



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

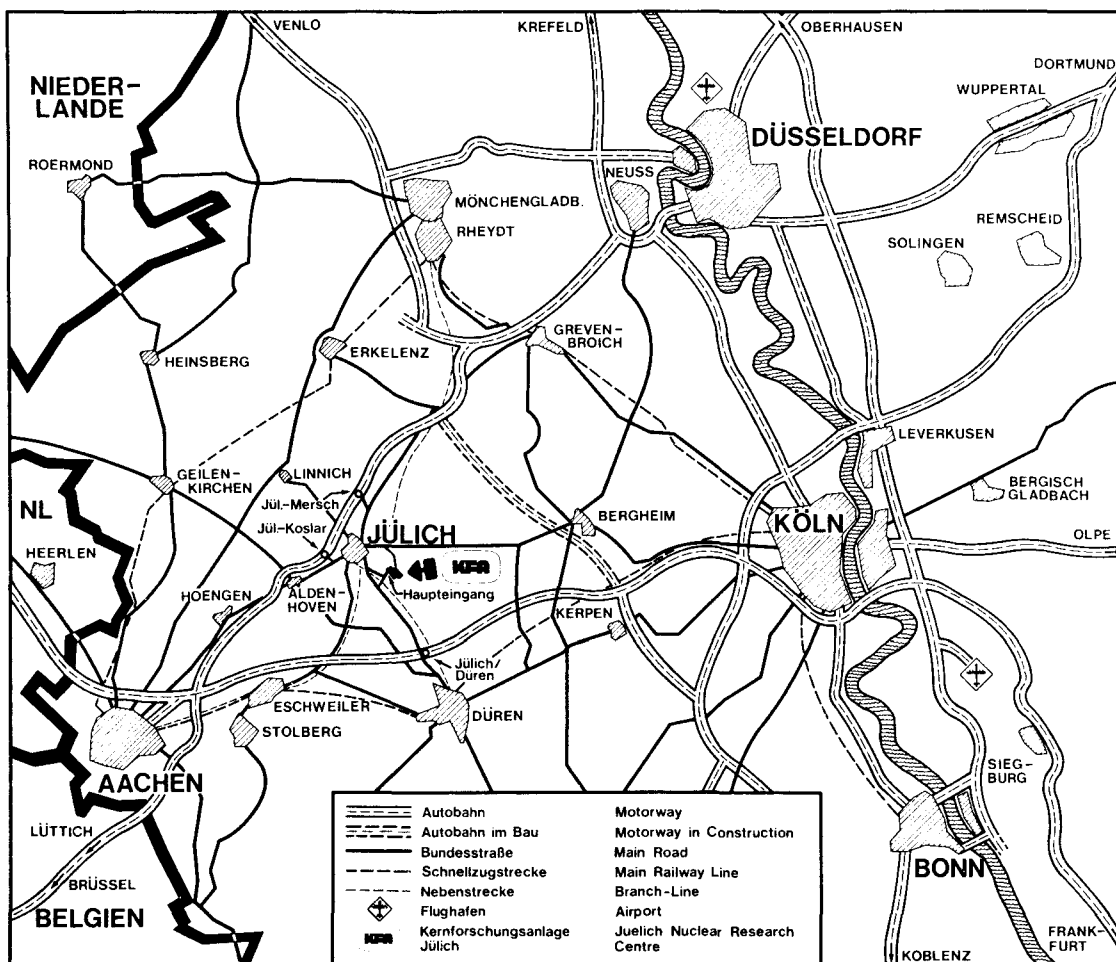
Institut für Festkörperforschung

**Messung der Elektronen-Spinpolarisation
bei der Photoemission an Nickel-
und Kobalt-Einkristallen
mit Photonenenergien in der Nähe
der Photoschwelle**

von

E. Kuhlmann

Jül - 1697
Dezember 1980
ISSN 0366-0885



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1697

Institut für Festkörperforschung Jülich - 1697

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich 1 (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: (02461) 61-0 · Telex: 833556 kfa d

**Messung der Elektronen-Spinpolarisation
bei der Photoemission an Nickel-
und Kobalt-Einkristallen
mit Photonenenergien in der Nähe
der Photoschwelle**

von

E. Kuhlmann

D 38 (Diss. Uni. Köln)

ABSTRACT

We have measured with s-polarized light near threshold the spin-polarization P of photoelectrons from Ni(001), -(110) and -(111) and from Co(0001)- and -(10 $\bar{1}$ 0) surfaces. The cylindrically shaped samples were magnetized perpendicular to the surface (longitudinal magnetization) up to complete saturation by an external magnetic field. With these experimental conditions a differential energy- analysis as well as angle- analysis of the emitted electrons is not feasible. However, for photon energies in the range 1-2 eV above threshold the energy distribution of the collected electrons is narrow and, because of energy conservation, emission occurs primarily normal to the surface (cone $< 15^\circ$). The effect of the external magnetic field on the electron trajectories and their spin direction has been determined by computational methods.

As expected from the bandmodel of ferromagnetism (Stoner-Wohlfarth- Slater- theory) the experimental values found for the photoelectron polarization near photothreshold are strongly energy dependent. For Ni(001) and -(111) the dependence of spin- polarization on photon energy agrees quantitatively with theoretical calculations only if a value of 0.33 eV for the exchange splitting Δ_{ex} is assumed. This is in contrast to the results of self- consistent band structure calculations yielding values between 0.6 eV and 0.9 eV for Δ_{ex} . These results provide clear evidence for the importance of many- body effects (electron- electron and electron- magnon interactions) in photoemission from strong ferromagnets. The same is true for the Stoner gaps along ΓX , $\Gamma K X$ and ΓL , which are found to be $\delta(\Delta_5^\uparrow \rightarrow X_5^\uparrow) = \delta(\Sigma_3^\uparrow \rightarrow X_5^\uparrow) \approx 0.02$ eV and $\delta(L_3^\uparrow) \approx 0.11$ eV, while calculations give values of $\delta(X_5^\uparrow) \geq 0.3$ eV and $\delta(L_3^\uparrow) \geq 0.5$ eV. Nickel differs therefore strongly from copper, where local density calculations of the ground state describe surprisingly accurately also the photoemission spectra.

We compare the polarization data with results of energy- and angular- resolved photoemission (ARUPS-) data obtained by several other groups. This comparison shows extensive agreement concerning conclusions about the experimental electronic structure of Ni.

Negative polarization near photothreshold has been observed, besides for Ni, also for Co(10 $\bar{1}$ 0), but not for Co(0001) -- in contrast to expectations. The interpretation of these and other ARUPS- data of Co is still contradictory.

The electron spin polarization has been measured as a function of temperature using a Ni(111) single crystal surface and constant wavelength of the incident light. The results indicate that the ESP-experiment tests the long- range magnetic order, while ARUPS seems to be measuring some sort of short- range order, the exact extent of which has still to be established.

Finally, in an appendix we report studies of the emission current and electron polarization from a tungsten field- emission tip coated with europium- sulfide. It is shown that they give information on the interface properties metal- magnetic insulator as well as on the magnetic properties of EuS. Spin-filter- and "memory"- effects of the W/EuS system are discussed.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Spinpolarisation P der mit s-polarisiertem Licht an einkristallinen Proben erzeugten Photoelektronen wurde an der (001)-, (110)- und (111)-Fläche von Nickel und an der (0001)- und (10 $\bar{1}$ 0)-Fläche von Kobalt gemessen. Die zylinderförmigen Proben wurden durch ein äußeres Magnetfeld senkrecht zur untersuchten Oberfläche (longitudinal) bis zur Sättigung magnetisiert. Unter diesen experimentellen Bedingungen ist eine differentielle Energie- und Winkelanalyse der emittierten Elektronen nicht möglich. Jedoch erfolgt für Photonenenergien, die etwa 1-2 eV oberhalb der jeweiligen Austrittsarbeit liegen, aus Energieerhaltungs-Gründen näherungsweise nur senkrechte Emission (Kegelwinkel $< 15^\circ$) bei entsprechend schmaler Energieverteilung. Der Einfluß des äußeren Magnetfeldes auf die Elektronenbahnen und den -spin sind rechnerisch untersucht worden.

Entsprechend den Voraussagen des Bandmodells des Ferromagnetismus (Stoner- Wohlfarth- Slater- Theorie) weisen die erhaltenen Meßwerte der Photoelektronen- Polarisation in der Nähe der Photoschwelle starke energieabhängige Strukturen auf. Für Ni(001) und -(111) stimmt die Abhängigkeit der Polarisation von der Photonenenergie nur dann mit theoretischen Rechnungen überein, wenn eine Austausch- Aufspaltung Δ_{ex} von 0,33 eV zugrunde gelegt wird. Dies steht im Widerspruch zu den Ergebnissen der selbstkonsistenten Bandstruktur- Rechnungen, aus denen man Werte von 0,6 eV bis 0,9 eV für Δ_{ex} erhält. In diesen Abweichungen tritt zum ersten Mal die Bedeutung von Vielteilchen- Effekten (Elektron- Elektron und Elektron- Magnon Wechselwirkungen) bei der Photoemission an starken Ferromagneten klar zutage. Das gleiche gilt für die aus den Meßergebnissen gewonnenen Größen der Stoner- gaps entlang der ΓX -, $\Gamma K X$ - und der ΓL -Richtung. Hier liegen die gemessenen Werte bei $\delta(\Delta_5^\uparrow \rightarrow X_5^\uparrow) = \delta(\Sigma_3^\uparrow \rightarrow X_5^\uparrow) \approx 0,02$ eV und $\delta(L_3^\uparrow) \approx 0,11$ eV, während aus Rechnungen $\delta(X_5^\uparrow) \geq 0,3$ eV und $\delta(L_3^\uparrow) \geq 0,5$ eV erhalten wurde. Im Gegensatz dazu lassen sich bekanntlich die Photoemissions- Spektren von Kupfer durch "local- density" -Berechnungen des Grundzustands überraschend genau beschreiben.

Die Polarisations- Meßdaten werden mit den Ergebnissen anderer Experimente an Ni(001) und mit winkel- und energieaufgelösten

Photoemissions- (ARUPS-) Messungen verglichen. Dieser Vergleich zeigt weitgehende Übereinstimmung hinsichtlich der Schlußfolgerungen über die experimentelle elektronische Struktur von Ni.

Bei der $\text{Co}(10\bar{1}0)$ - Fläche ist die gemessene Polarisierung an der Photoschwelle ebenso wie bei den drei Ni - Flächen negativ, bei der $\text{Co}(0001)$ - Fläche jedoch entgegen den Erwartungen positiv. Die Deutung dieses Ergebnisses und anderer ARUPS - Daten von Co sind noch widersprüchlich.

Die Messung der Polarisierung als Funktion der Proben temperatur bei der Photoemission an der $\text{Ni}(111)$ - Fläche zeigt, daß dabei die Magnetisierung untersucht wird. Dagegen werden bei der winkel- und energieaufgelösten Photoemission ohne Spin- Analyse anscheinend eher kurzreichweitige magnetische Korrelationen getestet, deren genaues Ausmaß aber noch unklar ist.

In einem Anhang berichten wir außerdem über Messungen des Emissionsstroms und der Elektronen- Polarisierung an einer mit Europiumsulfid bedampften Wolfram- Feldemissions- Spitze. Die Untersuchungen ergaben Information über die Eigenschaften der Grenzschicht zwischen Metall und magnetischem Isolator sowie über das EuS. Das System W/EuS wird als Spinfilter und Gedächtniszelle diskutiert.

INHALTSVERZEICHNIS

I. <u>Einleitung</u>	1
II. <u>Elektronische Struktur und Photoemission an 3d-Ferromagneten</u>	3
A. Bandartiger Charakter der 3d-Elektronenzustände: Das Stoner-Wohlfarth-Slater- Modell	3
B. Theoretische Modelle der Photoemission	8
1. Drei-Stufen-Modell	8
2. Ein-Stufen-Modell	9
3. Symmetrie- Auswahlregeln für elektromagnetische Dipol-Strahlung	11
C. Oberflächen- und Volumeneigenschaften eines magnetischen Metalles und Photoemission	12
1. Energie- und winkelaufgelöste Photoemission	13
2. Spinpolarisierte Photoemission	15
III. <u>Experiment und Auswerteverfahren</u>	18
A. Überblick über die Meßapparatur	18
B. Photoemissionskammer	23
1. Bahnablenkung der Elektronen im Magnetfeld	23
2. Magnetisierungsgrad des Probenmaterials	26
3. Präzession des Elektronenspins im Magnetfeld	26
4. Elektronenoptisches Extraktions- System	29
C. Mott-Detektor	31
D. Lichtquelle und Lichtoptik	35
E. Proben und Präparationskammer	36
1. Vorbehandlung der Proben	36
2. Untersuchung der Oberflächenbeschaffenheit	38
F. Auswerteverfahren	40
1. Fehlerquellen	40
2. Polarisations-Änderung während des Elektronen-Transports	41

3. Fehler durch apparative Asymmetrien und Berechnung der Polarisation	42
4. Statistischer Fehler der Zählergebnisse	45
5. Energiebreite des Photonenstroms	46
IV. <u>Meßergebnisse</u>	48
A. Spinpolarisation von Ni(001), -(110) und -(111)	48
B. Spinpolarisation von Co(0001) und -(10 $\bar{1}$ 0)	53
C. Temperaturabhängigkeit der Ni(111)-ESP	55
D. ESP an Ni(111) bei höheren Photonenenergien	56
V. <u>Deutung der Meßergebnisse im Vergleich mit anderen experimentellen und theoretischen Arbeiten</u>	59
A. Größe der Austausch-Aufspaltung in Ni	59
B. Experimentelle Bandstrukturen von Ni und Co	63
1. Nickel	63
2. Kobalt	67
C. Temperaturabhängigkeit der Austausch-Aufspaltung in Ni	70
VI. <u>Wichtigste Ergebnisse und Ausblick</u>	72
ANHANG:	
VII. <u>Feldemission aus ferromagnetischem Europiumsulfid auf Wolfram</u>	74
A. Einführung	74
B. Experimenteller Aufbau und Meßergebnisse	75
C. Diskussion der Meßergebnisse: W/EuS als Spinfilter und "Gedächtniszelle"	80
Literaturverzeichnis	83

I. Einleitung

Ebenso wie bei Atomen und Molekülen ist bei einem Festkörper die elektronische Struktur maßgeblich für die mikro- und makroskopischen physikalischen Eigenschaften verantwortlich. Zu den am häufigsten angewendeten experimentellen Methoden zur Untersuchung dieser Struktur gehören optische Messungen wie die Reflexions- und Absorptionsspektroskopie und die in jüngerer Zeit besonders erfolgreiche Photoelektronen- Spektroskopie.

Im Bereich der Metallphysik und vor allem des Magnetismus der Metalle sind die ferromagnetischen 3d- Übergangsmetalle Eisen, Kobalt und Nickel und ihre Oberflächen von großem Interesse. Dies gilt sowohl für das Verständnis ihrer elektronischen Struktur als auch z.B. für das Verständnis ihrer Wirkungsweise als Substrat für chemische Reaktionen in der heterogenen Katalyse oder für ihre Verwendbarkeit als Photoemitter polarisierter Elektronen.

Seit etwa 1976 haben die Methoden der spinpolarisierten Photoemission und der winkel- und energieaufgelösten Photoemission (ARPES: Angular Resolved Photo- Electron Spectroscopy) einen beachtlichen Aufschwung genommen. Die Voraussetzungen für diese intensive Entwicklung waren u.a. gegeben durch verbesserte Möglichkeiten zur Präparation und Charakterisierung einkristalliner Proben und ihrer Oberflächen. Eine Messung der Elektronen- Spin- Polarisation (ESP) bei gleichzeitiger differentieller Energie- und Winkelanalyse der emittierten Photoelektronen ist wegen des äußeren Magnetfeldes zur Probenmagnetisierung nicht möglich (erste erfolgversprechende Schritte zur Lösung der damit verbundenen Probleme werden aber bereits unternommen). Die bisher durchgeführten Experimente auf diesem Gebiet geben demnach nur Auskunft über die Polarisation der integralen Elektronenausbeute (PE- Yield). Ferner beschränken sie sich meistens auf einen Photonenenergie- Bereich, der sich von der Schwellenenergie Φ bis zu einigen eV oberhalb von Φ erstreckt (vgl. aber Abschn. IV,D). Es werden jedoch gerade in diesem Bereich -- auch bei einer Mittelung über die gesamte Photoausbeute -- drastische Polarisationsänderungen als Funktion von $h\nu$ erwartet und beobachtet.

Das markanteste Ergebnis der Messungen am Ni besteht darin, daß die Polarisation P dicht oberhalb der Schwelle negativ ist und bei $h\nu - \Phi \approx 100$ bis 300 meV ihr Vorzeichen wechselt. Gemäß einer weitgehend

gebräuchlichen Festlegung gilt P dann als positiv, wenn die magnetischen Momente der Elektronen parallel, d.h. ihre Spins antiparallel zur Richtung des äußeren Magnetfeldes $\vec{H}$ und damit zur Probenmagnetisierung $\vec{M}$ orientiert sind. Im Band-Modell von Stoner, Wohlfarth und Slater (SWS-Modell, vgl. Abschn. II,A) wird dieses Verhalten qualitativ vorausgesagt. Dagegen findet man bei einem genaueren quantitativen Vergleich zwischen selbstkonsistenten Rechnungen und dem Experiment erhebliche Abweichungen z.B. bezüglich der Austausch-Aufspaltung Δ_{ex} . Zu ähnlichen Ergebnissen gelangt man mit Hilfe der winkelaufgelösten Photoemission. Darüberhinaus ergeben sich für die mit ARPES gemessenen Banddispersionen und Bandbreiten W der d-Bänder ebenfalls gravierende Unstimmigkeiten gegenüber der Theorie. Es ist jedoch sehr interessant, daß im Gegensatz zum Ni die Übereinstimmung zwischen den selbstkonsistenten Bandstruktur-Rechnungen und den Photoemissions-Experimenten im Falle des Kupfers nahezu perfekt ist.

Die Aufgabe der vorliegenden Arbeit bestand darin, die Spinpolarisation P der Photoelektronen zu messen, die mit Photonenenergien nahe der Photoschwelle an den Ni(001)-, -(110)- und -(111)-Flächen und den Co(0001)- und -(10 $\bar{1}$ 0)-Flächen erzeugt wurden, und aus den Ergebnissen Informationen über die zugehörigen Bandstrukturen in der Nähe der Fermi-Energie zu gewinnen.

Die experimentellen Daten wurden mittels einer im Institut Elektronische Eigenschaften des IFF der KFA Jülich neu aufgebauten Ultrahochvakuum-Apparatur erhalten, die im wesentlichen aus folgenden Funktionseinheiten besteht:

- 1) Präparationskammer zur Reinigung und Charakterisierung der einkristallinen Probenoberfläche mittels niederenergetischer Elektronenstreuung und Auger-Elektronen-Spektroskopie.
- 2) Photoemissionskammer, wo die Probe magnetisiert wird, und wo das eigentliche Photoemissions-Experiment stattfindet.
- 3) Streukammer zum Nachweis der gesamten transversalen Polarisationskomponente der Photoelektronen mittels Mott-Streuung.

II. Elektronische Struktur und Photoemission an 3d-Ferromagneten

A. Bandartiger Charakter der 3d-Elektronenzustände:

Das Stoner- Wohlfarth- Slater - Modell

Wird in einem Festkörper durch Absorption eines Photons ein Elektron angeregt, so gelangt dieses von einem besetzten Anfangszustand Ψ_i in einen unbesetzten Endzustand Ψ_f . Bei genügend hoher Anregungsenergie kann das Elektron die Potentialschwelle der Festkörperoberfläche überwinden und mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ins Vakuum austreten. Die Eigenschaften der emittierten Elektronen werden durch die Meßgrößen Energie E , Emissionsrichtung (θ_e, ϕ_e ; s. Abb. 1b), Spinpolarisation $P(\theta_e, \phi_e)$ und Intensität $I(\theta_e, \phi_e)$ vollständig beschrieben. Sie sind abhängig von den vorgegebenen experimentellen Parametern Energie, Polarisation und Einfallswinkel θ_{Ph}, ϕ_{Ph} (Abb. 1a) der Photonen und der Orientierung des Probenkristalls. Das Ziel der Photoemissions- Experimente ist es, die Eigenschaften der emittierten Elektronen möglichst vollständig zu messen und daraus Informationen über die Zustände Ψ_i und Ψ_f zu erhalten. Für Elektronen in Metallen lassen sich zwei Extremfälle unterscheiden, in denen man bereits unter verhältnismäßig einfachen Annahmen bei der theoretischen Deutung zu einer recht genauen Beschreibung der experimentellen Beobachtungen gelangt. Dies gilt einerseits, wenn sich die Elektronen im Festkörper wie fast freie Teilchen, d.h. innerhalb eines schwachen, wenig ortsabhängigen Potentials und mit geringer gegenseitiger, effektiver

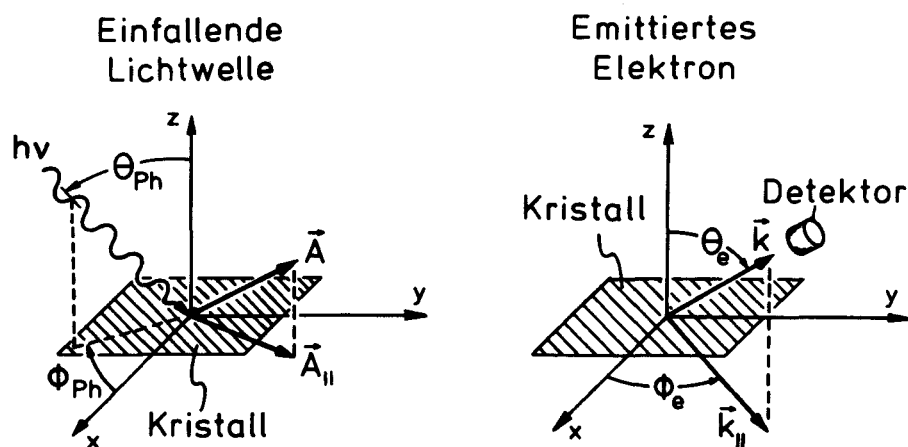


Abb. 1: Geometrie und Winkelbezeichnung bei der winkelaufgelösten Photoemission

Wechselwirkung U_{eff} , bewegen. Der andere Extremfall liegt bei stark lokalisierten Elektronen vor wie z.B. bei den 4f-Elektronen in den Metallen der Seltenen Erden und deren Verbindungen. Im ersten Fall handelt es sich um s,p- Leitungsbänder mit einer Energiebreite von mehreren eV und fast vernachlässigbarer Wechselwirkung U_{eff} , während im zweiten Fall die Bandbreite W nur in der Größenordnung von 10^{-1} bis 10^{-2} eV liegt, U_{eff} aber einige eV beträgt. Da nun das Verhältnis W/U_{eff}

als Maß für die Delokalisierung der Elektronen angesehen werden kann, nehmen die 3d-Bänder mit einer Breite von etwa 3-4 eV und einer effektiven Wechselwirkung derselben Größenordnung offenbar eine Mittelstellung ein. Sie sind im Vergleich zu den sp- Elektronen stärker in der Umgebung der Atomkerne lokalisiert, und dementsprechend besteht zwischen ihnen eine stärkere effektive Coulomb- Wechselwirkung. Dies führt unter anderem dazu, daß sich die in der Photoemission gemessenen Spektren teilweise erheblich von den Spektren unterscheiden, die man aus der theoretischen Einteilchen- Bandstruktur ableiten kann. Weiterhin wird diese Mittelstellung der 3d- Elektronen als Grund dafür angesehen, daß alle bisher existierenden Theorien über den Magnetismus der 3d-Metalle für viele physikalische Größen wie z.B. die Suszeptibilität und die Curie- Temperatur nur qualitativ richtige Ergebnisse liefern.

Für Fe, Co und Ni sind über viele Jahre hinweg von verschiedenen Gruppen (1-6) selbstkonsistente spin- abhängige Energiebänder berechnet worden. Außerdem existieren einige paramagnetische Rechnungen (4-11), aus denen die ferromagnetischen Bandstrukturen mit ihrer Aufspaltung in Minoritäts- (Spin $\downarrow$) und Majoritätsbänder (Spin $\uparrow$) näherungsweise durch starre Verschiebung der paramagnetischen Bandstruktur gegeneinander um den Betrag Δ_{ex} abgeleitet wurden. Die Größe Δ_{ex} ergibt sich hierbei aus der Forderung nach Anpassung an die experimentell beobachtete Zahl von Bohrschen Magnetonen/ Atom ($\hat{=}$ Magnetisierung/ Volumeneinheit). Als Beispiele sind in Abb. 2a die selbstkonsistent berechnete Bandstruktur von Ni nach Marschall und Bross (5) und in Abb. 3 diejenige für Co nach Batallan et al. (9) jeweils für die hochsymmetrischen Richtungen der Brillouin- Zone dargestellt (vgl. Abb. 4: Brillouin- Zonen für das fcc- und das hcp- Kristallgitter). Im ersten Fall wurde durch Berücksichtigung der intraatomaren Coulombwechselwirkung aus der paramagnetischen Bandstruktur die ferromagnetische erhalten. Die Größe Δ_{ex} als Aufspaltung zwischen den gestrichelt gezeichneten Minoritätsbändern und den durchgezogenen Majoritätsbändern ist stark $\vec{k}$ -abhängig. In Abb. 3 ist die (als konstant angenommene) ferromagnetische

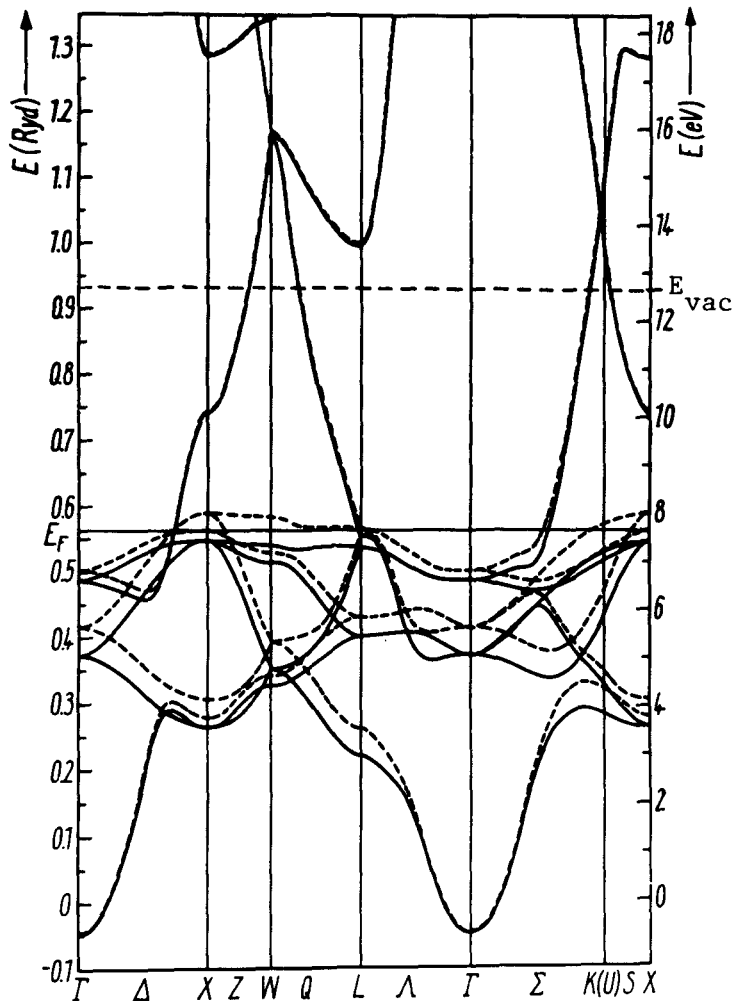


Abb. 2 a:

Energiebänder des ferromagnetischen Ni entlang der Symmetrie-Richtungen der Brillouin-Zone.

Durchgezogene Linien:

Majoritäts-Bänder ($Spin \uparrow$),
gestrichelt:

Minoritäts-Bänder ($Spin \downarrow$)

(nach Marschall und Bross, Ref. 5)

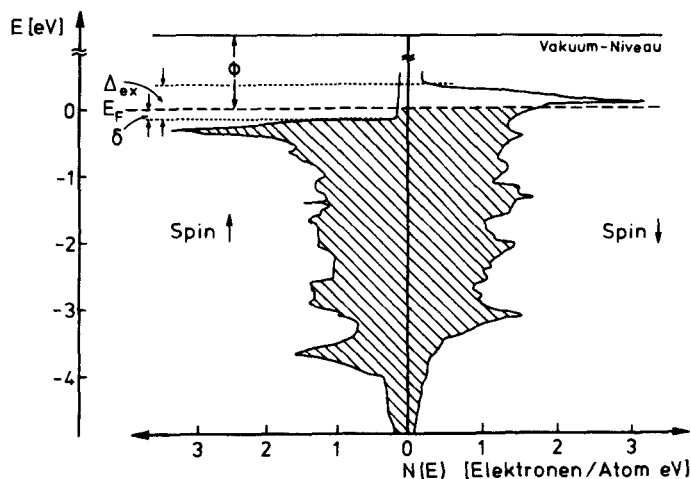


Abb. 2 b:

Zustandsdichte für Majoritäts- und Minoritäts-Elektronen in Ni (aus Ref. 5). Die relative Lage zueinander und zur Fermi-Energie E_F wird durch die Austausch-Aufspaltung Δ_{ex} und das Stoner-gap δ beschrieben

Austausch- Aufspaltung durch Angabe zweier Fermi- Niveaus für das paramagnetische Bandschema dargestellt. Die berechnete Zustandsdichte (5) in Ni für die beiden Spinrichtungen zeigt Abb. 2b. Die Größe δ , das sogenannte Stoner- gap, bezeichnet die Energiedifferenz zwischen der Fermi- Energie E_F und der Oberkante des Majoritätsbandes. Eine Berechnung der spinabhängigen Zustandsdichte für (fcc)-Co wurde kürzlich von Moruzzi et al. (4) durchgeführt.

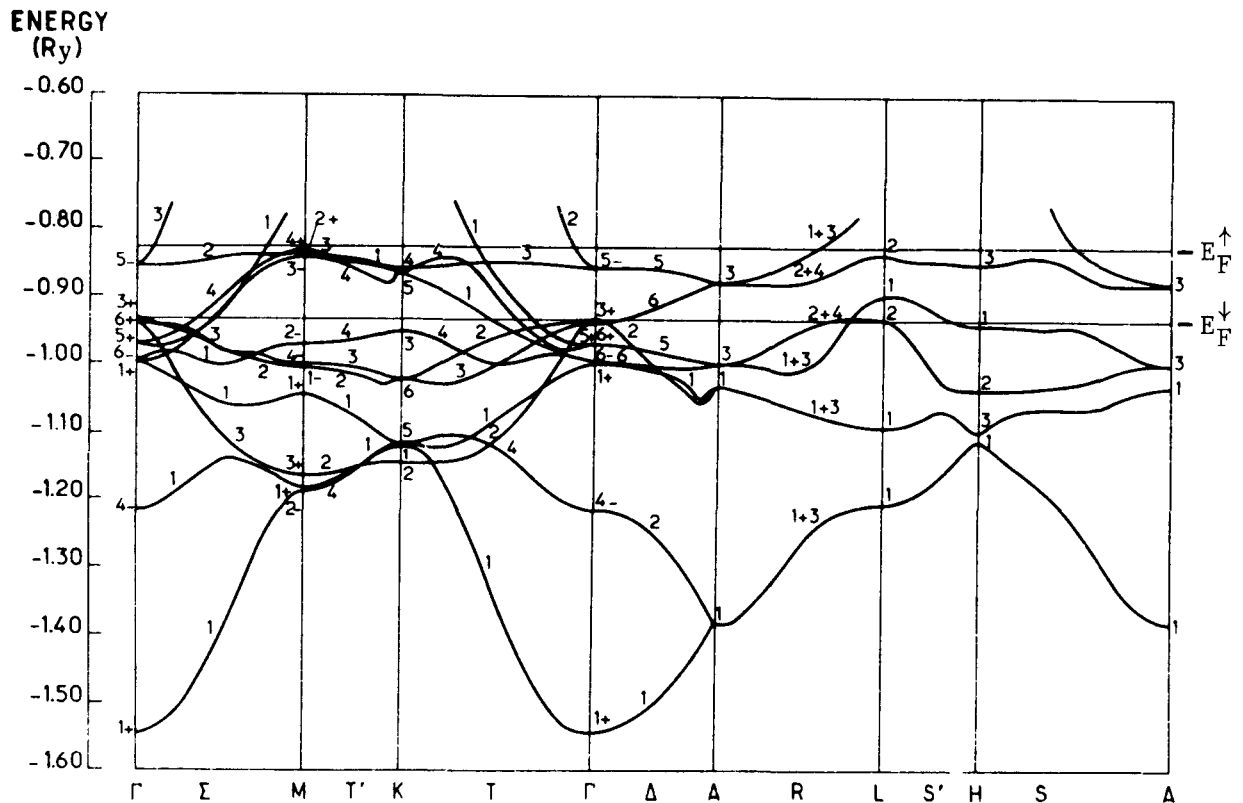


Abb. 3: Energiebänder von hcp-Kobalt entlang einiger hochsymmetrischer Richtungen. Die beiden unterschiedlichen Fermi-Niveaus für Majoritäts- und Minoritäts-Elektronen sind eingezeichnet (aus Ref. 9)

Zur Beschreibung der ferromagnetischen Eigenschaften von Fe, Co und Ni wird ein von Stoner (12), Wohlfarth (13) und Slater (14) entwickeltes Bandmodell verwendet. Im Rahmen dieses Modells werden die 3d- Elektronen, die als Träger der magnetischen Eigenschaften dieser Materialien gelten, als "itinerant", d.h. im Kristall frei beweglich, angesehen. Ferner geht man davon aus, daß die Austausch- Wechselwirkung zwischen den Bandelektroden ein mittleres Hartree- Fock Molekularfeld erzeugt, das für die beiden elektronischen Spinzustände unterschiedlich ist. Dieses bewirkt eine energetische Aufspaltung zwischen den $e^{\uparrow}$ - und $e^{\downarrow}$ - Teilbändern um einen Betrag Δ_{ex} . Die ferromagnetischen Eigenschaften entstehen durch die ungleiche Besetzung der beiden Teilbänder mit Elektronen. Abb. 2b zeigt diesen Sachverhalt für die berechneten Zustandsdichten von Ni: die schraffierten Bereiche sind (bei $T=0$) mit Elektronen besetzt. Nur die energetisch höher liegenden Minoritätsbänder schneiden die Fermi- Kante (vgl. Abb. 2a) und sind daher im Gegensatz zu den Majoritätsbändern nicht voll besetzt. Man nennt Nickel daher einen starken Ferromagneten, während z.B. beim Eisen beide Spin- Bänder die Fermi- Kante schneiden (schwacher Ferromagnet). Für Co läßt sich aus unserer Sicht eine eindeutige Zuordnung zur Zeit noch nicht treffen.

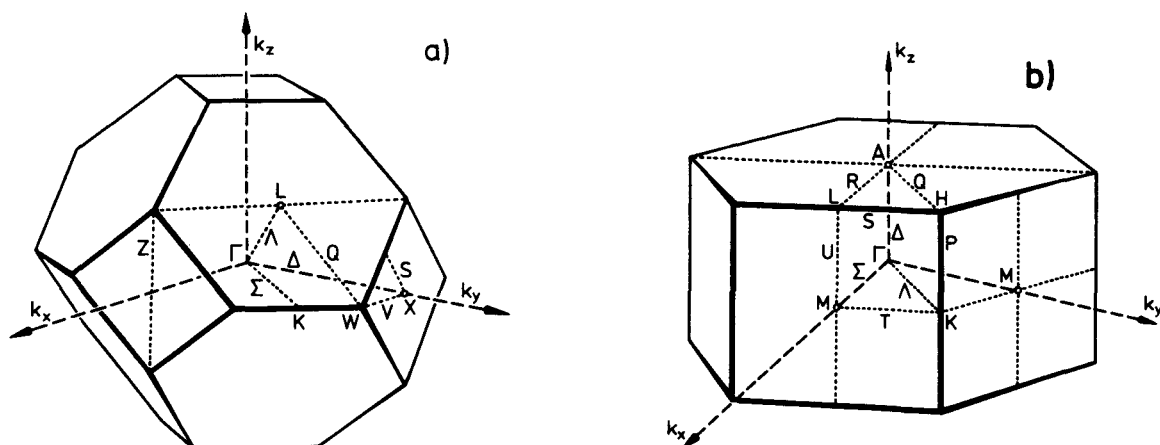


Abb. 4: Brillouin-Zonen für das kubisch-flächenzentrierte (a) und das hexagonale (b) Kristallgitter

Aus den unterschiedlichen Besetzungszahlen der beiden Teilbänder erklären sich die experimentell gefundenen, nicht ganzzahligen Werte für die Anzahl Bohrscher Magnetonen pro Atom: z.B. $n_B/n = 0,56$ für Ni und $n_B/n = 1,56$ für Co. Wie man anhand der Abbn. 2a,b einsieht, erwartet man bei der Photoemission an Ni (unter Vernachlässigung der sp-Elektronen-Emission und für $T=0$) eine Elektronen-Polarisation von -100 % unmittelbar an der Photoschwelle (vgl. auch Ref.15,16). Im Falle des Eisens sollte die Polarisation dagegen positiv sein, da an der Fermi-Kante die Zustandsdichte für Majoritäts-Elektronen größer ist als für Minoritäts-Elektronen. Mit steigender Photonenenergie erwartet man in 0. Näherung eine asymptotische Annäherung der Polarisationswerte an die Polarisation für das gesamte 3d- und 4s-Band $\tilde{P} = \frac{n^\uparrow - n^\downarrow}{n^\uparrow + n^\downarrow}$, die z.B. nach den oben angegebenen Magnetonenwerten n_B/n

für Ni $\tilde{P}_{Ni} = \frac{5,27-4,73}{10} = 5,4 \%$ und für Co $\tilde{P}_{Co} = \frac{5,28-3,72}{9} \approx 17\%$ beträgt.

Mit $n^\uparrow$ und $n^\downarrow$ ist jeweils die Summe der vorhandenen 3d- und 4s-Elektronen mit der betreffenden Spinrichtung gemeint. Wegen der Vernachlässigung unterschiedlicher Wirkungsquerschnitte für 4s- und 3d-Elektronen ist diese Betrachtung nur als grobe Abschätzung anzusehen.

Durch die spinpolarisierte Photoemission ist es möglich, die Aussagen der Theorie bezüglich der aufgespaltenen 3d-Bänder zu überprüfen. Die beiden wichtigsten Größen bei der quantitativen Beschreibung der vorliegenden Verhältnisse ist die Austausch-Aufspaltung Δ_{ex} und das Stoner-gap δ . Beide Größen hängen vom Impulsvektor $\vec{k}$ und der Energie E ab.

B. Theoretische Modelle der Photoemission

1. Drei-Stufen-Modell

Die Untersuchung der elektronischen Struktur von Metallen bedeutet weitgehend eine Bestimmung ihrer Bandstruktur. Man geht dazu meistens von theoretischen Berechnungen aus und leitet daraus die experimentell zu erwartenden Ergebnisse ab. Im Rahmen der Ein-Elektronen-Näherung hat sich dabei in vielen Fällen das Drei-Stufen-Modell bewährt, das im Prinzip die Berechnung der Energie-, der Winkel- und sogar der Intensitäts-Verteilung der Photoelektronen gestattet. In diesem Modell wird der Anteil der ungestreuten und elastisch gestreuten Elektronen im Energieverteilungs-Spektrum (EDC) dargestellt als Produkt von drei Faktoren (17):

$$I_e(E, \omega) = P(E, \omega) \cdot T(E, \omega) \cdot D(E) \quad (1)$$

Die Anregung als die erste Stufe in dem gesamten Emissionsprozeß wird beschrieben durch das Spektrum der direkten Interbandübergänge:

$$P(E, \omega) \propto \sum_{f,i} \int d^3k \left| \langle \psi_f | \vec{p} \cdot \vec{A} | \psi_i \rangle \right|^2 \cdot \delta\{E_f(\vec{k}) - E_i(\vec{k}) - \hbar\omega\} \cdot \delta\{E_f(\vec{k}) - E\} \quad (2)$$

Dabei stellt der erste Faktor des Integranden das Betragsquadrat des Übergangs-Matrixelementes mit dem Dipoloperator $\vec{p} \cdot \vec{A}$ für elektromagnetische Anregung dar, der die Wahrscheinlichkeit eines optischen Übergangs von ψ_i nach ψ_f angibt. Dieser Faktor wird Null für solche Übergänge $\psi_i \rightarrow \psi_f$, die bei vorgegebenem $\vec{p} \cdot \vec{A}$ nach den Symmetrie-Auswahlregeln verboten sind (siehe auch Abschn. II, B 3). Die Integration in (2) erstreckt sich nur über diejenigen Abschnitte des $\vec{k}$ -Raums, in denen die Anfangszustände besetzt sind, und die zur Emission in Richtung auf den Elektronen-Detektor beitragen. Die zweite δ -Funktion filtert solche Elektronen heraus, deren Endzustandsenergie (bezogen auf das Vakuumniveau, d.h. $E_{vac}=0$) mit dem am Energie-Analysator eingestellten Wert E übereinstimmt. Nimmt man das Matrixelement in (2) näherungsweise als konstant an, so erhält man den Ausdruck für die Energieverteilung der kombinierten Zustandsdichte.

Der zweite Faktor $T(E, \omega)$ in Gl. (1) beschreibt den Transport der angeregten Elektronen bis zur Oberfläche und ist daher von der mittleren freien Weglänge für inelastische Elektronenstreuung abhängig.

$D(E)$ beschreibt schließlich den Austritt ins Vakuum und weist wie $T(E, \omega)$ für $E > \Phi$ (Φ = Austrittsarbeit) nur schwache energieabhängige Strukturen auf.

Da das Drei- Stufen- Modell noch eine ganze Reihe von Näherungen und Vernachlässigungen enthält, liefert es in vielen Fällen keine brauchbaren Ergebnisse. So wird z.B. bei den verwendeten Banddispersionen häufig die Lebensdauer des Lochzustands vernachlässigt, die wegen der Unschärferelation zu einer Lorentz- Verbreiterung der Spektrallinien führt (im folgenden kurz mit "Lebensdauer- Verbreiterung" der Linien bzw. Zustände bezeichnet). Ferner berücksichtigt das Modell weder Vielteilchen- Effekte wie 2-Loch-Anregungen oder Elektron- Magnon- Wechselwirkungen, noch Oberflächeneffekte wie die $k_{\perp}$ - Verbreiterung ($k_{\perp}$ bezeichnet die Komponente des $\vec{k}$ -Vektors senkrecht zur Kristalloberfläche und $k_{\parallel}$ die Komponente parallel dazu), obwohl diese Effekte wegen der geringen Austrittstiefe der Elektronen von nur wenigen Å deutlich ins Gewicht fallen können (vgl. auch Abschn. II,C). Die Beschreibung einer Emission in sog. Bandlücken ist im 3-Stufen-Modell ebenfalls nicht möglich.

2. Ein-Stufen-Modell

Es hat sich gezeigt, daß das Vorhandensein einer Festkörperoberfläche im Vergleich zum unendlich ausgedehnten Festkörper (bzw. zum endlich ausgedehnten Festkörper mit periodischen Randbedingungen) so einschneidende Auswirkungen auf den Emissionsprozeß haben kann, daß es in vielen Fällen als eine grobe Näherung anzusehen ist, wenn man als Anfangs- und Endzustand Ψ_i bzw. Ψ_f nur reine Volumen- Bandzustände berücksichtigt, wie dies im Drei- Stufen- Modell der Fall ist. In neueren Theorien wird daher der gesamte Prozeß von der Anregung des Elektrons bis zu seinem Nachweis im Detektor durch ein Ein- Stufen- Modell beschrieben, das den auftretenden Oberflächeneffekten in viel stärkerem Maße Rechnung trägt. Wesentliche Merkmale sind hierbei:

- a) Einführung einer komplexen Bandstruktur: Auch in den Lücken zwischen den Energiebändern mit reellem $\vec{k}$ -Vektor sind nun "Bloch-Wellen" mit komplexem $\vec{k}$ definiert, deren Amplitude in der Richtung senkrecht zur Oberfläche nach innen und außen exponentiell abfällt. Sie dienen zur Beschreibung der "bandgap"- Emission, d.h. der Anregung in Endzustände Ψ_f , deren Anteil innerhalb des Festkörpers nicht aus propagierenden Blochwellen besteht. Ebenso enthält nun die Anfangszustands- Wellenfunktion neben dem Volumenzustands- Anteil, nämlich dem besetzten Blochzustand mit reellem $\vec{k}$ -Vektor, auch Anteile

der an der Oberfläche reflektierten und gestreuten Blochwelle mit komplexwertigem $\vec{k}$. Diese Anteile mit komplexem $\vec{k}$ sorgen aus mathematischer Sicht für die stetige Anpassung zwischen den Wellenfunktionen innerhalb und außerhalb des Festkörpers und aus physikalischer Sicht für zusätzliche, sozusagen "oberflächen-induzierte" Übergänge, die man mit der reellen Bandstruktur nicht beschreiben kann.

- b) Endzustand als zeitinvertierter LEED- Zustand: Alle Endzustands-Wellenfunktionen Ψ_f , die nach den experimentell vorgegebenen Bedingungen erreichbar sind, und die außerhalb des Festkörpers zu einer ebenen Elektronenwelle mit bestimmtem E- und $\vec{k}$ -Wert beitragen, werden zu einem zeitinvertierten LEED- Zustand zusammengefaßt. Dabei handelt es sich um dieselbe Wellenfunktion, die man auch benutzen würde, um ein LEED- (Low Energy Electron Diffraction) -Experiment zu beschreiben, bei dem eine ebene Elektronen- Welle in die Oberflächenschicht eines Festkörpers eindringt und dort kohärent gestreut wird, mit dem einzigen Unterschied, daß die Zeitachse in negativer Richtung verläuft.

Da die $\vec{k}$ -Vektoren des Anfangs- und Endzustandes im Rahmen dieses Modells nicht gleich zu sein brauchen, erhält man im Gegensatz zum Drei-Stufen- Modell auch die Beiträge durch indirekte Übergänge. Weiterhin beschreibt das Ein- Stufen- Modell in einer wesentlich verbesserten Weise die Einflüsse durch Vielteilchen- Effekte, obwohl es im Prinzip immer noch auf der Ein- Elektronen- Näherung beruht. Es berücksichtigt nämlich die endliche Lebensdauer des angeregten Elektrons aufgrund von inelastischer Streuung mit anderen Elektronen und die Abschirmung des erzeugten Loches durch Elektronen sowie ebenfalls dessen Lebensdauer. Eine wesentliche Verbesserung des Ein- Stufen- Modells wäre durch eine genauere Berechnung der Vielteilchen- Korrelationen gegeben, ein bis heute ungelöstes Problem. Stattdessen benutzt man ein Verfahren, in dem das berechnete Elektronen- Emissionsspektrum mit einer Spektralfunktion gefaltet wird, die in möglichst weitem Umfang die oben genannten Effekte berücksichtigt. Für eine genauere Betrachtung soll hier nur auf Kap. 6 von Ref. 17 und auf Refs. 18-21 verwiesen werden.

3. Symmetrie- Auswahlregeln für elektromagnetische Dipol-Strahlung

Die Deutung der Photoemissionsergebnisse wird durch die Anwendung von Symmetrie- Auswahlregeln stark vereinfacht (22). Bei spezieller Wahl der geometrischen Anordnung von Lichtwelle, Kristallorientierung und Nachweissystem lassen sich im Rahmen der Ein- Elektronen- Näherung konkrete Angaben über die Symmetrien des Anfangs- und Endzustands machen. Optische Übergänge können nur zwischen solchen Ψ_i und Ψ_f stattfinden, für die das Dipol- Matrixelement $D = \langle \Psi_f | \vec{p} \cdot \vec{A} | \Psi_i \rangle$ nicht Null ist. Die auslaufende Elektronenwelle wird als zeitumgekehrter LEED- Zustand angesetzt und kann außerhalb des Kristalls in eine Reihe von ebenen Wellen entwickelt werden. Betrachtet man Emission innerhalb einer die Oberflächennormale enthaltenden Spiegelebene des Kristalls, so hat Ψ_f gerade Parität bezüglich dieser Ebene. Bei senkrechter Emission ist Ψ_f symmetrisch bezüglich Punktgruppenoperationen um die Normalenrichtung. Folglich ist in diesen Fällen nur dann $D \neq 0$, wenn Ψ_i dieselbe Symmetrie besitzt wie der Dipoloperator $\vec{p} \cdot \vec{A}$. Die Symmetrie von $\vec{p} \cdot \vec{A}$ wird wiederum bestimmt durch die Symmetrie des Vektorpotentials $\vec{A}$. Tabelle I enthält für die drei niedrig indizierten Hauptrichtungen der kubisch kristallisierenden Metalle die bei senkrechter Emission erlaubten Anfangszustands- Symmetrien in Abhängigkeit von der Lage des elektrischen Feldvektors $\vec{E}$. Bei Verwendung von s-polarisiertem Licht (z.B. bei senkrechtem Einfall) hat $\vec{E}$ nur Komponenten parallel zur Oberfläche. In diesem Fall liegt die erlaubte Anfangszustands- Symmetrie

Koordinaten-Achsen			Endzustands- -Symmetrie	Erlaubte Anfangszustands- -Symmetrie		
x	y	z		E_x	E_y	E_z
[100]	[010]	[001]	Δ_1	Δ_5	Δ_5	Δ_1
[001]	[1\bar{1}0]	[110]	Σ_1	Σ_3	Σ_4	Σ_1
[1\bar{1}0]	[1\bar{1}2]	[111]	Λ_1	Λ_3	Λ_3	Λ_1

Tab. I: Dipol-erlaubte Anfangszustands-Symmetrien für senkrechte Emission aus niedrig-indizierten Kristallflächen kubischer Metalle in Abhängigkeit von der Lage des $\vec{E}$ -Vektors der Lichtwelle. Die Ausbreitungsrichtung der Elektronenwelle verläuft parallel zur z-Achse (aus Ref.22)

bei den (001)- und (111)- Flächen nach Tab. I bereits fest. Dagegen benötigt man für die Emission aus (110)- Ebenen linear- polarisiertes Licht mit einstellbarem Azimuth- Winkel von $\vec{E}$, wenn man die mit Hilfe von Auswahlregeln maximal erreichbare Information erhalten will.

Für ein quantitatives Verständnis von Photoemissions- und insbesondere von ESP- Spektren reicht allerdings eine Bestimmung der Anfangszustands- Symmetrie nicht aus. Dazu ist ein weiterer Schritt notwendig, nämlich die Berechnung von Photoemissions- Intensitäten.

C. Oberflächen- und Volumeneigenschaften eines magnetischen Metalles und Photoemission

Die mittlere Austrittstiefe der Photoelektronen aus einem Metall bei Photonenenergien zwischen 5 eV und 40 eV beträgt nur etwa 5 bis 20 Å (die mittlere Eindringtiefe der Photonen liegt dagegen bei über 1000 Å). Unter diesem Aspekt stellt sich die Frage, in welchem Umfang in den Photoemissions- Experimenten spezifische Eigenschaften des Festkörper- Inneren und solche der Oberfläche gemessen werden. Es können z.B. (intrinsische) Oberflächenzustände auftreten, deren Existenz bei mehreren Materialien an bestimmten Kristalloberflächen nachgewiesen wurde, und die, wie etwa beim Ni (Ref. 23-26), auch magnetisch sein könnten. Sie werden als Blochzustände mit reellwertiger $k_{\parallel}$ -Komponente, aber mit komplexer $k_{\perp}$ -Komponente beschrieben. Dementsprechend ist die Aufenthalts- Wahrscheinlichkeit für die Elektronen in solchen Zuständen nur in der Nähe der Oberfläche von Null verschieden, während sie in Richtung zum Kristallinneren exponentiell abfällt. Neben solchen Oberflächenzuständen, die nur in den Bandlücken zwischen Bändern mit derselben Symmetrie oberhalb und unterhalb der Fermi-Energie vorkommen können, gibt es auch Oberflächen- Resonanzen, die sich durch eine starke Zunahme der elektronischen Zustandsdichte in der Nähe der Oberfläche auszeichnen, und die immer an das gleichzeitige Vorhandensein von Volumenzuständen gebunden sind. Die hier genannten Effekte können dazu führen, daß die Magnetisierung an der Oberfläche kleiner oder größer ist, als im Innern des Materials (27-29). Zum augenblicklichen Zeitpunkt sind die experimentellen Befunde untereinander und auch die ersten selbstkonsistenten Berechnungen der magnetischen Bandstruktur an der Oberfläche (30,31) noch recht widersprüchlich. Mit Hilfe von spinpolarisierten Feldemissions- Messungen, mit denen die größte Oberflächenempfindlichkeit erzielt wird, wurden die Vorhersagen der

SWS-Theorie qualitativ bestätigt (32) und keine Anzeichen für eine vorher vermutete unmagnetische Oberflächenschicht beobachtet (33).

Aus theoretischer Sicht treten bereits in der 3.-4. Atomlage unterhalb der Oberfläche Volumeneigenschaften auf.

Wie im folgenden noch näher erläutert wird, lassen sich mit der Photoemissionsspektroskopie durch die Wahl geeigneter experimenteller Parameter trotz der geringen Austrittstiefe der Elektronen und der Einflüsse durch Oberflächeneffekte sowohl die elektronische Struktur des Inneren als auch der Oberflächen untersuchen.

1. Energie- und winkelaufgelöste Photoemission

Der größte Teil der bisher durchgeführten Photoemissions- Untersuchungen an ferromagnetischen Übergangsmetallen läßt sich in zwei Gruppen unterteilen: in energie- und winkelaufgelöste Experimente ohne Spin-Analyse und in Spin- Polarisations- Experimente ohne explizite Messung der Energie- und Winkelverteilung. Die Notwendigkeit für diese Trennung ergibt sich aus einigen schwerwiegenden, heute noch nicht vollständig gelösten experimentellen Problemen, die bei der gleichzeitigen Messung aller dieser Größen auftreten.

Mit Hilfe der winkelaufgelösten Photoelektronen- Spektroskopie ("ARPES" für "Angular- Resolved- Photo-Electron-Spectroscopy") ist man jedoch bei genauer Festlegung der experimentellen Parameter bereits in der Lage, weitgehende Information über die Bandstruktur zu bekommen. Aus der gemessenen Elektronenenergie und dem Emissionswinkel läßt sich der Wellenvektor $\vec{K}$ außerhalb des Kristalls bestimmen. Seine Komponente parallel zur Oberfläche $K_{||}$ bleibt beim Austritt aus einer glatten, nicht rekonstruierten Oberfläche bis auf einen reziproken Gittervektor $G_{||}$ erhalten, d.h. man kennt damit auch $k_{||}$ innerhalb des Kristalls. Dagegen bewirkt die Brechung der Elektronenwelle an der Grenzfläche, daß die senkrechte Komponente $k_{\perp}$ nicht erhalten bleibt. Wegen der geringen Austrittstiefe der Elektronen ist die Wellenfunktion ψ_f innerhalb des Festkörpers nur in einer dünnen Oberflächenschicht von Null verschieden. In Verbindung mit der Unschärferelation ergibt sich daraus eine Verschmierung der $k_{\perp}$ -Werte (34). Es gibt mehrere Möglichkeiten, dieses Problem wenigstens für bestimmte Fälle zu lösen (siehe z.B. Kap.1 von Ref.17). Die einfachste besteht darin, nur solche Elektronen zu messen, die senkrecht aus der Oberfläche emittiert werden, denn in diesem Fall ist $K_{||}$ und damit auch $k_{||}$ gleich 0 (Umklapp- Prozesse mit $G_{||} \neq 0$ seien hier vernachlässigt). Auf diese Weise ist der Wellenvektor der

Elektronen auf eine Linie parallel zur Oberflächennormalen beschränkt. Durch Messungen an verschiedenen orientierten Einkristallen lassen sich so die $E(\vec{k})$ - Banddispersionen entsprechender Richtungen in der Brillouin-Zone bestimmen, und aus der Kenntnis der Bandstruktur entlang einiger hochsymmetrischer Linien wiederum kann man die restliche Information häufig schon durch Interpolation gewinnen.

Für den Fall beliebiger Emissionsrichtungen benötigt man zur Bestimmung der besetzten Bänder die Kenntnis über den Verlauf der unbesetzten Bänder. Mit der näherungsweisen Annahme, daß bei dem Anregungsprozeß nur direkte Übergänge (d.h. senkrechte Übergänge im reduzierten Zonenschema) stattfinden -- diese Annahme hat sich für eine Betrachtung des elementaren Photo- Anregungsprozesses über einen weiten Photonenenergie- Bereich als einigermaßen zutreffend erwiesen (35) -- läßt sich dann der Impuls des Anfangszustandes modulo eines reziproken Gittervektors berechnen. Betrachtet man in einer weiteren Näherung parabolische Endzustände, d.h. Zustände eines freien Elektrons, so erhält man $k_{\perp}$ gemäß:

$$k_{\perp} = \sqrt{2m/\hbar^2 \cdot (E + V_0) - k_{\parallel}^2} \quad (3)$$

Darin bedeutet E die kinetische Energie des Elektrons im Vakuum und V_0 das innere Potential. Die Energien des Anfangs- und Endzustandes E_i und E_f ergeben sich mit der Austrittsarbeit Φ zu:

$$E_i = E + \Phi - h\nu \quad (4)$$

$$E_f = E_i + h\nu \quad (5)$$

Wie in Abschn. II,B 2 bereits erwähnt wurde, sind auch an solchen Stellen der Brillouin- Zone elektronische Übergänge möglich, wo die Endzustandsenergie E_f nicht mit einem Energieband der Volumen-Bandstruktur zusammenfällt. Hier geht die Emission dann in die nur an der Oberfläche existierenden Zustände mit komplexem $\vec{k}$ -Vektor. Da die Reichweite dieser Zustände in derselben Größenordnung liegt wie die Austrittstiefe der Elektronen, kann die Intensität von Übergängen in derartige Bandlückenzustände ähnlich groß sein wie die zwischen Volumenzuständen. Für die Bandlücken- Emission in der Nähe der Photoschwelle ist $k_{\perp}$ zwangsläufig nicht durch ein Endzustandsband festgelegt, und demnach kann die Emission von jedem Anfangszustand aus erfolgen, von dem es energetisch möglich ist, und der durch die Symmetrie- Auswahlregeln nicht verboten ist. Ein Beispiel hierfür ist die (001)- und die (111)- Fläche von Nickel, wo gerade oberhalb des Vakuumniveaus Bandlücken existieren.

2. Spinpolarisierte Photoemission

Für eine genaue Kenntnis der Bandstruktur ferromagnetischer Materialien braucht man Information über den Spinzustand der Bänder. Durch die Messung der Photo-ESP läßt sich diese Information erhalten, die bei ARPES nur aus Vergleichen mit theoretischen Vorhersagen oder mit anderen Experimenten hergeleitet werden kann. Es konnte zwar gezeigt werden (36,37), daß zum Beispiel die Aufspaltung der d-Bänder in Fe, Co und Ni auch in den ARPES-Meßkurven direkt in Erscheinung tritt, jedoch kann die Größe der Aufspaltung nur durch rechnerische Entfaltung der integralen PE- Intensitätskurve in die als lorentzförmig angenommenen Einzelkurven und anschließende Messung ihres Peak- Abstandes bestimmt werden. Bei der spinpolarisierten Photoemission mit Energieanalyse und Winkelauflösung ließe sich dagegen diese Größe unmittelbar aus den Meßkurven als Energiedifferenz zwischen den entsprechenden relativen Maxima der negativen und der positiven Polarisierung mit viel größerer Empfindlichkeit ablesen. Die erstgenannte Methode ist außerdem wegen der mit wachsendem Abstand von E_F zunehmenden Lebensdauer- Verbreiterung (vgl. II,B 2) der Elektronenzustände nur sehr begrenzt anwendbar und mit größeren Unsicherheiten behaftet als die zweitgenannte.

Eine wichtige Voraussetzung bei den ESP-Messungen besteht darin, daß die Probe in dem untersuchten Bereich homogen magnetisiert ist (z.B. in z- Richtung). Das bedeutet, daß die z- Komponente des Gesamtspins, summiert über alle Festkörperelektronen, maximal ist. Für die Majoritätsspin- Elektronen gilt (vgl. Abschn. II,A), daß ihre magnetischen Momente parallel zur Probenmagnetisierung $\vec{M}$ orientiert sind, wohingegen ihre Spins wegen des negativen gyromagnetischen Verhältnisses für Elektronen antiparallel zu $\vec{M}$ stehen (diese Formulierung entspricht dem üblichen Sprachgebrauch, obwohl die Aussage tatsächlich nur für die jeweiligen z- Komponenten der Momente bzw. der Spins gültig ist).

Die emittierten Photoelektronen können als ein statistisches Gemisch (inkohärente Überlagerung) von reinen Spinzuständen $\chi(\vec{r},\vec{s})$, d.h. alle Elektronen haben die gleiche Spinrichtung, angesehen werden (38). Die Polarisierung des Strahls ist der gewichtete Mittelwert der Erwartungswerte des Pauli'schen Spinoperators $\vec{\sigma}$ für jeden der reinen Zustände:

$$\vec{P} = \sum_n g_n \langle \chi_n | \vec{\sigma} | \chi_n \rangle \quad (6)$$

wobei die g_n den relativen Anteil der reinen (und als normiert angenommenen) Zustände χ_n am Gesamtsystem angeben. Der Polarisationsgrad P bezüglich einer vorgegebenen Richtung, die nicht notwendigerweise mit der Richtung von $\vec{P}$ zusammenfallen muß, ergibt sich nach einiger Umrechnung zu:

$$P = \frac{N^{\uparrow} - N^{\downarrow}}{N^{\uparrow} + N^{\downarrow}} \quad (7)$$

wobei $N^{\uparrow}$ bzw. $N^{\downarrow}$ jeweils die Anzahl der Elektronen mit Spin parallel bzw. antiparallel zu dieser vorgegebenen Bezugsachse bedeutet. Wie man aus Gl. (7) unmittelbar entnimmt, kann P nur Werte zwischen +1 und -1 bzw. zwischen +100% und -100% annehmen, wobei die Randwerte jeweils vollständig polarisierten Strahlen entsprechen.

Bei der gegenwärtig verwendeten Geometrie von Probe und Magnetfeld ist eine winkelaufgelöste Polarisationsmessung wegen des zur vollständigen Magnetisierung notwendigen longitudinalen äußeren Magnetfeldes nicht möglich (vgl. jedoch Abschn. III, B 1). Aus demselben Grunde läßt sich nur eine sehr geringe Energieauflösung erzielen. Man kann jedoch die für eine Bandstruktur-Untersuchung erforderliche Winkel- und Energieauflösung in guter Näherung erreichen, wenn man dicht an der

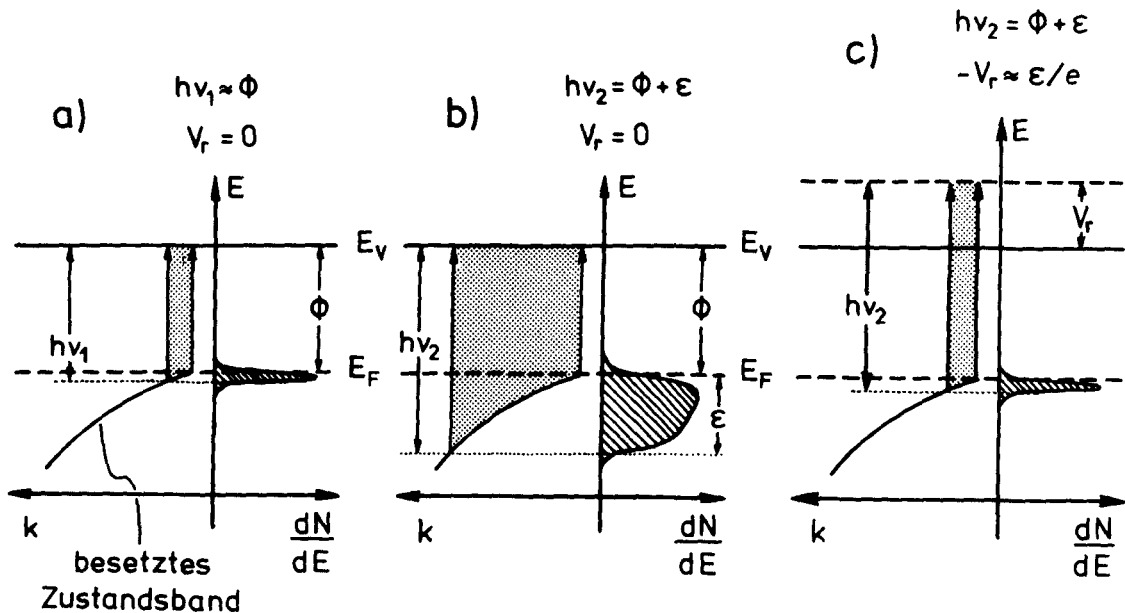


Abb. 5: Schematisches Energiediagramm für die Elektronen-Übergänge und PE-Intensitäten bei der Photoemission im Schwellenbereich mit variabler Photonenenergie $h\nu$ und Retardierungsspannung V_r . Es sind jeweils nur solche Übergänge eingezeichnet (gepunktete Bereiche), deren Elektronen bei den angegebenen experimentellen Bedingungen zum Nachweis gelangen können.

Photoschwelle arbeitet. Dann erfolgt nämlich die Emission senkrecht aus der Oberfläche ($k_{\parallel}=0$), und auch die kinetische Energie der Elektronen ist leicht angebbbar. In Abb. 5a sind die elektronischen Übergänge und die PE- Intensitäten dN/dE für diesen Fall in einem Energiediagramm schematisch dargestellt. Je größer die Differenz zwischen der Photonenenergie und der Schwellenenergie ist, desto mehr besetzte Elektronenzustände können allein aus energetischen Gründen zur Emission beitragen. Dadurch wird die Energieverteilung breiter, und es kann auch nicht- senkrechte Emission auftreten ($0 \leq k_{\parallel} \leq k_{\parallel \text{max}}$). In gleichem Maße verwischt wegen der Energie- und Winkelintegration die Information aus den Ausbeutespektren (vgl. Abb. 5b). Es läßt sich jedoch auch hier eine Winkel- und Energieauflösung erreichen, indem man zwischen der Photokathode und der ersten Anode ein elektrisches Gegenfeld erzeugt. Beträgt die angelegte Verzögerungs- Spannung $-V_r \cdot e \approx h\nu - \Phi$ (unter Vernachlässigung von Kontaktpotentialen), so können nur solche Elektronen zum Nachweis gelangen, die aus Zuständen an der Fermi-Kante kommen, und die parallel zur elektronenoptischen Achse, d.h. mit $k_{\parallel}=0$ emittiert werden (Abb. 5c). Benutzt man die kontinuierliche Synchrotron-Strahlung, so läßt sich durch Variation von $h\nu$ bei gleichzeitiger entsprechender Anpassung von V_r die sogenannte CIS (Constant Initial State) -Spektroskopie durchführen (39).

Bei hinreichend hoher Photonenenergie überwiegen im PE- Yield die inelastisch gestreuten Elektronen, und so kann man unter diesen Bedingungen zusätzlich Streuprozesse untersuchen (vgl. Abschn. IV,D und Ref.40).

III. Experiment und Auswerteverfahren

A. Überblick über die Meßapparatur

In diesem Abschnitt sollen die wesentlichen Teile der verwendeten Meßapparatur skizziert werden. Einzelheiten über das Experiment werden in den folgenden Abschnitten gegeben. Ein schematisches Bild der Apparatur ist in Abb. 6 dargestellt. Das Foto in Abb. 7 zeigt die Ansicht von vorne. Die Apparatur besteht im wesentlichen aus fünf Teilen, die alle -- bis auf die Lichtquelle -- unter Ultra- Hochvakuum stehen und durch Ventile gegeneinander abgeriegelt werden können.

Eine kleine Schleusenkammer mit eigener Turbomolekular- Pumpe ermöglicht ein schnelles Auswechseln der Proben, ohne daß dazu andere Apparaturteile belüftet werden müssen. Die Probe wird dabei am Ende eines etwa 1,30 m langen UHV- Manipulatorstabes befestigt, mit dessen Hilfe sie entlang der Apparaturachse bis zu ihrem Ort während der Messung verschoben werden kann. Die Kraftübertragung von außen auf den Stab erfolgt dabei durch Permanent- Magnete, so daß eine perfekte UHV-mäßige Abdichtung gewährleistet ist. Diese Magnete sind weit genug von den Bahnen der emittierten Elektronen entfernt, um eine Ablenkung infolge ihres Feldes ausschließen zu können.

Die sich an die Schleusenkammer anschließende Proben- Präparationskammer dient zur Vorbereitung, d.h. zur Reinigung und Charakterisierung der Probenoberfläche. In der Photoemissionskammer befindet sich die Probe während der Messung im homogenen Feld eines außerhalb des Vakuums angebrachten Elektromagneten. Für die Extraktion der emittierten Elektronen aus dem Magnetfeld und ihre Weiterleitung in Richtung auf den Mott- Streuer enthält die Kammer zwei Systeme von elektronenoptischen Linsen und dazwischen einen 90° -Kugelkondensator zur Strahl- Umlenkung. In beiden Linsensystemen ist die Möglichkeit für eine elektrostatische Strahlablenkung mittels eines Quadrupolfeldes gegeben. Eine Heiz- und Kühlvorrichtung dient bei temperaturabhängigen Polarisationsmessungen zur Einstellung der Probentemperatur in einem Bereich von etwa 220 K bis über 700 K (Messung mittels Ni/NiCr- Thermoelement) und gleichzeitig zur Zentrierung der Probe auf die Magnetfeld- Achse.

An die Photoemissionskammer schließt sich ein 12-stufiger Beschleuniger mit linearem Potentialverlauf an, in dem die Elektronen auf eine Energie von 100 keV gebracht werden. Danach werden sie im Mott-

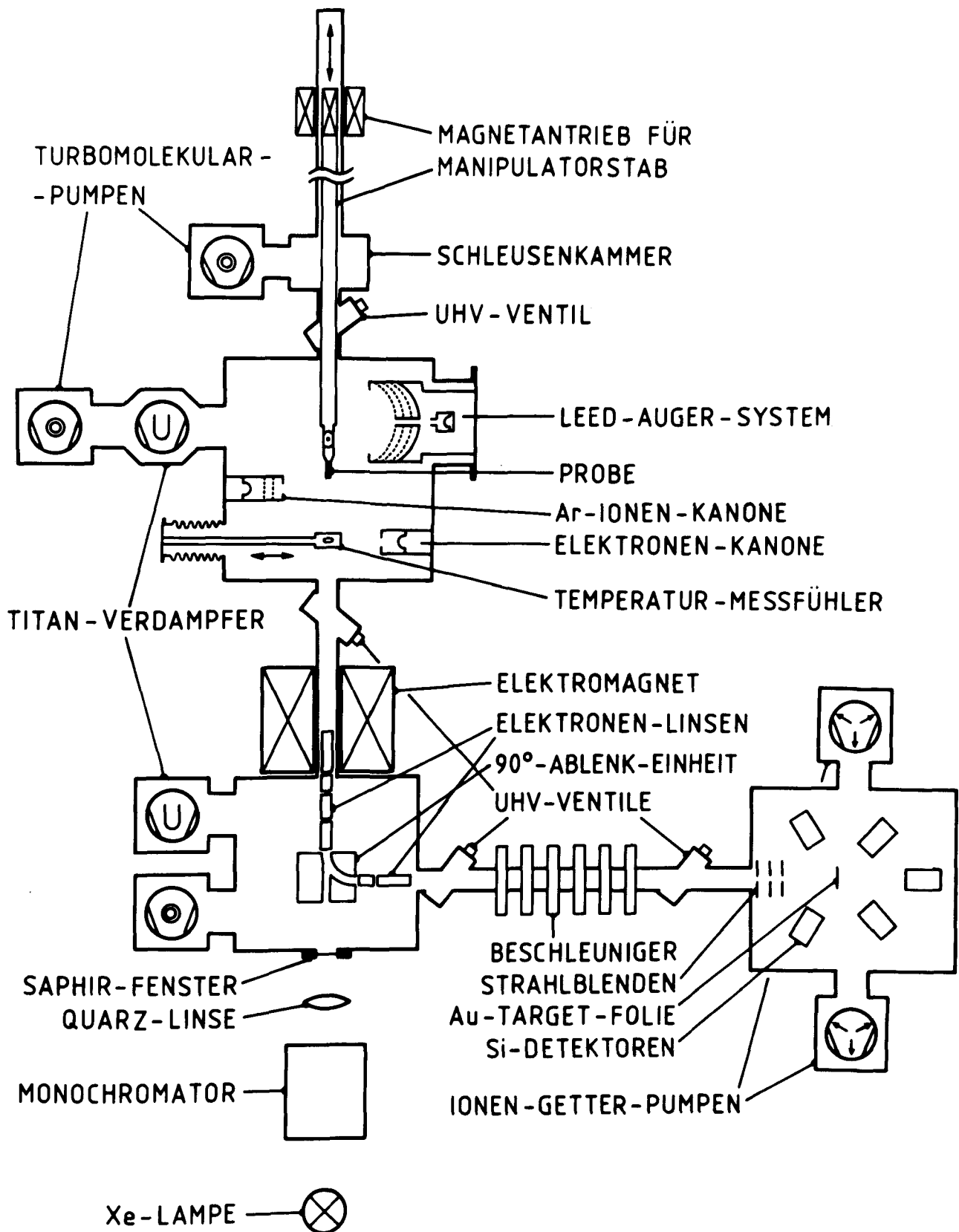


Abb. 6: Verwendete Meßapparatur für die Experimente zur spinpolarisierten Photoemission an Ni und Co

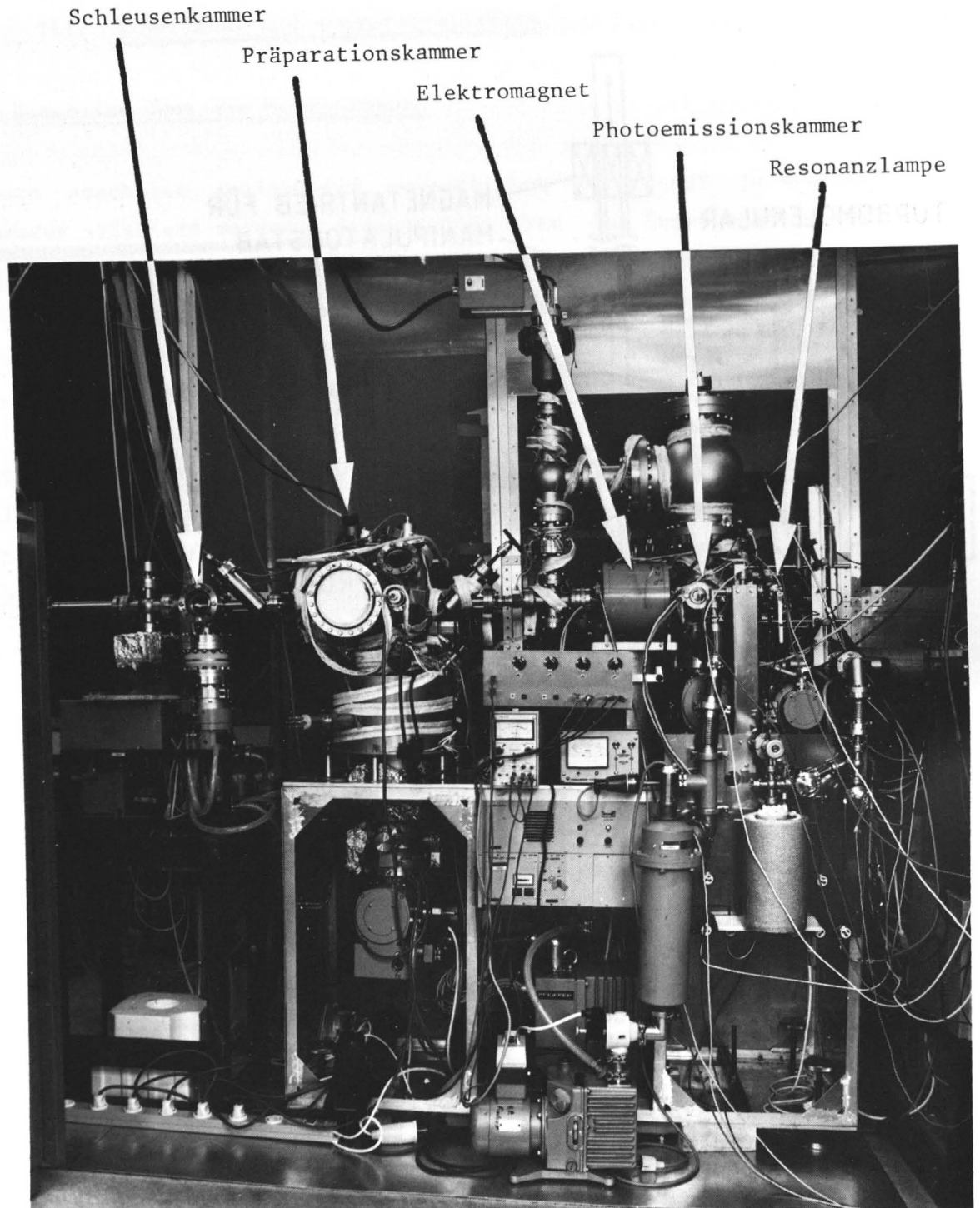


Abb. 7: Vorderansicht der Meßapparatur. Statt der Xe-Lampe mit Monochromator wird hier gerade eine Edelgas-Resonanzlampe verwendet

Analysator an einer Goldfolie gestreut, die mit Hilfe eines fernbedienbaren Motors auch gegen eine Aluminiumfolie ausgetauscht werden kann. Mit acht Si-Grenzschicht-Detektoren werden unter Streuwinkeln von 120° und 45° gestreute Elektronen nachgewiesen und die

gemessenen Impulse an eine entsprechende Zähl Elektronik weitergeleitet. Abb. 8 zeigt ein Blockschaltbild davon. Ein zusätzlicher Detektor zur Justierung des Primärstrahls befindet sich auf der elektronenoptischen Achse, d.h. unter 0° Streuwinkel. Da diese Zähl Elektronik zweckmäßigerweise auf Erdpotential liegen sollte, ist eine Übertragung der aufgenommenen Impulssignale von 100 kV auf 0 V notwendig. Dies geschieht durch Verwendung von Lichtleitern und einem optoelektronischen Sender-/ Empfänger- System. Die Impulse werden anschließend in einem Vielkanal- Analysator (MCA 1) nach ihrer Höhe, die ein Maß für die Energie der gezählten Elektronen ist, sortiert. Das sich ergebende Spektrum wird auf einem Bildschirm dargestellt. Anhand dieses Spektrums lassen sich die Energie- Schwellenwerte der Diskriminatoren für jeden Zählkanal so einstellen, daß die energieärmeren Impulse von an den Wänden gestreuten Elektronen und das Eigenrauschen der Detektoren möglichst weitgehend unterdrückt, dagegen die Impulse der elastisch gestreuten 100 keV- Elektronen möglichst vollständig akzeptiert werden.

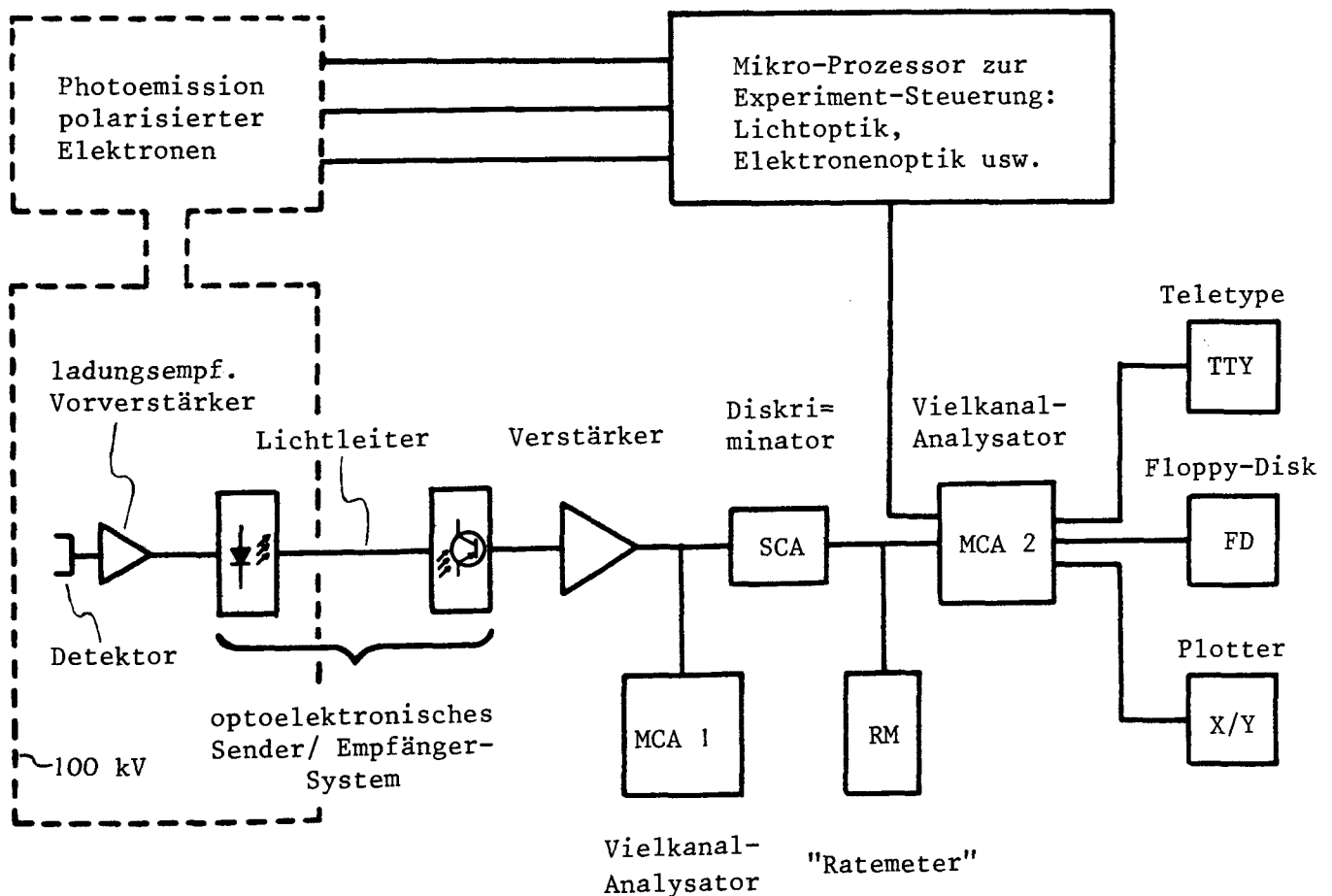


Abb. 8: Blockschaltbild der Zähl- und Auswerte-Elektronik
(zur besseren Übersichtlichkeit ist nur ein Zählkanal dargestellt)

Danach werden die so gefilterten Impulse in einem mikroprozessor-gesteuerten weiteren Vielkanal- Analysator (MCA 2) registriert. Schon während der Messung wird ständig aufaddiert, ausgewertet und die Zwischenergebnisse (links- /rechts- bzw. oben- /unten- Asymmetrie, Zählraten und eingestellte Photonenenergie) auf einem Bildschirm dargestellt. Die Endergebnisse werden in der gleichen Form mit Hilfe einer Teletype- Schreibmaschine ausgedruckt und auf Disketten gespeichert. Darüberhinaus kann derselbe -- in "BASIC" programmierbare -- Rechner auch die Polarisationswerte bestimmen, die entweder digital oder über einen angeschlossenen Plotter in Form eines vollständigen Diagramms mit den zugehörigen Fehlerbalken ausgegeben werden.

Ein anderer Mikroprozessor mit diverser zusätzlicher Peripherie-Elektronik steht für weitere Kontroll- und Steuerungsaufgaben zur Verfügung, wie z.B. Messen und kontinuierliches Durchfahren von Linsenspannungen, Monochromator- Steuerung in Verbindung mit dem Starten und Stoppen von Zählzyklen, Füllstandsüberwachung und Nachfüll- Regelung der mit flüssigem Stickstoff beschickten Kühlfallen u.ä.

Als Lichtquelle dient das kontinuierliche Spektrum des Lichtbogens einer Xe-Hochdrucklampe. Nach dem Durchtritt durch einen Monochromator wird das Licht von einer Quarz- Linse durch ein Saphir- Fenster auf die Probenoberfläche fokussiert. Damit es durch den 90° -Kugelkondensator gelangen kann, wurde dessen Außenschale mit einem Loch von 6 mm Durchmesser versehen.

Mit den gemäß Abb. 6 angeordneten Vakuum- Pumpen erreicht der Restgas- Druck in der Präparations- und der Photoemissionskammer einen Wert von etwa 10^{-8} Pa ($\approx 10^{-10}$ Torr), im Rezipienten des Mott- Streuers, der wegen der Halbleiter- Detektoren nur sehr schwach ausgeheizt werden kann, Werte von wenigen 10^{-6} Pa.

B. Photoemissionskammer

1. Bahnablenkung der Elektronen im Magnetfeld

Für Spinpolarisations- Messungen bei der Photoemission aus ferromagnetischen Materialien ist die parallele Ausrichtung der Magnetisierung in den Weißschen Bereichen des Probenmaterials eine notwendige Voraussetzung. Leider bewirkt das dazu erforderliche, von außen angelegte Magnetfeld zusammen mit dem Streufeld der Probe auch eine Bahnablenkung der emittierten Photoelektronen und eine Drehung ihres Spins. Um trotzdem quantitative Informationen aus dem Experiment zu erhalten, ist eine ausführliche Analyse des Magnetfeldeinflusses auf die Elektronen- Parameter unerlässlich. Zu diesem Zweck haben wir die Flugbahnen der Elektronen durch Integration ihrer Bewegungsgleichung

$$\frac{d(\vec{mv})}{dt} = -e (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (8)$$

numerisch ermittelt. Dabei wird das $\vec{E}$ -Feld erzeugt durch das Potential der ersten Elektronenlinsen gegenüber dem Erdpotential der Probe. Die Berechnungen wurden mit einem umfangreichen Computerprogramm von Hermannsfeld (41) durchgeführt. Einige Ergebnisse für verschiedene elektronenoptische Geometrien sowie der Verlauf des $\vec{B}$ -Feldes des Elektromagneten entlang der z-Achse (hier identisch mit der $\vec{B}$ -Feld-Achse) wurden bereits veröffentlicht (42). In Abb. 9 sind die Ergebnisse für eine magnetische Induktion von 0,225 T und eine Anfangsenergie der Photoelektronen von wenigen eV dargestellt. Die schwarzen Balken am oberen Rand der Zeichnung symbolisieren die ersten beiden Elektronenlinsen und das elektrostatische Ablenssystem. Die angegebenen Spannungen sind für die Messungen typische Werte. Durch die hohe Beschleunigung der Elektronen auf $E = 5$ keV vor ihrem Austritt aus dem Magnetfeld wird die Zeitspanne für eine Drehung der Spins im Randbereich des Feldes klein gehalten (vgl. Abschn. III, B 3). Um den störenden Einfluß des Magnetfeldes möglichst weitgehend zu verringern, wurde die experimentelle Anordnung so gewählt, daß die von den Photonen bestrahlte Stirnfläche der zylinderförmigen Probe senkrecht zur Feldachse steht und somit die Photoelektronen parallel zu den Feldlinien abgezogen werden. Für Elektronen, deren Bahn genau auf der Feldachse verläuft, gibt es keine Ablenkung und keine Spin- Präzession; dagegen erhalten die übrigen Elektronen im inhomogenen Bereich des Magnetfeldes eine Geschwindigkeitskomponente $v_{\perp}$ senkrecht zur Achse, wodurch sich, besonders beim Abbremsen der Elektronen, eine beträchtliche

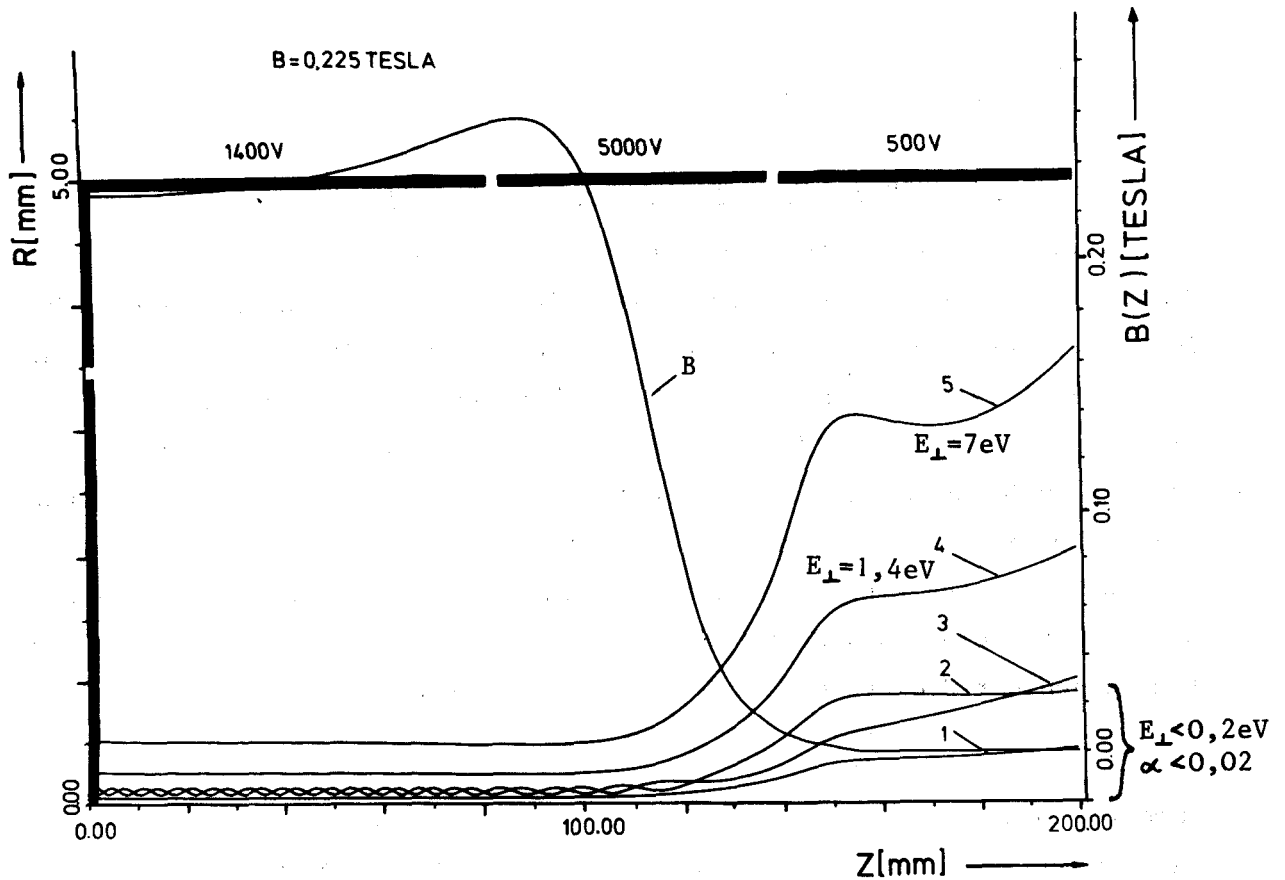


Abb. 9: Computer-Zeichnung von diskreten Elektronenbahnen und von der magnetischen Induktion B des Elektromagneten. Die angegebenen Potentiale der elektrostatischen Linsen sind auf die Probe bezogen. $E_{\perp}$ ist die transversale Elektronen-Energie. Die Anfangsenergie der Elektronen beträgt einige eV

Strahldivergenz und -aufweitung ergibt (s. Abb.9 und Ref.42). Die damit verbundene Energiekomponente $E = \frac{1}{2}mv_{\perp}^2$ beträgt in den Randbereichen des Strahls mehrere eV. Das Auftreten von $v_{\perp}$ wird verursacht durch radiale $\vec{B}$ -Feld-Komponenten in Verbindung mit der Lorentz-Kraft (die dabei ebenfalls entstehende azimuthale Geschwindigkeitskomponente v_{ϕ} wird hier nicht näher betrachtet). Bei der theoretischen Beschreibung dieser Effekte nutzt man aus, daß die Komponente des kanonischen Drehimpulses $\vec{L} = \vec{R} \times (m\vec{v} - e\vec{A})$ der Elektronen entlang der Achse der zylindersymmetrischen Feldverteilung erhalten bleibt ($\vec{R}$ = Achsenabstand, $m\vec{v}$ = Impuls der Elektronen). Eine genauere Behandlung dieses Problems wird in Ref. 42 gegeben. Für das Experiment ergibt sich aus Intensitätsgründen die wichtige Forderung, daß der Lichtfleck auf der Probe möglichst klein und genau um die Feldachse herum zentriert sein muß.

Die räumliche Justierung des Probenzylinders auf möglichst genaue axiale

Lage ließ sich immer durch Drehen am Manipulatorstab um die Längsachse erreichen. Dazu wurde ein halbdurchlässiger Spiegel in den Strahlengang des Lichtes gestellt, der es in Verbindung mit einem Fernrohr erlaubte, die Lage der Probenoberfläche aus der "Sicht" des Lichtstrahls und bezüglich einer achsensymmetrischen Lochblende dicht vor der Probe zu kontrollieren. Die oben erwähnten Berechnungen zeigen, daß -- besonders im Hinblick auf eine spätere Energieanalyse -- die Photoelektronen nicht sehr viel weiter als etwa 0,5 mm von der Achse entfernt von der Probenoberfläche starten dürfen, damit $E_{\perp}$ nicht zu große Werte annimmt (vgl. die in Abb.9 angegebenen $E_{\perp}$ -Werte für die dort dargestellten Elektronenbahnen).

Durch das Auftreten von $E_{\perp}$ verschlechtern sich die Möglichkeiten für eine Energieanalyse der Photoelektronen beträchtlich, da für das Erzielen einer hohen Auflösung eine starke Abbremsung notwendig ist, um die Abmessungen des Analysators in Grenzen zu halten. Hierdurch wiederum ergibt sich eine Vergrößerung des Strahlquerschnitts und damit wegen der begrenzten Analysator-Akzeptanz ein drastischer Intensitätsverlust des Elektronenstroms. Ferner ist aus Abb. 9 zu erkennen, daß das äußere Magnetfeld jede Information über die Winkelverteilung der Photoelektronen zerstört. Eventuelle zukünftige Untersuchungen zur energie- und winkelaufgelösten, spinpolarisierten Photoemission aus ferromagnetischen Materialien werden daher nur mit einer ganz anderen experimentellen Anordnung möglich sein (vgl. z.B. auch Ref.43). Es sei hier am Rande erwähnt, daß in unserem Labor zur Zeit gerade die ersten erfolgreichen Messungen mit dieser neuen Anordnung abgeschlossen werden konnten (44). Die Probe besteht dabei aus einem dünnen, länglichen Plättchen (Maße: $12 \times 3 \times 0,3 \text{ mm}^3$), das in Längsrichtung magnetisiert ist. Durch die Stellung senkrecht zur elektronenoptischen Achse ergibt sich eine transversale Magnetisierung. Wegen des günstigen Entmagnetisierungs-Faktors ist die Remanenz der Probe so groß, daß ein von außen angelegtes Feld nur zur Auf- bzw. Ummagnetisierung erforderlich ist. Dies geschieht durch kurzzeitiges Heranführen eines kleinen Hufeisen-Permanentmagneten außerhalb des Vakuums. Einige der Messungen mit dieser Geometrie ergaben $P \approx 100 \%$. Demnach ist das Streufeld der Probe so gering, daß im Rahmen der Meßgenauigkeit ($\pm 10 \%$) keine Drehung der Spins festgestellt wird (vgl. Abschn. III, B 3). Dieses Streufeld läßt sich durch Verwendung einer ringförmigen Probe sogar noch weiter reduzieren. Die emittierten Elektronen brauchen daher zur Extraktion aus dem Magnetfeld bei weitem nicht so stark beschleunigt zu werden, wie es bei der longitudinalen

Geometrie notwendig ist. Ferner ist E_L praktisch gleich 0, wodurch sich, wie oben erläutert wurde, die Möglichkeiten für eine bei höheren Photonenenergien sehr wünschenswerte differentielle Energieauflösung wesentlich verbessern.

2. Magnetisierungsgrad des Probenmaterials

Als weiterer wichtiger Punkt muß der Grad der Probenmagnetisierung untersucht werden. Einerseits soll das äußere Magnetfeld aus den genannten Gründen möglichst klein sein, andererseits muß die Probe auch noch in den oberen Atomlagen bis zur Sättigung magnetisiert sein, da sich gerade hier der Photoemissionsprozeß abspielt. Um einen günstigen Entmagnetisierungsfaktor zu erhalten, wurden zylinderförmige Proben mit einem Durchmesser von 3 mm und einer Länge von 12-15 mm verwendet. Wie entsprechende Messungen mit einer Induktions- Meßanordnung gezeigt haben, ist die Probe bei einem angelegten Feld von 500 Oe magnetostatisch bereits gesättigt. Die ESP- Messungen wurden mit einem Feld von 2,5 - 3 kOe durchgeführt, um auch die Randbereiche der Stirnfläche sicher zu sättigen.

3. Präzession des Elektronenspins im Magnetfeld

Unmittelbar nach dem Austritt aus dem Festkörper ist der Elektronenstrahl wegen der magnetischen Sättigung der Probe longitudinal polarisiert. Die im Streufeld der Probe und im Randfeld des Elektromagneten zwangsläufig auftretenden radialen Feld- Komponenten können jedoch zu einer Spin- Drehung außerhalb der elektronenoptischen Achse führen. Die Auswirkungen einer solchen Drehung auf die gemessene Polarisation sollen (unter Vernachlässigung des Proben- Streufeldes) im folgenden näher untersucht werden.

Dazu sei der Modellfall eines in z-Richtung vollständig polarisierten Elektronenstrahls mit kreisförmigem Querschnitt und homogener Intensitäts- Verteilung betrachtet (Anmerkung: Jeder teilweise polarisierte Strahl läßt sich in einen unpolarisierten und einen vollständig polarisierten Anteil zerlegen). Für solche Elektronen, deren Flugbahn nicht genau auf der z-Achse, d.h. also auf der Feldachse, verläuft, dreht sich der Spin im Bereich der radialen Feldkomponenten um den Winkel $\varphi = \omega_L \cdot t$ (s. Abb. 10). Dabei ist $\omega_L = e/m \cdot B_r$ (B_r = Radialkomponente von $\vec{B}$) die Larmor- Frequenz und $t=s/v$ die Zeitdauer für das Durchqueren der Randzone, wo $B_r \neq 0$. Die Geschwindigkeit v der

Elektronen ergibt sich aus dem Potential der betreffenden Rohrlinse in dieser Randzone von 5 kV gegenüber dem Potential 0 der Probe. Setzt man $B_r = \frac{1}{2} r \frac{\partial B}{\partial z} \Big|_{r=0} \approx \frac{1}{2} r \frac{\Delta B}{s} \Big|_{r=0}$, so ergibt sich in dieser Näherung φ als lineare Funktion von r :

$$\varphi = \frac{e \Delta B}{2 m v} r \quad (9)$$

Die Polarisation des Elektronenstrahls nach dem Austritt aus dem Magnetfeld wurde als Funktion des Strahlradius r durch Integration über seine Querschnittsfläche berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 11 dargestellt (es wurde hier eine magnetische Induktion von $B_0 = \Delta B = 0,2 \text{ T}$ zugrunde gelegt). Dabei gibt der Parameter d die seitliche Versetzung des Strahls bezüglich der Feldachse an. Für $d=0$ bewirkt die Spin-Drehung nur eine Depolarisation von P_z . Dagegen tritt bei $d \neq 0$ zusätzlich eine transversale Polarisationskomponente auf, die in y -Richtung zeigt (P_y), falls der Strahl in x -Richtung verschoben ist (dabei ist $P_x=0$). Neben der longitudinalen Polarisationskomponente $P_1 (\equiv P_z)$ wurde bei den

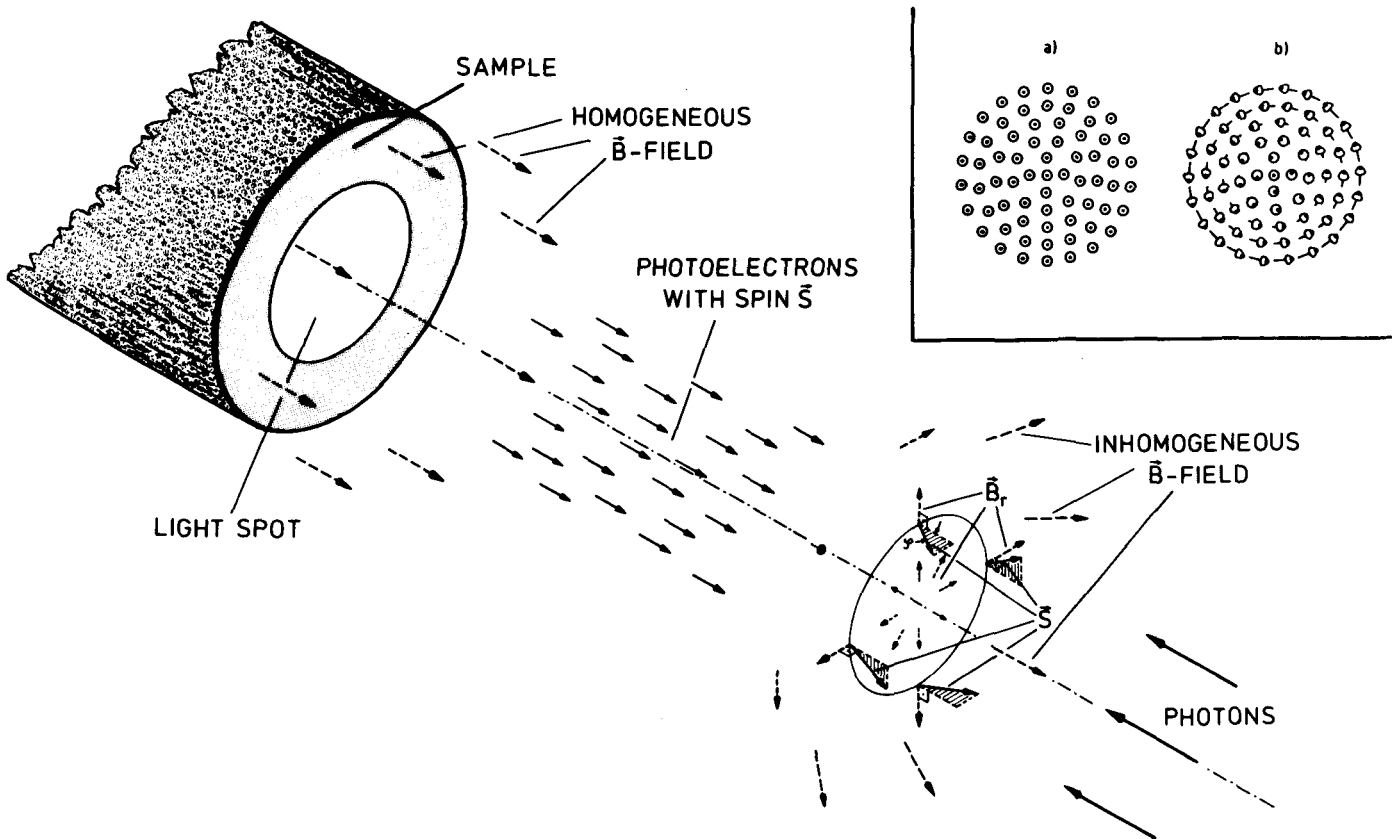


Abb. 10: Präzession der Elektronenspins $\vec{S}$ durch radiale Magnetfeldkomponenten B_r . Rechts oben: Querschnitt durch einen polarisierten Elektronenstrahl vor (a) und nach der Spin-Präzession (b) (Blick von vorne auf die Spitzen der "Spin-Pfeile": $\odot$)

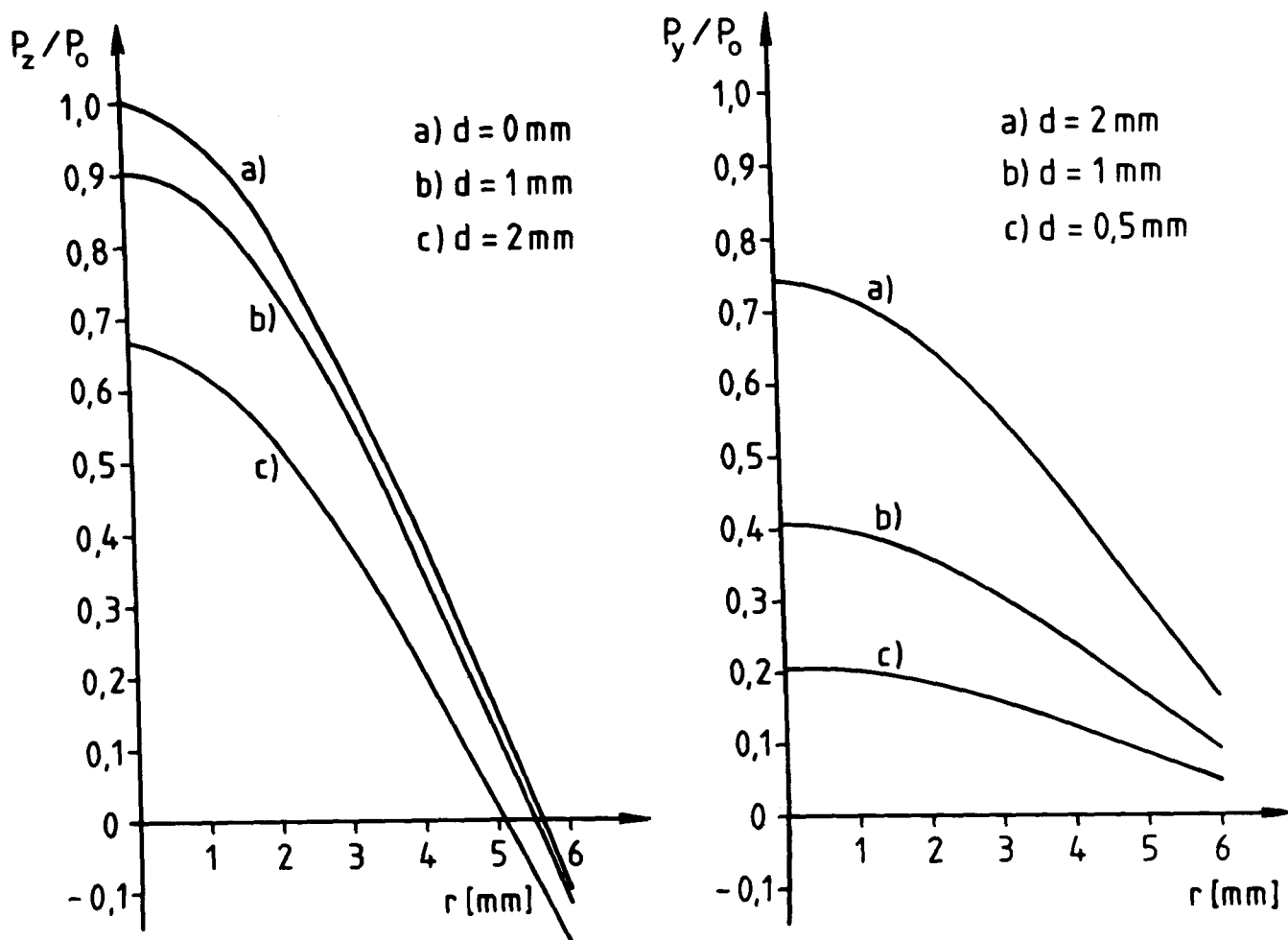


Abb. 11: Polarisationskomponenten P_z und P_y eines anfänglich in z-Richtung polarisierten Elektronenstrahls (P_0) nach dem Austritt aus dem Magnetfeld (r =Strahlradius; d = seitliche Strahlversetzung in x-Richtung)

vorliegenden Messungen auch eine der beiden transversalen Komponenten P_t bestimmt (es sei z.B. $P_t = P_y$). Bei den meisten Messungen war P_t innerhalb des Meßfehlers proportional zu P_l . Für die relative Größe P_t/P_l (bzw. P_y/P_z) lag der beobachtete maximale Wert $\bar{P}_y/P_z$ bei etwa 0,5, das entspricht einem maximalen Drehwinkel des Polarisationsvektors von ca. $25-30^\circ$. Zur Ermittlung dieses Wertes wurde seine Abhängigkeit von der räumlichen Stellung des Elektromagneten zur elektronenoptischen Achse und von anderen elektronenoptischen Parametern wie z.B. Blendendurchmesser und Linsenspannungen eingehend untersucht. Die Gesamt- Polarisation des Elektronenstrahls wurde gemäß $|P| = \sqrt{P_l^2 + P_t^2}$ bestimmt.

Anhand der Kurven in Abb. 11 soll nun abgeschätzt werden, wie groß die Abweichung von P gegenüber dem Wert P_0 vor der Spin- Drehung ist. Unter

der naheliegenden Annahme, daß im Fall des oben angegebenen Maximalwertes $\bar{P}_y = 0,5 P_z$ gilt: $P_x \ll P_y$, lassen sich für diesen Fall die Werte für $P_z/P_o =: q_z$ und $P_y/P_o =: q_y$ in Abhängigkeit vom Strahlradius r angeben (damit ist d ebenfalls festgelegt). Die relative Abweichung $\Delta P/P_o$ zwischen P und P_o erhält man schließlich aus:

$$\frac{\Delta P}{P_o} = \frac{P_o - P}{P_o} = \frac{P_o - \sqrt{P_z^2 + P_y^2}}{P_o} = \frac{P_o - \sqrt{(q_z P_o)^2 + (q_y P_o)^2}}{P_o} = 1 - \sqrt{q_z^2 + q_y^2}$$

In der folgenden Tabelle sind die so ermittelten Abweichungen für $r = 0,1,2$ mm aufgeführt:

r [mm]	d [mm]	q_z ($=\frac{P_z}{P_o}$)	q_y ($=\frac{P_y}{P_o}$)	$\frac{\Delta P}{P_o}$ [%]
0	1,12	0,88	0,44	2
1	1,08	0,845	0,423	5
2	1,0	0,74	0,37	17

Bei der Frage, welcher Strahlradius r für die Abschätzung von $\Delta P/P_o$ zugrunde gelegt werden muß, ist neben experimentellen Bedingungen wie der Größe des Lichtflecks u.ä. zu beachten, daß bei der Herleitung obiger Ergebnisse weder die Bahnablenkung der Elektronen im Randmagnetfeld (vgl. Abschn. III,B 1), noch die tatsächliche Intensitätsverteilung des Elektronenstrahls berücksichtigt wurde. Unter Einbeziehung all dieser Aspekte erscheint der für $r=1$ mm erhaltene Wert von etwa 5 % für die maximale Abweichung zwischen P und P_o als realistisch. In jenen Fällen, wo die Voraussetzung $P_x \ll P_y$ nicht gilt, kann die Abweichung bis zu ca. 15 % betragen.

4. Elektronenoptisches Extraktions- System

Nachdem die Elektronen mit einer kinetischen Energie von 5 keV den Randbereich des Magnetfeldes durchquert haben, werden sie in dem Kugelkondensator- Segment auf 500-1000 eV abgebremst. Dabei vergrößert sich der Strahldurchmesser etwa auf das 2- bis 3- fache, während die Winkeldivergenz nur ungefähr 40 mrad beträgt. Dieses im wesentlichen longitudinal polarisierte, fast parallele Strahlenbündel wird beim Durchlaufen des Kondensators um 90° abgelenkt. Hierdurch ergeben sich mehrere Vorteile: 1) Die longitudinale Polarisationskomponente verwandelt sich in eine transversale (wir nehmen hier den nichtrelativistischen Fall noch als brauchbare Näherung an und

vernachlässigen daher die Spindrehung im elektrostatischen Feld während der Strahlablenkung; vgl. Abschn. III,F 2). Dies ist wichtig, da mit der Methode der Mott-Streuung nur transversale Komponenten gemessen werden können. 2) Durch die Umlenkung ist es möglich, die Probenoberfläche direkt, d.h. ohne Verwendung von Spiegeln, durch eine Bohrung im Kondensator mit Licht zu bestrahlen. 3) Wegen der fokussierenden und energie-dispersiven Eigenschaften des Kugelkondensators (über die daraus resultierenden Vorteile im Hinblick auf unsere Experimente zur spin-polarisierten Photoemission wurde bereits an anderer Stelle ausführlich berichtet, s. Ref.45) wird ein am Eintrittsspalt paralleler monoenergetischer Elektronenstrahl auf einen Punkt in der Ebene des Austrittsspalt fokussiert. Dieser Punkt wiederum wird mit Hilfe einiger weiterer Rohrlinsen und einer Ablenkeinrichtung auf die Eintrittsöffnung eines Dreifach-Blendensystems im Mott-Analysator

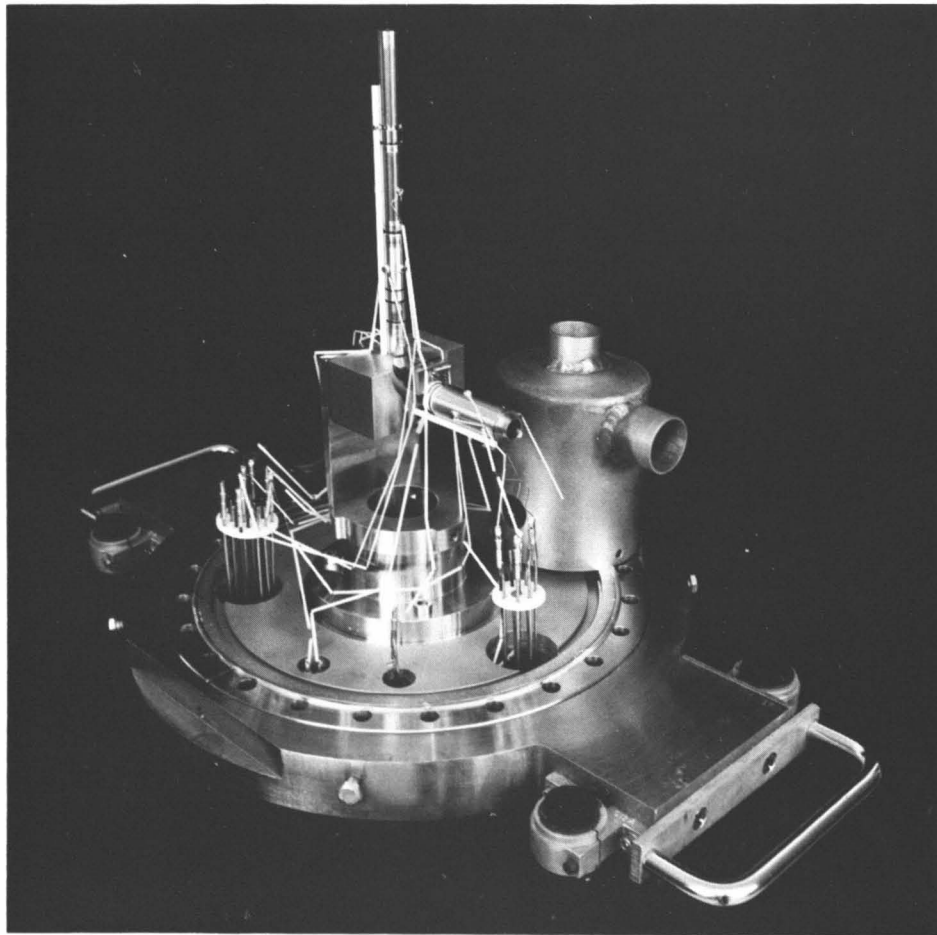


Abb. 12: Elektronenoptik aus elektrostatischen Rohrlinsen, Quadrupol-Ablenksystemen und einer 90° -Umlenkeinheit (Kugelkondensator-Segment). Die magnetische Abschirmung aus μ -Metall ist seitlich danebengestellt.

abgebildet. Der Durchmesser der Blendenöffnungen und die kinetische Energie der Elektronen im Kondensator bestimmen neben ihrer Winkeldivergenz maßgeblich die erreichbare Energieauflösung, die bei Messungen mit höheren Photonenenergien und damit breiteren Energieverteilungs- Spektren der Elektronen eine wichtige Rolle spielt (vgl. auch Abschn. IV,D). Sie beträgt z.B. bei 3mm-Blenden, 1000 eV Durchtrittsenergie und 40 mrad Divergenz- Winkel etwa 40 eV. Dabei besitzt der Kondensator keine weiteren strahlbegrenzenden Elemente, außer seinem Kugelabstand von 6 mm. Der Radius seiner Mittenachse beträgt 15 mm.

Das gesamte elektronenoptische System innerhalb des Rezipienten der Photoemissionskammer inclusive aller elektrischen Zuleitungen ist als eine Einheit auf einem senkrecht zum Lichtstrahl angebrachten Flansch von 200 mm Durchmesser montiert. Abb. 12 zeigt ein Foto davon. Während des Meßbetriebs befindet sich dieses ganze System -- bis auf die im Feld des Elektromagneten befindlichen Rohrlinsen -- zur Abschirmung von Restmagnetfeldern in einem Behälter aus μ -Metall mit einer hohen Permeabilität (in Abb. 12 rechts daneben gestellt).

C. Mott-Detektor

Die Methode der elastischen Streuung hochenergetischer Elektronen an schweren Atomkernen und Messung der Zählratenasymmetrie bei großen Streuwinkeln zur Bestimmung der transversalen Elektronenpolarisation (Mott- Analyse) beruht auf einem relativistischen Effekt. Das unterschiedliche Vorzeichen der Spin- Bahn- Wechselwirkungsenergie für nach links bzw. rechts gestreute Elektronen derselben (in diesem Fall senkrechten) Spinrichtung bewirkt einen Unterschied im Coulomb-Streupotential des Korns und damit auch die zu messende Zählratenasymmetrie (vgl. auch Abb.16 auf S. 43). Auf genauere theoretische Einzelheiten soll hier nicht eingegangen werden, da sie z.B. ausführlich in Ref.38 und 46 dargestellt sind. Die auf eine Energie von 100 keV beschleunigten Elektronen werden an einer Goldfolie von etwa $220 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ Flächendichte (das entspricht einer Dicke von $1140 \text{ \AA}$) gestreut und schließlich von jeweils 4 Detektoren unter Winkeln von 120° und 45° zur Strahlrichtung und mit einem Energie- Auflösungsvermögen von 10-20 keV (FWHM-Wert) nachgewiesen. Die Beschleunigung der Elektronen auf so hohe Energien empfiehlt sich aufgrund des Anwachsens der Streuasymmetrie mit zunehmender Energie. Da die Detektoren jeweils

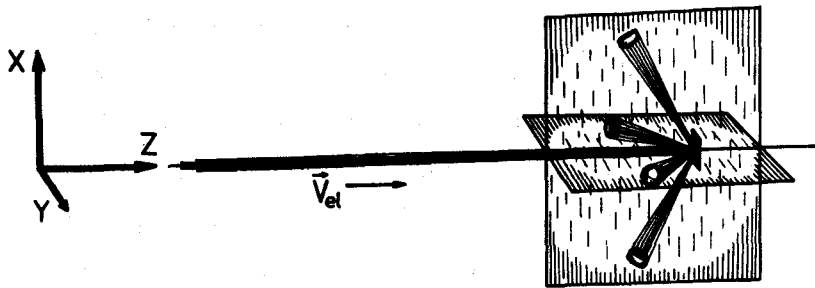


Abb. 13:

Anordnung der Detektoren zur gleichzeitigen Messung der beiden transversalen Polarisations-Komponenten

paarweise in zwei zueinander senkrechten Ebenen angeordnet sind (s. Abb.13), läßt sich die gesamte transversale Polarisationskomponente bestimmen. Ein Maß für die energie- und winkelabhängige Streuasymmetrie bei vorgegebener Polarisation ist die Sherman-Funktion $S(E, \theta)$. Leider nimmt sie immer gerade für solche E und θ große Werte an, bei denen der Wirkungsquerschnitt für die Streuung der Elektronen ein relatives Minimum hat. Im Interesse eines möglichst kleinen statistischen Fehlers bei möglichst kurzen Meßzeiten ist daher ein Kompromiß für die günstigsten Werte der Elektronenenergie E und des Streuwinkels θ zu finden. Dieses ist bei den oben angegebenen Werten von $\theta=120^\circ$ und $E=100$ keV der Fall. Bei $\theta=45^\circ$ ist dagegen die Sherman-Funktion praktisch gleich 0, d.h. jede Asymmetrie, die von den Zählern unter diesem Winkel gemessen wird, muß apparativ bedingt sein. Dasselbe gilt für die Streuung an einer Aluminium-Folie. Wegen der geringen Ordnungszahl von Al ist die zugehörige Sherman-Funktion für alle Streuwinkel so gering, daß die Asymmetrie infolge einer Elektronen-Polarisation weniger als 1 % der Au-Asymmetrie beträgt. Die apparative Asymmetrie wird nun mit den beiden genannten Hilfsmitteln bestimmt und als Korrekturwert für die Meßdaten verwendet. Eine genauere Beschreibung des Korrekturverfahrens erfolgt in Abschn. III,F. Als Hauptursachen dieser Asymmetrie sind zu nennen: 1) Verschiedene Ansprech-Wahrscheinlichkeiten der Detektoren infolge ungenauer räumlicher Justierung zum Streuzentrum oder fertigungsbedingter Unterschiede der Empfindlichkeit; 2) Inhomogenitäten der Streufolie; 3) Nicht genau axialer Einfall des Primärstrahls; 4) Unsymmetrische Intensitätsverteilung innerhalb des Strahls.

Den beiden letztgenannten Punkten ist besondere Aufmerksamkeit zu schenken, da ihr Einfluß wegen der Abhängigkeit von den Strahleigenschaften zeitlich variieren kann. Wie im vorangehenden Abschnitt B 4 bereits erwähnt wurde, befindet sich am Eingang des Mott-Streuers ein System aus drei Strahlblenden mit Lochdurchmessern von jeweils 3 mm. Aus dem Abstand dieser Blenden untereinander und zur Streufolie läßt sich der Maximalwert des Asymmetrie-Beitrags, der durch

die Lage und Richtung des Primärstrahls bedingt ist, bestimmen. Nach Eckstein (46) erhält man diese Asymmetrie I_1/I_r zwischen dem rechten und dem linken Detektor gemäß

$$\frac{I_1}{I_r} = 1 + 4 \left(\epsilon + \frac{y}{h} \right) \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta} \quad (10)$$

(ϵ = Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und der Normalenrichtung der Streufolie; y = Abstand des Strahl- Auftreffpunktes auf der Folie von der Apparatur- Achse; h = Abstand zwischen Detektor und Folie; θ = "Mott-Streuwinkel").

Unter den vorliegenden Bedingungen liegt I_1/I_r etwa zwischen 0,88 und 1,12. Die Verwendung kleiner Blendendurchmesser bringt demnach den weiteren Vorteil (s. Abschn. III, B 4) einer engen Begrenzung der apparativen Asymmetrie mit sich. Dadurch sind die Messungen mit der Aluminium- Folie, die wegen des geringen Streuquerschnitts von Al sehr zeitraubend sind, weniger oft erforderlich. Die Intensität des Elektronenstrahls wird durch die verwendeten Blenden kaum eingeschränkt, da sich die Strahldivergenz bei der Beschleunigung auf 100 keV nach dem Helmholtz'schen Gesetz um den Faktor 10 bis 100 reduziert. Eine Nachjustierung des Primärstrahls auf die genaue axiale Lage erwies sich jeweils nur dann als notwendig, wenn sich die elektronenoptischen Verhältnisse durch Variation der Linsenspannungen oder des Magnetfeldes zur Probenmagnetisierung geändert hatten. Der Einfluß des Erdmagnetfeldes ist durch die räumliche Ausrichtung der Analysatorachse in Nord- Süd- Richtung weitgehend beseitigt. Eine Kompensation der Vertikalkomponente stellte sich als überflüssig heraus. Zur leichteren Justierung des Primärstrahls mit dem elektrostatischen Quadrupol-Ablenksystem in der Photoemissionskammer dient ein weiterer Detektor in Vorwärts- Streurichtung auf der elektronenoptischen Achse (vgl. Abb. 6, S. 19). Die Zählraten dieses Detektors sind trotz des wesentlich kleineren erfaßten Raumwinkels um den Faktor 10^3 bis 10^4 größer als die bei $\theta = 120^\circ$ gemessenen. Diese Zahlen verdeutlichen den sehr geringen Wirkungsgrad, der für alle Meßanordnungen zur Elektronen- Polarisation typisch ist, im Gegensatz zu denjenigen für sichtbares Licht. Die verwendeten Au- Streu- Folien wurden entweder durch kontrolliertes Aufdampfen von Gold auf eine über einen Trägerring gespannte, dünne Kunststoff- Folie (Formvar) selbst hergestellt, oder es wurden Hammerschlagfolien freitragend auf einem gleichen Trägerring von 14 mm Innendurchmesser befestigt. Da die Sherman- Funktion in der Umgebung von $\theta = 120^\circ$ einen flachen Verlauf hat, kann man zur Steigerung der

Analysator- Effizienz relativ große, von den Rückwärts- Zählern erfaßte Raumwinkel zulassen. Sie ergeben sich aus dem Abstand zum Target von 28 mm und der empfindlichen Detektorfläche von 100 mm^2 zu $\Omega_{120^\circ} = 128 \text{ msrad}$ (Öffnungswinkel des Kegels: $\alpha_{120^\circ} = 23^\circ$). Für die Vorwärtszähler ergeben sich bei gleichem Abstand, jedoch bei nur 25 mm^2 Detektorfläche, die entsprechenden Winkel zu $\Omega_{45^\circ} = 32 \text{ msrad}$ und $\alpha_{45^\circ} = 11,5^\circ$.

Neben den bisher beschriebenen apparativen Asymmetrien können noch zwei weitere Fehlerquellen auftreten, die im allgemeinen zur Verringerung einer echten, d.h. durch Elektronenpolarisation verursachten, Asymmetrie führen und daher auch zu den apparativ bedingten Asymmetrien zu zählen sind: Durch Reflexion von gestreuten und ungestreuten Elektronen an den Wänden des Rezipienten können Untergrundzählraten hervorgerufen werden, die die Polarisations-Meßwerte gegenüber den wahren Werten herabsetzen. Um dieses zu verhindern, wurde jeder der Detektoren mit einer Blende versehen, die sich jeweils etwa auf der Mitte des Abstands zwischen Folie und Detektor befindet. Außerdem wird mit einem Vielkanal- Analysator das Energiespektrum der Zählimpulse aufgenommen, und die energieärmeren Impulse von reflektierten Elektronen werden mit Hilfe von Diskriminatoren ausgefiltert (vgl. Abschn. III,A).

Da bei der Berechnung der Polarisation aus der Zählraten-Asymmetrie der Wert für die Sherman- Funktion wesentlich eingeht (vgl. Abschn. III,F), muß dieser möglichst genau bekannt sein. Der theoretisch ermittelte Wert ist dazu weniger gut geeignet, da er für die Einzelstreuung an einem Atom berechnet wurde, während andererseits aber jedes reale Target so viele Atome enthält, daß auch Mehrfach-Streuprozesse vorkommen. Solche Elektronen, die durch aufeinanderfolgende Streuung um kleinere Winkel in die Nachweissysteme gelangen, vermindern in der Regel die Intensitäts- Asymmetrie. Da die theoretische Behandlung dieses Problems mit zu großen Unsicherheiten behaftet ist, mißt man am besten die Streuasymmetrie eines gleichbleibenden Strahls mit mehreren Folien unterschiedlicher Dicke. Aus der erhaltenen Meßreihe läßt sich der Wert für die Streuasymmetrie bei der Foliendicke 0 extrapolieren und so der Anschluß an den theoretischen Wert für Einzelstreuung herstellen. Der für diese Messung benötigte polarisierte Elektronenstrahl wurde mit Hilfe einer Feldemissions- Quelle erzeugt. Eine W-Spitze mit aufgedampfter EuS-Schicht emittiert unter bestimmten Bedingungen Elektronen mit Polarisationsgraden bis zu 95 %. Einige Ergebnisse, die in diesem

Zusammenhang über den W-EuS- Feldemitter gewonnen wurden, sind im Anhang (Kap. VII) dargestellt.

D. Lichtquelle und Lichtoptik

Für die Photoemission an Ni und Co in der Nähe der Photoschwelle benötigt man eine Lichtquelle, deren kontinuierliches Spektrum im Bereich der Austrittsarbeit für diese Materialien und noch etwas darüber hinaus möglichst hohe Photonenintensitäten aufweist. Die Austrittsarbeiten für die zu untersuchenden Proben und ihre Kristallrichtungen liegen zwischen etwa 4,7 eV und 5,2 eV. Das verwertbare Spektrum einer Xe-Hochdrucklampe wird auf der kurzwelligen Seite durch die abnehmende Transmission des Quarzkolbens begrenzt und reicht bis zu einer Wellenlänge von etwa 1850 Å, entsprechend 6,7 eV Photonenenergie. Es wurde eine 500 W- Lampe (Hanovia 959-C-1) ausgewählt, die neben hoher Lichtintensität und sehr stabiler Lage des Lichtbogens die höchste Leuchtdichte ("brightness") der käuflichen Lampen aufweist. Die "brightness" gibt dabei an, wieviele Photonen dN_p innerhalb eines Energieintervalls dE_p pro Zeiteinheit und pro Einheit der Leuchtfläche in einen Raumwinkel $d\Omega$ emittiert werden. Eine Kondensorlinse aus Quarz bildet den Lichtbogen auf den Eintrittsspalt des Gittermonochromators (Typ Jobin Yvon H 20) ab. Durch zwei Planspiegel und ein in Reflexion arbeitendes optisches Toroid- Gitter wird das Strahlenbündel der eingestellten Wellenlänge auf den Austrittsspalt fokussiert. Die Breite des Ein- und Austrittsspalt war bei den meisten Messungen so eingestellt, daß sich eine Wellenlängen-Bandbreite $\Delta\lambda$ von etwa 15 - 25 Å ergab ($\Delta E \approx 50 \text{ meV}$, s.u.), je nach Messung unterschiedlich. Eine weitere Quarzlinse bildet den Austrittsspalt auf die Probenoberfläche ab. Dabei gelangt der Lichtstrahl zunächst durch ein Saphir- Fenster in das Innere der Apparatur und weiter durch ein 6 mm großes Loch im Kugelkondensator bis hin zur Probe. Damit dieses Loch die Lichtintensität nicht zu sehr einschränkt, wurde der Raumwinkel des Strahlenbündels durch Vergrößerung des Abstandes zwischen Lampe und Monochromator möglichst klein gehalten. Zur genauen räumlichen Justierung wurde am Ort der Probe ein Fluoreszenz- Schirm angebracht und davor auf der elektronenoptischen Achse eine 2 mm große Lochblende. Der Leuchtfleck, den das UV-Licht auf diesem Schirm erzeugt, wurde auf maximale Helligkeit eingestellt. Die Größe des Lichtflecks auf der Probe beträgt etwa 3 mm². Wegen des wellenlängen- abhängigen Brechungsindex

ändern sich die Brennweiten der verwendeten Linsen bei der Variation der Wellenlänge. Eine Korrektur dieser Abweichungen wurde lediglich durch Verschiebung des Kondensors durchgeführt, da der Lichtfleck auf der Probe ohnehin größer ist als die emittierende Fläche, die von der Elektronenoptik erfaßt wird. Der Winkel, den die Lichtstrahlen mit der Oberflächennormalen einschließen, liegt zwischen 0° und $1,3^\circ$. Das Licht ist daher praktisch zu 100 % s-polarisiert.

Im Vergleich zu einer Synchrotron- Strahlungsquelle, mit der erstmalig einige Messungen an Ni und Co durchgeführt wurden (s. Abschn. IV,D), ist die Xe-Lampe hinsichtlich der Intensität in dem verwendeten Energiebereich durchaus konkurrenzfähig. Dagegen hat die Synchrotron-Strahlung eine höhere "brightness", da die Photonen innerhalb eines Kegels mit sehr kleinem Öffnungswinkel emittiert werden (z.B. 1 mrad beim Speicherring ACO in Orsay, Frankreich). Dies führt zu einem wesentlich kleineren Lichtfleck auf der Probe (ca. $0,7 \text{ mm}^2$) und damit auch zu geringeren Intensitätsverlusten bei der Extraktion aus dem Magnetfeld.

E. Proben und Präparationskammer

1. Vorbehandlung der Proben

Die Proben bestehen aus zylinderförmigen Einkristallen (vgl. Abschn. III,B 2) mit verschiedenen Kristallorientierungen. Bei den drei Nickel-Proben liegen die Zylinderachsen jeweils parallel zu den Kristallrichtungen $[001]$, $[110]$ und $[111]$, bei den Kobalt-Proben parallel zur $[0001]$ - und $[10\bar{1}0]$ - Richtung (wegen der hexagonalen Gitterstruktur von Co werden die kristallographischen Richtungen üblicherweise durch vier Indizes charakterisiert, vgl. Abschn V,B 2). Zur ersten Stufe der Proben- Präparation gehört das Durchschneiden des Rohzylinders, das am genauesten und schonendsten durch das Verfahren der Funkenerosion geschieht. Damit die entstehende Schnittfläche möglichst genau senkrecht zur jeweiligen Kristallachse steht, ist eine exakte Orientierung des Kristalls vor dem Zerteilen notwendig. Er wird dazu in ein Goniometer eingespannt und mit Hilfe von Laue- Diagrammen bis auf $\pm 0,5^\circ$ auf die Schnittebene ausgerichtet (47). Im nächsten Schritt wird die so entstandene Stirnfläche des Zylinders mechanisch und gegebenenfalls auch elektrochemisch poliert und danach die Probe mit verschiedenen Lösungsmitteln gereinigt. Die weiteren Präparationsschritte müssen im Vakuum durchgeführt werden, und so befestigt man nun die Probe

innerhalb der Schleusenkammer an dem Manipulatorstab (vgl. Abschn. III,A). Für die Photoemissions- Messungen muß die Probenoberfläche atomar sauber sein. Deswegen ist noch eine langwierige Reinigungs- Prozedur (bis zu mehreren Tagen Dauer) notwendig, in deren Verlauf die Probenoberfläche abwechselnd mit mittelschweren Edelgas- Ionen (meistens Argon) bestrahlt und dann durch Elektronenbeschuß auf zum Teil recht hohe Temperaturen (s.u.) aufgeheizt wird. Die Ar^+ -Ionen, die je nach fortschreitendem Reinigungsgrad mit Energien von etwa 1500 eV bis hinab zu mehreren hundert eV auf die Probe geschickt werden, dienen dazu, die obersten Atomlagen des Materials und damit auch die Oberflächen- Verunreinigungen abzutragen. Leider wird dadurch das Kristallgitter an der Oberfläche gestört, und es ist daher notwendig, die Probe in einem zweiten Verfahrensschritt zu erhitzen, damit die regelmäßige Gitterstruktur durch Einschwingen der Atome in die richtigen Gitterplätze infolge ihrer thermischen Bewegung wiederhergestellt wird. Zu diesem Zweck wird ein Strahl von Elektronen der Energie $E_{\text{kin}} \approx 1,2 \text{ keV}$ seitlich auf die Probe gerichtet, deren Halterung aus naheliegenden Gründen in ihrem hinteren Teil (von der Probe aus betrachtet) aus schlecht wärmeleitendem Titan hergestellt wurde. Dabei ist es im Falle des Kobalts wichtig, die Probentemperatur zu kontrollieren, da das Material bei einer Aufheizung bis über 450°C eine Phasenumwandlung vollzieht (48), die zwar bei anschließender Abkühlung bis zu einem gewissen Grad reversibel zu sein scheint, die jedoch bei mehrfacher Wiederholung zu einer dauerhaften starken Beeinträchtigung der Probe oder zumindest ihrer Oberfläche führt. Sie bekommt dann eine körnige oder fast schon raue Struktur, die auf die Ausbildung von polykristallinen Bereichen zurückzuführen ist. Wir haben deshalb zur Temperatur- Kontrolle ein Thermoelement an einem Kupferring befestigt, der mittels einer Schiebedurchführung bis zur Apparaturachse vorgeschoben werden kann (vgl. Abb.6, S.19). Anschließend wird die Probe so weit durch die Ringöffnung geführt, bis der Kupferring einen guten thermischen Kontakt zu jenem Teil der Probenhalterung (aus Molybdän) hat, der praktisch die gleiche Temperatur erreicht wie die Probe selbst. Da beim Nickel eine solche Phasenumwandlung nicht auftritt, ist hier eine genaue Messung der Probentemperatur entbehrlich, und es wurde daher jeweils bis zur schwachen Rotglut erhitzt, das entspricht einer Maximaltemperatur von etwa $600-800^\circ \text{C}$.

Bei diesem Heizprozeß diffundieren Fremdatome (hauptsächlich Kohlenstoff und Schwefel), die trotz des hohen Reinheitsgrades von

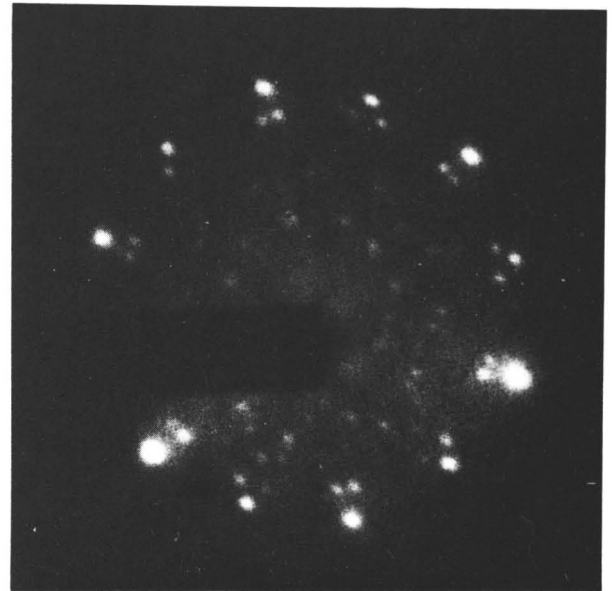
99,999 % noch im Probenmaterial enthalten sind, an die Oberfläche. Der beschriebene Reinigungszyklus aus "Sputtern" mit Ar^+ -Ionen und Heizen muß daher viele Male hintereinander durchgeführt werden, bis die Oberflächenverunreinigung weniger als 1/100 Monolage beträgt, wie es für die Messungen erforderlich ist. Es ist klar, daß unter diesen Umständen höchste Anforderungen an das Vakuum gestellt werden müssen: Das Restgasspektrum (aufgenommen mit einem Quadrupol-Massenspektrometer) besteht praktisch nur noch aus Wasserstoff mit einem Partialdruck bis hinunter zu 10^{-8} Pa. Es gibt auch die Möglichkeit, durch gezielten Einlaß von Sauerstoff während oder kurz nach der Heizperiode der Probe die Oberflächen-Verunreinigungen zu oxidieren und auf diese Weise in leichter zu entfernende Stoffe (wie z.B. SO und CO) zu verwandeln.

2. Untersuchung der Oberflächen-Beschaffenheit

Zur Überprüfung des jeweiligen Zustands der Proben-Oberfläche während und nach dem Reinigungsprozeß stehen zwei Verfahren zur Verfügung: Messung des Auger-Elektronen-Spektrums der Oberflächenschicht (AES) und Aufnahme des Beugungsbildes langsamer Elektronen an den Oberflächenatomen (LEED). Diese beiden Verfahren, die sich mit derselben experimentellen Anordnung durchführen lassen, sind inzwischen als standardmäßige Untersuchungsmethoden zu betrachten und sollen daher an dieser Stelle nur in groben Zügen skizziert werden: Die zu untersuchende Oberfläche wird mit Elektronen von einstellbarer Energie aus einer Glühemissions-Kathode bestrahlt. Zur Aufnahme des Auger-Spektrums beträgt ihre Energie im allg. etwa 2,5 keV, dagegen bei den LEED-Untersuchungen weniger als hundert eV. Im ersten Fall mißt man das Spektrum der aus Auger-Prozessen zurückgestreuten Elektronen und erhält daraus Informationen über die Art der an der Oberfläche befindlichen Atome; im zweiten Fall gibt die Winkelverteilung der gebeugten Elektronen Auskunft über die geometrische Oberflächenstruktur. Der Elektronennachweis erfolgt durch einen gewölbten Leuchtschirm mit einem davor befindlichen System aus vier Netzgittern. An 2 der Gitter wird die variable Gegenspannung angelegt, die im Auger-Betrieb zum Durchfahren des Elektronenenergie-Spektrums und im LEED-Betrieb zum Ausfiltern des beträchtlichen Anteils der inelastisch gestreuten Elektronen benötigt wird. Der Leuchtschirm dient dabei als Elektronen-Auffänger über einen großen Raumwinkelbereich bzw. zum Sichtbarmachen der LEED-Reflexe, die dann über ein Fenster in der Apparatur von außen betrachtet und fotografiert werden können. In Abb. 14 a ist ein solches LEED-Bild

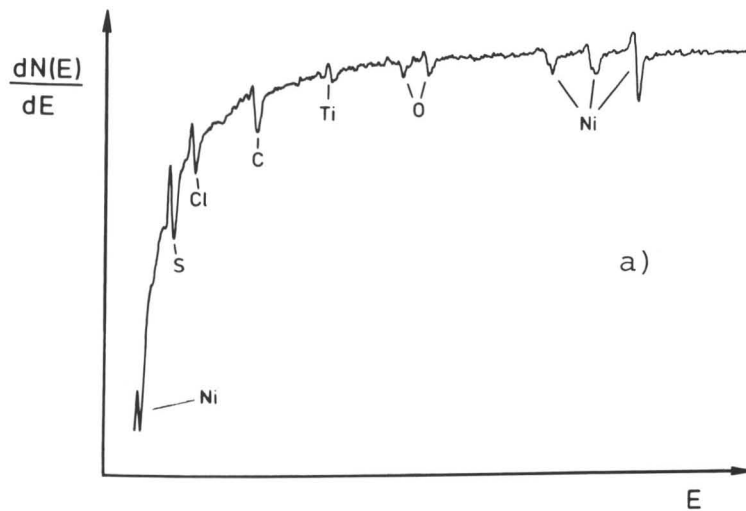


a)

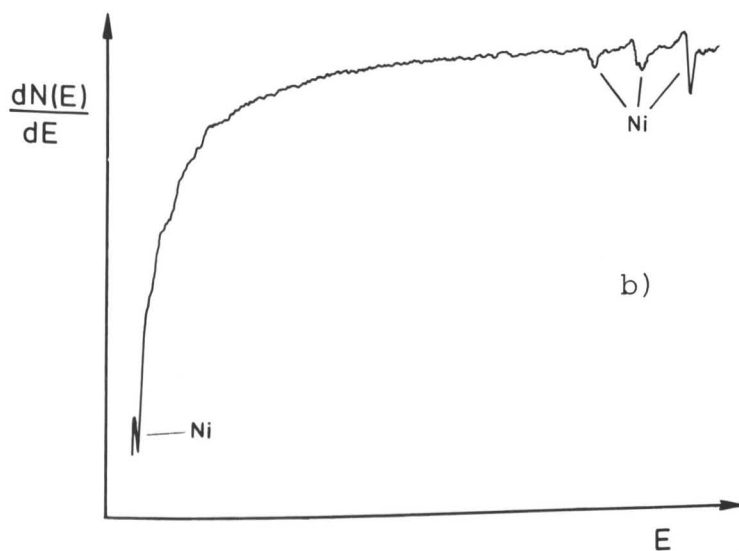


b)

Abb. 14: Fotografien von LEED-Reflexen an einer Ni(111)-Fläche
a) Saubere Oberfläche, b) Dieselbe Oberfläche wie in a), jedoch mit S-Überstruktur nach einigen Minuten kräftigem Heizen (die Grundreflexe aus (a) sind noch vorhanden)



a)



b)

Abb. 15:

Auger-Elektronen-Spektren,
aufgenommen an einer
Ni(001)-Fläche

a) Starke Kontamination
durch Fremdatome
($\geq 0,1$ Monolage),

b) Entfernung der Verunrei-
nigungen ($\leq 0,01$ Monolage)
nach längerem Reinigungs-
prozeß

einer sauberen und glatten Ni(111)- Oberfläche dargestellt. Nach einigen Minuten kräftigem Heizen zeigte sich an derselben Probe eine deutliche Überstruktur (Abb. 14 b), die höchstwahrscheinlich auf eine Submonolage von herausdiffundierten S-Atomen zurückzuführen ist.

Abb. 15 zeigt zwei Auger- Spektren, von denen eines vor und das andere nach der Reinigung einer Ni(001)- Probe aufgenommen wurde. Es handelt sich dabei um die auf meßtechnischem Wege direkt ermittelte 2-fach differenzierte Gegenspannungskurve. Dieser Kunstgriff ist erforderlich, damit auch sehr kleine Signale in dem bis zu 10^4 -mal höheren Störuntergrund erkennbar werden. Quantitative Abschätzungen über die Größe der Oberflächen- Verunreinigung anhand dieser Spektren ergab für den Fall a) eine Bedeckung von $\theta \approx 0,1$ bis $0,25$ ($\theta = 1$ entspricht 1 Monolage) und für b) $\theta \lesssim 0,01$.

F. Auswerteverfahren

1. Fehlerquellen

Bei der Messung der ESP kann man grob zwischen zwei verschiedenen Arten von Fehlerquellen unterscheiden: a) Änderung des Spins auf dem Wege vom "Ursprungsort" im Festkörper bis zum Nachweissystem (hier: Eintrittsblende des Mott- Analysators), und b) Fehler bei der Messung des Spins. Genauer müßte man hier anstelle des Ausdrucks "Spin" die Formulierung "Spin- Mittelwert einer aus sehr vielen Elektronen bestehenden gleichartig präparierten (im zeitlichen Sinn) quantenmechanischen Gesamtheit" verwenden. Aus dieser Mittelung über viele Spins ergibt sich eine weitere mögliche Fehlerquelle: Es ist unvermeidbar, daß nur ein sehr kleiner Teil aller in einem Photoabsorptionsprozeß angeregten Elektronen in das Nachweissystem gelangt. Im Falle der energie- oder winkelselektiven Meßverfahren wird dies sogar absichtlich herbeigeführt. Jedoch treten auch innerhalb der Menge der "erwünschten" Elektronen erhebliche Verlustfaktoren auf (bei den hier behandelten Messungen in der Größenordnung von 10- 100). Falls nun die Größe dieser Verluste spinabhängig ist, so ergibt sich dadurch für den Polarisationswert der Gesamtheit eine Änderung, ohne daß sich einer der beteiligten Elektronenspins gedreht hat.

2. Polarisations-Änderung während des Elektronen-Transports

Eine mögliche Beeinflussung der ESP ist bereits innerhalb des Festkörpers gegeben. Ergebnisse von Untersuchungen an Ni mit höheren Photonenenergien (s. Ref.40 und Abschn.IV,D) deuten darauf hin, daß die Elektron- Elektron- Streuung gegenüber der Elektron- Magnon- Streuung die dominierende Rolle spielt (die Streuung an Phononen und die Erzeugung von Plasmonen können hier allein aus energetischen Gründen außer acht gelassen werden), und daß die mittlere freie Weglänge für Singulett- Streuung kleiner ist als für Triplett- Streuung. Da man von einer vollständigen parallelen Magnetisierung in den Weiß'schen Bereichen der Probe ausgehen kann (III,B 2), ergibt sich hierdurch eine Zunahme der gemessenen Polarisationswerte. Nur für Energien in der Nähe der Photoschwelle ist eine nennenswerte Auswirkung dieser Effekte nicht zu erwarten.

Auch beim Überschreiten der Potentialstufe an der Oberfläche sollte aus theoretischer Sicht keine Spin- Änderung auftreten. Voraussetzung hierfür ist jedoch eine atomar saubere und glatte Oberfläche, da mit zunehmender Kontamination der Betrag der gemessenen Polarisation abnimmt, wie sich bei den Messungen herausgestellt hat. Die Effektivität des Elektronen- Nachweises konnte gegenüber früheren Experimenten dank einiger Verbesserungen im elektronenoptischen System um mindestens eine Größenordnung gesteigert werden. Außerdem sind die verwendeten Photonenintensitäten etwa 10 mal so groß. Damit kommt man für eine Meßreihe in dem besonders interessanten und auch empfindlichen (wegen des steilen Kurvenverlaufs) Energiebereich bis etwa 1 eV oberhalb der Schwelle mit ca. 60-90 Min. Meßzeit aus. Demgegenüber dauert bei den herrschenden Vakuumbedingungen von fast 10^{-8} Pa die Bedeckung der Probenoberfläche mit einer Monolage Fremdatome nach der Faustregel: 1 Monolage/sec bei 10^{-4} Pa und Haftkoeffizient 1, länger als 3 Stunden.

Die weitaus größte Änderung der Spins auf der Strecke zwischen Probe und Mott- Detektor erfolgt im inhomogenen Randbereich des angelegten Magnetfeldes und im Streufeld der Probe. Dies ergab eine Messung des Restmagnetfeldes (dessen hauptsächlichster Teil aus dem Erdmagnetfeld besteht) entlang der Elektronen- Flugbahn. Über die Abschirmung bzw. Kompensation dieses Restfeldes wurde bereits in den Abschnitten III,B bzw. III,C berichtet. Weiterhin ist zu beachten, daß im Ruh- System der Elektronen Magnetfelder auftreten, die im Labor- System nicht vorhanden sind. Sie ergeben sich aus der Relativbewegung der Elektronen mit der Geschwindigkeit $\vec{v}$ zu den elektrischen Feldern $\vec{E}$ der elektronenoptischen Elemente und sind proportional zu $\vec{E} \times \vec{v}$. Eine

genauere Betrachtung zeigt, daß sich allenfalls innerhalb der 90° -Umlenkeinheit eine nennenswerte Beeinflussung der Spinrichtung ereignen könnte. Bei typischen experimentellen Bedingungen wird jedoch auch hier ein zu vernachlässigender Drehwinkel von ca. $0,2^\circ$ nicht überschritten. Die Änderung des Polarisationsvektors beim Austritt aus dem Feld des Elektromagneten wurde in Abschn. III,B 3 diskutiert.

Als weitere denkbare Fehlerquelle ist die Spin-Änderung der Elektronen durch Streuung an Restgasmolekülen oder Apparaturteilen zu untersuchen. Die erste Möglichkeit kann wegen der mittleren freien Weglänge von über 10^6 m bei den herrschenden Druckbedingungen vernachlässigt werden. Die Streuung an Apparaturteilen ist schwierig zu messen, jedoch kann man es im Hinblick auf die Elektronenbahn-Berechnungen einerseits und die Anordnung der verschiedenen Blendensysteme in der Apparatur andererseits als sehr unwahrscheinlich ansehen, daß gestreute Elektronen in die Zählkanäle gelangen. Die Potentiale der Linsenelemente sind so gewählt, daß nur die von der Probe kommenden Elektronen transmittiert werden. Ferner gibt es keinen Grund zu der Annahme, daß auf dem Weg zum Nachweissystem die Elektronenverluste für bestimmte Spinrichtungen größer sind als für andere.

3. Fehler durch apparative Asymmetrien und Berechnung der Polarisation

In diesem und in dem folgenden Abschnitt 4 sollen die Fehlerquellen bei der Messung des Spins untersucht und in dem Zusammenhang auch das Auswerteverfahren näher beschrieben werden. Man kann bei der Spin-Messung zwischen drei Arten von Fehlern unterscheiden, nämlich zwischen dem Fehler in der Bestimmung der apparativen Asymmetrie, dem statistischen Fehler der Zählergebnisse und dem Fehler in der Bestimmung der Sherman-Funktion. Da die Haupt-Ursachen für die apparative Asymmetrie und einige der möglichen Maßnahmen zu ihrer Einschränkung bereits in Abschnitt III,C behandelt wurden, sei hier nur beschrieben, auf welche Weise die verbleibende Asymmetrie gemessen wird und als Korrektur in die Berechnung der Polarisation eingeht. Dazu soll die Polarisationsformel zunächst ohne diese Korrektur hergeleitet werden. Wir wollen dabei von den differentiellen Wirkungsquerschnitten $\sigma_1(\theta)$ und $\sigma_r(\theta)$ für nach links bzw. nach rechts gestreute Elektronen mit senkrecht nach oben gerichteter Polarisation $P_\perp$ ausgehen (verläuft die Polarisation $\vec{P}$ nicht genau in dieser Richtung, so ist mit $P_\perp$ die senkrechte

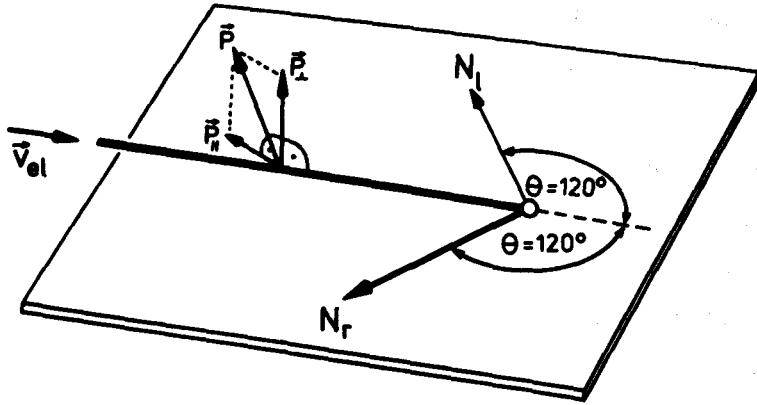


Abb. 16:
Streu-Asymmetrie eines Elektronenstrahls der Polarisation $\vec{P}$ an Au-Atomen ($S < 0$). In dem hier gezeichneten Fall ist die Anzahl N_r der nach rechts gestreuten Elektronen größer als die Anzahl N_l der nach links gestreuten

Komponente gemeint, da nur diese Komponente zur Streu-Asymmetrie beiträgt; s. Abb. 16):

$$\sigma_l(\theta) = I(\theta) \{1 + S(\theta) P_\perp\} \quad (11a)$$

$$\sigma_r(\theta) = I(\theta) \{1 - S(\theta) P_\perp\} \quad (11b)$$

($I(\theta)$:= diff. Wirkungsquerschnitt für unpolarisierten Strahl; $S(\theta)$:= Sherman-Funktion für vorgegebene Elektronenenergie und Targetmaterial)

Die allgemeine Formel für $\sigma(\theta, \phi)$, in der (11a) und (11b) als Spezialfälle enthalten sind, wird auf S. 40-43 von Ref. 38 hergeleitet. Dividiert man nun (11a) durch (11b) und berücksichtigt, daß $N_l \propto \sigma_l$ und $N_r \propto \sigma_r$ (N_l , N_r := Anzahl der Zählpulse im linken bzw. rechten Detektor), so bekommt man:

$$\frac{\sigma_l}{\sigma_r} = \frac{N_l}{N_r} = \frac{1 + S P_\perp}{1 - S P_\perp}$$

und nach $P_\perp$ aufgelöst:

$$P_\perp = \frac{1}{S} \frac{N_l - N_r}{N_l + N_r} = \frac{1}{S} \frac{N_l/N_r - 1}{N_l/N_r + 1} \quad (12)$$

Der theoretische Zahlenwert (bei Foliendicke 0) von S für Au mit $Z=79$, $E=100$ keV und $\theta=120^\circ$ ist $S_0 = -0,39$ nach Ref. 49. Die am häufigsten verwendete Folie ist etwa $1100 \text{ \AA}$ dick, und in diesem Fall beträgt $S_{\text{eff}} = -0,25$.

Der Fehler durch die apparative Asymmetrie läßt sich experimentell auf verschiedene Weise korrigieren: 1) Nach jeder Asymmetrie-Messung mit polarisiertem Strahl wird eine Messung mit unpolarisiertem Strahl von sonst aber gleichen Eigenschaften durchgeführt. Die Erzeugung eines solchen gleichen, unpolarisierten Strahls ist mit angemessenem Aufwand

aber nicht möglich, denn dazu müßte jeweils die magnetische Probe gegen eine unmagnetische (z.B. aus Kupfer) ausgetauscht werden. 2) Die Polarisation des Strahls wird in einer zweiten Messung umgekehrt, ohne daß sich der Strahlverlauf ändert. Dieses ist bei solchen Photoemissions- Experimenten, bei denen die Spinpolarisation nicht durch ein äußeres Magnetfeld, sondern durch zirkular- polarisierte Photonen hervorgerufen wird, einfach durch Umkehrung der Lichtpolarisation möglich. Dagegen ändern sich in unserem Fall bei der Polarisationsumkehr durch Umpolen des Magnetfeldes und der Probenmagnetisierung die elektronenoptischen Verhältnisse, da sich die Magnetfeld- Achse und die Achse der Elektronenoptik nicht mit genügender Präzision zur Deckung bringen lassen. Aus diesem Grunde ist die Bestimmung der apparativen Asymmetrie nach dieser Methode nicht möglich. 3) Man streut den gleichen polarisierten Elektronenstrahl zunächst an der Gold- Folie (Ergebnis: N_1/N_r) und danach an einer Aluminium- Folie für die $S \approx 0$ gilt (Ergebnis: A_1/A_r). Der Quotient der beiden Asymmetrien muß noch korrigiert werden, da sich die Impulshöhen- Verteilungen der verwendeten Oberflächen- Sperrschicht- Detektoren für die Streuung an den beiden verschiedenen Folien unterscheiden (50). Dazu wird für eine Testmessung der ferromagnetische Photoemitter durch eine Kupfer- Probe ersetzt und auf diese Weise die Asymmetrie C_1/C_r für unpolarisierte Elektronen gemessen. Aus den genannten Meßdaten ergibt sich die Polarisation zu:

$$P_{\perp} = \frac{1}{S} \frac{\frac{N_1}{N_r} / \frac{A_1}{A_r} / \frac{C_1}{C_r} - 1}{\frac{N_1}{N_r} / \frac{A_1}{A_r} / \frac{C_1}{C_r} + 1} \quad (13)$$

Die entsprechenden Werte des zweiten Detektor- Paares in der vertikalen Ebene werden ebenso gemessen und auf die gleiche Weise ausgewertet. Der Einfachheit halber soll jedoch auch im folgenden nur das horizontale Paar betrachtet werden. Die Bestimmung der Gesamtpolarisation aus den beiden Einzelkomponenten wird in Abschn. IV,A beschrieben.

A_1/A_r muß im allgemeinen nach jeder Messung von N_1/N_r bestimmt werden, besonders dann, wenn sich einer der elektronenoptischen Parameter wie Linsenspannung, Magnetfeld oder auch die Anfangsenergie der Photoelektronen (durch Variation der Photonenenergie) merklich ändert. Wenn jedoch -- wie im vorliegenden Fall -- die verwendeten Photonenenergien nur innerhalb eines Bereiches von 2 eV variieren, so beeinflußt das die apparative Asymmetrie praktisch nicht, da die

Elektronenenergien innerhalb des Linsensystems in der Größenordnung von 1000 eV liegen. Ebenso bewirkt die leicht unterschiedliche Lage und Form des Lichtfleckes auf der Probe infolge des wellenlängen- abhängigen Brechungsindex der Quarzlinse keine nennenswerte Änderung der apparativen Asymmetrie, da der Lichtfleck deutlich größer ist als die emittierende Fläche, deren Elektronen nach der Extraktion aus dem Magnetfeld von den elektronenoptischen Elementen erfaßt werden (42). Aus diesen Gründen wird bei den Messungen an der Photoschwelle die Aluminium- Asymmetrie bei jedem Meßdurchlauf nur etwa 2- bis 3-mal gemessen und der mit der Summe der Zählimpulse $N_1 + N_r$ gewichtete Mittelwert für die Berechnung von P benutzt. Durch die so verkürzte Meßzeit verringert sich der Fehler, der infolge zunehmender Kontamination der Probenoberfläche während der Messung auftritt. Die Streu- Asymmetrie unter $\theta=45^\circ$ wird bei den vorliegenden Messungen nicht betrachtet.

4. Statistischer Fehler der Zählergebnisse

Um ein Maß für die Genauigkeit der gefundenen Polarisationswerte zu erhalten, ist der statistische Fehler der Zählergebnisse zu berücksichtigen. Er ist nur von der Anzahl der gemessenen Impulse abhängig, und es gibt keine Möglichkeit zur Behebung oder Verringerung dieses Fehlers außer der Vergrößerung jener Anzahl. Unter der Annahme, daß die Zählraten klein sind im Verhältnis zur Sättigungs- Zählrate der Detektoren, und daß ferner die Zählzeit pro Meßpunkt Δt_m sehr groß ist gegen die Totzeit Δt_o (= Verarbeitungsdauer für einen Zählimpuls) der Detektoren, entsprechen die Zählergebnisse recht genau einer Poisson- Verteilung. Da man wegen des endlichen Meßzeit- Intervalls den genauen Mittelwert $\bar{n}$ und das genaue Schwankungsmaß $\sigma = \sqrt{\bar{n}}$ der zu $\Delta t_m / \Delta t_o = N \gg 1$ gehörenden Poissonverteilung nicht kennt (sonst wäre eine Messung überflüssig), setzt man näherungsweise den gemessenen Wert $\tilde{n}$ für $\bar{n}$ ein und erhält $\tilde{\sigma} = \sqrt{\tilde{n}}$. Durch Anwendung des Gauß'schen Fehlerfortpflanzungs- Gesetzes ergibt sich schließlich das relative Schwankungsmaß $\Delta P/P$ für die Spinpolarisations- Werte zu

$$\frac{\Delta P}{P} = \frac{2}{A - \frac{1}{A}} \left(\frac{1}{N_1} + \frac{1}{N_r} + \frac{1}{A_1} + \frac{1}{A_r} \right)^{1/2} \quad \text{mit} \quad A = \frac{N_1}{N_r} / \frac{A_1}{A_r} / \frac{C_1}{C_r} \quad (14)$$

In dieser Beziehung ist nur der statistische Fehler von N_1 , N_r , A_1 und A_r berücksichtigt worden, während der Fehler für den Sherman- Funktionswert und die Korrekturgröße C_1/C_r vernachlässigt wurde. Wenn

man zusätzlich auch noch den Fehler von A_1/A_r ignoriert, so vereinfacht sich (14) zu:

$$\frac{\Delta P}{P} = \frac{2 A}{A - 1} \{ N_1 (A + 1) \}^{-1/2} \quad \text{mit } A \text{ wie in (14)} \quad (15)$$

Mit der Beziehung (15) erhält man bei Zählergebnissen von einigen tausend pro Meßzeit- Intervall etwa um 10-15 % kleinere Werte als mit Glg. (14).

Die im nächsten Abschnitt gezeigten Polarisationskurven sind durch wiederholte Messungen mehrfach bestätigt worden. Aus den Ergebnissen der einzelnen Meßreihen, die weitgehend innerhalb der Fehlergrenzen übereinstimmen, werden durch Addition der Zählimpulse jedes Kanals die dargestellten Endwerte berechnet.

Die Zählraten der Rückwärts- Detektoren bei ausgeschaltetem Lichtstrahl, die sogenannte Nullrate, liegt bei etwa 1 min^{-1} und kann daher selbst bei den Messungen an der Photoschwelle vernachlässigt werden, da auch dort die Zählrate (infolge der optischen Bandbreite) noch in der Nähe von 1 sec^{-1} liegt.

5. Energiebreite des Photonenstroms

Neben dem Fehler in den Polarisationsgraden ist auch die Ungenauigkeit bei der Photonenenergie E anzugeben, die durch die Dispersion des Monochromators und die dort eingestellten Breiten von Eintritts- und Austrittsspalt gegeben ist. Hält man die Spaltbreiten konstant, so ändert sich beim Durchfahren der Wellenlängen- Einstellung auch nicht die Gestalt des Monochromator- Durchlaßprofils (=Quotient aus einfallender zu ausfallender Lichtintensität als Funktion von λ). Folglich ist auch die Wellenlängen- Bandbreite $\Delta\lambda$, gegeben durch den FWHM- Wert dieses Profils, unabhängig vom eingestellten λ . Hierbei wurde vorausgesetzt, daß die von der Lampe gelieferte und von der Lichtoptik transmittierte Intensität $I(\lambda)$ über den jeweils eingestellten Bereich von $\Delta\lambda$ konstant ist. Dies ist bei den hier dargestellten Messungen bis auf relative Abweichungen von etwa 5-10 % der Fall. Wegen des nichtlinearen Zusammenhangs zwischen $E=h\nu$ und λ ($E=hc/\lambda$; c = Lichtgeschwindigkeit) variiert die Energiebreite ΔE für $\Delta\lambda = \text{const}$ mit dem Quadrat der Energie:

$$\Delta E = (E^2/hc) \Delta\lambda \quad (16)$$

Typische Werte für ΔE liegen bei diesen Messungen zwischen 30 und 70 meV. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die Energieverteilungs-

Breite der Photoelektronen keineswegs mit der Photonenenergie- Breite ΔE übereinstimmen muß. Vielmehr erstreckt sich das Elektronenspektrum von $E=0$ bis $E=h\nu-\Phi$ (Φ = Austrittsarbeit). Die unterschiedliche Energie der Elektronen hängt davon ab, aus welchen Festkörperzuständen sie angeregt werden, bzw. welche inelastischen Streuprozesse innerhalb des Festkörpers erfolgen.

Zusätzlich zu dieser Energieverschmierung tritt mit wachsender Photonenenergie in gleicher Weise eine Verschmierung der Emissionswinkel auf. Wenn man nämlich, wie im vorliegenden Fall, alle entstehenden Photoelektronen abzieht, so kann man bereits bei $h\nu - \Phi = 2$ eV auch solche Elektronen erhalten, deren $\vec{k}$ -Vektoren im Festkörper innerhalb eines Kegels um die Oberflächennormalen- Richtung (des sogenannten "escape cone") mit einem Öffnungswinkel von ca. 20° (für Ni) liegen. Diese beiden Effekte können je nach dem Verlauf der betreffenden Bandstruktur sichtbare Auswirkungen auf die Meßergebnisse haben, was auch bei der Betrachtung der hier dargestellten Polarisationskurven zu berücksichtigen ist.

IV. Meßergebnisse

A. Spinpolarisation von Ni(001), -(110) und -(111)

Die ESP- Untersuchungen an der Photoschwelle erstrecken sich beim Nickel auf die drei niedrig indizierten Kristallrichtungen: [001], [110] und [111]. Dies entspricht in der zugehörigen fcc- Brillouin- Zone den Richtungen $\Gamma\Delta X$, $\Gamma\Sigma KX$ und $\Gamma\Lambda L$ (s. Abb.4a, S.7).

Nachdem erste Experimente zur spinpolarisierten Photoemission an aufgedampften dünnen Ni-Filmen (15) positive Polarisationswerte an der Photoschwelle ergeben hatten (die Festlegung des Vorzeichens von P wurde bereits in Kap. I getroffen), konnten Eib und Alvarado 1976 zeigen (51), daß die Elektronenpolarisation bei Verwendung eines Ni(001)-Einkristalls in einem kleinen Energiebereich von etwa 100 meV oberhalb der Schwellenenergie bis zu 30 % negative Werte aufweist. Dieses Ergebnis ist deshalb besonders bedeutsam, weil es die Voraussage der SWS- Bandtheorie (vgl. Abschn. II,A) qualitativ bestätigt. Eine weitere Voraussage dieser Theorie ist der Wechsel zu positiven Polarisationswerten innerhalb weniger hundert meV oberhalb der Schwelle.

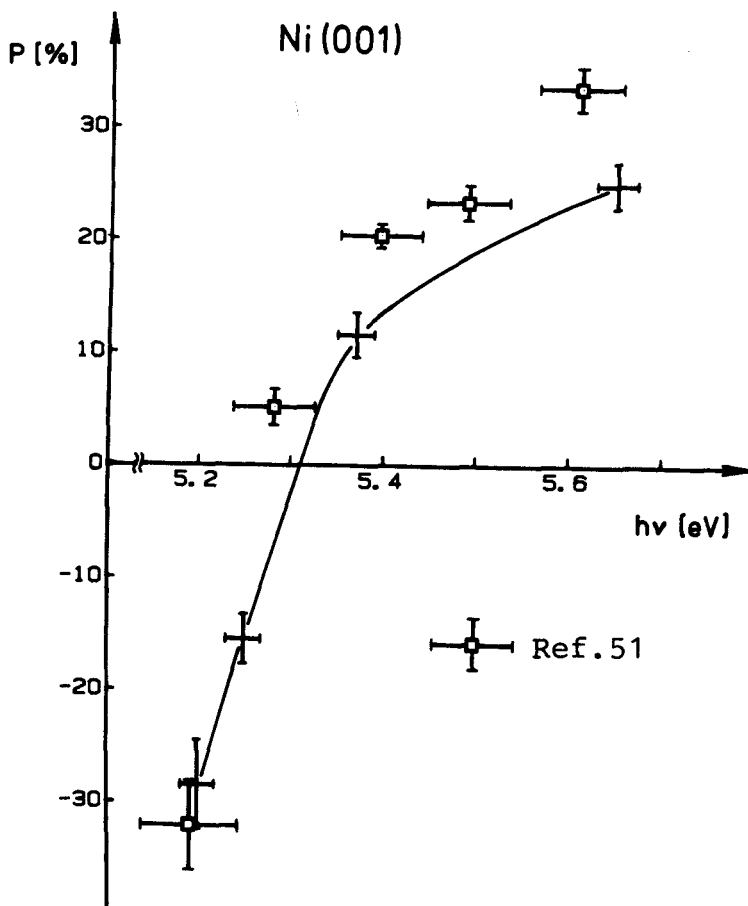
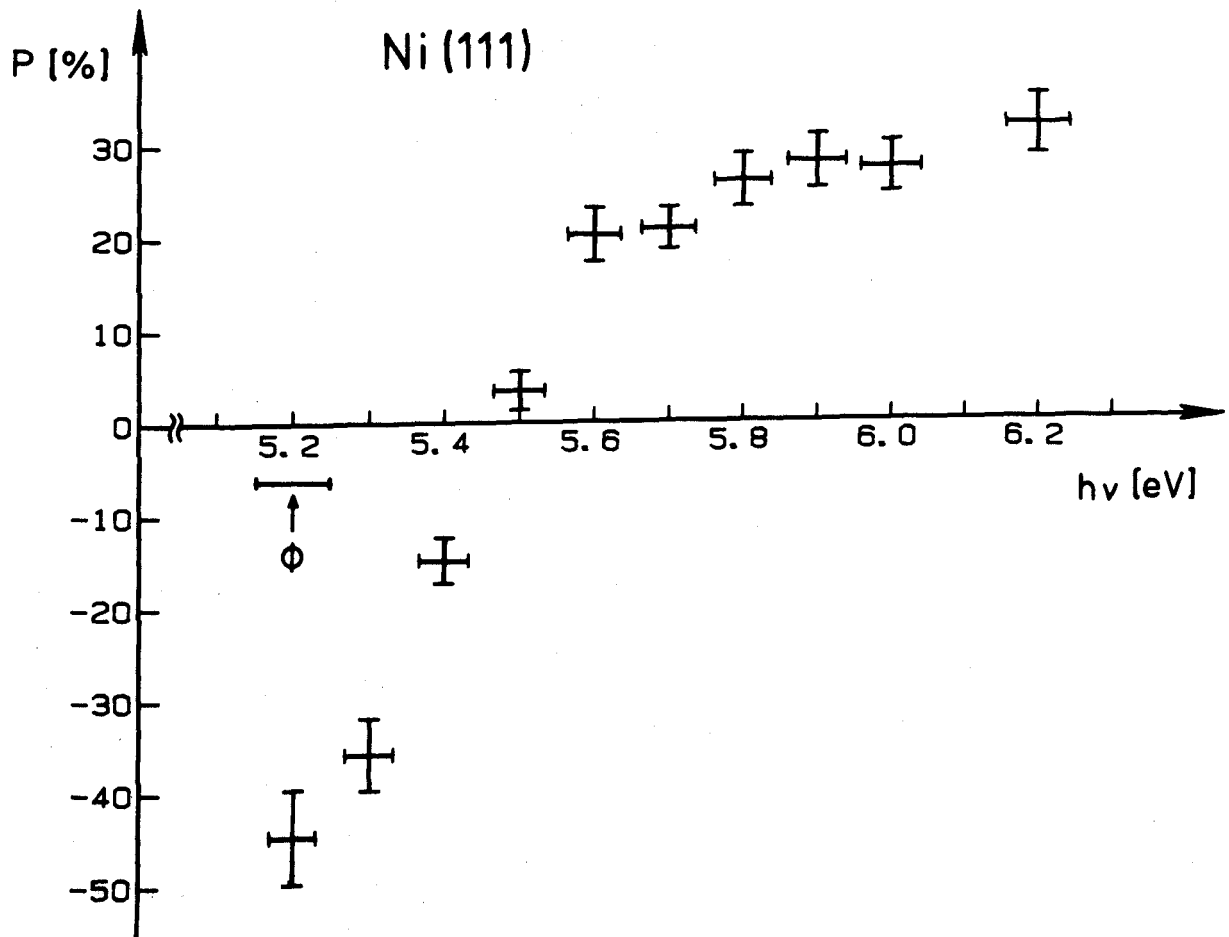
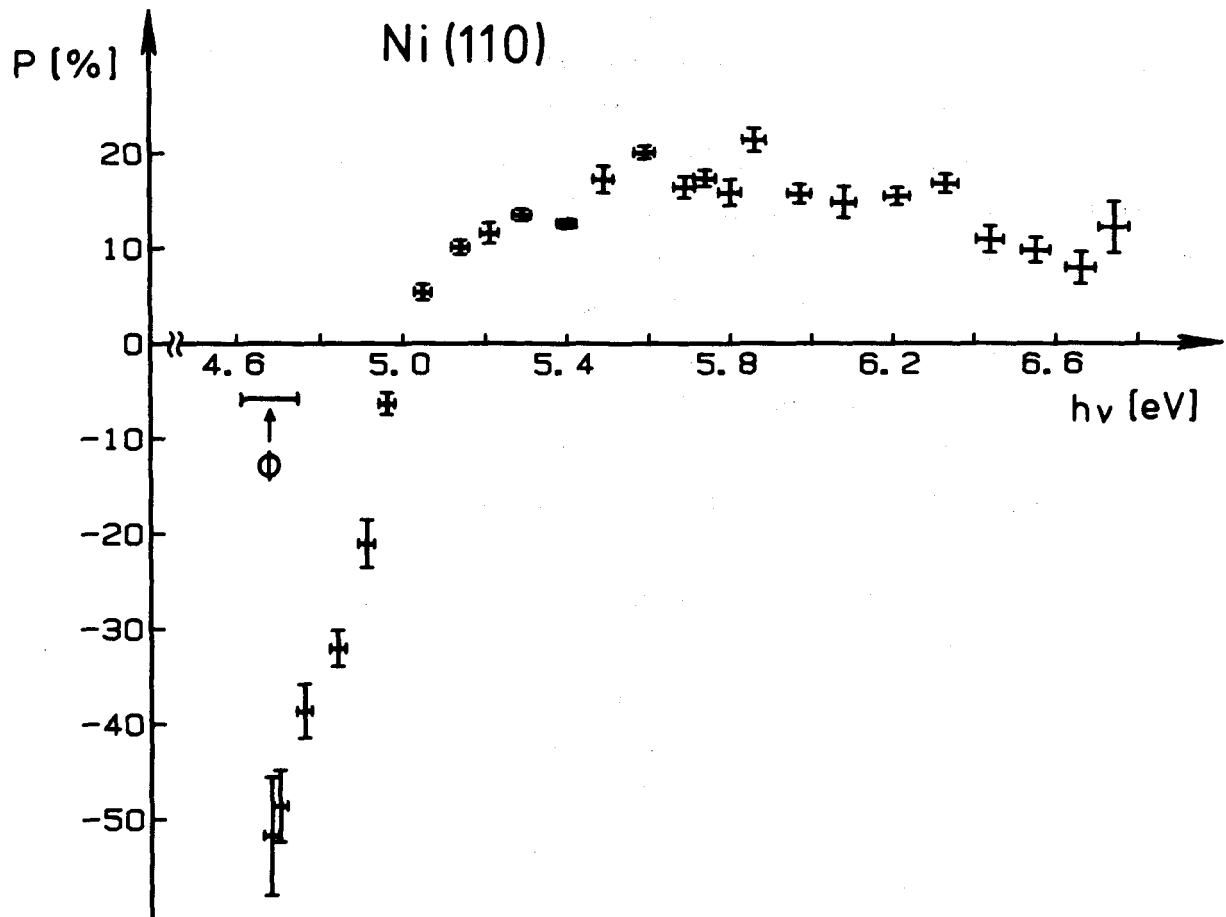


Abb. 17:
ESP-Messungen an Ni(001).
Daten aus Ref. 51 und
aus eigener Messung



Abbn. 18 und 19 : ESP- Messungen an Ni(110) und Ni(111)

Wie die vorliegenden Messungen zeigen, werden diese beiden Merkmale an allen drei niedrig indizierten Hauptkristallflächen beobachtet (52,53). In den Abbildungen 17-19 sind jeweils die Meßpunkte in Abhängigkeit von der Photonenenergie aufgetragen. Abb. 17 enthält zum Vergleich auch den entsprechenden Abschnitt der Kurve aus Ref. 51. Die Länge der Fehlerbalken ergibt sich aus der Bandbreite $\Delta\lambda$ der eingestrahlten Lichtwellenlänge und aus dem statistischen Fehler der Anzahl der in jedem Detektor nachgewiesenen Elektronen (vgl. Abschn. III,F). Die Werte für $\Delta\lambda$ (typisch 15-25 Å; vgl. Kap. III,D) sind nach unten begrenzt durch die Forderung nach einer Mindest- Lichtintensität, weil andernfalls die benötigte Meßzeit länger würde als die Zeitabstände, in denen die Probenoberfläche jeweils neu gesäubert werden muß. Die Detektor-Zählraten im Mott- Analysator betragen bei 5,6 eV Photonenenergie (hier liegt etwa das Maximum der Elektronenemission, normiert auf die Anzahl der einfallenden Photonen) ungefähr 20 sec^{-1} für die (001)- und die (111)- Fläche, dagegen für die (110)- Fläche ca. 900 sec^{-1} . Bei einem Vergleich dieser Zahlenwerte ist jedoch die unterschiedliche Austrittsarbeit ϕ von 5,2 eV und 4,7 eV (vgl. Tab.II, S. 52) und ein veränderter lichtoptischer Aufbau bei den (001)-/ (111)- Messungen zu berücksichtigen (1. es wurde ein McPherson- Monochromator verwendet; 2. der Lichtweg enthält drei reflektierende Elemente anstatt vier). Die Abnahme der Elektronenausbeute bei Annäherung der Photonenenergie an die Schwellenenergie bewirkt z.B. bei Ni(111) und $h\nu \approx \phi$ eine Reduktion der pro Zeiteinheit gemessenen Impulse um 95 % gegenüber $h\nu = \phi + 0,5 \text{ eV}$.

Mit den oben angegebenen Werten für die Zählraten dauert die Aufnahme eines Polarisationspektrums wie etwa das in Abb. 18 dargestellte nur ca. 2 Stunden. Benötigt man wesentlich längere Meßzeiten, so macht sich schließlich eine Abnahme der gemessenen ESP infolge einer Kontamination der Probe mit Atomen und Molekülen des Restgases bemerkbar. Wie bereits erwähnt, werden bei jeder Messung gleichzeitig die (am Ort der Probe) longitudinale (P_l) und eine der beiden transversalen Spinkomponenten (P_t) gemessen. Die transversale Komponente dürfte dabei im wesentlichen auf die Drehung des Spins in der Randzone des Magnetfeldes (bei exzentrischem Lichtfleck, vgl. Abschn. III,B 3) zurückzuführen sein. Bei den meisten Meßreihen zeigt sie qualitativ einen sehr ähnlichen Verlauf und gleiche Struktur wie die longitudinale Komponente. Insbesondere stimmt jeweils der Wert für die sogenannte crossover- Energie E_c , das ist der auf die Photoschwelle bezogene Energiewert, bei dem die Polarisationskurve ihr Vorzeichen

wechselt, für beide Komponenten innerhalb der Fehlergrenzen überein. Die Ursachen für das Auftreten von P_t lassen sich quantitativ nur recht ungenau untersuchen, aber es ist sehr unwahrscheinlich, daß P_t deutlich größere Werte annehmen kann als etwa $0,5 P_1$, da dies in keiner der zahlreichen Meßreihen beobachtet wurde. Mit dieser Feststellung und der bereits oben begründeten Annahme eines rein longitudinal polarisierten Strahls am Ort der Probe erscheint es gerechtfertigt, wenn man für den Polarisationsgrad, der den "wahren" Wert unmittelbar nach der Emission am besten wiedergibt, die Beziehung $P = \text{sign}(P_1) \sqrt{P_1^2 + P_t^2}$ verwendet. Die Beträge der so erhaltenen P-Werte können nach Abschn. III,B 3 um etwa 0-15 % zu niedrig liegen. Bei den in den Abbildungen dargestellten Meßpunkten handelt es sich um Mittelwerte aus mehreren unabhängigen Meßreihen, die an verschiedenen Tagen zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit durchgeführt wurden.

Bei allen drei untersuchten Ni- Einkristallflächen wird qualitativ dasselbe Verhalten der Spin- Polarisationswerte als Funktion der

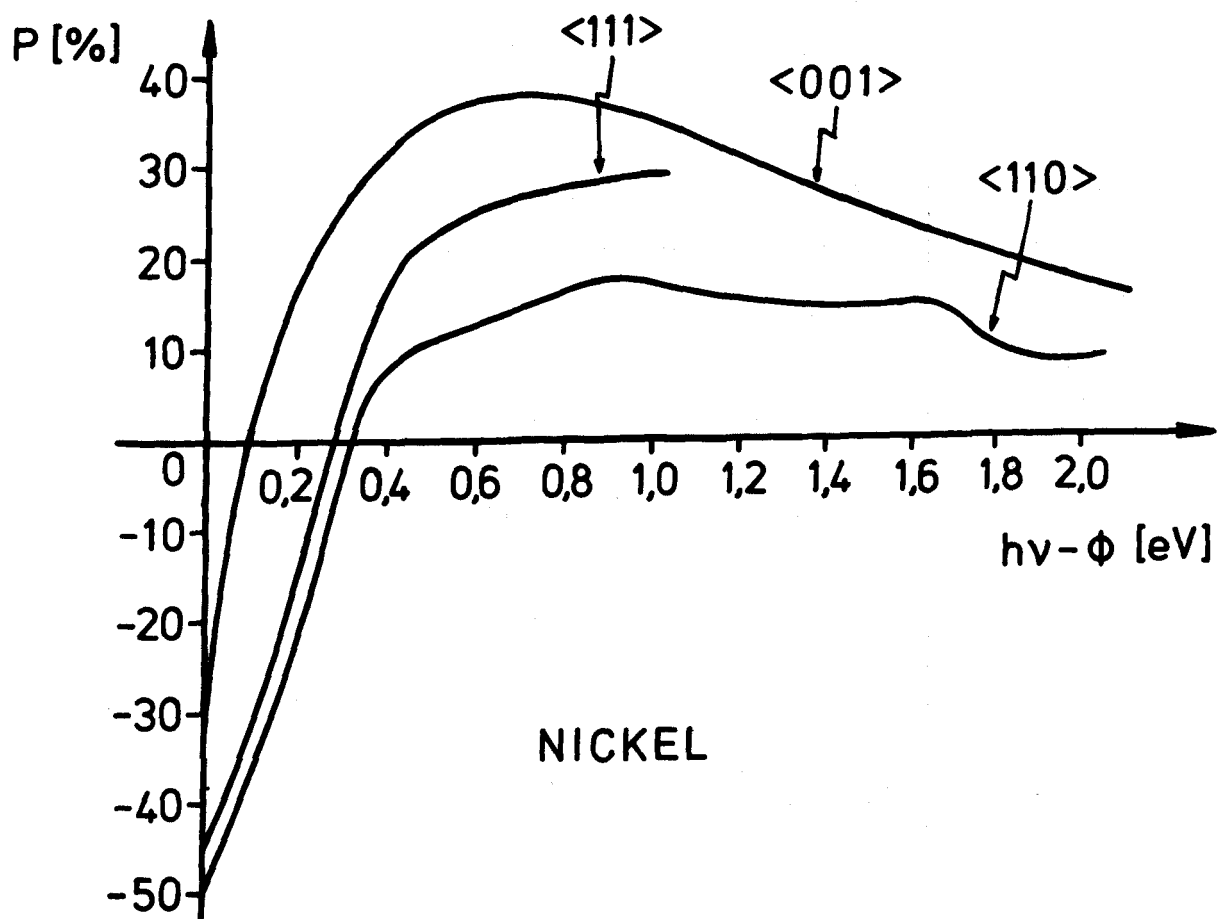


Abb. 20: Ausgleichskurven der ESP-Messungen entlang der niedrig indizierten Ni- Kristallrichtungen, zum besseren Vergleich auf dieselbe Anfangsenergie normiert ((001)-Kurve nach Ref.51)

Lichtenergie beobachtet. Zum besseren Vergleich sind in Abb. 20 die drei Kurven gemeinsam in einem Diagramm aufgetragen, wobei der Nullpunkt der Energieskala für jede Kurve bei ihrer jeweiligen Schwellenenergie liegt (die (001)- Kurve ist aus Ref.51 entnommen). Unmittelbar oberhalb der Photoschwelle ist P deutlich negativ. Mit zunehmender Energie steigen die Werte für P jedoch stark an und erreichen nach wenigen hundert meV bei E_c den Umschlagpunkt zu positiven Werten. Im Bereich von ungefähr 0,6 bis 1 eV oberhalb der Schwelle liegt jeweils ein flaches Maximum bei Werten zwischen etwa 15 % für die [110]- Richtung und 40 % für die [001] - Richtung. Auf der anderen Seite des Maximums ist die Abnahme von P weit weniger steil, und die Polarisation bleibt in dem gemessenen Bereich bis etwa 2 eV oberhalb der Schwelle positiv (die für Ni(111) vorliegenden Meßwerte gehen nur bis 1 eV). In Tabelle II sind die wichtigsten Daten, die man aus den Kurven entnehmen kann, explizit mit Fehlergrenzen aufgeführt. Zum Vergleich sind hier auch die von Himpsel et al. (54) mit Hilfe der winkelaufgelösten Photoemission ermittelten Werte für die Stoner- gaps δ angegeben. Wenn man berücksichtigt, daß in einer groben Näherung für die crossover- Energie E_c gilt $E_c \approx 2 \delta$ (Ref.16), so stimmen die Ergebnisse der beiden Experimente sehr gut überein. (s. auch S.61).

Fläche	(001)	(110)	(111)
Anf.-zust.- -Symmetrie	Δ_5	Σ_3, Σ_4	Λ_3
P (%)	-32 ± 5	-52 ± 7	-47 ± 5
Φ (eV)	$5,2 \pm 0,05$ $- 0,1$	$4,7 \pm 0,1$	$5,2 \pm 0,05$
E_c (eV)	0,1	$0,32 \pm 0,1$	$0,27 \pm 0,09$
$\delta(L_3^\uparrow)$ (eV) [54]			$0,15 \pm 0,05$ $- 0,1$
$\delta(X_5^\uparrow)$ (eV) [54]	$0,1 \pm 0,05$ $- 0,1$	$0,1 \pm 0,05$ $- 0,1$	

Tab. II: Vergleich zwischen der ESP an der Photoschwelle P, der Austrittsarbeit Φ , der crossover-Energie E_c und des Stoner-gaps δ für die drei niedrig-indizierten Ni-Oberflächen (δ aus Ref.54)

B. Spinpolarisation von Co(0001) und $-(10\bar{1}0)$

Die Messungen der Schwellenpolarisation beim Kobalt wurden an der (0001)- und an der $(10\bar{1}0)$ - Fläche durchgeführt. Die zugehörigen Oberflächennormalen liegen parallel zur $\Gamma\Delta A$ - bzw. zur $\Gamma\Sigma M$ - Richtung der hcp- Brillouin- Zone (Abb.4b, S.7). Eine besondere Schwierigkeit gegenüber den Ni- Messungen ergibt sich dadurch, daß die Präparation der Co-Probe langwieriger ist und mit größerer Sorgfalt durchgeführt werden muß, als dies beim Nickel erforderlich ist. Der Grund dafür ist die in Kap. III,E bereits erwähnte Phasenumwandlung, die beim Aufheizen der Co-Probe auf über 450°C auftritt. Wegen dieser Beschränkung in der Heiztemperatur darf auch die Energie der zum "Sputtern" benutzten Ar-Ionen nicht sehr groß sein, um die Oberflächenstruktur nicht zu stark zu zerstören. Die Zeitdauer für den gesamten Reinigungsprozeß ist daher länger als beim Nickel. Ein Vergleich der Photoelektronen- Ausbeute mit der Messung an der Ni(111)- Fläche (die jeweiligen Austrittsarbeiten liegen alle bei $\sim 5,1$ - $5,2$ eV) zeigt, daß die Detektor- Zählraten bei Co($10\bar{1}0$) etwa gleich sind und bei Co (0001) ungefähr ein Drittel betragen.

In Abb. 21 sind die Polarisationswerte für Co(0001) im Energiebereich von der Schwelle bis etwa 2 eV oberhalb aufgetragen und in Abb. 22 diejenigen für Co($10\bar{1}0$). Auch hier sind die dargestellten Meßpunkte Mittelwerte aus mehreren Meßreihen für $P(P_1, P_t)$. Während die Schwellenpolarisation bei der $(10\bar{1}0)$ - Kurve mit -20 % schwach negativ ist und der gesamte Kurvenverlauf somit eine zumindest grobe Ähnlichkeit zu den Ni-Meßdaten aufweist, liegen die an der (0001)- Fläche aufgenommenen Meßpunkte durchweg bei positiven Werten im Bereich zwischen etwa 11 % und 34 % und zeigen eine deutliche Strukturierung. Der Meßpunkt bei etwa 7 eV in Abb. 21 wurde unter Verwendung von Synchrotronstrahlung als Lichtquelle während eines Aufenthaltes am Speicherring ACO an der Universität von Paris- Süd aufgenommen. Dies ist ein Teilergebnis aus einer Reihe von spinpolarisierten Photoemissions- Experimenten an Ferromagneten bei höheren Photonenenergien (s. auch nächsten Abschn. u. Ref.39).

Aus der Summe der Zählimpulse aller Detektoren des Mott-Analysators als Funktion von $h\nu$ und aus der Proben temperatur läßt sich mit Hilfe der Fowler- Gleichung die Austrittsarbeit ϕ bestimmen (nähere Einzelheiten darüber befinden sich z.B. in der Einleitung des in Ref.17 angegebenen Buches). In einer für tiefe Temperaturen gültigen Näherung

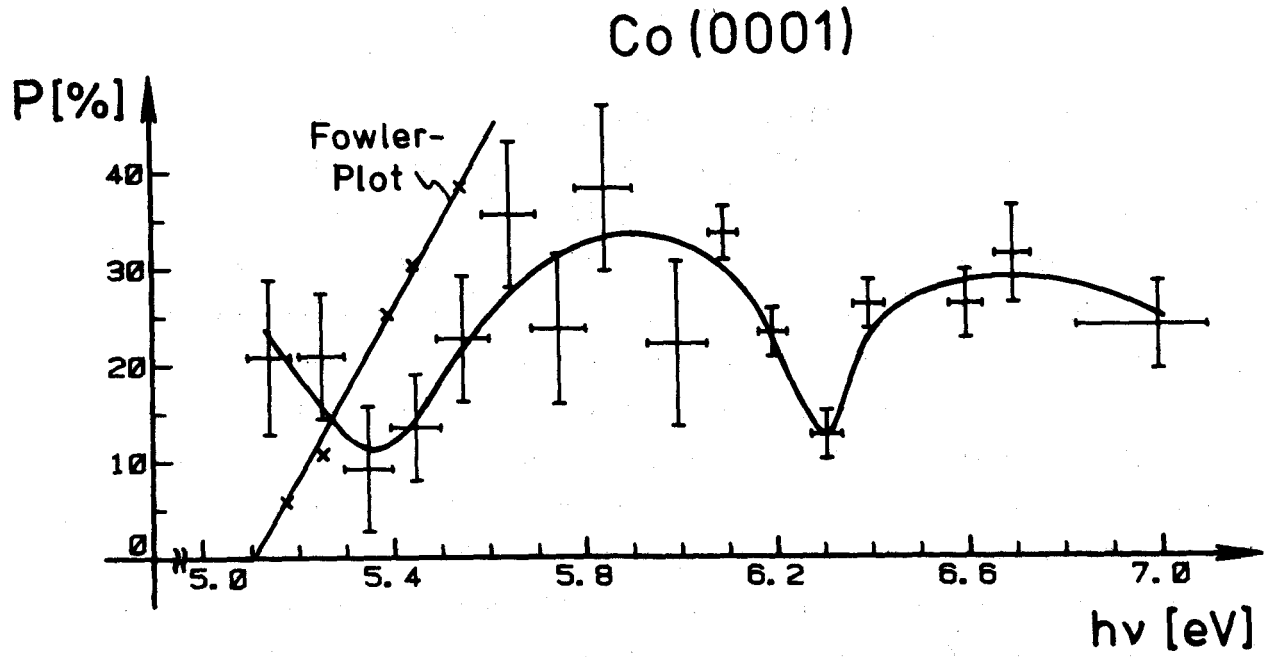


Abb. 21: ESP- Messung an Co(0001) mit Fowler-Plot zur Bestimmung der Austrittsarbeit

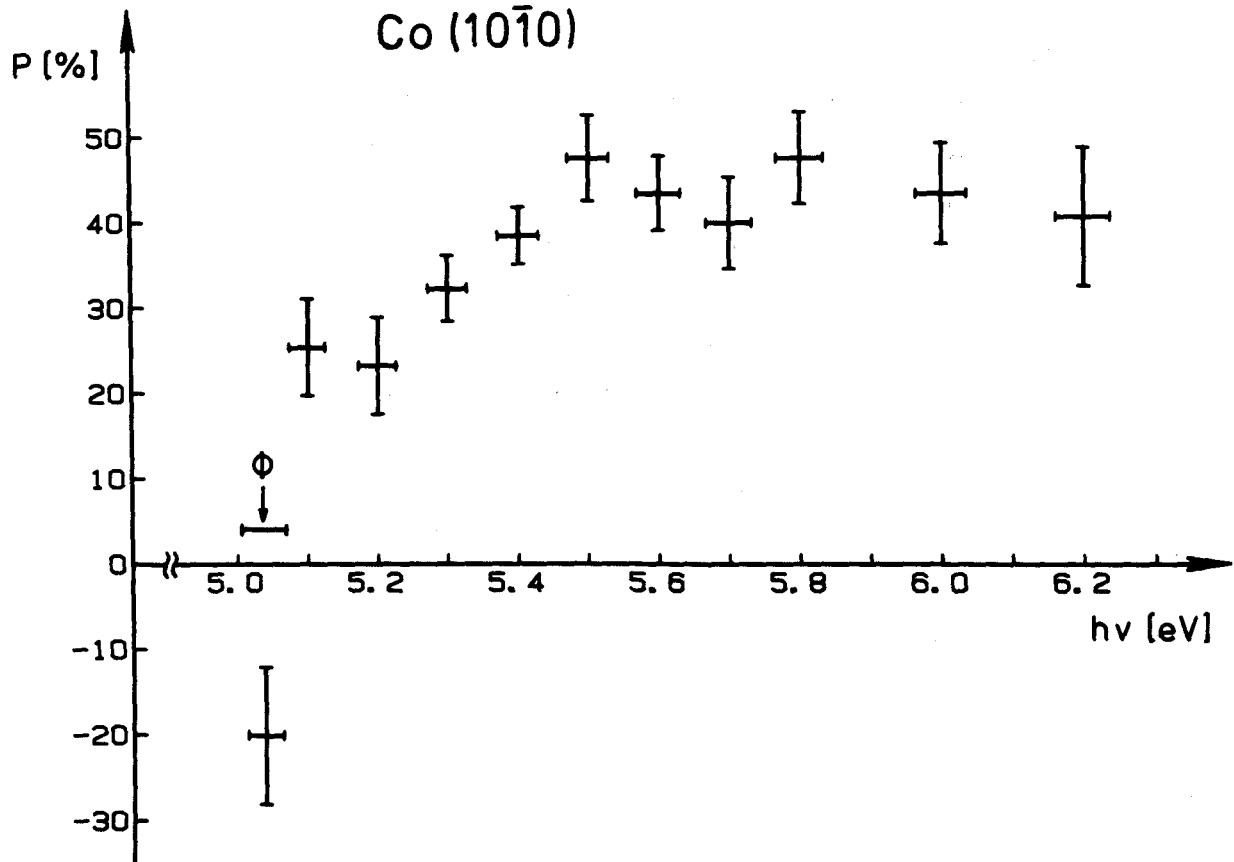


Abb. 22: ESP- Messung an Co($10\bar{1}0$)

dieser Gleichung besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der Photonenenergie und der Quadratwurzel der Zählimpulse. Diese Näherungslösung wurde auf die bei Raumtemperatur aufgenommenen Werte angewendet und ergab einen guten geradenförmigen Verlauf (Fowler-Plot), wie er als Beispiel für die Co(0001)-Messung in Abb. 21 eingezeichnet ist. Die Austrittsarbeit ergibt sich aus dem Schnittpunkt der Ausgleichsgeraden mit der Energieachse. Dieser liegt für Co(0001) bei $5,1 \pm 0,05$ eV und für Co(10 $\bar{1}$ 0) bei $5,03 \pm 0,03$ eV. Der Fehler des Näherungsverfahrens liegt in der Größenordnung von kT (≈ 40 meV). Die so erhaltenen Werte für Ni und Co stimmen innerhalb der Toleranzgrenzen gut mit den Angaben anderer Autoren überein (vgl. Tab.II, S.52 für Ni).

C. Temperaturabhängigkeit der Ni(111) - ESP

Im Rahmen einer weiteren Meßreihe wurde die Spinpolarisation der Photoelektronen aus einer Ni(111)-Fläche in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Damit soll das Verhalten der ESP mit dem bekannten Verlauf der Volumen-Magnetisierung bis in die Umgebung der Curie-Temperatur von etwa 630 K verglichen werden. Die Messung wurde mit einer konstanten Photonenenergie von ungefähr 7 eV und im Temperaturbereich von 300 K bis 730 K durchgeführt. Als Lichtquelle

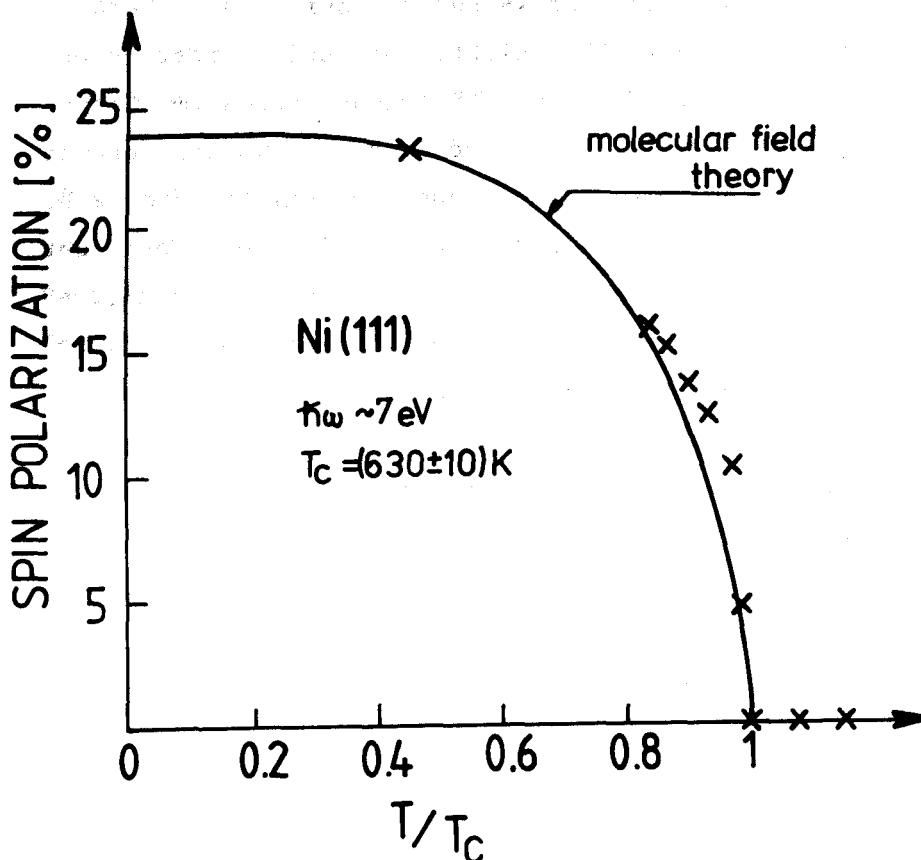


Abb. 23:
ESP-Messung an
Ni(111) in Ab-
hängigkeit von
der Temperatur

wurde der langwellige Bereich des Synchrotron- Strahlungs- Spektrums (ausgefiltert mit einer Quarz- Platte) benutzt. Bei den angegebenen Polarisationswerten handelt es sich wie bei allen bisher dargestellten ESP- Meßergebnissen um Mittelwerte über den gesamten Photoyield. Die Heizung und Temperaturmessung der Probe erfolgte mit der in Abschn. III,A bereits kurz erwähnten Heiz- und Kühlvorrichtung, bei der die Probenhalterung in thermischem Kontakt mit einem durchbohrten Cu-Zylinder steht, der wiederum von einem stromdurchflossenen Koaxial-Widerstandsdraht (zur Vermeidung von zusätzlichen Magnetfeldern) geheizt wird. Ein in den Cu-Zylinder eingelassenes Ni/NiCr- Thermoelement dient als Temperaturmeßfühler. Die Ergebnisse sind in Abb. 23 als Kreuze in einem $P \div T$ -Diagramm dargestellt. Gleichzeitig ist dort die Volumen-Magnetisierungskurve eingezeichnet, wie sie sich aus der Molekularfeld-Theorie ergibt. Ihre Maßeinheit wurde so gewählt, daß sie durch den obersten Meßpunkt verläuft. Wie man aus dem Diagramm entnimmt, fällt die gemessene ESP von etwa 24 % bei 300 K mit zunehmender Temperatur stark ab und erreicht am Curie- Punkt T_c den Wert 0, der auch für $T > T_c$ (gemessen bis $T=730$ K) bei 0 bleibt.

D. ESP an Ni(111) bei höheren Photonenenergien

Auf dem Gebiet der Weiterentwicklung spinpolarisierter Photoemissions-Experimente wird sicherlich ein Schwerpunkt bei der Verbesserung der Energieauflösung der Photoelektronen und ferner -- eng damit verbunden -- bei der Verwendung von Photonenenergien im fernen VUV- Bereich liegen. Erste Schritte in diese Richtung wurden bereits unternommen. Einige davon sollen hier kurz erwähnt werden. So wurde z.B. die Elektronen- Polarisation der gesamten Photo- Ausbeute bei der Bestrahlung eines Ni(111)- Einkristalls mit Photonen von $h\nu = 21,2$ eV bzw. 16,8 eV (He-I- bzw. Ne-I- Linie einer konventionellen Resonanzlampe) gemessen (40). Bei Energien, die so weit oberhalb der Photoschwelle ($\Phi \approx 5,2$ eV) liegen, läßt sich ohne Energieanalyse keine Information über die Bandstruktur gewinnen. Da der Anteil der inelastisch gestreuten Elektronen innerhalb des gemessenen Spektrums überwiegt, kann man auf diese Weise jedoch etwas über den Streuprozess erfahren. Die gemessene Polarisation beträgt bei den genannten Photonenenergien ungefähr 8 % und ist damit deutlich größer, als die Volumen- Polarisation von 5,4 % (vgl. Abschn. II,A), gebildet aus den 3d- und 4s- Elektronen. Zur Erklärung wurde dazu ein theoretisches Modell vorgeschlagen, nach dem die mittlere

Streu- Weglänge im Festkörper für Triplett- Streuung größer ist, als für Singulett- Streuung. Dadurch wird die "ursprüngliche" positive Polarisierung der angeregten Elektronen weiter erhöht. Das gleiche Experiment wurde später unter Verwendung von Synchrotron- Strahlung über einen großen Energiebereich wiederholt (39). Während sich dabei die früher an Ni(111) erhaltenen Ergebnisse innerhalb des gesamten Bereichs bestätigen (s. unten, Abb.24), wird die für das Co(0001) ebenfalls erwartete Erhöhung der Polarisierung nicht beobachtet. Stattdessen erreicht P nur gerade den Wert der Volumen- Polarisierung. Eine mögliche Erklärung hierfür wäre dadurch gegeben, daß beim Ni im Gegensatz zum Co die Magnetisierung an der Oberfläche größer ist, als die Volumen- Magnetisierung (vgl. Abschn. II,C und darin zitierte Arbeiten). Eine Verstärkung der Oberflächen- Magnetisierung kann auftreten, wenn das Fermi- Niveau gerade an einer Stelle liegt, wo die Oberflächen- Zustandsdichte relativ zur Volumen- Zustandsdichte ein großes Maximum aufweist (55). Zur genaueren Klärung dieses Punktes sind jedoch noch weitere Untersuchungen erforderlich.

Wie in Abschn. II,C 2 bereits angedeutet wurde, läßt sich bei Verwendung eines elektrischen Gegenfeldes zwischen der Probe und der ersten Elektrode des Linsensystems eine Energieanalyse der Photoelektronen erreichen. Ein Vorteil dieser Methode besteht darin, daß die Analyse im Bereich des homogenen Magnetfeldes erfolgt, wo die Elektronen durch die Randfeldeffekte noch keine transversale Geschwindigkeits- Komponente erhalten haben, und wo ihre Energie nur einige eV beträgt. Nach diesem Verfahren wurde, ebenfalls an der Ni(111)- Fläche, die ESP als Funktion der Verzögerungs- Spannung $-V_r$ bei den konstanten Photonenenergien $h\nu = 24,2$ eV und 16 eV (Synchrotron- Strahlung) gemessen (39). Die Daten sind in Abb. 24 dargestellt. Dabei zeigt sich, daß die Polarisierung bei $h\nu = 24,2$ eV von +9 % auf -10 % abfällt, wenn man $-V_r$ von 0 V kontinuierlich auf $-V_r = h\nu - \Phi$ erhöht. Der Wechsel von positiver zu negativer Polarisierung erfolgt bei $-V_r = h\nu - \Phi - 3$ eV, d.h. die crossover- Energie E_c ist mit 3 eV wesentlich größer als bei den ESP- Messungen an der Photoschwelle (vgl. Tab.II, S.52). Für $h\nu = 16$ eV ergibt sich qualitativ ein ähnlicher $P(V_r)$ - Kurvenverlauf, jedoch beträgt E_c hier nur etwa 0,5 eV. Berücksichtigt man die Energie- Verbreiterung der Anfangszustände infolge der endlichen Lebensdauer des erzeugten Loches, so lassen sich diese Meßergebnisse anhand der experimentellen Ni- Bandstruktur in Abb. 25 folgendermaßen

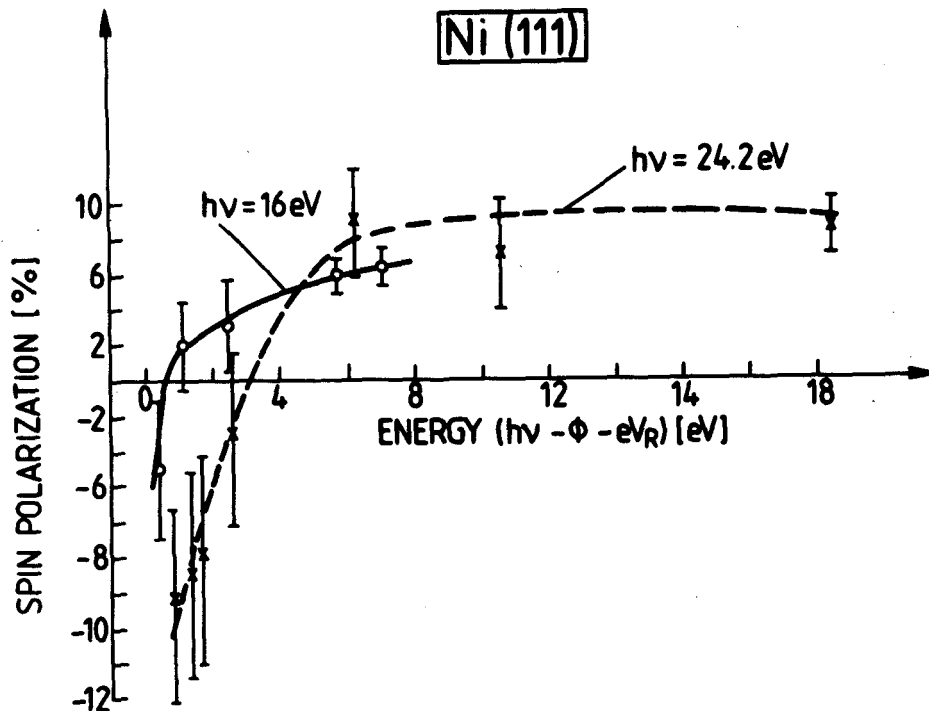


Abb. 24:
ESP-Messungen an
Ni(111) mit Energie=
auflösung ("retarding
field"-Methode) der
Photoelektronen bei
ausgewählten konstan=
ten Photonenenergien
(Synchr.-Strahlung)

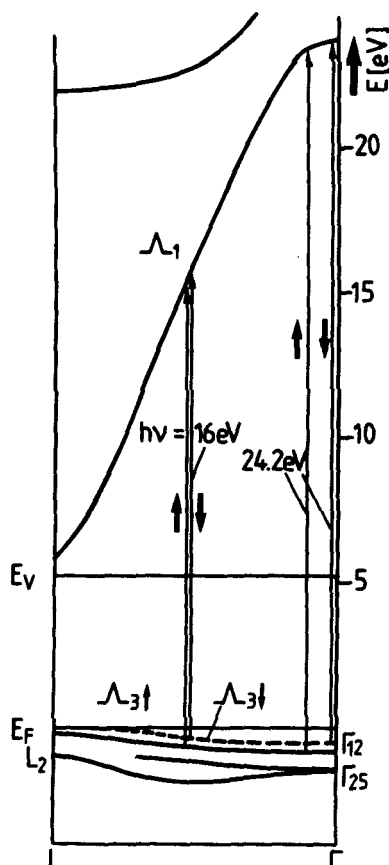


Abb. 25:
Ni-Bandstruktur entlang der Λ -Linie der fcc-Brillouin-
Zone. Die direkten Übergänge aus dem obersten aufge=
spaltenen Λ_3 -Band bei $h\nu = 16$ und $24,2$ eV sind mit
Angabe der jeweiligen Spinrichtung eingezeichnet

erklären: Zunächst stellt man fest, daß bei
den hier verwendeten Photonenenergien das
 Λ_1 -Endzustands- Band durch direkte Übergänge
erreichbar ist. Für hohe Retardierungs=
Spannungen V_r mißt man demnach nur
Elektronen aus direkten Übergängen zwischen
dem spin- aufgespaltenen obersten besetzten
 Λ_3 -Band und dem Λ_1 -Band. Diese Übergänge
erfolgen bei $h\nu = 24,2$ eV entsprechend der
 Λ_1 -Band- Dispersion ganz in der Nähe des
 Γ -Punktes, dagegen bei $h\nu = 16$ eV etwa in
der Mitte zwischen dem Γ - und dem L-Punkt.

Im zweiten Fall liegen die beiden Teilbänder
näher an der Fermi- Kante, und es dürfte daher das obere (Minoritäts-)
Band schwächer mit Elektronen besetzt sein als im Fall des $24,2$ eV-
Übergangs, da wegen der Lebensdauer- Verbreiterung der Bänder ein Teil

der $e^\downarrow$ -Zustände oberhalb von E_F liegt. Aus diesem Grund verläuft der Anstieg von negativen zu positiven Polarisationswerten bei der mit 16 eV Photonenenergie aufgenommenen Kurve steiler und erreicht den crossover-Punkt E_c bei niedrigeren Energiewerten. In der Nähe des Γ -Punktes dürfte das Λ_3 -Minoritätsband nahezu vollständig besetzt sein, und so erwartet man bei der Messung der schnellsten Elektronen zunächst negative Polarisation, die dann aber mit abnehmender Retardierung gegen Null gehen sollte. Der tatsächlich beobachtete Übergang zu positiven Werten bis etwa 9 % erklärt sich dadurch, daß für $V_r \rightarrow 0$ wegen der damit verschwindenden Energie- und Winkelauflösung die integrale Elektronenausbeute über einen großen Bereich der Brillouin-Zone gemessen wird.

V. Deutung der Meßergebnisse im Vergleich mit anderen experimentellen und theoretischen Arbeiten

A. Größe der Austausch-Aufspaltung in Nickel

Für eine quantitative Analyse der ESP-Daten im Rahmen der Einteilchen-Näherung sind rigorose Rechnungen erforderlich, die bereits von mehreren Gruppen in unterschiedlicher Weise durchgeführt wurden.

Smith und Chiang (11) haben die Spinpolarisation von Photoelektronen aus Ni auf der Grundlage des Drei-Stufen-Modells berechnet. Die Ergebnisse zeigen, daß man bei einer Beschreibung des Photoemissions-Prozesses mit diesem Modell beim Vorliegen einer Bandlücke wie im Falle der $[001]$ - und der $[111]$ -Richtung in Ni die Meßergebnisse nicht erklären kann.

Dempsey und Kleinman (56) erhielten aus selbstkonsistenten Bandstruktur-Rechnungen für das Stoner-gap an Ni(001) einen Wert von $\delta=140$ meV, der sich mit der gemessenen crossover-Energie von etwa 100 meV nicht in Einklang bringen läßt. Sie führten diese Abweichung auf das postulierte Vorhandensein eines Oberflächenzustands zurück. Bei der nicht selbstkonsistenten Berechnung der ferromagnetischen Energiebänder einer aus 35 Atomlagen bestehenden Ni-Schicht wurde daraufhin tatsächlich ein mit Majoritäts-Elektronen besetzter Oberflächenzustand dicht oberhalb des Majoritätsspin-d-Bandes gefunden. Um diesen wichtigen Punkt zu klären, sind jedoch selbstkonsistente Berechnungen der elektronischen Struktur von Ni(001)-Oberflächen unter Berücksichtigung von Oberflächenzuständen und -Resonanzen notwendig.

Ein weiterer Versuch, die Ni(001)- Polarisationskurve theoretisch herzuleiten, wurde von Moore und Pendry (57) unternommen. Die Berücksichtigung von Effekten, deren Beschreibung über die Einteilchen-Näherung hinausgeht, erfolgt durch Parametrisierung der Austausch-Aufspaltung. Im Falle des (allerdings etwas einfacher zu behandelnden) Kupfers erwies sich das verwendete PE- Modell bereits als erfolgreich. Die Autoren benutzten das von Wakoh (58) in seinen Rechnungen verwendete und tabellierte Potential, wobei jedoch die Austausch- Aufspaltung zur besseren Anpassung an die Experimente als variables gewichtetes Mittel aus dem Spin-auf- und dem Spin-ab- Potential gebildet wurde. Sie fanden, daß die experimentelle Spinpolarisations- Kurve für die (001)- Fläche (und später für die (111)- Fläche (52,57a)) nicht mit dem theoretischen Wert der Austausch- Aufspaltung beschrieben werden kann, der für die Wakoh- Bandstruktur- Rechnung 0,9 eV beträgt. Wenn man diesen Wert jedoch "künstlich" auf 0,33 eV herabsetzt, erhält man eine fast perfekte Anpassung an die experimentellen Daten für beide Kristallflächen wie es in Abb. 26 und 27 gezeigt ist. Hieraus muß geschlossen werden, daß man

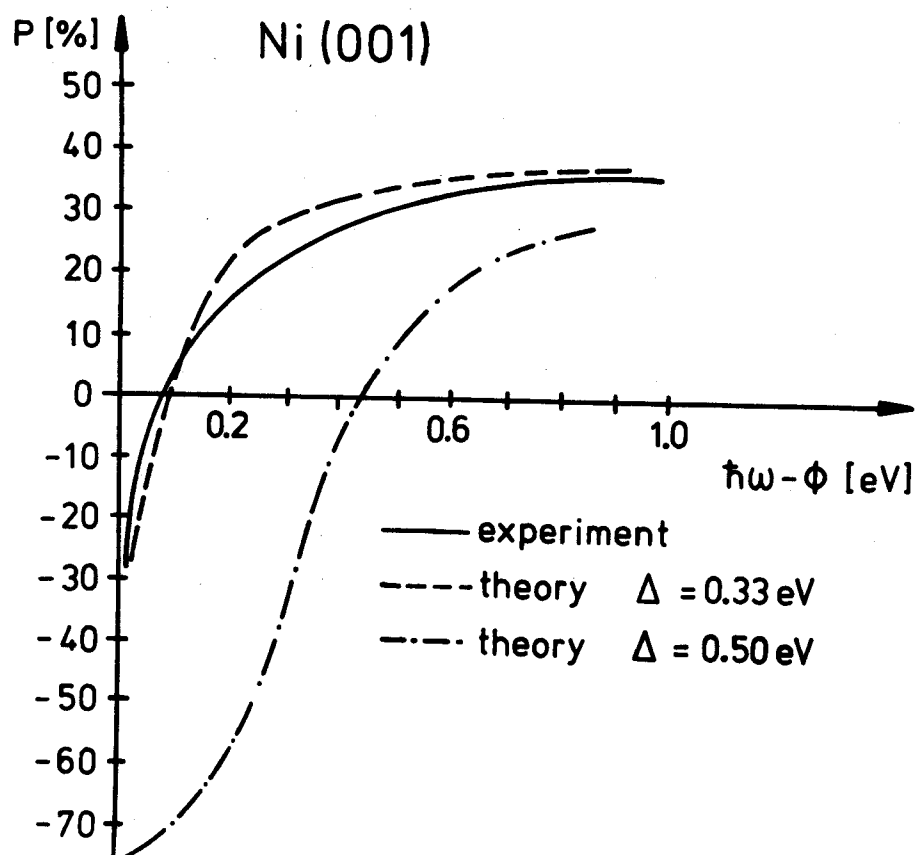


Abb. 26: Vergleich zwischen der theoretischen (Ref.57) und der experimentellen (Ref.51) Photo-ESP-Kurve für Ni(001) (aus Ref.52)

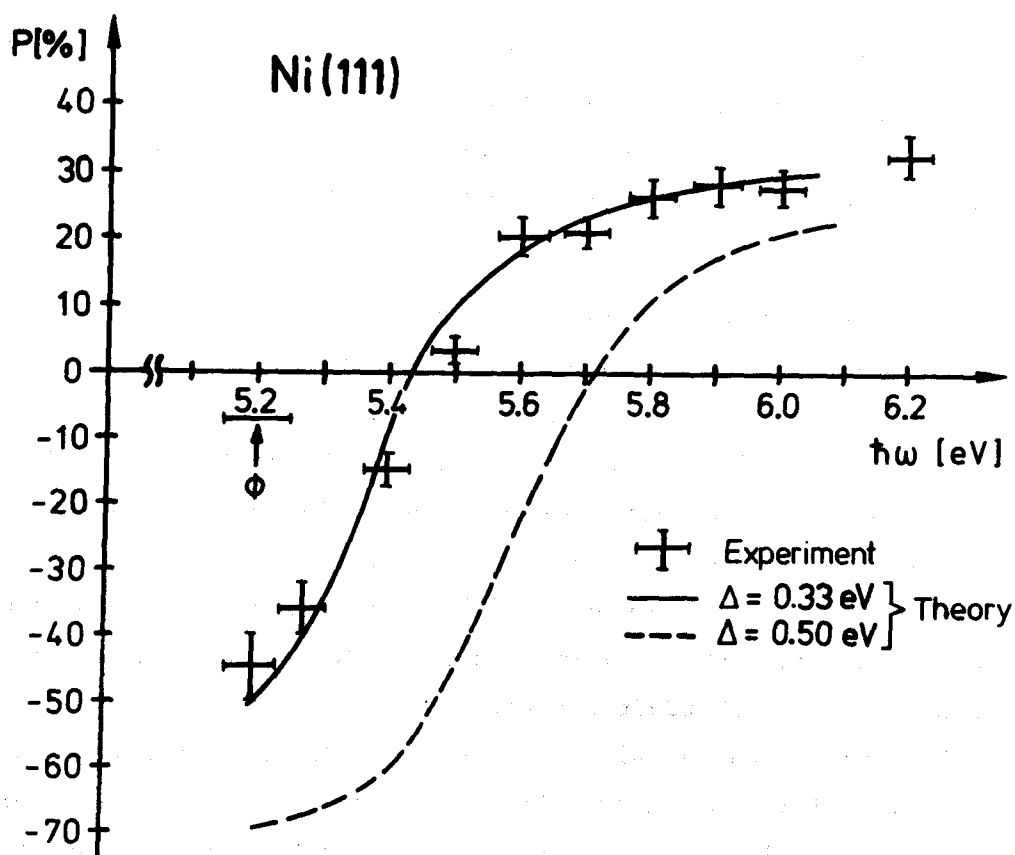


Abb. 27: Gemessene und berechnete Elektronen-Polarisation der Photo-Ausbeute an Ni(111) (aus Ref.52)

zur Erklärung der Photoemission an Ni für die Austausch- Aufspaltung einen Wert von etwa 0,33 eV anzusetzen hat und nicht Werte zwischen 0,6 und 0,9 eV, wie es von vielen selbstkonsistenten Bandstruktur-Rechnungen verlangt wird, oder Werte zwischen 0,4 und 0,6 eV, wie sie aus den besten Abschätzungen erhalten wurden (59), in denen Daten aus Fermi- Flächen- Untersuchungen an die experimentelle Anzahl Bohrscher Magnetonen angepaßt wurden.

Für die Größen der Stoner- gaps am X_5 - und L_3 -Punkt erhält man aus einem Vergleich der gemessenen crossover- Energie E_c (vgl. Tab.II, S.52) mit berechneten ESP-Kurven von Moore (Ref.52,57a; $\Delta_{ex} = 0,33$ eV als Parameter) Werte von $\delta(X_5^\uparrow) = 0,02$ eV und $\delta(L_3^\uparrow) = 0,11$ eV. Diese Werte sind gegenüber den Ergebnissen selbstkonsistenter Berechnungen sogar um den Faktor 1/3 bis 1/6 kleiner.

Der aus den vorliegenden Messungen abgeleitete kleine Wert für die Austausch- Aufspaltung wurde inzwischen auch mit Hilfe von ARPES-Messungen gewonnen (36,37,54,60,61). So haben z.B. Eastman et al. (36)

aus winkelaufgelösten Energieverteilungs- Kurven, die die Emission aus dem obersten spin- aufgespaltenen d-Band zeigen, einen Wert von $0,31 \pm 0,03$ eV für Δ_{ex} abgeleitet. Dies ergab eine Kurvenform- Analyse auf der Basis des spin- aufgespaltenen SWS-Modells mit zwei Lorentz- Spektralfunktionen.

In Anbetracht dieser experimentellen Hinweise für eine kleinere Austausch- Aufspaltung als die theoretisch geforderte sind verschiedene Versuche unternommen worden, dafür eine Erklärung zu finden. Die Lösung des Problems liegt offenbar in der Berücksichtigung von Elektron- Elektron- Wechselwirkungen, d.h. Vielteilchen- Effekten bei der Anregung in schmalen d-Bändern. Die Abweichungen vom Einteilchen- Spektrum sind bereits qualitativ von P.W. Anderson (62), Doniach (63), Baltensperger (64), Hertz und Edwards (65) und in jüngerer Zeit quantitativ von Penn (21) und Liebsch (20) diskutiert worden.

So weist z.B. Doniach darauf hin, daß ein im Minoritätsband erzeugtes Loch weniger effektiv von Majoritäts- Elektronen abgeschirmt werden kann, da letztere sich in einem gefüllten Band befinden, als umgekehrt ein Loch im Majoritätsband von Minoritäts- Elektronen abgeschirmt wird. Hierdurch ergibt sich eine Energieverschiebung der Photoelektronen- Spektren für Spin-auf- und Spin-ab- Elektronen relativ zueinander in der Weise, daß der gemessene Wert für die Austausch- Aufspaltung geringer ist als ihr tatsächlicher Wert im Grundzustand.

Eine semiquantitative Erklärung für die beobachteten kleinen Werte der Austausch- Aufspaltung und der 3d- Bandbreite sowie für das Auftreten von Satelliten im Photoemissionsspektrum von Ni bei höheren Energien wurde kürzlich von Liebsch gegeben (20).

Die durch Vielteilchen- Effekte bewirkten Abweichungen vom Einteilchen- Spektrum werden allgemein für die noch bestehende Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment verantwortlich gemacht. Zwei quantitative Abschätzungen dieser Abweichungen (20,21) unter Verwendung von angemessenen Parametern für Ni (z.B. bezüglich der Coulomb- Wechselwirkung U_{eff} und der d-Bandbreite von etwa 3-4 eV) haben allerdings noch keine ganz zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ergeben.

B. Experimentelle Bandstrukturen von Nickel und Kobalt

In den folgenden beiden Abschnitten werden experimentell bestimmte Bandstrukturen der 3d-Ferromagnete diskutiert und mit den vorliegenden ESP- Ergebnissen verglichen.

1. Nickel

In Abb. 28 ist eine von Himpsel et al. (54) mit Hilfe des ARPES-Verfahrens ermittelte Bandstruktur dargestellt. Sie zeigt s- und d-Bänder entlang der $[111]$ - und $[001]$ - Richtung in Ni, wie sie aus den

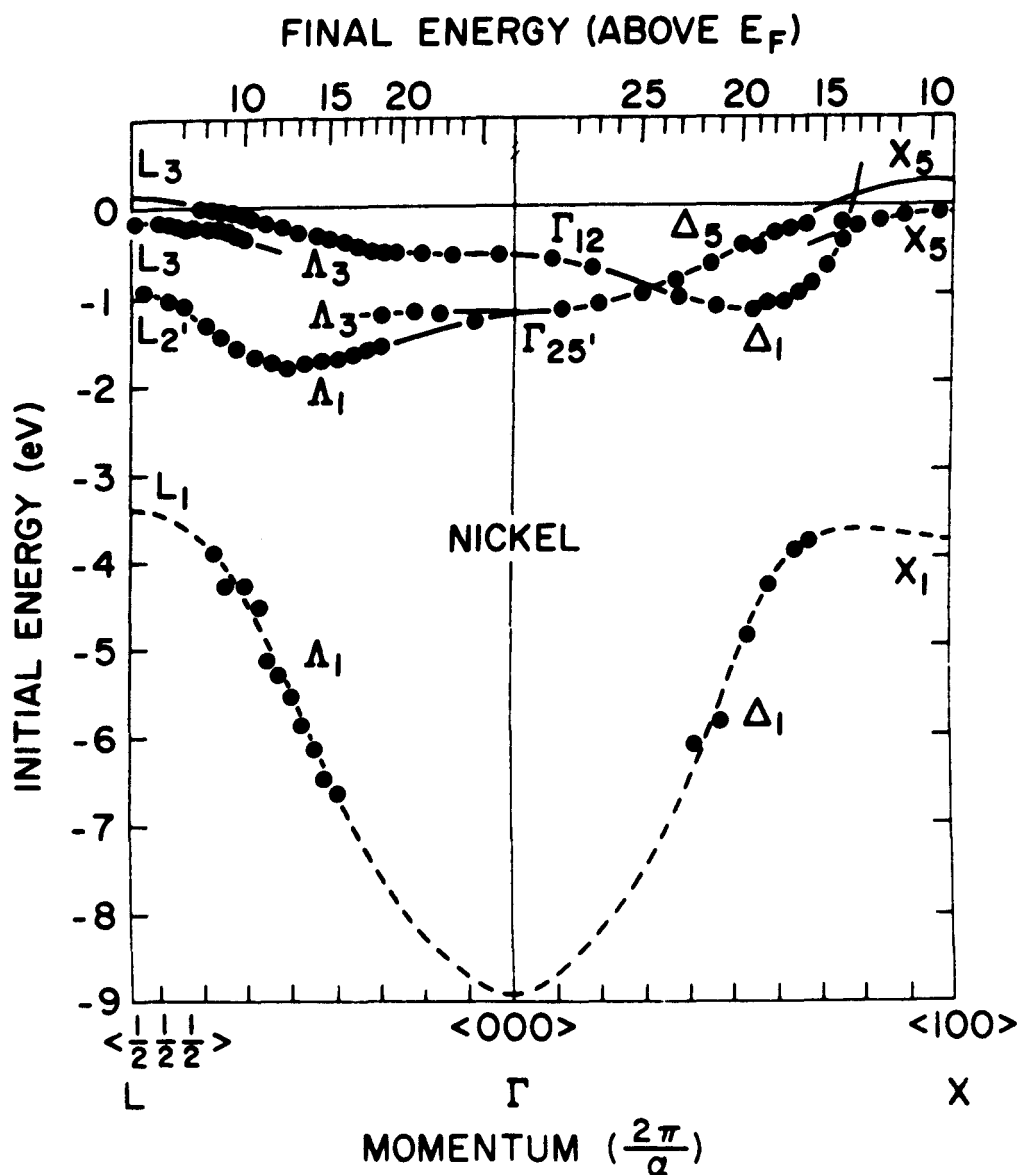


Abb. 28: Experimentell (mit ARPES) bestimmte Energieband- Dispersionen für Ni entlang der Λ - und der Δ -Richtung (aus Ref.54). Die obere Skala gibt die Energie des Endzustands-Bandes an, das zur Bestimmung von $k_{\perp}$ benutzt wurde

Elektronen- Energien unter der Annahme von direkten Interband- Übergängen bei senkrechter Emission und definierter Lichtpolarisation erhalten wurden.

Vergleicht man diese Daten mit den Polarisationskurven in Abb. 20 (S.51), so stellt man eine gute Übereinstimmung fest. Für $h\nu \approx \Phi$ werden überwiegend Elektronen aus dem Λ_3 - bzw. dem Δ_5 -Minoritätsband angeregt, und die gemessene ESP ist demzufolge negativ. Bei Erhöhung von $h\nu$ nimmt die Emission von Λ_3 - bzw. Δ_5 -Majoritätselektronen zu und überwiegt schließlich sogar wegen der hohen Zustandsdichte der zugehörigen Majoritätsbänder am L- bzw. X-Punkt. Dementsprechend beobachtet man einen starken Anstieg der ESP- Kurven an der Photoschwelle. Auch bei einem quantitativen Vergleich dieser Ergebnisse zwischen den charakteristischen Größen Stoner- gap δ (ergibt sich aus den ESP- Daten allerdings nur näherungsweise) und crossover- Energie E_c anhand von Tab. II auf S. 52 zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Dies ist ein Hinweis dafür, daß die Existenz von Oberflächenzuständen für die Erklärung des ESP- Verhaltens an der Schwelle nicht benötigt wird.

Die Meßdaten in Abb. 28 unterscheiden sich von selbstkonsistenten Bandstruktur- Rechnungen außer in der geringeren Austausch- Aufspaltung auch in der Anordnung bestimmter Bänder am L-Punkt und in der Breite des d-Bandes (gemessen als Energiedifferenz zwischen E_F und gewissen Extremalpunkten in der Banddispersion). In Tabelle III sind die entsprechenden experimentellen Daten aus Ref. 54 den von Wang und Callaway (2) und den von J.R. Anderson et al. (6) berechneten Werten gegenübergestellt. Tabelle IV gibt einen Vergleich zwischen der experimentell und der theoretisch bestimmten d-Bandbreite W und Austausch- Aufspaltung Δ_{ex} für Fe, Co und Ni, zusammen mit der d-Bandbreite von Cu (nach Ref.37).

	$H^a)$	$W^b)$	$A^c)$
$E_F - L_{2'} \text{ (eV)}$	0,9	0,39	0,79
$E_F - L_3^\uparrow \text{ (eV)}$	0,15	0,47	0,70
$L_3^\downarrow - L_3^\uparrow \text{ (eV)}$	0,31	0,6	0,86

a) Himpsel et al., Ref.54

b) Wang und Callaway,
Ref. 2

c) J.R. Anderson et al.,
Ref. 6

Tab. III: Experimentell (a) und theoretisch (b,c) bestimmte Lage des $L_{2'}$ - und des $L_3^\uparrow$ - Punktes und Austausch- Aufspaltung des oberen Λ_3 -Bandes am L-Punkt für Ni

	Fe	Co	Ni	Cu
W_{exp} (eV)	3,1	3,8	3,4	3,1
W_{theor} (eV)	3,4	4,7	4,7	3,6
$\Delta_{\text{ex}}^{\text{exp}}$ (eV)	1,5	1,1	0,3	0
$\Delta_{\text{ex}}^{\text{theor}}$ (eV)	1,5	1,32	0,65	

Tab. IV: Die experimentellen und theoretischen Werte (4) der Austausch-Aufspaltung Δ_{ex} , jeweils genommen am P-, Γ - und L-Punkt, und der Breite des besetzten d-Bandes W bei P, L und L,X für Fe, Co und Ni. Die d-Bandbreiten von Cu sind ebenfalls zum Vergleich angegeben (nach Ref. 37)

Für die $[110]$ - Richtung wurden solche Dispersionskurven noch nicht gemessen. Als die beste zur Zeit verfügbare Bandstruktur für diese Richtung kann eine halbempirische Rechnung von Smith und Chiang (11) angesehen werden. Sie geht aus von einer APW- (Augmented- Plane- Wave) Rechnung für paramagnetisches Nickel, auf die anschließend ein sog. kombiniertes Interpolationsschema angewendet wird. Aus dem Ergebnis wird dann die Bandstruktur des ferromagnetischen Ni durch starre Verschiebung der d-Bänder bei gleichzeitiger Anpassung an zwei experimentelle Parameter erhalten, nämlich an die Lage des L_2 - Punktes und an die Anzahl von 0,54 Bohr'schen Magnetonen pro Atom. Anhand der so gewonnenen Bandstruktur läßt sich eine Erklärung für den qualitativen Verlauf der (110) - Polarisationskurve relativ zum Verlauf der (001) - Kurve finden (s. auch Ref.53). In Abb. 29 sind die für die folgende Diskussion relevanten Teile der Bandstruktur dargestellt; das sind also jene Teile, die aufgrund der experimentell vorgegebenen Anordnung und der Symmetrie-Auswahlregeln aus Tab. I (S.11) allein zur Emission beitragen können. Wären die Σ_4 - Bänder nicht vorhanden, so könnte man in diesen beiden Richtungen einen sehr ähnlichen Verlauf der Polarisationskurven erwarten, da die Σ_3 - Bänder am X-Punkt in die Δ_5 - Bänder übergehen und daher die Stoner- gaps, die den Kurvenverlauf maßgeblich bestimmen, identisch sind. Da an der Photoschwelle aber auch aus dem Σ_4 -

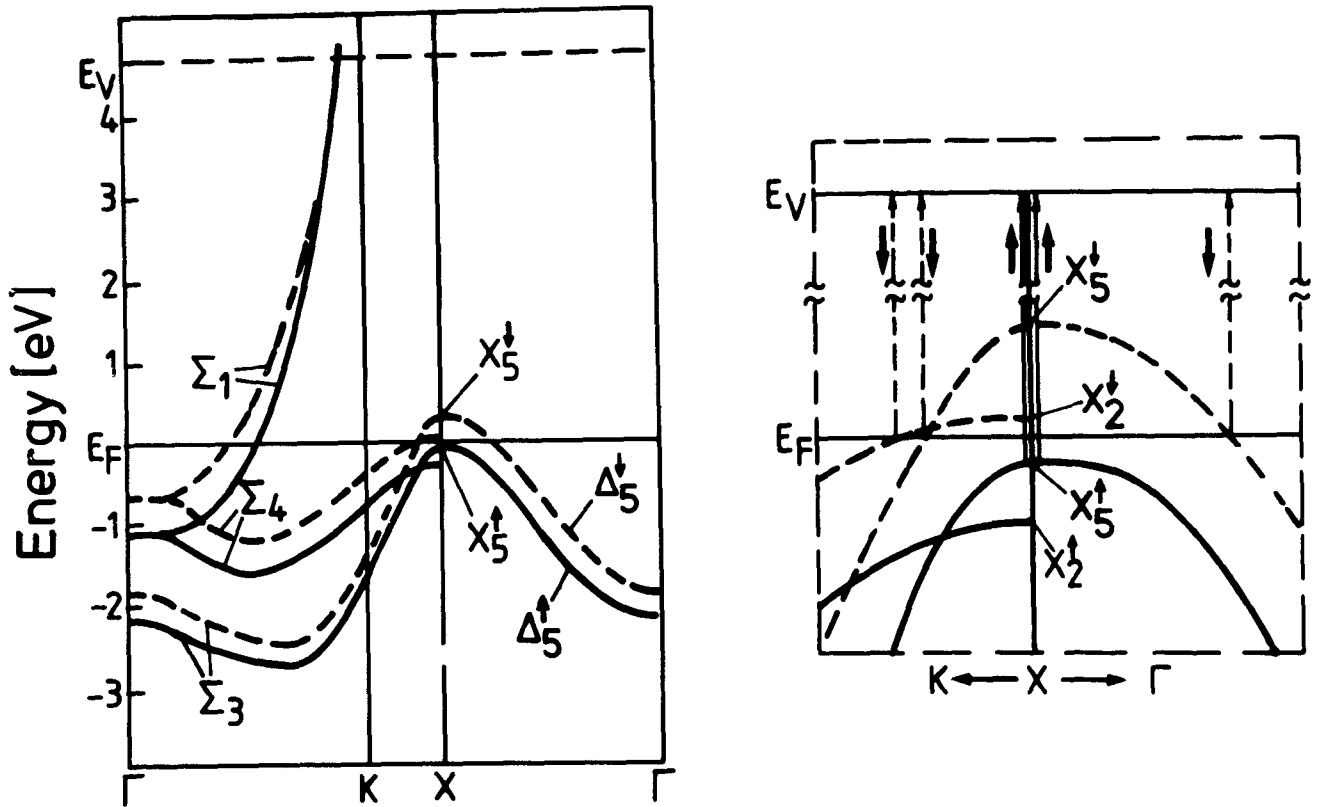


Abb.29 : Halbempirische Bandstruktur von Ni entlang der Σ - und der Δ - Richtung (nach Ref.11). Es sind nur die nach den Auswahlregeln für Dipol-Strahlung erlaubten Bänder für s-polarisierte Photonen und senkrechte Emission eingezeichnet. Der rechte Teil ist eine Ausschnittvergrößerung des Bereichs um den X-Punkt nahe E_F

Minoritätsband Elektronen emittiert werden, mißt man an dieser Stelle eine stärker negative Polarisation für die (110)- Fläche (auf die Bedeutung der Lichtpolarisation für diese Messungen wurde bereits in Abschn. II,B 3 hingewiesen; in dem hier diskutierten Fall waren die Photonen unpolarisiert). Der Grund dafür, daß bei keiner der Messungen direkt bei der Schwellenenergie der theoretisch geforderte Polarisationsgrad von -97 % beobachtet wurde, liegt teilweise an der Lebensdauer- Verbreiterung der besetzten Zustände und vor allem an der Bandbreite des verwendeten Lichtes ΔE von etwa 50 meV (vgl. Abschn. III,F 5). Da das Stoner- gap von ungefähr der gleichen Größe ist, werden an der Photoschwelle auch Majoritäts- Elektronen angeregt, deren Zustandsdichte am $X_5^\uparrow$ - Punkt relativ hoch ist. Unter der Annahme, daß die Emission aus dem $\Sigma_3^\downarrow$ - und dem $\Sigma_4^\downarrow$ - Band jeweils genauso groß ist wie aus dem $\Delta_5^\downarrow$ - Band, und aus dem $\Sigma_3^\uparrow$ - Band genauso groß wie aus dem $\Delta_5^\uparrow$ - Band (experimentelle Gegebenheiten, Übergangs- Matrixelemente usw. als gleich

vorausgesetzt), würde man an der (110)- Fläche einen Schwellen-Polarisationswert von -60 % anstelle von -30 %, wie an der (001)- Fläche, erwarten. Außerdem sollte die crossover- Energie bei der (110)- Kurve einen größeren Wert annehmen. Wie man anhand der Abb. 20 (S.51) leicht nachprüft, stimmen diese Aussagen recht gut mit dem experimentellen Befund überein.

Im Gegensatz zur [001]- und [111]- Richtung, wo in der Nähe der Vakuum-Energie E_v keine reellen Endzustände existieren (daher Beschreibung der Photoemissions- Meßergebnisse durch die bandgap- Emission), gibt es in der [110]- Richtung ein solches Endzustands- Band mit Σ_1 - Symmetrie, das etwa am K-Punkt das Vakuum- Niveau überquert (Abb. 29). Nach Dempsey et al. (66) sollte sich hierdurch ein Unterschied zwischen den entsprechenden Polarisationskurven ergeben. Nun ist jedoch dieses Endzustands- Band für Photonenenergien bis 0,5 eV oberhalb der Schwelle höchstens durch Übergänge vom X-Punkt in die Nähe des K-Punktes, also nur durch indirekte Übergänge, zu erreichen. Da die Wahrscheinlichkeit für solche Übergänge im allg. aber geringer ist als für direkte, die gemessenen Detektor- Zählraten dagegen relativ hoch sind, läßt sich die Emission aus der (110)- Fläche im Schwellenenergie- Bereich offenbar auch nur mit einer starken Beteiligung von Oberflächeneffekten erklären. Wegen des Σ_1 - Bandes oberhalb von E_F ist allerdings die Existenz einer Bandlücke und damit auch die Möglichkeit für eine bandgap- Emission auszuschließen. Die Frage, ob hier eventuell Oberflächenzustände eine Rolle spielen, läßt sich im Moment weder aus experimentellen, noch aus theoretischen, vorliegenden Erkenntnissen schlüssig beantworten.

2. Kobalt

Die Bandstruktur von Co ist wegen des hexagonalen Kristallgitters komplizierter als für Ni, da die Anzahl der Bänder hier doppelt so groß ist wie in einem kubisch flächenzentrierten Kristall. Man kann jedoch zeigen (37), daß sich die Energiebänder entlang der [0001]- Richtung in hcp-Co bei der Betrachtung von Übergängen für senkrechte Emission auf eine fcc- Brillouin- Zone (BZ) projizieren lassen. Es sei daran erinnert, daß sowohl die hcp- als auch die fcc- Kristallstruktur dieselbe größtmögliche Packungsdichte gleichartiger Atome darstellt, und daß sich die beiden Strukturen nur durch die räumliche Anordnung bestimmter Atomlagen unterscheiden. Die Grundfläche der hcp- Struktur ist mit der (111)- Fläche der fcc- Struktur identisch, und die Linie entlang $\Gamma\Delta\Delta\Gamma$ in der hcp-BZ (entspricht der [0001]-Richtung des realen

FINAL ENERGY (eV ABOVE E_F)

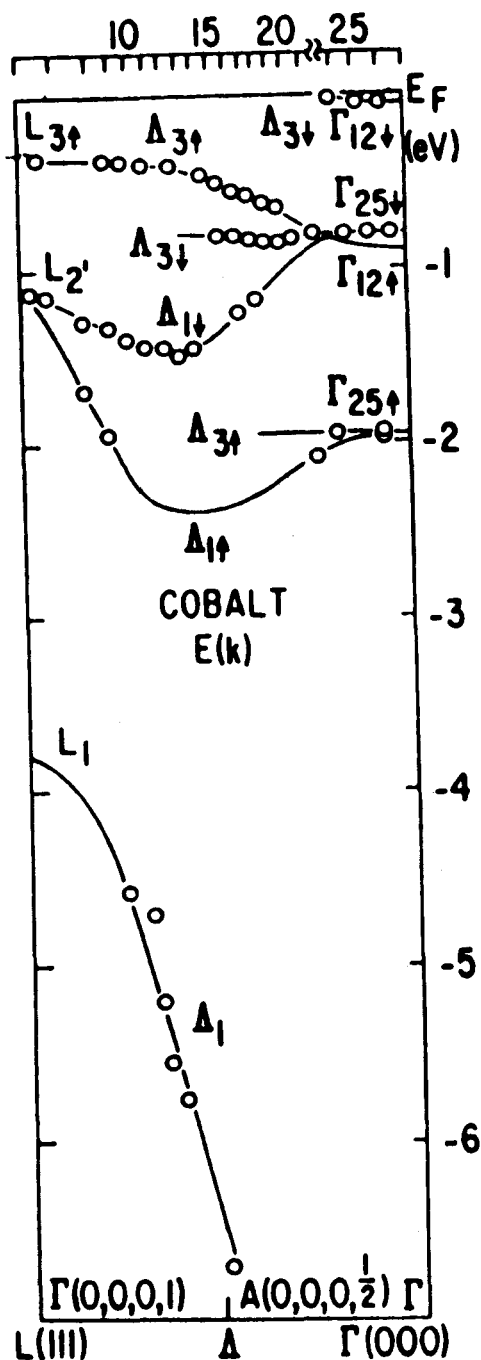


Abb. 30:

Experimentelle Bandstruktur von Co(0001)
(aus Ref. 37)

Raums) korrespondiert zu der $\Gamma\Delta L$ -Linie in der fcc-BZ. Nach den Dipol-Auswahlregeln sind nur Übergänge zwischen Zuständen erlaubt, die in der Bezeichnungsweise der fcc-BZ gleiche Symmetrie haben, also nicht etwa Übergänge zwischen Γ - und L-Zuständen. Durch diese Klassifizierung der hcp-Bandstruktur im Schema der fcc-BZ vereinfacht sich der Vergleich mit entsprechenden Ni-Daten. Abb. 30 zeigt die experimentell ermittelten Energiebänder von hcp-Co nach Ref. 37 (vgl. auch Ref. 67) entlang der [0001]-Richtung, die zu der [111]-Richtung in der fcc-BZ korrespondiert (dabei sind beide Arten von Symmetrie-Bezeichnungen angegeben). Bei dieser Darstellungsweise wird eine Ähnlichkeit mit dem Ni(111)-Bandschema erkennbar. In Tabelle V wird die Lage einiger kritischer Punkte mit den Ergebnissen der Bandstruktur-Rechnungen von Moruzzi et al. (4) verglichen. Dabei zeigen sich wesentliche Unterschiede z.B. bezüglich der relativen Lage des $L_3^\uparrow$ - und $L_2^\uparrow$ -Punktes, der Austausch-Aufspaltung der Γ_{12} -Zustände und der Existenz einer "Elektronen-Tasche"

dicht unterhalb von E_F nahe bei Γ .

Die im Bereich der Photoschwelle gemessene Spinpolarisation an der (0001)-Fläche von Co (Abb. 21, S. 54) sollte eine weitere Möglichkeit bieten, die Bandstruktur in der Nähe von E_F zu testen. Um zu prüfen, inwieweit diese experimentelle ESP-Kurve mit der Bandstruktur in Abb. 30 konsistent ist, sind allerdings genauere Photoemissions-Rechnungen

	$L_3^{\uparrow}$	L_2'	$\Gamma_{12}^{\downarrow}$	$\Gamma_{12}^{\uparrow}$	$ \Gamma_{12}^{\uparrow} - \Gamma_{12}^{\downarrow} $	$\Gamma_{25}^{\downarrow}$	$\Gamma_{25}^{\uparrow}$	$ \Gamma_{25}^{\uparrow} - \Gamma_{25}^{\downarrow} $
E ^{a)}	0,35	1,12	0,05	0,9	0,85	0,8	1,96	1,16
M ^{b)}	0,53	0,23	-0,22	1,14	1,36	1,43	2,65	1,22

a) Eastman et al., Ref. 37

b) Moruzzi et al., Ref. 4

Tab. V: Experimentell (a) und theoretisch (b) bestimmte Lage einiger kristalliner Punkte der Co-Bandstruktur (angegeben in Bindungsenergien (eV) bzgl. $E_F = 0$)

erforderlich, die zur Zeit durchgeführt werden (68). An dieser Stelle soll daher nur ein einfacher qualitativer Vergleich angestellt werden. Offenbar hängt der Verlauf der Polarisationskurve in dem Bereich bis etwa 0,5 eV oberhalb der Schwellenenergie ganz entscheidend von der genauen energetischen Lage des $L_3^{\uparrow}$ -Punktes und der $\Lambda_3^{\downarrow}$ -Elektronen-Tasche ab. Bei sehr schmaler Bandbreite der eingestrahlten Photonenenergie würde man nach Abb. 30 an der Schwelle eine negative Elektronen - Polarisation erwarten. Die tatsächlich gemessenen positiven Werte könnten auf Kontaminations- Effekte (die Meßzeit war wegen der geringen PE- Ausbeute etwa dreimal so lang wie beim Ni) und/ oder auf eine Lebensdauer- Verbreiterung und eine hohe Zustandsdichte des $\Lambda_3^{\uparrow}$ -Majoritätsbandes in der Nähe des $L_3^{\uparrow}$ -Punktes zurückzuführen sein. Auch für den übrigen Teil des $\Lambda_3^{\uparrow}$ -Bandes und für das am $\Gamma_{25}^{\downarrow}$ -Punkt beginnende $\Lambda_3^{\downarrow}$ -Band spielen die beiden genannten Größen bei der Deutung der ESP- Kurve eine wichtige Rolle. Das relative Minimum im Verlauf der ESP bei 1,2 eV oberhalb der Schwelle wird vermutlich durch die Emission aus dem sehr flachen $\Lambda_3^{\downarrow}$ -Band mit einer demzufolge hohen Zustandsdichte verursacht. Der von Himpsel und Eastman (69) an Co(0001) beobachtete intrinsische Oberflächenzustand bei -0,3 eV bezüglich E_F trägt wegen seiner Λ_1 -Symmetrie bei Verwendung von s-polarisiertem Licht nicht zur Emission bei (vgl. Ref.22).

Im Fall der Co(10 $\bar{1}$ 0)- Fläche (die zugehörige Oberflächennormale korrespondiert zur $\Gamma\bar{1}M$ -Richtung der hcp- Brillouin- Zone, s. Abb. 4b, S.7) ist die augenblickliche Situation noch undurchsichtiger. Es hat zwar den Anschein, als würden die Meßwerte (Abb.22, S.54) wegen der (schwach) negativen Polarisation an der Photoschwelle und des schnellen

Übergangs zu positiven Werten den Vorhersagen des SWS- Modells für einen starken Ferromagneten eher entsprechen als der Verlauf der (0001)- ESP- Kurve, jedoch sind auch in diesem Fall für eine rigorose Deutung Berechnungen der Photoemissions- Intensitäten erforderlich.

Geht man davon aus, daß Co ein starker Ferromagnet ist (vgl. Abschn. II,A) -- dies wird von allen bisherigen Theorien vorausgesagt und neben den ARPES- Daten in Abb. 30 auch durch Neutronen- Streuversuche bestätigt -- so lassen die hier gezeigten ESP- Ergebnisse an beiden untersuchten Kristallrichtungen auf einen sehr kleinen Wert für das Stoner- gap schließen: $\delta \lesssim 30$ meV. Nimmt man ferner einen flachen Verlauf der betreffenden Energiebänder an, so ergäbe sich (grob betrachtet) auch für die Austausch- Aufspaltung ein kleiner Wert. Beide Aussagen stehen im deutlichen Widerspruch zur Theorie, die sich weitgehend an der experimentell ermittelten Zahl von Bohrschen Magnetonen/ Atom orientiert (s. II,A) und für Co sogar ein größeres δ und Δ_{ex} voraussagt als für Ni (vgl. Tab.IV, S.65 und Tab.V, S.69).

C. Temperatur- Abhängigkeit der Austausch- Aufspaltung

Die einfache SWS- Bandtheorie sagt voraus, daß die Austausch- Aufspaltung proportional zur Magnetisierung ist und beim Erreichen des Curie- Punktes T_c verschwindet. Es sollte demnach möglich sein, durch die Untersuchung von Temperatureffekten und deren Auswirkungen auf die d-Bandstruktur zusätzliche Information über die Gültigkeit des SWS- Modells zu gewinnen.

Die bisher vorliegenden experimentellen Daten erlauben noch keine eindeutige Aussage über das Verhalten von Δ_{ex} als Funktion von T. Aus der gemessenen Temperaturabhängigkeit der Photoelektronen- Polarisation an Ni (s. Abb.23, S.55) geht hervor, daß die durch die Austausch- Wechselwirkung hervorgerufene parallele Anordnung der Spins -- gemittelt über den untersuchten Probenbereich -- für $T \rightarrow T_c$ verschwindet. Andererseits deuten Ergebnisse aus ARPES- Messungen darauf hin, daß auch oberhalb von T_c eine Austausch- Aufspaltung existiert. Abb. 31 zeigt die von Eastman et al. (36) an Ni gemessene Temperaturabhängigkeit von Δ_{ex} in dem Bereich $293 \text{ K} \leq T \leq 793 \text{ K}$ (Kurve 1). Die Austausch-

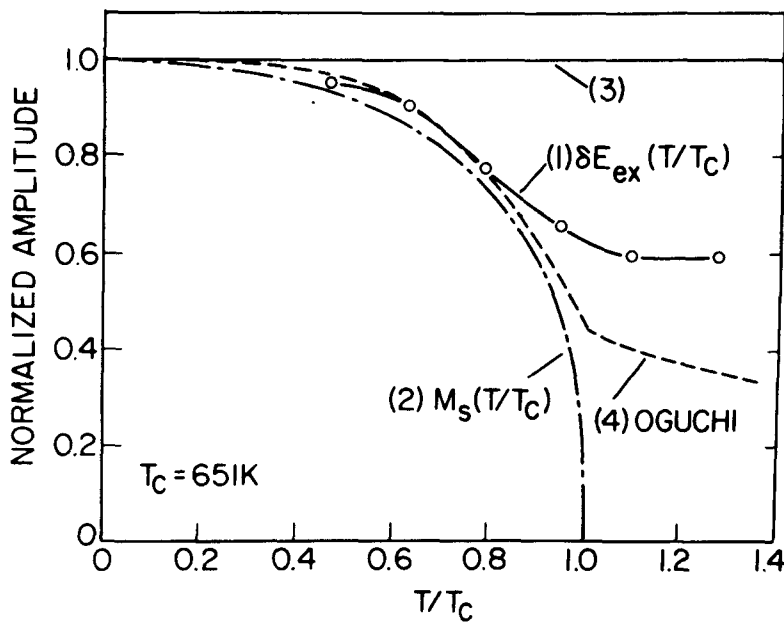


Abb. 31:

Experimentelle, temperaturabhängige d-Band-Aufspaltung von Ni (Kurve 1) und Vergleich mit einigen theoretischen Modellen (aus Ref. 18)

Aufspaltung nimmt mit steigender Temperatur nicht im gleichen Maße ab wie die spontane Magnetisierung (Kurve 2), sondern behält auch für $T > T_c$ noch etwa 60 % des auf $T=0$ extrapolierten Wertes bei (dies wird von den Autoren als obere Abschätzung angegeben). Die Bestimmung von Δ_{ex} aus den ARPES - Meßkurven ist jedoch mit großen Unsicherheiten behaftet, und so ist die Größe von Δ_{ex} oberhalb von T_c experimentell noch ein strittiger Punkt. Sie wird z.B. von Gerhardt (70) als nur etwa halb so groß abgeschätzt wie in Abb. 31 angegeben. Unabhängig von den genauen Zahlenwerten wäre eine (experimentell gesicherte) nicht verschwindende Austausch- Aufspaltung oberhalb von T_c ein Beweis dafür, daß dort in räumlich eng begrenzten Bereichen noch eine magnetische Ordnung existiert (s. Abb.31, Kurve 4: Vergleich mit Spinkorrelations- Funktion von Oguchi). Im Gegensatz zu den ARPES- Daten geben die Messungen der Photo-ESP Aufschluß über die langreichweitigen Ordnungsverhältnisse.

Die Tatsache, daß die mit der $P(T)$ - Kurve in Abb. 23 gemessene Curie- Temperatur mit der des Volumenmaterials übereinstimmt, belegt, daß sich die Oberflächenschicht von ungefähr $15 \text{ \AA}$ Dicke, die man bei einer Photonenenergie von 7 eV untersucht, bezüglich ihrer magnetischen Fernordnung bereits so verhält wie das Volumenmaterial.

Abschließend sei auf eine kürzlich erschienene Arbeit von Korenman und Prange (71) hingewiesen. Darin wird eine Definition von Δ_{ex} als

Energieaufspaltungs- Parameter vorgeschlagen, der proportional zur lokalen Magnetisierung ist. Mit dieser Definition gelingt es, im Rahmen der lokalen Bandtheorie experimentelle Ergebnisse zu beschreiben, wobei der genannte Parameter als konstant bzw. sogar mit der Temperatur leicht ansteigend angenommen wird.

VI. Wichtigste Ergebnisse und Ausblick

Für die in dieser Arbeit beschriebenen Messungen der Spinpolarisation von Photoelektronen an einkristallinen Nickel- und Kobaltproben wurde eine neuartige Ultrahochvakuum- Apparatur aufgebaut, mit der folgende Ergebnisse erzielt wurden:

- a) Nickel: Die Polarisation von Elektronen, die aus Zuständen sehr dicht am Fermi- Niveau angeregt werden, ist bei allen drei niedrig indizierten Kristallflächen (001), (110) und (111) negativ. Die Größe für die Austausch- Aufspaltung Δ_{ex} (und das Stoner- gap δ), die sich gemäß theoretischer Betrachtungen der elektronischen Struktur von Ni mit den experimentellen Daten an Ni(001) und -(111) in Einklang bringen läßt, ist um den Faktor $\frac{1}{2}$ bis $\frac{1}{3}$ ($\frac{1}{3}$ bis $\frac{1}{6}$) kleiner als die aus den besten selbstkonsistenten Rechnungen erhaltenen Werte. Dies wird als eindeutiger Beweis für den Einfluß von Vielteilchen- Effekten angesehen. Im Gegensatz dazu weisen erste Berechnungen der Polarisation an Ni(110) keine befriedigende Übereinstimmung mit den Meßkurven auf. Die Rolle von Oberflächenzuständen muß hier theoretisch weiter untersucht werden.
- b) Aus dem Verhalten der an Ni(111) mit $h\nu \approx 7$ eV gemessenen Elektronen- Polarisation über einen größeren Temperaturbereich bis $T > T_c$ kann man schließen, daß sich die untersuchte Oberflächenschicht von etwa 15 Å Dicke bezüglich ihrer magnetischen Eigenschaften bereits so verhält wie das Innere des Materials.
- c) Kobalt: Die an der Photoschwelle gemessene schwach negative Polarisation an der (10 $\bar{1}$ 0)- Fläche spricht dafür, daß Co ein starker Ferromagnet ist, in Übereinstimmung mit theoretischen Aussagen. Der Wert für das Stoner- gap muß dagegen viel kleiner sein, als von der Theorie vorausgesagt wird. Eine quantitative Deutung der Meßergebnisse kann ebenso wie im Fall der Co(0001)- Polarisation nur

mit Hilfe genauerer Rechnungen erfolgen. Diese sind zur Zeit im Gange.

d) Erste Experimente zur spinpolarisierten Photoemission an 3d-Ferromagneten bei höheren Photonenenergien (bis 40 eV) konnten am Speicherring ACO in Orsay (Frankreich) erfolgreich durchgeführt werden. Hierdurch ergeben sich in Verbindung mit der transversalen Probengeometrie (vgl. Abschn. III,B 1) sehr vielfältige Möglichkeiten für ESP- Untersuchungen mit differentieller Winkel- und Energieauflösung.

Experimente zur Untersuchung der 3d-Bänder und ihrer Austausch-Aufspaltung bei höheren Bindungsenergien sowie die ESP- Messung an der Satellitenstruktur, die im Photoemissionsspektrum von Ni für $h\nu \gtrsim 25$ eV bei einer Bindungsenergie von etwa 6 eV auftritt (72), sind jetzt im Prinzip möglich. Aus Messungen der Photoelektronen- Polarisation mit variabler Photonenenergie über einen größeren Energiebereich und mit der Proben temperatur als Parameter wird man wegen der energieabhängigen Austrittstiefe der Elektronen Information über die temperaturabhängige Oberflächenmagnetisierung von Ferromagneten gewinnen können (Oberflächenmagnetismus).

ANHANG

VII. Feldemission aus ferromagnetischem
Europiumsulfid auf Wolfram

A. Einführung

Der bei den Photoemissions- Experimenten verwendete Mott- Analysator zur Bestimmung des Elektronenspins ist, ebenso wie die übrige Apparatur, neu konzipiert und aufgebaut worden. Es war daher notwendig, seine Funktionsweise vor Beginn der Messungen mit Hilfe einer Quelle polarisierter Elektronen zu eichen. Dazu wurde ein mit Europiumsulfid bedampfter Wolfram- Feldemitter benutzt, von dem bekannt ist, daß er unter bestimmten Bedingungen Elektronen mit hohem Polarisationsgrad (bis zu 95 % wurden bisher gemessen) emittiert (73,74). Da die für den Mott- Analysator- Test aufgebaute experimentelle Anordnung mit geringfügigen Änderungen gleichermaßen für die Untersuchung magnetischer Eigenschaften des EuS bzw. der W/EuS- Grenzschicht geeignet ist, wurde damit der Emissionsstrom als Funktion der Spitzentemperatur und die Elektronen- Polarisation untersucht. Über die Messungen und Ergebnisse (zum Teil bereits in Ref.75,76 veröffentlicht) soll in diesem Abschnitt berichtet werden.

EuS gilt als typischer Heisenberg- Ferromagnet mit einer Curie- Temperatur von 16,5 K (Grundzustand der 4f- Schale der Eu^{2+} - Ionen: $^8\text{S}_{7/2}$). Zur Untersuchung magnetischer Eigenschaften dünner EuS-Filme bieten sich verschiedene Möglichkeiten an wie z.B. die in solchen Fällen wohl gebräuchlichste Messung der makroskopischen Sättigungs- Magnetisierung oder auch optische Untersuchungsmethoden (siehe z.B. in Ref.77). Das hier verwendete Meßverfahren mit Hilfe der Feldemission ist ein besonders geeignetes Mittel für die Beobachtung solcher Magnetismus- Phänomene auf mikroskopischer Ebene.

B. Experimenteller Aufbau und Meßergebnisse

Für die Präparation der Emissions- Spitze durch Aufdampfen von EuS im Ultrahochvakuum auf eine saubere einkristalline W-Spitze, die durch Ätzen auf elektrochemischem Wege hergestellt wurde, und durch anschließendes Tempern der erhaltenen Schicht ist höchste Sorgfalt erforderlich, da die magnetischen Eigenschaften des Materials von den bei diesen Prozessen herrschenden Bedingungen in starkem Maße abhängen. Legt man an die so vorbereitete Spitze ein negatives Potential, so entsteht innerhalb der EuS-Schicht infolge der nicht vorhandenen freien Ladungsträger ein für Elektronen von innen nach außen verlaufendes Potentialgefälle, das eine Neigung der Energieniveaus im Bandschema des EuS bewirkt (s. Abb.32). Bei entsprechend hoher Feldstärke können Elektronen mit Energien nahe E_F aus dem Leitungsband des Wolframs die Potentialbarriere der Höhe ϕ_i in der Grenzschicht zwischen W und EuS durchtunneln und in das leere EuS- Leitungsband gelangen. Die Größe des emittierten Stromes wird in erster Linie durch die Höhe dieser Barriere bestimmt, da die zweite Potentialschwelle an der Grenzfläche zum Vakuum wegen der Neigung der Energiebänder deutlich unterhalb der Fermi-Energie des Wolframs liegt. Diese zweite Schwelle ist andererseits jedoch hoch genug, um eine Emission aus den obersten besetzten Elektronenniveaus des EuS, den 4f- Zuständen, zu verhindern.

Der für die Messung des Feldemissions-Stroms in Abhängigkeit von der Spitzentemperatur $I(T)$ verwendete experimentelle Aufbau ist in Abb. 33

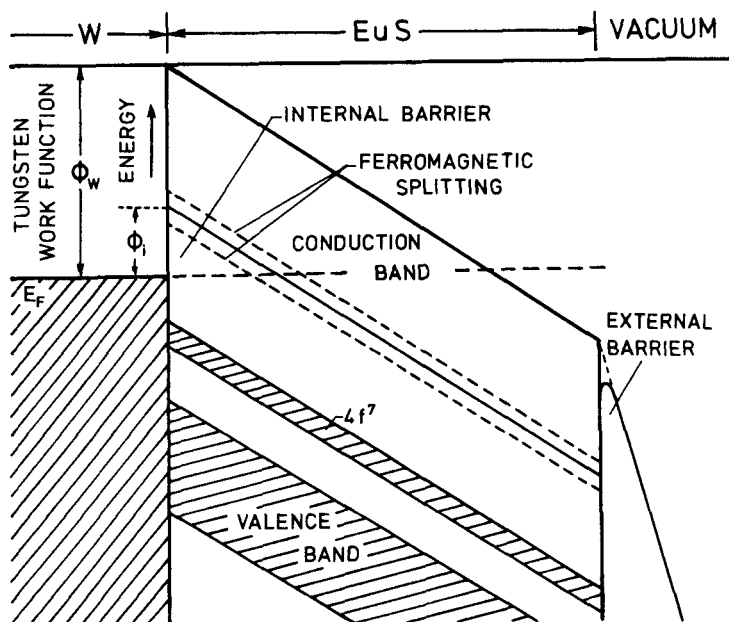


Abb. 32:
Vereinfachtes Bandschema
für den W/EuS- Feldemit-
ter bei angelegtem elek-
trischen Feld

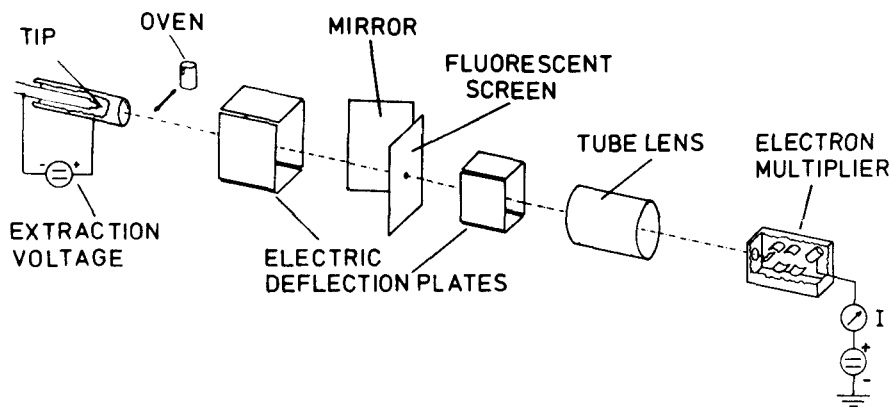


Abb. 33:
Feldemissions-Appa=
ratur zur Untersu=
chung magnetischer
Eigenschaften von
W/EuS-Feldemittern

dargestellt. Bei den ESP- Messungen wird der Elektronen- Vervielfacher durch den Mott- Analysator ersetzt. Die Feldemissions- Spitze ist an einem Kühlfinger befestigt, der durch Verdampfung von flüssigem Helium eine Abkühlung bis hinunter auf 4 K ermöglicht. Die Einstellung von Temperaturwerten oberhalb von 4 K konnte gegenüber dem ursprünglichen Verfahren (78) hinsichtlich der Temperaturstabilität dadurch verbessert werden, daß der Wärmeaustauscher mit Hilfe eines daran befestigten Kohlewiderstandes elektrisch geheizt wird, während diese Regelung in früheren Experimenten durch Verringerung des He-Flusses erfolgte. Als Temperatur- Meßfühler dient ein speziell für diese Zwecke geeigneter Kohlewiderstand, der sich in gutem Wärmekontakt zu dem die Spitze tragenden W-Drahtbügel befindet, und dessen R-Werte als Funktion von T genau bekannt sind.

Für das Aufdampfen der EuS-Schicht wird ein durch Elektronenbeschuß geheizter Wolfram- Ofen vor die Spitze geschwenkt. Aus Vorversuchen sind die Bedingungen bekannt, unter denen sich bestimmte Schichtdicken (hier im Bereich mehrerer hundert Å) erzielen lassen. Während des Aufdampfprozesses braucht keine bestimmte Spitzen- Temperatur eingehalten zu werden, da es sich gezeigt hat, daß der Verlauf der $I(T)$ - Kurven in viel stärkerem Maße von der Temperatur und der Zeitdauer des nachfolgenden Temperns abhängig ist. Zur Vermeidung einer möglichen Zerstörung der Spitze und wegen der empfindlichen Abhängigkeit der beobachteten Meßgrößen von der Art des Temperns wird dieser Vorgang mit Hilfe eines Mikroprozessors gesteuert, der neben der Zeitdauer (üblicherweise wenige Sekunden bis zu Sekunden- Bruchteilen) auch die Temper- Temperatur durch Regelung des Heizstroms kontrolliert (76,79).

Der größte Teil der emittierten Elektronen kann mit Hilfe eines nicht-radialen elektrischen Feldes und eines longitudinalen Magnetfeldes am

Ort der Spitze auf einen Leuchtschirm gelenkt werden, wo auf diese Weise die emittierten Strahlen aus verschiedenen Kristallflächen zu erkennen sind. Ein elektrostatisches Ablenkssystem vor dem Leuchtschirm erlaubt es, einen bestimmten Strahl dieses Feldemissions- Musters durch ein Loch in der Mitte des Leuchtschirms zu lenken und so der weiteren Messung zuzuführen. Ein zweites Ablenkssystem hinter dem Schirm und eine Rohrlinse dienen zur Justierung und Fokussierung des Elektronenstrahls auf die Eintrittsöffnung des sich anschließenden Nachweissystems.

Die Aufzeichnung der $I(T)$ - Abhängigkeit erfolgt mit Hilfe eines X/Y-Recorders, an dessen X- bzw. Y- Eingang ein der Temperatur T bzw. dem Emissionsstrom I proportionales elektrisches Signal angelegt wird. Das X-Signal liefert dabei ein Analog- Dividierer, der den R -Wert des oben erwähnten Kohle- Meßwiderstands aus der Messung von Spannung und Strom ermittelt und an einen Rechner weitergibt. Hier wird anhand der $R(T)$ - Charakteristik die zugehörige Temperatur bestimmt und dieser Wert schließlich über einen Digital/ Analog- Wandler an den X/Y- Recorder weitergegeben. Das Y-Signal wird direkt von einem an den Elektronen- Vervielfacher angeschlossenen Elektrometer erzeugt.

Aus früheren Messungen (74) ist bekannt, daß die Werte für den Emissionsstrom I mit zunehmender Temperatur bei Annäherung an den Curie-Punkt T_c eine starke Abnahme aufweisen, sofern in dem vorangehenden Temperprozeß bestimmte, eng begrenzte Bedingungen eingehalten wurden. Die Änderung des Stromes kann dabei durch ein Fenster in der Apparatur beobachtet werden, und zwar äußert sie sich in dem Verschwinden der (bei $T < T_c$ gut sichtbaren) Leuchtpunkte auf dem Fluoreszenzschirm für $T > T_c$. Dieses Verhalten ist nun in systematischer und quantitativer Weise untersucht worden, und aus den Ergebnissen wurde Information über den Tunnelprozeß der Elektronen und über magnetische Eigenschaften von EuS und der W/EuS- Grenzschrift gewonnen. Der Verlauf der $I(T)$ - Kurven für verschiedene Temperaturen T_a beim Temper- Vorgang ist in Abb. 34 dargestellt. Für $T_a \approx 500$ K ist die T -Abhängigkeit des Emissionsstroms nur sehr schwach ausgeprägt (Teil (a) der Abb. 34). Dagegen ändert sich der Strom für $T_a \approx 800$ K (durchgezogene Kurve in Teil (b)) in der Nähe von 16 K um das 200-fache und nimmt oberhalb von T_c sehr kleine Werte an. Bei nur geringfügiger Erhöhung von T_a auf etwa 900 K ist die Stromänderung bereits wieder deutlich schwächer wie man aus Teil (c) der Abbildung entnehmen kann, und für noch höhere Temper- Temperaturen zeigen

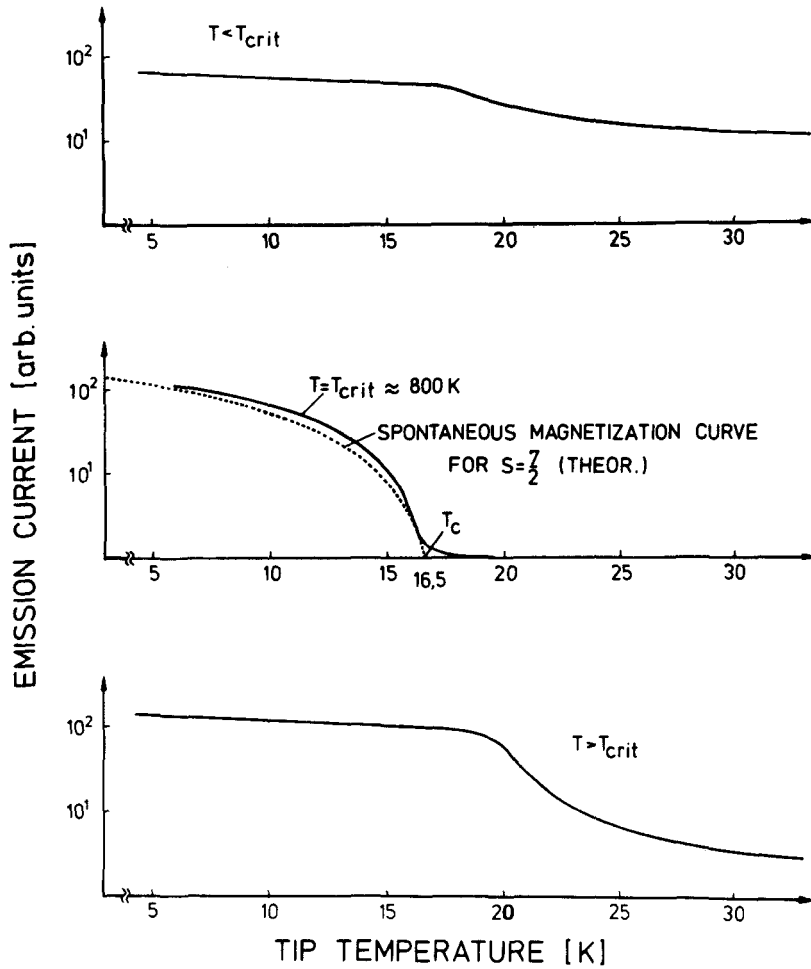


Abb. 34:

Abhängigkeit des Feld=
emissionsstroms von
der Spitzen-Temperatur
für verschiedene
Temper-Temperaturen
(I- Skala logarithmisch !)

die $I(T)$ - Kurven sogar einen völlig flachen Verlauf (in der Zeichnung nicht dargestellt). Anhand des Feldemissions- Bildes auf dem Leuchtschirm in der Apparatur ist zu erkennen, daß die hier untersuchten Elektronen aus den (112)- Flächen der in der $[111]$ -Richtung orientierten W-Spitze emittiert werden. Mit zunehmender angelegter Spannung setzt die Emission aus diesen Flächen eher ein als aus anderen noch vorhandenen Flächen an der Spitze, und man beobachtet zuerst nur einen dieser (112)- Reflexe in Form eines hellen, scharfen Leuchtflecks und bei etwas höherer Spannung auch die beiden übrigen in der zu erwartenden dreieckförmigen Anordnung (vgl. Ref.74). Das Durchfahren des Temperaturbereiches während der $I(T)$ - Messungen erfolgt einfach durch Abschalten des He-Flusses, nachdem die Spitze damit auf etwa 4 K abgekühlt worden ist. Sie erwärmt sich daraufhin von selbst und erreicht den Endwert des gemessenen Bereiches von etwa 35 K innerhalb einiger Sekunden.

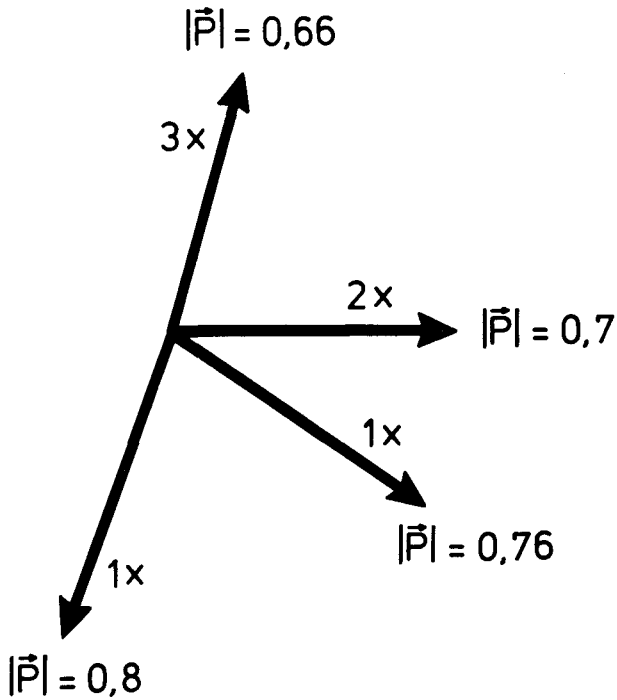


Abb. 35:

Änderung der Elektronen- Spinpolarisation nach jeweiliger Erwärmung der W/EuS- Spitze auf $T > T_c$ und anschließender Abkühlung

In einer weiteren Meßreihe ist an einer bei $T_a \approx 800$ K getemperten Spitze die transversale Polarisation eines (112)- Reflexes nach Betrag und Richtung bei jeweils derselben Spitzen- Temperatur mehrfach gemessen worden, wobei die Spitze jedoch zwischen jeder Messung bis oberhalb der Curie- Temperatur erwärmt und anschließend auf denselben vorherigen Wert wieder abgekühlt wurde. Die Pfeile in Abb. 35 geben die Richtung und den Betrag der so erhaltenen Elektronen- Polarisation an. Daneben ist jeweils die Häufigkeit eingezeichnet, mit der die betreffenden Werte im Laufe dieser Meßreihe aufgetreten sind.

Es soll hier noch kurz auf einen Effekt eingegangen werden, der im Zusammenhang mit den soeben beschriebenen Untersuchungen beobachtet wurde. Er besteht darin, daß der Verlauf des Emissionsstroms aus den (112)- Flächen eines W/EuS- Feldemissions- Systems nach einer Temperung bei $T_a \approx 1000$ K bis 1200 K (dadurch entsteht eine amorphe EuS-Schicht, vgl. unten) als Funktion der angelegten Spannung einen reversiblen Hysterese- Effekt aufweist, womit die typische Wirkungsweise einer Speicherzelle gegeben ist, die im vorliegenden Fall besonders wegen ihrer äußerst geringen Größe sehr interessant ist. Erhöht man nämlich bei konstanter Temperatur ($T=5$ K und $T=20$ K) die angelegte Spannung, so steigt der anfangs sehr geringe Strom beim Erreichen eines Schwellenwertes stark an und behält auch beim anschließenden Absenken der Spannung über einen gewissen Bereich (typisch etwa 20 V bei über

600 V angelegter Spannung) den erreichten Wert nahezu unverändert bei. Dieses Verhalten wird mit Hilfe lokalisierter Zustände beschrieben, die in der amorphen EuS- Modifikation in der Bandlücke zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband existieren. Sie sind für das Entstehen einer positiven Raumladung im Bereich der W/EuS- Grenzschrift verantwortlich, die sich oberhalb des genannten Spannungs- Schwellenwertes durch Feldionisation ausbildet und dann den Stromverlauf in Verbindung mit einer negativen Elektronen - Raumladung vor der Vakuumbarriere maßgeblich beeinflusst. Nähere Einzelheiten und weitere Ergebnisse über die Untersuchungen dieses "Memory"- Effektes sowie ein Vergleich mit anderen "Memory"- Strukturen aus amorphen Halbleiter- Materialien sind in Ref. 76 dargestellt.

C. Diskussion der Meßergebnisse:

W/EuS als Spinfilter und "Gedächtniszelle"

In einer früheren Arbeit (74) konnte im Rahmen eines einfachen Modells gezeigt werden, daß zwischen dem Logarithmus des Feldemissions- Stroms und der relativen spontanen Probenmagnetisierung $M_r(T) = M(T)/M(0)$ folgender linearer Zusammenhang besteht:

$$\ln \{I(T)/I(T_c)\} = M(T) \ln \{I(0)/I(T_c)\} \quad (15)$$

Diese Beziehung beruht auf der Annahme, daß der Strom $I(T)$ nur durch die Schottky- Barriere an der W/EuS- Grenzschrift beeinflusst wird. Die Variation in der Höhe und Breite dieser Barriere wird wesentlich von der energetischen Lage der Unterkante des EuS- Leitungsbandes bestimmt, die wiederum von der Größe der Magnetisierung $\vec{M}$ abhängt. Da nun die Magnetisierung eines Materials ein Maß für die bestehende magnetische Ordnung mit großer Reichweite darstellt, setzt die in Gleichung (15) getroffene Annahme voraus, daß die Elektronen während des Tunnelvorgangs nur diese langreichweitige und nicht die durch eine Spinkorrelations- Funktion beschriebene kurzreichweitige magnetische Ordnung (vgl. Abschn. V,C) "spüren". Um zu prüfen, wie weit diese Annahme gerechtfertigt ist, wird die logarithmische Darstellung des Emissionsstromes in Diagramm (b) der Abb. 34 mit der relativen spontanen Magnetisierungskurve von EuS (Brillouin- Funktion für $J=7/2$) verglichen (gestrichelt gezeichnet). Obwohl die Kurvenverläufe sehr ähnlich sind, lassen sich Abweichungen feststellen, die über die experimentelle Fehlerbreite hinausgehen. Die stärkere Abnahme der Meßwerte oberhalb von etwa 12 K bis nahe bei T_c

gegenüber der theoretischen Kurve wird auf die Streuung der Elektronen an Spin-Fluktuationen während des Durchtritts durch die Potentialbarriere zurückgeführt. Diese Art von Streuprozessen wurde erstmalig von Thompson et al. (80) beobachtet und beschrieben. Demnach handelt es sich bei solchen Spin-Fluktuationen um Gruppen benachbarter Spins, die sich bei $T > T_c$ spontan für eine begrenzte Zeit parallel zueinander einstellen und danach wieder in einen Zustand unregelmäßiger Spinstellung zerfallen. In der Umgebung der Curie-Temperatur, wo die Spin-Fluktuationen kontinuierlich in die zeitlich beständige magnetische Fernordnung übergehen, liegen deren räumliche Ausmaße in derselben Größenordnung wie die Dicke der Grenzschicht, und somit ist die Streuwahrscheinlichkeit in diesem Temperatur-Bereich maximal, wodurch sich die oben erwähnten Abweichungen zwischen experimenteller und theoretischer Kurve erklären lassen.

Das Fehlen einer starken temperaturabhängigen Emissionsstrom-Abnahme für Temperaturen oberhalb und unterhalb von 800 K (Kurven (a) und (c) in Abb.34) wird Störstellen und Unordnung in der EuS-Schicht zugeschrieben. Bei dem kritischen Temperaturwert von $T_a \approx 800$ K kann die nach dem Aufdampfen zunächst amorphe EuS-Schicht in einer stöchiometrischen und regelmäßigen Ordnung kristallisieren. Im Fall des höheren oder niedrigeren Temperns sind die Bedingungen für die Bildung einer solchen Schicht offenbar ungünstig. Als Folge davon liegt die Curie-Temperatur dieser Proben höher und die Sättigungsmagnetisierung niedriger. Durch den letztgenannten Effekt vergrößert sich, wie oben bereits ausgeführt wurde, die Höhe ϕ_i der Potentialbarriere in der W/EuS-Grenzschicht. Nun besteht aber zwischen der Tunnel-Stromdichte $j(T)$ und dieser Größe $\phi_i(T)$ nach der Fowler-Nordheim-Gleichung eine starke Abhängigkeit gemäß

$$j(T) \propto 1/\phi_i(T) \cdot \exp \{-b \phi_i(T)^{3/2}\} \quad (\text{mit } b = \text{const.}),$$

wodurch sich die beobachtete schwächere Stromänderung erklären läßt.

Die gemessenen hohen Polarisationswerte der emittierten Elektronen (s. Abb.35) sind darauf zurückzuführen, daß die Höhe der Schottky-Barriere ϕ_i für die beiden Spin-Richtungen sehr unterschiedlich ist. Der Grund dafür ist die energetische Aufspaltung der Elektronen-Energieniveaus infolge der ferromagnetischen Austausch-Wechselwirkung, wodurch sich auch die Unterkante des EuS-Leitungsbandes für Spin-auf-Elektronen nach unten und für Spin-ab-Elektronen nach oben verschiebt.

Nach diesem Modell hätte die Potentialschwelle die Wirkung eines perfekten Spinfilters, da die relative Tunnel- Wahrscheinlichkeit für Spin-ab- Elektronen zu vernachlässigen ist, und die emittierten Elektronen sollten daher vollständig polarisiert sein. Die tatsächlich gemessenen niedrigeren P-Werte lassen sich nach Ref. 74 durch einen Spin- Austausch mit den $4f^7$ - Elektronen (deren Polarisation nur für $T \rightarrow 0$ bei 1 liegt) beim Durchqueren der EuS-Schicht oder auch dadurch erklären, daß der energetisch tiefer liegende Teil des EuS-Leitungsbandes eine Mischung verschiedener Spinzustände enthält, wodurch die Funktion der internen Barriere als perfektes Spinfilter eingeschränkt wird.

Wie die obigen Messungen gezeigt haben (Abb. 35), kann sich die Polarisation $\vec{P}$ eines bestimmten (112)- Reflexes durch vorübergehende Erwärmung auf $T > T_c$ deutlich ändern. Dieses Verhalten ist verständlich, da die Polarisation von der Magnetisierung $\vec{M}$ im Bereich der emittierenden Fläche hervorgerufen wird, die bei $T < T_c$ und einem nur schwachen äußeren Magnetfeld die übliche Domänenstruktur aufweist. Wegen der geringen Größe der emittierenden (112)- Flächen von etwa $100 \times 100 \text{ \AA}^2$ dürfte die Elektronen- Polarisation $\vec{P}$ nur von der Magnetisierung einer einzigen Domäne bestimmt werden. Während des Aufwärm- Vorgangs bis in den paramagnetischen Temperatur- Bereich oberhalb von T_c können sich die Domänen beim Abkühlen jeweils in einer neuen Struktur anordnen, die zum einen Teil durch unveränderliche Gegebenheiten im Innern des Materials (führen zum wiederholten Auftreten bestimmter P-Werte) und zum anderen Teil durch zufällige Parameter bestimmt wird. Der Einfluß des schwachen, zur Strahljustierung benutzten, äußeren Magnetfeldes kann hier vernachlässigt werden. Die teilweise recht hohen Polarisationswerte sind ein Hinweis dafür (vgl. Ref.74), daß die EuS- Magnetisierung tangential zur emittierenden Oberfläche verläuft und somit die Elektronen überwiegend transversal polarisiert sind.

Die vorliegenden Meßergebnisse zeigen am Beispiel von EuS, daß es die Untersuchung der temperatur- (und spannungs-) -abhängigen Feldemission bei gleichzeitiger Messung der Elektronen- Spinpolarisation erlaubt, neue Information über die magnetischen Eigenschaften und die Domänenstruktur des Materials zu gewinnen, das auf die W-Emissions-Spitze aufgedampft wurde.

LITERATURVERZEICHNIS

- 1) S. Wakoh und J. Yamashita, J.Phys.Soc.Jap. 21, S.1712 (1966) und 28, S.1151 (1970)
- 2) C.S. Wang und J. Callaway, Phys.Rev.B 15, S.298 (1977)
- 3) J. Callaway und C.S. Wang, Phys.Rev.B 16, S.2095 (1977)
- 4) V.L. Moruzzi, J.F. Janak und A.R. Williams: Calculated Electronic Properties of Metals, Pergamon, New York (1978)
- 5) E. Marschall und H. Bross, Phys.Stat.Sol.(b) 90, S.241 (1978)
- 6) J.R. Anderson, D.A. Papaconstantopoulos, L.L. Boyer und J.E. Schirber, Phys.Rev.B 20, S.3172 (1979)
- 7) S. Ishida, J.Phys.Soc.Jap. 33, S.369 (1972)
- 8) R.A. Ballinger und E. Marschall, J.Phys.F 3, S.735 (1973)
- 9) F. Batallan, I. Rosenman und C.B. Sommers, Phys.Rev.B 11, S.545 (1975)
- 10) C.M. Singal und T.P. Das, Phys.Rev.B 16, S.5068 (1977)
- 11) N.V. Smith und S. Chiang, Phys.Rev.B 19, S.5013 (1979)
- 12) E.C. Stoner, Proc.Roy.Soc., Ser.A 154, S.656 (1936); 165, S.372 (1938)
- 13) E.P. Wohlfarth, Rev.Mod.Phys. 25, S.211 (1953)
- 14) J.C. Slater, Phys.Rev. 49, S.537 (1936); 49, S.931 (1936)
- 15) U. Bänninger, G. Busch, M. Campagna und H.C. Siegmann, Phys.Rev.Lett. 25, S.585 (1970)
- 16) E.P. Wohlfarth, Phys.Lett. 36a, S.131 (1971); Phys.Rev.Lett. 38, S.524 (1977)
- 17) M. Cardona und L. Ley (Hrsg.): Photoemission in Solids I, Verl. Springer, Berlin (1978)
- 18) A. Liebsch in: Festkörperprobleme XIX, (O. Madelung, H.J. Queisser, J. Treusch, Hrsg.) Verl. Vieweg, Wiesbaden (1979)
- 19) A. Liebsch in: Electron and Ion Spectroscopy of Solids, L. Fiermans, J. Vennik, W. Dekeyser (Hrsg.), Nato Advanced Study Institutes Series, Plenum Press, New York (1978)
- 20) A. Liebsch, Phys.Rev.Lett. 43, S.1431 (1979)
- 21) D.R. Penn, Phys.Rev.Lett. 42, S.921 (1979)
- 22) J. Hermanson, Sol.State Comm. 22, S.9 (1977)
- 23) F.J. Himpsel und D.E. Eastman, Phys.Rev.Lett. 41, S.507 (1978)
- 24) E.W. Plummer und W. Eberhardt, Phys.Rev.B 20, S.1444 (1979)

- 25) W. Eberhardt und E.W. Plummer, Phys.Rev.Lett. 45, S.273 (1980)
- 26) R.J. Celotta, D.T. Pierce, G.-C. Wang, S.D. Bader und G.P. Felcher, Phys.Rev.Lett. 43, S.728 (1979)
- 27) P. Kumar, Phys.Rev.B 10, S.2928 (1974)
- 28) L.N. Liebermann, D.R. Fredkin und H.B. Shore, Phys.Rev.Lett. 22, S.539 (1969)
- 29) L.N. Liebermann, J. Clinton, D.M. Edwards und J. Mathon, Phys.Rev.Lett. 25, S.232 (1970)
- 30) C.S. Wang und A.J. Freeman, Phys.Rev.B 21, S.4585 (1980)
- 31) O.K. Anderson, priv. Mitteilung
- 32) J.N. Chazalviel und Y. Yafet, Phys.Rev.B 15, S.1062 (1977)
- 33) M. Landolt und M. Campagna, Phys.Rev.Lett. 38, S.663 (1977)
- 34) P.J. Feibelman und D.E. Eastman, Phys.Rev.B 10, S.4932 (1974)
- 35) P. Thiry, D. Chandesris, J. Lecante, C. Guillot, R. Pinchaux und Y. Petroff, Phys.Rev.Lett. 43, S.82 (1979)
- 36) D.E. Eastman, F.J. Himpsel und J.A. Knapp, Phys.Rev.Lett. 40, S.1514 (1978)
- 37) D.E. Eastman, F.J. Himpsel und J.A. Knapp, Phys.Rev.Lett. 44, S.95 (1980); Erratum: 45, S.498 (1980)
- 38) J. Keßler: Spin Polarized Electrons, Verl. Springer, Berlin (1976)
- 39) W. Gudat, E. Kisker, E. Kuhlmann und M. Campagna, VUV Conf. Proc. VI, S.104, Charlottesville (1980)
- 40) A. Bringer, M. Campagna, R. Feder, W. Gudat, E. Kisker und E. Kuhlmann, Phys.Rev.Lett. 42, S.1705 (1979)
- 41) W.B. Hermannsfeld, SLAC Rep. 166(A), UC-28 (1973)
- 42) E. Kisker, M. Campagna, W. Gudat und E. Kuhlmann in: Festkörperprobleme (Advances in Solid State Physics), Band XIX, S.259, J. Treusch (Hrsg.), Vieweg, Braunschweig (1979)
- 43) D.T. Pierce, C.E. Kuyatt und R.J. Celotta, Rev.Sci.Instr. 50, S.1467 (1979)
- 44) E. Kisker, W. Gudat, E. Kuhlmann, R. Clauberg und M. Campagna, an Phys.Rev.Lett. eingesandt
- 45) E. Kisker, M. Campagna, W. Gudat und E. Kuhlmann, Rev.Sci.Instr. 50, S.1598 (1979)
- 46) W. Eckstein, IPP-Bericht 7/1 des Instituts für Plasmaphysik in Garching, Garching (1970)
- 47) Diese Arbeiten wurden freundlicherweise im Institut für Materialentwicklung der KFA Jülich ausgeführt

- 48) B.W. Lee, R. Alsensz, A. Ignatiev und M.A. Van Hove, Phys.Rev.B 17, S.1510 (1978)
- 49) J.W. Motz, H. Olsen und H.W. Koch, Rev.Mod.Phys. 36, S.881 (1964)
- 50) V.W. Hughes, R.L. Long, M.S. Lubell, M. Posner und W. Raith, Phys.Rev.A 5, S.195 (1972)
- 51) W. Eib und S.F. Alvarado, Phys.Rev.Lett. 37, S.444 (1976)
- 52) E. Kisker, W. Gudat, M. Campagna, E. Kuhlmann, H. Hopster und I.D. Moore, Phys.Rev.Lett. 43, S.966 (1979)
- 53) W. Gudat, E. Kisker, E. Kuhlmann und M. Campagna, Phys.Rev.B 22, S.3282 (1980)
- 54) F.J. Himpsel, J.A. Knapp und D.E. Eastman, Phys.Rev.B 19, S.2919 (1979)
- 55) D.M. Edwards, Inst.of Phys.Conf.Proc.: 'Transition Metals' 39, S.279 (1977), und darin zitierte Literaturstellen
- 56) D.G. Dempsey und L. Kleinman, Phys.Rev.Lett. 39, S.1297 (1977)
- 57) I.D. Moore und J.B. Pendry, J.Phys.C 11, S.4615 (1978)
- 57a) I.D. Moore, Solid State Comm. 32, S.907 (1979)
- 58) S. Wakoh, J.Phys.Soc.Jap. 20, S.1894 (1965)
- 59) E.J. Zornberg, Phys.Rev.B 1, S.244 (1970)
- 60) P. Heimann und H. Neddermeyer, J.Phys.F (Metal Phys.) 6, S.L257 (1976)
- 61) E. Dietz, U. Gerhardt und C.J. Maetz, Phys.Rev.Lett. 40, S.892 (1978)
- 62) P.W. Anderson, Phil.Mag. 24, S.203 (1971)
- 63) S. Doniach, AIP Conf.Proc. 5, S.549 (1972)
- 64) W. Baltensperger, Helv.Phys.Acta 45, S.203 (1972)
- 65) J.A. Hertz und D.M. Edwards, J.Phys.F 3, S.2174 (1973)
- 66) D.G. Dempsey, W.R. Grise und L. Kleinman,, Phys.Rev.B 18, S.1270 (1978)
- 67) F.J. Himpsel und D.E. Eastman, Phys.Rev.B 21, S.3207 (1980)
- 68) I.D. Moore, wird veröffentlicht
- 69) F.J. Himpsel und D.E. Eastman, Phys.Rev.B 20, S.3217 (1979)
- 70) U. Gerhardt, priv. Mitteilung
- 71) V. Korenman und R.E. Prange, Phys.Rev.Lett. 44, S.1291 (1980)
- 72) C. Guillot, Y. Ballu, J. Paigné, J. Lecante, K.P. Jain, P. Thiry, R. Pinchaux, Y. Petroff, und L.M. Falicov, Phys.Rev.Lett. 39, S.1632 (1977)
- 73) G. Baum, E. Kisker, A.H. Mahan, W. Raith und B. Reihl, Appl.Phys. 14, S.149 (1977)
- 74) E. Kisker, G. Baum, A.H. Mahan, W. Raith und B. Reihl, Phys.Rev.B

- 18, S.2256 (1978)
- 75) E. Kuhlmann und E. Kisker, J.Mag.Magn.Mater. 13, S.209 (1979)
- 76) E. Kuhlmann und E. Kisker, Phys.Rev.Lett. 45, S.207 (1980)
- 77) P. Wachter, CRC Crit.Rev.Sol.State Sci. 3, S.189 (1972)
- 78) D.A. Reed und W.R. Graham, Rev.Sci.Instrum. 43, S.1365 (1972)
- 79) E. Kisker, J.Phys.E 11, S.697 (1978)
- 80) W.A. Thompson, F. Holtzberg und T.R. Mc Guire, Phys.Rev.Lett. 26,
S.1308 (1971)

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Entstehen der vorliegenden Arbeit beigetragen haben:

Bei Herrn Prof. Dr. M. Campagna bedanke ich mich dafür, daß er mir die anregende Mitarbeit innerhalb der Arbeitsgruppe Spinpolarisierte Photoemission ermöglicht hat, ferner für die sehr aktuelle Themenstellung sowie für seine freundliche und großzügige Unterstützung und sein stetes Interesse am Fortgang der Arbeit.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. E. Kisker und Herrn Dr. W. Gudat für die sehr fruchtbare Zusammenarbeit in angenehmer Arbeitsatmosphäre und für zahlreiche wertvolle Anregungen, Ratschläge und Diskussionen, aus denen ich wichtige Erkenntnisse gewonnen habe.

Weiterhin danke ich Herrn Ing. D. Hoffmann für seine umfangreiche und fachmännische technische Hilfe beim Aufbau der Apparatur und den Mitarbeitern in der Werkstatt unseres Instituts für die Anfertigung vieler Apparaturteile.

Schließlich bedanke ich mich bei den Mitarbeitern des Instituts für Materialentwicklung der KFA für die Bearbeitung und Charakterisierung der verwendeten Einkristalle.

