



Vielkanal-Spinpolarimeter für energie- und winkeldispersive Photoemissionsmessungen

Dissertation
zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
am Fachbereich 08: Physik, Mathematik und Informatik
der Johannes Gutenberg-Universität
in Mainz

von
Michaela Kolbe
geb. Hahn, in Mainz

Mainz, den 9. September 2011

erster Berichterstatter:
zweiter Berichterstatter:
dritter Berichterstatter:

Tag der mündlichen Prüfung: 17. Januar 2012

D77 Mainzer Dissertation

Kurzfassung

Spinpolarisationsmessungen an freien Elektronen sind seit ihrer ersten Verwirklichung durch Mott anspruchsvoll geblieben. Die relevante Größe eines Spinpolarimeters ist seine Gütefunktion, $FoM = S^2 I/I_0$, mit der Asymmetriefunktion S und dem Verhältnis aus Streu- und Primärintensität I/I_0 . Alle bisherigen Geräte basieren auf einer einkanaligen Streuung (Spin-Bahn- oder Austauschwechselwirkung), die durch $FoM \simeq 10^{-4}$ charakterisiert ist. Moderne Halbkugelanalysatoren ermöglichen hingegen eine effiziente Vielkanaldetektion der *spinintegralen* Intensität mit mehr als 10^4 simultan erfassten Datenpunkten. Im Vergleich zwischen spinaufgelöster und spinintegraler Elektronenspektroskopie findet man somit einen Effizienzunterschied von 8 Größenordnungen.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung und Untersuchung eines neuartigen Verfahrens zur Effizienzsteigerung in der spinaufgelösten Elektronenspektroskopie unter Ausnutzung von Vielkanaldetektion. Der Spindetektor wurde in eine μ -metallgeschirmte UHV-Kammer integriert und hinter einem konventionellen Halbkugelanalysator angebracht. Durch elektronenoptische Simulationen wurde die Geometrie des elektrostatischen Linsensystems festgelegt. Das Grundkonzept basiert auf der \mathbf{k}_{\parallel} -erhaltenden elastischen Streuung des (0,0)-Spekularstrahls an einem W(100)-Streukristall unter einem Einfallswinkel von 45° . Es konnte gezeigt werden, dass etwa 960 Datenpunkte (15 Energie- und 64 Winkelpunkte) in einem Energiebereich von $\simeq 3$ eV simultan auf einen Delayline-Detektor abgebildet werden können. Dies führt zu einer zweidimensionalen Gütefunktion von $FoM_{2D} = 1,7$. Verglichen mit konventionellen Spindetektoren ist der neuartige Ansatz somit durch einen Effizienzgewinn von 4 Größenordnungen gekennzeichnet.

Durch Messungen einer Fe/MgO(100) und O p(1x1)/Fe(100)-Probe konnte die Funktionstüchtigkeit des neuen Spinpolarimeters nachgewiesen werden, indem die aus der Literatur bekannten typischen UPS-Ergebnisse mit stark verkürzter Messzeit reproduziert wurden. Durch die hohe Effizienz ist es möglich, besonders reaktive Oberflächen in kurzer Zeit zu vermessen. Dieser Vorteil wurde bereits für eine erste grundlagenorientierte Anwendung genutzt: Als Test für die Gültigkeit von Bandstrukturrechnungen für die Heusler-Verbindung Co_2MnGa , wobei eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment gefunden wurde.

Mit dem Vielkanal-Spinfilter wurde die Grundlage zu einem um Größenordnungen verbesserten Messverfahren der Elektronenspin-Polarisation geschaffen und damit der Zugang zu Experimenten eröffnet, die mit den bisherigen einkanaligen Detektoren nicht möglich sind.

Abstract

Spin polarization measurements of free electrons remain challenging since their first realization by Mott. The relevant quantity of a spin polarimeter is its figure of merit, $FoM = S^2 I/I_0$, with the asymmetry function S and the ratio between scattered and primary intensity I/I_0 . State-of-the-art devices are based on single-channel scattering (spin-orbit or exchange interaction) which is characterized by $FoM \simeq 10^{-4}$. On the other hand, modern hemispherical analyzers feature an efficient multichannel detection of *spin-integral* intensity with more than 10^4 data points simultaneously. In comparison between spin-resolved and spin-integral electron spectroscopy we are thus faced with a difference in counting efficiency by 8 orders of magnitude.

The present work concentrates on the development and investigation of a novel technique for increasing the efficiency in spin-resolved electron spectroscopy by multichannel detection. The spin detector was integrated in a μ -metal shielded UHV-chamber and mounted behind a conventional hemispherical analyzer. The electrostatic lens system's geometry was determined by electronoptical simulations. The basic concept is the \mathbf{k}_{\parallel} -conserving elastic scattering of the (0,0)-beam on a W(100) scattering crystal under 45° impact angle. It could be demonstrated that app. 960 data points (15 energy and 64 angular points) could be displayed simultaneously on a delayline detector in an energy interval of $\simeq 3$ eV. This leads to a two-dimensional figure of merit of $FoM_{2D} = 1.7$. Compared to conventional spin detectors, the new type is thus characterized by a gain in efficiency of 4 orders of magnitude.

The operational reliability of the new spin polarimeter could be proven by measurements with a Fe/MgO(100) and O p(1x1)/Fe(100)-sample, where results from the literature were reproduced with strongly decreased measuring time. Due to the high intensity it becomes possible, to investigate strongly reactive samples in a short time. This advantage was already implemented for an application in the viewpoint of fundamental research: as test for the validity of bandstructure calculations for the Heusler compound Co_2MnGa , where a good agreement between experiment and theory could be demonstrated.

With the multichannel spin filter, a basis to a measurement procedure for electron spin polarization enhanced by orders of magnitude was established. This paves the way to experiments that are not possible with state-of-the-art single channel detectors.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Vorbetrachtungen	5
2.1	Grundlagen der Photoemission	5
2.1.1	Dreistufenmodell	6
2.1.2	Einstufenmodell	10
2.1.3	Freie-Elektronen Endzustand	11
2.1.4	Bandstrukturrechnungen und Lebensdauerereffekte	11
2.1.5	Nachweistiefe	17
2.2	Spinpolarisation in der Photoemission	19
2.2.1	Spinpolarisation	19
2.2.2	Spin-Bahn-Wechselwirkung	20
2.2.3	Gütefunktion	27
3	Experimenteller Aufbau	29
3.1	Das UPS Experiment	29
3.1.1	Probenhalter	29
3.1.2	VUV-Quelle	32
3.1.3	Verdampfer	33
3.1.4	Halbkugelanalysator	34
3.1.5	Vakuumsystem	41
3.2	Das Vielkanal-Spinpolarimeter	42
3.2.1	Simulation der Elektronentrajektorien	42
3.2.2	Design	47
3.2.3	Streukristall	50
3.2.4	Delayline Detektor	53
4	Messverfahren	57
4.1	Einkanaliger Intensitätsscan	57
4.2	Vielkanal-Spinsnapshot	59
4.3	Grenzen der Auflösung	67

5	Messungen an Eisen	71
5.1	Eisen(110)-Filme auf Molybdän(110)	71
5.1.1	Das Substrat Molybdän(110)	71
5.1.2	Eisen(110) auf Molybdän(110)	75
5.2	Eisen(100)-Filme auf Magnesiumoxid(100)	80
5.2.1	Eisen(100) auf Magnesiumoxid(100)	80
5.2.2	Sauerstoff p(1x1) auf einem Eisen(100)-Film	87
6	Messungen an Heuslerverbindungen	91
6.1	Probenpräparation und Transfer	93
6.2	Co ₂ MnGa auf MgO(100)	94
6.3	Co ₂ FeAl _{0,3} Si _{0,7} auf MgO(100)	99
6.4	Diskussion	103
7	Zusammenfassung und Ausblick	105
	Literaturverzeichnis	109
	Abbildungsverzeichnis	117

1 Einleitung

Die erste Formulierung des Elektronenspins erfolgte bereits 1925 durch Uhlenbeck und Goudsmit [Uhl25], die eine Spinquantelung zur Erklärung der Feinstrukturaufspaltung in Energiespektren von ionisiertem Helium verwendeten. Mithilfe der von Schrödinger und Heisenberg neu entdeckten Quantenmechanik gelang Pauli 1927 die erste vollständige (nichtrelativistische) Formulierung der Spintheorie mit Paulimatrizen und zweikomponentigen Wellenfunktionen [Pau27]. 1928 konnte sie mithilfe der Diracgleichung [Dir28] relativistisch erweitert werden. Historisch ist das erste Experiment, das das Vorhandensein eines Elektronenspins anschaulich zeigte, der Stern-Gerlach Versuch von 1922 [Ger22], bei dem Silberatome in einem inhomogenen äußeren Magnetfeld in Abhängigkeit ihres Gesamtdrehimpulses abgelenkt werden und ein charakteristisches Muster auf einem Schirm hinter der Magnetfeldanordnung zeigen. Die theoretische Erklärung dieses Phänomens allerdings gelang erst 1927.

In modernen Anwendungen wie beispielsweise im Bereich der Spintronik, in der spinabhängige elektronische Transportprozesse eine Rolle spielen, ist die Kenntnis von spin aufgelösten Bandstrukturen dünner Schichten von großem Interesse. Um die Bandstruktur eines Festkörpers zu vermessen, werden meist Spektroskopieexperimente an photoemittierten *freien* Elektronen durchgeführt. Dabei ist es durch die Heisenberg'sche Unschärferelation nicht möglich, Elektronen unterschiedlicher Spins in einem Stern-Gerlach-Experiment voneinander zu trennen [Kes85]. Vielmehr werden zur Messung des Spin-Freiheitsgrades spinsensitive Wechselwirkungen der Elektronen mit Materie, wie beispielsweise die elastische Elektronenstreuung an Materialien mit hohem Z , ausgenutzt. Eine Vielzahl konkurrierender inelastischer Prozesse führt jedoch zu einem Verlustfaktor der gestreuten Intensität von typischerweise 10^3 . Zusammen mit der unvollständigen Polarisationsempfindlichkeit dieser Detektoren ergibt sich eine Gütefunktion von typisch 10^{-4} . Das heißt, unter dem Aspekt gleicher Zählstatistik benötigt ein spin aufgelöstes Spektrum eine um 4 Größenordnungen höhere Akquisitionszeit, als ein spinintegrales Spektrum. Dies erschwert den Nachweis entscheidend. Diese Situation hat sich seit der Einführung der spinpolarisierten niederenergetischen Elektronenstreuung (SPLEED, 'spinpolarized low energy electron scattering') als Ultrahochvakuumkompatible Methode für Spinpolarimetrie 1979 [Kir79] bis zum heutigen Tag kaum verändert. Wenige Typen von Spindetektoren kommen derzeit in Festkörperphysiklabors auf der ganzen Welt zum Einsatz, allen voran der Mott- [Hei78b], Mini-Mott- [Ghi99] und der SPLEED-Detektor [Yu07].

In nur wenigen Fällen konnte eine Effizienzsteigerung des Streuprozesses gezeigt wer-

den. Hier ist vor allem die Streuung an sauberen [Hil02] oder sauerstoffpassivierten Eisenschichten [Win08, Ber99] erwähnenswert. Die Präparation guter Schichten allerdings stellt eine große Herausforderung an den Experimentator dar, sodass diese Methode nur in Labors einiger weniger Spezialisten weltweit zum Einsatz kommt.

Allen herkömmlichen Spindetektoren gemein ist das einkanalige Detektionsprinzip, bei dem nur ein Datenpunkt pro Messintervall aufgenommen wird.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung und Untersuchung eines neuartigen Verfahrens zur Effizienzsteigerung in der spinabhängigen Elektronenspektroskopie unter Ausnutzung von Vielkanaldetektion. In einem modernen Elektronenspektrometer werden durch Photoemission Elektronen aus oberflächennahen Schichten einer Probe herausgelöst und durch ein winkelabbildendes Linsensystem einem hemisphärischen Energieanalysator zugeführt. Dieser stellt in seinem Austrittsfenster eine große Zahl an Datenpunkten bereit, die mit einem ortsauflösenden Detektor nachgewiesen werden. Dabei wird die Energie- und Winkelcoordinate eines auftretenden Elektrons bestimmt und es werden bis zu 10^4 Datenpunkte simultan erfasst. Vergleicht man also ein state-of-the-art spinaufgelöstes Photoemissionsexperiment (einkanalig) mit einem state-of-the-art spinintegralen Experiment (vielkanalig), so findet man einen Unterschied von *8 Größenordnungen* in der Messeffizienz. Dieser Unterschied ist prohibitiv für eine Vielzahl von interessanten Experimenten. Das in dieser Arbeit erstmals untersuchte, neuartige Detektorkonzept ermöglicht es, simultan eine Vielzahl von Datenpunkten der Spinanalyse zu unterwerfen. Die Güte der spinaufgelösten Messung eines einzelnen Datenpunktes mit dem neuen Spinfilter entspricht der eines guten einkanaligen Detektors. Es konnte aber gezeigt werden, dass etwa 960 Datenpunkten gleichzeitig aufgenommen werden können, was dem Detektor zu einer außergewöhnlichen Effizienz, ausgedrückt durch eine neu eingeführte 'zweidimensionale' Gütefunktion verhilft. Diese übersteigt die Effizienz konventioneller einkanaliger Detektoren um vier Größenordnungen.

Die Basis des Detektionsprinzips ist eine vom konventionellen Design abweichende Streuanordnung. Die spinabhängige, impulserhaltende elastische Streuung des Spekularstrahls unter 45° garantiert eine Erhaltung der Bildinformation, die durch den Streuwinkel kodiert ist. Elektronen, die aus einem Punkt in der Austrittsebene des Energieanalysators stammen, treffen in der berechneten Streugeometrie parallel auf dem Streukristall auf. Durch die Winkelerhaltung bei dem Beugungsprozess ist es möglich, ein spingefiltertes Bild der Austrittsebene des Energieanalysators auf einen ortsauflösenden Elektronendetektor (Delayline Detektor) zu transferieren.

Dieselbe Streugeometrie und der Vielkanalnachweis kann nicht nur für Spektroskopieanwendungen genutzt werden. Sie wurde parallel erfolgreich in einem Impuls-Mikroskop am Max Planck-Institut für Mikrostrukturphysik (Halle) implementiert. Dort ist es mithilfe der neuen Technik möglich, ein spin- und energiegefiltertes, ortsauflöstes Bild einer Probe mit ebenfalls besonders großer Effizienz darzustellen [Tus11]. Mit der Gruppe in Halle entstand eine erfolgreiche Kooperation. Das zweidimensionale Detek-

tionsprinzip eröffnet eine Vielzahl weiterer Möglichkeiten für neue Experimente, die im letzten Kapitel beschrieben werden.

Während der experimentellen Arbeit wurde das Elektronenspektrometer zunächst ohne Spinfilter mit einem integral arbeitenden Channeltron in Betrieb genommen. Die Elektronenoptik für den Spinfilter wurde entworfen und die UHV-Kammer für die Elektronenstreuung konstruiert und montiert. Nach der Adaption des Delayline-Detektors wurden die Linsenspannungen systematisch optimiert, mit dem Ziel, eine möglichst gute Abbildung der Austrittsebene des Halbkugelanalysators auf dem Delayline-Detektor zu erhalten. Es wurden systematische Untersuchungen zum Funktionsnachweis und zur Bestimmung der Gütefunktion des Vielkanal-Spinfilters durchgeführt. Mit dem funktionsstüchtigen Spindetektor wurden im zweiten Teil der Arbeit Proben aus einem Gebiet der aktuellen Forschung zu elektronischen Festkörpereigenschaften (Heuslerverbindungen) untersucht. Ferner wurde der Einfluss von Sauerstoff auf die spinaufgelöste Bandstruktur von Fe(100) im Oberflächenbereich untersucht.

In der vorliegenden Niederschrift werden zunächst die theoretischen Modelle der Photoemission und Spinfilterung durch Spin-Bahn-Wechselwirkung erläutert (Kapitel 2). Im dritten Kapitel wird die Entwicklung und der Aufbau des Spindetektors vorgestellt. Hier werden einige Simulationsrechnungen für Elektronentrajektorien gezeigt und es wird auf das Design des Spinfilters inklusive Streukristall mit Heizung eingegangen. Die Charakterisierung des Spinfilters und das Verfahren zur Datenakquisition und Auswertung sind in dem darauffolgenden Kapitel gezeigt. Winkel- und Energieauflösung und die Eigenschaften der energieabhängigen Asymmetriefunktion werden diskutiert. In zwei Ergebniskapiteln werden die Messungen an einem Testsystem (Eisen) und an den Heuslerproben zusammengefasst. Für einige Heuslerproben wurde durch theoretische Modelle eine 100%-ige Spinpolarisation an der Fermikante vorhergesagt, was sie zu attraktiven Kandidaten für Spintronikanwendungen macht. Experimentell konnte keine vollständige Spinpolarisation nachgewiesen werden, allerdings wurde an einer Heusler-Verbindung ein außergewöhnlich großer Wert der Spinpolarisation an der Fermikante gemessen. Eine gute qualitative Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen für eine moderat spinpolarisierte Heuslerprobe wurde gefunden. Im letzten Kapitel werden die Ergebnisse zusammengefasst und in einem Ausblick werden verschiedene zukünftige Anwendungsmöglichkeiten des Spinfilters aufgezeigt.

2 Theoretische Vorbetrachtungen

In dem vorgestellten Experiment werden Photoemissionsspektren unter Anregung der Probe durch ultraviolettes Licht gemessen. Dabei kommt dem Nachweis der Spinpolarisation eine besondere Rolle zu. Um die Ursprünge der charakteristischen Merkmale in den Spektren verstehen zu können, soll zunächst die dem Experiment zugrunde liegende Theorie erläutert werden.

2.1 Grundlagen der Photoemission

Energieniveaus, die von den Elektronen eines Festkörpers besetzt werden können, werden in einer sogenannten Bandstruktur, der Dispersion $E(\mathbf{k})$, dargestellt. Hierbei ist E die Energie der Elektronen und \mathbf{k} ihr Wellenvektor. Die Bänder sind bis zu einer bestimmten Energie, der Fermienergie, besetzt. Bänder, die energetisch darüber liegen sind bei $T = 0$ K unbesetzt. Mithilfe von Photoelektronenspektroskopie (PES) können die besetzten Bänder eines Festkörpers gemittelt über den Wellenvektor \mathbf{k} vermessen werden, mit winkelaufgelöster PES (ARPES) kann die energetische Lage der Bänder in Abhängigkeit des Wellenvektors ermittelt werden, wie in Abb. 2.1 gezeigt ist.

Um Informationen über die Bandstruktur zu erlangen, wird bei der PES eine Probe mit Photonen der Energie $\hbar\omega$ bestrahlt, wobei ω die Frequenz des Lichtes ist. Durch Absorption der Photonen können die Elektronen der besetzten Bänder in unbesetzte Zustände der Energie $E_f = E_i + \hbar\omega$ angehoben werden. E_i ist die Energie des Anfangszustandes. Liegt der Endzustand oberhalb der Vakuumenergie E_v , können sie den Festkörper verlassen und werden unter dem Polarwinkel Θ und dem Azimutalwinkel φ emittiert. Sie haben dann die kinetische Energie $E_{kin} = E_i + \hbar\omega - \Phi$ [Ein05], wobei Φ die Austrittsarbeit (typischerweise im Bereich weniger eV) ist. Um die Elektronen zu spektroskopieren, werden sie einem energiedispersiven Element (zum Beispiel einem hemisphärischen Energieanalysator) zugeführt. Die Aufnahme der Intensität der Elektronen in Abhängigkeit ihrer kinetischen Energie ergibt ein charakteristisches Energiespektrum, wie in Abb. 2.2 schematisch gezeigt ist. Sichtbar ist jeweils eine Fermikante bei der Endzustandsenergie $E_f = \hbar\omega$, bzw. der kinetischen Energie $E_{kin} = \hbar\omega - \Phi$, gefolgt von Intensitätsmaxima, die von Valenzelektronen stammen, und ein sogenannter 'Sekundärelektronenberg' zu kleinen Energien hin, der bei $E_{kin} = 0$ eV abrupt durch das Vakuumniveau abgeschnitten ist. Sein Ursprung ist in Kap. 2.1.1 erläutert.

Je nach Energie der Photonen werden drei Bereiche unterschieden: UPS (ultraviolet photoelectron spectroscopy, 1-100 eV), XPS (x-ray photoelectron spectroscopy, 100-

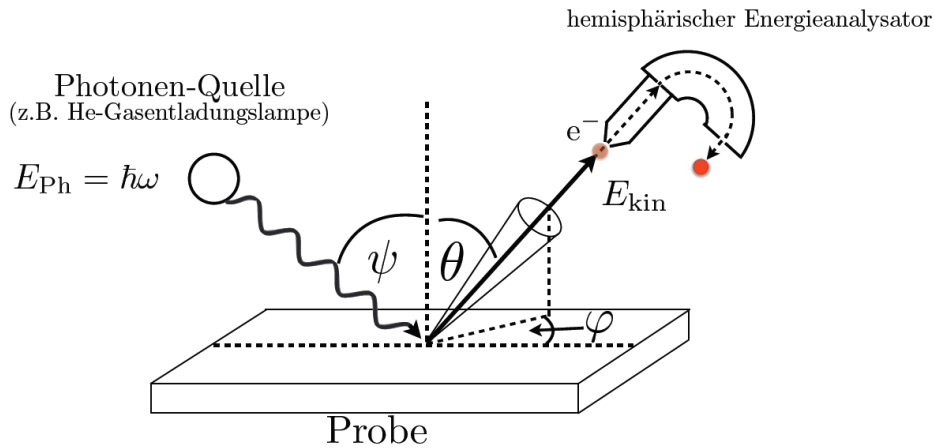


Abbildung 2.1: Schema zur Photoemission. Durch die Bestrahlung einer Probe mit Photonen der Energie $\hbar\omega$ verlassen Photoelektronen die Probe unter dem Polarwinkel Θ und dem Azimutalwinkel φ . Sie können mit einem hemisphärischen Analysator spektroskopiert werden, (entnommen aus [Gro10]).

5000 eV) und HAXPES (hard x-ray photoelectron spectroscopy, 5-15 keV). Während im UPS- und XPS-Bereich mit Laborlichtquellen gearbeitet werden kann, muss für eine HAXPES-Messung Synchrotronstrahlung eingesetzt werden.

Die Anregung der Photoelektronen aus einer metallischen Probe kann in der Eielektronen-Näherung mithilfe zweier unterschiedlicher Modelle beschrieben werden. Das anschauliche Dreistufenmodell von Berglund und Spicer [Ber64] liefert meist gute Ergebnisse, ist jedoch rein phänomenologisch. Das Einstufenmodell nach Adawi [Ada64], Mahan [Mah70] und Schaich und Ashcroft [Sch71] beschreibt den Anregungs- und Emissionsprozess korrekter. Auf beide Modelle soll im Folgenden kurz eingegangen werden.

2.1.1 Dreistufenmodell

Beim Dreistufenmodell wird der Photoemissionsprozess in drei Stufen, der Anregung, Propagation und Emission, unterteilt.

Anregung Im Rahmen des Dreistufenmodells wird die Anregung eines Elektrons als Interbandübergang zwischen zwei Blochzuständen beschrieben. Dadurch, dass der Photonenimpulsübertrag k_γ im verwendeten Energiebereich ($E \simeq 20$ eV) gegenüber dem Elektronenimpuls k_e ($k_\gamma = 0,01 \text{ \AA}^{-1} \ll k_e \simeq 2 \text{ \AA}^{-1}$) vernachlässigt werden kann, ist die Anregung ein vertikaler Übergang in der Bandstruktur, was gleichbedeutend ist mit

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}. \quad (2.1)$$

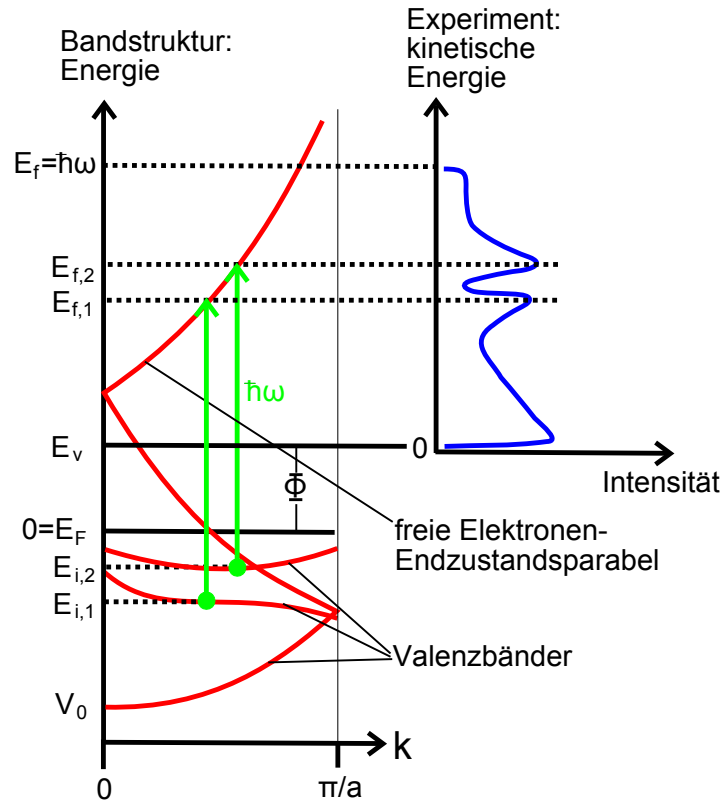


Abbildung 2.2: Zusammenhang zwischen einer angenommenen Bandstruktur (links) und dem gemessenen UPS-Spektrum (rechts). Elektronen aus den Anfangszuständen $E_{i,1(2)}$ unterhalb E_F (Fermienergie) werden um $\hbar\omega$ (Photonenenergie) angehoben. Wenn der Endzustand $E_{f,1(2)}$ oberhalb des Vakuumniveaus E_v liegt, werden sie emittiert und stellen im gemessenen Spektrum ein Maximum dar. Bei der Energie $E_{kin} = \hbar\omega - \Phi$ ist die Fermikante, bei $E_{kin} = 0$ eV die Abschneidekante und über der Abschneidekante der Sekundärelektronenanstieg im Spektrum erkennbar. Die Endzustände in der Bandstruktur sind als freie Elektronenparabeln genähert. Die Energiedifferenz zwischen der Vakuumenergie E_v und der Fermienergie E_F wird als Austrittsarbeit Φ bezeichnet. V_0 ist das innere Potential.

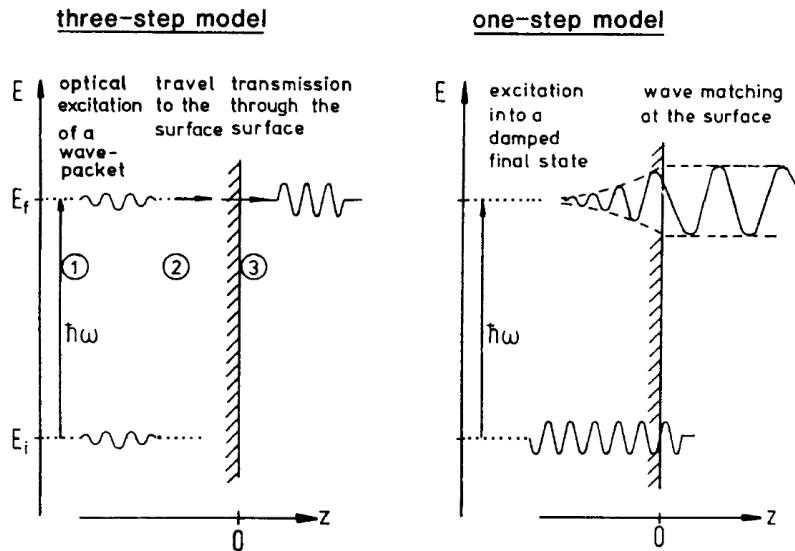


Abbildung 2.3: Gegenüberstellung des Drei- und Einstufenmodells nach [Hü03].

\mathbf{k}_i und \mathbf{k}_f sind die Anfangs- und Endzustandswellenvektoren und \mathbf{G} ein reziproker Gittervektor. Neben der Impulserhaltung gilt die Energieerhaltung:

$$E_f(\mathbf{k}_f) = E_i(\mathbf{k}_i) + \hbar\omega. \quad (2.2)$$

Propagation Nachdem das Elektron in einen unbesetzten Zustand angehoben wurde, durchquert es den Festkörper bis an die Oberfläche. Dabei kann es statistisch zu inelastischen Streuprozessen kommen. Der dominante Prozess ist hierbei die Elektron-Elektron Wechselwirkung. Die gestreuten, emittierten Elektronen geringer Energie stellen die bereits angesprochenen Sekundärelektronen dar.

Emission Die aus dem Festkörper austretenden Elektronen müssen einen Wellenvektor senkrecht zur Oberfläche (k_{\perp}) haben, der groß genug ist um die Oberflächen-Potenzialbarriere zu überwinden: $\frac{\hbar^2}{2m}k_{\perp}^2 \geq V_0 + \Phi$ (V_0 ist das innere Potential). Die anderen Elektronen werden zurück in den Festkörper reflektiert. Die Transmission der Elektronen durch die Oberfläche ist k_{\parallel} -erhaltend. Der Wert für k_{\parallel} ist gegeben durch:

$$k_{\parallel} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{kin} \sin\Theta}. \quad (2.3)$$

Da die Symmetrie bei dem Übertritt vom Festkörper in das Vakuum gebrochen ist, ist k_{\perp} keine gute Quantenzahl mehr. Dadurch ist es schwierig, diese Größe zu bestimmen. Dieses Problem kann durch die Annahme eines freien-Elektronen-Endzustandes umgangen werden (siehe Kap. 2.1.3), was jedoch nur zu genäherten Lösungen führt.

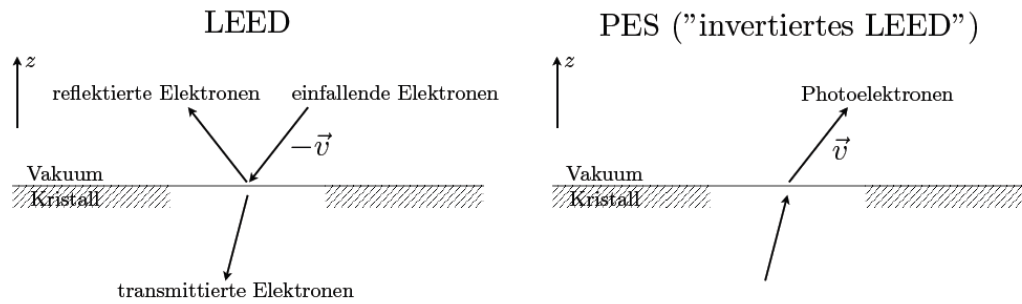


Abbildung 2.4: Der invertierte LEED-Zustand (entnommen aus [Gro10]).

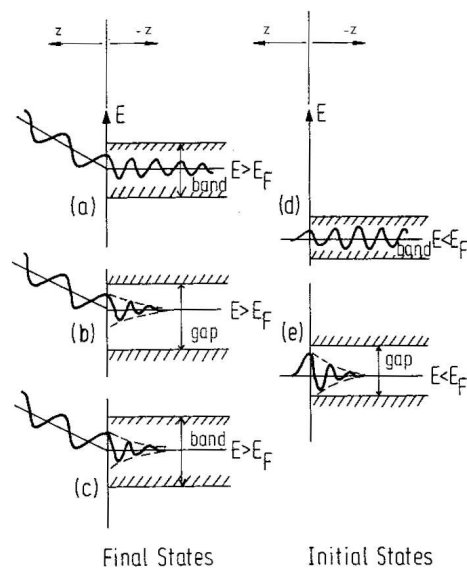


Abbildung 2.5: Anfangs- (rechts) und Endzustände (links) des Einstufenmodells. Für die Endzustände ist die Propagation einer Blochwelle innerhalb eines Bandes mit schwacher Dämpfung und anschließender Emission (a), oder ein stark gedämpfter Zustand in einer Lücke (Oberflächenzustand) (b) oder in einem Band (kurze freie Weglänge) (c) mit anschließender Emission möglich. Für die Anfangszustände ist eine propagierende Blochwelle in einem Band (unterhalb der Fermienergie) (d) oder ein Oberflächenzustand in einer Bandlücke (e) denkbar (entnommen aus [Hü03]).

2.1.2 Einstufenmodell

Obwohl meist direkte Interbandübergänge das UPS-Spektrum dominieren und das Dreistufenmodell deshalb eine gute Beschreibung des Anregungs-/Emissionsprozesses liefert, gibt es dennoch Charakteristika, die im Rahmen dieses Modells nicht erklärbar sind. Vor allem das Auftreten einer Fermikante in einem UPS-Spektrum wäre im Rahmen des phänomenologischen Modells nur dann möglich, wenn sich ein Anfangszustand genau an der Fermikante befindet und ein direkter Übergang in einen Endzustand möglich ist. Da die Fermikante allerdings in jedem Spektrum sichtbar ist, kann dies nicht die richtige Erklärung sein (da es nicht für jedes Material Zustände an der Fermikante gibt). Mit Hilfe des Einstufenmodells kann eine bessere Erklärung gefunden werden. Hierbei werden die drei Schritte des Dreistufenmodells zu einem Schritt zusammengefasst. Dieser Schritt beinhaltet die Anregung in einen gedämpften Endzustand mit Wellenanpassung an eine frei propagierende Welle an der Grenzfläche zwischen Kristall und Vakuum. Eine Gegenüberstellung der beiden Modelle ist in Abb. 2.3 zu sehen. Die Beschreibung der Anregung im Einstufenmodell basiert auf dem wohlbekannten LEED-Formalismus (LEED = low energy electron diffraction). Dieser berücksichtigt die kurze freie Weglänge der Elektronen im Festkörper. Bei der Photoemission entfällt der reflektierte Elektronenstrahl und um die Emission der Elektronen beschreiben zu können, wird der restliche LEED-Formalismus zeitinvertiert, siehe Abb. 2.4.

Die Anfangs- und Endzustände können in diesem Modell als Kombination aus propagierenden und evaneszenten (gedämpften) Wellen beschrieben werden:

$$\Psi_i^L \propto e^{(ik_{i,\parallel} \cdot \rho)} \sum_n C_n e^{(ik_{\perp,n} z)} v_n(r, k_{i,\parallel}, E_i) \quad (2.4)$$

$$\Psi_f^L \propto e^{(ik_{f,\parallel} \cdot \rho)} \sum_m t_m e^{(ik_{\perp,m} z)} u_m(r, k_{f,\parallel}, E_f) \quad (2.5)$$

mit $k_{\perp,m(n)} = k_{\perp,m(n)}^{(1)} + ik_{\perp,m(n)}^{(2)}$, wobei der Imaginärteil die Dämpfung beschreibt. \mathbf{z} ist die Ortskoordinate senkrecht zur Oberfläche und $\rho = \mathbf{e}_x x + \mathbf{e}_y y$ ist ein Vektor in der Oberfläche der Probe. In Abb. 2.5 sind die möglichen Anfangs- (rechts) und Endzustände (links) des Einstufenmodells gezeigt. Für die Endzustände ist die Propagation einer Blochwelle innerhalb eines Bandes mit schwacher Dämpfung und anschließender Emission (a), oder ein stark gedämpfter Zustand in einer Lücke (Oberflächenzustand) (b) oder in einem Band (kurze freie Weglänge) (c) mit anschließender Emission möglich. Für die Anfangszustände ist eine propagierende Blochwelle in einem Band (unterhalb der Fermienergie) (d) oder ein Oberflächenzustand in einer Bandlücke (e) denkbar. Die Sichtbarkeit der Fermikante in den Spektren wird durch Übergänge unter Beteiligung evaneszenter Zustände motiviert.

2.1.3 Freie-Elektronen Endzustand

Wie bereits angesprochen ist es ohne weitere Annahmen nicht möglich, die senkrechte Komponente des Wellenvektors $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp}$ zu bestimmen. Um \mathbf{k}_{\perp} dennoch ermitteln zu können, kann der Endzustand als freie Elektronenparabel genähert werden. Hierbei gilt, je höher die kinetische Energie des Elektrons ist, umso besser ist die Näherung, da der Einfluß des Kristallpotentials mit steigender Energie des Elektrons schwächer wird [Hü03]. Die Dispersion des Endzustandes ist dann $E_f = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - |V_0|$, wobei $|V_0|$ das innere Potential ist (nach [Hü03]). Die effektive Masse m^* wird meist mit der Elektronenmasse gleichgesetzt.

Für die Auswertung der experimentellen Daten in Kap. 5 wird V_0 durch die Anpassung der Endzustandsparabel an eine gerechnete Bänderdispersion gefunden. Für Eisen und Molybdän ergeben sich Werte von $V_{0,Fe,maj(min)} = 8,4$ eV (8,2 eV) und $V_{0,Mo} = 6,6$ eV. Aus dem gemessenen Energiespektrum kann die Energie der Intensitätsmaxima, relativ zur Fermienergie, abgelesen werden. Die spektralen Strukturen werden als direkte Übergänge zwischen dem Anfangsband und der freie-Elektronen Endzustandsparabel behandelt. Wenn die Energiedifferenz zwischen dem freie-Elektronen Endzustand und dem Intensitätsmaximum gerade die Photonenenergie 21,23 eV beträgt, ist der richtige k-Vektor festgelegt, siehe Abb. 2.2.

Die senkrechte und parallele Komponente des Wellenvektors im 'free-electron final state'-Modell sind [Chi80, Gew83, Dam04]:

$$k_{\perp} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e(E_{kin} \cos^2 \Theta - V_0)} \quad (2.6)$$

und

$$k_{\parallel} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e E_{kin} \sin \Theta}. \quad (2.7)$$

Die in diesen Gleichungen auftretenden Größen kinetische Energie E_{kin} , Austrittswinkel Θ und Austrittsarbeit Φ sind experimentell zugänglich.

2.1.4 Bandstrukturrechnungen und Lebensdauerereffekte

Um die Bandstruktur eines Festkörpers zu berechnen, muss die Schrödingergleichung (oder Diracgleichung) für ein Vielteilchenproblem (Teilchen in einer Gitterstruktur) gelöst werden. Das Vielteilchenproblem wird dabei meist durch das Einführen eines sogenannten Molekularfeldes vereinfacht. In der Molekularfeldnäherung wechselwirkt ein einzelnes Teilchen mit einem mittleren Potential, das durch die restlichen Teilchen erzeugt wird. Das Vielteilchenproblem wird dadurch auf ein Einteilchenproblem zurückgeführt. Zur Bestimmung des Molekularfeldes ist dann allerdings eine iterative Berechnung notwendig. Generell gibt es zwei verschiedene Ansätze für das Molekularfeld: in der DFT ('density functional theory') wird das Molekularfeld als stationär, in der DMFT ('dynamical mean field theory') als dynamisch, also zeitabhängig betrachtet.

DFT Die Beschreibung der DFT ist zu großen Teilen aus [Cap06] und [Blu02] entnommen.

Die DFT basiert auf der Feststellung von Hohenberg und Kohn [Hoh64], dass die Grundzustandsenergie eines N -Teilchensystems als ein Funktional, das allein von der Teilchendichte $\rho(\mathbf{r})$ abhängig ist, geschrieben werden kann. Das N -Teilchenproblem wird dann zu einem effektiven Einteilchenproblem. Das Energiefunktional kann nach [Koh65] in Einzelbeiträge zerlegt werden:

$$E[\rho] = T[\rho] + U[\rho] + V[\rho], \quad (2.8)$$

wobei T die kinetische Energie eines N -Teilchensystems, V die Elektron-Ionen Wechselwirkungsenergie und U die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist. Die kinetische Energie kann nach [Cap06] in zwei Teile aufgeteilt werden:

$$T[\rho] = T_s[\rho] + T_c[\rho], \quad (2.9)$$

wobei T_s die kinetische Energie nichtwechselwirkender Teilchen und T_c ein wegen der Korrelation notwendiger Korrekturterm ist. Ebenso kann die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in drei Termen geschrieben werden:

$$U[\rho] = U_H[\rho] + U_c[\rho] + U_x[\rho]. \quad (2.10)$$

Der Hartree-Term

$$U_H = \frac{q}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.11)$$

beschreibt die elektrostatische Wechselwirkung einer Ladungsverteilungsverteilung $\rho(\mathbf{r})$ [Cap06], U_x den Austausch und U_c gibt die restliche Korrelation (Coulombabstoßung) an. Das Energiefunktional kann nun umgeschrieben werden:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + U_H[\rho] + V[\rho] + E_{xc}[\rho]. \quad (2.12)$$

E_{xc} enthält nun die Differenz $U - U_H$ und $T - T_s$ und wird als Austausch-Korrelations-Energie bezeichnet.

Um die Grundzustands-Elektronendichte zu bestimmen, wird die Energie variiert:

$$0 = \frac{\partial E[\rho]}{\partial \rho(\mathbf{r})} = \frac{\partial T_s[\rho]}{\partial \rho(\mathbf{r})} + v_H(\mathbf{r}) + v(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\partial T_s[\rho]}{\partial \rho(\mathbf{r})} + v_s(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Die Funktionalabhängigkeit des vierten Terms v_{xc} wird normalerweise mit LDA ('local density approximation', das heißt jedes Teilchen bewegt sich unkorreliert in einer zeitlich gemittelten räumlichen Dichte der anderen Teilchen) genähert und aus einer Parametrisierung der Lösungen des vereinfachten Jellium-Modells [Bar72, Gun76] entnommen [Blu02]. Der Term $v_s(\mathbf{r})$ ist ein effektives Potential, sodass formell eine wechselwirkungsfreie Schrödingergleichung entsteht. Die Grundzustandseigenschaften können

numerisch durch eine selbstkonsistente Lösung der Kohn-Sham Gleichungen gefunden werden:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_s(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Die Einteilchenwellenfunktionen ϕ_i werden als Kohn-Sham Orbitale bezeichnet und sind direkt mit der Dichte verknüpft [Blu02]:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (2.15)$$

Bei der iterativen Berechnung von v_H und v_{xc} sind die elektronischen Wechselwirkungen enthalten. Obwohl die Eigenwerte der Kohn-Sham Gleichungen im Rahmen der theoretischen Behandlung keine unmittelbare Bedeutung für das ursprüngliche Vielteilchenproblem haben, können sie doch bei geringer Korrelation mit den Energieniveaus des Elektronensystems gleichgesetzt werden. Dies ist die Grundannahme bei der Berechnung einer Bandstruktur mit DFT-LDA (DFT-LDA = 'density functional theory' unter 'local density approximation'). Je nachdem, welche Basisfunktionen für ϕ_i angenommen werden, erhält das Modell seinen Namen. Es ist möglich, energieunabhängige Basisfunktionen zu wählen: zum Beispiel LCAO ('linear combination of atomic orbitals') oder OPW ('orthogonalized plane waves'), oder energieabhängige Basisfunktionen: APW ('augmented plane wave') oder KKR ('Korringa-Kohn-Rostocker'). In der Festkörperphysik werden häufig linearisierte energieabhängige Basisfunktionen verwendet: LMTO ('linear muffin tin orbitals') oder LAPW ('linear augmented plane waves'). Da die LDA Lösungen aus dem 'Jellium'-Modell übernimmt, wird lediglich die Wechselwirkung von delokalisierten Teilchen untereinander beschrieben. (Das Jellium-Modell ist das einfachste Modell wechselwirkender Teilchen, in dem die Atomrümpfe als einheitlicher positiver Hintergrund beschrieben werden. Die Valenzelektronen können sich innerhalb dieser gleichförmigen positiven Ladung frei bewegen und erfahren lediglich die Coulomb-Wechselwirkung untereinander.) Für Systeme mit starker lokaler Korrelation liefert die LDA keine guten Lösungen. Um eine starke lokale Korrelation mit einzubeziehen, kann ein LDA+U-Ansatz gemacht werden. Hier werden explizit lokale Wechselwirkungen zwischen den Elektronen in korrelierten Orbitalen (also Wechselwirkungen von Teilchen auf demselben Gitterplatz) durch die Wechselwirkungsparameter 'U' und 'J' hinzugefügt [Ani91]:

$$E_{LDA+U} = E_{LDA} + \frac{1}{2} \sum_{m,m',\sigma} U(n_{im\sigma} - n^0)(n_{im'\sigma} - n^0) + \frac{1}{2} \sum_{m,m',\sigma,m \neq m'} (U - J)(n_{im\sigma} - n^0)(n_{im'\sigma} - n^0), \quad (2.16)$$

wobei n^0 die mittlere Besetzungszahl (bei d-Orbitalen: $n^0 = n_d/10$), $n_{im\sigma}$ spin- und orbitalabhängige Besetzungen der lokalen Orbitale, i der Gitterplatz, σ die Spinquantenzahl

tenzahl und m die Orbitalzahl ist. Der zweite Term beschreibt eine Erhöhung der Coulombenergie, falls die Besetzungszahl der Orbitale bei antiparalleler Spinausrichtung von der durchschnittlichen Besetzungszahl abweicht. Der Hubbard-Parameter U ist in diesem Modell ein freier Parameter und liegt meist in der Größenordnung $\simeq 10$ eV. Der dritte Term gibt dieselbe Energiekorrektur wie der zweite, allerdings für parallele Spins wieder. Aufgrund der Hund'schen Regel wird dadurch die Energie abgesenkt, weshalb der Hund'sche Austauschparameter J mit negativem Vorzeichen erscheint. Er liegt meist in der Größenordnung $\simeq 1$ eV [Ani91].

Mit LDA+U ist es zwar möglich, zum Beispiel antiferromagnetische Ordnung darzustellen, nicht-statische Elektronenwechselwirkungen (zum Beispiel das 'Hüpfen' der Elektronen zwischen den Gitterplätzen) können allerdings noch immer nicht beschrieben werden.

LDA+DMFT Die Beschreibung der DMFT ist zu großen Teilen aus [Kot04] und [Blu02] entnommen.

Um eine starke dynamische Korrelation der Elektronen zu berücksichtigen, wird die LDA+DMFT-Methode ('dynamical mean field theory') angewendet. Bei LDA+DMFT wird das Vielteilchen-Gitterproblem als effektives 'Störstellenproblem' behandelt. Es wird ein Teilchen in dynamischer Wechselwirkung mit seinen Nachbarn betrachtet. Durch den Übergang in unendlich viele Dimensionen wird diese Näherung exakt. Die dynamische Korrelation der Teilchen (Hüpfen der Teilchen zwischen dem Störstellen-Gitterplatz und den benachbarten Plätzen) wird durch die Hybridisierung v_v beschrieben. Das sogenannte 'Elektronenbad' (die Gesamtheit der Nachbarpartikel) hat die Energie ϵ_v^{bad} . Die Hybridisierungsfunktion

$$\Delta(\omega) = \sum_v \frac{|v_v|^2}{\hbar\omega - \epsilon_v^{bad}} \quad (2.17)$$

beschreibt das dynamische Molekularfeld (dynamisch wegen der Frequenzabhängigkeit). Sie wird über eine Selbstkonsistenzgleichung bestimmt:

$$G[\Delta(\omega)] = \sum_k \{\hbar\omega - \Sigma[\Delta(\omega)] - t_k\}^{-1}. \quad (2.18)$$

Der Selbstenergieterm $\Sigma[\Delta(\omega)]$ hat hierbei die Bedeutung eines frequenzabhängigen Potentials und t_k ist die Fouriertransformierte der 'Hüpf-Matrix-Elemente' [Kot04]. In Analogie zur DFT kann die Energie als Funktional der Ladungsdichte ρ und der Greenfunktion G dargestellt werden:

$$E[\rho(\mathbf{r}), G] = T[\rho(\mathbf{r}), G] + V[\rho(\mathbf{r})] + U_H[\rho(\mathbf{r})] + E_{xc}[\rho(\mathbf{r}), G]. \quad (2.19)$$

Die Form ist dieselbe wie in der DFT, mit dem Unterschied, dass die kinetische Energie und die Austauschenergie Funktionale der Ladungsdichte und der Greenfunktion sind [Kot04].

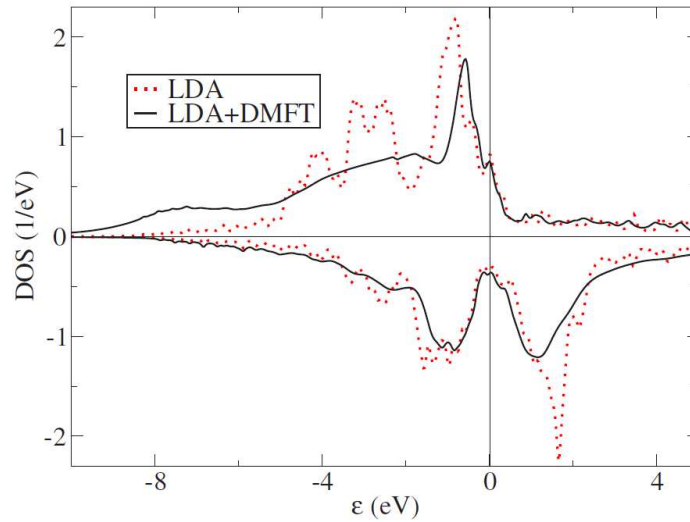


Abbildung 2.6: Vergleich einer LDA- und LDA+DMFT-Rechnung für Fe(001) (entnommen aus [Gre07]). Durch das Einbeziehen von DMFT ändert sich die Zustandsdichte (DOS) beträchtlich. Intensitätsmaxima jenseits der Fermienergie ($E = 0$ eV) sind stark verschmiert und verschoben.

Ziel der LDA+DMFT ist es, die tatsächliche Selbstenergie iterativ über einen Green-funktionsansatz zu bestimmen und somit eine Lösung des Vielteilchenproblems mit starker dynamischer Korrelation zu finden.

Die einzige Näherung der DMFT besteht darin, dass die Selbstenergie Σ als impuls-unabhängig angesehen wird. Diese Näherung ist exakt für unendlich viele Dimensionen. Durch die Voraussetzung der dynamischen Wechselwirkung zwischen Molekularfeld und Störstelle besteht die Selbstenergie aus einem Real- und einem Imaginärteil, wobei der Realteil die Verschiebung des Energiespektrums durch Korrelation der Teilchen und der Imaginärteil die Verbreiterung der Zustände aufgrund von Lebensdauereffekten beschreibt. Für Energien, bei denen der Imaginärteil ungleich null ist, haben die Teilchen eine endliche Lebensdauer. Dies führt nach der Heisenbergschen Unschärferelation zu einer Verbreiterung des Zustands. Dieser Effekt ist an der Oberfläche des Festkörpers sogar noch verstärkt. Da es weniger Nachbaratome gibt, sind die Zustände stärker lokalisiert [Tan10]. Für typische Lebensdauern von Elektronen in Zuständen nah der Fermienergie (zum Beispiel etwa 1 fs für Eisen bei der Bindungsenergie $E_B = -1$ eV [Kno00]) ist also der Zustand schon im eV-Bereich verbreitert. Die Lebensdauern werden im Allgemeinen mit zunehmender Bindungsenergie kleiner [Aes98]. Dementsprechend ist der Imaginärteil der Selbstenergie bei der Fermienergie gleich null und nimmt negative Werte zu großen und kleinen Bindungsenergien an [Gre07].

Im Vergleich einer LDA+DMFT- und einer reinen (DFT-)LDA-Zustandsdichte-Rechnung (Abb. 2.6) fällt direkt auf, dass LDA relativ scharfe Maxima in der Zustandsdichte (DOS = 'density of states') erzeugt, während die LDA+DMFT-Rechnung nur

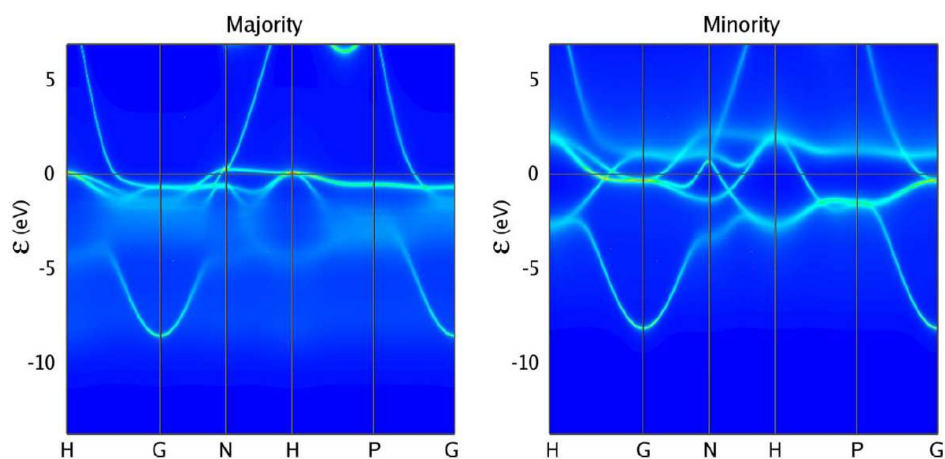


Abbildung 2.7: Spektrale Dichte von bcc Eisen entlang hochsymmetrischer Richtungen der Brillouinzone. Berechnet durch LDA+DMFT mit korrelierten Muffin-Tin Orbitalen (entnommen aus [Gre07]).

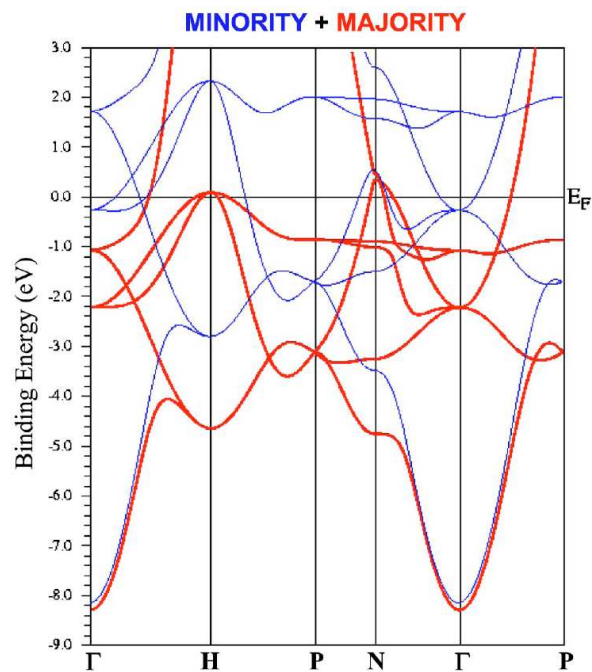


Abbildung 2.8: DFT-GGA Bandstruktur für Majoritäts (rot) und Minoritäts-Elektronen (blau) (entnommen aus [Sch05]).

wenige ausgeprägte Strukturen aufweist. Die Strukturen der LDA+DMFT-Rechnung werden mit zunehmender Bindungsenergie immer flacher. Im Bereich der Fermienergie hingegen stimmen beide Rechnungen überein. Im Vergleich mit Photoemissionsmessungen an korrelierten Systemen, wie zum Beispiel Eisen in Kap. 5, wird deutlich, dass die LDA+DMFT-Rechnungen die experimentellen Ergebnisse wesentlich besser beschreiben als die stark strukturierten DOS-Spektren aus den LDA-Rechnungen. Da die LDA+DMFT eine rechenzeitaufwendige Methode ist, gibt es bislang nicht viel Literatur zum Vergleich mit den experimentellen Spektren.

In den Abb. 2.7 und 2.8 sind Eisen-Bandstrukturen unter Berechnung mit LDA+DMFT und DFT-GGA gezeigt. Die Verschmierung der Bänder in der LDA+DMFT-Rechnung durch Lebensdauerereffekte ist augenscheinlich. Die Zustände in der DFT-Bandstruktur hingegen erscheinen scharf. Prägnante Strukturen, wie z.B. der Ast am Γ -Punkt sind in beiden Rechnungen zu finden. In Kap. 5 werden diese Rechnungen mit den gemessenen Daten aus den Fe(110) UPS-Spektren verglichen.

Im Vergleich eines gemessenen Spektrums mit Bandstrukturerechnungen fällt auf, dass teilweise die Intensitätsverhältnisse der Peaks in der gerechneten DOS mit denen im Spektrum nicht übereinstimmen. Dies ist oft durch unterschiedliche Übergangsmatrixelemente der Fall. Bei dem Vergleich von Photoemission und gerechneter DOS sind die Matrixelemente üblicherweise nicht einbezogen. Die Wirkungsquerschnitte der Übergänge können in [Yeh85] nachgeschlagen werden.

2.1.5 Nachweistiefe

Die mittlere freie Weglänge der Elektronen, die durch Photoemission aus einem Festkörper herausgelöst werden, ist im Allgemeinen eine materialabhängige Größe. Allerdings ist es möglich, die Abhängigkeit der mittleren freien Weglänge von der Energie für viele Materialien in guter Näherung in einer gemeinsamen Kurve darzustellen. Diese populäre 'universelle Kurve' (siehe Abb. 2.9) wurde zuerst von Seah und Dench [Sea79] veröffentlicht. Im Wesentlichen sind in dieser Arbeit Ergebnisse zur mittleren freien Weglänge aus einer Vielzahl von experimentellen Arbeiten zusammengetragen. Der Zusammenhang zwischen der inelastischen mittleren freien Weglänge (λ_{IMFW}) und der Elektronenenergie ist gegeben durch:

$$\lambda_{IMFW} = \frac{A}{E^2} + BE^{1/2}, \quad (2.20)$$

wobei A und B materialspezifische Konstanten und in [Sea79] angegeben sind. Das Minimum der Kurve liegt bei einer Energie von etwa 50 eV. λ_{IMFW} beträgt hier nur etwa 3Å. Für eine kinetische Energie von 16eV (das entspricht der kinetischen Energie der Elektronen direkt an der Fermikante bei Anregung mit He I-Licht) findet man für Eisen $\lambda_{IMFW} = 7.7\text{Å}$. Bei einer Monolagendicke von $d_M = \frac{a_{Fe}}{2} = 0.1433\text{ nm}$ [Mar05] bei Eisen sind das ca. fünf Monolagen für Fe(100), siehe Abb. 2.10.

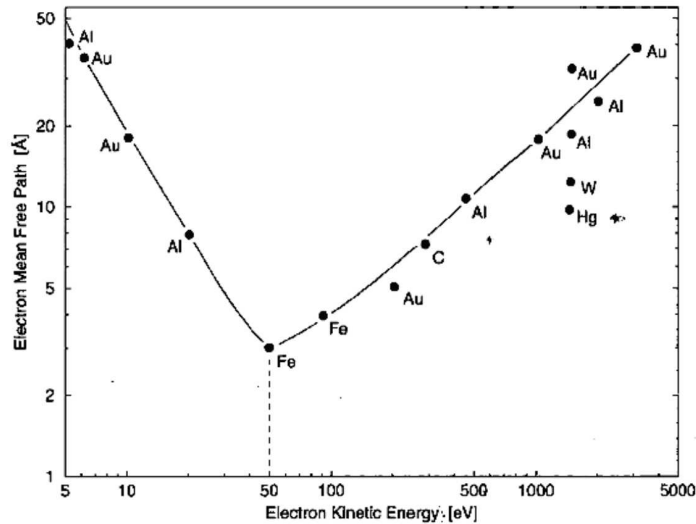


Abbildung 2.9: Inelastische mittlere freie Weglänge in Abhängigkeit der Elektronenenergie (bezogen auf die Fermienergie) nach Seah und Dench [Sea79].

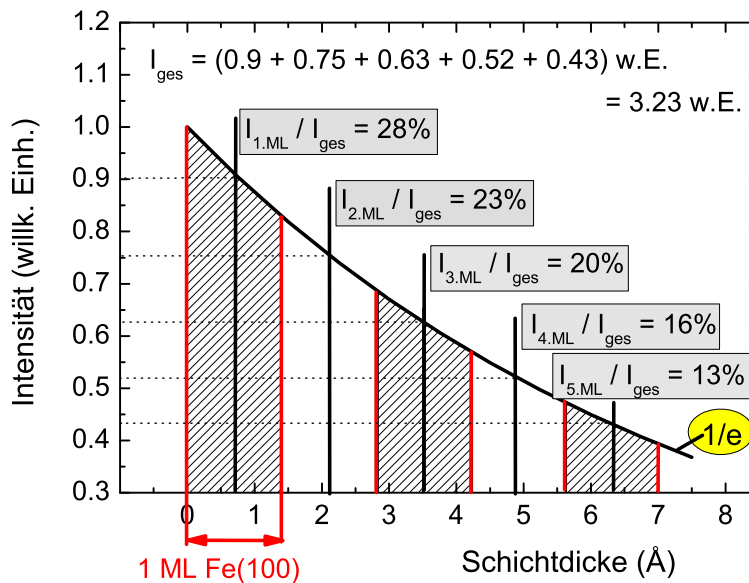


Abbildung 2.10: Beiträge der Fe(100)-Monolagen zum UPS-Spektrum unter der Annahme $\lambda_{IMFW} = 7,7 \text{ \AA}$ ist die Elektronenintensität auf $\frac{1}{e}$ abgesunken. Unter der Annahme, dass nur die ersten fünf Monolagen zum UPS-Spektrum beitragen, sind die Anteile in % der einzelnen Monolagen angegeben. Die gesamte beitragende Intensität ist die Summe der mittleren Intensitäten der einzelnen Monolagen. Die Absorption der Photonen in der Probe wurde vernachlässigt.

Die Beiträge der Elektronen aus den einzelnen Monolagen zur Gesamtintensität sind angegeben. Die mittlere freie Weglänge ist als die Wegstrecke definiert, nach der die Elektronenintensität auf $\frac{I}{e}$ gefallen ist. Das heißt, nach fünf Monolagen ist die Emissionswahrscheinlichkeit für Photoelektronen auf einen Faktor $1/e$ abgesunken. Es lässt sich festhalten, dass UPS eine sehr oberflächensensitive Nachweismethode ist, mit der vor allem Oberflächeneffekte der Probe gut untersucht werden können. Der Nachteil dieser Methode besteht allerdings darin, dass die Proben besonders sauber präpariert werden müssen. Daher ist die UPS-Photoemissionsmessung nur unter Ultrahochvakuumbedingungen durchführbar.

2.2 Spinpolarisation in der Photoemission

Durch die Photoemission von Elektronen aus einem Festkörper erhält man Zugang zu einem freien Elektron, das Information über die Bandstruktur des Festkörpers (E und k), und zusätzlich eine Spininformation trägt. Um die Information über die Bandstruktur lesen zu können, wird ein UPS-Experiment, wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben, durchgeführt. An die Information über den Spin, den das Elektron trägt, kann man nur durch spinsensitive Wechselwirkungen gelangen. In der Praxis werden vor allem Spin-Bahn- oder Austauschwechselwirkung ausgenutzt. Eine Separation von Elektronen einer bestimmten Spinausrichtung durch ein Stern-Gerlach Experiment ist für Elektronen aufgrund der Ortsunschärfe und der Lorentzablenkung im magnetischen Feld nicht möglich [Kes85]. In diesem Kapitel wird die Spin-Bahn-Wechselwirkung vorgestellt, auf der das Detektionsprinzip des entwickelten Spinfilters beruht.

2.2.1 Spinpolarisation

Die quantenmechanische Eigenschaft 'Spin' wird durch den Operator

$$\hat{S} = (S_x, S_y, S_z) \quad (2.21)$$

dargestellt, der die Vertauschungsrelationen

$$S_x S_y - S_y S_x = -i\hbar S_z \quad (2.22)$$

und zyklisch erfüllt. Mit den Pauli Spinmatrizen $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ kann der Spinoperator auch geschrieben werden als:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad \text{mit} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Die Matrizen σ_i sind unitär und selbstadjungiert.

Mit Hilfe einer zwei-komponentigen Wellenfunktion (Spinor) kann die Ausrichtung des Elektronenspins, im Bezug auf eine Quantisierungsachse, beschrieben werden. Zum

Beispiel wird ein Elektronenstrahl, der entlang der z -Achse teilweise oder vollständig polarisiert ist, charakterisiert durch den Spinor χ mit komplexen Koeffizienten a_1 und a_2 :

$$\chi = a_1 |\alpha\rangle + a_2 |\beta\rangle = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Die Basisfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ sind Eigenfunktionen der Paulimatrix σ_z mit den Eigenwerten ± 1 . Die Quadrate $|a_1|^2$ und $|a_2|^2$ geben die Wahrscheinlichkeit wieder, in einer Messung des Spins entlang der z -Achse den Wert $+\frac{\hbar}{2}$ oder $-\frac{\hbar}{2}$ zu finden.

Die Polarisation \hat{P} ist durch den Erwartungswert des Spinoperators gegeben:

$$\hat{P} = \frac{\langle \chi | \hat{\sigma} | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle}. \quad (2.25)$$

Der Grad der Spinpolarisation eines Elektronenstrahls entlang der z -Achse betragt:

$$P_z = \frac{\langle \chi | \sigma_z | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} = \frac{|a_1|^2 - |a_2|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2}. \quad (2.26)$$

2.2.2 Spin-Bahn-Wechselwirkung

Um die Spinpolarisation eines Elektronenstrahls entlang einer Quantisierungsachse zu bestimmen, kann die Spin-Bahn-Wechselwirkung in Streuprozessen an einem schweren Targetkern ausgenutzt werden. Die Polarisation der Elektronen kann dabei entlang der Richtung senkrecht zur Streuebene gemessen werden. Im Allgemeinen wird die Anzahl der ruckgetretenen Elektronen mit zwei Detektoren (je unter dem Streuwinkel Θ) gezahlt. Ist der gestreute Eingangselektronenstrahl senkrecht zur Streuebene polarisiert, so wird eine Links-Rechts-Zahlratenasymmetrie in den Detektoren gemessen. Eine anschauliche Erklarung gelingt mit Hilfe der Dirac-Gleichung. Sie beschreibt die Bewegung eines relativistischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens in einem elektromagnetischen Feld. Im nichtrelativistischen Grenzfall gilt [Kes85]:

$$(\mathcal{H} + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_\nabla + \mathcal{H}_{S.B.})\xi = E\xi. \quad (2.27)$$

Dabei ist ξ ein zwei-komponentiger Spinor. \mathcal{H} ist der Hamiltonian der nichtrelativistischen Schrodinger-Gleichung fur ein spinloses Teilchen im elektromagnetischen Feld, \mathcal{H}_B beschreibt die Wechselwirkung zwischen Spin und Magnetfeld, \mathcal{H}_∇ ist eine relativistische Korrektur und $\mathcal{H}_{S.B.}$ stellt die Spin-Bahn Wechselwirkung dar. Die ersten beiden Terme bilden zusammen die nichtrelativistische Pauli-Gleichung. Durch die Formulierung der Dirac-Gleichung kommt der Spin-Bahn-Term neu hinzu:

$$\mathcal{H}_{S.B.} = \frac{-e\hbar}{4m^2c^2} \hat{\sigma} [\mathbf{E} \times \mathbf{p}], \quad (2.28)$$

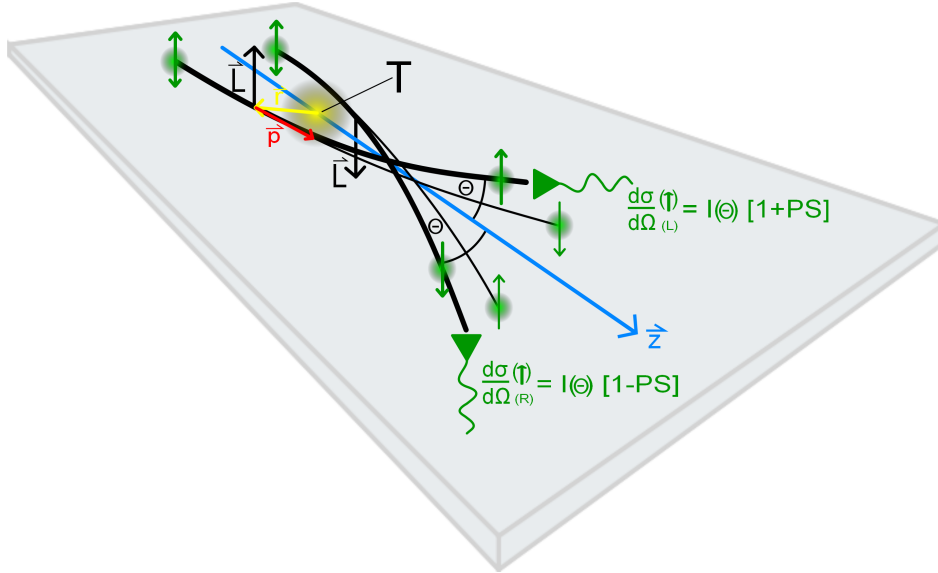


Abbildung 2.11: Skizze zur Streuung eines polarisierten Elektronenstrahls (grün) an einem Targetkern (T). Der Drehimpuls \mathbf{L} , der Abstand zwischen Elektron und Kern \mathbf{r} und der Impulsvektor \mathbf{p} sind eingezeichnet. Je nach Vorzeichen der Spinpolarisation wird das Elektron durch die Streuung abgelenkt. Die Wirkungsquerschnitte der Streuung eines Elektrons mit Spin up (\uparrow) sind für die beiden Detektorpositionen (links und rechts) angegeben.

wobei m die Elektronenmasse, c die Lichtgeschwindigkeit, \hbar das Plancksche Wirkungsquantum, e die Elementarladung und \mathbf{p} der Impuls des Elektrons ist. Für ein Zentralpotential $V = V(r)$ ist das elektrische Feld durch $\mathbf{E} = -\frac{1}{e} \frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$ gegeben. Damit lässt sich der Spin-Bahn-Term umformen zu

$$\mathcal{H}_{S.B.} = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} (\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{L}). \quad (2.29)$$

Für ein Coulombpotential $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ ergibt sich $\mathcal{H}_{S.B.} \sim \frac{Z}{r^3} (\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{L})$. Daraus ist einerseits ersichtlich, dass die Spin-Bahn-Wechselwirkung proportional zu Z ist, und es daher günstig ist, Targetkerne mit großem Z zu wählen, um den Effekt zu verstärken. Andererseits wird deutlich, dass die Wechselwirkung aufgrund des $\frac{1}{r^3}$ -Terms in direkter Nähe des Kerns am stärksten ist.

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung entspricht einem zusätzlichen Streupotential (im Vergleich zur Pauli-Gleichung), dessen Vorzeichen abhängig davon ist, in welche Richtung der Spin des Elektrons zeigt. Dies ist in Abb. 2.11 verdeutlicht. Bewegt sich das Elektron wie in der Skizze rechts an dem Target vorbei, zeigt der Bahndrehimpuls $\hat{\mathbf{L}}$ nach oben. Ein Elektron mit Spin in derselben Richtung sieht neben dem Coulombpotential ein zusätzliches attraktives Potential und wird weiter nach links abgelenkt als ohne Spin-Bahn-Kopplung zu erwarten ist. Ein Elektron mit Spin antiparallel zum Bahndre-

himpuls spürt ein repulsives Potential zusätzlich zu dem Coulombpotential und wird nicht so stark nach links abgelenkt. Bewegt sich das Elektron auf der anderen Seite an dem Target vorbei, zeigt der Bahndrehimpuls (in der Skizze) nach unten. Ein Elektron mit Spin nach oben sieht ein repulsives Potential und wird weniger weit nach rechts abgelenkt als durch die reine Coulombwechselwirkung. Ein Elektron mit Spin nach unten wird weiter nach rechts abgelenkt.

Der Wirkungsquerschnitt der Streuung von spinpolarisierten Elektronen in der Geometrie aus Abb. 2.11 ist gegeben durch [Kes85]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = I(\Theta)[1 + S(\Theta)\mathbf{P} \cdot \hat{n}], \quad (2.30)$$

wobei Θ der Streuwinkel, \mathbf{P} die Polarisation, $S(\Theta)$ die Asymmetriefunktion (Shermanfunktion genannt) und \hat{n} der Einheitsnormalenvektor senkrecht zur Streuebene ist. Unter Betrachtung des Elektrons mit Spin nach oben, ist der Wirkungsquerschnitt für die Streuung in Richtung der Detektoren rechts und links unterschiedlich:

$$\frac{d\sigma^\uparrow}{d\Omega_{(L)}} = I(\Theta)[1 + PS(\Theta)] \equiv I_L, \quad \frac{d\sigma^\uparrow}{d\Omega_{(R)}} = I(\Theta)[1 - PS(\Theta)] \equiv I_R. \quad (2.31)$$

Die gemessene Asymmetrie beträgt

$$A = \frac{I_L - I_R}{I_L + I_R} = PS(\Theta) \quad (2.32)$$

In der Shermanfunktion sind die spinabhängigen Streuamplituden enthalten (siehe [Kes85]). Sie ist energie-, material- und streuwinkelabhängig. Der Wert der Shermanfunktion liegt zwischen -1 und 1. Je größer der Absolutwert von S ist, desto effizienter ist die Messung der Spinpolarisation, wie in Kap. 2.2.3 gezeigt wird und aus Gleichung 2.31 ersichtlich ist.

In Abb. 2.12 ist die Polarisation eines an Au(110) und an Hg-Atomen gestreuten Elektronenstrahls gegenüber dem Streuwinkel 2Θ dargestellt. Dabei sind die Daten für die Streuung an Au(110) im Experiment gemessen und die Daten für die Hg-Atome gerechnet. Die Streuenergie beträgt 70 eV. Für Gold und Quecksilber ist ein breites Minimum der Polarisation beim Streuwinkel $2\Theta = 80^\circ$ erkennbar. Zwischen beiden Kurven gibt es eine relativ gute Übereinstimmung für Streuwinkel bis $2\Theta = 120^\circ$, danach sind einige Abweichungen erkennbar. Das oszillierende Verhalten der Kurve von Au(110) bei $2\Theta > 120^\circ$ ist auf Mehrfachstreuung zurückzuführen, die in der Rechnung für die Streuung von Elektronen an Hg-Atomen nicht auftreten.

Die Daten in Abb. 2.13 zeigen die Rolle von Mehrfachstreuungseffekten in der Streuung von niederenergetischen Elektronen an W(100) auf. Es ist die gestreute Intensität und die Polarisation des gestreuten Elektronenstrahls ($2\Theta = 47,51^\circ$ und $E = 100$ eV) gegenüber dem Azimutalwinkel ϕ gezeigt. Der Streuwinkel und die Streuenergie sind konstant, während der Kristall um seine Oberflächennormale gedreht wurde ('Rotationsdiagramm'). Wenn die kinematische Näherung (Einfachstreuung von niederenergetischen Elektronen an einer einkristallinen Oberfläche [Kir85]) gültig wäre, sollten

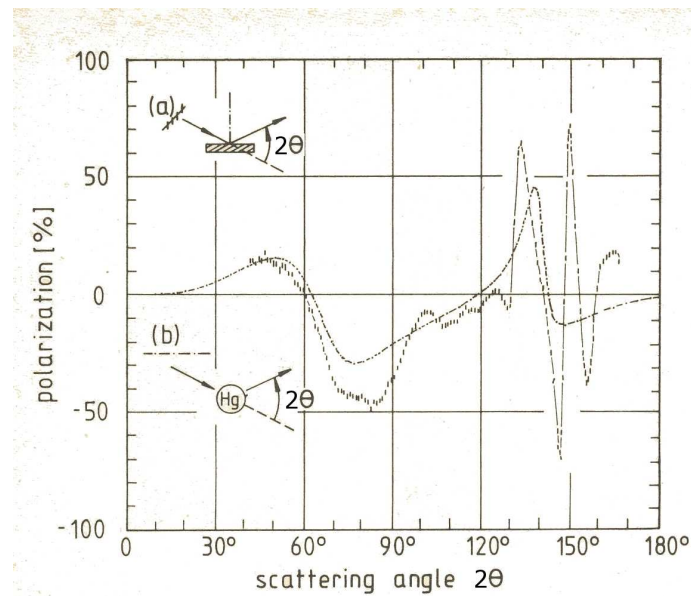


Abbildung 2.12: Vergleich der Spinpolarisationseffekte von Elektron-Atom-Streuung und niederenergetischer Elektronenbeugung (LEED). Die Streuenergie betrug 70 eV. (a) Ergebnis für den Spekularstrahl von Au(110) als Funktion des Streuwinkels 2θ (gepunktet). (b) Gerechnetes Ergebnis für Hg-Atome (gestrichelt) (entnommen aus [Kir85]).

Intensität und Polarisation konstante Werte in Abhängigkeit des Azimutalwinkels zeigen, da die kinematische Bedingung bei der Drehung unverändert bleibt. Sowohl das Experiment als auch die dynamische Theorie zeigen jedoch vier ausgeprägt Maxima der Intensität und sogar Vorzeichenwechsel in der Asymmetrie. Das Auftreten des großen Maximums bei $\phi = 45^\circ$ und das Fehlen eines Maximums bei $\phi = 0^\circ$ kann auf die vierzählige Symmetrie der W(100)-Oberfläche zurückgeführt werden [Kir85]. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass Mehrfachstreueffekte bei der Streuung eine große Rolle spielen. Die meßbare Polarisation des Elektronenstrahls variiert mit dem Azimutalwinkel ϕ und dem Streuwinkel 2θ .

Im vorliegenden Experiment werden Elektronen der kinetischen Energie 26 eV an einem W(100)-Einkristall unter einem Streuwinkel von 90° (Spekularstrahl) gestreut. Die elastische Streuung des Spekularstrahls ist winkelerhaltend. Daher ist es möglich, ein spingefiltertes Abbild der Datenpunkte des Energieanalysators auf einen ortsauflösenden Detektor zu transferieren. Der Detektor, mit dem die Zählrate der Elektronen gemessen wird, ist ein displayartiger, ortsauflösender Einzelelektronendetektor (Delay-line Detektor (DLD), siehe Kapitel 3.2.4). Aufgrund der Streugeometrie [Pat] ist nur ein Detektor im Experiment vorhanden. Für eine Asymmetriemessung wird die zu untersuchende Probe entlang der Achse senkrecht zur Streuebene aufmagnetisiert. Es werden zwei Intensitätsmessungen durchgeführt, je eine bei paralleler- (+) und bei antiparalleler (-) Ausrichtung des Polarisationsvektors im Bezug auf die Richtung senkrecht zur

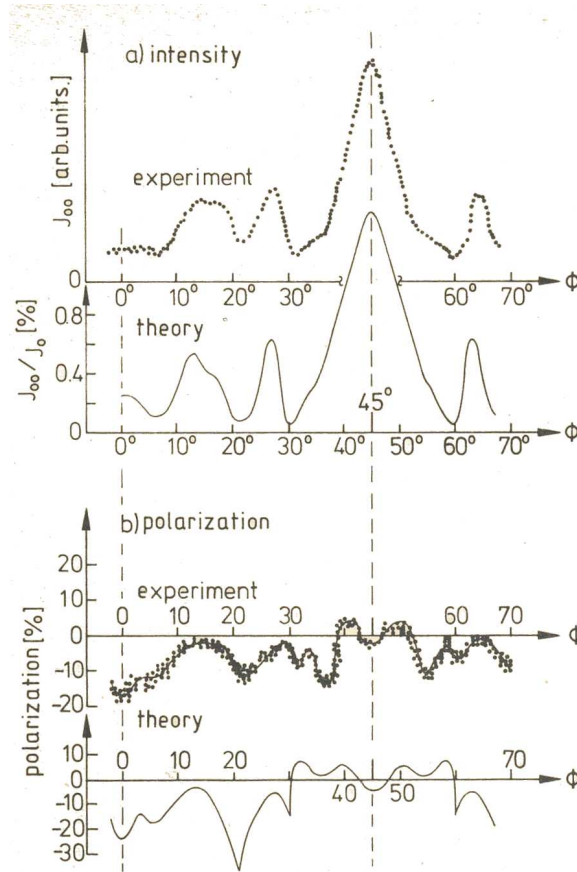


Abbildung 2.13: Rotationsdiagramme für den Spekularstrahl von W(100) ($E = 100$ eV, $2\Theta = 47,5^\circ$, $\phi = \text{variabel}$) für (a) Intensität und (b) Spinpolarisation. Die gepunkteten Kurven zeigen experimentelle, die Linien gerechnete Daten (entnommen aus [Kir85]).

Streuebene. Nach Gleichung 2.30 wird durch die resultierende Spinumkehr für einen polarisierten Elektronenstrahl eine Ungleichheit der Wirkungsquerschnitte der beiden Messungen bei gleichbleibendem Streuwinkel erwartet. Die Messasymmetrie in diesem Aufbau ist gegeben durch:

$$A = \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-} = PS(\Theta), \quad (2.33)$$

wobei $I^{+(-)}$ die gemessene Intensität für die zwei verschiedenen Magnetisierungsrichtungen ist. Sie ist wie in Gl. 2.32 gleich dem Produkt aus Shermanfunktion und Polarisation. Die Messung der Asymmetrien ist genauer in Kapitel 4.2 beschrieben.

Der Streuprozess ist in Abb. 2.14 dargestellt. Der spekulare (0,0)-Strahl unter einem Einfallswinkel von 45° wird für die Spinfilterung verwendet. Die Elektronen dringen etwa 3-4 Monolagen in den Kristall ein. Dabei verändert sich ihr \mathbf{k} -Vektor aufgrund des inneren Potentials des Kristalls, welches die Positionen der \mathbf{k} -Raum Gittervektoren entlang \mathbf{k}_\perp verschiebt. Um die Winkeltreue zu erhalten, wurden die Positionen der Gitterpunkte für den Außenraum entsprechend dem inneren Potential angepasst. Für

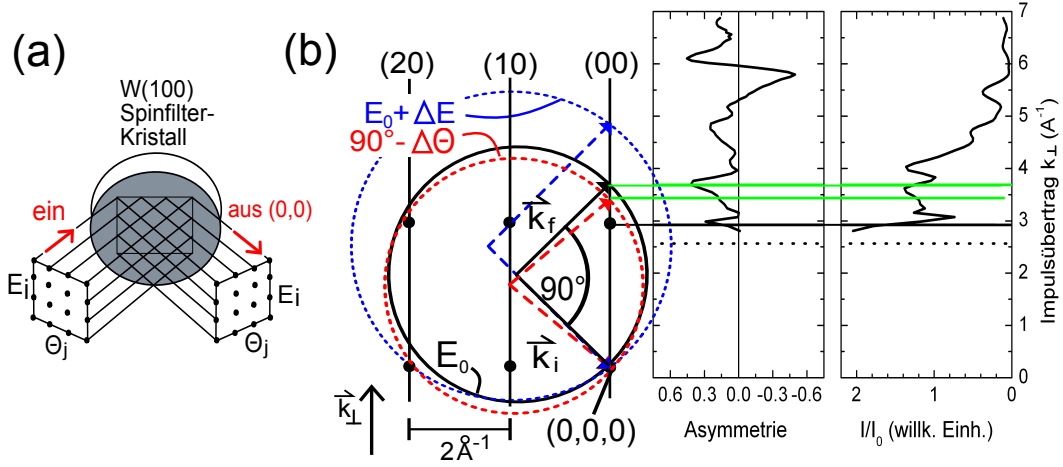


Abbildung 2.14: (a) Skizze zur Streugeometrie im Spinfilter. Elektronen der kinetischen Energie 26 eV werden an einem W(100)-Einkristall unter einem Streuwinkel von 90° (Spekularstrahl) gestreut. (b) Entsprechendes Impulschema im Außenraum unter Berücksichtigung des inneren Potentials. Reflexe von hoher Intensität ergeben sich unter Vernachlässigung von Mehrfachstreuung und Dämpfung dort, wo die Ewaldkugel (Radius $k_i = k_f$) die Gitterpunkte schneidet. Eine nahezu verdoppelte Streuenergie ist in blau, ein um 5° verringerter Einfallswinkel in rot dargestellt.

W(100) ist der Abstand der Gitterpunkte in \mathbf{k}_{\parallel} -Richtung $2\pi/a_W = 2,00\text{\AA}^{-1}$. Die Länge des \mathbf{k} -Vektors beträgt $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 2,61\text{\AA}^{-1}$ bei einer Streuenergie von $E = 26$ eV. Unter Vernachlässigung von Mehrfachstreuung und Dämpfung erscheinen Reflexe von hoher Intensität dort, wo die Ewaldkugel (Radius $k_i = k_f$) die Gitterpunkte schneidet. Die Beugungsbedingung in der kinematischen Näherung für den Wellenvektor senkrecht zur Oberfläche lautet [Hen91]:

$$\Delta k = 2k'_{\perp} = 2 \cdot \frac{2\pi}{2d} \cdot n. \quad (2.34)$$

Der Monolagenabstand für W(100) beträgt $d = 3,16\text{\AA}/2$. Die oberste Lage ist nach [Yu92] um 6% relaxiert, was einem Lagenabstand von $d = 3,16\text{\AA} \cdot 0,94/2 = 1,49\text{\AA}$ entspricht. Durch die Berücksichtigung des inneren Potentials kann eine Beziehung zwischen dem Wellenvektor im Inneren des Kristalls, k'_{\perp} , und dem außerhalb des Kristalls, k_{\perp} , gefunden werden:

$$k_{\perp} = \sqrt{k'^2_{\perp} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{2d} \cdot n\right)^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (2.35)$$

Nach [Yu92] beträgt das innere Potential für W(100) $V_0 = 9$ eV. Damit erhält man die Interferenzbedingung für das erste Maximum ($n=1$) bezüglich der Wellenvektorkomponente \mathbf{k}_{\perp} im Außenraum: $\Delta k = 2 \cdot k_{\perp,1} = 2,93 \text{\AA}^{-1}$ (durchgezogene horizontale schwarze Linie in Abb. 2.14b). Ohne inneres Potential ergibt sich: $\Delta k = 2 \cdot k_{\perp,1} = 4,22 \text{\AA}^{-1}$. Der

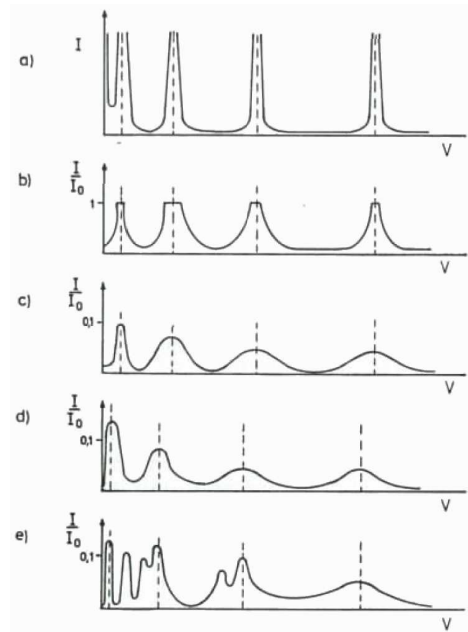


Abbildung 2.15: Intensität eines Reflexes als Funktion der Beschleunigungsspannung (entnommen aus [Hen91]). (a) Einfachstes kinematisches Modell. (b) Einfachste Berücksichtigung der Vielfach-Streuung (verbotene Zonen). (c) Berücksichtigung von Dämpfung. (d) Berücksichtigung von innerem Potential und Phasenverschiebung. (e) Berücksichtigung aller Vielfachstreuungen.

Einfluß des inneren Potentials wird mit zunehmender Ordnung des Maximums kleiner. Falls die Relaxation von 6% nicht einberechnet wird, ergibt sich: $\Delta k = 2 \cdot k_{\perp,1} = 2,56 \text{ \AA}^{-1}$ (gestrichelte horizontale schwarze Linie in Abb. 2.14b). Der k_{\perp} -Anteil des Arbeitspunktes beträgt: $2 \cdot k_{\perp} = 2 \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{h\sqrt{2}} = 3,69 \text{ \AA}^{-1}$ (obere durchgezogene grüne Linie in Abb. 2.14b).

Für eine höhere Energie ($E+\Delta E$, blau gestrichelt in Abb. 2.14b) oder einen von 90° abweichenden Streuwinkel ($90^\circ-\Delta\Theta$, rot gestrichelt) ist der Arbeitspunkt verschoben. Eine Einfallswinkeländerung um lediglich 5° bewirkt in der kinematischen Näherung bereits eine Verringerung der Asymmetriefunktion auf den halben Maximalwert, wie durch die untere grüne Linie in Abb. 2.14b angedeutet ist. In der Realität liegen während der Streuung tatsächlich von 90° abweichende Streuwinkel vor, wie in Kap. 3.2.1 gezeigt wird.

In Abb. 2.14b ist deutlich das Beugungsmaximum nach der kinematischen Näherung in der gemessenen Intensität I/I_0 zu erkennen. Das Intensitätsmaximum am Arbeitspunkt hingegen lässt sich im Rahmen der kinematischen Näherung nicht erklären. Neben den Intensitätsmaxima der kinematischen Theorie ergeben sich weitere Maxima der Intensität durch Berücksichtigung von Mehrfachstreuung, wie in Abb. 2.15 schematisch gezeigt ist. Es ist sehr wahrscheinlich, dass das Maximum in der Nähe des Arbeits-

punktes des Vielkanal-Spinpolarimeters durch Mehrfachstreuung begründet ist.

Die Wechselwirkungszeit während des Streuprozesses kann aus der Eindringtiefe berechnet werden. Sie beträgt nach [Sea79] $\lambda_{IMWF} = 4,9\text{\AA}$ für eine kinetische Energie von 26 eV. Da die Elektronen unter einem Winkel von 45° auf den Kristall treffen ist der senkrechte Anteil $\lambda_{IMWF,\perp} = 3,5\text{\AA}$. Die Elektronen haben im Inneren des Kristalls eine Geschwindigkeit von $v = \sqrt{\frac{2E_{kin}}{m}}$. Bei einer kinetischen Energie von $E_{kin} = 26 \text{ eV} + 9 \text{ eV} = 35 \text{ eV}$ beträgt die Geschwindigkeit $v = 3,5 \cdot 10^6 \text{ m/s}$. Dies entspricht bei der Eindringtiefe $\lambda_{IMWF,\perp} = 3,5\text{\AA}$ einer Wechselwirkungszeit von $\simeq 1 \cdot 10^{-16} \text{ s}$. Verglichen mit Präzessionsfrequenzen des Elektronenspins, die im GHz-Bereich liegen, ist diese Wechselwirkungszeit extrem kurz. Es kann also in guter Näherung angenommen werden, dass der Elektronenspin während der Streuung an dem W(100)-Kristall nicht präzediert.

2.2.3 Gütefunktion

Der Fehler bei der Messung der Polarisation kann in einen systematischen und einen statistischen Anteil unterteilt werden [Get98]:

$$\Delta P = \sqrt{\Delta P_{sys}^2 + \Delta P_{stat}^2} = \sqrt{\left(\frac{A}{S^2} \Delta S\right)^2 + \left(\frac{\Delta A}{S}\right)^2}. \quad (2.36)$$

Der statistische Fehler ist gegeben durch:

$$\Delta P_{stat} = \frac{\Delta A}{S}. \quad (2.37)$$

Während der Fehler der Shermanfunktion (ΔS) unbekannt ist, kann der Fehler der Asymmetrie (ΔA) nach der Gaußschen Fehlerfortpflanzung berechnet werden:

$$\begin{aligned} \Delta A &= \sqrt{\left(\frac{\partial A}{\partial I^+}\right)^2 \Delta I^{+2} + \left(\frac{\partial A}{\partial I^-}\right)^2 \Delta I^{-2}} = \\ &= \sqrt{\left(\frac{2I^+}{(I^+ + I^-)^2}\right)^2 I^+ + \left(\frac{-2I^-}{(I^+ + I^-)^2}\right)^2 I^-}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

wobei bereits $\Delta I^{+(-)} = \sqrt{I^{+(-)}}$ aus der Zählratenstatistik des Detektors eingesetzt wurde. Mit $I = I^+ + I^-$ ergibt sich:

$$\Delta A = \sqrt{\frac{4I^+I^-}{I^3}}. \quad (2.39)$$

Da $1 - P^2S^2 = \frac{4I^+I^-}{I^2}$ ist, kann der Ausdruck für ΔA weiter umgeformt werden:

$$\Delta A = \sqrt{\frac{1}{N}(1 - P^2S^2)}. \quad (2.40)$$

Für den statistischen Fehler der Polarisation findet man also

$$\Delta P_{stat} = \frac{\Delta A}{S} = \sqrt{\frac{1}{N} \left(\frac{1}{S^2} - P^2 \right)} \simeq \sqrt{\frac{1}{NS^2}}, \quad (2.41)$$

wobei der P^2 -Term vernachlässigt wurde, da $P^2 \ll \frac{1}{S^2}$ ist. Da die Gesamtzählrate N proportional zu der Intensitätsantwort $\frac{I}{I_0}$ ist, kann man schreiben

$$\Delta P_{stat} \propto \frac{1}{\sqrt{S^2 \cdot I/I_0}}. \quad (2.42)$$

wobei I_0 die Intensität des einfallenden Strahls und I die Intensität des Strahls nach der elastischen Streuung ist. Es ist also erkenntlich, dass der Ausdruck $S^2 \cdot \frac{I}{I_0}$ groß sein muß, um den statistischen Fehler zu minimieren. Er wird als Gütefunktion (Figure of Merit) bezeichnet:

$$FoM = S^2 \frac{I}{I_0}. \quad (2.43)$$

Für die Konstruktion eines Spinpolarimeters ist es stets wichtig, die Shermanfunktion und die Intensitätsantwort $\frac{I}{I_0}$ groß zu wählen, um die Messzeit zu minimieren, die benötigt wird, um innerhalb eines gegebenen Fehlerintervalls ΔP_{stat} zu bleiben.

3 Experimenteller Aufbau

3.1 Das UPS Experiment

Bei einem UPS-Experiment wird eine Probe mit niederenergetischer Strahlung ($\hbar\omega < 100$ eV) beleuchtet und die herausgelösten Photoelektronen werden spektroskopiert. Zur Spektroskopie wird typischerweise ein energiediskriminierendes Element, hier ein Halbkugelanalysator, verwendet. Im vorliegenden Experiment können Proben mit einem Eisenverdampfer beschichtet werden. Die Energie der verwendeten Anregungsquelle (Helium Gasentladungslampe) beträgt $\hbar\omega = 21,23$ eV. Ausgelöste Photoelektronen werden über eine Elektronenoptik dem Eintrittsspalt des Halbkugelanalysators zugeführt und im Kugelfeld bezüglich ihrer Energie in der dispersiven Ebene diskriminiert. In der Schemazeichnung, Abb. 3.1, ist zu erkennen, dass Elektronen unterschiedlicher kinetischer Energien verschiedene Trajektorien zwischen den zwei Halbkugeln durchlaufen. Die Austrittsblende des Analysators schneidet ein Energieintervall aus diesem Spektrum aus. Die ausgeschnittene Energie der mittleren Trajektorie wird als Durchlassenergie ('pass energy') bezeichnet und ist über die Spannung zwischen beiden Halbkugeln des Analysators festgelegt. Wird ein Zählratendetektor wie z.B. ein Channeltron hinter den Austrittsspalt positioniert, kann über ein Durchstimmen der mittleren analysierten Energie bei gleichzeitiger Messung der Zählraten ein Energiespektrum der Probe aufgenommen werden. Details zur Spektrenaufnahme sind in Kap. 4.1 zu finden. Mit einer Magnetisierungsspule ist es möglich, die Eisenschicht in der Probenebene aufzumagnetisieren, was die Voraussetzung zur spinaufgelösten Messung darstellt, siehe Kapitel 4.2. Die einzelnen Bestandteile des UPS-Experiments werden in den nächsten Abschnitten vorgestellt.

3.1.1 Probenhalter

Für das Experiment wurde ein Probenhalter aufgebaut, auf dem ein Einkristall fest montiert und in situ auf bis zu 2000 K geheizt werden kann, siehe Abb. 3.2. Der gezeigte Mo(110)-Einkristall wurde mit zwei Tantallaschen auf ein standardisiertes Probenplättchen (Molybdän) aufgepunktet. Zwei verdrehte Wolframdrähte an beiden Seiten des Probenplättchens verbinden es mit dem Probenhalterrahmen (Molybdän). Der Rahmen ist auf einem Aluminiumgestell durch 4 isolierte M2-Gewindestifte befestigt. In Abb. 3.2, rechts, sind die Gewindestifte von der Seite zu sehen. Unterhalb des Kristalls befindet sich ein Wolframfilament (Osram, 50 W) zum Heizen des Kristalls

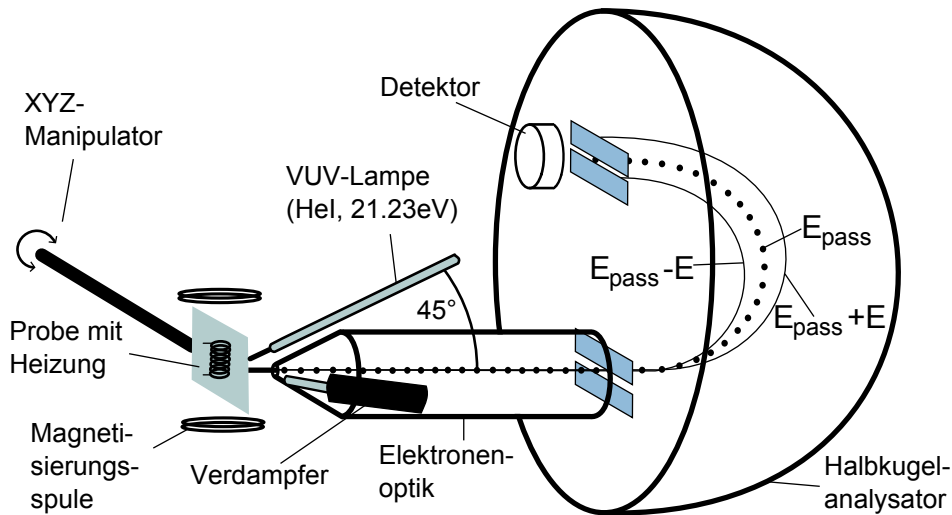


Abbildung 3.1: Schema des UPS-Experiments. Die Probe ist heizbar und kann mit dem XYZ-Manipulator bewegt werden. Sie kann durch den Verdampfer mit Eisen beschichtet werden. Die Probe wird mit Licht aus einer VUV-Quelle ($\hbar\omega = 21,23 \text{ eV}$) bestrahlt. Es entsteht ein Spektrum von Photoelektronen, die mit Hilfe einer Transferlinse dem Energieanalysator zugeführt werden. Die Elektronentrajektorien für den Probenaustrittswinkel 0° sind für 3 verschiedene Energien gezeigt. Das Elektronenspektrometer lässt nur eine bestimmte Energie (gepunktet, pass energy (E_{pass})) durch den Austrittsspalt passieren.

durch Elektronenstoß. Da die Probe mit dem Plättchen sehr heiß werden kann, wurden ausschließlich Materialien mit einem hohen Schmelzpunkt verarbeitet. Zudem zeigen die Materialien keine Remanenz, was für die Spinmessung von großer Bedeutung ist. Der Probenhalter ist auf einem XYZ-Manipulator montiert und kann zusätzlich um die lange Achse rotiert werden. Die millimetergenaue Positionierung der Probe vor der Elektronenoptik ist für eine korrekte Funktion des Halbkugelanalysators unabdingbar, wie in Kapitel 3.1.4 aufgezeigt wird.

In der Hauptkammer wurde eine schwenkbare kernlose Spule aufgebaut, die über den Probenhalter vor der Optik des Halbkugelanalysators gedreht werden kann. Sie hat 2×70 Windungen mit einem Radius von 5 cm in einem Abstand von ca. 7 cm. Durch einen Stromfluß von $I = 10 \text{ A}$ durch die Spule kann in ihrer Mitte ein Magnetfeld von 10 mT bereitgestellt werden. Dieses Feld reicht aus, um eine Eisenprobe mit einer Koerzitivfeldstärke von wenigen mT umzumagnetisieren. Dafür wird eine Spannungsquelle (Delta Electronica) über die Spule ca. 1 s kurzgeschlossen, wobei ein Strom von maximal 21 A fließt. Der Widerstand der Spule beträgt $\rho = 1,3 \Omega$. Während der Messung wurde die Spule auf das Massepotential der Vakuumkammer gelegt. Reproduzierbares Auf- und Ummagnetisieren des magnetischen Films bildet die Grundlage zu der spinaufgelösten UPS-Messung, wie in Kapitel 4.2 gezeigt wird. Da die Photoelektronen

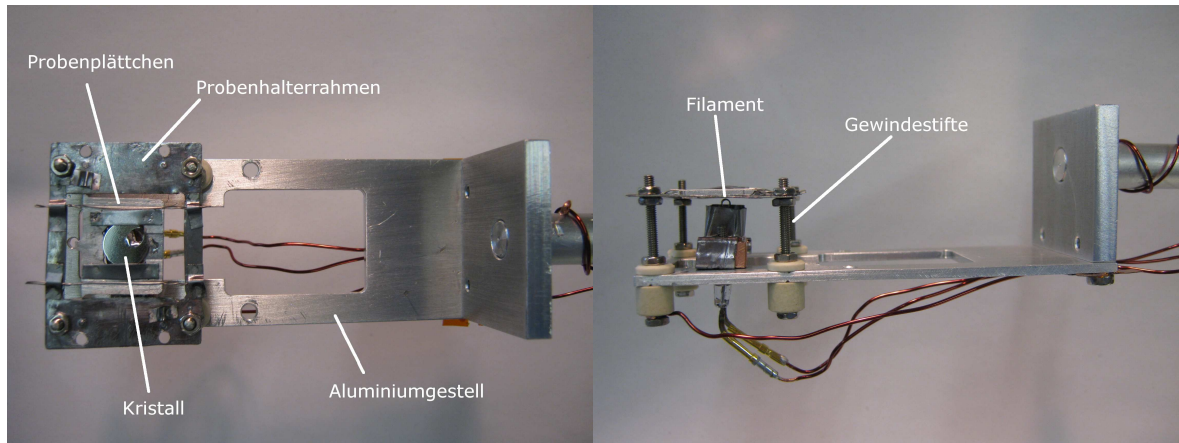


Abbildung 3.2: Fotografie des Probenhalters. *Links*: Mo(110)-Probenkristall auf Halterung. *Rechts*: Filament/Wehnelt-Einheit zur Probenheizung (Seitenansicht).

die Probe mit einer sehr geringen Energie verlassen, ist es wichtig, dass Materialien in der Nähe der Probe keine Remanenz zeigen. Remanente Materialien würden durch das Anschalten des Magnetfeldes der Spule ebenfalls aufmagnetisiert und ein permanentes Magnetfeld (Streufeld) aufweisen. Die Flugbahnen der niederenergetischen Elektronen auf dem Weg von der Probe zu der Analysatoroptik könnten dadurch beeinflusst werden.

Als Substrate für spinaufgelöste Messungen wurden Molybdän- (Mo(110)) und Magnesiumoxid (MgO(100)) Einkristalle verwendet. Molybdän wird zur Reinigung der Oberfläche auf eine hohe Temperatur nahe seines Schmelzpunktes geheizt. Dazu wird der Kristall auf eine positive Hochspannung U und das Wolframfilament auf Masse gelegt. Fließt ein Strom durch das Filament, so heizt sich der Wolframdraht auf und Elektronen können ihn verlassen. Sie werden in dem Feld zwischen Draht und Kristall auf eine kinetische Energie von $E_{kin} = e \cdot U$ beschleunigt, treffen den Kristall und deponieren ihre Energie im Kristall durch inelastische Stöße (= Elektronenstoßheizung). Der Mo(110)-Kristall ($\varnothing = 10$ mm) wurde jeweils zu Beginn des Messtages auf eine Temperatur von 1600°C für 10s erhitzt. Der Emissionsstrom betrug 60 mA während des Heizvorgangs, der Kristall lag dabei auf einer Hochspannung von 800V (Heizleistung 48 W). Der Druck in der Hauptkammer stieg bei dieser Präparation kurzzeitig auf maximal $5 \cdot 10^{-8}$ mbar an. Die Temperaturkalibrierung (siehe Abb. 3.3) wurde mit einem Pyrometer durch einen Fensterflansch mit Sicht auf den Kristall durchgeführt. Nach jedem Öffnen der Kammer wurde der Mo(110)-Kristall bei einer Temperatur von 1300°C für 10s in Sauerstoffatmosphäre ($5 \cdot 10^{-8}$ mbar) 10 mal geheizt. Anschließend wurde er bei 1600°C für 10s geheizt. Dieser Vorgang ist analog zur Präparation des W(100)-Kristalls im Spinpolarimeter, siehe Kapitel 3.2.3.

Die MgO(100)-Kristalle wurden ex situ mit Leitsilber auf ein Probenplättchen aufgeklebt und am Probenhalterrahmen befestigt. Nach dem Ausheizen der Vakuumkammer

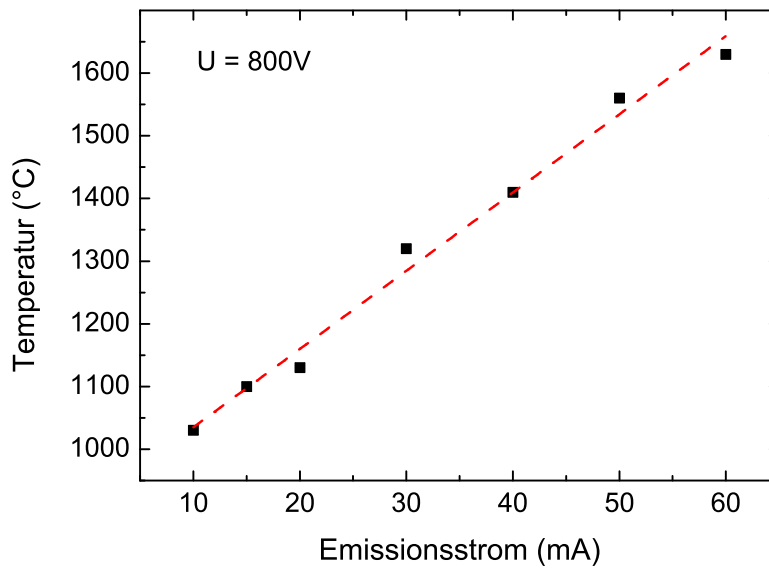


Abbildung 3.3: Temperatur des Mo(110)-Einkristalls in Abhängigkeit des Emissionsstromes. Die Hochspannung am Kristall betrug $U = 800\text{V}$. Der Heizprozess basiert auf Elektronenstoßheizung.

wurden sie bei einer Temperatur von 400°C getempert und die Kammer über Nacht gepumpt. Die Temperatur wurde mit einem Pyrometer bei freier Sicht auf die Probe durch ein Quarzglasfenster, und später über ein Typ K Thermoelement gemessen. Da die MgO-Kristalle nicht in situ gereinigt werden konnten, wurden bei jedem Belüften der Kammer drei Substrate gleichzeitig auf dem Probenhalter befestigt. Über den XYZ-Manipulator konnten sie in die richtige Messposition gefahren werden.

3.1.2 VUV-Quelle

Zur Anregung von Photoelektronen aus der Probe wurde Vakuumultraviolett (VUV)-Strahlung verwendet. Es wurde dabei die Resonanzstrahlung von Helium mit einer Energie von $\hbar\omega = 21,23\text{eV}$ genutzt. Die Resonanzlinie dieser Energie wird als HeI-Linie bezeichnet. Das um $1,86\text{eV}$ verschobene Spektrum durch Anregung der intensitätsschwächere He I α -Linie ($\frac{I_{\text{HeI}\alpha}}{I_{\text{HeI}}} = 0,05$) konnte in den Messungen stets beobachtet werden. Die Strahlung der He I α -Linie hat eine Energie von $23,09\text{ eV}$ [She76]. Da es für diesen Energiebereich keine transparenten Medien gibt, muß die Strahlung bei geringem Druck erzeugt und fensterlos zur Probe geleitet werden.

Materialien, deren Transparenz am weitesten in den VUV-Bereich hineinragen, sind Lithiumfluorid (LiF) und Calciumfluorid (CaF_2). Mikrowellenangeregte Gasentladungslampen (Xe, Kr, Ar) wurden bereits erfolgreich in Kombination mit ionischen Filterkristallen betrieben [Sug10]. Es war in diesem Experiment möglich, scharfe Resonanzlinien

bei $\hbar\omega = 8,4 \text{ eV}$, $10,0 \text{ eV}$ und $11,6 \text{ eV}$ in einer Anordnung mit Fenster zu nutzen. In diesem Sinne wäre es möglich, UV-Strahlung außerhalb des Vakuumbereichs mit Energien von maximal $11,6 \text{ eV}$ herzustellen und über ein LiF-Fenster in die Vakuumapparatur zu leiten.

Bei der VUV-Lampe im vorliegenden Experiment handelt es sich um eine Kaltkathoden-Gleichstrom Entladungslampe (Typ HIS 13 [Sch83, Foc]). Diese besteht im wesentlichen aus einer Gasentladungskammer, zwei Pumpstufen und einer Glaskapillare, die als Lichtleiter dient. Das Helium wird mit einem Dosierventil in den Entladungsraum eingelassen. Über die zwei Pumpstufen wird der Gasdruck im Entladungsraum so eingestellt, dass eine Zündung des Gases im Bereich zwischen Kathode und Anode möglich wird. Die Kathode wird auf eine Spannung von etwa 700 V gelegt. Über einen Piezopuls wird das Gas gezündet und es fließt dann ein Entladungsstrom von typischerweise 60 mA . Durch die direkte Verbindung des Entladungsraumes mit der Hauptkammer über die Glaskapillare steigt bei Betrieb der VUV-Lampe der Druck in der Hauptkammer auf etwa $p = 1 \cdot 10^{-8} \text{ mbar}$ an. Die beiden Pumpstufen der Lampe werden mit einer Drehschieberpumpe und einer Turbomolekularpumpe bedient. Die Konstruktion der VUV-Lampe geht auf die Diplomarbeit von G. Schönhense zurück [Sch78].

In späteren Messungen wurde die Focus VUV-Lampe durch eine VUV-Gasentladungslampe der Firma Specs (Typ UVS 300) [Spe] ersetzt. Diese bietet den Vorteil eines größeren Lichtflusses und des Vorhandenseins von zwei Absperrventilen gegenüber der Hauptkammer, aber den Nachteil einer sperrigen Bauweise. Der Betriebsdruck der Lampe von Specs ist geringer, sodass der Hauptkammerdruck auf lediglich $p = 5 \cdot 10^{-9} \text{ mbar}$ anstieg.

Mit der VUV-Lampe von Focus konnte ein maximaler Elektronenstrom aus der Probe von $I_P = 10 \text{ nA}$ gemessen werden, mit der VUV-Lampe von Specs betrug der Elektronenstrom maximal $I_P = 20 \text{ nA}$. Durch die Verwendung der SPECS-Lampe wurde die Messzeit für ein Spektrum von konstanter Qualität halbiert, da die Elektronenintensität linear in die Güte des Spindetektors eingeht.

3.1.3 Verdampfer

Um das Substrat mit einer dünnen Eisenschicht zu bedampfen, wurde ein Molecular Beam Epitaxy (MBE)-Verdampfer (Typ EFM 3 [Foc]) verwendet. Das zu verdampfende Metall wird mittels Elektronenstoß erhitzt. Je nach Material geschieht dies von einem Stab oder aus einem Tiegel. Für Eisen wird ein Stab mit dem Durchmesser 2 mm verwendet. Dieser Stab liegt auf einer Spannung von 1000 V , das vorgelagerte Filament (eine Schleife mit $\varnothing = 12 \text{ mm}$) auf Masse. Der Abstand zwischen dem Filament und dem Stab, der sich auf der Mittelachse des Filaments befindet, beträgt ca. 3 mm . Der Emissionsstrom des Filaments beträgt typischerweise 20 mA bei einem Filamentstrom von 2 A . Die Heizleistung von 20 W reicht bereits aus, um das Metall auf

Weißglut zu erhitzen. Eisenatome und -ionen, die den Stab verlassen, gelangen durch einen Kollimator in einem gerichteten Strahl auf das Substrat. Zur Kühlung umgibt ein wasserdurchflossener Kupferblock das Gehäuse des Verdampfers. Der Eisenstab ist auf einer CF-16 Lineardurchführung montiert, mit der er in Richtung des Filaments geschoben werden kann. Es kann eine Länge von bis zu 20 mm des Eisenstabes verdampft werden, was für etwa 5-10 Messtage reicht (je nach Schichtdicke die aufgedampft wird). Wenn der Eisenstab verbraucht ist, muß die Vakuumkammer belüftet werden, um einen neuen Stab einzubauen.

Zwischen dem Filament und dem Kollimator ist ein Kollektor elektrisch isoliert befestigt, durch den die Metallatome und -ionen fliegen. Der Strom der Ionen, die auf den Kollektor treffen, ist ein Maß für die Menge des verdampften Materials. Er wird auf einem 'Flußmonitor' am Regler des Verdampfers dargestellt. Durch Einbeziehen von Geometriefaktoren kann bei bekanntem Substratabstand die Rate der auf das Substrat aufgedampften Atome berechnet werden. Diese Art der Schichtdickenbestimmung erwies sich allerdings als nicht besonders konsistent im Vergleich mit einer nachträglichen (ex situ) Schichtdickenbestimmung durch Röntgenbeugung.

3.1.4 Halbkugelanalysator

Ein wesentliches Element des SRUPS-Experiments (SRUPS = spin resolved UPS) ist der Halbkugelanalysator (Typ Leybold EA10-100). Er besteht aus einer Transferoptik und zwei konzentrischen Halbkugeln unterschiedlicher Radien ($R_1 = 114$ mm und $R_2 = 80$ mm), die ineinander liegen, siehe Abb. 3.4. Zwischen den zwei Halbkugeln befinden sich auf der flachen Seite zwei Öffnungen, in die Ein- und Austrittsspalte mit verschiedenen Größen geschoben werden können. Sie sind auf einem Karussell angebracht, das von außen durch eine Drehdurchführung betrieben wird. Die möglichen Kombinationen sind in Tabelle 3.1 aufgelistet. Die erste Zahl bezieht sich auf die dispersive- die zweite auf die nichtdispersive Richtung. Die maximale Austrittsöffnung ist rund, mit einem Durchmesser von 20 mm.

Eintrittsspalt [mm ²]	Austrittsspalt [mm ²]
0,5 x 20	∅ 20 mm
2 x 10	0,5 x 20
1 x 20	1 x 20
2 x 20	2 x 20

Tabelle 3.1: Auswahlmöglichkeiten der Spalte am Halbkugelanalysator. Die erste Zahl bezieht sich jeweils auf die dispersive Richtung. Der vollständig geöffnete Austrittsspalt (obere Zeile) ist rund mit einem Durchmesser von 20 mm.

Transferoptik Die Aufgabe der Transferoptik ist der Transport der Elektronen von der Probe zu dem Eintrittsspalt zwischen den beiden Halbkugeln und die Vorselektion von Elektronen eines gewünschten Energie- und Probenaustrittswinkelintervalls. Die Geometrie der Optik mit einer Simulation der Elektronenbahnen im Inneren ist in Abb. 3.4, unterer Teil, dargestellt. Die aus der Probe austretenden Photoelektronen passieren eine Anordnung von zwei elektronenoptischen Linsen (Elemente T1, T2, T3 und T4, T5, T6) und formen jeweils zwischen den beiden Linsen und am Eingang des Halbkugelkondensators ein Abbild der Probe, wobei die erste Linse eine 2:1 Abbildung, die zweite Linse eine 1:1 Abbildung erzeugt. Im Strahlengang sind Netze aus quer gespannten Drähten mit einem Durchmesser von jeweils ca. 0,1 mm im Abstand von 1 mm angebracht, die auf dem Potential der jeweiligen Elektrode liegen, an der sie befestigt sind. Dies soll ein Durchgreifen der Felder zwischen den Elektroden verhindern. In der Simulation sind sie durch gepunktete Linien dargestellt.

Die Elektronen mit der analysierten kinetischen Energie werden in der Transferoptik auf die Durchlassenergie ('pass energy') gebracht und in den Eintrittsspalt abgebildet. Dabei ist die Energieselektion nur moderat, die Optik wirkt wie ein breiter Bandpassfilter. Die Durchlassenergie ist die Energie, die die Elektronen auf der Sollbahn ($R_0 = 97$ mm) im nachfolgenden Halbkugelkondensator haben. Je nach Startenergie der Elektronen ist hierfür eine Beschleunigung oder Abbremsung durch die Optik vonnöten. In den nachfolgenden Messungen wurde eine Durchlassenergie von $E_{pass} = 50$ eV ausgewählt. Die höchste mögliche kinetische Startenergie der Elektronen bei Eisen ist $E_{max} = \hbar\omega - \Phi \simeq 21,23 - 5,82 \simeq 15,41$ eV. Die Ermittlung der Austrittsarbeit wird in Kap. 5 beschrieben. Die Probe wird auf eine negative Biasspannung von -10 eV gelegt, was insgesamt zu einer maximalen kinetischen Energie der Elektronen (an der Fermikante) von $E_{kin,max} \simeq 25,41$ eV führt (bezogen auf das Potential der Apparaturmasse). Die Elektronen im UPS-Experiment müssen also in Richtung des Eintrittsspalts um weitere 24,59 eV beschleunigt werden.

Für die elektronenoptische Abbildung ist neben den korrekten Linsenspannungen der Abstand zwischen der Probe und der ersten Elektrode wichtig. Der optimale Abstand wird in der Betriebsanleitung mit $s = 23 \pm 1$ mm angegeben. Es ist allerdings gleichzeitig vermerkt, dass wenn dieser Abstand nicht eingestellt werden kann, die Spannung der zweiten Elektrode (T2) verändert werden muß. Um den korrekten Wert für T2 einstellen zu können, muß das Spektrometer mit einer Probe, deren UPS-Spektrum hinreichend gut bekannt ist, kalibriert werden. Durch einen falschen Wert von T2 können beispielsweise die Peakhöhenverhältnisse nicht korrekt erscheinen, oder gar Intensitätsmaxima an falschen Stellen gemessen werden. In der Tat ist es in der gegebenen experimentellen Anordnung schwierig, den Abstand präzise einzustellen, was vermutlich nur bis auf einen Fehler von einigen Millimetern gelungen ist. Eine Anpassung von T2 brachte im Anschluß gute Ergebnisse.

Um zu prüfen, ob der Strahlengang in der Transferoptik den Kriterien in der Betriebsanleitung mit den im Experiment angelegten Spannungen genügt, wurde die Optik des

Halbkugelanalysators simuliert. Die Kriterien waren: Eine Abbildung der Probe in den Eintrittsspalt mit einem Zwischenbild bei T3/T4 und dabei eine Vergrößerung des Bildes um einen Faktor 2 durch die erste Linse. Für die Simulation der Linsenoptik des Halbkugelanalysators in Abb. 3.4 wurden Startenergien der Elektronen 0,4 eV unterhalb der Fermienergie verwendet: $E_{kin} = E_{start} + E_{Bias} \simeq 15,0 \text{ eV} + 10 \text{ eV} = 25,0 \text{ eV}$. Der Abstand zwischen Probe und T1 entspricht dem im Handbuch angegebenen Sollabstand von 23 mm. Der Lichtfleck auf der Probe wurde im Durchmesser als 8 mm angenommen. Seine Größe hat Einfluß auf die Schärfe der Linien. Je weiter weg vom Zentrum des Strahlenganges die Elektronen starten, desto stärker werden sie von den Linsen gebrochen, was zu einer sphärischen Aberration führt. Die Geometrie der Elektroden wurde aus der technischen Originalzeichnung übernommen. Die Spannungen der Elektroden T1-T6, wie von der Leybold-Elektronik vorgegeben, wurden im Experiment für die ausgesuchte Startenergie gemessen und bildeten die Grundlage der Simulation. Um gute Simulationsergebnisse zu erzielen mussten sie nur geringfügig verändert werden.

Die Simulation zeigt, dass ein maximaler Probenaustrittswinkel von 10° in den Eintrittsspalt des Energieanalysators abgebildet werden kann. Elektronen mit größeren Startwinkeln können nicht durch T1 in den Analysator gelangen. In der dispersiven Ebene ist eine asymmetrische Blende im Strahlengang, in der Mitte der Elektrode T5, vorhanden (in der Simulation nicht gezeigt), die negative Startwinkel abschneidet und so die durchgelassenen Startwinkel auf $\gamma_{d,min} = 1^\circ$ bis $\gamma_{d,max} = 10^\circ$ begrenzt. In der nichtdispersiven Ebene ist die Blende komplett geöffnet, hier ist das durchgelassene Startwinkelintervall $\Delta\gamma_{nd} = \pm 10^\circ$. Da das Bild am Eintrittsspalt des Analysators um einen Faktor $M = 2$ vergrößert erscheint im Vergleich zu der Startposition auf der Probenoberfläche, ist der maximale Eintrittswinkel in den Analysator nach dem Satz von Liouville (Phasenraumerhaltung, siehe z.B. [Wol87, Pic66]): $\alpha_m = \arcsin\left(\frac{\sqrt{E_1} \cdot \sin\gamma}{M \cdot \sqrt{E_2}}\right) = \arcsin\left(\frac{\sqrt{25,0} \cdot \sin 10^\circ}{2 \cdot \sqrt{50}}\right) = 3,5^\circ$. E_1 und E_2 sind die Energien der Elektronen an der Startposition und am Eintritt in den Analysator.

Die asymmetrische Blende reduziert den maximalen Startwinkel in dispersiver Richtung weiter falls die Optik im Abbremsmodus betrieben wird, da dann die Trajektorien an dieser Stelle dann weiter geöffnet sind. Im Beschleunigungsmodus, in dem gearbeitet wurde, wird der Maximalwinkel durch die asymmetrische Blende nicht weiter beschränkt, die Selektion der durchgelassenen Maximalstartwinkel geschieht lediglich über die Öffnung der ersten Elektrode T1. Das durchgelassene Startwinkelintervall in der dispersiven Richtung beträgt nach der Betriebsanleitung des Spektrometers $\gamma_d = 1^\circ$ bis 7° . Der Wert von 7° konnte in der Simulation nicht reproduziert werden. Obwohl die Lage der asymmetrischen Blende nach einem Öffnen des Halbkugelanalysators genau bekannt war, konnte in der Simulation nicht bestätigt werden, dass sie den Maximalwinkel von 10° weiter einschränkt. Die in der Betriebsanleitung erwähnte 2:1 Abbildung der ersten Linse konnte mithilfe der Simulation verifiziert werden. Das Zwischenbild an T3/T4 ist in der Betriebsanleitung beschrieben und konnte in der Simulation mit

den gegebenen Werten reproduziert werden. Im Experiment ist es ebenfalls gut nachweisbar, da an dieser Stelle zwei Netze stehen, deren Schattenwurf in allen weiteren Bildern sichtbar ist, siehe nächster Abschnitt.

Halbkugelkondensator In dem Halbkugelkondensator herrscht ein radialsymmetrisches Feld

$$E_r(r) = -\Delta V \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1} \frac{1}{r^2}, \quad (3.1)$$

welches die Elektronen unterschiedlicher Energien auf unterschiedliche Keplerellipsen lenkt und in Kombination mit einem schmalen Austrittsspalt eine Energiediskriminierung bewirkt. Auf der Sollkreisbahn kompensieren sich gerade die auf die Elektronen wirkende Zentrifugalkraft und die elektrostatische Zentripetalkraft des Kugelfeldes. Die Energie eines Elektrons auf dieser Bahn mit Radius $R_0 = 97$ mm wird als Durchlassenergie (E_{pass}) bezeichnet. Die Bewegungsgleichung für Elektronen innerhalb des radialsymmetrischen Feldes lautet [Lou90]

$$\frac{d^2 u}{d\Theta^2} + u = \frac{R_0 E_{pass}}{r_0 E \cos^2 \alpha}, \quad u := \frac{r_0}{r}, \quad (3.2)$$

mit dem Startradius r_0 , der Energie E , dem Startwinkel α und dem Polarwinkel Θ nach der Skizze in Abb. 3.4. Die Lösung der Bewegungsgleichung lautet [Lou90]

$$\frac{r}{r_0} = \frac{R_0 E_{pass}}{r_0 E \cos^2 \alpha} (1 - \cos \Theta) + \cos \Theta - \tan \alpha \sin \Theta. \quad (3.3)$$

Um das Energieintervall zu errechnen, das bei offener Austrittsöffnung ($\Theta = 180^\circ$) (wie in einer Vielkanalmessung) in dem Austrittsbereich mit $\varnothing 20$ mm zu sehen ist, wird $r = 87$ mm und $r = 107$ mm eingesetzt und der Startwinkel der Einfachheit halber $\alpha = 0^\circ$ gewählt. Für die Position $r = 87$ mm erhält man $E = 0,96 \cdot E_{pass}$ und für die Position $r = 107$ mm erhält man $E = 1,06 \cdot E_{pass}$. Das Energieintervall in der Austrittsebene ist somit $\delta E = 1,06 \cdot E_{pass} - 0,96 \cdot E_{pass} = 0,1 \cdot E_{pass}$, also 10% der Durchlassenergie.

Die Energieauflösung (FWHM, full width at half maximum) des Halbkugelanalysators ist gegeben durch [Pol74]

$$\Delta E_{theo} = \frac{E_{pass}(d + 2\alpha_m^2 R_0/4)}{2R_0}. \quad (3.4)$$

Dabei ist d die Breite des Eintrittsspaltens in dispersiver Richtung. Der zweite Term im Zähler (α_m^2 -Term) trägt der Auflösungsbegrenzung durch den endlichen Öffnungswinkel Rechnung. Für alle Messungen wurde eine konstante Sollbahnenergie von 50 eV eingestellt und der Eintrittswinkel beträgt nach dem vorherigen Abschnitt maximal $\alpha_m = 3,5^\circ$. Für eine Eintrittsspaltbreite von 0,5 mm, wie bei der Multikanal-Spinmessung ergibt sich daraus eine Energieauflösung von $\Delta E_{theo} = 175$ meV FWHM. Die Energieauflösung skaliert mit der Sollbahnenergie. In spektroskopischen Messungen ist es daher

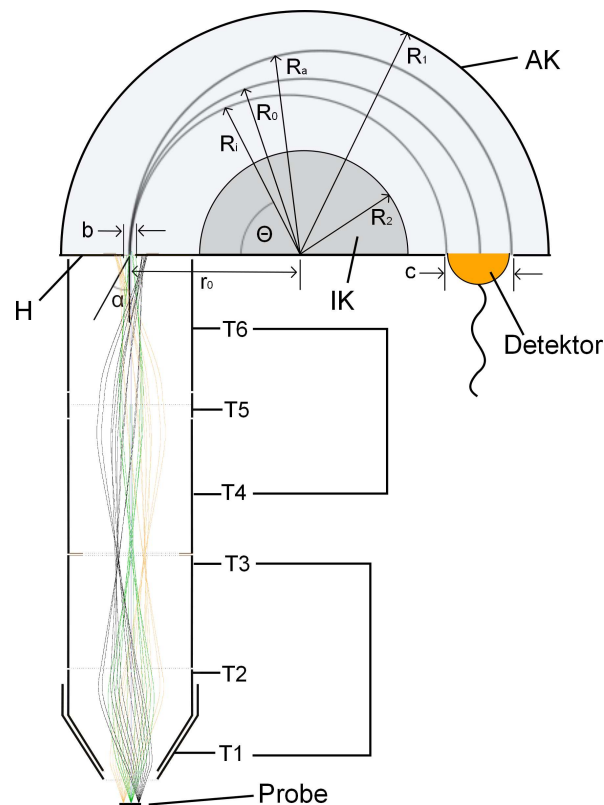


Abbildung 3.4: Schematischer Querschnitt der Elektronenoptik des UPS-Experimentes in der dispersiven Ebene. *Unterer Teil:* Transferoptik, Simulation der beiden Linsenelemente des Halbkugelanalysators (Simulationsprogramm: Simion 7.0). Die Elektroden T1, T3 und T4, T6 sind verbunden. T4 ist das Potential von Ein- und Austrittsspalt des Halbkugelanalysators (Herzogplattenpotential, H). Die Elektronen starten an der Probe 23mm von T1 entfernt mit einer kinetischen Energie von 25,0 eV unter Maximalwinkeln von $\pm 10^\circ$. Bei korrekter Einstellung der Linsenparameter entstehen Zwischenbilder zwischen den Elektroden T3 und T4 und am Eintrittsspalt. *Oberer Teil:* Halbkugelanalysator, die große (AK) und kleine (IK) Halbkugel des Energieanalysators haben die Durchmesser R_1 und R_2 . Die Elektronensollbahn hat den Radius R_0 . Die restlichen Bezeichnungen der Abstände beziehen sich auf die Herleitung der Bewegungsgleichung, siehe Text. Im radialsymmetrischen Feld zwischen den Halbkugeln werden Elektronen energetisch diskriminiert und am Austrittsspalt vom Detektor registriert.

sinnvoll, die Sollbahnenergie möglichst klein zu wählen, was aber mit einem Verlust in der Intensität einhergeht [Pol74]. Da für die Vielkanal-Spinmessung bei geöffnetem Austrittsspalt ein Energieintervall von mindestens 3 eV simultan gemessen werden sollte, wurde die Durchlassenergie genügend groß gewählt und eine Einbuße in der Auflösung hingenommen. Die Energieauflösung des Halbkugelanalysators wird maßgeblich durch den α_m^2 -Term begrenzt. Eine Verbesserung der Auflösung bietet z.B. das nanoESCA-System der Firma Focus GmbH [Esc05], bei dem der α_m^2 -Term korrigiert ist.

Die Austrittswinkel β sind in der dispersiven Ebene des Analysators nicht genau gleich den Eintrittswinkeln α . Dies ist aus einer Polardarstellung der Elektronenbahnen, Abb. 3.5 erkennbar. Die Elektronen fliegen von dem Eintritts- zu dem Austrittsspalt. Sie starten alle näherungsweise auf dem Sollbahnradius, da die Eintrittsblende sehr klein (0,5 mm) ist. In rot ist die Sollbahn dargestellt, die grüne Linie stellt die Situation $E = 0,95 \cdot E_{pass}$, die schwarze Linie die Situation $E = 1,05 \cdot E_{pass}$ dar. Die Elektronen starten mit dem zuvor berechneten maximalen Eintrittswinkel von $3,5^\circ$. An der offenen Austrittsblende lassen sich die Austrittswinkel in der Polardarstellung ablesen: $3,14^\circ$ für $E = 0,95 \cdot E_{pass}$ und $3,8^\circ$ für $E = 1,05 \cdot E_{pass}$. Der maximale Austrittswinkel aus dem Halbkugelanalysator beträgt also $\beta = 3,8^\circ$. In der Praxis verändert die Randfeldkorrektur die Trajektorien ebenfalls signifikant, was hier nicht berücksichtigt wurde.

In der Austrittsebene des Analysators ist in der dispersiven Richtung eine Energieverteilung zu finden, wobei kleinere Energien auf der Innen- und größere Energien auf der Außenbahn liegen. In der nichtdispersiven Richtung überkreuzen sich die Trajektorien in der Mitte des Analysators ('crossover') und formen in der Austrittsebene ein Abbild des Eintrittsspalt und somit ein Abbild der Probe. Ebenso ist in der Austrittsebene ein Schattenwurf des Netzes an T3/T4 zu sehen.

Spannungsversorgung Die einzelnen Spannungen für T1 = T3, T2, T5, T4 = T6, Außenkugel (AK) und Innenkugel (IK) werden von der Spektrometerelektronik (Firma Leybold) in Abhängigkeit einer Steuerspannung erzeugt, siehe Abb. 3.6. Die Steuerspannung wird vom PC über eine USB-Box ausgegeben, passiert einen 4:1 Spannungsteiler und wird einem Verstärker (Leybold) zugeführt. Dieser Verstärker gibt die verstärkte Steuerspannung an den Verteiler weiter, wo die Linsenspannungen der Transferoptik und die Spannungen für die beiden Halbkugeln generiert werden. Im Verlauf eines Spektrums bleibt die Sollbahnenergie gleich, während die Linsenspannungen der Transferoptik durchgeföhren werden. Die USB-Box gibt Spannungswerte zwischen 0 und 10 V aus, mit minimal 5 mV-Schritten. Da für die geringen kinetischen Energien bei der Anregung durch die VUV-Lampe nur ein Viertel des Spannungsintervalls benötigt wird, wurde der Spannungsteiler verwendet, um die Minimalschrittweite zu senken. Die Spannung des 4:1 Teilers wird ebenfalls einem T4-Generator zugeführt, der einzig die Spannung T4 (= 'Herzogplattenpotential') generiert. Der Spannungsgeber für die Spinfilter-Spannungen und der Multichannelplatestapel des Delayline Detektors

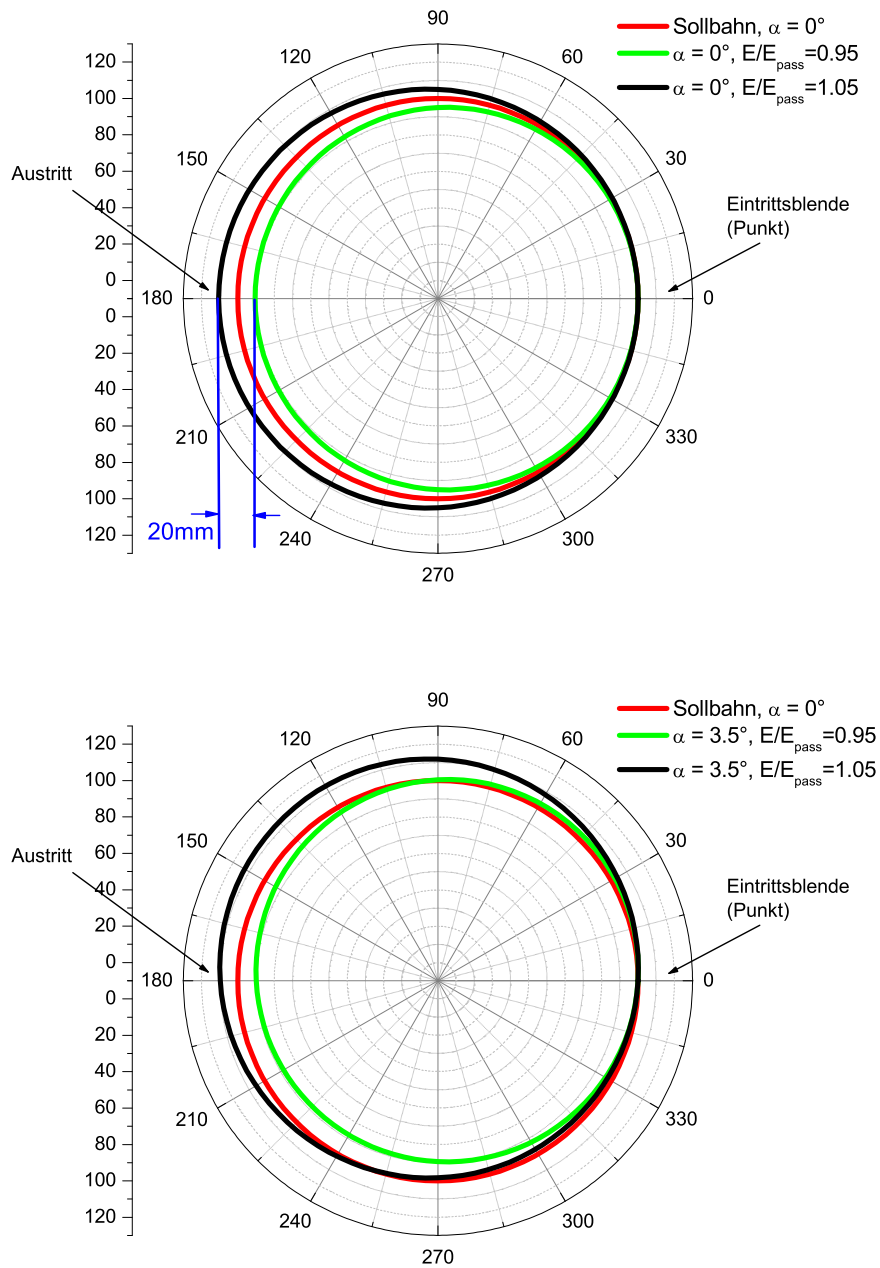


Abbildung 3.5: Polardarstellung der Elektronenbahnen im Halbkugelanalyzer. Die Elektronen starten am Eintrittsspalt (rechts) auf dem Sollbahnradius R_0 . In rot ist die Sollbahn dargestellt, die grüne Linie gibt die Situation $E = 0,95 \cdot E_{pass}$, die schwarze Linie die Situation $E = 1,05 \cdot E_{pass}$ wieder. Alle Trajektorien starten unter einem Einschubwinkel von 0° (oben), bzw. die schwarze und grüne Trajektorie starten unter dem maximalen Einschubwinkel $3,5^\circ$ und die rote unter 0° (unten).

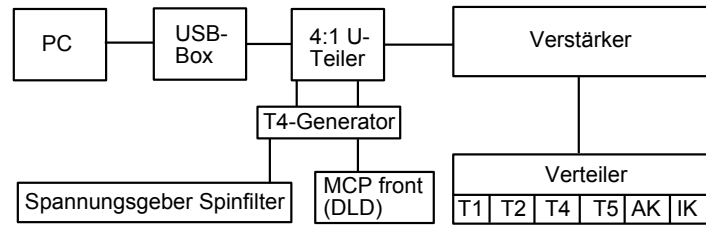


Abbildung 3.6: Übersicht über die Vernetzung der Spannungsgeber. Die Spannungen für den Energieanalysator und den Spindetektor werden in Abhängigkeit einer Steuerspannung erzeugt. Die Steuerspannung wird vom PC über eine USB-Box (0 V bis 10 V) ausgegeben, passiert einen 4:1 Spannungsteiler und wird einerseits einem Verstärker, dem Spannungsgeber für den Spinfilter und dem Delayline Detektor zugeführt. Vom Verstärker aus wird die Steuerspannung an den Verteiler weitergegeben und dort in 6 Einzelspannungen für den Halbkugelanalysator aufgeteilt. Der Spannungsgeber für die Spinfilter-Spannungen floatet auf der Steuerspannung um zu garantieren, dass der Spindetektor und der Halbkugelanalysator dieselbe Bezugsspannung haben.

schwimmen auf der Spannung T4. Der T4-Generator musste aufgrund von Impedanzanpassung zusätzlich neu aufgebaut werden. Dadurch dass der Spinfilter dann dasselbe Bezugspotential wie der Halbkugelanalysator hat, kann trotz des Spinfilter-Aufbaus weiterhin ein einkanaliger Intensitätsscan aufgenommen werden, siehe Kap. 4.1. Am PC wird ein in der Arbeitsgruppe vorhandenes Programm ('Easyspectra') verwendet, mit dem einerseits die USB-Box gesteuert und andererseits die Zählrate des Delayline Detektors ausgelesen wird.

Überprüfung der Linsenparameter Durch eine Positionierung des Delayline Detektors direkt hinter den Austrittspalt (ohne Spinfilterkristall) konnte sowohl die korrekte Abbildung des T3/T4-Netzes als auch des Austrittspaltes verifiziert werden, siehe Abb. 3.10, links. In dem Bild sind 16 Streifen zu erkennen, was bei einer gemessenen Stegzahl der Netze von 1/mm zu einer Bildgröße an T3/T4 von ca. 16 mm führt. Das entspricht einer 2:1 Vergrößerung in der Simulation (Abb. 3.4), die tatsächlich vorliegt. Die Abbildung des 1 mm Austrittspaltes ist relativ scharf und der Spalt erscheint nach oben gebogen, was in der Realität ebenfalls gegeben ist. Auf das Bild des Austrittspaltes nach der Streuung an dem W(100)-Kristall (Abb. 3.10, rechts) wird in Kapitel 3.2.1 eingegangen.

3.1.5 Vakuumsystem

Der Vakuumaufbau besteht aus zwei Kammern, einer Hauptkammer und der Spinfilterkammer, siehe Abb. 3.7. In der Hauptkammer befindet sich das UPS-Experiment mit

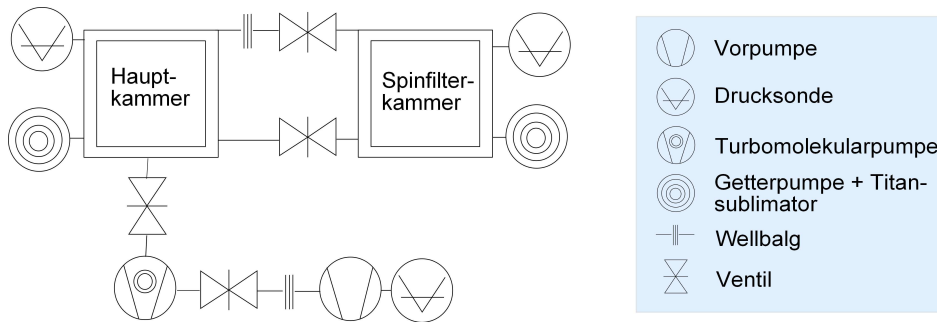


Abbildung 3.7: Das Vakuumsystem des Experiments. Einzelkomponenten sind in der Legende erläutert. Das Experiment besteht aus zwei voneinander trennbaren Einzelkammern, der Hauptkammer, in der sich die Probe befindet und der Spinfilterkammer.

Probe, Heliumlampe, Verdampfer und Halbkugelanalysator. Am Austrittsflansch des Halbkugelanalysators befindet sich ein Ventil, das ihn mit der Spinfilterkammer verbindet. Es existiert noch ein weiterer Bypass zwischen Spindetektor- und Hauptkammer. Die Hauptkammer wird mit einem Turbopumpensystem und einer Getterpumpe gepumpt, die Spindetektorkammer ist mit einer Getterpumpe ausgestattet, die den Druck halten kann, wenn beide Verbindungsventile zur Hauptkammer geschlossen sind. Nach einem Ausheizen von 2 Tagen wird ein Enddruck von typischerweise $p = 3 \cdot 10^{-10}$ mbar erreicht.

3.2 Das Vielkanal-Spinpolarimeter

Im Folgenden wird die Konstruktion des Spinpolarimeters, die einen Hauptteil der Doktorarbeit ausmachte, vorgestellt. Die Fähigkeit des Halbkugelanalysators, ein Energieintervall im geöffneten Austrittsspalt bereit zu stellen, wird als Grundlage des Detektorkonzepts ausgenutzt. Die Bildinformation in der Austrittsebene ist über die Winkel kodiert. Nach der spinabhängigen, winkelerhaltenden Streuung an einem W(100) Einkristall kann sie mittels eines ortsauflösenden Detektors (Delayline Detektor, DLD [Oel01]) wieder abgerufen werden. Die große Zahl an Bildpunkten, die auf diese Weise simultan spinaufgelöst dargestellt werden können, bilden die Basis des bislang effizientesten Spindetektorsystems.

3.2.1 Simulation der Elektronentrajektorien

Die Aufgabe der Elektronenoptik des Spinfilters ist der Transport der Elektronen von der Austrittsebene des Analysators zu dem W(100)-Streukristall, und von dort weiter zu dem DLD, an dessen empfindlicher Detektorfläche ein Abbild der Austrittsebene des Halbkugelanalysators zu sehen sein soll. Die Streuung an dem W(100)-Kristall er-

folgt elastisch unter einem Winkel von 90° zur Oberflächennormalen (Spekularstrahl). In diesem Zusammenhang ist es sinnvoll, einen 'crossover' (oder reziprokes Bild) der Trajektorien an den Ort des Streukristalls zu legen, da in einem solchen Fall der Strahldurchmesser am Kristall genügend klein wird und die Kristallfläche ($\varnothing = 10$ mm) besser zur Streuung ausgenutzt werden kann.

Für die Simulation mit dem Programm Simion 7.0 wurden wie in Abschnitt 3.1.4 Elektronen der kinetischen Startenergie von 25,0 eV (0,4 eV unterhalb der Fermienergie) gewählt. Sie haben bei ihrem Austritt aus dem Halbkugelanalysator (Startpunkt der hier vorgestellten Simulation) eine mittlere Energie von 50 eV (Durchlassenergie), wobei die Herzogplatte des Analysators dann auf einer Spannung von 25,0 eV bezüglich der Masse liegt. Da eine konstante Sollbahnenergie von 50 eV bei allen Messungen eingestellt wurde, liegt ein verfügbares Energieintervall von $E = 0,1 \cdot E_{pass} = 5$ eV in der Austrittsebene des Energieanalysators vor. Die Austrittswinkel aus dem Spektrometer sind für die nichtdispersive Richtung gleich den Eintrittswinkeln ($\alpha_{nd,max} = \pm 3,5^\circ$), in der dispersiven Richtung beträgt der maximale Austrittswinkel $\alpha_{d,max} = 3,8^\circ$, wie in Kapitel 3.1.4 gezeigt wurde. Der minimale Austrittswinkel ist $\alpha_{d,min} = 0,32^\circ$. Da vorausgesetzt wurde, dass die Elektronen elastisch am Kristall gestreut werden und die Winkel erhalten bleiben, wurde die Simulation vereinfacht geradlinig, ohne den Kristall im Strahlengang, durchgeführt.

Die Simulationen für die dispersive und nichtdispersive Richtung sind in Abb. 3.8 gezeigt. Die vertikale Achse in dieser Darstellung ist gestreckt. Der Austrittsspalt des Halbkugelanalysators bildet den Startpunkt der Simulation und ist auf der linken Seite zu sehen. Die Elektronen fliegen nach rechts und treffen am Ende der durchlaufenen Elektronenoptik auf den DLD. Die angelegten Spannungen der Elektroden sind im unteren Bild eingezeichnet. Die Startenergien sind in der nichtdispersiven Ebene alle gleich 50 eV, in der dispersiven Ebene wurde ein Energieintervall mit von oben nach unten linear kleiner werdenden Energien nach Gl. 3.3 angenommen ($E_{oben} = 52,5$ eV, $E_{unten} = 47,5$ eV). In der Simulation der dispersiven Richtung ist die chromatische Aberration klar erkennbar. Die kleineren Energien erreichen die Detektorfläche nicht (vor allem die hellgrüne Trajektorie), für die mittleren Energien ist das Bild am Besten fokussiert. Die Breite des Strahlenbündels am Kristallort beträgt 3 mm, was klein genug ist, um alle Elektronen am Kristall mit dem Durchmesser $\varnothing = 10$ mm zu streuen.

In der Simulation der nichtdispersiven Richtung wird deutlich, dass nicht alle Elektronen, die den Energieanalysator verlassen, am Analysatorkristall reflektiert werden können. Da die Streuung in der nichtdispersiven Ebene stattfindet, sehen diese Elektronen einen effektiven Kristalldurchmesser von $\varnothing_{eff} = \sqrt{2} \cdot 10 \text{ mm} = 7,07$ mm. Für die angegebenen Geometrieparameter ist der Strahldurchmesser in der nichtdispersiven Richtung an der Stelle des Streukristalls aber 8 mm breit. Elektronen, die nicht am Kristall gestreut werden können, fliegen weiter geradeaus auf die Kammerwand. Sie werden inelastisch gestreut und tragen dann zum Untergrund bei. Um diesen Untergrund abzuschneiden, wird die Frontseite des DLD (und der kurze Rohransatz) auf

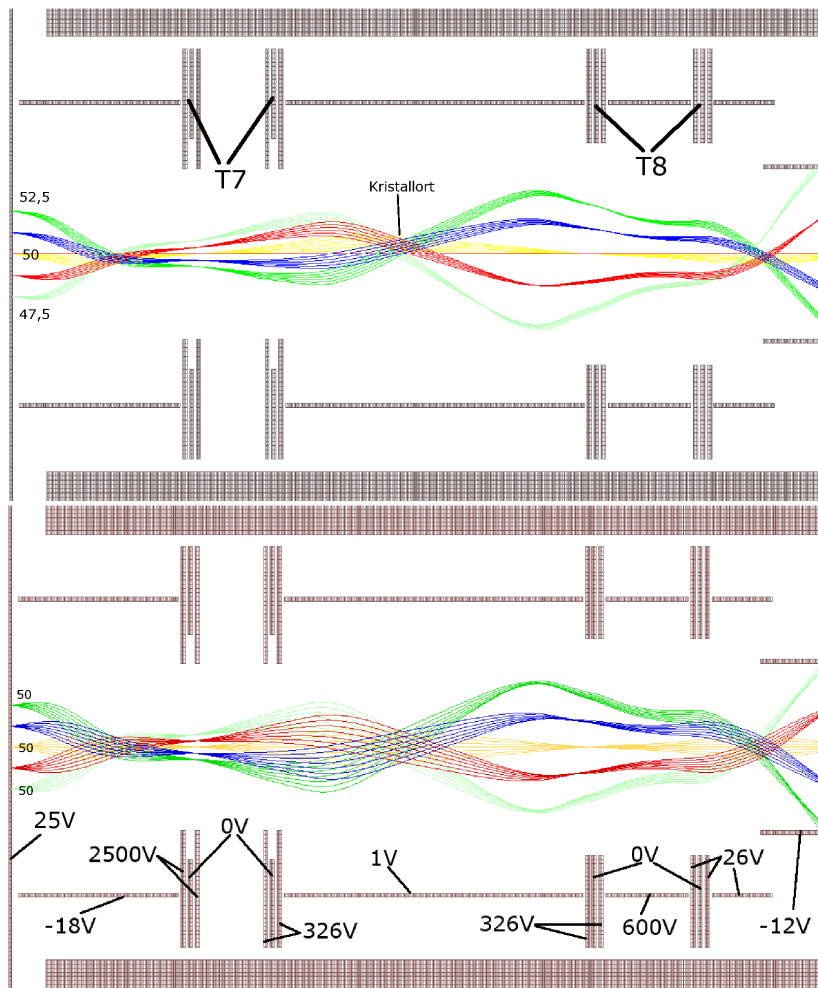


Abbildung 3.8: Simulation der Elektronenbahnen im Spinfilter (Simulationsprogramm: Simion 7.0). Die vertikale Achse ist gestreckt. Die elastische Streuung am Kristall ist winkel- und energieerhaltend, sodass der Streuprozess nicht simuliert wurde (lineare Anordnung der Optik). *Oben*: Dispersive Ebene. Mittlere Startenergie bei dem Austritt aus dem Halbkugelanalytator: $E_{pass} = 50$ eV, $\delta E = \pm 2,5$ eV. *Unten*: Nichtdispersive Ebene mit Startwinkeln $\pm 3,5^\circ$ und konstanter Energie $E_{pass} = 50$ eV. Die Spannungen der Elektroden für eine mittlere analysierte Bindungsenergie von 0,4 eV bzgl. E_F sind angegeben. Der Kristall steht real am mittleren 'crossover', siehe Markierung im oberen Teilbild.

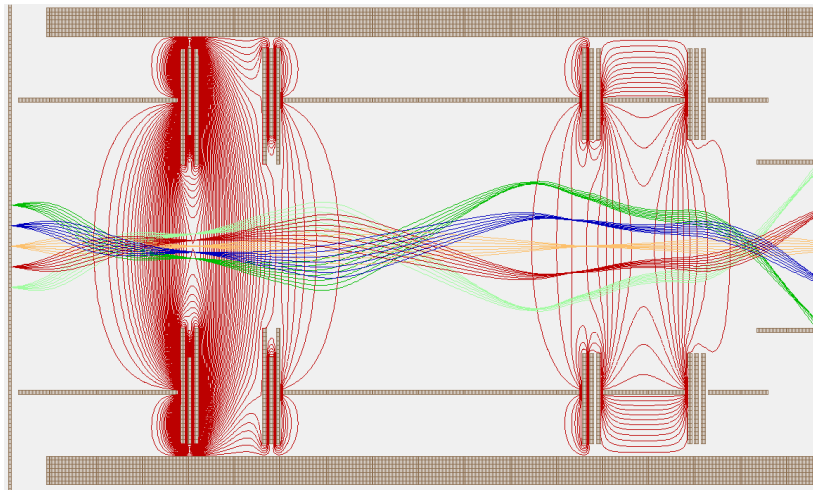


Abbildung 3.9: Äquipotentiallinien der Transferoptik mit Trajektorien in der nichtdispersiven Ebene. Es bilden sich 2 Linsen aus.

eine negative Gegenspannung (-12 V) gelegt.

Alle Linsenelemente werden generell bei niedrigen Spannungen unter 326 V betrieben. Die Spannungen werden von einem Vielkanal-Netzgerät (Firma Focus GmbH) generiert, welches auch den Spannungsgeber für den Proben-Flash und die Umschaltlogik enthält. Alle Spannungen floaten auf der Herzogplattenspannung (T4), wodurch sichergestellt ist, dass die Trajektorien bei allen Analysatorspannungen gleich bleiben, siehe Kap. 3.1.4. Lediglich die Spannungen des ersten Elektrodenstapels sind Hochspannungen und werden separat mit einer Spannungsquelle (Firma Heinzinger) generiert. Die hintere Multichannelplate des Delayline Detektors wird ebenfalls über eine separate Hochspannungsquelle versorgt. Die hohen Spannungen floaten nicht auf dem Potential T4, da die gesamte Spannungsänderung während eines Spektrums von max. 16 eV Breite bei Spannungen > 1000 V im Bezug auf die Linsenwirkung zunächst vernachlässigbar ist.

In Abb. 3.9 ist die Simulation für die nichtdispersive Richtung mit eingezeichneten Äquipotentiallinien zu sehen. Es ist erkennbar, dass die Elektronenoptik bei den gewählten Spannungseinstellungen 2 Linsen ausbildet. Durch die negative Gegenspannung der ersten Elektrode wird direkt ein 'crossover' und das erste Zwischenbild im Zentrum der ersten Linse (T7) erzeugt. T7 ist in beide Richtungen gewölbt und führt zu dem zweiten 'crossover', direkt am Streukristall. Die zweite Linse (T8) befindet sich symmetrisch hinter dem Streukristall und erzeugt einen dritten 'crossover' sodass in der Detektorebene des DLD ein Bild entsteht. Dieses Bild ist in der dispersiven Ebene das Spiegelbild des Austrittsspalt (also umgekehrte Seiten), in der nichtdispersiven Richtung ist es das genaue Abbild des Spalt, da die nichtdispersive Ebene die Streuebene darstellt, in der eine weitere Richtungs inversion stattfindet. In Abb. 3.10 ist das Bild des 1 mm-Austrittsspalt auf dem DLD gezeigt. In der linken Abbildung sieht man das Bild auf

dem DLD direkt hinter dem Halbkugelanalysator. Hier war der DLD über ein kurzes Linsenelement hinter dem Analysator montiert. Der Spalt erscheint auf dem Bild, wie in der Realität, in der Mitte nach oben gebogen. Auf der rechten Seite ist zum Vergleich das Bild des Spaltes hinter dem Spinfiler gezeigt. Da in der dispersiven Richtung ein Spiegelbild entsteht, erscheint der Spalt nun in die andere Richtung gekrümmt. Das linke Bild erscheint verdreht im Vergleich zu dem rechten Bild, da der DLD für die Bilder eine unterschiedliche Ausrichtung hatte. Desweiteren ist erkennbar, dass das Verhältnis zwischen der Helligkeit im Spalt und des Untergrundes im rechten Bild schlechter ist als im linken. Durch die Streuung an dem Kristall entstehen zusätzlich zu den elastisch gestreuten Elektronen auch inelastische Elektronen, die keine Bildinformation mehr tragen und zum größten Teil von der negativen Gegenspannung des DLD abgeschnitten werden.

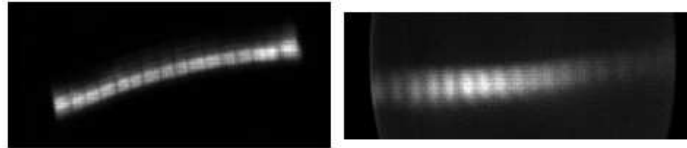


Abbildung 3.10: Abbildung des 1 mm Austrittsspalt. *Links*: Delayline Detektor direkt hinter dem Spalt, der Spalt ist nach oben gebogen. *Rechts*: Delayline Detektor am Ende des Spinfilters, das Bild ist invertiert, der Spalt erscheint nach unten gebogen. In beiden Bildern sind 16 helle Streifen zu erkennen, die der Schattenwurf eines Gitters bei T3/T4 sind.

Die Elektronen haben am Streukristall eine kinetische Energie von $E_{kin} = (\hbar\omega - 0,4 \text{ eV}) - \phi_{Fe} - U_{Bias}/e + U_{Kristall}/e = 26 \text{ eV}$ und der Kristall befindet sich in einem näherungsweise feldfreien Raum, wie aus Abb. 3.9 ersichtlich ist. Auf die Bestimmung der optimalen Streuenergie wird in Kapitel 4.2 näher eingegangen.

Sowohl in der Simulation der dispersiven- als auch in der nichtdispersiven Ebene ist erkennbar, dass die Trajektorien der Elektronen am Kristallort nicht immer parallel zur optischen Achse liegen. Eine Abweichung achsenparallelen Einfall entspricht einer Abweichung des Streuwinkels in der Streuebene (nichtdispersiv) und des azimuthalen Winkels in der dispersiven Ebene. Einerseits variieren die mittleren Einfallswinkel wenn die Strahlen von unterschiedlichen Startpositionen miteinander verglichen werden (verschiedene Farben in der Simulation), andererseits variiert auch der Einfallswinkel von Elektronen innerhalb eines Strahlenbündels (durch verschiedene Startwinkel am Analysator, gleiche Farbe in der Simulation). Die Winkelabweichung in der *dispersiven* Ebene beträgt maximal etwa $\Delta\phi \simeq \pm 4^\circ$ zwischen den Strahlen verschiedener Farbe und etwa $\Delta\phi \simeq \pm 1^\circ$ innerhalb eines Strahls einer Farbe. Dies führt zu geringfügig unterschiedlichen Asymmetriefunktionen bei unterschiedlichen Datenpunkten (etwa 10% Unterschied zwischen der Mitte des Bildes und dem Rand, zusätzlich zu der Änderung der Asymmetriefunktion bedingt durch die Energievariation) und zu einer geringfügigen

Mittelung der Asymmetriefunktion über einen kleinen Bereich (siehe z.B. Abb. 2.13) innerhalb eines Datenpunktes. Die Winkelabweichung in der *nichtdispersiven* Ebene beträgt maximal etwa $\Delta\Theta \simeq \pm 5^\circ$ zwischen den Strahlen verschiedener Farbe und etwa $\Delta\Theta \simeq \pm 1,5^\circ$ innerhalb eines Strahls einer Farbe. Die Variation der Asymmetriefunktion mit dem Einfallswinkel ist in der kinematischen Näherung in Abb. 2.14 dargestellt. Durch eine Änderung des Einfallswinkels um $\pm 5^\circ$ erwartet man, wie in rot eingezeichnet, eine Verringerung der Asymmetriefunktion auf den halben Wert von der Mitte des Bildes zum Randbereich. Durch die Mittelung innerhalb eines Datenpunktes ($\Delta\Theta \simeq 1,5^\circ$) wird der Maximalwert der Asymmetriefunktion reduziert.

3.2.2 Design

Der Halbkugelanalysator ist an der Stelle der Austrittsöffnung mit einem CF-100 Flansch ausgestattet, an den unter Normalbetrieb direkt ein Elektronendetektor, z.B. ein Multiplier angeschlossen ist. Bei diesem alten Modell erfolgt die Kontaktierung der Linsenelemente und der beiden Halbkugeln ebenfalls über diesen Flansch. Nach Entfernen des Multipliers wurde die Spannungsversorgung der Linsen und Halbkugeln neu verlegt, an der Innenseite des Rohransatzes auf der Vakuumseite entlang, um dann über ein CF-100 Ringelement, in das eine CF-16 Durchführung eingelassen ist, ausgekoppelt zu werden. Um den Spindetektor von der Hauptkammer abtrennen zu können wurde hinter dem CF-100 Ring ein CF-100 Plattenventil aufgebaut, das pneumatisch betrieben ist.

Zwischen der Austrittsebene des Analysators und dem Ventil befindet sich der erste Stapel Elektroden, wie bereits in der Simulation zu erkennen ist. Die längeren Rohrstücke haben einen Innendurchmesser von 72 mm, die Platten haben verschiedene Innendurchmesser, siehe technische Zeichnung im Anhang. An die Elektroden-Rohrstücke sind Ringe angepunktet, die denselben Außendurchmesser wie die Platten, 92 mm, haben. Der Lochkreis von 84 mm weist je 6 Bohrungen mit dem Durchmesser 6 mm auf. In jede dieser Bohrungen wird eine Isolationskeramik mit breitem Kragen eingesetzt, die nächste Platte wird mit eingesetzter Keramik darüber gestapelt etc. Die letzte Platte hat je 3 Gewinde auf demselben Teilkreis, sodass der Stapel zusammengeschaubt werden kann. Die Kontaktierung der einzelnen Elektroden erfolgt über M2 Madenschrauben, die in jede Platte (oder Ring) geschraubt werden, mit Leitsilber fixiert, und auf der anderen Seite auf 1 mm Durchmesser abgedreht sind. Hierüber lassen sich passende Goldstecker streifen, an denen Leitungen befestigt werden können. Zur Isolation wird der Goldstecker mit einer Keramik umhüllt. Die elektrischen Durchführungen zur Kontaktierung des ersten Stapels befinden sich auf dem bereits erwähnten CF-100 Ringelement. Zur Befestigung und isolierten Aufhängung der Elektrodenstapel wird an die Innenwand des CF-100 Rohrs ein Haltering mit 8 Madenschrauben über 4 Klemmklotzchen festgeklemmt. Der Ring mit den Klötzchen ist genau in das CF-100-Rohr eingepasst. Er hat 3 Gewinde auf dem bereits bekannten Teilkreis. Der Elektrodensta-

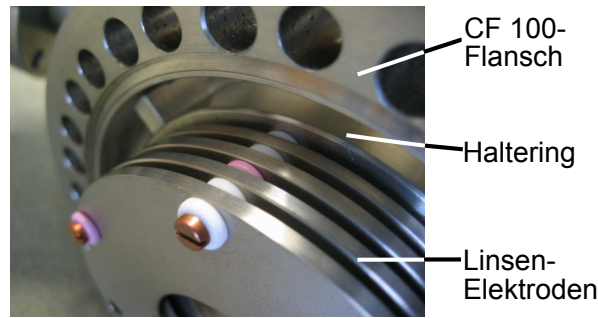


Abbildung 3.11: Detailfoto des Designs der Elektronenlinsen. Zu sehen ist ein Stapel Elektroden, der mit einem Haltering verschraubt ist. Der Haltering ist über 4 Klötzchen in dem CF-100 Außenrohr des Spinfilters mit Madenschrauben eingeklemmt. Die Elektroden sind voneinander und von der Kammererde durch Keramiken (weiß) isoliert.

pel kann hier durch die 3 verbliebenen Bohrungen verschraubt werden und ist durch weitere Keramiken zwischen dem Stapel und dem Haltering von der Kammererde isoliert. Ein Detailfoto der Verschraubung ist in Abb. 3.11 gezeigt. Zur Abschirmung des Kammerinneren gegen magnetische Störfelder von außen wird über die Halteringe eine vierfach geschlitzte μ -Metallabschirmung gestreift, die eng an der Wand des CF-100 Rohrs anliegt.

Das Herzstück des Spinfilters ist ein Topf mit 4 CF-100 Anschlüssen, in den die Elektronen nach Passage des Ventils eintreten. In dem Topf sind zwei weitere Stapel von Elektroden enthalten. Sie sind auf Gehrung geschnitten, also so zusammengesetzt dass zwischen ihnen ein Winkel von 90° entsteht. Die Verschraubung der Elektroden ist hier ebenso gelöst wie in dem ersten Elektrodenstapel. Die elektrischen Durchführungen zur Kontaktierung führen über einen freien CF-35 Flansch des Topfes nach außen.

In dem auf Gehrung geschnittenen Rohrstück, wo beide Elektrodenstapel zusammenlaufen, ist der Streukristall so angebracht, dass seine Oberfläche genau in dem Scheitelpunkt sitzt. Die Elektronen können also unter 90° an dem W(100)-Kristall gestreut werden und bewegen sich auch nach der elastischen Streuung weiter zentrisch in der Elektronenoptik. Der Kristall ist aus Montagegründen auf einer kardanischen Halterung aufgebaut, er kann in zwei Ebenen verkippt und in Richtung der Kristallnormalen vor- und zurück bewegt werden. Weitere Details zu der Konstruktion des Kristallhalters sind im Abschnitt 3.2.3 zu finden. In Abb. 3.12 ist oben die Justage des montierten Spinfilters mit dem Topf zu sehen. Im unteren Teil der Abbildung ist die darüber gestreifte μ -Metallabschirmung zu sehen.

Hinter dem CF-100 Topf ist ein CF-100 Rohr angeschraubt, in dem ein vierter Stapel Elektroden und an dessen Ende der Delayline Detektor befestigt ist. Der Delayline Detektor besteht im Wesentlichen aus einem Stapel von zwei Multichannelplates, hinter dem das ortsauflösende Element, der Mäander angebracht ist (siehe Kap. 3.2.4).

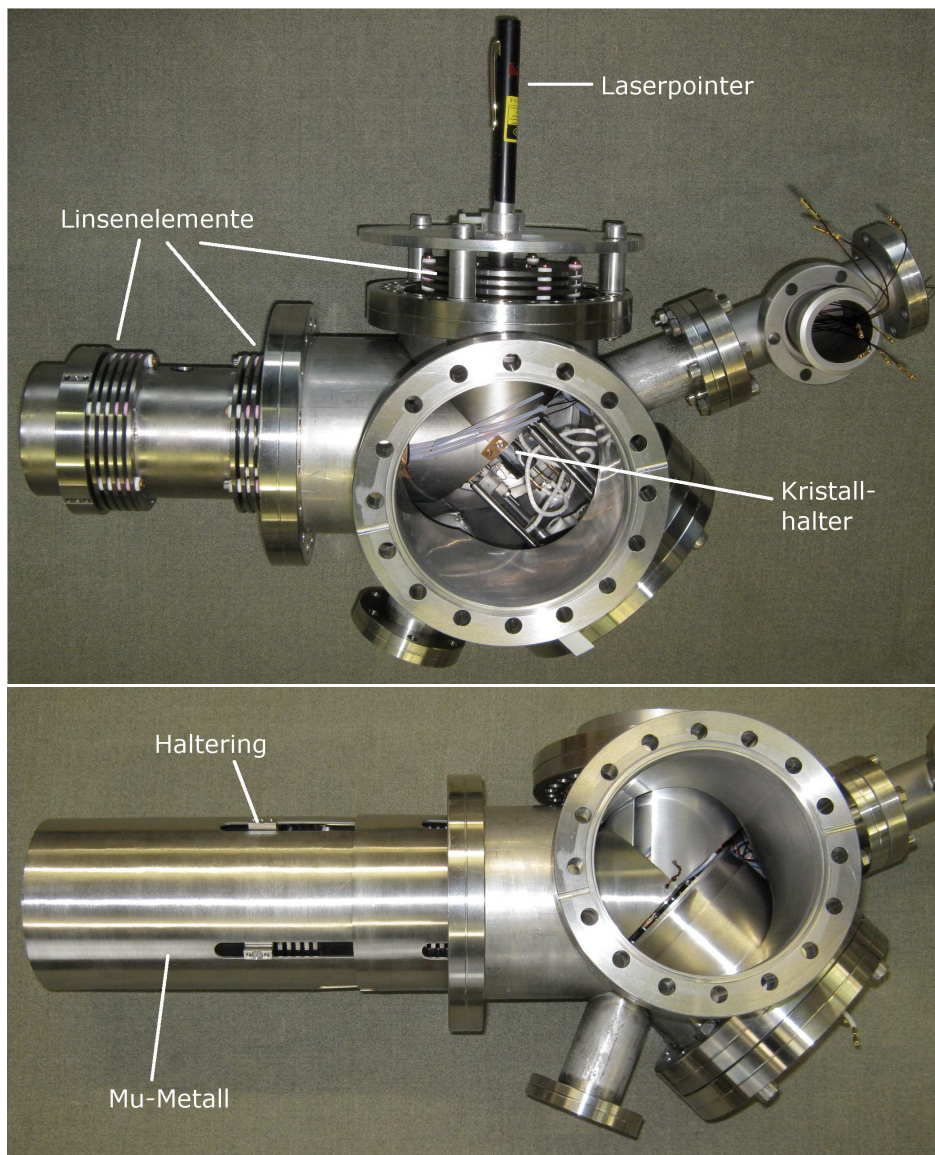


Abbildung 3.12: Fotografien des Spinfilters. *Oben:* Die Linsenelemente sind im Topf mit Halteringen verschraubt und durch Keramikisolatoren voneinander getrennt. Der Streukristall mit dem kardanischen Halter kann durch den mittleren offenen Flansch von der Seite gesehen werden. Die Justage des Kristalls wird mit einem Laserstrahl (Laserpointer) vorgenommen. *Unten:* Nach der Justage wurde die μ -Metall Verkleidung über die Halteringe gestreift. Im linken Bildteil ist ein freiliegender Haltering im Schlitz der μ -Metall Abschirmung zu sehen.

Vor dem Multichannelplate-Stapel ist ein Rohrelement mit Außendurchmesser 44 mm und Innendurchmesser 40 mm verschraubt, das in die letzte Elektrode der vorher beschriebenen Optik eintauchen kann. Dadurch werden Feldverzerrungen vermieden. Der Delayline-Detektor ist detaillierter in Kapitel 3.2.4 beschrieben. Er sitzt auf einem CF-100 Flansch, der den Abschluss des Spinfilters bildet.

Von der Spindetektorkammer gibt es einen Bypass zur Hauptkammer, der mit einem Ventil verschlossen werden kann. Der freie CF-100 Flansch des Topfes wird zum Pumpen des Spinfilters durch eine Ionengetterpumpe und eine wassergekühlte Titansublimationspumpe genutzt. Werden beide Ventile zur Hauptkammer geschlossen, so kann dieses Pumpensystem den Druck in dem Spinfilter im mittleren 10^{-10} mbar Bereich halten. Dies ist wichtig um eine Kontamination des Streukristalls zu vermeiden, beispielsweise wenn die Probe in der Hauptkammer präpariert wird, wobei durchaus ein Druckanstieg auf 10^{-7} mbar auftreten kann.

3.2.3 Streukristall

Die Montage des Spinfilter-Kristalls ist anhand Abb. 3.13 zu erkennen. Der W(100) Spinfilter-Kristall (1) mit einem Durchmesser von 10 mm und einer Dicke von 3 mm ist zur Erleichterung der Montage mit einer kardanischen Halterung auf einem CF-100 Blindflansch befestigt. Zwei 84 mm lange Stangen (2) mit Durchmesser 6 mm tragen den kardanischen Aufbau. Sie sind über Keramikisolatoren isoliert montiert. Die beiden Stangen sind über einen äußeren Ring (3) miteinander verbunden, der um die Verbindungsachse drehbar ist. In dem Ring ist auf einer der beiden freien Seiten eine konische Vertiefung eingelassen, in die genau eine Kugel am Ende eines dritten Stabes (4) passt. Die Kugel wird im Konus mit einem Riemen aus Cuprodur, CuNi_2Si , befestigt. Das andere Ende des dritten Stabes verjüngt sich in ein M5-Gewinde, das in die Grundplatte des Aufbaus geschraubt und mit einer Mutter fixiert wird. Mit dem Heraus- oder Hineinschrauben des dritten Stabes kann die Verkipfung des äußeren Ringes eingestellt werden. Der äußere Ring ist über eine Achse, die senkrecht zu seiner Drehachse liegt, mit dem inneren Ring (5), in dem der Streukristall befestigt ist, verbunden. Mit einem vierten Stab (6) und derselben Technik wie bei dem dritten Stab, kann dieser innere Ring senkrecht zum äußeren verkippt werden. Die beiden Haltestangen können in der Höhe variiert werden. Somit sind ex situ 3 Freiheitsgrade der Bewegung gewährleistet, Verkipfung in zwei Ebenen und Translation in Richtung der Kristallnormalen.

Der innere Ring (5) wurde aus Molybdän gefertigt, siehe auch Detailaufnahme Abb. 3.14. Der W(100)-Kristall hat auf zwei Außenseiten Durchgangsbohrungen des Durchmessers 0,6 mm, durch die zwei Wolframdrähte (7) mit Durchmesser 0,5 mm gesteckt werden. Diese Stäbe werden mit Molybdän-Klötzchen und Molybdän-Schrauben auf dem inneren Ring befestigt. Zwischen den Durchgangsbohrungen ist auf beiden Seiten eine Bohrung der Tiefe 0,6 mm und \varnothing 0,6 mm eingelassen, in die je ein kürzerer Wolframstab (8) gesteckt und ebenfalls an den Molybdän-Klötzchen festgeklemmt wird. Der

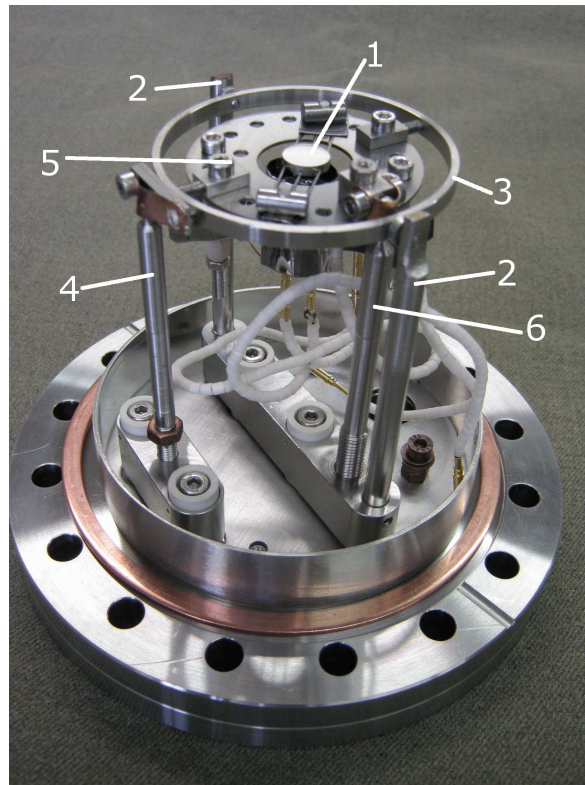


Abbildung 3.13: Fotografie des Kristallhalters. Der $W(100)$ -Kristall ist auf der kardani-
schen Halterung isoliert auf einem CF-100 Flansch befestigt. Er kann
über zwei Achsen gekippt und entlang der Kristallnormalen auf- und
ab bewegt werden. Unterhalb des Kristalls ist ein Filament angebracht.
Der Kristall kann mittels Elektronenstoßheizung auf bis zu 2300 K er-
hitzt werden. Beschreibung der Nummern siehe Text.

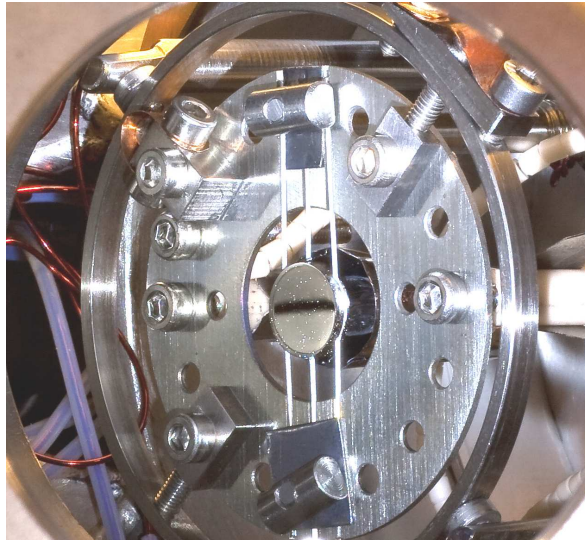


Abbildung 3.14: Fotografie des montierten Kristallhalters mit dem W(100)-Kristall (1) im Zentrum, von der Position des DLD gesehen. Auf der Kristalloberfläche ist als dunkler Streifen die Reflexion des 1 mm Austrittsspalt des Energieanalysators sichtbar. Der Kristall ist mit Wolframdrähten (7 und 8) am inneren Ring (5) befestigt.

Kristall kann nicht auf dem inneren Ring verrutschen. Diese Befestigung ist allerdings nicht perfekt, da sich die kurzen Wolfram-Stäbe beim Heizen des Kristalls (nächster Absatz) verbiegen und der Kristall sich dabei bewegen kann. Es wurde zusätzlich ein dünner Wolframdraht zur Stütze um die Stäbe und den inneren Ring gewickelt. Unterhalb des Kristalls ist im Abstand von 2 mm ein Heizdraht (Wolfram) mit einer Maximalleistung von $P = 50\text{W}$ montiert. Der Kristallhalter mit Justageeinheit ist genauso wie der Spinfilter mit einer μ -Metall Ummantelung verkleidet, um äußere Magnetfelder abzuschirmen. In Abb. 3.13 ist lediglich das Bodenteil erkennbar.

In dem zusammengebauten Spinfilter wurde der Streukristall ex situ mit einem Laser justiert, wie auch in Abb. 3.12, oberes Bild, zu sehen ist. Der Spinfilter wurde dann mit dem Halbkugelanalysator verschraubt. Bei einem Blick durch den offenen DLD-Flansch kann direkt der Streukristall gesehen werden, wie Abb. 3.14 im Detail zeigt. Auf dem Streukristall ist ein schwarzer Streifen zu sehen. Dies ist die Reflexion des 1mm Austrittsspalt des Halbkugelanalysators. Dadurch, dass sie zentrisch auf dem Kristall zu sehen ist kann geschlossen werden, dass der Streukristall optisch ausreichend gut justiert wurde. Elektronenoptisch ist trotz μ -Metallabschirmung eine Trajektorienverzerrung durch magnetische Restfelder möglich.

Zur Präparation wird der Kristall auf zwei unterschiedliche Temperaturen durch Elektronenstoß geheizt. Bei der sogenannten Sauerstoff-Behandlung wird eine Temperatur von 1500 K für 10 s gewählt. Dies entspricht der Desorptionstemperatur von CO. Dabei beträgt die Hochspannung des Kristalls 500 V und der Emissionsstrom 60 mA.

Die Heizleistung ist also 30 W. Während dieser Behandlung befindet sich der Kristall in einer Sauerstoffumgebung von etwa $5 \cdot 10^{-8}$ mbar. Der Kristall wird typischerweise während eines Zyklus' 20 Mal geheizt, zwischen den Heizperioden wird jeweils eine Minute gewartet um Reaktionsprodukte wie CO abzupumpen. Die Zyklenserie der Sauerstoffbehandlung wird nach dem Ausheizen der Kammer etwa 3 mal durchgeführt, ebenso wie zu Beginn eines Messtages. Sie dient dazu, Kohlenstoff, der sich in den Kristall einlagert, an die Oberfläche zu transportieren und zu oxidieren. Zum Abschluss wird das verbleibende Wolframoxid mit einem Hochtemperatur-Flash von 2300 K von der Oberfläche entfernt. Die Spannungseinstellung für diese Prozedur beträgt 1000 V und der Emissionsstrom 250 mA, entsprechend beträgt die Heizleistung 250 W. Der Flash dauert nur 6 s, um die thermische Desorption von Restgas von den Kammerwänden zu minimieren.

Nach der Präparation des Kristalls kann mit dem Delayline-Detektor eine relativ hohe Zählrate nachgewiesen werden, und das jeweilige Bild erscheint schärfer, was auf weniger inelastische Streuprozesse am Kristall hindeutet. Die Zählrate nimmt aber aufgrund der nicht perfekten Vakuumbedingungen innerhalb von einer Stunde um etwa ein Drittel ab. Um einen weitgehend konstanten Reinheitsgrad des Kristall zu erhalten, wurde der Kristall vor jeder Messung, die etwa 15 min dauert, auf 1500 K für 10 s geflasht, um CO, H₂O und andere Restgase zu beseitigen.

3.2.4 Delayline Detektor

Der Delayline Detektor (DLD) (Firma Surface Concept GmbH) ist ein ortsauflösender Elektronenzählratendetektor. Er besteht aus einer Anordnung von zwei Multichannel Plates zur Verstärkung der eintreffenden Elektronenladung um bis zu 10^7 und einer Ausleseinheit in Form zweier gekreuzter Mäander, auf die die Elektronenwolke beschleunigt wird, siehe Abb. 3.15. Durch das Auftreffen der Elektronenwolke auf dem x-Mäander wird dort eine elektrische Pulsgruppe influenziert (kapazitive Kopplung), die zu beiden Enden des Mäanders abfließt. Je nach Auftreffpunkt auf dem Mäander entsteht eine unterschiedlich große Laufzeitdifferenz Δt_x . Durch Messung von Δt_x kann die Position des Auftreffortes entlang der x-Koordinate festgelegt werden. Um ein zweidimensionales Bild der Auftrefforte erstellen zu können, ist ein zweiter y-Mäander um 90° verdreht zu dem x-Mäander aufgebaut. Durch die Messung der beiden Laufzeitunterschiede Δt_x und Δt_y kann der Auftreffort auf einem zweidimensionalen Raster mit einer Genauigkeit von etwa 50 μm bestimmt werden. Der Durchmesser der runden effektiven Detektorfläche beträgt 40 mm. Dadurch ergeben sich ca. 800 auflösbare 'Pixel' entlang der Bilddiagonalen. Die Elektronen werden mit einer Hochspannung zwischen den Multichannelplates und dem Mäander beschleunigt. Das hintere Channelplate und die Anode sind über einen 100 M Ω -Widerstand verbunden, der Spannungsabfall zwischen dem vorderen Channelplate und der Anode beträgt 2,7 kV, wobei 10%, also 270 Ω , über den 100 M Ω -Widerstand abfallen. Die Betriebsspannung (2,7 kV) stieg im

Lauf von einem Jahr um etwa 200V aufgrund von Alterungserscheinungen in den MCPs an. Delayline Detektoren zählen einzelne Elektronen und arbeiten deshalb linear, auch bei geringer Zählrate. Die Maximalzählrate des Detektors ist durch den einsetzenden Pulsüberlapp limitiert. Sie liegt zum jetzigen Zeitpunkt bei etwa $2 \cdot 10^6$ 1/s. Im Delayline Detektor ist jeder Ausgang der Mäander verbunden mit einem schnellen Verstärker, gefolgt von einem Constant Fraction Diskriminator zur Pulsformung und Diskriminierung, idealerweise ohne 'Amplitude walk' (Amplitude walk = Verzögerung des Triggerzeitpunktes bei fester Triggerspannung durch unterschiedlich hohe Amplituden des Signals), auch bei variierenden Pulshöhen. Ein nachgeschalteter Time-to-Digital Converter dient als Stopuhr für Eingangszeiten der Signale.

Im PC wird mithilfe der Bilderfassungs-Software aus den gemessenen Eingangszeiten ein zweidimensionales Bild erstellt. Ein schneller Histogramm-Speicher ermöglicht eine hohe Datentransferrate nach der Detektion und eine Realzeit-Bilddarstellung. Aufgrund einer unterschiedlichen Länge der beiden Mäander, die zu unterschiedlichen Wellenwiderständen führt, erscheint das am PC dargestellte Bild als Ellipse. Dies kann mit herkömmlichen Bildverarbeitungsprogrammen wie dem hier verwendeten Image J behoben werden.

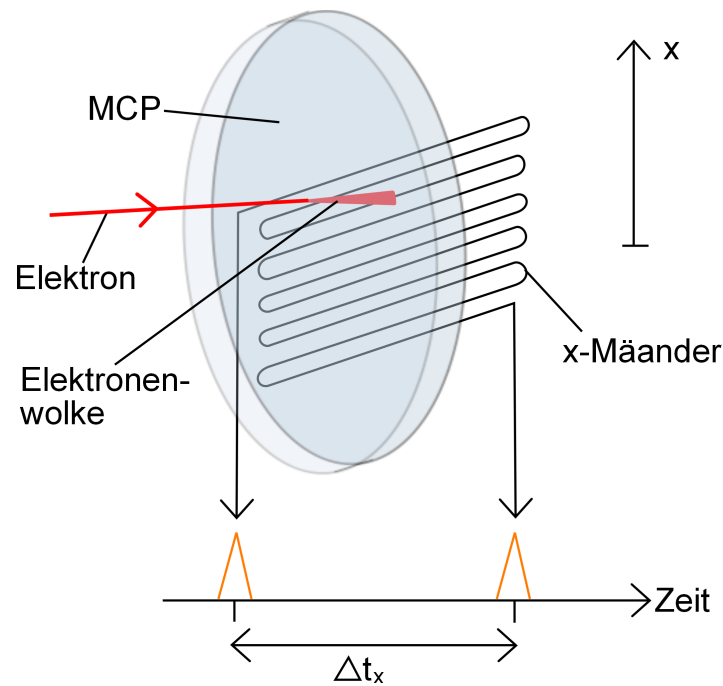


Abbildung 3.15: Funktionsprinzip des Delayline Detektors. Das einfallende Elektron trifft auf zwei Multichannel Plates (MCP) und wird um bis zu 10^7 verstärkt. Die entstandene Elektronenwolke wird zu der mäanderförmigen Anode beschleunigt. Dort wird eine elektromagnetische Pulsgruppe influenziert, die zu beiden Seiten des Leiters (= Delayline) abfließt. Aus dem Laufzeitunterschied Δt_x kann die genaue Eintreffposition entlang x bestimmt werden. Im Experiment wird ein 2D-DLD verwendet. Es gibt dann zwei Mäander, die um 90° verdreht aufgebaut sind.

4 Messverfahren

Das Vielkanal-Spinpolarimeter kann in verschiedenen Messmodi spinaufgelöst oder spinintegriert betrieben werden. Für einen Einkanal-Intensitätsscan wird die 1 mm Austrittsblende des Energiefilters verwendet und durch ein Durchfahren der Analysatorenergie eine einkanalige Gesamtintensität in Abhängigkeit der kinetischen Energie der Photoelektronen dargestellt. Im Vielkanal-Modus kann entweder ein Snapshot aufgenommen werden (das bedeutet, die Spannungen der inneren und äußeren Kugel und der Transferoptik werden festgehalten und der Austrittsspalt des Energieanalysators geöffnet, wodurch das Intervall $\Delta E = 0,1 E_{pass}$ zur Analyse genutzt werden kann) oder ein 'Sweep' gefahren werden (für einen Sweep werden mehrere Snapshots aufgenommen, wobei zwischen den einzelnen Bildern die Kugelspannungen und die Spannungen der Transferoptik variiert werden (das Energiespektrum der Probe wird durchgefahren)). Während der bisherigen Messungen wurde stets ein einkanaliger Intensitätsscan durchgeführt, um die Qualität der Probe hinsichtlich einer Oxidation zu überprüfen. Für die spinaufgelösten Messungen wurde der Vielkanal-Snapshotmodus verwendet, wobei die Aquisition einer zweidimensionalen Verteilung der Elektronen-Spinpolarisation in guter Qualität mit 960 Datenpunkten lediglich 30 min dauerte. Beide Verfahren werden in diesem Kapitel erläutert.

4.1 Einkanaliger Intensitätsscan

Das integrale Messverfahren stellt das Basismessverfahren dar, um die energetische Lage von Intensitätsmaxima im UPS-Spektrum einer beliebigen Probe innerhalb kurzer Zeit zu bestimmen. Für diesen Messmodus wird am Spektrometer der Ein- und Austrittsspalt zu je 1 mm gewählt. Aus dem Energiespektrum in der Austrittsebene des Analysators wird von der Blende ein Energieintervall von $\Delta E = 290$ meV (nach Gleichung 3.4) pro Messpunkt ausgeschnitten. Die austretenden Elektronen werden von der Elektronenoptik des Spinfilters zum DLD transportiert. Die Spannung der beiden Halbkugeln und der Optik wird von dem PC durchgefahren und für jeden Messpunkt wird die integrale Zählrate des DLD ausgelesen. Wie in Kapitel 3.1.4 berechnet, ist die Winkelakzeptanz der Eintrittsoptik des Energieanalysators $\pm 10^\circ$. Aufgrund dieses großen Winkelbereichs wird in dem so aufgenommenen Spektrum über einen großen Bereich der Brillouinzone gemittelt. $\gamma_{max} = 10^\circ$ im Probenaustrittswinkel ist gleichbedeutend mit einem maximalen Wellenvektor von $k_{\parallel f} = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} E_{kin}} \sin \gamma \simeq 0,44 \text{ \AA}^{-1}$ bei der kinetischen Energie der Elektronen 0,4 eV unterhalb der Fermikante. Die halbe

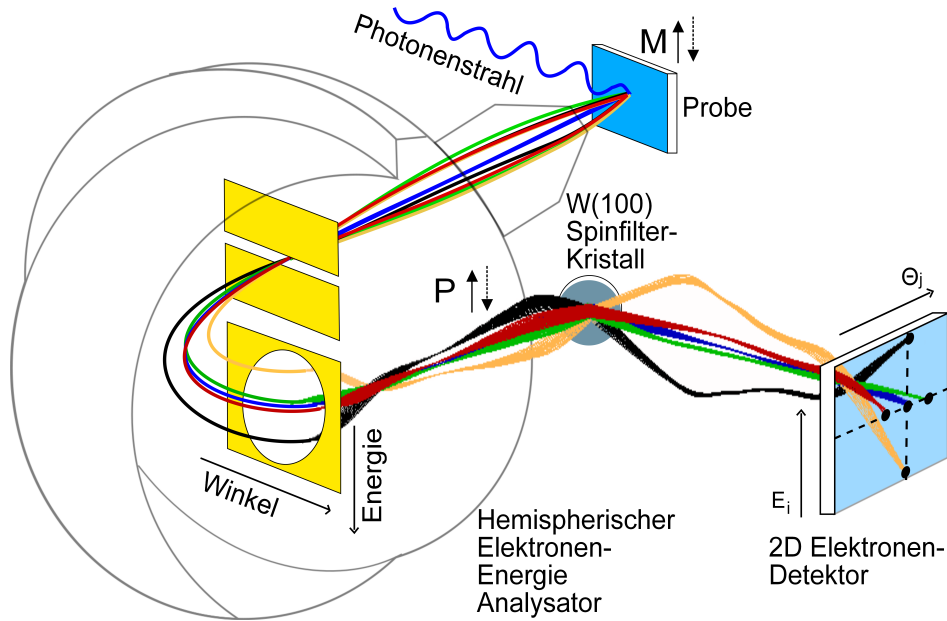


Abbildung 4.1: Schema des Energieanalysators mit Vielkanal-Spinpolarimeter. Das Bündel der Elektronentrajektorien vom Energieanalysator zum DLD wurde unter Annahme einer perfekten Reflexion am Kristall simuliert. Die elektronenoptischen Linsen des Spinpolarimeters (nicht sichtbar) transferieren die laterale Energieverteilung von der Austrittsöffnung des Energieanalysators zu dem zweidimensionalen Elektronendetektor, unter impulserhaltender Reflexion am Streukristall. Die schwarzen, blauen und orangenen Trajektorien repräsentieren Elektronenbündel in der dispersiven Ebene, die roten, blauen und grünen Trajektorien in der nichtdispersiven Ebene. Die Elektronen sind in der dispersiven (nicht-dispersiven) Richtung entlang der E_i (Θ_j)-Achse separiert.

Brillouinzone von z.B. Fe(100) ist $k = \frac{2\pi}{2a_{Fe}} \simeq 1,1 \text{ \AA}^{-1}$ breit. Das bedeutet, bei der Messung mit einem Akzeptanzwinkel von $\pm 10^\circ$ wird über $\frac{0,44}{1,1} \cdot 100\% \simeq 40\%$ der Brillouinzone von Eisen gemittelt. Mit dem Easyspectra-Programm wird die Gesamtzählrate des Delayline-Detektors synchronisiert zur Erhöhung der Spannung der Linsen und Halbkugeln ausgelesen. Es wird die integrale Zählrate in Abhängigkeit der vom Spektrometer durchgelassenen kinetischen Energie dargestellt. Die Akkumulationszeit pro Messpunkt beträgt 1 s, was zu einer Gesamtlaufzeit von etwa 200 s bei einem typischen Spektrum führt. Es wurde typischerweise in einem Energieintervall von 10 eV mit einer Schrittweite von 5 meV gemessen. Ein Beispiel für ein integrales UPS-Spektrum ist in Abb. 5.2 gegeben.

4.2 Vielkanal-Spinsnapshot

Für den Modus des Vielkanal-Spinsnapshots wird der 0,5 mm Eintrittsspalt gewählt und das Austrittsfenster vollständig geöffnet. In der Austrittsebene des Spektrometers ist dann ein elektronenoptisches Bild vorhanden, an dessen einer Achse (dispersive Richtung) die Energie und an dessen anderer Achse (nichtdispersive Richtung) eine orts aufgelöste Darstellung der Probe zu finden ist. Mit einem modernen Halbkugelanalysator ist es möglich, auf die nichtdispersive Achse ein Intervall von Austrittswinkeln aus der Probe zu legen, die direkten Aufschluss über den k_{\parallel} -Vektor der elektronischen Bandstruktur der Probe liefert. Da der Spinfilter in Zukunft in diesem Modus betrieben werden soll, wird die nichtdispersive Achse im Folgenden als (reziproke) Winkelachse bezeichnet. Das reziproke Bild der Austrittsebene wird mithilfe der Elektronenoptik auf den Streukristall projiziert. Das gestreute Signal wird auf die Ebene des Delayline Detektors fokussiert, siehe Abb. 4.1. Die hier dargestellte Simulation zum Spinfilter ist in Kapitel 3.2.1 ausführlich diskutiert.

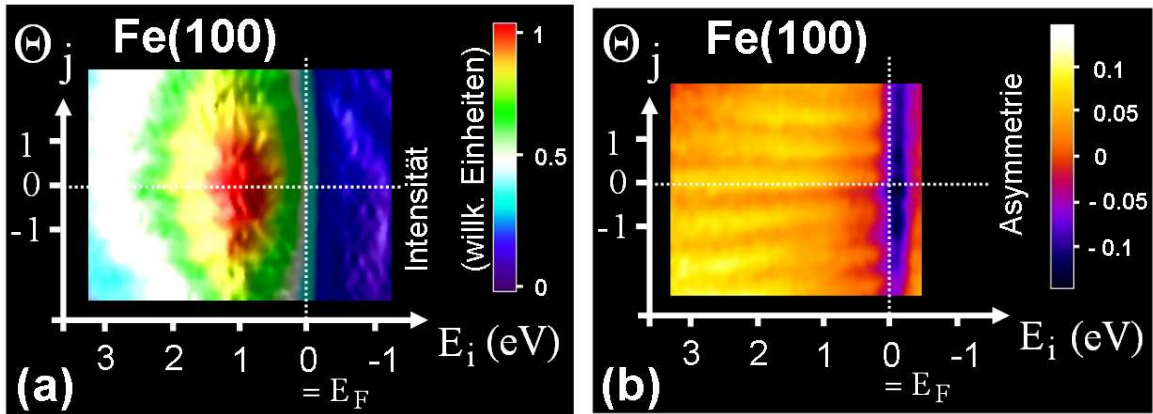


Abbildung 4.2: (a) Zweidimensionale Elektronenintensitäts-Verteilung im Austrittsfeld des Energieanalysators, abgebildet auf dem DLD hinter dem Streukristall. Die dispersive- und nichtdispersive Richtung ist mit E_i und Θ_j bezeichnet. Die Intensitätsverteilung ist als Falschfarbenkarte gezeigt und gehört zu einem Photoelektronenspektrum eines aufmagnetisierten Fe(100)-Films nahe der Fermikante (für $\hbar\omega = 21,23$ eV und den Emissionsbereich um 0°). (b) 2D Asymmetrie-Muster von Fe(100), das aus zwei Intensitäts-Verteilungen mit unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen nach Gl. 4.1 berechnet wurde. Es wurde eine lineare Untergrundkorrektur durchgeführt. Die Intensitätsvariation in Abhängigkeit des Streuwinkels wurde nicht korrigiert.

In Abb. 4.2a ist ein Beispiel eines Intensitätsbildes von Fe(100) am DLD gezeigt. Die mittlere kinetische Energie war 25,0 eV, siehe Kapitel 3.1.4. Die dispersive- und nichtdispersive Richtung sind mit den Achsen E_i und Θ_j bezeichnet, wobei i und j die auflösbaren Bildpunkte angeben. Der Intensitätsabfall auf der rechten Seite ist die

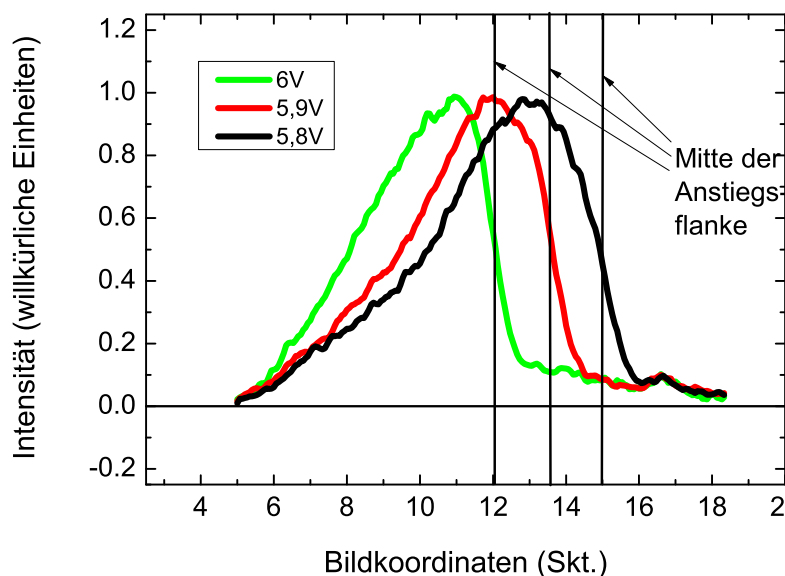


Abbildung 4.3: Methode der Energiekalibrierung. Es wurden drei Spektren mit verschiedener Steuerspannung aufgenommen, um eine Beziehung zwischen der analysierten Energie und der Bildkoordinate im Bild des DLD auf der dispersiven Achse herstellen zu können.

Fermikante (markiert durch die weiße gepunktete Linie). Der leicht gebogene Rand auf der linken Bildseite spiegelt die Begrenzung des durchgelassenen Energieintervalls durch die Transferoptik wieder. Das horizontale Streifenmuster stammt von einem feinmaschigen Gitter im Strahlengang, bei den Linsen T3 und T4 (siehe Kapitel 3.1.4). Die Auswertung der Fe(100)-Messung ist in Kap. 5.2.1 zu finden.

Energiekalibrierung Die Kalibrierung der Energieachse erfolgte über eine Variation der Steuerspannung am PC, siehe Abb. 4.3. Es wurde für drei verschiedene Steuerspannungen ein Linescan entlang der dispersiven Achse durch das Intensitätsbild am DLD gelegt. Da über die Steuerspannung die mittlere analysierte (kinetische) Energie der Elektronen aus der Probe verändert wird, wird das Energiespektrum mit abnehmender Steuerspannung zu größeren Bindungsenergien verschoben. Aus der Position der Fermikante (der steile Anstieg auf der rechten Seite) erhält man eine Beziehung zwischen Bildkoordinate und Bindungsenergie, in diesem Fall: 1 Skalenteil der Bildkoordinate entspricht 0,301 eV (100 mV Steuerspannung entsprechen 0,446 eV analysierter Energie). Da es bei den vielen Spannungen, die am Spinfilter jeden Tag wieder neu hochgefahren werden müssen, zu Abweichungen zwischen den Messtagen kommen kann, wurde zu Beginn jeden Messtages die Energiekalibrierung durchgeführt.

Auflösung in der Winkelrichtung Θ_j Die Anzahl der mit dem DLD auflösbaren Streifen stellt ein direktes Maß für die Auflösung in der Winkelrichtung in dem Bild dar. In einem DLD-Bild erscheinen insgesamt bis zu 16 helle und 16 dunkle Streifen. Die Begrenzung ihrer Anzahl ist dabei durch die Ausleuchtung des Netzes bei T3/T4 gegeben. In Abb. 4.4 ist im Inset ein DLD-Bild zu sehen, in dem die Streifen mit gutem Kontrast erscheinen. Ein Linescan quer durch die Streifen, wie mit der grünen Linie angedeutet und im großen Bild dargestellt, zeigt, dass in jedem Streifen 2 Punkte aufgelöst werden können. Die Breite der schärfsten auflösbaren Struktur (Anstiegskante) beträgt 0,2 Skalenteile der Bildkoordinate, während ein Streifen 0,4 Skalenteile breit ist. Das entspricht einer Gesamtauflösung von mindestens $2 \cdot 16 \cdot 2 = 64$ Punkten in der Winkelrichtung. Die Breite der Anstiegskante wurde berechnet, indem die x-Koordinaten von 80% und 20% der Höhe des Peaks (relativ zum Minimum) voneinander subtrahiert wurden.

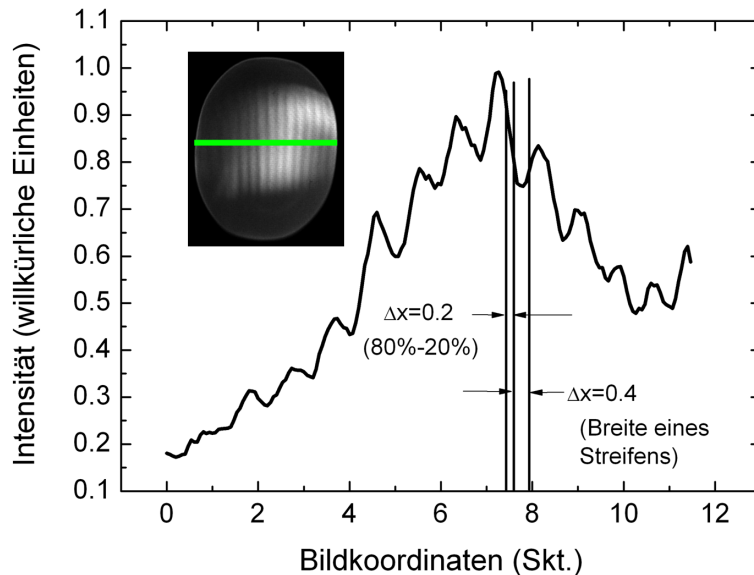


Abbildung 4.4: Linescan entlang der nichtdispersiven Richtung. In einem Bild sind maximal 16 helle und 16 dunkle Streifen sichtbar. In einem Streifen können 2 Punkte voneinander unterschieden werden, da die schärfste Struktur eine Breite von $\Delta x = 0,2$ Skalenteile der Bildkoordinate hat. Die Breite der schärfsten Struktur (Anstiegskante) wurde berechnet, indem die x-Koordinate von 80% und 20% der Höhe des Peaks (relativ zum Minimum) voneinander abgezogen wurden. Dies führt zu einer Auflösung in nichtdispersiver Richtung von 64 Punkten.

Energieauflösung Die Breite des Energiebandes an der Austrittsöffnung des Analysators beträgt 10% der Durchlassenergie. Für alle vorgestellten Spinmessungen wurde

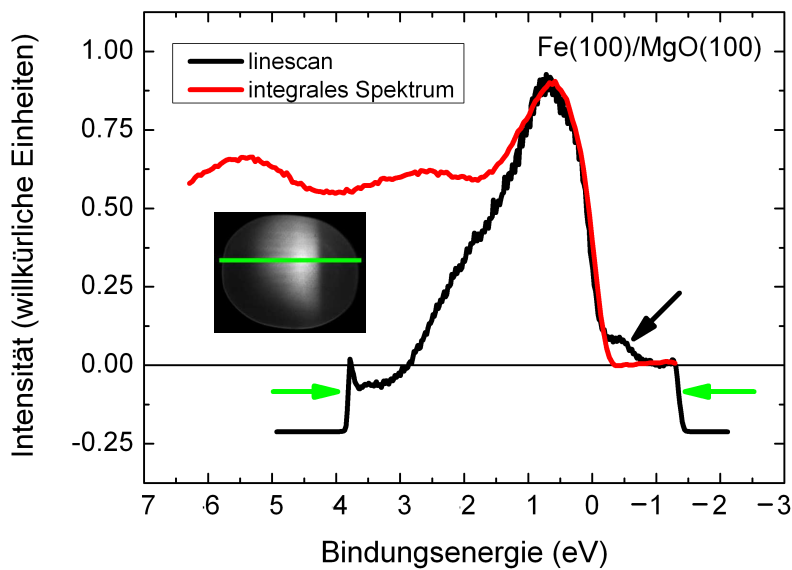


Abbildung 4.5: Vergleich zwischen einem integralen UPS-Spektrum von Fe(100) und dem Linescan durch ein DLD-Bild entlang der Energiedispersiven. *Inset*: DLD-Intensitätsbild, der Linescan verläuft entlang der grünen Linie. Im Linescan ist der Rand des empfindlichen Detektorbereichs, markiert durch die beiden grünen Pfeile, zu erkennen. Mithilfe des Linescans der dispersiven Richtung kann die Energieauflösung des Experiments zu 0,180 eV bestimmt werden. Insgesamt kann ein Intervall von 3eV simultan genutzt werden. Das entspricht 17 auflösbaren Punkten in dispersiver Richtung.

eine Durchlassenergie von 50eV verwendet, was zu einer Energiebreite am Austritt von 5eV führt. Davon konnten für die Spinfilterung 3eV verwendet werden. In Abb. 4.5 ist der Vergleich zwischen einem integralen UPS-Spektrum von Fe(100) und dem Linescan durch ein DLD-Bild entlang der energiedispersiven Richtung gezeigt.

Im Inset ist das DLD-Intensitätsbild gezeigt, aus dem der Linescan entlang der grünen Linie entnommen wurde. Die beiden Kurven stimmen zwischen $E_B = 2$ eV und $E_B = -1$ eV gut überein, woraus sich folgern lässt, dass dieser Bereich des Spektrums zur Spinanalyse nutzbar ist. Im Linescan ist deutlich der Rand des empfindlichen Detektorbereichs, markiert durch die beiden grünen Pfeile, zu erkennen. Ein von dem integralen Spektrum abweichendes Feature ist ein kleiner Fuß des Spektrums bei $E_B = 0,5$ eV (schwarzer Pfeil). Diese Signatur ist in jedem Intensitätsbild zu erkennen und erscheint aufgrund einer defekten Stelle auf dem Multichannelplate. Solche Stellen entstehen durch kurzzeitige Überbelichtung des MCP. Diese Signatur ist ein Artefakt im Spektrum und kann durch einen Abgleich mit einem Graubild korrigiert werden. Das Graubild wird durch lange, gleichmäßige Ausleuchtung des DLD erzeugt. Für einen

Graubildabgleich wird der Quotient aus dem betreffenden DLD-Bild und dem Graubild gebildet. So werden dauerhaft überbelichtete Stellen aus dem Bild entfernt. Ein Graubildabgleich wurde in der vorliegenden Arbeit nicht durchgeführt, da vor allem die Asymmetriebilder von Interesse sind, in denen das Feature nicht mehr auftaucht, da sich das Artefakt auf beide Teilspektren gleichermaßen auswirkt. Für das Asymmetriebild werden zwei Intensitätsbilder unterschiedlicher Vorzugsmagnetisierungsrichtungen nach Formel 4.1 verrechnet.

Mithilfe des Linescans entlang der dispersiven Richtung kann die Energieauflösung des Experiments bestimmt werden. Die schärfste Struktur, die in dem Spektrum abgebildet wird, ist die Fermikante. Der Fuß der Fermikante erscheint bei einer Bindungsenergie von $E_B = -0,2$ eV, die Schulter der Fermikante ist bei der Energie $E_B = 0,21$ eV zu finden. Die Auflösung wird wie bei der Winkelkoordinate auch, über die Differenz der x-Werte von 80% und 20% der Höhe der Schulter berechnet. Die gemessene Energieauflösung beträgt somit $\Delta E = 0,1169$ eV + $0,0836$ eV = $0,20$ eV. Da alle Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt wurden, wird die thermische Verbreiterung von $4k_B T = 100$ meV bei Raumtemperatur herausgerechnet. Die Auflösung der Messung unter Abzug der thermischen Verbreiterung beträgt $\Delta E_a = \sqrt{\Delta E^2 - \Delta E_t^2} = 180$ meV, was mit dem theoretischen Erwartungswert von $\Delta E_{theo} = 175$ meV nach Gleichung 3.4 gut übereinstimmt. Diese Energieauflösung entspricht einer Anzahl von $N_E = \frac{3}{0,2} = 15$ darstellbaren Energiepunkten bei Raumtemperatur im DLD-Bild. Zusammen mit den Winkelpunkten sind das $64 \cdot 15 = 960$ Datenpunkte, die parallel aufgenommen werden können.

Asymmetriebild Der Delayline Detektor registriert jedes Zählereignis in Abhängigkeit der Koordinaten E_i und Θ_j , was zu der Intensität I_{ij} führt. Um eine Asymmetrie messen zu können, wird die Probe in beide Vorzugsmagnetisierungsrichtungen aufmagnetisiert und es wird jeweils ein Intensitätsbild aufgenommen. Der Polarisationsvektor muß für die Spinmessung senkrecht auf der Streuebene stehen [Kes85]. Die beiden Intensitätsbilder werden pixelweise nach Gl. 4.1 zu einem Asymmetriebild verrechnet. Das Asymmetriebild des Elektronensignals der Fe(100)-Probe ist in Abb. 4.2b gezeigt. Die Asymmetrie von Fe(100) zeigt einen Nulldurchgang in der Nähe der Fermikante, die Auswertung ist in Kap. 5.2.1 zu finden. Für jeden Datenpunkt kann die Spinpolarisation als Produkt aus der gemessenen Asymmetrie A_{ij} und der reziproken Shermanfunktion S_{ij} errechnet werden:

$$P_{ij} = A_{ij} \cdot \frac{1}{S_{ij}} = \frac{I_{ij}^+ - I_{ij}^-}{I_{ij}^+ + I_{ij}^-} \cdot \frac{1}{S_{ij}} \quad (4.1)$$

wobei $I_{ij}^{+(-)}$ die Intensitäten in Pixel (i,j) für die zwei verschiedenen Magnetisierungsrichtungen sind und S_{ij} die energieabhängige Shermanfunktion ist. Da bei der Vielkanalmessung ein großes Elektronenenergie-Intervall simultan analysiert wird, muß bei der Umrechnung der gemessenen Asymmetrie in die Polarisation die Energieabhängig-

keit der Shermanfunktion (siehe Abb. 4.6 und nächster Abschnitt) berücksichtigt werden. Zum Vergleich der gemessenen Polarisation mit der Theorie wurde jeweils ein Linescan aus den Asymmetriebildern bei Θ_0 entnommen und die Asymmetrie in die Polarisation nach Gleichung 4.1 umgerechnet.

Die Intensitäten der Majoritätsladungsträger ($I_{i,0}^\uparrow$) und der Minoritätsladungsträger ($I_{i,0}^\downarrow$) bei Θ_0 ergeben sich aus:

$$I_{i,0}^{\uparrow(\downarrow)} = (1 \pm P_{i,0}) I_{tot,i,0}, \quad (4.2)$$

wobei $I_{tot,i,0}$ die spinintegrierte Zählrate ($= I_{i,0}^+ + I_{i,0}^-$) bei der Energie $E_{i,0}$ und $P_{i,0}$ die Polarisation nach Gleichung (4.1) ist.

Zweidimensionale Gütefunktion Die relevante Größe um die statistische Effizienz eines Polarimeters zum Ausdruck zu bringen, ist im Allgemeinen das sogenannte Figure of Merit (FoM). Es ist gegeben durch [Kes85]:

$$\text{FoM} = S^2 \frac{I}{I_0} \quad (4.3)$$

$\frac{I}{I_0}$ ist die Intensitätsantwort, also das Verhältnis aus der elastisch gestreuten und der einfallenden Intensität und S die Asymmetriefunktion (auch: Shermanfunktion). Das FoM ist ein Maß für die Zeit, die benötigt wird, um eine Spinpolarisationsmessung einer bestimmten statistische Sicherheit durchzuführen.

Alle kommerziellen Spinpolarisationsdetektoren basieren auf einem einkanaligen Detektionsprinzip und die meisten von ihnen sind charakterisiert durch ein sehr kleines FoM von $\simeq 10^{-4}$ [Yu07, Gay09, Hei78a, Gar86]. Diese Tatsache hat sich seit deren erster Entwicklung in den 1970er/80er Jahren kaum verändert. Es gibt allerdings in der letzten Zeit einige Ansätze um die Effizienz von Spindetektoren zu erhöhen, z.B. die Streuung an reinen oder sauerstoffpassivierten Eisen- und Kobaltdünnschichten [Win08, Oku08, Joz10], wodurch 1-2 Größenordnungen im FoM gewonnen werden. Die Präparation guter Schichten allerdings stellt eine große Herausforderung an den Experimentator dar.

Um die Effizienz des Vielkanal-Spinpolarimeters mit der Effizienz anderer Spindetektoren vergleichen zu können, wurde ein zweidimensionales Figure of Merit (FoM_{2D}) als Produkt des einkanaligen Figure of Merit (FoM_1) und der Anzahl der aufgelösten Datenpunkte im Vielkanalbetrieb (N) definiert:

$$\text{FoM}_{2D} = N \cdot \langle \text{FoM}_1 \rangle = N \cdot \left\langle S_{ij}^2 \cdot \frac{I_{ij}}{I_{ij,0}} \right\rangle \quad (4.4)$$

Dies ist gerechtfertigt unter der Vorstellung dass, um mit einem einkanaligen Spinpolarimeter dieselbe Informationsdichte zu erhalten wie bei einer Messung im Vielkanalbetrieb, die einkanalige Messung N mal durchgeführt werden muß. Zur Berechnung des einkanaligen FoM_1 des Spinpolarimeters muß die Energieabhängigkeit der eingehenden Größen berücksichtigt werden.

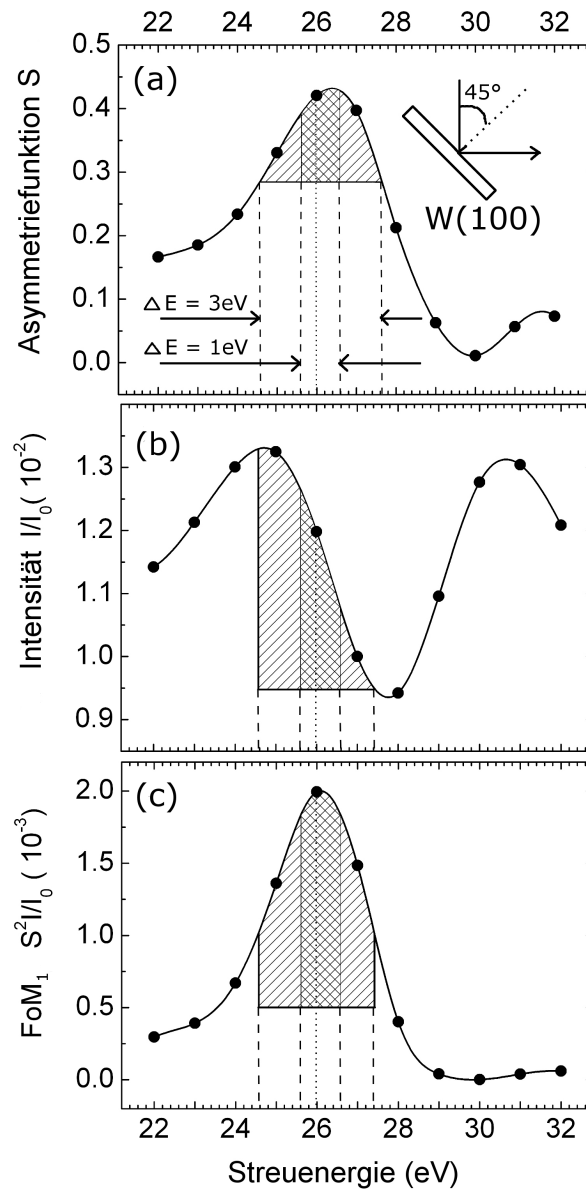


Abbildung 4.6: Energieabhängigkeit von Asymmetriefunktion S (a), Intensitätsantwort $\frac{I}{I_0}$ (b) und Figure of Merit (c) des Spekularstrahls von $W(100)$ bei 45° Einfallswinkel. Die Punkte sind Messdaten, die durchgezogenen Linien eine Interpolation. Die schraffierten Flächen markieren den für das Experiment genutzten Bereich, die gepunktete Linie zeigt die Energie des optimalen Figure of Merits. Die gemittelte Shermanfunktion beträgt 0,38 (0,41) für ein simultan aufgenommenes Energieintervall von 3 (1) eV (schraffiert(doppelt schraffiert)). Die Messdaten wurden freundlicherweise von xxx zur Verfügung gestellt.

In Abb. 4.6 ist die Asymmetriefunktion S (a), die Intensitätsantwort $\frac{I}{I_0}$ (b) und das FoM_1 (c) in Abhängigkeit der kinetischen Energie der Elektronen bei der Streuung an dem W(100)-Kristall gezeigt. Die große gestrichelte Fläche deutet jeweils den Energiebereich an, der für die Messung verwendet wurde. Bei einer Streuenergie von $E_{streu} = 26$ eV hat die Shermanfunktion ein Maximum von $S_{max} = 0,43$ und fällt zu beiden Seiten des Maximums ab. Bei einem kleineren Energieintervall von nur 1 eV (für hochauflösende Messungen) variiert die Shermanfunktion weniger, wie in dem gekreuzt gestrichelten Bereich zu erkennen ist. Die Intensitätsantwort zeigt ein oszillierendes Verhalten mit zwei Maxima im dargestellten Intervall bei $E_{streu} = 24,5$ eV und $E_{streu} = 30,5$ eV. Die optimale Streuenergie ist durch das Maximum im Figure of Merit festgelegt und beträgt 26 eV. Die Messungen zur Energieabhängigkeit der Shermanfunktion und Intensitätsantwort wurden am Max Planck Institut für Mikrostrukturphysik in Halle in derselben Beugungsgeometrie an einem Multikanal-Impulsmikroskop durchgeführt [Tus11]. Die Messdaten wurden freundlicherweise von xxx zur Verfügung gestellt.

Da sowohl die Shermanfunktion als auch die Intensitätsantwort über das genutzte Streuenergie-Intervall variieren, wird für die Definition von FoM_{2D} das intensitätsgewichtete Mittel von S_{ij} und $\frac{I_{ij}}{I_{ij,0}}$ verwendet. Für die Energieintervalle 3 eV und 1 eV sind die Mittelwerte:

$$\Delta E = 3eV : \quad \langle FoM_1 \rangle = 1,7 \cdot 10^{-3}, \quad \langle S_i \rangle = 0,38$$

$$\Delta E = 1eV : \quad \langle FoM_1 \rangle = 2 \cdot 10^{-3}, \quad \langle S_i \rangle = 0,41$$

wobei jeweils das Maximum des FoM_{2D} in der Mitte des Energiebereichs liegt. Der maximale Wert der Shermanfunktion von 0,43 ist einer der höchsten bisher gemessenen für Elektronenspin-Polarimeter und führt zusammen mit der großen Anzahl an Bildpunkten ($N = 960$) zu einem einem hohen zweidimensionalen FoM (im Energieintervall von 3 eV):

$$FoM_{2D} = 1,7.$$

Die Größe der Asymmetriefunktion S ist stark abhängig von der Reinheit der Oberfläche des Streukristalls. Exemplarisch wird nun gezeigt, wie eine Untergrenze für den Maximalwert von S bei der Streuenergie 26 eV, S_{max} , gefunden werden kann. In Abb. 4.7 ist ein Ausschnitt einer spinaufgelösten UPS-Messung von Fe(100) für $S_{max} = 0,2$ und $S_{max} = 0,4$ gezeigt. Es ist deutlich erkennbar, dass der Majoritätskanal bei $S_{max} = 0,2$ eine negative Intensität direkt unterhalb der Fermienergie zeigt. Eine negative Intensität bedeutet in dem Zusammenhang, im Vergleich mit Gl. 4.2, dass durch eine zu klein gewählte Shermanfunktion ein Teil der Intensität der Minoritätsladungsträger den Majoritätsladungsträgern zugesprochen wird, jedoch mit umgekehrtem Vorzeichen. Daraus resultiert, dass die Intensität der Minoritätsladungsträger zu

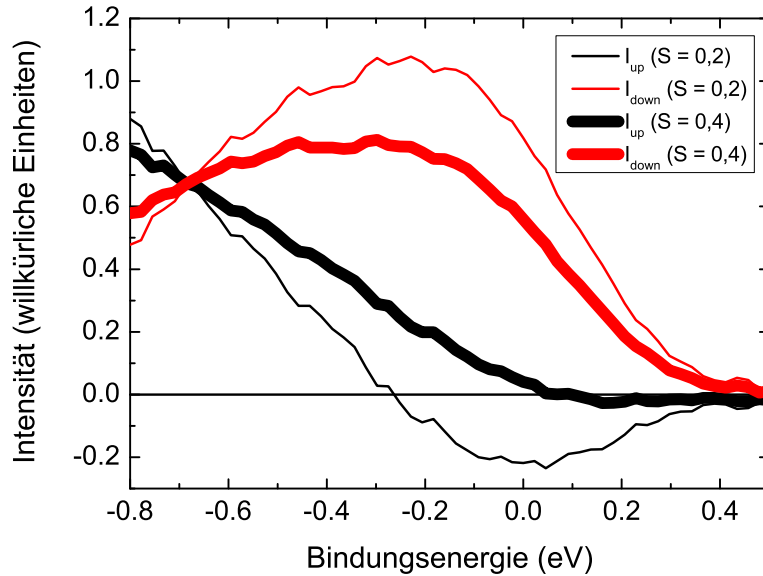


Abbildung 4.7: Spinaufgelöste UPS-Spektren von Fe(100) für $S_{max} = 0,2$ und $S_{max} = 0,4$. Der Majoritätskanal zeigt bei einer zu kleinen Shermanfunktion ($S_{max} = 0,2$) eine negative Intensität direkt unter der Fermikante. Die zu klein gewählte Shermanfunktion führt zu einer Fehlzuordnung der Partialintensitäten, siehe Gl. 4.2. Die Untergrenze für S_{max} ist dadurch bestimmt, dass die Zählrate nicht negativ werden kann.

hoch, und die Intensität der Majoritätsladungsträger zu niedrig (negativ) erscheint. S_{max} wird nun sukzessive erhöht, bis die Intensität nicht mehr negativ ist. Mit dieser Methode kann eine Untergrenze für S_{max} festgelegt werden: $S_{max} \geq 0,4$. Dieser Wert passt sehr gut mit den Ergebnissen aus Halle zusammen, siehe Abb. 4.6.

4.3 Grenzen der Auflösung

Im Folgenden sollen Faktoren betrachtet werden, die zu einer Einschränkung der Auflösung des Spindetektors führen.

Einerseits stellt die **Auflösung des DLD** eine Begrenzung dar. Der Delayline Detektor hat eine Ortsauflösung von $50 \mu\text{m}$ bei einer aktiven Detektorfläche von 40 mm . Das entspricht einer maximalen Datenpunktzahl von $\frac{40000}{50} = 800$ auf der Bilddiagonalen, was zu einer maximalen Gesamtpunktzahl von $\pi r^2 = \pi \cdot 400^2 = 500000$ führt. Die momentane Bildpunktzahl beläuft sich auf 960. Daher stellt die laterale Auflösung des DLD zum momentanen Forschungszeitpunkt keine Einschränkung dar.

Die **Mosaikstruktur des Streukristalls** führt dazu, dass der (0,0)-Reflex des kohärent einfallenden Elektronenstrahls verbreitert wird. Da am Kristallort ein reziprokes Bild vorhanden ist, streuen kohärente Elektronen über die gesamte ausgeleuchtete

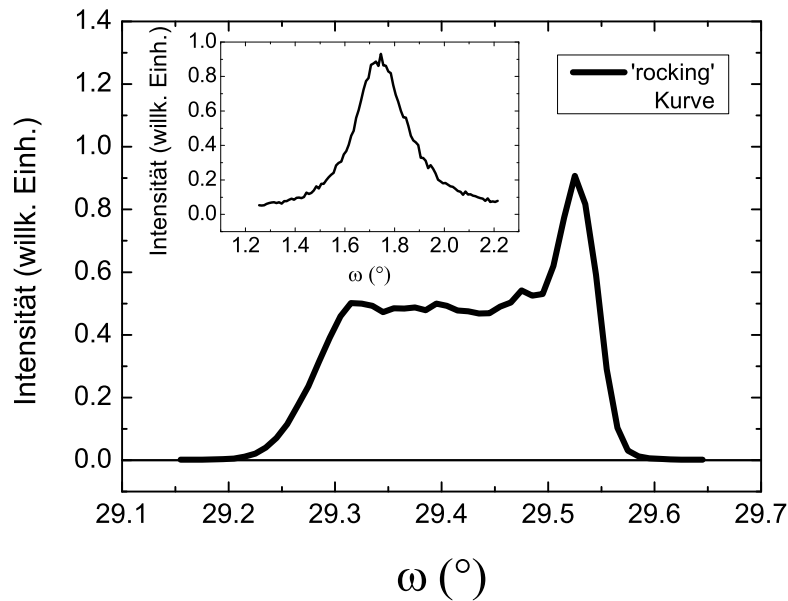


Abbildung 4.8: Ex-situ 'Rocking'-Kurve des W(100) Streukristalls bei der Röntgenbeugung mit einem Zweikreis-Röntgendiffraktometer (Phillips X'Pert MPD). Der Kristall wird bei dieser Messung langsam gedreht, während der Detektor ortsfest bleibt. Im Inset ist die Kurve unter Totalreflexion bei einem Einfallswinkel von 3° dargestellt.

Fläche des Kristalls. Durch die Aufnahme einer 'Rocking'-Kurve eines Bragg-Reflexes (Röntgenbeugung) kann sichtbar gemacht werden, wie die Ausrichtungen der kristallographischen (100)-Achsen des W-Streukristalls variieren. Dazu wird der Kristall langsam gedreht, während der Detektor ortsfest bleibt.

Die 'Rocking'-Kurve ist in Abb. 4.8 dargestellt. Sie zeigt ein scharfes Maximum auf der rechten Seite, bei $\omega = 29,53^\circ$, d.h. ein relativ großer Volumenanteil (ca. 30%) des Kristalls ist ein einziger Kristallit mit wohldefinierter Ausrichtung der (100)-Achse. Der Peak ist überlagert von einer breiten Struktur (auf der linken Seite des Peaks). Dies zeigt, dass viele weitere Kristallite vorhanden sind, deren Ausrichtungen der (100)-Achsen leicht voneinander abweichen. Aus der Halbwertsbreite der 'Rocking'-Kurve kann die maximale Verkippung der (100)-Richtungen innerhalb des Kristalls abgeschätzt werden. Sie beträgt $\Delta\omega = 0,28^\circ$ (FWHM). Als 'inset' in dem Graph ist die Messung einer Rockingkurve bei Totalreflexion unter einem Einfallswinkel von 3° dargestellt. Die Messung gibt die Verteilung der Oberflächennormalen des Streukristalls, so wie sie durch Politur und Rekristallisation beim Tempern entstanden ist, wieder. Die Verbreiterung liegt in derselben Größenordnung wie bei der 'Rocking'-Kurve des Bragg-Reflexes und beträgt $\Delta\omega = 0,26^\circ$. Die Oberfläche des Kristalls gibt also wahrscheinlich die Mosaikstruktur wieder, da durch Rekristallisation beim Heizen verschiedene (100)-Facetten ausgebildet werden.

Die Streuung an Domänen mit bis zu $0,28^\circ$ unterschiedlicher Ausrichtung führt nach der Simulation zu einer Verbreiterung eines scharfen Reflexes auf dem DLD von $\simeq 0,35$ mm. Bei einer nutzbaren Detektionsfläche von 40 mm führt diese Verbreiterung zu einer maximalen Auflösung von $\frac{40}{0,35} = 114$ Datenpunkten in der Bilddiagonalen. Somit beträgt die erreichbare Gesamtzahl an Datenpunkten mit dem verwendeten Kristall $\pi r^2 = \pi \cdot 57^2 \simeq 10207$. Dies ist zehnmal mehr als die momentan genutzte Zahl an Datenpunkten. In Zukunft könnte die Anzahl der auflösbaren Datenpunkte durch Nutzung einer epitaktischen Schicht auf oxidischen Kristallen als Streutarget weiter erhöht werden. Oxidische Kristalle zeigen teilweise nur geringe Mosaikstrukturen. Es sollte auch möglich sein, eine bessere Auflösung mit Wolfram-Einkristallen zu erzielen. Bozhko et al. [Boz08] gelang es unter Anwendung einer speziellen Rekristallisationstechnik, hochreine Wolfram-Einkristalle ohne Kleinwinkelkorngrenzen herzustellen. Die Produktion erscheint allerdings aufwendig, was vermutlich mit einem hohen Preis einhergeht.

Die **chromatische Aberration** hat zur Folge, dass Elektronentrajektorien unterschiedlicher Energien verschiedene Brennpunkte haben. Das bedeutet, dass eine Seite der Intensitätsverteilung am DLD in dispersiver Richtung immer schärfer abgebildet wird, als die andere. Da in dem Elektronenstrahl eine Energiedispersion vorhanden ist, lässt sich die chromatische Aberration nicht verhindern, wie in der Simulation, Abb. 3.8, oben, zu sehen ist. Allgemein kann die chromatische Aberration jedoch klein gehalten werden, indem die Brennweite der optischen Linsen nicht zu klein gewählt wird. Desweiteren könnte der DLD schräg aufgestellt werden, was die chromatische Aberration zum Teil kompensieren würde. Anhand der Simulation kann die Zahl der auflösbaren Energiepunkte bei chromatischer Aberration in einer optimierten Geometrie auf mindestens 100 abgeschätzt werden. Dies ist wesentlich mehr als die im vorliegenden Experiment tatsächlich aufgelösten 15 Energiepunkte.

Die Auflösung entlang der Winkelkoordinate wird hauptsächlich begrenzt durch die **nicht-optimierte Transferlinse** im Strahleintritt des verwendeten Energieanalysators. Mit vorliegenden Linsenoptik entsteht keine gute Abbildung im Eintrittsspalt des Halbkugelanalysators, wie in der Simulation Abb. 3.4 zu sehen ist. Zusätzlich hat der Energieanalysator auch eine starke Aberration in der dispersiven Ebene (der α^2 -Term in Gl. 3.4), die zu einer relativ schlechten Energieauflösung führt.

Die mangelhafte Abbildungseigenschaft des Halbkugelanalysators und seiner Transferoptik ist in diesem Experiment der Faktor, der die Auflösung direkt begrenzt. Die Auflösung des Spinfilters ist hauptsächlich in der dispersiven Richtung durch die chromatische Aberration begrenzt. Falls für das Experiment ein neuartiger Halbkugelanalysator verwendet wird, dessen Abbildungseigenschaften um ein Vielfaches besser sind [Spe], kann die Energieauflösung in dem spingefilterten Bild erheblich erhöht werden (Begrenzung in der dispersiven Ebene des Spinfilters). Durch eine weitere Optimierung der Elektronenoptik des Spinfilters ist ebenfalls eine deutlich größere Erhöhung der Bildpunktzahl möglich. Aus neueren Simulationen ergibt sich, dass eine Auflösung von bis zu 100 Energiepunkten möglich ist.

5 Messungen an Eisen

Zur Kalibrierung des Vielkanal-Spinpolarimeters wurde eine Probe verwendet, deren spinaufgelöste Energiespektren aus der Literatur hinreichend gut bekannt sind. Um eine Asymmetrie in der Energieverteilung von Majoritäts- und Minoritätsladungsträgern messen zu können, wurde ferromagnetisches Eisen gewählt. Eisen ist ein klassischer 3d-Ferromagnet und dient oft als Modell für itineranten, bandartigen Ferromagnetismus [San90]. Photoemissionsmessungen zu der Bänderdispersion und Austauschaufspaltung von Eisen können relativ gut durch die Annahme von direkten Übergängen in eine freie Elektronen-Endzustandsparabel erklärt werden, siehe z.B. [Tur82].

5.1 Eisen(110)-Filme auf Molybdän(110)

Die bcc (110)-Oberfläche des Molybdäns ist ein sehr geeignetes Substrat um dünne magnetische Schichten aufzuwachsen, da ihre freie Oberflächenenthalpie hoch ist und Interdiffusion generell nicht auftritt [Pro04]. Eisen wächst aufgrund der geringen Gitterfehlpassung pseudomorph auf dem Molybdän (110)-Einkristall auf [Uso04] und die leichte Achse der Magnetisierung ('Easy Axis') liegt bei diesem System in der Ebene ('in-plane') in der (001)-Richtung [Fru99]. Da das Molybdän-Substrat durch Erhitzen effizient von Adsorbaten oder zuvor präparierten dünnen Eisenschichten gereinigt werden kann, wurde es in der Präparationskammer fest auf dem Probenhalter mit integrierter Heizvorrichtung (siehe Kapitel 3.1.1) eingebaut.

5.1.1 Das Substrat Molybdän(110)

Der Molybdän-Kristall wurde zu Beginn der Messtage auf eine Temperatur von 1600°C für 10 s erhitzt, siehe Kapitel 3.1.1. Die Sauberkeit der Oberfläche nach dieser Prozedur wurde zu Beginn der Messungen einmalig in einer mit einem LEED-System (LEED = 'low energy electron diffraction') ausgestatteten Vakuumkammer kontrolliert. Die Funktionsweise eines LEED-Systems kann in [Zim73] nachgelesen werden.

Der Mo(110)-Kristall wurde auf dem Probenhalter so befestigt, dass die leichte Magnetisierungsrichtung (001) entlang der Achse der Magnetspule lag. Die Ausrichtung des Kristalls wurde mit dem LEED-System bestimmt. Das charakteristische Beugungsmuster von Mo(110) bei einer Elektronenenergie von 138 eV ist in Abb. 5.1 zu sehen. Die (001)- und $(1\bar{1}0)$ -Achse sind eingezeichnet. Das Verhältnis der reziproken Gittervektoren beträgt $\frac{a}{b} \simeq \frac{3}{4}$.

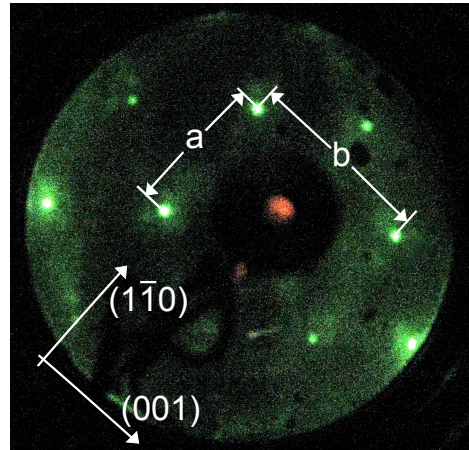


Abbildung 5.1: LEED-Aufnahme des Mo(110)-Kristalls bei einer Elektronenenergie von 138 eV. Die Kristallachsen in der Oberflächenebene sind eingezeichnet. Die (001)-Achse gibt die leichte Magnetisierungsrichtung vor.

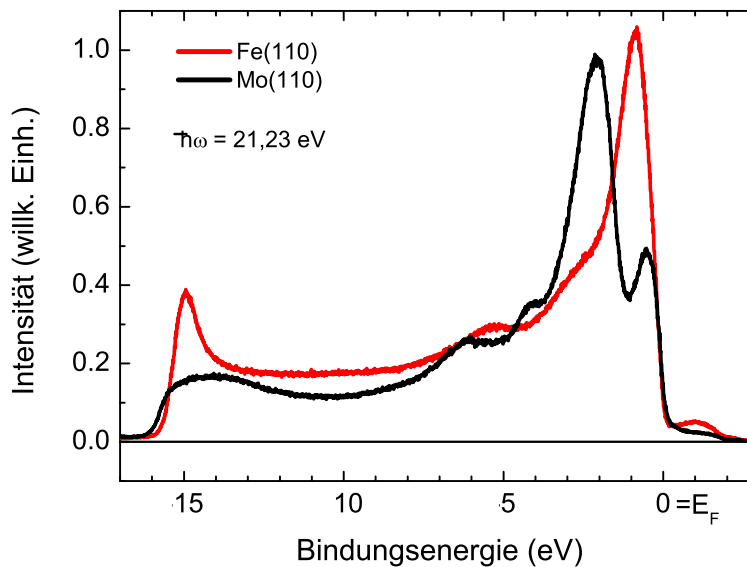


Abbildung 5.2: Vergleich der UPS-Spektren (aufgenommen ohne Multikanal-Spinfilter, mit dem DLD direkt hinter dem Analysator) von Fe(110) und Mo(110). Anhand der Länge der Spektren kann die Austrittsarbeit der Materialien bestimmt werden. Sie beträgt $Mo(110) = 5,46$ eV und $\Phi_{Fe(110)} = 5,82$ eV. Beide Materialien zeigen d-Band Peaks in der Nähe der Fermienergie, die mit Bandstrukturechnungen verglichen werden können.

UPS-Messungen an Mo(110) Ein UPS-Spektrum des Mo(110)-Substratkristalls ist in Abb. 5.2 im Vergleich mit dem Spektrum einer präparierten dünnen Eisenschicht zu sehen. Der in der Theorie besprochene Sekundärelektronenanstieg bei niedrigen kinetischen Energien ist deutlich zu erkennen, ebenso wie die Fermikante (E_F) am hochenergetischen Ende des Spektrums. Letztere dient als Nullpunkt der Bindungsenergie E_B . Anhand der Länge des gemessenen Spektrums kann unmittelbar die Austrittsarbeit des Materials bestimmt werden. Sie beträgt für Molybdän: $\Phi_{Mo(110)} = \hbar\omega - \Delta E = 21,23 \text{ eV} - 15,77 \text{ eV} = 5,46 \pm 0,2 \text{ eV}$, was im Rahmen des Fehlers mit dem erwarteten Wert von $\Phi_{Mo(110),lit} = 5,34 \text{ eV}$ [Skr92] übereinstimmt. Der angegebene Fehler gibt die Unsicherheit in der Bestimmung der Lage der Abschneidekante auf der Seite der Sekundärelektronen wieder. Durch eine Fehleinstellung der Elektronenoptik kann die energetische Lage der Abschneidekante geringfügig verfälscht werden. Bei dieser Messung muß die Probe auf eine negative Biasspannung gelegt werden, um den unverfälschten cutoff zu vermessen.

Das Energiespektrum von Mo(110) zeigt drei Maxima in der Intensität bei den Bindungsenergien 0,4 eV, 2,0 eV und 4,0 eV. Ebenso ist ein schwaches Signal bei der Energie 6,0 eV erkennbar, das von einer leichten Oxidation der Probe stammt, vgl. [Boi80]. Das Eisenspektrum wird in 5.1.2 diskutiert.

Vergleich mit einer Bandstrukturechnung von Molybdän Die energetische Position der Strukturen aus der UPS-Messung kann mit einer berechneten Bandstruktur von Molybdän, die aus einer Veröffentlichung von Legoas et al. [Leg00] entnommen wurde, verglichen werden. Die Berechnung der Bandstruktur von Molybdän erfolgte über eine selbstkonsistente 'real-space linear muffin-tin orbital' Methode in der 'atomic sphere' Approximation (nichtrelativistisch). Die Emission von Photoelektronen entlang der (110)-Richtung des Kristalls entspricht einem Übergang vom Γ - zum N-Punkt in der Bandstrukturechnung. Die Länge des reziproken Gittervektors der ersten Brillouinzone in dieser Richtung beträgt $k_{110} = \frac{\sqrt{2}\pi}{a_{Mo}} = 1,4 \text{ \AA}^{-1}$. Die Energie des Anfangszustands wird aus dem Spektrum anhand der energetischen Position der Maxima in Bezug auf E_F übernommen. Die Endzustandparabeln werden im Rahmen des 'free-electron final state model' berechnet, wobei die Energiedispersion durch $E_f = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |V_0|$ gegeben ist, wobei $|V_0|$ das innere Potential ist (nach [Hü03]). In der Bandstrukturechnung von Legoas et al. sieht man deutlich den parabelförmigen Verlauf des untersten, sp-artigen Bandes. Die freie-Elektronen-Endzustandparabel wurde an dieses Band angepasst, was zu einem inneren Potential von $V_0 = 6,6 \text{ eV}$ führt. In Abb. 5.3 ist die Bandstrukturechnung (schwarz), zusammen mit dem berechneten Endband gezeigt. Die Energie des Endzustands beträgt: $E_f = E_i + \hbar\omega$. Die Endzustandparabel aus dem 'free-electron-final-state model' ist nach [Chi80] verbreitert. Die Verbreiterung ist energieabhängig und wird im interessanten Energiebereich mit 2 eV angenommen (halbtransparente Darstellung). Es ist zu erkennen, dass die Position des prominenten Intensitätsmaximums bei $\sim 2 \text{ eV}$ gut mit einem Übergang aus einem Bandkomplex

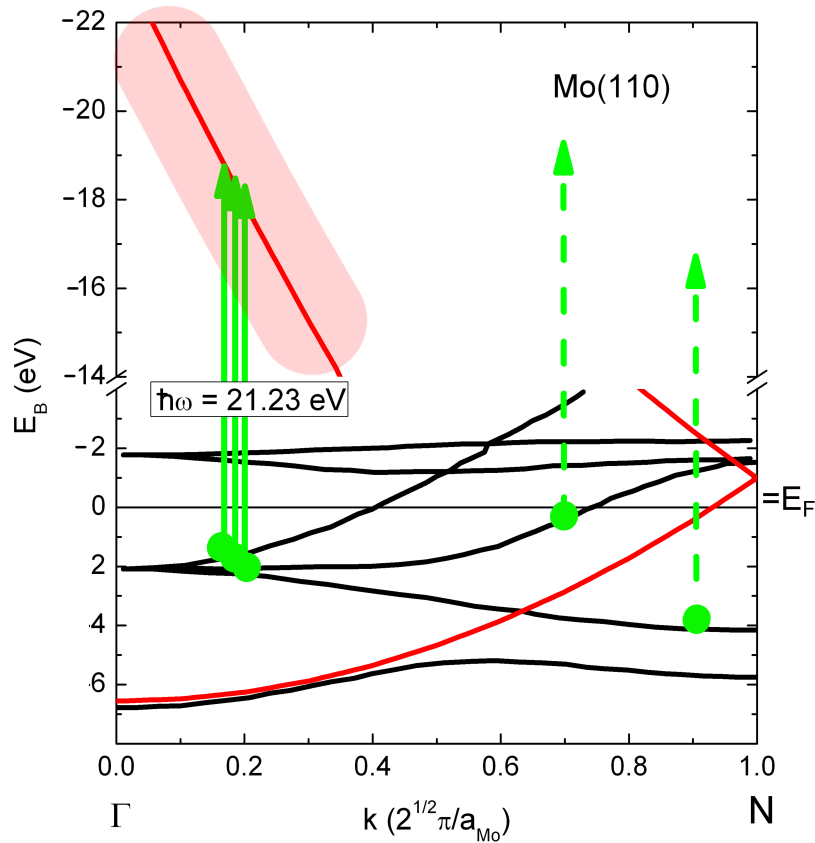


Abbildung 5.3: Vergleich der im UPS-Spektrum von Mo(110) gefundenen d-Band Peaks mit einer Bandstrukturrechnung [Leg00]. Die freie-Elektronen-Endzustandsparabel (rot) wurde berechnet mit einem inneren Potential von $V_0 = 6,6$ eV. Die Verbreiterung des Endzustandes ist halbtransparent dargestellt und wird mit 2 eV angenommen. Die Interbandübergänge aus dem Bandkomplex nahe Γ bei 2 eV in die Parabel mit einer Anregungsenergie von 21,23 eV sind mit grünen Pfeilen gekennzeichnet. Die schwächeren Strukturen im Spektrum entsprechen der sogenannten Zustandsdichteemission sowie Oberflächenzuständen (gestrichelte Pfeile).

bei einer Bindungsenergie von 2 eV in der Nähe des Γ -Punktes übereinstimmt. Dieser Peak entspricht der Überlagerung von drei Interbandübergängen. Das Signal bei der Energie $E_B = 0,4$ eV zeigt im Spektrum einen Anstieg in Richtung E_F , der durch die Fermikante abgeschnitten ist. Im Vergleich mit [Val99] handelt es sich dabei vermutlich um einen Oberflächenzustand aus dem Bereich um E_F . Das dritte Signal bei einer Energie von $E_B = 4,0$ eV korrespondiert zu Zustandsdichteemission¹ aus einem Band mit horizontaler Tangente am N-Punkt.

Abschließend ist anzumerken, dass aufgrund der großen Winkelakzeptanz die Emission nicht auf die Γ -N-Richtung beschränkt ist (streng senkrechte Emission von der (110)-Oberfläche). Vielmehr tragen große Bereiche der Brillouinzone mit $\mathbf{k}_{\parallel} \neq \mathbf{0}$ bei, welche andere Lagen der Bänder aufweisen.

5.1.2 Eisen(110) auf Molybdän(110)

Auf das saubere Substrat wurde eine dünne Schicht hochreinen Eisens (Reinheit: 4N) mit dem MBE-Verdampfer aufgebracht. Die Schichtdicke konnte in-situ nur qualitativ mithilfe des Flussmonitors des Verdampfers abgeschätzt werden, siehe Kapitel 3.1.3. Eisen ($a_{Fe} = 2,8665 \text{ \AA}$) [Pea91] wächst auf Mo(110) ($a_{Mo} = 3,15 \text{ \AA}$) in der ersten Monolage pseudomorph in (110)-Orientierung auf [Mal98]. Die relativ große Gitterexpansion von 10% führt zu Verspannungen in der dünnen Eisenschicht, welche sich in der zweiten und folgenden Monolagen durch eine Versetzung der Atome äußern. Die Versetzung ist am größten bis $12 \pm 1 \text{ \AA}$ [Mur02]. Ab etwa 10 Monolagen liegt die Eisenschicht mit der Volumengitterkonstanten vor.

Charakterisierung der Eisenschicht Die Qualität der Eisenschicht wurde nachträglich ex-situ mit Hilfe von Röntgenbeugung durch einen $\Theta/2\Theta$ -Scan in Bragg-Brentano Geometrie untersucht (Zweikreis-Röntgendiffraktometer, Firma Phillips, X'pert MPD). In Abb. 5.4 sind die gemessenen Braggpeaks für das Mo(110)-Substrat ($2\Theta_{Mo(110)} = 40,5^\circ$) und die Fe(110)-Schicht ($2\Theta_{Fe(110)} = 45^\circ$) gezeigt. Die Position des Molybdän-Peaks stimmt exakt mit dem Literaturwert überein. In dem schmalen Mo-Signal ist eine Schulter auf der rechten Seite zu erkennen. Sie stammt von einer zweiten $K\alpha$ -Linie, die energetisch nah an der Hauptlinie bei $1,54 \text{ \AA}$ liegt. Der Literaturwert für Fe(110) beträgt $2\Theta_{lit, Fe(110)} = 44,67^\circ$ mit der Gitterkonstante für Eisen aus [Pea91]. Die Abweichung zwischen Literatur- und gemessenem Wert und die große Breite des Eisenpeaks deuten auf eine markante Verspannung im Fe-Gitter hin. Die Intensität des Eisenpeaks ist etwa um einen Faktor 1000 kleiner als die Intensität des Molybdän-Peaks. Dies liegt vor allem darin begründet, dass das Molybdän-Substrat makroskopisch dick ist,

¹Zustandsdichteemission ist die Emission von Elektronen innerhalb eines Bandes in einen inversen LEED-Zustand. Das Übergangsmatrixelement ist dabei i. A. klein, weshalb dieser Übergang nur an Stellen hoher Zustandsdichte sichtbar wird. Er wird auch als 'surface emission' bezeichnet [Hü03], da die möglichen Endzustände nah der Oberfläche lokalisiert sind.

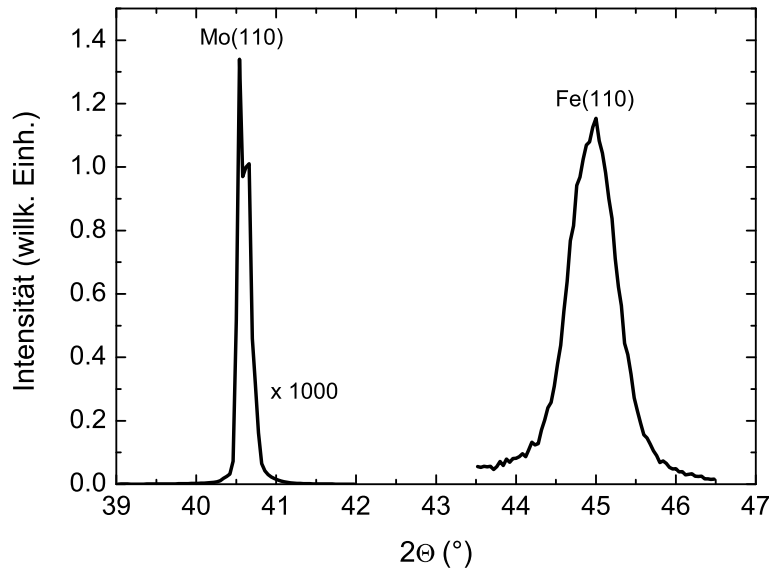


Abbildung 5.4: Röntgenbeugung des Fe(110)-Films (Dicke: 16,7 nm) auf dem Mo(110)-Substrat. Es ist die Intensität gegenüber dem Beugungswinkel 2Θ aufgetragen. Die Positionen der Braggpeaks von Molybdän und Eisen sind: $2\Theta_{Mo(110)} = 40,5^\circ$ und $2\Theta_{Fe(110)} = 45^\circ$.

während Eisen nur in einer dünnen Schicht aufgedampft wurde. Aus der Verbreiterung des Bragg-Peaks kann mit Hilfe der Scherrer-Formel die Kohärenzlänge des Eisens (bei einem perfekt geordneten Kristall entspricht sie der Dicke der Eisenschicht) berechnet werden, solange die reale Verbreiterung viel größer als die Geräteverbreiterung ist. Da der Molybdänpeak nur $\frac{1}{4}$ so breit wie der Eisenpeak ist, kann davon ausgegangen werden, dass die Geräteverbreiterung für Eisen vernachlässigbar ist. Die Kohärenzlänge wurde zu $d_{Fe} = \frac{0,94\lambda}{\Delta\theta(2\theta)\cos\theta} = 16,7$ nm bestimmt [Gui94]. Dabei ist $\lambda = 1,54$ Å die Wellenlänge der eingestrahlten Röntgenstrahlung, $\Delta\theta = 0,7^\circ$ die Verbreiterung des Peaks, θ der Streuwinkel und 0,94 der Scherrer-Formfaktor.

UPS-Spektrum Das UPS-Spektrum der Fe(110)-Oberfläche in Abb. 5.2 zeigt deutlich andere Signaturen als das Molybdän-Spektrum. Es stimmt gut mit bereits publizierten Energiespektren, z.B. [Hei78a, Tur84], überein. Die Austrittsarbeit von Eisen ist mit $\Phi_{Fe(110)} = 21,23$ eV – 15,41 eV = $5,82 \pm 0,2$ eV höher als die Austrittsarbeit von Molybdän, was in gutem Einklang mit der Literatur steht: $\Phi_{Fe(110),lit.} = 5,78$ eV [Skr92]. Fe(110) zeigt nur ein ausgeprägtes Intensitätsmaximum bei der Bindungsenergie 0,85 eV und eine schwache Schulter bei 2,5 eV. Es ist ebenfalls eine leichte Oxidation der Probe vorhanden, was sich durch das kleine Maximum bei ca. 6 eV ausdrückt.

In dem Eisenspektrum ist ein kleiner Peak direkt oberhalb der Fermienergie zu erkennen. Es handelt sich dabei um den d-Bandpeak unter Anregung mit der inten-

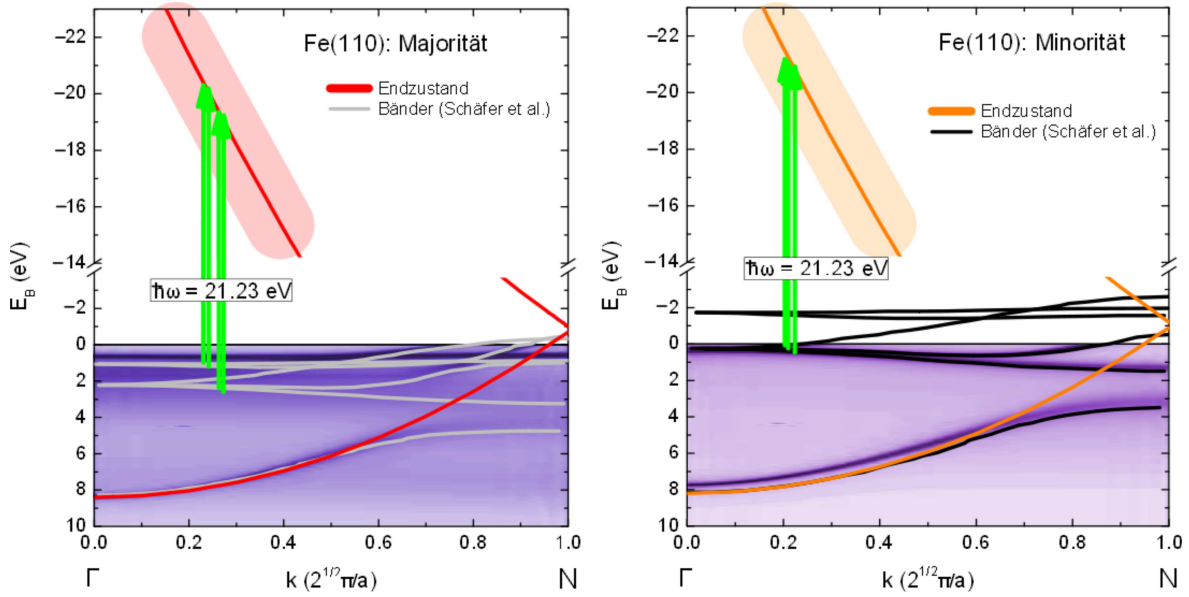


Abbildung 5.5: Vergleich der im UPS-Spektrum von Fe(110) gefundenen d-Band Peaks mit einer DFT-Bandstrukturrechnung [Sch05] (graue und schwarze Bänder) und einer DMFT-Bandstrukturrechnung [Gre07] (lila). Die freie-Elektronen-Endzustandsparabel (orange und rot) wurde berechnet mit $V_0 = 8,4$ eV (8,2 eV). Die Verbreiterung des Endzustandes ist halbtransparent dargestellt und wird wiederum mit 2 eV angenommen. Die direkten Interbandübergänge ($\sim 0,25 \Gamma N$) bei einer Anregungsenergie von 21,23 eV sind als grüne Pfeile gekennzeichnet.

sitätsschwächeren He $I\alpha$ -Linie der VUV-Lampe. Die Intensität der He $I\alpha$ -Linie ($\hbar\omega = 23,09$ eV) beträgt etwa 5 % der Intensität der He-I Linie, was vom Peakhöhenverhältnis wiedergegeben wird. Das He $I\alpha$ -Energiespektrum ist gegenüber dem He I-Spektrum um 1,86 eV verschoben.

Vergleich mit einer Bandstrukturrechnung von Eisen Die Peaklagen können mit einer gerechneten Bandstruktur von Schäfer et al. [Sch05] und Grechnev et al. [Gre07] verglichen werden, siehe Abb. 5.5. Diese Bandstrukturen wurde mit DFT-GGA ('Generalized Gradient Approximation') und LDA+DMFT berechnet. Da Eisen ferromagnetisch ist, werden die Bänder für Majoritäts- und Minoritätselektronen getrennt berechnet und erscheinen um den Wert der Austauschspaltung gegeneinander verschoben. Die zu den gemessenen Signalen korrespondierenden Übergänge wurden in Abb. 5.5 wie bei Molybdän in die gerechnete Bandstruktur eingetragen. Für Eisen passt die gerechnete Bandstruktur sehr gut mit den gemessenen Peakpositionen zusammen. Das Signal bei 0,85 eV, sowie die Schulter bei 2,5 eV resultiert aus der Emission von Majoritätselektronen. Dabei ist anzunehmen, dass der Peak bei 0,85 eV vermutlich aufgrund von zusätzlichen Zustandsdichteemissionen (über die ganze Breite der Brillouinzone

möglich) deutlich ausgeprägter auftritt. Bei 0,3 eV Bindungsenergie tritt zusätzlich ein Minoritätselektronen-Signal durch Interbandübergänge auf. Dieser Peak ist allerdings im Spektrum von dem deutlichen Maximum bei 0,85 eV nicht zu trennen. Die freie-Elektronen-Endzustandsparabel für Majoritäts- (Minoritäts-) Elektronen (orange (rot)) wurde mit $V_0 = 8,4$ eV (8,2 eV) berechnet. Die Verbreiterung des Endzustandes ist im interessanten Energiebereich halbtransparent dargestellt und wird wiederum mit 2 eV angenommen. Ferner ist in Abb. 5.5 zu erkennen, dass die DFT-GGA und die LDA+DMFT-Rechnung relativ gut übereinstimmen. Lediglich das unterste Band in dem Minoritätskanal zeigt eine geringe Abweichung. Die LDA+DMFT-Rechnung zeigt im Gegensatz zu der reinen LDA-Rechnung Lebensdauererweiterte Bänder.

Mit dem Probensystem Fe(110) auf Mo(110) konnte keine Spinasymmetrie nachgewiesen werden, da die Magnetisierung nicht umgeschaltet werden konnte. Die Koerzitivfeldstärke des Fe(110)-Films wurde entlang der leichten Achse in einem magnetooptischen Kerreffekt-Experiment bei Raumtemperatur vermessen. Die Koerzitivfeldstärke betrug etwa 30 mT bei der aus Röntgenbeugung bestimmten Kohärenzlänge von 16,7 nm, siehe Abb. 5.6. Dieser Wert konnte in einer Messung mit einem VSM-Magnetometer (VSM='vibrating sample magnetometer') bestätigt werden, siehe Abb. 5.7. Die Angaben zur Koerzitivfeldstärke dieses Systems in der Literatur sind stark abhängig von der Dicke der Eisenschicht und der Qualität des Films, die maßgeblich von der Herstellung abhängt. So ist z.B. in einer Veröffentlichung von Fruchart et al. [Fru99] ein Wert von $\mu_0 H_c = 6$ mT für 10 nm Fe(110) auf Mo(110) bei Raumtemperatur angegeben. Allerdings werden für dieselbe Schichtdicke bei einer abweichenden Herstellung bis zu doppelt so hohe Werte für $\mu_0 H_c$ gemessen. In einer Veröffentlichung von Fraune et al. [Fra06] wurde eine Koerzitivfeldstärke von $\mu_0 H_c = 40$ mT bei einer Schichtdicke von 1,2 nm Fe(110) auf Mo(110) publiziert. Ein Magnetfeld von ausreichender Größe, um die präparierte Eisenschicht vollständig umzumagnetisieren, konnte von der verwendeten Luftspule in der UHV-Apparatur nicht bereitgestellt werden. Daher wurden auch dickere Eisenschichten auf dem Mo(110)-Substrat präpariert, in der Hoffnung eine Probe mit geringerer Koerzitivfeldstärke herstellen zu können. Doch auch mit dickeren Schichten konnte keine Spinasymmetrie in der SRUPS-Messung (SRUPS = spin resolved UPS) nachgewiesen werden.

Magnetisches Moment Aus der Messung mit dem VSM-Magnetometer in Abb. 5.7 ist das magnetische Moment μ_{tot} der Probe bestimmbar. Mit diesem lässt sich bei bekanntem magnetische Moment pro Eisenatom, $\mu_{Fe,lit} = 2,18\mu_B$ [Kü81], die Schichtdicke der Eisenprobe berechnen. μ_B ist das Bohr'sche Magneton. Der Literaturwert wurde aus in einer selbstkonsistenten Bandstrukturrechnung mit 'local spin-density functional approximation' gewonnen. Die Schichtdicke ergibt sich zu:

$$d = \frac{\mu_{tot} \cdot V_{M,E}}{\mu_{Fe,lit} \cdot N_A \cdot F} = 20 \text{ nm.} \quad (5.1)$$

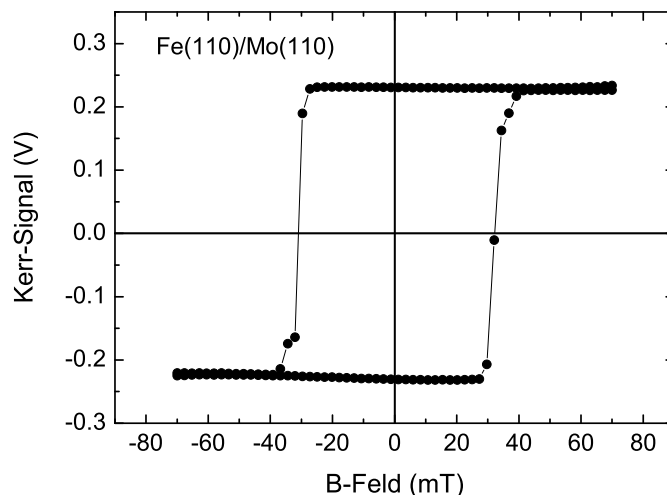


Abbildung 5.6: Ex-situ Messung eines magnetooptischen Kerreffekts des Fe(110)-Films auf Mo(110). Darstellung des Kerr-Signals in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes. Es ist ein typisches 'easy-axis'-Verhalten zu sehen. Die gemessene Koerzitivfeldstärke beträgt etwa $\mu_0 H_c = 30$ mT.

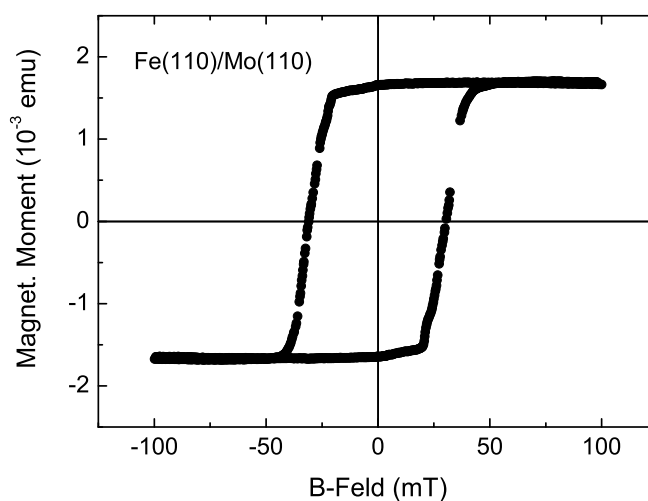


Abbildung 5.7: Ex-situ Messung der Koerzitivfeldstärke eines Fe(110)-Films auf Mo(110) mit einem VSM-Magnetometer. Das magnetische Moment ist in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes dargestellt. Das äußere Magnetfeld wurde entlang der einfachen Magnetisierungsachse (001) angelegt. Der Wert der Koerzitivfeldstärke beträgt $\mu_0 H_c = 29,5$ mT.

Hierbei ist N_A die Avogadrokonstante, F die von Eisen bedeckte Fläche und $V_{M,E}$ das molare Eisenvolumen. Die Kohärenzlänge der Probe wurde zu 16,7 nm bestimmt. Sie ist nur 17% kleiner als die Schichtdicke und stellt somit ein gutes Maß für die

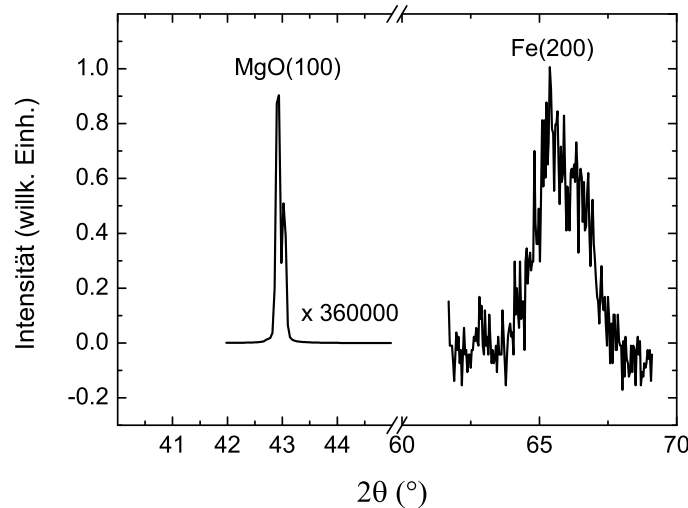


Abbildung 5.8: Röntgenbeugung an einem dünnen Fe(100)-Film auf MgO(100). Es ist die Intensität gegenüber dem Beugungswinkel 2Θ aufgetragen. Die Positionen der Braggpeaks von MgO und Eisen sind: $2\Theta_{MgO(100)} = 42,92^\circ$ und $2\Theta_{Fe(200)} = 65,6^\circ$.

Größenordnung der Schichtdicke dar.

5.2 Eisen(100)-Filme auf Magnesiumoxid(100)

Im Folgenden wurde MgO(100) als Substrat verwendet. Die Erfahrung der Arbeitsgruppe zeigte, dass Eisen, das auf MgO(100) gewachsen ist, ein sehr niedriges Koerzitivfeld von wenigen mT hat. Die Gitterparameter von Eisen und MgO sind: $a_{Fe} = 2,8 \text{ \AA}$ und $a_{MgO} = 4,2 \text{ \AA}$. Eisen wächst auf MgO(100) mit (100)-Orientierung auf, wobei zwischen der (001)-Achse des Eisens und der (001)-Achse des MgO ein Winkel von 45° liegt. Die Gitterfehlpassung ist damit 6%. Da zuletzt vor allem in Verbindung mit dem sehr effizienten VLEED ('very low energy electron diffraction') Spindetektionsprinzip [Hil01] dünne Fe(100)-Schichten mit einer Sauerstoff p(1x1) Überstruktur in den Vordergrund des Interesses gerückt sind, wurde das Probensystem Fe(100) auf MgO(100) ohne und mit Sauerstoffüberstruktur untersucht.

5.2.1 Eisen(100) auf Magnesiumoxid(100)

Da eine in-situ Reinigung von MgO-Substraten nach Beschichtung nicht möglich ist, also jedes Substrat nur für eine Messung verwendet werden konnte, wurden bei jedem Belüften der Kammer jeweils drei Substrate auf dem Probenhalter befestigt. Über den XYZ-Manipulator konnte jedes der Substrate in die Messposition vor den Halbkugelanalysator gefahren werden. Die MgO(100)-Einkristalle wurden auf ein dünnes

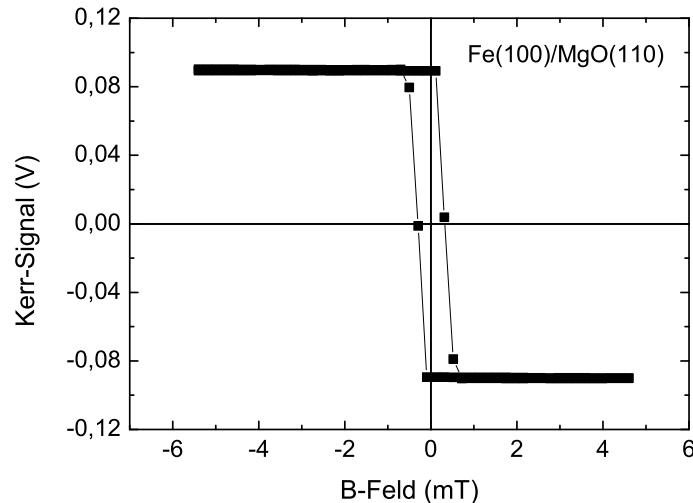


Abbildung 5.9: Messung des magnetooptischen Kerreffekts eines dünnen Fe(100)-Films auf MgO(100). Darstellung des Kerrsignals in Abhängigkeit des äußeren Magnetfeldes. Es ist ein typisches 'easy axis'-Verhalten zu sehen. Die gemessene Koerzitivfeldstärke beträgt etwa 0,32 mT in der leichten Richtung (001).

Molybdän-Blech mit Leitsilber aufgeklebt. Nach dem Ausheizen der Vakuumkammer wurden die MgO-Kristalle im Vakuum bei $\sim 550^\circ\text{C}$ ausgegast, siehe Kapitel 3.1.1.

Charakterisierung der Fe(100)/MgO(100)-Schicht Eisen wurde mit dem MBE-Verdampfer wie bei dem Mo(110)-Substrat auf MgO(100) aufgebracht. Die gemessenen Schichten waren stets > 5 nm dick. Die Schichtdicke konnte in-situ wiederum nur abgeschätzt werden, die Kohärenzlänge wurde nachträglich ex-situ mit Hilfe von Röntgenreflektometrie zu 74 nm bestimmt. Bei einem $\Theta/2\Theta$ -Scan konnte der (200)-Braggpeak von Eisen vermessen werden (siehe Abb. 5.8), was bestätigt, dass das Eisen in der richtigen Geometrie aufgewachsen ist. Der (100)-Reflex fehlt beim kubisch raumzentrierten Gitter (er ist ausgelöscht). Der Fe(200)-Peak bei $2\Theta_{Fe(200)} = 65,6^\circ$ erscheint stark verbreitert ($\Delta\Theta = 2^\circ$). Er ist zu größeren Winkeln verschoben im Vergleich zum Literaturwert von $2\Theta_{lit, Fe(200)} = 65^\circ$, was wiederum auf eine Verspannung des Gitters hindeutet. Die Koerzitivfeldstärke der Eisenprobe wurde in einer ex-situ Kerr-Messung zu 0,32 mT in der leichten Magnetisierungsrichtung (001) bestimmt, siehe Abb. 5.9. Mit der vorhandenen Luftspule konnte die Probe daher leicht umgeschaltet werden.

UPS-Spektren von Fe(100)/MgO(100) In Abb. 5.10 sind Energieverteilungskurven von Fe(100) (rote Linie) und Fe(110)-Filmen (schwarze Linie) im Vergleich gezeigt. Es ist augenscheinlich, dass vor allem die Intensitätsverhältnisse unterschiedlich sind. Die Peaklagen weichen nur geringfügig voneinander ab. Weiterhin ist das Spektrum einer

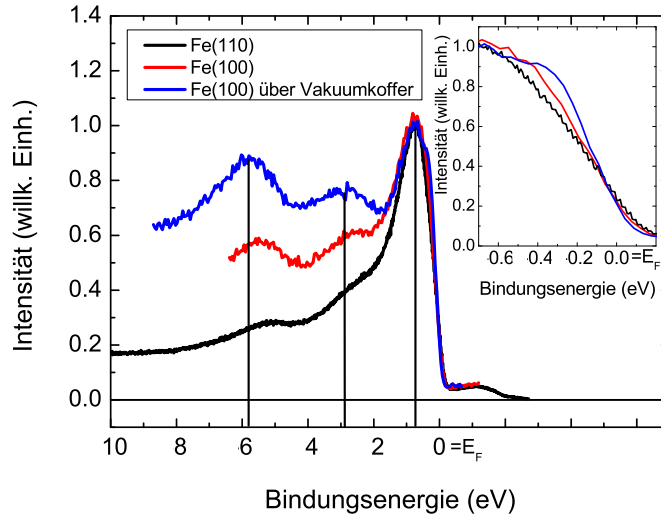


Abbildung 5.10: Vergleich der UPS-Spektren ($\hbar\omega = 21,23$ eV) von in-situ präparierten Fe(110) (schwarz) und Fe(100)-Filmen (rot) und mit einem im Vakuumkoffer transportierten Fe(100)-Film (blau). Im Inset ist eine Vergrößerung des Bereichs um die Fermienergie gezeigt. Die Spektren wurden im Maximum angepasst.

mit einem Vakuumkoffer transportierten Probe (blaue Linie) gezeigt. Sie wurde ebenso wie die Heuslerproben in Kap. 6 in einem anderen Labor präpariert, dort charakterisiert und zur SRUPS-Kammer transportiert. Die beiden Spektren der Fe(100)-Filme sehen sehr ähnlich aus, es gibt allerdings Unterschiede in der Lage des Maximums um 6 eV und in dem Spektrum der transportierten Probe ist eine Schulterstruktur in der Nähe der Fermikante erkennbar, die bei dem in-situ hergestellten Spektrum nicht erkennbar ist. Es ist anzunehmen, dass die transportierte Probe durch eine bessere Präparation atomar glatter ist. Dadurch ist der Oberflächenzustand (vgl. Abb 5.11) von Fe(100) bei $E_B = 0,1$ eV sichtbar ausgeprägter als bei der in-situ präparierten Fe(100)-Probe, siehe Inset. Das Aussehen der Spektren ist gut vergleichbar mit den Messungen von Heimann und Neddermeyer [Hei78a]. In Abb. 5.11 ist eine Wien2K-Rechnung für Minoritätselektronen für eine Fe(100)-Oberfläche von Plucinski et al. [Plu09] gezeigt. Durch den großen Akzeptanzwinkel des Spektrometers wird es möglich, den deutlichen Oberflächenzustand direkt an der Fermikante, der in einem großen Teil der Brillouinzone sichtbar ist, in den UPS-Spektren nachzuweisen.

Spinaufgelöste Messungen Für in-situ präparierte Eisenfilme wurden zwei Intensitätsverteilungen (im Folgenden auch 'Intensitätsbilder' genannt, da sie die 2D-Verteilung in der Art eines Bildes darstellen) bei den zwei verschiedenen Magnetisierungsrichtungen aufgenommen, wie in Kap. 4.2 beschrieben. Die beiden Intensitätsbilder wurden nach Gleichung 4.1 zu einem Asymmetriebild verrechnet, siehe Abb. 4.2, rechts. Das

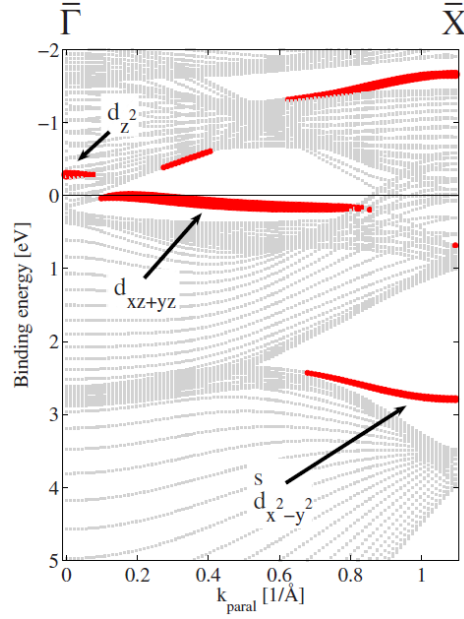


Abbildung 5.11: Minoritätselektronen-Bandstrukturrechnung für die Fe(100)-Oberfläche entlang $\bar{\Gamma}\bar{X}$ (entnommen aus [Plu09]). Berechnung durch Wien2k für ein 30-Atome 'slab' (Platte). Zustände, die sich hauptsächlich an der Oberfläche befinden, sind rot eingezeichnet.

Asymmetriebild zeigt ein für Eisen charakteristisches Muster. In der Nähe der Fermikante ist die Polarisation negativ, hat bei $E_B = 0,2$ eV einen Nulldurchgang und wird bei größeren Bindungsenergien positiv. In Abb. 5.12, oben, ist der Linescan der Polarisation an der Stelle Θ_0 gezeigt. Die Polarisation wird aus der Asymmetrie wie in Gleichung 4.1 errechnet, mit der energieabhängigen Shermanfunktion und Intensitätsresponse. Die experimentell gemessene Polarisation wird mit einer Bandstrukturrechnung von Tange et al. [Tan10] verglichen. In der Veröffentlichung wurde die lokale Zustandsdichte (LDOS) für die ersten 3 Monolagen von Fe(100) und Fe(100) mit Sauerstoffadsorbat über die Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) Green-Funktionenmethode berechnet. Für den Vergleich mit den UPS-Daten wurden die DOS für die einzelnen Eisenschichten gewichtet. Bereits aus Kapitel 2.1.5 ist bekannt, dass die obersten Monolagen der Eisenprobe unterschiedliche Beiträge zu der Gesamtintensität des UPS-Spektrums liefern. Unter der Voraussetzung, dass die Gesamtintensität die ersten 5 Monolagen umfasst (mittlere freie Weglänge in Eisen für die verwendete Anregungsenergie ist 7,7 eV), sind das 28% für die erste Lage (S), 23% für die zweite Lage (S-1), 19,5% für die dritte Lage (S-2), 16,1% für die vierte Lage (S-3) und 13,3% für die fünfte Lage (S-4). Da die LDOS lediglich für die ersten drei Monolagen gerechnet wurde, wird die (S-2)-Lage als Volumen angesehen und trägt dementsprechend so viel bei wie die 3., 4. und 5. Lage zusammen, also 49%. Es gilt also: $I^{\uparrow(\downarrow)} = 0,28I_S^{\uparrow(\downarrow)} + 0,23I_{(S-1)}^{\uparrow(\downarrow)} + 0,49I_{(S-2)}^{\uparrow(\downarrow)}$. Die theoretische LDOS wurde nach der Gewichtung noch mit einer Gaussfunktion der

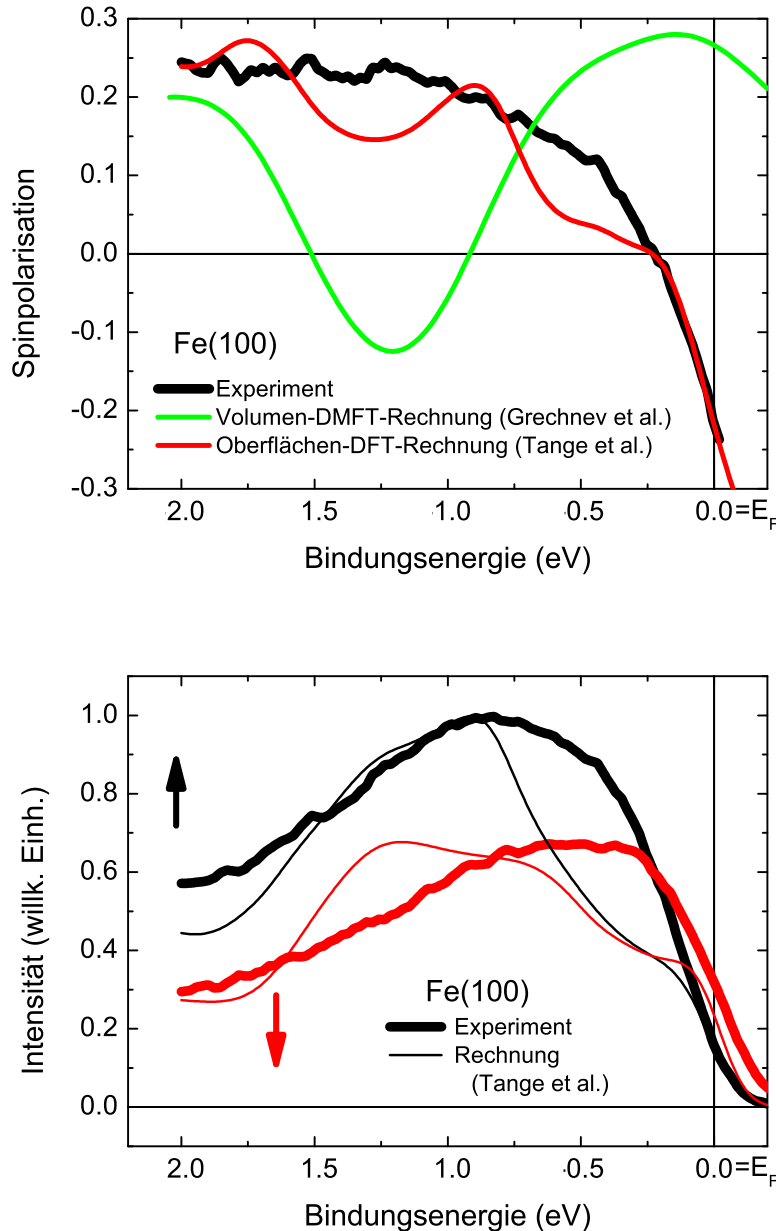


Abbildung 5.12: Spinpolarisation (oben) und Partialintensitäten der Minoritäts- (↓) und Majoritätsladungsträger (↑) (unten) einer Fe(100)-Schicht in Abhängigkeit der Bindungsenergie. Die experimentellen Kurven erscheinen als dicke, die Oberflächen-DFT-Rechnung von Tange et al. [Tan10] als dünne Linien. In der Darstellung der Polarisation ist zusätzlich eine Volumen-DMFT-Rechnung von Grachnev et al. [Gre07] (grün) dargestellt.

Halbwertsbreite 180 meV gefaltet, um die Energieauflösung des SRUPS-Experiments wiederzugeben. Ferner wurde sie mit der Fermifunktion multipliziert, da mit UPS nur die besetzten Zustände gemessen werden. Im Vergleich der theoretischen mit den expe-

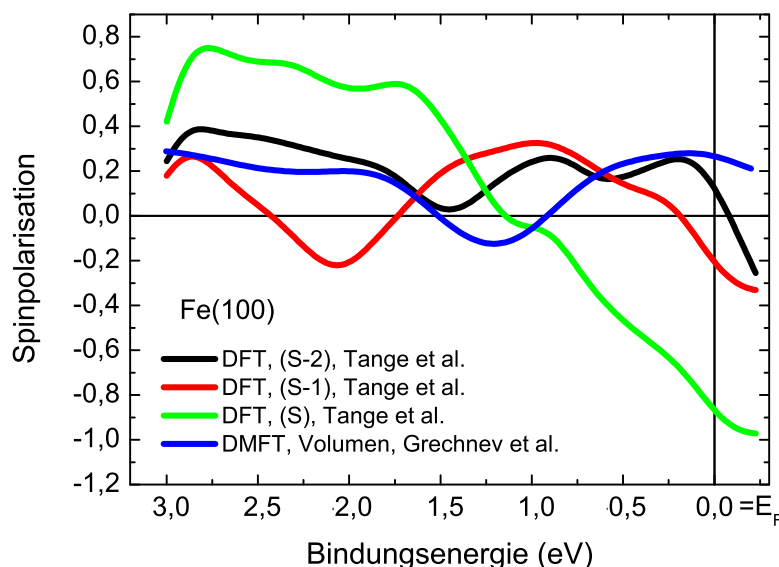


Abbildung 5.13: Vergleich der Oberflächen-DFT- und Volumen-DMFT-Bandstrukturechnungen für Fe(100) nach Tange et al. (DFT, [Tan10]) und Grechnev et al (DMFT, [Gre07]).

rimentellen Daten fällt auf, dass der generelle Kurvenverlauf und die Absolutwerte in der Polarisation gut übereinstimmen. Der Nulldurchgang der experimentellen Kurve stimmt mit dem der Rechnung überein. Die Einzelintensitäten für die beiden Spin-Kanäle können mithilfe von Gleichung 4.2 aus der Asymmetrie errechnet werden. Sie sind in Abb. 5.12, unten, dargestellt. Die experimentellen Kurvenverläufe stimmen mit der Theorie besonders im Bereich der Fermikante gut überein. Die Theorie sagt einen Oberflächenzustand bei $E_B = 0,1$ eV voraus, dessen Existenz auch im Experiment verifiziert werden konnte (ersichtlich durch die negative Polarisation an der Fermikante). Bei größeren Bindungsenergien sagt die Theorie sowohl in den Intensitätsspektren, als auch in der Polarisation Oszillationen voraus, die so vom Experiment nicht wiedergegeben werden. Diese Intensitätsmaxima sind an Stellen hoher Zustandsdichte in der Bandstruktur zu finden. Da die Rechnung von Tange et al. mit DFT durchgeführt wurde, sind dynamische Wechselwirkungen, die eine Verbreiterung der Zustände bewirken, nicht berücksichtigt. In Abb. 5.12 (oben) ist zusätzlich eine Volumen-DMFT DOS von Grechnev et al. [Gre07] gezeigt. Es ist deutlich, dass diese Rechnung die gemessene Polarisation nicht gut beschreibt, da die Kurvenverläufe völlig verschieden sind.

In Abb. 5.13 sind die Oberflächen-DFT und die Volumen-DMFT-Rechnungen miteinander verglichen. Die DFT-Rechnung ist nach Monolagen aufgeschlüsselt dargestellt. Die DMFT-Rechnung und die (S-2)-DFT-Rechnung sehen sich relativ ähnlich. Das erscheint wenig überraschend, da die Bandstruktur der tiefer liegenden Monolagen der Volumenbandstruktur mit großem Abstand zur Oberfläche entsprechen sollte. Es ist

deutlich zu erkennen, dass die DMFT-Rechnung breitere Maxima zeigt als die DFT-(S-2)-Rechnung und zusätzlich nach rechts verschoben ist. Im Vergleich mit Kapitel 2.1.4 ist erkennbar, dass die in der DMFT eingeführte Selbstenergie dafür verantwortlich ist.

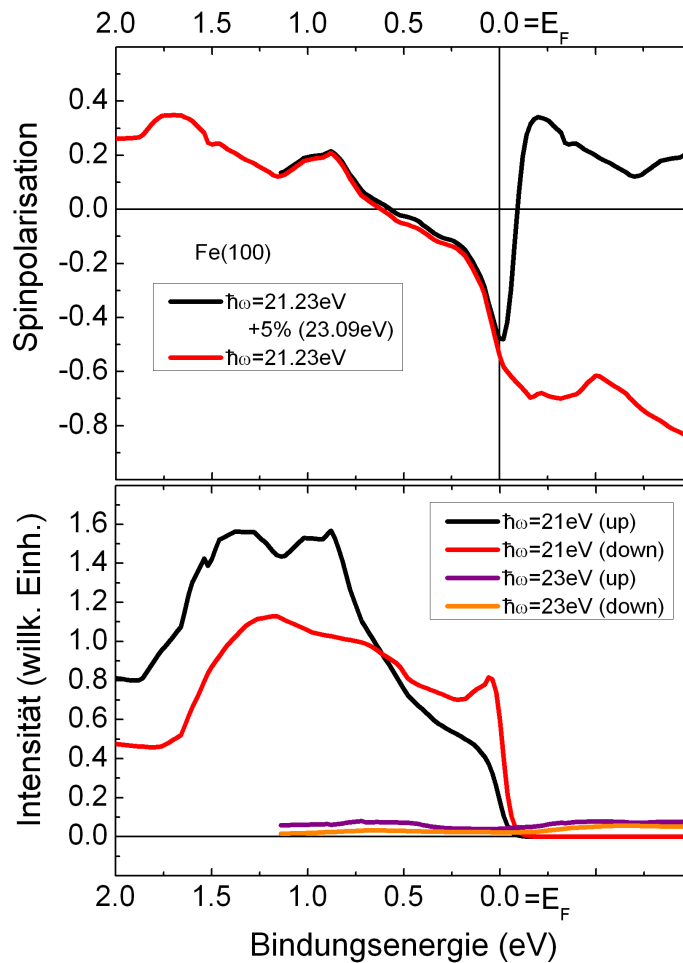


Abbildung 5.14: Vergleich der Spinpolarisation von Fe(100) mit und ohne He I α -Linie. Im Inset sind die zu erwartenden Energiespektren unter Anregung von He I (21,23 eV) und He I α (23,09 eV) im korrekten Intensitätsverhältnis dargestellt. Die Daten wurden aus der Simulation von Tange et al. [Tan10] entnomme (ungefaltet). Die Spektren unter Anregung durch die höhere Energie (He I α , lila und orange) wurde aus einer Gewichtung (Faktor 0,05) und Verschiebung (um 1,86 eV) der He I-Spektren (schwarz und rot) gewonnen. In der großen Darstellung ist die Spinpolarisation in Abhängigkeit der Bindungsenergie inklusive der He I α -Linie (schwarze Linie) und exklusive der He I α -Linie (rote Linie) zu sehen. Man erkennt, dass sich die Polarisationen nur rechts der Fermikante unterscheiden.

Für die Polarisationsmessung ist nun die Oberfläche anscheinend von großer Bedeutung. Sie allein zeigt an der Fermikante (Abb. 5.13) eine hohe negative Polarisation von etwa 90%. Trotz ihres relativ geringen Einflusses (28% in der Gesamtintensität) bringt

sie die gesamte theoretische Polarisation auf einen Wert von -20% an der Fermikante. Dieser Wert stimmt mit dem Experiment überein. Ab etwa 200 meV Bindungsenergie unterscheiden sich Experiment und Theorie signifikant. Dies ist zu erwarten, da die Lebensdauer der Elektronen zur Fermikante hin ansteigt und dementsprechend dynamische Wechselwirkungen keine Rolle mehr spielen. In diesem Moment beschreibt eine Oberflächen-DFT-Rechnung das Experiment hinreichend gut. Mit zunehmender Bindungsenergie sinkt die Lebensdauer, wodurch Zustände verbreitert erscheinen [Kno00]. In diesem Energiebereich wäre also eine Beschreibung durch Oberflächen-DMFT korrekter. Eine DMFT-DOS speziell für eine Fe(100)-Oberfläche wurde allerdings nach jetzigem Stand nicht veröffentlicht. Die Volumen-DMFT-Rechnung ist zur Beschreibung des UPS-Experimentes ungeeignet, da ausschließlich in der Oberflächenschicht eine hohe Polarisation an der Fermikante vorliegt, die das Spektrum maßgeblich beeinflusst.

Das Vorhandensein des um 1,86 eV verschobenen Energiespektrums der He $I\alpha$ -Linie fällt in der Polarisation bei Bindungsenergien unterhalb der Fermikante kaum ins Gewicht, da für die Polarisation die Differenz aus absoluten Zählraten gebildet wird. Das He $I\alpha$ -Spektrum ist um einen Faktor 20 schwächer als das He I Spektrum. Die spinaufgelösten Spektren sind in Abb. 5.14 (unten) dargestellt (entnommen aus der Rechnung von Tange et al. [Tan10], ungefalted). Die Spektren unter Anregung durch die höhere Energie (He $I\alpha$, lila und orange) wurde aus einer Gewichtung (Faktor 0,05) und Verschiebung (um 1,86 eV) der He I-Spektren (schwarz und rot) gewonnen. Lediglich in Energiebereichen, in denen das He $I\alpha$ -Spektrum die Gesamtintensität der Messung ($I_{ges}^{\uparrow(\downarrow)} = I_{21eV}^{\uparrow(\downarrow)} + I_{23eV}^{\uparrow(\downarrow)}$) dominiert (oberhalb der Fermienergie in den dargestellten Spektren), bestimmt es die Polarisation, wie in Abb. 5.14 (oben) gut zu erkennen ist. Die Spinpolarisationen der Spektren inklusive der He $I\alpha$ -Linie (schwarze Linie) und exklusive der He $I\alpha$ -Linie (rote Linie) unterscheiden sich lediglich bei oberhalb E_F deutlich voneinander.

5.2.2 Sauerstoff p(1x1) auf einem Eisen(100)-Film

Eine Fe(100)-Probe mit einer (1x1) Sauerstoffüberstruktur ist relativ inert gegenüber weiterer Oxidation und kann in einer Vakuumkammer mit gutem Basisdruck mehrere Wochen bestehen, ohne dass sich das UPS-Spektrum dieser Probe verändert. In bisherigen spinaufgelösten UPS-Messungen wurde stets der spinaufgespaltene O 2p-Peak untersucht. Dieser zeigt eine Austauschaufspaltung, die abhängig ist von der Menge des angebotenen Sauerstoffs, siehe z.B. [Get95a, Get95b]. Durch die neuere DFT-Simulation der Oberfläche von reinem Eisen und Eisen mit Sauerstoff-Überstruktur [Tan10] ist jedoch besonders die Region in der Nähe der Fermikante von Interesse. Die Simulation zeigt, dass durch die Bildung der p(1x1)-Überstruktur neue Zustände in der Nähe der Fermikante entstehen, die dort eine hohe Photoelektronen Spinpolarisation vermuten lassen. Gleichzeitig wird der Oberflächenzustand in der Minoritätselektro-

nendichte von Fe(100) durch das Adsorbat unterdrückt, was insgesamt in der Nähe der Fermikante zu dem umgekehrten Vorzeichen der Polarisierung bei einer oxidierten Fe(100)-Probe im Vergleich zu einer sauberen Fe(100)-Proben führen sollte.

Präparation Nach der Messung des Spektrums der reinen Fe(100)-Oberfläche wurden 6 Langmuir Sauerstoff in die Kammer gelassen (1 Langmuir entspricht 10^{-6} Torr · s). Diese Menge Sauerstoff führt bei einer sauberen Fe(100)-Schicht dazu, dass sich eine p(1x1)-Überstruktur atomaren Sauerstoffs auf die Eisenprobe legt [Tan10]. Der Sauerstoffdosierer befindet sich in der Spindetektorkammer. Zur Oxidation wurden beide Ventile zwischen Haupt- und Spindetektorkammer geöffnet und die Sauerstoffmenge mit einem Massenspektrometer in der Hauptkammer kontrolliert. Nach der Oxidation wurden beide Ventile wieder geschlossen. Der W(100) Spinfilterkristall wurde vor der Messung mit einem 1500 K-Flash von Sauerstoffadsorbaten gereinigt, siehe Kapitel 3.2.3.

Spinaufgelöste Messungen Für die O p(1x1) auf Fe(100)-Oberfläche wurden wiederum zwei Intensitätsbilder bei den zwei verschiedenen Vorzugsmagnetisierungsrichtungen aufgenommen und zu einem Asymmetriebild verrechnet. In Abb. 5.15, oben, ist der Linescan der Polarisierung an der Stelle Θ_0 gezeigt. Die Polarisierung wird aus der Asymmetrie wie in Gleichung 4.1 errechnet, mit der energieabhängigen Shermanfunktion und Intensitätsresponse. Die experimentell gemessene Polarisierung von O p(1x1)/Fe(100) wird ebenfalls mit einer Bandstrukturechnung aus der Veröffentlichung von Tange et al. [Tan10] verglichen. Dazu wurden die einzelnen Monolagen wieder wie bei der reinen Eisenprobe gewichtet.

Die Polarisierung ist bei allen Bindungsenergien positiv, wie in Abb. 5.15 zu sehen ist. Dies wird durch die Rechnung bestätigt. Der Kurvenverlauf der experimentellen Daten allerdings wird in der Theorie nicht wiedergegeben. Es wird für O p(1x1)/Fe(100) eine hohe positive Polarisierung in der Nähe der Fermikante vorhergesagt, die bis $E_B = 1,7$ eV abnimmt und danach wieder ansteigt. In der Messung ist eine so große Variation der Polarisierung in Abhängigkeit der Energie nicht zu verzeichnen. In den Einzelintensitätsspektren für Majoritäts- und Minoritätsladungsträger ist wiederum eine gute Übereinstimmung mit der Theorie in der Nähe der Fermikante gegeben. Der Oberflächenzustand bei $E_B = 0,1$ eV ist aufgehoben, das Maximum der Minoritätselektronen ist im Vergleich zu Fe(100) zu kleineren Bindungsenergien verschoben. Eine charakteristische Schulter in der Majoritätselektronenintensität bei $E_B = 0,5$ eV wird sowohl in der Theorie als auch im Experiment gesehen. Bei größeren Bindungsenergien ist wiederum eine Oszillation der Theoriespektren erkennbar, die nicht von dem Experiment wiedergegeben wird. Die Polarisierung zwischen 1 eV und 2 eV Bindungsenergie sieht der Polarisierung von reinem Eisen ähnlich. Sie ist leicht reduziert (von 25% in der Eisenmessung auf 22% bei E_F). Im Gegensatz zu der reinen Eisenprobe wird nun keine negative Polarisierung gemessen. Der Oberflächenzustand des Minoritätskanals

ist unterdrückt. Die Vermutung liegt nahe, dass sich die O p(1x1)-Deckschicht nicht vollständig ausgebildet hat. Die Polarisation des reinen Eisens scheint das Spektrum weiterhin zu dominieren.

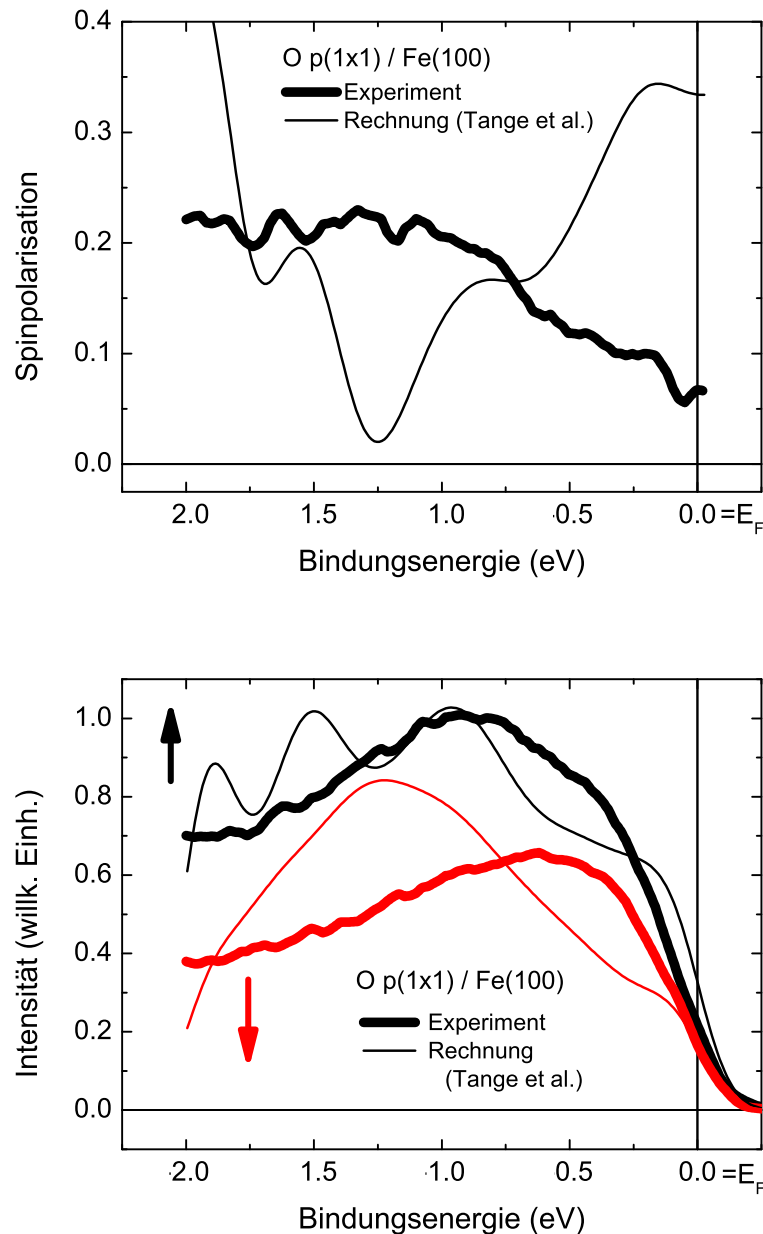


Abbildung 5.15: Spinpolarisation (oben) und Partialintensitäten der Minoritäts- (↓) und Majoritätsladungsträger (↑) (unten) einer O p(1x1) Überstruktur auf Fe(100) in Abhängigkeit der Bindungsenergie. Die experimentellen Kurven erscheinen als dicke, die berechneten Spektren von Tange et al. [Tan10] als dünne Linien.

Als weitere Erklärung für die schlechte Übereinstimmung von Messung und Rechnung kann angeführt werden, dass schon bei der Charakterisierung der Fe(100)-Probe auffiel,

dass es Gitterverspannungen gab, da der Fe(100)-Peak in der Röntgenbeugung stark verbreitert und verschoben gegenüber dem Volumenwert war. Auf einer nicht-perfekten Eisenoberfläche kann keine perfekte $O p(1 \times 1)$ Struktur gebildet werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Hauptkammer des Experiments als Präparationskammer nur wenig geeignet ist, da einerseits lediglich ein Verdampfer vorhanden ist, also immer nur Proben eines Materials präpariert werden können. Zusätzlich ist es aufgrund der Größe der Kammer schwierig, eine Probencharakterisierung in-situ, z.B. durch ein LEED-System, zu ermöglichen. Dadurch werden Proben in dieser Kammer stets 'blind' präpariert und über die Qualität der analysierten Probe kann erst ex-situ eine Aussage gemacht werden. Für spätere Anwendungen ist es sinnvoll, entweder die Hauptkammer mit Charakterisierungsgeräten zu erweitern, oder Proben, die in einer anderen Vakuumapparatur hergestellt wurden, in die Spindetektor-Hauptkammer einzuschleusen. Die zweite genannte Möglichkeit wurde bereits erfolgreich verifiziert und ist im nächsten Kapitel vorgestellt.

6 Messungen an Heuslerverbindungen

Unter Heuslerverbindungen versteht man intermetallische Verbindungen mit einer speziellen Gitterstruktur ($L2_1$). Im Allgemeinen sind diese Verbindungen ferromagnetisch, wobei es auch Ausnahmen (z.B. nicht-magnetische Supraleiter mit Heusler-Struktur [Aok00]) gibt. Historisch wurden die Verbindungen nach F. Heusler benannt, der in dieser Struktur einen Ferromagneten aus nichtmagnetischen Elementen gefunden hat [Heu03]. Es werden unterschiedliche Typen von Heuslerverbindungen nach der Zusammensetzung unterschieden. Von Interesse sind hier vor allem die Heusler-Legierungen mit der Zusammensetzung X_2YZ (jeder Buchstabe steht für ein Legierungselement) und sogenannte 'substitutional alloys', die 4 Elemente nach den Formeln $X_2Y_{1-x}Y'_xZ$ oder $X_2YZ_{1-x}Z'_x$ enthalten. Bei den hier vorgestellten Heuslerverbindungen handelt es sich bei dem Element X um Kobalt, während Y Übergangsmetalle und Z Elemente der III. und IV. Hauptgruppe sind. Die Kristallstruktur einer Heuslerverbindung besteht aus 4 ineinander geschachtelten kubisch-flächenzentrierten Teilgittern. Sind die Teilgitter perfekt geordnet, also alle Atome auf den richtigen Gitterplätzen, spricht man von einer $L2_1$ -Ordnung, siehe Abb. 6.1. Unter Vertauschung von Atomen der Teilgitter Y und Z entsteht eine ungeordnete B2-Struktur. Herrscht Unordnung auf allen Gitterplätzen, wird dies als A2-Struktur bezeichnet.

Bandstrukturrechnungen sagen für einige dieser Verbindungen eine Energielücke an der Fermienergie für einen Spinkanal und metallische Eigenschaften für den anderen Spinkanal voraus [dG83], was als Halbmetall-Ferromagnetismus bezeichnet wird. Daraus folgt theoretisch eine bis zu 100 %ige Spinpolarisation in der Bandlücke, deren energetische Position je nach Legierung variiert. Eine so hohe Spinpolarisation, die für alle Leitungselektronen gilt, stellt eine Besonderheit dar. Deshalb ist die Forschung an Heuslerverbindungen insbesondere für Spintronikanwendungen aktuell von großem Interesse. Die theoretischen Vorhersagen ihrer halbmetallischen Eigenschaften haben viele Experimente zu deren Erforschung eingeläutet [Gal02, Pic02], der experimentelle Nachweis der besonders hohen Spinpolarisation allerdings stellt bis zum heutigen Tag immer noch eine Herausforderung dar.

Die winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie nutzt einen Energiebereich, mit dem es möglich ist, die interessante Region in der Nähe der Fermikante eines Heusler-Halbmetalls mit guter Energieauflösung zu untersuchen. Aufgrund der Oberflächensensitivität stellt es eine große experimentelle Anforderung dar, Heusler-Proben zu präparieren, die an der Oberfläche perfekt geordnet sind, also die sogenannte $L2_1$ -Struktur besitzen. Eine Abweichung von dieser Ordnung ist gleichbedeutend mit einer Redukti-

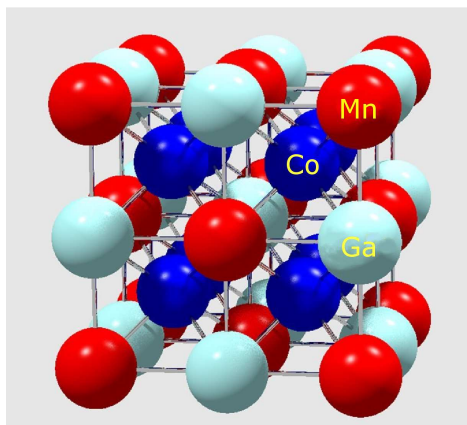


Abbildung 6.1: $L2_1$ -Struktur einer Heuslerverbindung [Abb]. Auf den roten, blauen und hellblauen Gitterplätzen befinden sich Kobalt, Mangan und Gallium-Atome für das Beispiel Co_2MnGa .

on der Spinpolarisation [Miu04]. In der Vergangenheit wurde Valenzbandspektroskopie an Heuslerverbindungen verifiziert, indem entweder Volumenproben in-situ gebrochen oder poliert wurden [Wur06, Miy07, Ima07], oder indem eine Dünnschichtprobe präpariert und mit einer dünnen Schutzschicht von z.B. Aluminium abgedeckt wurde. Die Probe wurde dann ex-situ zu der Messkammer transportiert und die Schutzschicht durch eine Abfolge von Sputter- und Temperprozessen in der Messkammer entfernt [Cor06, Cin07].

Wenn komplexe intermetallische Verbindungen wie die Heuslerverbindungen mit einer solchen Methode untersucht werden, hat dies zur Folge, dass die Oberflächenordnung und die Stöchiometrie mehr oder weniger stark zerstört werden. Um diesem Problem aus dem Weg zu gehen, wurde die Methode der 'hard x-ray photoemission spectroscopy' (HAXPES) eingeführt, die aufgrund ihrer großen Informationstiefe in der Lage ist, Photoelektronen aus dünnen Heuslerschichten mit Abdeckschicht zu messen (e.g. [Miy09, Oua09]). Alternativ wurden unabgedeckte dünne Heusler-Filme (hergestellt durch gepulste Laser Deposition) mit Hilfe eines Vakuumschiffs von der Präparationskammer zu einem Synchrotron für spinaufgelöste Photoemissionsspektroskopie gebracht [Wan05]. Heuslermaterialien sind generell sehr empfindlich betreffend Oxidation, was die Bandstruktur im Oberflächenbereich und damit die Photoemissionsspektren verändert [Her09, Jou11]. Dies könnte die lediglich kleinen gemessenen Polarisierungen von Heuslermaterialien erklären. Beispielsweise wurden für Co_2MnSi nur 12% Polarisierung an einem Synchrotron und nach Transport mit einem Vakuumschiff gemessen [Wan05]. Ein Wert von 20% [Wü09] oder bis zu 45% [Cin07] wurden bei einem ex-situ Transport mit abgedeckter $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ -Dünnschichtprobe gefunden. Die Deckschicht wurde für die Messungen in der Analysekammer abgesputtert und die Probe getempert. Allerdings bleibt zu sagen, dass die bisher gezeigten Energieabhängigkeiten der Photoemissionsmessungen nicht die theoretischen Kurven für Volumenproben wi-

derspiegeln [Wur06]. Es kann spekuliert werden, dass der Sputter-Reinigungsschritt zu einer ungeordneten Oberfläche auf der Längenskala der UPS Nachweistiefe (0.5 nm) führt. Prinzipiell kann jedoch auch nicht ausgeschlossen werden, dass die Bandstruktur an der Oberfläche auch bei perfekter $L2_1$ -Ordnung nicht der intrinsischen Bandstruktur entspricht [Lez05, Ahm11].

Die dünnen Heuslerschichten in diesem Experiment werden durch ein Sputterverfahren mit stöchiometrischen Targets hergestellt. Da es dafür einer speziellen Sputteranlage bedarf, wurden die Proben in einer Präparationskammer in einem anderen Labor im Gebäude hergestellt und mittels eines Vakuumpuffers in die SRUPS-Kammer (SRUPS = spin aufgelöste Ultraviolett Photoelektronen-Spektroskopie) gebracht.

Die spinabhängige Analyse der Heuslerverbindungen mit dem Vielkanal-SRUPS-Experiment ist besonders sinnvoll, da die Spinpolarisation in einem Energieintervall von 3 eV in einem Zeitraum (30 min) gemessen werden kann, in dem sich die Oberfläche der Probe durch Oxidation oder Kontamination kaum verändert.

6.1 Probenpräparation und Transfer

Da bekannt ist, dass die Höhe der gemessenen Spinpolarisation der Heuslermaterialien maßgeblich von der Qualität der Probe beeinflusst wird, wurde in dieser Arbeit viel Wert auf eine gründliche Präparation einer guten Oberfläche und auf eine möglichst geringe Oxidation gelegt. Mit Co_2MnGa wurde ein Material verwendet, das für eine Heuslerverbindung relativ unempfindlich gegenüber Oxidation ist. Die Heusler-Verbindung $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ hingegen ist reaktiver, die Theorie verspricht für diese Verbindung allerdings eine nahezu vollständige Spinpolarisation an der Fermienergie.

Die epitaktischen Heusler-Schichten wurden durch rf-Magnetron Sputtern von stöchiometrischen Targets auf $\text{MgO}(100)$ Substrate bei Raumtemperatur hergestellt. Die Sputterkammer ist Teil eines Molecular Beam Epitaxie-Clusters (Typ Omicron). Der Basisdruck in der Sputterkammer betrug $\simeq 2 \cdot 10^{-9}$ mbar. Die Filme wurden bei einer Temperatur von 550°C getempert und in-situ mit Elektronendiffraktometrie (RHEED) charakterisiert. Eine in-situ Charakterisierung durch spinintegriertes UPS erfolgte mit identisch hergestellten Proben bereits im Vorfeld [Her09, Jou11].

Die Proben wurden mit einem Vakuumpuffer von der Präparationskammer in die SRUPS Kammer transportiert. Im Koffer herrschte ein Basisdruck von $\simeq 8 \cdot 10^{-10}$ mbar, er wurde mit einer Getterpumpe batteriebetrieben gepumpt. Zusätzlich wurde eine Kühlfalle mit flüssigem Stickstoff in dem Koffer betrieben, um den Wasserpartialdruck zu reduzieren. Nachdem der Vakuumpuffer mit der SRUPS Kammer verbunden war, wurde das Zwischenstück für 3 Stunden ausgeheizt und zügig wieder abgekühlt. Nach dem Abkühlen wurde in dem Verbindungsstück ebenfalls eine Kühlfalle betrieben. Der gesamte Ausheizvorgang dauerte ca. 4 Stunden und der danach erreichte Druck im Zwischenstück betrug $\simeq 8 \cdot 10^{-9}$ mbar. Die Probe wurde in die SRUPS Kammer transferiert (Basisdruck hier $\simeq 5 \cdot 10^{-10}$ mbar). Unmittelbar danach wurde zur Kontrolle

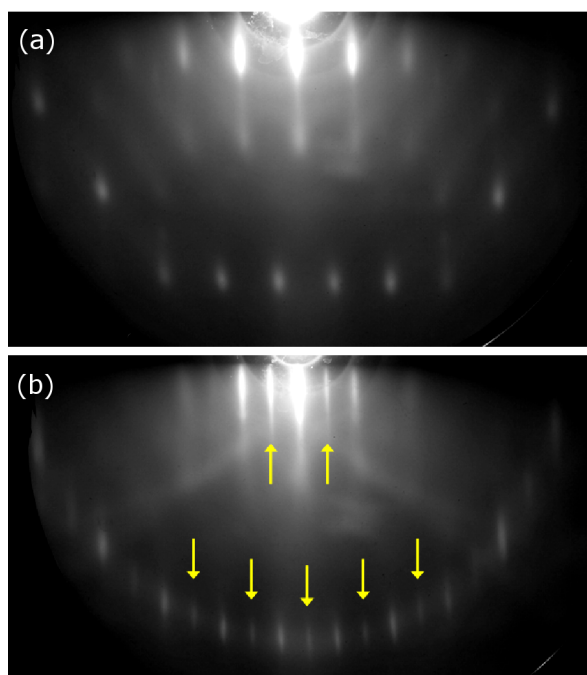


Abbildung 6.2: (a) RHEED-Aufnahme eines Co_2MnGa -Films direkt nach dem Sputtern. (b) Derselbe Film nach einem Temper-Schritt bei 550°C . Die dabei entstehende $L2_1$ Struktur, die ein Indiz für eine wohlgeordnete Oberfläche ist, kann durch die zusätzlich auftretenden Reflexe (obere Pfeile) identifiziert werden.

ein spinintegriertes UPS Spektrum aufgenommen. Zwischen der Präparation der Probe und der Aufnahme des ersten Spektrums waren ca. 4,5 Stunden vergangen.

6.2 Co_2MnGa auf $\text{MgO}(100)$

Für das moderat reaktive Heuslermaterial Co_2MnGa ist die mit DFT simulierte Volumen-Spinpolarisation der besetzten Zustände nach [Gal06] an der Fermikante positiv und beträgt 67%, die Mitte der Bandlücke liegt im unbesetzten Teil der Bandstruktur, bei $E_B = -0,3\text{ eV}$.

Charakterisierung In Abbildung 6.2 sind Elektronendiffraktometriebilder (RHEED) des Co_2MnGa -Films zu sehen. Der Elektronenstrahl war parallel zu der (100)-Richtung ausgerichtet. Das obere Teilbild zeigt eine Aufnahme für die frisch präparierte Probe, das untere Teilbild zeigt dieselbe Probe nach der Temper-Prozedur. Das Auftauchen von zusätzlichen Streifen, die die Periodizität halbieren, gibt die $L2_1$ -Ordnung des Heusler-Films in der Oberflächenregion wieder. Zusätzlich wurde nachträglich der für eine $L2_1$ -Ordnung indikative (111)-Reflex mit Röntgendiffraktion gefunden.

Das magnetische Moment des dünnen Films wurde zu $3.2\mu_B/\text{f. u.}$ (f. u. = Formel-

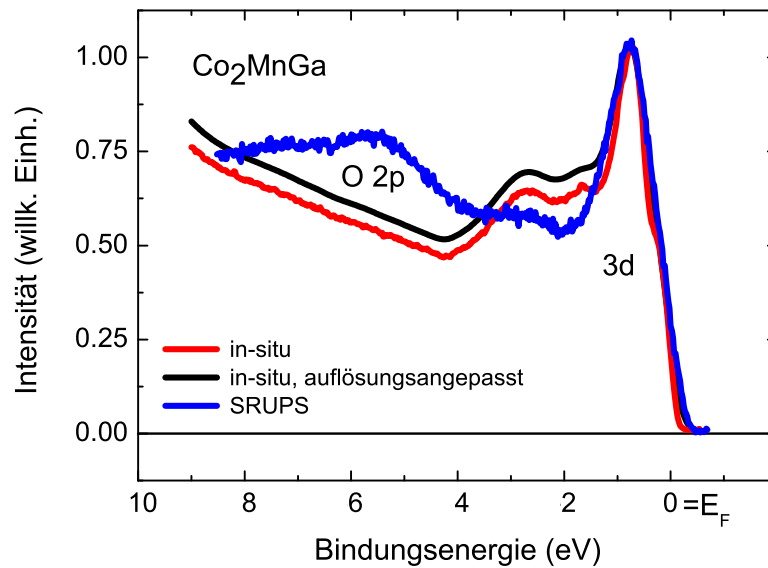


Abbildung 6.3: Vergleich zwischen einem in-situ He I UPS Spektrum eines Co₂MnGa-Films mit einer Energieauflösung von 110 meV (rote Linie), dasselbe Spektrum mit einer 200 meV Gaußfunktion gefaltet um die Auflösung der in-situ-Messung an die Auflösung des SRUPS-Aufbaus anzupassen (schwarze Linie) und das spinintegrierte UPS-Spektrum, das mit dem SRUPS-Aufbau nach dem Transport in dem Vakuumkoffer gemessen wurde (blaue Linie). Die Intensitäten wurden im Maximum angepasst.

einheit) bei $T = 20$ K bestimmt, was eine Reduktion im Vergleich zu theoretischen Vorhersagen von $4\mu_B/f.$ u. [Gal06] ist. In Anlehnung an [Öz06] entspricht dies $\simeq 20\%$ vertauschten Atomen auf Mn/Ga Plätzen, was die Spinpolarisation verringert.

Abb. 6.3 zeigt das erste UPS-Spektrum in der SRUPS-Kammer von Co₂MnGa im Vergleich mit dem in-situ aufgenommenen Spektrum in der Präparationskammer. Zusätzlich wurde das in-situ aufgenommene Spektrum mit einer Gaußfunktion mit der mittleren Halbwertsbreite von 200 meV gefaltet um der schlechteren Auflösung in der SRUPS Kammer Rechnung zu tragen. Man kann erkennen, dass die Spektren sehr gut in einem Bereich bis etwa 4 eV unterhalb der Fermikante übereinstimmen. In diesem Bereich liegen drei Intensitätsmaxima, bei den Bindungsenergien 0,8 eV, 1,8 eV und 2,8 eV. In dem Spektrum der transportierten Probe ist deutlich die einsetzende Oxidation zu verzeichnen, die sich durch den entstehenden Peak bei $E_B = 5,5$ eV erkennen lässt. Das Maximum bei 2,8 eV erscheint abgeschwächt und das Maximum bei 1,8 eV ist in dem Spektrum der SRUPS-Kammer unterdrückt, was den Schluss zulässt, dass sich die Bandstruktur im Oberflächenbereich der Probe durch die Oxidation verändert hat.

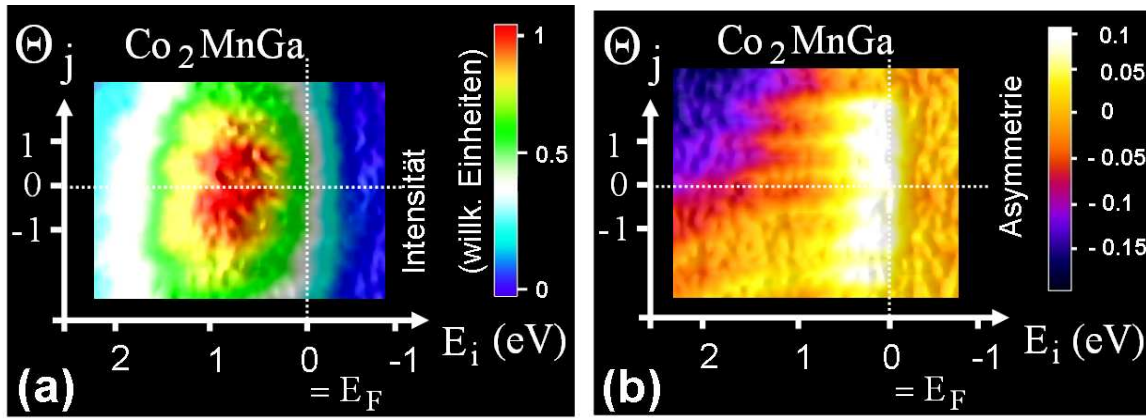


Abbildung 6.4: (a) Zweidimensionale Elektronenintensitäts-Verteilung von Co_2MnGa . Die dispersive und nichtdispersive Richtung sind mit E_i und Θ_j bezeichnet. Die Intensitätsverteilung ist als Falschfarbenkarte gezeigt und gehört zu einem Photoelektronenspektrum ($\hbar\omega = 21,23$ eV) eines aufmagnetisierten dünnen Co_2MnGa -Films nahe der Fermikante. (b) 2D Asymmetrie-Muster, das aus zwei Intensitäts-Verteilungen, aufgenommen mit unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen, nach Gl. 4.1 berechnet wurde. Die Intensitätsvariation in Abhängigkeit des Streuwinkels wurde nicht korrigiert.

Spinaufgelöste Messungen Intensitäts- und Asymmetrieverteilungen von Co_2MnGa sind in Abb. 6.4 zu sehen. Sie wurden nach dem gleichen Verfahren aufgenommen wie die Bilder der Messung an $\text{Fe}(100)$, siehe Kap. 4.2. Der Spinfilter-Kristall wurde nach jedem Intensitätsbild bei 1500 K geflasht, wobei beide Ventile zwischen Haupt- und Spinfilterkammer geschlossen waren. Das Intensitätsbild zeigt ein Maximum bei $E_B \simeq 0,7$ eV, die Fermikante ist gut erkennbar. Die Asymmetrie ist positiv an der Fermikante und negativ bei höheren Bindungsenergien, was an der Farbskala abgelesen werden kann.

In Abb. 6.5a ist die Photoelektronen-Spinpolarisation in Abhängigkeit der Energie aufgetragen. Die Polarisation wurde durch einen Linescan bei Θ_0 des Asymmetriebildes nach Gleichung 4.1 erhalten. Der Maximalwert wird an der Fermienergie erreicht und beläuft sich auf 34%. Die Spinpolarisation zeigt einen monotonen Verlauf mit einem Vorzeichenwechsel bei $E_B = 0.6$ eV. Zusätzlich ist in der Abbildung eine gerechnete Polarisation von Galanakis et al. [Gal06] gezeigt. In [Gal06] sind Zustandsdichterechnungen aus der Dichtefunktionaltheorie ('full potential screened Korringa-Kohn-Rostoker-Methode mit local spin-density approximation', LDA-FSKKR) für Co_2MnGa zu finden. Die theoretische Polarisation wurde aus der normierten Differenz der Zustandsdichten von Majoritäts- und Minoritätsladungsträgern berechnet. Für einen Vergleich mit der gemessenen Polarisation wurde die theoretische Kurve wiederum mit einer Gaußfunktion der Halbwertsbreite 200 meV gefaltet, um der Energieauflösung des Spektrometers Rechnung zu tragen. Da im Experiment nur besetzte Zustände beobachtet werden

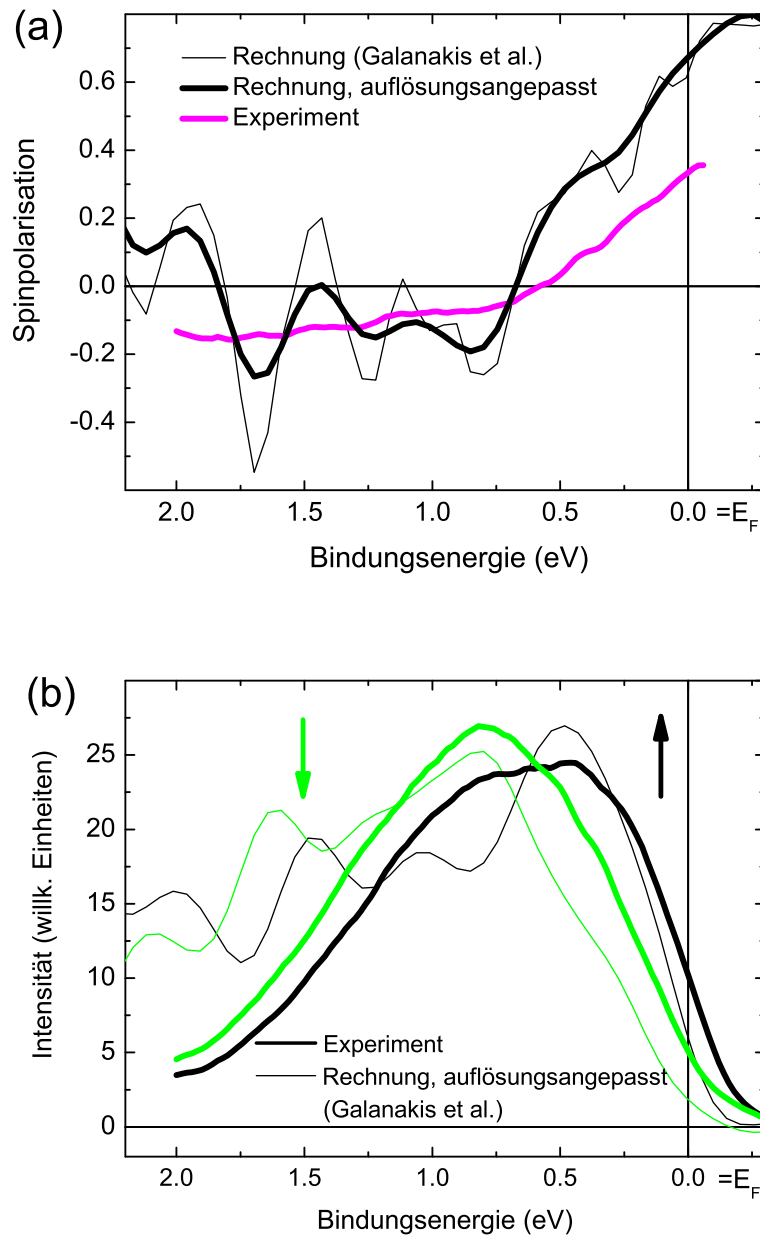


Abbildung 6.5: Photoelektronen-Spinpolarisation (a) und Partialintensitäten (b) der Minoritäts- (\downarrow , grün) und Majoritätsladungsträger (\uparrow , schwarz) von Co₂MnGa in Abhängigkeit der Bindungsenergie ($\hbar\omega = 21,23$ eV). Die experimentellen Kurven erscheinen dick rosa (a) und dick grün und schwarz (b). Die theoretischen Spektren sind aus [Gal06] entnommen und zur Auflösungsanpassung mit einer Gaußfunktion gefaltet.

können, wurde die theoretische Zustandsdichte zusätzlich mit der Fermifunktion bei Raumtemperatur multipliziert. Eine grobe Übereinstimmung der Kurvenverläufe zwischen der theoretischen und der gemessenen Polarisierung ist klar erkennbar, z.B. stimmt der Nulldurchgang der Polarisierung gut überein.

Das einfache Modell zur Identifikation der Photoelektronen-Spinpolarisierung mit der totalen Zustandsdichte ist zu rechtfertigen, da erwartet wird, dass die Heuslerverbindungen in der Nähe der Fermikante lediglich d-Zustände aufweisen (keine Übergangsbote zu dem sp-Endzustand, welche die Intensitätsverhältnisse ändern könnten). Ferner führt der große Akzeptanzwinkel des Spektrometers ($\pm 10^\circ$) in Verbindung mit der großen Heusler-Einheitszelle zu einer k-Raum Mittelung (die gerechnete Zustandsdichte ist ebenfalls k-Raum-gemittelt). Es konnte gezeigt werden, dass dieses Modell zu plausiblen Resultaten führt [Jou11], obwohl eine bessere theoretische Beschreibung die Übergangsmatrixelemente zwischen Grund- und angeregtem Zustand berücksichtigen müsste [Hü03].

Die spinaufgelösten Photoemissionsintensitäten für Majoritäts- und Minoritätszustände nach Gl. 4.2 sind in Abb. 6.5b gezeigt. Wiederum ist die Ähnlichkeit mit den Theoriekurven, insbesondere in der Nähe der Fermikante, augenscheinlich. Die Majoritätsladungsträger zeigen ein breites Intensitätsmaximum bei $E_B = 0,6$ eV, die Minoritätsladungsträger haben ein Maximum bei $E_B = 0,8$ eV. Ein scharfer Peak bei $E_B = 0,45$ eV auf dem breiten Maximum kann bei den Majoritätselektronen sowohl in der Theorie gefunden als auch im Experiment nachgewiesen werden.

Die energieabhängigen Photoemissionsintensitäten und die experimentell erhaltene Spinpolarisierung zeigen wie bei den Messungen an Eisen generell weniger ausgeprägte Strukturen als die Rechnung. Die Theoriekurven haben einige Oszillationen mit Maxima in der Polarisierung bei den Bindungsenergien 0,5 eV, 1,1 eV, 1,4 eV und 1,9 eV. Die gemessene Kurve scheint eine Mittelung über die Oszillationen der Theorie wiederzugeben. Wie bei Eisen ist der Grund dafür in der DFT-Rechnung zu suchen, die keine dynamischen Wechselwirkungen beinhaltet. Letztere führen zu einer deutlichen Verbreiterung der Zustände.

Das experimentell ermittelte magnetische Moment, das reduziert war im Vergleich zur Theorie deutet auf eine Unordnung von Atomen auf Mn/Ga-Plätzen von $\simeq 20\%$ hin, was die Spinpolarisierung verringert. So kann erklärt werden, dass im Experiment nur 34% Spinpolarisierung im Vergleich zu den theoretisch erwarteten 67% gefunden wurden. Nicht zuletzt führt auch eine einsetzende Oberflächenoxidation, wie in Abb. 6.3 diskutiert, zu einer reduzierten Polarisierung der Probe in Oberflächennähe.

Trotz der reduzierten Polarisierung ist der Wert von 34% einer der höchsten bisher publizierten Werte für Heuslerverbindungen. Für Co_2MnGa ist es der bisher höchste gemessene Polarisationswert. Die Glaubhaftigkeit der Messung (hinreichende Qualität der Probe) ist vor allem durch den mit der Theorie gut übereinstimmenden Kurvenverlauf gegeben [Hah11].

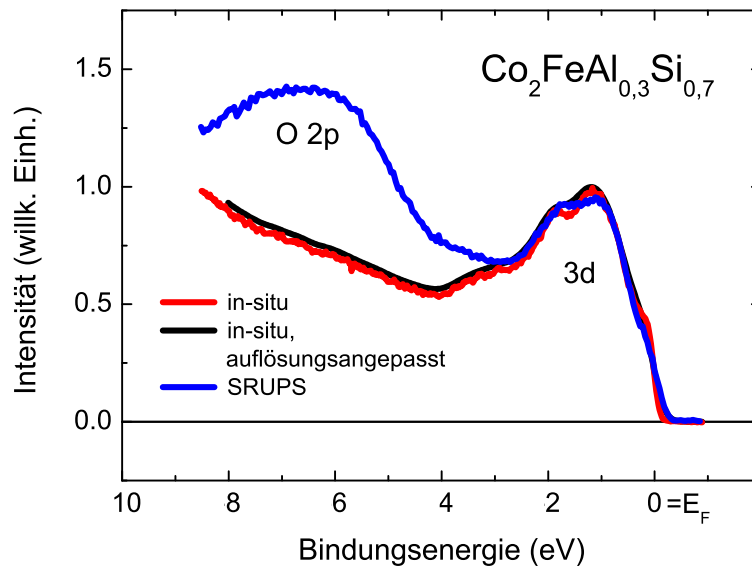


Abbildung 6.6: Vergleich zwischen einem in-situ HeI UPS Spektrum eines $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ -Films mit einer Energieauflösung von 50 meV (rote Linie), dasselbe Spektrum gefaltet mit einer 200 meV Gaußfunktion um die Auflösung der in-situ-Messung an die Auflösung des SRUPS-Aufbaus anzupassen (schwarze Linie) und das spinintegrierte UPS-Spektrum, das mit dem SRUPS-Aufbau nach dem Transport in dem Vakuumkoffer gemessen wurde (blaue Linie).

6.3 $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ auf $\text{MgO}(100)$

$\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ ist wesentlich reaktiver als Co_2MnGa , was sich durch eine früh einsetzende Oxidation des Materials bemerkbar macht. Die Mitte der Bandlücke liegt bei der gemessenen Zusammensetzung nach [Fec07] direkt an der Fermikante. Die berechnete Spinpolarisation ist hier positiv und beträgt 100%, gefolgt von einer hohen negativen Polarisation von -70% bei $E_B = 0,7$ eV.

Charakterisierung Die $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ -Probe wurde ebenfalls in-situ mit RHEED charakterisiert (das Bild ist hier nicht gezeigt da es dem RHEED-Bild der Co_2MnGa -Probe stark ähnelt). Die frisch präparierten Filme zeigen bereits eine B2-Ordnung auf den Plätzen des Co. Nach dem Tempern war wie bei Co_2MnGa eine $L2_1$ -Struktur vorhanden.

Das magnetische Moment wurde mit einem VSM-Magnetometer zu $4,9\mu_B/\text{f.u.}$ bestimmt [AJ10]. Von der Theorie wird ein Wert für eine gekühlte Volumenprobe von $5,75\mu_B/\text{f.u.}$ vorhergesagt [Bal07]. Der experimentelle Wert ist wiederum kleiner als der theoretische Wert, woraus auf eine leichte Unordnung des kristallinen Systems geschlos-

sen werden kann.

Nach dem Proben-transport und dem Ausheizen des Zwischenstücks wurde direkt ein UPS-Intensitätsscan durchgeführt und mit dem in-situ Spektrum verglichen, siehe Abb. 6.6. Der entstandene Oxidpeak bei einer Bindungsenergie von 6 eV dominiert bei dieser Verbindung das Energiespektrum nach dem Transport. In-situ ist praktisch kein Sauerstoff vorhanden. Die Doppelpeakstruktur bei den Bindungsenergien 1,15 eV und 1,85 eV konnte in der Messung nach dem Transport zwar reproduziert werden, die Intensitätsverhältnisse der beiden Peaks haben sich im direkten Vergleich aber verändert. Bei der UPS-Messung vor dem Transport beträgt das Verhältnis aus den beiden Peakhöhen 0,1, wobei der Peak bei 1,15 eV in der Intensität höher erscheint. Nach dem Transport erscheinen jedoch beide Peaks in der Intensität etwa gleich, das Verhältnis ist nun 1,02. Die beiden Peaks sind verbreitert im Vergleich zu dem in-situ Spektrum. Die Doppelpeakstruktur war bei in-situ Proben in der Präparationskammer ein Indiz für eine nicht zu stark oxidierte Probe [Jou11]. Zusätzlich ist in dem SRUPS-Spektrum eine neue, schulterartige Struktur bei 0,75 eV zu erkennen und die Fermikante erscheint unschärfer als in der auflösungsangepassten in-situ Messung. Diese Änderungen im 3d-Spektralbereich deuten klar auf Sauerstoff-induzierte Änderungen der Bandstruktur im Oberflächenbereich hin.

Spinaufgelöste Messung Intensitäts- und Asymmetrieverteilungen von $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ sind in Abb. 6.7 zu sehen. Sie wurden nach dem gleichen Verfahren aufgenommen wie die Daten der Eisenmessung, siehe Kap. 4.2. Der Spinfilter-Kristall wurde nach jedem Intensitätsbild bei 1500 K geflasht, wobei beide Ventile zwischen Haupt- und Spinfilterkammer geschlossen waren. Das Intensitätsbild zeigt ein Maximum bei ca. $E_B = 1$ eV, die Fermikante ist gut erkennbar. Die Asymmetrie ist positiv an der Fermikante und negativ bei höheren Bindungsenergien, was an der Farbskala abgelesen werden kann. In Abb. 6.8a ist die gemessene Photoelektronen Spinpolarisation der $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ -Probe, die durch einen Linescan des Asymmetriebildes bei Θ_0 nach Gleichung 4.1 erhalten wurde, mit einer Bandstrukturrechnung von Fecher und Felser [Fec07] verglichen. Es wurde wiederum die Photoelektronen Spinpolarisation mit der totalen Zustandsdichte identifiziert (wie bei Co_2MnGa). Der Verlauf der theoretischen Polarisation in dem Bindungsenergieintervall 0 eV bis 2 eV zeigt einen schnellen Abfall von 100% auf ein Minimum bei 0,7 eV, gefolgt von einem weniger ausgeprägten Maximum von 20% bei 1,2 eV und einem Minimum von -20% bei 1,56 eV (im gefalteten Spektrum). Bei 2 eV liegt die Polarisation wieder bei 40%. Nulldurchgänge liegen bei den Energien 0,12 eV, 1,05 eV, 1,4 eV und 1,7 eV (im gefalteten Spektrum). An der Fermikante ist sowohl die theoretische als auch die gemessene Polarisation positiv, der gemessene Wert von $P_{exp} = 32\%$ liegt aber um einen Faktor 3 unter dem theoretischen Wert. Die gemessene Kurve fällt monoton mit einem Nulldurchgang bei einer Bindungsenergie von 0,8 eV.

Die Diskrepanz zwischen theoretischen und gemessenen Daten zeigt sich auch im Ver-

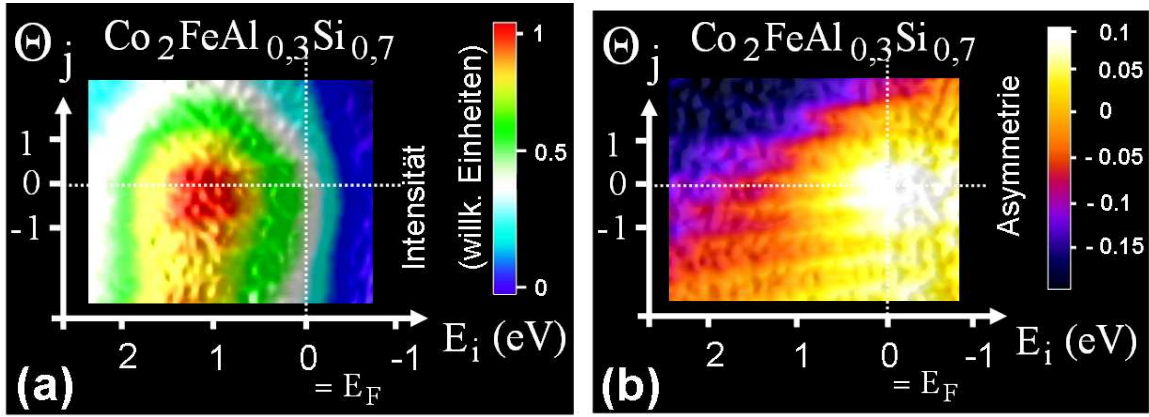


Abbildung 6.7: (a) Zweidimensionale Elektronenintensitäts-Verteilung von $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$. Die dispersive und nichtdispersive Richtung sind mit E_i und Θ_j bezeichnet. Die Intensitätsverteilung ist als Falschfarbenkarte gezeigt und gehört zu einem Photoelektronenspektrum eines dünnen $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ -Films nahe der Fermikante ($\hbar\omega = 21,23$ eV). (b) 2D Asymmetrie-Muster, das aus zwei Intensitäts-Verteilungen mit unterschiedlichen Magnetisierungsmessungen nach Gl. 4.1 berechnet wurde. Die Intensitätsvariation in Abhängigkeit des Streuwinkels wurde nicht korrigiert.

gleich der Partialintensitäten, siehe Abb. 6.8b. Während in dem betrachteten Energieintervall drei Maxima für Majoritätselektronen ($E_B = 0,5$ eV, 1,4 eV und 2,05 eV) und zwei Maxima für Minoritätselektronen ($E_B = 0,75$ eV und 1,6 eV) berechnet wurden, wurde für den Majoritätskanal nur ein Maximum ($E_B = 0,8$ eV) und eine Schulter ($E_B = 0,3$ eV) und für den Minoritätskanal nur ein Maximum ($E_B = 1,15$ eV) gemessen. Das Maximum des gemessenen Spektrums für Spin up Elektronen liegt bei 0,75 eV. Das ist dieselbe Bindungsenergie, bei der im Intensitätsscan eine neu erschienene Schulter gefunden wurde. Diese könnte möglicherweise einem neuen Zustand, begründet durch die Oxidation, entsprechen. Bei einer sauberen Probe wäre dieser Zustand dann nicht vorhanden und das experimentelle Spektrum möglicherweise gut mit der Theorie verträglich. Im Spektrum der Minoritätselektronen liegt das Maximum bei 1,15 eV, genau zwischen zwei Maxima des gerechneten Spektrums. Wie schon bei Eisen und Co_2MnGa ist die gezeigte Bandstrukturechnung mit DFT erstellt, weshalb die Intensitätsmaxima viel ausgeprägter als in der Realität erscheinen. In einer DMFT-Rechnung würden die beiden Maxima aus der DFT-Rechnung eventuell zusammenfallen und als ein großer Peak mit einem Maximum bei 1,15 eV erscheinen, was die Messung gut beschreiben würde.

Vor allem durch die starke Oxidation der Probe lässt sich die nur geringe gemessene Spinpolarisation von $P_{exp} = 32\%$ an der Fermienergie begründen.

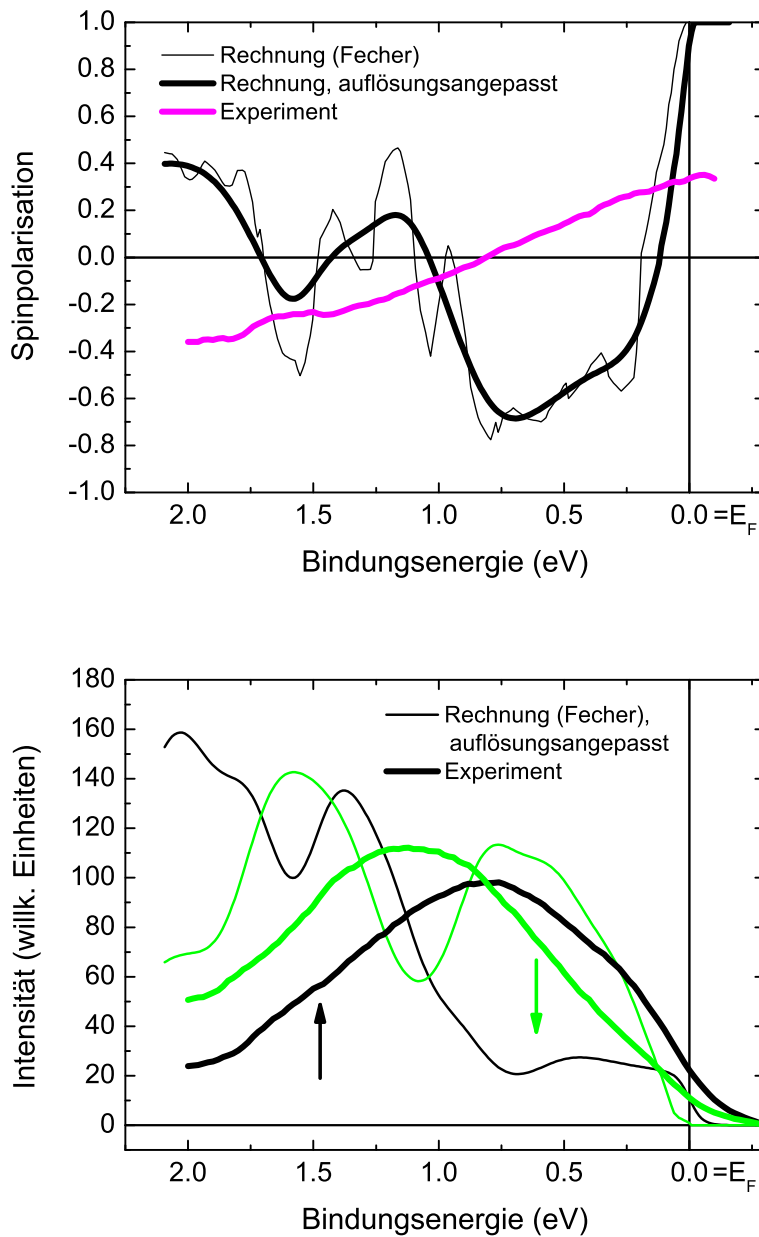


Abbildung 6.8: Photoelektronen-Spinpolarisation (a) und Partialintensitäten (b) der Minoritäts- (\downarrow , grün) und Majoritätsladungsträger (\uparrow , schwarz) von $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ in Abhängigkeit der Bindungsenergie ($\hbar\omega = 21,23$ eV). Die experimentellen Kurven erscheinen dick rosa (a) und dick grün und schwarz (b). Die Theoriekurven sind aus [Fec07] entnommen und mit einer 200 meV Gaußfunktion zur Auflösungsanpassung gefaltet.

6.4 Diskussion

In diesem Abschnitt wurden spinaufgelöste UPS-Messungen an zwei Heusler-Dünnschichtproben durchgeführt. Diese wurden mittels rf-Magnetron Sputtern von stöchiometrischen Targets auf MgO(100)-Substrate bei Raumtemperatur deponiert und nach einer in-situ Vorcharakterisierung mittels einer UHV-Transfereinheit ('Vakuumkoffer') in die Spinpolarimeterapparatur gebracht.

Es lässt sich festhalten, dass wenn eine passende Heuslerverbindung mit moderater Reaktivität gewählt wird, und der Transferprozess zwischen beiden Kammern optimiert wird, UPS-Spektren mit dem Vielkanal-Spinpolarimeter gemessen wurden, die nur eine geringe Oxidation zeigen. Bedingt durch die kurze Messzeit für spinaufgelöste Spektren kann eine Heuslerprobe untersucht werden, die während der gesamten Messung kaum gealtert ist. Eine gute Übereinstimmung zwischen der theoretisch berechneten Volumen-Zustandsdichte und der experimentell gemessenen Spinpolarisation konnte für das Heuslermaterial Co_2MnGa gezeigt werden. Obwohl der experimentelle Wert der Spinpolarisation von 34 % etwa nur halb so groß wie die theoretische Vorhersage von 67%, ist er der größte bisher gemessene Polarisationswert für Co_2MnGa . Die Glaubhaftigkeit dieser Zahl wird unterstützt durch die gut übereinstimmenden Kurvenverläufe der Polarisierung für Theorie und Experiment.

Bei der reaktiveren Heuslerprobe $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ ist eine fortgeschrittene Oxidation nach dem optimierten Transferprozess zu verzeichnen. Aufgrund der Oxidation erscheint der Intensitätsscan abweichend von dem direkt nach der Schichtdeposition in-situ gemessenen Spektrum. Vor allem die Fermikante ist stark verbreitert und die d-Band Zustände sind verwaschen. Sowohl die Polarisierung als auch die Partialintensitäten lassen sich mit der theoretischen Bandstrukturechnung von Fecher und Felser kaum in Einklang bringen. Es erscheint naheliegend, dass die Probe durch den Transport in die SRUPS-Kammer zu stark oxidiert wurde. Die vorhergesagte, besonders hohe Spinpolarisation an der Fermienergie konnte aufgrund der starken Oxidation und der teilweise gestörten L_{21} -Struktur von $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ nicht verifiziert werden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Spinpolarisationsmessungen an freien Elektronen sind seit ihrer ersten Verwirklichung durch Mott anspruchsvoll geblieben. Die relevante Größe eines Spinpolarimeters ist seine Gütefunktion, $FoM = S^2 I/I_0$, mit der Asymmetriefunktion S und dem Verhältnis aus Streu- und Primärintensität I/I_0 . Alle bisherigen Geräte basieren auf einer einkanaligen Streuung (Spin-Bahn- oder Austauschwechselwirkung), die durch $FoM \simeq 10^{-4}$ charakterisiert ist. Hingegen ermöglichen moderne Halbkugelanalysatoren eine effiziente Vielkanaldetektion der *spinintegralen* Intensität mit mehr als 10^4 simultan erfassten Datenpunkten. Im Vergleich zwischen spinaufgelöster und spinintegraler Elektronenspektroskopie ist man somit mit einem Effizienzunterschied von 8 Größenordnungen konfrontiert.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung und Untersuchung eines neuartigen Verfahrens zur Effizienzsteigerung in der spinaufgelösten Elektronenspektroskopie unter Ausnutzung von Vielkanaldetektion. Dazu wurde der neu entwickelte Spinfilter hinter einen konventionellen Halbkugelanalysator aufgebaut. Durch elektronenoptische Simulationen wurde die Geometrie des elektrostatischen Linsensystems des Vielkanal-Spinfilters festgelegt. Die Zielsetzung bestand in einer Fokussierung möglichst vieler Elektronen auf den relativ kleinen Streukristall und in einer Abbildung der Austrittsebene des Halbkugelanalysators auf den ortsauflösenden Delayline Detektor (DLD). Als Randbedingung musste die Energie der auf den Streukristall auftreffenden Elektronen im Bereich der maximalen spinabhängigen Streuasymmetrie (26 eV) liegen. Aberrationen sollten klein gehalten werden, da diese die Zahl der übertragbaren Datenpunkte reduzieren. Basierend auf den Simulationen wurde das Linsensystem entworfen und die elektronenoptischen Elemente und eine umgebende Vakuumkammer von der feinmechanischen Werkstatt des Instituts gebaut.

Es wurde gezeigt, dass die Datenpunkte am Austritt des Halbkugelanalysators aufgrund der winkelerhaltenden elastischen Streuung des Spekularstrahls an dem W(100)-Streukristall unter einem Einfallswinkel von 45° auf einen DLD übertragen werden können. Das Abbild des 1 mm Austrittsspalt und darin enthaltenen Schattenwurf eines Gitters im Strahlengang wurden in einem ersten Schritt auf den DLD abgebildet. Durch ein Öffnen des Austrittsspalt konnten Datenpunkte in einem Energiebereich von bis zu 3 eV bei festgehaltenen Linsenspannungen auf den DLD übertragen werden. In diesem Modus wurden spinaufgelöste UPS-Spektren von Fe/MgO(100), Co_2MnGa und $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ aufgenommen. Die Akquisition einer spinaufgelösten Intensitätsverteilung in guter Qualität dauerte dabei nur 30 Minuten.

Die Funktionstüchtigkeit des neuen Spinpolarimeters konnte durch die Messungen einer Eisenprobe nachgewiesen werden, indem die aus der Literatur bekannten typischen UPS-Ergebnisse in einer sehr kurzen Messzeit reproduziert wurden.

Mit dem aufgebauten ersten Prototyp des Vielkanal-Spinfilters können 15 Energie- und 64 Winkelpunkte, d.h. insgesamt 960 Datenpunkte, simultan aufgelöst werden. Dies führt zu einer zweidimensionalen Gütefunktion von

$$\text{FoM}_{2D} = 1,7.$$

Verglichen mit der einkanaligen Gütefunktion der konventionellen Spindetektoren stellt dies einen Effizienzgewinn von 4 Größenordnungen dar.

Der experimentelle Aufbau der vorliegenden Arbeit beinhaltet einen Halbkugelanalytator, der weder für eine winkeldispersive Abbildung noch für einen Vielkanalbetrieb optimiert ist. Durch die Verwendung von modernen Spektrometern kann die Effizienz bei der Aufnahme spingefilterter Intensitätsverteilungen um ein Vielfaches erhöht werden. Unter der Annahme, dass die Effizienz letztendlich durch die Mosaikstruktur des Streukristalls begrenzt wird, erreicht die maximale Zahl der auflösbaren Datenpunkte eine Größe von etwa 10000. Dies führt zu einer Gütefunktion von $\text{FoM}_{2D} \simeq 17$, was einer Steigerung der Effizienz in der Spindetektion von 5 Größenordnungen im Vergleich zu konventionellen Spindetektoren entspricht.

Durch die hohe Effizienz und die damit verbundene kurze Messzeit ist es zudem möglich, besonders reaktive Oberflächen in entsprechend kürzerer Zeit zu vermessen. Dieser Vorteil wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit für eine erste grundlagenorientierte Anwendung des neu entwickelten Spinfilters genutzt: Als Test für die Gültigkeit von Bandstrukturrechnungen für Heusler-Materialien. Diese wurden in Form dünner Schichten mit einem Vakuum-Koffer aus einer separaten Präparationskammer in die Photoemissionskammer transferiert. Die gemessenen spinaufgelösten Energiespektren der Heuslerprobe Co_2MnGa zeigen eine gute Übereinstimmung mit berechneten Zustandsdichteverteilungen und die Messung der Polarisation ergab den für diese Verbindung höchsten gemessenen Wert der Spinpolarisation an der Fermikante von 34%. Dies wurde vor allem auf die kurze Messzeit mit dem Spinpolarimeter, in der die Probe kaum degradieren konnte, und auf eine gelungene Probenpräparation zurückgeführt. Die Messungen an der Heuslerprobe $\text{Co}_2\text{FeAl}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$ lieferten keine gute Übereinstimmung mit gerechneten Zustandsdichten. Die für diese Verbindung vorhergesagt vollständige Spinpolarisation an der Fermikante konnte nicht bestätigt werden. Dies wurde auf eine einsetzende Oxidation der Oberfläche der Probe durch den Vakuum-Koffer-Transport zurückgeführt. In Zukunft sollten sehr stark reaktive Proben besser über einen sauberen UHV-Transfer-Mechanismus von der Sputterkammer in die SRUPS-Kammer gebracht werden.

Dieselbe Streugeometrie und der Vielkanalnachweis wurde parallel erfolgreich in einem Impuls-Mikroskop am Max Planck-Institut für Mikrostrukturphysik (Halle) implemen-

tiert. Dort ist es mithilfe der neuen Technik möglich, ein spin- und energiegefiltertes, ortsaufgelöstes Bild einer Probe mit besonders großer Effizienz darzustellen [Tus11]. Mit der Gruppe in Halle wurde intensiv kooperiert, indem alle Zwischenergebnisse ständig ausgetauscht wurden und die Resultate gemeinsam diskutiert, verglichen und ausgewertet wurden.

Das zweidimensionale Detektionsprinzip eröffnet eine Vielzahl weiterer Möglichkeiten für neue Experimente. Das Vielkanalprinzip ist vor allem interessant für die bisher zeitaufwendige Darstellung von spinaufgelösten Fermiflächen (z.B. [Hoe02]). Um beide transversalen Polarisationskomponenten detektieren zu können, könnte der hintere Teil des Spinfilters (Kristall bis DLD) um 0° | 180° oder $+90^\circ$ | -90° um die Strahlachse geschwenkt werden. Alternativ kann auch ein Spin-Dreher Aufbau wie in [Dud95] eingebaut werden, um beide transversalen Polarisationskomponenten zu vermessen.

Ein Gebiet aktuellen Interesses, auf dem das Vielkanal-Polarimeter eingesetzt werden kann, sind spinaufgelöste 'single-shot'-Experimente (pulsartige Anregung der Probe am Synchrotron [Hui11, LOV09]). Insbesondere die Freie-Elektronen-Laserquellen bieten für die Zukunft hochinteressante Möglichkeiten mit Zeitaufösungen im fs-Bereich. In einem single-shot Experiment muß der Delayline Detektor durch einen displayartigen optischen Detektor ersetzt werden, da der DLD das Auftreffen von mehr als drei Elektronen gleichzeitig nicht darstellen kann. Eine Bildverstärker / Leuchtschirm / CCD-Kamera Anordnung könnte sehr viele Elektronen in einem sehr kurzen Zeitintervall nachweisen. Letztendlich wäre man bei solchen Experimenten nur durch die Raumladung limitiert: Der transversale Boersch-Effekt führt zu einer Verschmierung der Ortsauflösung, der longitudinale zu einer Energieverbreiterung, beides verursacht durch Coulombwechselwirkung im Strahl.

Weiterhin ist die spinaufgelöste 'Hard-X-Ray Photoemission' (Spin-HAXPES) bei Photonenergien von $\hbar\omega > 5$ keV in greifbare Nähe gerückt. Im Valenzband sind die Zählraten aufgrund der sehr niedrigen Wirkungsquerschnitte prohibitiv klein. Hier wird der Vielkanaldetektor die erforderliche Erhöhung des Signals durch die effiziente Spinanalyse ermöglichen.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte somit ein neuartiges Vielkanal-Spinfilter-Prinzip etabliert werden, dessen Anwendung in vielen Bereichen der Elektronenspektroskopie neue Möglichkeiten eröffnet.

Literaturverzeichnis

- [Abb] ABBILDUNG: Die Skizze wurde freundlicherweise von Dr. Martin Jourdan, Universität Mainz, zur Verfügung gestellt.
- [Ada64] ADAWI, I.: *Phys. Rev. Lett.* (1964), Bd. 134: S. A788–A798
- [Aes98] AESCHLIMANN, M.; BURGERMEISTER, R.; PAWLIK, S.; BAUER, M.; OBERLI, D. und WEBER, W.: *J. Electr. Spectr. and Rel. Phen.* (1998), Bd. 88-91: S. 179–183
- [Ahm11] AHMADIN, F. und BOOCHANI, A.: *Physica B* (2011), Bd. 406: S. 2865–2870
- [AJ10] ARBELO JORGE, E.; JOURDAN, M.; KALLMAYER, M.; KLAER, P. und ELMERS, H.-J.: *J. Physics: Conference Series* (2010), Bd. 200(072006)
- [Ani91] ANISIMOV, V.; ZAAANEN, J. und ANDERSEN, O.: *Phys. Rev. B* (1991), Bd. 44(943)
- [Aok00] AOKI, Y.; SATO, H. R.; SUGAWARA, H. und SATO, H.: *Phys. C: Superconductivity* (2000), Bd. 333(187)
- [Bal07] BALKE, B.; FECHER, G. H. und FELSER, C.: *Appl. Phys. Lett.* (2007), Bd. 90(242503)
- [Bar72] BARTH, U. und HEDIN, L.: *J. Phys. C* (1972), Bd. 5(1629)
- [Ber64] BERGLUND, C. und SPICER, W.: *Phys. Rev. Lett.* (1964), Bd. 136: S. A1044–A1064
- [Ber99] BERTACCO, R.; ONOFRIO, D. und CICCACCI, F.: *Rev. Sci. Instr.* (1999), Bd. 70(3572)
- [Blu02] BLUEMER, N.: Mott-Hubbard Metal-Insulator Transition and Optical Conductivity in High Dimensions, Dissertation, Universität Augsburg (2002)
- [Boi80] BOIZIAU, C.; GAROT, C.; NUVOLONE, R. und ROUSSEL, J.: *Surf. Sci.* (1980), Bd. 91: S. 313–326
- [Boz08] BOZHKO, S. I.; GLEBOVSKY, V. G.; SEMENOV, V. N. und SMIRNOVA, I.: *Journal of Crystal Growth* (2008), Bd. 311: S. 1–6

- [Cap06] CAPELLE, K.: *Brazilian Journal of Physics* (2006), Bd. 36(4A)
- [Chi80] CHIANG, T. C.; KNAPP, J. A.; AONO, M. und EASTMAN, D. E.: *Phys. Rev. B* (1980), Bd. 21(3515)
- [Cin07] CINCHETTI, M.; WÜSTENBERG, J.-P.; SANCHEZ ALBANEDA, M.; STEEB, F.; CONCA, A.; JOURDAN, M. und AESCHLIMANN, M.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2007), Bd. 40(1544)
- [Cor06] CORREA, J.S.; EIBL, C.; RANGELOV, G.; BRAUN, J. und DONATH, M.: *Phys. Rev. B* (2006), Bd. 73(125316)
- [Dam04] DAMASCELLI, A.: *Phys. Scr.* (2004), Bd. 61(T109)
- [dG83] DE GROOT, R. A.; MUELLER, F. M.; VAN ENGEN, R. G. und BUSCHOW, K. H. J.: *Phys. Rev. Lett.* (1983), Bd. 50(2024)
- [Dir28] DIRAC, P. A. M.: *Proc. R. Soc. A* (1928), Bd. 117(610)
- [Dud95] DUDEN, T. und BAUER, E.: *Rev. Sci. Instr.* (1995), Bd. 66(2861)
- [Ein05] EINSTEIN, A.: *Annalen der Physik* (1905), Bd. 322(6): S. 132
- [Esc05] ESCHER, M.; WEBER, N.; MERKEL, M.; ZIETHEN, C.; BERNHARD, P.; SCHÖNHENSE, G.; SCHMIDT, S.; FORSTER, F.; REINERT, F.; KRÖMKER, B. und FUNNEMANN, D.: *J. Phys.: Condens. Matter* (2005), Bd. 17: S. 1329–1338
- [Fec07] FECHER, G. und FELSER, C.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2007), Bd. 40(1582)
- [Foc] FOCUS: www.focus-gmbh.com
- [Fra06] FRAUNE, M.; HAUCH, J. O.; GÜNTHERODT, G.; LAUFENBERG, M.; FONIN, M.; RÜDIGER, U.; MAYER, J. und TURBAN, P.: *J. Appl. Phys.* (2006), Bd. 99(033904)
- [Fru99] FRUCHART, O.; NOZIÈRES, J. P. und GIVORD, D.: *J. Magn. Magn. Mater.* (1999), Bd. 207(158)
- [Gal02] GALANAKIS, I.; DEDERICHS, P. H. und PAPANIKOLAOU, N.: *Phys. Rev. B* (2002), Bd. 66(174429)
- [Gal06] GALANAKIS, I.; MAVROPOULOS, P. und DEDERICHS, P. H.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2006), Bd. 39(765)
- [Gar86] GARBE, J.; VENUS, D.; SUGA, S.; SCHNEIDER, C. und KIRSCHNER, J.: *Surf. Sci.* (1986), Bd. 178(342)
- [Gay09] GAY, T. J.: *Adv. in Atomic, Molecular and Optical Physics* (2009), Bd. 57: S. 157–247

- [Ger22] GERLACH, W. und STERN, O.: *Zeitschrift für Physik* (1922), Bd. 9(349)
- [Get95a] GETZLAFF, M.; BANSMANN, J. und SCHÖNHENSE, G.: *Fresenius J. Anal. Chem.* (1995), Bd. 353: S. 743–747
- [Get95b] GETZLAFF, M.; BANSMANN, J. und SCHÖNHENSE, G.: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (1995), Bd. 140: S. 729–730
- [Get98] GETZLAFF, M.; HEIDEMANN, B.; BANSMANN, J.; WESTPHAL, C. und SCHÖNHENSE, G.: *Rev. Sci. Instr.* (1998), Bd. 69(11): S. 3913–3923
- [Gew83] GEWINNER, G.; PERUCHETTI, J.; JAEGLE, A. und PINCHAUX, R.: *Phys. Rev. B* (1983), Bd. 27: S. 3358–3365
- [Ghi99] GHIRINGHELLI, G.; LARSSON, K. und BROOKES, N.: *Rev. Sci. Instr.* (1999), Bd. 70(4225)
- [Gre07] GRECHNEV, A.; DI MARCO, I.; KATSNELSON, M. I.; LICHTENSTEIN, A. I.; WILLS, J. und ERIKSSON, O.: *Phys. Rev. B* (2007), Bd. 76(035107)
- [Gro10] GROSSE-SCHULTE, F.: Untersuchung der elektronischen Eigenschaften von Heusler-Verbindungen mit Ultraviolett-Photoelektronen-Spektroskopie, Diplomarbeit, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz (2010)
- [Gui94] GUINIER, A.: *X-Ray Diffraction In Crystals, Imperfect Crystals and Amorphous Bodies*, Dover Publications, New York (1994)
- [Gun76] GUNNARSSON, U. und LUNDQVIST, B. I.: *Phys. Rev. B* (1976), Bd. 13(4274)
- [Hü03] HÜFNER, S.: *Photoelectron Spectroscopy*, Springer-Verlag Berlin (2003)
- [Hah11] HAHN, M.; SCHÖNHENSE, G.; ARBELO JORGE, E. und JOURDAN, M.: *Appl. Phys. Lett.* (2011), Bd. 98(232503)
- [Hei78a] HEIMANN, P. und NEDDERMEYER, H.: *Phys. Rev. B* (1978), Bd. 18(3537)
- [Hei78b] HEINZMANN, U.: *Phys. Rev. B* (1978), Bd. 11(399)
- [Hen91] HENZLER, M. AND GÖPEL, W.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*, Teubner Studienbücher (1991)
- [Her09] HERBORT, C.; ARBELO JORGE, E. und JOURDAN, M.: *Appl. Phys. Lett.* (2009), Bd. 94(142504)
- [Heu03] HEUSLER, F.: *Verh. d. dt. Phys. Gesellschaft* (1903), Bd. 5(1903): S. 219 ff.
- [Hil01] HILLEBRECHT, F. U.; JUNGBLUT, R. M.; WIEBUSCH, L.; ROTH, C.; ROSE, H. B.; KNABBEN, D.; BETHKE, C.; WEBER, N. B.; MANDERLA, S.; ROSOWSKI, U. und KISKER, E.: *Rev. Sci. Instr.* (2001), Bd. 73(3): S. 1229–1234

- [Hil02] HILLEBRECHT, F. U.; JUNGBLUT, R. M.; WIEBUSCH, L.; ROTH, C.; ROSE, H. B.; KNABBEN, D.; BETHKE, C.; WEBER, N. B.; MANDERLA, S.; U., Rosowski und KISKER, E.: *Rev. Sci. Instr.* (2002), Bd. 73(1229)
- [Hoe02] HOESCH, M.; GREBER, T.; PETROV, V. N.; MUNTWILER, M.; HENGSEBERGER, M.; AUWÄRTER, W. und OSTERWALDER, J.: *J. Electr. Spectr. Rel. Phen.* (2002), Bd. 124: S. 263–279
- [Hoh64] HOHENBERG, P. und KOHN, W.: *Rhys. Rev. B* (1964), Bd. 136(864)
- [Hui11] HUISMANS, Y.; ROUZE, A.; GIJSBERTSEN, A.; JUNGSMANN, J.; SMOLKOWSKA, A. S.; LOGMAN, P.; LPINE, F.; CAUCHY, C.; ZAMITH, S.; MARCHENKO, T.; BAKKER, J.; BERDEN, G.; REDLICH, B.; VAN DER MEER, A.; MÜLLER, H.; VERMIN, W.; SCHÄFER, K. J.; SPANNER, M.; IVANOV, M.; SMIRNOVA, O.; BAUER, D.; POPRUZHENKO, S. V. und VRAKING, M.: *Science* (2011), Bd. 331(61)
- [Ima07] IMADA, S.; YAMASAKI, A.; KUSUDA, K.; HIGASHIYA, A.; IRIZAWA, A.; SEKIYAMA, A.; KANOMATAE, T. und SUGA, S.: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* (2007), Bd. 156(433)
- [Jou11] JOURDAN, M.; GROSSE-SCHULTE, F.; HAHN, M. und SCHÖNHENSE, G.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2011), Bd. 44(155001)
- [Joz10] JOZWIAK, C.; GRAF, J.; LEBEDEV, G.; ANDRESEN, N.; SCHMID, A. K.; FEDOROV, A. V.; EL GABALY, F.; WAN, W.; LANZARA, A. und HUSSAIN, Z.: *Rev. Sci. Instr.* (2010), Bd. 81(053904)
- [Kü81] KÜBLER, J.: *Physics Lett. A* (1981), Bd. 81(1): S. 81–83
- [Kes85] KESSLER, J.: *Polarized Electrons*, Springer-Verlag Berlin (1985)
- [Kir79] KIRSCHNER, J. und FEDER, R.: *Phys. Rev. Lett.* (1979), Bd. 42(1008): S. 5803–5808
- [Kir85] KIRSCHNER, J.: *Polarized Electrons at Surfaces*, Springer-Verlag Berlin (1985)
- [Kno00] KNORREN, R.; BENNEMANN, K. H.; BURGERMEISTER, R. und AESCHLI-MANN, M.: *Phys. Rev. B* (2000), Bd. 61(9427)
- [Koh65] KOHN, W. und SHAM, L. J.: *Phys. Rev. A* (1965), Bd. 140(1133)
- [Kot04] KOTLIAR, G. und VOLLHARDT, D.: *Physics Today* (2004)
- [Leg00] LEGOAS, S. B.; ARAUJO, A. A.; LAKS, B.; KLAUTAU, A. B. und FROTA-PESSOA, S.: *Phys. Rev. B* (2000), Bd. 61(417)

- [Lez05] LEZAIC, M.; GALANAKIS, I.; BIHLMAYER, G. und BLÜGEL, S.: *J. Phys.: Condens. Matter* (2005), Bd. 17: S. 3121–3136
- [Lou90] LOUETTE, P.; DELAGE, D., A. Roy; THIRY, P. A. und CAUDANO, R.: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (1990), Bd. 52: S. 867–874
- [LOV09] LA-O-VORAKIAT, C.; SIEMENS, M.; MURNANE, M.; KAPTEYN, H.; MATHIAS, S.; AESCHLIMANN, M.; GRYSHTOL, P.; ADAM, R.; SCHNEIDER, C.; SHAW, J.; NEMBACH, H. und SILVA, T. J.: *Phys. Rev. Lett.* (2009), Bd. 103(178)
- [Mah70] MAHAN, G. D.: *Phys. Rev. B* (1970), Bd. 2: S. 4334–4350
- [Mal98] MALZBENDER, J.; PRZYBYLSKI, M.; GIERGIEL, J. und KIRSCHNER, J.: *Surf. Sci.* (1998), Bd. 414(187)
- [Mar05] MARTIENSSEN, W. und WARLIMONT, H.: *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*, Springer-Verlag Berlin (2005)
- [Miu04] MIURA, Y.; NAGAO, K. und SHIRAI, M.: *Phys. Rev. B* (2004), Bd. 69(144413)
- [Miy07] MIYAZAKI, H.; SODA, K.; KATO, M.; YAGI, S.; TAKEUCHI, T. und NISHINO, Y.: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* (2007), Bd. 156(347)
- [Miy09] MIYAMOTO, K.; KIMURA, A.; MIURA, Y.; SHIRAI, M.; YE, M.; CUI, Y.; SHIMADA, K.; NAMATAME, H.; TANIGUCHI, M.; TAKEDA, Y.; SAITOH, Y.; IKENAGA, E.; UEDA, S.; KOBAYASHI, K. und KANOMATA, T.: *Phys. Rev. B* (2009), Bd. 79(100405)
- [Mur02] MURPHY, S.; MAC MATHUNA, D.; MARIOTTO, G. und SHVETS, I. V.: *Phys. Rev. B* (2002), Bd. 66(195417)
- [Oel01] OELSNER, A.; SCHMIDT, O.; SCHICKETANZ, M.; KLAIS, M.; SCHÖNHENSE, G.; MERGEL, V.; JAGUTZKI, O. und SCHMIDT-BOCKING, H.: *Rev. Sci. Instr.* (2001), Bd. 72(3968)
- [Oku08] OKUDA, T.; TAKEICHI, Y.; MAEDA, Y.; HARASAWA, A.; MATSUDA, I.; KINOSHITA, T. und KAKIZAKI, A.: *Rev. Sci. Instr.* (2008), Bd. 79(123117)
- [Oua09] OUARTI, S.; BALKE, B.; GLOSKOVSKII, A.; FECHER, G.; FELSER, C.; SCHÖNHENSE, G.; ISHIKAWA, T.; UEMURA, T.; YAMAMOTO, M.; SUKEGAWA, H.; WANG, W.; INOMATA, K.; YAMASHITA, Y.; YOSHIKAWA, H.; UEDA, S. und KOBAYASHI, K.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2009), Bd. 42(084019)
- [Pat] PATENT: DE 10 2005 045 622 B4
- [Pau27] PAULI, W.: *Z. für Physik A: Hadrons and Nuclei* (1927), Bd. 43(601)

- [Pea91] PEARSON, W. B.: *Handbook Of Lattice Spacings Of Metals and Alloys*, Pergamon, London (1991)
- [Pic66] PICHT, J. und HEYDENREICH, J.: *Einführung in die Elektronenmikroskopie*, VEB Verlag Technik, Berlin (1966)
- [Pic02] PICOZZI, S.; CONTINENZA, A. und FREEMAN, A. J.: *Phys. Rev. B* (2002), Bd. 66(094421)
- [Plu09] PLUCINSKI, L.; ZHAO, Y.; SCHNEIDER, C. M.; SINKOVIC, B. und VESCOVO, E.: *Phys. Rev. B* (2009), Bd. 80(184430)
- [Pol74] POLASCHEGG, H. D.: *Appl. Phys.* (1974), Bd. 4: S. 63–68
- [Pro04] PROKOP, J.; VALDAITSEV, D.A.; KUKUNIN, A.; PRATZER, M.; SCHÖNHENSE, G. und ELMERS, H.J.: *Phys. Rev. B* (2004), Bd. 70(184423)
- [San90] SANTONI, A. und HIMPSEL, F.J.: *Phys. Rev. B* (1990), Bd. 43(2)
- [Sch71] SCHAICH, W. L. und ASHCROFT, N. W.: *Phys. Rev. B* (1971), Bd. 3: S. 2352–2465
- [Sch78] SCHÖNHENSE, G.: Bau von Resonanzlampen zur Erzeugung intensitätsreicher VUV-Strahlung und deren Verwendung bei der Messung der Winkelverteilung von Photoelektronen aus Permanentgasen, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster (1978)
- [Sch83] SCHÖNHENSE, G. und HEINZMANN, U.: *Journal of Physics E* (1983), Bd. 16(1): S. 74–82
- [Sch05] SCHÄFER, J.; HOINKIS, M.; ROTENBERG, E.; BLAHA, P. und CLAESSEN, R.: *Phys. Rev. B* (2005), Bd. 72(155115)
- [Sea79] SEAH, M. und DENCH, W.: *Surface and Interface Analysis* (1979), Bd. 1(1)
- [She76] SHEVCHIK, N. J.: *Rev. Sci. Instr.* (1976), Bd. 47(1028)
- [Skr92] SKRIVER, H. L. und ROSENGAARD, N. M.: *Phys. Rev. B* (1992), Bd. 46(11)
- [Spe] SPECS: www.specs.de
- [Sug10] SUGA, S.; SEKIYAMA, A.; FUNABASHI, G.; YAMAGUCHI, J.; KIMURA, M.; TSUJIBAYASHI, M.; UYAMA, T.; SUGIYAMA, H.; TOMIDA, Y.; KUWAHARA, G.; KITAYAMA, S.; FUKUSHIMA, K.; KIMURA, K.; YOKOI, T.; MURAKAMI, K.; FUJIWARA, H.; SAITOH, Y.; PLUCINSKI, L. und SCHNEIDER, C. M.: *Rev. Sci. Instr.* (2010), Bd. 81(105111)

- [Tan10] TANGE, A.; GAO, C.; YAVORSKY, B.; MAZNICHENKO, I.; ETZ, C.; ERNST, A.; HERGERT, W.; MERTIG, I.; WULFHEKEL, W. und KIRSCHNER, J.: *Phys. Rev. B* (2010), Bd. 81(195410)
- [Tur82] TURNER, A. M. und ERSKINE, J. L.: *Phys. Rev. B* (1982), Bd. 25: S. 1983–1986
- [Tur84] TURNER, A. M.; DONOHO, A. W. und ERSKINE, J. L.: *Phys. Rev. B* (1984), Bd. 29(2986)
- [Tus11] TUSCHE, C.; ELLGUTH, M.; ÜNAL, A.; CHIANG, C.-T.; WINKELMANN, A.; KRASYUK, A.; HAHN, M.; SCHÖNHENSE, G. und KIRSCHNER, J.: *Appl. Phys. Lett.* (2011), Bd. 99(032505)
- [Uhl25] UHLENBECK, G. E. und GOUDSMIT, S.: *Naturwissenschaften* (1925), Bd. 47(953)
- [Uso04] USOV, V.; MURPHY, S. und SHVETS, I. V.: *Jour. of Appl. Phys.* (2004), Bd. 95(11)
- [Val99] VALLA, T.; FEDOROV, A. V.; JOHNSON, P. D. und HULBERT, S. L.: *Phys. Rev. Lett.* (1999), Bd. 83(2085)
- [Wü09] WÜSTENBERG, J.-P.; FISCHER, J.; HERBORT, C.; JOURDAN, M.; AESCHLI-MANN, M. und CINCHETTI, M.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2009), Bd. 42(084016)
- [Wan05] WANG, W. H.; PRZYBYLSKI, M.; KUCH, W.; CHELARU, L. I.; WANG, J.; LU, Y. F.; BARTHEL, J.; MEYERHEIM, H. L. und KIRSCHNER, J.: *Phys. Rev. B* (2005), Bd. 71(144416)
- [Win08] WINKELMANN, A.; HARTUNG, D.; CHIANG, C.-T. und KIRSCHNER, J.: *Rev. Sci. Instr.* (2008), Bd. 79(083303)
- [Wol87] WOLLNIK, H.: *Optics of charged particles*, Academic Press, Inc, Orlando, Florida 32887 (1987)
- [Wur06] WURMEHL, S.; FECHER, G.; KROTH, K.; KRONAST, F.; DÜRR, H. A.; TAKEDA, Y.; SAITOH, Y.; KOBAYASHI, K.; LIN, H.-J.; SCHÖNHENSE, G. und FELSER, C.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* (2006), Bd. 39(803)
- [Yeh85] YEH, J. J. und LINDAU, I.: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* (1985), Bd. 32: S. 1–155
- [Yu92] YU, R.; KRAKAUER, H. und SINGH, D.: *Phys. Rev. B* (1992), Bd. 45(8671)
- [Yu07] YU, D.; MATH, C.; MEIER, M.; ESCHER, M.; RANGELOV, G. und DONATH, M.: *Surf. Sci.* (2007), Bd. 601: S. 5803–5808

- [Öz06] ÖZDOĞAN, K.; SASIOĞLU, E.; AKTAS, B. und GALANAKIS, I.: *Phys. Rev. B* (2006), Bd. 74(172412)
- [Zim73] ZIMMER, R. S.: *J. Phys. E: Sci. Instrum.* (1973), Bd. 6(1029)

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schema zur Photoemission	6
2.2	Zusammenhang zwischen der Bandstruktur der Probe und dem gemessenen UPS-Spektrum	7
2.3	Gegenüberstellung des Drei- und Einstufenmodells	8
2.4	invertierter LEED-Zustand	9
2.5	Anfangs- und Endzustände des Einstufenmodells	9
2.6	Vergleich einer LDA- und LDA+DMFT-Rechnung für Fe(001)	15
2.7	LDA+DMFT Bandstruktur für Eisen)	16
2.8	DFT Bandstruktur für Eisen	16
2.9	Inelastische mittlere freie Weglänge	18
2.10	Beiträge der Fe(100)-Monolagen zum UPS-Spektrum.	18
2.11	Skizze zur Streuung eines polarisierten Elektronenstrahls an einem Targetkern	21
2.12	Winkelabhängigkeit der Elektronenstreuung 1	23
2.13	Winkelabhängigkeit der Elektronenstreuung 2	24
2.14	Schema zur Streuung von Elektronen an einer Oberfläche	25
2.15	Einfluß der Mehrfachstreuung auf IV-Kurven	26
3.1	Schema des UPS Experiments	30
3.2	Probenhalter	31
3.3	Temperaturkalibration von Mo(110)	32
3.4	Schematischer Querschnitt der Elektronenoptik des UPS-Experiments in der dispersiven Ebene	38
3.5	Polardarstellung der Elektronenbahnen im Analysator.	40
3.6	Übersicht über die Vernetzung der Spannungsgeber	41
3.7	Übersicht über das Vakuumsystem	42
3.8	Simulation der Elektronenbahnen im Spinfilter	44
3.9	Äquipotentiallinien der Transferoptik mit Trajektorien in der nichtdispersiven Ebene	45
3.10	Spaltabbildung	46
3.11	Detailfoto des Designs der Elektronenlinsen	48
3.12	Fotografien des Spinfilters	49
3.13	Fotografie des Kristallhalters	51
3.14	Fotografie des Kristalls mit Reflexion des 1 mm Spaltes	52

3.15	Funktionsprinzip des Delayline Detektors	55
4.1	Schema des Vielkanal-Spinpolarimeter Aufbaus	58
4.2	Fe Intensität und Asymmetrie	59
4.3	Energiekalibrierung	60
4.4	Bestimmung der Auflösung in Winkelrichtung	61
4.5	Bestimmung der Auflösung in dispersiver Richtung	62
4.6	Energieabhängigkeit der Asymmetriefunktion, Intensitätsantwort und FoM	65
4.7	Shermanfunktion	67
4.8	'rocking'-Kurve von W(100)	68
5.1	LEED-Aufnahme des Mo(110)-Kristalls	72
5.2	UPS-Spektren von Fe(110) und M(110)	72
5.3	Vergleich des UPS-Spektrums von Mo(110) mit einer Bandstrukturrechnung	74
5.4	Röntgenbeugung an Fe(110)	76
5.5	Vergleich des UPS-Spektrums von Fe(110) mit einer Bandstrukturrechnung	77
5.6	Kerrmessung Fe(110) auf Mo(110)	79
5.7	VSM-Magnetometermessung Fe(110) auf Mo(110)	79
5.8	Röntgenbeugung an Fe(100)	80
5.9	Kerrmessung Fe(100) auf MgO(100)	81
5.10	Vergleich der UPS-Spektren von Fe(100) und Fe(110)	82
5.11	Fe(001) Oberflächen-Bandstrukturrechnung	83
5.12	Eisen Spinpolarisation und Partialintensitäten	84
5.13	Vergleich der DFT- und DMFT-Bandstrukturrechnungen für Fe(100)	85
5.14	Spinpolarisation von Fe(100) mit und ohne He I α -Linie	86
5.15	Eisenoxid Spinpolarisation und Partialintensitäten	89
6.1	L ₂₁ -Struktur	92
6.2	RHEED-Aufnahmen von Co ₂ MnGa	94
6.3	Co ₂ MnGa UPS-Spektren	95
6.4	Co ₂ MnGa Intensität und Asymmetrie	96
6.5	Co ₂ MnGa Spinpolarisation	97
6.6	Co ₂ FeAl _{0,3} Si _{0,7} UPS-Spektren	99
6.7	Co ₂ FeAl _{0,3} Si _{0,7} Intensität und Asymmetrie	101
6.8	Co ₂ FeAl _{0,3} Si _{0,7} Spinpolarisation	102

Veröffentlichungen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sind folgende Veröffentlichungen entstanden:

- M. Jourdan, F. Grosse-Schulte, M. Hahn und G. Schönhense: *Spectroscopy of the electronic states of the Heusler compounds Co_2FeAl and $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ and the influence of oxidation*. J. Phys. D: Appl. Phys. **44**, 155001 (2011),
- M. Hahn, G. Schönhense, E. Arbelo Jorge und M. Jourdan: *Significant spin polarization of Co_2MnGa Heusler thin films measured by UV-photoemission spectroscopy*. Appl. Phys. Lett. **98**, 232503 (2011),
- C. Tusche, M. Ellguth, A. Ünal, C.-T. Chiang, A. Winkelmann, A. Krasnyuk, M. Hahn, G. Schönhense und J. Kirschner: *Spin resolved photoelectron microscopy using a two-dimensional spin-polarizing electron mirror*. Appl. Phys. Lett. **99**, 032505 (2011),
- M. Kolbe, P. Lushchyk, B. Petereit, H. J. Elmers, G. Schönhense, A. Oelsner, C. Tusche und J. Kirschner: *Highly efficient multichannel spin polarization detection*. Phys. Rev. Lett. **107**, 207601 (2011).

Folgende Veröffentlichungen stehen nicht im Zusammenhang mit der Arbeit:

- D. Panzer, C. Beck, M. Hahn, J. Maul, G. Schönhense, H. Decker und E. Aziz: *Water Influences on the Copper Active Site in Hemocyanin*. J. Phys. Chem. Lett. **1** (2010), S. 1642-1647.