

**WESTFÄLISCHE  
WILHELMS-UNIVERSITÄT  
MÜNSTER**

Fachbereich Physik

# **Spin-Bahn Kopplung an Festkörperoberflächen: Rashba-Effekt**

**Schriftliche Ausarbeitung des Vortrages im Seminar zur Theorie der Atome,  
Kerne und kondensierten Materie, WS 2014/15**

Tobias Frohoff-Hülsmann  
〈tobiasfh@live.de〉

**gehalten am:** 10. Dezember 2014

**Betreuer:** Herr Prof. Dr. P. Krüger

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Motivation</b>	<b>3</b>
<b>2 Spin-Bahn Kopplung (SBK) allgemein und speziell im Atom</b>	<b>4</b>
2.1 Der Fermionen-Spin . . . . .	4
2.2 SBK als Grenzfall der Dirac-Gleichung . . . . .	5
2.3 SBK im Kugelpotential . . . . .	6
<b>3 SBK von Oberflächenzuständen</b>	<b>7</b>
3.1 Der Oberflächenzustand . . . . .	7
3.2 Modell des 2D freien Elektronengases . . . . .	9
3.2.1 Das Eigenwertproblem . . . . .	9
3.3 Der Rashba-Effekt . . . . .	13
<b>4 Experimenteller Nachweis</b>	<b>17</b>
4.1 Der Versuch: Winkelauflöste Photoemissionsspektroskopie . . . . .	17
4.2 Rashba-Effekt bei Au [111] . . . . .	18
4.3 Rashba-Effekt auch bei Ag [111]? . . . . .	19
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>24</b>

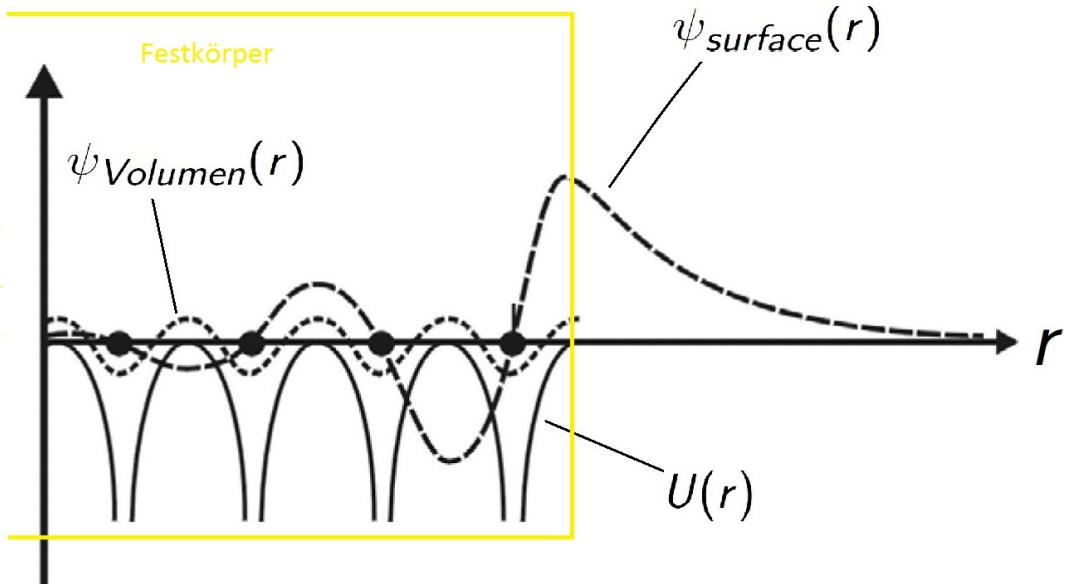


Abbildung 1: Festkörperoberfläche [1]

## 1 Motivation

Im Folgenden geht es um die Effekte der Spin-Bahn Kopplung (SBK) an Festkörperoberflächen. Wieso es interessant ist, Oberflächenzustände zu betrachten, kann rein qualitativ in Abbildung 1 gesehen werden. Dort sind zunächst die oberflächennächsten Atomlagen bzw. Atomkerne zu sehen (die Oberfläche wird durch die gelbe vertikale Linie gekennzeichnet), die ein periodisches Coulombpotential  $U(r)$  hervorrufen. Des Weiteren sind zwei Wellenfunktionen dargestellt. Die erste,  $\psi_{Volumen}(r)$ , ist ein Volumenzustand, und erstreckt sich, wie dargestellt, periodisch über das ganze Volumen des Festkörpers. Die zweite Wellenfunktion,  $\psi_{surface}(r)$ , stellt im Gegensatz dazu, mit der größten Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Festkörperoberfläche, einen Oberflächenzustand dar. Diese Wellenfunktion reicht sogar noch weit aus dem Festkörper hinaus, fällt nach innen aber schnell ab.

Diese signifikanten Unterschiede zwischen Volumen- und Oberflächenzustand deuten darauf hin, dass die SBK an der Oberfläche andere Effekte als im Volumenkristall hervorruft, sodass eine genauere Betrachtung lohnenswert ist.

Ziel dieser Ausarbeitung ist es, die SBK an bestimmten Festkörperoberflächen durch ein einfaches Modell zu beschreiben, die Ergebnisse zu diskutieren und auch mit der SBK im Atom zu vergleichen. Abschließend soll nach der theoretischen Betrachtung der Bogen zum Experiment geschlagen werden, um zu überprüfen, ob Messungen die Ergebnisse verifizieren können.

Um im Hauptteil dieser Ausarbeitung die Ergebnisse zu berechnen und zu interpretieren, ist es notwendig, zunächst einige wichtige Eigenschaften von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen sowie die SBK im Atom kurz zusammenzufassen.

## 2 Spin-Bahn Kopplung (SBK) allgemein und speziell im Atom

### 2.1 Der Fermionen-Spin

In der Spinordarstellung wird ein beliebiger Zustand  $|\psi\rangle$  als Überlagerung eines Spin-up-Zustandes  $|\psi_a\rangle$  und eines Spin-down-Zustandes  $|\psi_b\rangle$  geschrieben,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_a\rangle \\ |\psi_b\rangle \end{pmatrix} , \quad (1)$$

wobei  $|\psi_a\rangle$  und  $|\psi_b\rangle$  i.A. unabhängig voneinander sein können.

Die Spinoperatoren setzen sich wie folgt aus den Paulimatrizen zusammen:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Möchte man die dreidimensionale Spinpolarisation des Zustandes  $|\psi\rangle$  ermitteln, bildet man folgenden Erwartungswert:

$$\vec{S} = \langle \hat{S} \rangle = \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle \quad (3)$$

Dabei ist  $\hat{\vec{S}}$  der Vektorspinoperator, dessen einzelne Komponenten die in Gleichung (2) angeführten Spinoperatoren sind.

#### Klassifizierung des Zustandes $|\psi\rangle$

Falls die Spin-up- und die Spin-down-Komponente des Zustandes dieselbe Ortsabhängigkeit  $\phi(r)$  aufweisen, sich also schreiben lässt als

$$\psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{mit } \langle \phi | \phi \rangle = 1 \quad \text{sowie} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad , \quad (4)$$

dann ist der Zustand  $|\psi\rangle$  vollständig spinpolarisiert. Das bedeutet, dass die Spinpolarisation in Richtung eines Einheitsvektors  $\vec{e}$  liegt und den Betrag  $\frac{\hbar}{2}$  hat:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{e} \quad (5)$$

Die bekanntesten Beispiele sind die Zustände, die vollständig in Richtung der kartesischen Einheitsvektoren spinpolarisiert sind:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel \vec{e}_x \quad , \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel -\vec{e}_x \quad (6)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel \vec{e}_y \quad , \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel -\vec{e}_y \quad (7)$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel \vec{e}_z \quad , \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{S} \parallel -\vec{e}_z \quad (8)$$

Da, wie sich im Verlauf dieser Ausarbeitung herausstellt, die Oberflächenzustände vollständig spinpolarisiert sind, hier nur ein kurzes Beispiel für einen unvollständig polarisierten Zustand:

$$\psi(\vec{r}) = R_{n1} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Y_{10} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + Y_{11} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \quad (9)$$

So ein Zustand tritt u.a. beim Wasserstoffatom auf. Dabei sind  $Y_{10}$  und  $Y_{11}$  Kugelflächenfunktionen und  $R_{n1}$  stellt den Radialanteil dar. Offensichtlich haben die Spin-up- und die Spin-down-Komponente unterschiedliche Orts- bzw. hier Winkelabhängigkeiten, sodass es bei der Spinerwartungswertbildung durch die spezielle Form der Paulimatrizen (siehe Gleichung (2)) zu dem Skalarprodukt  $\langle Y_{10} | Y_{11} \rangle$  für den Spinerwartungswert in x- und y-Richtung kommt. Da die Kugelflächenfunktionen orthogonal aufeinander stehen, verschwindet dieser Term. Darüber hinaus gehen Spin-up- und Spin-down-Komponente mit gleichem Anteil ein, sodass auch die Spinpolarisation in z-Richtung sich gegenseitig aufhebt. Somit erhalten wir in diesem Beispiel eines unvollständig spinpolarisierten Zustandes eine Spinpolarisation von

$$\vec{S} = 0 \quad . \quad (10)$$

## 2.2 SBK als Grenzfall der Dirac-Gleichung

Um den Effekt der SBK zu berechnen, ist es notwendig, den Hamiltonoperator zu kennen, der diese Kopplung beschreibt. Da die Herleitung dieser Gleichung, der sogenannten Dirac-Gleichung, den Rahmen dieser Ausarbeitung sprengen würde, sind im Folgenden die für den Rashba-Effekt wichtigen Anteile des Hamiltonians angegeben, die schließlich aus dem nichtrelativistischen Grenzfall der Dirac-Gleichung folgen:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{Q}{m} \vec{B}_{ext} \cdot \vec{S} - \frac{Q}{2m^2 c^2} (\vec{E} \times \vec{p}) \cdot \vec{S} \quad (11)$$

Er setzt sich zusammen aus dem bekannten Teil,  $\mathcal{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ , eines sich im Potential  $V(\vec{r})$  bewegenden Teilchens sowie aus dem Term  $\mathcal{H}_B = -\frac{Q}{m} \vec{B}_{ext} \cdot \vec{S}$ , der die Kopplung des Spins mit einem externen Magnetfeld  $\vec{B}_{ext}$  beschreibt, und  $\mathcal{H}_{SBK} = -\frac{Q}{2m^2 c^2} (\vec{E} \times \vec{p}) \cdot \vec{S}$ , dem Spin-Bahn Kopplungsterm, bei dem  $\vec{E} \times \vec{p}$  das Kreuzprodukt zwischen elektrischem Feld und Impuls des Elektrons ist. Da in dieser Ausarbeitung der Rashba-Effekt noch

ohne äußeres Magnetfeld  $\vec{B}_{ext}$  untersucht wird, fällt der zweite Term zunächst weg. Zwar wurde hier nicht die Herleitung des SBK-Terms geliefert, jedoch kann er kurz anschaulich erklärt werden. Durch die bewegte Ladung (Elektron) entsteht nach der Lorentz-Transformation ein inneres Magnetfeld

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} (\vec{v} \times \vec{E}) \quad , \quad (12)$$

sodass

$$\Rightarrow \vec{B} \cdot \vec{S} \sim (\vec{p} \times \vec{E}) \cdot \vec{S} \quad . \quad (13)$$

Schreibt man das elektrische Feld mit  $-Q\vec{E} = \vec{\nabla}V(\vec{r})$  um, erhält man:

$$\mathcal{H}_{SBK} = \gamma (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \vec{p}) \cdot \vec{S} \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{1}{2m^2c^2} \quad (14)$$

Dabei röhrt der Faktor  $\frac{1}{2}$  von der Thomas-Präzession her.

## 2.3 SBK im Kugelpotential

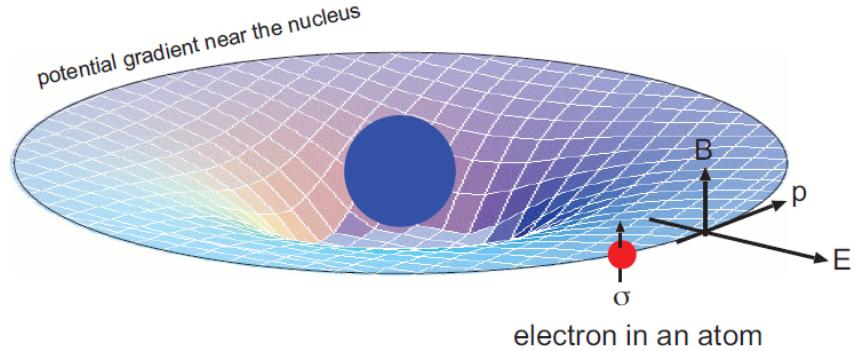


Abbildung 2: Elektron im kugelsymmetrischen Potential [6]

Die SBK im Atom stellt einen Spezialfall dar, da das Potential, wie in Abbildung 2 durch das blaue Gitter dargestellt, kugelsymmetrisch ist, also  $V(\vec{r}) = V(r)$ .

Dadurch gilt:

$$\vec{\nabla}V(\vec{r}) = \frac{\partial V(r)}{\partial r} \frac{\vec{r}}{r} \quad (15)$$

Dies hat zur Folge, dass sich der SBK-Term (siehe (14)) wie folgt schreiben lässt:

$$\mathcal{H}_{SBK} = \gamma (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \vec{p}) \cdot \vec{S} = \gamma \frac{\partial V(r)}{\partial r} \frac{1}{r} (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{S} = \gamma \frac{\partial V(r)}{\partial r} \frac{1}{r} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (16)$$

Der bekannte  $LS$ -Kopplungsterm ist also nur ein Spezialfall der SBK für ein Teilchen im kugelsymmetrischen Potential.

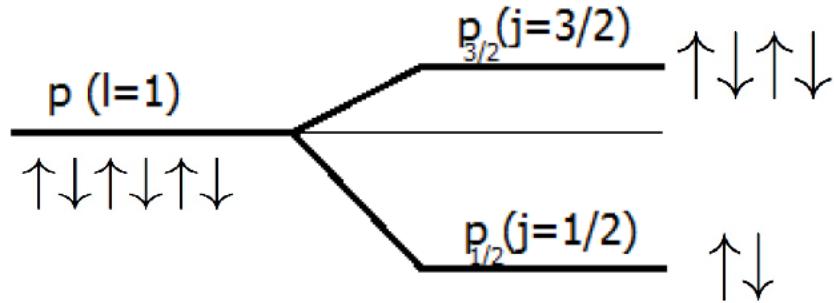
Eine weitere spezielle Eigenschaft dieser SBK ist die Spinentartung der Zustände. Führt man einen Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  ein, so ist dieser eine Erhaltungsgröße und der Kopplungsterm lässt sich schreiben als

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad (17)$$

Dies führt qualitativ auf eine Energieverschiebung der gekoppelten in Bezug auf die freien Zustände von

$$\Delta E_{SBK} \sim j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \quad . \quad (18)$$

Man stellt fest, dass diese Verschiebung unabhängig ist von der magnetischen Spinquantenzahl  $m_s$ , also von der Ausrichtung des Spins. Wie in Abbildung 3 zu sehen, sind die Zustände demnach spinentartet.



**Abbildung 3:**  $p_{3/2}$  ist vierfach-,  $p_{1/2}$  ist zweifach spinentartet [8]

Die Spinentartung im Atom wurde in diesem Teil ausführlich erläutert, da, wie im folgenden Hauptteil dieser Arbeit zu finden, eben diese Entartung bei der SBK an der Oberfläche aufgehoben ist, was ein wichtiger Aspekt des Rashba-Effektes darstellt.

### 3 SBK von Oberflächenzuständen

#### 3.1 Der Oberflächenzustand

Um die SBK an der Oberfläche zu berechnen, wird zunächst ein gut gewähltes Modell für den Oberflächenzustand benötigt. Aus Abbildung 1 geht hervor, dass zum einen die Inversionssymmetrie des auf den Zustand wirkenden Potentials aufgehoben ist, d.h.  $V(\vec{r}) \neq V(-\vec{r})$  und somit auch offensichtlich keine Kugelsymmetrie vorliegt. Zum anderen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Oberfläche maximal, jedoch zunächst nicht einfach zu beschreiben.

Betrachtet man jedoch Abbildung 4, in der die ohne SBK berechnete Bandstruktur, also Energiedispersion, der Au(111)-Oberfläche abgebildet ist, erkennt man ein parabolisch verlaufendes Energieniveau (mit S gekennzeichnet), nahe der Fermi-Energie  $E_F$ . Dieses

Niveau befindet sich um den  $\Gamma$ -Punkt, dem Mittelpunkt der Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Gitter, oder einfacher gesagt, um den Wellenvektor  $k_{\parallel} = 0$ . Dieser auf der Abzisse aufgetragene Wellenvektor  $k_{\parallel}$  liegt in der Oberflächenebene, zeigt also weder in den Festkörper noch aus ihm heraus. Aus dem parabolischen Verlauf erkennt man, dass für diese  $k_{\parallel}$  die Energiedispersion eines freien Teilchens gilt:

$$E \sim k_{\parallel}^2 \quad , \quad k_{\parallel} = (k_x, k_y, 0) \quad (19)$$

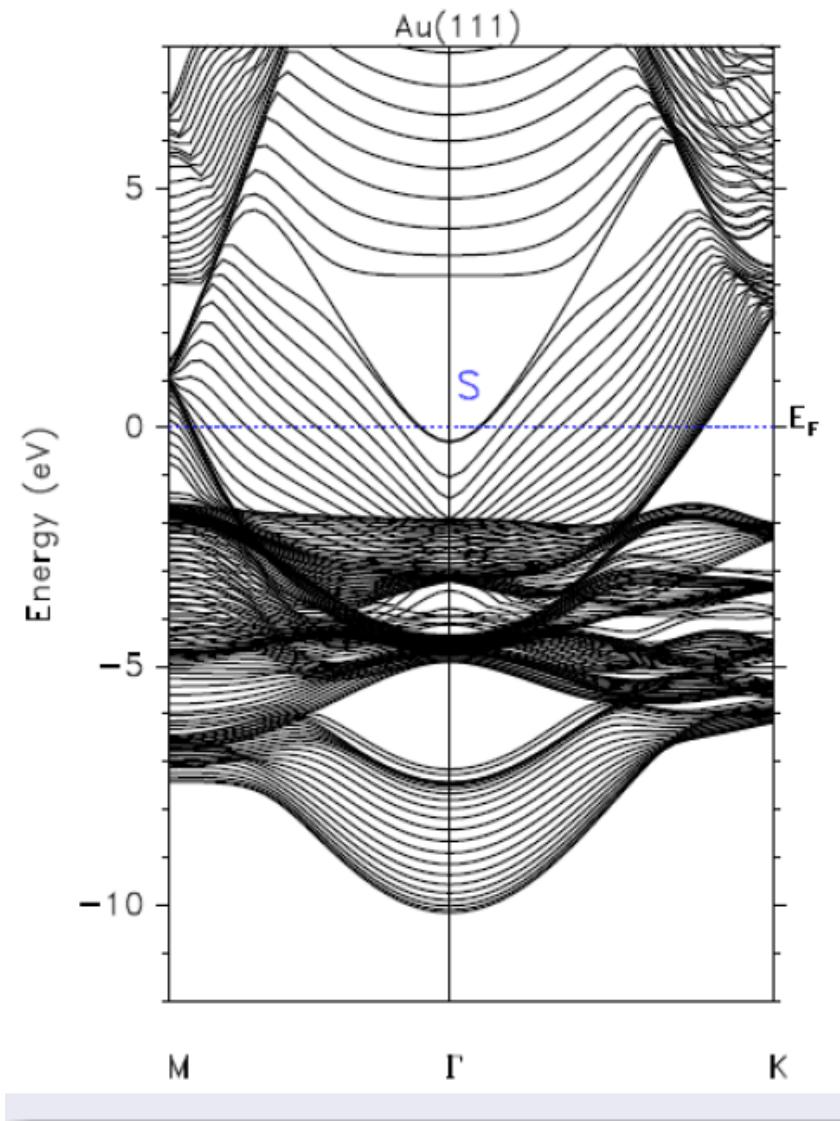


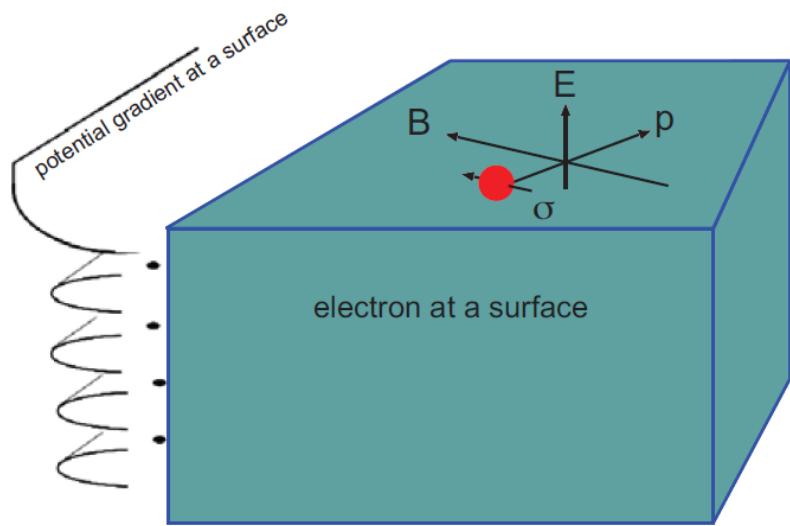
Abbildung 4: Energiedispersion von Au (111) ohne SBK [7]

Diese Eigenschaft hat den Vorteil, dass der Oberflächenzustand mathematisch leicht darstellbar ist. Jedoch gilt diese Beschreibung der freien Bewegung auf der Oberfläche nur für kleine Wellenvektoren auf einigen Oberflächen mancher Festkörper. Trotzdem werden im Weiteren nur diese betrachtet und das Modell des zweidimensionalen Elektronengases

wird eingeführt.

### 3.2 Modell des 2D freien Elektronengases

Das 2D Elektronengas besteht, wie in Abbildung 5 zu sehen, aus Elektronen, die sich in einer Ebene (hier also auf der Oberfläche) frei bewegen können und in der dritten Raumrichtung (im Folgenden z-Richtung) durch ein Potential gebunden sind.



**Abbildung 5:** Elektronenbewegung und Potential im Modell des 2D Elektronengases [6]

Dies hat ähnlich wie im Atom zur Folge, dass das Potential und dessen Gradient vereinfacht darstellbar sind:

$$V(\vec{r}) = V(z) \Rightarrow \vec{\nabla}V(z) = \frac{\partial V(z)}{\partial z} \vec{e}_z \quad (20)$$

Setzt man  $V(z = 0) = 0$  (Nullpunkt eines Potentials kann beliebig definiert werden) erhalten wir aus (11) den Hamiltonoperator für den Oberflächenzustand (bei  $z=0$ ):

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}_{\parallel}^2}{2m} + \gamma (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \vec{p}_{\parallel}) \cdot \vec{S} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SBK} \quad , \quad \vec{p}_{\parallel} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (21)$$

### 3.2.1 Das Eigenwertproblem

Um die SBK nun zu berechnen, muss die Eigenwertgleichung

$$\mathcal{H}|\psi> = E_{SBK}|\psi> \quad (22)$$

für  $z=0$  gelöst werden. Dafür wird zunächst der SBK-Term aufgrund des speziellen Potentials zu

$$\mathcal{H}_{SBK} = \gamma (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \vec{p}_{\parallel}) \cdot \vec{S} \quad (23)$$

$$= \gamma \frac{\partial V(z)}{\partial z} |_{z=0} (\vec{e}_z \times \vec{p}_{\parallel}) \cdot \vec{S} \quad (24)$$

$$= \gamma \frac{\partial V(z)}{\partial z} |_{z=0} \frac{\hbar^2}{2i} \left( \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (25)$$

$$= \frac{\zeta}{i} \left( \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \text{mit} \quad \zeta = \gamma \frac{\partial V(z)}{\partial z} |_{z=0} \frac{\hbar^2}{2} \quad (26)$$

vereinfacht.  $\zeta$  wird dabei als Stärke der SBK bezeichnet.

Für den Oberflächenzustand wählen wir folgenden Ansatz:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad \vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0) \quad (27)$$

Diese Wellenfunktion beschreibt eine sich auf der Oberfläche ausbreitende ebene Welle mit den Konstanten  $a, b$ , für die ebenfalls  $a^2 + b^2 = 1$  gilt. Diese Welle ist auf die Fläche  $F$  normiert. Da die Spin-up- und die Spin-down-Komponenten sich also nur um eine Konstante unterscheiden, stellt  $\psi(\vec{r})$  bereits einen vollständig spinpolarisierten Zustand dar.

Mithilfe dieses Ansatzes sollen nun die Eigenenergien des Oberflächenzustandes berechnet werden; bei diesen Berechnungen gilt die Notation:

$$p_{\parallel} \equiv |\vec{p}_{\parallel}| = \sqrt{p_x^2 + p_y^2} \quad (28)$$

$$k_{\parallel} \equiv |\vec{k}_{\parallel}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (29)$$

Durch Einsetzen des Ansatzes (Gleichung (27)) in das Eigenwertproblem (22) erhält man:

$$\rightarrow \mathcal{H} \psi(\vec{r}) = \left( \frac{p_{\parallel}^2}{2m} + \frac{\zeta}{i} \left( \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \psi(\vec{r}) \quad (30)$$

$$= \left( \frac{k_{\parallel}^2}{2m} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \frac{\zeta}{i} \left( \begin{pmatrix} -ib \\ ia \end{pmatrix} ik_x - \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} ik_y \right) \right) \frac{1}{\sqrt{F}} e^{ik_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad (31)$$

$$= \left( \frac{k_{\parallel}^2}{2m} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \zeta \left( \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} k_y - \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} ik_x \right) \right) \frac{1}{\sqrt{F}} e^{ik_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad (32)$$

$$= E_{SBK} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{ik_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad (33)$$

$$\Rightarrow \frac{k_{\parallel}^2}{2m} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \zeta \left( \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} k_y - \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} ik_x \right) - E_{SBK} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad (34)$$

Gleichung (34) lässt sich auch in Matrixschreibweise darstellen:

$$\begin{pmatrix} \frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK} & -\zeta(k_y + ik_x) \\ -\zeta(k_y - ik_x) & \frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad (35)$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich lösen, indem die Determinante der Matrix null gesetzt wird.

$$\det \begin{pmatrix} \frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK} & -\zeta(k_y + ik_x) \\ -\zeta(k_y - ik_x) & \frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK} \end{pmatrix} = 0 \quad (36)$$

$$\left( \frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK} \right)^2 = \zeta(k_y^2 + k_x^2) \quad (37)$$

$$\frac{k_{\parallel}^2}{2m} - E_{SBK_{\mp}} = \pm \zeta k_{\parallel} \quad (38)$$

$$E_{SBK_{\pm}} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} \pm \zeta k_{\parallel} \quad (39)$$

Nachdem nun die Energieniveaus bestimmt wurden, erhält man die Eigenvektoren aus der oberen Gleichung des Gleichungssystems (siehe (35)), in die man diese Energieniveaus einsetzt:

$$\mp\zeta k_{\parallel}a_{\pm} - \zeta(k_y + ik_x)b_{\pm} = 0 \quad (40)$$

$$\Rightarrow b_{\pm} = \mp \frac{k_{\parallel}}{k_y + ik_x} a_{\pm} \quad (41)$$

$$= \mp \frac{\sqrt{(k_y + ik_x)(k_y - ik_x)}}{k_y + ik_x} a_{\pm} \quad (42)$$

$$= \mp \frac{\sqrt{(k_y - ik_x)}}{\sqrt{k_y + ik_x}} a_{\pm} \quad (43)$$

$$= \mp \frac{(k_y - ik_x)}{\sqrt{(k_y + ik_x)(k_y - ik_x)}} a_{\pm} \quad (44)$$

$$= \mp \frac{(k_y - ik_x)}{k_{\parallel}} a_{\pm} \quad (45)$$

Da der Zustand normiert sein muss, folgt

$$1 = |a|^2 + |b|^2 \quad (46)$$

$$= |a|^2 + \frac{(k_y - ik_x)(k_y + ik_x)}{k_{\parallel}^2} |a|^2 \quad (47)$$

$$= 2|a|^2 \quad (48)$$

$$\Rightarrow a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad (49)$$

wobei die Phase frei wählbar ist (hier zu 1 gewählt).

Eingesetzt in Gleichung (45) ergibt sich:

$$b_{\pm} = \mp \frac{(k_y - ik_x)}{k_{\parallel}} \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (50)$$

Wir erhalten also folgende Lösungen der SBK:

$$\psi_+(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{k_y - ik_x}{k_{\parallel}} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad \text{mit} \quad E_{SBK+} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + \zeta k_{\parallel} \quad (51)$$

$$\psi_-(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k_y - ik_x}{k_{\parallel}} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad \text{mit} \quad E_{SBK-} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} - \zeta k_{\parallel} \quad (52)$$

Im Folgenden werden die Spinausrichtungen und Energien dieser Lösungen näher betrachtet.

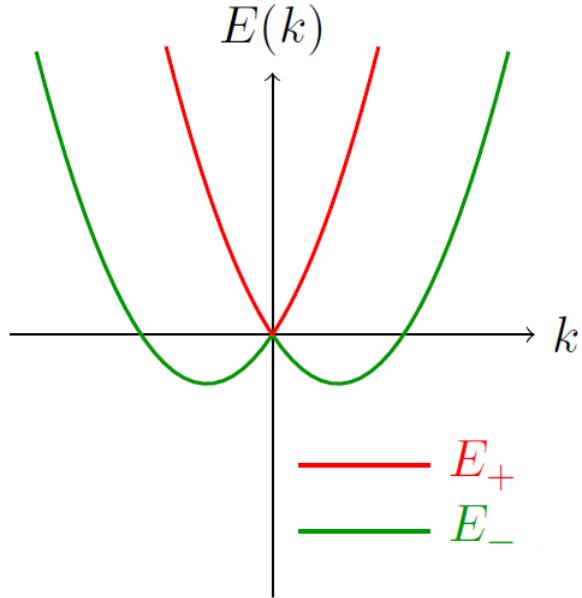
### 3.3 Der Rashba-Effekt

Die Energiedifferenzen lassen sich mithilfe einer quadratischen Ergänzung wie folgt umschreiben:

$$E_{SBK\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_{\parallel}^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2} \zeta k_{\parallel} + \left( \frac{m}{\hbar^2} \zeta \right)^2 - \left( \frac{m}{\hbar^2} \zeta \right)^2 \right) \quad (53)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_{\parallel} \pm \frac{m}{\hbar^2} \zeta \right)^2 - \frac{m}{2\hbar^2} \zeta^2 \quad (54)$$

Trägt man die Energie gegen eine Wellenzahlkomponente (beispielsweise  $k_x$ , entspricht über  $p = \hbar k$  dem Impuls des Elektrons in x-Richtung) auf, so erinnert diese Form an eine auf der Abzisse um  $\frac{m}{\hbar^2} \zeta$  nach links (positives Vorzeichen) oder rechts (bei negativem Vorzeichen) und auf der Ordinate um  $\frac{m}{2\hbar^2} \zeta$  nach unten verschobene Parabel. Jedoch muss man beachten, dass das Argument  $k_{\parallel} = |\vec{k}_{\parallel}|$  der Betrag des Wellenvektors ist, und somit immer positiv ist. Daher sind beide Lösungen achsensymmetrisch zur Ordinate. Stellt man beide Dispersionsrelationen grafisch dar, ergibt sich Abbildung 6:



**Abbildung 6:** Dispersionsrelationen, als Lösungen der SBK am Oberflächenzustand [8]

Bei dieser Darstellung ist zu beachten, dass die Energie gegen eine Komponente des Wellenzahlvektors  $\vec{k}_{\parallel}$  aufgetragen ist, wobei diese Relation isotrop, d.h. unabhängig von der gewählten  $k$ -Richtung ist. Für die Energiedispersionen entlang beliebiger zweidimensionaler Impulse auf der Oberfläche muss man sich Abbildung 6 demnach dreidimensional vorstellen. Aufgrund der Isotropie genügt es aber nur die Energiedispersionen entlang einer Komponente zu betrachten.

Man sieht, dass die beiden verschobenen Parabeln auftreten und auch, dass die Lösung mit dem positiven Vorzeichen die inneren Zweige bildet (rote Kurve), die andere Lösung die äußeren Zweige (grüne Kurve), die einzelnen Parabeln also nicht zu einer Lösung gehören. Der Grund dafür ist, wie bereits erwähnt, dass nur der Betrag des Wellenvektors in Gleichung (54) eingeht. Ist  $\zeta$  negativ, dreht sich die zuvor getroffene Aussage um, d.h. die inneren Zweige entsprechen der Lösung mit dem negativen, die äußeren Zweige der Lösung mit dem positiven Vorzeichen.

Aus den Energieniveaus (siehe Gleichung (39)) lässt sich ableiten, dass sich die Energiedifferenz der beiden Lösungen, bzw. Bänder bei gleichem  $k_{\parallel}$  zu

$$\Delta E(k_{\parallel}) = E_+(k_{\parallel}) - E_-(k_{\parallel}) = 2\zeta k_{\parallel} \quad (55)$$

ergibt. Auch in Abbildung 6 ist zu sehen, dass die Energiedifferenz bei  $k_{\parallel} = 0$  nicht vorhanden ist, dann aber mit wachsendem  $k_{\parallel}$  linear zunimmt. Der Parameter  $2\zeta$  ist dabei die Steigung dieses linearen Zuwachses, wodurch die Bezeichnung von  $\zeta$  als Stärke der SBK klar wird.

Neben der Energiedifferenz kann natürlich auch die Impulsverschiebung der Bänder

bei fester Energie betrachtet werden:

$$\Delta k_{\parallel}(E = konst.) = 2\frac{m}{\hbar^2}\zeta = konstant \quad (56)$$

Aus Gleichung (56) erhält man, dass die Impulsverschiebung der Lösungen konstant ist (jeweils links oder rechts vom Ursprung), die sich auch in Abbildung 6 als Konstante zeigt. Nachdem nun die Energiedispersionen analysiert wurden, werden die Spinpolarisationen, also -ausrichtungen, betrachtet.

Dazu werden im Folgenden die Spinerwartungswerte berechnet. Zur Übersichtlichkeit wird zunächst der in Gleichung (27) gewählte Ansatz verwendet, um erst später die Werte für die Konstanten  $a$  und  $b$  einzusetzen. Für den Spinerwartungswert in x-Richtung gilt:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \frac{1}{F} \int_F e^{-i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} dxdy \quad (57)$$

Aufgrund der Normierung des angesetzten Zustandes ist  $\frac{1}{F} \int_F e^{-i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} dxdy = 1$ , womit man vereinfacht

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} (a^*b + b^*a) \quad (58)$$

erhält. Analog sind die Spinerwartungswerte in y- und z-Richtung mit den entsprechenden Paulimatrizen (dazu siehe Gleichung (2)) zu berechnen und mit den Werten für  $a$  und  $b$  (siehe Gleichungen (49) und (50)) ergibt sich:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} (a^*b + b^*a) = \mp \frac{\hbar}{2} \frac{k_y}{k_{\parallel}} \quad (59)$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} i(b^*a - a^*b) = \pm \frac{\hbar}{2} \frac{k_x}{k_{\parallel}} \quad (60)$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (|a|^2 - |b|^2) = 0 \quad (61)$$

Die dreidimensionale Spinpolarisation lautet dann nach Gleichung (3)

$$\vec{S}_{\pm} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} \mp k_y \\ \pm k_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (62)$$

Offensichtlich gilt für beide Lösungen, dass

$$\vec{S}_{\pm} \perp \vec{k}_{\parallel} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (63)$$

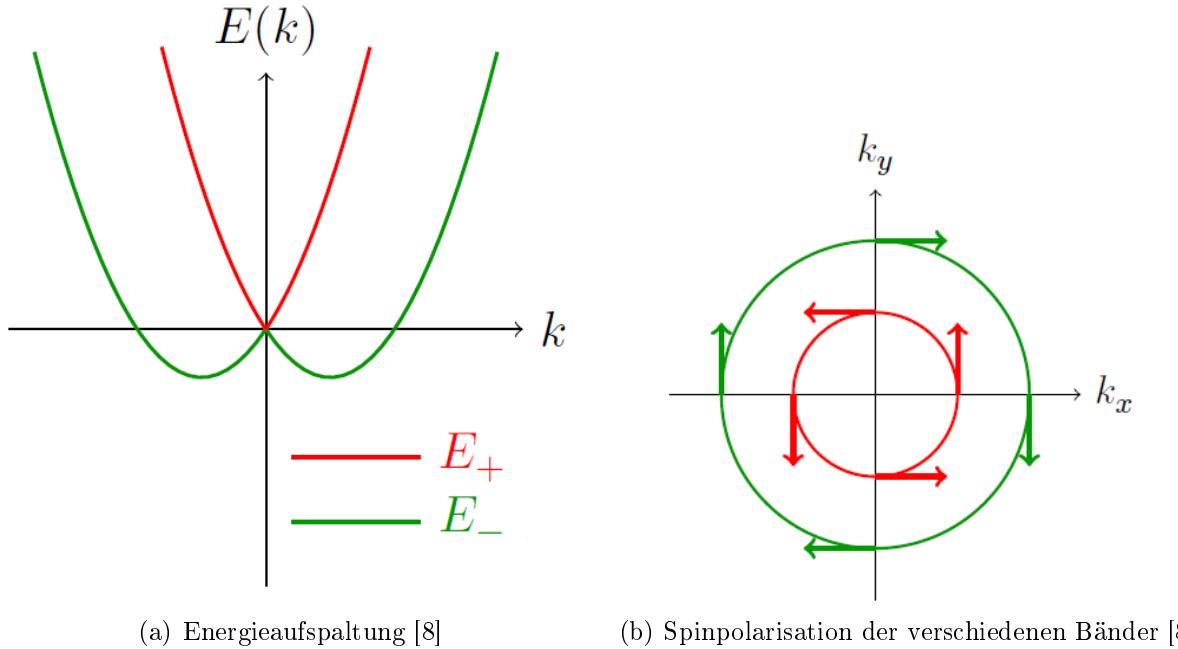
der Spin also immer orthogonal auf dem Wellenvektor in der Oberflächenebene steht.

Außerdem sind die beiden Spinpolarisation antiparallel zueinander, denn es gilt

$$\vec{S}_+ = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} -k_y \\ +k_x \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \frac{1}{k_{\parallel}} \begin{pmatrix} +k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} = -\vec{S}_- \quad (64)$$

Aus der Kombination der Eigenschaften aus Gleichungen (63) und (64) erkennt man, dass im Gegensatz zur SBK im Atom die Energiezustände nicht spinentartet sind, sondern in einem Energieband nur Elektronen mit Spin-up und im anderen nur Elektronen mit Spin-down zu finden sind, wobei Spin-up und Spin-down hier nicht bezüglich der z-Achse, sondern bezüglich des auf  $\vec{k}_{\parallel}$  orthogonalen Vektors gemeint sind.

Die nun diskutierten Auswirkungen der SBK an Oberflächenzuständen bezüglich der Energieaufspaltung und der Spinausrichtung der verschiedenen Bänder werden in der Literatur unter dem Begriff Rashba-Effekt zusammengefasst. Die wichtigsten Ergebnisse sind in der folgenden Abbildung 7 illustriert:



**Abbildung 7:** Rashba-Effekt als Ergebnis der SBK

Die Energieaufspaltung des Rashba-Effekts (Abbildung 7(a)) ist bereits bekannt, Abbildung 7(b) ist die zweidimensionale Ansicht der bei einer konstanten Energie  $E > 0$  geschnittenen Kurven aus Abbildung 7(a). Somit lässt sich die innere rote Kurve und die äußere grüne Kurve der beiden Lösungen wiederfinden. Zusätzlich sind die Spinpolarisationen der jeweiligen Energiezweige eingezeichnet. Da der Spin immer orthogonal zu  $\vec{k}_{\parallel}$  steht, dreht sich der Spin in dieser Draufsicht mit oder gegen den Uhrzeigersinn. Aufgrund

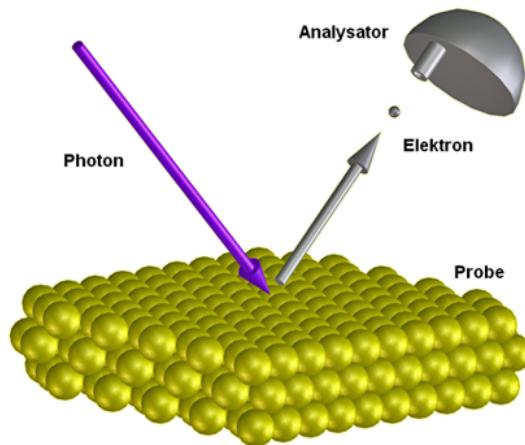
der unterschiedlichen Drehrichtungen ist gegeben, dass man auf dem einen Band Spin-up und auf dem anderen Spin-down Zustände findet und somit keine Spinentartung vorliegt. Unter der Annahme, dass  $\zeta$  positiv ist, dreht sich, wie in Abbildung 7 zu sehen, der Spin der inneren Lösung gegen und der der äußeren mit dem Uhrzeigersinn. Da sich, wie oben diskutiert, die Lösungen bei negativem Vorzeichen von  $\zeta$  vertauschen, würden auch die Umlaufrichtungen des Spins auf den Zweigen umkehren.

Nachdem nun der Rashba-Effekt theoretisch hergeleitet, die Ergebnisse anhand der Formeln sowie grafisch diskutiert und der Unterschied zur SBK im Atom gezogen wurde, soll im Folgenden auf experimentelle Untersuchungen dieses Effektes eingegangen werden.

## 4 Experimenteller Nachweis

Um den Rashba-Effekt auch experimentell nachweisen zu können, muss die zu untersuchende Probenoberfläche dem Modell des 2D freien Elektronengases genügen, da dieses Modell die Grundlage der oben durchgeführten Rechnungen bildet. Das bedeutet, dass sich die Oberflächenelektronen ohne SBK wie freie Teilchen auf der Oberfläche bewegen können. Durch zuvor berechneten Bandstrukturen ist diese Voraussetzung für Elektronen an der Gold [111]-Oberfläche gegeben (siehe Abbildung 4).

### 4.1 Der Versuch: Winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie



**Abbildung 8:** Schema zur winkelaufgelösten Photoemissionsspektroskopie [2]

Um den Rashba-Effekt bzw. das Aufspalten in zwei Energiebänder messen zu können, müssen die Energiedispersionskurven quasi abgefahren werden, d.h. es werden Impuls und Energie des gebundenen Elektrons gemessen. Dazu wird, wie in Abbildung 8 schematisch dargestellt, die zu untersuchende Oberfläche mit Photonen bekannter Energie bestrahlt, wodurch die Elektronen aufgrund des Photoeffektes (Absorption des Photons) aus dem Material herausgestoßen werden. Mithilfe eines Analysators wird die kinetische Energie

mit einer Energieauflösung von wenigen meV und der Winkel mit einer Winkelauflösung von etwa  $0,3^\circ$  des austretenden Elektrons bestimmt. Diese hohen Auflösungen sind notwendig, da der Rashba-Effekt ein schwacher Effekt ist und somit die beiden Energiebänder sonst nicht unterscheidbar wären. Durch Differenz der Photonenenergie und der kinetischen Energie des Elektrons erhält man die gesuchte Band- bzw. Bindungsenergie. Mithilfe des Winkels lässt sich dann auch der zugehörige Impuls bzw. Wellenvektor  $\vec{k}_\parallel$  feststellen.

## 4.2 Rashba-Effekt bei Au [111]

Mit dieser Methode, der winkelaufgelösten Photoemissionsspektroskopie, wurde die Gold [111]-Oberfläche untersucht. Die aus einer Messung von Nicolay et al. [3] resultierende Energiedispersion ist in der folgenden Abbildung 9 dargestellt.

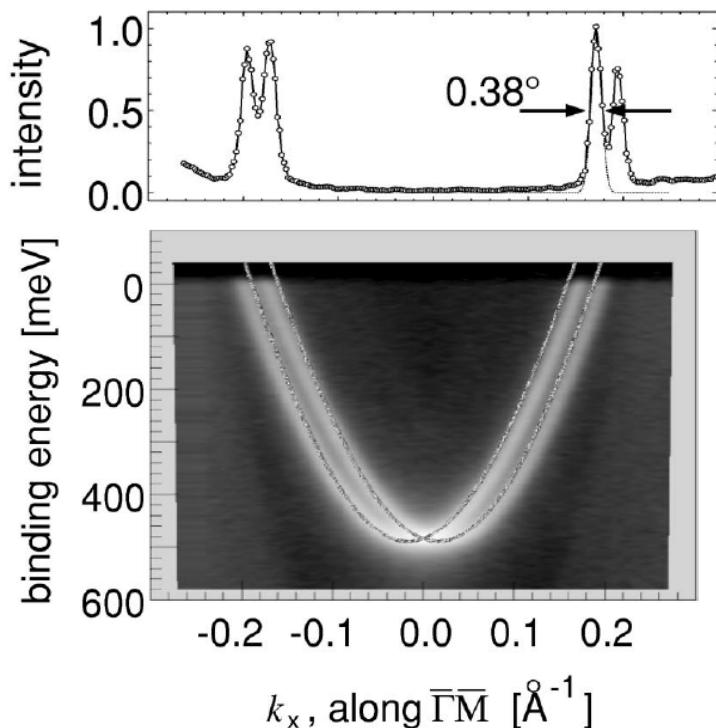
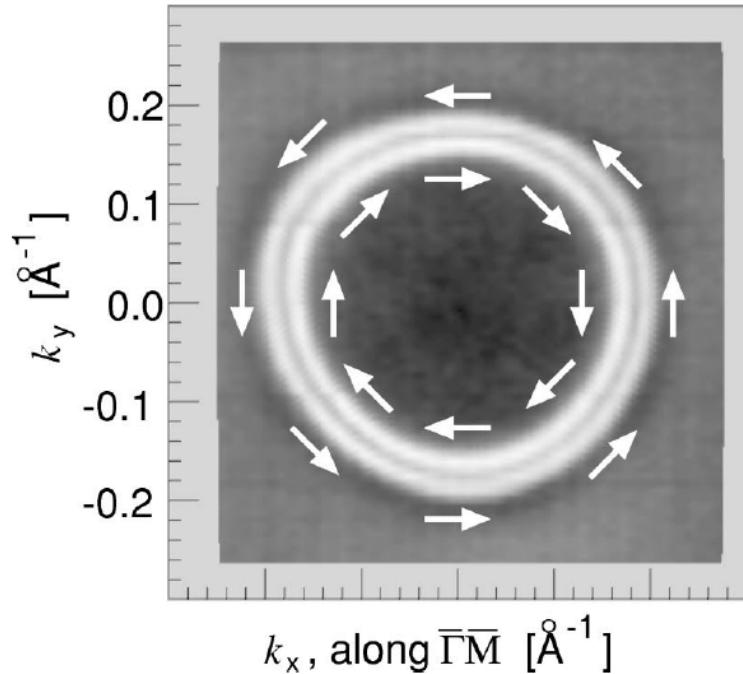


Abbildung 9: Rashba-Effekt der Au [111]-Oberfläche [3]

In der unteren Grafik ist die Energie gegen eine Komponente des Wellenvektors entlang der Oberfläche aufgetragen, wobei die Anzahl der gemessenen Elektronen mit hell für viele und mit dunkel für wenige gekennzeichnet wird. In dieser Abbildung sind deutlich die beiden erwarteten zueinander verschobenen Parabeln zu erkennen, was auch in der darüber liegenden Intensitätsverteilung ersichtlich wird, da die einzelnen Peaks mit einer vollen Halbwertsbreite von  $0,38^\circ$  klar zu unterscheiden sind. In unmittelbarer Nähe dieser Parabeln erkennt man ebenfalls die Energielücke, da dieser Bereich dunkel gefärbt ist und erst außen in der Abbildung durch hellere Färbung die Volumenzustände zu erahnen sind. Die theoretische Energieaufspaltung (siehe Abbildung 7(a)) wurde demnach bestens verifiziert.

Ebenso wurde die Orientierung der Spins in einer späteren, spinaufgelösten Messung nachgewiesen [4], die in der folgenden Abbildung 10 bei einem Schnitt konstanter Energie dargestellt ist:



**Abbildung 10:** Spinpolarisation der Oberflächenatome [3]

Auch hier stellt man beim Vergleich mit der Theorie (Abbildung 7(b)) fest, dass das Experiment diese gut wiedergibt.

Anhand dieser Messungen lässt sich der Rashba-Effekt somit in all seinen Teilen verifizieren.

### 4.3 Rashba-Effekt auch bei Ag [111]?

Nachdem der Rashba-Effekt an der Gold Oberfläche nachgewiesen werden konnte, ist es interessant, ob dies auch an Oberflächen anderer Elemente, die ähnliche Eigenschaften besitzen (insbesondere auch für das Modell des 2D freien Elektronengases geeignet sind), gelingt.

Die Voraussetzungen erfüllt u.a. die Silber [111]-Oberfläche, weshalb diese mit derselben Methode analysiert wurde. Die gemessene Energiedispersion ist in der folgenden Abbildung 11 dargestellt:

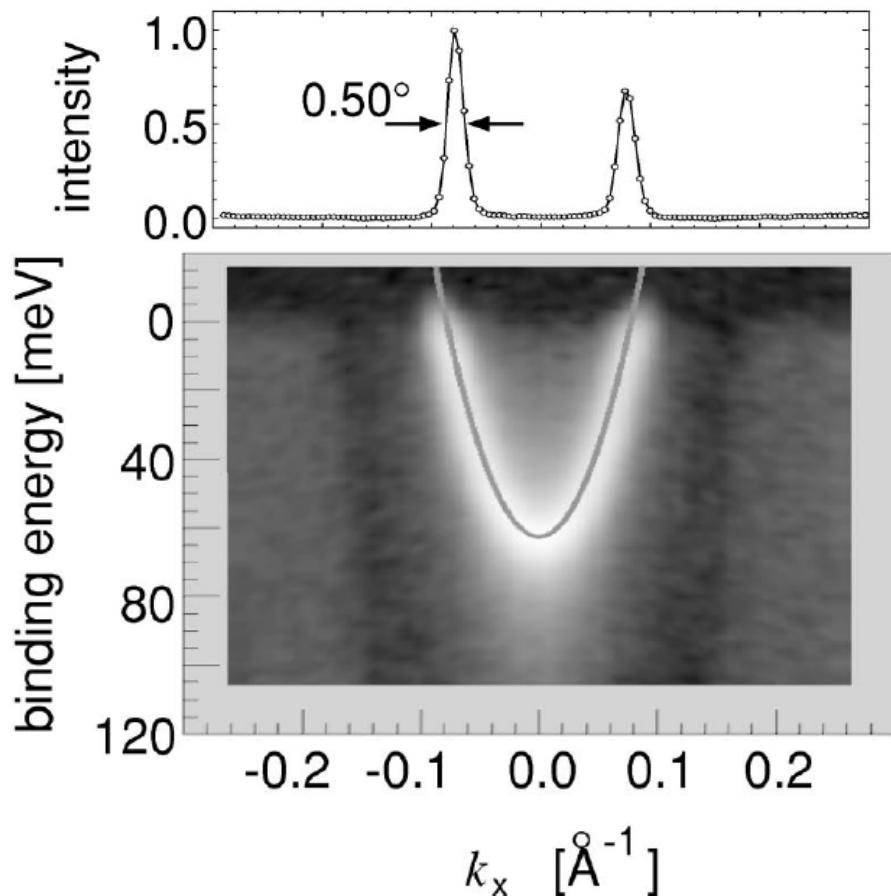


Abbildung 11: Energiedispersion der Ag [111]-Oberfläche [3]

Diesmal ist in der unteren Grafik keine Energieaufspaltung ersichtlich, was auch in der darüber liegenden Intensitätsverteilung, in der nur zwei Peaks mit einer vollen Halbwertsbreite von  $0,50^\circ$  zu erkennen sind, bestätigt wird.

Nach diesen Messergebnissen stellt sich die Frage, ob der theoretische Rashba-Effekt doch ein falsches Modell ist und nur durch Zufall mit der Bandstruktur an der Gold [111]-Oberfläche in Deckung kommt, oder ob der Rashba-Effekt an der Silber [111]-Oberfläche zu schwach ist, um mit dem gegebenen maximalen Auflösungsvermögen die Aufspaltung messen zu können. Ein erster Anhaltspunkt, dass die zweite Interpretation dieser Messung zutrifft, ist, dass die Halbwertsbreite des scheinbar nur einzelnen Energiebandes bei Silber ( $0,50^\circ$ ) um etwa 30% breiter ist, als die eines einzelnen Energiebandes bei Gold ( $0,38^\circ$ ) und somit bei feinerer Betrachtung aus zwei Energiebändern bestehen könnte.

Um die Theorie mit dem Experiment in Einklang zu bringen, ist es demnach notwendig, Erklärungen für die starke Variation der Stärke des Rashba-Effektes zu liefern.

### Erster Erklärungsversuch

Unter Betrachtung der Gleichungen (55) und (56) erinnert man sich, dass sowohl die Energieaufspaltung bei konstantem Impuls als auch die Impulsverschiebung bei konstanter

Energie proportional zu der Stärke der SBK  $\zeta$ , mit

$$\zeta = \gamma \frac{\partial V(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} \frac{\hbar^2}{2} \quad , \quad (65)$$

sind. Der interessante Beitrag ist dabei der Wert des Gradienten des Potentials an der Oberfläche,  $\frac{\partial V(z)}{\partial z} \Big|_{z=0}$ , da der Rest in Gleichung (65) nur Konstanten sind und dieser Term somit den einzigen Unterschied zwischen  $\zeta_{Au}$  und  $\zeta_{Ag}$  machen kann. Da dieses Potential mit dem reinen Coulomb-Potential eines Kerns verknüpft ist, beziehungsweise dies seine Herkunft ist, kann man annehmen, dass auch für dieses Potential

$$V \sim Z \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial V(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} \sim Z \quad , \quad (66)$$

gilt, wobei  $Z$  die Kernladungszahl ist. Ein kurzer Blick ins Periodensystem verrät, dass  $Z(Au) = 79 > 47 = Z(Ag)$  und so eine etwa doppelt so starke SBK beim Gold im Gegensatz zu Silber erklärt werden könnte. Unter Berücksichtigung der Energie- und Winkelauflösung der Messung stellt man jedoch fest, dass selbst diese schwächere SBK noch signifikant gemessen worden wäre. Somit kann dieser erster Erklärungsversuch nicht ausreichen, um die nicht messbare (bzw. nicht auflösbare) SBK an der Silber-Oberfläche zu begründen.

### Erklärung anhand der Symmetrie des Oberflächenzustandes

Nachdem nun der erste Erklärungsversuch keine so schwache SBK erklären konnte, muss man annehmen, dass der gewählte Ansatz die Silber-Oberfläche doch nicht genügend beschreibt. Um den Oberflächenzustand zu modellieren, wählte man eine zweidimensionale ebene Welle der Form

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \quad , \quad (67)$$

sodass keine Ausdehnung in oder aus dem Festkörper (hier in z-Richtung) berücksichtigt wurde. Im Vergleich zu Abbildung 1 sieht man, dass der Oberflächenzustand zwar das Aufenthaltsmaximum an der Oberfläche besitzt, jedoch sowohl Aufenthaltswahrscheinlichkeiten innerhalb und außerhalb des Festkörpers vorhanden sind.

Um dies zu berücksichtigen, wird der gewählte Ansatz aus Gleichung (67) zu dem neuen Oberflächenzustand  $|\Psi\rangle$  erweitert:

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{F}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \phi(z) \quad (68)$$

Dabei stellt  $\phi(z)$  gerade die Ausdehnung in z-Richtung dar, wobei angenommen wurde, dass die Bewegung des Elektrons auf und senkrecht zu der Oberfläche unabhängig voneinander sind und  $|\Psi\rangle$  demnach aus dem Produkt von  $\psi(x, y)$  mit  $\phi(z)$  gebildet wird. Mit diesem neuen Ansatz lässt sich die Energiekorrektur durch die SBK folgendermaßen

berechnen:

$$\Delta E_{SBK} = \langle \Psi | \mathcal{H}_{SBK} | \Psi \rangle = \langle \phi | \zeta k_{\parallel} | \phi \rangle \sim k_{\parallel} \int \frac{\partial V}{\partial z} |\phi(z)|^2 dz \quad (69)$$

Der entscheidende Unterschied zur vorherigen Berechnung besteht darin, dass das Integral  $\int \frac{\partial V}{\partial z} |\phi(z)|^2 dz$  über den Bereich, in dem der Oberflächenzustand eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit senkrecht zur Oberfläche besitzt, ausgewertet werden muss. Um den Wert dieses Integrals abzuschätzen, ist es notwendig, sich Gedanken über die Form des Potentialgradienten in der Nähe der Oberfläche zu machen.

Wandert das Elektron von der Oberfläche in den Festkörper, spürt es ein abnehmendes Potential, da dieses aufgrund der Coulomb-Anziehung des Kerns attraktiv ist, sodass  $\frac{\partial V}{\partial z} < 0$ . In entgegengesetzter Richtung, also aus dem Festkörper hinaus, steigt das Coulomb-Potential gegen Null, sodass der Wert des Gradienten  $\frac{\partial V}{\partial z} > 0$  ist. Da der Oberflächenzustand nicht weit aus dem Festkörper heraus oder in ihn hinein reicht, müssen nur kurze Strecken (etwa 1 Bohr) betrachtet werden, sodass das Potential in diesem Bereich als Gerade angenähert werden kann und so zum Festkörper genauso stark abfällt wie es aus dem Festkörper ansteigt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\phi(z)|^2$  entlang der z-Richtung kann als eine (immer positive) Gewichtung des asymmetrischen Coulombterms aufgefasst werden. Diese Größe ist in den folgenden Abbildung 12 für die Gold- und 13 für die Silberoberfläche gegen die z-Richtung aufgetragen:

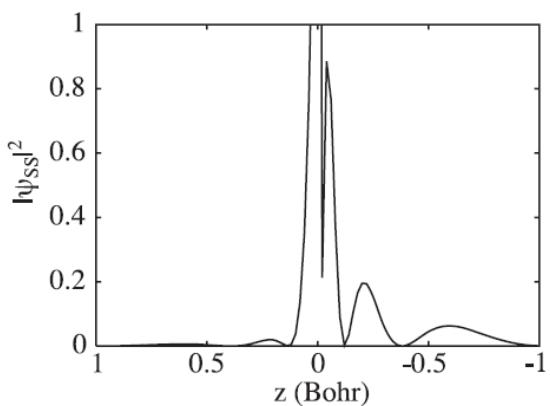


Abbildung 12:

Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi_{ss}|^2$  des Oberflächenzustandes senkrecht zur Au[111]-Oberfläche [5]

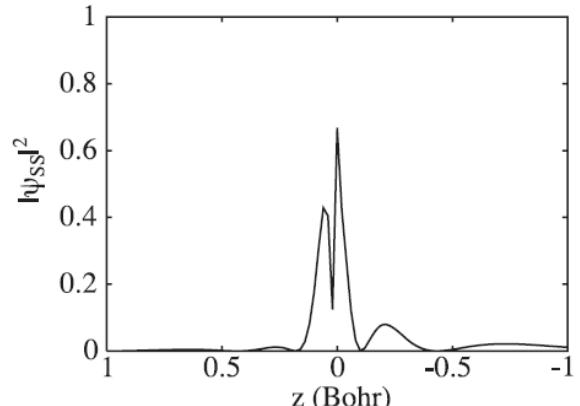


Abbildung 13:

Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi_{ss}|^2$  des Oberflächenzustandes senkrecht zur Ag[111]-Oberfläche [5]

In Abbildung 12 ist zu sehen, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Gold-Wellenfunktion nicht symmetrisch um die Oberfläche bei  $z=0$  verteilt ist. Man sieht, dass die Wellenfunktion bis zu einem Bohr aus dem Kristall hinausragt (negative z-Werte), während bereits bei etwa 0,3 Bohr innerhalb des Kristalls die Wahrscheinlichkeit gegen Null geht. Dadurch werden die verschiedenen Anteile des Potentialgradienten anders gewichtet und heben sich

bei Addition bzw. beim Auswerten des Integrals (siehe Gleichung (69)) von  $z=-1$  Bohr bis  $z=1$  Bohr nicht weg.

Wird dagegen Abbildung 13 betrachtet, ist eine nahezu symmetrische Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit um die Silber [111]-Oberfläche gegeben. Genau dies hat zur Folge, dass die Integration mit denselben Grenzen einen wesentlich kleineren Wert ergibt, da der asymmetrische Charakter des Potentialgradienten und die symmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit um die Oberfläche im Produkt dafür sorgen, dass sich die Anteile innerhalb und außerhalb des Festkörpers nahezu gegenseitig kompensieren.

Mit dieser neuen Betrachtung, wie symmetrisch das Betragsquadrat der Wellenfunktion senkrecht zur Oberfläche verteilt ist, kann schließlich der nicht messbare Rashba-Effekt an der Silber [111]- im Gegensatz zu den starken Effekten an der Gold [111]-Oberfläche erklärt werden. Es ist also zu vermuten, dass die, im Experiment gemessene, erhöhte Halbwertsbreite des Energiebandes bei Silber durch Überlagerung zweier leicht verschobener, nicht auflösbarer Parabeln hervorgerufen wird.

## 5 Zusammenfassung

Zum Schluss werden hier die wichtigsten Teile dieser Ausarbeitung zusammen getragen, um das Ziel, die Vorgehensweise und die Interpretation der Ergebnisse sowie der Vergleich zum Experiment hervorzuheben:

- **Motivation:** Das Ziel war es, die Spin-Bahn Kopplung an Oberflächenzuständen berechnen und beschreiben zu können, sowie diese mit der Spin-Bahn Kopplung in einem kugelsymmetrischen Potential (Beispiel: Atom) zu vergleichen.
- **Vorgehensweise:** Zu lösen war eine, wie in der Quantenmechanik üblich, Energieeigenwertgleichung, wobei der Hamiltonoperator aus dem Grenzfall der Dirac-Gleichung folgte. Als Ansatz wurde das Modell des zweidimensionalen freien Elektronengases gewählt, sodass von einem auf der Oberfläche beschränkten, aber dort freien (→ parabelförmige Energiedispersion) Zustand ausgegangen wurde.
- **Ergebnisse/Rashba-Effekt:** Die Lösung dieser Energieeigenwertgleichung ergab eine Aufspaltung der Energiedispersion in zwei gegeneinander verschobene Parabeln. Diese Energieaufspaltung ist proportional zur Wellenzahl  $k$  sowie zur Stärke der Kopplung  $\zeta$ . Im Gegensatz zur Spin-Bahn Kopplung im kugelsymmetrischen Potential sind die Parabeln nicht spinentartet, sondern je nach positiver oder negativer Wellenzahl ist Spin-up oder Spin-down energetisch bevorzugt. Die Spinrichtung bezieht sich dabei auf die zum Wellenvektor  $\vec{k}$  orthogonale Achse.
- **Experiment:** Mithilfe der winkelaufgelösten Photoemission wurden Energiedispersion bestimmter Oberflächen (die für das Modell des zweidimensionalen freien Elektronengases geeignet sind) gemessen. An der Gold [111]-Oberfläche trat der Rashba-Effekt erwartungsgemäß auf, während an der Silber [111]-Oberfläche keine messbare Energieaufspaltung zu erkennen war. Doch auch diese experimentellen Ergebnisse sind schließlich theoretisch erklärbar, indem das zuvor getätigte Modell etwas erweitert wird, um so die Symmetrie des Zustandes in der Nähe der Oberfläche zu berücksichtigen. Dabei gilt: Je asymmetrischer die Aufenthaltswahrscheinlichkeit um die Oberfläche verteilt ist, desto stärker tritt der Rashba-Effekt auf.

⇒ Alles in allem liefert die Anwendung eines einfachen Modells Ergebnisse der Spin-Bahn Kopplung an Festkörperoberflächen, die durch das Experiment an geeigneten Oberflächen (material- und richtungsabhängig) bestätigt werden.

## Literatur

- [1] <http://rimg.geoscienceworld.org/content/42/1/199/F4.large.jpg>, Dez. 2014.
- [2] <http://www.mpg.de/426295/zoom.jpeg>, Dez. 2014.
- [3] G. Nicolay et al. “Spin-orbit splitting of the L-gap surface state on Au(111) and Ag(111)”. In: Bd. 65. 033407. Phys. Rev. B, 2009.
- [4] M. Hoesch et al. “Spin structure of the Shockley surface state on Au(111)”. In: Bd. 69. 241401. Phys. Rev. B, 2004.
- [5] M. Nagano et al. “A first-principles study on the Rashba effect in surface systems”. In: Bd. 21. 064239. J. Phys.: Condens. Matter, 2009.
- [6] G. Bihlmayer. “Electronic States in Solids”. In: *Spintronics* 40. Spring School (2009). Jülich.
- [7] T. Keuter. “Mikroskopische Theorie der Spin-Bahn-Wechselwirkung in Festkörpern”. Vortrag im Seminar zu aktuellen Problemen dimensionsreduzierter Festkörper WS 2009/10, WWU Münster.
- [8] B. Wallmeyer. “Theorie der Spin-Bahn-Wechselwirkung in Festkörpern und an Oberflächen”. Vortrag im Seminar zu aktuellen Problemen dimensionsreduzierter Festkörper SS 2013, WWU Münster.