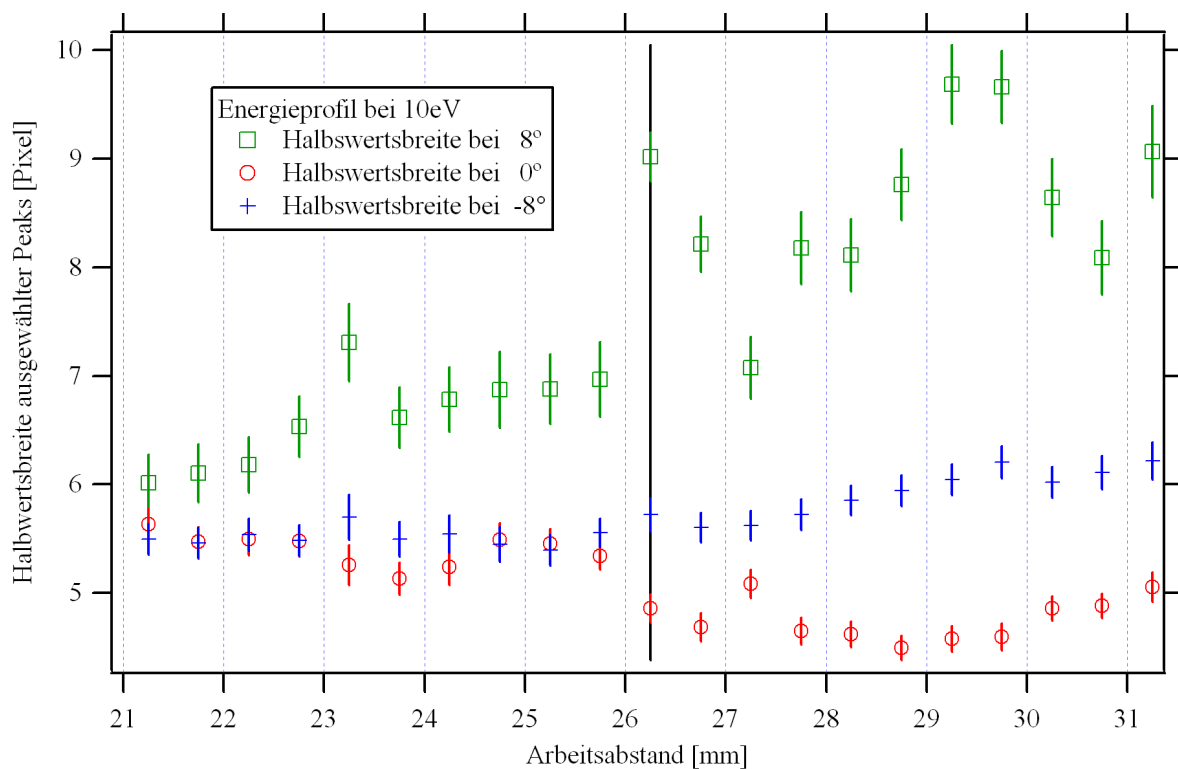
Anhand dieser Daten wurde entschieden, den Arbeitsabstand für die nachfolgenden Messungen auf 25,75 mm zu ändern, da dieser Wert geringere Peakbreiten bzw. gleichmäßigere Peakbreiten aufzuweisen hat und außerdem eine bessere Winkelakzeptanz vorweist. Die Abweichungen zum Sollwert von 26,25 mm ist damit nur 0,5 mm und wird als Justagefehler der Winkelblende auf dem Manipulator angesehen. Deswegen werden auch für diese Arbeitsabstände die für 26,25 mm gerechneten Transformationsparameter benutzt.



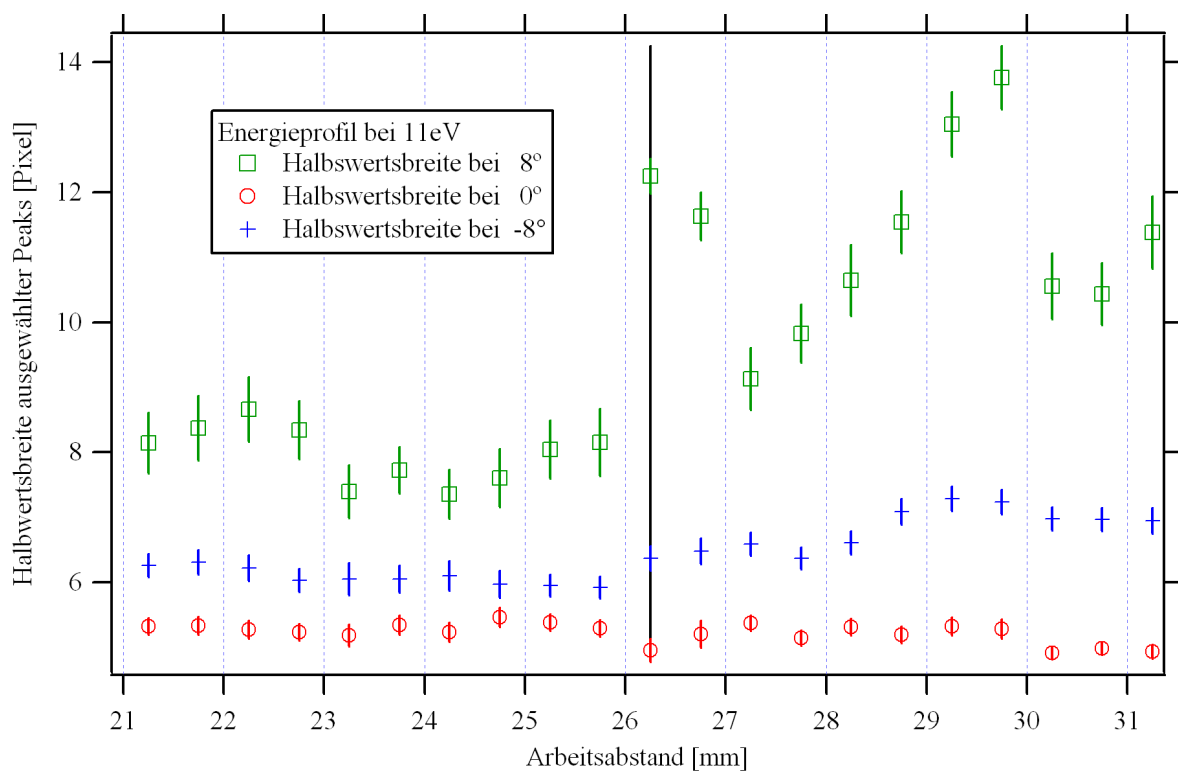
a.) Profil bei 9 eV

5.2.2 Vergleich von zwei Winkelstreifenmustern

In den Abbildungen 5.10a-b sind zwei Winkelstreifenmuster aus der Simulation und dem Experiment zu sehen. Der Abstand der Winkelstreifen sollte in beiden Bildern 2° betragen, dies ist aber nur in der Simulation der Fall. Im Experiment nimmt der Abstand der Streifen mit größer werdendem ϑ zu. Die Streifen sind über große Winkelbereiche parallel zur Energieachse, dies zeigt die gute Qualität der nichtlinearen Winkeldispersionsparameter Da_3 - Da_7 . Der Grund dafür, dass die Zuordnung der Winkelstreifen für größere ϑ -Winkel nicht zutrifft, liegt an einem zu großen Da_1 . Dies stimmt auch mit dem Vergleich der Parameter aus Experiment und Simulation in Tabelle 5.2 auf Seite 70 überein. Die Breite der Winkelstreifen im Experiment kann nicht direkt mit denen aus der Simulation verglichen werden. Der Grund dafür liegt in der ϑ -Verteilung der die Winkelblende verlassenden Elektronen. Bei einem Abstand der Schlitze von 20 mm von der in der Winkelblende sitzenden Probe, ergibt sich mit einer Schlitzbreite von $200 \mu\text{m}$ eine Bogenlänge von $0,01 \text{ rad} = 0,57^\circ$. Diese Winkelverteilung der Elektronen beim Austritt aus der Winkelblende muss dann auch in die gemessene Winkelverteilung am Detektor eingehen. In der Simulation besitzen die Streifen, wie zu erwarten, die richtige ϑ -Koordinate, ab 16° jedoch sind sie nicht mehr gerade und weisen leichte Unregelmäßigkeiten auf. Beim Entwurf des Linsenmodus ist für diesen Bremsfaktor eine Winkelakzeptanz von 17° erreicht worden. Da der Abstand der Winkelstreifen in den Abbildungen 2° beträgt, sieht man keine 17° Streifen und nur am niederenergetischen Rand noch einen Teil des 18° Streifens.



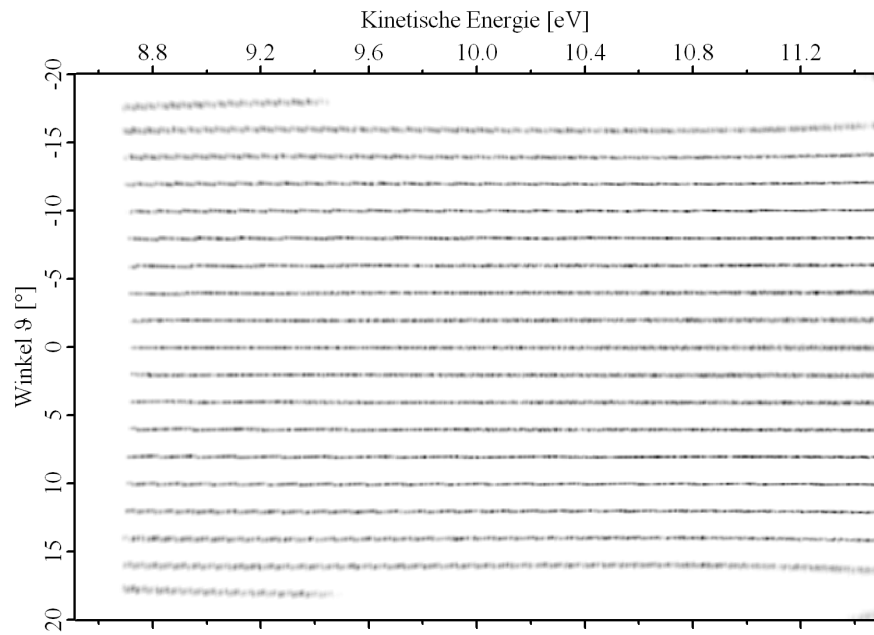
b.) Profil bei 10eV



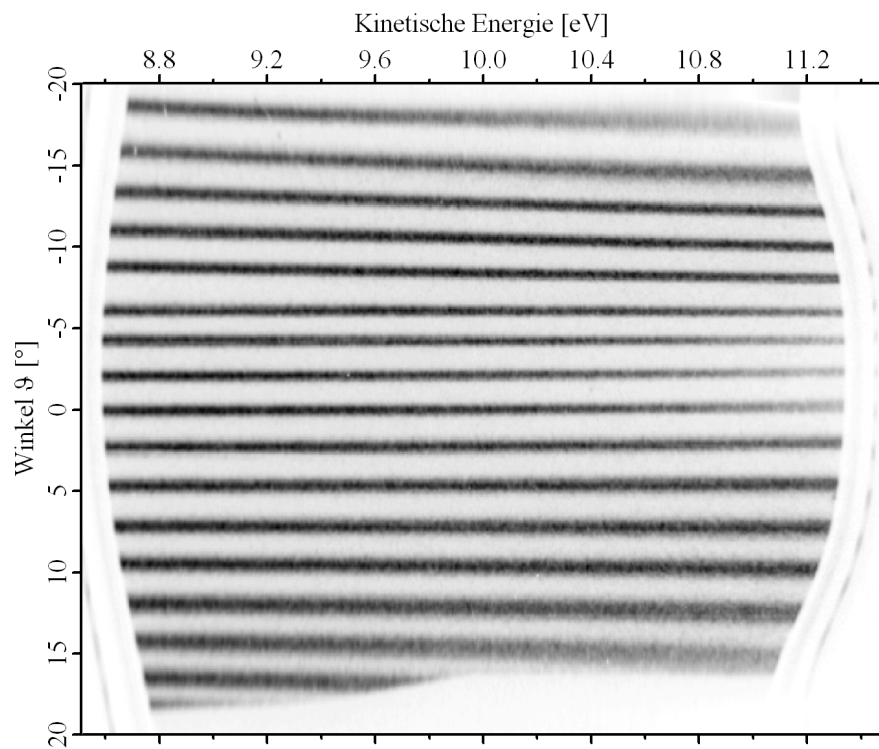
c.) Profil bei 11eV

Abbildung 5.9: Halbswertsbreiten ausgewählter Peaks als Funktion des Arbeitsabstandes mit der Standardabweichung des Fits als Fehlerbalken. Die senkrechte Linie bei 26,25 mm ist der für die Simulationen genutzte Arbeitsabstand.

5 EXPERIMENTELLE BESTIMMUNG DER LINSENMODUSEIGENSCHAFTEN



a.) *Simuliertes Winkelstreifenmuster.*



b.) *Experimentelles Winkelstreifenmuster.*

Abbildung 5.10: Vergleich zweier Winkelstreifenmuster aus der Simulation und dem Experiment mit $E_{kin} = 10\text{eV}$, $E_p = 20\text{eV}$ und $\Delta\vartheta = 2^\circ$.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein neuer Linsenmodus, der Super Wide Angle Mode (SWAM), für winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie entworfen und charakterisiert. Dieser Linsenmodus wurde für einen hemisphärischen Elektronen-Energie-Analysator vom Phoibostyp entwickelt; dabei sollte die geänderte elektronenoptische Abbildung durch alleinige Veränderung der Linsenpotentiale erreicht werden.

Für diesen Entwurf eines winkelaufgelösten Linsenmodus von Grund auf, wurde sowohl die Elektronenoptik von elektrostatischen Linsen erörtert, als auch die Funktionsweise des Analysators en détail erklärt. Dabei wurde vor allem auf die für winkelaufgelöste (ARPES) Messungen relevanten Eigenschaften des Analysators, nämlich Form der Eintrittsspalte, elektronenoptische Abbildung der Linse und den zwei-dimensionalen CCD-Detektor, eingegangen. Nach einer heuristischen Einführung von winkelaufgelösten Linsenmodi wurden alle ihre speziellen Eigenschaften, das sind die Winkelakzeptanz, -auflösung und dispersion definiert und untersucht. Damit konnte eine einfache elektronenoptische Beschreibung der winkelaufgelösten Linsenmodi im Allgemeinen gemacht werden; diese hat als Analogon eine Sammellinse der Lichtoptik mit umgekehrtem Strahlengang.

Da eine analytische Lösung der Bewegungsgleichung in der verwendeten elektrostatischen Linse mit fünf variablen Potentialen nicht existiert, wurde das Finite-Elemente-Programm SIMION zur numerischen Lösung der Laplace-Gleichung und der Trajektorienberechnung verwendet. Diese Simulationssoftware erlaubte sowohl den Potentialverlauf darzustellen, visuelle Darstellungen der Strahlengänge zu generieren, als auch quantitative Aussagen über die Elektronenbahnen zu treffen. Mit diesen Voraussetzungen wurde ein systematischer lokaler Optimierungsansatz zur Berechnung eines winkelaufgelösten Linsenmodus von Grund auf neu entwickelt. Für diesen Ansatz wurde die Winkelauflösung als zu optimierende Größe festgelegt und die Eigenschaften eines winkelaufgelösten Linsenmodus als Nebenbedingungen hinzugenommen. Die Durchführung der Optimierungsläufe beinhaltete das Entwerfen mehrerer Softwareprogramme, um einerseits die elektronenoptischen Simulationen möglichst effizient und reproduzierbar ablaufen zu lassen, und andererseits die Auswertung großer Datenmengen zu ermöglichen. Dieser iterative Optimierungsansatz war, obgleich lokal und ohne die Konvergenz beschleunigender zusätzlicher Gradientenansätze, sehr erfolgreich. Es konnten für jeden Bremsfaktor zwischen 0,2 bis 2,5 mit einer Schrittweite von 0,1 jeweils fünf Linsenpotentiale gefunden werden, die einen winkelauflösenden Linsenmodus darstellen und eine Winkelabbildung von bis zu 17° erlauben. Auffälligkeiten bei den dadurch gefundenen Abbildungseigenschaften der Linse konnten als sphärische Aberration (Einfluss der Quellflecksgröße) und Bildfeldwölbung (prinzipieller Abbildungsfehler) identifiziert werden. Ansät-

ze zur Korrektur der Bildfeldwölbung wurden versucht, führten aber nur zu einer schlechteren Winkelauflösung über das Bild verteilt.

Der so komplett neu entworfenene Linsenmodus wurde dann in einem winkelaufgelösten Photoemissionsexperiment verwendet. Da eine definierte Winkelstruktur der Elektronen zu Testzwecken erforderlich ist, wurde dafür das Standardwerkzeug der ARPES-Testmessungen, eine Winkelblende, benutzt. Mit dieser Winkelblende konnten im Experiment mit der Simulation vergleichbare Winkelstreifenmuster aufgenommen werden. Weiterhin wurde der Übergang von dem durch die Winkelblende aufgespannten krummlinigen Koordinatensystem in ein kartesisches untersucht. Diese Transformation ist prinzipiell nötig, da durch chromatische Aberrationen in der Linse die Winkelabbildung als Funktion der Elektronenenergie nicht linear ist. Zusätzlich zu diesem Abbildungsfehler sorgt der Trapez-Effekt der Hemisphären des Analysators für ein nicht kartesisches Koordinatensystem auf dem Detektor. Dadurch müssen die Detektorbilder, unabhängig von Experiment oder Simulation, mit einer Transformationssoftware in kartesische Koordinaten überführt werden. Einige Parameter der dazu verwendeten Transformationssoftware sind von Eigenschaften des Linsenmodus abhängig und wurden aus diesem Grund für den SWAM neu berechnet. Beim Vergleich der dabei berechneten Winkeldispersionen aus der Simulation und dem Experiment wurde festgestellt, dass die linearen Winkeldispersionen im Experiment deutlich größer sind, als die aus der Simulation ermittelten. Ein Grund dafür ist die Präsenz der Winkelblende selbst. Eine Vergleichssimulation mit Modellierung der Winkelblende zeigte, dass die unterschiedlichen Winkeldispersionen mit und ohne Blende zu einer maximalen Abweichung des interpretierten Winkels von $0,4^\circ$ führt. Eine qualitative Erklärung dafür ist der veränderte Feldverlauf vor der Linse durch die Präsenz der Winkelblende. Aus diesem Grund muss die Eignung der Winkelblende als Standardwerkzeug für winkelaufgelöste Testmessungen stark in Zweifel gezogen werden. Lösungsansätze dafür könnten eine in-situ drehbare Elektronenquelle sein. Diese müsste genügend weit entfernt vor der Linse angebracht sein, um den Effekt der Feldverzerrung zu vermeiden. Die Verwendung einer planen Winkelblende hingegen muss als Alternative ausfallen, da die dafür nötige mechanische Präzision bei der Herstellung der Schlitze schwer realisierbar ist.

Eine Untersuchung der Abhängigkeit der Winkelakzeptanz vom Arbeitsabstand konnte qualitativ die geometrisch erwartete Abhängigkeit zeigen. Ein weiteres Ergebnis dieses Experiments war, dass sich die Winkelauflösung selbst nur sehr schwach mit dem Arbeitsabstand ändert.

Da die Literatur im Bereich der elektrostatischen Linsenabbildung *mit Winkelauflösung* sehr spärlich ist, kann diese Arbeit in vielfältiger Weise fortgeführt werden. Einerseits wäre eine tiefgehende theoretische Beschreibung der elektronenoptischen Eigenschaften inklusive der Aberrationsterme wünschenswert. Die Frage nach deren Einfluss ist von enormem Interesse zur Erreichung der ultimativen Winkelauflösung einer bestehenden Linse. Auch eine quantitative Beschreibung der vorhandenen Aberrationen und ihr Einfluss auf die Winkelauflösung sind von Interesse. Dieses quantitative Wissen und ein globaler Optimierungsansatz könnten dann auch dazu verwendet werden, die dabei auftretenden Aberrationen direkt zu minimieren.

Ein Beispiel für einen globalen Optimierungsansatz ist die genetische Optimierung. Dieser Ansatz würde es erlauben, große Teile des Parameterraums der Optimierung effizient abzusuchen.

Die hier aufgeworfene Frage nach der prinzipiellen Eignung der Winkelblende für ARPES-Messungen muss in jedem Fall tiefer gehend untersucht werden. Die hier erkannten Probleme lassen die Eignung für weitere Testmessungen mehr als fraglich erscheinen. Gibt es numerische Korrekturmöglichkeiten des Einflusses der Winkelblende? Wie verändert die Winkelblende die Winkelachsen im Vergleich zwischen Experiment mit Winkelblende und Experiment ohne? Gibt es praktikable Alternativen zur Winkelblende und wie sind diese im Vergleich zur Winkelblende?

Der in dieser Arbeit konzipierte Linsenmodus SWAM kann nun dazu verwendet werden, winkelaufgelöste Messungen noch schneller und effizienter zu gestalten.

7 Literaturverzeichnis

- [1] H. Hesse. *Das Glasperlenspiel*. 2. Auflage. Frankfurt am Main: Suhrkamp, 2002, Seite 167.
- [2] H. Hertz. „Ueber einen Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die electriche Entladung“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 267(8). Seiten 983–1000. DOI: [10.1002/andp.18872670827](https://doi.org/10.1002/andp.18872670827).
- [3] U. Kilian und C. Weber, Herausgeber. *Lexikon der Physik : in sechs Bänden*. 1. Auflage. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2000. ISBN: 3860252941.
- [4] J. C. Maxwell. „A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field“. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 155. Seiten 459–512. ISSN: 02610523. URL: <http://www.jstor.org/stable/108892>.
- [5] W. Hallwachs. „Ueber den Einfluss des Lichtes auf electrostatisch geladene Körper“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 269(2). Seiten 301–312. DOI: [10.1002/andp.18882690206](https://doi.org/10.1002/andp.18882690206).
- [6] A. Einstein. „Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt“. In: *Annalen der Physik* 322(6). Seiten 132–148. DOI: [10.1002/andp.19053220607](https://doi.org/10.1002/andp.19053220607).
- [7] M. Planck. „Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum“. In: *Annalen der Physik* 309(3). Seiten 553–563. DOI: [10.1002/andp.19013090310](https://doi.org/10.1002/andp.19013090310).
- [8] J. J. Thomson. „Cathode Rays“. In: *Philosophical Magazine* 44. Seiten 293–316.
- [9] L. de Broglie. „Recherches sur la théorie des quanta“. Dissertation. Paris, 1924.
- [10] W. Hittorf. „Ueber die Electricitätsleitung der Gase“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 212(1). Seiten 1–31. DOI: [10.1002/andp.18692120102](https://doi.org/10.1002/andp.18692120102).
- [11] W. Hittorf. „Ueber die Electricitätsleitung der Gase“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 212(2). Seiten 197–234. DOI: [10.1002/andp.18692120203](https://doi.org/10.1002/andp.18692120203).
- [12] H. Busch. „Berechnung der Bahn von Kathodenstrahlen im axialsymmetrischen elektromagnetischen Felde“. In: *Annalen der Physik* 386(25). Seiten 974–993. DOI: [10.1002/andp.19263862507](https://doi.org/10.1002/andp.19263862507).
- [13] H. Busch. „Über die Wirkungsweise der Konzentrierungsspule bei der Braunschen Röhre“. In: *Electrical Engineering (Archiv für Elektrotechnik)* 18(6). Seiten 583–594. DOI: [10.1007/BF01656203](https://doi.org/10.1007/BF01656203).

- [14] E. Brüche. „Die Geometrie des Beschleunigungsfeldes in ihrer Bedeutung für den gaskonzentrierten Elektronenstrahl“. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 78(1). Seiten 26–42. DOI: [10.1007/BF01342260](https://doi.org/10.1007/BF01342260).
- [15] O. Scherzer. „Über einige Fehler von Elektronenlinsen“. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 101(9). Seiten 593–603. DOI: [10.1007/BF01349606](https://doi.org/10.1007/BF01349606).
- [16] E. Hecht. *Optik*. 4. Auflage. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München, 2005. ISBN: 9783486273595.
- [17] Referenz [16], Seite 441.
- [18] E. Brüche und O. Scherzer. *Geometrische Elektronenoptik: Grundlagen und Anwendungen*. Springer, 1934.
- [19] E. Ruska, G. Binning und H. Rohrer. *The Nobel Prize in Physics 1986*. URL: http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1986/index.html.
- [20] F. Kluge und E. Seebold. *Etymologisches Wörterbuch der deutschen Sprache*. 24. Auflage. Gruyter, 2002. ISBN: 9783110174731.
- [21] M. Dose u. a. *Duden Fremdwörterbuch*. Herausgegeben von G. Drosdowski u. a. 5. Auflage. Mannheim: Dudenverlag, 1990. ISBN: 3411209151.
- [22] D. Roy und D. Tremblay. „Design of electron spectrometers“. In: *Reports on Progress in Physics* 53(12). Seiten 1621–1674. DOI: [10.1088/0034-4885/53/12/003](https://doi.org/10.1088/0034-4885/53/12/003).
- [23] E.-E. Koch, Herausgeber. *Handbook on synchrotron radiation*. Amsterdam: Sole distributors for the USA und Canada, Elsevier Science Publishing Company, 1983. ISBN: 0444864253.
- [24] Referenz [23], Seite 420.
- [25] P. D. Innes. „On the Velocity of the Cathode Particles Emitted by Various Metals under the Influence of Rontgen Rays, and Its Bearing on the Theory of Atomic Disintegration“. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 79(532). Seiten 442–462. ISSN: 09501207. URL: <http://www.jstor.org/stable/92660>.
- [26] Referenz [23], Seite 410.
- [27] Referenz [23], Seite 402.
- [28] Referenz [23], Seite 406.
- [29] P. Auger. „Sur l’effet photoélectrique composé“. In: *Journal de Physique et le Radium* 6(6). Seiten 205–208. DOI: [10.1051/jphysrad:0192500606020500](https://doi.org/10.1051/jphysrad:0192500606020500).
- [30] L. Meitner. „Über die β -Strahl-Spektren und ihren Zusammenhang mit der γ -Strahlung“. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 11(1). Seiten 35–54. DOI: [10.1007/BF01328399](https://doi.org/10.1007/BF01328399).

- [31] Pfeiffer GmbH. *Press Release: Pfeiffer Vacuum celebrates the turbopump's 50th birthday*. Oktober 2008. URL: http://www.pfeiffer-vacuum.com/filepool/2/File/Press%20Releases/Press_Release_50Jahre_Turbopumpen_E.pdf (besucht am 31. 10. 2008).
- [32] M. H. Hablani. „Comments on the history of vacuum pumps“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 2(2). Seiten 118–125. DOI: [10.1116/1.572699](https://doi.org/10.1116/1.572699).
- [33] K. Siegbahn u. a. „ESCA–Atomic, Molecular and Solid State Structure Studied by Means of Electron Spectroscopy“. In: *Nova Acta Reg. Soc. Sci. Ups.* 20(1).
- [34] K. Siegbahn, N. Bloembergen und A. L. Schawlow. *The Nobel Prize in Physics 1981*. URL: http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1986/index.html.
- [35] M. P. Seah und W. A. Dench. „Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids“. In: *Surface and Interface Analysis* 1(1). Seiten 2–11. DOI: [10.1002/sia.740010103](https://doi.org/10.1002/sia.740010103).
- [36] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin. *Festkörperphysik*. 2. Auflage. Oldenbourg Wissenschafts Verlag, 2005. ISBN: 9783486577204.
- [37] S. M. Sze, J. L. Moll und T. Sugano. „Range-energy relation of hot electrons in gold“. In: *Solid-State Electronics* 7(7). Seiten 509–523. DOI: [10.1016/0038-1101\(64\)90088-7](https://doi.org/10.1016/0038-1101(64)90088-7).
- [38] Referenz [36], Seite 440.
- [39] D. R. Penn. „Quantitative chemical analysis by ESCA“. In: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 9(1). Seiten 29–40. DOI: [10.1016/0368-2048\(76\)85004-9](https://doi.org/10.1016/0368-2048(76)85004-9).
- [40] S. D. Kevan, Herausgeber. *Angle-Resolved Photoemission*. Elsevier Science Publishing Company, 1992. ISBN: 9780444881830.
- [41] Referenz [40], Seite 24.
- [42] J. G. Jenkin, J. Liesegang, R. C. G. Leckey und J. D. Riley. „Was the “first” angle-resolved photoemission experiment done by a nobel-prize winning physicist at Adelaide University in 1908?“ In: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 15(1). Seiten 307–322. DOI: [10.1016/0368-2048\(79\)87048-6](https://doi.org/10.1016/0368-2048(79)87048-6).
- [43] A. Damascelli. „Probing the Electronic Structure of Complex Systems by ARPES“. In: *Physica Scripta* T109. Seiten 61–74. URL: <http://stacks.iop.org/1402-4896/T109/61>.
- [44] SPECS GmbH. *Leaflet: Hemispherical Energy Analyzer PHOIBOS 100/150*. URL: http://www.specs.de/cms/upload/PDFs/SPECS_Prospekte/phoibos_katalog_72dpi.pdf (besucht am 06. 11. 2008).
- [45] D. A. Dahl. „SIMION for the personal computer in reflection“. In: *International Journal of Mass Spectrometry* 200(1-3). Seiten 3–25. DOI: [10.1016/S1387-3806\(00\)00305-5](https://doi.org/10.1016/S1387-3806(00)00305-5).

- [46] G. Ertl und J. Koppers. *Low Energy Electrons and Surface Chemistry*. 2. Auflage. Vch Pub, 1986. ISBN: 978895730657.
- [47] Referenz [46], Seite 101.
- [48] C. N. Berglund und W. E. Spicer. „Photoemission Studies of Copper and Silver: Theory“. In: *Physical Review* 136(4A). A1030–A1044. DOI: [10.1103/PhysRev.136.A1030](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.A1030).
- [49] J. D. Jackson. „From Lorenz to Coulomb and other explicit gauge transformations“. In: *American Journal of Physics* 70(9). Seiten 917–928. DOI: [10.1119/1.1491265](https://doi.org/10.1119/1.1491265).
- [50] S. Hüfner. *Photoelectron Spectroscopy. Principles and Applications*. 2. Auflage. Springer-Verlag, 1996. ISBN: 9783540608752.
- [51] Referenz [50], Seite 248.
- [52] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. 3. Auflage. B. Cummings, 1999. ISBN: 138053260.
- [53] Referenz [52], Seite 384.
- [54] V. N. Strocov, H. I. Starnberg, P. O. Nilsson, H. E. Brauer und L. J. Holleboom. „New Method for Absolute Band Structure Determination by Combining Photoemission with Very-Low-Energy Electron Diffraction: Application to Layered VSe₂“. In: *Physical Review Letters* 79(3). Seiten 467–470. DOI: [10.1103/PhysRevLett.79.467](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.467).
- [55] Referenz [40], Seite 298.
- [56] K. Horn und M. Scheffler, Herausgeber. *Electronic Structure*. 1. Auflage. Handbook of Surface Science. Amsterdam: Elsevier Science, 2000, Seite 69. ISBN: 444892911.
- [57] A. Damascelli, Z. Hussain und Z.-X. Shen. „Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors“. In: *Reviews of Modern Physics* 75(2). Seiten 473–541. DOI: [10.1103/RevModPhys.75.473](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.473).
- [58] Referenz [50], Seite 298.
- [59] Referenz [50], Seite 299.
- [60] Referenz [50], Seite 300.
- [61] Referenz [40], Seite 4.
- [62] N. V. Smith, M. M. Traum und F. J. Di Salvo. „Mapping energy bands in layer compounds from the angular dependence of ultraviolet photoemission“. In: *Solid State Communications* 15(2). Seiten 211–214. DOI: [10.1016/0038-1098\(74\)90743-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(74)90743-1).
- [63] H. Hänsel und W. Neumann. *Physik - Elektrizität, Optik, Raum und Zeit*. Spektrum Akademischer Verlag, 1993, Seite 416. ISBN: 9783860253045.
- [64] A. Sommerfeld. *Band I: Mechanik*. 4. Auflage. Vorlesungen über theoretische Physik. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig, 1949.

- [65] Referenz [64], Seite 176.
- [66] Referenz [52], Seite 91.
- [67] B. Paszkowski. *Electron optics*. London: Iliffe American Elsevier, 1968.
- [68] Referenz [67], Seite 13.
- [69] W. Glaser. „Über optische Abbildung durch mechanische Systeme und die Optik allgemeiner Medien“. In: *Annalen der Physik* 410(5). Seiten 557–585. DOI: [10.1002/andp.19334100507](https://doi.org/10.1002/andp.19334100507).
- [70] Referenz [67], Seite 36.
- [71] Referenz [18], Seite 6.
- [72] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. 4. Auflage. Harri Deutsch, 1999. ISBN: 9783817120055.
- [73] Referenz [72], Seite 667.
- [74] Referenz [52], Seite 114.
- [75] C. L. Fortescue und S. W. Farnsworth. „Air as an insulator when in the presence of insulating bodies of higher specific inductive capacity“. In: Band 32. Proceedings of the American Institute of Electrical Engineers. 1913, Seiten 757–772.
- [76] C. L. Fortescue und S. W. Farnsworth. „Die Luft als Insulator in Gegenwart von Körpern von größerer Dielektrizitätskonstante“. In: *Elektrotechnische Zeitschrift* 25. Seite 1045.
- [77] W. Estorff. „Die Kugelfunkenstrecke“. In: *Elektrotechnische Zeitschrift* 37. Seiten 60, 76.
- [78] A. Soudack und C. A. E. Uhlig. „Fields, and methods of their simulation and exploration“. In: *SIMULATION* 8(3). Seiten 151–164. DOI: [10.1177/003754976700800314](https://doi.org/10.1177/003754976700800314).
- [79] Referenz [83], Seite 65.
- [80] D. Cubric, B. Lencova, F. H. Read und J. Zlamal. „Comparison of FDM, FEM and BEM for electrostatic charged particle optics“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 427(1-2). Seiten 357–362. DOI: [10.1016/S0168-9002\(98\)01563-0](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)01563-0).
- [81] T. J. M. Zouros, F. M. Spiegelhalder und D. J. Manura. „Modelling SIMION’s accuracy for hemispherical deflector analyzers using a spherical capacitor“. In: *Physics Procedia* 1(1). Seiten 461–466. DOI: [10.1016/j.phpro.2008.07.127](https://doi.org/10.1016/j.phpro.2008.07.127).
- [82] Referenz [67], Seite 162.
- [83] A. Rusterholz. *Elektronenoptik. Bd. 1. Grundzüge der theoretischen Elektronenoptik*. Birkhäuser, 1950.
- [84] Referenz [83], Seite 77.

- [85] J. Picht. „Beiträge zur Theorie der geometrischen Elektronenoptik“. In: *Annalen der Physik* 407(8). Seiten 926–964. DOI: [10.1002/andp.19324070806](https://doi.org/10.1002/andp.19324070806).
- [86] A. Renau. „Geometric aberrations in electrostatic lenses“. Dissertation. PhD Thesis Royal Holloway College, London, 1984.
- [87] Referenz [86], Seite 15.
- [88] Referenz [83], Seite 116.
- [89] O. Scherzer. „Berechnung der Bildfehler dritter Ordnung nach der Bahnmethode“. In: *Beiträge zur Elektronenoptik : Vorträge von der Physikertagung 1936 sowie ergänzende Beiträge*. Herausgegeben von H. Busch und E. Brüche. 1936.
- [90] W. Glaser. „Zur Bildfehlertheorie des Elektronenmikroskops“. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 97(3). Seiten 177–201. DOI: [10.1007/BF01330958](https://doi.org/10.1007/BF01330958).
- [91] Referenz [83], Seite 158.
- [92] Referenz [83], Seite 199.
- [93] Referenz [83], Seite 170.
- [94] K. Mütze, L. Foitzik u. a. *ABC der Optik*. Leipzig: Verlag Werner Dausien, 1961. URL: <http://d-nb.info/450001946>.
- [95] R. Gobrecht. „Die Bildfeldwölbung bei elektrostatischen Linsen“. In: *Electrical Engineering (Archiv für Elektrotechnik)* 36(8). Seiten 484–492. DOI: [10.1007/BF02074905](https://doi.org/10.1007/BF02074905).
- [96] L. S. Goddard. „A note on the Petzval field curvature in Electron-Optical Systems“. In: *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 2(42). Seiten 127–131.
- [97] P. W. Hawkes und E. Kasper. *Principles of Electron Optics, Three Volume Set (Principles of Electron Optic)*. Academic Press, 1989. ISBN: 9780123333512.
- [98] E. Grimsehl, W. Schallreuter und H. Haferkorn. *Lehrbuch der Physik, Band 3, Optik*. 16. Auflage. Teubner Verlag, 1988. ISBN: 9783322007812.
- [99] Referenz [97], Seite 366.
- [100] Referenz [98], Seite 82.
- [101] SPECS GmbH. *Manual: Hemispherical Energy Analyzer PHOIBOS 100/150*. März 2006.
- [102] A. Guthrie. *Vacuum technology*. 1. Auflage. New York: Wiley, 1963.
- [103] Referenz [102], Seite 433.
- [104] J. D. Koralek, J. F. Douglas, N. C. Plumb, J. D. Griffith, S. T. Cundiff, H. C. Kapteyn, M. M. Murnane und D. S. Dessau. „Experimental setup for low-energy laser-based angle resolved photoemission spectroscopy“. In: *Review of Scientific Instruments* 78(5), 053905. Seite 053905. DOI: [10.1063/1.2722413](https://doi.org/10.1063/1.2722413).
- [105] H. Goldstein, C. P. Poole und J. L. Safko. *Klassische Mechanik*. 3. Auflage. Wiley-VCH, 2006. ISBN: 9783527405893.

- [106] Referenz [105], Seite 98.
- [107] T. J. Sumner, J. M. Pendlebury und K. F. Smith. „Convictional magnetic shielding“. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 20(9). Seiten 1095–1101. URL: <http://stacks.iop.org/0022-3727/20/1095>.
- [108] J. L. Wiza. „Microchannel plate detectors“. In: *Nuclear Instruments and Methods* 162. Seiten 587–601. DOI: [10.1016/0029-554X\(79\)90734-1](https://doi.org/10.1016/0029-554X(79)90734-1).
- [109] F. Hadjarab und J. L. Erskine. „Image properties of the hemispherical analyzer applied to multichannel energy detection“. In: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 36(3). Seiten 227–243. DOI: [10.1016/0368-2048\(85\)80021-9](https://doi.org/10.1016/0368-2048(85)80021-9).
- [110] Referenz [97], Seite 33.
- [111] S. Mähl. *Mündliche Mitteilung*. Januar 2007.
- [112] R. Ierusalimsky, L. H. de Figueiredo und W. Celes Filho. „Lua - An Extensible Extension Language“. In: *Software: Practice and Experience* 26(6). Seiten 635–652. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-024X\(199606\)26:6<635::AID-SPE26>3.0.CO;2-P](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-024X(199606)26:6<635::AID-SPE26>3.0.CO;2-P).
- [113] H. Samet. *The Design and Analysis of Spatial Data Structures*. Addison-Wesley series in computer science. Addison-Wesley, 1989. ISBN: 9780201502558.
- [114] F. J. Mulligan. „An illustration of method of finite differences in the solution of Laplace’s equation“. In: *European Journal of Physics* 13(2). Seiten 57–63. URL: <http://stacks.iop.org/0143-0807/13/57>.
- [115] H. Heuser. *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Einführung in Lehre und Gebrauch*. 3. Auflage. Teubner Verlag, 1995. ISBN: 9783519222279.
- [116] D. J. Manura. *Mündliche Mitteilung*. Februar 2007.
- [117] SPECS GmbH. *Leaflet: UV Source UVS 300*. November 2007 (besucht am 23. 12. 2008).
- [118] BESSY GmbH, Herausgeber. *Bessy: UE 112 PGM 1*. Januar 2005. URL: http://www.bessy.de/upload/bitpdfs/ID_13_3.pdf (besucht am 23. 12. 2008).
- [119] W. Gohout. *Operations Research: Einige ausgewählte Gebiete der linearen und nicht-linearen Optimierung*. 3. Auflage. Oldenbourg, 2007. ISBN: 9783486584325.
- [120] A. V. Aho, B. W. Kernighan und P. J. Weinberger. *The AWK programming language*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1988. ISBN: 020107981X.
- [121] Scientific Instruments Ltd. *SIMION Version 8.0*. 2007.
- [122] *Manual 2D Software*. SPECS GmbH. 2008.

A Anhang

A.1 Alle berechneten Linsenpotentiale

RR	NL(T_2)	NL(T_3)	NL(T_{4-7})	NL(T_8)	NL(T_9)
0,2	0,5	2,3	6,6	1,95	0,75
0,3	0,500000	2,716530	7,393060	3,741250	0,778556
0,4	0,937500	5,000000	6,750000	1,450000	0,905000
0,5	1,042500	6,000000	7,250000	1,650000	0,822500
0,6	1,349830	7,305020	9,984650	3,191310	0,923069
0,7	1,606880	8,854420	10,320400	3,255750	0,954944
0,8	1,666370	10,150500	11,443600	4,542110	1,074800
0,9	2,308810	11,467200	13,351000	4,204040	1,282780
1,0	2,750000	13,050000	15,350000	4,850000	1,500000
1,1	3,208740	14,393300	16,852100	5,364370	1,659570
1,2	3,43	15,742600	17,806400	5,743100	1,756320
1,3	3,65	17,093700	18,296500	6,260030	1,800510
1,4	4,13	18,442500	18,156100	6,188980	1,802400
1,5	4,62	19,784800	17,468600	5,803790	1,772250
1,6	5,1	21,116200	17,067600	5,878300	1,720320
1,7	5,58	22,432600	16,036700	5,936340	1,656870
1,8	6,06	23,729900	15,209400	6,251750	1,592160
1,9	7,54	25,003800	14,669300	6,098360	1,536450
2,0	7	26,250000	15,250000	7,750000	1,750000
2,1	7,45	27,465700	14,767700	7,975220	1,740870
2,2	8,650100	28,652700	14,219200	8,271430	1,758300
2,3	9,587100	29,814300	14,584300	8,380730	1,799360
2,4	10,266800	30,953600	15,592300	8,295240	1,861070
2,5	9,190230	32,073800	14,973000	9,507070	2,190500

A.2 Transformationsparameter für SWAM und einem Bremsfaktor von 0,5

Die im Folgenden aufgelisteten Winkeldispersionsparameter $Da1[E]$ - $Da7[E]$ wurden in [Abschnitt 5.1](#) aus der Simulation ohne Winkelblende bestimmt. Diese Daten

hier dienen als Eingabe für das Transformationsprogramm `phoibos2d` der Firma SPECS.

```
EnergyParams.Ek_eV = 10.0
EnergyParams.Ep_eV = 20.0
EnergyParams.WF_eV = 0.0
EnergyAzimuthRegion.Emin_eV = 8.5132
EnergyAzimuthRegion.Emax_eV = 11.4776
EnergyAzimuthRegion.amin_deg = -20
EnergyAzimuthRegion.amax_deg = 20
```

```
CorrectedImage.rows = 480
CorrectedImage.cols = 640
ProcessingOpts.interpolation_mode = 22
ProcessingOpts.intensity_scaling = 1
```

```
DetectorParams.pixel_pitch_um = 9.9
DetectorParams.magnification = 7.1
DetectorParams.offset_px[0] = 0.0
DetectorParams.offset_px[1] = 0.0
```

```
AnalyzerModelParams.De1 = 0.0033
AnalyzerModelParams.Eshifts[0] = -0.05
AnalyzerModelParams.Eshifts[1] = 0
AnalyzerModelParams.Eshifts[2] = 0.05
AnalyzerModelParams.aInner = 19
AnalyzerModelParams.Da1[0]=0.56051069
AnalyzerModelParams.Da1[1]=0.56680511
AnalyzerModelParams.Da1[2]=0.52879511
AnalyzerModelParams.Da3[0]=0.01206099
AnalyzerModelParams.Da3[1]=0.07860791
AnalyzerModelParams.Da3[2]=0.17497112
AnalyzerModelParams.Da5[0]=-0.01630612
AnalyzerModelParams.Da5[1]=-0.03565441
AnalyzerModelParams.Da5[2]=-0.05848354
AnalyzerModelParams.Da7[0]=0.00227565
AnalyzerModelParams.Da7[1]=0.00373529
AnalyzerModelParams.Da7[2]=0.00416841
```

A.3 Eingabedatenformat ION

Abkürzung	Bedeutung	Einheit	Beispiel
TOB	Zeitpunkt der Geburt	ms	0
Mass	Masse	Atomare Masseneinheit amu	5,49E – 004
Charge	Ladung	Elementarladung e	–1
X	Ort x	mm	13,75
Z	Ort z	mm	–0,05
Azm	Azimut, Winkel in der x - z -Ebene	Winkelgrad	–10
Elv	Elevation, Winkel in der x - y -Ebene	Winkelgrad	–2,1
KE	Kinetische Energie des Teilchens	eV	11,11
CWF	Ladungsgewichtung	o. E.	1
Color	Farbe	o. E.	0

Tabelle A.1: Übersicht über das Eingabedatenformat *ION* von *SIMION*. Daten nach [121]

B Danksagung

Die Entstehung dieser Diplomarbeit haben viele Menschen durch kleinere und größere Beiträge ermöglicht und unterstützt. Und daher will ich an dieser Stelle zunächst allen danken, die ich in der folgenden Aufzählung vergessen habe. Herzlichen Dank! Ohne euch wäre es nur sehr viel schwerer, wenn überhaupt, möglich gewesen dieses Jahr so produktiv an diesem Thema zu arbeiten.

Im Speziellen möchte ich meinen Dank aussprechen:

Karsten Horn, meinem Betreuer, der mir nicht nur dieses eher untypische aber hochinteressante Diplomarbeitsthema ermöglicht, sondern auch durch sein Wissen, Geschick und untrüblichen Optimismus mich allzeit unterstützt und motiviert hat.

Sven Mähl für die Idee zu diesem Thema. Außerdem für das gemeinsame Eintauchen in die Welt der elektronenoptischen Simulation und vor allem für sein gesammeltes und schier unerschöpfliches Wissen über die Arbeitsweise des Analysators.

Der Firma SPECS für die Möglichkeit der Diplomarbeit, das Bereitstellen der 3D-Modelle für SIMION und für die finanzielle Unterstützung zur Durchführung der Diplomarbeit.

Carsten Enderlein Für viel Wissen zur Problembhebung jedes erdenklichen Problems einer Vakuumapparatur, die Einführung in die Arbeitsgruppe und für viele Stunden gemeinsamer BESSY-Erlebnisse.

Yuriy Dedkov für die Erkenntnis, dass gute Organisation schon die halbe Miete ist und seine Mithilfe bei den Winkelblendenmessungen.

Allen am Fritz-Haber-Institut für ein schönes Jahr, in dem ich viel lernen durfte. Dank vor allem auch der hervorragenden Institutsbibliothek für ewiges Verlängern meiner ausgeliehenen Bücher und sofortiges Besorgen jeglicher Artikel.

Dem gesamten BESSY-Personal für allzeitige Unterstützung bei der Behebung der großen und kleinen Probleme.

Annette Huck für das gemeinsame Bezwingen der Rechtschreibung und dem mächtigen LaTeX-Biest.

C Lebenslauf

Persönliche Daten

Thomas Braun, geb. Cernik
Schwarzastraße 9
12055 Berlin

Geb. am 25. 11. 1980 in Augsburg
Ledig, deutsch

Schulbildung

09/1991–07/2000 Leonhard-Wagner-Gymnasium
Schwabmünchen

Zivildienst

10/2000–08/2001 Sozialstation Schwabmünchen

Studium

10/2001–09/2003 Grundstudium der Physik an der
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

seit 10/2003 Hauptstudium der Physik an der
Freien Universität Berlin

09/2005–05/2006 Auslandsjahr an der Universität Helsinki

seit 12/2007 Diplomarbeit am Fritz-Haber-Institut der MPG
in der Arbeitsgruppe Prof. K. Horn

Praktika

07/2006–09/2006 Freiwilliges Praktikum
bei der SPECS GmbH in Berlin

D Änderungshistorie

Version	Änderung
1.0	Abgegebene Version
1.1	Einige Grafiken überarbeitet, Tippfehler korrigiert, Links anklickbar und blau gemacht, kleinere Unschönheiten im Literaturverzeichnis geändert