



HAL
open science

Etude de la répartition du poids spectral en ARPES avec le logiciel chinook

Cynthia Léna Ndjimi, Daniel Malterre, Geoffroy Kremer, Bertrand Kierren,
Yannick Fagot-Revurat

► **To cite this version:**

Cynthia Léna Ndjimi, Daniel Malterre, Geoffroy Kremer, Bertrand Kierren, Yannick Fagot-Revurat. Etude de la répartition du poids spectral en ARPES avec le logiciel chinook. Journée surfaces Interfaces, Jan 2025, Paris, Orsay, France. <hal-05057508>

HAL Id: hal-05057508

<https://hal.science/hal-05057508v1>

Submitted on 6 May 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

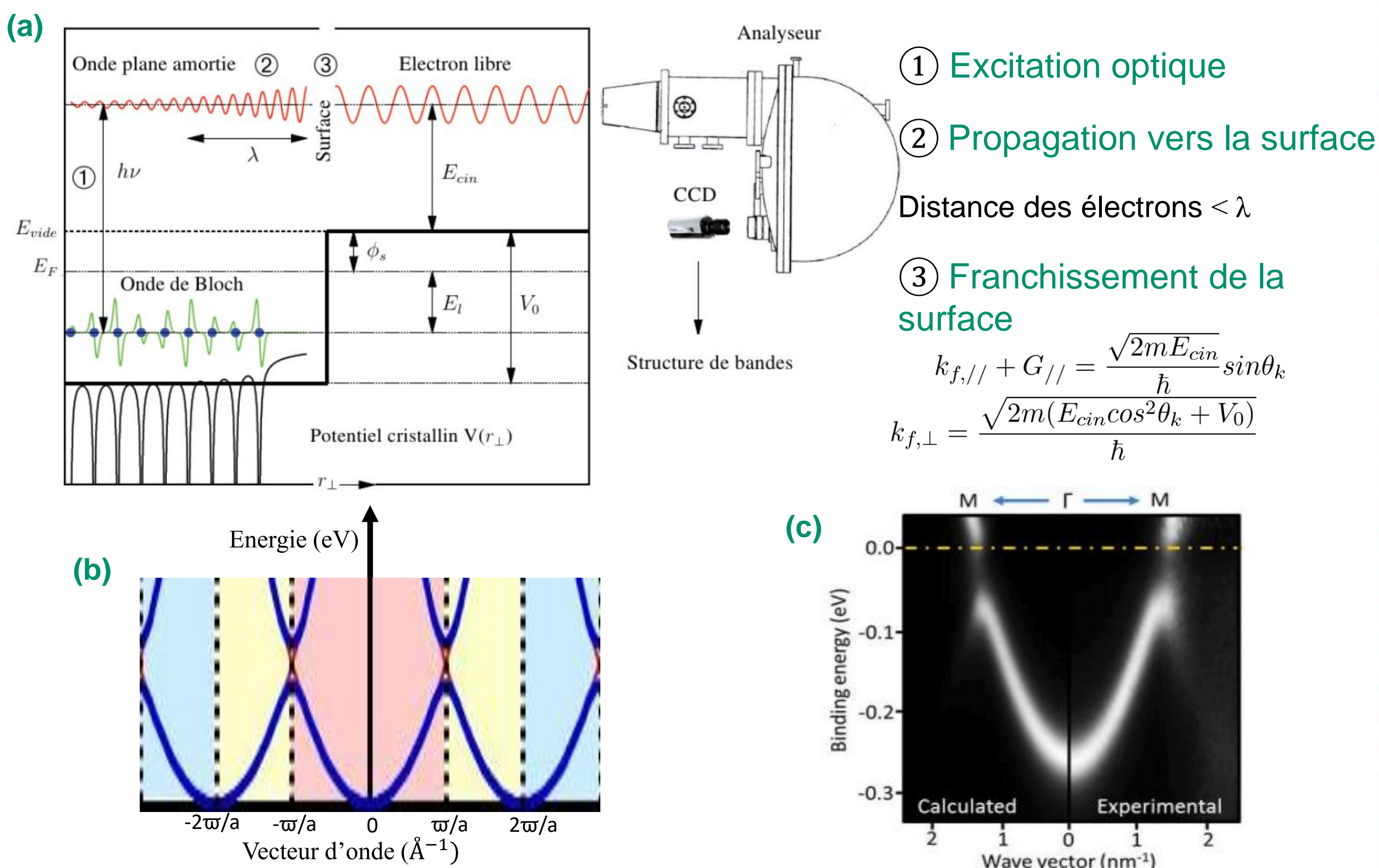
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

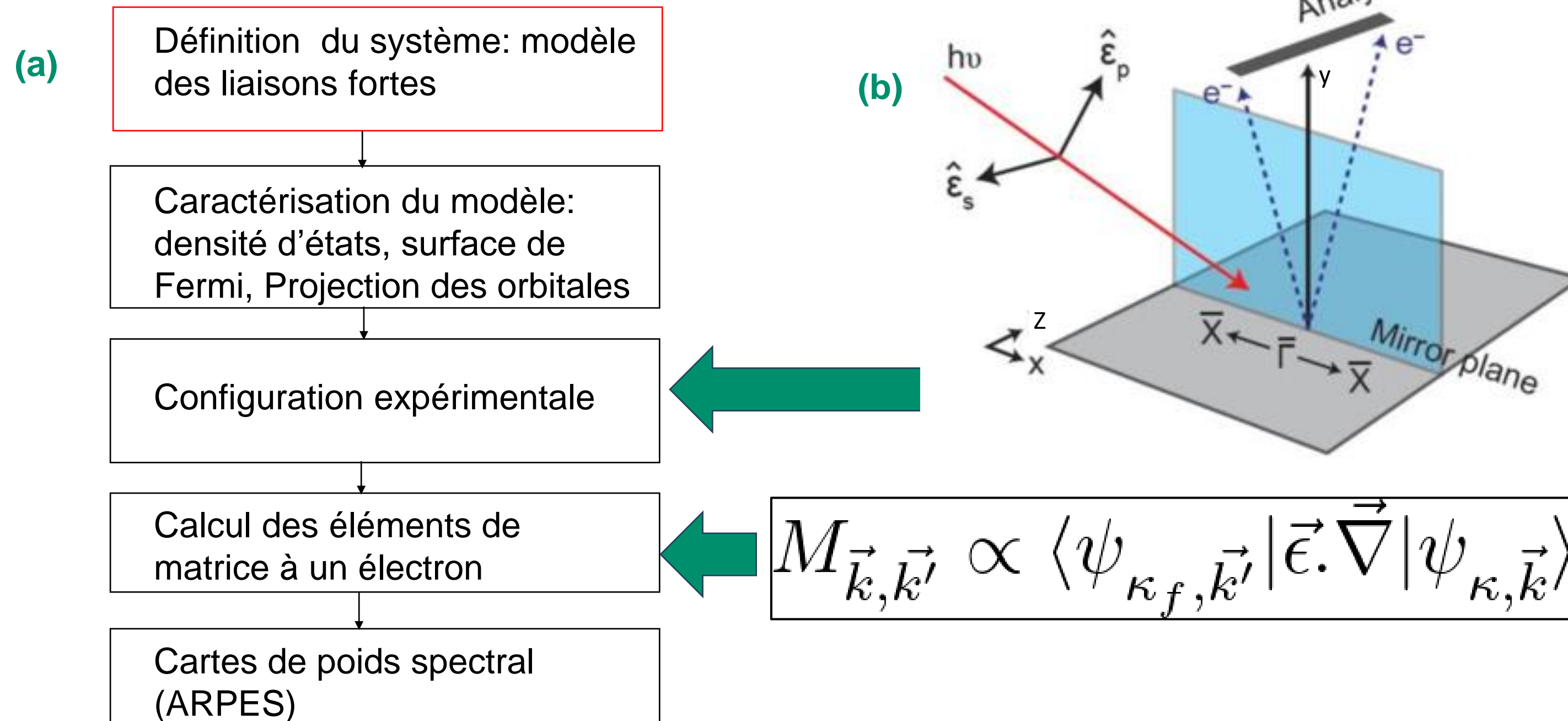
La photoémission résolue en angle (ARPES) est une technique spectroscopique clé dans l'étude des propriétés électroniques des matériaux car elle donne accès à leur structure de bande (relations de dispersions $E(k)$) permettant ainsi de dire d'un matériau s'il présente des propriétés métalliques, semi-conductrices ou topologiques. Théoriquement, il est également possible d'avoir accès à ces structures de bandes grâce à des méthodes d'approximation à un électron telles que la **méthode des liaisons fortes**. Contrairement à l'énergie $E(k)$ qui est périodique dans l'espace réciproque, il n'en est pas de même pour le poids spectral en ARPES car il dépend des **éléments de matrices à un électron**. Ici nous proposons d'étudier la répartition de ce poids spectral en ARPES en utilisant le **logiciel chinook** tout d'abord sur un modèle académique (réseau carré avec deux atomes par maille) et ensuite sur un matériau bidimensionnel réel (le graphène). Chinook montre l'influence du choix de polarisation des photons et de la géométrie expérimentale sur les éléments de matrice à un électron et par conséquent sur la répartition du poids spectral en ARPES.

Description théorique de l'ARPES



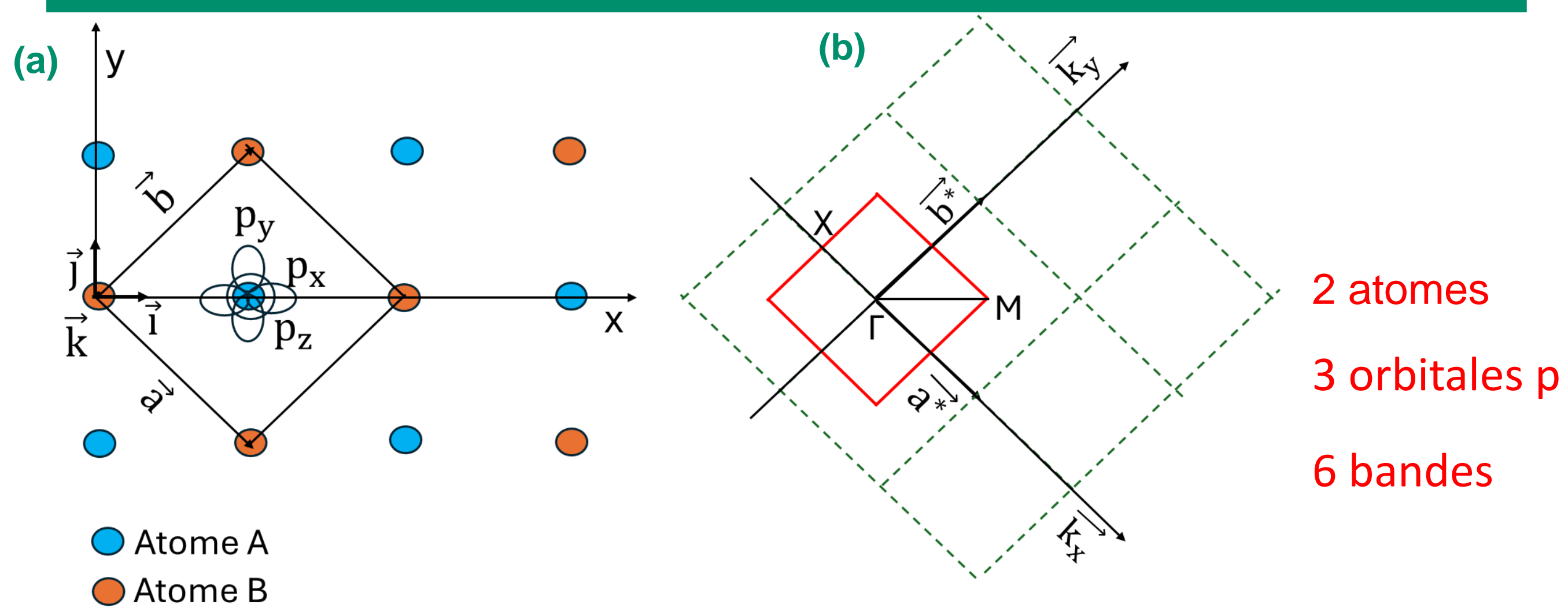
(a) Modèle à 3 étapes de la photoémission résolue en angle [1], (b) périodicité de l'énergie $E(k)$ dans l'espace réciproque et (c) non périodicité du poids spectral sur un état de Shockley [2]

Logiciel chinook



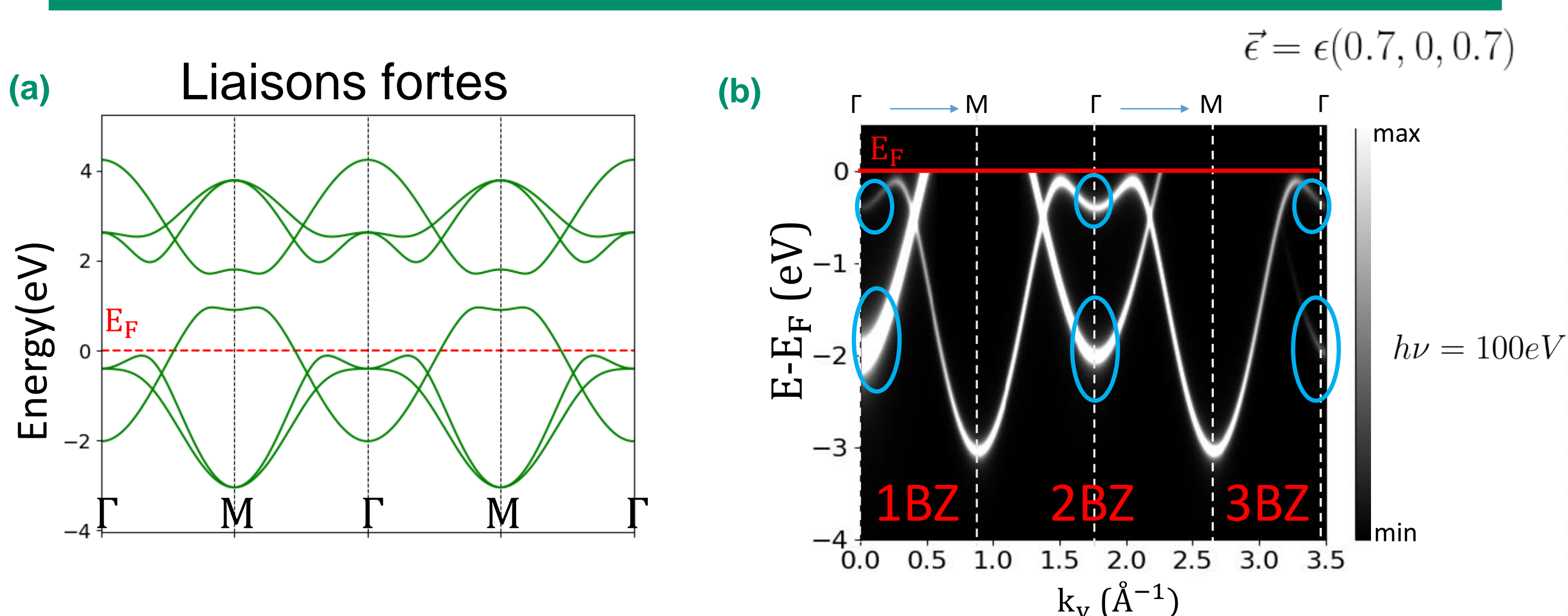
(a) Organigramme du logiciel chinook [3], (b) géométrie expérimentale utilisée par chinook

Illustration du modèle académique: le réseau carré



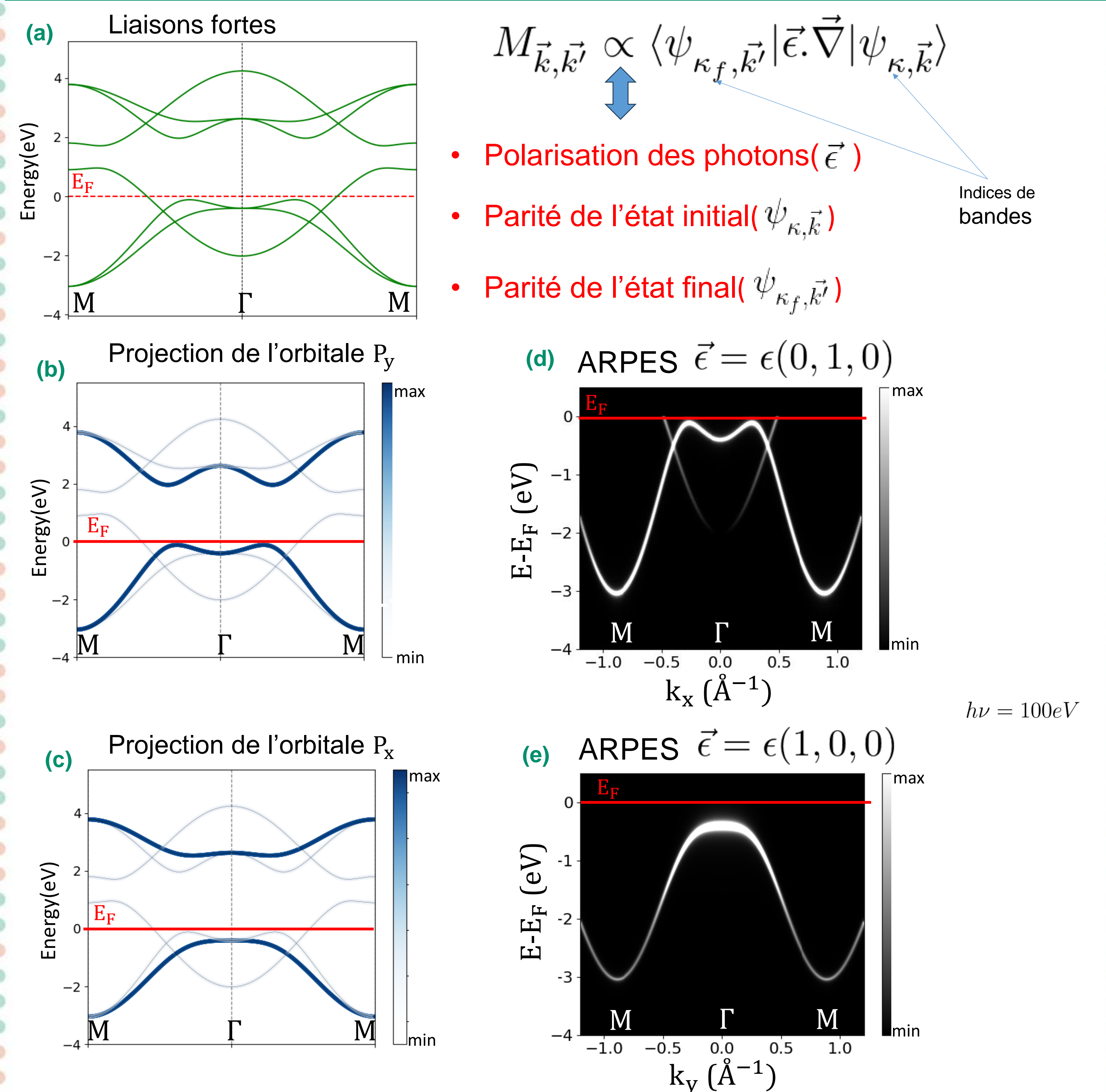
(a) Réseau direct et (b) réseau réciproque avec la première zone de Brillouin en rouge.

Structure de bandes et carte ARPES du réseau carré



Le poids spectral n'est pas périodique autour du point Γ dans les différentes zones de Brillouin à cause des effets d'éléments de matrices à un électron. Extinction d'une bande autour du point M

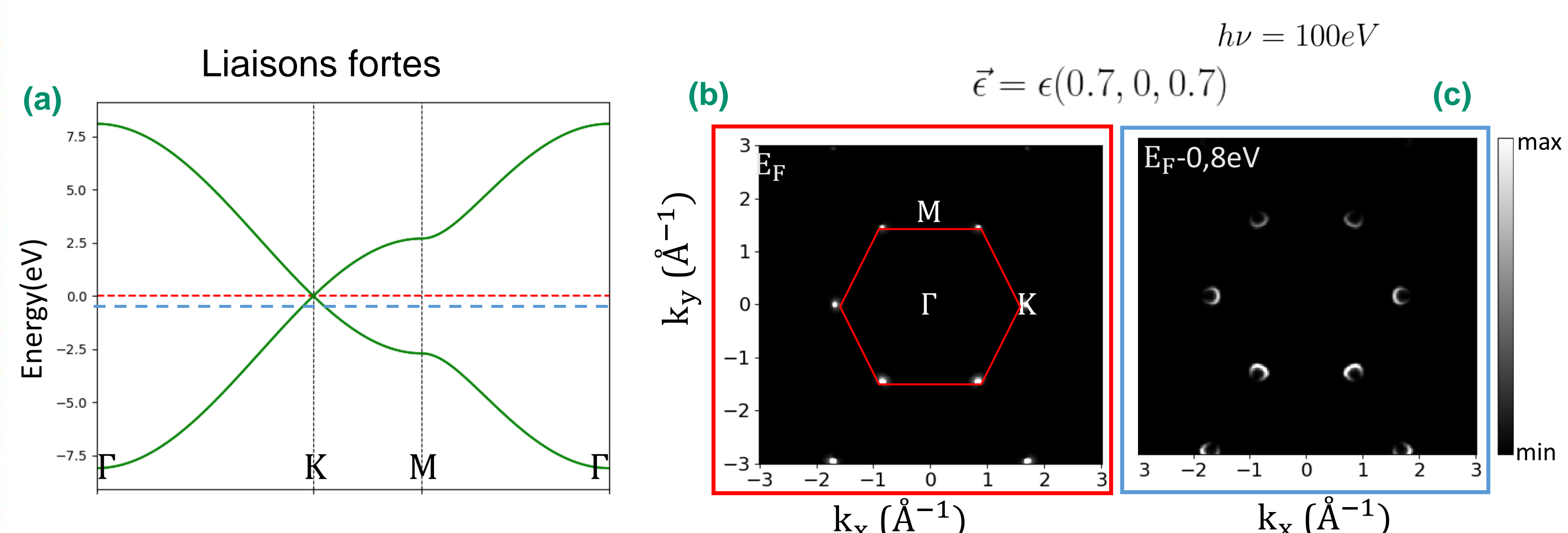
Influence de la géométrie expérimentale et de la polarisation des photons sur la nature orbitale des bandes sondées en ARPES



(b) et (c) projection de l'orbitale p_y et p_x respectivement sur la structure de bandes. (d) et (e) carte d'intensité ARPES obtenue avec une polarisation $(0,1,0)$ et $(1,0,0)$ respectivement

Les éléments de matrice à un électron dépendent fortement de la **polarisation des photons** et de la **géométrie expérimentale** conduisant ainsi à l'extinction de certaines bandes en ARPES. La parité de l'état initial et final est donnée par rapport au plan miroir du cristal (figure (b) de la section logiciel chinook)

Structure de bandes et carte ARPES d'un matériau 2 D: le graphène



(b),(c) coupes isoénergétiques au niveau de Fermi et à $E_F - 0.8$ eV avec une polarisation $(0,7,0,0,7)$ et une énergie de photons de 100eV. La première zone de Brillouin est en rouge.

Mise en évidence des points de Dirac au niveau de Fermi et en dessous du niveau de Fermi. Présence du poids spectral uniquement dans la première zone de Brillouin.

Conclusion

De la comparaison entre les structures de bandes et les cartes de simulation d'intensité ARPES, nous pouvons conclure que le poids spectral est non périodique. Cette non périodicité provient des éléments de matrices à un électron qui dépendent de la géométrie expérimentale, de la polarisation des photons et de la parité des états sondés. Le logiciel chinook nous permet de comprendre l'influence de ces éléments de matrices à un électron sur les spectres ARPES et nous apporte donc une meilleure compréhension des propriétés électroniques en comparaison avec l'expérience.

Références

- [1] S.K Moser, thèse de doctorat, 2014
- [2] G,Vasseur, Thèse de doctorat, 2014
- [3] P,D Ryan et al, npj Quantum Materials,4(1):54,2019