

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

Magnetische Domänen und spinaufgelöste
elektronische Struktur von Ni(001)

Magnetic Domains and spin-resolved
elektronic Struktüre of Ni(001)

Kai Starke

IPP 9/85

Februar 1991

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

IPP 9/85

Kai Starke

Magnetic Domains
and spin-resolved
elektronic Structure
of Ni(001)*

February 1991

Abstract:

Complex structures of closure domains exist at surfaces which do not contain an easy axis of magnetization. In this work the influence of closure domains on surface magnetization was studied by magneto-optic Kerr-effect and spin-resolved Inverse Photoemission (IPE). It is shown that in the temperature range of high anisotropy energy closure domains can lead to a strong *reduction* of the average surface magnetization compared to saturation. The average magnetization at the surface can even be *antiparallel* to the bulk. In electron spectroscopies the false impression of too little spin effects and hence too small exchange splittings can occur.

On the magnetically well defined Ni(001) surface the exchange splitting of the upper edge of the bandgap at $\bar{\Gamma}$ is determined to be (230 ± 70) meV by spin-resolved Target-Current-Spectroscopy (TCS). The value agrees with the theoretical prediction. By using spin-resolved IPE the exchange splitting of the image-potential surface state at $\bar{\Gamma}$ was determined. The measured value is below the resolution of 25 meV. In contrast the crystal-induced surface state at \bar{X} is exchange split by (180 ± 80) meV. The splittings of the surface states can be understood within the multiple reflection model as a consequence of the spin dependent energy position of sp-band gaps.

* This report is identical with a dissertation of the same title which was submitted to the Universität Bayreuth in November 1990

Februar 1991

Zusammenfassung:

An Oberflächen ohne leichte Magnetisierungsrichtung bilden sich in Remanenz komplizierte Abschlußstrukturen. In dieser Arbeit wurde am Beispiel von Ni(001) der Einfluß von Abschlußdomänen auf die Oberflächen-Magnetisierung mit magneto-optischem Kerr-Effekt und spinaufgelöster Inverser Photoemission (IPE) untersucht. Wie die Messungen zeigen, kann die Bildung von Abschlußdomänen im Temperaturbereich hoher Kristall-Anisotropie dazu führen, daß die mittlere Oberflächen-Magnetisierung in Remanenz im Vergleich zur Sättigung stark *reduziert* ist und bei Raumtemperatur sogar *antiparallel* zum Volumen steht. In Elektronen-Spektroskopien können zu kleine Spin-Effekte beobachtet und dadurch insbesondere zu geringe Austausch-Aufspaltungen vorgetäuscht werden.

An der magnetisch wohldefinierten Ni(001)-Oberfläche wurde mit spinaufgelöster Target-Current-Spectroscopy (TCS) die Austausch-Aufspaltung des oberen Rands der sp-Bandlücke an $\bar{\Gamma}$ (X_1 -Punkt) zu (230 ± 70) meV bestimmt. Dies stimmt mit dem theoretisch vorhergesagten Wert überein. Die mit spinaufgelöster IPE gemessene Aufspaltung des Bildkraftzustands in der $\bar{\Gamma}$ -Bandlücke ist kleiner als die Nachweisgrenze von 25 meV. Der kristall-induzierte Oberflächenzustand an \bar{X} besitzt dagegen eine Aufspaltung von (180 ± 80) meV. Die Aufspaltungen der Oberflächenzustände lassen sich im Vielfachreflexions-Modell als Folge der spinabhängigen Energielage der sp-Bandlücken verstehen.

* Diese Arbeit ist identisch mit einer Dissertation gleichen Titels, die im November 1990 bei der Universität Bayreuth eingereicht wurde.

für Martina

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Ferromagnetismus und Domänen	3
2.1 FERROMAGNETISMUS UND AUSTAUSCH-WECHSELWIRKUNG	3
2.2 DOMÄNEN-THEORIE	6
2.3 ABSCHLUSSDOMÄNEN UND VERZWEIGUNG	16
3. Experimentelles	20
3.1 KERR-EFFEKT	20
3.2 INVERSE PHOTOEMISSION	24
3.3 APPARATUR UND MESSVORGANG	27
3.3.1 APPARATUR FÜR SPINAUFGELÖSTE IPE	28
3.3.2 ANORDNUNG FÜR <i>IN SITU</i> KERR-MESSUNGEN	35
4. Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche in Abhängigkeit von Temperatur und Feld	39
4.1 BISHERIGE UNTERSUCHUNGEN UND DOMÄNEN-MODELLE	40
4.2 ORTSGEMITTELTE MAGNETISIERUNG	43
4.3 DOMÄNENSTRUKTUR	48
4.4 TEMPERATUR-HYSTERESE	58
4.5 VOLUMEN-HYSTERESE	64
5. Unbesetzte elektronische Zustände an Ni(001)	66
5.1 VOLUMEN-ZUSTÄNDE	66
5.2 OBERFLÄCHEN-ZUSTÄNDE	76
5.2.1 GENERELLE EIGENSCHAFTEN	76
5.2.2 AUSTAUSCH-AUFSPALTUNG SP-ARTIGER OBERFLÄCHEN-ZUSTÄNDE	78
6. Spin-Abhängigkeit des absorbierten Stroms an Ni(001)	86
7. Zusammenfassung	91
Literaturverzeichnis	93

1. Einleitung

Ferromagnetismus wurde bereits in der Antike beobachtet, und man verfügt heute über eine detaillierte makroskopische Beschreibung ferromagnetischer Erscheinungen im Festkörper-Volumen. Durch die fortschreitende Miniaturisierung in der Informations-Technologie besteht seit einiger Zeit ein großes Interesse an ferromagnetischen Systemen mit reduzierter Dimension: Festkörper-Oberflächen und atomar dünne Schichten.

Ferromagnetische Ordnung magnetischer Momente kann aber weder in zwei noch in drei Dimensionen mit klassischen Modellen erklärt werden (Bohr-van Leeuwen-Theorem), sondern ist ein rein quantenmechanisches Phänomen [Nolting (1986)]. Der kollektive Ordnungszustand läßt sich erst in der quantenmechanischen Beschreibung der Festkörper-Elektronen durch eine gemeinsame Wellenfunktion verstehen. Er ist eine Konsequenz des Pauli-Prinzips, das zur sogenannten Austausch-Wechselwirkung und damit zu einer effektiven Kopplung der Elektronen-Spins untereinander führt. In Festkörpern mit genügend starker Austausch-Wechselwirkung kann sich spontan, ohne äußeres Feld eine Spin-Ordnung einstellen, d. h. es gibt dort eine energetisch bevorzugte Spinrichtung. In Bandferromagneten (Fe, Co, Ni,..) ist daher die elektronische Struktur in Majoritäts- und Minoritätsbänder aufgespalten, deren Energie sich um die Austausch-Aufspaltung unterscheidet.

Mit Methoden der Oberflächenphysik, besonders der spinaufgelösten Photoemission (PES) und Inversen Photoemission (IPE), ist es möglich, die spin-aufgespaltene Bandstruktur von Ferromagneten direkt zu messen. Eine Voraussetzung für die erfolgreiche Anwendung spinaufgelöster Spektroskopien sind möglichst homogen magnetisierte Probenoberflächen, denn das Signal wird aus experimentellen Gründen über eine Fläche von mehreren mm^2 gemittelt. Für diese Methoden ist also die mittlere Oberflächen-Magnetisierung von Bedeutung. In winkelaufgelösten Messungen ist bei Verwendung niederenergetischer Elektronen eine magnetische Sättigung der Proben in starken äußeren Feldern während der Messung ausgeschlossen. Daher muß mit remanent magnetisierten Proben gearbeitet werden.

In Remanenz liegt eine homogene Magnetisierung aber immer nur innerhalb Weißscher Domänen vor, die infolge der Kristall-Anisotropie entlang energetisch

begünstigter Kristallrichtungen, den sogenannten leichten Richtungen, magnetisiert sind. Eine einfache Domänenstruktur kann sich nur an Oberflächen ausbilden, in denen leichte Richtungen liegen. In Nickel, mit dem sich die vorliegende Arbeit befaßt, sind bei Raumtemperatur $\langle 111 \rangle$ leichte Richtungen, so daß von den drei niedrigindizierten Ni-Oberflächen nur Ni(110) eine einfache Domänenstruktur hat. An Ni(001) bilden sich dagegen komplizierte Strukturen sehr kleiner Abschlußdomänen an der Oberfläche [Krause und Frey (1969)], und ein ähnliches Verhalten wird für Ni(111) erwartet [Hubert (1990)]. Bei der für die Spektroskopie wichtigen Frage nach der mittleren Magnetisierung an Ni-Oberflächen ohne leichte Richtung gelangten bisherige Untersuchungen jedoch zu völlig unterschiedlichen Resultaten [Krause und Frey (1969), Klebanoff et al. (1987)].

Das Ziel dieser Arbeit ist ein zweifaches: Erstens soll am Beispiel von Ni(001) untersucht werden, welchen Einfluß Abschlußdomänen auf die Oberflächen-Magnetisierung haben. Auf der Grundlage eines bekannten Magnetisierungsverhaltens soll zweitens die Austausch-Aufspaltung von Volumen- und Oberflächen-Zuständen an dieser Oberfläche bestimmt werden. Die *in situ*-Messungen der Oberflächen-Magnetisierung erfolgen mittels magnetooptischem Kerr-Effekt, und zur spektroskopischen Untersuchung werden spinaufgelöste IPE sowie spinaufgelöste Target-Current-Spectroscopy (TCS) eingesetzt.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: In Kapitel zwei wird, nach einem Überblick über das heutige mikroskopische Verständnis des Ferromagnetismus, eine theoretische Beschreibung der Ni-Domänen im Volumen und an Oberflächen dargestellt. Kapitel drei beschäftigt sich mit der Beschreibung der Experimente: Magnetooptischer Kerr-Effekt und spinaufgelöste IPE. In Kapitel vier werden Magnetisierung und Domänenstruktur der Ni(001)-Oberfläche charakterisiert und ihre Abhängigkeit von Temperatur und äußeren Feldern gezeigt. Kapitel fünf widmet sich der elektronischen Struktur von Ni(001). Es sei hier vorweggenommen, daß die delokalisierten *sp*-Bänder - im Gegensatz zu bisherigen Messungen - an dieser Oberfläche eine nennenswerte Austausch-Aufspaltung besitzen. Es wird die Austausch-Aufspaltung von zwei unterschiedlichen Oberflächen-Zuständen in *sp*-Bandlücken untersucht. Den Nachweis der Austausch-Aufspaltung eines hochangeregten Zustands an einem kritischen Punkt beschreibt Kapitel sechs. Die in der Arbeit erzielten Ergebnisse werden in Kapitel sieben zusammengefaßt.

2. Ferromagnetismus und Domänen

2.1 FERROMAGNETISMUS UND AUSTAUSCH-WECHSELWIRKUNG

Atome mit unvollständig besetzten Elektronenschalen zeigen ein permanentes magnetisches Moment μ , das durch ein äußeres Magnetfeld ausgerichtet werden kann. Dieses als Paramagnetismus bekannte Verhalten kann bereits in der Gasphase beobachtet werden, wo zwischen den atomaren Momenten nahezu keine Wechselwirkung besteht. In Festkörpern kann sich unterhalb einer kritischen Temperatur spontan eine kollektive Ordnung einstellen. Die Erscheinungsformen des kollektiven Magnetismus (Ferro-, Ferri- und Antiferromagnetismus) werden in Isolatoren (z. B. EuO, EuSe, EuTe) und 4f-Übergangsmetallen (z.B. Gd) durch Momente bewirkt, die am Kristallgitterplatz lokalisiert sind, während sie in den bekanntesten Ferromagneten der 3d-Übergangsmetalle (Fe, Co, Ni) delokalisiert sind.

Ohne die Ursache der ferromagnetischen Wechselwirkung zu kennen, läßt sich ihre Stärke einfach abschätzen [Nolting (1986)]. Beim Paramagneten werden die Momente durch ein äußeres Feld geordnet. Für Ferromagnete nimmt Weiß ein homogenes inneres Feld B_M (Molekularfeld) an, das proportional zur temperaturabhängigen spontanen Magnetisierung J_S ist

$$B_M(T) = \text{const } J_S(T) \quad (2.1)$$

und in dem sich die Momente paramagnetisch verhalten. Dem ordnenden Einfluß des Molekularfeldes wirkt die thermische Energie entgegen. Bei der Curie-Temperatur T_C , wenn die ferromagnetische Ordnung verschwindet, halten beide Einflüsse einander die Waage:

$$\mu_B B_M \approx k T_C \quad (2.2)$$

(k: Boltzmann-Konstante; $\mu_B = 0.58 \cdot 10^{-4} \text{ eV T}^{-1}$: Bohrsches Magneton). Für Ni ergibt sich daraus eine Wechselwirkungsenergie von $\sim 50 \text{ meV}$ pro Moment und $\sim 1000 \text{ T}$ für das Molekularfeld. (Es wird in dieser Abschätzung $B_M = B_M(T=0)$ angenommen, was jedoch für die Größenordnung keine Rolle spielt [Nolting (1986)].)

Die Weißsche Molekularfeldtheorie (1907) war als erste in der Lage, das Temperaturverhalten der spontanen Magnetisierung $J_S(T)$ nahezu richtig wiederzuge-

ben. Außerdem beschreibt sie den Phasenübergang Ferromagnetismus - Paramagnetismus sowie das magnetische Verhalten oberhalb T_C (Curie-Weiss-Gesetz der Suszeptibilität). Sie sagt jedoch nichts aus über die Ursache der ferromagnetischen Kopplung.

Es liegt nahe, als Ursache die klassische Wechselwirkung magnetischer Dipole anzunehmen. Die Abschätzung der potentiellen Energie eines Dipols im Magnetfeld seiner Nachbarn liefert ~ 0.1 meV, was um fast drei Größenordnungen zu klein ist [Nolting (1986)]. Die klassische Dipol-Dipol Wechselwirkung kann also höchstens zu Curietemperaturen in der Größenordnung von 1 K führen und scheidet damit als Erklärung für den Ferromagnetismus aus. Die Ursache des Ferromagnetismus sind nicht magnetische Felder, sondern ist die rein elektrostatische Wechselwirkung von Elektronen im Festkörper. Das wird erst in der quantenmechanischen Beschreibung eines Systems mehrerer Elektronen durch eine gemeinsame Wellenfunktion verständlich und ist eine "Konsequenz" des Pauli-Prinzips.

Aufgrund der Nichtunterscheidbarkeit identischer Teilchen eines Systems müssen die Observablen gegenüber Teilchenvertauschung invariant sein. Die Gesamtwellenfunktion bleibt bei Vertauschung also unverändert oder wechselt ihr Vorzeichen. Man spricht von symmetrischen bzw. antisymmetrischen Wellenfunktionen. Das Pauliprinzip fordert nun, daß ein System identischer Teilchen mit halbzahligem Spin (Fermionen) durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben werden muß. Für die Elektronen im Festkörper kann das zu einer effektiven Kopplung (Austausch-Wechselwirkung) ihrer Spins S und damit der magnetischen Momente $\mu = -g \mu_B / \hbar S$ führen ($g \approx 2$ ist der g -Faktor des Elektrons). Dabei braucht der Hamiltonoperator H des Systems keinen Term zu enthalten, der explizit vom Spin abhängt! (Einen ausführlichen Überblick findet man bei Nolting (1986).)

Der kollektive Magnetismus bei Isolatoren wird durch das Heisenbergmodell beschrieben; dort sind die Spins lokalisiert. Anstelle des "eigentlichen" Hamiltonoperators H , der sich aus Termen für die kinetische Energie, das Kristallpotential und die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen zusammensetzt, wird ein "effektiver" Operator

$$H_{\text{eff}} = -2 \sum J_{ij} S_i S_j \quad (2.3)$$

verwendet, in dem i und j Gitterplätze und S die Spinoperatoren bezeichnet. H_{eff}

wirkt nur auf den Spinraum, hat aber dieselben Eigenwerte wie der "eigentliche" Operator H . Art und Stärke der (effektiven) Spinkopplung werden durch die Kopplungskonstante J_{ij} beschrieben, deren Vorzeichen und Größe durch die sogenannten Austausch- und Überlappintegrale bestimmt sind. Ein System kann nur dann kollektiv ordnen, wenn die Wellenfunktionen der beteiligten Elektronen überlappen; für positive J_{ij} ist diese Ordnung dann ferromagnetisch.

Jede Beschreibung einer ferromagnetischen Ordnung führt auf ein Vielteilchenproblem, das in drei Dimensionen nicht allgemein lösbar ist. Es wird in der Molekularfeld-Näherung auf ein Einteilchenproblem reduziert. Dabei wirkt auf den Spin S_i ein effektives Feld, das durch die Spinstellung aller übrigen Spins S_j festgelegt ist. Das entspricht dem Modell des Weißschen Ferromagneten.

Während das Heisenbergmodell eine korrekte Beschreibung des kollektiven Magnetismus lokalisierter Momente liefert, versagt es jedoch bei den Bandmagneten Fe, Co, und Ni. In ihnen wird die magnetische Ordnung von den Elektronen der unvollständig besetzten d-Bänder bewirkt, denselben, die auch wesentlich zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen. Auch hier führt die Austausch-Wechselwirkung zu einer energetisch bevorzugten Spinrichtung, d. h. zu einer Energieaufspaltung zwischen Majoritäts- und Minoritätsbändern, der sogenannten Austausch-Aufspaltung. Zur Beschreibung des Bandmagnetismus wird das Hubbardmodell herangezogen. In der Molekularfeldnäherung des Hubbardmodells, dem sogenannten Stonermodell, erhält man ein Kriterium für das Auftreten von Ferromagnetismus bei 3d-Übergangsmetallen und außerdem eine Aussage über das Temperaturverhalten der Austausch-Aufspaltung. Ohne ferromagnetische Ordnung wären die Spin-Subbänder entartet und gleich besetzt. Die ungleiche Besetzung der Bänder bei Spinordnung (kleine potentielle Energie) erfordert jedoch kinetische Energie zur Anhebung der Elektronen aus Minoritätsbändern in Zustände der Majoritätsbänder oberhalb der Fermienergie E_F . Das Stonerkriterium

$$\rho(E_F) \cdot U > 1 \quad (2.4)$$

besagt nun, daß Ferromagnetismus nur in solchen Metallen auftritt, in denen eine genügend hohe Zustandsdichte an der Fermienergie $\rho(E_F)$ vorhanden ist. Außerdem muß dazu die intraatomare Coulombwechselwirkung U und damit die Austausch-Wechselwirkung hinreichend groß sein, damit für eine ungleiche Besetzung der Spin-Bänder die Reduktion der potentiellen Energie möglichst groß und die

Zunahme an kinetischer Energie möglichst klein sind. Im Stonermodell wird ferromagnetische Ordnung durch eine starre Verschiebung zwischen Majoritäts- und Minoritätsbändern beschrieben. Die Austausch-Aufspaltung ist proportional zur Magnetisierung und verschwindet damit oberhalb T_C . Der vom Modell vorhergesagte Phasenübergang findet allerdings bei unrealistisch hohen Temperaturen statt (in Ni bei ~ 6000 K). Neue Rechnungen zum Hubbardmodell in einem Vielteilchenformalismus [Nolting und Borgiel (1989), Nolting et al. (1989)] zeigen, daß die ferromagnetische Ordnung in Nickel hauptsächlich vom höchsten 3d-Band getragen wird, dessen Austausch-Aufspaltung (~ 0.3 eV bei $T=0$ K) bei Annäherung an T_C verschwindet. Dieses oft Stoner-artig genannte Temperaturverhalten ist also kein "Artefakt" der Molekularfeldnäherung. Es steht in Einklang mit neueren experimentellen Ergebnissen [Donath und Dose (1989), Kämper (1989)].

In einem idealen unendlich ausgedehnten Ferromagneten würde die Austausch-Wechselwirkung zu einer homogenen spontanen Magnetisierung führen, die allein von der Temperatur abhängt. In realen, endlichen Kristallen ist sie aber meist nur innerhalb von kleinen Bereichen, den sogenannten Domänen, homogen.

2.2 DOMÄNEN-THEORIE

Ein realer ferromagnetischer Kristall mit endlichen Abmessungen kann unterhalb der Curietemperatur von außen her unmagnetisch erscheinen. Um diese Beobachtung zu beschreiben, stellte Weiß (1907) die Hypothese auf, daß der Ferromagnet in viele Volumenbereiche mit homogener spontaner Magnetisierung J_S unterteilt ist, den sogenannten Domänen. Die Magnetisierungsrichtungen benachbarter Domänen sind verschieden; sie werden durch sogenannte Wände getrennt. Über die gesamte Probe gemittelt können sich die Magnetisierungsbeiträge der einzelnen Domänen gegenseitig aufheben und der Kristall wirkt nach außen unmagnetisch. Die Unterteilung in Domänen hat energetische Ursachen. Es wird dadurch hauptsächlich die magnetische Feldenergie verringert und zwar um mehr als die damit verbundene Zunahme anderer Energiebeiträge.

Der magnetische Teil der Gesamtenergie setzt sich im Ferromagneten aus vier wesentlichen Beiträgen zusammen. Neben der im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Austauschenergie E_A und der Feldenergie E_S , die in der Domänentheo-

rie oft als Streufeldenergie bezeichnet wird, ist die Anisotropieenergie E_K und, vor allem bei großen Kristallen, die Spannungsenergie E_σ von Bedeutung:

$$E_{\text{ges}} = E_A + E_S + E_K + E_\sigma. \quad (2.5)$$

(Der Unterschied zwischen innerer und freier Energie ist nur in der Umgebung der Curietemperatur relevant und kann in dieser Betrachtung vernachlässigt werden [Kittel (1949)].) Im Folgenden dieses Kapitels sollen die einzelnen Beiträge in Gl. (2.5) der Größenordnung nach abgeschätzt werden, um ihre relative Bedeutung zu ermessen. Es lassen sich auf diese Weise Regeln dafür aufstellen, welche Domänenstrukturen im Kristall ausgebildet werden.

Beginnen wir mit der Streufeldenergie. Aus der Quellenfreiheit der magnetischen Flußdichte

$$\text{div } \mathbf{B} = 0 \quad (2.6)$$

und der Definition des magnetischen Feldes \mathbf{H}

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{J} \quad (2.7)$$

folgt

$$\mu_0 \text{div } \mathbf{H} = - \text{div } \mathbf{J}. \quad (2.8)$$

Demnach sind Senken der Magnetisierung \mathbf{J} auch immer Quellen für ein \mathbf{H} -Feld. (Es werden hier durchweg SI-Einheiten verwendet.) Durch Anwendung des Gaußschen Satzes läßt sich (2.8) in

$$\mu_0 (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \mathbf{n} = - (\mathbf{J}_2 - \mathbf{J}_1) \mathbf{n} \quad (2.9)$$

umschreiben, wobei \mathbf{n} den Einheitsvektor normal zur Grenzfläche zwischen den Medien 1 und 2 bezeichnet. Eine Unstetigkeit in der Normalkomponente der Magnetisierung stellt einen magnetischen Pol dar. Seine Flächenladungsdichte ist als

$$\sigma_{\text{mag}} = (\mathbf{J}_2 - \mathbf{J}_1) \mathbf{n}. \quad (2.10)$$

definiert. Damit haben wir Gleichung (2.6) in den üblichen Sprachgebrauch übersetzt: An Proben-Oberflächen oder -Grenzflächen, an denen magnetische Pole vorliegen, ist auch die Normalkomponente der \mathbf{H} -Felder zu beiden Seiten der Fläche verschieden.

Wenn \mathbf{H} -Felder auftreten, dann muß beim Aufbau der Magnetisierung gegen sie Arbeit verrichtet werden. Die Selbstenergie der Magnetisierung \mathbf{J} im eigenen \mathbf{H} -Feld

ist

$$E_S = -\frac{1}{2} \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{J} \, dV, \quad (2.11)$$

und gleich der \mathbf{H} -Feldenergie [Kittel (1949)]. Es hat sich leider eingebürgert, die Energie des gesamten \mathbf{H} -Felds als Streufeldenergie zu bezeichnen, obwohl andererseits nur das Feld außerhalb von Proben "Streufeld" genannt wird.

Als obere Grenze für die Streufeldenergiedichte erhält man für ein hypothetisches Feld $\mu_0 \mathbf{H} = -\mathbf{J}_S$ im Probeninneren

$$e_S = J_S^2 / 2 \mu_0. \quad (2.12)$$

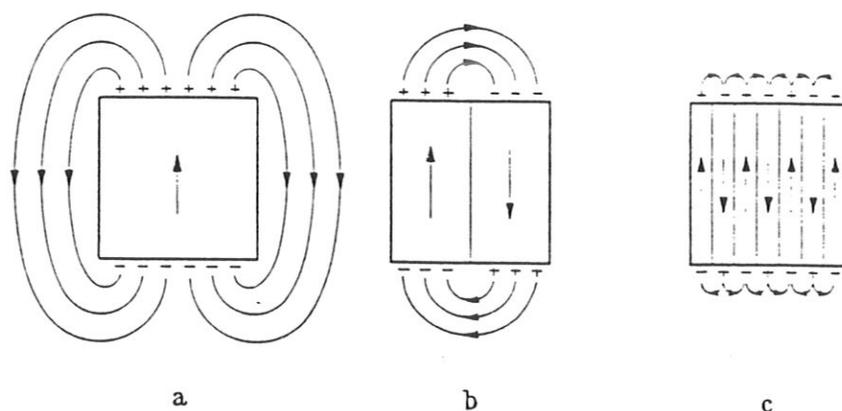


Abb. 2.1: Aufteilung in Domänen [aus: Kneller (1962)]. (Erläuterungen im Text.)

Ein 1 cm^3 großer Würfel aus Nickel (s. Abb. 2.1 a) besäße bei homogener Magnetisierung demnach eine Streufeldenergie von etwa 0.2 J . Diese Energie überwiegt jedoch, wie wir unten sehen werden, alle anderen möglichen Beiträge um Größenordnungen und führt zur Aufteilung des Kristalls in Domänen. Bereits die Unterteilung in zwei gleichgroße, antiparallel magnetisierte Domänen reduziert E_S auf etwa die Hälfte (vgl. Abb. 2.1 b). Durch weitergehende Aufteilung in N jeweils antiparallel gerichtete Domänen kann die Streufeldenergie auf etwa $\frac{1}{N} J_S^2 / 2 \mu_0$ [Kneller (1962)] und damit um Größenordnungen reduziert werden (vgl. Abb. 2.1 c). Die Unterteilung wird nur soweit fortgesetzt, solange die zur Ausbildung der Domänenwände aufzubringende Energie geringer ist, als die eingesparte Streufeldenergie. Zum Aufbau einer Wand ist neben der Austauschenergie vor allem

Anisotropieenergie erforderlich.

Das Vorhandensein der Kristall-Anisotropie zeigt sich darin, daß die zur Aufmagnetisierung eines Kristalls nötige Energie von der Magnetisierungsrichtung abhängt. Abb. 2.2 zeigt Volumen-Magnetisierungskurven für Nickel bei Raumtemperatur. Die Raumdiagonalen

bilden in Nickel die Richtungen leichter Magnetisierbarkeit, die sogenannten leichten Richtungen; die Würfelkanten sind schwere Richtungen. Als mögliche Ursachen scheidet die isotrope Austausch-Wechselwirkung und die magnetische Dipol-Dipol Wechselwirkung aus. Letztere liefert Beiträge, die um Größenordnungen zu gering sind und im Fall von Nickel sogar das falsche Vorzeichen tragen [Kittel (1949)]. In allen derzeitigen Theorien zur Anisotropie spielt vielmehr die Spin-Bahn

Kopplung der Elektronen eine zentrale Rolle [Darby und Isaac (1974)]. Im Bild lokalisierter Elektronen nehmen die Ladungsverteilungen und damit die Bahndrehimpulse bevorzugte Richtungen im Kristallfeld ein. Über die Spin-Bahn Kopplung sind damit auch für den Spin Vorzugsrichtungen im Kristall definiert. Bei den Bandmagneten bewirkt die Spin-Bahn Kopplung, daß die Energien der Bänder außer vom Impuls auch von der Magnetisierungsrichtung abhängen [Darby und Isaac (1974)].

Der Ausdruck für die Energiedichte der Anisotropie e_K für Nickel spiegelt die kubische Symmetrie des fcc-Gitters wieder. Bei beliebiger Magnetisierungsrichtung darf e_K nur gerade Potenzen der Richtungskosinusse $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (bzgl. der kubischen Achsen) enthalten. Da der Ausdruck invariant gegen Permutationen der α_i ($i=1,2,3$) untereinander sein muß, ist der kleinste richtungsabhängige Term von vierter Ordnung:

$$e_K = K_0 + K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2) + \dots \quad (2.13)$$

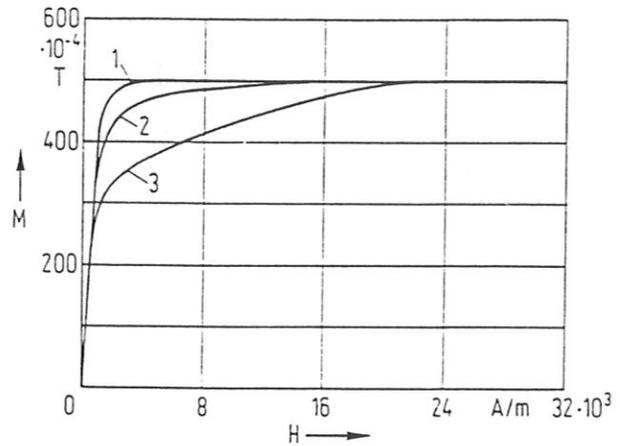


Abb. 2.2: Volumen-Magnetisierungskurven für Nickel bei Raumtemperatur; (1) Raumdiagonale $\langle 111 \rangle$, (2) Flächendiagonale $\langle 110 \rangle$, (3) Würfelkante $\langle 100 \rangle$ [nach: Honda und Kaya (1926), aus: Bergmann-Schäfer (1987)].

Für Nickel kann die Reihenentwicklung für nicht zu kleine Temperaturen nach der sechsten Ordnung abgebrochen werden. Die beiden ersten Anisotropiekonstanten K_1 und K_2 sind bei Raumtemperatur negativ [Aubert (1968)]: $K_1 \approx -5 \cdot 10^{-3} \text{ Jcm}^{-3}$, $K_2 \approx -2 \cdot 10^{-3} \text{ Jcm}^{-3}$; das entspricht einer Orientierung der leichten Richtungen entlang den Raumdiagonalen.

Die Kristall-Anisotropie hängt in Nickel stark von der Temperatur ab. Bei 500 K sind K_1 und K_2 dem Betrage nach um mindestens zwei Größenordnungen geringer als bei Raumtemperatur [Aubert (1968)]. Je nach Größenverhältnis und Vorzeichen der Anisotropiekonstanten kann sich die leichte Richtung mit der Temperatur aber durchaus ändern. Um das zu sehen, vergleichen wir die Energien für die drei niedrigindizierten Kristallachsen

$$e_{[100]} = K_0, \quad e_{[110]} = K_0 + \frac{1}{4}K_1, \quad e_{[111]} = K_0 + \frac{1}{3}K_1 + \frac{1}{27}K_2. \quad (2.14)$$

K_1 wechselt wahrscheinlich oberhalb von 470 K das Vorzeichen [Darby and Isaac (1974)] und damit die leichte Richtung zu [100]. Da man das Vorzeichen von K_2 bei hohen Temperaturen nicht sicher kennt [Aubert (1968)], ist es nicht auszuschließen, daß in einem kleinen Intervall unterhalb 470 K die leichten Richtungen entlang [110] verlaufen [Kneller (1962)]. Für Abschätzungen der Anisotropie-Energiedichte e_K wird meist der Betrag von K_1 genommen (und der Index weggelassen)

$$e_K \approx \frac{1}{3}|K_1| = \frac{1}{3}K. \quad (2.15)$$

Dieser Beitrag ist in Nickel also um mehr als 2 Größenordnungen kleiner als der maximale Streufeldbeitrag e_S . Als "Oberstes Prinzip" bei der Aufteilung in Domänen gilt daher die Vermeidung von Streufeldenergie, also die Vermeidung magnetischer Pole.

Kehren wir zurück zur Domänenwand. Ihr Aufbau erfordert in guter Näherung nur Austausch- und Anisotropieenergie. Beide Einflüsse konkurrieren miteinander und bestimmen Dicke sowie Energie der Wand. Einer-

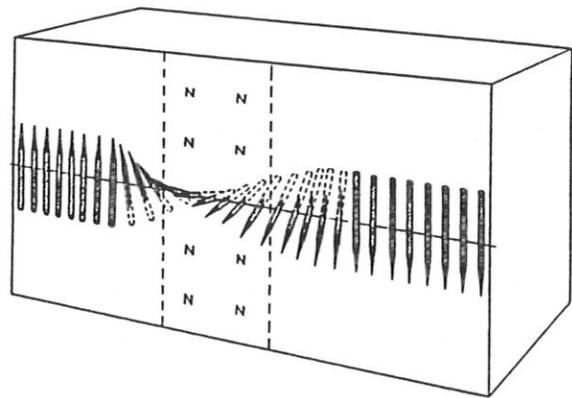


Abb. 2.3: Modell für eine Blochwand. Die zur Wand senkrechte Magnetisierungs-Komponente bleibt in der Wand konstant [aus: Kittel (1949)].

seits verhindert die Austauschkopplung (s. Kap. 2.1) eine abrupte Umkehr der Spinrichtung von einer Atomlage zur nächsten; sie begünstigt eine graduelle Umkehr der Spinrichtung über möglichst viele Atomlagen. Andererseits ist wegen der Kristall-Anisotropie eine zusätzliche Energie damit verbunden, wenn innerhalb einer Domänenwand die Magnetisierung nicht in einer leichten Richtung liegt. Bei einer fest vorgegebenen Änderung für die Spinrichtung ist der Beitrag an Anisotropieenergie also um so geringer, je dünner die Wand ist. Die Wanddicke stellt sich nun gerade so ein, daß die Summe aus den beiden Energiebeiträgen minimal wird und läßt sich der Größenordnung nach im Modell einer linearen Kette abschätzen (s. Abb. 2.3).

Die Gesamtänderung der Spinrichtung sei $180^\circ (\pi)$, erstrecke sich über N Atome im Abstand a und erfolge in winkelgleichen Schritten $\frac{\pi}{N}$; die Wanddicke ist $d = N \cdot a$. Bei nur kleiner Abweichung φ von der Parallelstellung zweier Spins wird der Aufwand an Austauschenergie pro Spinpaar $E_{A,P}$ durch $-2JS^2 \cos\varphi$ und der winkelabhängige Teil durch

$$E_{A,P} \approx JS^2 \varphi^2 \quad (2.16)$$

beschrieben, da das Produkt der quantenmechanischen Spinoperatoren in Gleichung (2.3) in der Näherung $\varphi \ll 1$ durch das Skalarprodukt klassischer Vektoren ersetzt werden darf [Kittel (1949)]. Ein Maß für die "Steifheit" der Spinkopplung stellt die sogenannte Austauschkonstante ($f=4$ im fcc-Gitter)

$$A = f \frac{JS^2}{a} \quad (2.17)$$

dar, mit der sich die Austauschenergie pro Flächeneinheit der Wand näherungsweise zu

$$\sigma_A \approx \frac{1}{a^2} N JS^2 \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 = \frac{\pi^2}{4} A \frac{1}{d} \quad (2.18)$$

ergibt. Mit dem Aufwand an Anisotropieenergie von etwa $K \cdot d$ ist die Wandenergie pro Flächeneinheit

$$\sigma_W \approx \frac{\pi^2}{4} A \frac{1}{d} + K \cdot d. \quad (2.19)$$

Variiert man nun diesen Ausdruck nach d , so nimmt bei der Wanddicke

$$d_W \approx \sqrt{\frac{A}{K}} \quad (2.20)$$

die Flächenenergie das Minimum

$$\sigma_w \approx \sqrt{A \cdot K} \quad (2.21)$$

an. Folglich sind in Nickel mit einer Austauschkonstanten $A \approx 8 \cdot 10^{-14} \text{ Jcm}^{-1}$ die Domänenwände etwa 400 \AA dick und ihre Bildung erfordert ungefähr $2 \cdot 10^{-8} \text{ Jcm}^{-2}$. Verglichen mit Streufeld- und Anisotropieenergie spielt die Wandenergie eine untergeordnete Rolle: In einer sicher unsinnigen dichten "Packung" von Wänden ist die hypothetische Wandenergie gerade gleich der Anisotropieenergie! Man trifft im Volumen eines Kristalls nur ladungsfreie Wände an (Vermeidung von Streufeldern), also solche, in denen die Normalkomponente der Magnetisierung zu beiden Seiten der Wand gleich ist: Das ist der "Bauplan" für die Blochwand. Abb. 2.3 zeigt hierzu ein anschauliches Beispiel. Erreicht die Blochwand jedoch eine Oberfläche, so müssen Pole entstehen. Um die Flächenladungsdichte gering zu halten, ist die Wand dort asymmetrisch verbreitert und - im Gegensatz zum Volumen - ändern die Spins ihre Richtung durch Drehung in der Oberfläche [*Oepen und Kirschner* (1989), *Scheinfein et al.* (1989)].

Wandwinkel	Magnetisierung angrenzender Domänen	Wandebenen
180°	[111]	(1 $\bar{1}$ 0)
	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	(11 $\bar{2}$)
71°	[111]	(010)
	[11 $\bar{1}$]	(110)
		(1 $\bar{1}$ 0)
109°	[111]	(001)
	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	(1 $\bar{1}$ 0)
		(1 $\bar{1}$ 1)

Tab. 2.1: Ni-Blochwände in niedrig indizierten Ebenen.

In Nickel ist die Lage der Blochwände durch die 71°- und 109°-Winkel zwischen den leichten Richtungen, den Raumdiagonalen, bestimmt. Einen Überblick geben Abb. 2.4 und Tabelle 2.1. Durch die unterschiedliche Lage der Wände ist der

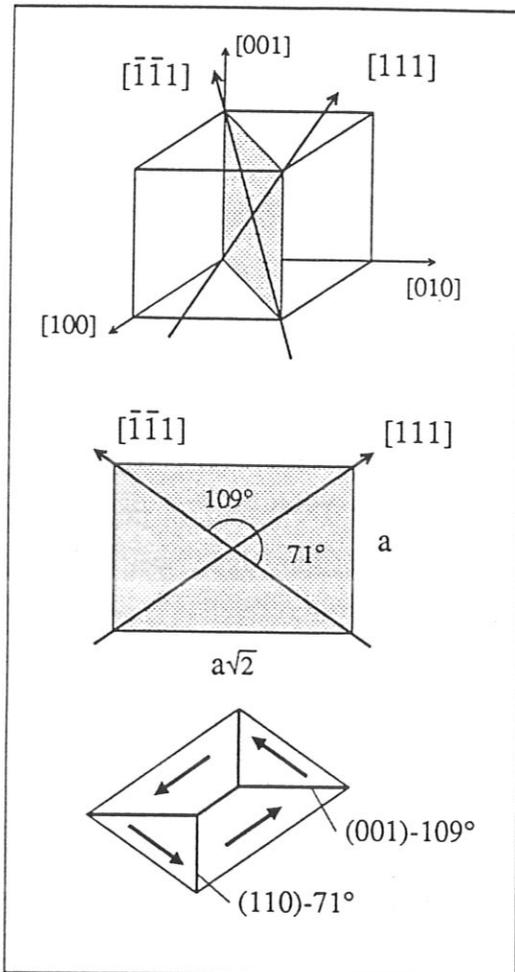


Abb. 2.4: Leichte Richtungen und Blochwände in Nickel.

Abbildung 2.4 zeigt die leichten Richtungen und Blochwände in Nickel. Die leichten Richtungen sind die Richtungen, in denen die magnetische Anisotropieenergie am geringsten ist. In Nickel sind dies die Richtungen $[111]$ und $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$. Die Blochwände sind die Grenzflächen zwischen den Domänen, die durch die Bildung antiparallel magnetisierter Domänen reduziert werden.

Anisotropieenergiebeitrag zur Wandenergie verschieden groß. In einer genaueren Rechnung [Kneller (1962)] erhält man Wandenergien von $0.5 \dots 2 \cdot \sqrt{A \cdot K}$.

In Ferromagneten mit uniaxialer Anisotropie (wie z. B. Kobalt) wird das Streufeld an der Oberfläche hauptsächlich durch Bildung antiparallel magnetisierter Domänen reduziert (vgl. Abb. 2.1 c). In den kubischen Kristallen Nickel und Eisen sind durch die höhere Symmetrie mehrere leichte Richtungen vorhanden und bei speziellen Kristallgeometrien kann sich eine Domänenstruktur ausbilden, bei der überhaupt kein Streufeld auftritt. Zur besseren Anschauung nehmen wir leichte Richtungen entlang der Würfelkanten an (Fe). Dann ist für den Fall, daß alle Oberflächen leichte Richtungen enthalten, eine Domänenaufteilung wie in Abb. 2.5 a scheinbar energetisch günstig. In dieser Anordnung verschwinden zwar sowohl Streufeld- und Anisotropieenergie, aber es zeigt sich der Einfluß der Magnetostriktion, eines ansonsten untergeordneten Energiebeitrags.

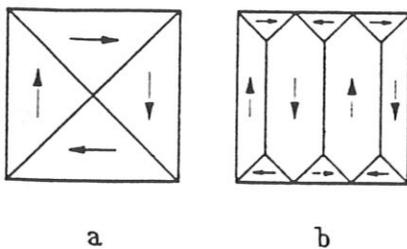


Abb. 2.5: Einfluß der Magnetostriktion auf die Domänen kubischer Kristalle [aus: Kneller (1962)].

Die Magnetostraktion führt zu einer relativen Längenänderung $\Delta l/l = \lambda$ von einigen 10^{-5} in Richtung der Magnetisierung. Die Magnetostraktionskonstante λ ist zwar richtungsabhängig, doch wird bereits der Unterschied von wenigen 10^{-5} zwischen λ_{100} und λ_{111} oft vernachlässigt. (λ ist in Nickel negativ, d. h. die Probe verkürzt sich in Magnetisierungsrichtung.) Der Grund für das Auftreten von Magnetostraktion liegt in der Kopplung von Magnetisierungsrichtung und elastischer Deformation des Kristalls. Sie wird beschrieben mit einer Abhängigkeit der Kristall-Anisotropieenergie vom Verzerrungszustand: Durch die magnetoelastische Kopplung hat ein gegenüber dem kubischen Gitter verzerrter Zustand eine niedrigere Anisotropieenergie. Die Konfiguration in Abb. 2.5 a erfordert also zusätzliche magnetostraktive Energie, da sich die Domänen bei ihrer Deformation gegenseitig "behindern". Die Anordnung in Abb. 2.5 b ist energetisch günstiger, weil sich die großen Domänen nahezu frei entspannen können und magnetostraktive Energie nur noch in einem viel kleineren Volumen anfällt.

Berücksichtigt man die Magnetostraktion in der niedrigsten Ordnung, so erhält man die Korrektur

$$\Delta K_1 = \frac{9}{4}[(c_{11} - c_{22}) \lambda_{100}^2 - 2c_{44} \lambda_{111}^2] \quad (2.22)$$

zur Konstanten K_1 [Kneller (1962)]. Für Nickel, mit Elastizitätsmoduln c_{ii} ($i=1,2,4$) der Größenordnung $1 \cdot 10^5 \text{ Jcm}^{-3}$, hat die Korrektur eine Größe von etwa $2 \cdot 10^{-4} \text{ Jcm}^{-3}$, was etwa 4 % der Anisotropieenergie bei Raumtemperatur entspricht. Experimentell ist nur die Anisotropie bei Vorhandensein von Magnetostraktion von Bedeutung; in allen experimentell bestimmten Werten für K_1 ist ΔK_1 prinzipiell bereits enthalten. Der magnetostraktive Anteil ist in Nickel viel größer als in Eisen, wo er nur etwa 1 Promille ausmacht.

Die relativ starke magnetoelastische Kopplung in Nickelkristallen erklärt außerdem, warum in ihnen die Magnetisierungsrichtung so empfindlich auf Verzerrungen reagiert, die durch äußere oder innere Spannungen hervorgerufen werden: Der infolge einer Spannung σ zusätzlich auftretende Energiebeitrag wird meist in der Näherung isotroper Magnetostraktion durch

$$e_\sigma \approx \frac{3}{2} \lambda \sigma \sin^2 \theta \quad (2.23)$$

beschrieben [Kittel (1949)], wobei der Winkel θ zwischen Magnetisierungs- und

Spannungsrichtung liegt. Versetzungen können in Nickel innere Spannungen der Größenordnung 10^3 Ncm^{-2} und damit eine Spannungsenergie-dichte von bis zu $7 \cdot 10^{-4} \text{ Jcm}^{-3}$ erzeugen [Schauer (1963)].

Damit liegen alle für die Domänenbildung wesentlichen Energiebeiträge vor. Die Tatsache, daß sie sich um Größenordnungen unterscheiden, führt auf die folgenden Regeln [Hubert (1965)] für reale Domänenstrukturen:

1. Die Domänenstruktur ist im Volumen streufeldfrei.
2. In allen Volumendomänen liegt die Magnetisierung in einer leichten Richtung.

Wenn sich zwischen den einzelnen Energiebeiträgen ein Gleichgewicht einstellen kann, dann ist die Domänenstruktur durch das Minimum der Gesamtenergie $\delta E_{\text{ges}} = 0$ eindeutig festgelegt. Reale Kristalle nehmen jedoch den Zustand niedrigster Energie nicht ohne weiteres ein, sondern zeigen Hysterese-Erscheinungen. Bekannt ist die Hysterese im äußeren Feld H . Dort tritt zur Gesamtenergie der Term

$$e_H = - \mathbf{J} \cdot \mathbf{H} \quad (2.24)$$

hinzu, der bei einer resultierenden Magnetisierung in Richtung des äußeren Feldes minimal wird. Die Ummagnetisierung eines Kristalls läßt sich auf zwei Elementarprozesse zurückführen: Wandverschiebung und Drehung der Magnetisierung. Bereits in kleinen Feldern wachsen Domänen mit einer Magnetisierungskomponente in H -Richtung auf Kosten von entgegengesetzt magnetisierten Domänen durch Verschiebung von 180° -Wänden. Steht H senkrecht zu den Wänden, so wird e_H durch Drehung der Magnetisierung in den einzelnen Domänen (unter Aufwendung von Anisotropieenergie) möglichst gering gehalten.

Während die Rotation in nicht zu kleinen Kristallen stets reversibel ist, verläuft die Wandbewegung größtenteils irreversibel. Das liegt an den Gitterfehlern realer Kristalle. Sie erzeugen eine örtlich schwankende innere Spannung $\sigma(\mathbf{r})$; die damit verbundene Verteilung der Spannungsenergie ("Potentialgebirge") bewirkt, daß die Wandenergie näherungsweise $\sqrt{A(K + 3/2\lambda\sigma(\mathbf{r}))}$ ist, also vom Ort abhängt [Kneller (1962)]. Im realen Kristall ist daher die Bewegung der Blochwände generell mit Reibung verbunden, zu deren Überwindung zusätzliche Energie, z. B. die des äußeren Feldes aufzuwenden ist. Zur Einstellung einer stabilen Domänenstruktur (relatives Energieminimum) werden Proben deshalb oft in einem Wechselfeld

abnehmender Amplitude magnetisiert ("idealisiert") [z. B. *Krause und Frey* (1969)]. Die Wandreibung hat zur Konsequenz, daß *jede* Änderung der Domänenstruktur Hysterese zeigen kann (s. Kap. 4.4).

2.3 ABSCHLUSSDOMÄNEN UND VERZWEIGUNG

In uniaxialen Ferromagneten mit hoher Anisotropie wie z. B. Kobalt wird das Streufeld an den Oberflächen hauptsächlich durch Bildung antiparallel magnetisierter Domänen reduziert (vgl. Abb. 2.1 c). In kubischen Kristallen, wie Nickel und Eisen, gibt es dagegen durch die höhere Symmetrie mehrere leichte Richtungen und eine wesentlich geringere Anisotropie; sie werden darum als weichmagnetisch bezeichnet. Als Maß für die Weichheit gilt das Verhältnis von Anisotropieenergie- zur maximalen Streufeldenergiedichte, der sogenannte Q-Wert

$$Q = \frac{K}{I_s^2 / 2\mu_0} \quad (2.25)$$

In Nickel, wie auch in Eisen, beträgt Q lediglich $3 \cdot 10^{-2}$. Das bedeutet anschaulich, daß bei der Ausbildung der Domänenstruktur selbst dann Streufeld vermieden wird, wenn dabei Anisotropieenergie aufzuwenden ist. Dieser weichmagnetische Charakter zeigt sich vor allem an Oberflächen wie Ni(001), Ni(111) und Fe(111), bei denen die nächste leichte Richtung um mehr als nur einige Grad von einer Lage in der Oberfläche abweicht (35° , 19° bzw. 35°). An diesen Oberflächen werden sogenannte Abschlußdomänen gebildet. Die "Aufgabe" einer Abschlußdomäne besteht darin, den magnetischen Fluß einer darunterliegenden Domäne so umzulenken, daß er nicht an der Oberfläche austritt, sondern von einer anderen Domäne im Volumen wieder aufgenommen wird. In den Abschlußdomänen liegt die Magnetisierung nicht mehr entlang einer leichten Richtung, sondern, bis auf wenige Grad Abweichung, *in* der Oberfläche, dort aber bevorzugt in einer *relativ* leichten Richtung. Die Wände zwischen Abschluß- und Grunddomänen sind in ihrer Lage ebenfalls durch Streufeldvermeidung festgelegt [*Hubert* (1990)]. (Damit die Normalkomponente der Magnetisierung stetig übergeht, sind hier jedoch andere Wandlagen erforderlich als die der Tabelle 2.1.)

Die Formen von Abschlußdomänen sind im allgemeinen recht kompliziert. Überschaubare Verhältnisse liegen aber in Proben vor, die in einer Dimension sehr klein sind. In plattenförmigen Kristallen liegt unterhalb einer kritischen Dicke von -

je nach Material - einigen $1/10 \mu\text{m}$ bis wenigen μm die Magnetisierung im gesamten Volumen in der Ebene und nimmt in ihr eine *relativ* leichte Richtung ein. Jede außerhalb der Ebene liegende Magnetisierungsrichtung würde eine Struktur mit zu hoher Wandenergie erfordern [Kittel (1946)]. Abschlußdomänen wurden von DeBlois (1965) an den $\langle 100 \rangle$ -Kanten dünner Ni(001)-Plättchen untersucht. Da in sehr dünnen Ni-Proben $\langle 110 \rangle$ -Richtungen leichte Richtungen sind, entstehen an den $\langle 100 \rangle$ -Kanten Abschlußdomänen, die in Abb. 2.6 qualitativ wiedergegeben sind. Die

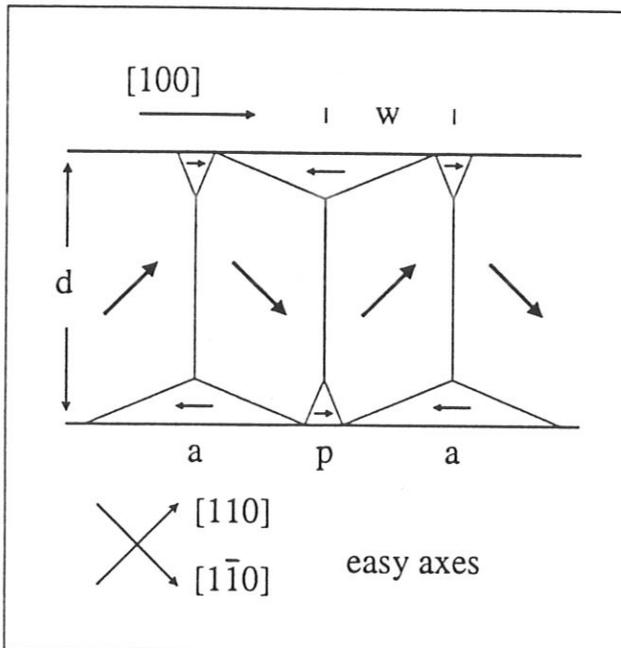


Abb. 2.6: Abschlußdomänen in weichmagnetischen Kristallen. Die Magnetisierung der Abschlußdomänen liegt in der Oberfläche [nach: Hubert (1990)].

Grunddomänen sind entlang der leichten Richtungen magnetisiert und haben die charakteristische Platten-Struktur [Williams et al. (1949), Williams und Walker (1951)]. Die mittlere Volumenmagnetisierung verläuft entlang $[100]$. Die Magnetisierung der Abschlußdomänen liegt in den kleineren Domänen parallel, in den größeren antiparallel dazu; dementsprechend werden sie p - bzw. a -Domänen genannt [Spreen (1967)]. Im Mittel über viele Abschlußdomänen ist in dieser Anordnung die Magnetisierung an der Oberfläche der mittleren Volumenmagnetisierung entgegengesetzt! Die Domänen im Volumen und an der Oberfläche sind gekoppelt: Ändert sich die Form der Grunddomänen, z. B. durch Wirkung eines äußeren Feldes, so ändert sich auch die Struktur der Abschlußdomänen. Sie stehen aber im Vergleich zu den Grunddomänen unter viel höheren magnetostriktiven Spannungen. Daher besteht in ihnen eine stärkere Wechselwirkung mit Kristallversetzungen [Peach und Koehler (1950)], an denen sie bei der Ummagnetisierung z. T. regelrecht "hängenbleiben" können.

Die Grunddomänen sind entlang der leichten Richtungen magnetisiert und haben die charakteristische Platten-Struktur [Williams et al. (1949), Williams und Walker (1951)]. Die mittlere Volumenmagnetisierung verläuft entlang $[100]$. Die Magnetisierung der Abschlußdomänen liegt in den kleineren Domänen parallel, in den größeren antiparallel dazu; dementsprechend werden sie p - bzw. a -Domänen genannt [Spreen (1967)]. Im Mittel über viele Abschlußdomänen ist in dieser Anordnung die Magnetisierung an der Oberfläche der mittleren Volumenmagnetisierung entgegengesetzt! Die Domänen im Volumen und an der Oberfläche sind gekoppelt:

Da die Bildung von Abschlußdomänen Anisotropieenergie erfordert, wird ihr Volumen und damit die Domänenweite an der Oberfläche w_s möglichst klein sein. Die Weite der Grunddomänen im Volumen w ist jedoch möglichst groß, um Wandenergie einzusparen. Die Verbindung wird mit sogenannten Verzweigungsdomänen hergestellt (s. Abb. 2.7), die zuerst von *Martin* (1957) an Fe(111) beobachtet wurden. Verzweigungsdomänen treten auch in den oben beschriebenen Nickel-Plättchen auf [*DeBlois* (1965)]. Sie sind wie die Grunddomänen entlang leichter Richtungen magnetisiert und haben ladungsfreie Wände. Sie ordnen sich charakteristischerweise in einer treppenartigen Struktur, der sogenannten Echelon-Struktur an. Die mittlere Magnetisierung in den Verzweigungsdomänen ist *antiparallel* zu den Grunddomänen. An Oberflächen mit Verzweigungsdomänen existieren also in Remanenz bereits Keime für eine Ummagnetisierung des Kristalls; die Koerzitivfelder der Hysterese sind dann nicht - wie an SiFe(001)(100)- Fensterrahmen Kristallen [*Hellmiß* (1970)] - durch Keimbildung sondern hauptsächlich durch Keimwachstum bestimmt. Eine völlig streufeldfreie Abschlußstruktur besteht nur in Remanenz. Im äußeren Feld in Richtung der mittleren Volumenmagnetisierung werden die Verzweigungsdomänen abgebaut und der Fluß aus den Grunddomänen durch Ladungen an der Oberfläche umgelenkt [*Krause und Frey* (1969)].

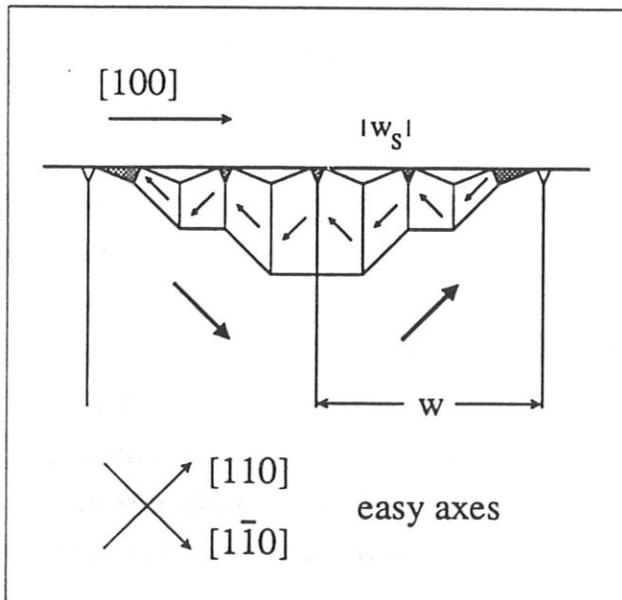


Abb. 2.7: Verzweigungsdomänen als Echelon-Struktur [nach: *Hubert* (1990)]. Sie ermöglichen eine wesentlich kleinere Domänenweite an der Oberfläche (w_s) als im Volumen (w) und zeigen im Mittel *antiparallel* zur Volumen-Magnetisierung. Helle Abschlußdomänen sind *parallel*, dunkle *antiparallel* zu [100] magnetisiert: Oberflächen-Magnetisierung im Mittel *antiparallel* zum Volumen.

Damit jedoch Verzweigung auftreten kann, darf die Kristalldicke d (s. Abb. 2.6) nicht zu klein sein. Rechnungen von *Hubert* (1990) zeigen, daß die Verzweigungsstruktur dem unverzweigten Abschluß in Abb. 2.6 bereits überlegen ist, wenn die Kristalldicke etwa hundertfache Wandstärke $\sqrt{A/K}$ erreicht, in Nickel also ab etwa $4 \mu\text{m}$. Die Rechnungen zeigen außerdem, daß bei großen Kristalldicken (von einigen mm) der Volumenanteil der Abschlußdomänen noch wesentlich verringert werden kann, indem sich weitere Generationen von Verzweigungsdomänen bilden; sie haben dieselbe Struktur wie die erste Generation, sind jedoch viel kleiner. Diese wiederholte Verzweigung bis zur Oberfläche bewirkt, daß die Abmessungen der Abschlußdomänen auch in Kristallen mit großer Dicke nur in der Größenordnung von μm liegen, was auch der an $\text{Fe}(111)$ beobachteten Domänenweite entspricht [*Martin* (1957)].

Sind die Kristallabmessungen in allen drei Dimensionen viel größer als $1 \mu\text{m}$, dann ist die Magnetisierung der Verzweigungs- und Abschlußdomänen nicht mehr auf nur eine Ebene beschränkt, und es können in dicken Kristallen sehr komplizierte Domänenstrukturen entstehen. Solche 3-dimensionalen Strukturen werden allgemein mit dem Konzept der Quasidomänen beschrieben [*Hubert* (1990)]. Für die in dieser Arbeit untersuchte $\text{Ni}(001)$ -Oberfläche geben aber bisherige Experimente keinen Hinweis darauf, daß ein 3-dimensionaler Abschluß vorliegt (s. Kap. 4.1).

3. Experimentelles

3.1 MAGNETOOPTISCHER KERR-EFFEKT

Linear polarisiertes Licht wird bei Reflexion an einem Ferromagneten elliptisch polarisiert, wobei die große Ellipsenachse gegenüber der Polarisationssebene des einfallenden Lichts gedreht ist. Dieses Phänomen bezeichnet man als magnetooptischen Kerr-Effekt (kurz: Kerr-Effekt). Die Drehung der Polarisationssebene (Kerrdrehung) ist *linear* in der Magnetisierung und beträgt in den meisten Fällen nur wenige 1/10 Grad. Der gleiche Effekt in Transmission, der bekanntere Faraday-Effekt (1845), tritt auch an Nichtferromagneten in äußeren Feldern auf; dabei können Polarisationsdrehungen von vielen Grad bereits in Feldern von der Ordnung 1 T beobachtet werden. Obwohl in Ferromagneten die magnetooptische Wechselwirkung um 3 bis 4 Größenordnungen stärker ist [Born (1933), Bennett und Stern (1965)], bleibt die Kerrdrehung klein. Das ist eine Folge der geringen Eindringtiefe (Skintiefe) von sichtbarem Licht in Metallen (100..200 Å).

Kerr ist es durch "glückliche Intuition" [Voigt (1920)] schon im 19. Jh. gelungen, diese in Reflexion sehr kleine Polarisationsdrehung an einem polierten Endstück eines Elektromagneten nachzuweisen. Wegen der geringen Größe des Kerr-Effekts wurde in den 30er Jahren zur Sichtbarmachung der Domänenstruktur zunächst die Bittertechnik verwendet, bevor Williams *et al.* (1951) die erste Domänenabbildung mit dem Kerr-Effekt an Co(0001) gelang. Während dabei, wie schon bei den *Kerr*schen Beobachtungen, nur die Magnetisierung normal zur Oberfläche ein zum Nachweis genügend starkes Signal lieferte, konnten *in* der Oberfläche liegende Magnetisierungskomponenten nur an Eisen-Oberflächen und auch dort erst durch Aufbringen von Interferenzschichten sichtbar gemacht werden [Kranz und Hubert (1963)]. Durch Verbindung von Kerrmikroskopie und digitaler Bildverarbeitung [Schmidt *et al.* (1985)] ist es heute möglich, Domänen mit beliebiger Orientierung und sogar an Proben mit kleinerer Sättigung als bei Eisen zu untersuchen. Benutzt man eine Differenzbildtechnik, so kann der Kontrast soweit erhöht werden, daß die Domänenstruktur an Nickeloberflächen auch ohne Interferenzschichten beobachtbar ist (s. Kap. 4.3).

Die Hauptursache für das Auftreten magnetooptischer Effekte in Ferromagneten ist die Spin-Bahn Kopplung [Bennett und Stern (1965)]. Phänomenologisch kann man den Kerreffekt durch Nebendiagonalelemente im dielektrischen Tensor beschreiben [Hubert (1990)]. Unter der Voraussetzung, daß keine weitere optische Anisotropie auftritt, sind die Diagonalelemente ϵ in kubischen Metallen gleich und das dielektrische Gesetz lautet

$$\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E} - i\epsilon Q \mathbf{j} \times \mathbf{E}. \quad (3.1)$$

\mathbf{j} bezeichnet den Richtungsvektor der Magnetisierung und Q eine komplexe Materialkonstante für die Stärke der magnetooptischen Kopplung; sie ist in guter Näherung proportional zur Magnetisierung. Auf die Interpretation des Kreuzprodukts $\mathbf{j} \times \mathbf{E}$ stützt sich eine anschauliche klassische Deutung des Kerr-Effekts: Die Lorentzkraft wirkt auf Elektronen, die vom elektrischen Feld des

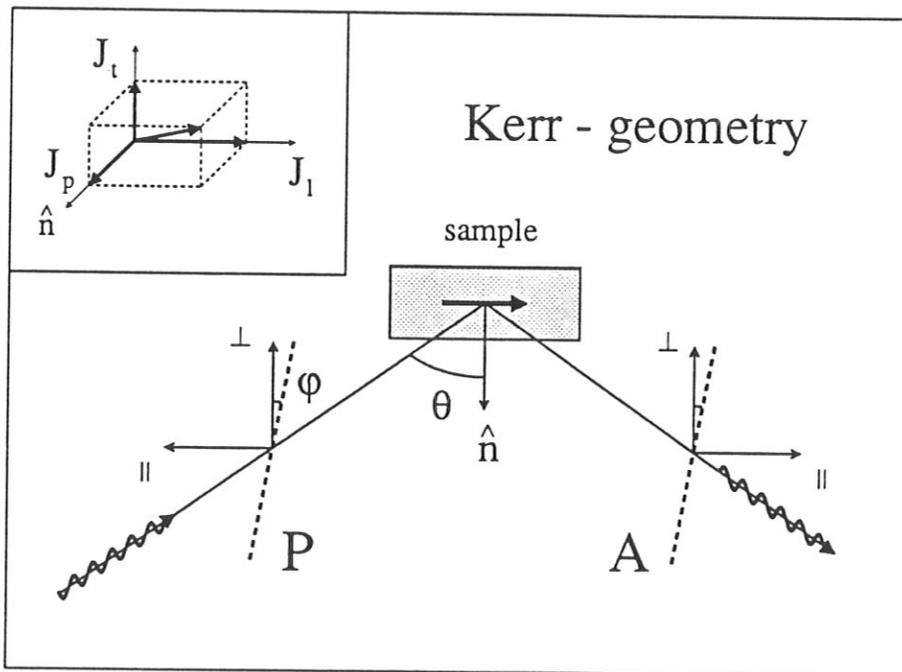


Abb. 3.1: Geometrie für Messungen mit dem Kerreffekt [nach: Kranz und Hubert (1963)]. Polarisator und Analysator sind durch gestrichelte Linien angedeutet. Das Nebenelement veranschaulicht die Zerlegung der Magnetisierung in kartesische Komponenten mit den üblichen Bezeichnungen.

Lichts in Schwingung versetzt werden. Wenn das Kreuzprodukt verschwindet ($\mathbf{j} \parallel \mathbf{E}$), so bleiben dielektrische Verschiebung \mathbf{D} und elektrisches Feld \mathbf{E} parallel, d. h. es tritt keine Kerr-Drehung auf. Ist es jedoch von Null verschieden, so entsteht zusätzlich zum eingestrahnten Licht eine elektromagnetische Welle, deren elektrisches Feld, die sogenannte Kerr-Komponente \mathbf{K} , auf der Magnetisierung *und* der Polarisation des eingestrahnten Lichts senkrecht steht.

Mit dem Kerr-Effekt lassen sich Betrag und Richtung der Magnetisierung \mathbf{J} an der Oberfläche einer Probe bestimmen. Abb. 3.1 zeigt die für Kerr-Messungen relevante Geometrie. Linear polarisiertes Licht fällt unter einem Winkel θ zur Normalen auf die Proben-Oberfläche; die Ausbreitungsrichtung des Lichts und die Oberflächennormale definieren eine Einfallsebene. Die beiden in der Einfallsebene liegenden Magnetisierungskomponenten werden üblicherweise als longitudinale J_l und polare Magnetisierung J_p bezeichnet, je nachdem, ob sie parallel oder senkrecht zur Oberfläche zeigen; die senkrecht zur Einfallsebene liegende Komponente heißt transversale Magnetisierung J_t (s. Nebenbild). Die Stellungen von Polarisator und Analysator legen die Polarisationsrichtungen von einfallendem bzw. nachzuweisendem Licht fest. Allgemein tragen bei nicht-senkrechttem Lichteinfall alle drei Magnetisierungskomponenten zum Kerrsignal bei. Wählt man jedoch die Analysatorstellung senkrecht (\perp) oder parallel (\parallel) zur Einfallsebene, so ist eine Trennung der Komponenten leicht möglich. Für die zugehörigen Kerramplituden K_\perp bzw. K_\parallel gilt [Kranz und Hubert (1963)]:

$$K_\parallel(\varphi) = (J_l k_l - J_p k_p) \cos\varphi - 2J_t k_t \sin\varphi \quad (3.2)$$

$$K_\perp(\varphi) = (J_l k_l + J_p k_p) \sin\varphi \quad (3.3)$$

(φ : s. Abb. 3.1); sie sind linear in der Magnetisierung. Die Proportionalitätskonstanten k_l , k_p und k_t heißen longitudinale, polare und transversale Kerramplitude und sind betragsmäßig von der Größenordnung 10^{-3} ; sie hängen vom Einfallswinkel θ , dem (komplexen) Brechungsindex n des Metalls und der verwendeten Wellenlänge ab. Sie lassen sich, entsprechend der Theorie von Voigt (1920), in der Näherung $|n|^2 \gg 1$ und nach Umformung auf gebräuchliche Größen [Kranz und Hubert (1963)] als

$$k_p = \kappa T_\parallel T_\perp' \quad (3.4)$$

$$k_l = \kappa \frac{\sin\theta}{n} T_\parallel T_\perp' \quad (3.5)$$

$$k_t = \kappa \frac{\sin\theta}{n} T_{\parallel} T_{\perp} \quad (3.6)$$

schreiben. Die komplexe Konstante κ beschreibt die Stärke der magnetooptischen Kopplung, T_{\parallel} (T_{\perp}) bezeichnet den Amplituden-Transmissionskoeffizienten parallel (senkrecht) zur Einfallsebene beim Übergang vom Metall in den Außenraum, T' beim Übergang vom Außenraum ins Metall.

Wie die Gleichungen (3.2) und (3.3) zeigen, treten die longitudinale und die polare Magnetisierungskomponente in den Kerramplituden immer gekoppelt auf. Außerdem werden diese Komponenten dann maximal sichtbar, wenn die Polarisatoren gekreuzt sind ($\varphi=0^\circ$ bzw. $\varphi=90^\circ$); dabei wird der "normale", d. h. ohne Kerr-Effekt reflektierte Anteil unterdrückt. Messungen mit fester einfallender Polarisierung (z. B. Kerrmikroskopie) erfolgen jedoch bei etwas geöffneten Polarisatoren, da dann die *Intensität* des reflektierten Lichts durch Interferenz der Kerramplitude mit der normal reflektierten Amplitude *proportional zur Magnetisierung* wird [Rave (1990)]. Eine transversale Magnetisierung ist, im Gegensatz dazu, bei geöffneten Polarisatoren maximal zu beobachten, da die zugehörige

Kerramplitude ausschließlich in der Einfallsebene schwingt (s. Gl. (3.2)). Wegen der im Verhältnis zur normalen Reflexion geringen Kerramplitude ist die Anordnung in Abb. 3.1 zur Beobachtung von J_t ungeeignet. (Beim transversalen Effekt bleibt das senkrecht zur Einfallsebene polarisierte Licht unverändert. Daher sind solche Methoden geeignet, in denen dieser Lichtanteil als Referenzstrahl benutzt wird [Boockmann (1989)].)

Wenn die Magnetisierung der Probe eine longitudinale *und* eine polare Komponente besitzt, so sind

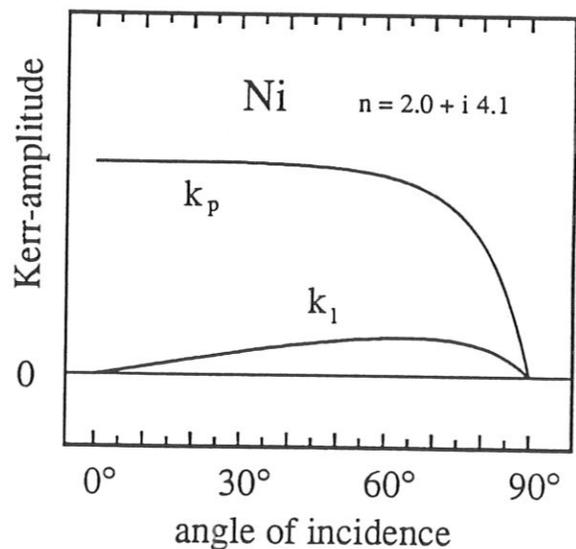


Abb. 3.2: Winkelabhängigkeit der polaren und transversalen Kerramplitude.

zur Separation der beiden Komponenten in jedem Fall zwei Messungen erforderlich. Dazu nutzt man die unterschiedliche Abhängigkeit der Kerramplituden vom Einfallswinkel aus (s. Abb. 3.2). Bei senkrechter Inzidenz verschwinden sowohl die longitudinale als auch die transversale Kerramplitude. Qualitativ läßt sich das bereits der Gleichung (3.1) entnehmen: Eine senkrecht zur Magnetisierung und ebenfalls senkrecht zur Polarisation stehende Kerramplitude müßte in diesem Fall parallel zur Ausbreitungsrichtung des Lichts stehen. Da elektromagnetische Wellen im Vakuum transversal polarisiert sind, tritt eine solche Schwingung nicht auf.

3.2 INVERSE PHOTOEMISSION

Mit der Inversen Photoemission wird die Energie-Impuls-Relation $E(k)$ unbesetzter elektronischer Zustände gemessen. Das zugrundeliegende Phänomen, die Strahlungsemission eines Festkörpers bei Elektronenbeschuß, ist als Röntgenbremsstrahlung lange bekannt [Röntgen (1895)]. Da die Methode bereits an anderer Stelle ausführlich beschrieben ist [Dose (1985)], werden hier nur einige, für die Messungen in dieser Arbeit wichtige Aspekte referiert.

Die Inverse Photoemission (IPE) ist das zur Photoemission (PES) komplementäre Meßverfahren (s. Abb. 3.3). Bei der Photoemission treffen monochromatische Lichtquanten auf den Kristall. Elektronen, die dabei aus einem Anfangszustand $|i\rangle$ in einen zuvor unbesetzten Endzustand $|f\rangle$ angeregt werden, können den Kristall verlassen,

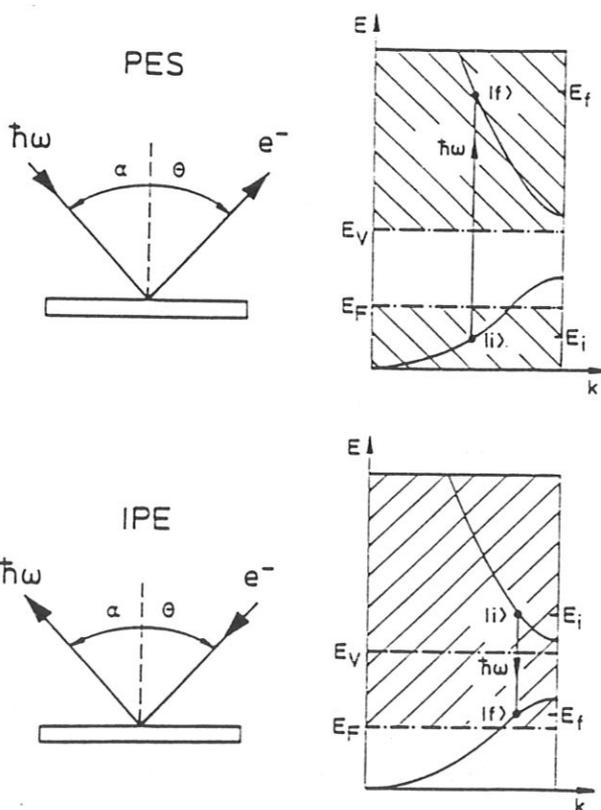


Abb. 3.3: Schematische Darstellung von direkten Übergängen in den komplementären Meßverfahren IPE und PES.

wenn $|f\rangle$ oberhalb der Vakuumenergie E_V liegt. Durch winkel- und energieselektiven Nachweis der Elektronen können also die besetzten Bänder unterhalb der Fermienergie E_F sowie die unbesetzten Bänder oberhalb E_V untersucht werden. Die Inverse Photoemission stellt den zeitlich umgekehrten Prozess dar: Elektronen mit definiertem Impuls und definierter Energie treffen auf den Kristall. Wenn sie, nach Ankopplung an einen unbesetzten, oberhalb E_V liegenden Anfangszustand, durch einen Strahlungsübergang in einen zuvor unbesetzten Endzustand (oberhalb E_F) übergehen, können die dabei emittierten Strahlungsquanten nachgewiesen werden. In Abb. 3.3 sind die Energiebereiche schraffiert, die den beiden Methoden zugänglich sind. Für den IPE-Prozess lautet die Erhaltung von Energie und Impuls

$$E_i = E_f + \hbar\omega \quad (3.7)$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f + \mathbf{G} + \mathbf{q} \quad (3.8)$$

(die Indizes bezeichnen Anfangs- und Endzustand). Der Impuls des emittierten Photons \mathbf{q} ist gegenüber der Ausdehnung der Brillouin-Zone vernachlässigbar (für $\hbar\omega = 10 \text{ eV}$ ist $q = 5 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} \ll 2\pi/a \approx 2 \text{ \AA}^{-1}$). Daher können die Übergänge im reduzierten Zonenschema, das den möglichen Austausch eines Gittervektors \mathbf{G} bereits enthält, als senkrechte Übergänge $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f$ behandelt werden.

Die elektronische Bandstruktur besitzt die Symmetrie des Kristallgitters. Abb. 3.4 zeigt einen Schnitt durch die Volumen-Brillouinzone für die bei Nickel vorliegende kubisch-flächenzentrierte (fcc) Kristallstruktur. Die Symmetriepunkte sind mit den üblichen Symbolen gekennzeichnet; der Schnitt liegt in der ΓXUL -Spiegelebene. In

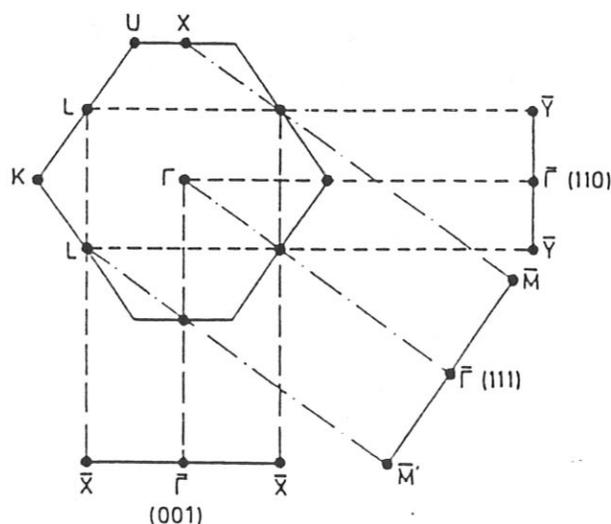


Abb. 3.4: Schnitt durch die Volumen-Brillouin Zone eines fcc-Kristalls in der ΓXUL -Spiegelebene mit Projektionen auf die niedrig-indizierten Oberflächen [nach: *Goldmann et al.* (1985b)].

der Projektion auf die (001)-Oberfläche entspricht sie dem $\overline{\Gamma X}$ -Azimuth, in dem alle IPE-Messungen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Durch die reduzierte Symmetrie an der Oberfläche wird dort die elektronische Bandstruktur modifiziert; insbesondere können im Bereich der obersten Atomlage zusätzliche Zustände in den Lücken der Volumen-Bandstruktur auftreten (s. Kap. 5.2). Durch die sehr geringe Eindringtiefe niederenergetischer Elektronen von nur wenigen Atomlagen [Ertl und Küppers (1985), Abraham und Hopster (1987)] geben die IPE-Messungen Informationen sowohl über die Volumen-Bandstruktur als auch über Zustände an der Oberfläche.

Bei der Bestimmung von $E(\mathbf{k})$ muß jedoch beachtet werden, daß der \mathbf{k} -Vektor der Elektronen zwar im Außenraum definiert ist, aber beim Eintritt in den Kristall die Komponente senkrecht zur Oberfläche k_{\perp} durch den Einfluß des Kristallpotentials zunimmt. Es bleibt wegen der 2-dimensionalen Periodizität des Oberflächen-Potentials nur die Parallelkomponente k_{\parallel} bis auf einen reziproken Oberflächen-Gittervektor G_{\parallel} erhalten

$$\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel \text{ Vakuu}} + \mathbf{G}_{\parallel}. \quad (3.9)$$

Bei hinreichend kleiner Anfangszustandsenergie tritt aber eine Addition von G_{\parallel} ("Oberflächen-Umklapp") nicht auf. Der Betrag von k_{\parallel} ist dann ohne weiteres durch die kinetische Energie der Elektronen im Vakuum $E_{\text{kin,Vakuu}}$ und den Einfallswinkel θ experimentell einstellbar

$$k_{\parallel} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{\text{kin,Vakuu}}} \sin\theta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_f + \hbar\omega - \Phi_p)} \sin\theta. \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnet Φ_p die Austrittsarbeit der Probe; die Endzustandsenergie E_f ist auf die Fermienergie bezogen. Die senkrechte Komponente k_{\perp} ist der Messung nicht zugänglich, weil das Kristallpotential unbekannt ist. Deshalb werden die Meßergebnisse in einem $E(k_{\parallel})$ -Diagramm ausgewertet; darin werden theoretische $E(\mathbf{k})$ -Werte zum Vergleich als projizierte Bandstruktur dargestellt (Energiewerte aller nichtäquivalenten k_{\perp} zu einem k_{\parallel} für auf diesen k_{\parallel} -Wert projiziert).

Die bisher betrachtete Kinematik bestimmt die energetische Lage und den Elektronen-Einfallswinkel, bei denen ein direkter Übergang im IPE-Spektrum auftritt. Seine Intensität wird durch die Ankopplungs-Wahrscheinlichkeit der einfallenden Elektronenwelle an den Anfangszustand $|i\rangle$ und vom Matrixelement M_{fi} für den optischen Übergang bestimmt. Die Ankopplungswahrscheinlichkeit ist umso höher, je größer der Überlapp der Wellenfunktion des einfallenden (freien) Elektrons

mit der Wellenfunktion von $|i\rangle$ im Kristall ist, d. h. die Elektronen koppeln bevorzugt an freielektronen-artige Bänder. In der Dipolnäherung ist im Matrixelement M_{fi} Anfangs- und Endzustand nur über den Impulsoperator \mathbf{p} verknüpft [Plummer und Eberhardt (1982)], da das Vektorpotential der emittierten Strahlung \mathbf{A} vor das Integral gezogen werden kann

$$M_{fi} = \mathbf{A} \cdot \langle f | \mathbf{p} | i \rangle. \quad (3.11)$$

Ohne es zu berechnen, kann man allein aus Symmetrieüberlegungen etwas über M_{fi} aussagen. Liegt die Ausbreitungsrichtung der auftreffenden Elektronen-Welle in einer Kristall-Spiegelebene, dann hat sie gerade Parität bezüglich einer Spiegelung an der Ebene und koppelt nur an gerade Anfangszustände $|i\rangle$. Damit das Matrixelement nicht verschwindet, muß der Integrand gerade sein, also $|f\rangle$ und \mathbf{p} dieselbe Parität haben. Da \mathbf{p}_{\parallel} und \mathbf{p}_{\perp} , die Komponenten des Impulsoperators parallel und senkrecht zur Spiegelebene, von gerader bzw. ungerader Parität sind, ist aus

$$M_{fi} = \mathbf{A}_{\parallel} \cdot \langle f | \mathbf{p}_{\parallel} | i \rangle + \mathbf{A}_{\perp} \cdot \langle f | \mathbf{p}_{\perp} | i \rangle \quad (3.12)$$

sofort ersichtlich, daß bei Übergängen in gerade (ungerade) Endzustände nur Strahlung emittiert werden kann, die parallel (senkrecht) zur Spiegelebene polarisiert ist. Aus der Winkelverteilung der emittierten Strahlung kann die räumliche Lage von \mathbf{p} , und damit die Endzustandssymmetrie bestimmt werden [Donath et al. (1986), Fauster et al. (1989)] (s. Kap. 5.2), obwohl es für Licht mit $\hbar\omega \approx 10$ eV keine effizienten Polarisatoren gibt.

In Experimenten mit IPE (und PES) liegen immer angeregte Zustände vor. In Metallen können die Messungen dennoch als direkte Übergänge zwischen Energiezuständen von Grundzustands-Bandstrukturen ($T = 0$ K) betrachtet werden [Plummer und Eberhardt (1982), Dose (1985)].

3.3 APPARATUR UND MESSVORGANG

Alle in dieser Arbeit vorgestellten Messungen (mit Ausnahme der Kernmikroskop-Beobachtungen) wurden an einer Apparatur für spinaufgelöste Inverse Photoemission [Kolac et al. (1988), Donath (1989)] durchgeführt, die in Kapitel 3.3.1 beschrieben ist. Um den magnetischen Zustand der Probenoberfläche leichter charakterisieren zu können, wurde die Apparatur um eine Kerr-Anordnung erweitert. Damit können *in situ* sowohl IPE- als auch Kerr-Messungen vorgenommen werden (s. Kap. 3.3.2).

3.3.1 APPARATUR FÜR SPINAUFGELÖSTE IPE

Die Apparatur unterscheidet sich von IPE-Aufbauten ohne Spinauflösung durch die wesentlich aufwendigere Erzeugung eines spinpolarisierten Elektronenstrahls. Sie ist in Abb. 3.5 schematisch dargestellt. Zirkular polarisiertes Laserlicht regt spinpolarisierte Photoelektronen in GaAs an, die den Kristall verlassen können, wenn seine Austrittsarbeit durch Adsorption von Cs und O₂ herabgesetzt wird. Nach elektrostatischer Umlenkung um 90° werden transversal polarisierte Elektronen mit einer Transferoptik zur Probe geführt. Von der Probe emittiertes Licht wird von zwei Zählrohren unter verschiedenen Winkeln nachgewiesen.

Die Apparatur besteht aus zwei UHV-Kammern, eine für die "GaAs-Quelle", die andere als Präparations- und Meßkammer. Obwohl die Kammern durch die Transferoptik miteinander verbunden sind, können sie zur unabhängigen Kristallpräparation vakuummäßig getrennt werden; beide Kammern sind jeweils mit einer Ionengetterpumpe, einer Titansublimationspumpe und einer LN₂-Kühlfalle ausgerüstet. Der Basisdruck beträgt in der Quellenkammer $3 \cdot 10^{-9}$ Pa, in der Meßkammer $8 \cdot 10^{-9}$ Pa. Um den störenden Einfluß von Magnetfeldern zu minimieren, wurde die Vertikal-komponente des Erdfelds mit einem Helmholtzspulen-Paar (Durchmesser 3 m) kompensiert und zur weiteren Abschirmung, auch von Streufeldern, sind beide Kammern innen mit einem hochpermeablen Material ausgekleidet. Das Restfeld am Probenort betrug weniger als $5 \cdot 10^{-7}$ T. Außerdem wurden in der Nähe des Elektronenstrahls - insbeson

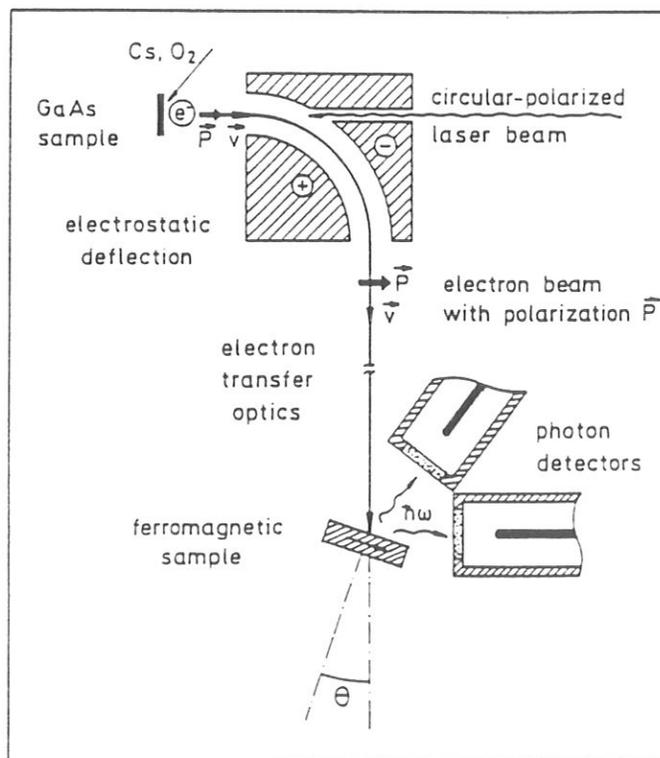


Abb. 3.5: Schematische Darstellung der Apparatur für spinaufgelöste IPE.

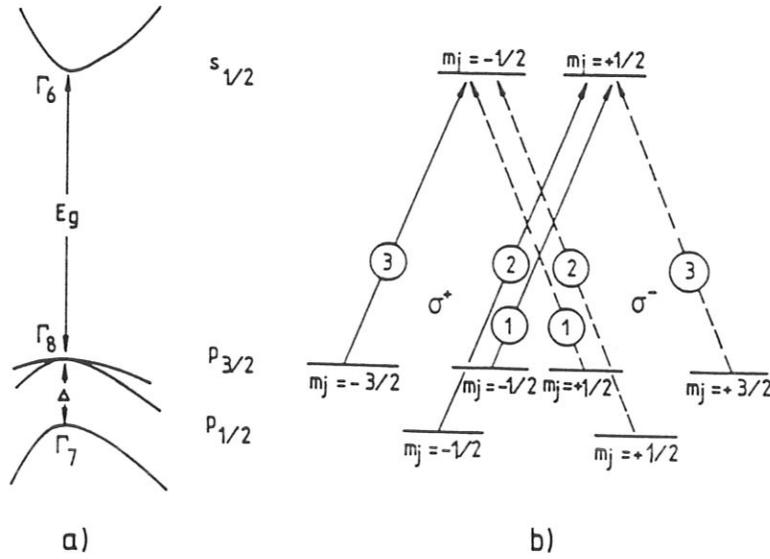


Abb. 3.6: Ausschnitt aus der GaAs-Bandstruktur am Γ -Punkt (a) und mögliche Anregungen zwischen den magnetischen Sub-Niveaus (b) mit den Übergangs-Wahrscheinlichkeiten [nach: *Pierce und Meier* (1976)].

dere für den Probenhalter - kein Edelstahl (Restmagnetisierung nach mechanischer Bearbeitung), sondern ausschließlich unmagnetische Metalle (Al, Ta, Ti,...) verwendet!

Die spinpolarisierten Elektronen werden durch Photoemission aus GaAs erzeugt [*Pierce und Meier* (1976)], dessen Bandstruktur am Γ -Punkt in Abb. 3.6 a ausschnittsweise wiedergegeben ist. Das Valenzband-Maximum ist durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung soweit aufgespalten, daß es möglich ist, nur Elektronen aus dem höhergelegenen $P_{3/2}$ -Niveau ins Leitungsband anzuregen. Dies wird dadurch erreicht, indem man die Photonenenergie nur geringfügig größer wählt als die direkte Bandlücke ($E_g = 1.52$ eV bei $T = 0$ K). Dann beschränkt sich der Prozess näherungsweise auf den Γ -Punkt, und es gelten die Auswahlregeln $\Delta m_j = \pm 1$ für σ^\pm -zirkular polarisiertes Licht (s. Abb. 3.6 b). Entsprechend der relativen Übergangswahrscheinlichkeiten werden bei Beschuß mit σ^+ -Photonen 3 mal soviel Elektronen in den $m_j = -1/2$ Zustand angeregt wie in den $m_j = +1/2$ Zustand; bei Anregung mit σ^- -Photonen ist es umgekehrt. Der theoretisch maximal erreichbare

Polarisationsgrad P einer GaAs-Quelle beträgt also bei Anregung mit σ^+ -Licht

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = \frac{3 - 1}{3 + 1} = 50 \%, \quad (3.13)$$

wobei N_{\uparrow} (N_{\downarrow}) die Zahl der Elektronen mit Spin parallel (antiparallel) zur Quantisierungsachse bezeichnet. Die Quantisierungsachse ist dabei durch den Drehimpuls der Photonen festgelegt. Für σ^- -Licht gilt $P = -50 \%$.

Zur Erzeugung von zirkularpolarisiertem Licht wurden GaAlAs-Laserdioden ($\hbar\omega = 1.49$ eV) in Kombination mit einem Linear-Polarisator und einer Pockelszelle verwendet. Die Pockelszelle erlaubt ein schnelles Umschalten der Lichtpolarisation durch Umpolung der angelegten Spannung. Sie hat aber den Nachteil, daß ein zeitlich schwankender Anteil linear polarisierten Lichts auftreten kann. Dieser kann für die beiden Polaritäten verschieden sein und zeigt eine auffallende Abhängigkeit von der Temperatur der Pockelszelle. Die Störung ist vermutlich darauf zurückzuführen, daß die Oberflächen der Zellen nicht exakt senkrecht zu ihrer kristallographischen c -Achse geschnitten sind; sie trat bei allen drei hier untersuchten Zellen auf. Durch äußerst sorgfältige Justierung (kardanische Lagerung, "Malteserkreuz") konnte erreicht werden, daß der lineare Anteil (im Dauerbetrieb und für beide Polaritäten) unter 1/10 der Intensität blieb. Der lineare Anteil ist bei der Angabe des Polarisationsgrades der Quelle zu berücksichtigen. Das Laserlicht erreicht den GaAs(001)-Kristall (p -dotiert mit $3.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ Zn) durch ein Fenster in der Quellenkammer.

Damit die angeregten Elektronen den GaAs-Kristall verlassen können, wird seine Austrittsarbeit (4 eV) durch Adsorption von Cs und O_2 abgesenkt. Zu Beginn der Quellenpräparation wurde der Kristall zur Reinigung für mindestens 1 h bis knapp unter die Schmelztemperatur (660 °C) erhitzt. Noch während der Abkühlung erfolgte eine kontinuierliche Adsorption des Cs aus einem Dispenser; mit einer intervallweisen Zugabe (Yo-Yo-Technik) von O_2 wurde das Vakuum-Niveau unter das Leitungsbandminimum gesenkt, d. h. negative Elektronen-Affinität (NEA) erreicht. Die Quantenausbeute betrug etwa $10 \mu\text{A/mW}$. Nach vielen Präparationszyklen konnte routinemäßig eine Halbwerts-Lebensdauer von 20 h erzielt werden, so daß - durch Verwendung eines Graukeils zur Einstellung der Laserintensität - ein Strom von $5 \mu\text{A}$ über einen Zeitraum von 150 h zur Verfügung stand, ohne daß die Quelle zwischendurch aktiviert werden mußte. Über diesen Zeitraum steigt die Austrittsarbeit um 100 meV, was bei der Auswertung der IPE-Spektren

berücksichtigt werden muß (s. u.). Der theoretische Polarisationsgrad $|P| = 50\%$ wird aufgrund von Austausch-Streuprozessen der Photoelektronen nicht erreicht. Bei der beschriebenen Präparation beträgt der Polarisationsgrad dieser Quelle $(33 \pm 6)\%$ [Donath (1989)], wobei im Fehler der Einfluß der Pockelszelle enthalten ist. Dieser Polarisationsgrad wird reproduzierbar erreicht [Kolac *et al.* (1988)] und ist unabhängig vom Alter einer Präparation [Donath (1989)]. Durch die Transferoptik können etwa 80% der emittierten Elektronen die Probe erreichen; die Strahldivergenz ist unter 2° , die Halbwertsbreite etwa 3 mm (Kontrolle durch Faradaybecher). Bei typischen Emissionsströmen von $5\ \mu\text{A}$ besitzt der Strahl an der Probe eine Energieverteilung mit einer Halbwertsbreite von weniger als 0.35 eV .

Die Meßkammer war zur Präparation und Charakterisierung der Probe mit einer Ionenkanone, einer 4-Gitter LEED- und Auger-Optik und einem Quadrupol-Massenspektrometer ausgestattet. - Für die Messungen stand als Probe ein Nickel-Einkristall von der Form eines Fensterrahmens zur Verfügung (s. Abb. 4.3), in dem der magnetische Fluß geschlossen ist. Die Schenkel liegen parallel zu $\langle 110 \rangle$ -Richtungen, haben einen Querschnitt von $3 \times 3.5\text{ mm}^2$ und eine äußere Kantenlänge von 13.5 mm . Die (001)-Oberfläche wurde mit Diamantpaste bis zu einer Körnung von $0.25\ \mu\text{m}$ poliert und anschließend mehrere Stunden bei $800\text{ }^\circ\text{C}$ gegläht. Höhere Kristalltemperaturen über eine Dauer von Stunden waren ausgeschlossen, wollte man ein allzu starkes Bedampfen der Isolationen verhindern. (Nickel-Dampfdruck bei $1200\text{ }^\circ\text{C}$: $\sim 1 \cdot 10^{-3}\text{ Pa.}$) Die Probe wurde deshalb nur wenige Minuten bei $1200\text{ }^\circ\text{C}$ sowie eine halbe Stunde bei $1000\text{ }^\circ\text{C}$ gehalten. Zur Magnetisierung wurde um einen Schenkel eine freitragende Spule gewickelt. Da für IPE-Messungen elektrostatische Aufladungen zu vermeiden sind, durfte dazu nur nicht-isolierter Draht verwendet werden, was die Windungszahl auf 10 beschränkte. Die Spule konnte im DC-Betrieb maximal mit 1.5 A belastet werden. Zur Einstellung der remanenten Magnetisierung wurden kurze Strompulse ($\sim 50\text{ A}$, $\sim 1\text{ ms}$) gegeben. Da die Magnetisierung in Nickelkristallen äußerst empfindlich auf Spannung reagiert, wurde der Kristall durch Elektronenbeschuß (1 kV , 10 mA) geheizt; es konnten so die zur "Ohmschen Heizung" nötigen massiven Kontakte am Kristall vermieden werden. Die Proben temperatur wurde über ein NiCr/NiAl-Thermoelement gemessen.

Bei der Präparation der Ni(001)-Oberfläche erwies sich Kohlenstoff als die

hartnäckigste Verunreinigung. Er segregierte durch 2-stündiges Heizen (800 °C) an die Oberfläche und wurde von dort durch Ionenbeschuß (1 keV, $-3 \mu\text{A}$, 1/2 h) entfernt; bei mehrmaliger Wiederholung dieser Prozedur konnte der oberflächennahe Bereich an Kohlenstoff verarmt werden. Anschließend wurde in vielfach wiederholten Zyklen [Musket *et al.* (1982)] aus Sputtern, Adsorption von Sauerstoff und kurzem Aufheizen der Probe (600 °C) der Kohlenstoff an der Oberfläche weiter verringert, da er mit adsorbiertem Sauerstoff Kohlenmonoxid bildet, welches desorbiert. Die dabei erforderliche Menge an Sauerstoff nahm von anfänglich einigen Langmuir (1 Langmuir (L) entspricht $1 \cdot 10^{-6}$ mbar s) auf etwa 1/10 L ab für die saubere Probe; sie zeigt ein scharfes LEED-Bild mit geringer Untergrund-Intensität und keine Verunreinigungen im Auger-Spektrum. (In diesem Zustand wurde nach Adsorption von Sauerstoff mit LEED eine $p(2 \times 2)$ -Überstruktur mit den in der Literatur bekannten Intensitätsverhältnissen [Demuth und Rodin (1974)] beobachtet.) Die Oberflächengüte ließ sich, wie bei Donath (1989), am empfindlichsten durch Intensität und Energielage des kristallinduzierten Oberflächenzustands (s. Kap. 5.2) in den IPE-Spektren selbst kontrollieren.

Die von der Probe emittierten Photonen werden von Geiger-Müller-Zählrohren [Dose (1977)] nachgewiesen, die durch Kombination von SrF_2 -Eintrittsfenstern mit I_2 als Füllgas energieselektiv wirken [Goldmann *et al.* (1985a)]. Durch die Transmissionskante des SrF_2 -Fensters und die Anregungsschwelle für dissoziative Photoionisation von I_2 liegt der Schwerpunkt der Nachweisenergie bei 9.43 eV mit einer Varianz von $(118 \pm 8 \text{ meV})^2$ [Dose *et al.* (1986)]. Zur Apparatefunktion mit einer Breite von unter 400 meV trägt nur noch die Energieverteilung des Elektronenstrahls bei.

Die Photonen werden gleichzeitig in zwei Zählrohren unter verschiedenen Winkeln (37° und 90° zur Elektronen-Einfallrichtung) nachgewiesen; Elektronenstrahl und Zählrohre liegen in einer Ebene. Durch Drehen der Probe um eine senkrecht dazu stehende Achse wird der Elektronen-Einfallswinkel θ geändert. Die Ebene liegt senkrecht zu einer Ni(001)-Spiegelebene, so daß man äquivalente Einfallswinkel erhält, wenn man die Probe in Gegenrichtung dreht; das eröffnet einen dritten Photonen-Nachweiswinkel. Auf diese Weise gewinnt man eine Information über die Strahlungscharakteristik der Übergänge [Donath *et al.* (1990)]. Sie erlaubt eine teilweise Polarisationsanalyse und damit die Festlegung der

Symmetrie des Endzustands.

Die Aufnahme der IPE-Spektren erfolgte durch schrittweise Änderung der Strahlenergie. Bei jeder Energie wurde die Spinrichtung der Elektronen nach wenigen Sekunden umgekehrt, um die Spektren für beide Spinrichtungen *quasi gleichzeitig* zu messen. Die von der Probe emittierten Photonen wurden für jede Spinrichtung so lange gezählt, bis eine voreingestellte Ladungsmenge absorbiert war; die Spektren sind also auf gleiche Ladung normiert. Der absorbierte Strom ist am oberen Rand der $\bar{\Gamma}$ -Bandlücke spinabhängig (s. Kap. 6); die Spin-Asymmetrie beträgt dort bis zu 3 %. Ein möglicher Einfluß (durch Ankopplungseffekte) auf die Spin-Asymmetrie der IPE-Spektren ist aber bereits 1 eV oberhalb der Fermienergie vernachlässigbar. Um Veränderungen des Probenzustands, etwa durch den Restgas-Einfluß, anhand der IPE-Spektren selbst ablesen zu können, wurde die Meßzeit pro Energiepunkt auf nur wenige Sekunden beschränkt, so daß die Zeit für ein Einzelspektrum nur etwa 10 min betrug. Das ist kurz im Vergleich zur Meßzeit von etwa 1 h, innerhalb der die Intensität des kristallinduzierten Oberflächenzustands um weniger als 10 % abnahm. Die Meßzeit wiederum ist kurz auf der Zeitskala der Austrittsenergieänderung $\Delta\Phi_K$ der Kathode (100 meV in 150 h, s. o.). Durch diese Änderung verschiebt sich die Einsatzkante der IPE-Spektren, festgelegt durch

$$eU + \Phi_K \geq \hbar\omega, \quad (3.14)$$

im Laufe der Kathodenalterung zu kleineren Strahlspannungen U . Verschiebungen von 20 meV konnten mit der Gegenfeldmethode sicher nachgewiesen werden. Für eine gute Statistik ist es erforderlich, viele Einzelspektren aufzuaddieren. Durch einen entsprechenden Offset der Strahlspannung war es möglich, bei unterschiedlichem Alter der Quelle aufgenommene Einzelspektren zu verwenden, ohne die vorgetäuschten Peakverschiebungen. Eine möglichst vollständige Ausnutzung der Quellen-Standzeit war besonders wichtig bei den Oberflächenzuständen. Dort betrug die reine Meßzeit über 30 h; hinzu kommt die Präparationszeit.

Zur Auswertung der IPE-Spektren ist eine möglichst genaue Kenntnis des Elektroneneinfallwinkels θ erforderlich. Eine Möglichkeit zur Festlegung von senkrechter Inzidenz bietet auf der Ni(001)-Oberfläche der sehr intensive Übergang in ein sp-Band (s. Kap. 5.1), an dessen niederenergetischer Flanke die Photonen-zählrate ein deutlich ausgeprägtes Maximum für $\theta = 0^\circ$ aufweist [Donath (1984)].

Um einen möglichen Streufeld-Einfluß auszuschließen, wurde die Strahlage für nichtsenkrechten Einfall über die bzgl. $\theta = 0^\circ$ symmetrische Winkelabhängigkeit des Stroms kontrolliert, welcher von der Probe bei fester Strahlenergie absorbiert wird [Schneider (1989)]. Beide Methoden führten auf denselben Nullpunkt (Genauigkeit $\pm 1^\circ$) für die Winkelskala. In Remanenz hatte die Umkehr der Probenmagnetisierung im für die IPE-Messungen verwendeten Energiebereich von 7 bis 21 eV keinen Einfluß auf den Elektronenstrahl.

Für den Nachweis von Spin-Asymmetrien ist es erforderlich, mögliche Unsymmetrien durch die Apparatur auszuschließen. Eine wichtige Kontrollmöglichkeit beruht darauf, daß Spin-Effekte nur von der *relativen* Orientierung der Elektronen-Polarisation zur Quantisierungsachse, d. h. der Probenmagnetisierung abhängen. Bei gleichzeitiger Umkehr von Polarisation *und* Magnetisierung sollte ein Spin-Effekt unverändert bleiben, bei Umkehr von nur einer der beiden Größen das Vorzeichen der Asymmetrie wechseln. Bei allen spinaufgelösten Messungen wurde daher für die vier möglichen Kombinationen je eine Serie von Spektren aufgenommen. Die Spin-Asymmetrien - und damit auch die Peak-Aufspaltungen - waren innerhalb der Statistik (bis auf das Vorzeichen) identisch. Durch diese Kontrolle, zusammen mit der quasi gleichzeitigen Messung in beiden Spinrichtungen, können apparativ vorgetäuschte Peak-Aufspaltungen ausgeschlossen werden. Die kleinste, noch nachweisbare Aufspaltung hängt von den IPE-Spektren selbst ab (s. Kap. 5). Zum Vergleich mit theoretischen Bandstrukturen müssen die spinaufgelösten Spektren "hochgerechnet" werden. Der Wert der gemessenen Spin-Asymmetrie - und damit auch der Spin-Aufspaltung der Peaks - hängt vom Skalarprodukt $\mathbf{P} \cdot \mathbf{J}$ des Polarisationsvektors \mathbf{P} mit der mittleren Probenmagnetisierung \mathbf{J} ab [Kessler (1985)]. Diese Größe ist vom Polarisationsgrad der Quelle $|\mathbf{P}|$ sowie der Domänenstruktur der Oberfläche abhängig und ändert sich mit dem Elektronen-Einfallswinkel θ . Alle spinaufgelösten Spektren dieser Arbeit wurden auf $\mathbf{P} \cdot \mathbf{J} = J$ hochgerechnet. Das entspricht dem hypothetischen Fall eines Elektronenstrahls im reinen Spinzustand ($|\mathbf{P}| = 100\%$) und $\mathbf{P} \parallel \mathbf{J}$. Dazu wurden die dargestellten Zählraten $N_{\uparrow, \downarrow}$ aus den gemessenen Zählraten $n_{\uparrow, \downarrow}$ entsprechend

$$N_{\uparrow, \downarrow} = \frac{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}{2} (1 \pm A) \quad (3.15)$$

bestimmt, wobei die Spin-Asymmetrie als

$$A = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}} \frac{1}{P} \frac{1}{\cos \theta} \quad (3.16)$$

definiert ist. Für den Fall, daß die Probe homogen ("eindomänig") und parallel zur P-Richtung (Schenkelachse) magnetisiert ist, lassen sich die Spin-Aufspaltungen der hochgerechneten Spektren mit theoretischen Bandstrukturen vergleichen; sie geben Minoritäts- und Majoritätsbänder für Elektronen wieder, deren Spins ja parallel bzw. antiparallel zur Magnetisierung stehen. Welche Aussagen über Spinaufspaltungen lassen sich aber anhand der hochgerechneten Spektren treffen, wenn die Probenoberfläche - wie bei Ni(001) im Bereich hoher Anisotropie (s. Kap. 4.2) - nicht eindomänig ist? Jede davon abweichende Domänenstruktur führt zu größeren Winkeln zwischen \mathbf{P} und \mathbf{J} , als durch den Einfallswinkel θ berücksichtigt wird. Diese Aussage ist für $\theta = 0^\circ$ ohne weiteres richtig. Für nichtsenkrechten Einfall ($\theta \neq 0^\circ$) ist dazu die Annahme erforderlich, daß die Magnetisierungskomponente senkrecht zur Oberfläche (im Mittel über den Strahlquerschnitt) verschwindet. Das ist bei Nickel in Remanenz in guter Näherung der Fall (s. Kap. 2.3). (Die Magnetisierung liegt in der ersten Atomlage von Ni(001) aufgrund der Oberflächenanisotropie in der Oberfläche (vgl. Kap. 4.4).)

Man kann nun für die Hochrechnung, unabhängig von der tatsächlich vorliegenden Domänenstruktur, den eindomänigen Zustand mit \mathbf{J} parallel zur Schenkelachse annehmen. Dann ist der $1/\cos$ - Faktor in Gleichung (3.16) immer kleiner oder gleich einem Faktor für die tatsächliche Struktur. In den auf diese Weise hochgerechneten Spektren sind die Werte für Asymmetrie und Spin-Aufspaltung also *untere Grenzen* der tatsächlichen Größen.

3.3.2 ANORDNUNG FÜR *IN SITU*-KERR-MESSUNGEN

Durch die Fensterrahmen-Geometrie ist der magnetische Fluß in der Probe geschlossen. Das führt dazu, daß die Magnetisierung, gemittelt über viele Domänen, nur eine Komponente parallel zur Schenkelachse besitzt (vgl. Kap. 4.1). Zur Untersuchung der Oberflächenmagnetisierung eignet sich deshalb der longitudinale Kerr-Effekt, wenn man die Lichteinfallsebene so wählt, daß sie parallel zur Schenkelachse ($[\bar{1}\bar{1}0]$) liegt (vgl. Abb. 4.3). Messungen mit fester Polarisation des einfallenden Lichts zeigten, daß das Kerrsignal sehr empfindlich auf mechanische Schwingungen (z. B. des Manipulators) reagiert; bei fester Polarisation war das Signal-zu-Untergrund Verhältnis nur bei rechteckförmiger Hysterese zur Messung

der Koerzitivfelder ausreichend. Die Details des komplizierten Hystereseverlaufs der Magnetisierung an Ni(001) konnten aber erst durch Anwendung von Modulationstechnik untersucht werden. (Damit ist es sogar möglich, sehr kleine Magnetisierungsänderungen in atomar dünnen Schichten nachzuweisen.)

Die Anordnung ist in Abb. 3.7 schematisch dargestellt. Licht eines HeNe-Lasers fällt unter einem Winkel θ zur Oberflächennormalen auf die Probe. Ein parallel zur Einfallsebene stehender Linear-Polarisator (P) und ein photoelastischer Modulator (PEM) erzeugen eine bei fester Frequenz (50 kHz) oszillierende Strahlpolarisation. Das von der Probe reflektierte, senkrecht zur Einfallsebene polarisierte Licht wird mit einer PIN-Diode (D) gemessen; sie liefert das Signal für einen Lock-In Verstärker.

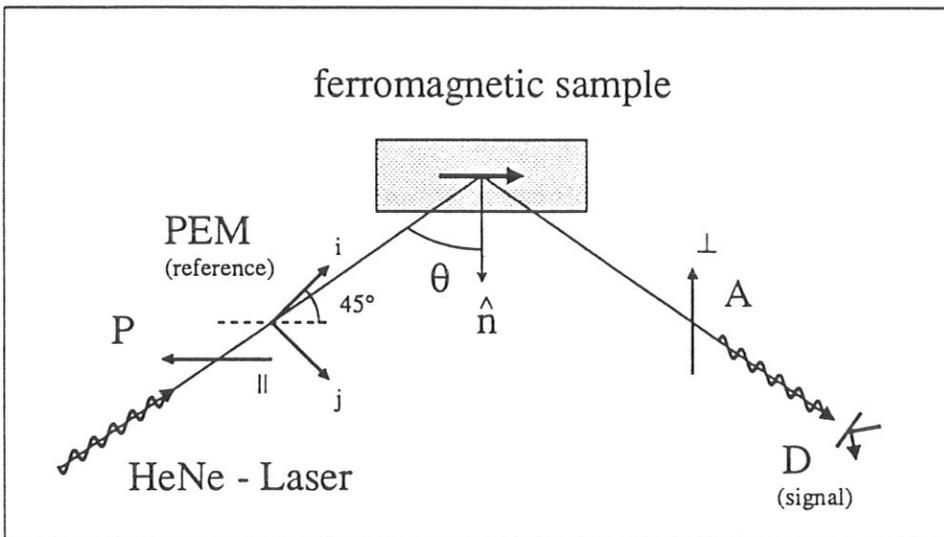


Abb. 3.7: Schematische Darstellung des Aufbaus für *in situ* Kerr-Messungen in Modulationstechnik. (Erläuterungen im Text.)

Die Wirkung des PEM basiert auf dem umgekehrten piezoelektrischen Effekt in einem amorphen Quarzblock, d. h. auf dessen Verformung bei angelegter Spannung. Der quaderförmige Block schwingt entlang einer Kante (j -Achse). Dadurch wird der Brechungsindex n_j , also die Ausbreitungsgeschwindigkeit für Licht, das entlang j linear polarisiert ist, harmonisch moduliert; der Brechungsindex für dazu senkrecht

polarisiertes Licht n_i bleibt konstant. Trifft in der Einfallsebene polarisiertes Licht senkrecht zur i,j -Ebene auf den PEM in 45° -Stellung, so haben die Komponenten in i - und j -Richtung gleiche Amplituden. Nach dem Durchgang beträgt die Phasenverschiebung der beiden Komponenten

$$\delta = \frac{2\pi d}{\lambda} (n_j - n_i) = \delta_{\max} \sin(\omega t) \quad (3.17)$$

so daß der Polarisationszustand des auf die Probe treffenden Lichts mit ω moduliert ist (d : Quarzblockdicke senkrecht zu i und j).

Im Vergleich zu Kerrmessungen mit primärseitig fester Polarisation ist die Signalberechnung bei Anwendung der Modulationstechnik etwas aufwendiger. Zur besseren Übersicht zerlegt man dazu das Licht in die parallel und senkrecht zur Einfallsebene schwingenden Komponenten E_{\parallel} bzw. E_{\perp} [Bethke (1988)]. Betrachtet man es als 2-komponentigen Vektor E , dann lassen sich alle optischen Komponenten als 2×2 -Matrizen darstellen. Die Matrix für die Reflexion an der Probenoberfläche enthält auf der Diagonalen die (komplexen) Metallreflektivitäten. Ihre Nebendiagonalelemente, die Kerramplituden, verknüpfen E_{\parallel} und E_{\perp} . Für die Polarisatorstellungen in Abb. 3.7 beträgt die mit der Diode meßbare Intensität (unter Vernachlässigung des in der Kerramplitude quadratischen Terms)

$$|E|^2 = \frac{1}{2} R_{\perp}^2 (1 - \cos\delta) + K_{\parallel}(0) R_{\perp} \sin\delta \sin\Delta. \quad (3.18)$$

R_{\perp} ist der Betrag der Metallreflektivität für E_{\perp} , $K_{\parallel}(0)$ der Betrag der Kerramplitude in der Einfallsebene (bei $\varphi = 0^\circ$, s. Abb. 3.1) und Δ bezeichnet die Phasendifferenz zwischen den beiden Amplituden. Eine Zerlegung der Terme $\sin(\delta_{\max} \sin(\omega t))$ und $\cos(\delta_{\max} \sin(\omega t))$ nach ihren harmonischen Anteilen führt auf die Besselschen Zylinderfunktionen J_n ($n = 0, 1, 2, \dots$). Die im Experiment zu erwartenden Intensitäten betragen (bis 2ω):

$$I_{DC} = \frac{1}{2} R_{\perp}^2 [1 - J_0(\delta_{\max})] \quad (3.19)$$

$$I_{\omega} = 2 K_{\parallel}(0) R_{\perp} J_1(\delta_{\max}) \sin\Delta \times \sin(\omega t) \quad (3.20)$$

$$I_{2\omega} = R_{\perp}^2 J_2(\delta_{\max}) \sin\Delta \times \cos(2\omega t). \quad (3.21)$$

Das Kerrsignal tritt also bei der Modulationsfrequenz ω auf. (Der das Gesamtsignal wegen $R_{\perp} \gg K_{\parallel}(0)$ dominierende 2ω -Anteil wird durch den Lock-In Verstärker unterdrückt.)

Für eine Auskunft über den Magnetisierungszustand einer Oberfläche sind

Kerr-Messungen wesentlich weniger zeitaufwendig als IPE-Messungen (bei jedoch wesentlich größerer Informationstiefe). Ein bekannter Nachteil der Methode [Boockmann (1989)] besteht (auch bei Anwendung von Modulationstechnik) in ihrer Empfindlichkeit gegenüber langsamen thermischen Drifts des Gesamtsystems, die auch hier vor allem bei erhöhter Temperatur (oberhalb von 300 °C) auftraten. Daher ist lediglich eine Messung einer Magnetisierungs-Änderung möglich, wie sie z. B. bei der Ummagnetisierung innerhalb einer Hysterese stattfindet. Zur Magnetisierungs-Messung ohne Ummagnetisierung - über einen Zeitraum von Minuten (oder länger) - kann dagegen die Spin-Asymmetrie von IPE-Übergängen benutzt werden (s. Kap. 4.4).

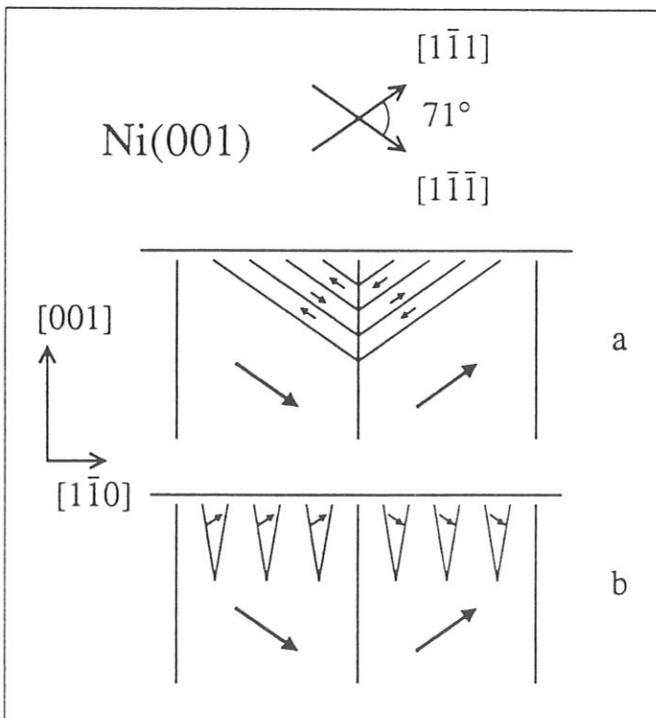
4. Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche in Abhängigkeit von Temperatur und Feld

In der nicht ortsaufgelösten Elektronenspektroskopie an Oberflächen wird das Signal schon aus Intensitätsgründen meist über einen Probenbereich von einigen mm^2 gemittelt. Will man bei der Untersuchung magnetischer Oberflächen mit spektroskopischen Methoden eine Spin-Information erhalten, dann sollten die Probenoberflächen möglichst homogen magnetisiert sein. Bei Experimenten, die unempfindlich gegenüber Streufeldern sind, kann man die Probe während der Messung in Sättigung halten [z.B. *Eib und Alvarado* (1976)]. Diese Möglichkeit scheidet für die spinaufgelöste Inverse Photoemission (IPE) jedoch aus: Um bei kinetischen Energien der Elektronen von etwa 10 eV eine gute Winkelauflösung zu erzielen, müssen äußere Felder bei der Messung vermieden werden. Deshalb sollte die Probenoberfläche bereits *in Remanenz* eine hohe Magnetisierung aufweisen. Liegt in der Oberfläche eine leichte Richtung, wie z. B. bei Fe(001), Fe(110) und Ni(110), so reichen die Grunddomänen bis an die Oberfläche (s. Kap. 2.2) und man kann durch entsprechende Wahl der Kristallgeometrie erreichen, daß die Oberfläche in Remanenz nur aus einer Domäne besteht (Sättigung). Für Oberflächen, die *keine* leichte Richtung enthalten, ist das unmöglich und es entstehen komplizierte Strukturen von sehr kleinen Domänen. Ein Beispiel bildet Ni(001). Auf der Grundlage bisher bestehender Experimente läßt sich die zur spektroskopischen Untersuchung wichtige Frage nach der remanenten Magnetisierung der Oberfläche nicht eindeutig beantworten.

Das Kapitel ist folgendermaßen gegliedert: Resultate früherer Messungen und Domänen-Modelle sind in Kap. 4.1 beschrieben. Darauf werden Temperatur- und Feldabhängigkeit der Ni(001)-Oberflächen-Magnetisierung ausführlich untersucht: Die ortsgemittelte Magnetisierung in Kap. 4.2, die Domänenstruktur in Kap. 4.3. Kap. 4.4 beschäftigt sich mit der ausgeprägten Temperatur-Hysterese von Ni(001)-Oberflächen-Domänen. In Kap. 4.5 wird das Ummagnetisierungsverhalten des Volumens gezeigt.

4.1 BISHERIGE UNTERSUCHUNGEN UND DOMÄNEN-MODELLE

Die Domänenstruktur der Ni(001)-Oberfläche wurde in den 60er Jahren mit der Bittertechnik untersucht (bei Raumtemperatur). Kleine magnetische Teilchen eines Kolloids sammeln sich an Stellen der Oberfläche, an denen Streufeld austritt [Schwink und Schärpf (1968)]. Damit werden also magnetische Ladungen nahe der Oberfläche markiert und viele der Stellen sichtbar, an denen Wände die Oberfläche erreichen. Als Proben wurden rechteckige [Schwink und Grüter (1967)] und zylindrische [Spreen (1967)] Nickel-Einkristalle mit einer langen Achse parallel zur $\langle 110 \rangle$ -Richtung benutzt. In ihnen bilden sich im Volumen plattenförmige Grunddomänen aus, die entlang einer leichten Richtung, einer $\langle 111 \rangle$ -Richtung magnetisiert und durch senkrecht zur langen Achse stehende (110) - 71° -Wände getrennt sind. An den (001)-Oberflächen sind die beobachteten Bitterstreifen sehr komplex und stark feldabhängig. Für die zusätzlichen Domänen an der Oberfläche wurden zwei Modelle vorgeschlagen, die in Abb. 4.1 gezeigt sind. Beide Modelle enthalten neben den Grunddomänen eine weitere Generation, die die Domänenweite an der Oberfläche (und damit das austretende Streufeld) reduziert. Im Modell a



geschicht dies durch antiparallel magnetisierte Scheiben, in Modell b durch keilförmige Domänen, deren Magnetisierung, projiziert man sie auf die Oberfläche, sich nicht vom Volumen unterscheidet. Mittelt man also über einen gegen die

Abb. 4.1: Modelle für Domänen an der Ni(001)-Oberfläche in Remanenz (a) und bei entlang $[1\bar{1}0]$ angelegtem Feld (b) [nach: Spreen (1967)]. Die Modelle enthalten keine Abschlußdomänen (Lücken an der Oberfläche).

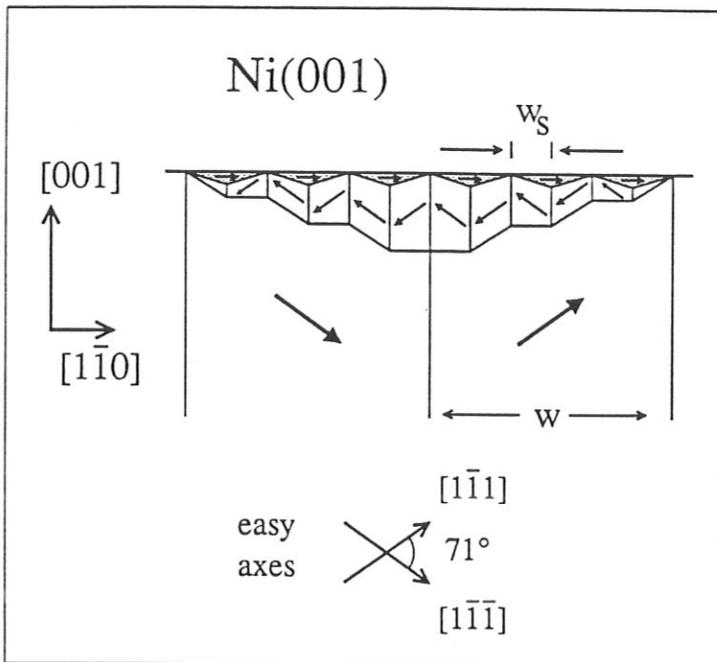


Abb. 4.2: Von *Krause und Frey* (1969) vorgeschlagenes Modell für Abschluß- und Verzweigungsdomänen an Ni(001) in Remanenz. Durch Verzweigungsdomänen ist die Domänenweite an der Oberfläche (w_s) wesentlich kleiner als im Volumen (w). Das Modell enthält nur *parallel* zu $[1\bar{1}0]$ magnetisierte Abschlußdomänen.

Oberflächen-Domänenweite großen Bereich, so verschwindet im Modell a die Magnetisierung in der Oberfläche, während man bei b etwa 80% ($\cos 35^\circ$) der spontanen Magnetisierung erhält! Nach *Spreen* ist die Abschlußstruktur in Remanenz vornehmlich aus Scheiben aufgebaut (im Innern streufeldfrei und keine Magnetostruktionsenergie erforderlich), während in einem äußeren Feld (parallel zu $[1\bar{1}0]$) die keilförmigen Domänen überwiegen. Ob sich eine zweite Generation von noch feineren Domänen an der Oberfläche bildet, ließ sich anhand der Beobachtungen nicht entscheiden. Die Modelle in Abb. 4.1 geben darüber folglich keine Auskunft.

Erst eine Untersuchung mit dem Kerr-Mikroskop von *Krause und Frey* (1969) erlaubte die Aufstellung eines verfeinerten Modells für die Domänen an Ni(001). Die Eindringtiefe von sichtbarem Licht in Metallen beträgt nur wenige 100 Å, was etwa der Dicke einer Blochwand entspricht (in Nickel 400 Å). Damit sind der Kerrtechnik die Abschlußdomänen zugänglich, wobei allerdings darunterliegende (Verzweigungs-) Domänen unsichtbar bleiben. *Krause und Frey* beobachteten in Remanenz eine homogene Magnetisierung der Oberfläche (bei Raumtemperatur). Sowie jedoch ein äußeres Feld anliegt, wurden Domänen mit entgegengesetzter Magnetisierung sichtbar, die erst bei annähernd gesättigter Probe wieder

verschwanden. Das von *Krause und Frey* vorgeschlagene Modell für die Remanenz enthält zwei Generationen (s. Abb. 4.2): Eine Echelonstruktur zur Verzweigung sowie Abschlußdomänen, die ausschließlich *parallel* zur mittleren Volumenmagnetisierung zeigen. Nach diesem Modell ist die mittlere Oberflächenmagnetisierung gleich der spontanen Magnetisierung J_S und damit sogar größer als die auf die Oberfläche projizierte Magnetisierung der Grunddomänen!

Im Gegensatz dazu finden *Klebanoff et al.* (1987) (vgl. Kap. 5.1), ebenfalls mit Kerrtechnik, daß die mittlere Oberflächen-Magnetisierung in Remanenz verschwindet! Der dort untersuchte Kristall besaß aber, im Unterschied zu den oben beschriebenen Proben, keine lange Achse parallel zu $\langle 110 \rangle$, sondern hatte die Form einer rechteckigen Platte mit $\langle 100 \rangle$ -Kanten. Um die Probe remanent entlang einer $\langle 100 \rangle$ -Richtung zu magnetisieren, wurde sie auf einem Hufeisenmagneten befestigt.

Der Grund für dieses so vollkommen unterschiedliche Verhalten der Ni(001) Oberflächen - Magnetisierung ist bislang ungeklärt. - Die Kristallanisotropie hängt in Nickel stark von der Temperatur ab, und es wechselt oberhalb von 470 K die leichte Richtung zu $\langle 100 \rangle$; dann sind an Ni(001) aber keine Abschlußdomänen mehr erforderlich. Bisher gibt es jedoch keine Untersuchung darüber, wie sich die Struktur von Abschlußdomänen und damit die Magnetisierung der Oberfläche mit der Temperatur ändert.

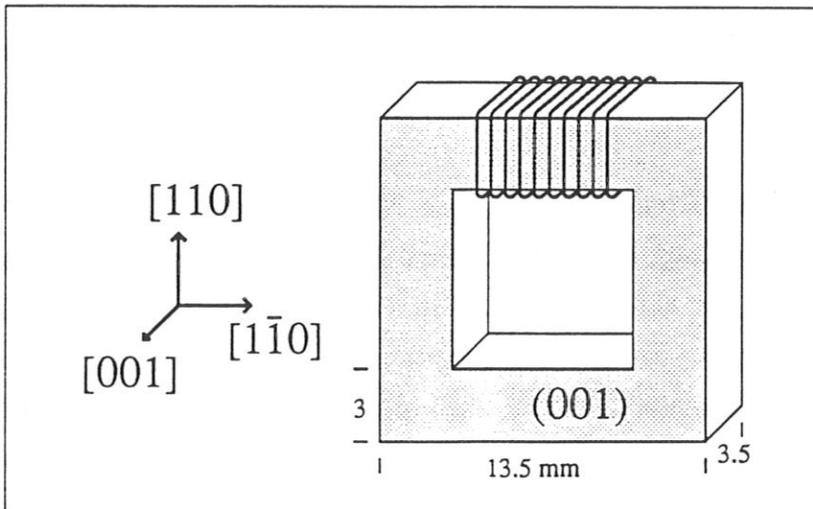


Abb. 4.3: Geometrie des Nickel Fensterrahmen-Kristalls.

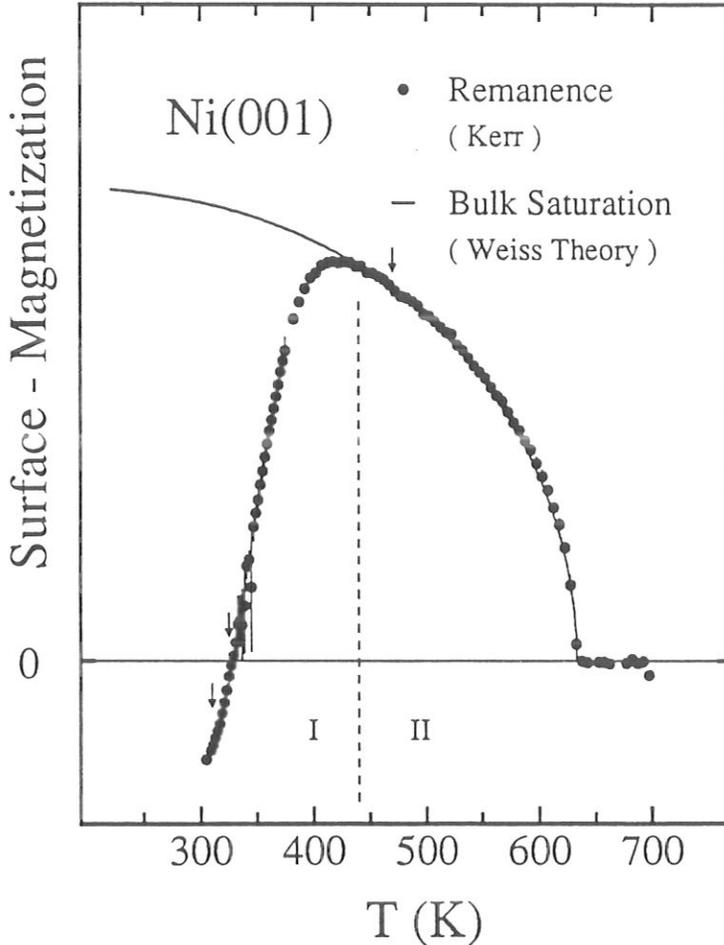
4.2 ORTSGEMITTELTE MAGNETISIERUNG

Für die Messungen stand als Probe ein Nickel-Einkristall von der Form eines Fensterrahmens zur Verfügung (s. Abb. 4.3), in dem der magnetische Fluß geschlossen ist und die Schenkel parallel zu $\langle 110 \rangle$ -Richtungen liegen. Gemessen wurde ausschließlich an dem der Magnetisierungs-Spule gegenüber liegenden Schenkel.

Um einen Überblick über das magnetische Verhalten der Ni(001) Oberfläche zu gewinnen, wurde zuerst die Temperaturabhängigkeit der Remanenz untersucht. Mit dem longitudinalen Kerreffekt (s. Kap. 3.1) wurde dazu die Magnetisierungskomponente J_{\parallel} parallel zum Schenkel gemessen, und zwar gemittelt über eine Fläche von etwa 1 mm^2 in der Schenkelmitte. Das Licht fiel unter einem Winkel von 23° zur Normalen ein; sowohl Schenkelachse ($[1\bar{1}0]$) als auch Oberflächennormale lagen in der Einfallsebene. Um einen Einfluß der Streufelder durch die Heizwendel auszuschließen, wurde nur bei abgeschalteter Heizung gemessen, also während die Probe abkühlte. Im Abstand von wenigen Sekunden wurden zwei Strompulse (äquivalent zu $\sim 125 \text{ Acm}^{-1}$) von entgegengesetzter Richtung durch die Magnetisierungswendel gegeben und jeweils das Kerrsignal gemessen; die Differenz der beiden Kerrsignale ist proportional zur remanenten Magnetisierung.

Für den in Abb. 4.4 gezeigten Verlauf wurden drei Einzelmessungen in Temperaturintervallen von 5 K (oberhalb 380 K) sowie 2 K (unterhalb 380 K) zusammengefasst. Die durchgezogene Kurve zeigt den Temperaturverlauf der spontanen Magnetisierung nach der Weißschen Molekularfeldtheorie (s. Kap 2.1). Für Spin $\frac{1}{2}$ und $T_C = 630 \text{ K}$ gibt sie den Verlauf der spontanen Magnetisierung (Sättigungsmagnetisierung) in Nickel hinreichend gut wieder [Kneller (1962)]. Zur Skalierung der Kerrdaten ist der Wert bei 460 K an den theoretischen Verlauf angepasst. Oberhalb von 440 K ist im Temperaturverlauf zwischen der remanenten Oberflächenmagnetisierung und der Sättigung kein Unterschied festzustellen. Unterhalb von 440 K nimmt die Magnetisierung in der Oberfläche aber drastisch mit der Temperatur ab und verschwindet bei etwa 330 K. Bei Raumtemperatur ist sie sogar der Volumenmagnetisierung entgegengesetzt! Diese durch Strompulse eingestellte remanente Magnetisierung ist eine eindeutige Funktion der Temperatur: Wenn man die Probe von Raumtemperatur aus nur wenig erwärmt und dann bei

Abb. 4.4: Temperaturabhängigkeit der remanenten Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche. (Erläuterungen im Text. Die Pfeile zeigen Temperaturen für die Hysteresen in Abb. 4.5.)



Abkühlung mißt, so zeigt sich derselbe Verlauf. Entsprechend dem vollkommen unterschiedlichen Verhalten bei hohen und tiefen Temperaturen wollen wir die Bereiche I und II unterscheiden (s. Abb. 4.4). Wie läßt sich diese ausgeprägte Temperaturabhängigkeit im Bereich I verstehen? Was bestimmt den Übergang zwischen den beiden Temperaturbereichen?

In Induktionsmessungen (s. Kap. 4.5) wurde festgestellt, daß das Volumen des Proben-Schenkels bei Raumtemperatur eine hohe remanente Magnetisierung besitzt. Die gegenüber der Sättigung stark reduzierte Remanenz beschränkt sich also auf die Oberfläche. Entsprechend der Kerr-Informationstiefe tragen nur die Domänen zum

Signal bei, die unmittelbar an der Oberfläche liegen, in Remanenz also die Abschlußdomänen. Der Temperaturverlauf der gemittelten Magnetisierung im Bereich I ist folglich eine Konsequenz der temperaturabhängigen Struktur der Abschlußdomänen an der Ni(001)-Oberfläche.

Folgendes muß beachtet werden: Zum einen ist die Ausdehnung einzelner Abschlußdomänen von der Größenordnung μm (s. Kap. 2.3). Die Messung gibt aber nur Auskunft über den Mittelwert der Magnetisierung, der sich aus den Beiträgen einzelner Domänen zusammensetzt. (Daß die Domänen an der Oberfläche, wie erwartet, tatsächlich wesentlich kleiner als der Mittelungsbereich sind, zeigen die Kerrmikroskop-Aufnahmen weiter unten.) Zum andern ist der longitudinale Kerr-Effekt (selbst bei nichtsenkrechtem Lichteinfall) immer auch auf die senkrecht zur Oberfläche stehende Magnetisierung J_{\perp} empfindlich (s. Kap 3.1). Eine Drehung der Oberflächenmagnetisierung in der Einfallsebene könnte zu einer Änderung des Kerrsignals führen. Da J_{\perp} aber im weichmagnetischen Nickel bei Raumtemperatur und darüber nur wenige Prozent der spontanen Magnetisierung beträgt (s. Kap 2.3), führt dieser Einfluß höchstens zu einer vernachlässigbaren Korrektur. Dreht die Magnetisierung jedoch *in* der Oberfläche um 90° , so wird sie für die longitudinale Kerr-Anordnung unsichtbar, das Kerrsignal verschwindet. Eine solche Lage (ebenfalls $\langle 110 \rangle$) ist für die Magnetisierung von der Kristallanisotropie her zur schenkel-parallelen Lage gleichwertig. Durch solche senkrecht zur Schenkelachse magnetisierten Domänen allein kann der Verlauf im Bereich I sicher nicht erklärt werden, denn bei Raumtemperatur ist die Oberflächenmagnetisierung im Mittel der Volumenmagnetisierung entgegengerichtet: Es müssen also an der Oberfläche *antiparallele* Domänen überwiegen.

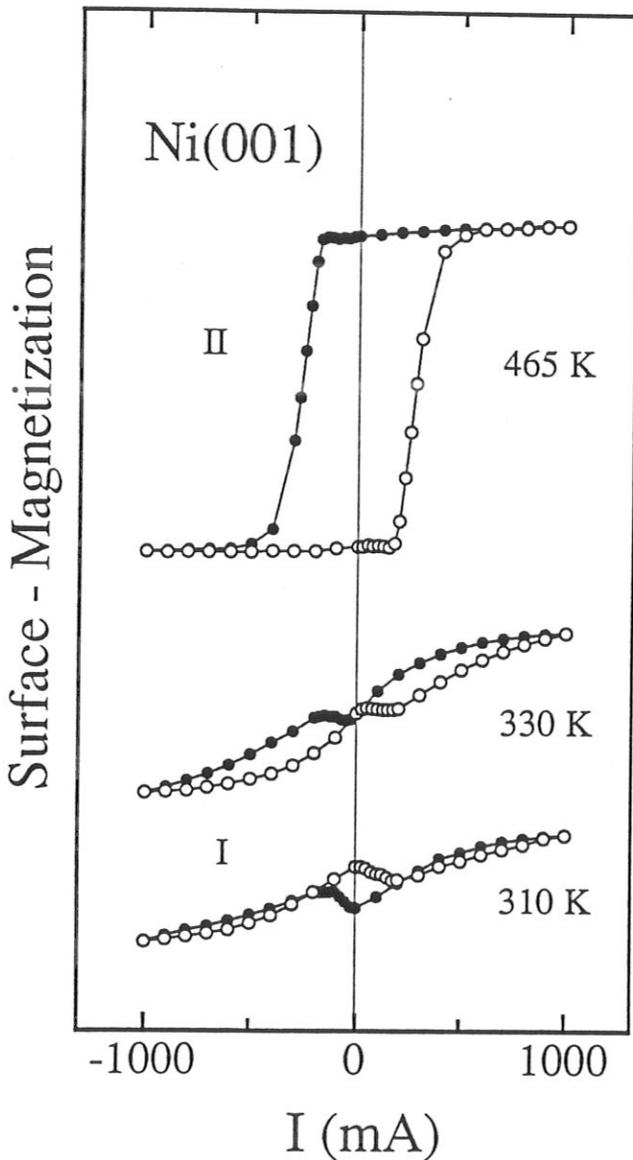
Für den Bereich II legt die Magnetisierungskurve in Abb 4.4 eine einfache Domänenstruktur ohne Abschlußdomänen an der Oberfläche nahe. Das ist möglich, wenn die leichten Richtungen nicht mehr entlang $\langle 111 \rangle$, sondern in der Ebene liegen. In früheren Experimenten wurde beobachtet, daß bei hohen Temperaturen die leichte Richtung nach $\langle 100 \rangle$ wechselt. Für die Übergangstemperatur werden sowohl 470 K als auch 490 K angegeben [Darby and Isaac (1974)]. Bei der hier vorliegenden Probengeometrie erwartet man dann in Remanenz eine Plattenstruktur mit Domänen, die abwechselnd in die $[100]$ - und die $[0\bar{1}0]$ -Richtung zeigen. Dadurch beträgt die mittlere Magnetisierung entlang $[\bar{1}\bar{1}0]$ nur etwa 70 % ($\cos 45^{\circ}$) der Sättigung. In

einem kleinen Temperaturintervall unterhalb des Übergangs bilden möglicherweise die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen leichte Richtungen, da das Vorzeichen der Anisotropiekonstante K_2 bei hohen Temperaturen nicht sicher bekannt ist [Aubert (1968)]. Dann besteht der gesamte Schenkel in Remanenz nur noch aus einer Domäne, die parallel zum Schenkel magnetisiert ist; er ist also gesättigt. Bei einer Änderung der leichten Richtungen von $\langle 100 \rangle$ nach $\langle 110 \rangle$ würde also die Magnetisierungskomponente parallel zum Schenkel um 30 % zunehmen. Eine solche Änderung tritt aber im Temperaturverlauf der Remanenz nicht auf!

Zur weiteren Klärung wurde das Verhalten der Magnetisierung im äußeren Feld untersucht. Liegt - wie der Temperaturverlauf der Remanenz nahelegt - im Bereich II eine einfache Domänenstruktur vor, so erwartet man dort bei der Ummagnetisierung eine rechteckförmige Hysterese. Eine solche Hysterese wird an Oberflächen beobachtet, in der leichte Richtungen liegen [Donath et al. (1990)]. Dagegen sollte der Verlauf bei Vorhandensein von Abschlußdomänen im Bereich I wesentlich komplizierter sein, weil zum einen die Ummagnetisierung nicht allein durch Verschiebung von 180° - Wänden erfolgen kann und, zum anderen, Abschlußdomänen mit Kristall-Versetzungen viel stärker wechselwirken als Grunddomänen (s. Kap. 2.3).

Abb. 4.5 zeigt Hysteresen bei drei verschiedenen Temperaturen (vgl. Pfeile in Abb. 4.4) für die mittlere Magnetisierung parallel zum Schenkel. Die Kurven sind auf gleiche Magnetisierung normiert und über dem Strom durch die Magnetisierungsspule aufgetragen. Dabei entsprechen 1000 mA einem Feld von 2.5 Acm^{-1} , wenn man annimmt, daß das Feld in allen Schenkeln gleich groß und homogen über ihren Querschnitt verteilt ist. (Die Güte dieser Annahme hängt u. a. von der Domänenstruktur des Kristalls ab (s. u.) und kann nicht ohne weiteres überprüft werden. Daher wurde hier einer Auftragung gegenüber dem Strom der Vorzug gegeben.) Die Hysterese bei 465 K zeigt tatsächlich - wie erwartet - einen einfachen Verlauf. Ausgehend von Remanenz beginnt die Oberfläche bei 200 mA umzumagnetisieren und erreicht bei 600 mA entgegengesetzte Magnetisierung, die sich bei höheren Strömen nicht mehr ändert. Gegenüber diesem Wert ist die Remanenz nur um wenige Prozent verringert. Außerdem verläuft die Ummagnetisierung nicht schlagartig: Die Flanken der Hysterese besitzen eine endliche Steilheit. Im gesamten Temperaturbereich II liegen Hysteresen einer derart

Abb. 4.5: Feldabhängigkeit der Oberflächen-Magnetisierung bei großer (I) und bei vernachlässigbarer (II) Anisotropie.



einfachen Form vor. - Im Bereich I ist das Ummagnetisierungsverhalten dagegen vollkommen anders: Die Hysteresen sind nahezu vollständig kollabiert. Bei 330 K berühren die Äste einander in Remanenz und überschneiden sich bei Raumtemperatur. Selbst bei dem maximalen hier angelegten Feld ist die Oberfläche nicht mehr zu sättigen: Bei 330 K erreicht man nur noch etwa die Hälfte und bei 310 K nur noch ein Drittel der Remanenz von 465 K. (Es stellen sich etwa dieselben Remanenzwerte ein wie in Abb. 4.4, obwohl die hier angelegten Felder viel schwächer sind als die gepulsten Felder.)

Die Hysteresis im Temperaturbereich II besitzt ein wesentliches Merkmal: Die nicht senkrechten Flanken. Generell erfolgt die Ummagnetisierung eines Kristalls im Bereich kleiner

Felder durch Wachstum entgegengesetzt magnetisierter Domänen. Dabei bewegen sich vor allem 180° -Wände. In äußerst spannungsarmen SiFe-Rahmenkristallen bilden sich Keime von entgegengesetzten Domänen erst dadurch, daß sich oberhalb einer Startfeldstärke eine 180° -Wand von einer Oberfläche löst [Hellmiß (1970)]. Ist

das für die nachfolgende Wandbewegung erforderliche Feld kleiner als die Startfeldstärke, so magnetisiert der Kristall sprunghaft um (Barkhausensprung) und die Hysterese flanken sind praktisch senkrecht. Die Flanken der Oberflächen-Hysterese im Temperaturbereich II (in Abb. 4.5) sind jedoch schräg: Offensichtlich ist hier ein schlagartiges Wachstum entgegengesetzt magnetisierter Keime durch Wandreibung behindert. Die Ummagnetisierung der Oberfläche ist erst dann abgeschlossen, wenn der Einfluß des äußeren Feldes gegenüber der Wandreibung überwiegt. Das ist anscheinend im Bereich II oberhalb von 600 mA der Fall (s. Abb. 4.5). Ob die Ummagnetisierung der Oberfläche allerdings vollständig erfolgt, kann, ebenso wie die noch offene Frage nach der Domänenstruktur bei Raumtemperatur, aber erst mit einer orts aufgelösten Methode entschieden werden.

4.3 DOMÄNENSTRUKTUR

Ein detaillierteres Bild über die Domänenstruktur an der Ni(001)-Oberfläche erhält man mit dem Kerr-Mikroskop. Die Informationstiefe beträgt - wie bei den Messungen oben - wenige 100 Å; es werden wiederum nur die Domänen unmittelbar an der Oberfläche beobachtet. Die kleinsten anhand der Abbildungen noch unterscheidbaren Strukturen haben Abmessungen von etwa 2 µm. Für die Untersuchung bei erhöhten Temperaturen wurde ein evakuierbarer und außen kühlbarer Ofen gebaut, um Probenverunreinigung bzw. eine thermische Verspannung des Mikroskop-Objektivs zu vermeiden; die Oberfläche wurde durch ein Glasfenster beobachtet. Es konnten höhere Felder als bei den UHV-Messungen erreicht werden, da die Magnetisierungs-Spule nicht freitragend gewickelt werden mußte. Die hier gezeigten Mikroskop-Bilder sind von R. Schäfer im Labor von Prof. A. Hubert (Institut für Werkstoffwissenschaften in Erlangen) angefertigt worden.

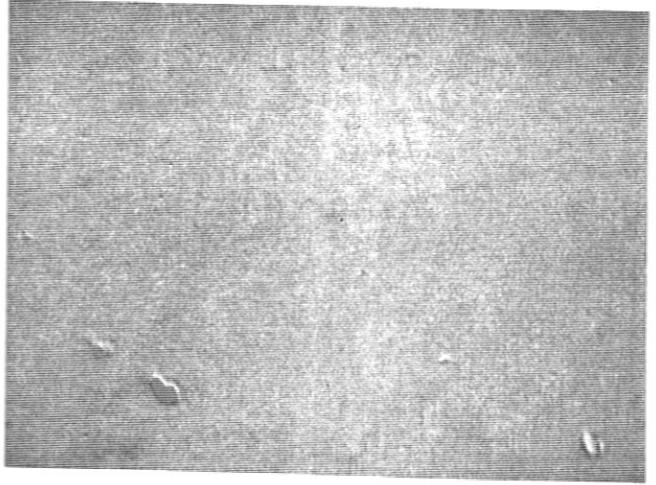
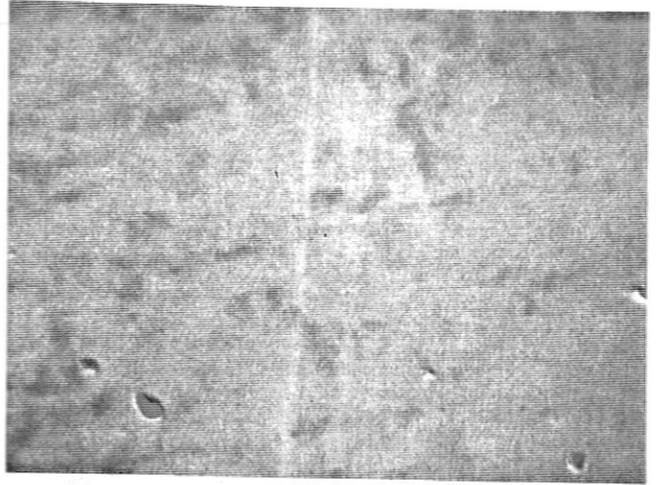
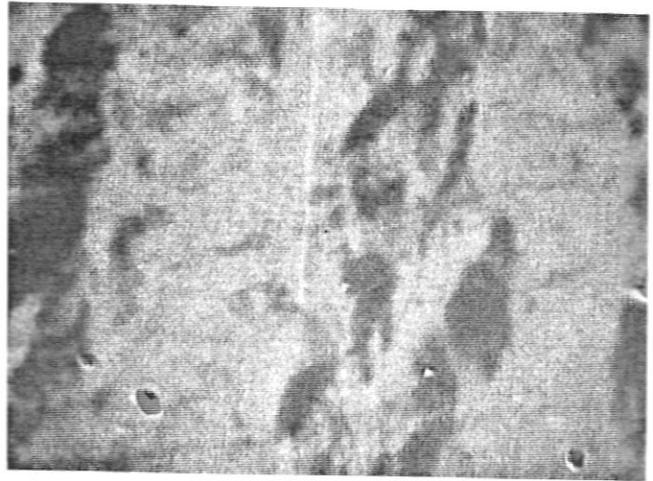
Betrachten wir zunächst den Temperaturbereich II. Die Abbildungen 4.6 (a bis f) zeigen einen Ausschnitt von $250 \times 170 \mu\text{m}^2$ der Oberfläche bei Durchlaufen eines Hysterese-Asts bei 490 K. Die Lichtpolarisation ist so gewählt, daß Kerr-Kontraste durch Unterschiede in der Magnetisierungskomponente parallel zum Schenkel entstehen. Wie bei den gemittelten Hysteresen in Abb. 4.5 entsprechen 1000 mA Spulenstrom einem Feld von etwa 2.5 Acm^{-1} . Bei -1000 mA (Abb. 4.6 a) ist überhaupt kein Kerrkontrast zu beobachten. Wird das Feld bis zur Remanenz (b)

Abb. 4.6 a bis f:

Kerr-Mikroskop-Aufnahmen der Oberflächen-Domänen bei der Ummagnetisierung im Temperaturbereich vernachlässigbarer Anisotropie ($T = 490 \text{ K}$).

Spulenströme: - 1000 mA (a),
0 mA (b), + 230 mA (c),
+ 260 mA (d), + 290 mA (e),
+ 600 mA (f).

Die Domänen ordnen sich parallel zur Schenkelachse an. Die abgebildete Fläche beträgt jeweils $250 \times 170 \mu\text{m}^2$.

*a**b**c*

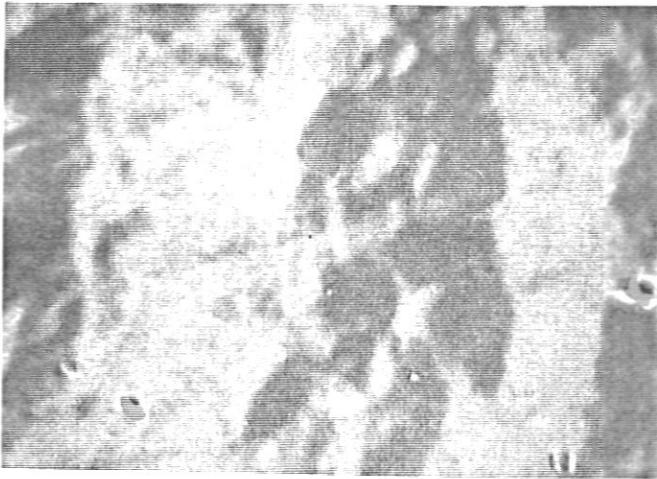
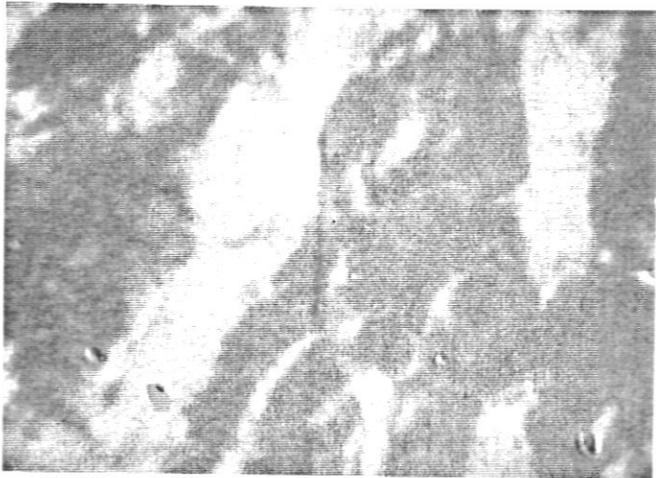
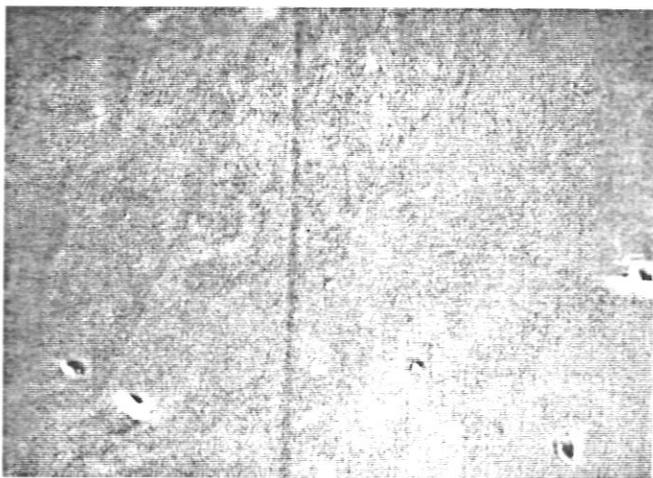
*d**e**f*

Abb. 4.6 d bis f

reduziert, so entstehen regellos angeordnete, kleine Domänen mit regellosen Konturen. Ihr Anteil beträgt wenige Prozent der Gesamtfläche. Dieses Bild bleibt bis etwa +200 mA erhalten (vgl. Abb. 4.5). Erhöht man das Feld weiter (c,d), so entstehen plötzlich größere Domänen entgegengesetzter Magnetisierung, die bereits bei 290 mA (e) überwiegen. Sie ordnen sich, im Gegensatz zu den kleinen Domänen bei Remanenz, in Streifen an, die parallel zu den Schenkelkanten liegen. Oberhalb von 600 mA (f) ist wiederum kein Kontrast mehr zu erkennen. An anderen Stellen der Oberfläche beobachtet man qualitativ das gleiche Domänenverhalten.

Die Bilder (a) und (f) zeigen durch Vergleich mit den übrigen Bildern (b bis e), daß die Ummagnetisierung der Oberfläche oberhalb von 600 mA vollständig abgeschlossen ist. Die Wandreibung behindert zwar die Bewegung der 180° -Wände, kann aber bereits durch moderate Felder ($\sim 1.5 \text{ Acm}^{-1}$) überwunden werden: Es liegen dann keine entgegengesetzt magnetisierten Domänen mehr vor. Da keine Abschlußdomänen vorhanden sind, muß die Magnetisierung im gesamten Schenkel *in* der Oberfläche liegen. Weiter ist zu bemerken, daß die Kristall-Spannungen zu klein sind, um bei dem angelegten Feld von $\sim 1.5 \text{ Acm}^{-1}$ die Magnetisierungsrichtung noch zu beeinflussen. Damit ist das H-Feld an der Oberfläche homogen. Das Volumen des Schenkels ist bei Raumtemperatur bei demselben Feld ebenfalls vollständig ummagnetisiert (s. Kap. 4.5); das sollte auch bei erhöhter Temperatur der Fall sein, da sich die Volumen-Koerzitivfeldstärke in Nickel nur wenig mit der Temperatur ändert [Kneller (1962)]. Das H-Feld ist damit auch über den Schenkel-Querschnitt näherungsweise homogen. Unter dieser Annahme lassen sich die Energiebeiträge abschätzen, die bei der Ummagnetisierung von Bedeutung sind. Zur Energiedichte tragen neben der magnetostatischen Energie (e_H) durch das äußere H-Feld nur noch Anisotropie- (e_K) und Spannungsenergie (e_σ) wesentlich bei:

$$e_{\text{ges}} = e_H + e_K + e_\sigma. \quad (4.1)$$

(Streifeld- und Wandenergie sind bei Abwesenheit von Abschlußdomänen zu vernachlässigen.) Dem angelegten Feld von $\sim 1.5 \text{ Acm}^{-1}$ entspricht eine magnetostatische Energie von etwa $1 \cdot 10^{-4} \text{ Jcm}^{-3}$. Die Anisotropiekonstanten sind im gesamten Temperaturbereich II betragsmäßig kleiner als $1 \cdot 10^{-4} \text{ Jcm}^{-3}$ [Aubert (1968)] was auf eine obere Grenze für $e_K \approx K/3$ von etwa $3 \cdot 10^{-5} \text{ Jcm}^{-3}$ führt. Die Anisotropie ist also bereits so stark verringert, daß die Magnetisierung - völlig unabhängig von

der leichten Richtung - durch das äußere Feld ausgerichtet werden kann: Damit kann eine homogene Magnetisierung entlang des Schenkels entstehen. Der völlig verschwindende Kerrkontrast in den Abb. 4.6 a und 4.6 f ist mit dieser Abschätzung konsistent. Wird das Feld wieder bis zur Remanenz reduziert, so verschwindet die magnetostatische Energie. Selbst wenn die leichten Richtungen nicht parallel zu $\langle 110 \rangle$ liegen, die Anisotropie also in Remanenz eine von der vormaligen Feldrichtung abweichende Magnetisierungsrichtung bevorzugt, kann es nicht zu einer vollständigen Änderung der Magnetisierung kommen. Das würde nämlich einen Umbau der Domänenstruktur, also Keimbildung und Keimwachstum erfordern. Die mit einem solchen Prozess notwendig verbundene Wandbewegung wird aber durch die Wandreibung behindert, wie die schrägen Flanken der Hysteresese zeigen. Ein Umbau findet entweder überhaupt nicht oder nur unvollständig statt: Der im Feld vorliegende Magnetisierungszustand wird "konserviert". (Die kleinen regellosen Domänen in Remanenz und bei geringen Feldern können durch lokale Spannungen entstehen und weisen nicht notwendig auf von $\langle 110 \rangle$ abweichende leichte Richtungen.)

Damit läßt sich nun der Temperaturverlauf der Remanenz in Abb. 4.4 verstehen. Solange die Anisotropie klein genug ist, wird während des Strom-Pulses der Schenkel kurzzeitig parallel zur Achse homogen magnetisiert. Das entspricht in Remanenz nicht dem Zustand niedrigster Energie, falls die leichten Richtungen von der Schenkelachse abweichen. Ein Umbau der Domänenstruktur findet aber nur dann statt, wenn der Unterschied an Anisotropieenergie zwischen homogener Magnetisierung und Remanenz-Zustand genügend groß ist, damit die erforderliche Wandreibung - zumindest teilweise - überwunden wird. Dazu ist aber die Anisotropieenergie, wie oben abgeschätzt wurde, im gesamten Temperaturbereich II zu klein. Erst unterhalb von 440 K, im Bereich I, wird die Anisotropieenergie so groß, daß in Remanenz die leichten Richtungen - zumindest teilweise - eingenommen werden. Da die leichten Richtungen parallel zu $\langle 111 \rangle$ liegen, ist der Zustand niedrigster Energie eine komplizierte Struktur mit Abschlußdomänen und besitzt ein fein verzweigtes System von gekoppelten Wänden an der Oberfläche; dieser Zustand kann infolge der Wandreibung sicher nur unvollständig erreicht werden. Die Temperatur, bei der die Bereiche I und II aneinandergrenzen, ist also durch die Wandreibung bestimmt und *nicht* mit der Temperatur gleichzusetzen, bei

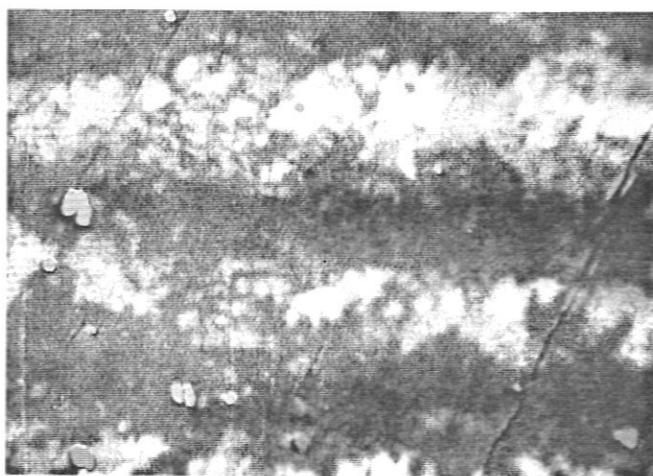
der die leichten Richtungen von $\langle 100 \rangle$ (oder $\langle 110 \rangle$) nach $\langle 111 \rangle$ übergehen. 440 K ist also eine untere Schranke für die Übergangstemperatur: Der Richtungswechsel "zeigt" sich erst, wenn die Anisotropieenergie genügend groß ist.

Aus der Hysterese bei kleiner Anisotropie läßt sich eine obere Grenze für die Spannungen des Kristalls abschätzen. Bereits bei Feldern von 1.5 Acm^{-1} haben Kristallspannungen keinen Einfluß mehr auf die Magnetisierung. Durch Gleichsetzen der Energiedichten für den magnetostatischen Anteil e_H und den Spannungs-Beitrag e_σ läßt sich die Spannungsdichte im Kristall nach oben zu $\sigma \leq 200 \text{ Ncm}^{-2}$ abschätzen. Zur Kristallspannung können sowohl innere als auch äußere Spannungen beitragen. Innere Spannungen sind nahezu unabhängig von der Temperatur [Schauer (1963)]. Äußere Spannungen können bei der Halterung des Kristalls auftreten. Dieser Einfluß wurde überprüft, indem an der (110)-Oberfläche (*ex situ*) zusätzliche Hysteresen gemessen wurden, nachdem der Kristall aus seiner Halterung gelöst worden war. Die Flanken dieser Hysteresen unterschieden sich nicht von denen des gehalterten Kristalls, womit ein großer Beitrag äußerer Spannungen ausgeschlossen werden kann. Die hier abgeschätzten Kristallspannungen sind gegenüber anderen "gut geglühten" Nickel-Kristallen [Schauer (1963)] um mindestens einen Faktor 5 geringer.

Was zeigen nun die Kerrmikroskop-Aufnahmen über die Struktur der Abschlußdomänen? In den Abbildungen 4.7 (a bis d) sind die Domänen bei Raum-

Abb. 4.7 a bis d:

Kerr-Mikroskop-Aufnahmen der Oberflächen-Domänen bei der Ummagnetisierung im Bereich hoher Anisotropie (Raumtemperatur). Kontraste entstehen durch Magnetisierung *parallel* zur Schenkelkante. Spulenströme: - 1 A (a), 0 A (b), + 1 A (c), + 4 A (d). (Ausschnittgröße wie in Abb. 4.6.)



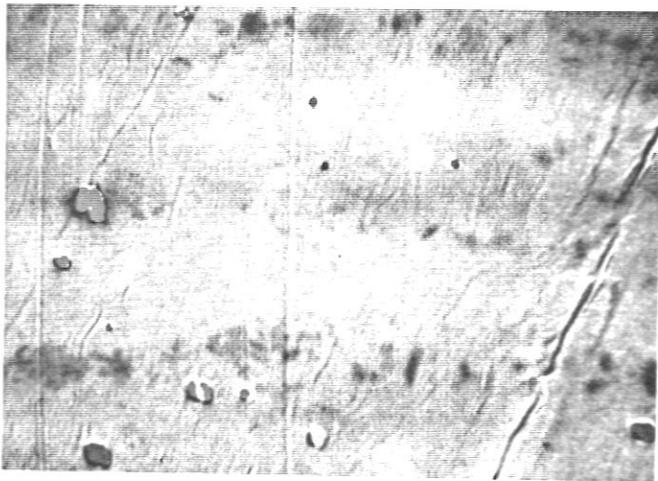
a



b



c



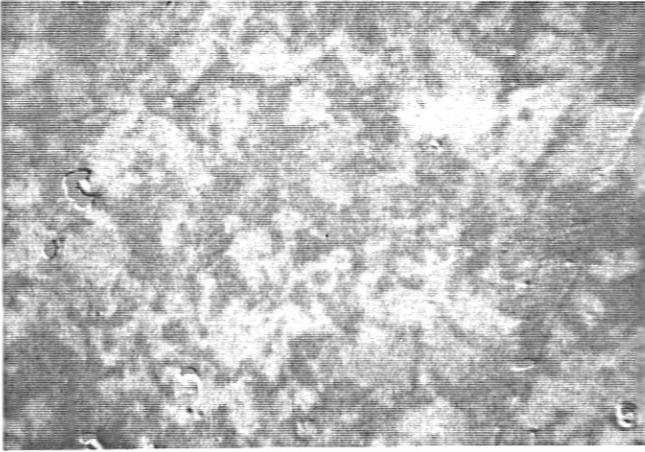
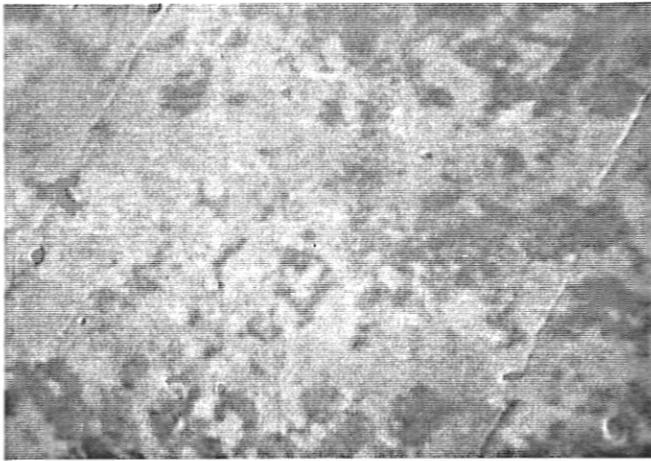
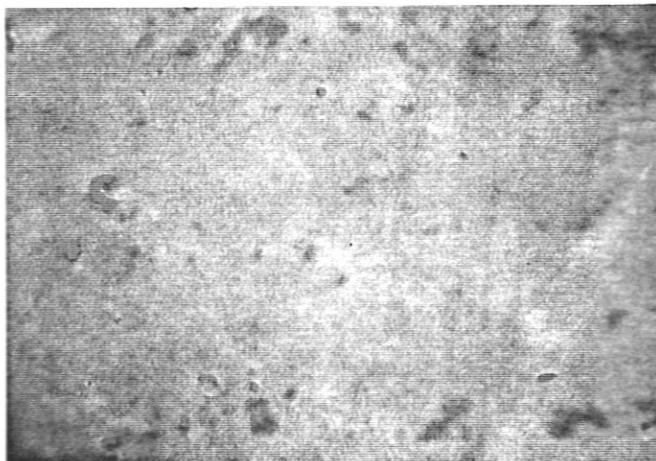
d

Abb. 4.7 b bis d

temperatur wieder beim Durchlaufen eines Hysterese-Asts dargestellt (Ausschnittgröße wie bei Abb.en 4.6); die Lichtpolarisation ist wie zuvor so gewählt, daß die Kerr-Kontraste durch die Magnetisierungskomponente parallel zum Schenkel entstehen. Das Erscheinungsbild der Domänen unterscheidet sich vollkommen von dem bei hohen Temperaturen: Die Abschlußdomänen ordnen sich in Streifen *senkrecht* zur Schenkelachse an und verschwinden selbst in sehr hohen Feldern bis 10 Acm^{-1} (d) nicht vollständig. Die Konturen der Domänen sind nahezu regellos und ihre mittlere Größe ist nicht an allen Stellen der Oberfläche gleich (vgl. linke und rechte Bildhälfte). In Remanenz (b) haben die abwechselnd helleren und dunkleren Streifen eine etwa gleiche Weite von $30..50 \mu\text{m}$. Innerhalb der hellen Streifen zeigen die Abschlußdomänen vornehmlich parallel, in den dunklen antiparallel zur mittleren Volumenmagnetisierung.

In den ortsgemittelten Kerrmessungen wurde die Frage aufgeworfen, ob bei Raumtemperatur Abschlußdomänen mit einer Magnetisierungskomponente senkrecht zur Schenkel-Achse existieren. Zur Klärung wurde dieselbe Stelle der Oberfläche mit einer um 90° gedrehten Lichtpolarisation betrachtet (s. Abb.en 4.8). Bei allen Feldern bis 10 Acm^{-1} (c) zeigen die Abschlußdomänen einen Kerrkontrast, der jedoch, bei gleichen Aufnahmebedingungen, deutlich schwächer ist als für die achsenparallele Komponente. Ein kleiner Kontrast in der achsensenkrechten Komponente bedeutet aber gleichzeitig, daß sie insgesamt klein ist, da sie im Mittel über viele Abschlußdomänen verschwinden muß (Vermeidung magnetischer Ladungen). Die Abschlußdomänen sind also hauptsächlich *parallel* und *antiparallel* zur Schenkelachse magnetisiert.

Im Gegensatz zum Modell von *Krause und Frey* (1969) ("KF-Modell", vgl. Abb. 4.2) existieren hier in Remanenz antiparallel magnetisierte Domänen. Die an der hier untersuchten Probe nachgewiesene Wandreibung übt einen großen Einfluß auf die Umordnung von Abschlußdomänen aus, da in ihnen ja ein Netz von gekoppelten Wänden besteht. Sie verhindert die Einstellung der Remanenz - Struktur und "konserviert" einen Teil der Abschlußdomänen aus der Struktur im Feld, die auch nach der Beobachtung von *Krause und Frey* antiparallele Domänen enthält. Der Befund der vorliegenden Arbeit steht also nicht im Widerspruch mit der früheren Beobachtung, obwohl sich in Remanenz die Domänenstrukturen sehr unterscheiden. Es sei darauf hingewiesen, daß auch das KF-Modell *nicht* dem

*a**b**c***Abb. 4.8 a bis c:**

Kerr-Mikroskop-Aufnahmen wie in Abb. 4.7. Kontraste entstehen durch Magnetisierung *senkrecht* zur Schenkelkante. Spulenströme: 0 A (a), + 1 A (b), + 4 A (c). (Ausschnittgröße wie in Abb. 4.6.)

Zustand niedrigster Energie entspricht. Nach Rechnungen von [Hubert (1990)] (vgl. Kap. 2.3) besitzt eine solche 2-dimensionale Abschlußstruktur im Energieminimum Abschlußdomänen, die parallel und andere, die antiparallel zur Kristallachse magnetisiert sind (vgl. Abb. 2.6).

Die mittlere Streifenbreite der Abschlußdomänen ist um mindestens eine Größenordnung kleiner als die (an der (110)-Oberfläche des Kristalls beobachtete) Weite der Grunddomänen (~ 0.5 mm, [Donath et al. (1990)]). Das deutet auf das Vorliegen von Verzweigungsdomänen, die von der Domänentheorie und nach dem Modell von (Abb. 4.2) erwartet werden. (Um das mit Sicherheit sagen zu können, wäre eine wiederholte Messung der Grunddomänenweite erforderlich, da sie durch Kristallspannungen beeinflusst werden kann. Die zwischenzeitig erfolgte Politur und Glühbehandlung des Kristalls könnten seine inneren Spannungen geändert haben. Die Frage, ob Verzweigung auftritt, hat aber keine Konsequenz für die hier gezogenen Schlüsse.)

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß

- (1.) die Anisotropieenergie in Nickel bei hohen Temperaturen so klein ist, daß die Magnetisierung bereits durch geringe äußere Felder ausgerichtet werden kann, unabhängig von der leichten Richtung. Ob ein Wechsel der leichten Richtungen (Vorzeichenwechsel der Anisotropiekonstanten K_1) stattfindet, spielt also keine Rolle, solange die Anisotropie im Vergleich zu den übrigen Energiebeiträgen klein ist.
- (2.) Im Temperaturbereich großer Anisotropie kann die mittlere Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche mit abnehmender Temperatur kollabieren und sogar *antiparallel* zur Volumen-Magnetisierung stehen.
- (3.) An der Ni(001)-Oberfläche kann ein Wandreibungseinfluß leicht durch die Hysterese im Bereich kleiner Anisotropie nachgewiesen werden.
- (4.) Im gesamten Temperaturbereich ist in dem hier untersuchten Kristall die Wandreibung hinreichend groß, um einen Umbau zu einem energetisch günstigeren Zustand (teilweise) zu blockieren.

Der letzte Punkt zeigt möglicherweise die Ursache für einen "...rather curious effekt..." auf, den Abraham und Hopster (1987) an der Ni(110)-Oberfläche eines Fensterrahmen-Kristalls mit derselben Orientierung wie der Kristall dieser Arbeit beobachtet haben. Die (von den Autoren bei 370 K erwartete) Änderung der leichten

Richtung sollte die mittlere Oberflächenmagnetisierung um 20 Prozent verringern. Die Spinpolarisations-Daten geben aber keinerlei Hinweis darauf, daß die erwartete Umordnung der Domänen stattfindet. Da die Probe - wie hier - durch Strom-Pulse remanent magnetisiert wurde, kann der beobachtete Effekt möglicherweise allein durch Wandreibung erklärt werden, die den Umbau der Domänenstruktur verhindert.

4.4 TEMPERATUR - HYSTERESE

Will man den Magnetisierungszustand eines Kristalls charakterisieren, so reichen die Parameter Temperatur und äußeres Feld nicht aus, denn es spielt außerdem die "Vorgeschichte" eine Rolle. Ändert man bei konstanter Temperatur das äußere Feld, so führt die Wandreibung zu einer Hysterese der Domänenstruktur im Feld. Im vorhergehenden Kapitel wurde gezeigt, daß an der Ni(001) - Oberfläche in Remanenz eine Umordnung der Domänenstruktur mit der Temperatur erfolgt: Beim Übergang vom Bereich verschwindender zum Bereich großer Anisotropie werden Abschlußdomänen gebildet. Aufgrund der vorhandenen Wandreibung ist damit für die Domänenstruktur an der Oberfläche zu erwarten, daß sie bei konstantem Feld keine eindeutige Funktion der Temperatur ist, sondern vielmehr auch eine Hysterese mit der Temperatur zeigt.

Eine Temperatur-Hysterese der Domänenstruktur wurde von *Schauer* (1963) mit einem Kermikroskop an Ni(110) beobachtet. Die bei Raumtemperatur im Wechselfeld idealisierte Probe zeigte in Remanenz eine für die (110)-Oberfläche charakteristische Plattenstruktur aus Grunddomänen. Wurde die Probe ohne Feldeinfluß erwärmt, so blieb diese Struktur bis zur Curie-Temperatur T_C unverändert bestehen. Bei Überschreiten von T_C und nachfolgender Abkühlung ohne äußeres Feld, entstand an der Oberfläche ein diffuses Domänenmuster. Dieses Muster war von den Kristallspannungen bestimmt, die bei hohen Temperaturen gegenüber der verschwindend kleinen Anisotropie überwogen. Das diffuse Muster blieb beim Abkühlen bis zur Raumtemperatur bestehen und erst durch erneutes Idealisieren oder weitere Abkühlung auf 220 K stellte sich wieder die Plattenstruktur ein. *Schauer* erwartet, daß in jedem Nickel-Kristall, unabhängig von seiner Orientierung und der Stärke seiner Spannungen, die Domänenstruktur eine Temperatur - Hysterese zeigt. Bisher gibt es dazu aber keine Untersuchung an Oberflächen mit Abschlußdomänen.

Bei den in Kap. 4.2 dargestellten Messungen zum Temperaturverhalten der Remanenz wurde die Probe bei jeder Temperatur durch Pulse ummagnetisiert. *Krause und Frey* (1969) sahen an einem stabförmigen Nickel-Kristall, daß sich die Grunddomänen beim Ummagnetisieren verbreitern. Diese Beobachtung deuten sie so, daß jede Ummagnetisierung, da sie nicht ohne Streufelder geschieht, einer teilweisen Idealisierung entspricht, bei der sich zwar nicht das Energieminimum aber eine energetisch günstigere Domänenstruktur im Kristall einstellen kann. Hat die durch Pulse hervorgerufene Umordnung der Domänen ebenfalls eine teilweise idealisierende Wirkung? Wenn die vorhandene Wandreibung groß genug ist, dann sollte es möglich sein, die Bildung von Abschlußdomänen bei Raumtemperatur dadurch zu verhindern, indem man die Probe im Bereich verschwindender Anisotropie magnetisiert, und danach ohne Feldwirkung abkühlen läßt!

Zur Untersuchung scheidet die UHV-Kerrtechnik aus. Die Probe, bedingt durch ihre Wärmekapazität und die isolierende Aufhängung, kühlt nur innerhalb von 1 1/2 h vom Bereich kleiner Anisotropie (oberhalb 440 K) auf Raumtemperatur ab. Mit der Kerr-Technik ist es aber nur möglich, Magnetisierungs-Änderungen auf einer Zeitskala von einigen 10 s mit hinreichender Genauigkeit zu messen (s.

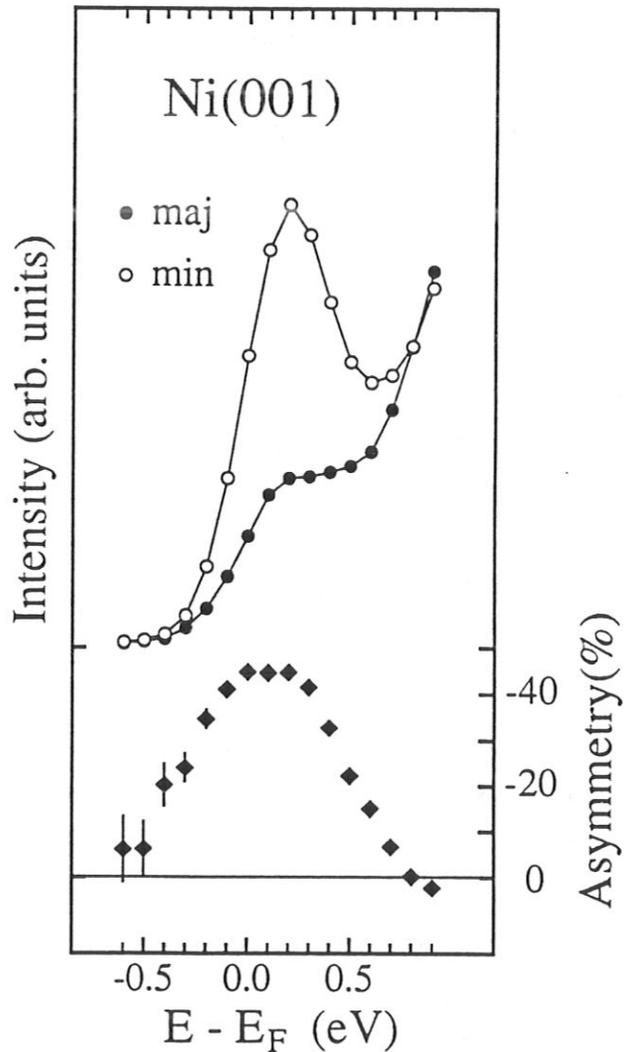


Abb. 4.9: Spin-Asymmetrie des IPE-Übergangs in unbesetzte 3d-Zustände auf Ni(001) bei senkrechtem Elektronen-Einfall ($T = 400$ K, $\hbar\omega = 9.4$ eV).

Kap. 3.3.2). Für den Nachweis einer Temperatur-Hysterese ist hier ein Magnetisierungs-Detektor erforderlich, der ein über mehrere Stunden hinreichend konstantes Signal einer festen Magnetisierung liefert. Diese Anforderung wird von der d-Band Asymmetrie in den IPE-Spektren erfüllt.

Die hohe Spin-Asymmetrie eines direkten d-Band Übergangs wurde bereits bei IPE-Messungen an Ni(110) als Magnetisierungs-Detektor ausgenutzt [Donath *et al.* (1990)]. Das dort benutzte flache Band besitzt eine hohe Zustandsdichte und wird an der Ni(001) - Oberfläche bei senkrechtem Elektroneneinfall als Zustandsdichte-Beitrag beobachtet. Sein Peakmaximum liegt 0.2 eV oberhalb der Fermienergie (s. Abb. 4.9). Die hohe Spin-Asymmetrie von etwa -45 % im Maximum rührt daher, daß das Majoritäts-d-Band nahezu vollständig besetzt ist und unterhalb der Fermienergie liegt. Auf der hochenergetischen Seite des d-Band Peaks schließt sich ein intensiver Übergang in ein sp-Band an, dessen Asymmetrie aber wesentlich geringer ist als die des d-Bands (s. Kap. 5.1).

Die Informationstiefe beträgt bei der inversen Photoemission nur wenige Atomlagen im Gegensatz zu wenigen 100 Å beim Kerr-Effekt. Ein Vergleich von mit beiden Methoden gemessenen Hysteresen zeigte keinen Unterschied für das Ummagnetisierungs-Verhalten in den obersten Atomlagen und dem darunterliegenden Bereich. (Ein "precursor state" für die Ummagnetisierung, wie er an Fe(001) beobachtet wurde [Allenspach *et al.* (1986), Siegmann und Bagus (1988)] ist für Ni(001) nicht zu erwarten. Die oberste Ni(001)-Atomlage sollte eine *in plane*-Anisotropie besitzen [Gradmann *et al.* (1984)]; das wird durch eine Messung des Hyperfein-Felds gestützt [Voigt (1990)].) Der Durchmesser des Elektronenstrahls ist mit etwa 3 mm wesentlich größer als die Domänenweite an der Oberfläche. Man erhält also, wie bei den Kerr-Messungen in Kap. 4.2 eine Auskunft über die mittlere Magnetisierung der Oberfläche. In der Untersuchung von Donath *et al.* (1990) wurde die Spin-Asymmetrie nur bei einer festen Temperatur als Magnetisierungs-Detektor verwendet. Bei temperaturabhängigen Messungen muß jedoch beachtet werden, daß die temperaturabhängige Austausch-Aufspaltung (s. Kap. 2.1) sowie die Verbreiterung der Fermikante bei hohen Temperaturen zu einem komplizierten Temperaturverlauf der Asymmetrie nahe der Curie-Temperatur führen. Beide Einflüsse nehmen jedoch stark mit sinkender Temperatur ab [Donath und Dose (1990)]. Bereits unterhalb von 500 K haben die bei fester Energie

gemessene Asymmetrie und die mittlere Magnetisierung denselben Temperaturverlauf (s. u.). Bei senkrechtem Elektronen-Einfall liegt die nachgewiesene Komponente der Magnetisierung parallel zu den Schenkelkanten und in der Oberfläche (s. Kap. 3.2). Zur Vermeidung von Streufeldern wurde auch hier nur bei abgeschalteter Heizung gemessen, also während die Probe abkühlte. Für hinreichend kleine statistische Fehler wurde jeder Temperaturverlauf mehrmals gemessen.

Abb. 4.10 zeigt den Temperatur-Verlauf der d-Band-Asymmetrie. Zur Skalierung wurde der Asymmetrie-Wert bei 460 K an denselben theoretischen Verlauf für die Sättigung angepaßt wie bei den Kerr-Daten (s. Abb. 4.4). Wenn die Probe bei jeder Temperatur, wie zuvor bei den Kerr-Messungen, durch Pulse umma-

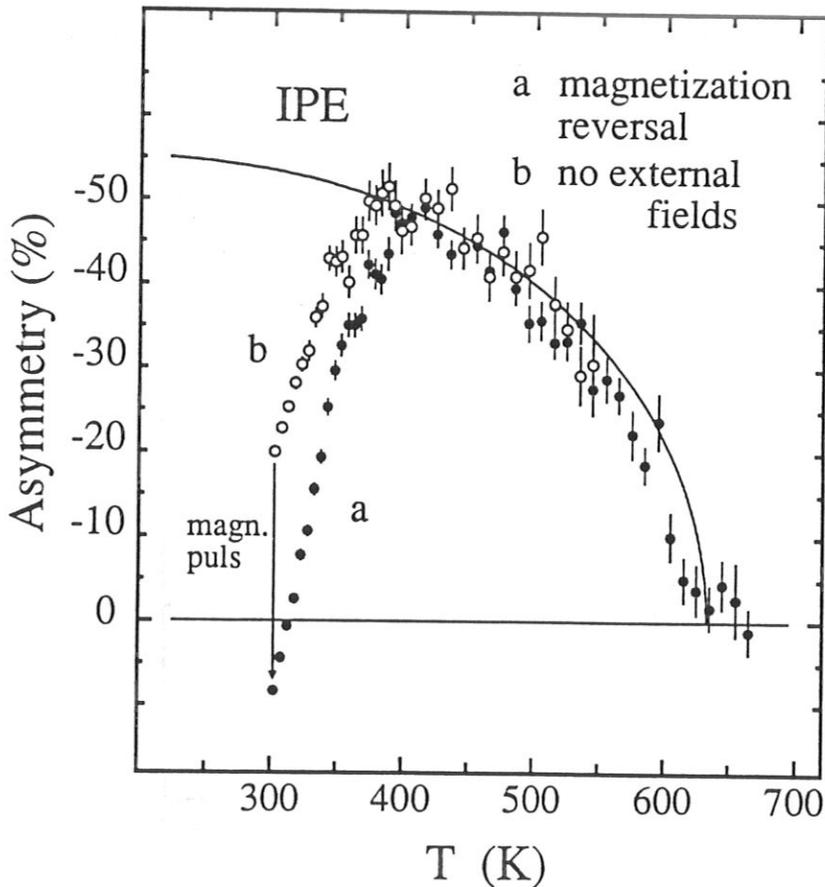


Abb. 4.10: Temperatur-Hysterese der remanenten Magnetisierung von Ni(001). (Erläuterungen im Text.)

gnetisiert wird, so erhält man für die beiden Magnetisierungs-Zustände je eine Temperaturkurve, die sich nur durch das Vorzeichen der Asymmetrie unterscheiden. Sie sind (nach Multiplikation der Ordinatenwerte einer Kurve mit -1) in der Kurve a zusammengefaßt. Sie zeigt unterhalb von 500 K den aus den Kerr-Messungen bekannten Temperaturverlauf der Magnetisierung. (In Kerr-Messungen mit unaufgeweitetem Laserstrahl wurde beobachtet, daß im Bereich kleiner Anisotropie die remanente Magnetisierung an den Kanten des Schenkels gegenüber der Mitte etwas erhöht ist. Da der Strahlquerschnitt bei den Kerr-Messungen in Kap. 4.2 kleiner war als der des Elektronenstrahls, verläuft die Kurve a im Bereich kleiner Anisotropie oberhalb der Magnetisierungskurve in Abb. 4.4.) - Magnetisiert man hingegen die Probe durch einen Puls bei hohen Temperaturen (hier: 540 K) und läßt sie ohne weitere Feldeinwirkung abkühlen, so stellt sich der Verlauf b ein. Im Bereich verschwindender Anisotropie ist er von der Kurve a nicht unterscheidbar,

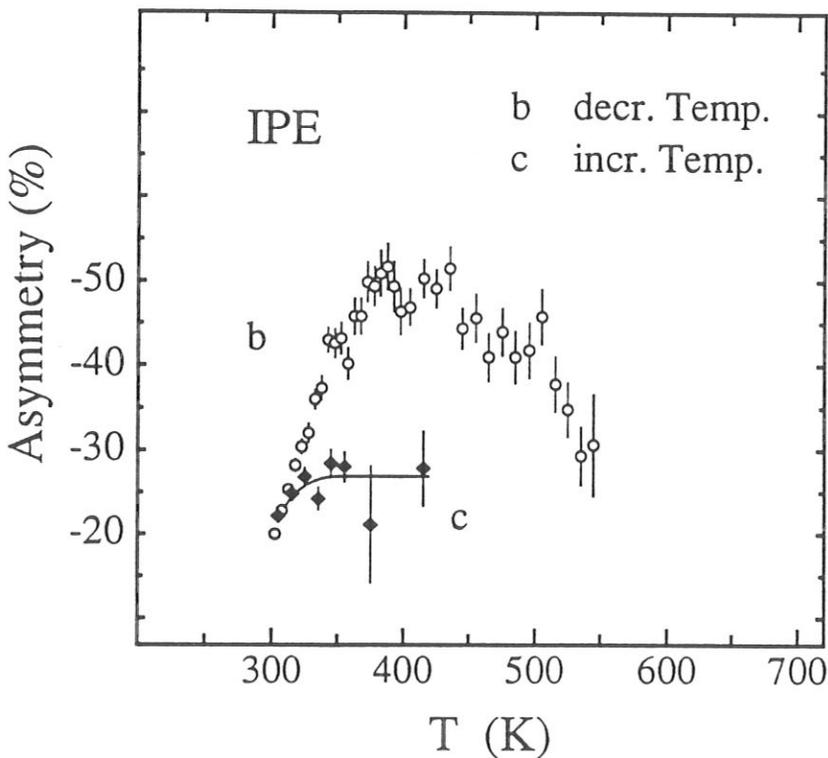


Abb. 4.11: Temperatur-Hysterese. (Erläuterungen im Text.)

weicht aber bei großer Asymmetrie deutlich von ihr ab. Eine Abnahme der Magnetisierung beginnt in Kurve b erst bei 380 K und verläuft wesentlich flacher als bei a. Die Oberfläche bleibt bis T_R im Mittel *parallel* zum Volumen magnetisiert und die Magnetisierung beträgt noch gut $1/3$ der Sättigung! Gibt man allerdings nach Durchlaufen der Kurve b einen Magnetisierungspuls, so geht die Magnetisierung in den Zustand der Kurve a über. Der Temperaturverlauf b ist, im Gegensatz zu a, nicht reversibel (s. Abb. 4.11): Erwärmt man die Probe nach Durchlaufen von b, so steigt die Magnetisierung zunächst mit der Temperatur etwas an, weicht aber oberhalb von 320 K deutlich vom Verlauf b ab und bleibt im Rahmen des statistischen Fehlers konstant (Kurve c). (Die Probenerwärmung war mit der Heizwendel nicht ohne Streufeld möglich. Die Kurve c stellt sich jedoch unabhängig von der Richtung des Heizstroms ein.) Bei einer Erwärmung auf Temperaturen oberhalb von 440 K, also im Bereich vernachlässigbarer Anisotropie, genügt das Streufeld der Heizwendel, um die Oberfläche teilweise umzumagnetisieren.

Die Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche zeigt also, wie erwartet, eine deutlich ausgeprägte Hysterese mit der Temperatur. Aber im Gegensatz zu der Beobachtung von *Schauer* (1963) ändert sich die Magnetisierung ohne Einwirkung eines äußeren Feldes hier bereits weit oberhalb von 220 K, d. h. bei kleinerer Anisotropie. Das ist verständlich wenn man bedenkt, daß die Kristallspannungen hier wesentlich geringer sind als bei der Untersuchung von *Schauer*. Durch Magnetisierung bei hoher Temperatur und anschließendes Abkühlen kann eine Umordnung der Domänen nicht ganz verhindert werden (Kurve b). Dazu wäre eine stärkere Wandreibung, d. h. größere Kristallspannungen sogar günstiger!

Für die spinaufgelösten IPE-Messungen (s. Kap. 5 und 6) hat die Temperatur-Hysterese eine wichtige praktische Konsequenz: Sie vergrößert den Temperaturbereich mit hoher remanenter Magnetisierung beträchtlich. Durch Magnetisierung der Oberfläche bei hohen Temperaturen und nachfolgende Abkühlung war es möglich, die spinaufgespaltene Bandstruktur der Ni(001)-Oberfläche mit höherer Genauigkeit als bisher zu untersuchen (s. Kap. 5 und 6).

Kristallspannungen und damit die Stärke der Wandreibung können für verschiedene Proben sehr unterschiedlich sein. Die remanente Magnetisierung der Ni(001)-Oberfläche hängt daher (1.) von der einzelnen Probe und (2.) von ihrer

Temperatur- / Feld- "Vorgeschichte" ab. Sie entscheidet bei der hier untersuchten Probe darüber, ob die Remanenz der Oberfläche bei Raumtemperatur im Mittel *parallel* oder *antiparallel* zum Volumen gerichtet ist. Das ist eine mögliche Erklärung für die eingangs beschriebenen Unterschiede in der Magnetisierung einzelner Ni(001)-Oberflächen. Solche Unterschiede sind auch für andere Ni-Oberflächen ohne leichte Richtung zu erwarten.

Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse zeigen, daß für eine quantitative Auswertung der Spin-Information von Oberflächen ohne leichte Richtung auch immer eine Untersuchung ihrer Domänenstruktur erforderlich ist.

4.5 VOLUMEN - HYSTERESE

Die in Kap. 4.2 untersuchte Ni(001)-Oberflächen-Hysterese besitzt sich überkreuzende Äste bei Raumtemperatur (vgl. Abb. 4.5). Um das beobachtete Magnetisierungs-Verhalten eindeutig als eine Konsequenz der Abschlußdomänen zu identifizieren, ist eine Messung der zugehörigen Volumen-Hysterese erforderlich.

Die Ummagnetisierung des Proben-Volumens bei Raumtemperatur wurde *ex situ* mit einer Induktionsspule gemessen; sie wurde um denselben Schenkel gewickelt (200 Windungen), an dem zuvor die Oberflächen-Magnetisierung untersucht worden war. Die induzierte Spannung wurde in Abhängigkeit des Stroms durch die Magnetisierungswindel aufgenommen und anschließend numerisch integriert. Typischerweise betrug die Umlaufzeit für eine Hysterese 40 s.

Abb. 4.12 zeigt die Volumen-Hysterese. Das Volumen des Meßschenkels besitzt, im Gegensatz zur (001)-Oberfläche, eine hohe remanente Magnetisierung. Zur Kontrolle wurden mit den Volumen-Hysteresen *gleichzeitig* auch Kerr-Hysteresen an der Ni(001)-Oberfläche aufgenommen: Sie waren mit den zuvor *in situ* gemessenen identisch. Damit ist gezeigt, daß das in Kap. 4.2 untersuchte Magnetisierungs-Verhalten von Ni(001) nicht durch eine "pathologische" Volumen-Magnetisierung entsteht, sondern eine Konsequenz der Domänenstruktur an der Oberfläche ist.

Die Hysterese in Abb. 4.12 zeigt außerdem, daß die Volumen-Magnetisierung in Remanenz um 20 % kleiner ist als bei dem maximal angelegten Spulenstrom von 1.5 A ($H \sim 3.8 \text{ Acm}^{-1}$). Dieses Ummagnetisierungs-Verhalten läßt sich als Folge von Verzweigungs-Domänen an der (001)-Oberfläche interpretieren: Die geringe Größe

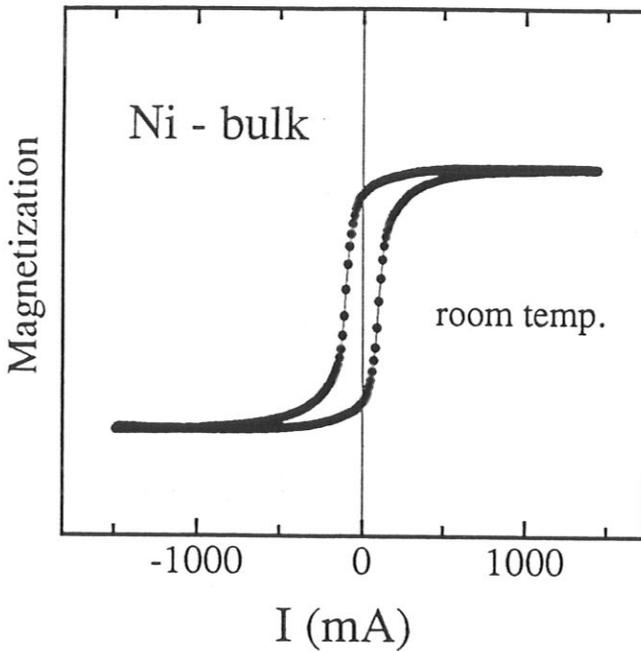


Abb. 4.12: Volumen-Hysterese des Meßschenkels.

der Ni(001)-Abschlußdomänen (vgl. Kap. 4.3) deutet darauf hin, daß darunter Verzweigungs-Domänen existieren. Wie im Modell von *Krause und Frey* (1969) ersichtlich (s. Abb. 4.2), transportieren sie magnetischen Fluß entgegengesetzt zum Volumen und bilden damit bereits in Remanenz Keime für die Ummagnetisierung. Da der Anteil der Verzweigungs-Domänen am Gesamtvolumen der Probe - im Unterschied zu dem der Abschlußdomänen - aber nicht vernachlässigbar ist (vgl. Abb. 4.2 und Kap. 2.3), können sie die beobachtete Abrundung der Volumen-Hysterese erklären.

5. Unbesetzte elektronische Zustände an Ni(001)

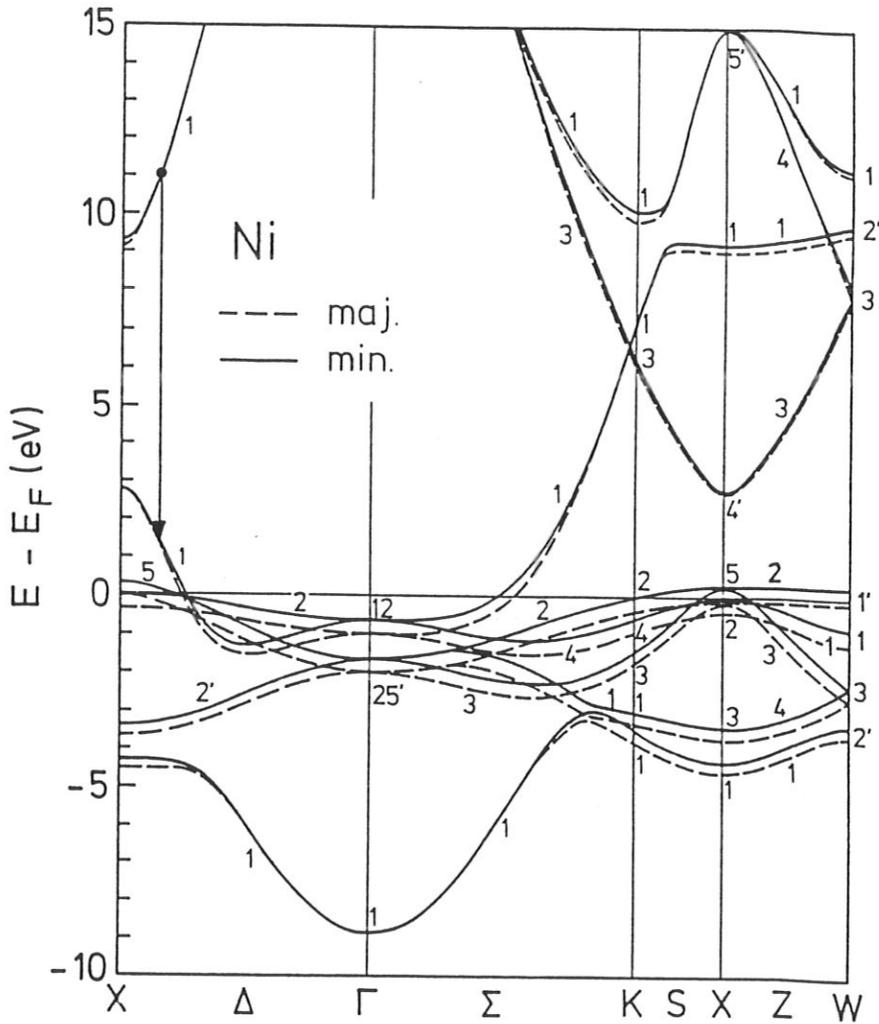
5.1 VOLUMENZUSTÄNDE

Im Bandferromagneten Nickel führt die Austausch-Wechselwirkung zu einer Aufspaltung in Majoritäts- und Minoritätsbänder. Diese Austausch-Aufspaltung ist am größten für die "magnetischen" 3d-Bänder. In Nickel sind die Majoritäts-d-Bänder bei $T=0$ K vollständig besetzt ("starker" Ferromagnet), nur die zugehörigen Minoritätsbänder liegen teilweise oberhalb der Fermienergie. Untersuchungen mit der Photoemission zeigen für die Ni d-Bänder eine Austausch-Aufspaltung von bis zu 310 meV [Himpfel *et al.* (1979)]; die Größe der Aufspaltung hängt von der Symmetrie des Bandes ab [Heimann *et al.* (1981)] und ändert sich entlang eines Bandes mit dem Ort im k-Raum [Kämper (1989)]. Mit der spinaufgelösten IPE konnte der Minoritäts-Charakter der unbesetzten d-Bänder demonstriert werden [Unguris *et al.* (1982)]. Bereits bei Raumtemperatur ($T/T_C = 0.48$) ist das oberste Majoritäts-d-Band (Z_2 -Band entlang X-W) teilweise unbesetzt [Donath und Dose (1989)] und wird in den IPE-Spektren sichtbar. Das ist eine Konsequenz der temperaturabhängigen Austausch-Aufspaltung sowie der (gegenüber $T=0$ K) verbreiterten Fermifunktion und entspricht der bei erhöhten Temperaturen nicht mehr vollständigen Sättigungsmagnetisierung.

Viele Rechnungen von Einteilchen-Bandstrukturen überschätzen die Austausch-Aufspaltung der Ni d-Bänder um mindestens einen Faktor 2 [Wang und Callaway (1977), Moruzzi *et al.* (1978)]. Im Gegensatz zu den freibeweglichen s- und p-Elektronen sind die 3d-Elektronen sowohl *itinerant* als auch *lokalisiert* und bewegen sich korreliert [Eberhardt und Plummer (1980)]. Dagegen liefern Hubbardmodell-Rechnungen im Vielteilchen-Formalismus [Nolting *et al.* (1989)] realistische Werte für die d-Band-Aufspaltung (s. Kap. 2.1). Die in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich untersuchten sp-Bänder wurden jedoch in den Vielteilchen-Rechnungen nicht berücksichtigt; für die Austausch-Aufspaltung dieser Bänder liegen bisher nur Rechnungen im Einteilchenbild vor.

Abb. 5.1 zeigt eine ferromagnetische Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ für Nickel [Eckardt und Fritsche (1987)] mit den üblichen Symbolen für die Einteilchen-Symmetrien. In der selbstkonsistenten Rechnung wurde die Korrelation der d-Elektronen durch einen lokalen Ausdruck in den Einteilchen-Gleichungen angenähert; die Aufspaltung

Abb. 5.1: Spinabhängige Bandstruktur für Nickel entlang einiger Hochsymmetrielinien [nach Eckardt und Fritsche (1987)]. Der eingezeichnete Pfeil markiert einen direkten Übergang ($\hbar\omega = 9.4$ eV) in ein sp-artiges Δ_1 -Band.



beträgt 0.39 eV und liegt damit zumindest nahe an den experimentellen Werten. Darüber hinaus zeigt die Rechnung auch Aufspaltungen in den sp-artigen Bändern. Diese Aufspaltungen sind eine Folge der Hybridisierung der sp-Bänder mit den "magnetischen" d-Bändern und können noch 10 eV oberhalb der Fermienergie E_F beträchtliche Werte annehmen (z. B. am X_1 -Punkt).

Der experimentelle Nachweis einer sp-Band Aufspaltung kann prinzipiell nur mit spinaufgelösten Methoden erfolgen, da die Lebensdauer-Breite nur nahe E_F

kleiner als die Aufspaltung ist [Eberhardt und Plummer (1980)]. Die in nicht spinaufgelösten Messungen erforderliche Linienformanalyse ist also nur im Bereich der d-Bänder möglich.

Bisher existieren zwei spinaufgelöste IPE-Untersuchungen an sp-Bändern. Sie gelangen jedoch zu sich widersprechenden Ergebnissen: An Ni(110) fanden *Donath*

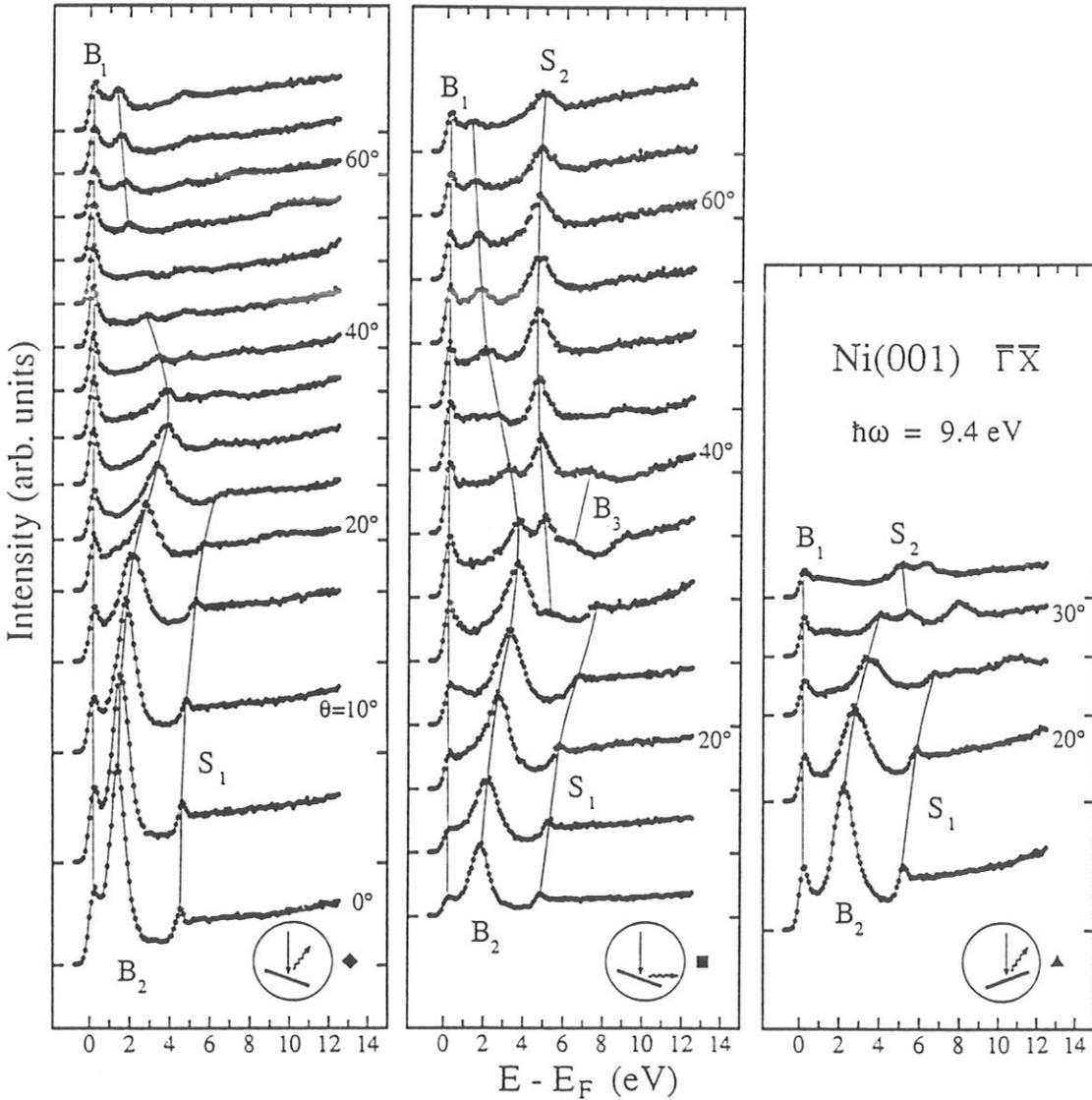


Abb. 5.2: Winkelaufgelöste IPE-Spektren von Ni(001) in der $\Gamma\bar{X}$ -Spiegelebene ($\hbar\omega = 9.4$ eV) für verschiedene Photonen-Nachweisgeometrien. Die Spektren der linken und mittleren Serie zu gleichem Elektronen-Einfallswinkel θ wurden jeweils gleichzeitig aufgenommen.

et al. (1990) eine Spin-Aufspaltung von 140 meV für den Übergang in ein sp-Band (2 eV oberhalb E_F). Für nahezu denselben Übergang auf der Ni(001)-Fläche konnten *Klebanoff et al.* (1987) keine Aufspaltung identifizieren. Dieser Befund entsprach einer Erwartung der Autoren: "One would not expect a sizeable spin dependence for a large bandwidth 4sp-band." Da der Nachweis von Spin-Effekten auf der Ni(001)-Oberfläche durch Abschlußdomänen vereitelt werden kann, erscheint es zur Aufklärung der Ursache für die vorliegende Diskrepanz wertvoll, spinaufgelöste IPE-Messungen an einer Ni(001)-Oberfläche vorzunehmen, deren Magnetisierungs-Zustand gut bekannt ist (s. Kap. 4).

Für einen Überblick wurden zuvor winkelaufgelöste IPE-Spektren in der $\overline{\Gamma X}$ -Spiegelebene im Energiebereich von 0 bis 12 eV oberhalb der Fermienergie aufgenommen (s. Abb. 5.2). Die beobachteten Übergänge sind im $E(k_{\parallel})$ -Diagramm in Abb. 5.3 zusammengefaßt. Der Bereich, in dem der Elektronen-Einfallswinkel variiert wurde, ist gegenüber einer früheren systematischen Untersuchung der Ni-Oberflächen von *Donath* (1984) und *Goldmann et al.* (1985a) erweitert. Außerdem wurden die Photonen in der vorliegenden Arbeit nicht winkel-integriert, sondern mit Zählrohren unter verschiedenen Winkeln nachgewiesen; das ermöglicht eine Polarisationsanalyse von Übergängen (s. Kap. 5.2). Die Photonen-Nachweisgeometrie ist schematisch jeweils unten im Bild angedeutet. Die verschiedenen Symbole in Abb. 5.3 entsprechen der unterschiedlichen Nachweisgeometrie; die Symbolgrößen spiegeln die Intensität der beobachteten Übergänge in drei Stufen wieder. Zum Vergleich sind theoretisch zu erwartende Übergänge aus einer Rechnung im Combined Interpolation Scheme [*Smith und Mattheiss* (1974)] eingetragen, das dankenswerter Weise von *Th. Fauster* zur Verfügung gestellt wurde. Durchgezogene (gestrichelte) Linien entsprechen kinematisch möglichen Übergängen mit $\hbar\omega = 9.4$ eV in Minoritäts- (Majoritäts-) Zustände der Volumen-Bandstruktur. Bereiche der projizierten Volumen-Bandstruktur sind grau unterlegt, die Bandlücken (zur besseren Übersicht nur für die Minoritätsbänder) weiß ausgespart.

Fünf Strukturen lassen sich deutlich beobachten, von denen zwei (S_1, S_2) in den Lücken der projizierten Bandstruktur auftreten. Diese Oberflächen-Zustände werden in Kap. 5.2 näher beschrieben. Die praktisch dispersionslose Struktur B_1 knapp oberhalb der Fermienergie setzt sich aus direkten sowie nicht k -erhaltenden

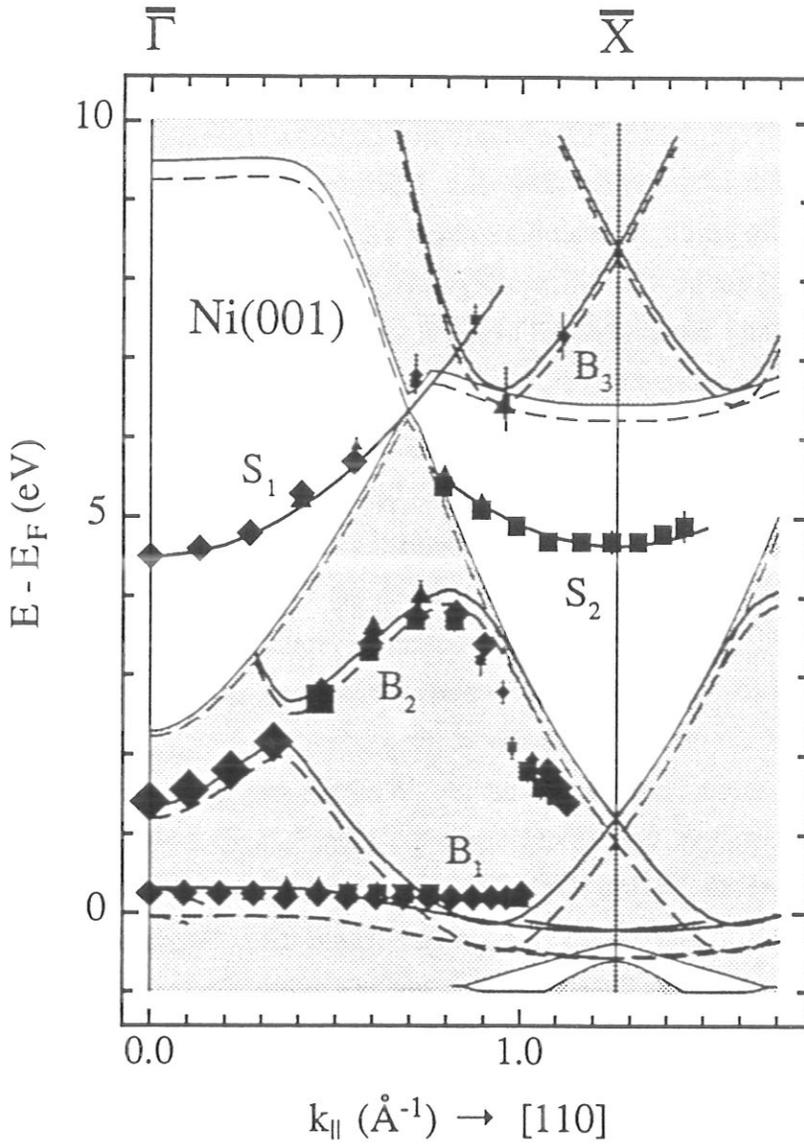


Abb. 5.3: $E(k_{\parallel})$ -Diagramm der IPE-Übergänge auf Ni(001) $\bar{\Gamma}\bar{X}$ ($\hbar\omega = 9.4$ eV). Durchgezogene (gestrichelte) dicke Linien bezeichnen kinematisch mögliche Übergänge in Minoritäts- (Majoritäts-) Zustände der projizierten Volumen-Bandstruktur nach einer Combined-Interpolation-Scheme-Rechnung. Lücken der projizierten Bandstruktur (dünne Linien) sind weiß ausgespart. Die verschiedenen Symbole entsprechen den unterschiedlichen Nachweisgeometrien (s. Abb. 5.2).

"Zustandsdichte"-Übergängen zusammen. Der direkte $\Delta_1 - \Delta_5$ Übergang in das oberste (Minoritäts-) d-Band findet nahe am X-Punkt statt (vgl. Abb. 5.1); direkt am X-Punkt ist er jedoch dipol-verboden [Goldmann *et al.* (1985a)], so daß er nur mit geringer Intensität auftritt. Der Zustandsdichte-Beitrag in B_1 zeigt sich experimentell darin, daß seine Intensität bei Aufrauhen der Oberfläche (durch Sputtern) wesentlich geringer abnimmt als die von B_2 .

Die Struktur B_2 dominiert das Spektrum bei senkrechter Inzidenz und entspricht dort einem dipol-erlaubten $\Delta_1 - \Delta_1$ Übergang in ein 4sp-Band. Nach Rechnungen im Vielfachreflexions-Modell (vgl. Kap. 5.2) liegt auf Ni(001) wahrscheinlich ein mit B_2 nahezu energie-entarteter Oberflächen-Zustand (Resonanz) mit derselben Dispersion vor [Garrett und Smith (1986)]. Ein solcher Zustand ist jedoch bisher nur auf Cu(001) experimentell nachgewiesen [Thörner *et al.* (1985)]. Sein Intensitätsbeitrag zu B_2 wäre jedoch gering; das zeigt die im Vergleich zum Oberflächen-Zustand S_2 abermals deutlich geringere Intensitätsabnahme von B_2 bei Oberflächen-Aufrauhen. Die Dispersion von B_2 entspricht dem theoretischen Verlauf gut bis etwa zum Rand der projizierten Bandlücke um \bar{X} , liegt aber im abwärts dispergierenden Bereich etwas darunter. Mit der Intensitäts-Zunahme bei hohen Winkeln ($\theta \geq 55^\circ$) zeigt B_2 ein von Cu(001) bekanntes Verhalten. Dort wird der vergleichbare Zustand bei hohen Winkeln zu einer Oberflächen-Resonanz, die sich in die Bandlücke als Oberflächen-Zustand fortsetzt [Schneider (1989)]: B_2 liegt jedoch bis $k_{||} < 1.1 \text{ \AA}^{-1}$ deutlich unterhalb des im Combined Interpolation Scheme berechneten Rands der projizierten Bandlücke. - Die schwache Struktur B_3 erscheint bei $\theta = 40^\circ$ deutlich vom Oberflächen-Zustand S_2 getrennt; sie entspricht einem Übergang in ein höher angeregtes sp-Band.

Der beobachtete Dispersionsverlauf stimmt qualitativ mit neueren Ergebnissen von anderen fcc (001)-Oberflächen überein [Altmann (1988), Schneider (1989)], weicht jedoch für größere Einfallwinkel von früheren Ni-Messungen [Desinger *et al.* (1984), Goldmann *et al.* (1985a)] systematisch ab. In der vorliegenden Arbeit wurden in der Probennähe ausschließlich unmagnetische Materialien verwendet (s. Kap. 3.3.1). Außerdem besitzt der Ni Fensterrahmenkristall - im Gegensatz zu den früher benutzten Pfennigkristallen - einen geschlossenen magnetischen Fluß, so daß nur geringe Streufelder von der Probe selbst ausgehen (s. Kap. 3.3.1). Daher wird vermutet, daß Streufelder in den früheren Experimenten zu Winkelfehlern geführt

haben. - Die Spektrenserie im rechten Teil von Abb. 5.2 zeigt Einflüsse von LEED-Reflexen an der Probe, die Strahlungs-Übergänge an der Zählrohr-Einfassung auslösen. Solche Einflüsse wurden an verschiedenen Apparaturen in unseren Labors beobachtet und können daran erkannt werden, daß sie nicht für beide (äquivalente) Kipprichtungen der Probe auftreten. Bei 30° erscheint ein solcher "LEED-Peak" - wie bei *Donath* (1989) - als ziemlich scharfe Struktur bei 8 eV, die bei kleineren Winkeln rasch zu höherer Energie wandert.

Für den intensiven sp-Band Übergang B_2 konnten *Klebanoff et al.* (1987) bei senkrechtem Elektronen-Einfall *keine* Spin-Aufspaltung beobachten. Außerdem zeigte die Oberfläche bei Raumtemperatur keine remanente Magnetisierung. Um überhaupt einen Spin-Effekt für den Übergang in das Minoritäts(!)-d-Band zu beobachten, wurde die Probe während der IPE-Messungen in einem äußeren Feld (entlang $\langle 100 \rangle$) magnetisiert gehalten. Auf diese Weise konnte aber für die mittlere Oberflächen-Magnetisierung nur etwa $1/3$ der Sättigung erreicht werden, denn die dabei entstandenen Streufelder führten bereits zu einer beträchtlichen Ablenkung der Elektronen (von 14°). Damit wird deutlich, daß äußere Felder für (spinaufgelöste) Bandstruktur-Untersuchungen mit hoher Winkel-Auflösung ausscheiden. *Klebanoff et al.* geben keine Begründung für das Verschwinden der remanenten Magnetisierung.

Wie in Kap. 4.2 gezeigt ist, können an der Ni(001)-Oberfläche Abschlußdomänen dazu führen, daß die Oberflächen-Magnetisierung und damit jeder Spin-Effekt im Mittel über viele Domänen verschwindet. Aufgrund der ausgeprägten Temperatur-Hysterese der Ni(001)-Domänenstruktur (s. Kap. 4.4) ist es möglich, eine hohe Magnetisierung der Oberfläche zu erzielen, ohne äußere Felder anlegen zu müssen. Dazu wurde die Probe bei 540 K remanent magnetisiert und während der Abkühlung gemessen. Nach 30 min Meßzeit war die Probe noch 340 K warm und die Spin-Asymmetrie im d-Band Übergang erst auf -40 % gesunken (vgl. Abb. 4.11); der Mittelwert für das Temperaturintervall beträgt etwa 400 K. Durch diese "Magnetische Präparation" der Ni(001)-Oberfläche erreicht man eine wesentlich höhere Magnetisierung als (in äußeren Feldern!) bei Raumtemperatur (vgl. Abb. 4.5). Die "Einbuße" an d-Band Asymmetrie beträgt nur $1/10$, verglichen mit einem hypothetisch eindomänigen Zustand bei 400 K (-50 %). Dadurch ist der Nachweis von Spin-Effekten mit wesentlich höherer Genauigkeit

möglich als bisher.

Abb. 5.4 zeigt spinaufgelöste IPE-Spektren für senkrechten Elektronen-Einfall im unteren Teil sowie dem spinintegrierten Spektrum mit zugehöriger Spin-Asymmetrie darüber. (Zur Definition der Asymmetrie s. Kap. 3.3.1, Gl. (3.16).)

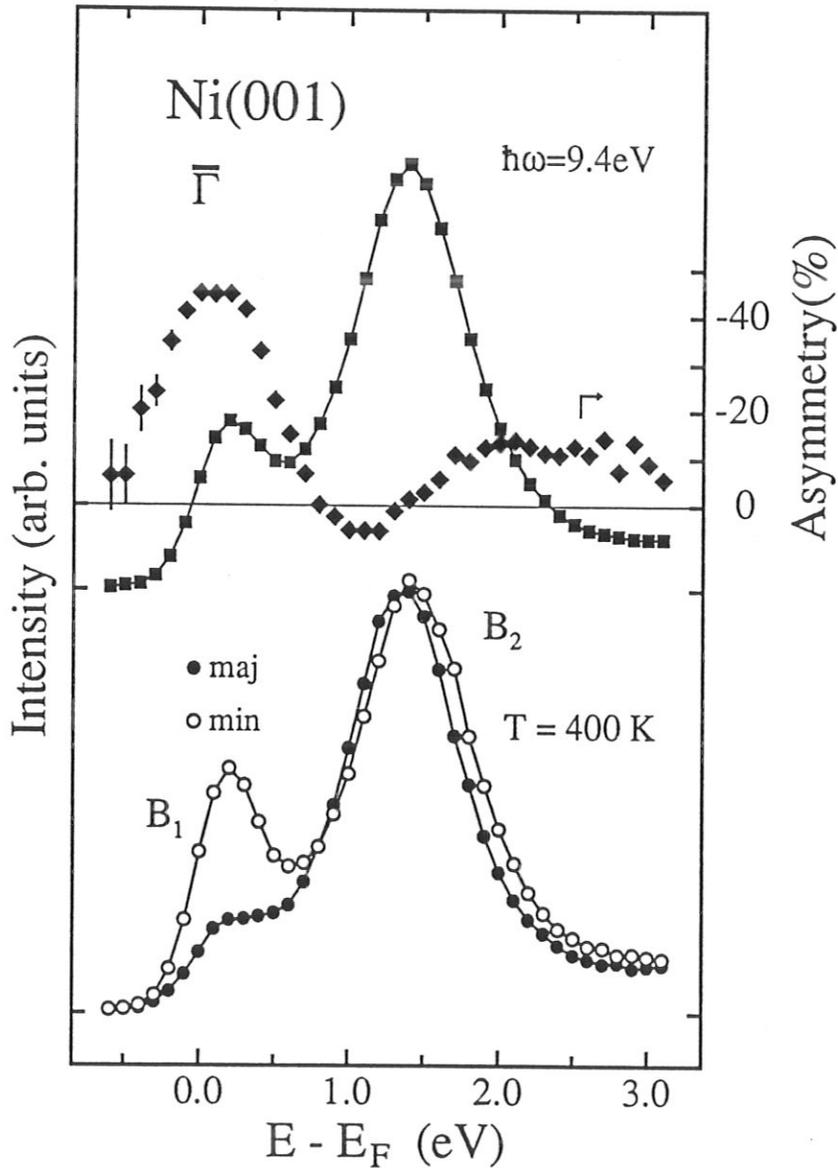


Abb. 5.4: Spinaufgelöste (unten) und spinintegrierte IPE-Spektren (oben) mit zugehöriger Asymmetrie für die Übergänge B_1 und B_2 auf Ni(001) an $\bar{\Gamma}$.

Die Strukturen bei 0.2 eV und 1.4 eV oberhalb der Fermienergie entsprechen den Übergängen B_1 und B_2 . Die spinaufgelösten Spektren zeigen, daß der d-Band Übergang fast ausschließlich Minoritäts-Charakter besitzt. Der Übergang in das 4sp-Band ist deutlich spin-aufgespalten! Im Linienmaximum wurden pro Spinrichtung über 120000 Pulse aufgenommen; die zugehörige Asymmetrie ändert sich dort rasch mit der Energie und besitzt an der Stelle der B_2 -Peaks einen Nulldurchgang. Damit ist das Vorhandensein einer Aufspaltung für den Übergang eindeutig belegt, da ein Vorzeichen-Wechsel der Asymmetrie nicht durch spin-unabhängige Zusatzintensitäten vorgetäuscht werden kann (s. Kap. 3.3.1, Gl. (3.16)).

Die Größe der Spin-Aufspaltung des sp-Band Übergangs läßt sich durch Least-squares Fits zu (80 ± 20) meV bestimmen. Durch das hohe Signal-zu-Untergrund Verhältnis ist der Wert unabhängig von der beim Fit angenommenen Linienform. Der Fehler berücksichtigt die Unsicherheit in der Quellen-Polarisation sowie einen *a priori* nicht bekannten Untergrund-Beitrag durch B_1 . Der Hochrechnung der spinaufgelösten Spektren (s. Kap. 3.3.1) liegt eine hypothetisch eindomänige Oberfläche zugrunde, so daß der Wert von (80 ± 20) meV eine untere Grenze bezüglich des Domänen-Einflusses darstellt. Will man darüber hinaus zu einem ungefähren Wert für die Aufspaltung des Übergangs gelangen, so kann man für eine Abschätzung den Temperatur-Verlauf der d-Band Asymmetrie verwenden. Ein im gesamten Temperaturintervall der Messung hypothetisch eindomäniger Zustand würde demnach auf ungefähr 1.1-fache Werte für die Asymmetrie führen, was einer Aufspaltung des Übergangs von etwa 90 meV entspricht.

Da die sp-Bänder nicht flach verlaufen, ist die Aufspaltung des Übergangs prinzipiell von der Austausch-Aufspaltung sowohl des Anfangs- ($\Delta E_{A,i}$) wie des Endzustands ($\Delta E_{A,f}$) abhängig, und es geht die Steigung beider Bänder ein. Der Anfangszustand für den B_2 -Übergang liegt in der Nähe des X_1 -Punkts. Nach Rechnungen von *Noffke* (1990) beträgt $\Delta E_{A,i} = 0.16$ eV und ist damit sogar größer als $\Delta E_{A,f} = 0.08$ eV (beides für $T = 0$ K). Der für den Übergang zu erwartende Wert liegt dazwischen, da Anfangs- und Endband entgegengesetzte Steigung besitzen: Das ist mit dem experimentellen Wert (~ 90 meV bei 400 K) verträglich. Der Nachweis einer nicht verschwindenden Spin-Aufspaltung für den Übergang besagt,

daß Anfangs- oder Endband oder beide Bänder aufgespalten sind. (Experimentell wäre die Trennung von $|i\rangle$ - und $|f\rangle$ -Anteilen nur durch Variation der Übergangsenergie $\hbar\omega$ möglich.) - Eine kleinere Aufspaltung im Endzustand ist durch die rein p-artige Symmetrie des X_4 -Punkts [Cornwell (1969)] verständlich. Da an X-Punkten nur Wellenfunktionen gleicher Parität mischen können, ist eine Hybridisierung mit d-Wellen direkt an X_4 ausgeschlossen und folglich klein in seiner Umgebung. Dagegen besitzt der höherliegende X_1 -Punkt sowohl s- als auch d-artige Symmetrie. (Der Anteil d-artiger Basisfunktionen beträgt dort 30 % [Noffke (1990)]; das ist eine Obergrenze für den Anteil der magnetischen 3d-Bänder, da in dem Wert auch höher angeregte d-Wellen berücksichtigt sind.)

sp-Bänder sind also auf einer magnetisch wohldefinierten Ni(001)-Oberfläche austausch-aufgespalten! Anhand der Untersuchungen in Kap. 4 kann das Resultat von Klebanoff *et al.* (1987) auf eine durch Abschlußdomänen im Mittel stark reduzierte Oberflächen-Magnetisierung zurückgeführt werden.

5.2 OBERFLÄCHEN-ZUSTÄNDE

Auf Ni(001) treten in den Lücken der projizierten Volumen-Bandstruktur die Oberflächen-Zustände S_1 und S_2 auf. Nach einer Betrachtung ihrer allgemeinen Eigenschaften (in Kap. 5.2.1) wird in Kap. 5.2.2 die Größe ihrer Austausch-Aufspaltungen untersucht.

5.2.1 GENERELLE EIGENSCHAFTEN

An der Kristall-Oberfläche ist die drei-dimensionale Symmetrie gebrochen und damit das Potential gegenüber dem Volumen verändert. Daher können an der Oberfläche elektronische Zustände existieren, die im Volumen verboten sind. Solche Oberflächen-Zustände erscheinen bei Metallen hauptsächlich in den Lücken der auf die Oberfläche projizierten Volumen-Bandstruktur.

Es ist üblich, zwischen sogenannten Tamm- und Shockley-Zuständen zu unterscheiden [z. B. *Courths und Hüfner* (1984)]. Tamm-Zustände sind von den d-Bändern abgespalten und können als Bandverschiebung im Oberflächenpotential aufgefaßt werden. Während besetzte Tamm-Zustände an vielen Übergangsmetall-Oberflächen identifiziert sind [*Himpel* (1983), *Courths und Hüfner* (1984)], gibt es keinen Hinweis auf unbesetzte Tamm-Zustände an den niedrig-indizierten Ni-Oberflächen [*Goldmann et al.* (1985b)]. - Shockley-Zustände treten hingegen in Energielücken auf, die durch Hybridisierung sich kreuzender sp-Bänder am Zonenrand entstehen. In diesen Bandlücken können ins Vakuum exponentiell abfallende Wellenfunktionen an periodische Volumenfunktionen angepaßt werden, wenn die Bandlücke invertiert ist ("Shockley inverted gap"), das untere Band also p-artig, das obere s-artig ist. Solche Lücken treten an den fcc-Übergangsmetallen z. B. am X-Punkt (X_4 - X_1 Lücke) und am L-Punkt auf (L_2 - L_1 Lücke). In der projizierten Bandstruktur der Ni(001)-Oberfläche tritt die X_4 - X_1 Lücke an $\bar{\Gamma}$ auf, die L_2 - L_1 Lücke führt zur Lücke an \bar{X} (vgl. Abb. 5.3).

Die sp-artigen Oberflächen-Zustände werden im Vielfachreflexions-Modell beschrieben, das von *Echenique und Pendry* (1978) und *McRae* (1979) entwickelt wurde. Ein gebundener Zustand wird als ebene Welle aufgefaßt, die zwischen der Kristall-Oberfläche und der Oberflächen-Barriere "eingesperrt" ist. Die Amplitude der (normierten) Welle ändert sich bei den wiederholten Reflexionen an Kristall und

Barriere jeweils um $r_C e^{i\Phi_C}$ bzw. $r_B e^{i\Phi_B}$ und beträgt nach unendlich häufiger Reflexion $[1 - r_C r_B e^{i(\Phi_B + \Phi_C)}]^{-1}$. Für $r_B = r_C = 1$ und

$$\Phi_C + \Phi_B = 2\pi n \quad (5.1)$$

(n ganzzahlig) ist die Amplitude selbsterhaltend. Ein gebundener Zustand kann also nur in einer Lücke der projizierten Bandstruktur ($r_C = 1$) und unterhalb der Vakuumenergie ($r_B = 1$) auftreten. Energie und k_{\parallel} für den Oberflächen-Zustand sind durch die Phasenbedingung (5.1) festgelegt. Um sie zu erfüllen, muß sich mindestens eine der beiden Phasen Φ_C oder Φ_B rasch mit der Energie ändern. Dementsprechend unterscheidet man nach *Echenique und Pendry* (1978) zwischen kristall-induzierten und bildkraft-induzierten Oberflächen-Zuständen, je nachdem, ob Φ_C oder Φ_B die Änderung der Gesamtphase dominiert.

Ein kristall-induzierter Zustand entsteht, wenn Bedingung (5.1) für $n = 0$ erfüllt werden kann. Seine exakte Energielage hängt kritisch von Φ_C und Φ_B ab, d. h. von der Volumen-Bandstruktur sowie der genauen Form der Oberflächen-Barriere. Seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist hauptsächlich auf die erste Atomlage konzentriert, reicht aber etwas tiefer ins Volumen hinein als bei einem (d-artigen) Tamm-Zustand [*Himpsel* (1983)].

Im Gegensatz dazu liegt bei Bildkraft-Zuständen das Maximum der Wellenfunktion einige Å vor der Oberfläche. Sie sind hauptsächlich durch den asymptotischen Verlauf der Oberflächen-Barriere, d. h. das Bildkraft-Potential $V(z) \sim E_V - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{4z}$ ($z > 0$) bestimmt. Für die Barrierenphase Φ_B gilt in der Näherung des unsaturierten Potentials (mit $V = +\infty$ für $z < 0$) [*McRae* (1979)]:

$$\Phi_B(E) = (\sqrt{\frac{3.4 \text{ eV}}{E_V - E}} - 1) \pi. \quad (5.2)$$

Unterhalb der Vakuumenergie E_V kann also eine Rydberg-artige Serie von Zuständen mit den Energien $E_V - E_n$ ($n = 1, 2, \dots$) auftreten, da Φ_B für E vs. E_V divergiert. Experimentell wurden $n = 1$ Bildkraft-Zustände auf Metalloberflächen mit IPE nachgewiesen [*Dose et al.* (1984), *Straub und Himpsel* (1984)]; höhere Zustände der Rydbergserie konnten mit der 2-Photonen Photoemission aufgelöst werden [*Giesen et al.* (1985), *Steinmann* (1989)]. Bildkraft-Zustände besitzen aufgrund des kleinen Überlapps mit Volumenbändern eine bemerkenswert geringe Lebensdauer-Breite von nur einigen 10 meV [*Schoenlein et al.* (1988), *Schuppler et al.* (1990)] und sind damit wesentlich schmaler als die heute mit IPE erreichbare

Auflösung. In den IPE-Spektren treten daher $n = 1$ Bildkraft-Zustände mit einer Breite auf, die etwa der apparativen Auflösung entspricht.

Auf Ni(001) können beide Arten der sp-artigen Oberflächen-Zustände beobachtet werden (s. Abb.en 5.2 und 5.3). Ein ($n = 1$) Bildkraft-Zustand (S_1) erscheint an $\bar{\Gamma}$ 4.5 eV oberhalb E_F ; seine Bindungsenergie E_1 beträgt also etwa 0.8 eV ($E_V = 5.3$ eV [Wandelt (1987)]). Er zeigt die erwartete freielektronen-artige Dispersion mit $k_{||}$. Eine Linienformanalyse der in Abb. 5.2 gezeigten und weiterer Spektren ergibt eine effektive Masse $m^*/m = (0.95 \pm 0.15)$ für $k_{||} \leq 0.55 \text{ \AA}^{-1}$. (Die in Abb. 5.3 eingezeichneten Parabeln entsprechen $m^*/m = 1$.)

Die Struktur S_2 in der Umgebung von \bar{X} ist ein kristall-induzierter Oberflächen-Zustand. In früheren Arbeiten trat S_2 wegen des winkelintegrierten Photonen-Nachweises nur mit sehr geringer Intensität auf. Durch die Verwendung eines zweiten Zählrohrs kann hier nicht nur die Dispersion über den Rand der Brillouinzone hinaus deutlich verfolgt werden, sondern es läßt sich auch die Symmetrie von S_2 auf Ni(001) zum ersten Mal experimentell festlegen (vgl. [Donath et al. (1986)] für Cu(001)). Der Zustand ist in dem ungefähr senkrecht zur Oberfläche stehenden Zählrohr nur mit äußerst geringer Intensität, schräg zur Oberfläche dagegen deutlich sichtbar (vgl. linke und mittlere Serie in Abb. 5.2). Die Dipolachse des Strahlungsübergangs steht also etwa senkrecht zur Oberfläche, d. h. parallel zur GXUL-Spiegelebene; folglich hat der Zustand S_2 bzgl. der Spiegelebene gerade Parität. Das ist für den Vergleich mit theoretischen Bandstrukturen von Bedeutung (s. u.). Die Aufwärts-Dispersion von S_2 ist eine Konsequenz der $k_{||}$ -abhängigen Lage der Bandlücke [Chen und Smith (1987)]. Ein Bildkraft-Zustand ist um \bar{X} nicht zu erwarten, da die "Vakuumparabel" $E_V + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m}$ weit oberhalb der Bandlücke verläuft.

5.2.2 AUSTAUSCH-AUFSPALTUNG SP-ARTIGER OBERFLÄCHEN-ZUSTÄNDE

Die erste Atomlage von Metalloberflächen und das darunterliegende Volumen haben eine andere elektronische Struktur. Daher können auch magnetische Eigenschaften wie die Stärke der Austauschkopplung und damit die Magnetisierung in den beiden Bereichen voneinander verschieden sein.

Nach einer langen Kontroverse über die Existenz von magnetisch "toten" Atomlagen an Ni-Oberflächen [Liebermann et al. (1970), Pierce und Siegmann

(1974), *Bergmann* (1978)] besteht heute Einvernehmen darüber, daß die obersten Ni-Lagen magnetisch aktiv sind. Das konnte für Ni(110) direkt durch Messung der Austausch-Aufspaltung von Oberflächen-Zuständen gezeigt werden. Mit nicht spinaufgelöster PES fanden *Eberhardt et al.* (1980) durch Linienformanalyse eine Aufspaltung von 0.3 eV ($T = 100$ K) für einen Tamm-Zustand am \bar{S} -Punkt. Ein direkter Beweis ist die - bisher einzige spinaufgelöste - IPE-Messung von 170 meV für die Aufspaltung des kristall-induzierten Zustands an \bar{X} . Dieser unbesetzte Oberflächen-Zustand liegt etwa 6 eV oberhalb der "magnetischen" d-Bänder; die gemessene Aufspaltung ist daher "überraschend groß" [*Donath* (1989)].

Für die hier untersuchte Ni(001)-Oberfläche zeigten *Landolt und Campagna* (1977) durch Polarisationsanalyse von feld-emittierten Elektronen, daß die spinabhängige Zustandsdichte nahe E_F ähnlich der des Ni-Volumens ist; auf diese Weise konnten sie magnetisch "tote" Lagen an der Oberfläche ausschließen. Das ist durch Messungen mit der Elektronen-Einfang-Spektroskopie (ECS) bestätigt worden [*Rau* (1980)]. (In beiden Untersuchungen war die Ni-Probe in einem äußeren Feld gesättigt; ein Einfluß von Abschlußdomänen ist daher auszuschließen.) *Feder et al.* (1983) fanden mit spinpolarisiertem LEED, daß die Magnetisierung in der obersten Atomlage von Ni(001) gegenüber dem Volumen sogar etwas erhöht ist (5 %). Für diese Aussage wurden bei 520 K und 300 K gewonnene Daten auf den Grundzustand ($T = 0$ K) extrapoliert.

Selbstkonsistente Rechnungen im Einteilchen-Bild ergeben für die oberste Atomlage von Ni(001) und Ni(110) eine gegenüber dem Volumen erhöhte Magnetisierung von 20 % [*Wimmer et al.* (1984)] bzw. 13 % [*Krakauer et al.* (1983)]. (Als Konsequenz auf die reduzierte Koordination der Oberflächen-Atome und der dadurch verringerten d-Bandbreite zeigen diese Rechnungen eine Zunahme an Majoritäts- bei einer Abnahme von Minoritäts-Elektronen.) - Insgesamt kann man für Ni(001) also davon ausgehen, daß die Magnetisierung der obersten und der darunter liegenden Atomlagen sehr ähnlich ist; die theoretisch vorhergesagte Erhöhung konnte experimentell bisher nicht bestätigt werden.

Welche Größe kann man nun für die Austausch-Aufspaltung der Oberflächen-Zustände S_1 und S_2 erwarten? Dazu läßt sich das Vielfachreflexions-Modell heranziehen. Diese zuerst von *Borstel und Thörner* (1988) für den Fall von Fe(110) angestellte Betrachtung ist hier zum Zweck einer Abschätzung auf Ni(001) über-

tragen; dabei werden für den Energieverlauf der Phasen Näherungen benutzt.

Für eine Abschätzung kann man trotz der Nähe der d-Bänder annehmen, daß sich die Kristallphase Φ_C beim Durchqueren der projizierten Bandlücke um π ändert [Pendry und Gurman (1975)] und zur Beschreibung ihrer Energieabhängigkeit das Zweiband-Modell heranziehen [Chen und Smith (1987)]. Die Barrierenphase Φ_B wird als spin-unabhängig angenommen [Borstel und Thörner (1988)] und durch den Ausdruck (5.2) angenähert. Eine Aufspaltung der Oberflächen-Zustände rührt in dieser Näherung allein von der unterschiedlichen Energielage von Majoritäts- und Minoritäts-Bandlücke! Die Austausch-Aufspaltung Shockley-invertierter Bandlücken ist prinzipiell am oberen Rand größer als am unteren: Während die s-artigen Zustände am oberen Rand mit den 3d-Zuständen mischen können, ist das

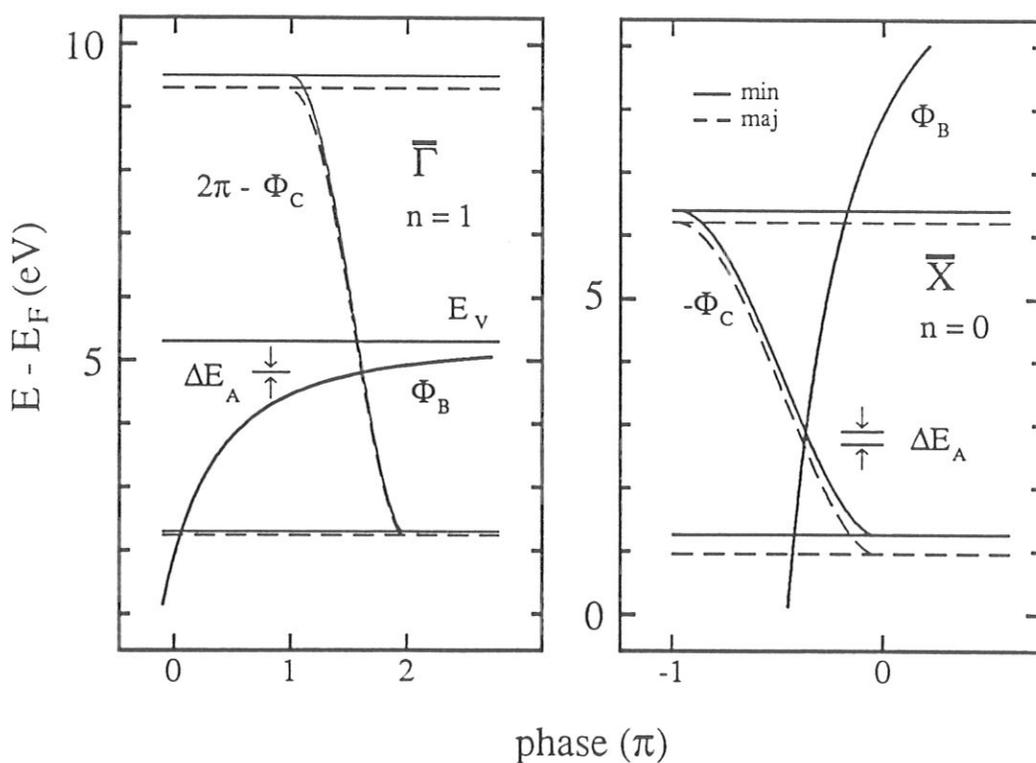


Abb. 5.5: Abschätzung der Austausch-Aufspaltung sp-artiger Oberflächen-Zustände auf Ni(001) im Vielfach-Reflexionsmodell [in Anlehnung an: Borstel und Thörner (1988)]. Die Energiewerte der Minoritäts- und Majoritäts-Bandlücken sind einer Combined-Interpolation-Scheme-Rechnung entnommen.

an den Hochsymmetrie-Punkten Γ, X und L für die p-artigen Zustände am unteren Rand symmetrie-verboden. (An \bar{X} ist der untere Rand nicht rein p-artig.)

Abb. 5.5 zeigt die spinabhängigen Kristallphasen mit den jeweiligen Barrierenphasen für $\bar{\Gamma}$ und \bar{X} . Die absoluten Energielagen der Zustände, gegeben durch die Schnittpunkte von Φ_B mit $2\pi n - \Phi_C$, hängen kritisch von den gewählten Parametern ab und wurden für die hier beabsichtigte Abschätzung nicht angepaßt. Für den $n = 1$ Bildkraft-Zustand an $\bar{\Gamma}$ ist nur eine verschwindend kleine Aufspaltung von etwa 10..20 meV zu erwarten, obwohl der obere Rand der Bandlücke (X_1 -Punkt) mit etwa 0.2 eV beträchtlich aufgespalten ist (vgl. Kap. 5.1). Der Grund dafür ist der flache Energie-Verlauf von Φ_B in der Umgebung der $n = 1$ Schnittpunkte. Experimentelle Werte zur Austausch-Aufspaltung des Bildkraft-Zustands gibt es nicht. (In einer frühen Untersuchung von *Dose und Glöbl* (1985) an Fe(110), ebenfalls mit spinaufgelöster IPE, war der Elektronenstrahl longitudinal polarisiert, sodaß bei senkrechtem Elektronen-Einfall ($\bar{\Gamma}$), wo der Bildkraft-Zustand am intensivsten ist, keine magnetische Information erhalten werden konnte (s. Kap. 3.3.1.) Es existiert lediglich eine obere Grenze von 40 meV, die *Fischer et al.* (1990) anhand neuer Messungen mit (nicht spinaufgelöster) 2-Photonen Photoemission für den $n = 1$ Zustand an Ni(111) $\bar{\Gamma}$ angeben können.

Ganz anders ist die Situation für den kristall-induzierten Zustand an \bar{X} . Durch den sehr steilen Φ_B -Verlauf in der gesamten Bandlücke - die "Vakuumparabel" liegt an \bar{X} bei über 11 eV oberhalb E_F - "schlägt" die Aufspaltung an den Rändern der Bandlücke "voll durch": Für S_2 ist daher eine Aufspaltung der Größenordnung 200 meV zu erwarten! In dieser Betrachtung wird die große, für den $n = 0$ Zustand auf Ni(110) an \bar{X} (ebenfalls X_4 - X_1 Lücke) gemessene Aufspaltung (s. o.) verständlich: Sie ist eine Konsequenz der Aufspaltung des sp-artigen Bands am oberen Rand der Bandlücke, d. h. des hohen d-Band Anteils am X_1 -Punkt.

Wimmer et al. (1984) sagen für Ni(001) einen Oberflächen-Zustand um \bar{X} bei etwa 5 eV oberhalb E_F voraus; er soll bezüglich der ΓXUL -Spiegelebene gerade Parität besitzen und, bei $T = 0$ K, etwa 0.25 eV austausch-aufgespalten sein! Anhand von Symmetrie und Energielage kann der vorhergesagte Zustand mit S_2 identifiziert werden.

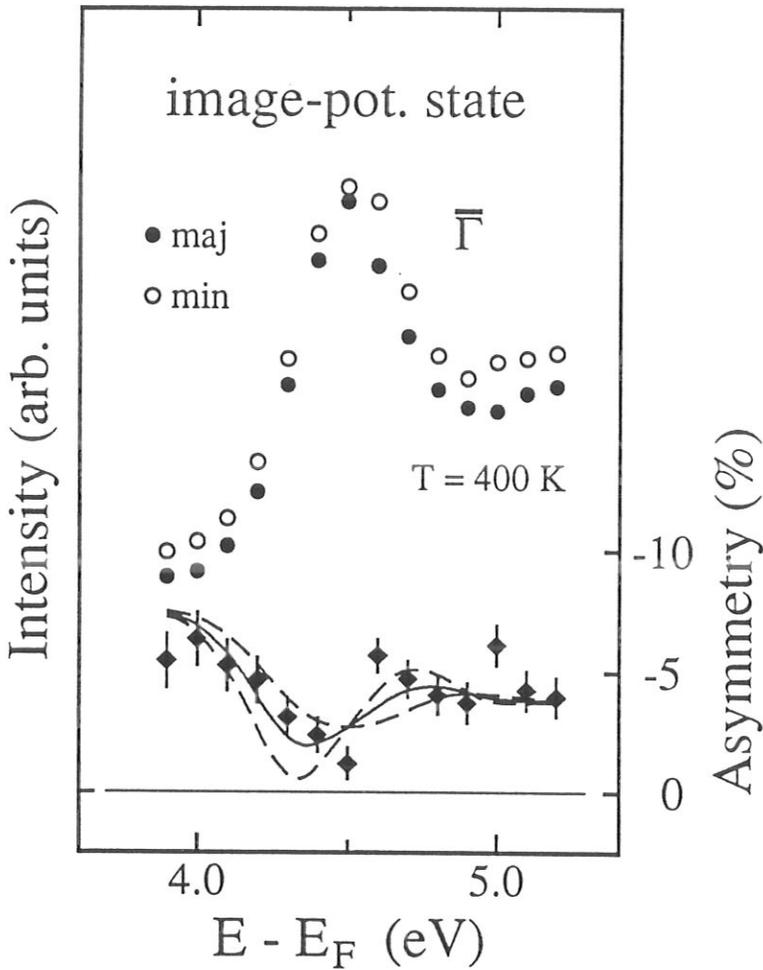


Abb. 5.6: Spinaufgelöste IPE-Spektren des Ni(001) Bildkraft-Zustands ($n=1$) an $\bar{\Gamma}$ ($\hbar\omega = 9.4$ eV) mit zugehöriger Spin-Asymmetrie. Durchgezogene und gestrichelte Linien entsprechen hypothetischen Asymmetrien für unterschiedliche Linien-Aufspaltung. (Erläuterungen im Text.)

Welche Aufspaltungen zeigt nun das Experiment? In Abb. 5.6 sind spinaufgelöste IPE-Spektren des Bildkraft-Zustands an $\bar{\Gamma}$ zusammen mit der zugehörigen Asymmetrie dargestellt. Die Asymmetrie besitzt an der Stelle der beiden Linienmaxima eine signifikante Struktur. Solche Strukturen müssen aber mit Vorsicht betrachtet werden: Da die beiden Linien - wie in allen IPE-Spektren - auf einem polarisierten Untergrund liegen, kann man nicht ohne weiteres auf eine Aufspaltung schließen. Durch die Untergrund-Polarisation nimmt die Asymmetrie im Bereich der Linien zwangsläufig ab, selbst wenn sie nicht aufgespalten sind. Zur

Bestimmung der Energielage beider Linien wurden Least-squares Fitprozeduren verwendet. Wegen der kleinen intrinsischen Breite (s. o.) wurde dabei die Linienform als Gauß-förmig (Apparatefunktion) angenommen; zur Beschreibung des Untergrunds dienten verschiedene nichtlineare Funktionen. Man erhält für die Austauschaufspaltung (14 ± 25) meV.

Die Nachweisgrenze für Spin-Aufspaltungen ist wesentlich kleiner als die apparative Auflösung und allein durch die Genauigkeit bestimmt, mit der die Linienmaxima in den spinaufgelösten Spektren lokalisiert werden können. Das hängt einerseits von der Statistik in den Spektren, andererseits aber vom Signal-zu-Untergrund Verhältnis ab, da die Form von Linien und Untergrund in IPE nicht *a priori* bekannt ist. Beim Bildkraft-Zustand führen die nicht aufgelösten Beiträge der höheren Rydberg-Zustände zu einer asymmetrisch verbreiterten Linie, die zudem auf einem nicht linearen Untergrund liegt. Daher ist selbst mit einer besseren Statistik (als ± 1 % Fehler in der Asymmetrie) keine genauere Aussage über die Austausch-Aufspaltung des $n = 1$ Zustands mit IPE möglich.

Man kann gegen dieses Vorgehen zur Bestimmung der Aufspaltung einwenden, daß die "Zerlegung" der Spektren in Linie und Untergrund dabei nicht eindeutig ist. Darum wurde zusätzlich die experimentelle Asymmetrie mit einer hypothetischen Asymmetrie verglichen: Das spinintegrierte Spektrum diente dabei sowohl als "Majoritäts"- als auch nach Addition eines Offsets B sowie einer Verschiebung in der Energie um S als "Minoritäts"-Spektrum. Der experimentelle Verlauf wird am besten bei einer "Aufspaltung" von $S = 10$ meV (und $B = -7.5$ %) beschrieben ($\chi^2=2.3$); die zugehörige Asymmetrie ist in Abb. 5.5 als durchgezogene Linie eingetragen. Zum Vergleich geben die gestrichelten Linien den Verlauf für $S = 0$ (flache Kurve, $\chi^2=3.1$) und $S = 20$ meV ($\chi^2=3.3$) wieder. Obwohl das χ^2 -Minimum für $S = 10$ meV deutlich größer als 1 ist, stützt diese Analyse den durch Fitprozeduren gewonnenen Wert.

Die Austausch-Aufspaltung von (14 ± 25) meV für den Bildkraft-Zustand ist im Vielfachreflexions-Modell - angewendet auf Ni(001) - qualitativ verstanden. Das Ergebnis ist jedoch innerhalb des Fehlers mit Null verträglich. Angesichts der großen Aufspaltung der d-Bänder in Eisen (etwa 2 eV) sind Fe-Oberflächen, trotz ihrer schwierigen Reinigung, bessere Kandidaten, um die Frage nach der Spin-Abhängigkeit von Bildkraft-Zuständen definitiv zu klären.

Für den kristall-induzierten Oberflächen-Zustand S_2 zeigt Abb. 5.7 spinaufgelöste Spektren nahe \bar{X} ($\theta = 50^\circ$): Majoritäts- und Minoritäts-Linie sind klar spinaufgespalten. Die Spin-Aufspaltung läßt sich mittels Fitprozeduren zu (180 ± 80) meV festlegen. Da der S_2 -Zustand bei \bar{X} flach verläuft, ist der Wert in guter Näherung gleich der Austausch-Aufspaltung. (Er ist wiederum eine untere Grenze bezüglich eines Einflusses der Domänenstruktur (vgl. Kap. 5.1). Eine Berücksichtigung dieses Einflusses würde auf $\Delta E = 210$ meV führen, ist aber bei der

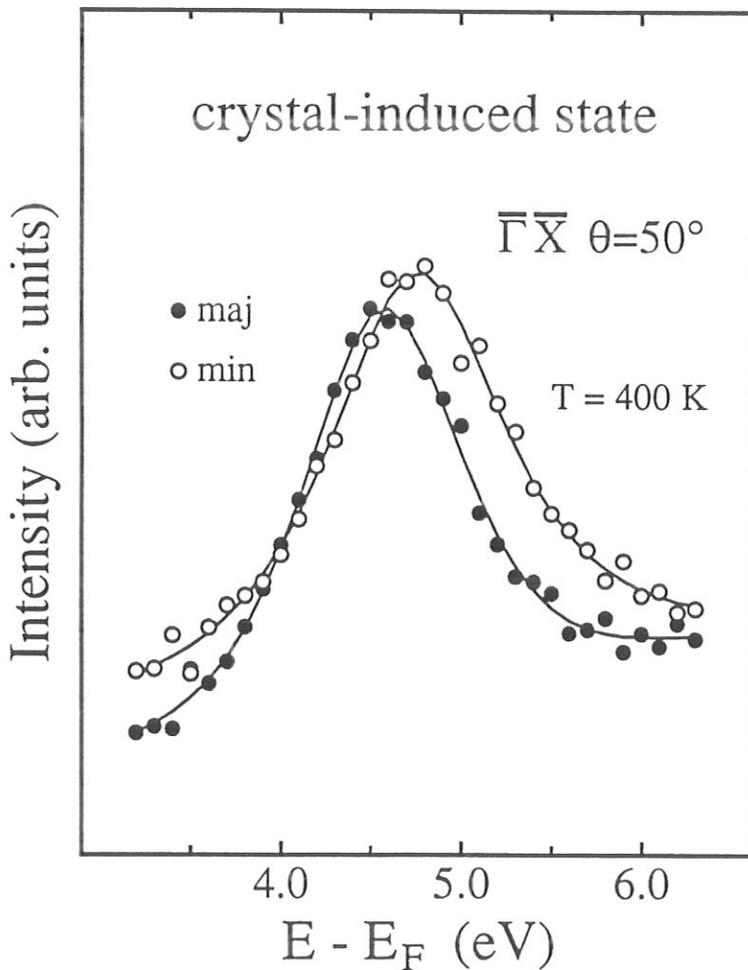


Abb. 5.7: Spinaufgespaltene IPE-Spektren des kristallinduzierten Oberflächen-Zustands ($n=0$) auf Ni(001) nahe \bar{X} ($\hbar\omega = 9.4$ eV).

Größe des Fehlers - v. a. bedingt durch die Unsicherheit des Untergrunds - wohl kaum sinnvoll.) - Die Halbwertsbreite der Minoritäts-Linie ist etwas größer als die der Majoritäts-Linie. Eine geringere Lebensdauer von Minoritäts-Zuständen wurde bisher nur an Volumen-Zuständen (wie auch bei B_2) beobachtet [Donath *et al.* (1990)] und erscheint für sie aufgrund der größeren unbesetzten Minoritäts-Zustandsdichte an E_F plausibel [Feder und Rodriguez (1984)]. Im Verhältnis zu den Bildkraft-Zuständen haben kristall-induzierte Zustände einen beträchtlichen Überlapp mit Volumenzuständen, in die sie zerfallen können; eine spinabhängige Lebensdauer der $n=0$ Oberflächen-Zustände erscheint damit verständlich.

Die Austausch-Aufspaltung des kristall-induzierten Zustands ist von der Größe, wie sie nach der Abschätzung im Vielfachreflexions-Modell erwartet wird. Sie ist, ebenso wie die in der X_4 - X_1 Lücke auf Ni(110) gemessene Aufspaltung [Donath *et al.* (1990)] eine Folge des hohen d-Band Anteils der freielektronen-artigen Bänder, hier am L_1 -Punkt. Außerdem zeigt das Ergebnis an Ni(001) die magnetische "Aktivität" der obersten Atomlage direkt, in Einklang mit früheren Untersuchungen.

6. Spin-Abhängigkeit des absorbierten Stroms an Ni(001)

Rechnungen zur Ni-Bandstruktur sagen selbst für hoch angeregte Zustände an kritischen Punkten nennenswerte Austausch-Aufspaltungen voraus (z. B. 0.2 eV an X_1 , etwa 10 eV oberhalb E_F , vgl. Kap. 5) [Eckardt und Fritsche (1987), Noffke (1990)]. Das ist in Einklang mit den relativ großen Aufspaltungen der kristallinduzierten Oberflächen-Zustände an Ni(001) \bar{X} (s. Kap. 5.2) und Ni(110) \bar{X} [Donath et al. (1990)]. Die Größenordnung der gemessenen Aufspaltungen läßt sich im Vielfachreflexions-Modell verstehen, wenn man für die Aufspaltung der Bandlücken die theoretischen Werte annimmt. Damit ist ihre Größenordnung zwar *indirekt* bestätigt, aber einen direkten Nachweis gibt es bisher nicht.

Eine experimentell recht einfache Möglichkeit bietet die Messung des von der Probe absorbierten Elektronen-Stroms (Target-Current-Spektroskopie, TCS). Elektronen, die auf die Probe treffen, werden nur zum Teil absorbiert [Komolov und Chadderton (1979)]. Der absorbierte Strom besitzt bei Variation der kinetischen Energie (Stromkurven) eine Einsatzkante an der Oberflächen-Vakuumenergie E_V . Da die Reflektivität des Kristalls energieabhängig ist, zeigen die Stromkurven deutliche, hauptsächlich durch die Bandstruktur bestimmte Strukturen [Kisker et al. (1985), Schäfer et al. (1987), Drube et al. (1990)]. Diese Strukturen sind an den Rändern von Bandlücken besonders ausgeprägt: Elektronen, die an einen Blochzustand ankoppeln können, dringen in den Kristall ein und tragen damit zum Strom bei. Fällt die kinetische Energie jedoch in eine Bandlücke, so ist die Reflektivität erhöht und der Strom nimmt ab. Um diese Änderungen sichtbar zu machen, wird meistens die erste oder zweite Ableitung des Stroms nach der Energie (TCS-Spektren) betrachtet. Spinaufgelöste TCS-Spektren können nun über Unterschiede in der Energielage von Majoritäts- und Minoritäts-Bandlücken Auskunft geben, sofern diese oberhalb E_V liegen.

Die Spin-Abhängigkeit des absorbierten Stroms an ferromagnetischen Oberflächen wurde zuerst von Siegmann et al. (1981) untersucht. Messungen mit spinaufgelöster TCS gibt es bislang nur an Fe(001) [Dodt et al. (1988), Tillmann et al. (1989)]. Dort besitzt die Spin-Asymmetrie bei senkrechtem Elektronen-Einfall ($\bar{\Gamma}$) eine Struktur mit 7 % im Maximum bei 11 eV oberhalb E_V (Band-Lücke am H-Punkt). Da in Ni die Austausch-Aufspaltungen um etwa eine Größenordnung

kleiner sind, werden auch die Spin-Effekte in den TCS-Spektren an Ni-Oberflächen geringer sein.

Abb. 6.1 a zeigt spinaufgelöste Stromkurven an Ni(001) $\bar{\Gamma}$ für 0 eV bis 8 eV oberhalb E_V (E_V liegt 5.3 eV oberhalb der Fermienergie E_F). An $\bar{\Gamma}$ besteht für einlaufende Elektronen eine Ankopplungsmöglichkeit an Δ -Bänder (vgl. Abb. 5.1). Bei etwa 4 eV steigt der absorbierte Strom deutlich an und verläuft bei höheren Energien (bis 40 eV) strukturlos und flach. Bezogen auf E_F liegt der Anstieg zwischen 9 eV und 10 eV, d. h. am oberen Rand der Ni(001)-Bandlücke an $\bar{\Gamma}$ (X_1 -Punkt). Die Energie des steilsten Anstiegs ist für Majoritäts- und Minoritäts-Elektronen deutlich verschieden. Die Wendepunkte der Stromkurven, d. h. die Maxima in der ersten Ableitung, sind um (230 ± 70) meV aufgespalten (s. Abb. 6.1 b). Der Fehler ist hauptsächlich durch die Unsicherheit in der Lage des Untergrunds bei der TCS-Asymmetrie (s. u.) sowie in der Quellen-Polarisation bestimmt.

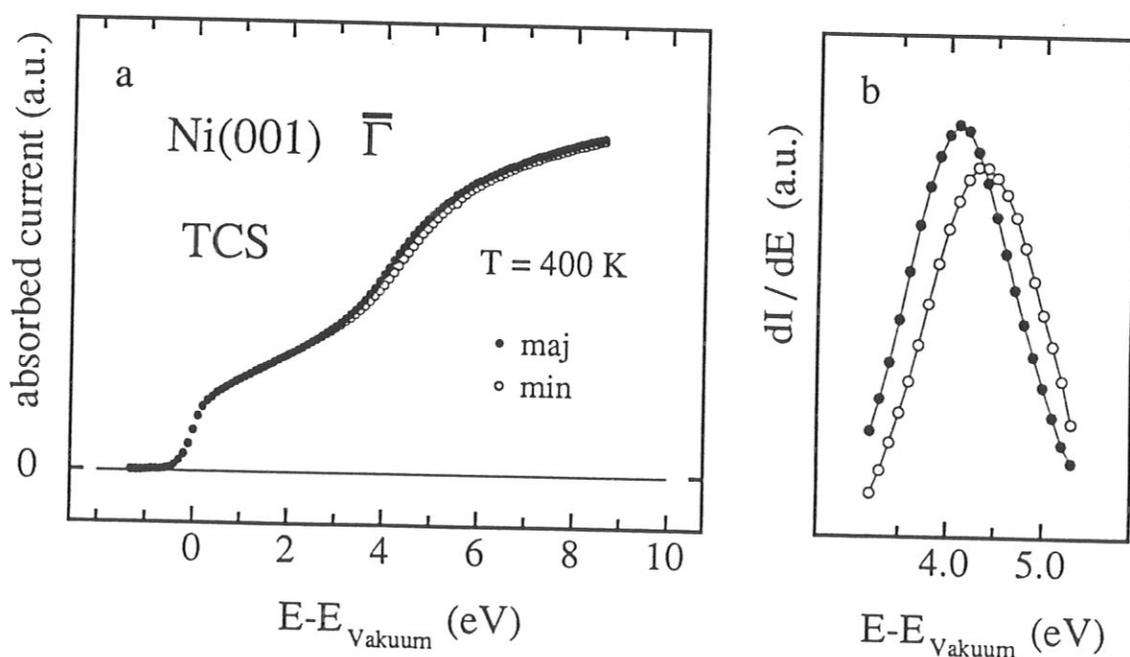


Abb. 6.1: Spinaufgelöste Stromkurven an Ni(001) $\bar{\Gamma}$ (a) und Austausch-Aufspaltung am X_1 -Punkt (b). (Erläuterungen im Text.)

Was sagen die Wendepunkte in den Stromkurven über die Energielage des Bandlücken-Rands aus? Direkt am kritischen Punkt verschwindet die Gruppengeschwindigkeit der Δ -Bänder, so daß die Ankopplung eines freien Elektrons an X_1 prinzipiell erst bei höherer Energie erfolgen kann [Tamura *et al.* (1985)]. Die absolute Lage des Wendepunkts hängt auch von der Wahrscheinlichkeit ab, mit der das freie Elektron an das Volumenband ankoppelt, d. h. vom Dispersionsverlauf des Bands [Drube *et al.* (1990)]. In erster Näherung unterscheidet sich die Dispersion der spinabhängigen Δ_1 -Bänder nahe dem X_1 -Punkt aber nur um eine Konstante, nämlich die Austausch-Aufspaltung an X_1 . Die Spin-Aufspaltung der Wendepunkte gibt also *direkt* die Austausch-Aufspaltung an X_1 wieder! (Der Hochrechnung

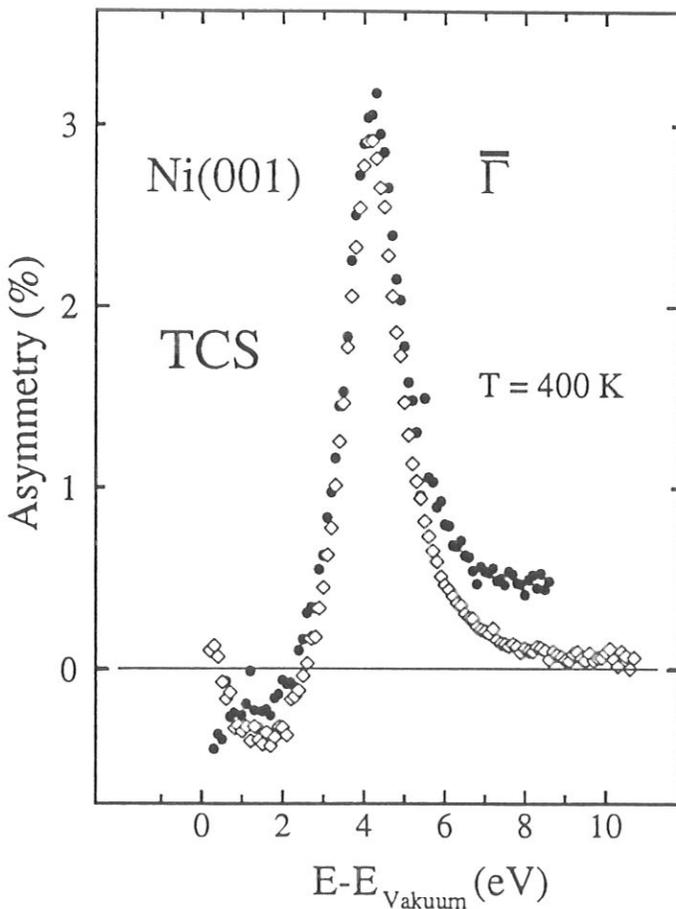


Abb. 6.2: Spin-Asymmetrie des Probenstroms an Ni(001) $\bar{\Gamma}$.

spinaufgelöster Spektren wird eine magnetisch gesättigte Oberfläche zugrunde gelegt, so daß der Wert von 230 meV eine untere Grenze bezüglich des Domänen-Einflusses darstellt. Eine näherungsweise Berücksichtigung dieses Einflusses erhöht den Wert um weniger als die Hälfte des experimentellen Fehlers (vgl. Kap. 5.) Sie stimmt im Rahmen des Fehlers mit der theoretischen Vorhersage von 0.2 eV [Noffke (1990)] überein. Damit ist das Vorhandensein einer nennenswerten Austausch-Aufspaltung für einen hochangeregten Zustand der Ni-Bandstruktur erstmals nachgewiesen. In der Diskussion der Oberflächen-Zustände im Vielfachreflexions-Modell (s. Kap. 5.2) wurde für den oberen Rand der Bandlücken eine Aufspaltung der Größenordnung 0.2 eV angenommen; dies ist hiermit für den X_1 -Punkt auch vom Experiment her gerechtfertigt.

Die zu den Stromkurven gehörige Spin-Asymmetrie zeigt Abb. 6.2 (ausgefüllte Symbole). Die Austausch-Aufspaltung an X_1 führt bei 4.1 eV zu einem ausgeprägten Peak (FWHM = 1.5 eV) mit einem Maximum von 3 %; dort dominiert die Ankopplung der Majoritäts-Elektronen (positives Vorzeichen der Asymmetrie). Im Vergleich zu den IPE-Spektren (-45 % im d-Band-Übergang, etwa -7 % im Untergrund nahe E_F) ist die Spin-Asymmetrie in den Stromkurven zwar klein, kann aber im Prinzip ohne großen Aufwand mit hoher Genauigkeit nachgewiesen werden. (Bei typischen Primärströmen von 1 μ A entsprechen Unterschiede von 1 nA bereits 500 ppm in der Asymmetrie.) Praktisch ist die Nachweis-Genauigkeit für die Asymmetrie durch den Elektronenstrahl begrenzt. Die offenen Symbole in Abb. 6.2 zeigen ein Beispiel für den Asymmetrie-Verlauf bei anderen Linsen-Parametern in der Elektronen-Transferoptik: Er besitzt einen anderen Untergrund. Die Ursache dafür liegt in der nicht exakt identischen Lage des Elektronenstrahls für beide Spinrichtungen; das konnte durch Messung des Stroms in einen (unmagnetischen) Faraday-Becher nachgewiesen werden. Da die Halbwertsbreite des Elektronenstrahls nicht wesentlich kleiner als die Probenbreite ist, unterscheidet sich der auftreffende Primärstrom für die beiden Spinrichtungen um bis zu 1 %. Dieser sehr kleine Unterschied hat keinen Einfluß auf die IPE-Spektren, die auf einen festen, von der Probe absorbierten Strom normiert sind. In den spinaufgelösten TCS-Spektren führt er aber zu einer Unsicherheit von bis zu 1/5 bei der Bestimmung der Asymmetrie im Linienmaximum in Abb. 6.2.

Die Messung von Probenströmen ist einfach. Auch aus diesem Grund haben *Tillmann et al.* (1989) vorgeschlagen, die hohe Spin-Asymmetrie von 21 % in dem von Fe(001) (bei 10.6 eV) reflektierten Strom als Polarisations-Detektor zu benutzen. Als Kenngröße für die Detektorgüte verwendet man $I/I_0 \cdot A^2$ [*Kessler* (1985)], da zur effizienten Polarisationsmessung ein hoher Anteil I/I_0 eines primären Elektronenstroms I_0 in einem Prozeß mit hoher Spin-Asymmetrie analysiert werden sollte. Während im Fall von Fe(001) eine Güte von $3.5 \cdot 10^{-3}$ erreicht werden könnte, erhielte man für die hier untersuchte Ni(001)-Oberfläche "nur" einige 10^{-4} . Das ist allerdings ein beträchtlich hoher Wert, wenn man ihn mit der bisher höchsten Güte von $2.3 \cdot 10^{-4}$ vergleicht [*Scheinfein et al.* (1989)], die bei den üblichen, auf Mott-Streuung beruhenden Detektoren erreicht wird. Dennoch ist die Ni(001)-Spin-Asymmetrie im Probenstrom zum quantitativen Polarisations-Nachweis wohl kaum praktikabel, da ein Einfluß der Abschlußdomänen auf die Oberflächen-Magnetisierung nur bei höheren Temperaturen ausgeschlossen werden kann (s. Kap. 4.2).

7. Zusammenfassung

Die Austausch-Aufspaltung von Majoritäts- und Minoritätsbändern kann mit spinaufgelösten Elektronen-Spektroskopien untersucht werden. Dabei muß für eine quantitative Analyse der Spin-Information die Magnetisierung der Probenoberfläche bekannt sein.

In der vorliegenden Arbeit wurde am Beispiel von Ni(001) der Einfluß von Abschlußdomänen auf die Oberflächen-Magnetisierung untersucht. Die Messungen der Oberflächen-Magnetisierung erfolgten *in situ* mit magnetooptischem Kerr-Effekt. Diese Untersuchungen erlaubten es, an einer Ni(001)-Oberfläche mit definiertem Magnetisierungszustand Details der spin-aufgespaltenen Bandstruktur zu bestimmen. Dazu wurden spinaufgelöste Inverse Photoemission (IPE) sowie spinaufgelöste Target-Current-Spectroscopy (TCS) eingesetzt.

Es wurde gezeigt, daß die Domänenstruktur an Ni(001) stark von der Temperatur abhängt. Beim Übergang vom Temperaturbereich kleiner Kristall-Anisotropie oberhalb von etwa 440 K zum Bereich hoher Anisotropie bei niedrigen Temperaturen bilden sich Abschlußdomänen aus. Dadurch kann die mittlere Oberflächen-Magnetisierung in Remanenz im Vergleich zur Sättigung stark *reduziert* sein und sogar *antiparallel* zum Volumen zeigen. In spinaufgelösten Spektroskopien können zu kleine Spin-Effekte beobachtet und dadurch insbesondere zu geringe Austausch-Aufspaltungen vorgetäuscht werden.

Selbst geringe Kristallspannungen können einen großen Einfluß auf das Ummagnetisierungsverhalten der Ni(001)-Oberfläche haben. Das zeigt sich vor allem in einer stark ausgeprägten Hysterese der remanenten Magnetisierung mit der Temperatur. Aufgrund der hier vorgenommenen Untersuchung wird erwartet, daß sich "die" Magnetisierung an Ni-Oberflächen mit Abschlußdomänen von Probe zu Probe unterscheidet.

An einer magnetisch gut definierten Ni(001)-Oberfläche besitzen sp-artige Δ_1 -Volumenbänder an $\bar{\Gamma}$ eine beträchtliche Austausch-Aufspaltung, deren Größe mit theoretischen Werten verträglich ist. Zusammen mit der Untersuchung zur Domänenstruktur konnte durch dieses Ergebnis die Ursache von Diskrepanzen aufgeklärt werden, die zur Aufspaltung dieser Bänder aus früheren Messungen in der Literatur

existieren.

Die Austausch-Aufspaltung von zwei verschiedenen Oberflächen-Zuständen (Shockley-Zuständen) wurde untersucht: Für den kristallinduzierten Oberflächen-Zustand beträgt sie (180 ± 80) meV nahe dem \bar{X} -Punkt. Da seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der äußersten Atomlage konzentriert ist, wird dadurch direkt die magnetische "Aktivität" der Ni(001)-Oberfläche demonstriert. Die gemessene Austausch-Aufspaltung des Ni(001)-Bildkraft-Zustands an $\bar{\Gamma}$ liegt unter der Nachweisgrenze von 25 meV. Dies steht in Einklang mit Abschätzungen im Vielfachreflexions-Modell. Eisen mit seiner um einen Faktor sieben größeren Austausch-Aufspaltung der 3d-Bänder ist ein besserer Kandidat, um die Frage nach der Spin-Abhängigkeit von Bildkraft-Zuständen definitiv zu klären.

Für den hochangeregten Zustand am X_1 -Punkt (~ 10 eV oberhalb der Fermienergie) konnte mit TCS eine Austausch-Aufspaltung von (230 ± 70) meV nachgewiesen werden. Diese Aufspaltung am oberen Rand der X_4 - X_1 -Bandlücke ist in Übereinstimmung mit theoretischen Werten. Die mit der Aufspaltung verbundene Spin-Asymmetrie im Probenstrom ließe sich zwar prinzipiell zum effizienten Spinpolarisations-Nachweis nutzen, ist jedoch aufgrund des komplizierten Domänenverhaltens in der Praxis dazu kaum geeignet.

Messungen mit spinaufgelösten Elektronen-Spektroskopien liefern wertvolle Beiträge zur Bestimmung der elektronischen Struktur von ferromagnetischen Systemen. Es wurde gezeigt, daß dazu die detaillierte Untersuchung des magnetischen Zustands der Probe eine unabdingbare Voraussetzung ist.

Literaturverzeichnis

- Abraham D. L., Hopster H.,
(1987), Phys. Rev. Lett. **58**, 1352
- Allenspach R., Taborelli M., Landolt M., Siegmann H. C.,
(1986), Phys. Rev. Lett. **56**, 953
- Altmann W.,
(1988), IPP-Report 9/66, Garching,
Dissertation (1988), Universität Würzburg
- Aubert G.,
(1968), J. Appl. Phys. **39**, 504
- Bennett H. S., Stern E. A.,
(1965), Phys. Rev. **137**, 448
- Bergmann G.
(1978), Phys. Rev. Lett. **41**, 264
- Bergmann-Schaefer,
(1987), *Lehrbuch der Experimentalphysik*,
Band II, *Elektrizität und Magnetismus*, 7. Aufl.
(Walter de Gruyter, Berlin)
- Bethke K.,
(1988), Diplomarbeit, Technische Hochschule Aachen
- Boockmann K.,
(1989), Diplomarbeit, Universität Erlangen
- Born M.,
(1933), *Optik*,
(Springer, Berlin)
- Borstel G., Thörner G.,
(1988), Surf. Sci. Rep. **8**, 1
- Chen C. T., Smith N. V.,
(1987), Phys. Rev. B **35**, 5407
- Clauberg R., Hopster H., Raue R.,
(1984), Phys. Rev. B **29**, 4395
- Cornwell J. F.,
(1969), *Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids*,
(North Holland, Amsterdam)

- Courths R., Hüfner S.,
(1984), *Physics Reports* **112**, 53
- Darby M. I., Isaac E. D.,
(1974), *IEEE Trans. Magn.* **MAG-10**, 259
- De Blois R. W.,
(1965), *J. Appl. Phys.* **36**, 1647
- Demuth J. E., Rhodin T. N.,
(1974), *Surf. Sci.* **45**, 249
- Desinger K., Dose V., Glöbl M., Scheidt H.,
(1984), *Solid State Commun.* **49**, 479
- Donath M.,
(1984), Diplomarbeit, Universität Würzburg
- Donath M., Glöbl M., Senftinger B., Dose V.,
(1986), *Solid State Commun.* **60**, 237
- Donath M.,
(1989), IPP-Report 9/71, Garching,
Dissertation (1988), Universität Würzburg
- Donath M., Dose V.,
(1989), *Europhys. Lett.* **9**, 821
- Donath M., Schönhense G., Ertl K., Dose V.,
(1990), *Appl. Phys. A* **50**, 49
- Dose V.,
(1977), *Appl. Phys.* **14**, 117
- Dose V., Altmann W., Goldmann A., Kolac U., Rogozik J.,
(1984), *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1919
- Dose V., Glöbl M.,
(1985), in: *Polarized Electrons in Surface Physics*,
Feder R., Ed.,
Advanced Series in Surface Science,
(World Scientific, Singapore)
- Dose V., Fauster Th., Schneider R.,
(1986), *Appl. Phys. A* **40**, 203
- Dotz Th., Tillmann D., Rochow R., Kisker E.,
(1988), *Europhys. Lett.* **6**, 375
- Drube R., Noffke J., Schneider R., Rogozik J., Dose V.,
(1990), zur Veröffentlichung eingereicht

- Eckardt H., Fritsche L.,
(1987), *J. Phys. F* **17**, 925
- Eberhardt W., Plummer E. W.,
(1980), *Phys. Rev. B* **21**, 3245
- Eberhardt W., Plummer E. W., Horn K., Erskine J.,
(1980), *Phys. Rev. Lett.* **45**, 273
- Echenique P. M., Pendry J. B.,
(1978), *J. Phys. C* **11**, 2065
- Eib W., Alvarado S. F.,
(1976), *Phys. Rev. Lett.* **37**, 444
- Ertl G., Küppers J.,
(1985), *Low Energy Electrons and Surface Chemistry*, 2nd Ed.,
(VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim)
- Fauster Th., Schneider R., Dürr H.,
(1989), *Phys. Rev. B* **40**, 7981
- Feder R., Alvarado S. F., Tamura E., Kisker E.,
(1983), *Surf. Sci.* **127**, 83
- Feder R., Rodriguez A.,
(1984), *Solid State Commun.* **50**, 1033
- Fischer N., Schuppler S., Fauster Th., Steinmann W.,
(1990), *Phys. Rev. B* **42** (im Druck)
- Forstmann F.,
(1970), *Z. Phys.* **235**, 69
- Garrett R. F., Smith N. V.,
(1986), *Phys. Rev. B* **33**, 3740
- Giesen K., Hage F., Himpsel F. J., Riess H. J., Steinmann W.,
(1985), *Phys. Rev. Lett.* **55**, 300
- Goldmann A., Donath M., Altmann W., Dose V.,
(1985a), *Phys. Rev. B* **32**, 837
- Goldmann A., Dose V., Borstel G.,
(1985b), *Phys. Rev. B* **32**, 1971
- Gradmann U., Bergholz R., Bergter E.,
(1984), *IEEE Trans. Magn.* **MAG-20**, 1840
- Heimann P., Himpsel F. J., Eastman D. E.,
(1981), *Solid State Commun.* **39**, 219

- Hellmiß G.,
(1970), *Wissenschaftl. Ber. AEG-TELEFUNKEN* **43**, 77
- Himpsel F. J., Knapp J. A., Eastman D. E.,
(1979), *Phys. Rev. B* **19**, 2919
- Himpsel F. J.,
(1983), *Adv. Phys.* **32**, 1
- Hubert A.,
(1965), Dissertation, Universität München
- Hubert A.,
(1990), *Magnetic Domains*,
(Springer, Berlin) wird veröffentlicht
- Kämper K.-P.,
(1989), Dissertation, Technische Hochschule Aachen
- Kessler J.,
(1985), *Polarized Electrons*,
(Springer, Berlin)
- Kisker E., Kirby R. E., Garwin E. L., King F. K., Tamura E., Feder R.,
(1985), *J. Appl. Phys.* **57**, 3021
- Kittel C.,
(1946), *Phys. Rev.* **70**, 965
- Kittel C.,
(1949), *Rev. Mod. Phys.* **21**, 541
- Klebanoff L. E., Jones R. K., Pierce D. T., Celotta R. J.,
(1987), *Phys. Rev. B* **36**, 7849
- Kneller E.,
(1962), *Ferromagnetismus*,
(Springer, Berlin)
- Kolac U., Donath M., Ertl K., Liebl H., Dose V.,
(1988), *Rev. Sci. Instrum.* **59**, 1933
- Komolov S. A., Chadderton L. T.,
(1979), *Surf. Sci.* **90**, 359
- Krakauer H., Freeman A. J., Wimmer E.,
(1983), *Phys. Rev. B* **28**, 610
- Kranz J., Hubert A.,
(1963), *Z. angew. Phys.* **15**, 220
- Krause D., Frey H.,
(1969), *Z. Physik* **224**, 257

- Landolt M., Campagna M.,
(1977), Phys. Rev. Lett. **38**, 663
- Liebermann L., Clinton J., Edwards D. M., Mathon J.,
(1970), Phys. Rev. Lett. **25**, 232
- Martin D. H.,
(1957), Proc. Phys. Soc. B **70**, 77
- McRae E. G.,
(1979), Rev. Mod. Phys. **51**, 541
- Moruzzi V., Janak J. F., Williams A. R.,
(1978), *Calculated Electronic Properties of Metals*,
(Pergamon, New York)
- Musket R. G., McLean W., Colmenares C. A., Makowiecki D. M., Siekhaus W. J.,
(1982), Appl. Surf. Sci. **10**, 143
- Noffke J.,
(1990), Persönliche Mitteilung
- Nolting W., Borgiel W., Dose V., Fauster Th.,
(1989), Phys. Rev. B **40**, 5015
- Nolting W.,
(1986), *Quantentheorie des Magnetismus 1, 2*,
(Teubner, Stuttgart)
- Oepen H. P., Kirschner J.,
(1989), Phys. Rev. Lett. **62**, 819
- Peach M., Koehler J. S.,
(1950), Phys. Rev. **80**, 436
- Pendry J. B., Gurman S. J.,
(1975), Surf. Sci. **49**, 87
- Pierce D. T., Siegmann H. C.,
(1974), Phys. Rev. B **9**, 4035
- Pierce D. T., Meier F.,
(1976), Phys. Rev. B **13**, 5484
- Plummer E. W., Eberhardt W.,
(1979), Phys. Rev. B **20**, 1444
- Plummer E. W., Eberhardt W.,
(1982), Adv. Chem. Phys. **49**, 533

- Rau C.,
(1980), *Comments Solid State Phys.* **9**, 177
- Rave W.,
(1990), Dissertation, Universität Erlangen
- Röntgen W. C.,
(1895), *Sitz. Ber. Med. Phys. Ges. Würzburg*, 137
- Schäfer I., Schlüter M., Skibowski M.,
(1987), *Phys. Rev. B* **35**, 7663
- Schauer A.,
(1963), *Z. Angew. Phys.* **16**, 90
- Scheinfein M. R., Pierce D. T., Unguris J., McClelland J. J., Celotta R. J., Kelley M. H.,
(1989), *Rev. Sci. Instrum.* **60**, 1
- Scheinfein M. R., Unguris J., Celotta R. J., Pierce D. T.,
(1989), *Phys. Rev. Lett.* **63**, 668
- Schmidt F., Rave W., Hubert A.,
(1985), *IEEE Trans. Magn.* **MAG-21**, 1596
- Schneider R.,
(1989), IPP-Report 9/75, Garching,
Dissertation (1989), Universität Würzburg
- Schoenlein R. W., Fujimoto J. G., Eesley G. L., Capehart T. W.,
(1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2596
- Schuppler S., Fischer N., Fauster Th., Steinmann W.,
(1990), *Appl. Phys. A* **51**, 322
- Schwink Ch., Grüter O.,
(1967), *phys. stat. sol.* **19**, 217
- Schwink Ch., Schärpf O.,
(1968), *phys. stat. sol.* **30**, 637
- Siegmann H. C., Bagus P. S.,
(1988), *Phys. Rev. B* **38**, 10434
- Siegmann H. C., Pierce D. T., Celotta R. J.,
(1981), *Phys. Rev. Lett.* **46**, 452
- Smith N. V., Mattheiss L. F.,
(1974), *Phys. Rev. B* **9**, 1341
- Spreen H.,
(1967), *phys. stat. sol.* **24**, 413

- Steinmann W.,
(1989), Appl. Phys. A **49**, 365
- Straub D., Himpsel F. J.,
(1984), Phys. Rev. Lett. **52**, 1922
- Tamura E., Feder R., Krewer J., Kirby R. E., Kisker E., Garwin E. L., King F. K.,
(1985), Solid State Commun. **55**, 543
- Tersoff J., Falicov L. M.,
(1982), Phys. Rev. B **26**, 6186
- Thörner G., Borstel G.,
(1985), Surf. Sci. Lett. **157**, 379
- Tillmann D., Thiel R., Kisker E.,
(1989), Z. Phys. B **77**, 1
- Unguris J., Seiler A., Celotta R. J., Pierce D. T., Johnson P. D., Smith N. V.,
(1982), Phys. Rev. Lett. **49**, 1047
- Voigt J.,
(1990), Dissertation, Universität Konstanz
- Voigt W.,
(1920), in: *Handbuch der Elektrizität und des Magnetismus*, **Bd.IV**, 667,
(Leipzig)
- Wandelt K.,
(1987), in: *Thin Metal Films and Gas Chemisorption*,
Wissmann P., Ed.,
(Elsevier, Amsterdam)
- Wang C. S., Callaway J.,
(1977), Phys. Rev. B **15**, 298
- Williams H. J., Bozorth R. M., Shockley W.,
(1949), Phys. Rev. **75**, 155
- Williams H. J., Walker J. G.,
(1951), Phys. Rev. **83**, 634
- Wimmer E., Freeman A. J., Krakauer H.,
(1984), Phys. Rev. B **30**, 3113

Danksagungen

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. V. Dose bedanken, der mir die Möglichkeit gab, diese Arbeit in seiner Arbeitsgruppe am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik (IPP) in Garching durchzuführen, sowie für sein stetes Interesse am Fortgang der Arbeit.

Herrn Dr. K. Ertl danke ich herzlich für die tatkräftige Unterstützung an der Apparatur und die gute Zusammenarbeit.

Herrn Dr. M. Donath danke ich herzlich für die Einführung in die spinaufgelöste Inverse Photoemission und für viele klärende Diskussionen.

Herrn Prof. Dr. A. Hubert danke ich für die Möglichkeit, die Domänenstruktur unserer Probe mithilfe seines Kerr-Mikroskops zu ergründen und für viele Erläuterungen zur Domänentheorie.

Herrn Prof. Dr. Th. Fauster und Dr. R. Schneider sei an dieser Stelle für die vielen Auskünfte über Bandstrukturen sowie den Herrn Dr. K. Desinger, Dr. R. Drube und Dipl. Phys. N. Memmel für die Hilfen bei so manchen Hardware- und Softwarefragen gedankt.

Herrn G. Nagleder danke ich herzlich für die stets sorgfältige und zuverlässige Ausführung vieler mechanischer Arbeiten.

Herrn Dr. E. Bertel danke ich für das sorgfältige Korrekturlesen des Manuskripts.

Bei Frau Luise Hirschinger bedanke ich mich für die schnellen und guten zeichnerischen Hilfen.

Allen "Würzburgern" und Mitgliedern der Abteilung Oberflächenphysik am IPP danke ich für die freundschaftliche Aufnahme in ihre Gruppe und die stete Hilfsbereitschaft, mit der sie zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Den Beschäftigten der Institutswerkstätten sei für die immer schnelle Ausführung der Arbeiten gedankt.

Schließlich bedanke ich mich bei meiner Frau.