

Spinpolarisierte Metastabilen-Deexcitation an ferromagnetischen Oberflächen: Messung von Spinasymmetrien

Dissertation zur Erlangung des
Doktorgrades (Dr. rer. nat.) an der
Fakultät für Physik
der
Universität Bielefeld

vorgelegt von

Peer Rappolt

aus Bielefeld

im Dezember 1999

1. Gutachter: Prof. Dr. Hans Steidl

2. Gutachter: Prof. Dr. Günter Baum

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Physikalische Grundlagen	5
2.1	Oberflächenmagnetismus und Adsorbate	5
2.1.1	Oberflächenmagnetismus	5
2.1.2	Adsorbate auf ferromagnetischen Oberflächen	7
2.2	Spektroskopische Methoden	8
2.2.1	Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie	8
2.2.2	Spinpolarisierte Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie	9
2.2.2.1	Augerdeexcitation	11
2.2.2.2	Resonanzionisation und Augerneutralisation	13
2.2.3	Auswertung von SPMD-Spektren	14
3	Aufbau der Apparatur und experimentelle Methoden	17
3.1	Der polarisierte Heliumstrahl	20
3.1.1	Die Gasentladung	20
3.1.2	Der Sechspolmagnet	21
3.1.3	Der Spinflipper und die magnetischen Führungsfelder	23
3.1.4	Die Polarisationsanalyse	25
3.2	Die UV-Gasentladungslampe	27
3.3	Der Manipulator und die neue Kristallhalterung	27
3.4	Präparation der ferromagnetischen Schichten auf W(110)	30
3.4.1	Der W(110)-Kristall als Substrat	30
3.4.2	Das Aufdampfen von epitaktischen Schichten	30
3.4.3	Das Magnetisieren der Schichten	33
3.4.4	Die Bedeckung mit Adsorbaten	34
3.5	Der energieaufgelöste Elektronennachweis	35
3.6	Die experimentelle Bestimmung der Asymmetrie	38
4	SPMDS-Messungen und Diskussion der Ergebnisse	41
4.1	Messungen am unbedeckten W(110)-Kristall	41
4.2	Messungen an Fe(110)-, Co(0001)- und Ni(111)-Schichten	44
4.2.1	Eisen	44
4.2.1.1	SPMDS-Ergebnisse und Vergleich mit UPS	44
4.2.1.2	Vergleich mit theoretischen Berechnungen und Diskussion	46
4.2.1.3	Einfluß der Schichtqualität auf die experimentellen Ergebnisse	48
4.2.1.4	Entfaltung der MD-Spektren und Vergleich mit UPS	49
4.2.2	Kobalt	52
4.2.3	Nickel	55

4.3	Messungen an sauerstoffbedeckten Fe(110)- und Co(0001)-Schichten	57
4.3.1	Eisen	57
4.3.1.1	RI+AN an sauerstoffbedecktem Eisen	57
4.3.1.2	Vergleich mit theoretischen Berechnungen und Diskussion	63
4.3.1.3	Einfluß der Schichtqualität	63
4.3.2	Kobalt	65
4.4	Kohlenmonoxidbedeckte Fe(110)- und Co(0001)-Schichten	70
4.4.1	Adsorption von Kohlenmonoxid	70
4.4.2	SPMDS-Messungen an CO/Fe/W(110) - Ergebnisse und Diskussion	72
4.4.3	SPMDS-Messungen an CO/Co/W(110) - Ergebnisse und Diskussion	76
5	Zusammenfassung und Ausblick	79
	Anhang	81
A.1	Metastabiles Helium	81
A.2	Das Aufwachsen von epitaktischen Schichten auf W(110)	83
A.3	Definition der mit der FLAPW-Methode berechneten Größen	86
A.4	Das Auswerteprogramm RMS	87
	Glossar	89
	Abbildungsverzeichnis	90
	Tabellenverzeichnis	91
	Literaturverzeichnis	92

1 Einleitung

Die Schwerpunkte in der Erforschung des Magnetismus liegen heutzutage nicht mehr in der makroskopischen Beschreibung, sondern in der Untersuchung von magnetischen Strukturen, deren Ausdehnung im μm - bis nm-Bereich liegt. Die technologische Anwendung solcher Nanostrukturen ist z. B. durch die Entwicklung immer leistungsfähigerer Datenspeichermedien oder magnetischer Sensoren gegeben. Dabei kommt den Grenz- und Oberflächeneffekten, die sich an aus dünnen magnetischen Schichten bestehenden Systemen untersuchen lassen, eine steigende Bedeutung zu.

Fortschritte in der Erforschung der Grundlagen des Magnetismus werden im Bereich der Oberflächenphysik erzielt, indem die elektronische Struktur bzw. die Verteilung der Elektronenspins in der Oberfläche bestimmt wird. Dazu stehen verschiedene Verfahren zur Verfügung, mit denen es möglich ist, die Elektronen in der Oberfläche anhand ihrer Spinrichtung zu unterscheiden. Am verbreitetsten ist die spinpolarisierte Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie (SPUPS), bei der durch Bestrahlung der Probe mit ultraviolettem Licht Elektronen aus besetzten Zuständen des Leitungsbandes ausgelöst werden. Durch die anschließende Analyse der Spinrichtung der Elektronen erhält man ein Abbild der spinaufgelösten lokalen Zustandsdichten.

Die spinpolarisierte inverse Photoemissionsspektroskopie (SPIPE) basiert darauf, daß durch den Beschuß mit polarisierten Elektronen Photonen aus der Oberfläche emittiert werden. Aus der Abhängigkeit der nachgewiesenen Photonen von der Spinrichtung der einfallenden Elektronen ergeben sich spinaufgelöste Zustandsdichten von unbesetzten Zuständen oberhalb der Fermienergie.

Da bei beiden Verfahren die verwendeten Teilchen mehrere Atomlagen tief in das Target eindringen, stellen die so erzielten Ergebnisse Überlagerungen der Zustandsdichten aller beteiligten Atomlagen dar. Eine größere Oberflächensensitivität weisen deshalb Verfahren auf, bei denen es zu keinem Eindringen der Projektil in die zu untersuchende Schicht kommt.

Schon seit langer Zeit ist bekannt, daß eine Elektronenemission stattfindet, wenn sich metastabil angeregte Atome einer Oberfläche annähern [Olip29]. Aber auch die Neutralisation von Ionen vor Festkörpern führt zur Aussendung von Elektronen. Bei beiden Prozessen findet die Wechselwirkung mit der Oberfläche statt, bevor es zu einer Berührung zwischen Projektil und Target kommt; also kann speziell die Übergangsregion zwischen Schicht und Vakuum untersucht werden. So ist mit der von Hagstrum entwickelten Ionen-Neutralisationsspektroskopie (INS) die spinaufgelöste Untersuchung der besetzten Zustände der obersten Atomlage von Festkörpern möglich [Hags53, Hags78].

Speziell die theoretische Beschreibung der bei der INS ablaufenden Prozesse [Hags54], die den Deexcitationsprozessen von metastabilen Atomen sehr ähnlich sind, hat stark zum Verständnis der von Ertl et al. perfektionierten Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie (MDS) beigetragen [Conr80, Sess84, Ertl85, Wora85]. Durch den Einsatz eines spinpolarisierten metastabilen Atomstrahls wurde 1984

an der Rice University, Texas, erstmals nachgewiesen, daß die spinpolarisierte Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie (SPMDS) eine Untersuchungsmethode im Bereich des Oberflächenmagnetismus darstellt, die sich durch eine extrem hohe Oberflächenempfindlichkeit auszeichnet [Onel84, Hart89, Hamm92, Ridd81]. Diese Methode wird auch in dem in dieser Arbeit beschriebenen Experiment eingesetzt. Mit den möglichen Deexcitationsprozessen, auf denen die SPMDS basiert, befaßt sich Kapitel 2.2.2. In Kapitel 2.2.3 wird dann detailliert erläutert, wie mit Hilfe dieses Verfahrens Aussagen über die spinaufgelösten Zustandsdichten im Bereich der Fermienergie gewonnen werden können. Der verwendete experimentelle Aufbau wird in Kapitel 3 beschrieben.

In Bielefeld war das Experiment in den SFB 216 eingebettet, wo im Teilprojekt M1 der hochpolarisierte, intensitätsstarke, metastabile Heliumstrahl [Baum88] zuvor in spinpolarisierten Ionisationsexperimenten eingesetzt wurde [Baum89, Tabo88, Eger91].

Das Vorgehen im Rahmen der vorliegenden Arbeit war folgendermaßen gegliedert:

Zuerst galt es, begonnene Meßreihen an sauberen sowie sauerstoffbedeckten Eisen- und Kobaltschichten fortzusetzen [Getz94b]. Neben der Erhöhung der Energieauflösung der emittierten Elektronen wurde speziell für Eisen der Einfluß der Schichtqualität auf die Magnetisierbarkeit der dünnen Filme untersucht (Kapitel 4.2.1). Dazu wird durch ein an das Aufdampfen anschließendes Tempern eine Neuordnung der Eisenschicht erreicht. Die Details der Probenpräparation werden in den Kapiteln 3.4 und A.2 beschrieben. Die Adsorption von Sauerstoff auf getemperte Eisenschichten wird dann in Kapitel 4.3.1 behandelt.

Anschließend wurden erstmalig spinpolarisierte MDS-Messungen an Systemen durchgeführt, bei denen Elektronen durch eine Augerdeexcitation emittiert werden (Kapitel 4.4). Der Wechsel des dominierenden Deexcitationsprozesses von der Resonanzionisation mit nachfolgender Augerneutralisation zur Augerdeexcitation wird dadurch erreicht, daß durch die Chemisorption von Kohlenmonoxid auf die Eisen- und Kobaltschichten eine Resonanzionisation verhindert wird.

Nach Abschluß dieser Messungen wurde der Manipulator, der das Bewegen der Probe in der Experimentierkammer erlaubt, durch einen neuen, leistungsfähigeren ersetzt, der nun das Heizen und Kühlen des Wolframkristalls sowohl während der Schichtpräparation als auch während der Messungen ermöglicht (Kapitel 3.3). So können in Zukunft temperaturabhängige Untersuchungen, z. B. die Bestimmung der Curietemperatur von dünnen Schichten, durchgeführt werden. Die Funktionstüchtigkeit der ersetzten Komponenten, speziell die der neuentwickelten Kristallhalterung, wurde in ersten Testmessungen nachgewiesen.

2 Physikalische Grundlagen

2.1 Oberflächenmagnetismus und Adsorbate

2.1.1 Oberflächenmagnetismus

An Grenz- bzw. Oberflächen kommt es zu einer Brechung der im Inneren eines Festkörpers vorhandenen Translationssymmetrie. Da Ferromagnetismus aber auf einer kollektiven Ordnung von magnetischen Momenten basiert, die unter anderem von der Anzahl der Nachbaratome abhängt, ist zu erwarten, daß sich die magnetischen Eigenschaften der Oberfläche von denen des Festkörpers unterscheiden. Da es experimentell schwierig ist, den Beitrag zu bestimmen, den die Oberfläche zum Gesamtmagnetismus des Festkörpers leistet, werden die meisten Untersuchungen zum Oberflächenmagnetismus an dünnen Schichten durchgeführt. In diesen oft nur wenige Atomlagen dicken Filmen trägt dann die Oberfläche relativ stark zum Gesamtmagnetismus bei.

So sind für einige magnetische Eigenschaften experimentell Unterschiede zwischen Oberfläche und Festkörper gefunden worden. Im allgemeinen kommt es bei ferromagnetischen Materialien zu einer von der Schichtdicke abhängigen Absenkung der Curietemperatur. So wurde z. B. für einen 1.5 Monolagen dicken Eisenfilm, der auf W(110) aufgebracht wurde, eine Curietemperatur von $T_C = 323$ K gemessen [Mulh91], die deutlich unter dem Wert von $T_C = 1043$ K für den Kristall liegt [Nolt86]. Des weiteren ist in einer ferromagnetischen Schicht das magnetische Moment pro Atom im Vergleich zum Festkörper erhöht.

Ein anderer Unterschied kann in der Richtung der leichtesten Magnetisierbarkeit liegen. Bei der Magnetisierung eines realen Kristalls ist die Arbeit, die dazu verrichtet werden muß, davon abhängig, entlang welcher Kristallachse die Magnetisierung erzeugt werden soll (Kristallanisotropie, [Knel62]). Je nach Arbeitsaufwand unterscheidet man zwischen schweren und leichten Richtungen. Für einen Eisenkristall z. B. ist die [001]-Richtung die Richtung der leichtesten Magnetisierbarkeit [Hond26]. Durch das Fehlen von magnetischen Nachbaratomen an der Oberfläche (Oberflächenanisotropie) weicht die leichte Magnetisierungsrichtung für Eisenfilme auf W(110) unterhalb einer Schichtdicke von 65 \AA davon ab und liegt entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung [Grad86, Kurz86, Elme91].

Die theoretische Behandlung des Oberflächenmagnetismus setzt ein Modell zur Annäherung eines dünnen Filmes voraus. Als geeignet hat sich die in Abbildung 2.1 skizzierte slab-Geometrie erwiesen. Dabei wird aus einer Einheitszelle eine unendlich ausgedehnte Schicht konstruiert, die typischerweise 5 bis 13 Atomlagen dick ist. Bei der Verwendung dieser Geometrie ist es möglich, mit dem gleichen Ansatz Volumeneigenschaften, Oberflächeneffekte und die Auswirkung von Adsorbaten zu beschreiben.

Eine Methode zur Berechnung von spinaufgelösten Zustandsdichten, die auf der Verwendung der slab-Geometrie basiert, ist die full potential linearized augmented plane wave (FLAPW) Methode [Ande75, Wimm81]. Dabei wird das zu berechnende System in drei verschiedene Regionen unterteilt, für die jeweils

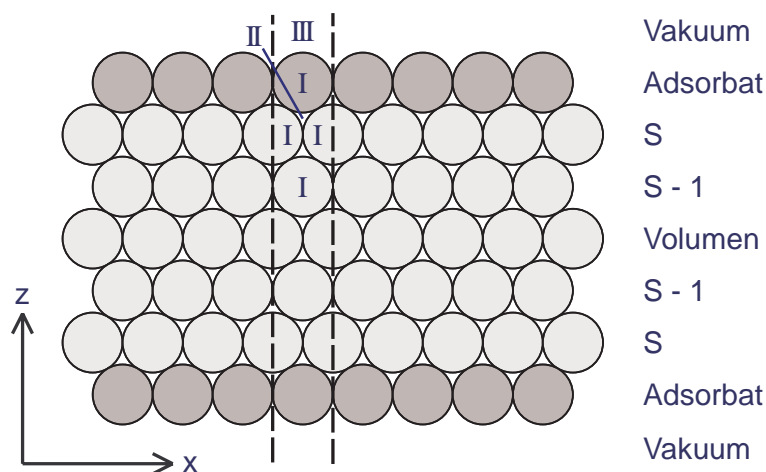


Abbildung 2.1:

Bei der FLAPW-Methode wird ein dünner Film durch die **slab-Geometrie** angenähert. Die markierte Einheitszelle wiederholt sich dabei bis $x = \pm \infty$. Die Bedeutung der Bereiche I, II und III wird im Text näher erläutert. (nach [Kra79])

unterschiedliche mathematische Funktionen zur Beschreibung angesetzt werden [Kra79]. Als Basisfunktion für die in Abbildung 2.1 als II bezeichneten Zwischenräume wird ein Produkt aus zwei- und eindimensionalen, ebenen Wellen angenommen. Diese wird mit Funktionen überlagert, die die Kugeln um die Atomkerne (I) und das Vakuum auf beiden Seiten der Schicht (III) beschreiben. Für die Kugeln wird dabei ein Produkt aus Kugelflächenfunktionen und einer Radialfunktion und für das Vakuum ein Produkt aus einer zweidimensionalen, ebenen Welle und einer z -abhängigen Funktion angesetzt. Effektive, lokale Potentiale werden mit Hilfe der local density Näherung [Koh65] aus der Ladungsverteilung der Schicht bestimmt, wobei keinerlei Annahmen über die Potentialverläufe gemacht werden müssen. Als Ergebnis liefert die FLAPW-Methode spinaufgelöste, lokale Zustandsdichten für jede Lage der Schicht (s. Anhang A.3). Des weiteren ist es möglich, diese Zustandsdichten energieaufgelöst anzugeben, um so einen Vergleich mit experimentellen Methoden, die Zustandsdichten im Bereich der Fermienergie abtasten (z. B. SPSTM oder SPMDs, s. Kapitel 2.2.2), zu ermöglichen [Wu92]. Eine ausführliche Beschreibung, wie mit Hilfe der FLAPW-Methode die Grundgleichungen der Dichtefunktionaltheorie gelöst werden können, befindet sich in [Weim95].

2.1.2 Adsorbate auf ferromagnetischen Oberflächen

Durch ein kontrolliertes Angebot von Fremdteilchen lassen sich viele Eigenschaften einer Oberfläche gezielt beeinflussen. Je nach Stärke der Wechselwirkung zwischen Adsorbat- und Substratteilchen treten verschiedenartige Prozesse auf. Bei Wechselwirkungsenergien unter 0.5 eV pro Teilchen, hervorgerufen durch Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Adsorbatteilchen und den Substratatomten, findet **Physisorption** statt. Kommt es zu einer stärkeren, chemischen Bindung, wird die Wechselwirkung **Chemisorption** genannt. Eine detaillierte Beschreibung der möglichen Wechselwirkungen von Teilchen mit Oberflächen wird bei [Henz91] gegeben.

Bei der Physisorption bleiben aufgrund der schwachen Wechselwirkung die geometrische und elektronische Struktur von Adsorbat und Oberfläche weitgehend erhalten. Physisorption tritt z. B. bei der Adsorption von Edelgasen auf metallischen Oberflächen bei tiefen Temperaturen auf [Getz93a].

Die Chemisorption dagegen kann eine drastische Änderung der elektronischen Verhältnisse bewirken. Eine Möglichkeit dazu ist ein Ladungstransfer vom ferromagnetischen Substrat zum Adsorbat, der eine Veränderung des magnetischen Moments des Substrats zur Folge hat. Ebenso können unmagnetische Teilchen nach Adsorption auf einer magnetischen Unterlage ein magnetisches Moment tragen. Außerdem kann die Hybridisierung von Adsorbatzuständen und Substratbändern zu adsorbatinduzierten Bändern führen, die eine Austauschspaltung aufweisen. Die Existenz dieser magnetischen Kopplung zwischen Chemisorbaten und ferromagnetischen Oberflächen ist in zahlreichen experimentellen und theoretischen Untersuchungen bestätigt worden. Eine Zusammenstellung ausgewählter Ergebnisse befindet sich in [Getz93a].

Bei sehr hohen Wechselwirkungsenergien kann es zu einer **Verbindungsbildung** zwischen den adsorbierten Teilchen und dem Substrat kommen. So entsteht nicht nur an der Oberfläche, sondern auch im tiefer liegenden Volumen ein neuer Stoff mit grundlegend anderen magnetischen Eigenschaften. Ein Beispiel für diesen Umwandlungsvorgang ist die Oxidbildung an metallischen Oberflächen bei hohem Sauerstoffangebot. Für die Adsorption von O₂ auf Fe(110) wird ab einem Angebot von 10 L die Bildung einer FeO(111)-Schicht beobachtet [Masu88]. Die bei chemisorbiertem Sauerstoff mit SPUPS gemessene Austauschspaltung der dem O 2p-Zustand zugeordneten Struktur verschwindet bei zunehmender Oxidation [Getz93a].

Eine weiterer möglicher Adsorptionsprozeß ist die **Segregation**, bei der Teilchen in das Substratvolumen eindringen und dort in das Gitter eingebettet werden. Die so erzeugte Gitterverzerrung hat ebenfalls eine Veränderung der elektronischen und magnetischen Strukturen zur Folge.

2.2 Spektroskopische Methoden

Zur direkten Untersuchung der elektronischen Struktur und den damit verbundenen Zustandsdichten von Festkörpern haben sich eine Vielzahl von spektroskopischen Methoden etabliert. Die auf dem Photoeffekt beruhende Photoemissionsspektroskopie hat sich dabei wohl zur am häufigsten eingesetzten Standardmethode entwickelt, wobei die Verwendung von Photonenenergien zwischen 10 eV und 100 eV (Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie, UPS) die direkte Untersuchung der Valenzbandstruktur von Festkörpern erlaubt. Des Weiteren werden Elektronen und Ionen, aber auch neutrale Atome als primäre Teilchen eingesetzt. So werden bei der Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie (MDS) mit Hilfe von langlebig angeregten Edelgasatomen Elektronen aus der Probe ausgelöst.

Aussagen über magnetische Eigenschaften der untersuchten Proben sind aber nur mit Methoden möglich, die Elektronen als Projektile oder emittierte Teilchen verwenden, wenn der Spin dieser Elektronen bestimmt werden kann. Beide oben genannten Verfahren erfüllen diese Voraussetzung. Bei der spinpolarisierten UPS (SPUPS) wird der Spin der ausgelösten Elektronen analysiert. Bei der SPMDS hingegen sind die Hüllenelektronen der einfallenden Atome spinpolarisiert.

Die jeweilige Oberflächenempfindlichkeit einer Methode wird durch die Eindringtiefen der verwendeten Projektile bestimmt. Da geladene Teilchen und Photonen, je nach Einfallenergie, mehrere Atomlagen tief in den Festkörper eindringen, liefern die Methoden, die diese Projektile verwenden, Überlagerungen von Informationen aus allen beteiligten Atomlagen. Den größten Anteil an Information über die Oberfläche selbst erhält man, wenn die einfallenden Teilchen ausschließlich mit der obersten Atomlage wechselwirken. Da bei der SPMDS neutrale Atome mit thermischer Energie verwendet werden, die nicht in tiefere Lagen eindringen, liegen dort Verhältnisse für eine extrem oberflächensensitive, spinselektive Spektroskopie vor.

Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen Bandstruktur und Elektronenspektren und weil aus dem Vergleich von UPS und SPMDS ergänzende Informationen über die in Kapitel 2.2.2.1 und Kapitel 2.2.2.2 vorgestellten Deexcitationprozesse gewonnen werden können, beschäftigt sich Kapitel 2.2.1 mit der Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie.

In Kapitel 2.2.3 wird dann erläutert, wie bei der spinpolarisierten Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie aus den aufgenommenen Elektronenspektren Informationen über die Spindichten der Probe gewonnen werden können.

2.2.1 Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie (UPS)

Bei der UPS wird die Energie $h\nu$ eines einfallenden Photons an ein Festkörperelektron in einem besetzten Anfangszustand übertragen, das dadurch in einen unbesetzten Zustand, der außerhalb der Probe im Vakuum liegt, angehoben wird

(s. Abbildung 2.2). Dieses Elektron hat dann, abhängig von seiner Bindungsenergie E_B und der Austrittsarbeit Φ , eine kinetische Energie E_{kin} von:

$$E_{kin} = h\nu - E_B - \Phi . \quad (2.1)$$

Die maximale kinetische Energie erreichen dabei gerade die Elektronen, die direkt von der Fermikante E_F stammen ($E_B = 0$), so daß sich aus der Breite des Energiespektrums der emittierten Elektronen (UP-Spektrum) die Austrittsarbeit Φ bestimmen läßt:

$$\Phi = h\nu - E_{kin}^{max} . \quad (2.2)$$

Der Zusammenhang zwischen der Zustandsdichte im Festkörper und dem aufgenommenen UP-Spektrum wird in Abbildung 2.2 verdeutlicht. Die primären Photoelektronen, die aus Valenzzuständen stammen, werden von einem kontinuierlichen, zu niedrigeren Energien hin ansteigenden Untergrund überlagert. Dieser Untergrund besteht aus sekundären Photoelektronen, die auf dem Weg zur Oberfläche Energieverluste erleiden.

Die Oberflächensensitivität dieser Spektroskopiemethode wird durch die Eindringtiefe der Photonen in die Probe bestimmt. Da Elektronen in Festkörpern eine Strecke von mehreren Nanometern ohne Energieverlust zurücklegen können (mittlere freie Weglänge), enthalten UP-Spektren, bei denen die Austrittstiefe der Elektronen ca. 1 nm beträgt, neben Informationen von der obersten Atomlage auch in exponentiell abgeschwächter Form Informationen aus tieferen Lagen. Bei der Untersuchung von dünnen Schichten sind dann je nach Schichtdicke Strukturen der Schicht von Strukturen des Trägermaterials überlagert.

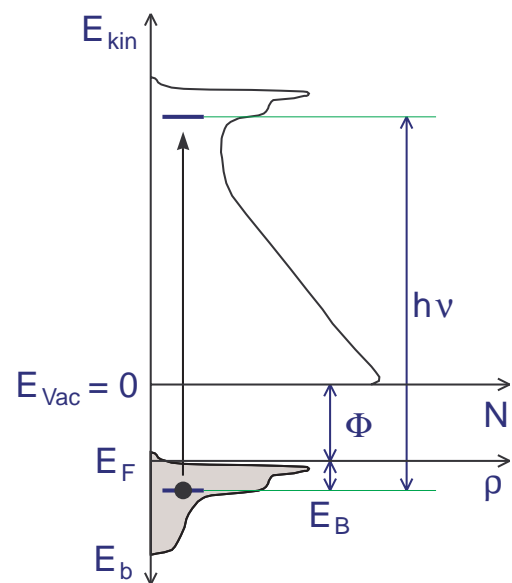


Abbildung 2.2:

Zusammenhang zwischen der Zustandsdichte ρ und der Elektronenzahlrate N bei der Ultraviolet-photoemissionsspektroskopie

2.2.2 Spinpolarisierte Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie

Nähern sich elektronisch angeregte, neutrale Edelgasatome einer Oberfläche, kommt es zur Emission von Elektronen [Olip29, Coba44]. Verantwortlich dafür sind strahlungsfreie Prozesse, die während der Annäherung, also im Vakuum vor der Oberfläche, stattfinden. Dabei wechselwirken die metastabilen Atome fast ausschließlich mit den Elektronen der äußersten Atomlage [Hein66], woraus die extreme Oberflächensensitivität dieser Art von Spektroskopie resultiert.

Zu unterscheiden sind zwei Mechanismen, nach denen die Deexcitation der $\text{He}(2^3\text{S})$ -Atome ablaufen kann, zum einen die einstufige Augerdeexcitation (AD, s. Kapitel 2.2.2.1) und zum anderen eine Resonanzionisation, der eine Augerneutralisation folgt (RI+AN, s. Kapitel 2.2.2.2).

Ist ein spinpolarisierter $\text{He}(2^3\text{S})$ -Atomstrahl vorhanden, ist bei der Untersuchung von magnetischen Proben die Rate der emittierten Elektronen bei beiden Deexcitationsprozessen von der Einstellung der Spinrichtung des $1s$ -Loches zur Magnetisierungsrichtung der Schicht abhängig, so daß mit Hilfe der spinpolarisierten Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie Aussagen über magnetische Eigenschaften gewonnen werden können.

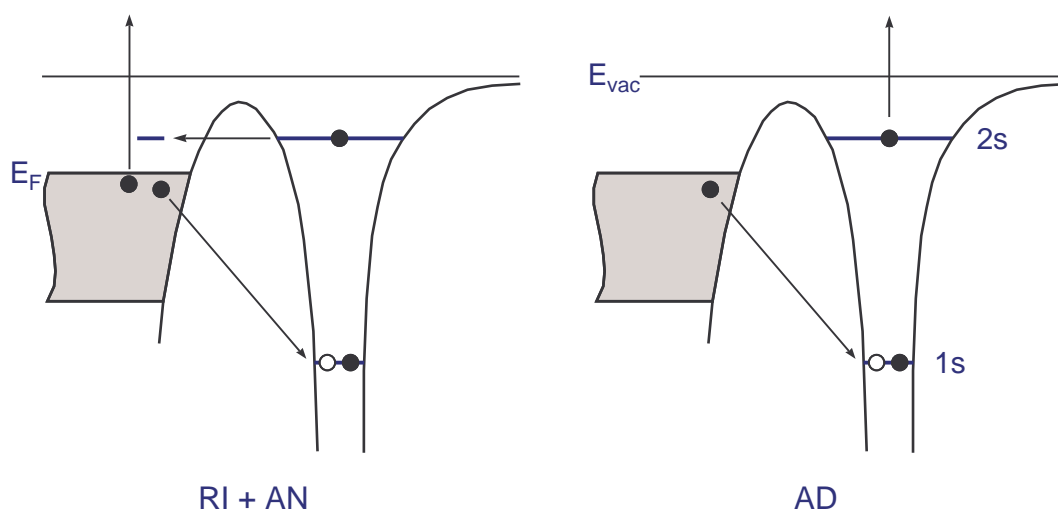


Abbildung 2.3:
Mögliche Deexcitationsprozesse

In Abbildung 2.3 sind die während der Deexcitation des spinpolarisierten Atoms ablaufenden Prozesse mit den daran beteiligten Teilchen für die beiden möglichen Mechanismen schematisch gegenübergestellt. Im Laufe der Annäherung der metastabilen $\text{He}(2^3\text{S})$ -Atome an die Oberfläche kommt es unter gewissen Voraussetzungen zu einem Tunnelprozeß, bei dem das $2s$ -Elektron das Heliumatom verläßt (RI). Das so entstandene Ion wird danach durch ein Elektron aus der Oberfläche neutralisiert (AN), wobei die dabei gewonnene Energie an ein weiteres Schichtelektron übertragen wird. Dieses wird dann aus der Schicht emittiert. Bei der Augerdeexcitation dagegen tunneln ein Schichtelektron in das $1s$ -Loch des Heliumatoms, wobei das $2s$ -Elektron das System mit der überschüssigen Energie verläßt. Die Endprodukte beider Prozesse sind ein neutrales Heliumatom im Grundzustand sowie ein freies Elektron mit der kinetischen Energie E_{kin} .

Voraussetzung dafür, daß eine Resonanzionisation stattfinden kann, ist die Existenz eines unbesetzten Zustandes vor der Oberfläche, der energetisch mit dem $2s$ -Niveau der Heliumatome entartet ist (s. Abbildung 2.3), wogegen es für eine Au-

gerdeexcitation eine solche Einschränkung nicht gibt. Für metallische Oberflächen liegt die Wahrscheinlichkeit für eine RI nahezu bei 1 [Soud86], da sie schon in einem Abstand zwischen Atom und Oberfläche von 5-10 Å stattfinden kann. Zu einem Tunnelprozeß in das 1s-Loch kommt es dagegen erst ab ca. 4.5 Å [Penn90]. Zu erklären sind diese unterschiedlichen Abstände durch die im Vergleich zum 1s-Orbital größere räumliche Ausdehnung des 2s-Orbitals. Durch dessen Überlapp mit einem unbesetzten Orbital der Oberfläche wird die Resonanzionisation eingeleitet. Augerdeexcitation ist erst dann möglich, wenn es zum Überlappen des 1s-Orbitals mit besetzten Orbitalen der Oberfläche kommt.

Auch vor metallischen Oberflächen kann aber durch verschiedene Maßnahmen, die eine Resonanzionisation verhindern, eine Augerdeexcitation herbeigeführt werden. Z. B führt die Adsorption von Alkalimetallen zu einer Absenkung der Austrittsarbeit der Oberfläche [Conr80], so daß das Fermi-niveau dann oberhalb des 2s-Niveaus liegt. Ähnlich wirkt auch die Bedeckung der Oberfläche mit einem Adsorbat, das die freien Oberflächenzustände abschirmt und selbst keine freien Zustände für eine Resonanzionisation bereitstellt. Eine komplette Unterdrückung der Resonanzionisation wurde nach Adsorption von Kohlenmonoxid auf Pd(111) beobachtet [Conr79] und theoretisch erklärt [Wang80]. Das gleiche Ergebnis wurde auch für Adsorption von CO bzw. NO auf Ni(111) gefunden [Rous81]. Im Gegensatz dazu bleibt nach Sauerstoffadsorption der RI+AN-Mechanismus erhalten [Conr80].

2.2.2.1 Augerdeexcitation (AD)

Bei diesem Prozeß wird das angeregte Elektron, das sich im 2s-Niveau befindet, aus dem System emittiert (s. Abbildungen 2.3 und 2.5). Die dazu nötige Energie erhält es aus einem Tunnelprozeß, in dem ein Elektron aus der Oberfläche das 1s-Loch des Heliumatoms auffüllt. Die kinetische Energie E_{kin} , die es im Vakuum besitzt, hängt von der Bindungsenergie E_B des tunnelnden Elektrons in der Oberfläche und von der effektiven Anregungsenergie des Heliumatoms E^* ab (s. Abbildung 2.5):

$$E_{kin} = E^* - E_B - \Phi . \quad (2.3)$$

Zu berücksichtigen ist dabei, daß E^* vom Abstand d zwischen Oberfläche und Atom abhängt. Da das Wechselwirkungspotential V_{2s} zwischen Oberfläche und angeregtem Elektron ein Minimum aufweist, ist E^* kleiner als E_∞^* für ein freies Atom (s. Abbildung 2.4, [Ertl85]).

Da bei der Augerdeexcitation im Gegensatz zur Augerneutralisation nur ein Elektron aus der

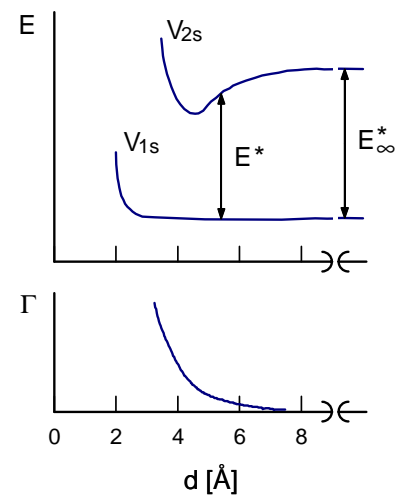


Abbildung 2.4:

Die Abstandsabhängigkeit der effektiven Anregungsenergie E^* und der Übergangsrate Γ für den AD-Prozeß. (aus [Ertl85])

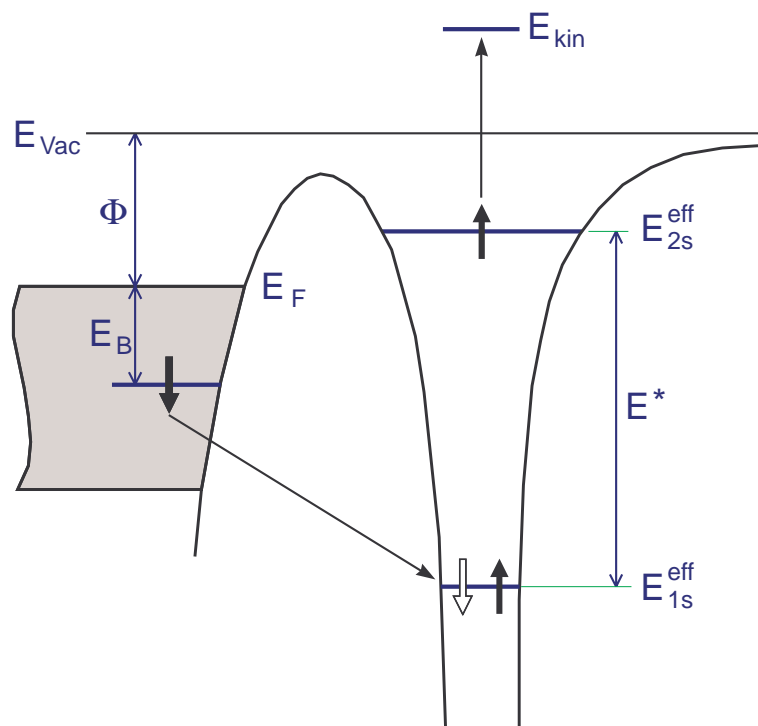


Abbildung 2.5:
 Schema der Augerdeexcitation.
 Wenn nicht durch Abstandspfeile extra markiert, be-
 ziehen sich die Energien auf E_{vac} .

Oberfläche beteiligt ist, gibt es wie bei der UPS einen direkten Zusammenhang zwischen den aufgenommenen Elektronenspektren und der Bandstruktur der Schicht (s. Kapitel 2.2.1).

Die energiereichsten Elektronen stammen sowohl bei der AD als auch bei der UPS aus Prozessen, bei denen Elektronen direkt von der Fermikante beteiligt sind. Aus dem Vergleich von MD- mit UP-Spektren ergibt sich die effektive Anregungsenergie E^* . Mit $E_B = 0$ erhält man aus den Gleichungen 2.3 und 2.1:

$$E_{kin,AD}^{max} = E^* - \Phi, \quad E_{kin,UPS}^{max} = h\nu - \Phi. \quad (2.4)$$

Aus der Differenz $\Delta E_{kin}^{max} = E_{kin,UPS}^{max} - E_{kin,AD}^{max}$, die aus aufgenommenen Spektren ablesbar ist (s. Abbildung 4.4), ist es dann möglich, die effektive Anregungsenergie E^* zu bestimmen:

$$E^* = h\nu - \Delta E_{kin}^{max}. \quad (2.5)$$

2.2.2.2 Resonanzionisation und Augerneutralisation (RI+AN)

Anders als bei der Augerdeexcitation wird für den RI+AN-Mechanismus angenommen, daß er in zwei zeitlich voneinander getrennten Stufen abläuft. Zuerst wird das sich annähernde Atom ionisiert (RI). Das entstandene Ion bewegt sich weiter auf die Oberfläche zu, bis es schließlich durch ein Elektron aus der obersten Atomlage neutralisiert wird (AN). Dabei wird ein weiteres Schichtelektron, an das die überschüssige Energie übertragen wird, aus der Oberfläche emittiert.

Die kinetische Energie dieser Elektronen ergibt sich aus

$$\begin{aligned}
 E_{kin} &= E_{1s}^{eff} - (\Phi + \bar{E}_B + \epsilon) - (\Phi + \bar{E}_B - \epsilon) \\
 &= E_{1s}^{eff} - 2(\bar{E}_B + \Phi) ,
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

wobei eine Energie \bar{E}_B eingeführt wird, die der mittleren Bindungsenergie der beiden beteiligten Elektronen entspricht (s. Abbildung 2.6). E_{1s}^{eff} gibt die effektive Energie des 1s-Niveaus an, die sich durch die Wirkung des Bildpotentials des Atoms vor der Oberfläche von der Energie E_{1s} des freien Heliums unterscheidet und vom Abstand zwischen Atom und Oberfläche abhängig ist [Sess87b].

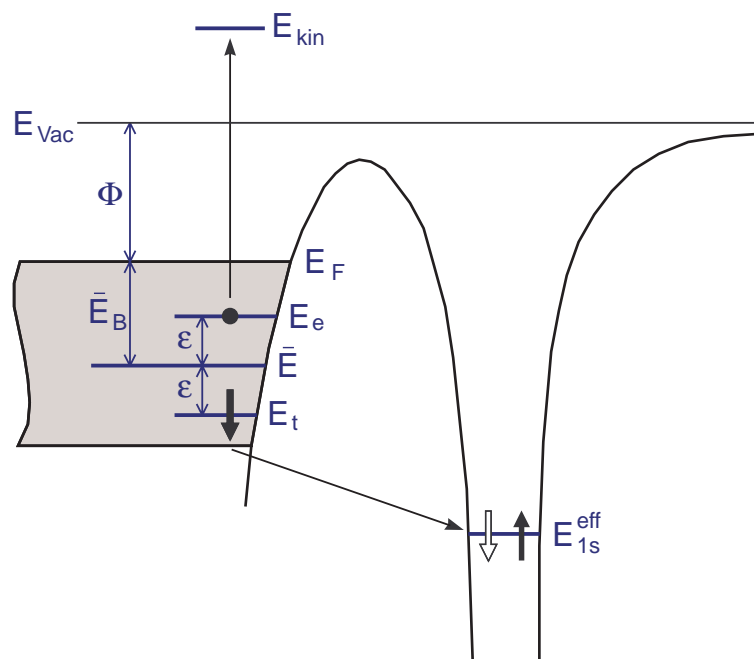


Abbildung 2.6:
 Schema der Augerneutralisation.
 Wenn nicht durch Abstandspfeile extra markiert, beziehen sich die Energien auf E_{vac} .

Zu jeder möglichen Energie E_{kin} tragen also alle Elektronenpaare bei, die symmetrisch zu \bar{E}_B liegen. Die Energieverteilung der emittierten Elektronen kann nicht wie bei der UPS oder der AD direkt als elektronische Zustandsdichte interpretiert werden, sondern sie setzt sich aus Faltungen der Zustandsdichtefunktionen der an den AN-Prozessen beteiligten Elektronen zusammen. Ohne eine Entfaltung der Spektren ist eine Zuordnung der beobachteten Strukturen zu Energiezuständen der untersuchten Probe nicht möglich.

Eine Ausnahme bildet dabei der hochenergetische Einsatz der Spektren. Die kinetische Energie E_{kin} ist maximal, wenn $\bar{E}_B = 0$ ist, also gerade dann, wenn beide beteiligten Elektronen direkt von der Fermikante der Schicht stammen:

$$E_{kin,AN}^{max} = E_{1s}^{eff} - 2\Phi. \quad (2.7)$$

Für diesen Bereich erlauben auch die durch RI+AN gewonnenen Spektren direkte Aussagen über magnetische Eigenschaften der Probe (s. Kapitel 2.2.3).

Außerdem kann aus dem Vergleich mit UPS unabhängig von einer absoluten Energieskala die effektive Energie des 1s-Niveaus E_{1s}^{eff} bestimmt werden. Aus der Differenz $\Delta E_{kin}^{max} = E_{kin,UPS}^{max} - E_{kin,AN}^{max}$ ergibt sich E_{1s}^{eff} zu:

$$E_{1s}^{eff} = h\nu - \Delta E_{kin}^{max} + \Phi. \quad (2.8)$$

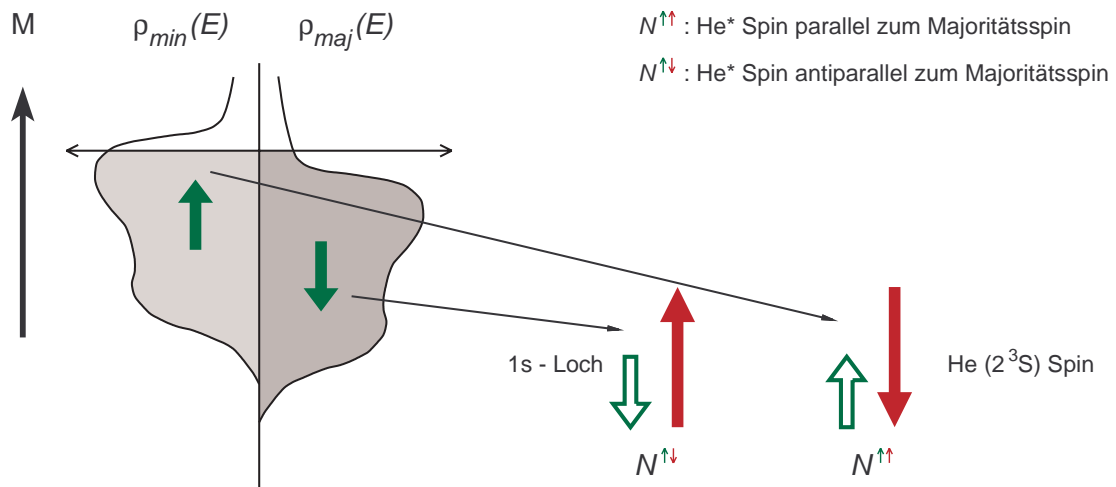
2.2.3 Auswertung von SPMD-Spektren

Die Spinabhängigkeit beider Deexcitationmechanismen resultiert aus der Tatsache, daß durch die im polarisierten Atomstrahl vorgegebene Spinorientierung des 2s-Elektrons bzw. des 1s-Loches ebenfalls die Orientierung des Spins des tunnelnden Schichtelektrons festgelegt ist. Für eine feste Magnetisierungsrichtung der Schicht sind in Abbildung 2.7 die Spinkonstellationen für die beiden möglichen Spineinstellungen des 2s-Elektrons dargestellt. In dem Fall, daß der He(2^3S)-Spin parallel zur Spinrichtung der Majoritätselektronen steht, kann nur ein Minoritätselektron das 1s-Loch auffüllen. Unter der Annahme, daß die Schicht eindomänig magnetisiert ist, ist die Zählrate N^{\uparrow} dann proportional zur Minoritätsspindichte ρ_{min} . Ebenso ergibt sich die Proportionalität von N^{\uparrow} zu ρ_{maj} . Mit der weiteren Annahme, daß die Tunnelwahrscheinlichkeit für Majoritäts- und Minoritätselektronen gleich ist, sind für ferromagnetische Materialien unterschiedliche Zählraten zu erwarten, die die Besetzung der beiden Spinsubbänder widerspiegeln.

Als Maß für diesen Unterschied läßt sich die Asymmetrie A definieren als

$$A(E) = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{N^{\uparrow}(E) - N^{\downarrow}(E)}{N^{\uparrow}(E) + N^{\downarrow}(E)} \propto \frac{\rho_{min}(E) - \rho_{maj}(E)}{\rho_{min}(E) + \rho_{maj}(E)}, \quad (2.9)$$

wobei die Wichtung mit der Polarisation P_{He^*} berücksichtigt, daß der Atomstrahl nicht zu 100% polarisiert ist. Die Bestimmung von N^{\uparrow} und N^{\downarrow} aus den aufgenommenen Spektren wird in Kapitel 3.6 näher erläutert.


Abbildung 2.7:

Zusammenhang zwischen Zählraten und Zustandsdichten für unterschiedliche Spinorientierungen.

Mit Ausnahme der Magnetisierung M stellen die Pfeile Elektronenspinrichtungen dar, nicht Richtungen der magnetischen Momente.

Aus dem Wert dieser Asymmetrie lassen sich also Aussagen über die Magnetisierung der obersten Atomlage der Schicht ableiten. Eine von Null verschiedene Asymmetrie zeigt an, daß die Oberfläche magnetisiert ist, wobei sich aus dem Vorzeichen die dominierende Spinsorte ergibt. Minoritätselektronen überwiegen dann, wenn eine positive Asymmetrie gemessen wird.

Stammen die nachgewiesenen Elektronen allerdings aus einem RI+AN-Prozeß und wird die Asymmetrie direkt aus den nicht entfalteten AN-Spektren berechnet, so beschränken sich diese Ergebnisse auf einen Energiebereich nahe der Fermikante (s. Kapitel 2.2.2.2).

Für eine weitergehende Interpretation über den gesamten zugänglichen Energiebereich ist die Bestimmung der spinaufgelösten Zustandsdichten durch eine Entfaltung der AN-Spektren nötig. Dazu dient der im folgenden skizzierte Ansatz.

Zu jeder Energie E_{kin} im nachgewiesenen Elektronenspektrum tragen alle Elektronenpaare bei, die symmetrisch im Abstand ϵ um die Energie \bar{E} liegen (s. Abbildung 2.6):

$$\bar{E} = \bar{E}_B + \Phi = \frac{(E_t \pm \epsilon) + (E_e \mp \epsilon)}{2}. \quad (2.10)$$

Unter der Annahme, daß keine Spinkorrelation zwischen dem tunnelnden und emittierten Elektron besteht, ergibt sich N^{\parallel} aus der Faltung der Zustandsdich-

te des tunnelnden Elektrons ρ_{min} und der nicht spinaufgelösten Zustandsdichte $\rho = \rho_{min} + \rho_{maj}$ des emittierten Elektrons:

$$N^{\uparrow} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{min}(\bar{E} - \epsilon) [\rho_{min}(\bar{E} + \epsilon) + \rho_{maj}(\bar{E} + \epsilon)] d\epsilon . \quad (2.11)$$

Analog folgt für N^{\downarrow} :

$$N^{\downarrow} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{maj}(\bar{E} - \epsilon) [\rho_{min}(\bar{E} + \epsilon) + \rho_{maj}(\bar{E} + \epsilon)] d\epsilon . \quad (2.12)$$

Des weiteren sind die in [Sess87b] für die Interpretation von unpolarisierten AN-Spektren eingeführten Vereinfachungen, daß die Übergangsmatrixelemente nur von den Anfangsenergien E_t und E_e abhängen und daß die effektiven Zustandsdichten ρ_{min} und ρ_{maj} für den Tunnelprozeß und die Emission gleich sind, in den Gleichungen 2.11 und 2.12 enthalten.

Parallel zu dieser Arbeit wird in unserer Arbeitsgruppe von S. Förster ein Verfahren entwickelt, mit dem aus den Spektren N^{\uparrow} und N^{\downarrow} unter Verwendung des oben vorgestellten Ansatzes die spinaufgelösten Zustandsdichten ρ_{min} und ρ_{maj} numerisch bestimmt werden können [Förs99]. Erste Ergebnisse, die nun einen direkten Vergleich mit UP-Spektren erlauben, werden in Kapitel 4.2.1 vorgestellt.

3 Aufbau der Apparatur und experimentelle Methoden

Die Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie basiert auf dem energieaufgelösten Nachweis von Elektronen, die durch Deexcitationsprozesse von angeregten Atomen vor metallischen Oberflächen ausgelöst werden. In den Abbildungen 3.1 und 3.2 sind die dabei verwendeten Komponenten skizziert.

Der spinpolarisierte Atomstrahl besteht aus metastabilen Heliumatomen, die in einer Gasentladungsquelle erzeugt werden.

Im Zentrum eines Edelstahlrezipienten ($\varnothing = 60$ cm) befindet sich ein Wolframkristall, der mit Hilfe eines Manipulators sowohl in allen drei Raumrichtungen bewegt werden als auch um die z-Achse gedreht werden kann. Eine neu entwickelte Halterung bietet nun die Möglichkeit, den Kristall sowohl mit flüssigem Stickstoff zu kühlen als auch mit Hilfe einer Widerstandsheizung zu erwärmen.

Die zu untersuchenden dünnen Schichten werden mit Hilfe eines Elektronenstrahlverdampfers auf den Wolframkristall aufgedampft. Zur Charakterisierung der Schichten steht ein LEED-System zur Verfügung.

Die durch die Deexcitationprozesse emittierten Elektronen werden zur Energieanalyse durch ein 150° -Kugelspektrometer geführt und in einem Sekundärelektronenvervielfacher (SEV) nachgewiesen.

Zur Aufnahme von Photoemissionsspektren, die zur Kalibrierung des Elektronennachweises verwendet wurden, steht eine UV-Gasentladungslampe zur Verfügung.

Das für oberflächenphysikalische Experimente notwendige Ultrahochvakuum wird mit Hilfe von mehreren Turbomolekularpumpen (TMP) mit vorgeschalteten, zweistufigen Drehschieberpumpen erzeugt. Nach dreitägigem Ausheizen der gesamten Experimentierkammer bei ca. 200°C wird ein Druck von $1 \cdot 10^{-10}$ mbar erreicht, der durch den Einsatz einer mit flüssigem Stickstoff gekühlten Titansublimationspumpe (TSP) bis auf $3 \cdot 10^{-11}$ mbar abgesenkt werden kann. Die Totaldruckmessung erfolgt mit einem Heißkathodenionisationsmanometer, die Restgasanalyse mit einem Quadrupol-Massenspektrometer (QMA).

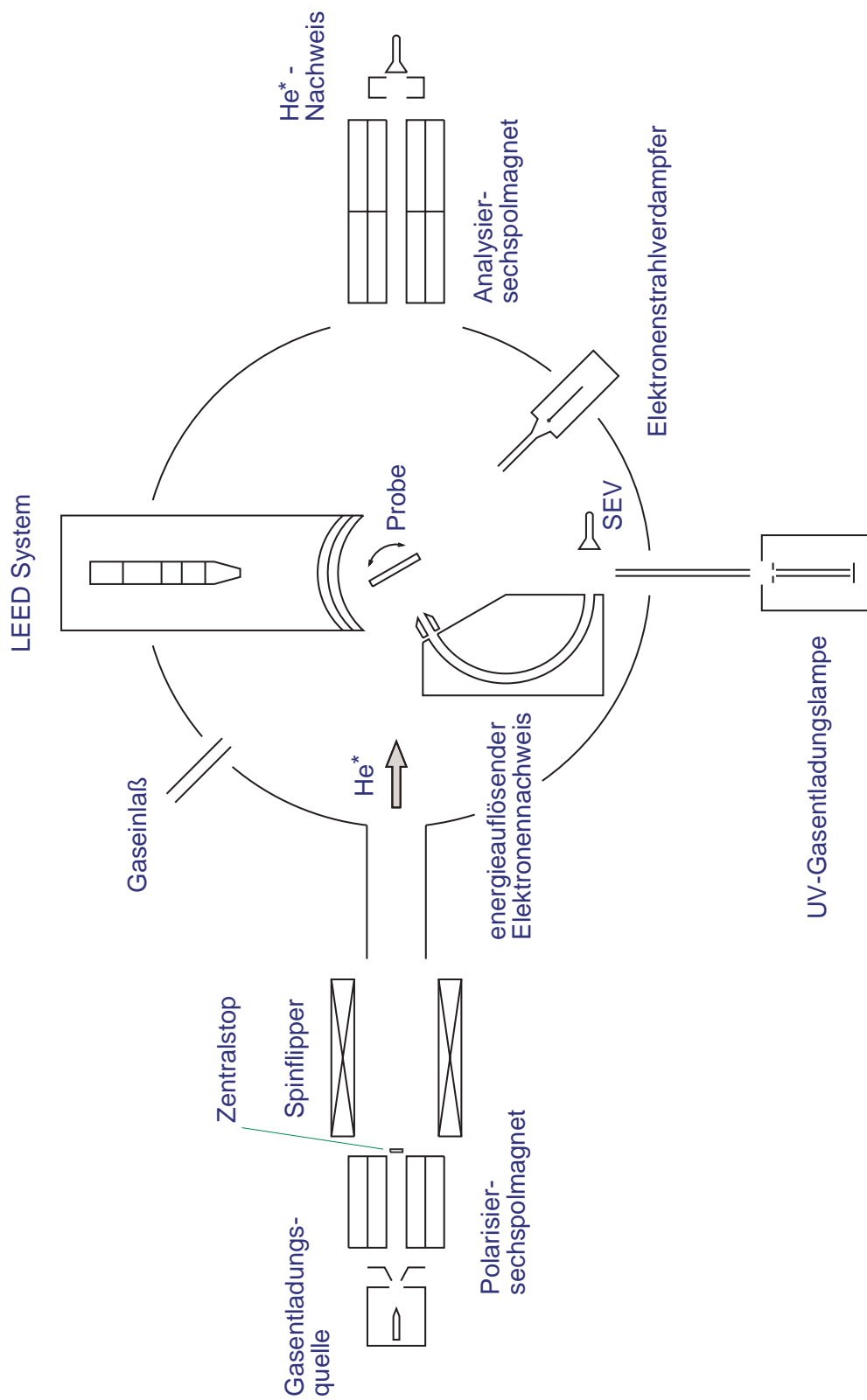


Abbildung 3.1:
Schematische Übersicht des experimentellen Aufbaus

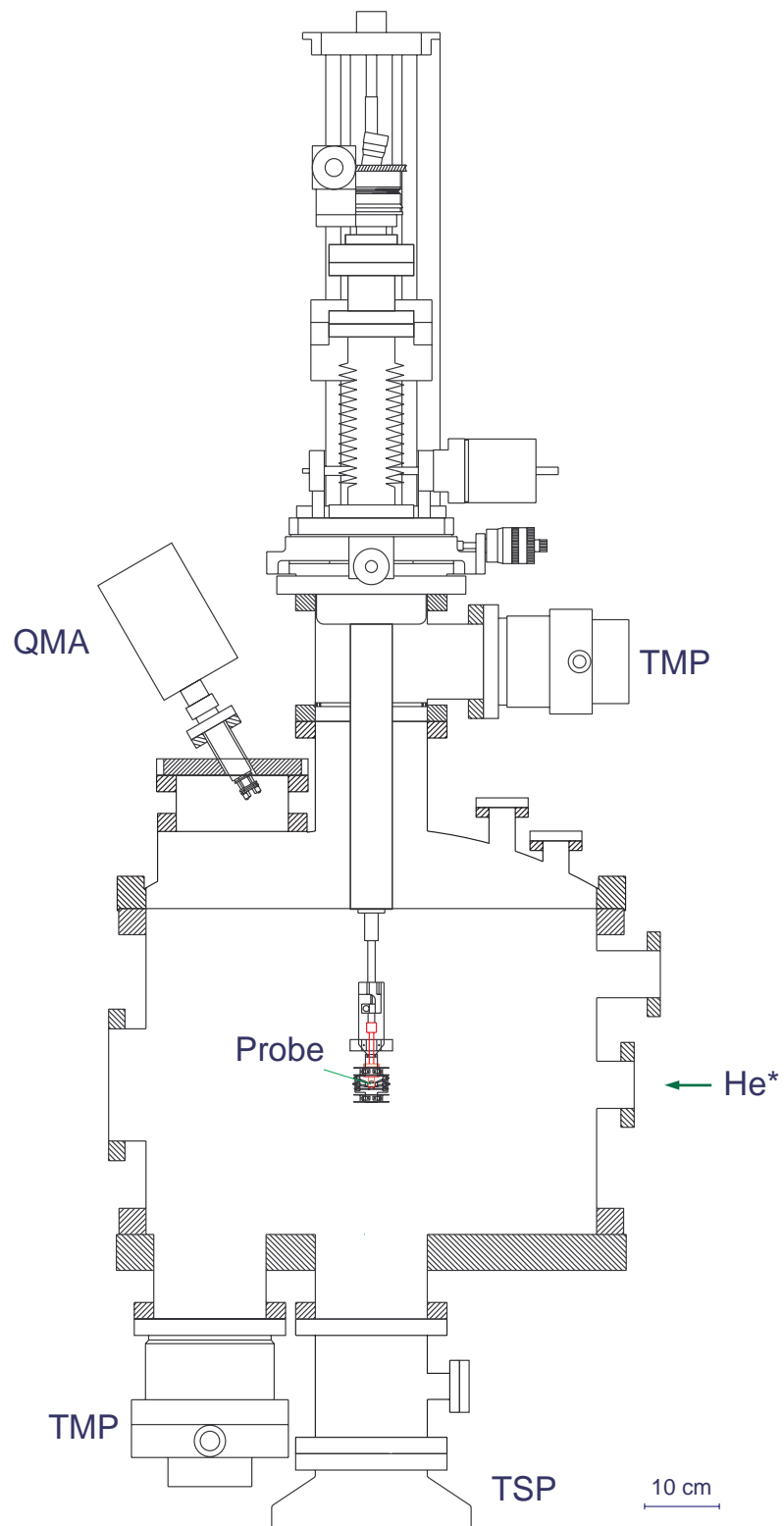


Abbildung 3.2:
Ansicht der Experimentierkammer senkrecht zu der in
Abbildung 3.1 dargestellten Ebene.

3.1 Der polarisierte Heliumstrahl

In einer Gasentladungskammer werden durch Elektronenstoß angeregte Heliumatome erzeugt, die mit Hilfe einer Düsen-Skimmer-Kombination zu einem Atomstrahl kollimiert werden. Dieser thermische Strahl enthält u. a. He-Atome im Grundzustand, metastabile He(2^1S)- und He(2^3S)-Atome sowie hoch angeregte Rydbergatome. Durch einen nachfolgenden Sechspolmagneten werden He(2^3S)-Atome mit $m_s = +1$ selektiert. Die Ausrichtung des Spins des He(2^3S)-Atoms relativ zu einem äußeren Führungsfeld kann mit Hilfe eines Spinflippers umgekehrt werden. Zur Polarisationsanalyse wird ein weiterer Sechspolmagnet in Verbindung mit einem Detektor für die He(2^3S)-Atome verwendet.

Gasentladungskammer, Sechspolmagnet und Spinflipper sind in drei differentiell gepumpten Kammern untergebracht, so daß bei einem Druck von $9 \cdot 10^{-4}$ mbar in der Gasentladungskammer schließlich in der Probenkammer während der Messungen ein Druck von ca. $4 \cdot 10^{-9}$ mbar erreicht wird.

Dichte der He(2^3S)-Atome im Probenbereich	$1 \cdot 10^7$ Atome / cm^{-3}
Fluß der He(2^3S)-Atome im Probenbereich	$1 \cdot 10^{12}$ Atome / $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2}$
Strahldurchmesser im Probenbereich	ca. 7 mm
Polarisationsgrad	0.9 ± 0.02
Lebensdauer des (2^3S)-Zustandes	$1 \cdot 10^4$ s
mittlere Geschwindigkeit	ca. 1800 m/s
kinetische Energie	ca. 70 meV

Tabelle 3.1:
Parameter des metastabilen He(2^3S)-Strahls

3.1.1 Die Gasentladung

In der in Abbildung 3.3 dargestellten Gasentladungszelle werden durch Elektronenstoß angeregte Heliumatome erzeugt. Als Kathode wird eine Wolframnadel verwendet, die sich in einem Abstand von 5 mm vor der Düsenöffnung ($\varnothing = 0.5$ mm) in der Wand der Entladungskammer befindet. Um die Entladung räumlich zu begrenzen, ist die Edelstahlwand der Entladungskammer bis auf eine Öffnung mit 1.5 mm Durchmesser durch eine Keramikplatte abgeschirmt und die Wolframnadel mit einem Keramikröhrchen umgeben. Ein Edelstahlskimmer mit einer Öffnung von 0.6 mm befindet sich 5 mm strahlabwärts von der Düse.

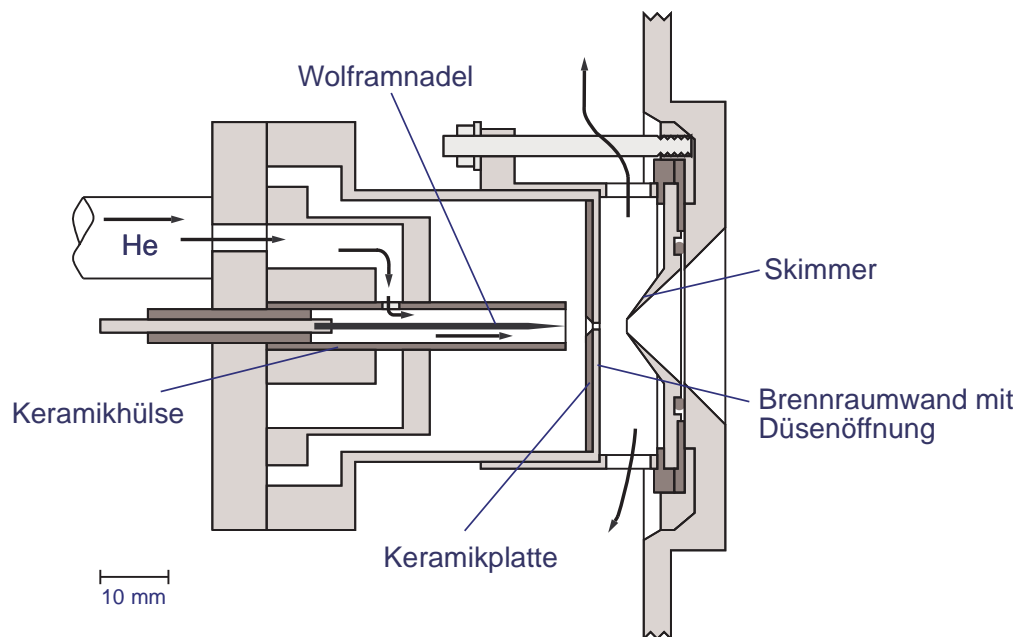


Abbildung 3.3:
Querschnitt der Gasentladungskammer

Kathodenpotential	1.7 kV
Skimmerpotential	180 V
Gaseinlaßdruck	22 - 24 mbar
Entladungsstrom	ca. 20 mA

Tabelle 3.2:
Betriebsparameter der Gasentladung

3.1.2 Der Sechspolmagnet

Die Polarisation des metastabilen Atomstrahls wird mit Hilfe des in Abbildung 3.4 dargestellten Sechspolmagneten erzeugt. Das Magnetfeld eines solchen Magneten ergibt sich in Abhängigkeit von r aus (s. Abbildung 3.5, [Hugh72]):

$$|\vec{B}(\vec{r})| = \frac{r^2}{R^2} B_R, \quad (3.1)$$

mit B_R : Feldstärke an den Polschuhspitzen,
 R : Abstand Polschuhspitze - Strahlachse.

Aus der Bewegungsgleichung für Teilchen mit der Masse m und dem magnetischen Moment μ

$$m \frac{d^2}{dt^2} r = 2\mu \frac{B_R}{R^2} r \quad (3.2)$$

ergeben sich für He(2^3S)-Atome in Abhängigkeit von m_s drei Lösungen, die zu folgendem Ergebnis führen:

- Teilchen mit $m_s = -1$ werden auf hyperbolischen Bahnen aus dem Strahl entfernt,
- Teilchen mit $m_s = 0$ bleiben auf ihrer geradlinigen Bahn und
- Atome mit $m_s = +1$ bewegen sich auf einer sinusförmigen Bahn durch den Magneten.

Alle Teilchen mit $m_s = 0$ werden mit Hilfe einer im Ausgang des Sechspolmagneten zentral aufgehängten Edelstahlscheibe mit 1.5 mm Durchmesser (Zentralstop, s. Abbildung 3.1) mechanisch aus dem Strahl ausgeblendet. So wird gleichzeitig verhindert, daß in der Entladungskammer entstehende Photonen in die Probenkammer gelangen.

Durch geeignete Wahl der Länge und der Polschuhfeldstärke des Sechspolmagneten (s. Tabelle 3.1.2) werden also Atome mit $m_s = +1$ am Zentralstop vorbei in einem quasiparallelen Bündel zur Probe transportiert.

Der so erreichte Polarisationsgrad des He*-Strahls beträgt $P_{He^*} = 0.9 \pm 0.02$, wobei P_{He^*} definiert ist als:

$$P_{He^*} = \frac{N^+ - N^-}{N^+ + N^0 + N^- + N^S}, \quad (3.3)$$

mit $N^{-,0,+}$: Anzahl der He*-Atome im Zustand (2^3S), $m_s = -1, 0, +1$,
 N^S : Anzahl der Atome im Zustand (2^1S), $m_s = 0$.

Durchmesser der Eingangsöffnung	5 mm
Feldstärke an den Polschuhspitzen	0.85 T
Länge	100 mm
Durchmesser des Zentralstops	1.5 mm

Tabelle 3.3:
Daten des Sechspolmagneten

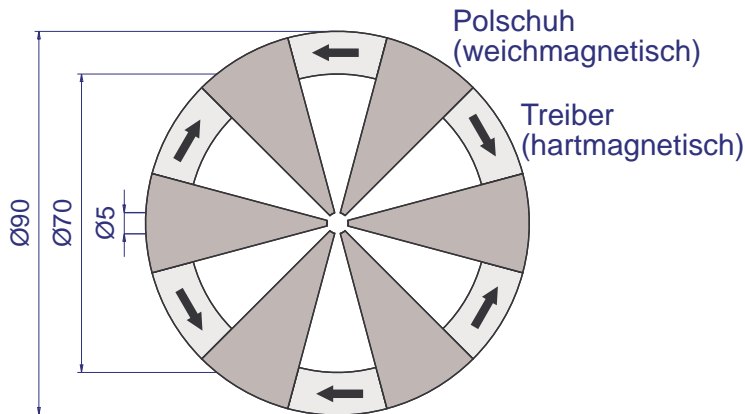


Abbildung 3.4:
Querschnitt des Sechspolmagneten
(Maße in mm)

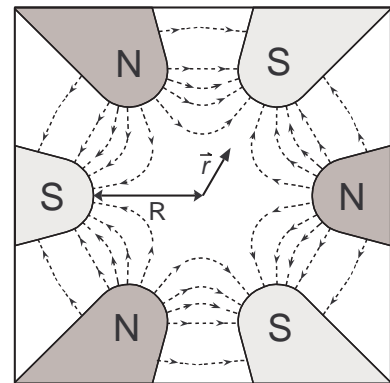


Abbildung 3.5:
Magnetfeldverlauf im
Sechspolmagneten

3.1.3 Der Spinflipper und die magnetischen Führungsfelder

Um die am Ausgang des Sechspolmagneten vorhandene Polarisation zu erhalten, ist ein magnetisches Führungsfeld entlang des Transportweges notwendig. Dazu ist der Atomstrahl von einem Magnetfeld umgeben, das durch außerhalb der Vakuumapparatur axial angeordnete Spulen erzeugt wird.

Mit Hilfe eines Spinflippers [Schr83], der aus fünf symmetrisch verteilten Spulenpaaren besteht (s. Abbildung 3.6, 1a bis 5b), ist es möglich, die Orientierung der Atomspins relativ zu dem äußeren Führungsfeld umzukehren. Dazu wird

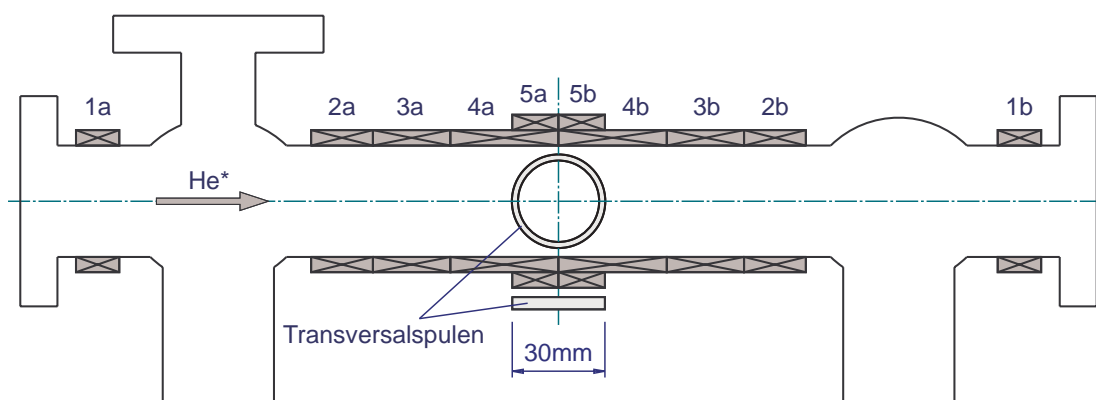


Abbildung 3.6:
Querschnitt des Spinflippers. Die gesamte Anordnung ist mit einer magnetischen Abschirmung umgeben.

im Spinflipper durch geeignete Wahl der Spulenströme ein Richtungswechsel des Führungsfeldes erzeugt. Ist der feldfreie Bereich (Nulldurchgang) klein, so bleibt die Spinorientierung im Raum erhalten, da die Atomspins dem Feldwechsel nicht folgen können (diabatischer Fall). Relativ zum Führungsfeld ist der Atomspin jetzt antiparallel eingestellt, was einem Zeemanübergang von $m_s = +1$ nach $m_s = -1$ entspricht (s. Abbildung 3.8). Das Führungsfeld für diesen Fall (**Flip**) ist in Abbildung 3.7 dargestellt.

Legt man im Spinflipperzentrum ein zusätzliches transversales Magnetfeld an (s. Abbildung 3.6, Transversalspulen), so ändert sich die Richtung des resultierenden Führungsfeldes im Vergleich zur Larmorpräzession des Atomspins so lang-

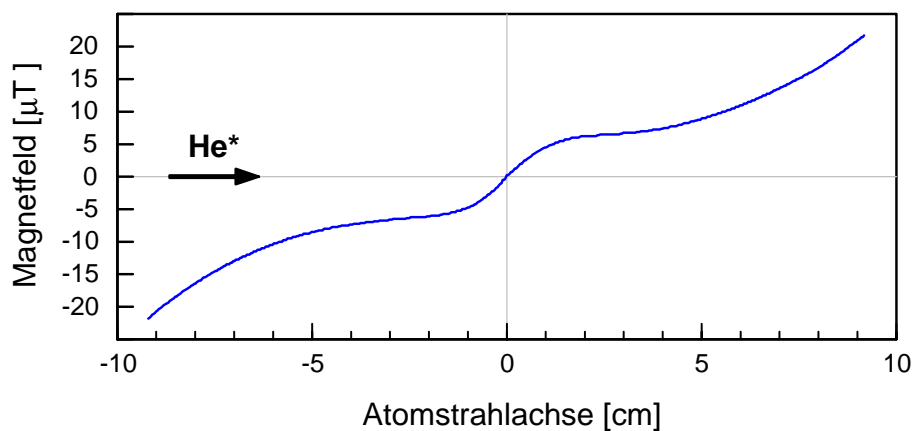


Abbildung 3.7: Verlauf der Magnetfeldstärke im Spinflipper in der Einstellung Flip (Maßangaben relativ zum Spinflipperzentrum)

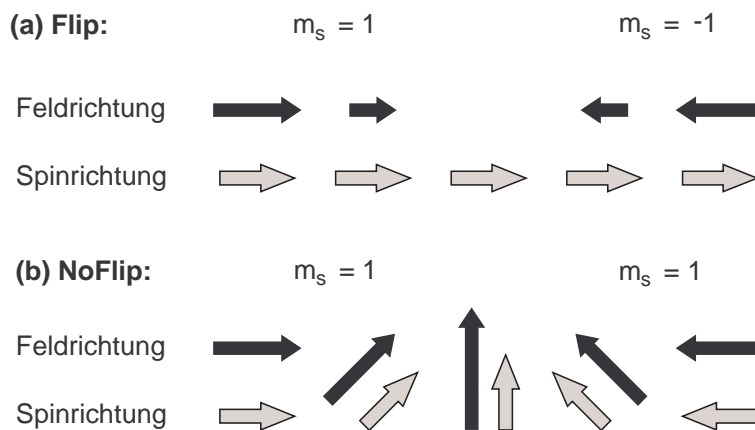


Abbildung 3.8: Spin- und Feldrichtungen im Spinflipper

sam, daß die Atomspinrichtung im Bezug auf die Feldrichtung erhalten bleibt (adiabatischer Fall), was die Erhaltung der magnetischen Quantenzahl zur Folge hat (**NoFlip**).

Die Effizienz des Spinflippers beträgt 100 % [Schr83], also ist der Betrag der jeweils erreichten Atomstrahlpolarisation in der Probenregion für beide Spinflipperstellungen identisch.

Die Probenkammer ist zusätzlich von zwei transversal angeordneten Spulenpaaren umgeben, die ein Führungsfeld erzeugen, das parallel zur Achse der Kammer, und damit in Richtung der Magnetisierung der Probe ausgerichtet ist. Die Atomspins sind also je nach Spinflipperstellung parallel bzw. antiparallel zur Magnetisierungsrichtung der Probe eingestellt.

3.1.4 Die Polarisationsanalyse

Die metastabilen Heliumatome treffen auf den Konus eines Sekundärelektronenvervielfachers (SEV). Dort kommt es durch Deexcitationsprozesse zur Emission von Elektronen, die dann mit Hilfe einer auf positivem Potential liegenden Blendenanordnung abgezogen werden (s. Abbildung 3.9). Der am Konus des SEV gemessene Strom liegt im nA-Bereich und ist proportional zur Intensität des metastabilen Heliumstrahls.

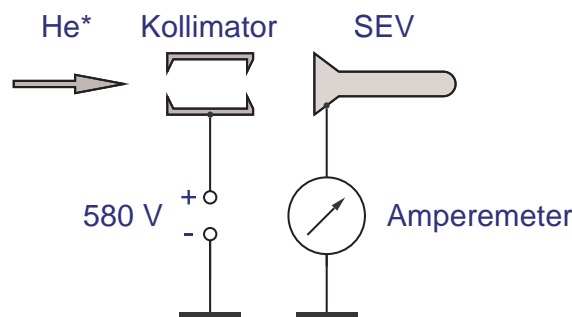


Abbildung 3.9:
Nachweis der angeregten Heliumatome

In einem früheren Versuchsaufbau wurden mit Hilfe eines Stern-Gerlach Magneten die in Abbildung 3.10 dargestellten Strahlprofile aufgenommen [Baum88]. Eine Auswertung dieser Profile ergibt eine Strahlpolarisation von $P = 0.9 \pm 0.02$. Im derzeitigen Aufbau wird zur Bestimmung der Polarisation eine erneute Zustandsselektion durchgeführt. Dazu werden zwei weitere Sechspolmagneten verwendet, so daß nur Atome mit $m_s = +1$ den Atomnachweis erreichen können. In Abhängigkeit von der Einstellung des Spinflippers erhält man also zwei unterschiedliche Intensitäten I_{NoFlip} bzw. I_{Flip} , aus denen sich die Strahlpolarisation nach

$$P_{He} = \frac{I_{NoFlip} - I_{Flip}}{I_{NoFlip} + \frac{1}{2}I_{Flip}} \quad (3.4)$$

ergibt. Die Resultate beider Methoden zur Bestimmung der Strahlpolarisation stimmen überein [Tabo88].

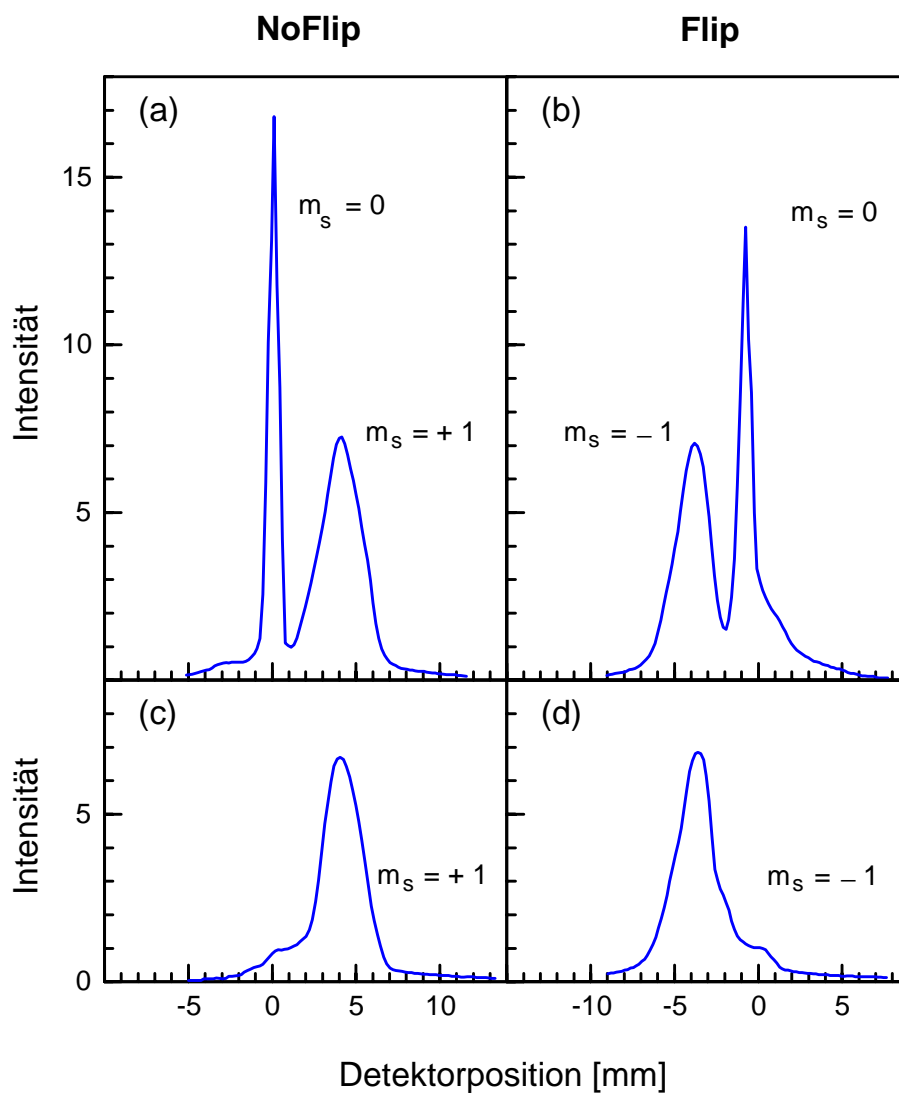


Abbildung 3.10:

Stern-Gerlach Profile des polarisierten Heliumstrahls

- (a) ohne Zentralstop, Spinflippereinstellung NoFlip
- (b) ohne Zentralstop, Spinflippereinstellung Flip
- (c) mit Zentralstop, Spinflippereinstellung NoFlip
- (d) mit Zentralstop, Spinflippereinstellung Flip

3.2 Die UV-Gasentladungslampe

Zur Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie wird eine kommerzielle Gasentladungslampe des Typs UVL-HI von VG Microtech eingesetzt (s. Abbildung 3.11). In einer Gasentladung, die in einer zwischen zwei Elektroden liegenden Glaskapillaren brennt, werden Edelgasatome in höher liegende Zustände angeregt. Bei der Rückkehr in den Grundzustand wird Resonanzstrahlung ausgesendet, die mit Hilfe einer zweiten Kapillaren bis ca. 20 cm vor die Probe geführt wird. Der Durchmesser des auf der Probe ausgeleuchteten Bereiches beträgt 6 mm. Zwei differentielle Pumpstufen sorgen dafür, daß der Druck in der Probenkammer nicht über $2 \cdot 10^{-10}$ mbar ansteigt, während der Gaseinlaßdruck in der 1. Pumpstufe ca. 0.1 mbar beträgt.

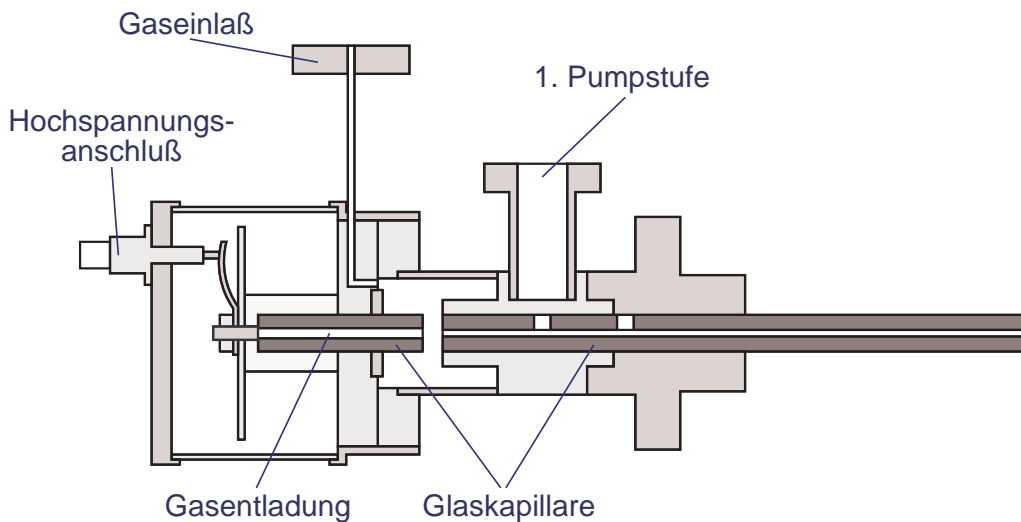


Abbildung 3.11:

Querschnitt der UV-Gasentladungslampe

(nach [Micr95])

Die Lampe wird mit Helium oder Neon betrieben, so daß UP-Spektren mit HeI-Licht ($h\nu = 21.2$ eV) und NeI-Licht ($h\nu = 16.85$ eV) aufgenommen werden können.

3.3 Der Manipulator und die neue Kristallhalterung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der bisher verwendete Manipulator durch einen neuen Manipulator des Typs Omniax von Vacuum Generators ersetzt (s. Abbildung 3.2). Ziel dieser Maßnahme war es – neben einer Verbesserung der mechanischen Eigenschaften – die Möglichkeit zu schaffen, den Kristall während der Probenpräparation und der Messungen auf einer definierten Temperatur zu halten. Zur Heizung sieht die zu dem neuen Manipulator gehörige Kristallhalterung vor, daß der Kristallrücken ganzflächig auf einer Edelstahlplatte aufliegt, die indirekt durch eine Widerstandsheizung erwärmt werden kann. Zur Kühlung bie-

tet der Manipulator außerdem die Möglichkeit, über eine Edelstahlkapillare mit einem Innendurchmesser von 2 mm flüssigen Stickstoff in ein Reservoir aus Kupfer zu leiten, das sich am unteren Ende des Manipulatorschaftes befindet. Mit Hilfe von Kupferlitzen wird der Wärmeaustausch zwischen dem Kältereservoir und der Grundplatte der kommerziellen Halterung vorgenommen.

Zur Reinigung des in diesem Experiment verwendeten Wolframkristalls sind Temperaturen von mehr als 2000° C erforderlich (s. Kapitel 3.4.1), die nur mit Hilfe einer Elektronenstrahlheizung (s. Abbildung 3.12 b) erzeugt werden können. Eine Heizung durch Elektronenbeschuß ist aber mit der kommerziellen Kristallhalterung nicht möglich, da dieses Heizverfahren eine Kristallbefestigung voraussetzt, bei der der Wärmeaustausch zwischen Kristall und Haltevorrichtung möglichst gering ist. Andererseits ist eine effektive Erwärmung bzw. Kühlung des Kristalls während der Messung nur durch direkten Kontakt zwischen Kristall und einem Wärmereservoir möglich.

Eine Kombination beider Heizverfahren an einer Halterung wird durch den Einsatz eines beweglichen Kupferkontaktes realisiert, der während des Heizens mit Elek-

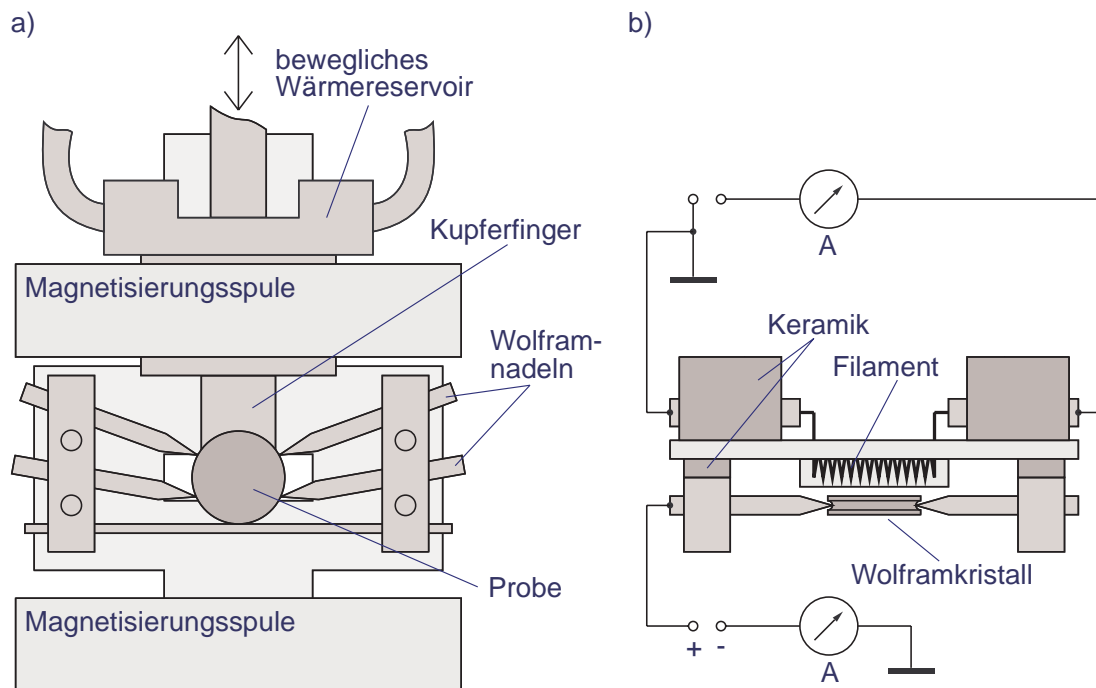


Abbildung 3.12:

Die neue Kristallhalterung

Während des Einsatzes der Elektronenstrahlheizung, deren Anordnung in der Draufsicht (b) skizziert ist, kann das in der Vorderansicht (a) dargestellte Wärmereservoir aus Kupfer nach oben gezogen werden.

tronen von dem Kristall entfernt werden kann. Dazu wird der Kristall unterhalb der kommerziellen Halterung an vier Wolframnadeln und einer Wolframstange aufgehängt (s. Abbildung 3.12 a). In den Manipulator integriert ist eine Linear-durchführung, die in der z-Richtung einen Hub von 12 mm erlaubt. An diesem Gestänge befindet sich ein Kupferklotz, der durch Kupferlitzen sowohl mit dem Stickstoffreservoir als auch mit der beheizbaren Grundplatte der kommerziellen Halterung verbunden ist. So lassen sich an dem Kupferklotz Temperaturen zwischen -120°C und 300°C erzeugen. Von diesem Klotz aus greift ein 8 mm breiter Kupferfinger nach unten, der an dem Kristallrücken anliegt. So stellt sich innerhalb weniger Minuten am Kristall die am Kupferklotz vorgegebene Temperatur ein. Die Temperaturdifferenz zwischen Kristall und Kupferklotz betrug bei Testmessungen weniger als 4°C .

Des weiteren wurde die einzelne Magnetisierungsspule, die sich oberhalb des Kristalls befand [Wilh94], durch ein Spulenpaar ersetzt. Dadurch wird am Kristall, der sich nun in dem Bereich zwischen den Spulen befindet, zur Aufmagnetisierung der Probe ein deutlich homogeneres Magnetfeld erzeugt (s. Kapitel 3.4.3).

Der Kristall wird abhängig vom untersuchten ferromagnetischen Stoff so in die Halterung eingesetzt, daß die Magnetisierung parallel zu der jeweils leichten Magnetisierungsrichtung erfolgt (s. Kapitel 3.4).

3.4 Präparation der ferromagnetischen Schichten auf W(110)

3.4.1 Der W(110)-Kristall als Substrat

Eine Voraussetzung für die Herstellung dünner, gut geordneter Metallschichten ist eine möglichst dicht gepackte Substratoberfläche, an der keine Interdiffusion stattfindet. Des weiteren müssen die aufgetragenen Schichten einfach und zuverlässig zu entfernen sein. Als Substrat ist deshalb ein W(110)-Einkristall sehr gut geeignet. Ferromagnetische Schichten auf W(110) sind mit anderen Verfahren ausführlich untersucht worden, z.B. mit SPUPS [Getz93a], so daß das Wachstumsverhalten dieser Systeme bekannt ist (s. Anhang A.2).

Die Reinigung des 2 mm dicken W-Kristalls ($\varnothing = 9$ mm) erfolgt mit Hilfe einer Elektronenstrahlheizung (s. Abbildung 3.12 b) durch kurzzeitiges Glühen (20 – 30 sec.) bei ca. 2300° C ("flashen"). So werden auch die aufgedampften Metallschichten entfernt. Des weiteren führt dieses Erhitzen zu einem Ausheilen der Wolframoberfläche.

Da Wolframkristalle durch eingelagerten Kohlenstoff verunreinigt sind, muß dieser aus den obersten Schichten entfernt werden. Dazu wird der Kristall für einige Minuten unter Sauerstoff ($1 \cdot 10^{-6}$ mbar) auf 1500° C erhitzt. Dabei diffundiert der Kohlenstoff an die Oberfläche und verbindet sich mit Sauerstoff zu CO. Dieses und das außerdem entstehende WO_3 wird durch anschließendes flashen entfernt. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis im MD-Spektrum keinerlei Verunreinigungen mehr zu erkennen sind (s. Kapitel 4.1, Abbildung 4.1).

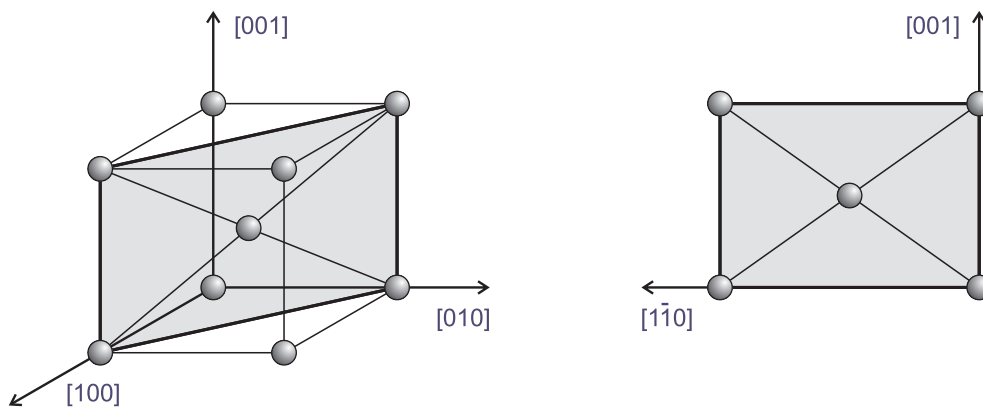


Abbildung 3.13:

Orientierung der (110)-Fläche (schraffiert) des bcc-Wolframkristalls

3.4.2 Das Aufdampfen von epitaktischen Schichten

Die zu untersuchenden Schichten müssen vor Beginn der Messung im Ultrahochvakuum präpariert werden. Dazu wird Eisen, Kobalt oder Nickel auf den zuvor gereinigten Substratkristall aufgedampft. Eine detailliertere Beschreibung

des Wachstums der Schichten wird in Anhang A.2 gegeben. Die auf der W(110)-Oberfläche entstehenden Kristallstrukturen sind in Tabelle 3.4 aufgelistet.

Material	Struktur	Gitterkonstante	Misfit	Referenz
Wolfram	bcc (110)	0.316 nm		
Eisen	bcc (110)	0.287 nm	9.2 %	[Kurz86], [Grad82]
Kobalt	hcp (0001)	0.251 nm	0.7 %	[John89], [Ocie90]
Nickel	fcc (111)	0.249 nm	3.6 %	[Kämp88], [Camp90]

Tabelle 3.4:

Die Gitterstruktur der aufgedampften Schichten

Bei allen untersuchten Materialien liegt Frank - van der Merwe - Wachstum, also reines lagenweises Wachstum vor (s. Anhang A.2).

Der zur epitaktischen Herstellung von Metallschichten benötigte Atomstrahl wird mit Hilfe eines Elektronenstrahlverdampfers erzeugt (s. Abbildungen 3.14 und 3.15). Das zu verdampfende Material ist entweder in Form von zwei 1 mm dicken Stäben oder eingeschmolzen in einem Wolframtiegel in dem Ofen enthalten. Die Spitze der Stäbe bzw. des Tiegels liegt im Zentrum eines kreisförmigen Heizdrahtes aus Wolfram. Aus dem Draht emittierte Elektronen werden mit einer Spannung von 600 V beschleunigt und erhitzen das zu verdampfende Material bis zur Weißglut. Damit ein konstanter Fluß erreicht wird, ist es wichtig, daß das Material immer von der gleichen Stelle verdampft. Deshalb können die Stäbe mittels einer Lineardurchführung nachgeschoben werden. Um eine Verunreinigung der entstehenden Schicht durch desorbierte Restgase zu minimieren, ist die aus Kupfer hergestellte Verdampfungszelle wasserkühlbar.

Nach Austritt aus der Verdampfungszelle wird mit Hilfe eines 10 cm langen Edelstahlkollimators ($\varnothing = 6$ mm) der Atomstrahl so kollimiert, daß nur der ca. 20 cm entfernte Wolframkristall bedampft wird.

Während des Verdampfungsvorganges entstehen auch Metallionen. Unter der Annahme, daß die Menge der Ionen direkt proportional zur insgesamt verdampften Stoffmenge ist, erhält man also durch Bestimmung der Ionenmenge ein direktes Maß für den gesamten Materialfluß. Dazu ist in den Kollimator ein als Kollektor dienendes Röhrchen integriert, das elektrisch isoliert angebracht ist, so daß mit einem Amperemeter der Ionenstrom gemessen werden kann. Die in Abbildung 3.15 angegebenen Betriebsparameter für den Verdampfer ergeben einen Ionenstrom von 100 mA, der während eines Aufdampfvorganges durch Nachschieben des Verdampfungsmaterials konstant gehalten wird. Mit diesem Verfahren können für unterschiedliche Meßreihen vergleichbare Schichten hergestellt werden.

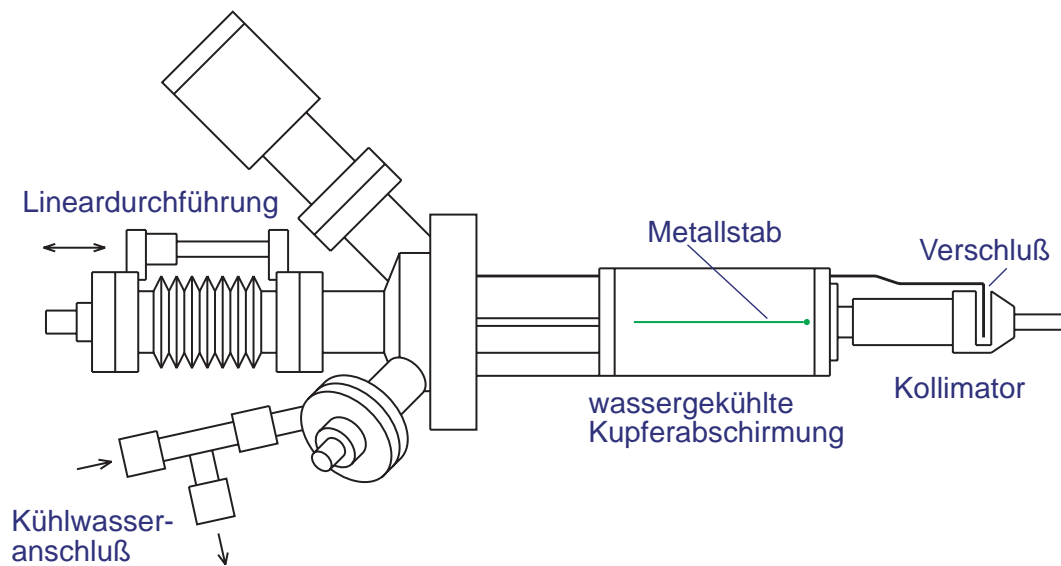


Abbildung 3.14:
Der Elektronenstrahlverdampfer

(nach [Focu92])

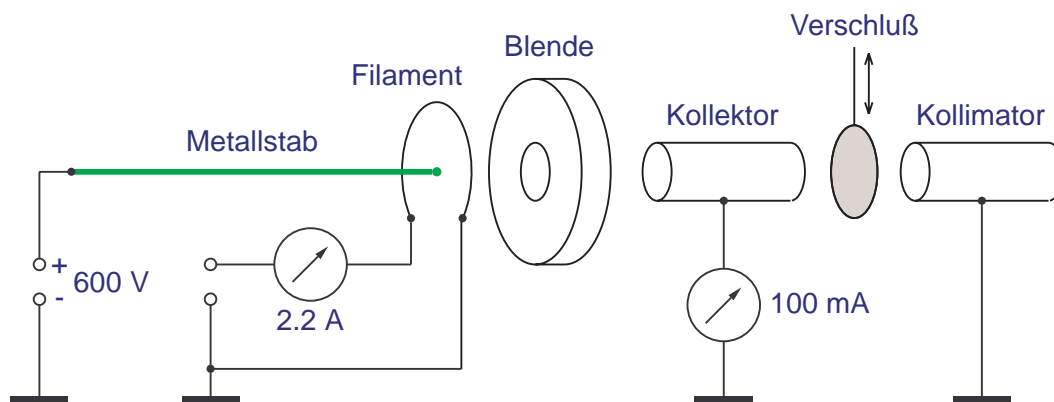


Abbildung 3.15:
Die Anordnung des Elektronenstrahlverdampfers mit integriertem Flußmonitor

Die für einen Ionenfluß von 100 mA erreichte Aufdampfgeschwindigkeit wurde mit Hilfe eines Schichtdickenmeßgerätes des Typs Leybold Inficon XTC ermittelt [Wilh94]. An Stelle des W(110)-Kristalls wurde ein zu Dickenschwingungen angeregter Quarz bedampft. Aus der durch den Massenzuwachs erzeugten Änderung der Eigenfrequenz des Systems läßt sich die Dicke der aufgedampften Schicht

bestimmen. Ergebnisse sind in Abbildung 3.16 dargestellt. Es ergibt sich für Kobalt eine Aufdampfrate von 0.7 \AA pro Minute, also entsteht eine Monolage in drei Minuten. Eine Abschätzung der Schichtdicke anhand von LEED-Bildern, in denen ab einer Bedeckung von 4 Monolagen die Satellitenspots verschwinden [Ocie90], führt zu einem ähnlichen Ergebnis.

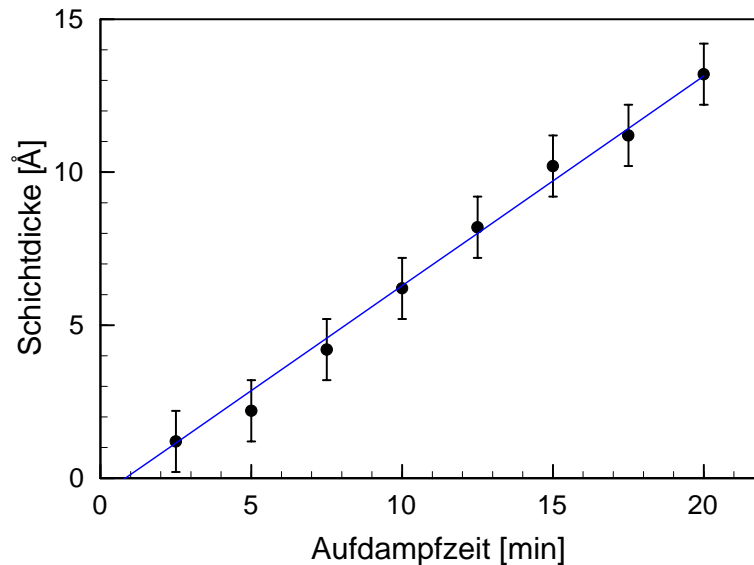


Abbildung 3.16:

Die Kobaltschichtdicke in Abhängigkeit von der Aufdampfzeit für einen Ionenstrom von 100 mA.

Es ergibt sich eine Aufdampfgeschwindigkeit von ca. 0.7 \AA pro Minute.

3.4.3 Das Magnetisieren der Schichten

Die leichte Magnetisierungsrichtung liegt für Fe(110)-Schichten mit weniger als 30 Atomlagen [Grad86, Kurz86, Elme91] und dünne Co(0001)-Schichten mit mehr als vier Lagen [Getz93a, Baum91] parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung des W(110)-Kristalls sowie für Ni(111)-Schichten [Farl91] entlang der $[001]$ -Richtung des W(110)-Kristalls.

Zur Magnetisierung der Schichten wird kurzzeitig ein starkes Magnetfeld, dessen Betrag im Bereich der Probe über 0.05 T liegt, erzeugt. Dazu wird ein durch die Entladung einer Kondensatorbatterie generierter Strompuls [Fran94] an das in Abbildung 3.12 dargestellte Spulenpaar angelegt (s. Kapitel 3.3). Es wird eine remanente, im Idealfall eindomänige Magnetisierung erreicht, deren Richtung über die Polarität des Strompulses wählbar ist.

Durch den Einbau eines Spulenpaares anstelle der einzelnen Magnetisierungsspule, die sich 4 cm oberhalb des Kristalls befand, hat sich die Homogenität des Magnetfeldes deutlich verbessert. So wurde die über die Probenfläche auftretende Feldstärkenänderung von ca. 50 % auf unter 10 % gesenkt. Durch die Reduzierung der zur Probe senkrecht stehenden Feldkomponente auf unter 10 % der Feldstärke in der Probenebene ist nun gewährleistet, daß es zu keiner Aufmagnetisierung senkrecht zur Probenebene kommt.

Durch eine genaue Bestimmung der in der Probenregion anliegenden Magnetisierungsfeldstärke [Förs99] ist es nun möglich, leichte Magnetisierungsrichtungen experimentell zu bestimmen.

Nach der Integration des MOKE-Aufbaus [Fran94, Graf97] in die Experimentierkammer ist es durch die genaue Kenntnis der Magnetisierungsfeldstärke möglich, mit Hilfe des transversalen magnetooptischen Kerr-Effektes die Hysteresekurve der Probe zu bestimmen.

3.4.4 Die Bedeckung mit Adsorbaten

Der Einlaß der Adsorbatgase in die Experimentierkammer geschieht mit Hilfe eines Feindosierventils (s. Abbildung 3.1), das ca. 35 cm von der Probe entfernt ist. Es kann von einer gleichmäßigen Verteilung des Gases in der Kammer ausgegangen werden.

Das Adsorbatangebot wird in Langmuir angegeben ($1 L = 10^{-6} \text{ torr} \cdot \text{s}$). Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurde ein Angebot von xL realisiert, indem der mit dem Ionisationsmanometer gemessene Totaldruck in der Experimentierkammer für $x \cdot 10 \text{ s}$ auf $1 \cdot 10^{-9} \text{ mbar}$ eingestellt wurde.

Dieses Verfahren ist mit einem großen Fehler behaftet, da die Zeit, in der das Ventil von Hand geöffnet bzw. geschlossen wird, nicht berücksichtigt werden kann. Außerdem ist die Dauer dieser Vorgänge schlecht reproduzierbar. Des Weiteren ist bei der Druckmessung mit Ionisationsröhren neben der vorhandenen Ungenauigkeit (Faktor 2) speziell in diesem Fall noch zu beachten, daß Sauerstoff zu einer Absenkung der Austrittsarbeit des in der Meßröhre verwendeten Wolframfilaments führt. Dies hat Schwankungen des Emissionsstromes der Röhre und damit Meßfehler zur Folge.

3.5 Der energieaufgelöste Elektronennachweis

Die durch die Deexcitationprozesse aus der Oberfläche emittierten Elektronen werden energieaufgelöst nachgewiesen. Dazu werden Elektronen mit Hilfe der in Abbildung 3.17 gezeigten Elektronenoptik mit einer Winkelauflösung von ca. $\pm 5^\circ$ erfaßt und beschleunigt. Der Abstand zwischen der Probe und der Eintrittsöffnung von E1, dem ersten der vier Optikelemente, beträgt 4 cm.

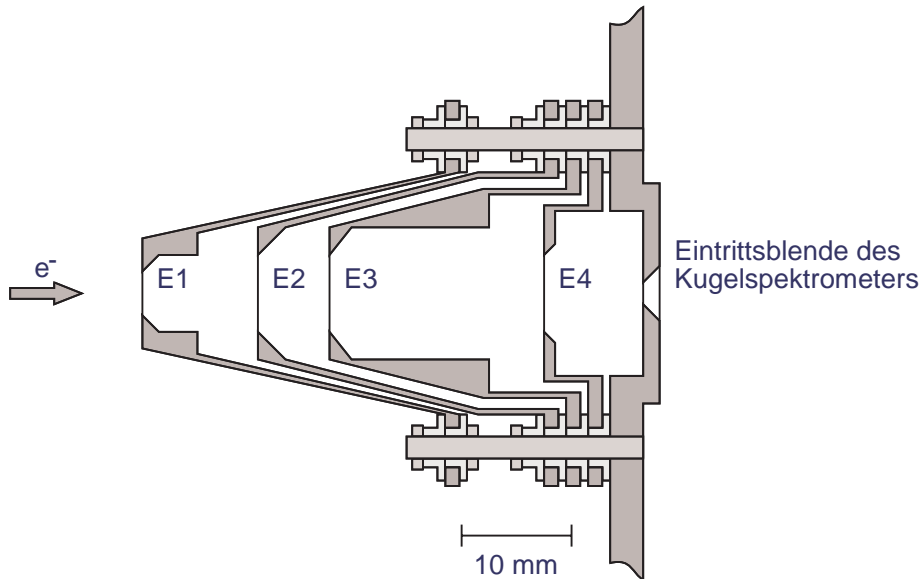


Abbildung 3.17:
Querschnitt der Elektroneneintrittsoptik (s. Abbildung 3.18)

Die Energieanalyse erfolgt mit einem 150° -Kugelspektrometer mit einem Sollkreisbahnradius von $R_0 = 10$ cm, der sich aus den Radien der Innen- bzw. Außenkugel von $R_i = 9$ cm und $R_a = 11$ cm ergibt (s. Abbildung 3.18). Die beiden Blenden am Ein- und Ausgang des Spektrometers legen mit ihrem Öffnungsdurchmesser von $d = 1.5$ mm die relative Energieauflösung fest (s. Gleichung 3.7) und dienen zur Optimierung des elektrischen Feldes an den Rändern des Spektrometers [Siek93]. Die nachgewiesene Sollenergie E_0 hängt von der Potentialdifferenz zwischen den beiden Kugelschalen $V_{diff} = V_i - V_a$ ab [Purc38]:

$$E_0 = \frac{V_{diff} \cdot e}{\frac{R_a}{R_i} - \frac{R_i}{R_a}} \quad (3.5)$$

Das Spektrometer wird so betrieben, daß die Sollenergie durch Veränderung von V_{diff} variiert wird. Die Potentiale für die Kugelschalen ergeben sich aus

$$V_i = \frac{E_0}{e} \cdot \frac{R_a}{R_i} \quad \text{und} \quad V_a = \frac{E_0}{e} \cdot \frac{R_i}{R_a} \quad (3.6)$$

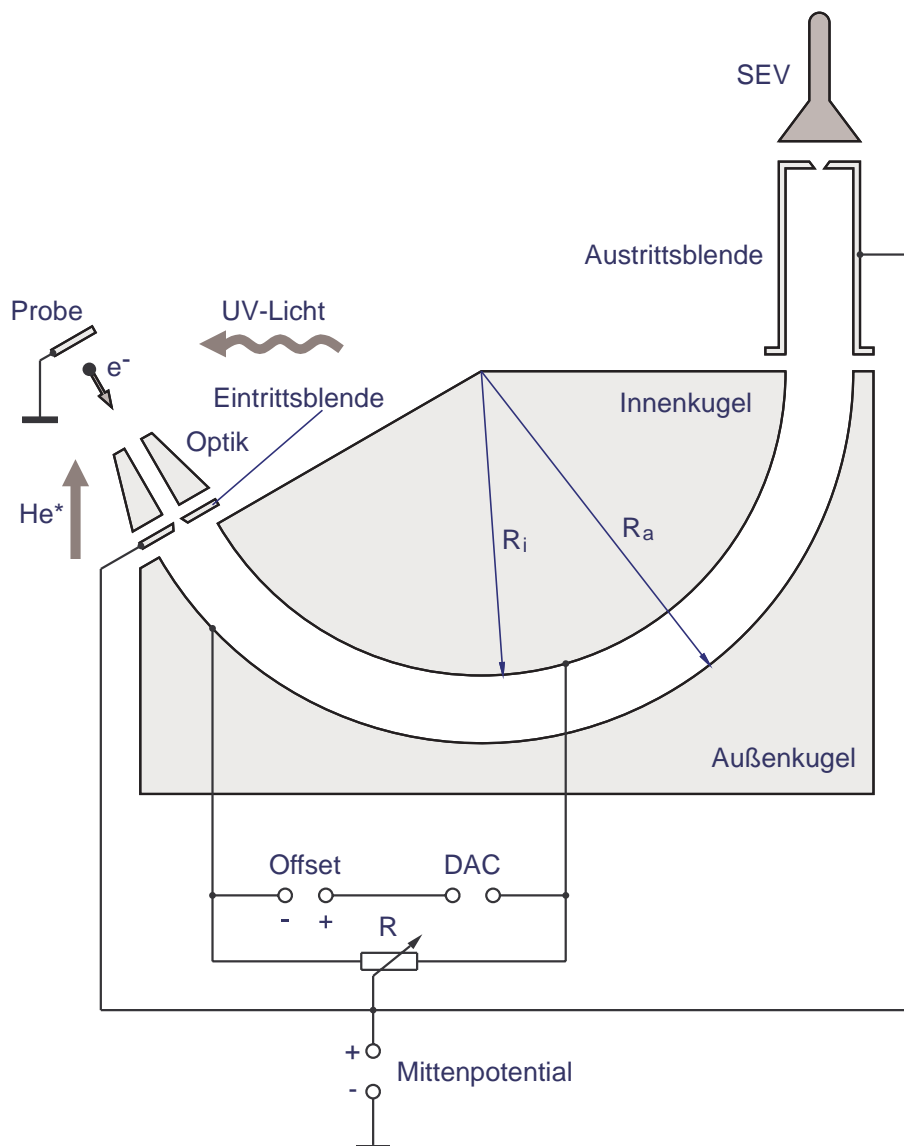


Abbildung 3.18:
Schematische Darstellung des Elektronennachweises

Das Mittenpotential wird z. B. auf 10V festgelegt. Elektronen, die bei Resonanzionisationsprozessen mit einer Maximalenergie von ca. 12 eV aus der Oberfläche austreten, haben dann also eine Durchflugsenergie von 22 eV. Die relative Energieauflösung für dieses Spektrometer wird in erster Linie durch die geometrischen Abmessungen bestimmt [Sevi72]:

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{d}{2 \cdot R_0} \quad (3.7)$$

Andere Einflüsse, wie z. B. die Strahldivergenz der einfallenden Elektronen oder Abbildungsfehler, sind deutlich kleiner und werden vernachlässigt. Die absolute Energieauflösung bei einer Durchflugsenergie von 22 eV beträgt dann $\Delta E = 165 \text{ meV}$.

Nach Austritt aus dem Kugelspektrometer werden die Elektronen in einem Einkanal-Sekundärelektronenvervielfacher (Philips, Typ X919BL) nachgewiesen. Die dabei erzeugten Strompulse werden mit Hilfe eines Kondensators in Spannungspulse gewandelt, elektronisch aufbereitet und gezählt. Die Nachweiselektronik und auch die Potentialversorgung des Kugelspektrometers werden von einem PC gesteuert (s. Abbildung 3.19), so daß eine vollautomatische Aufnahme von Spektren möglich ist [Eger94].

Für ein Spektrum werden dabei für 140 Energiewerte, die einen Abstand von 120 meV aufweisen, Zählraten bestimmt. Die Meßzeit pro eingestellter Durchflugsenergie betrug bei allen in dieser Arbeit vorgestellten Messungen 0.4 Sekunden.

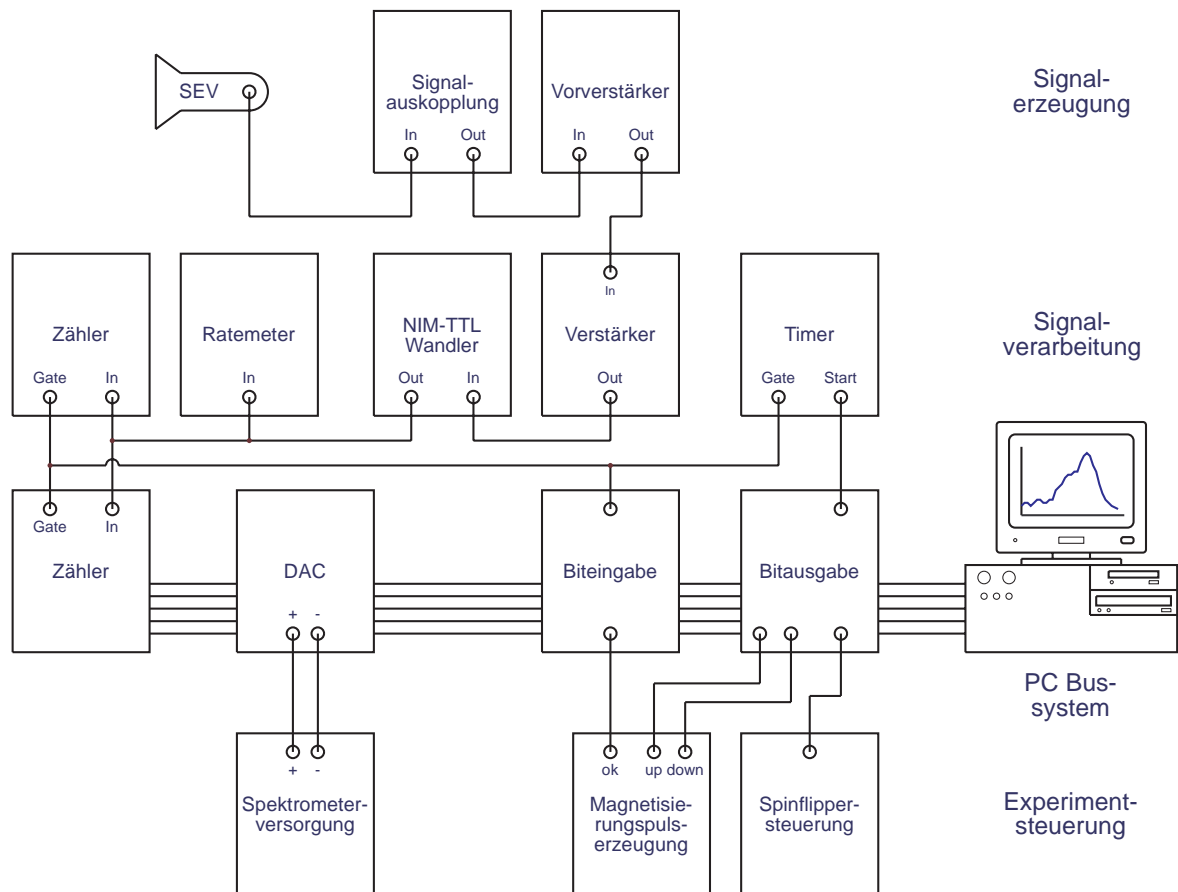


Abbildung 3.19:
Blockschaltbild der Steuerungs- und Nachweiselektronik

3.6 Die experimentelle Bestimmung der Asymmetrie

Um die in Kapitel 2.2.3 beschriebene Asymmetrie zu bestimmen, werden bei entweder paralleler oder antiparalleler Ausrichtung von Atomspin und Schichtmagnetisierung Spektren aufgenommen. Da sowohl die Magnetisierungsrichtung als auch die Atomspinrichtung variiert werden können, gibt es also vier mögliche Spinkonstellationen. Zur statistischen Kontrolle bzw. zur Erkennung etwaiger apparativ bedingter Asymmetrien wird während einer Asymmetriemessung jede der vier Konstellationen viermal in der in der Tabelle 3.5 angegebenen Reihenfolge eingestellt, so daß insgesamt sechzehn Einzelspektren aufgenommen werden.

Einzelspektrum Nummer	magnetische Schicht Majoritätsspin	Atomstrahl		Bezeichnung
		Spinflipper	He*- Spin	
1	↓	noFlip	↑	$s_1^{\uparrow\downarrow}$
2	↓	Flip	↓	$s_1^{\downarrow\downarrow}$
3	↓	Flip	↓	$s_2^{\downarrow\downarrow}$
4	↓	noFlip	↑	$s_2^{\uparrow\downarrow}$
5	↑	noFlip	↑	$s_1^{\uparrow\uparrow}$
6	↑	Flip	↓	$s_1^{\uparrow\downarrow}$
7	↑	Flip	↓	$s_2^{\uparrow\downarrow}$
8	↑	noFlip	↑	$s_2^{\uparrow\uparrow}$
9	↑	noFlip	↑	$s_3^{\uparrow\uparrow}$
10	↑	Flip	↓	$s_3^{\uparrow\downarrow}$
11	↑	Flip	↓	$s_4^{\uparrow\downarrow}$
12	↑	noFlip	↑	$s_4^{\uparrow\uparrow}$
13	↓	noFlip	↑	$s_3^{\uparrow\downarrow}$
14	↓	Flip	↓	$s_3^{\downarrow\downarrow}$
15	↓	Flip	↓	$s_4^{\downarrow\downarrow}$
16	↓	noFlip	↑	$s_4^{\uparrow\downarrow}$

Tabelle 3.5:

Die Reihenfolge der sechzehn Einzelmessungen mit unterschiedlichen Spinkonstellationen während einer Asymmetriemessung.

Sowohl der Spinflipper als auch die Magnetisierungsspule sind durch ferngesteuerte Relais schaltbar (s. Abbildung 3.19), so daß die jeweils benötigten Richtungen von Atomspin und Magnetisierung computergesteuert eingestellt werden können. So ist mit Hilfe eines Meßprogramms [Eger94] die automatische Aufnahme von

aus beliebig vielen Einzelmessungen bestehenden Asymmetrieserien möglich. Die Meßzeit für einen Zyklus aus sechzehn Einzelspektren beträgt inklusive der Verstellzeiten für die Spin- bzw. Magnetfeldrichtungen ca. 20 min.

Die sechzehn Einzelspektren einer Asymmetriemessung können nun für jede der 140 nachgewiesenen Energien zu Zählraten für parallele bzw. antiparallele Spinorientierung zusammengefaßt werden:

$$N^{\uparrow\uparrow} = S^{\uparrow\uparrow} + S^{\downarrow\downarrow}, \quad N^{\uparrow\downarrow} = S^{\uparrow\downarrow} + S^{\downarrow\uparrow}. \quad (3.8)$$

mit

$$S^{\uparrow\uparrow} = \sum_{i=1}^4 s_i^{\uparrow\uparrow}; \quad S^{\downarrow\downarrow} = \sum_{i=1}^4 s_i^{\downarrow\downarrow}; \quad S^{\uparrow\downarrow} = \sum_{i=1}^4 s_i^{\uparrow\downarrow}; \quad S^{\downarrow\uparrow} = \sum_{i=1}^4 s_i^{\downarrow\uparrow}. \quad (3.9)$$

Daraus ergibt sich nach der Wichtung der Rohasymmetrie A_r mit der Atomstrahlpolarisation P_{He^*} die Asymmetrie aus (s. Gleichung 2.9)

$$A = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot A_r = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{N^{\uparrow\uparrow} - N^{\uparrow\downarrow}}{N^{\uparrow\uparrow} + N^{\uparrow\downarrow}}. \quad (3.10)$$

Unter der Voraussetzung, daß die Atomstrahlpolarisation zeitlich konstant ist, beträgt der statistische Fehler der Asymmetrie dann

$$\Delta A = \frac{2}{P_{He^*}} \cdot \frac{\sqrt{N^{\uparrow\uparrow}{}^2 N^{\uparrow\downarrow} + N^{\uparrow\downarrow}{}^2 N^{\uparrow\uparrow}}}{(N^{\uparrow\uparrow} + N^{\uparrow\downarrow})^2} \quad (3.11)$$

Die in Gleichung 3.8 durchgeführte Zusammenfassung setzt voraus, daß Atomstrahlpolarisation und Magnetisierungsrichtung vollständig umgekehrt werden. Nur dann sind $S^{\uparrow\uparrow}$ und $S^{\downarrow\downarrow}$ bzw. $S^{\uparrow\downarrow}$ und $S^{\downarrow\uparrow}$ wirklich gleichwertig. Sichergestellt wird das für die Atomstrahlpolarisation durch die Effizienz des Spinflippers von 100% (s. Kapitel 3.1.3 und Kapitel 4.1, Abbildung 4.2b) sowie durch das mehrmalige Anlegen eines Magnetfeldes, dessen Stärke ausreicht, die Probe eindomänig und remanent zu magnetisieren (s. Kapitel 3.4.3). Ob alle vier möglichen Spin-konstellationen im Experiment fehlerfrei eingestellt werden, kann durch die Berechnung von zusätzlichen Falschasymmetrien kontrolliert werden. Ergeben sich bei der Simulation eines unpolarisierten Atomstrahls durch die Bildung des Ausdrucks

$$A_{UA} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{(S^{\uparrow\uparrow} + S^{\downarrow\downarrow}) - (S^{\uparrow\downarrow} + S^{\downarrow\uparrow})}{S^{\uparrow\uparrow} + S^{\downarrow\downarrow} + S^{\uparrow\downarrow} + S^{\downarrow\uparrow}} \quad (3.12)$$

bzw. einer unmagnetischen Schicht durch Bildung von

$$A_{US} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{(S^{\uparrow\uparrow} + S^{\uparrow\downarrow}) - (S^{\downarrow\downarrow} + S^{\downarrow\uparrow})}{S^{\uparrow\uparrow} + S^{\downarrow\downarrow} + S^{\uparrow\downarrow} + S^{\downarrow\uparrow}} \quad (3.13)$$

Asymmetrien, die im Rahmen des statistischen Fehlers bei Null liegen, können apparative Unregelmäßigkeiten bei der Präparation des Atomspins bzw. bei der Magnetisierung der Schichten ausgeschlossen werden.

Des weiteren können Asymmetrien bei fester Schichtmagnetisierung

$$A_{Su} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{S^{\uparrow} - S^{\downarrow}}{S^{\uparrow} + S^{\downarrow}} \quad \text{und} \quad A_{Sd} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{S^{\uparrow} - S^{\downarrow}}{S^{\uparrow} + S^{\downarrow}} \quad (3.14)$$

sowie bei festem Atomspin

$$A_{Au} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{S^{\uparrow} - S^{\downarrow}}{S^{\uparrow} + S^{\downarrow}} \quad \text{und} \quad A_{Ad} = \frac{1}{P_{He^*}} \cdot \frac{S^{\uparrow} - S^{\downarrow}}{S^{\uparrow} + S^{\downarrow}} \quad (3.15)$$

bestimmt werden, die bei Fehlen apparativ bedingter Asymmetrien jeweils übereinstimmen müssen.

Zur Auswertung von Asymmetrieserien werden zuerst die entsprechenden Spektren der einzelnen Zyklen addiert. So setzt sich z. B. Spektrum s_1^{\uparrow} (s. Tabelle 3.5) aus der Summe der jeweils ersten Spektren aller Durchgänge zusammen. Aus den resultierenden sechzehn Zählraten wird dann die Asymmetrie bestimmt. Alternativ können mehrere Asymmetrien zusammengefaßt werden, indem der mit dem statistischen Fehler (s. Gleichung 3.11) gewichtete Mittelwert gebildet wird.

Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Programm **RMS**, mit dem die Auswertung der Messungen erfolgt, wird in Anhang A.4 beschrieben. Es stellt u. a. Routinen zur Bestimmung der Asymmetrie sowie aller oben vorgestellten Falschasymmetrien zur Verfügung.

Beiträge zum systematischen Fehler der Asymmetrie ergeben sich u. a. aus dem Fehler bei der Bestimmung der Atomstrahlpolarisation sowie aus einer nicht parallelen Ausrichtung der leichten Magnetisierungsrichtung der Schicht zu der Führungsfeldrichtung des Atomstrahls.

4 SPMDS-Messungen an ferromagnetischen Schichten und Diskussion der Ergebnisse

4.1 Messungen am unbedeckten W(110)-Kristall

Zu Beginn jeder Messung ist es erforderlich, den Substratkristall zu reinigen (s. Kapitel 3.4.1). Zur Charakterisierung der Oberflächen steht ein kommerzielles LEED-System des Typs RVL 640 der Firma Vacuum Generators zur Verfügung [Micr94]. Ein scharfes, kontrastreiches LEED-Bild zeigt dabei eine fremdatomfreie Oberfläche an.

Im Laufe unserer Messungen hat sich allerdings gezeigt, daß das beste Kriterium für einen sauberen Kristall das MD-Spektrum, also die Intensität der emittierten Elektronen in Abhängigkeit von ihrer kinetischen Energie, ist. Abbildung 4.1 zeigt eine Serie von MD-Spektren, die während des Reinigens zwischen den Flashvorgängen (s. Kapitel 3.4.1) aufgenommen worden sind. Im ungeflashten Zustand ist die für W(110) typische Struktur im Bereich von $E_{kin} = 8 - 11$ eV, die bei UPS der Emission aus Σ_1 - und Σ_3 -Bändern zugeordnet wird [Getz93a], überhaupt nicht zu erkennen. Allerdings ist ein sehr großer Anteil an niederenergetischen Elektronen vorhanden, der auf ungeordnet adsorbierte Restgasatome hinweist. Schon nach dem ersten Flash geht das Spektrum in die typische Form über. Mit jedem weiteren Flash nimmt der für W(110) charakteristische Peak zu, wogegen der Anteil der niederenergetischen Elektronen immer weiter verschwindet. Nach dem fünften Flash sind dann im MD-Spektrum keine Veränderungen mehr zu erkennen. In der entsprechenden Serie von LEED-Bildern ist dagegen schon nach dem ersten Flash kein Unterschied mehr sichtbar [Wilh94].

Bei allen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurden die ferromagnetischen Schichten erst dann auf den W(110)-Kristall aufgedampft, wenn das MD-Spektrum dem in Abbildung 4.2 a) gezeigten Verlauf für die reine W(110)-Oberfläche entsprach.

Eine weitere Bestätigung für die Empfindlichkeit der MD-Spektroskopie zeigte sich an der Tatsache, daß schon kleinste Mengen Sauerstoff, die durch ein defektes Ventil in die Kammer gelangt waren, zu einer sauerstoffinduzierten Struktur bei einer kinetischen Energie von $E_{kin} = 5.5$ eV (s. Kapitel 4.3) geführt haben. Diese kleine Menge Sauerstoff konnte weder mit dem Quadrupol-Massenspektrometer noch mit dem Ionisationsmanometer sichtbar gemacht werden. Auch haben sich unter sonst gleichen Betriebsbedingungen in UP-Spektren keine sauerstoffinduzierten Strukturen gezeigt.

In Abbildung 4.2 sind die Ergebnisse von spinpolarisierten MD-Messungen an W(110) gezeigt. Aufgetragen in Teilbild a) sind die zur Minoritätsspindichte proportionale Zählrate N^{\uparrow} (Minoritätskanal) und die zur Majoritätsspindichte proportionale Zählrate N^{\downarrow} (Majoritätskanal) (s. Kapitel 2.2.3 und Gleichung 3.8, Kapitel 3.6) über der kinetischen Energie. Diese spinaufgelösten MD-Spektren stimmen für unmagnetisches Wolfram praktisch überein. In Abbildung 4.2 b) ist die nach Gleichung 3.10 aus N^{\uparrow} und N^{\downarrow} berechnete Asymmetrie in Abhängigkeit

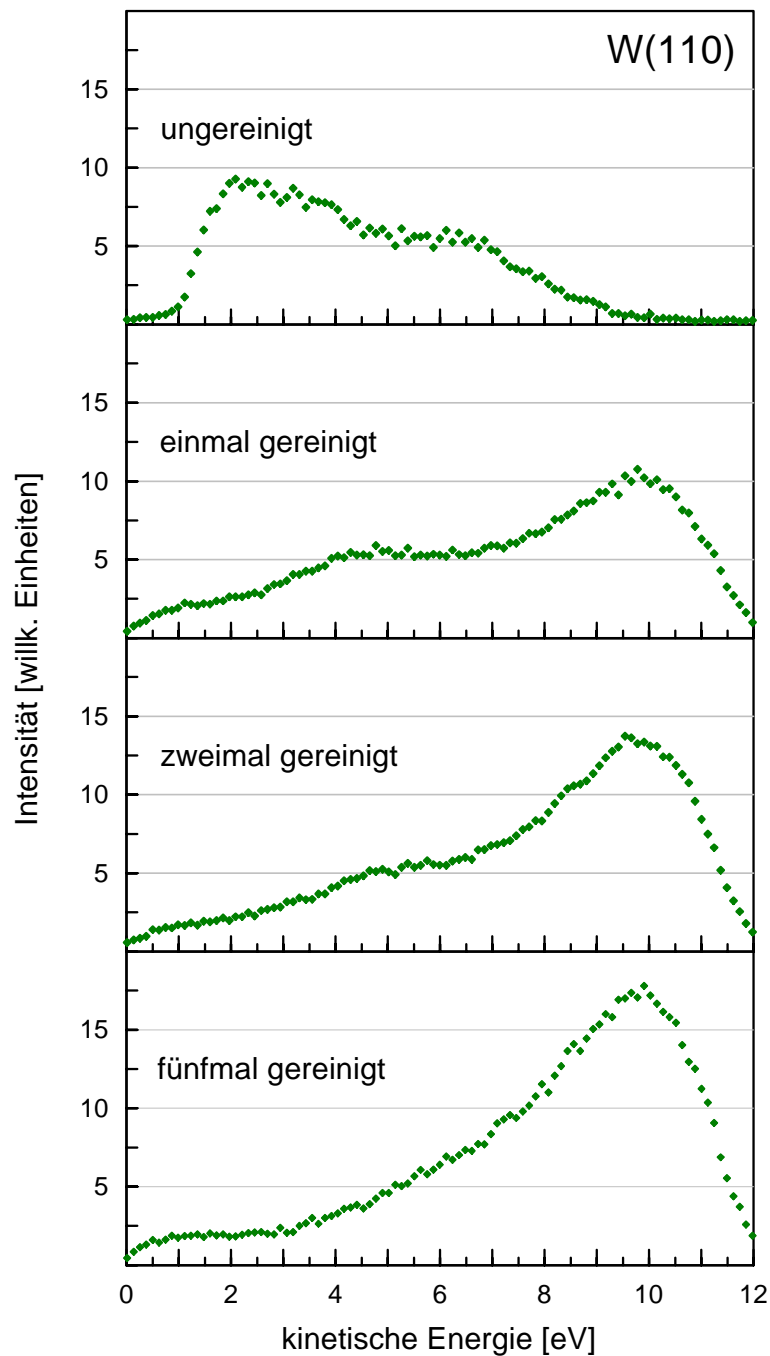


Abbildung 4.1: Typische MD-Spektren während der Reinigung des W(110)-Kristalls. Aufgetragen sind die Elektronenzählraten in Abhängigkeit von E_{kin} , aufgenommen zwischen den einzelnen Flashprozeduren eines Reinigungsvorganges (s. Kapitel 3.4.1).

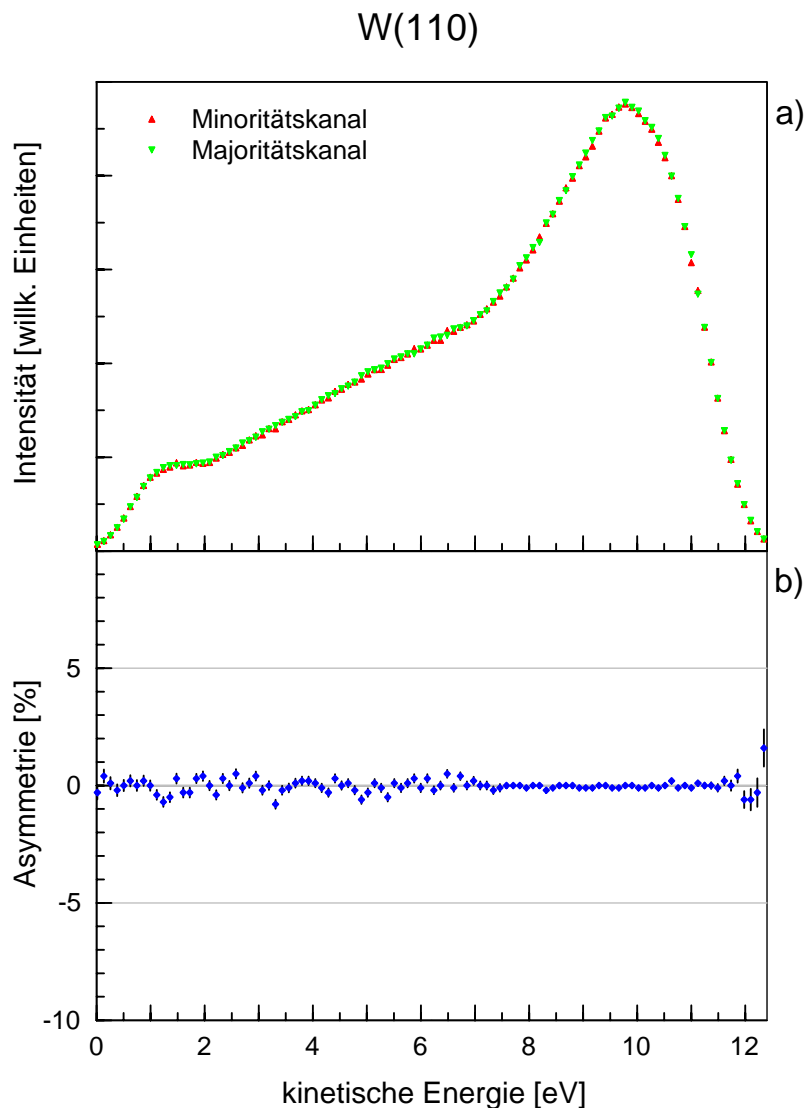


Abbildung 4.2:

Spinaufgelöste MD-Spektren (a) und Asymmetrie (b) von der gereinigten W(110)-Oberfläche.

Die in Abhängigkeit von E_{kin} abgebildeten Zählraten N^{\uparrow} (Minoritätskanal) und N^{\downarrow} (Majoritätskanal) liegen für die unmagnetische W(110)-Schicht praktisch übereinander. Die Asymmetrie von Null belegt die Spinflip-pereffizienz von 100% (s. Kapitel 3.6).

von der kinetischen Energie dargestellt, die mit der gleichen Methode bestimmt wurde, die auch für magnetische Systeme verwendet wird (s. Kapitel 3.6). Aus der Tatsache, daß die Asymmetrie an dieser unmagnetischen Schicht im gesamten Energiebereich praktisch Null ergibt, zeigt sich, daß der Atomstrahl in den bei-

den Einstellungen Flip und noFlip (s. Kapitel 3.1.3) im Streuzentrum identische Intensitäten besitzt, was die für die experimentelle Bestimmung der Asymmetrie notwendige Spinflippereffizienz von 100% bestätigt (s. Kapitel 3.6).

4.2 Messungen an Fe(110)-, Co(0001)- und Ni(111)-Schichten

Alle Fe-, Co- und Ni-Schichten wurden zu Beginn einer Messung auf den zuvor flash-gereinigten W(110)-Kristall bei ca. 25° C aufgedampft (s. Kapitel 4.1), die Schichtdicke betrug jeweils 10 Monolagen. Die Eisenschichten wurden unmittelbar nach dem Aufdampfen zwei Mal für 20 s getempert. Das Aufwachsen der verschiedenen Materialien auf den W(110)-Kristall und die jeweils entstehende Gitterstruktur wird in Kapitel 3.4.2 und Anhang A.2 beschrieben.

Alle Spektren der jeweiligen Serien wurden bei identischen Einstellungen des Elektronenspektrometers aufgenommen, so daß die Ergebnisse von verschiedenen Messungen zusammengefaßt werden können. Das Mittenpotential betrug bei den Messungen an Eisen und Nickel 18.3 V, was bei der maximalen Durchflugsenergie von 30 eV für die von der Fermikante emittierten Elektronen zu einer Energieauflösung von $\Delta E = 0.22$ eV führt (s. Kapitel 3.5). Für die Messungen an Kobalt war diese Energieauflösung 0.16 eV eingestellt (Mittenpotential = 10 V).

4.2.1 Eisen

4.2.1.1 SPMDS-Ergebnisse und Vergleich mit UPS

Wie vor allen metallischen Oberflächen findet die Deexcitation der He(2^3S)-Atome durch eine Resonanzionisation statt, der eine Augerneutralisation nachfolgt (RI+AN, s. Kapitel 2.2.2.2).

In Abbildung 4.3 a) sind spinaufgelöste MD-Spektren von Eisen dargestellt. Aufgetragen sind die Zählraten N^{II} (Minoritätskanal) und N^{I} (Majoritätskanal) über der kinetischen Energie. Die Strukturen im Bereich von $E_{kin} = 9 - 11$ eV werden den 3d-Bändern des Eisens zugeordnet.

Wie in Kapitel 2.2.2.2 beschrieben, unterscheidet sich die effektive Energie des 1s-Niveaus der Heliumatome vor der Oberfläche E_{1s}^{eff} von der Energie E_{1s} eines freien Heliumatoms. Durch die Wirkung des Bildpotentials ist E_{1s}^{eff} vom Abstand zwischen Atom und Oberfläche abhängig. Aus der unterschiedlichen energetischen Lage der zu den 3d-Bändern gehörigen Strukturen in UP- und MD-Spektren läßt sich E_{1s}^{eff} aber bestimmen. Dazu wird in Abbildung 4.4 jeweils ein UP- und ein MD-Spektrum, die unmittelbar nacheinander an der gleichen Eisenschicht aufgenommen worden sind, verglichen. Für die in Gleichung 2.8 eingeführte Größe ΔE_{kin}^{max} erhält man einen Wert von 3.8 eV. Aus Gleichung 2.8 ergibt sich dann mit $\Phi = 4.8$ eV [Yu76]:

$$E_{1s}^{eff} = 21.2 \text{ eV} - 3.8 \text{ eV} + 4.8 \text{ eV} = 22.2 \text{ eV} . \quad (4.1)$$

Die Verschiebung von 2.4 eV gegenüber der Bindungsenergie des 1s-Zustandes des freien Heliumatoms von $E_{1s} = 24.6$ eV liegt in dem Bereich, der auch vor Pd(111) (2.3 eV) oder W(poly) (2.2 eV) gefunden wurde [Sess87b].

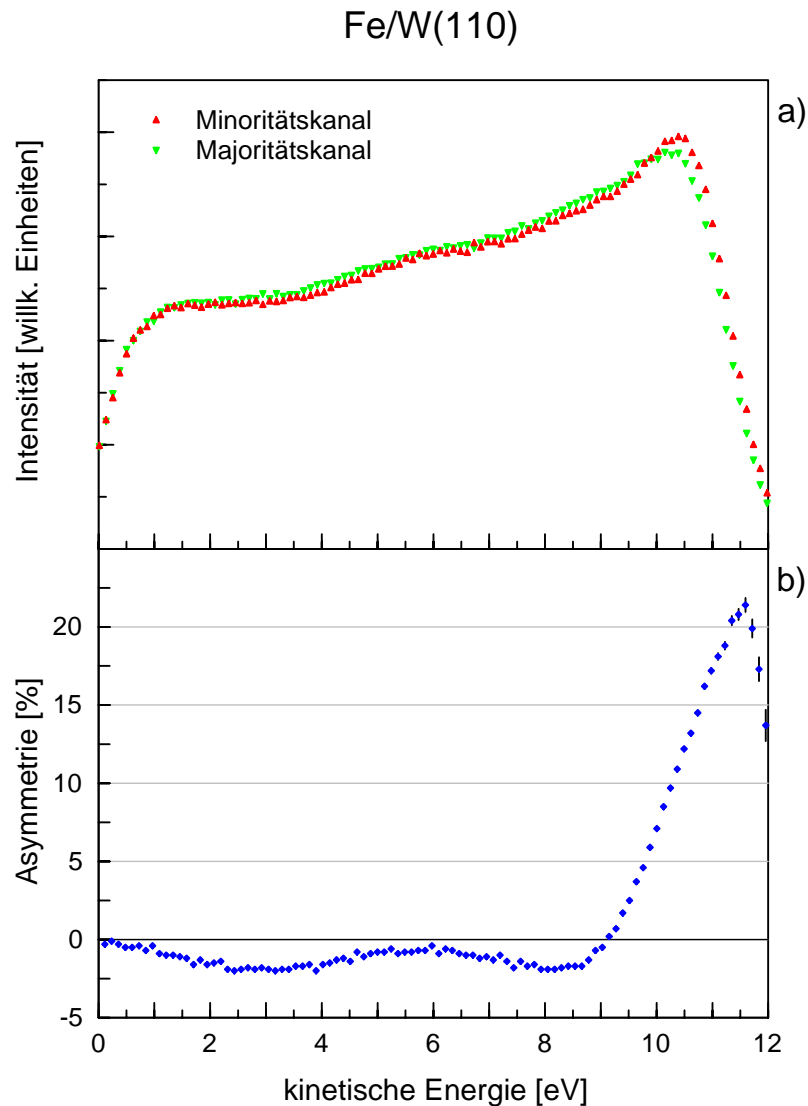


Abbildung 4.3:

Spinaufgelöste MD-Spektren und die zugehörige Asymmetrie von Eisen auf W(110).

Abgebildet in Abhängigkeit von E_{kin} sind die Zählraten N^{\uparrow} (Minoritätskanal) und N^{\downarrow} (Majoritätskanal) (a) sowie die Asymmetrie (b), die aus an neun identisch präparierten Schichten aufgenommenen Spektren berechnet wurde. Magnetisiert wurde in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung.

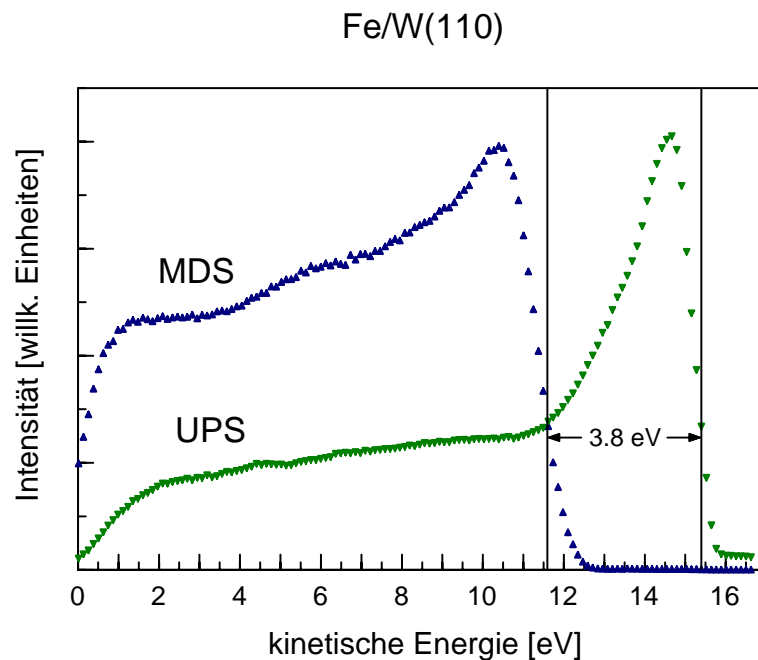


Abbildung 4.4:

Bestimmung von ΔE_{kin}^{max} aus dem Vergleich von unmittelbar nacheinander an der gleichen Eisenschicht aufgenommenen MD- und UP-Spektren.

In Abbildung 4.3 b) ist die Asymmetrie von unbedecktem Eisen dargestellt. Ein-gezeichnet ist der statistische Fehler. Wie in Kapitel 2.2.3 beschrieben, zeigt das positive Vorzeichen dieser Asymmetrie im Bereich der hochenergetischen Elektro-nen, die von der Fermikante stammen, an, daß in der Übergangsregion vom Metall zum Vakuum Minoritätselektronen überwiegen.

Dieses Resultat stimmt mit anderen SPMDS-Messungen an Eisenschichten über-ein, die an der Rice University, Houston, an Fe/GaAs(110) [Hamm92] sowie an der Universität Genua an Fe/Ag(100) [Salv97a] durchgeführt wurden.

4.2.1.2 Vergleich mit theoretischen Berechnungen und Diskussion

Das Vorzeichen der Asymmetrie ist auch in Übereinstimmung mit einer Rech-nung nach der FLAPW-Methode (vgl. Kapitel 2.1.1) für eine Fe(110)-Schicht [Wu92, Wu93]. Die errechneten spinaufgelösten Zustandsdichten (DOS, s. Kapitel A.3) für jede einzelne Lage Fe(C) bis Fe(S) und die Übergangsregion vom Metall zum Vaku-um V (s. Abbildung 2.1) sind in Abbildung 4.5 gezeigt. Für die inneren Lagen (Fe(C) - Fe(S-1)) wird hier im Energiebereich um E_F eine Dominanz von Majoritätselek-tronen vorhergesagt. Für die äußeren Schichten kommt es allerdings aufgrund der

Verringerung der Koordinationszahl zu einer Verengung des d-Bandes [Free87]. Die daraus resultierenden Bandverschiebungen führen für Eisen – wie auch für Kobalt und Nickel [Wu92] – dazu, daß sich in der Nähe von E_F für die Oberfläche Fe(S) und die Vakuumregion V ein Überschuß an Minoritätselektronen ergibt. Dieses theoretische Ergebnis wird durch die SPMDS-Messungen bestätigt.

Neben der totalen Spindichte $m(\vec{r})$ kann mit der FLAPW-Methode auch die energieaufgelöste Spindichte an der Fermikante $m(\vec{r}, E_F)$ lagenweise berechnet werden (Definitionen s. Kapitel A.3). In Abbildung 4.6 ist das Ergebnis für ein Ener-

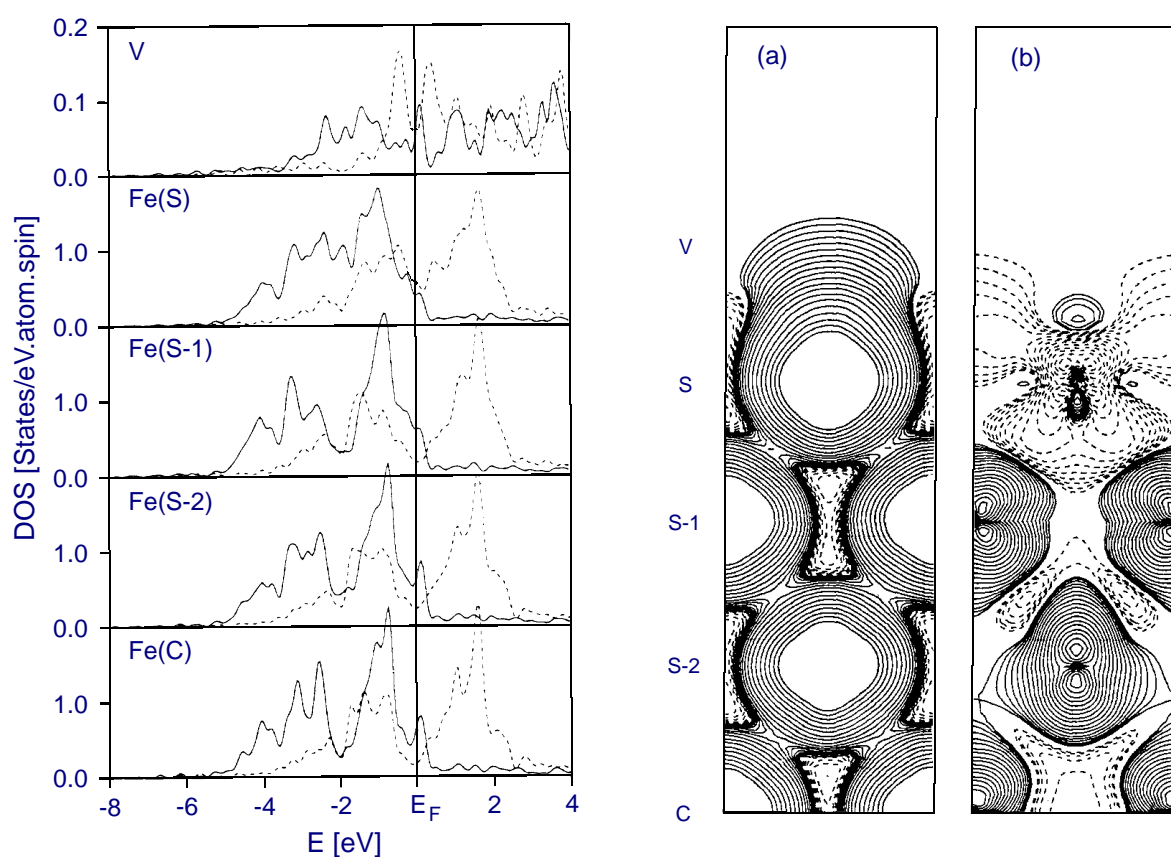


Abbildung 4.5:

Nach der FLAPW-Methode berechnete Zustandsdichten für eine Fe(110)-Schicht aus sieben Lagen (abgebildet ist nur die obere Hälfte, s. Kapitel 2.1.1) und den Übergang zum Vakuum (V).

— Majoritätselektronen,
 - - - Minoritätselektronen.

(nach [Wu92])

Abbildung 4.6:

Verteilung der totalen Spindichte $m(\vec{r})$ (a) und der Spindichte $m(\vec{r}, E_F)$ von Zuständen bei E_F (b) der Fe(110)-Schicht aus Abbildung 4.5. Die Schnittebene wird von der [001]- und der [110]-Richtung aufgespannt.

— Majoritätsüberschuß,
 - - - Minoritätsüberschuß. ([Wu92])

giefenster von 0.25 eV Breite unterhalb von E_F dargestellt. Der abgebildete Bereich entspricht jeweils der oberen Hälfte der Einheitszelle des slab-Modells (s. Abbildung 2.1). Da nur die Wellenfunktionen von Zuständen aus diesem Energiefenster weiter als 2 Å in das Vakuum reichen [Tsuk91], gibt es bei Untersuchungsmethoden, bei denen die Wechselwirkung in einem größeren Abstand als 2 Å vor der Oberfläche stattfindet (SPMDS, SPUPS), keine wesentlichen Beiträge von energetisch tiefer liegenden Zuständen. So ergibt sich in Übereinstimmung mit den experimentellen SPMDS-Resultaten für $m(\vec{r}, E_F)$ (s. Abbildung 4.6 (b)) an der Oberfläche S und in der Übergangsregion zum Vakuum V eine Dominanz des Minoritätsspins (gestrichelte Linien).

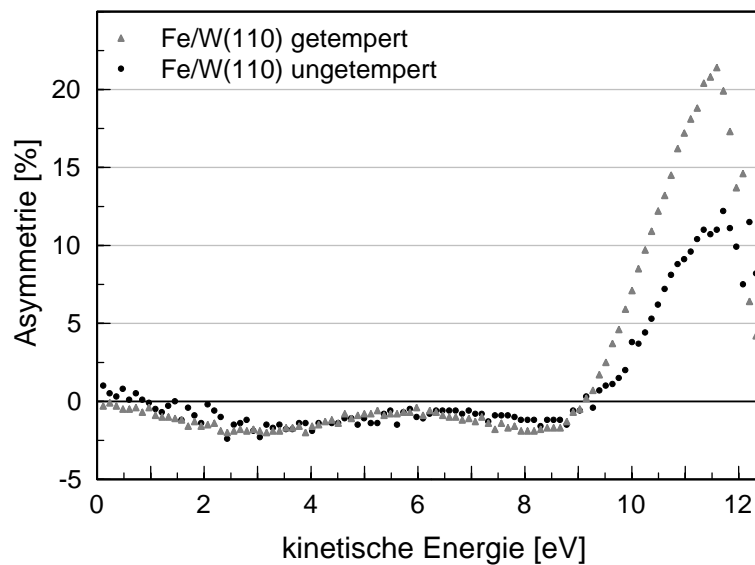
An einem identisch präparierten System sind an der Universität Bielefeld spinpolarisierte Photoemissionsspektroskopiemessungen (SPUPS) durchgeführt worden [Getz93a]. Anders als mit SPMDS wurde dabei für Fe/W(110) das Überwiegen von Majoritätselektronen gefunden [Getz93c]. Dieser Majoritätsüberschuß zeigt an, daß die SPUPS-Ergebnisse neben der Wechselwirkung mit der obersten Atomlage auch durch die Wechselwirkung mit tiefer liegenden Lagen, aus denen ein Teil der nachgewiesenen Elektronen stammt (s. Kapitel 2.2.1), bestimmt sind. Außerdem ist bei der SPUPS die Beschränkung auf Zustände in der Nähe der Fermienergie nicht gegeben, so daß die SPUPS-Ergebnisse besser durch die in Abbildung 4.6 (a) angegebene energieintegrierte Spindichte $m(\vec{r})$ erklärt werden.

4.2.1.3 Einfluß der Schichtqualität auf die experimentellen Ergebnisse

Der absolute Wert der Asymmetrie hängt stark von der experimentell erreichten kristallographischen Qualität der Eisenschichten ab. Je weitreichender die (110)-Struktur ausgeprägt ist, desto größer wird die gemessene Asymmetrie. In Abbildung 4.7 ist der Asymmetrie einer getemperten Schicht die einer bei Raumtemperatur aufgedampften, ungetemperten gegenübergestellt. Es zeigt sich, daß sich durch die durch das Tempern erreichte Neuordnung der Schicht (vgl. Kapitel A.2) die Asymmetrie von 13% auf 22% erhöht. Schichten mit weitreichender kristallographischer Ordnung lassen sich also besser magnetisieren.

Mit diesem Ergebnis lassen sich die niedrigeren Asymmetriewerte erklären, die in den beiden anderen Gruppen (s. Kapitel 4.2.1.1) gemessen wurden.

Die Messungen der Rice-Gruppe ergeben eine maximale Asymmetrie von ca. 15%. Die dort verwendeten Schichten wurden nicht wie im hier durchgeführten Experiment unmittelbar vor der Messung im UHV präpariert, sondern in einer externen Apparatur. Nach dem Einbau wurde die Eisenschicht dann vor jeder Messung durch Sputtern mit Ne-Ionen gereinigt und getempert, im Augerspektrum zeigten sich allerdings noch Verunreinigungen aus Kohlenstoff und Sauerstoff [Hamm92]. In der Gruppe an der Universität Genua wird Eisen auf Silber aufgedampft, das auf 120 K gekühlt wird. Dabei zeigt sich, daß ca. 5% Silber an die Oberfläche segregiert [Cane96]. Schon das Erwärmen dieser Schicht auf 300 K erhöht diesen Prozentsatz deutlich [Salv97b], so daß ein Ausheilen dieser Systeme nicht möglich ist. An diesen Fe(100)-Schichten wurde eine maximale Asymmetrie von nur ca. 5% gemessen [Salv97a].

**Abbildung 4.7:**

Einfluß des Temperns auf die Asymmetrie von Fe/W(110).

Das zweimalige, kurzzeitige Erhitzen der Schicht auf ca. 200° C unmittelbar nach dem Aufdampfen führt zu einer deutlich größeren Asymmetrie.

Eine theoretische Vorhersage des absoluten Asymmetriewertes, der mit SPMDS an Eisen gemessen werden kann, existiert nicht. Eine solche Vorhersage würde die Kenntnis der abstandsabhängigen Matrixelemente der Augerneutralisation voraussetzen [Penn90]. Eine Abschätzung der Asymmetrie aus den theoretischen Zustandsdichten aus Abbildung 4.5 ergibt unter Berücksichtigung der experimentellen Energieauflösung einen Wert von ca. 30 % [Stein97].

4.2.1.4 Entfaltung der MD-Spektren und Vergleich mit UPS

Da bei der Augerneutralisation zwei Elektronen aus der Oberfläche beteiligt sind, gibt es keinen direkten Zusammenhang zwischen den aufgenommenen Elektronenspektren und der Bandstruktur der Schicht. Im Gegensatz zu UP-Spektren setzen sich die AN-Spektren aus Faltungen der Zustandsdichtefunktionen der am AN-Prozeß beteiligten Schichtelektronen zusammen (s. Kapitel 2.2.2.2).

In Abbildung 4.8 sind erste entfaltete Spektren dargestellt, die mit Hilfe eines Entfaltungsverfahrens, das auf dem in Kapitel 2.2.3 erläuterten Ansatz basiert, aus den gemessenen SPMD-Spektren bestimmt wurden [Förs99]. In Abbildung 4.8 b) wird das spinintegrierte, entfaltete Spektrum mit einem an einem identisch präparierten System aufgenommenen UP-Spektrum verglichen. Abbildung 4.8 a) zeigt

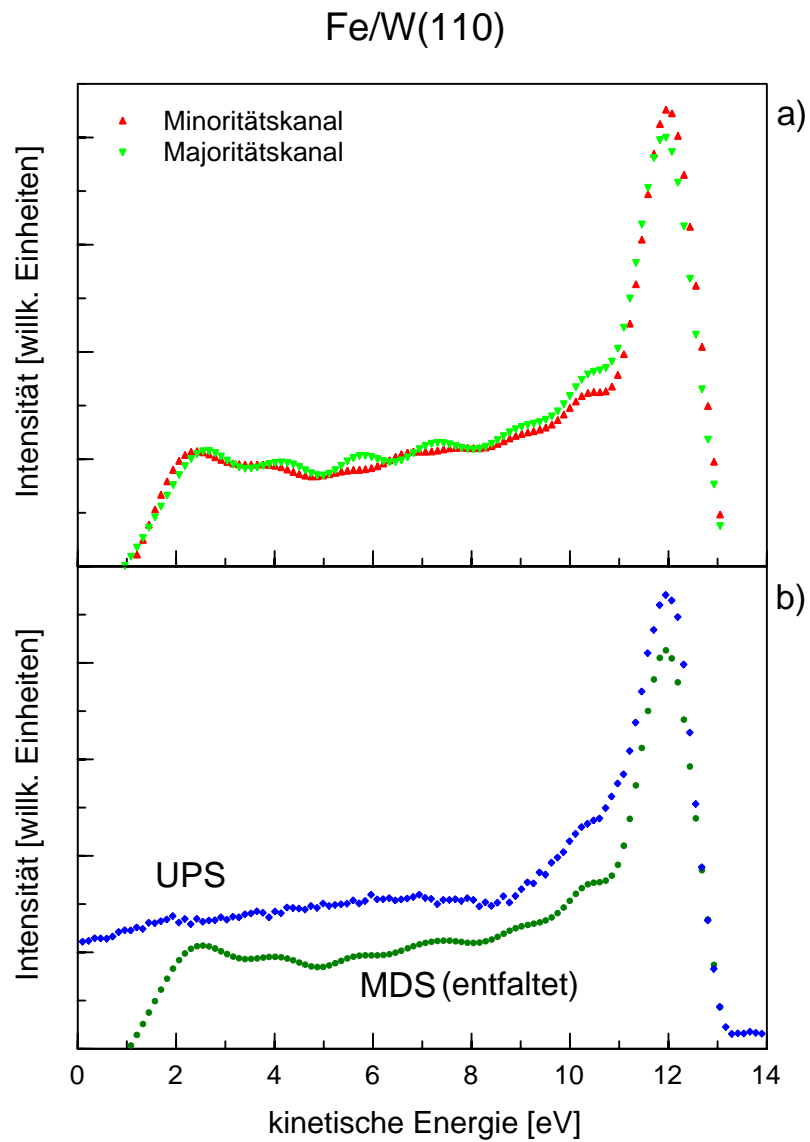


Abbildung 4.8:

Aus den Meßergebnissen (s. Abbildung 4.3) entfaltete SPMD-Spektren von Fe/W(110) (nach [Förs99]).

a) Spinaufgelöste Spektren.

b) Vergleich des spinintegrierten Spektrums mit einem experimentellen UP-Spektrum. Die energetische Lage des UP-Spektrums wurde an der abfallenden Flanke der hochenergetischen Seite angepaßt.

die spinaufgelösten entfalteten Spektren. Der Verlauf und die Lage der beiden Strukturen bei $E_{kin} = 10.5$ eV und $E_{kin} = 12$ eV entsprechen spinaufgelösten UP-Spektren [Getz93c]. Die gute Übereinstimmung des relativen Verlaufs dieser Ergebnisse mit UP-Spektren zeigt die Funktionstüchtigkeit des verwendeten Entfaltungsverfahrens [Förs99].

4.2.2 Kobalt

Die Ergebnisse der SPMDS-Messungen an Co(0001)/W(110) sind in Abbildung 4.9 dargestellt. Die gemessene positive Asymmetrie zeigt wiederum eine Dominanz der Minoritätselektronen an, die auch theoretisch mit der FLAPW-Methode für hcp Co(0001) gefunden wird [Wu94]. Es ergibt sich sowohl für die äußerste Lage Co(S) als auch für die innerste Lage Co(C) in der Nähe der Fermienergie

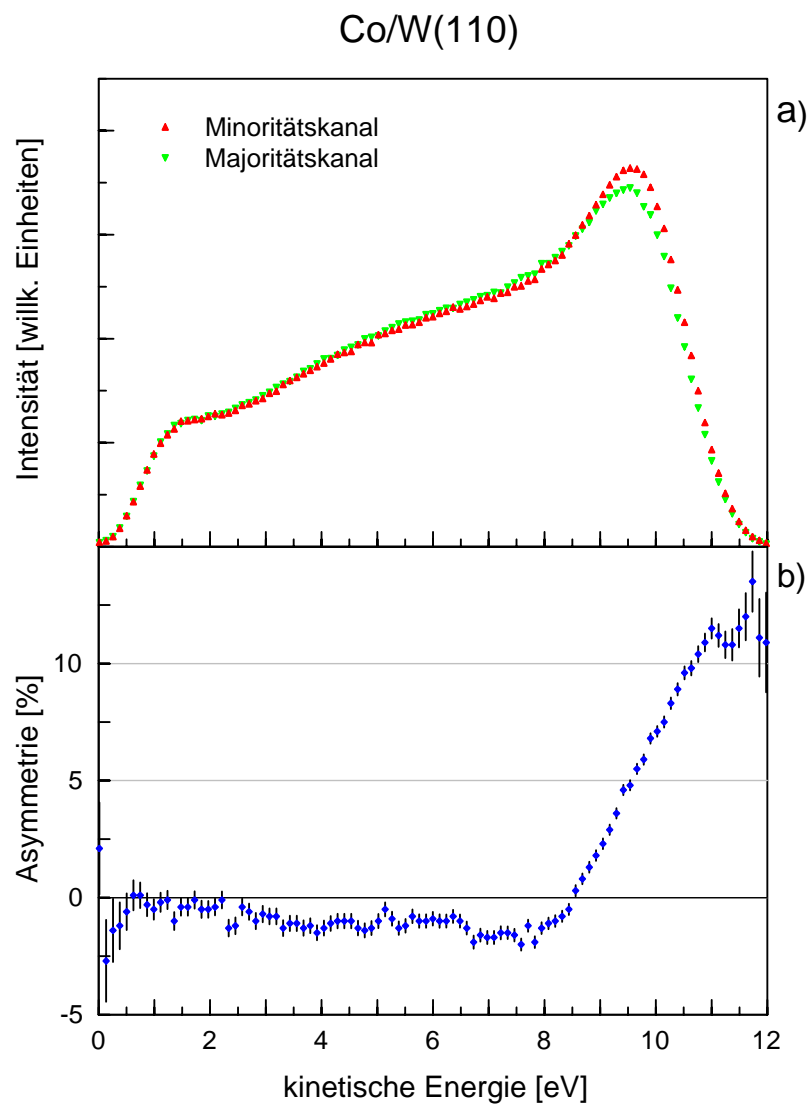


Abbildung 4.9: Spinaufgelöste MD-Spektren (a) und die zugehörige Asymmetrie (b) von Kobalt auf W(110). Magnetisiert wurde entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung des W(110)-Kristalls.

ein Überschuß von Minoritätselektronen (s. Abbildung 4.10). Eine theoretische Bestimmung der energieaufgelösten Spindichte $m(\vec{r}, E_F)$ existiert für Co(0001) nicht, in [Weim95] wird diese aber für das System bcc Co(110)/W(110) angegeben (s. Abbildung 4.11 (b)). Berücksichtigt werden dort alle Zustände, die im Energiebereich ± 0.5 eV um E_F liegen, allerdings wurde nur eine Lage von Co-Atomen untersucht. Auch hier überwiegt der Minoritätsspin.

Messungen mit SPUPS an Schichten mit 20 Lagen Kobalt auf W(110) haben zu unterschiedlichen Ergebnissen geführt. Während sich mit HeI-Licht ($h\nu = 21.22$ eV) eine Dominanz der Minoritätselektronen ergibt [Getz93c], die mit dem SPMDS-Ergebnis übereinstimmt, zeigt sich bei Anregung mit NeI- und ArI-Licht ($h\nu = 16.85$ eV und 11.83 eV) ein Überwiegen von Majoritätselektronen [Getz93b, Getz93a].

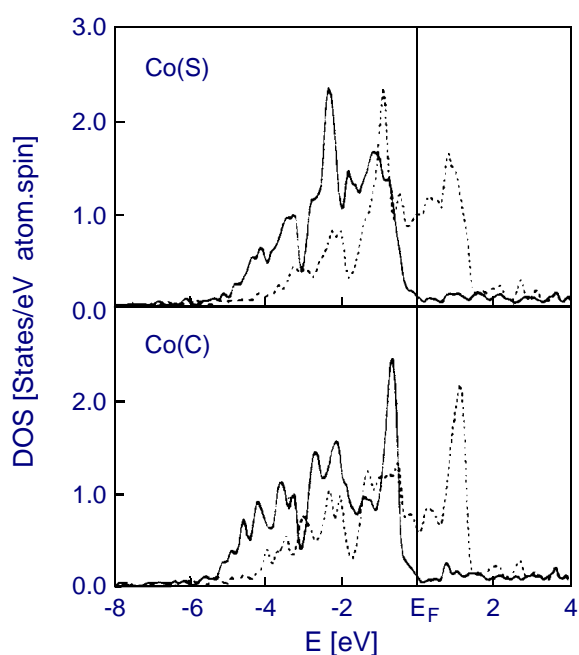


Abbildung 4.10:

Nach der FLAPW-Methode berechnete Zustandsdichten einer Co(0001)-Schicht für die oberste (Co(S)) und die innerste Lage (Co(C)). An der Fermikante überwiegen die Minoritätselektronen.

— Majoritätselektronen,
 - - - Minoritätselektronen.

(nach [Wu94])

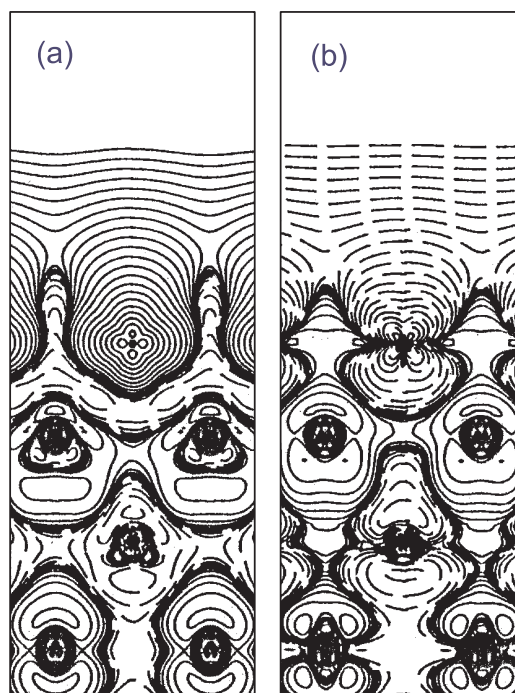


Abbildung 4.11:

Verteilung der Spindichten $m(\vec{r})$ (a) und $m(\vec{r}, E_F)$ (b) von einer Lage Co(110) auf W(110). Die Schnittebene wird von der [001]- und der [110]-Richtung aufgespannt.

— Majoritätsüberschuß,
 - - - Minoritätsüberschuß.

(nach [Weim95])

Der maximale Absolutwert der experimentellen Asymmetrie beträgt 15% (s. Abbildung 4.9b). Da für Kobalt bisher keine berechneten Zustandsdichten für die Übergangsregion zum Vakuum vorliegen, ist eine theoretische Abschätzung der Asymmetrie noch nicht möglich. Das Tempern der Kobaltschichten, das genauso durchgeführt wurde wie das Tempern der Eisenschichten (s. Kapitel 4.2.1.2), hat erwartungsgemäß zu keiner Erhöhung der experimentellen Asymmetrie geführt, da aufgrund des kleinen Misfits der Gitterkonstanten von 0.7% schon bei Raumtemperatur lagenweises Wachstum vorliegt (s. Anhang A.2).

4.2.3 Nickel

In Abbildung 4.12 sind Ergebnisse von Testmessungen an Ni(111)-Schichten dargestellt. Die hohe Elektronenzählrate bei niedrigen kinetischen Energien (s. Abbildung 4.12 a)) deutet auf eine verunreinigte Schicht hin, die allerdings im LEED-Bild trotzdem eine recht scharfe Struktur zeigte.

Da die leichte Magnetisierungsrichtung für das auf W(110) entstehende Ni(111) (s. Anhang A.2) entlang der [001]-Richtung, also im Vergleich zu Eisen um 90° ver-

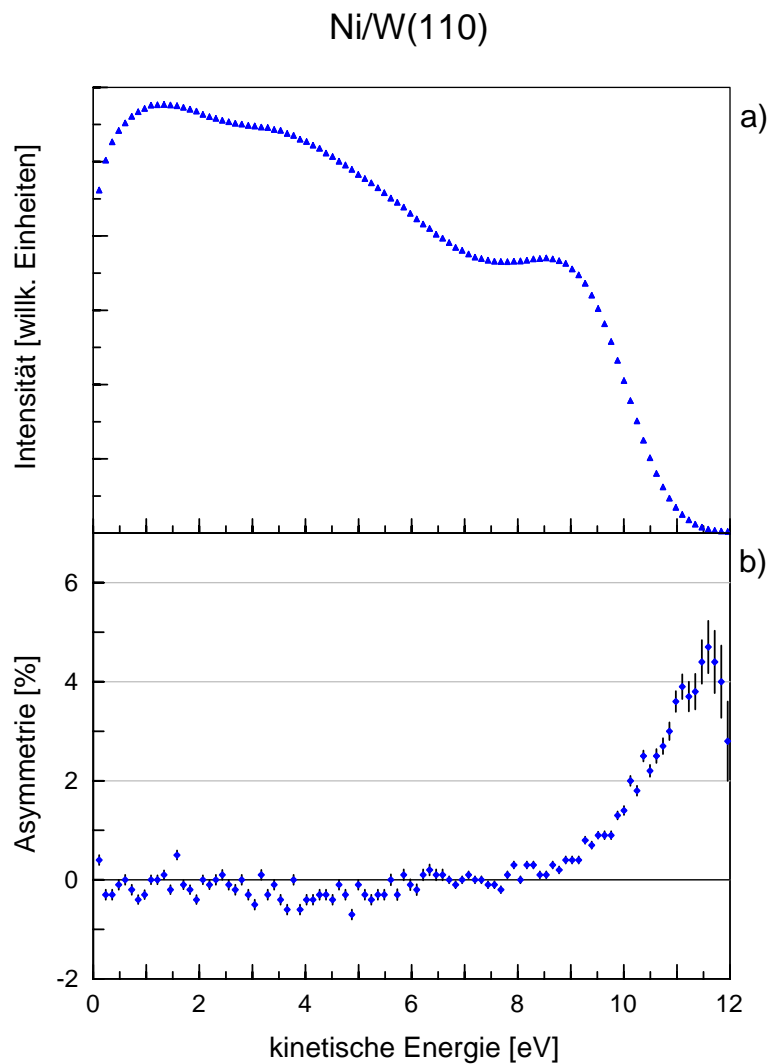


Abbildung 4.12:

Spinintegriertes MD-Spektrum (a) und die Asymmetrie (b) von Nickel auf W(110). Magnetisiert wurde entlang der [001]-Richtung des W(110)-Kristalls.

dreht liegt, muß für die Messungen an Nickel der Substratkristall um 90° gedreht eingebaut werden, damit die leichte Richtung parallel zum Magnetisierungsfeld liegt.

Die Messungen zeigen eine positive Asymmetrie, also überwiegen auch bei Nickel in der Nähe der Fermikante die Minoritätselektronen. Dieses Ergebnis bestätigt andere SPMDS-Untersuchungen an einem Ni(110)-Kristall [Onel84].

Berechnete, spinaufgelöste Zustandsdichten für Ni(111) existieren nicht, eine theoretische Behandlung für eine aus fünf Lagen bestehende Ni(110)-Schicht liegt aber vor [Weim95]. Die in Abbildung 4.13 (b) gezeigte Spindichte $m(\vec{r}, E_F)$ für Zustände in einem Energieintervall ± 0.5 eV um E_F zeigt ebenfalls den Überschuß von Minoritätsspins an.

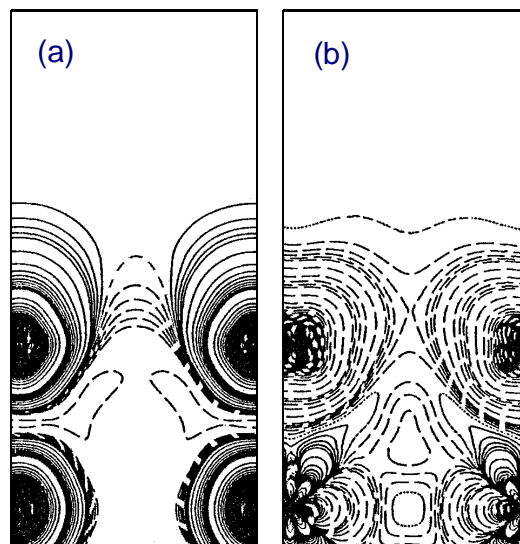


Abbildung 4.13:
Verteilung der Spindichten $m(\vec{r})$ (a)
und $m(\vec{r}, E_F)$ (b) von fünf Lagen
Ni(110). Die Schnittebene wird von
der [001]- und der [110]-Richtung
aufgespannt.

— Majoritätsüberschuß,
- - - Minoritätsüberschuß.

(nach [Weim95])

4.3 Messungen an sauerstoffbedeckten Fe(110)- und Co(0001)-Schichten

Bei der Chemisorption kann es aufgrund der starken Wechselwirkung mit dem Adsorbat zu einer drastischen Veränderung der elektronischen Struktur des Substrats kommen. Ein Chemisorbat, das atomar auf ferromagnetischen Metallen adsorbiert wird, ist Sauerstoff. Mit SPUPS ist an sauerstoffbedecktem Eisen eine energetische Aufspaltung von adsorbatinduzierten Zuständen, die durch die Hybridisierung zwischen O_{2p} und Fe_{3d} -Zuständen entstehen, beobachtet worden [Getz93a].

Zur Untersuchung des Einflusses von Sauerstoff auf den Oberflächenmagnetismus dünner Schichten mit SPMDS werden nach dem in Kapitel 4.2 dargestellten Verfahren zehn Monolagen dicke Filme aus Eisen bzw. Kobalt auf W(110) aufgedampft. Zur Überprüfung der erreichten Qualität wird zunächst an der sauberen Schicht eine Asymmetriemessung durchgeführt. Stimmt diese Asymmetrie mit der in Abbildung 4.3 bzw. Abbildung 4.9 gezeigten überein, wird eine Bedeckung mit Sauerstoff herbeigeführt (s. Kapitel 3.4.4).

4.3.1 Eisen

Die Anlagerung des Sauerstoffs an die Eisenoberfläche geschieht durch dissoziative Chemisorption, wobei die dabei gebildete Überstruktur vom Sauerstoffangebot abhängig ist. Bis zu einem Bedeckungsgrad von ca. 0.25 ist in LEED-Bildern eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur zu erkennen, die mit zunehmender Bedeckung in eine $c(3 \times 1)$ -Struktur übergeht [Saki85, Pign67]. Ab einer Bedeckung von 0.5 setzt dann die Bildung von Eisenoxid ein. Eine ausführliche Zusammenstellung von Ergebnissen zur Sauerstoffadsorption auf Fe(110) befindet sich z. B. in [Piru80].

In Abbildung 4.14 sind UP-Spektren von reinen und sauerstoffbedeckten Eisen-schichten (a) sowie deren Differenzspektrum (b) gezeigt. Zu erkennen ist die Entstehung einer neuen Struktur bei einer kinetischen Energie von $E_{kin} = 10$ eV sowie die Abschwächung der Emission aus den d-Bändern bei $E_{kin} = 14 - 15$ eV. Die Lage der durch die 2p-Elektronen von dissoziiertem Sauerstoff hervorgerufenen Struktur ($E_B = 5.4$ eV) stimmt exakt mit Ergebnissen von UPS-Untersuchungen an Sauerstoff auf einem Fe(110)-Einkristall [Brod77] und an Sauerstoff auf einem polymorphen Eisenfilm, der auf einen Niobkristall aufgedampft war, überein [Yu76].

4.3.1.1 RI+AN an sauerstoffbedecktem Eisen

Auch nach der Adsorption von Sauerstoff auf metallische Oberflächen geschieht die Deexcitation der Heliumatome durch RI+AN. Referenzspektren findet man für die Systeme O/Pd(111) und O/Cu(110) bei [Sess87a]. Im Gegensatz zu UPS ist in den MD-Spektren schon bei kleinsten Sauerstoffmengen das Verschwinden der für die jeweiligen Metalle charakteristischen Strukturen zu erkennen, was erneut die extreme Oberflächensensitivität dieser Methode bestätigt. Diese starke Unterdrückung der Emission aus den 3d-Bändern des Eisens zeigt sich auch in den

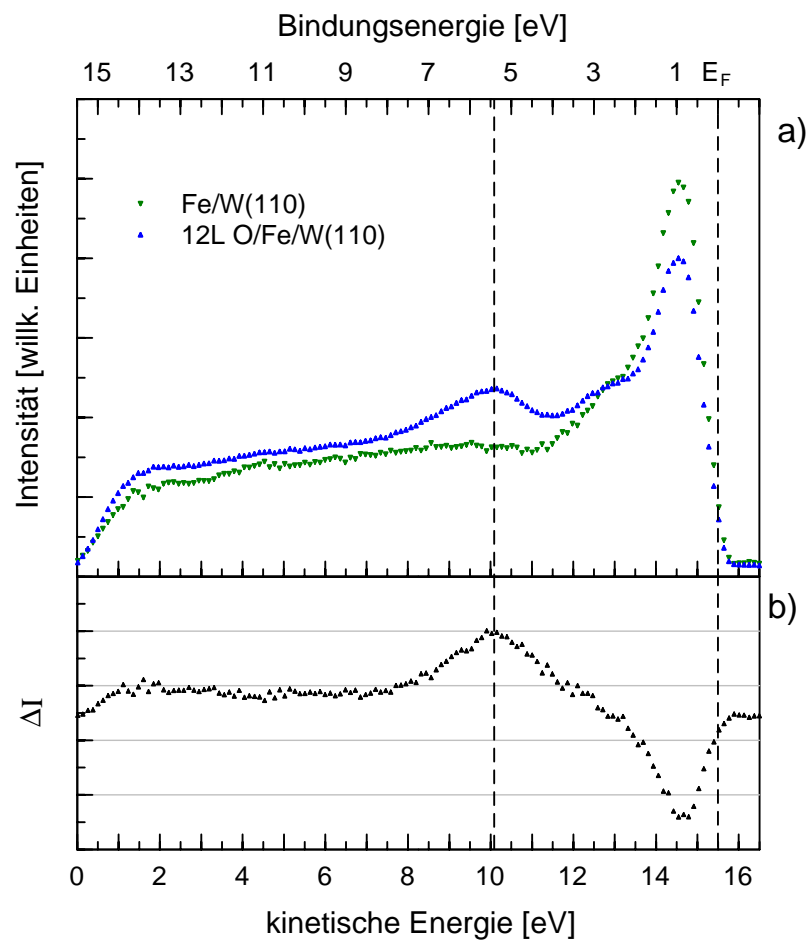


Abbildung 4.14:

a) UP-Spektren von reinem und sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110).

b) Differenzspektrum, ΔI ergibt sich aus den in a) abgebildeten Intensitäten.

spinaufgelösten MD-Spektren (s. Abbildung 4.15). Um die kleinen Intensitätsunterschiede zwischen den beiden Spinkanälen besser sichtbar zu machen, sind in dieser Abbildung nicht die Datenpunkte, sondern deren Verbindungslinien gezeigt. Des weiteren entsteht eine sauerstoffinduzierte Struktur im Bereich um $E_{kin} = 5$ eV, die ebenfalls in den gemessenen Asymmetriekurven, die bei verschiedenen starken Sauerstoffangeboten aufgenommen wurden, zu erkennen ist (s. Abbildungen 4.16 und 4.17).

Diese Struktur hat schon nach einem Angebot von 3 L die maximale Asymmetrie von +5% erreicht. Dieses Ergebnis stimmt im Vorzeichen mit SPMDS-Resultaten an O/Fe/GaAs(110) [Hamm92] und O/Fe/Ag(100) [Ferr98] überein. Die durch Sauer-

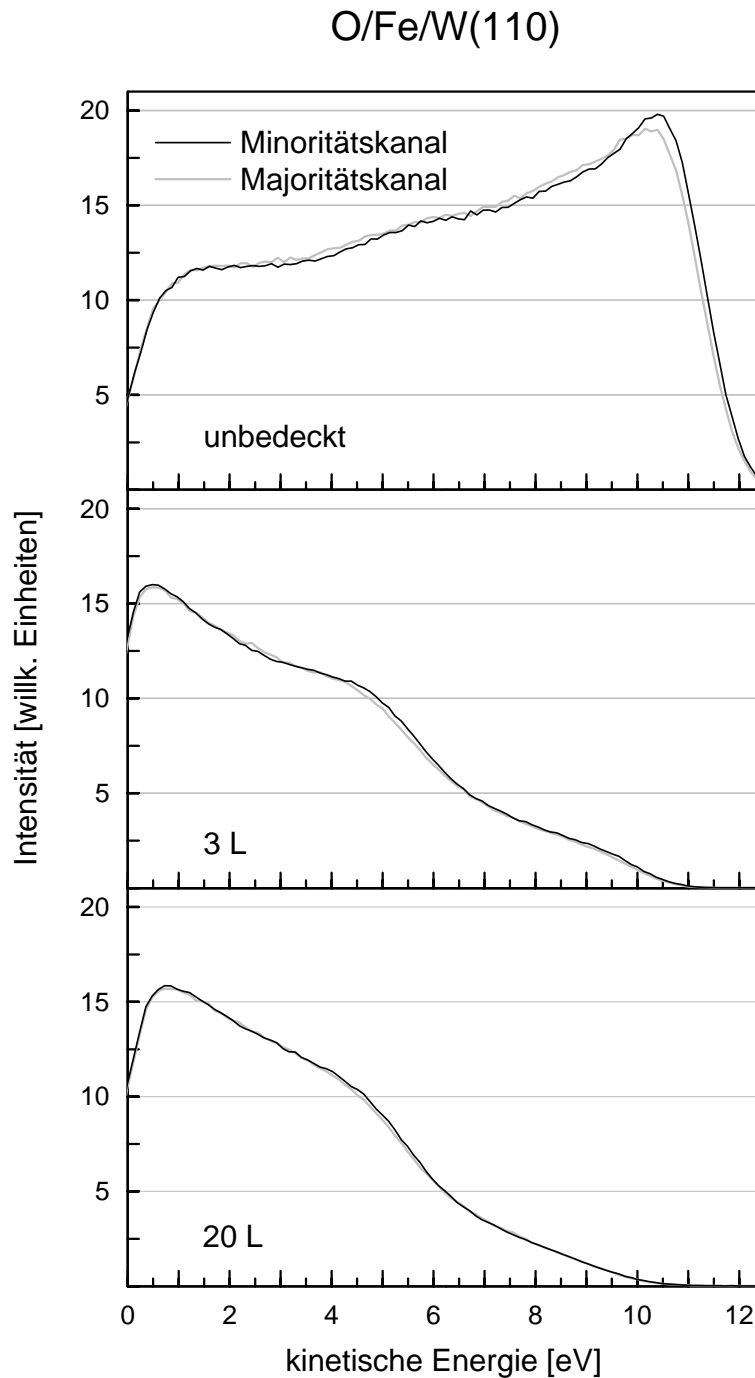


Abbildung 4.15:

Spin aufgelöste MD-Spektren von reinem und sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110) bei unterschiedlichem Sauerstoffangebot ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr} \cdot \text{s}$).

Magnetisiert wurde in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung.

Aufgrund der deutlicheren Darstellung der kleinen Intensitätsdifferenzen sind nicht die Datenpunkte, sondern deren Verbindungslinien abgebildet.

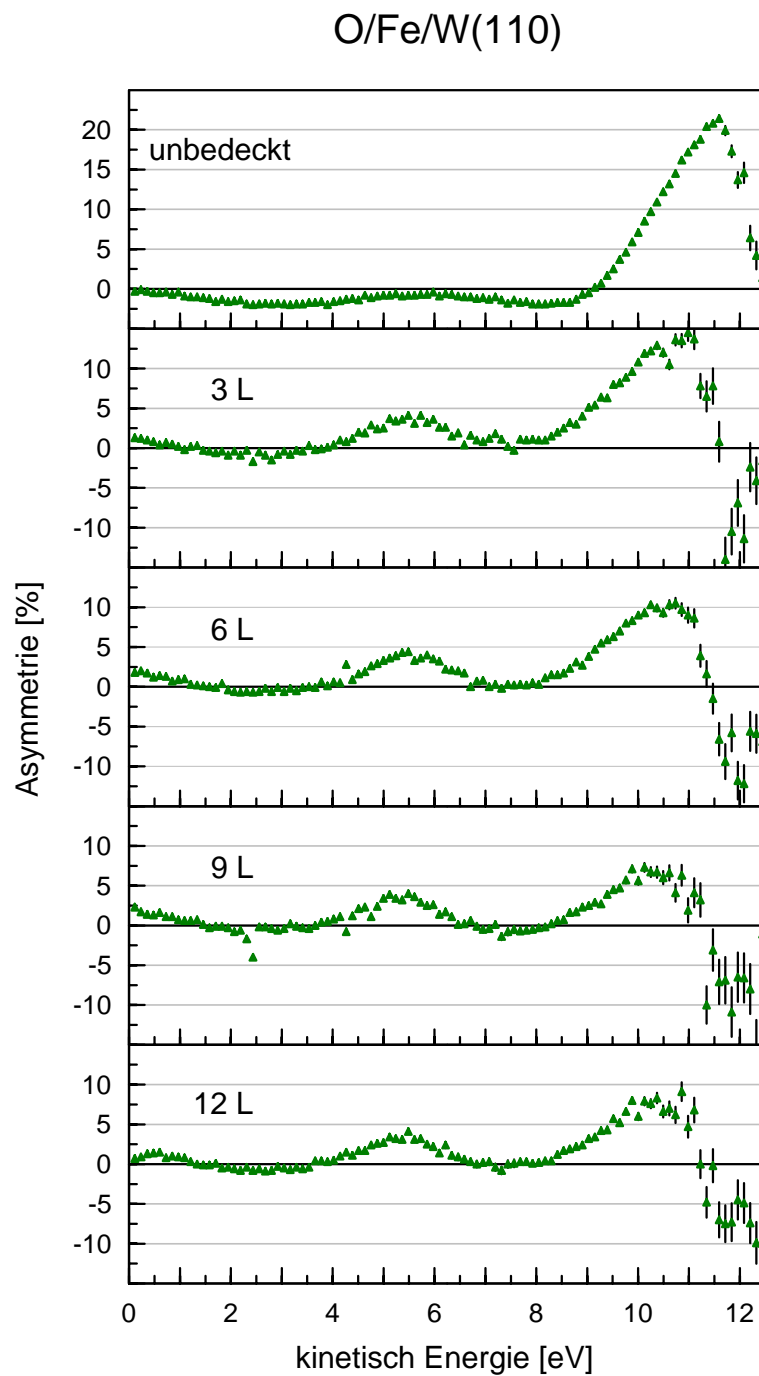
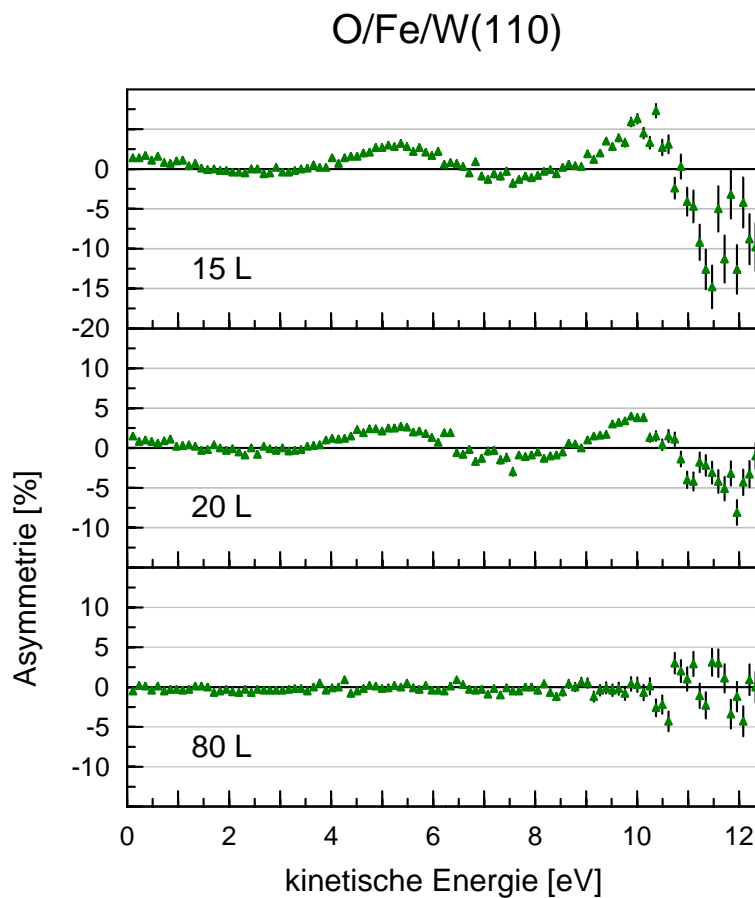


Abbildung 4.16:
Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Sauerstoffangebot für Eisen auf W(110) (1 L = 10^{-6} torr · s).
Fortsetzung siehe Abbildung 4.17

**Abbildung 4.17:**

Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Sauerstoffangebot für Eisen auf W(110) ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr}\cdot\text{s}$).
Fortsetzung von Abbildung 4.16

stoffadsorption hervorgerufene Struktur kann, wie auch in UP-Spektren gefunden, auf O_{2p} -Zustände zurückgeführt werden [Hamm92].

Mit SPUPS an O/Fe/W(110) ($h\nu = 16.85 \text{ eV}$, [Getz99]), wo sich für diese O_{2p} -abgeleiteten Zustände eine Austauschspaltung ergibt, (s. Abbildung 4.21 und Kapitel 4.3.1.2) wird eine magnetische Ankopplung des Sauerstoffs an die ferromagnetische Unterlage festgestellt.

Im Bereich der Fermienergie kommt es durch die Adsorption von Sauerstoff zu drastischen Änderungen im Verlauf der Asymmetrie (s. Abbildungen 4.16 und 4.17), die oberhalb $E_{kin} = 11 \text{ eV}$ zu negativen Werten umschlägt. Dieser Vorzeichenwechsel zeigt an, daß jetzt in der Übergangsregion zum Vakuum die Majoritätselektronen an der Fermikante überwiegen.

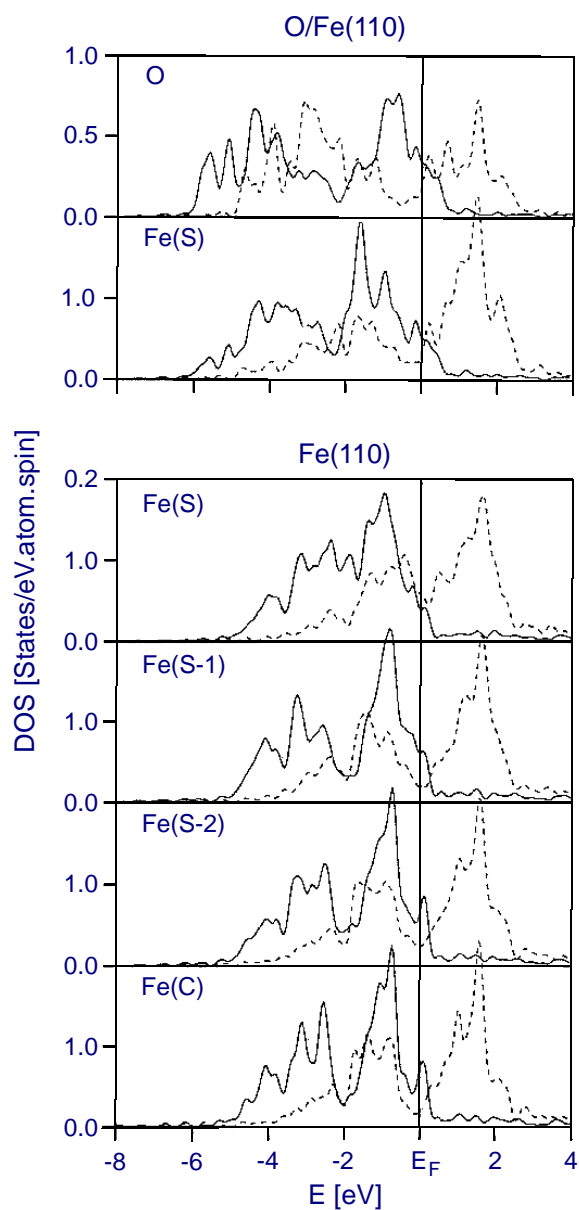


Abbildung 4.18:

Nach der FLAPW-Methode berechnete Zustandsdichten für Fe(110) (Fe(C) bis Fe(S), s. Abb. 4.5) sowie für O/Fe(110) (Fe(S) und die Adsorbatlage O).

— Majoritätselektronen,
 --- Minoritätselektronen.

(nach [Wu93])

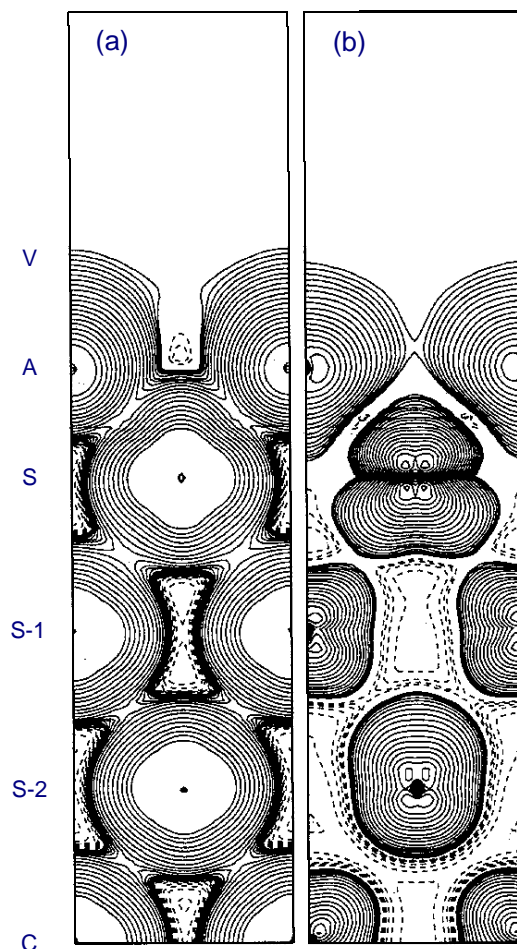


Abbildung 4.19:

Verteilung der Spindichten $m(\vec{r})$ (a) und $m(\vec{r}, E_F)$ (b) für das System O/Fe/W(110). A bezeichnet die Adsorbatlage aus Sauerstoff, V den Übergang zum Vakuum. Die Schnittebene wird von der [001]- und der [110]-Richtung aufgespannt.

— Majoritätsüberschuß,
 --- Minoritätsüberschuß.

(nach [Wu93])

4.3.1.2 Vergleich mit theoretischen Berechnungen und Diskussion

Der Wechsel der dominierenden Spinsorte wird auch theoretisch vorhergesagt. In [Wu92] werden mit der FLAPW-Methode spinaufgelöste Zustandsdichten (s. Abbildung 4.18) und die energieaufgelöste Spindichte $m(\vec{r}, E_F)$ für Zustände in einem 0.25 eV breiten Energiefenster unterhalb von E_F (s. Abbildung 4.19(b)) für ein System aus sieben Lagen Fe(110) und einer Lage Sauerstoff, für die eine p(1x1)-Überstruktur angenommen wird, bestimmt.

Anschaulich läßt sich der Vorzeichenwechsel der Asymmetrie durch die Annahme erklären, daß durch die Adsorption eine Konfiguration erreicht wird, die der im Inneren eines Eisenkristalls, wo mehr Majoritätselektronen vorhanden sind, entspricht (s. Kapitel 4.2.1 und Abbildung 4.5).

Vorläufige, aus den SPMD-Spektren von 6L O/Fe/W(110) entfaltete, spinaufgelöste Spektren sind in Abbildung 4.20 gezeigt [Förs99]. Für die O_{2p} -abgeleiteten Zustände ist nach der Entfaltung eine Austauschspaltung von 0.25 eV zu erkennen. Dieser Betrag stimmt mit SPUPS-Ergebnissen überein [Getz99], wo sich nach einem Sauerstoffangebot von 5 L bei der Verwendung von NeI-Licht ($h\nu = 16.85$ eV) eine Austauschspaltung von 0.22 eV ergibt (s. Abbildung 4.21). Mit HeI-Licht ($h\nu = 21.2$ eV) wird nach einem Angebot von 6 L Sauerstoff eine Austauschspaltung von 0.4 eV beobachtet. Dieses Ergebnis bestätigt das mit SPUPS gefundene magnetische Ankoppeln des Sauerstoffs.

Ab einem Angebot von 20 L ist eine Verkleinerung aller in der Asymmetrie sichtbaren Strukturen zu erkennen, bei 80 L ist die Asymmetrie dann über den ganzen Energiebereich praktisch gleich Null. Zu erklären ist dies durch die mit stärkerer Bedeckung einsetzenden Oxidation, bei der sich an der Oberfläche unmagnetisches Eisenoxid bildet. In SPUPS-Messungen an O/Fe/W(110) äußert sich die Ausbildung dieser magnetisch toten FeO-Schicht durch die mit zunehmender Bedeckung verschwindende Austauschspaltung der O_{2p} -Zustände [Getz93a].

4.3.1.3 Einfluß der Schichtqualität

Die gemessene Breite des Energiebereiches, in dem die Asymmetrie das Vorzeichen wechselt, hängt mit der Qualität der Eisenschicht zusammen. Während der Wechsel bei Verwendung einer getemperten Schicht nur im Bereich von $E_{kin} > 11$ eV stattfindet (Bielefeld), ergeben sich für Messungen, bei denen leicht verunreinigte Eisenoberflächen verwendet wurden (s. Kapitel 4.2.1.2), schon für $E_{kin} > 6$ eV [Hamm92] bzw. $E_{kin} > 8$ eV [Salv97a, Ferr98] negative Asymmetrien. Diese breite, negative Asymmetrie stimmt mit Bielefelder Messungen überein, bei denen der Sauerstoff auf ungetemperte Eisenschichten aufgebracht wurde [Getz95c, Getz95d]. Für Sauerstoffangebote unterhalb von 6 L wechselt dort das Asymmetrievorzeichen im Bereich von $E_{kin} > 10$ eV, für 6 L oder mehr allerdings schon ab $E_{kin} = 6$ eV.

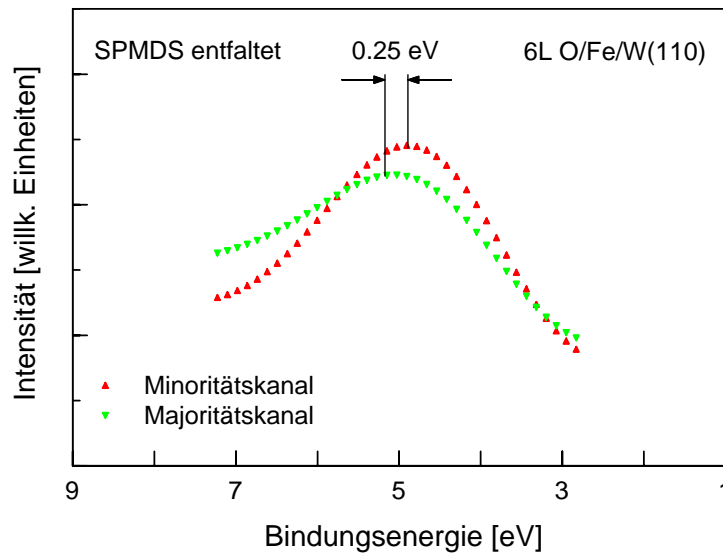


Abbildung 4.20:
 Spinaufgelöste, entfaltete SPMD-Spektren von O/Fe/W(110). Nach einem Sauerstoffangebot von 6 L ergibt sich für die O_{2p} -abgeleiteten Zustände eine Austauschspaltung von 0.25 eV.
 (vorläufige Ergebnisse, nach [Förs99])

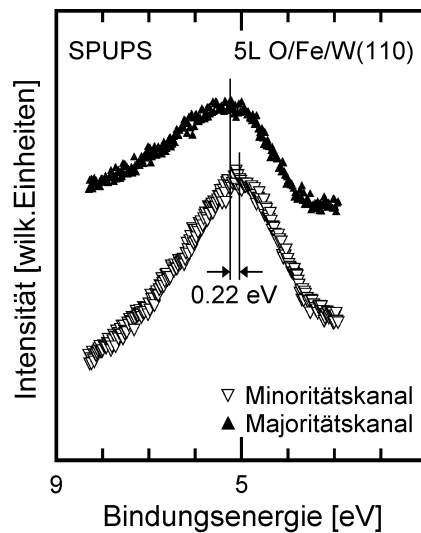


Abbildung 4.21:
 Spinaufgelöste UP-Spektren ($h\nu = 16.85$ eV) von O/Fe/W(110). Nach einem Angebot von 5 L wird für die sauerstoffinduzierte Struktur eine Austauschspaltung von 0.22 eV beobachtet. (nach [Getz99])

4.3.2 Kobalt

Auch auf Kobalt geschieht die Adsorption von Sauerstoff bei Raumtemperatur durch dissoziative Chemisorption [Brid79]. Allerdings kommt es im Gegensatz zur Adsorption auf Eisen schon bei kleinen Mengen zu einem Eindringen von Sauerstoff in die Kobaltschicht und dort zur Bildung von CoO. Bei sehr hohem Sauerstoffangebot kann zusätzlich auch Co_3O_4 entstehen [Cast82]. Neben der Oxidation innerhalb der Kobaltschicht kann an der Oberfläche Sauerstoff gleichzeitig als Chemisorbat vorliegen. Diese Koexistenz von antiferromagnetischem CoO, Co_3O_4 und chemisorbiertem Sauerstoff wurde mit SPUPS nachgewiesen [Getz94a].

In den in Abbildung 4.22 dargestellten spinaufgelösten MD-Spektren ist, wie auch bei Eisen, eine Unterdrückung der Emission im Bereich der Fermikante sowie die Andeutung einer neuen Struktur um $E_{kin} = 5$ eV zu erkennen. Diese Struktur kann wiederum auf Emission aus den O_{2p} -Zuständen des Sauerstoffs zurückgeführt werden [Cast82].

In den Abbildungen 4.23 und 4.24 ist der Asymmetrieverlauf in Abhängigkeit vom Sauerstoffangebot dargestellt. Man erkennt, daß die Asymmetrie an der Fermikante zwar abnimmt, im Gegensatz zu den Messungen an Eisen aber ein Wechsel des Vorzeichens nicht festzustellen ist. Daraus folgt, daß auch nach der Adsorption von Sauerstoff auf Kobalt das Überwiegen der Minoritätselektronen erhalten bleibt.

Dieses Ergebnis stimmt mit einer theoretischen Vorhersage überein, in der mit der FLAPW-Methode ein System aus einer (1x1)-Monolage Sauerstoff auf einer fünfzähligen bcc-Co(110)-Schicht behandelt wird [Weim95]. Die dort berechneten Zustandsdichten zeigen für die Sauerstofflage in der Nähe der Fermienergie mehr Minoritäts- als Majoritätselektronen an (s. Abbildung 4.25).

Folgt man der anschaulichen Argumentationsweise, daß durch die Adsorption von Sauerstoff eine kristallähnliche Konfiguration ausgebildet wird, ist für Kobalt deshalb kein Wechsel des Asymmetrievorzeichens zu erwarten, weil ebenfalls in den inneren Lagen der Schicht, im Gegensatz zu Eisen, nahe E_F die Minoritätselektronen dominieren (s. Abbildung 4.10, Co(C)).

Auch die sauerstoffinduzierte Struktur bei $E_{kin} = 5$ eV zeigt eine positive Asymmetrie, die bei einem Angebot von 8 L Sauerstoff ihren Maximalwert von +5% erreicht. Mit SPUPS wird bei einem Angebot von 10 L für diese Zustände eine Austauschspaltung von 0.4 eV gemessen [Getz94a], was wiederum auf ein magnetisches Ankoppeln des Sauerstoffs an die ferromagnetische Unterlage hinweist.

Das Verschwinden der Asymmetrie sowohl an der Fermikante als auch für die sauerstoffinduzierten Zustände bei zunehmender Bedeckung zeigt die vollständige Umwandlung in nicht ferromagnetisches Kobaltoxid an. Dieser Rückgang der Asymmetrie entspricht wiederum der mit SPUPS gemessenen Abnahme der Austauschspaltung der O_{2p} -Zustände mit wachsendem Sauerstoffangebot [Getz95b].

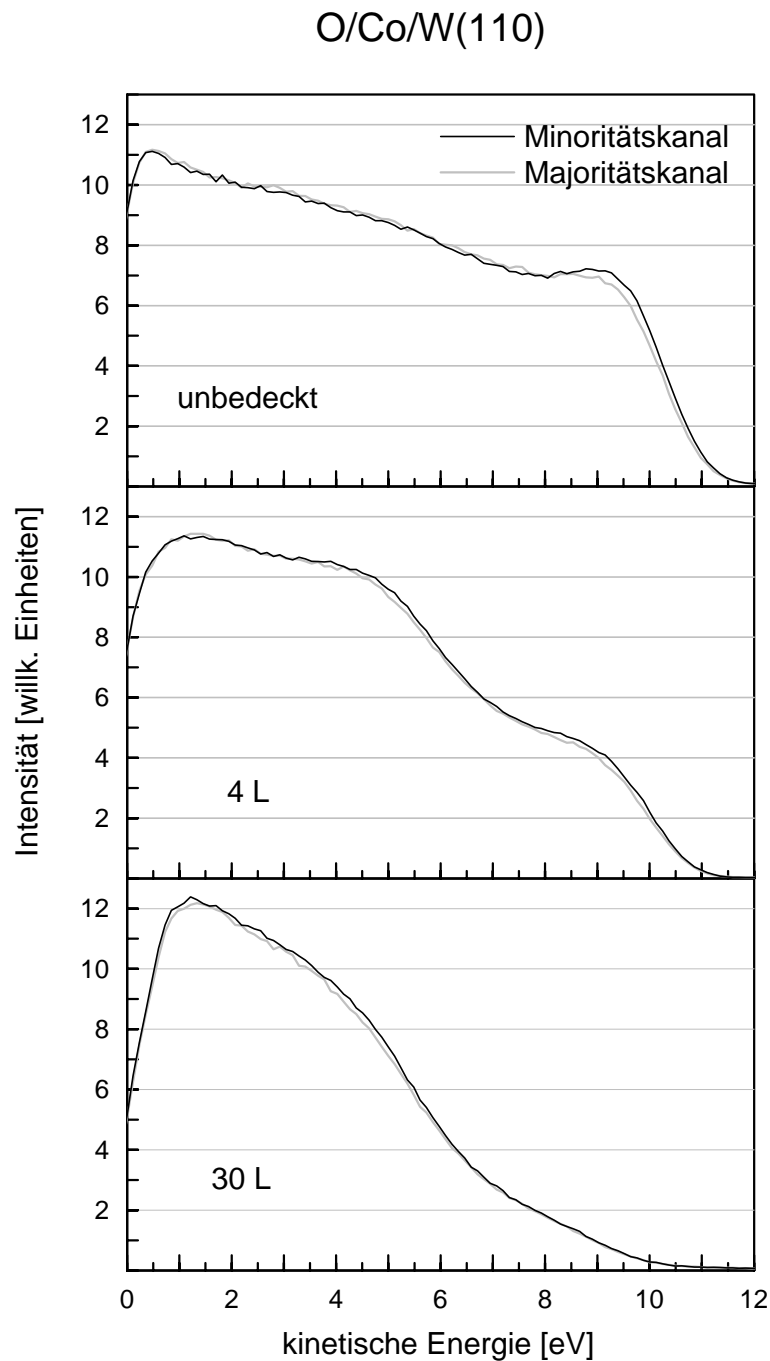


Abbildung 4.22:

Spinaufgelöste MD-Spektren von reinem und sauerstoffbedecktem Kobalt auf W(110) bei unterschiedlichem Sauerstoffangebot ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr} \cdot \text{s}$). Magneti-
siert wurde in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung des W(110).

Aufgrund der deutlicheren Darstellung der kleinen Intensitätsdifferenzen sind nicht die Datenpunkte, sondern deren Verbindungslinien abgebildet.

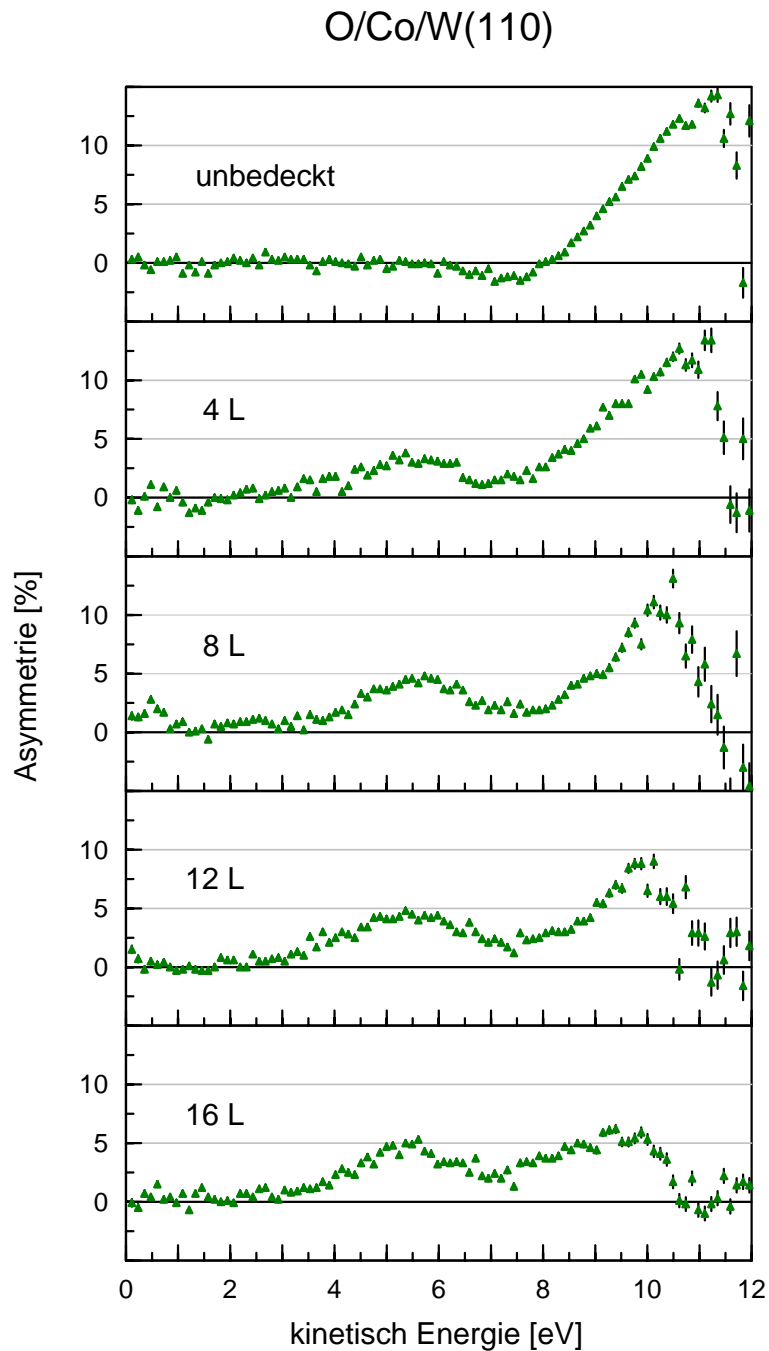


Abbildung 4.23:
 Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Sauerstoffangebot für Kobalt auf W(110) ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr}\cdot\text{s}$).
 Fortsetzung siehe Abbildung 4.24

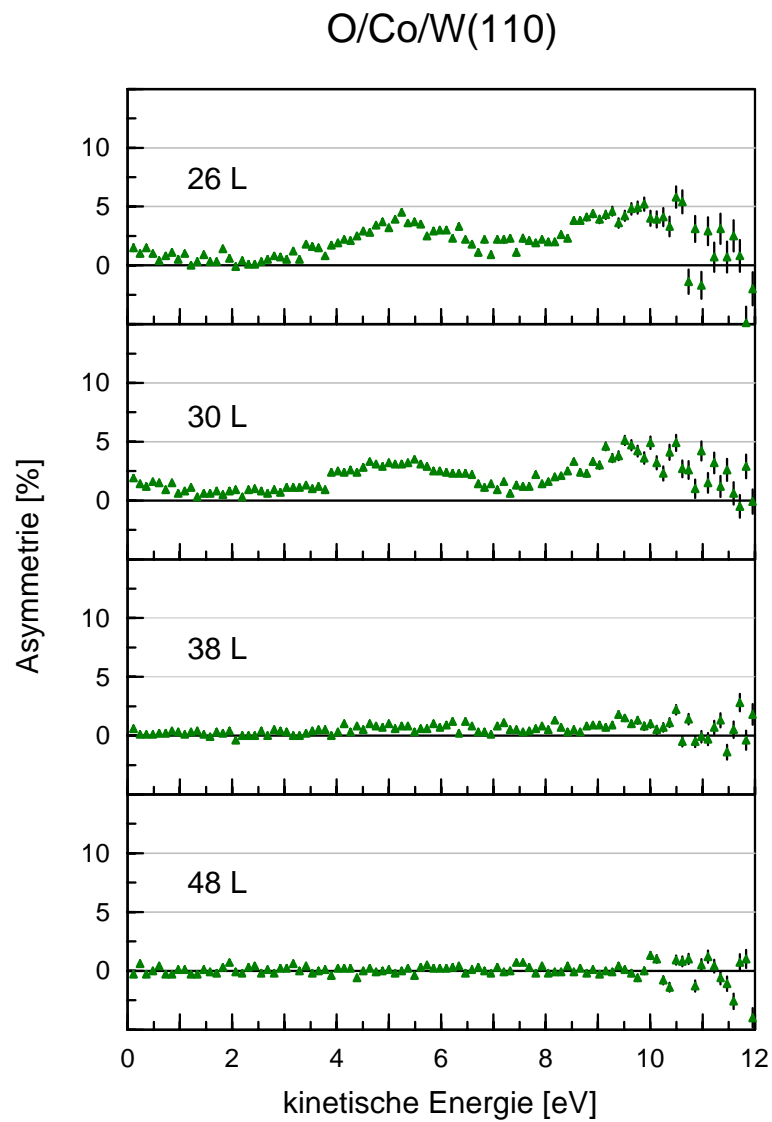


Abbildung 4.24:
Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Sauerstoffangebot für Kobalt auf W(110) ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr} \cdot \text{s}$).
Fortsetzung von Abbildung 4.23

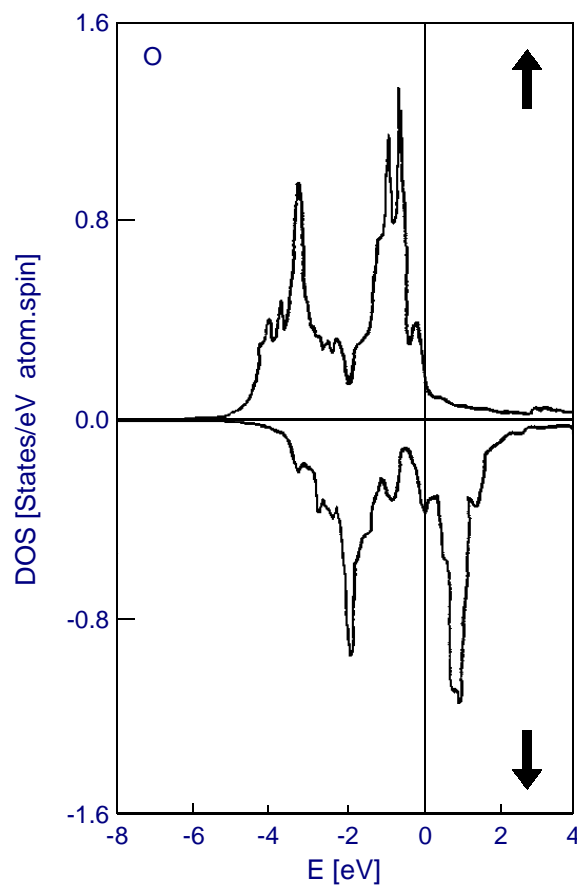


Abbildung 4.25:

Nach der FLAPW-Methode berechnete Zustandsdichten für eine Lage Sauerstoff, die sich auf fünf Lagen Co(110) befindet.

↑ : Majoritätselektronen,

↓ : Minoritätselektronen.

(nach [Weim95])

4.4 Kohlenmonoxidbedeckte Fe(110)- und Co(0001)-Schichten

Aus Untersuchungen mit nicht spinaufgelöster MDS [Conr79, Rous81] ist bekannt, daß vor kohlenmonoxidbedeckten Oberflächen der Übergang der metastabilen Atome in den Grundzustand durch eine Augerdeexcitation erfolgt, weil durch das CO-Adsorbat die vor unbedeckten metallischen Oberflächen sonst stattfindende Resonanzionisation unterdrückt wird. In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der ersten spinaufgelösten MDS-Messungen, bei denen die Elektronen durch einen AD-Prozeß emittiert werden, vorgestellt.

4.4.1 Adsorption von Kohlenmonoxid

Die Adsorption von CO geschieht bei Raumtemperatur durch eine nicht dissoziative Chemisorption, wobei das Kohlenstoffende des Moleküls zum Metall gerichtet ist [Plum82]. Beschrieben wird die Kohlenmonoxidadsorption im allgemeinen durch das Blyholder-Modell [Blyh64]. Dabei tragen zur Bindung ausschließlich das höchste besetzte (HOMO) und das niedrigste unbesetzte Molekülorbital (LUMO) bei, die durch eine Hybridisierung mit Valenzzuständen des Metalls wech-

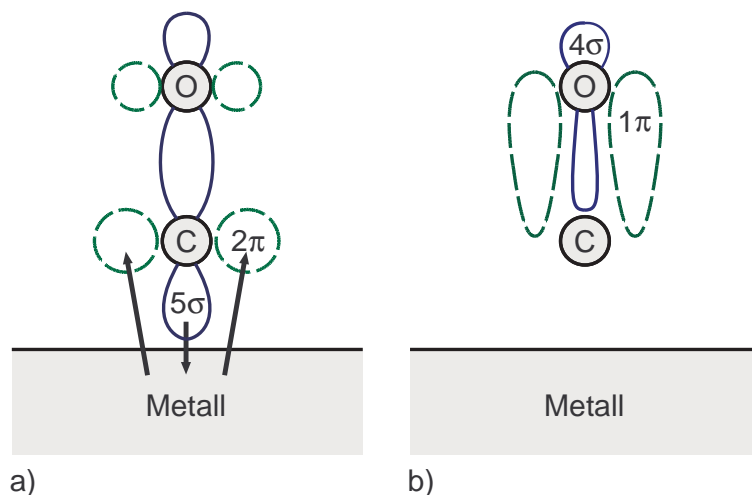


Abbildung 4.26:

Blyholder Modell zur Adsorption von CO auf metallischen Oberflächen.

a) An der Bindung sind nur das 5σ -Orbital (durchgezogen) und das 2π -Orbital (gestrichelt) beteiligt (σ donation, π back donation).

b) Die komplett gefüllten 4σ - und 1π -Orbitale spielen bei der Bindung keine Rolle. (nach [Brod76])

selwirken. In Abbildung 4.26 sind die an der Bindung beteiligten CO-Orbitale dargestellt. Es kommt zu einer Abgabe von Elektronen aus dem vollständig gefüllten 5σ -Orbital des CO an das Metall (σ donation) sowie zu einer Rückgabe von d-Elektronen des Metalls in zuvor unbesetzte $2\pi^*$ -Zustände des CO (π back donation). Die Gültigkeit des Blyholder-Modells wurde von Aizawa et. al. in einer theoretischen Behandlung des System CO/Pt(111) 1998 erneut bestätigt [Aiza98]. Zur Überprüfung der Systempräparation wurden UP-Spektren aufgenommen und mit Referenzspektren [Brod77] verglichen. In Abbildung 4.27 sind UP-Spektren von reinen und kohlenmonoxidbedeckten Eisenschichten, die nach dem in Kapitel 3.4 beschriebenen Verfahren hergestellt wurden, und das daraus resultie-

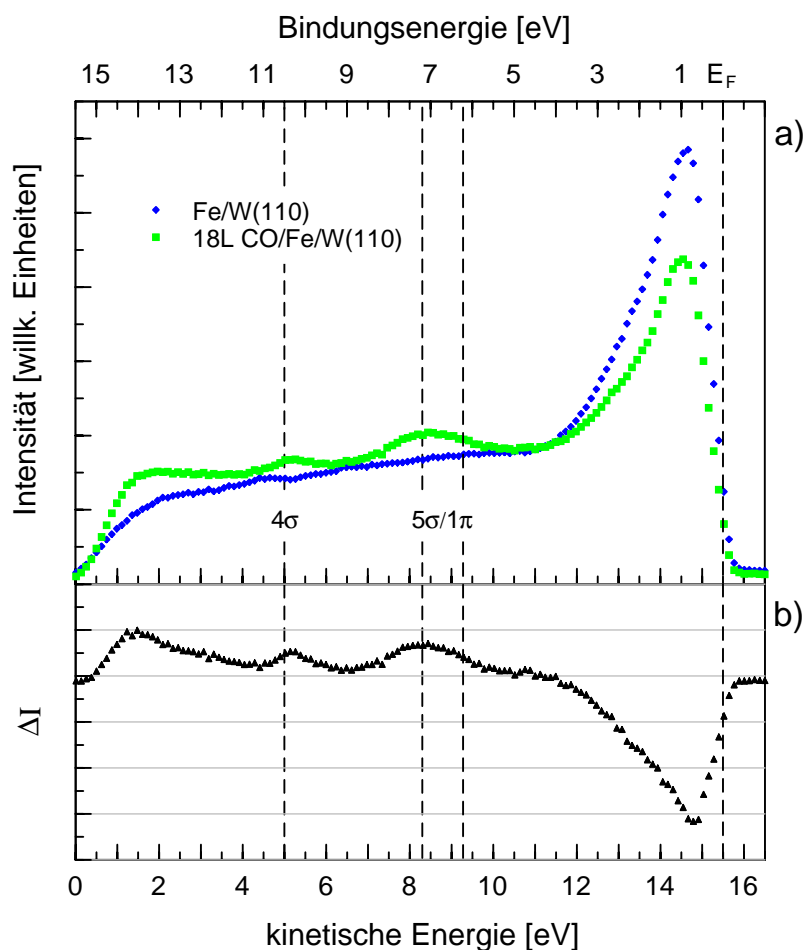


Abbildung 4.27:

- a) UP-Spektren von reinem und kohlenmonoxidbedecktem Eisen auf W(110).
 b) Differenzspektrum, ΔI ergibt sich aus den in a) abgebildeten Intensitäten.

rende Differenzspektrum ΔI gezeigt. Die zwei Strukturen bei den Bindungsenergien $E_B = 10.5$ eV und $E_B = 7$ eV sind charakteristisch für molekular adsorbiertes Kohlenmonoxid. Der Emissionspeak im Bereich von $E_B = 10.5$ eV wird dem 4σ -Orbital zugeordnet, zu der breiten Struktur um $E_B = 7$ eV tragen das 1π - sowie das 5σ -Orbital bei. Angegeben durch die gestrichelten Linien in Abbildung 4.27 ist die energetische Lage dieser Strukturen in Referenzspektren, die an einem kohlenmonoxidbedeckten Fe(110)-Einkristall aufgenommen wurden [Brod77]. Aufgrund der guten Übereinstimmung der Lage der Emissionspeaks der CO-Orbitale kann für die in diesem Experiment präparierten Systeme ebenfalls von molekularer Adsorption des CO ausgegangen werden.

4.4.2 SPMDS-Messungen an CO/Fe/W(110) – Ergebnisse und Diskussion

Der Einfluß von adsorbiertem CO auf MD-Spektren von Eisenschichten ist in Abbildung 4.28 dargestellt. Eingezeichnet sind wiederum die Verbindungslinien der einzelnen Meßpunkte. Schon bei sehr kleinen Bedeckungsgraden zeigt sich eine starke Unterdrückung der Emission aus den Eisenbändern. Nach einem Angebot von 3 L ist die Metalloberfläche durch die Kohlenmonoxidschicht bereits komplett abgeschirmt, so daß ausschließlich die Emission aus den CO-Molekülorbitalen das Spektrum bestimmt.

Da durch die Adsorbatbedeckung vor der Oberfläche keine für den Tunnelprozeß des 2s-Elektrons des He-Atoms notwendigen, freien Energiezustände mehr vorhanden sind, findet keine Resonanzionisation (RI) mit nachfolgender Augerneutralisation (AN) statt, sondern eine direkte Augerdeexcitation (AD) (s. Kapitel 2.2.2). Dieser Wechsel des Deexcitationsprozesses wurde bereits an verschiedenen Systemen nachgewiesen, z. B. an CO/Pd(111) [Conr79], CO/Ni(111) [Rous81, Bozs83] und CO/Pd(111) [Conr82]. In allen Experimenten werden nach Kohlenmonoxidadsorption Strukturen bei kinetischen Energien um $E_{kin} = 6.5$ eV und $E_{kin} = 4$ eV festgestellt, welche der Emission aus $5\sigma/1\pi$ - und 4σ -Orbitalen des CO zugeordnet werden. Den Nachweis dafür, daß eine Augerdeexcitation vorliegt, erbringen Conrad et al. durch den direkten Vergleich von MD-Spektren, die mit Hilfe von He(2^3S)- und He(2^1S)-Atomen aufgenommen wurden. Die oben genannten Strukturen sind in diesen Spektren exakt um die Differenz der Anregungsenergien von $\Delta E^* = 20.6$ eV – 19.8 eV = 0.8 eV verschoben, also entsprechen die beobachteten Peaks den elektronischen Energiezuständen des CO [Conr82]. Da die Energieverteilung der durch Augerneutralisation emittierten Elektronen aus Faltungen der an den AN-Prozessen beteiligten Zustandsdichtefunktionen zusammengesetzt ist, besteht für AN-Spektren dieser direkte Zusammenhang zwischen Anregungsenergie und Emissionspeak nicht.

Neben diesen Strukturen zeigen sich in den MD-Spektren noch zwei weitere Peaks, einer bei $E_{kin} = 1.5$ eV und ein intensitätsschwacher bei $E_{kin} = 12.7$ eV, der in der um den Faktor 20 vergrößerten Darstellung (rechte y-Achse, Abbildung 4.28) sichtbar wird.

Da die Struktur bei 12.7 eV mit steigendem CO-Angebot wächst, kann sie nicht mit den metallischen 3d-Bändern, deren durch AD hervorgerufener Emissionspeak in

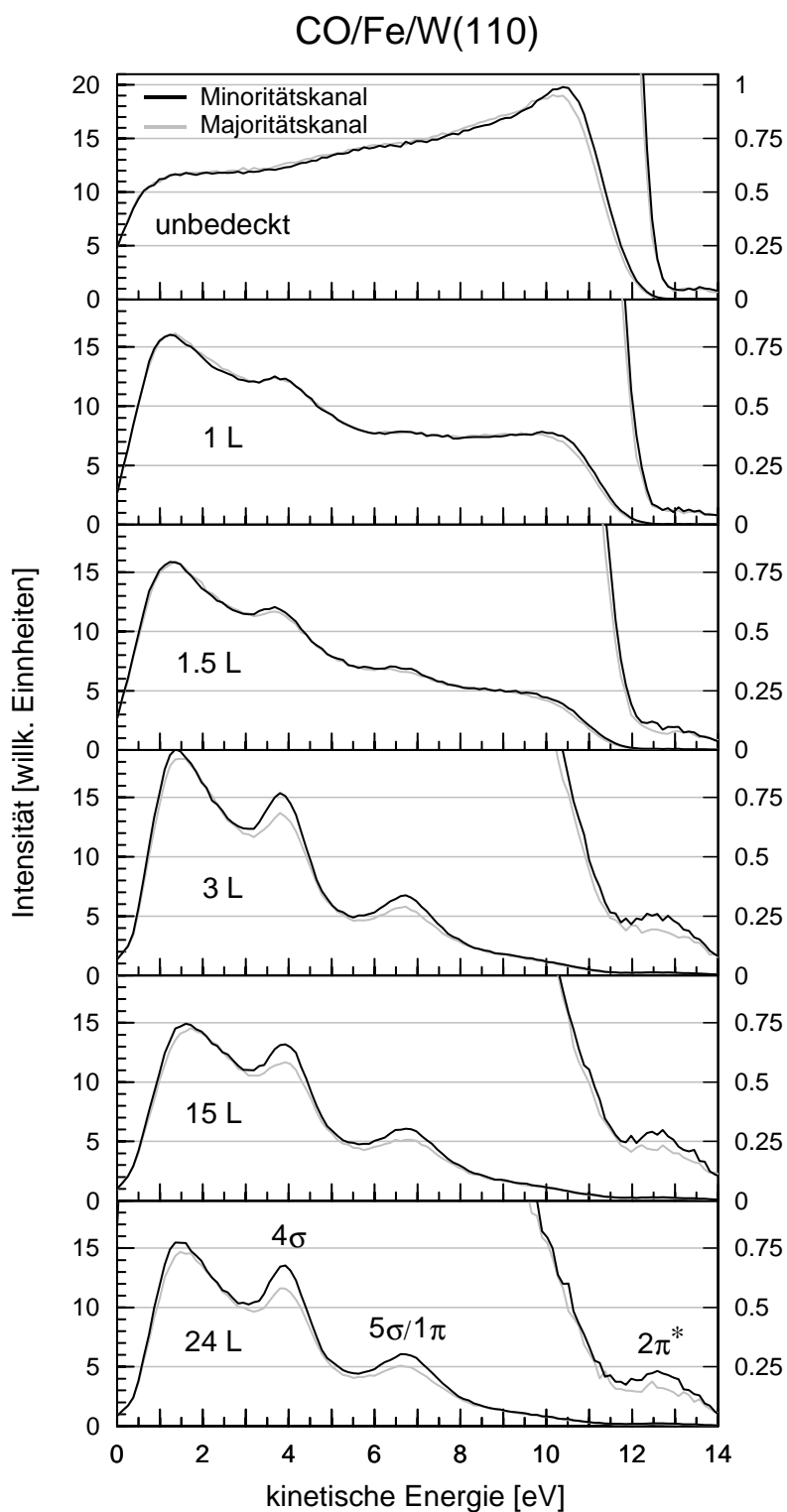


Abbildung 4.28:

Spinaufgelöste MD-Spektren von reinem und kohlenmonoxidbedecktem Eisen auf W(110) bei unterschiedlichem CO-Angebot ($1\text{ L} = 10^{-6}\text{ torr}\cdot\text{s}$). Die auftretenden Strukturen werden den CO-Zuständen 4σ , $5\sigma/1\pi$ und $2\pi^*$ zugeordnet.

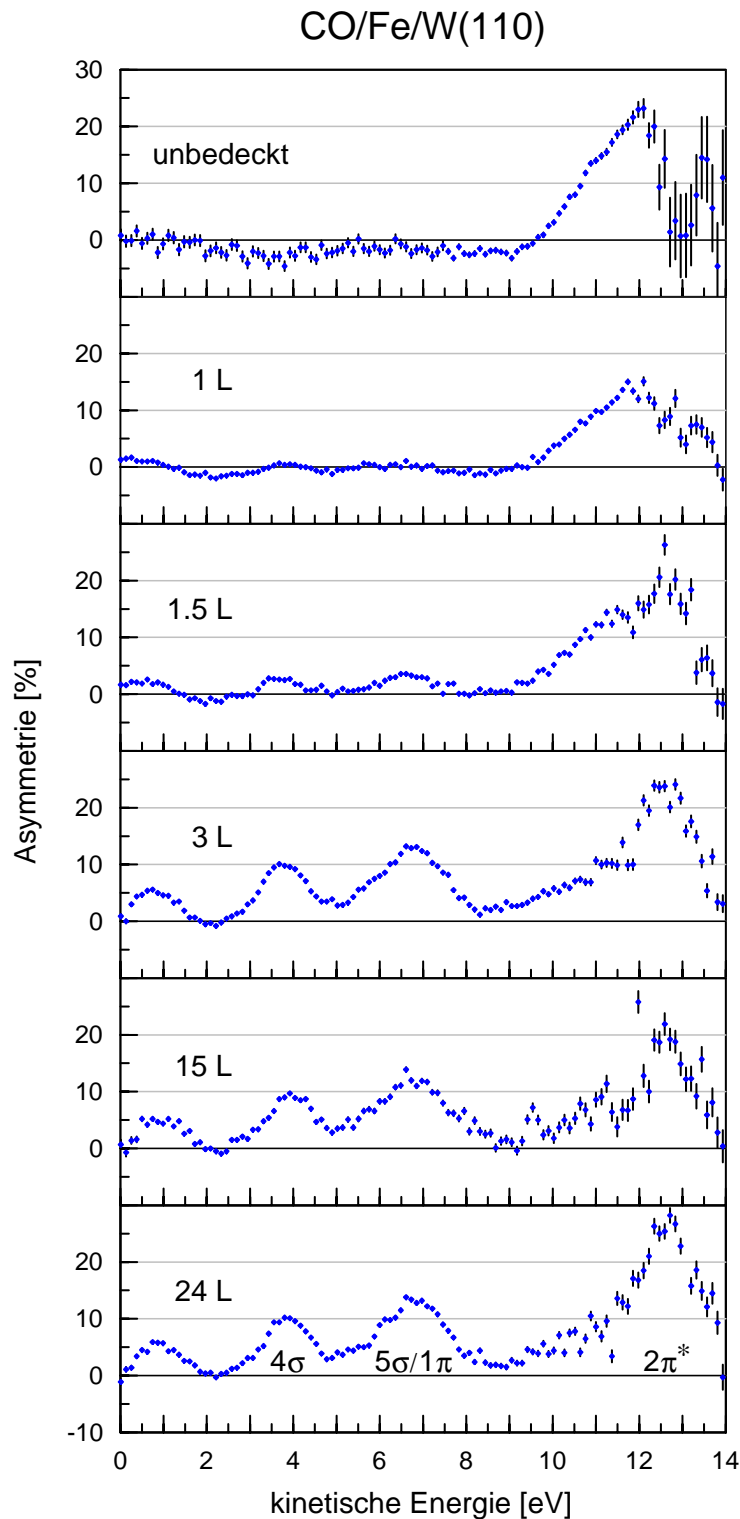


Abbildung 4.29: Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Kohlenmonoxidangebot für Eisen auf W(110) ($1\text{ L} = 10^{-6}\text{ torr}\cdot\text{s}$). Die auftretenden Strukturen werden den CO-Zuständen 4σ , $5\sigma/1\pi$ und $2\pi^*$ zugeordnet.

diesem Energiebereich liegt, in Verbindung gebracht werden. Gegen diese Zuordnung spricht auch die in allen oben zitierten Deexcitationsexperimenten bestätigte totale Abschirmung der Metallunterlage durch das Kohlenmonoxid ab einem Angebot von 2-3 L. Bozso et al. haben diese Struktur in einem MDS-Experiment mit He(2^1S)-Atomen an CO/Ni(111) ebenfalls beobachtet und als Emission aus dem durch *back donation* teilweise aufgefüllten $2\pi^*$ -Zustand gedeutet [Bozs83].

Aus dem in Abbildung 4.29 dargestellten Asymmetrieverlauf ergibt sich erstmalig auch die dominierende Spinsorte der den $2\pi^*$ -Zustand auffüllenden Elektronen. In den oberen Teilbildern ist das mit zunehmender Bedeckung fortschreitende Wachstum einer neuen Struktur bei 12.7 eV und das gleichzeitige Verschwinden des zur Emission aus den Eisenbändern gehörenden Peaks im Energiebereich von 10 - 12.5 eV deutlich erkennbar. Beide Vorgänge sind nach einem Kohlenmonoxidangebot von 3 L abgeschlossen.

Die positive Asymmetrie zeigt an, daß der $2\pi^*$ -Zustand bevorzugt mit Minoritätselektronen besetzt ist.

Da die Emission aus dem $2\pi^*$ -Zustand im gleichen Energiebereich stattfindet wie auch die Emission aus den 3d-Bändern des Eisens, ist ein Einfluß des Kohlenmonoxids auf UP-Spektren äußerst schwer nachweisbar, denn aufgrund der Eindringtiefe der Photonen von einigen Atomlagen kommt es zur Überlagerung der entsprechenden Strukturen. So wurden bei der Untersuchung an einem identisch präparierten System mit spinaufgelöster Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie keinerlei Hinweise auf eine Beteiligung des $2\pi^*$ -Zustandes gefunden [Getz95a, Getz93a]. In einem UPS-Experiment an CO/Ni(001) [Smit80] wird allerdings bei einer Bindungsenergie von $E_B = 2.2$ eV ein Emissionspeak gefunden, der auf das chemisorbierte CO zurückgeführt wird. Smith et al. finden für diesen Zustand eine π -ähnliche Symmetrie und nehmen zur Erklärung ebenfalls die Beteiligung des durch *back donation* von Metallelektronen aufgefüllten 2π -Orbitals des CO an.

Aus den mit SPMDS in der vorliegenden Arbeit gemessenen positiven Asymmetriewerten für die mit den 4σ - und $5\sigma/1\pi$ -Orbitalen verbundenen Zustände des CO/Fe/W(110)-Systems ergibt sich ein Überwiegen von Minoritätselektronen. In den spinaufgelösten MD-Spektren zeigt sich für diese Peaks bei der hier verwendeten Energieauflösung von 160 meV keine Austauschspaltung (s. Abbildung 4.28), so daß innerhalb der Meßgenauigkeit für die Chemisorption von Kohlenmonoxid im Gegensatz zur Adsorption von Sauerstoff keine magnetische Kopplung mit der ferromagnetischen Schicht festgestellt werden kann. Diese beiden Beobachtungen stimmen mit SPUPS-Ergebnissen für die 4σ - und $5\sigma/1\pi$ -Zustände überein [Getz95a].

Der mit SPUPS bisher nicht erfaßte, mit SPMDS hier erstmalig nachgewiesene $2\pi^*$ -Zustand zeigt bei der verwendeten Energieauflösung des Elektronenspektrometers von $\Delta E = 160$ meV ebenfalls keine Austauschspaltung.

Die bei $E_{kin} = 1.5$ eV hier mit SPMDS gemessene Struktur (s. Abbildung 4.28) zeigt eine Asymmetrie von +5%. Bozso et al. nehmen zur Erklärung dieses Peaks in ihren MDS-Messungen wiederum eine Beteiligung des $2\pi^*$ -Zustandes an. Folgen-

der Mechanismus wird für die Emission in diesem Energiebereich vorgeschlagen [Bozs83]: Das 2s-Elektron des metastabilen Heliumatoms tunnelt resonant in den unbesetzten Teil des breiten $2\pi^*$ -Zustandes oberhalb der Fermienergie des chemisorbierten Kohlenmonoxids. Die nachfolgende Augerneutralisation des so entstandenen He^+ -Ions erfolgt durch ein Elektron aus dem 4σ -Zustand, wobei ein $2\pi^*$ -Elektron das System verläßt. Die kinetische Energie dieses Elektrons ergibt sich zu $E_{kin} = E_{1s,\text{He}} - E_{4\sigma,\text{CO/Fe}} - E_{2\pi^*,\text{CO/Fe}} = 24.6 \text{ eV} - 16.5 \text{ eV} - 7 \text{ eV} = 1.1 \text{ eV}$. Die Tatsache, daß die gemessene Asymmetrie das gleiche Vorzeichen aufweist wie der 4σ -Peak, unterstützt die Annahme dieses Mechanismus, wobei der geringere Absolutwert der Asymmetrie dieses Peaks im Vergleich zum 4σ -Peak allerdings andeutet, daß dieses nicht der einzige Beitrag zu der 1.5 eV-Struktur sein kann. Auch das stimmt mit Untersuchungen von Bozso et al. zur Neutralisation der während der Augerdeexcitation des metastabilen Heliums vor der Oberfläche entstandenen CO^+ -Ionen überein, bei denen weitere Möglichkeiten, z. B. eine Augerneutralisation unter Beteiligung des 5σ - oder des 1π -Orbitals, die alle zu einer Emission im Energiebereich von 1-3 eV führen, aufgezeigt werden [Bozs83].

4.4.3 SPMDS-Messungen an CO/Co/W(110) – Ergebnisse und Diskussion

In den Abbildungen 4.30 und 4.31 sind die Ergebnisse der SPMDS-Messungen an kohlenmonoxidbedeckten Kobaltfilmen dargestellt. Auch hier sind sowohl in den Elektronenspektren als auch in den zugehörigen Asymmetrien an den Stellen Strukturen zu erkennen, die den 4σ - und $5\sigma/1\pi$ -Orbitalen des CO im CO/Co/W(110)-System entsprechen. Allerdings liegen diese Strukturen im Vergleich zu dem CO/Fe/W(110)-System bei um 0.6 eV niedrigeren kinetischen Energien, was auf eine stärkere Bindung der Elektronen im CO/Co-System hindeutet. Die mit zunehmendem Kohlenmonoxidangebot wachsende Struktur bei $E_{kin} = 12.0 \text{ eV}$ wird wiederum als Emission aus dem durch *back donation* teilweise aufgefüllten $2\pi^*$ -Zustand gedeutet. Die positive Asymmetrie hat nach einem CO-Angebot von 2L ihren Maximalwert von 21% erreicht. Auch hier wird, wie im System CO/Fe/W(110), der $2\pi^*$ -Zustand bevorzugt von Minoritätselektronen besetzt.

Im Bereich niedriger kinetischer Energien um $E_{kin} = 1.5 \text{ eV}$ wird im Gegensatz zu den Messungen an CO/Fe/W(110) an CO/Co/W(110) keine zusätzliche Struktur gefunden. Es ist zwar ein im Vergleich zu der unbedeckten Kobaltschicht leichter Anstieg der Elektronenzählrate im Bereich um $E_{kin} = 1.5 \text{ eV}$ zu erkennen, dieser führt aber nicht zu einer meßbaren Asymmetrie. In dem oben für CO/Fe/W(110) zur Erklärung des 1.5 eV-Peaks verwendeten Bild kann das bedeuten, daß entweder ein Tunneln des 2s-Elektrons des Heliumatoms in den $2\pi^*$ -Zustand oder die anschließende Augerneutralisation mit Beteiligung der 4σ - und $2\pi^*$ -Zustände am System CO/Co/W(110) nicht möglich ist.

In Übereinstimmung mit UP-Messungen [Getz95a] zeigt auch im AD-Spektrum von CO/Co/W(110) kein Peak eine Austauschspaltung. Ebenso wie auf Eisen erhält also molekular auf Kobalt chemisorbiertes Kohlenmonoxid kein induziertes magnetisches Moment.

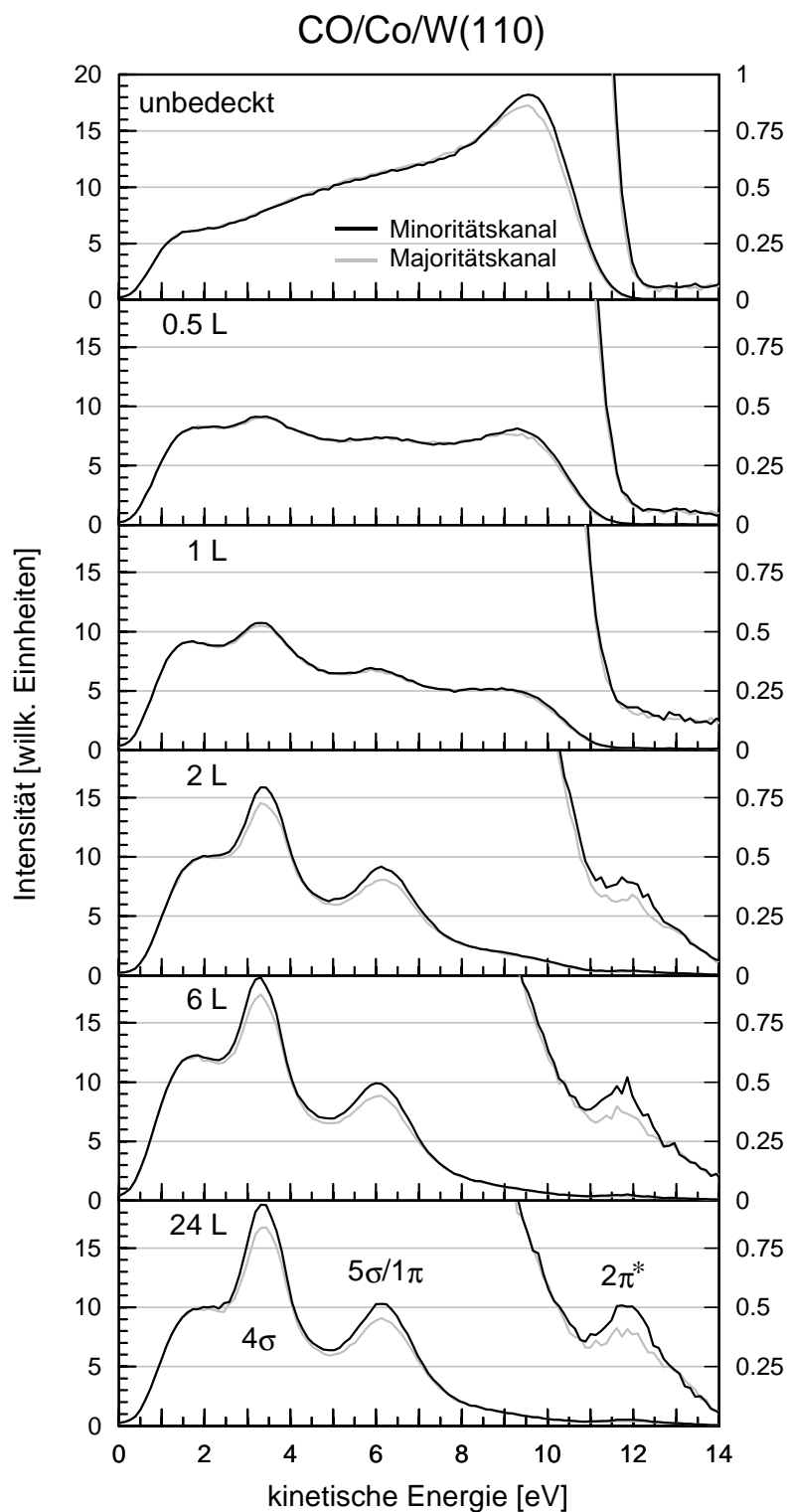


Abbildung 4.30:

Spinaufgelöste MD-Spektren von reinem und kohlenmonoxidbedecktem Kobalt auf W(110) bei unterschiedlichem CO-Angebot ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr}\cdot\text{s}$). Die auftretenden Strukturen werden den CO-Zuständen 4σ , $5\sigma/1\pi$ und $2\pi^*$ zugeordnet.

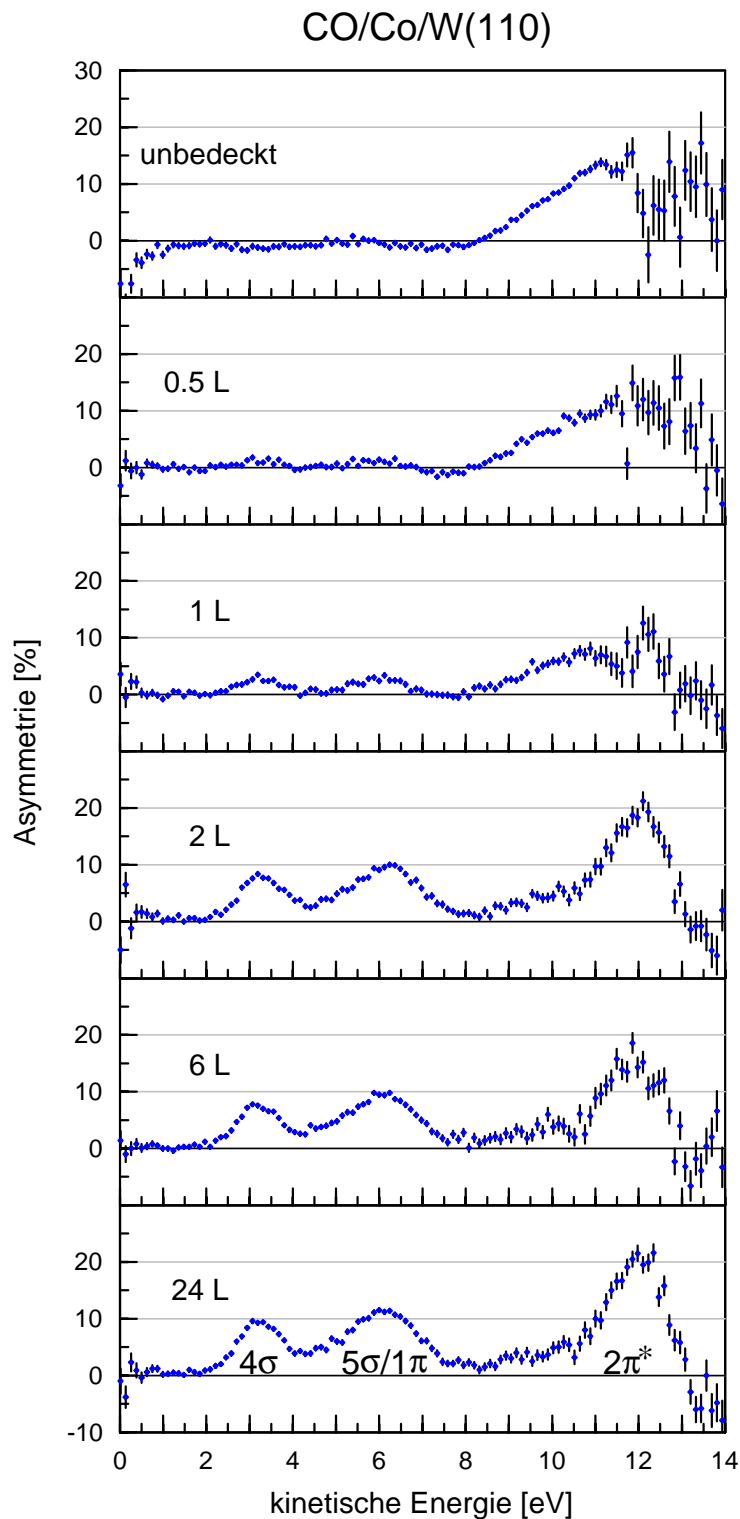


Abbildung 4.31: Abhängigkeit des Asymmetrieverlaufs vom Kohlenmonoxidangebot für Kobalt auf W(110) ($1 \text{ L} = 10^{-6} \text{ torr} \cdot \text{s}$). Die auftretenden Strukturen werden den CO-Zuständen 4σ , $5\sigma/1\pi$ und $2\pi^*$ zugeordnet.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit werden mit spinpolarisierter Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie (SPMDS) die Oberflächen unbedeckter und adsorbatbedeckter ferromagnetischer Schichten untersucht.

Durch die extreme Oberflächenempfindlichkeit der SPMDS ist eine selektive Untersuchung der obersten Atomlage bzw. der Übergangsregion zum Vakuum möglich. Diese Oberflächensensitivität basiert auf der Tatsache, daß die Wechselwirkung zwischen den angeregten, spinpolarisierten Heliumatomen ($\text{He}(2^3\text{S})$) und der Probe im Vakuum stattfindet, bevor es zu einer Berührung zwischen Projektil und Target kommt. Die Auswertung der durch Deexcitation der $\text{He}(2^3\text{S})$ -Atome hervorgerufenen Elektronenspektren erlaubt Rückschlüsse auf die in der Wechselwirkungsregion vorliegenden elektronischen Zustandsdichten.

So wird in der Übergangsregion zum Vakuum vor unbedeckten Eisenfilmen das theoretisch vorhergesagte Überwiegen von Minoritätselektronen im Bereich der Fermienergie gefunden, wogegen nach der Adsorption von Sauerstoff auf Eisen ein Überwiegen von Majoritätselektronen gemessen wird.

Auch für unbedecktes Kobalt und Nickel ergibt sich aus den Meßergebnissen eine Dominanz von Minoritätselektronen. Im Gegensatz zum O/Fe/W(110)-System existieren nach Sauerstoffadsorption auf Kobalt an der Fermikante aber weiterhin mehr Minoritätselektronen.

Die Entfaltung des am O/Fe/W(110)-System gemessenen AN-Spektrums zeigt eine Austauschspaltung der auf den O_{2p} -Zustand zurückgeführten Struktur, wodurch ein magnetisches Ankoppeln des Sauerstoffs an die ferromagnetische Schicht bestätigt wird.

Geschieht die Deexcitation der metastabilen Heliumatome vor unbedeckten und sauerstoffbedeckten Schichten durch eine Resonanzionisation, der eine Augerneutralisation nachfolgt, findet nach der Adsorption von Kohlenmonoxid auf ferromagnetische Schichten eine einstufige Augerdeexcitation statt.

Erstmalig wurden spinpolarisierte MD-Untersuchungen durchgeführt, bei denen die Elektronen durch eine Augerdeexcitation emittiert werden. So ergibt sich für die mit den 4σ - und $5\sigma/1\pi$ -Orbitalen zusammenhängenden Zustände sowohl für das System CO/Fe/W(110) als auch für CO/Co/W(110) ein Überwiegen der Minoritätselektronen. Die gleiche Dominanz kann zum ersten Mal auch für den durch *back donation* aufgefüllten $2\pi^*$ -Zustand nachgewiesen werden. Keiner der beobachteten Peaks ist austausch aufgespalten, so daß für molekular chemisorbiertes Kohlenmonoxid – anders als für atomar adsorbierten Sauerstoff – innerhalb unserer Meßgenauigkeit kein induziertes magnetisches Moment nachweisbar ist.

Durch den Einbau des neuen Manipulators und die damit verbundene technische Verbesserung der Kristallhalterung sind jetzt temperaturabhängige Untersuchungen, z. B. die Bestimmung der Curietemperatur von dünnen Schichten, möglich. Da in die Kristallhalterung sowohl eine Heizung als auch eine Kühlung integriert sind, kann nun eine definierte Substratkristalltemperatur eingestellt werden. Da

die Schichtqualität die Höhe des Absolutwertes des Asymmetrieverlaufs beeinflusst, ist ein Studium dieser Abhängigkeit nun unter genauer kontrollierten Bedingungen möglich, z. B. ob das Aufdampfen von Eisen auf einen auf 200° C geheizten Substratkristall zu einer höheren Schichtqualität führt als das in Anhang A.2 dargestellte Verfahren.

Eine gekühlte ferromagnetische Schicht eröffnet nun des weiteren die Möglichkeit, die elektronischen Zustände von physisorbierten Edelgasen zu untersuchen. Mit spinpolarisierter Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie wurde beispielsweise für physisorbiertes Xenon eine Spinaufspaltung der Xe 5_p -Zustände gefunden [Getz93c, Getz93a].

Als erste temperaturabhängige Messungen sind in Kooperation mit M. Getzlaff, Universität Hamburg, Untersuchungen an dünnen Gadoliniumschichten geplant. Von der Hamburger Gruppe wurde mit STM eine Austauschspaltung des Oberflächenzustandes von Gd(0001) beobachtet, die mit steigender Temperatur zwar abnimmt, aber auch oberhalb der Curietemperatur erhalten bleibt [Getz98]. Mit SPMDS soll nun geklärt werden, ob die gefundene Aufspaltung durch eine Spinpolarisation des Oberflächenzustandes hervorgerufen wird.

Anhang

A.1 Metastabiles Helium

Angeregte atomare Zustände, aus denen ein elektrischer Dipolübergang in den Grundzustand nicht möglich ist, werden als **metastabil** bezeichnet, da ihre Lebensdauer im Vergleich zu der Zeit, nach der ein elektrischer Dipolübergang stattfindet (typischerweise 10^{-8} s), deutlich erhöht ist. Solche metastabilen Atome fallen z. B. durch die Emission von zwei Photonen oder magnetische Dipolübergänge in den Grundzustand zurück. Es kann aber auch durch die Wechselwirkung mit anderen Teilchen oder Festkörpern gezielt eine Deexcitation herbeigeführt werden (s. Kapitel 2.2.2).

Aufgrund des Pauliprinzips muß die Gesamtwellenfunktion des Heliumatoms antisymmetrisch sein, weil sich die beiden Elektronen nicht im gleichen Zustand befinden dürfen. Weil für Atome mit kleiner Ordnungszahl Z die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigbar ist, folgt aus einer symmetrischen Ortswellenfunktion immer eine antisymmetrische Spinfunktion und umgekehrt. Das Termschema des Heliums zerfällt deshalb in ein Singulettssystem ($\vec{S} = 0$) mit antisymmetrischer und ein Triplettssystem ($\vec{S} = 1$) mit symmetrischer Spinfunktion (s. Abbildung A.1). Da bei einem elektrischen Dipolübergang weder der Symmetriecharakter der Ortswellenfunktion noch der der Spinfunktion geändert wird, kann es zu keinen Übergängen zwischen den beiden Termsystemen kommen (Interkombinationsverbot [Mayer85]).

Aufgrund der Drehimpulsauswahlregel $\Delta l = \pm 1$ ergeben sich zwei metastabile Zustände verschiedener Multiplizität. Der $\text{He}(2^1\text{S})$ -Zustand kann durch die Emission von zwei Photonen zerfallen [Drak69], wobei die Lebensdauer $\tau = 19.5$ ms beträgt [Drak73]. Bei dem $\text{He}(2^3\text{S})$ -Zustand mit $\vec{S} = 1$ wird der Übergang in den $\text{He}(1^1\text{S})$ -Zustand zusätzlich noch durch das Interkombinationsverbot unterdrückt, so daß dieser Zustand als Grundzustand des Triplettsystems angesehen werden kann. Er zerfällt bevorzugt durch einen magnetischen Dipolübergang mit einer Rate von $1.27 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ [Drak71], was einer Lebensdauer von $\tau = 0.8 \cdot 10^4$ s entspricht.

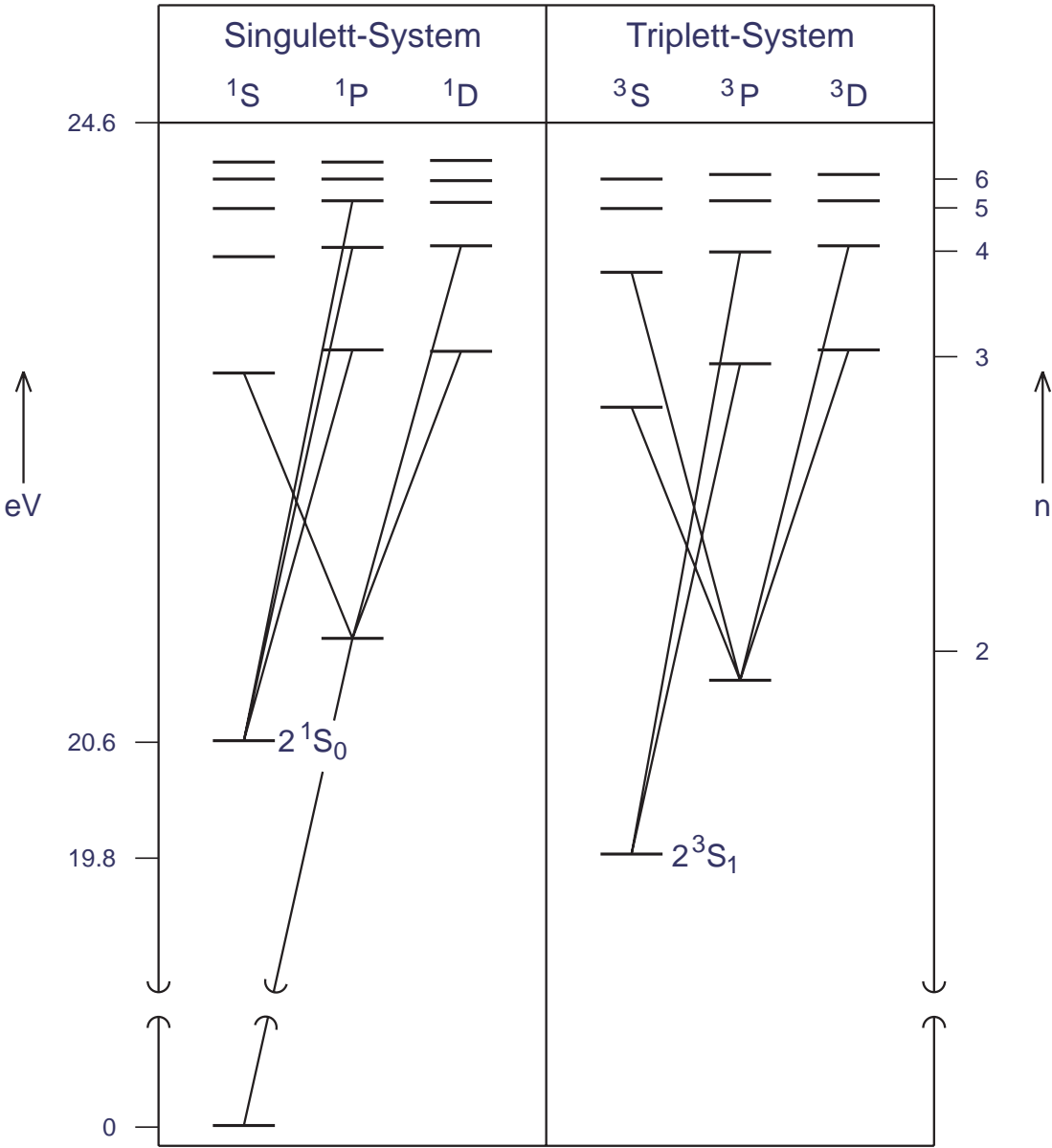


Abbildung A.1:
Termschema des Heliumatoms

(nach [Maye85])

A.2 Das Aufwachsen von epitaktischen Schichten auf W(110)

Eine Methode, metallische Schichten auf einkristallinen Substraten herzustellen, ist die Epitaxie. Sind die Gitterkonstanten von Substrat und verdampftem Metall ähnlich, so wächst die erzeugte Schicht kristallin auf, wobei die Orientierung der Schicht durch das Substrat bestimmt wird. Grundsätzlich gibt es dabei drei verschiedene Arten des Wachstums, die zu unterschiedlich beschaffenen Schichten führen [Berg92].










reines Lagenwachstum Frank - van der Merwe	Stranski - Krastanov	reines Inselwachstum Volmer - Weber	aufgedampfte Metallmenge
			$M < 1$
			$1 < M < 2$
			$M > 2$

Abbildung A.2:

Verschiedene Modelle des epitaktischen Schichtwachstums.

M: aufgedampfte Metallmenge ($M = 1$ entspricht einer Monolage)

Bei dem **Frank - van der Merwe - Wachstum** handelt es sich um ein reines Lagenwachstum, d. h., daß zuerst zweidimensionale Cluster entstehen, die sich im weiteren Verlauf zu einer vollständigen Monolage zusammenschließen. Erst dann beginnt der Aufbau der nächsten Lage. So kommt es zu der Entstehung einer glatten, geschlossenen Oberfläche. Im Gegensatz dazu bilden sich beim **Volmer - Weber - Wachstum** von Anfang an dreidimensionale Cluster, so daß eine rauhe Schicht aufwächst. Das **Stransky - Krastanoff - Wachstum** ist eine Kombination dieser beiden Typen und startet als reines Lagenwachstum, geht nach einer oder mehrerer Monolagen aber in ein dreidimensionales Clusterwachstum über.

Auf welche Art und Weise die Schicht aufwächst, hängt u. a. von der Oberflächenenergie des Substrats, welche die Beweglichkeit der Schichtatome bestimmt, und von der Beschaffenheit der Oberfläche ab. An Verunreinigungen oder Defektstellen kann es zum Einfang von Schichtatomen kommen.

Des weiteren spielt auch der "Misfit" f der Gitterkonstanten

$$f = \frac{a_{\text{Substrat}} - a_{\text{Schicht}}}{a_{\text{Substrat}}} \quad (\text{A.1})$$

von Substrat und aufgebrachtem Material eine entscheidende Rolle. Reines Lagenwachstum findet nur dann statt, wenn der Misfit kleiner als 8% ist [Merw82].

Für das System **Eisen** auf W(110) liegt f bei 9.2%. Dampft man das Eisen allerdings bei einer Substrattemperatur von ca. 200° C auf, kommt es trotzdem zur Ausbildung von gut geordneten Schichten [Kurz86]. Dabei wachsen die ersten Lagen pseudomorph auf, das Eisengitter wird also auf die Gitterkonstante von Wolfram gedehnt. Bei der Entstehung der folgenden Schichten gibt es dann periodische Gitterversetzungen, durch die es zu einer schrittweisen Anpassung an die Gitterkonstante von Eisen kommt. Dieser Vorgang ist nach ca. 10 Monolagen abgeschlossen [Grad82].

In dem in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Experiment werden die Schichten bisher bei einer Kristalltemperatur von ca. 30° C aufgedampft, was zu rauen Oberflächen führt. Durch ein nachfolgendes, kurzzeitiges Erhitzen auf ca. 200° C ("Tempern") wird eine Neuordnung des Systems erreicht. Die Umordnung zu einer geschlossenen Oberfläche wird mit Hilfe von LEED-Bildern kontrolliert. Die zuvor unscharfen, streifenförmig vergrößerten Bildpunkte gehen in scharfe Reflexe mit hohem Kontrast über.

Da die neu konstruierte Kristallhalterung das Heizen während des Aufdampfens erlaubt (s. Kapitel 3.3), besteht nun auch die Möglichkeit, direkt auf einen 200° C warmen Kristall aufzudampfen.

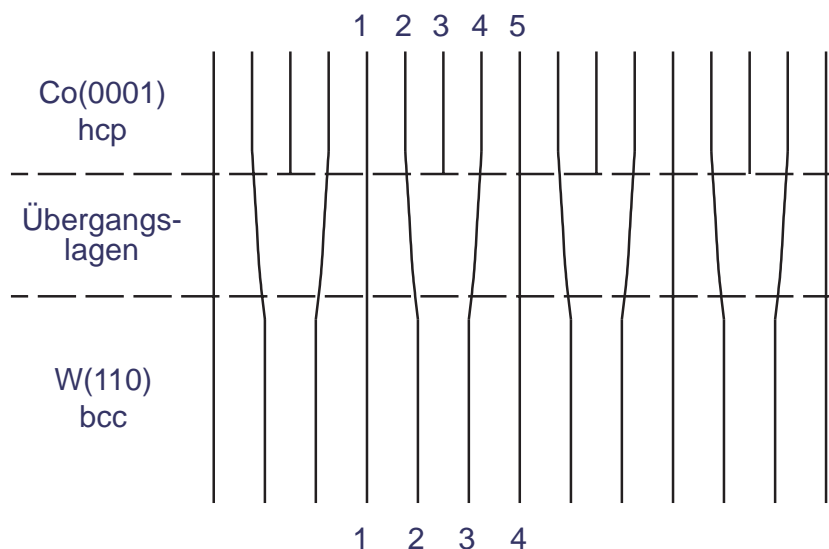


Abbildung A.3:

Schematische Darstellung eines möglichen, lagenweisen Schichtwachstums bei unterschiedlichen Gitterkonstanten durch elastische Deformation am Beispiel von Kobalt auf W(110).

Auch **Kobalt** wächst auf W(110) lagenweise auf, wenn die Substrattemperatur unter 180° C liegt [John89]. Es bildet sich jedoch eine hcp(0001)-Struktur. Der Misfit von 20.5% wird durch eine elastische Deformation des Gitters, die dazu führt, daß sich jedes fünfte Kobaltatom an jedem vierten Wolframatom ausrichtet (s. Abbildung A.3), auf einen Wert von

$$f = \frac{4a_{\text{Substrat}} - 5a_{\text{Co}}}{4a_{\text{W}}} = 0.7\% \quad (\text{A.2})$$

reduziert. Ab einer Schichtdicke von vier Monolagen ist die hcp(0001)-Struktur des Kobalt erreicht [Ocie90].

Eine detaillierte Beschreibung des Aufwachsens von **Nickel** auf W(110) wird in [Kämp88] gegeben. Es entsteht eine fcc(111)-Oberfläche, deren $[1\bar{1}0]$ -Achse parallel zur $[001]$ -Richtung der W(110)-Fläche liegt. Der Misfit beträgt 3.6% entlang der $W[1\bar{1}0]$ -Achse und 21.5% entlang der $W[001]$ -Richtung. Letzterer wird jedoch dadurch kompensiert, daß sich jedes neunte Nickelatom an jedem siebten Wolframatom ausrichtet, was zu einer Gitterdeformation von etwa 1% führt. Der Übergang zu der normalen Ni(111)-Struktur ist nach etwa zehn Monolagen abgeschlossen. Die optimale Substrattemperatur während des Aufdampfens liegt bei 300° C für die erste Atomlage und bei 170° C für alle weiteren.

A.3 Definition der mit der FLAPW-Methode berechneten Größen

Die lokale Zustandsdichte $\rho(\vec{r}, \epsilon)$ (LDOS: local Density of States) ist definiert als

$$\rho(\vec{r}, \epsilon) = \sum_i |\Psi_i(\epsilon, \vec{r})|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_i) . \quad (\text{A.3})$$

Mit der FLAPW-Methode ist es für Schichtsysteme möglich, diese lokale Zustandsdichte für jede einzelne Atomlage getrennt zu berechnen (s. Kapitel 2.1.1). Diese lagenspezifische Zustandsdichte $\rho_\nu(\epsilon)$ der Atomlage mit der Nummer ν ergibt sich durch Integration von $\rho(\vec{r}, \epsilon)$ über das Volumen Ω_ν der Lage:

$$\rho_\nu(\epsilon) = \int_{\Omega_\nu} \sum_i |\Psi_i(\epsilon, \vec{r})|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_i) d^3 r . \quad (\text{A.4})$$

Mit Einführung der partiellen Zustandsdichte $\hat{\rho}_{l\nu}^{(\alpha)}(\epsilon)$ des Atom α der ν -ten Atomlage kann $\rho_\nu(\epsilon)$ dargestellt werden als

$$\rho_\nu(\epsilon) \approx \sum_{l,\alpha} \hat{\rho}_{l\nu}^{(\alpha)}(\epsilon) . \quad (\text{A.5})$$

Zur Untersuchung von magnetischen Systemen ist es außerdem möglich, die lagenspezifischen Zustandsdichten spinaufgelöst anzugeben. Die Ergebnisse für eine Fe(110)-Schicht aus sieben Lagen sind in Abbildung 4.5 gezeigt.

Eine weitere Größe, die mit der FLAPW-Methode bestimmt werden kann, ist die Spindichte. Die totale Spindichte $m(\vec{r})$ ergibt sich dabei aus der Differenz der spinaufgelösten Zustandsdichten $\rho_\uparrow(\vec{r})$ (Majoritätsspindichte) und $\rho_\downarrow(\vec{r})$ (Minoritätsspindichte):

$$m(\vec{r}) = \rho_\uparrow(\vec{r}) - \rho_\downarrow(\vec{r}) \quad (\text{A.6})$$

Zum Vergleich mit experimentellen Methoden, die nur Zustände untersuchen, die in der Nähe der Fermienergie E_F liegen (z. B. SPMDS, SPSTM), kann die energieaufgelöste Spindichte $m(\vec{r}, E_F)$ bestimmt werden, indem bei der Differenzbildung nur Zustände berücksichtigt werden, die in einen Energieintervall $\Delta\epsilon$ unterhalb von E_F liegen:

$$m(\vec{r}, E_F) = \rho_\uparrow(\vec{r}, E_F) - \rho_\downarrow(\vec{r}, E_F) \quad (\text{A.7})$$

Eine detaillierte Beschreibung, wie mit Hilfe der FLAPW-Methode die oben definierten Größen berechnet werden, befindet sich z. B. in [Weim95] und [Weim93].

A.4 Das Auswerteprogramm RMS

Zur Auswertung der mit Hilfe des Meßprogramms DEMESS [Eger94] aufgenommenen Spektren ist im Rahmen dieser Arbeit das Programm **RMS** (Rechnen Mit Spektren) entwickelt worden.

Jedes gemessene Spektrum wird in einer eigenen Datei abgespeichert, wobei sich der automatisch erzeugte Dateiname aus einer fortlaufenden Nummer und der Endung .rdt (Rohdaten) zusammensetzt. Diese Spektrendateien enthalten neben den Zählraten, die zeilenweise zusammen mit dem DAC-Kanal (s. Kapitel 3.5) und der entsprechenden Energie angegeben werden, einen Kopf mit 18 zusätzlichen Eintragungen, in dem unter anderem die Einstellungen der Elektronenoptik, die Richtung der Magnetisierung, die Atomspinrichtung und die Uhrzeit protokolliert werden. Anhand dieses Kopfes wird bei der Auswertung sichergestellt, daß keine Spektren verknüpft werden, die bei unterschiedlichen Meßparametern aufgenommen worden sind.

Ziel der Entwicklung war ein Programm, das eine möglichst flexible Schnittstelle zum Rechnen mit den Spektren zur Verfügung stellt. Des weiteren müssen an den vorgegebenen Meßzyklus (s. Kapitel 3.6) angepaßte Funktionen zur schnellen und einfachen Bestimmung der Asymmetrie und anderer Ergebnisse bereitgestellt werden.

Die Berechnung eines resultierenden Spektrums geschieht durch die kanalweise Verknüpfung der Zählraten eines Ausgangsspektrums entweder mit den Zählraten eines zweiten Spektrums oder mit einer Zahl. Als grundlegende Verknüpfungen stellt RMS dazu Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division sowie die Bildung des Kehrwertes und der Quadratwurzel zur Verfügung.

Die Steuerung von RMS geschieht mit Hilfe von Eingabedateien, die zeilenweise die Spektrendateinamen bzw. die auszuführenden Verknüpfungen enthalten müssen. Zur Abarbeitung der Steuerdatei verwendet RMS intern einen Stack (Stapel), auf dem diejenigen Spektren abgelegt werden, auf die die nachfolgende Verknüpfung angewendet werden soll. Die Verknüpfung ersetzt dann auf dem Stack die verwendeten Spektren mit dem resultierenden Spektrum. So können durch die Erzeugung von entsprechenden Steuerdateien komplexe Auswertevorgänge durchgeführt werden.

Neben den Grundverknüpfungen sind noch Funktionen zum einfachen Aufsummieren von Spektrenserien, zum Glätten und Integrieren, zum Abspeichern neuer Spektrendateien, zum Ausführen externer Programme und zum Einfügen von auf eine Fermienergie bezogenen Energiewerten definiert. Auch das Anlegen von temporären Spektren im Speicher zur späteren Verwendung auf den Stack ist möglich. Außerdem existiert noch eine große Zahl von Auswerteabläufen, die an den aus sechzehn Einzelspektren bestehenden Meßzyklus angepaßt sind. So ist es mit einzelnen Befehlen möglich, z. B. die Asymmetrie (s. Gleichung 3.10), die spinaufgelösten Zählraten (s. Gleichung 3.8) oder die Falschsymmetrien (s. Gleichungen 3.12 - 3.15) zu bestimmen. Des weiteren kann aus mehreren zuvor bestimmten Asymmetrien der gewichtete Mittelwert berechnet werden.

Eine vollständige Liste aller zur Verfügung stehenden Befehle mit Erläuterungen und die genaue Beschreibung der in der Steuerdatei zu verwendenden Syntax befinden sich im Handbuch [Rapp97].

Neben der Auswertung kann RMS auch zur grafischen Darstellung von Spektren bzw. Asymmetrien auf dem Bildschirm verwendet werden. Das ermöglicht z.B. den schnellen Vergleich mehrerer Spektren, ohne daß diese zuerst in ein anderes Programm importiert werden müssen. Das aktuell auf dem Bildschirm angezeigte Bild kann als Postscriptdatei auf der Festplatte abgespeichert und später ausgedruckt werden. Eine Beschreibung aller im Grafikmodul zur Einstellung des Anzeigebereiches definierten Tastaturkürzel befindet sich ebenfalls im Handbuch.

RMS wurde unter dem Betriebssystem DOS in der Programmiersprache C geschrieben, als Compiler stand Borland C++ 3.1 zur Verfügung. Das Grafikmodul verwendet zusätzlich die Bibliothek libgrx 2.0 von Csaba Biegel [Bieg95].

Das Programm ist so strukturiert, daß es mit geringem Aufwand verändert werden kann. So ist speziell das Hinzufügen eines neuen Befehls durch eine einfache Erweiterung der Befehlsliste zu realisieren. Durch den modularen Aufbau ist es außerdem leicht möglich, die Rechenfunktionen zu einer eigenen Bibliothek zusammenzufassen, um sie für andere Programme zugänglich zu machen. Dadurch ist auch die Portierung auf andere Betriebssysteme, wie z.B. Windows oder UNIX, möglich.

Glossar

AD	Augerdeexcitation
AN	Augerneutralisation
bcc	body centered cubic (kubisch innenzentriert)
DOS	density of states (Zustandsdichte)
fcc	face centered cubic (kubisch flächenzentriert)
FLAPW	full potential linearized augmented plane wave
hcp	hexagonal close packing (hexagonal dichteste Packung)
INS	Ionen-Neutralisationsspektroskopie
LDOS	local density of states (lokale Zustandsdichte)
LEED	low energy electron diffraction
MDS	Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie
MOKE	magnetooptischer Kerr-Effekt
QMA	quadrupole mass analyser (Quadrupol-Massenspektrometer)
RI	Resonanzionisation
SEV	Sekundärelektronenvervielfacher
SPIPE	spinpolarisierte inverse Photoemissionsspektroskopie
SPMDS	spinpolarisierte Metastabilen-Deexcitationsspektroskopie
SPSTM	spin polarized scanning tunneling microscopy (spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie)
SPUPS	spinpolarisierte Ultraviolettphotoemissionsspektroskopie
STM	scanning tunneling microscopy (Rastertunnelmikroskopie)
TMP	Turbomolekularpumpe
TSP	Titansublimationspumpe

Abbildungsverzeichnis

2.1	Slab-Geometrie bei der FLAPW-Methode	6
2.2	Zusammenhang zwischen Bandstruktur und UP-Spektren	9
2.3	Mögliche Deexcitationsprozesse	10
2.4	$E^*(d)$ und $\Gamma(d)$ für den AD-Prozeß	11
2.5	Schema der Augerdeexcitation	12
2.6	Schema der Augerneutralisation	13
2.7	Zusammenhang zwischen Zählraten und Zustandsdichten	15
3.1	Übersicht des experimentellen Aufbaus	18
3.2	Ansicht der Experimentierkammer	19
3.3	Querschnitt der Gasentladungskammer	21
3.4	Querschnitt des Sechspolmagneten	23
3.5	Magnetfeldverlauf im Sechspolmagneten	23
3.6	Querschnitt des Spinflippers	23
3.7	Magnetfeldverlauf im Spinflipper	24
3.8	Spin- und Feldrichtungen im Spinflipper	24
3.9	Nachweis der angeregten Heliumatome	25
3.10	Stern-Gerlach Profile des polarisierten Heliumstrahls	26
3.11	Querschnitt der UV-Gasentladungslampe	27
3.12	Ansicht und Funktionsweise der neuen Kristallhalterung	28
3.13	(110)-Fläche des bcc-Wolframkristalls	30
3.14	Ansicht des Elektronenstrahlverdampfers	32
3.15	Anordnung des Elektronenstrahlverdampfers	32
3.16	Abhängigkeit der Schichtdicke von der Aufdampfzeit	33
3.17	Querschnitt der Elektroneneintrittsoptik	35
3.18	Schematische Darstellung des Elektronennachweises	36
3.19	Blockschaltbild der Steuerungs- und Nachweiselektronik	37
4.1	MD-Spektren während der Reinigung des W(110)-Kristalls	42
4.2	Spinaufgelöste MD-Spektren und Asymmetrie von W(110)	43
4.3	MD-Spektren und Asymmetrie von Eisen auf W(110)	45
4.4	MD- und UP- Spektrum von Eisen auf W(110)	46
4.5	Theoretische Zustandsdichten einer Fe(110)-Schicht	47
4.6	Theoretische Spindichten einer Fe(110)-Schicht	47
4.7	Einfluß des Temperns auf die Asymmetrie von Fe/W(110)	49
4.8	Entfaltete SPMD-Spektren von Fe/W(110)	50
4.9	MD-Spektren und Asymmetrie von Kobalt auf W(110)	52
4.10	Theoretische Zustandsdichten einer Co(0001)-Schicht	53
4.11	Theoretische Spindichten von Co(110)/W(110)	53
4.12	MD-Spektren und Asymmetrie von Nickel auf W(110)	55
4.13	Theoretische Spindichten von Ni(110)	56
4.14	UP-Spektren von sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110)	58
4.15	MD-Spektren von sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110)	59
4.16	Asymmetrie von sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110), Teil 1	60

4.17	Asymmetrie von sauerstoffbedecktem Eisen auf W(110), Teil 2	61
4.18	Theoretische Zustandsdichten von Sauerstoff auf Fe(110))	62
4.19	Theoretische Spindichten von Sauerstoff auf Fe(110)	62
4.20	Entfaltete SPMD-Spektren von 6L O/Fe/W(110)	64
4.21	Spinaufgelöste UP-Spektren von 5L O/Fe/W(110)	64
4.22	MD-Spektren von sauerstoffbedecktem Kobalt auf W(110)	66
4.23	Asymmetrie von sauerstoffbedecktem Kobalt auf W(110), Teil 1	67
4.24	Asymmetrie von sauerstoffbedecktem Kobalt auf W(110), Teil 2	68
4.25	Theoretische Zustandsdichten von Sauerstoff auf Co(110)	69
4.26	Blyholder Modell	70
4.27	UP-Spektren von kohlenmonoxidbedecktem Eisen auf W(110)	71
4.28	MD-Spektren von kohlenmonoxidbedecktem Eisen auf W(110)	73
4.29	Asymmetrie von kohlenmonoxidbedecktem Eisen auf W(110)	74
4.30	MD-Spektren von kohlenmonoxidbedecktem Kobalt auf W(110)	77
4.31	Asymmetrie von kohlenmonoxidbedecktem Kobalt auf W(110)	78
A.1	Termschema des Heliumatoms	82
A.2	Modelle des epitaktischen Schichtwachstums	83
A.3	Lagenweises Wachstum bei unterschiedlichen Gitterkonstanten	84

Tabellenverzeichnis

3.1	Parameter des metastabilen He(2^3S)-Strahls	20
3.2	Betriebsparameter der Gasentladung	21
3.3	Daten des Sechspolmagneten	22
3.4	Gitterstruktur der aufgedampften Schichten	31
3.5	Zusammensetzung der Asymmetrie	38

Literaturverzeichnis

- [Aiza98] H. Aizawa und S. Tsuneyuki
Surf. Sci. **399** (1998) L364-L370
- [Ande75] O. K. Andersen
Phys. Rev. B **12** (1975) 3060-3083
- [Baum88] G. Baum, W. Raith und H. Steidl
Z. Phys. D **10** (1988) 171-178
- [Baum89] G. Baum, M. Fink, W. Raith, H. Steidl und J. Taborski
Phys. Rev. A **40** (1989) 6734-6736
- [Baum91] P. Baumgart, B. Hillebrands und G. Güntherodt
J. Magn. Magn. Mater **93** (1991) 225-228
- [Berg92] Bergmann Schäfer
Lehrbuch der Experimentalphysik, Festkörper (Band 6)
Walter de Gruyter, Berlin - New York (1992)
- [Bieg95] C. Biegel
GRX graphics library user's manual (1995)
- [Blyh64] G. Blyholder
J. Phys. Chem. **68** (1964) 2772-2778
- [Bozs83] F. Bozso, J. T. Yates, Jr., J. Arias, H. Metiu und R. M. Martin
J. Chem. Phys. **78** (1983) 4256-4269
- [Brid79] M. E. Bridge und R. M. Lambert
Surf. Sci. **82** (1979) 413-424
- [Brod76] G. Brodén, T. N. Rhodin, C. Bruckner, R. Benbow und Z. Hurych
Surf. Sci. **59** (1976) 593-611
- [Brod77] G. Brodén, G. Gafner und H. P. Bonzel
Appl. Phys. **13** (1977) 333-342
- [Camp90] R. A. Campbell, J. A. Rodriguez und D. W. Goodman
Surf. Sci. **240** (1990) 71-80
- [Cane96] M. Canepa, E. Magnano, A. Campora, P. Cantini, M. Salvietti und
L. Mattera
Surf. Sci. **352-354** (1996) 36-40
- [Cast82] G. R. Castro und J. Küppers
Surf. Sci. **123** (1982) 456-470

- [Coba44] A. Cobas und W. E. Lamb, Jr.
Phys. Rev. **65** (1944) 327-337
- [Conr79] H. Conrad, G. Ertl, J. Küppers, W. Wang, K. Gérard und H. Haberland
Phys. Rev. Lett. **42** (1979) 1082-1086
- [Conr80] H. Conrad, G. Ertl, H. Haberland, J. Küppers und W. Sesselmann
Surf. Sci. **100** (1980) L461-L466
- [Conr82] H. Conrad, G. Ertl, J. Küppers, W. Sesselmann und H. Haberland
Surf. Sci. **121** (1982) 161 - 180
- [Drak69] G. W. F. Drake, G. A. Victor und A. Dalgarno
Phys. Rev. **180** (1969) 25-32
- [Drak71] G. W. F. Drake
Phys. Rev. A **3** (1971) 908-915
- [Drak73] G. W. F. Drake
In: S. J. Smith und G. K. Walters, Herausgeber
Atomic Physics **3**, 269-290
Plenum Press, New York (1973)
- [Eger91] D. Egert
Diplomarbeit, Universität Bielefeld (1991)
- [Eger94] D. Egert
Dokumentation des Meßprogramms, Laborhandbuch (1994)
- [Elme91] H. J. Elmers, T. Furubayashi, M. Albrecht und U. Gradmann
J. Appl. Phys. **70** (1991) 5764-5768
- [Ertl85] G. Ertl und J. Küppers
Low Energy Electrons and Surface Chemistry
VCH Verlagsgesellschaft (1985)
- [Farl91] M. Farle, A. Berghaus, Y. Li und K. Baberschke
J. Magn. Magn. Mater **93** (1991) 215-219
- [Ferr98] P. Ferro, R. Moroni, M. Salvietti, M. Canepa und L. Mattera
Surf. Sci. **407** (1998) 212-220
- [Focu92] Focus GmbH
UHV-Verdampfer EFM 3 mit integriertem Flux Monitor,
Betriebsanleitung (1992)
- [Förs99] S. Förster
Universität Bielefeld, private Mitteilung (1999)

- [Fran94] U. Franke
Diplomarbeit, Universität Bielefeld (1994)
- [Free87] A. J. Freeman und C. L. Fu
J. Appl. Phys. **61** (1987) 3356-3361
- [Getz93a] M. Getzlaff
Dissertation, Universität Bielefeld (1993)
- [Getz93b] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
Solid State Comm. **87** (1993) 467-469
- [Getz93c] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 793-796
- [Getz94a] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
J. Magn. Magn. Mater **131** (1994) 304-310
- [Getz94b] M. Getzlaff, D. Egert, H. Steidl, G. Baum und W. Raith
Z. Phys. D **30** (1994) 245-249
- [Getz95a] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
J. Chem. Phys. **103** (1995) 6691-6696
- [Getz95b] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
J. Magn. Magn. Mater **140-144** (1995) 729-730
- [Getz95c] M. Getzlaff, D. Egert, P. Rappolt, M. Wilhelm, H. Steidl, G. Baum und W. Raith
J. Magn. Magn. Mater **140-144** (1995) 727-728
- [Getz95d] M. Getzlaff, D. Egert, P. Rappolt, M. Wilhelm, H. Steidl, G. Baum und W. Raith
Surf. Sci. **331-333** (1995) 1404-1407
- [Getz98] M. Getzlaff, M. Bode, S. Heinze, R. Pascal und R. Wiesendanger
J. Magn. Magn. Mater **184** (1998) 155-165
- [Getz99] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense
J. Magn. Magn. Mater **192** (1999) 458-466
- [Grad82] U. Gradmann und G. Waller
Surf. Sci. **116** (1982) 539-548
- [Grad86] U. Gradmann, J. Korecki und G. Waller
Appl. Phys. A **39** (1986) 101-108
- [Graf97] C. Graf
Staatsexamensarbeit, Universität Bielefeld (1997)

- [Hags53] H. D. Hagstrum
Phys. Rev. **89** (1953) 244
- [Hags54] H. D. Hagstrum
Phys. Rev. **96** (1954) 336
- [Hags78] H. D. Hagstrum
In: L. Fiermans, J. Vennik und W. Dekeyser, Herausgeber
Electron and Ion Spectroscopy of Solids, 273-323
Plenum Press, New York (1978)
- [Hamm92] M. S. Hammond, F. B. Dunning, G. K. Walters und G. A. Prinz
Phys. Rev. B **45** (1992) 3674-3679
- [Hart89] M. W. Hart, M. S. Hammond, F. B. Dunning und G. K. Walters
Phys. Rev. B **39** (1989) 5488-5491
- [Hein66] V. Heine
Phys. Rev. **151** (1966) 561-563
- [Henz91] M. Henzler und W. Göpel
Oberflächenphysik des Festkörpers
B. G. Teubner, Stuttgart (1991)
- [Hond26] K. Honda und S. Kaya
Sci. Rep. Tohoku Imp. Univ. **15** (1926) 721
- [Hugh72] V. W. Hughes, R. L. Long, Jr., M. S. Lubell, M. Posner und W. Raith
Phys. Rev. A **5** (1972) 195-222
- [John89] B. G. Johnson, P. J. Berlowitz, D. W. Goodman und
C. H. Bartholemew
Surf. Sci. **217** (1989) 13-37
- [Kämp88] K.-P. Kämper, W. Schmitt, G. Güntherod und H. Kuhlenbeck
Phys. Rev. B **38** (1988) 9451-9456
- [Knel62] E. Kneller
Ferromagnetismus
Springer (1962)
- [Kohn65] W. Kohn und L. J. Sham
Phys. Rev. **140** (1965) A1133-A1138
- [Krak79] H. Krakauer, M. Posternak und A. J. Freeman
Phys. Rev. B **19** (1979) 1706-1719
- [Kurz86] R. Kurzawa
Dissertation, Universität Köln (1986)

- [Masu88] S. Masuda, Y. Harada, H. Kato, K. Yagi, T. Komeda, T. Miyano, M. Onchi und Y. Sakisaka
Phys. Rev. B **37** (1988) 8088-8095
- [Maye85] T. Mayer-Kuckuk
Atomphysik
Teubner (1985)
- [Merw82] J. H. van der Merwe
Phil. Mag. A **45** (1982) 127-170
- [Micr94] VG Microtech
Rear View LEED, Operating Manual (1994)
- [Micr95] VG Microtech
Ultraviolet Sources System Operating Manual (1995)
- [Mulh91] G. A. Mulhollan, R. J. Fink, J. L. Erskine und G. K. Walters
Phys. Rev. B **43** (1991) 13645-13648
- [Nolt86] W. Nolting
Quantentheorie des Magnetismus, Grundlagen (Teil 1)
Teubner (1986)
- [Ocie90] J. G. Ociepa, P. J. Schultz, K. Griffiths und P. R. Norton
Surf. Sci. **225** (1990) 281-291
- [Olip29] M. L. E. Oliphant
Proc. Roy. Soc. **A124** (1929) 228
- [Onel84] M. Onellion, M. W. Hart, F. B. Dunning und G. K. Walters
Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 380-383
- [Penn90] D. R. Penn und P. Apell
Phys. Rev. B **41** (1990) 3303-3315
- [Pign67] A. J. Pignocco und G. E. Pellissier
Surf. Sci. **7** (1967) 261-278
- [Piru80] G. Pirug, G. Brodén und H. P. Bonzel
Surf. Sci. **94** (1980) 323-338
- [Plum82] E. W. Plummer und W. Eberhard
In: I. Prigogine und S. A. Rice, Herausgeber
Advances in Chemical Physics **49**, 533-657
John Wiley & sons, New York (1982)
- [Purc38] E. M. Purcell
Phys. Rev. **54** (1838) 818-826

- [Rapp97] P. Rappolt
RMS - Rechnen mit Spektren, Laborhandbuch (1997)
- [Ridd81] T. W. Riddle, M. Onellion, F. B. Dunning und G. K. Walters
Rev. Sci. Instrum. **52** (1981) 797-801
- [Rous81] J. Roussel, C. Boiziau, R. Nuvolone und C. Reynaud
Surf. Sci. **110** (1981) L634-L640
- [Saki85] Y. Sakisaka, T. Komeda, T. Miyano, M. Onchi, S. Masuda, Y. Harada,
K. Yagi und H. Kato
Surf. Sci. **164** (1985) 220-234
- [Salv97a] M. Salvietti, P. Ferro, R. Moroni, M. Canepa und L. Mattera
Surf. Sci. **377-379** (1997) 481-486
- [Salv97b] M. Salvietti, R. Moroni, M. Canepa, P. Ferro und L. Mattera
J. Magn. Magn. Mater **165** (1997) 230-233
- [Schr83] W. Schröder und G. Baum
J. Phys. E **16** (1983) 52-56
- [Sess84] W. Sesselmann, B. Woratschek, G. Ertl, J. Küppers und H. Haberland
Surf. Sci. **146** (1984) 17-42
- [Sess87a] W. Sesselmann, B. Woratschek, J. Küppers, G. Ertl und H. Haberland
Phys. Rev. B **35** (1987) 8348-8359
- [Sess87b] W. Sesselmann, B. Woratschek, J. Küppers, G. Ertl und H. Haberland
Phys. Rev. B **35** (1987) 1547-1559
- [Sevi72] K. D. Sevier
Low Energy Electron Spectrometry
Wiley-Interscience (1972)
- [Siek93] C. Sieker
Diplomarbeit, Universität Bielefeld (1993)
- [Smit80] R. J. Smith, J. Anderson und G. J. Lapeyre
Phys. Rev. B **22** (1980) 632-637
- [Soud86] R. Souda und M. Aono
Nucl. Instrum. Methods B **15** (1986) 114-121
- [Steil97] H. Steidl
SFB 216, Final Report, Universität Bielefeld (1997)
- [Tabo88] J. Taborski
Diplomarbeit, Universität Bielefeld (1988)

- [Tsuk91] M. Tsukada, K. Kobayashi, N. Issiki und H. Kageshima
Surf. Sci. Rep. **13** (1991) 267-304
- [Wang80] S.-W. Wang und G. Ertl
Surf. Sci. **93** (1980) L75-L81
- [Weim93] B. Weimert, J. Noffke und L. Fritsche
Surf. Sci. **289** (1993) 397-410
- [Weim95] B. Weimert
Dissertation, Technische Universität Clausthal (1995)
- [Wilh94] M. Wilhelm
Diplomarbeit, Universität Bielefeld (1994)
- [Wimm81] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert und A. J. Freeman
Phys. Rev. B **24** (1981) 864-875
- [Wora85] B. Woratschek, W. Sesselmann, J. Küppers und G. Ertl
Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 611-614
- [Wu92] R. Wu und A. J. Freeman
Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2867-2870
- [Wu93] R. Wu und A. J. Freeman
J. Appl. Phys. **73** (1993) 6739-6741
- [Wu94] R. Wu, D. Wang und A. J. Freeman
J. Magn. Magn. Mater **132** (1994) 103-123
- [Yu76] K. Y. Yu, W. E. Spicer, I. Lindau, P. Pianetta und S. F. Lin
Surf. Sci. **57** (1976) 157-183

Danksagung

An erster Stelle bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Hans Steidl für die gute Betreuung dieser Arbeit.

Auch Herrn Prof. Dr. Günter Baum und Herrn Prof. Dr. Wilhelm Raith danke ich für ihre Unterstützung bei der Durchführung dieser Promotion in der von ihnen geleiteten Arbeitsgruppe D1.

Für die sehr gute Zusammenarbeit im Labor in einer stets angenehmen Atmosphäre danke ich speziell Dirk Egert, Stefan Förster, Carsten Graf und Marius Müller.

Des weiteren gilt mein Dank allen ehemaligen und jetzigen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Arbeitsgruppe D1, die jederzeit für ein gutes Arbeitsklima gesorgt haben. Der rege Erfahrungsaustausch und die Hilfe bei auftretenden Problemen haben sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Für die tatkräftige Unterstützung bei allen Arbeiten im technischen Bereich bedanke ich mich allen voran bei Herrn Leo Schütz sowie bei den Mitarbeitern der mechanischen Werkstatt. Auch die Hilfe von Gaby Krome bei den anfallenden Büroarbeiten darf an dieser Stelle nicht unerwähnt bleiben.

Abschließend bedanke ich mich bei meinen Eltern für ihre Unterstützung während des gesamten Studiums.

Gedruckt auf alterungsbeständigem Papier nach DIN-ISO 9706