

# **Isolierte Adatome als radioaktive Sonden auf Fe-, Co-, Ni- und Pd-Oberflächen**

Inauguraldissertation  
zur Erlangung der Doktorwürde  
der Freien Universität Berlin  
Fachbereich Physik

angefertigt am Hahn-Meitner-Institut Berlin

vorgelegt von Andreas Weber  
aus Potsdam

- Juni 2001 -

*Meiner Familie*  
*Mojej Rodzinie*

Diese Dissertation wurde in der Arbeitsgruppe  
„Grenzflächenmagnetismus mit radioaktiven Sonden“  
unter der Leitung von Dr. Hartmut H. **Bertschat** am Hahn-Meitner-Institut Berlin angefertigt.

1. Gutachter: **Brewer**, William, Ph. D., Univ.-Prof., Freie Universität Berlin
2. Gutachter: **Stolterfoht**, Nikolaus, Dr. rer. nat., Priv.-Doz., Hahn-Meitner-Institut, Berlin

Tag der mündlichen Prüfung: 19.11.2001

# Isolated adatoms as radioactive probes on Fe-, Co-, Ni-, and Pd-surfaces

## Abstract

The magnetic hyperfine fields  $B_{\text{hf}}$  of  $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$  adatoms on the Co(0001) surface and on the (001) surface of a 40 monolayers Fe film were measured at  $T = 300$  K applying perturbed angular correlation spectroscopy (PAC). The results are:  $|B_{\text{hf}}| = 2.2(2)$  T for Se on Co(0001) and  $|B_{\text{hf}}| = 6.1(3)$  T for Se on Fe(001). The values of the  $B_{\text{hf}}$  of the Se adatom are strongly reduced in comparison to their respective bulk values:  $B_{\text{hf}} = 42(4)$  T in cobalt [1] and  $B_{\text{hf}} = 69(5)$  T in iron [1]. These experimental results can be explained by first-principle calculations of the  $B_{\text{hf}}$  of 4sp-impurities on the (001) surfaces of Ni and Fe which were performed by Mavropoulos et al. [2]. The authors show that a splitting in the local density of states of the impurity s-electrons due to the lowering of the symmetry and of the coordination number at the surface is responsible for the observed reduction of  $B_{\text{hf}}$  of Se on Ni [3] and Fe. The same mechanism is likely to be attributed to the observed reduction of  $B_{\text{hf}}$  of Se on Co(0001), though computational results are not reported. The calculated enhancement of magnetic hyperfine fields at the beginning and the end of the 4sp-series (Zn, Ga,..., Kr) on the surface of Fe and Ni compared to the bulk values [2] could be demonstrated in this work experimentally by measuring the  $|B_{\text{hf}}|$  of the 5sp-impurity  $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$  on Ni(111) which is isoelectric to Zn. The result is  $|B_{\text{hf}}| = 16$  T as compared to  $B_{\text{hf}} = -6.69(3)$  T in bulk Ni [4]. Such a considerably stronger value of a  $B_{\text{hf}}$  at a surface is experimentally observed for the first time.

In the second part of this work the temperature dependence of the electric field gradient EFG of  $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$  on Pd(111) and Co(0001) was studied. In both cases a linearly increasing EFG with increasing temperature was observed. This is in contrast to EFGs at Se on surfaces with (001) orientation and in most metallic bulk systems. Computations of the EFG using electronic structure calculations based on the discrete variational method (DVM) were performed for Se on Ni(001), Ni(111), Pd(001), Pd(111) and Co(0001) by B. Lindgren [5]. The computation of the EFG is based on the dependence of the distance between the Se adatom and the substrate surface at  $T = 0$  K. Extrapolation of the experimental results of the temperature dependence of the EFG at Se on Ni(001) [3], Ni(111) [3], Pd(001) [3], Pd(111) and Co(0001) to  $T = 0$  K allows for comparison of the experimental and theoretical findings. A consistent picture emerges with the assumption of negative EFGs at the Se nuclei on surfaces with (001) orientation and positive EFGs at the Se nuclei on surfaces with (111) orientation.

All experiments were performed in the UHV chamber ASPIC at the UHV beam line of the online mass separator ISOLDE/CERN.

- [1] P. T. Callaghan, N. J. Stone, B. G. Turrell, Phys. Rev. **B 10**, 1075 (1974)
- [2] P. Mavropoulos, N. Stefanou, B. Nonas, R. Zeller, P. H. Dederichs, Phys. Rev. Lett. **81**, 1505 (1998)
- [3] H. Granzer, H. H. Bertschat, H. Haas, W. -D. Zeitz, J. Lohmüller, G. Schatz, Phys. Rev. Lett. **77**, 4261 (1996)
- [4] B. Lindgren, E. Karlsson, B. Jonsson, Hyp. Int. **1**, 505 (1976)
- [5] B. Lindgren, private communication

# Inhalt

Einleitung	1
1. Magnetismus	5
1.1 Magnetismus im freien Atom	5
1.2 Magnetismus im Festkörper	9
1.3 Oberflächenmagnetismus	18
1.4 Hyperfeinwechselwirkungen	22
1.4.1 Kombinierte Wechselwirkung	30
2. Meßmethode PAC	31
2.1 Die $\gamma\gamma$ -Winkelkorrelationsfunktion	31
2.2 Aufnahme und Auswertung der PAC-Spektren	33
2.3 Meßelektronik	35
2.4 Benutzte PAC-Sonden	36
2.4.1 $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$	36
2.4.2 $^{79}\text{Rb}/^{79}\text{Kr}$	37
2.4.3 $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$	38
3. Experimenteller Aufbau und Probenpräparation	41
3.1 Übersicht: Vom Evakuieren bis zum Start der PAC-Messung	41
3.2 Der Massenseparator ISOLDE/CERN	42
3.3 Die UHV-Kammer ASPIC	43
3.3.1 Die Vorkammer (AS-Kammer)	44
3.3.2 Die Hauptkammer (PIC-Kammer)	44
3.4 Das Ultrahochvakuum	46
3.5. Anpumpen, Ausheizen und Entgasen	47
3.6. Kristallpräparation	49
3.6.1 Reinigung nach Kristallzucht	49
3.6.2 Probenreinigung in der ASPIC-Kammer – Sputtern und Anlassen	49
3.6.3 Auger-Elektronen-Spektroskopie AES	50
3.6.4 Strukturbestimmung durch LEED-Analyse	52
3.6.5 Präparation dünner Filme – Wachstum von Fe auf (001)GaAs	54

3.6.6 Probencharakterisierung	57
3.6.6.1 Der Co(0001)-Einkristall	57
3.6.6.2 Der (001)-GaAs-Einkristall	58
3.6.6.3 Der Fe(001)-Film	60
3.6.6.4 Der Pd(111)-Einkristall	62
3.6.6.5 Der Ni(111)-Einkristall	63
3.6.7 Aufdampfen der radioaktiven Sonden	65
4. Meßergebnisse und Interpretation	69
4.1 Bestimmung des Adsorbatplatzes der Sonde	69
4.2 Magnetische Hyperfeinfelder von Adatomen auf Co(0001), Fe(001) und Ni(111)	77
4.2.1 $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$ auf Co(0001)	78
4.2.2 $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$ auf 40 ML Fe(001)	82
4.2.3 $^{79}\text{Rb}/^{79}\text{Kr}$ auf Ni(111)	88
4.2.4 $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$ auf Ni(111)	89
4.2.5 Interpretation	93
4.2.5.1 Magnetische Hyperfeinfelder der sp-Elemente auf den ferromagnetischen Oberflächen	93
4.2.5.2 Magnetische Momente und Hyperfeinfelder	101
4.2.5.2.1 Übergangsmetalle	101
4.2.5.2.2 sp-Elemente	102
4.3 Temperaturverhalten des EFG von Selen auf einkristallinen metallischen Oberflächen	107
4.3.1 Temperaturverhalten elektrischer Feldgradienten	107
4.3.2 $^{77}\text{Br}/^{77}\text{Se}$ auf Pd(111)	110
4.3.3 Interpretation	114
Zusammenfassung und Ausblick	119
Literatur	125

## Veröffentlichungen

- G. Nachtwei, A. Weber, H. Künzel, J. Böttcher, O. Jaschinski  
*Fermi surfaces of InGaAs/InAlAs superlattices with thin delta-doped barriers*  
Journal of Applied Physics **84**, 323-328 (1998)
- Y. Ashkenazy, I. Kelson, H. H. Bertschat, K. Potzger, A. Weber, W. –D. Zeitz, and the ISOLDE Collaboration  
*Nuclear stimulated desorption of isolated cadmium atoms from structured surfaces*  
Surface Science Letters **442**, L1001 (1999)
- H. H. Bertschat, H. Granzer, K. Potzger, S. Seeger, A. Weber, W. –D. Zeitz, D. Forkel-Wirth, and the ISOLDE Collaboration  
*Surface and interface studies with ASPIC*  
Hyperfine Interactions **129**, 475-492 (2000)
- H. H. Bertschat, K. Potzger, A. Weber, W. –D. Zeitz, M. Dietrich, and the ISOLDE Collaboration  
*Radioactive ions for solid state investigations at magnetic surfaces and interfaces*  
wird veröffentlicht in European Physical Journal A
- A. Weber, K. Potzger, H. Granzer, H. H. Bertschat, W. –D. Zeitz, M. Dietrich, and B. Lindgren  
*Temperature dependence of electric-field gradients at isolated Se adatoms on (001) and (111) surfaces and derived adatom distances*  
Physical Review B, vol. 64, 081404(R) (2001)
- K. Potzger, A. Weber, H. H. Bertschat, W. –D. Zeitz, and M. Dietrich  
*Coordination-number dependence of magnetic hyperfine fields at  $^{111}\text{Cd}$  on Ni surfaces*  
in Vorbereitung

## Danksagung

Endlich ist der Punkt der Arbeit erreicht, an dem ich in der ersten Person schreiben darf.

Allen Menschen, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich von ganzem Herzen danken.

Meiner Familie danke ich für ihre Liebe und die Kraft und Hoffnung, die sie in mich investierten, damit ich nun zeigen kann, daß aus mir vielleicht doch noch etwas wird.

(Mein Vater hat mich übrigens als überaus begeisterter Mensch auf den Geschmack an der Physik gebracht. So bekam ich von meinen Eltern zu meinem 10. Geburtstag ein kleines Buch „Das Atom“, aus dem ich erfuhr, daß Elektronen kleine rote Plastelinekugeln sind, die sich, befestigt an einer Strippe, um etwas größere blaue Plastelinekugeln drehen, die von den Erwachsenen Protonen genannt werden. Die Farben können auch umgekehrt gewesen sein.)

Meinem Familienteil in Warschau danke ich, daß sie mich so unglaublich herzlich fern von zuhause aufgenommen haben und ich dort mit die schönsten und lehrreichsten Jahre meines Lebens verbrachte.

*Serdecznie wam dziękuję za wszystko co wy czyniliście, żebym został kim teraz jestem.*

Ich danke all meinen Lehrern, die mich auf meinem Weg begleiteten; angefangen bei Frau Przybylski, ihren Namen konnte ich 1975 in der 1. Klasse nicht schreiben, Herrn Ditkowski, Frau Borgmann, Herrn Fehse, Herrn Fericke, Prof. Hofmohl, Prof. Zakrzewski, Prof. Namysłowski, Prof. Sym, Dr. Jezierski, Dr. Napiórkowski, Dr. Stępniewski, Prof. Grynberg, Prof. Hennel, *Prof. Janina Świątosławska*, *Dr. Witold Żółkiewski*, Dr. Cieciora, Dr. Nachtwei, Prof. v. Ortenberg, Prof. Nolting u.v.a. (Die meisten von den oben genannten, haben mir die Idee mit den blauen und roten Plastelinekugeln an der Strippe wieder aus dem Kopf geschlagen. Schade eigentlich, Alles wäre so viel einfacher.)

Es ist höchste Zeit meinen Freunden, Helfern und Lehrern zu danken, die unmittelbar zur Arbeit beigetragen haben.

Kay Potzger, Hartmut Bertschat, Wolf – Dietrich Zeitz: Ohne auch nur einen von Euch, wären die letzten 130 Seiten, geschweige denn die Experimente, nicht zustande gekommen. Ich habe von Euch allen drei sehr viel gelernt und Euch viel zu verdanken. (Lieber Hartmut, jetzt weiß auch ich, was Königsberg bedeuten kann und wo so ungefähr Walddorf liegt.)

William Brewer danke ich ganz besonders für die herzliche Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, in der durch ihre Mitglieder eine höchst angenehme Atmosphäre sowohl im Wissenschaftlichen als auch im Kollegialen herrscht.

Meinen Vorgängern an ASPIC danke ich für die hervorragende Arbeit, die sie leisteten, damit diese UHV-Kammer zu einer der meist ausgeklügelten Anlagen wurde, mit denen ich jemals in Berührung kam.

Den Kollegen vom HMI Heinz Haas und Dietmar Riegel danke ich für wertvolle Gespräche und Anregungen.

Meinen Doktoranden-Kollegen Mario Gossila, Martin Müller und Jens Hattendorf (Er mußte mich sogar im gemeinsamen Büro aushalten) danke ich für viele lebendige Diskussionen, kritische Anmerkungen und schöne Momente in Kneipen, in Cafés, in Ausstellungen und auf Frühjahrstagungen.

Ich danke all den Leuten am HMI, die aus der schönen Umgebung des Instituts auch einen Ort machen, an den man später gern zurückdenkt: Viola Lange, Frau Martin, Frau Brosowski, Hotte, der gesamten ISL-Mannschaft, meinen Kollegen im Bereich u.v.m.

Nicht zu vergessen sind meine Kollegen von der ISOLDE, die uns bei der Vorbereitung der Experimente und einige von ihnen im Zeitvertreib danach tatkräftig zur Seite standen: Herr Stöckli und seine Werkstatt-Leute, Uwe Georg, Marc Dietrich, Thomas Nilsson, Ove Jonsson, die Vakuum-Gruppe, olle Wolfjang, Günni, der anstelle von „Weißt Du?“ immer nur „Waischt?“ sagt, den Leuten von der Rex-Trap, Pedro aus Porto, der genau weiß, wie man *Fernão de Magalhães* richtig ausspricht, Uli Wahl, der immer informiert ist, was in Genf gerade los ist u.v.a.

Wen ich unbedingt erwähnen möchte sind Gina und die anderen „Coffeemamas“. Ein frisch gerösteter doppelter Espresso bei einem angenehmen Gespräch (nicht über Physik) garantierten, daß jeder Tag in der Zeit des Zusammenschreibens dieser Arbeit gut anfing (Meine Empfehlung: Probiert bzw. Probieren Sie den Espresso dort, gleich am Hackeschen Markt, er ist verdammt gut).

Zum Schluß, denn irgendwann muß man aufhören, danke ich allen meinen Freunden und Bekannten sowie denen, die ich hier vergessen haben sollte.