

La photoémission résolue en angle

Carte de la structure électronique dans l'espace réciproque
Très directe pour les matériaux 2D avec une bonne qualité de surface.

⇒ Dispersion des bandes, vitesse de Fermi, surface de Fermi

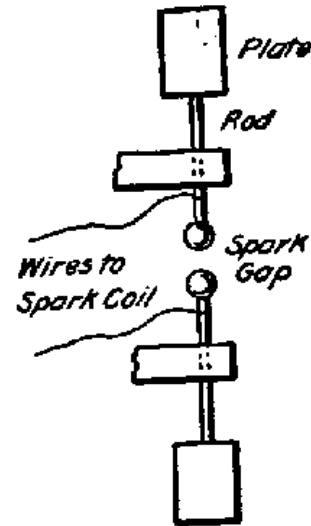
⇒ Etude des transitions (apparition de gaps par exemple)

⇒ Etude des interactions : déviations par rapport à un modèle de bande simple

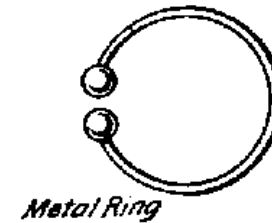
L'effet photoélectrique : la découverte de Hertz



Heinrich. R. Hertz, 1887



émetteur



récepteur

⇒ Propagation des ondes électromagnétiques (théories de Maxwell)

⇒ Observe aussi que l'étincelle est plus intense si le récepteur voit l'étincelle de l'émetteur

⇒ effet photoélectrique !!

L'effet photoélectrique et la nature quantique de la lumière

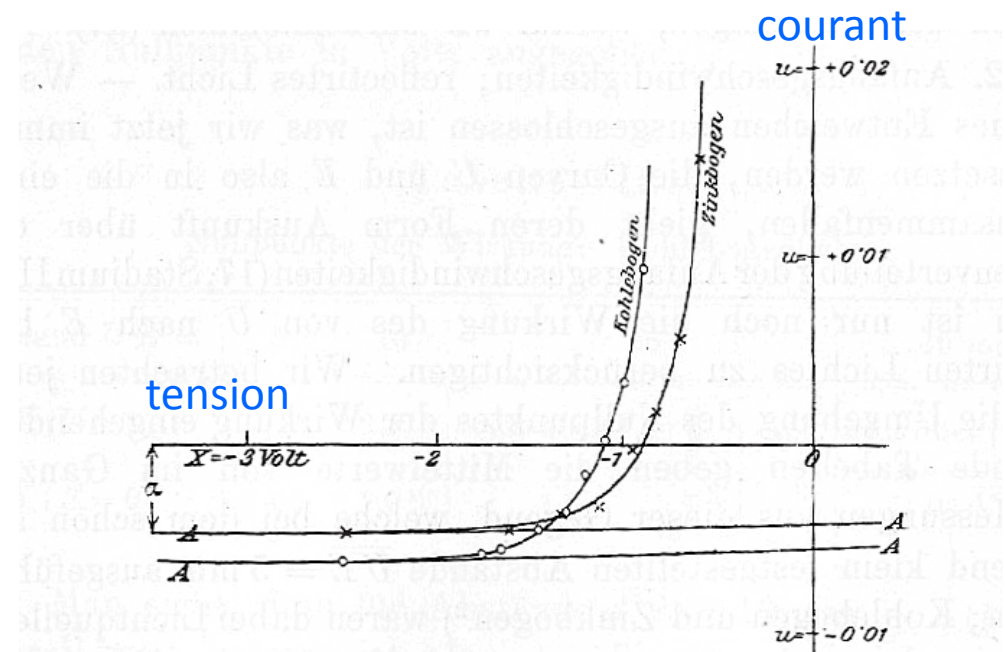
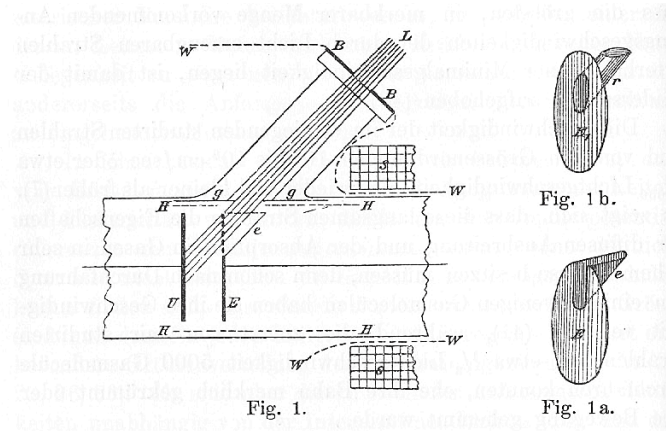
Expérience ultérieures (notamment Von Lenard)

- L'énergie maximum des électrons émis est proportionnelle à la fréquence de la lumière, pas à son intensité.

- Il y a une énergie minimum à fournir (le travail de sortie, ϕ eV) pour arracher des électrons à un métal, elle est différente pour chaque matériau.

Expliqué par Einstein en 1905...

⇒ Il existe des photons d'énergie $h\nu$



L'effet photoélectrique

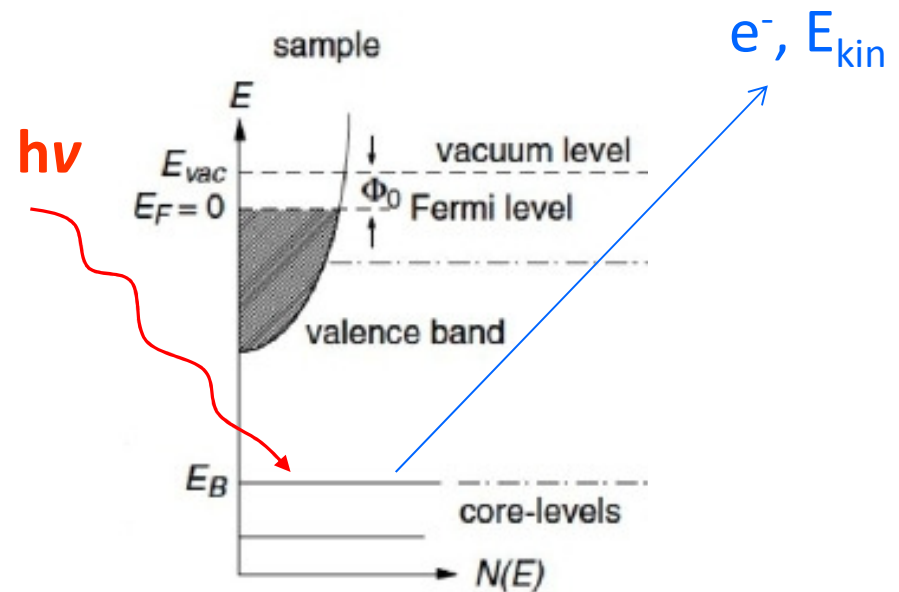
Expérience ultérieures (notamment Von Lenard)

- L'énergie maximum des électrons émis est proportionnelle à la fréquence de la lumière, pas à son intensité.
- Il y a une énergie minimum à fournir (le travail de sortie, qq eV) pour arracher des électrons à un métal, elle est différente pour chaque matériau.

Expliqué par Einstein en 1905...

⇒ Il existe des photons d'énergie $h\nu$

Description moderne



Niveaux d'énergie
dans un solide

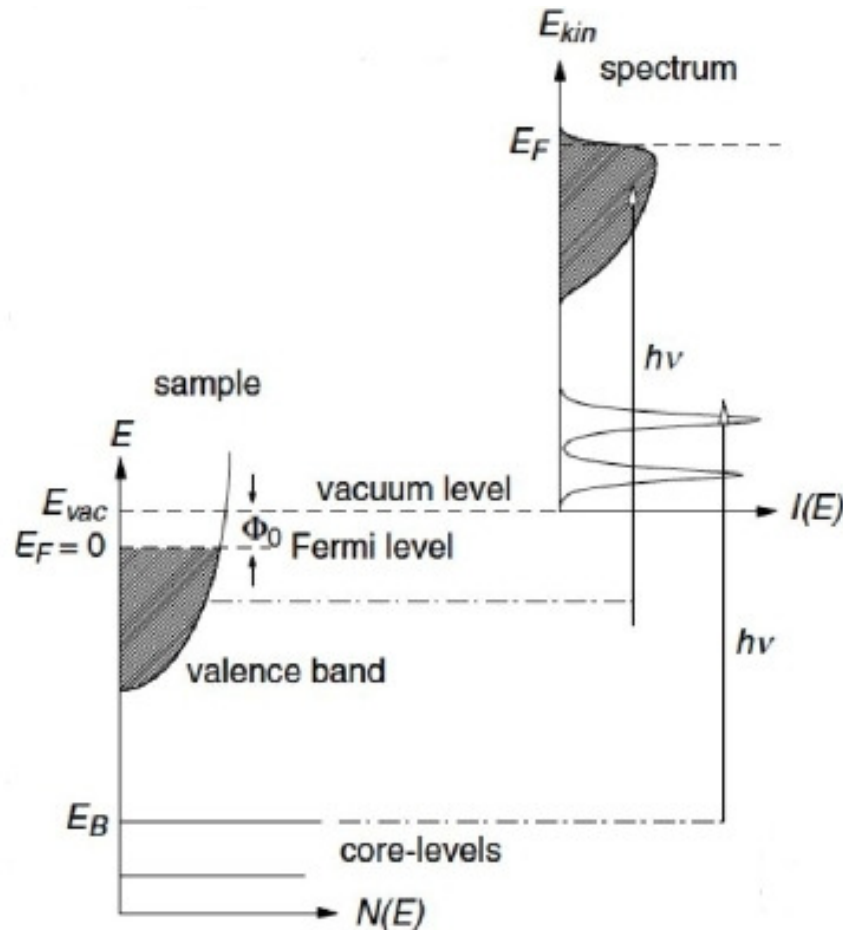
$$E_{kin} = h\nu - W - |E_B|$$

Que peut apporter la photoémission comme information ?

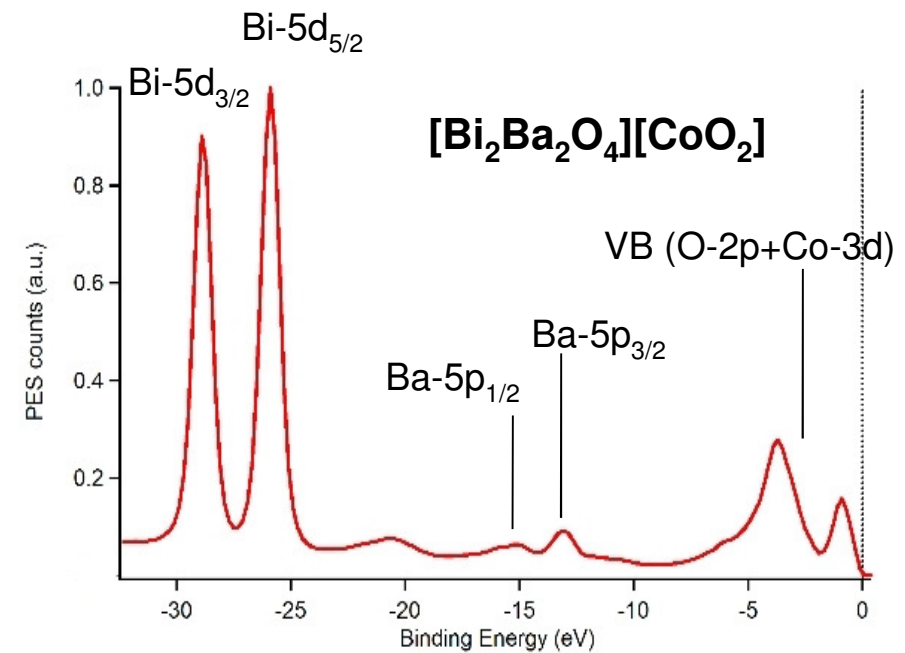
1- Conservation de l'énergie :

$$E_{kin} = h\nu - W - |E_B|$$

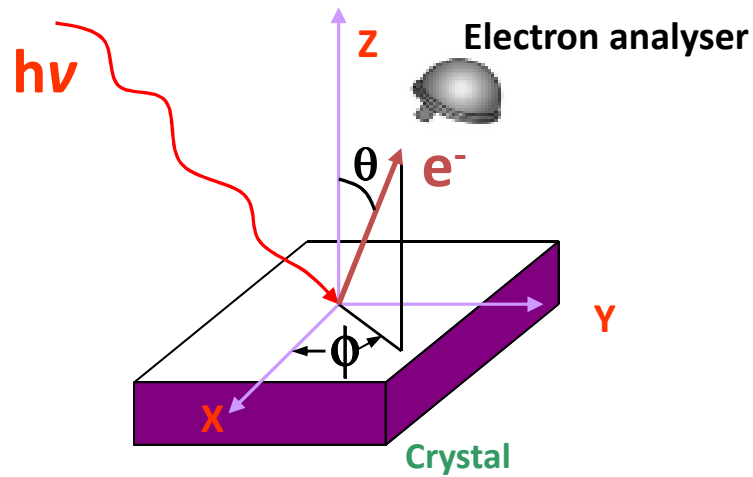
=> Densité d'état intégrée



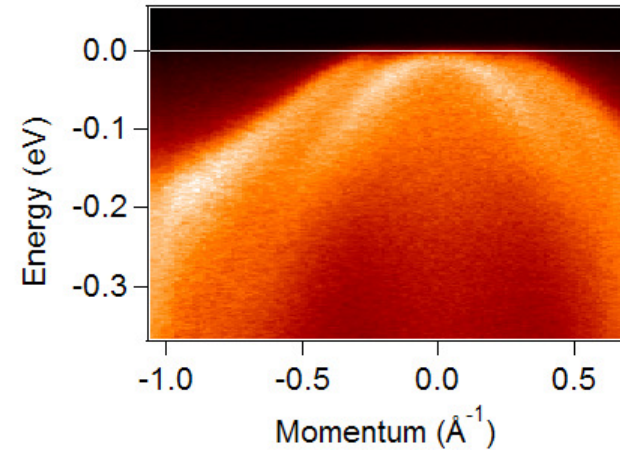
Niveaux d'énergie
dans un solide



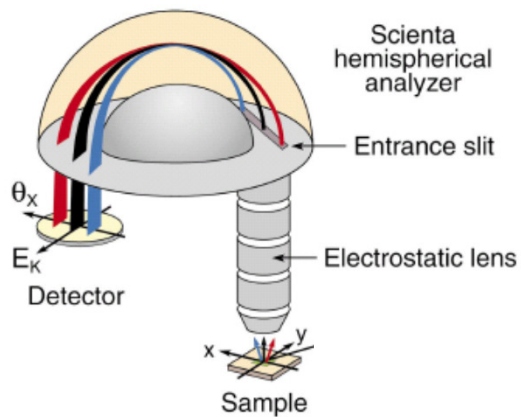
La photoémission résolue en angle : exemple



Hole pockets in $Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})As_2$



$$E_{kin} = h\nu - W - |E_B|$$



2- Conservation du moment parallèle à la surface :

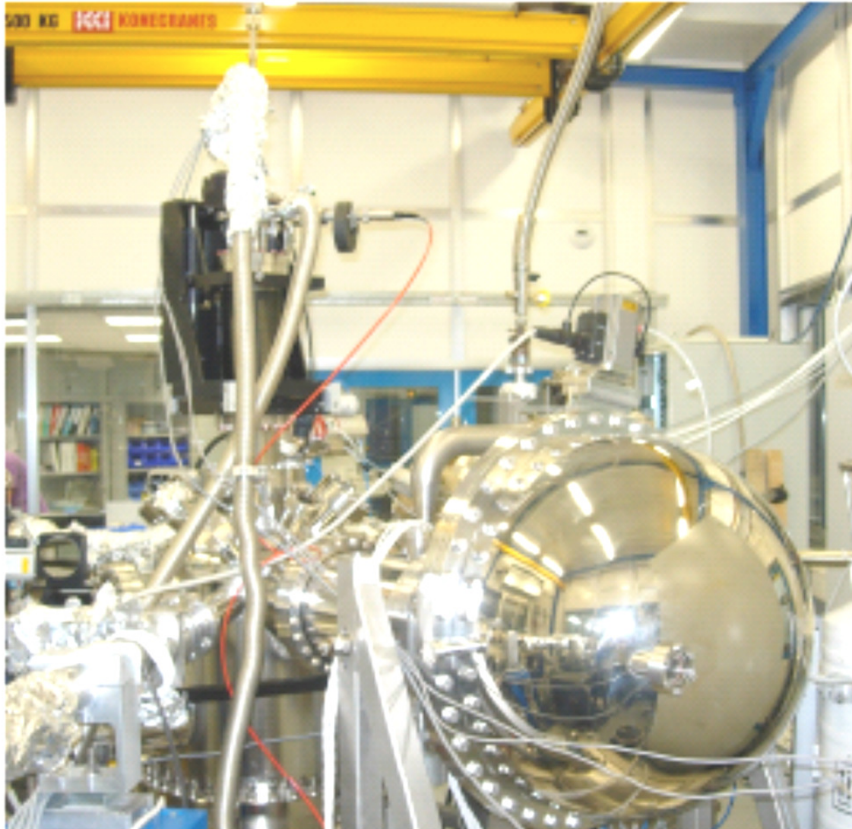
$$\hbar k_{\parallel} = \sqrt{2mE_{kin}} \sin \theta$$

$\Rightarrow E_{kin}$ vs k_{\parallel} : Structure de bandes

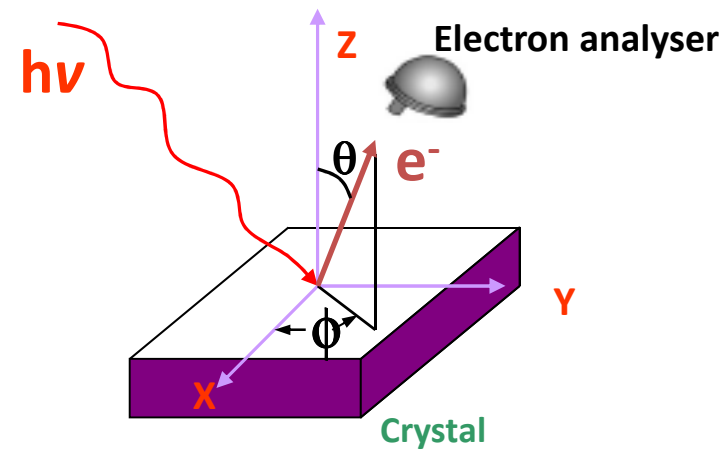
NB : l'information sur k_{perp} est perdue

La photoémission résolue en angle, un siècle plus tard

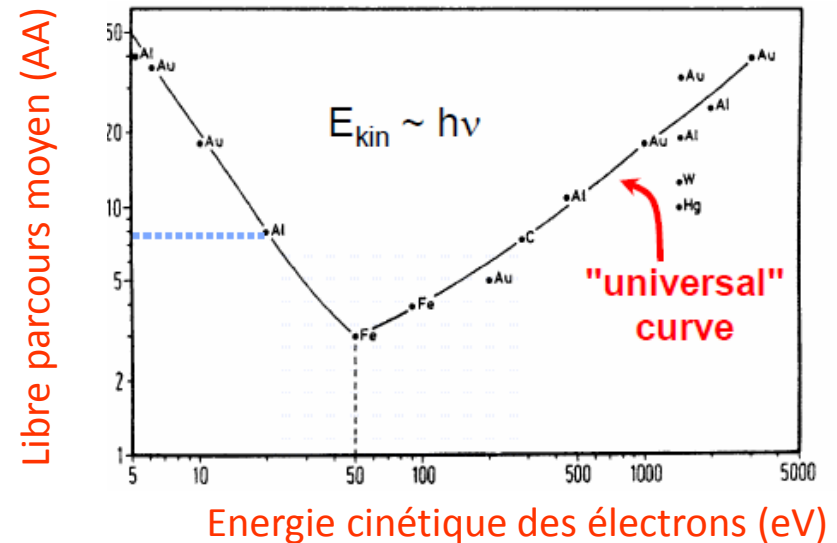
CASSIOPEE beamline, SOLEIL synchrotron



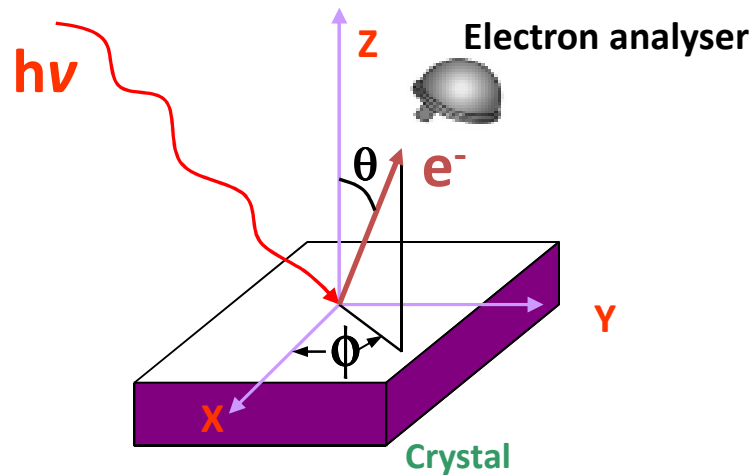
Photons from : Synchrotrons : 10-100eV
He lamp : 21 eV
Laser : 6-7eV



Une technique de surface !!
=> environnement ultra-vide



La photoémission résolue en angle : exemple



$$E_{kin} = h\nu - W - |E_B|$$

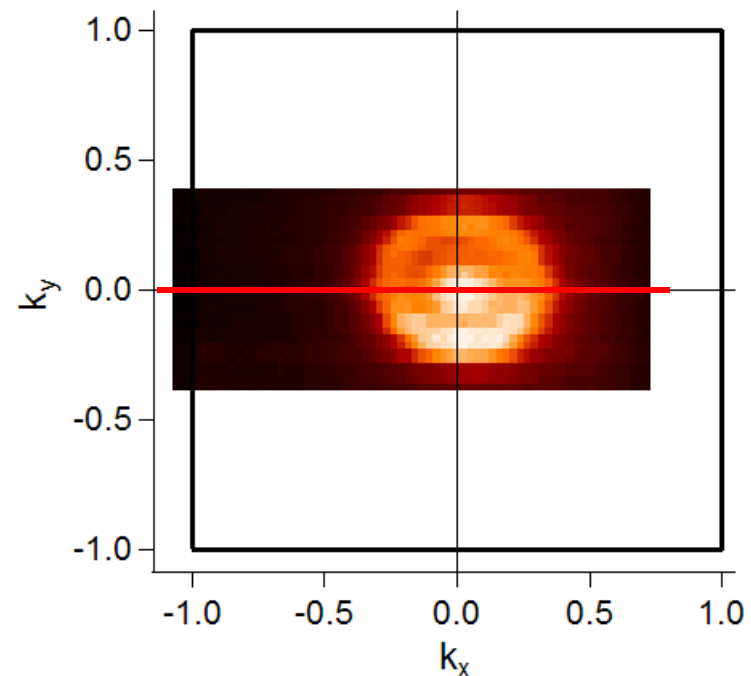
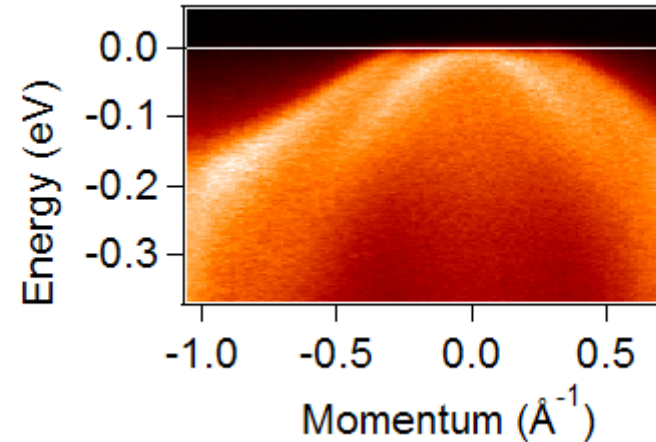
$$\hbar\mathbf{k}_{\parallel} = \sqrt{2mE_{kin}} \sin \theta$$

Carte de la structure électronique

Très directe pour les matériaux 2D avec une bonne qualité de surface.

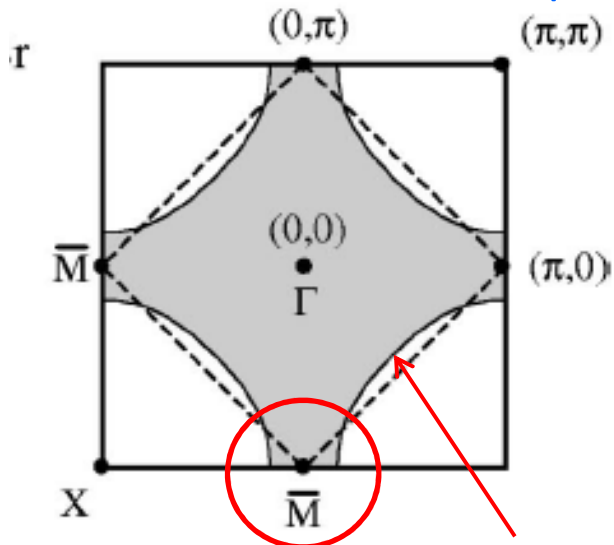
⇒ Etude des transitions (existence de gaps par exemple)

Hole pockets in $Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})As_2$



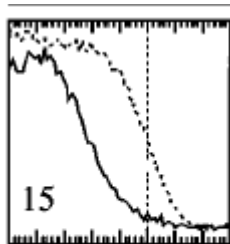
Exemple : Gap supraconducteur mesuré par photoémission dans les cuprates

Surface de Fermi d'un cuprate

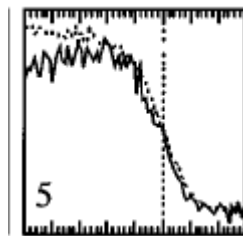


Région antinodale

Point nodal

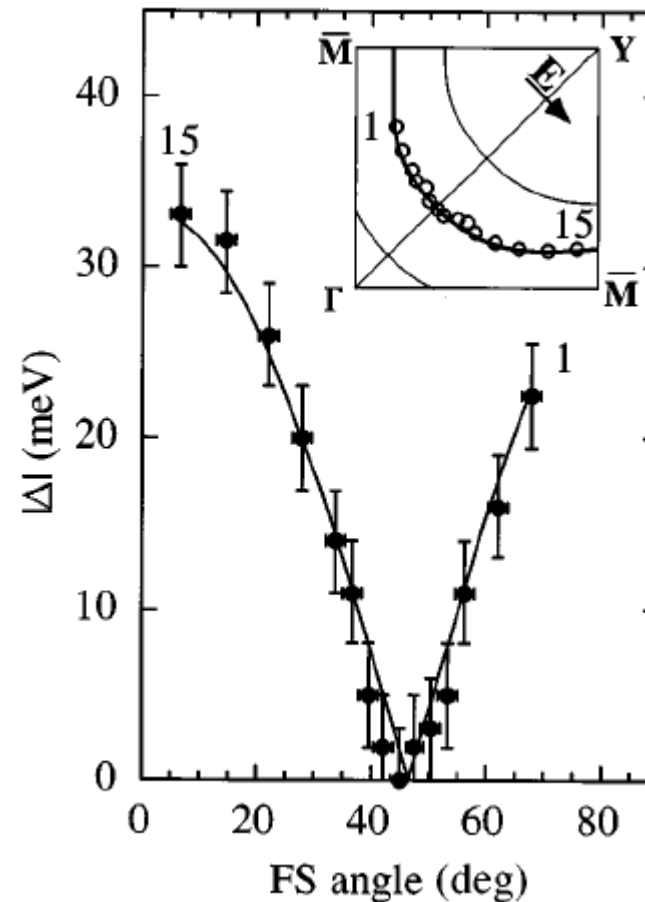


Energy



Energy

Early determination (Bi2212, $T_c=87K$)

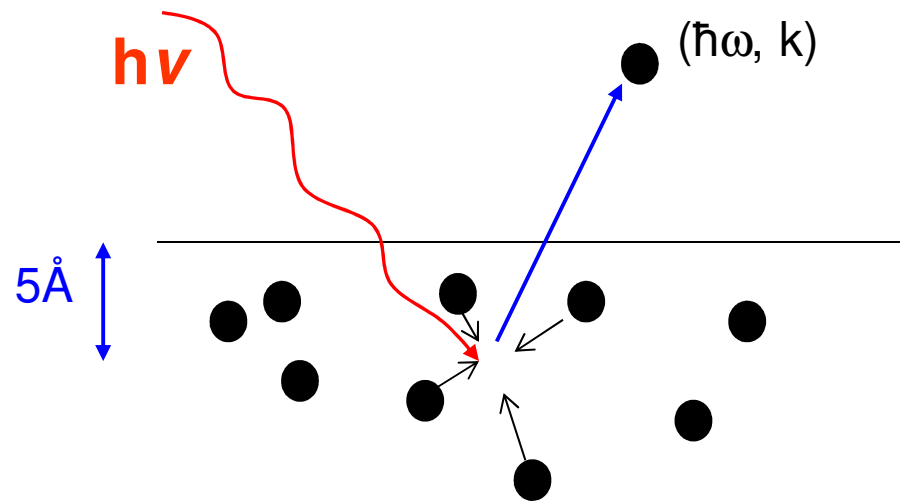


Ding et al., PRB 1996

=> Le gap est anisotrope (« d-wave »), c'est une caractéristique inhabituelle et importante de la supraconductivité dans ces matériaux.

Exemple d'information sur les interactions du système de N électrons

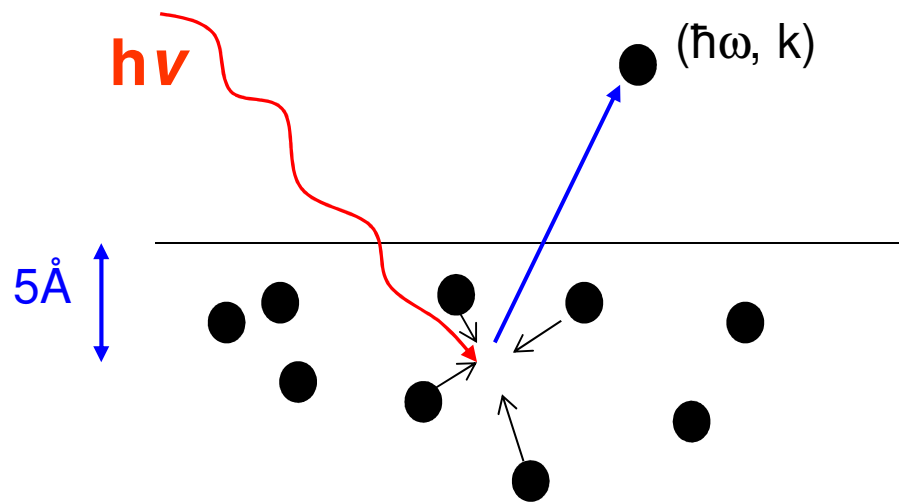
La **probabilité** d'arracher un électron dépend de la manière dont il est lié aux autres électrons.



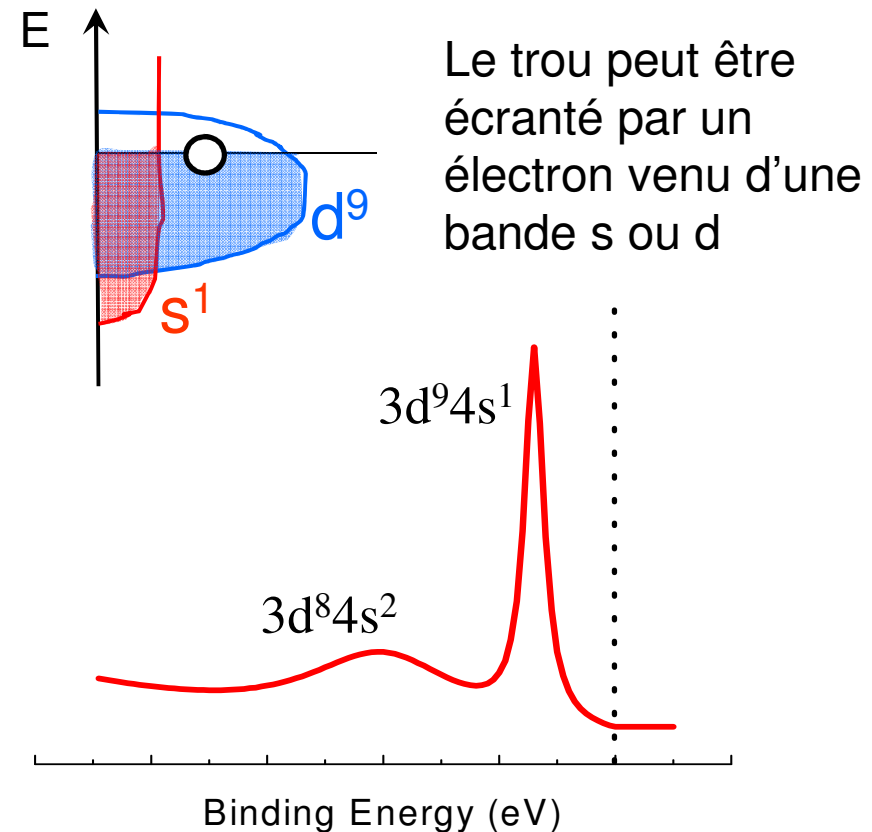
Le système des N-1 électrons réagit au trou laissé par le photoélectron. Ceci peut conduire des états excités.

Exemple d'information sur les interactions du système de N électrons

Exemple : Ni métallique



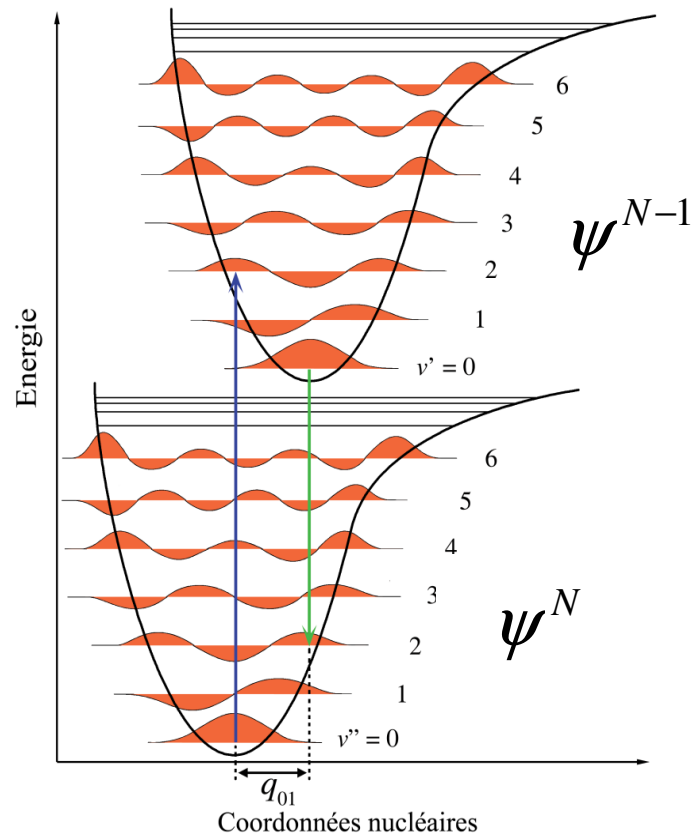
L'énergie « stockée » dans le système des N-1 électrons sera retranchée de E_{kin} => apparition de satellites.



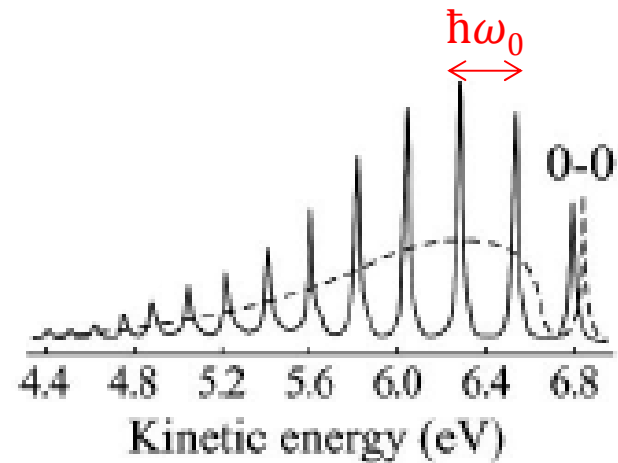
=> La position et l'intensité du satellite renseignent sur le couplage entre les bandes d et s et la force des corrélations dans la bande d.

Interactions électron-phonon

L'état d'équilibre du système à N ou N-1 électrons peut être différent.

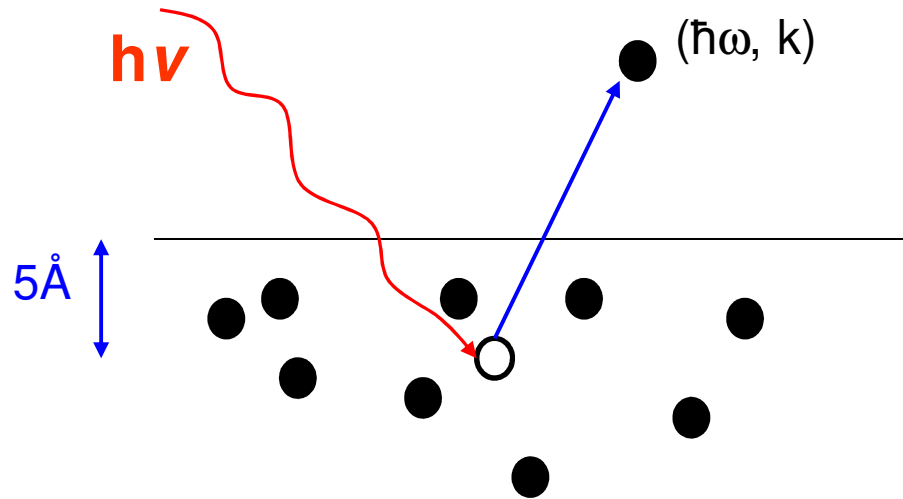


Spectre de photoémission pour une molécule H_2



Dans un solide => élargissement. La forme du spectre renseigne sur l'intensité du couplage électron-phonon.

La règle d'or de Fermi



On calcule la **probabilité** d'arracher un électron d'énergie cinétique ω et de vecteur d'onde k au système de N électrons.

$$I(k, \omega) = \sum_{i,f} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f^N | \mathbf{H}_{\text{int}} | \psi_i^N \rangle \right|^2 \delta(E_f^N - E_i^N - h\nu)$$

N-1 électrons
en interaction
+ électron libre ($\hbar\omega, k$)

N électrons
en interaction

La règle d'or de Fermi

$$I(k, \omega) = \sum_{i,f} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f^N | \mathbf{H}_{\text{int}} | \psi_i^N \rangle \right|^2 \delta(E_f^N - E_i^N - h\nu)$$

One electron wave function

$$\psi_f^N = \varphi_f^k \psi_f^{N-1}$$

Approximation soudaine :

ψ_f^{N-1} est un état propre du système de N-1 électron, indépendant de φ_f^k

Il peut être un état excité.

$$\psi_i^N = \varphi_i^k \psi_i^{N-1}$$

Attention !!

$|\psi_i^{N-1}\rangle = c_k |\psi_i^N\rangle$ n'est pas, en général, un état propre du système de N-1 électron

$$\langle \varphi_f^k | \mathbf{H}_{\text{int}} | \varphi_i^k \rangle \langle \psi_f^{N-1} | c_k | \psi_i^N \rangle$$

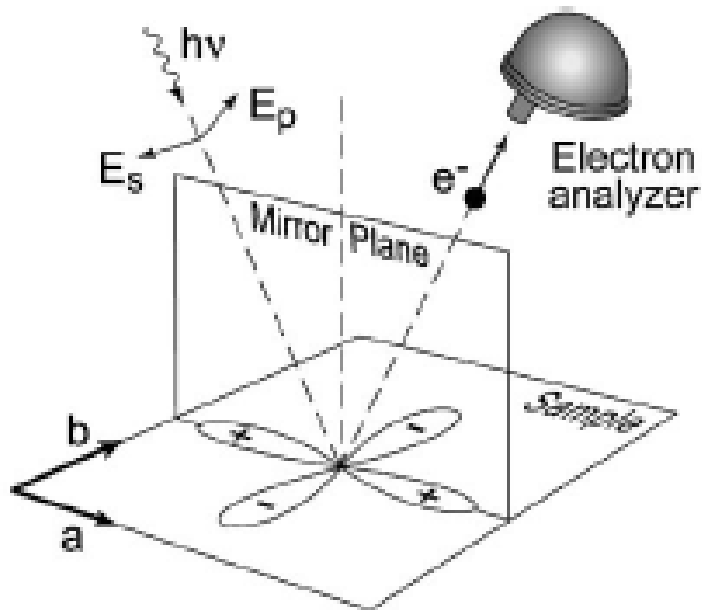
Élément de matrice décrivant le processus de photoémission.
Il dépend de A et hν.

Interactions

Le processus de photoémission

$$M_{i,f} = \left| \langle \varphi_f^k | H_{\text{int}} | \varphi_i^k \rangle \right|^2$$

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$$



Pour avoir $M \neq 0$

$\Rightarrow \Psi_f$ pair / plan de symétrie

Soit : Ψ_i pair et A pair

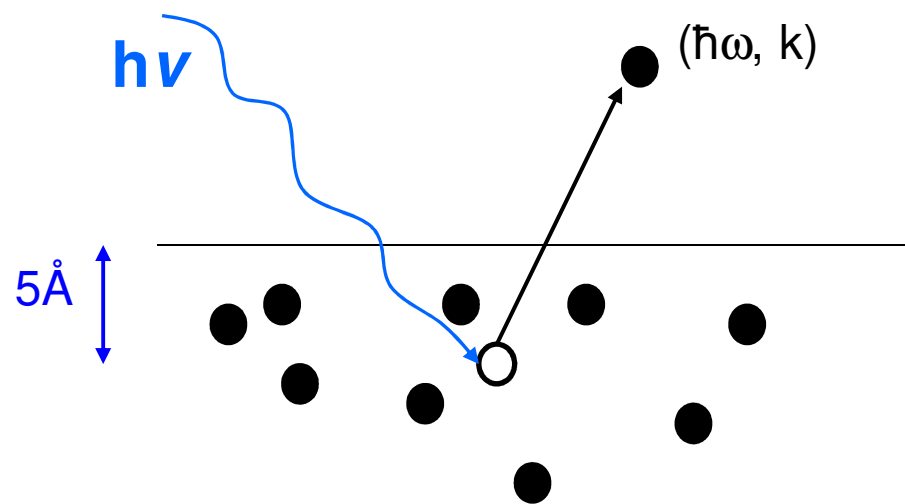
Soit : Ψ_i impair et A impair

\Rightarrow Choix de la symétrie des orbitales

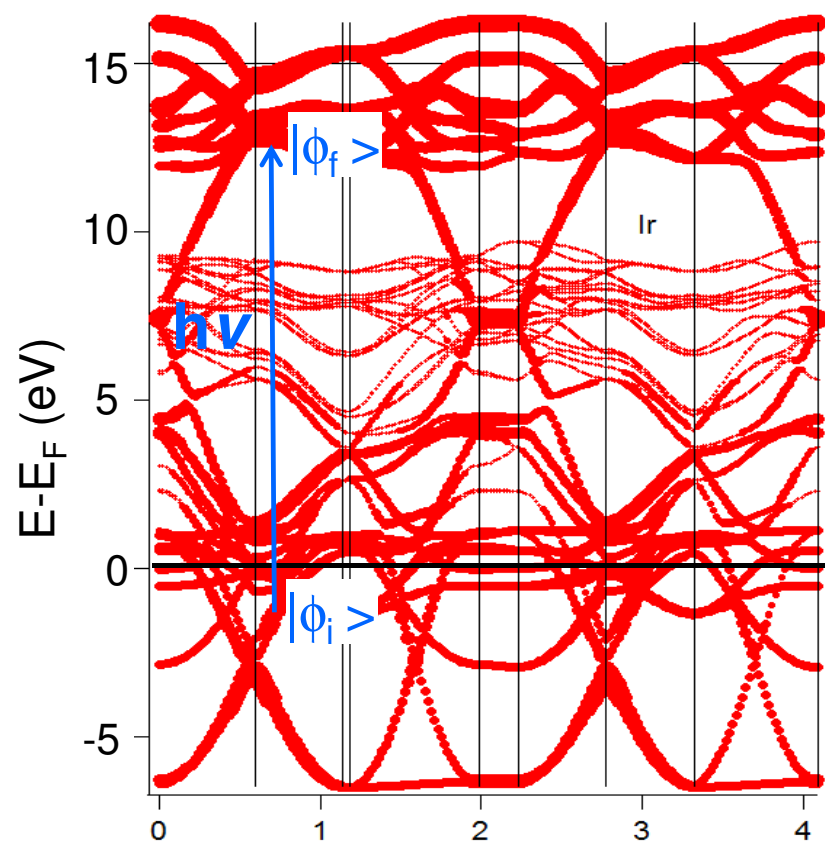
Le processus de photoémission

$$M_{i,f} = \left| \left\langle \varphi_f^k \left| H_{\text{int}} \right| \varphi_i^k \right\rangle \right|^2$$

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

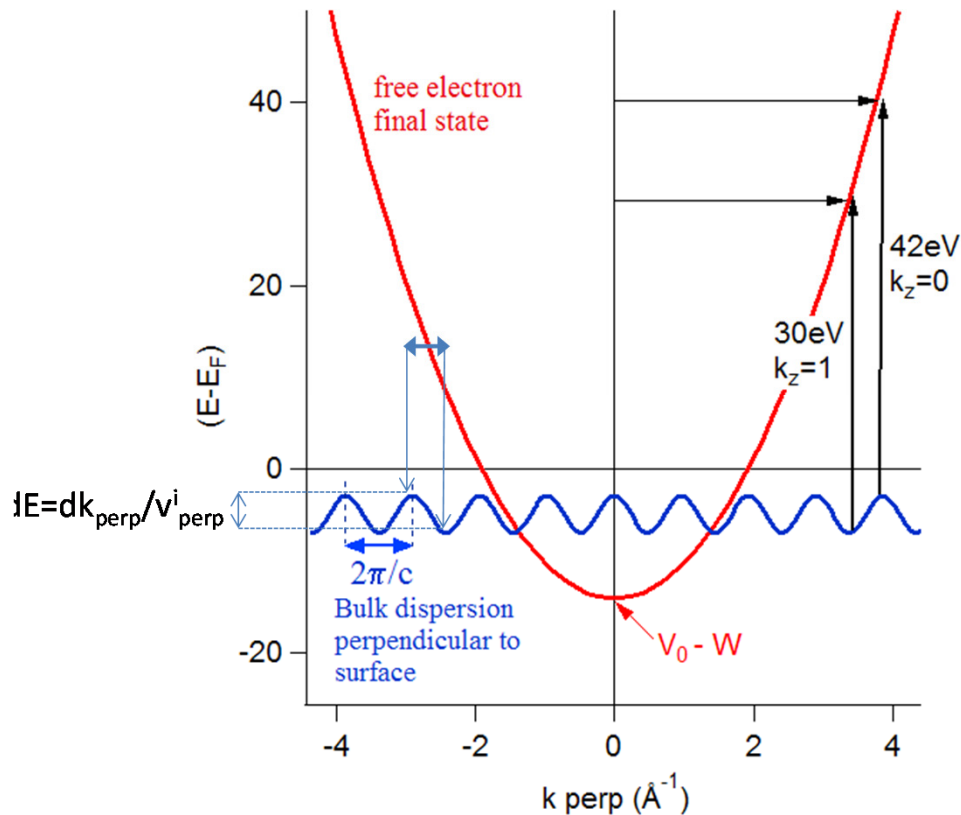


- Excitation vers un état de haute énergie (en général mal connu)
- Trajet jusqu'à la surface
- Passage de la surface



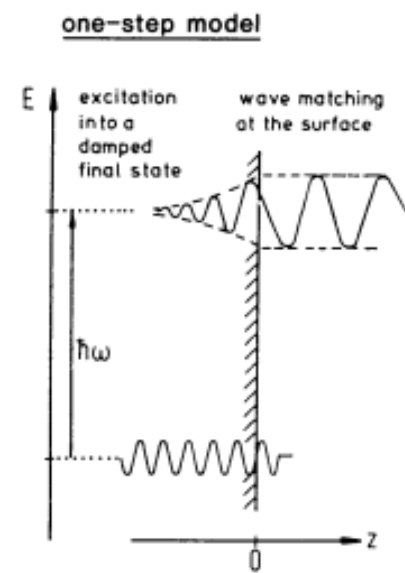
Problèmes liés à k_{perp}

k_{perp} n'est pas conservé lors du passage de la surface



k_{perp} dépend de l'énergie de photons
 \Rightarrow permet d'étudier des structures 3D

Incertitude sur $k_{\text{perp}} \sim 1/\lambda$
 \Rightarrow largeur résiduelle



\Rightarrow La photoémission est plus compliquée dans les matériaux 3D, en particulier pour interpréter les largeurs de raie

Le terme d'interaction

$$I(k, \omega) = \sum_{i,f} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f^N | \mathbf{H}_{\text{int}} | \psi_i^N \rangle \right|^2 \delta(E_f^N - E_i^N - h\nu)$$

One electron wave function

$$\psi_f^N = \varphi_f^k \psi_f^{N-1}$$

Approximation soudaine :

ψ_f^{N-1} est un état propre du système de N-1 électron, indépendant de φ_f^k

Il peut être un état excité.

$$\psi_i^N = \varphi_i^k \psi_i^{N-1}$$

Attention !!

$|\psi_i^{N-1}\rangle = c_k |\psi_i^N\rangle$ n'est pas, en général, un état propre du système de N-1 électron

$$\langle \varphi_f^k | \mathbf{H}_{\text{int}} | \varphi_i^k \rangle \langle \psi_f^{N-1} | c_k | \psi_i^N \rangle$$

Élément de matrice décrivant le processus de photoémission.

Il dépend de A et hν.

Interactions

$$A(k, \omega) = \sum_f |\langle \psi_f^{N-1} | c_k | \psi_i^N \rangle|^2 \delta(E_f^{N-1} - E_i^N - \omega)$$

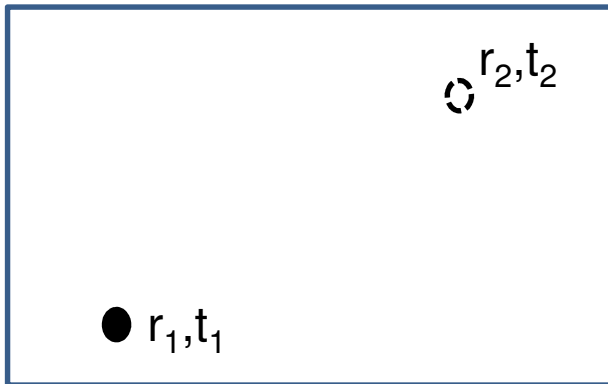
Fonction spectrale $A(k, \omega)$

$$A(k, \omega) = \sum_f |\langle \psi_f^{N-1} | c_k | \psi_i^N \rangle|^2 \delta(E_f^{N-1} - E_i^N - \omega)$$

$A(k, \omega)$ décrit la probabilité de trouver un électron en k et ω

A partir de la fonction de Green :

Expérience de pensée



$$G(r_1, r_2, t_1, t_2) = -i \langle \psi_N | T [c_{r_1 t_1} c_{r_2 t_2}^+] | \psi_N \rangle$$

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} G''^{ret}(k, \omega)$$

Fonction spectrale $A(k, \omega)$

$$A(k, \omega) = \sum_f |\langle \psi_f^{N-1} | c_k | \psi_i^N \rangle|^2 \delta(E_f^{N-1} - E_i^N - \omega)$$

$A(k, \omega)$ décrit la probabilité de trouver un électron en k et ω

Sans interaction :

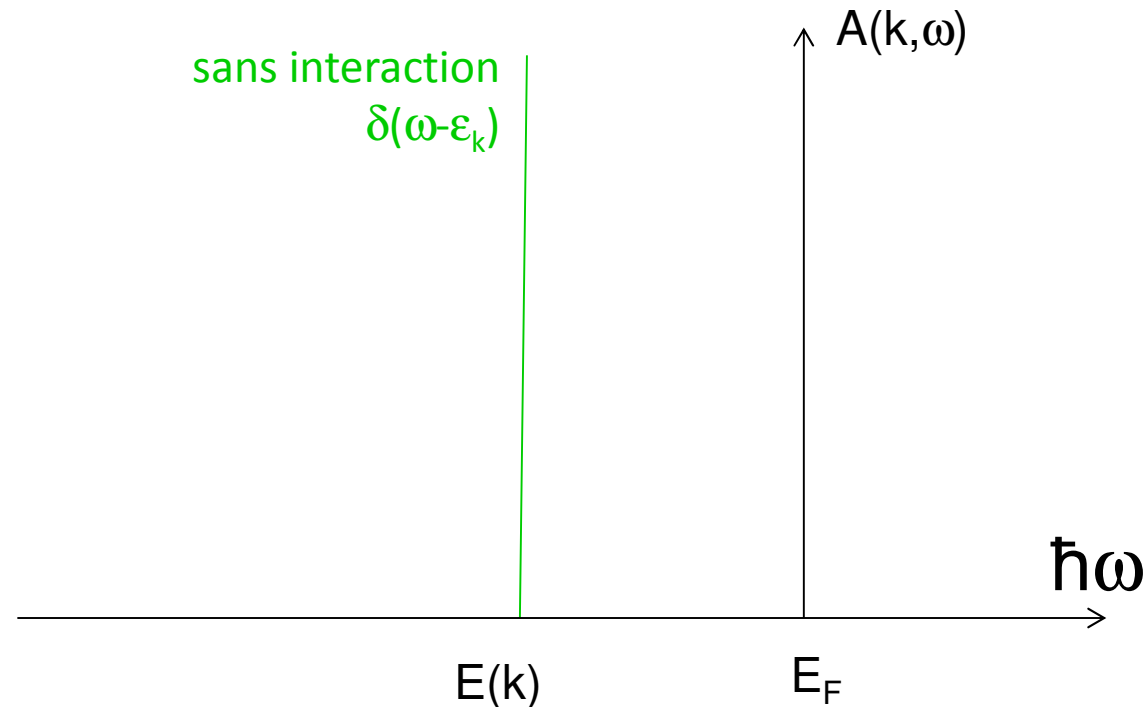
$$E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$$

$$\text{Si } \hbar\omega = E(k) \Rightarrow A=1$$

$$\text{Sinon } A=0$$

Avec interaction :

Les électrons sont remplacés par des quasiparticules qui gardent un état k pendant un certain temps de vie τ .



Exprimer $A(k, \omega)$ à l'aide de la self-énergie électronique

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma(k, \omega)} \quad \Sigma(k, \omega) = \text{self énergie électronique}$$

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} G''^{ret}(k, \omega)$$

$$A(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Sigma''(k, \omega)}{(\omega - \varepsilon_k - \Sigma'(k, \omega))^2 + \Sigma''(k, \omega)^2}$$

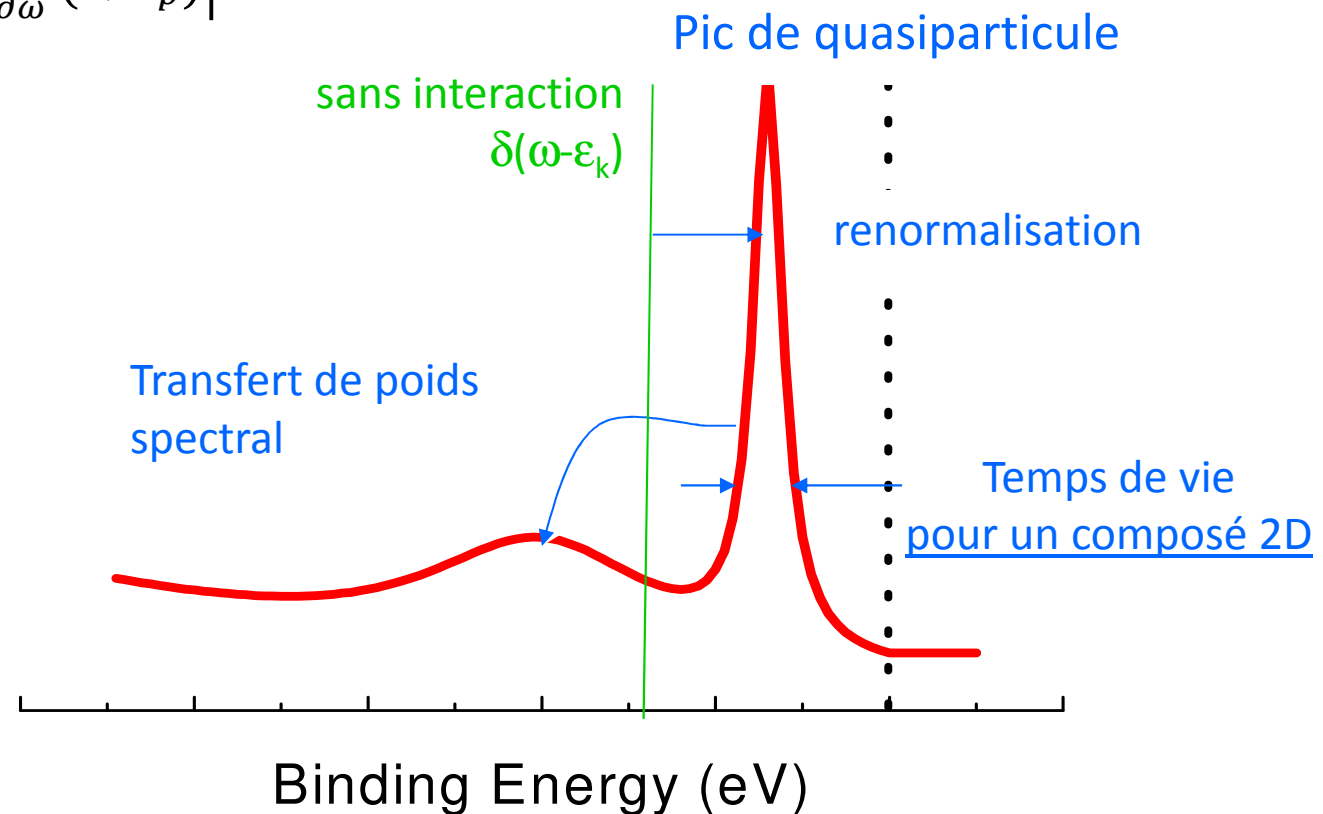
« Ressemble » à une lorentzienne centrée à $\varepsilon_k + \Sigma'(k, \omega)$ et de largeur $\Sigma''(k, \omega)$

=> Développement limité autour du pôle $\omega_p = \varepsilon_k + \Sigma'(k, \omega)$

Exprimer $A(k, \omega)$ à l'aide de la self-énergie électronique

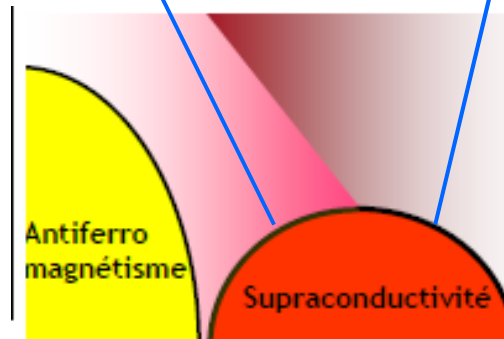
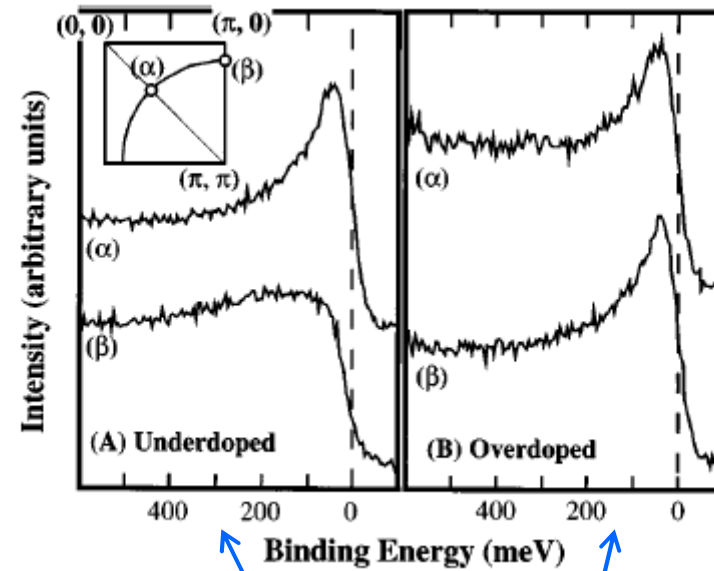
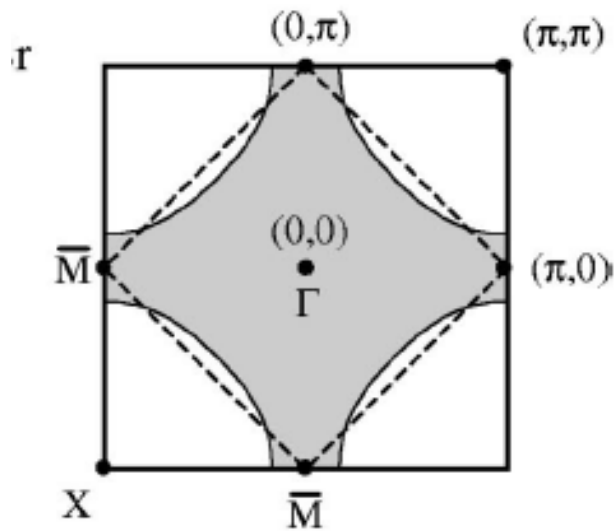
$$A(k, \omega) = Z_k \frac{Z_k \Sigma''(k, \omega_p) / \pi}{(\omega - \varepsilon_k - \Sigma'(k, \omega_p))^2 + (Z_k \Sigma''(k, \omega_p))^2} + (1 - Z_k) A_{inc}(k, \omega)$$

avec $Z_k = 1 / \left| 1 - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}(k, \omega_p) \right|$



Dans les cuprates...

Les spectres ARPES sont très différents dans les régions nodales et antinodales

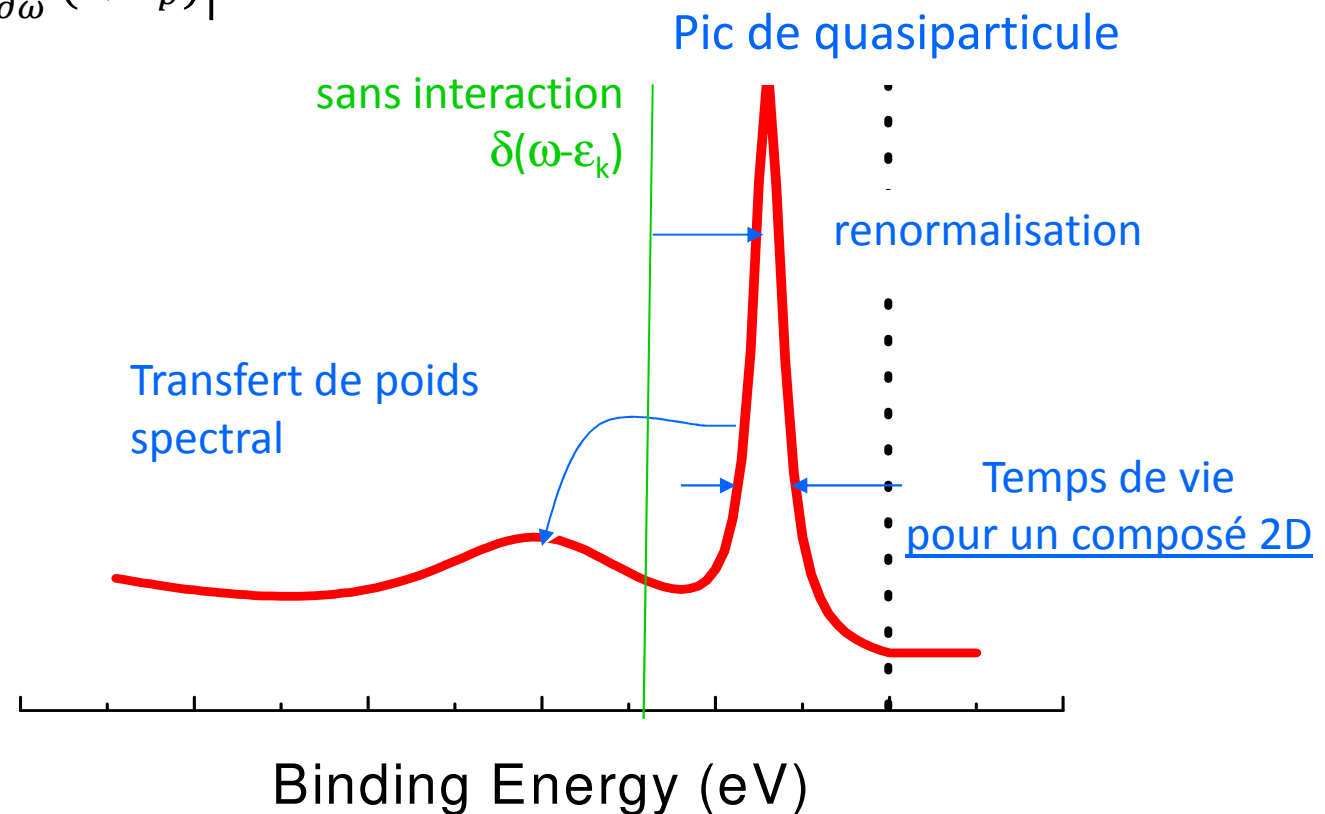


dopage

Exprimer $A(k, \omega)$ à l'aide de la self-énergie électronique

$$A(k, \omega) = Z_k \frac{Z_k \Sigma''(k, \omega_p) / \pi}{(\omega - \varepsilon_k - \Sigma'(k, \omega_p))^2 + (Z_k \Sigma''(k, \omega_p))^2} + (1 - Z_k) A_{inc}(k, \omega)$$

avec $Z_k = 1 / \left| 1 - \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}(k, \omega_p) \right|$

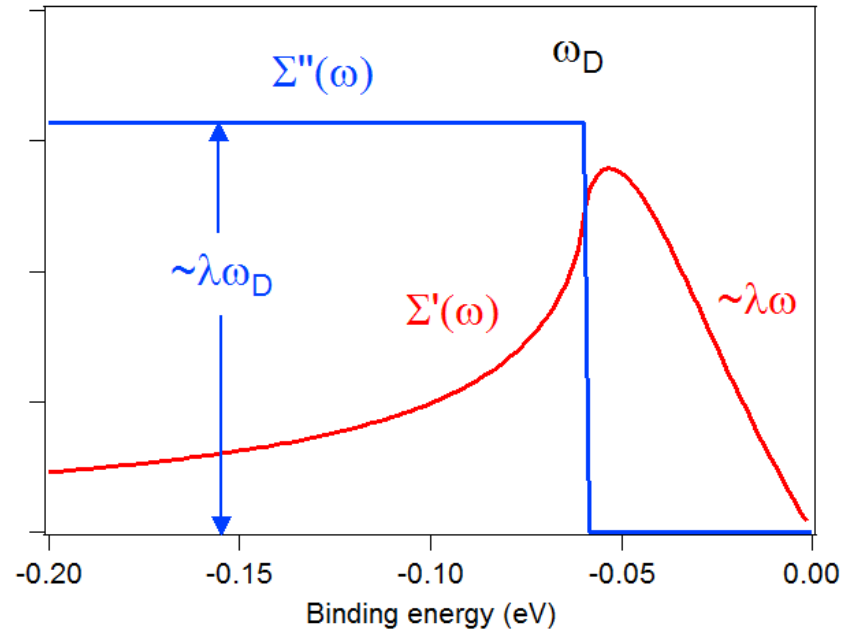
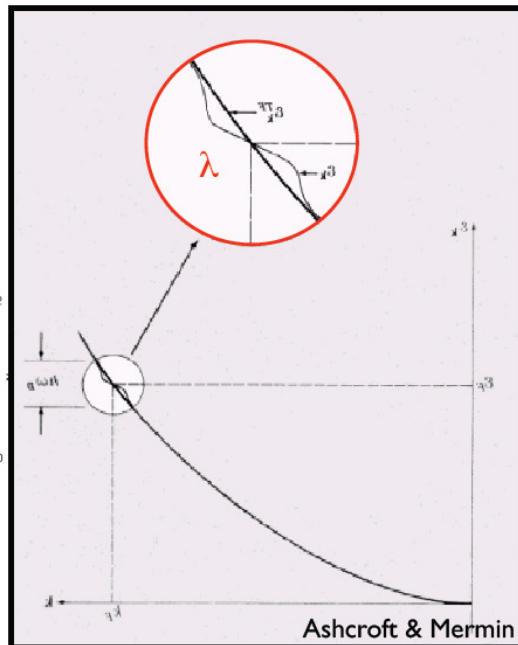


Self-énergie due au couplage électron-phonon

$$\Sigma''(\omega) \propto \int_0^\omega \alpha^2 F(\Omega) d\Omega$$

$\Sigma'(\omega)$ by Kramers Kronig

λ = couplage électron-phonon

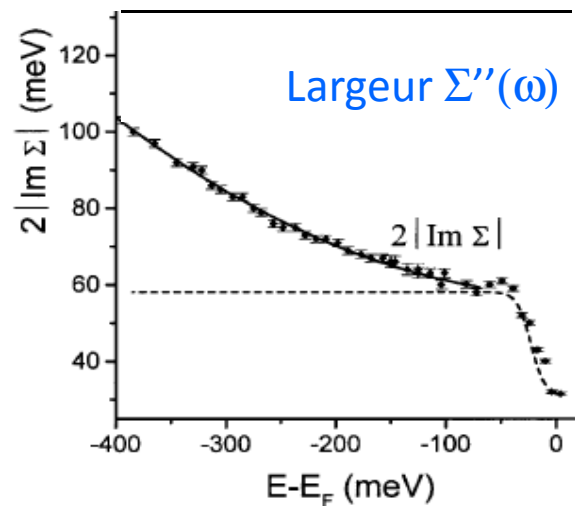
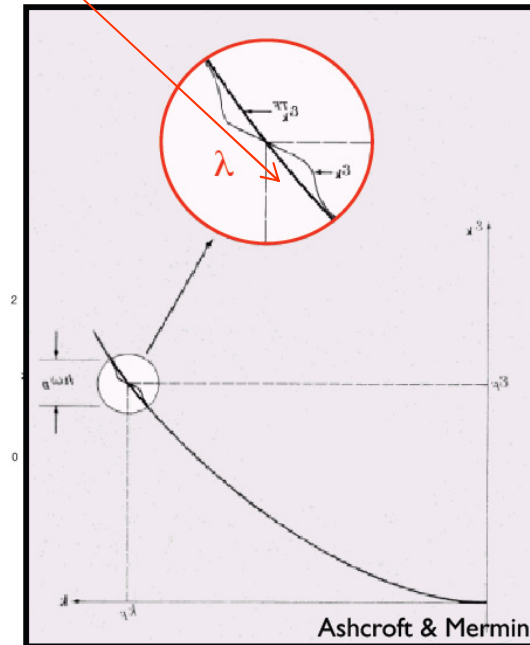
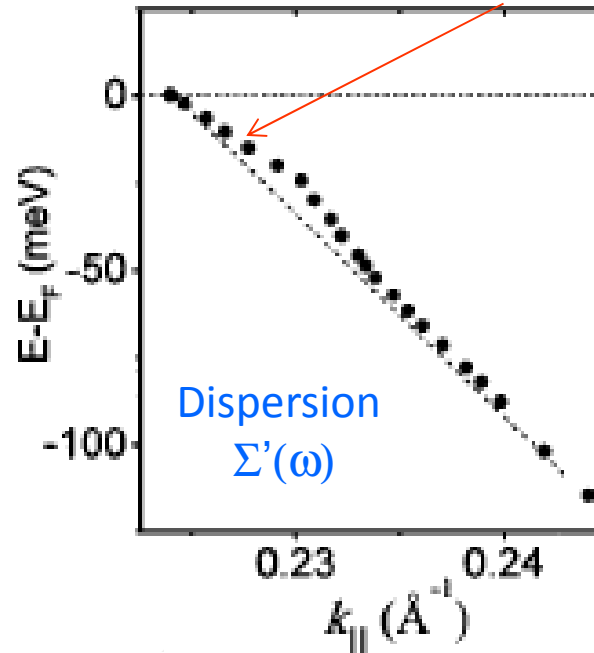
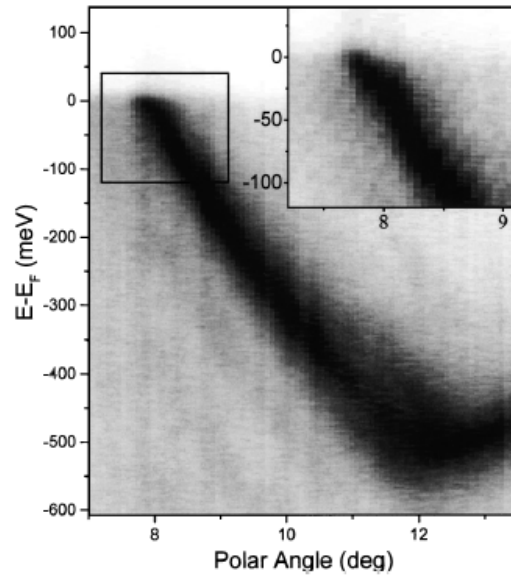


$\omega < \omega_D$: Renormalisation de la dispersion, les électrons apparaissent « plus lourds » :

$$m^* = m / (1 + \lambda)$$

$\omega > \omega_D$: Excitation possible de phonons => élargissement des spectres de l'ordre de $\lambda\omega_D$.

Etat de surface de Mo(110) (T. Valla et al., PRL 1999)

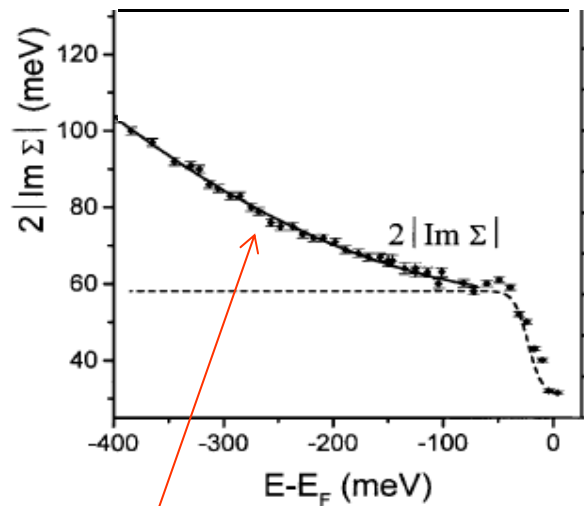


=> Même type de comportement attendu pour le couplage avec tout mode de bosons (magnons, etc.)

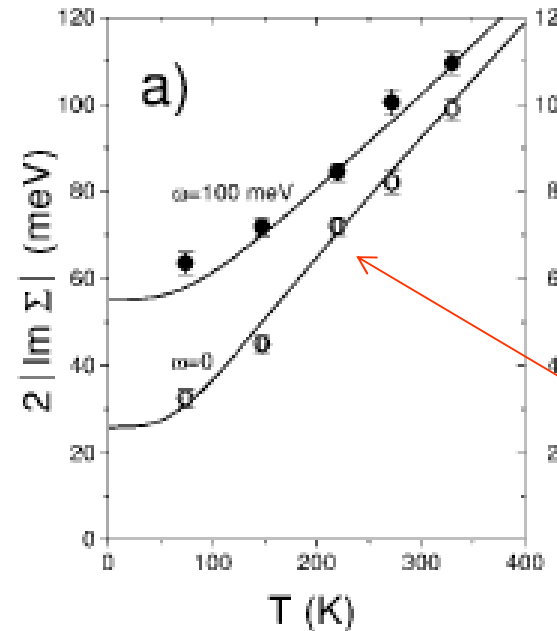
Test de comportements liquide de Fermi

Dans un liquide de Fermi, on s'attend à : $\frac{1}{\tau} \propto A(\omega^2 + T^2)$

Mo(110) surface state (T. Valla et al., PRL 1999)



Variation en ω^2



Variation en T^2

NB : on ne peut pas faire ce genre d'études dans les liquides de Fermi les plus standards, qui sont tridimensionnels.

Finalemment

Avantages :

- Résolution dans l'espace réciproque
- Sensibilité aux interactions

Inconvénients :

- Sensibilité à la surface
- Plutôt pour des matériaux 2D et métalliques
- Impossible en présence de champ magnétique ou sous pression
- Difficile d'atteindre les très basses températures ($T < 5K$)