

Abstract

Three different effects at surfaces of magnetic rare-earth crystals have been studied by means of angle-resolved photoemission spectroscopy: magnetic structure and Rashba effect, related to the ground state properties of the surface, and magnetic dichroism (MD) in photoemission, being a final state effect.

The first part of the work is devoted to the study of the magnetic structure of the recently discovered surface monoxide layer formed on Gd(0001). It is found to be clearly not ferromagnetic, in contrast to the underlying bulk gadolinium. From the combined study of the MD effect, the Rashba effect, and ab-initio band-structure calculations, we conclude that the spin polarization of the oxygen-induced surface state is driven by the sub-surface ferromagnetic gadolinium layer.

In the second part of the work, diffraction effects in magnetic linear dichroism in 4f photoemission demonstrate that diffraction can lead to a very strong modification of the atomic angular dependence of dichroism. Our analysis implies that, for the case with one dominant final-state excitation channel, only diffraction dichroism remains, whereas the atomic part vanishes. In these cases the MD signal at the crystal surface reveals a strong modulation with photoelectron emission angle, including a change of sign around the surface normal.

The final part presents the first observation of the Rashba effect at magnetic rare-earth metal surfaces at the example of gadolinium and terbium, and their monoxides. The energy dispersion of the surface states at Gd(0001) and Tb(0001) and their monoxides depends on the spin-orientation of the electron relative to its propagation direction in the electric field, provided by the surface potential. Comparison of the experimental dispersion with first-principle DFT calculations including spin-orbit interaction gives strong evidence that this behavior is a direct manifestation of the Rashba effect. In connection with previous studies of Au(111) and W(110) surface states, the present results lead to the conclusion that the Rashba effect is a general surface and interface phenomenon. The strength of the effect is defined by mainly three ingredients: the atomic contribution to the potential gradient experienced by the electronic states, the shape of the electron charge density distribution, and the hybridization of the electronic states located at the surface/interface; this explains why it can be modified by adsorbates.

Kurzfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden mittels winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie drei verschiedene Effekte untersucht, die an Oberflächen magnetischer Kristalle der seltenen Erden auftreten. Davon sind die magnetische Struktur und der Rashbaeffekt auf Grundzustandseigenschaften der Oberfläche zurückzuführen, wohingegen der magnetische Dichroismus (MD) in Photoemissionsspektren Eigenschaften des Endzustands widerspiegelt.

Der ersten Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der magnetischen Struktur der kürzlich entdeckten Monooxidschicht, die sich auf Gd(0001) Oberflächen bildet. Es wurde eindeutig nachgewiesen, daß sie im Gegensatz zum darunterliegenden *bulk*-Gd nicht ferromagnetisch ist. Kombiniert man die Ergebnisse aus MD Messungen, Rashbaeffekt und *ab initio* Bandstrukturechnungen, so folgt, daß die Spinpolarisation des sauerstoffinduzierten Oberflächenzustands von der unter der Oberfläche liegenden ferromagnetischen Gadoliniumlage hervorgerufen wird.

Der zweite Teil widmet sich Beugungseffekten im magnetisch lineardichroischen Kontrast in 4f Photoemissionsspektren. Es wird gezeigt, daß Beugung die Winkelabhängigkeit des dichroischen Signals sehr stark gegenüber der vom Atom gegebenen verändern kann. Die von uns durchgeführte Analyse setzt voraus, daß für den Fall eines dominanten Anregungskanal in Endzustände nur der Anteil des dichroischen Signals verbleibt, der auf Beugungseffekte zurückzuführen ist, während der atomare verschwindet. In einem solchen System zeigt das MD Signal der Kristalloberfläche eine starke Abhängigkeit vom Emissionswinkel der Photoelektronen, bei Drehung um die Oberflächennormale ändert sich sein Vorzeichen.

Am Beispiel von Gadolinium und Terbium sowie ihrer Monoxide werden im letzten Teil der Arbeit die ersten experimentellen Beobachtungen des Rashbaeffekts an magnetischen Seltenerd-Kristalloberflächen gezeigt. Die Energiedispersion des Oberflächenzustands von Gd(0001) und Tb(0001) sowie deren Monoxiden hängt von der Ausrichtung des Elektronenspins relativ zu seiner Bewegungsrichtung im elektrischen Feld des Oberflächenpotentials ab. Ein Vergleich der experimentellen Dispersion mit *ab initio* DFT Rechnungen, in denen Spin-Bahn-Wechselwirkung berücksichtigt ist, liefert überzeugende Hinweise, daß das beobachtete Verhalten direkt auf dem Rashbaeffekt beruht. Im Zusammenhang mit bereits an Au(111) und W(110) durchgeführten Untersuchungen der Oberflächenzustände kann man aus den in dieser Arbeit vorgelegten Ergebnissen schließen, daß der Rashbaeffekt ein allgemeines Oberflächen- und Grenzflächenphänomen ist. Die Stärke des Effekts hängt im wesentlichen von

drei Faktoren ab: dem atomaren Beitrag zum auf die Elektronen einwirkenden Potentialgradienten, der Form der elektronischen Ladungsverteilung und der Hybridisierung der Elektronenzustände an der Ober- bzw. Grenzfläche; aus diesem Grund kann sie durch Adsorbate verändert werden.