

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stand die Untersuchung der elektronischen Struktur von Lanthanidmetalloberflächen mittels Rastertunnelspektroskopie bei tiefen Temperaturen. Die schwach dispergierenden Oberflächenzustände der dreiwertigen Lanthanidmetalle zeigen ausgeprägte Maxima in der Zustandsdichte, so daß sie mit dieser Methode sehr gut zu messen sind. Die Rastertunnelspektroskopie hat einige Vorteile gegenüber anderen Methoden, welche die hier vorgestellten Ergebnisse erst möglich machen. Im einzelnen sind diese Vorteile: die gleichzeitige Messung der besetzten und der unbesetzten Zustandsdichte, eine hohe Energieauflösung und eine hohe Ortsauflösung. Außerdem gestattet das kryogene Ultrahochvakuum des Tieftemperatur-Rastertunnelmikroskops, auch länger andauernde, systematische Untersuchungen an den hoch reaktiven Lanthanidmetalloberflächen vorzunehmen.

An der Oberfläche von ultradünnen Yb(111)/W(110)-Filmen konnte erstmals die Ausbildung von Quantentopfzuständen (*quantum-well states*) gezeigt werden. Wegen der unvermeidbaren Rauigkeit der Filme ist dies nur mit einer Methode möglich, welche eine hohe laterale Auflösung mit hoher Energieauflösung verbindet (vor allem oberhalb der Fermi-Energie), wobei wohl nur die Rastertunnelspektroskopie diese Anforderungen erfüllt. Die sich rasch ändernden Positionen der Quantentopf-Zustände wurden zwischen 9 und 23 ML gemessen. Aus den Daten wurden die Dispersion des zugrundeliegenden Volumenbandes und alle notwendigen Parameter zur exakten Beschreibung des *quantum-well*-Systems ermittelt. Die durch die hohe Energieauflösung mögliche Analyse der Linienbreiten zeigt, daß die Energieabhängigkeit der Lebensdauer im Volumenband durch Elektron-Elektron-Streuung erklärt werden kann. Dies ist somit die erste Rastertunnelspektroskopie-Studie zur Dynamik eines *quantum-well*-Systems. Die Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der Linienbreiten bietet die Aussicht, die Dynamik des Volumenbandes vollständig beschreiben zu können.

Rastertunnelspektren der (0001)-Oberflächenzustände auf den dreiwertigen Lanthanidmetallen erlaubten die Bestimmung der Austauschspaltung im Grundzustand mit bislang unerreichter Präzision. Dies ist dem Umstand zu verdanken, daß innerhalb eines Experiments sowohl der besetzte Majoritäts- als auch der unbesetzte Minoritätszustand mit hoher Energieauflösung ausgemessen werden können. So wurde erstmalig experimentell gezeigt, daß eine systematische Abweichung von der bislang angenommenen linearen $4f$ -Spinabhängigkeit existiert, welche als Effekt der Lanthanidenkontraktion identifiziert werden konnte. Temperaturabhängige Messungen bestätigen das *Stoner*-artige Verhalten der Austauschspaltung unterhalb der höchsten magnetischen Ordnungstemperatur und den *spin-mixing*-Charakter weit oberhalb, welcher eine konstante Restaufspaltung bewirkt. Die schwache laterale Ausdehnung des Oberflächenzustands scheint dabei nicht nur auf die langreichweitige magnetische Ordnung empfindlich zu sein, sondern auch auf lokale Ordnungsphänomene, wie die Temperaturabhängigkeit in einem begrenzten Bereich oberhalb der höchsten Ordnungstemperatur zeigt. Noch

stärker wirkt sich diese Nahordnung vermutlich bei ultradünnen Gd(0001)-Filmen aus, deren Ordnungstemperatur durch den *finite-size*-Effekt stark reduziert ist. Hier bietet sich die Chance, in Zukunft die Ursachen der kurzreichweitigen Ordnung ausführlicher zu untersuchen.

Wegen der hohen Energieauflösung in der Rastertunnelspektroskopie bei tiefen Temperaturen sind die gemessenen spektralen Formen der Oberflächenzustände von intrinsischer Natur. Mit Hilfe einiger im Rahmen dieser Arbeit entwickelter Modelle zur Linienformanalyse konnte die inverse Lebensdauer der Oberflächenzustände bestimmt werden. Die Ergebnisse demonstrieren, daß die Rastertunnelspektroskopie im Prinzip die quantitative Untersuchung aller Streubeiträge gestattet.

So konnte gezeigt werden, daß die Lebensdauer des besetzten Majoritätszustands bei tiefen Temperaturen durch Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Streuung bestimmt wird. Die Lebensdauer des unbesetzten Minoritätszustands wird vermutlich zusätzlich stark durch Elektron-Magnon-Streuung reduziert. Im Vergleich zu den (111)-Oberflächenzuständen der Edelmetalle sind die Lebensdauern der (0001)-Oberflächenzustände auf den Lanthanidmetallen deutlich kleiner, was durch eine höhere Zustandsdichte und der damit verbundenen größeren Zahl von Streukanälen verstanden werden kann. Die fehlende Systematik der Energieabhängigkeit über die Lanthanidenreihe weist darauf hin, daß die nur geringen Unterschiede in den Bandstrukturen einen bedeutenden Einfluß auf die Lebensdauer haben.

Am Beispiel von Gd(0001) wurde die Temperaturabhängigkeit der inversen Lebensdauer untersucht, welche durch die Elektron-Phonon-Streuung bestimmt wird und mit dem Debye-Modell quantitativ analysiert werden konnte. Die Elektron-Phonon-Kopplung ist deutlich größer als theoretisch angenommen. Ihre Energieabhängigkeit, welche bei einer sich stark ändernden Zustandsdichte erwartet werden kann, ist allerdings nicht bekannt. Die Messung der Temperaturabhängigkeit anderer Lanthanidmetalle, insbesondere von Lu(0001) und Yb(111), könnte den Zusammenhang zwischen der Elektron-Phonon-Kopplung und der Bandstruktur aufklären.

Die hohe Ortsauflösung des Rastertunnelmikroskops hat den Vorteil, vor einer Messung des Tunnelspektrums die umgebende Probenoberfläche zu kontrollieren, um Defektstreuung ausschließen zu können. Deren Einfluß konnte gezielt an einzelnen Adsorbaten auf der Dy(0001)-Oberfläche untersucht werden. Während der Minoritätszustand nicht beeinflußt wird, hat der Majoritätszustand gegenüber der reinen Oberfläche eine doppelt so große inverse Lebensdauer am Adsorbat. Zusätzlich erscheint ein adsorbat-induzierter Zustand oberhalb der Fermi-Energie, welcher ein interessantes, aber noch nicht aufgeklärtes „Schalt“-Verhalten zeigt. Eine nähere Untersuchung dieses Adsorbatzustands wird Gegenstand zukünftiger Experimente sein.

Die ungewöhnlichen Eigenschaften der Lu(0001)-Oberfläche wurden gezielt ausgenutzt, um den Einfluß von zusätzlich aufgedampften einzelnen magnetischen Atomen zu studieren. Während auf der Oberfläche adsorbierte Gd- und Ho-Atome keinen besonderen Effekt bewirken, zeigen in der Oberflächenlage eingebettete Atome ein spektroskopisches Signal, welches als Kondo-Resonanz interpretiert werden kann. Während der Kondo-Effekt für Ce- und Yb-Verbindungen bekannt ist, wurde er für Gd- und Ho-Atome, welche eine stabile $4f$ -Konfiguration und große Coulomb-Korrelationsenergien besitzen, noch nie beobachtet. Daher ist Zurückhaltung in der Beurteilung angebracht, ob hier tatsächlich der Kondo-Effekt beobachtet wurde. Viele Indizien sprechen aber

dafür. So ist der Unterschied zwischen Gd- und Ho-Atomen in Übereinstimmung mit theoretischen Erwartungen. Die laterale Ausdehnung der Resonanz unterscheidet sich deutlich zwischen Gd/Lu und Ho/Lu und stimmt mit der zu erwartenden Größe der Kondo-Abschirmwolke überein. Somit wurde vermutlich erstmals die Ausdehnung der Kondo-Abschirmwolke gemessen. Die Ergebnisse lassen außerdem den Schluß zu, daß der Kondo-Effekt nur an der Lu(0001)-Oberfläche auftritt und daß der Oberflächenzustand eine zentrale Rolle spielt. Mit Volumenmessungen (z.B. des elektrischen Widerstands, der spezifischen Wärme oder der magnetischen Suszeptibilität) wäre dieser Oberflächeneffekt also nicht nachweisbar. Weitere Messungen sind notwendig, um die Existenz des Kondo-Effekts zu beweisen. Ein Kontrollexperiment mit nichtmagnetischen Lanthan-Atomen auf der Lu-Oberfläche kann prüfen, ob der Effekt bei Gd und Ho tatsächlich im Zusammenhang mit dem lokalen magnetischen Moment der $4f$ -Schale steht. Eine systematische Studie aller Lanthanidatome auf der Lu(0001)-Oberfläche sollte klären, ob sich in der lateralen Ausdehnung tatsächlich die Kondo-Abschirmwolke zeigt.

Dank der hohen Energieauflösung bei 10 K konnten an den Lanthanidmetalloberflächen unerwartete Veränderungen der Rastertunnelspektren in einem engen Bereich (wenige meV) um die Fermi-Energie entdeckt werden, welche vermutlich die Folge eines Vielteilcheneffekts an der (0001)-Oberfläche sind. Die Zusammenhänge sind noch völlig ungeklärt, so daß zum aktuellen Stand der Forschung nur Spekulationen möglich wären. Somit bieten die gezeigten ersten Ergebnisse einen spannenden Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen.

Das Rastertunnelmikroskop bietet die außergewöhnliche Möglichkeit, einzelne Adsorbate zu manipulieren. Damit lassen sich beispielsweise Adsorbat-Wechselwirkungen untersuchen oder die elektronische Struktur von Oberflächen gezielt modifizieren. Das Potential solcher Experimente im „Nanolabor“ ist immens, wie viele Beispiele auf den Edelmetalloberflächen zeigen, und es gilt, diese Möglichkeiten in Zukunft auch für die $3d$ - und $4f$ -Übergangsmetalle zu nutzen.

8 Zusammenfassung und Ausblick