

# Kapitel 5

## Ladungsdichtewelle auf Cr(110)

Chrom ist im Grundzustand ein itineranter Antiferromagnet, der sich durch die Ausbildung einer Spindichtewelle auszeichnet [74][75]. Dieser Zustand ist seit langer Zeit im Blickpunkt des Interesses, einerseits wegen seiner fundamentalen Natur, andererseits aufgrund seiner technologischen Implikationen [75]. Unterhalb der Néeltemperatur  $T_N=312$  K existieren im Volumen von Cr statische Spindichtewellen, die dadurch entstehen, daß große Teile der Fermifläche durch einen Wellenvektor  $\vec{Q}$  (den sogenannten *nesting*-Vektor) verbunden werden können. Dieser Wellenvektor koppelt Elektronenzustände der Fermifläche am  $\Gamma$ -Punkt mit Lochzuständen am H-Punkt, wie in Abbildung 5.1 veranschaulicht ist. Wegen der unterschiedlichen Größen der beteiligten Segmente der Fermifläche ist der Wellenvektor  $\vec{Q}$  inkommensurat bezüglich des Grundgitters. Die Kopplung führt zum Entstehen einer Bandlücke und damit zu einem Energiegewinn, der diesen Zustand stabilisiert. Diese Bandlücke konnte erst vor kurzer Zeit mittels ARPES spektroskopiert werden [77].  $\vec{Q}$  ist gerade der Wellenvektor der Spindichtewelle und zeigt in eine der drei äquivalenten  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen des Cr-Gitters. Die Spindichtewelle ist entweder longitudinal ( $\vec{S} \parallel \vec{Q}$ ,  $T < T_{sf}$ ) oder transversal ( $\vec{S} \perp \vec{Q}$ ,  $T > T_{sf}$ ) polarisiert, dabei ist  $\vec{S}$  die Spinpolarisation und  $T_{sf} = 123$  K die Spinflip-Übergangstemperatur. Die Spindichtewelle wird von einer Verspannungswelle und einer Ladungsdichtewelle mit der halben Periode der Spindichtewelle begleitet [78][79][80][81]. In der technologischen Anwendung spielt die

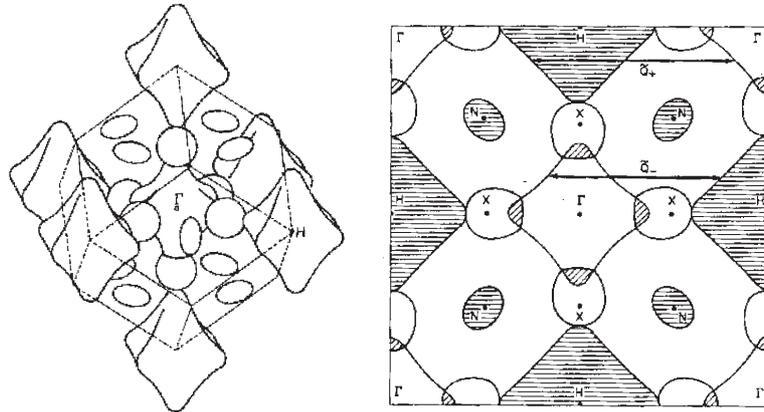


Abbildung 5.1: Die 3D-Fermifläche von Cr und ein Schnitt durch die (100)-Ebene nach Bandstrukturrechnungen aus [76].

Spindichtewelle eine entscheidene Rolle beim GMR<sup>1</sup>-Effekt [82]. In Cr/Fe-Übergittern wird dieser Effekt durch oszillatorische magnetische Kopplung bestimmt, die über die antiferromagnetischen Cr-Zwischenschichten hinweg besteht [83][84][85][86]. Die gesamte bisher zugängliche experimentelle Information über die strukturellen Eigenschaften der Spindichte- sowie der Ladungsdichtewelle in Cr-Volumenkristallen oder in dünnen Cr-Filmen basiert auf räumlich mittelnden Methoden wie Neutronen- [74] oder Röntgenstreuung [74][75][79][80][81] und Spektroskopiemethoden [87][77]. Mit den in diesem Kapitel vorgestellten Experimenten konnte zum ersten Mal direkt und lokal die Ladungsdichtewelle auf der Cr(110)-Oberfläche untersucht werden. Dazu wurde mittels RTM-Messungen die Oberfläche zwischen 6 K und 145 K abgebildet und die lokale Zustandsdichte auf verschiedenen Domänen spektroskopiert.

## 5.1 Präparation der Cr(110)-Oberfläche

Als ausgesprochen schwierig stellte sich die Präparation der Cr-Oberfläche heraus. Bedingt durch den Herstellungsprozess (Firma Mateck: Czochrals-

---

<sup>1</sup>*giant magneto resistance*

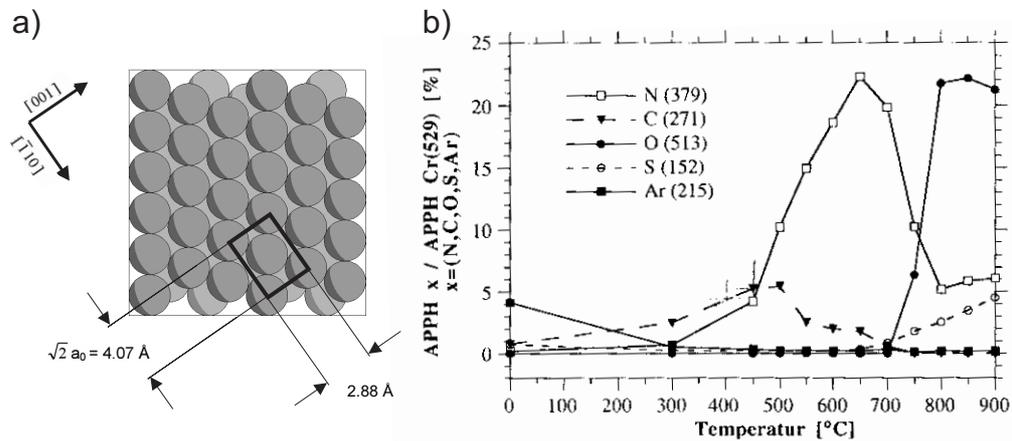


Abbildung 5.2: **a)** Strukturmodell der bcc-Cr(110)-Oberfläche. **b)** Intensitäten der charakteristischen Augerlinien von Verunreinigungen an der Cr(110)-Oberfläche bezogen auf die Augerlinie von Cr bei 529 eV (a uger p eak to p eak height = APPH) nach [88].

kyverfahren) sind im Volumen des Cr-Kristalls im wesentlichen  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ , S und C gelöst [89][90]. Heilt man den Kristall bei hohen Temperaturen nach dem Sputtern aus, so segregieren diese Kontaminationen an die Oberfläche und reichern sich dort an. Dabei ist die Mobilität der Verunreinigungen von der Temperatur und der chemischen Zusammensetzung abhängig. Mittels Augerelektronenspektroskopie wurde die Konzentration der verschiedenen Verunreinigungen an der Oberfläche in Abhängigkeit von der Ausheiltemperatur untersucht [88] und ist in Abbildung 5.2 b) gezeigt. Im vorliegenden Fall ist es sinnvoll, den Kristall bei hohen Temperaturen zu sputtern, um die oberflächennahe Region an Kontaminationen zu verarmen. Die besten Ergebnisse wurden erzielt durch zweistündiges Sputtern bei 970 K ( $\text{Ne}^+$ , 1 keV,  $4 \mu\text{A}$ ), anschließend Ausheilen für 30 s bei derselben Temperatur und Herunterkühlen unter 670 K innerhalb von 60 s. Ein repräsentatives Ergebnis dieser Präparation ist in Abbildung 5.5 zu sehen. Dabei erhält man typischerweise eine Terrassenbreite von  $600 \text{ \AA}$  und eine Konzentration von segregierten Verunreinigungen von etwa 8 %. Bei diesen Ausheiltemperaturen segregiert nach Abbildung 5.2 b) im wesentlichen Stickstoff an die Oberfläche, daher ist anzunehmen, daß es sich bei diesen Verunreinigungen um Stickstoff handelt.

Ein weiteres Indiz hierfür liefert die Art der Aggregation der Verunreinigungen: Es bilden sich reihenartige Strukturen aus, die entlang der dichtgepackten  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen der Kristalloberfläche orientiert sind. Dies kann als Fragment der  $(\sqrt{6} \times \sqrt{6})R45^\circ$ -(Fischgräten)-Überstruktur identifiziert werden, die bei höheren Bedeckungen von segregiertem Stickstoff entsteht [90]. Die Verunreinigungen sind stark gebunden und lassen sich auch mit lateraler Manipulation mit dem RTM nicht entfernen.

### 5.1.1 Wachstum von Cr auf Cr(110)

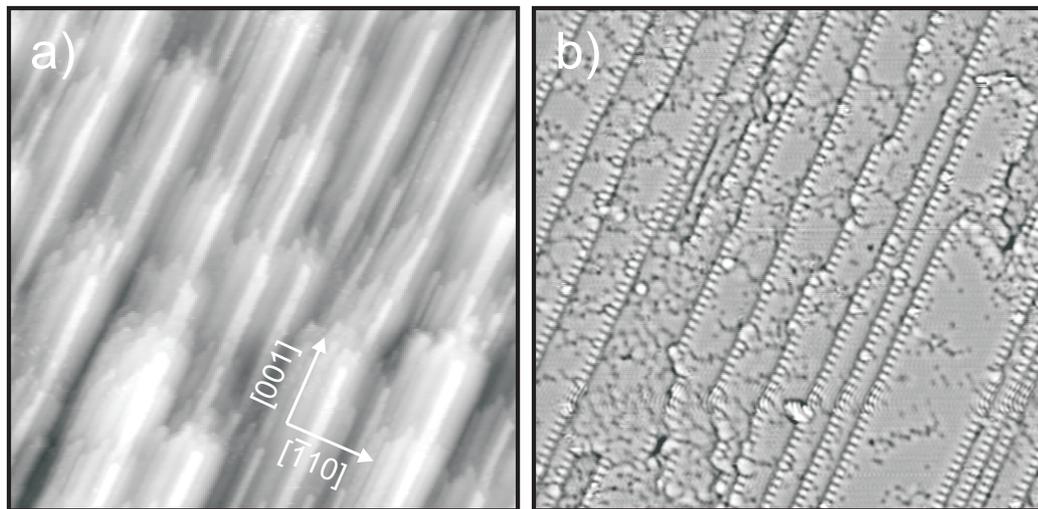


Abbildung 5.3: Diese Bilder zeigen die Cr(110)-Oberfläche nach Aufdampfen von etwa 10 ML Cr bei 620 K mit einem Fluß von 1 ML/min. **a)** Auf der Oberfläche sind schmale streifenförmige Terrassen in  $[001]$ -Richtung entstanden ( $1300 \text{ \AA} \times 1300 \text{ \AA}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ,  $U = +420 \text{ mV}$ ). **b)** In diesem Bildausschnitt ( $320 \text{ \AA} \times 320 \text{ \AA}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ,  $U = +300 \text{ mV}$ ) ist für alle Terrassen dieselbe Grauskala gewählt, die mit aufsteigender Höhe eine geringer werdende Konzentration an Verunreinigungen aufweisen. Die  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion sämtlicher Stufenkanten ist deutlich erkennbar.

Um die Konzentration an Verunreinigungen weiter zu reduzieren, wurde Cr auf die Cr(110)-Oberfläche aufgedampft. Abbildung 5.3 zeigt die Oberfläche nach dem Aufwachsen von 10 ML Cr bei einer Probertemperatur von 620 K und einem Fluß von 1 ML pro Minute. Dabei sind schmale streifen-

förmige Terrassen in  $[001]$ -Richtung entstanden, wie es typisch für die Homoepitaxie auf  $(110)$ -bcc-Oberflächen ist [91]. Die mittlere Terrassenbreite beträgt in dieser Präparation  $35 \text{ \AA}$ . In Abbildung 5.3 b) ist ein kleinerer Ausschnitt der Probenoberfläche zu sehen. Dieses RTM-Bild wurde abgeleitet, so daß man für alle Terrassenhöhen dieselbe Grauskala erhält. Man erkennt, daß die Terrassen mit aufsteigender Höhe eine geringer werdende Konzentration an Verunreinigungen aufweisen. Dabei ist die Konzentration an Verunreinigungen in der untersten Cr-Lage erhöht gegenüber der Konzentration, die für die nichtbedampfte Cr-Oberfläche vorliegt. Die Verunreinigungen werden also nicht in das Kristallvolumen eingebaut, sondern von den sich während des Wachstums bewegenden Stufenkanten zusammengesoben. Wegen der geringen Terrassenbreite eignete sich diese Präparation mittels Cr-Homoepitaxie nicht für die geplanten RTM-Experimente und wurde daher für die folgenden Untersuchungen nicht weiter verwendet. Die Terrassenbreite kann prinzipiell durch eine Temperaturerhöhung vergrößert werden, die dann aber ebenfalls zu einer erhöhten Segregation führt und so die Konzentration an Verunreinigungen effektiv nicht reduziert.

In Abbildung 5.3 b) ist deutlich die Rekonstruktion sämtlicher Stufenkanten zu erkennen, die in Abbildung 5.4 links im Detail abgebildet ist. Diese Rekonstruktion kann im Strukturmodell (Abb. 5.4 rechts) verifiziert werden und ergibt eine  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion der Stufenkanten. Da aufgrund der höheren Koordination eine glatte Stufenkante energetisch günstiger ist, handelt es sich vermutlich nicht um eine rein metallische Stufenkante, sondern um die Substitution eines jeden zweiten Cr-Atoms durch eine Verunreinigung. Diese  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion der Stufenkanten in  $[001]$ -Richtung wurde auch auf der unbedampften Cr-Oberfläche gefunden.

## 5.2 Ladungsdichtewelle

In Abbildung 5.5 ist ein Ausschnitt der Cr-Oberfläche mit sieben Terrassen zu sehen, der bei zwei verschiedenen Tunnelspannungen aufgenommen

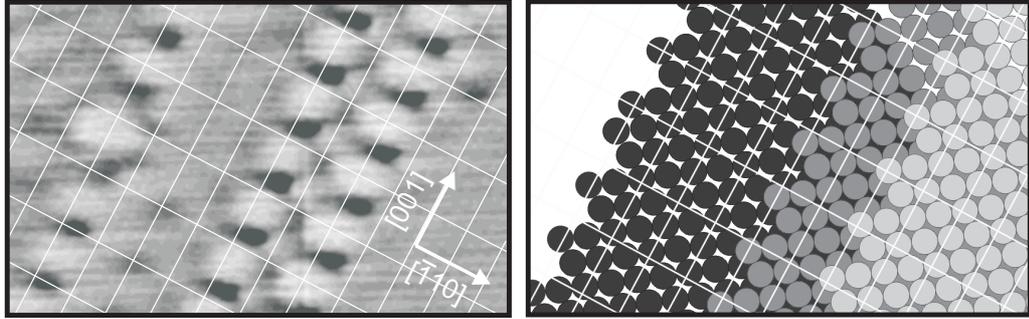


Abbildung 5.4: Die Stufenkanten der Cr-Oberfläche in  $[001]$ -Richtung zeigen eine  $(2 \times 1)$ -Rekonstruktion, wie im Strukturmodell verifiziert werden kann ( $40 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ,  $U = +26 \text{ mV}$ ).

wurde. Bei einer Tunnelspannung<sup>2</sup> von  $-1 \text{ V}$  wird nur die Topographie abgebildet, dagegen wird bei einer Tunnelspannung von  $-10 \text{ mV}$  eine wellenartige Modulation mit einer Korrugationsamplitude von  $0.15 \text{ \AA}$  sichtbar. Die Periode beträgt  $42 \text{ \AA}$  und die Wellenfronten verlaufen entlang der  $[001]$ -Richtung. Dieses Wellenmuster existiert im gesamten untersuchten Temperaturintervall von  $6 \text{ K}$  -  $145 \text{ K}$ . Der einzige Effekt einer Temperaturerhöhung ist hierbei eine stetige Abnahme der Korrugationsamplitude von  $0.15 \text{ \AA}$  bei  $6 \text{ K}$  bis  $0.05 \text{ \AA}$  bei  $145 \text{ K}$ . Insgesamt zeigt das Wellenmuster kein dispersives Verhalten (d.h. die Wellenlänge ändert sich nicht mit der Tunnelspannung) und erscheint im wesentlichen unbeeinflusst von Stufenkanten, Adsorbaten, oder segregierten Verunreinigungen. Daher läßt sich ein Oberflächenzustand [92] ausschließen, der zu Friedeloszillationen führen würde.

Bei der Untersuchung der Änderung der Korrugationsamplitude in Abhängigkeit von der Tunnelspannung zeigte sich das Wellenmuster nur für Energien um das Fermi Niveau. Dabei ist die Amplitude unempfindlich auf den Tunnelwiderstand (d.h. den Abstand zwischen Spitze und Probe), der zwischen  $0.1$  und  $1000 \text{ M}\Omega$  variiert wurde. Daraus ergibt sich, daß die beobachtete Modulation der Ladungsdichte nicht auf eine topographische Modulation der Oberfläche zurückzuführen ist.

Die Spannungsabhängigkeit der Amplitude des gemessenen Wellenmu-

<sup>2</sup>Die Tunnelspannung ist stets auf die Probe bezogen.

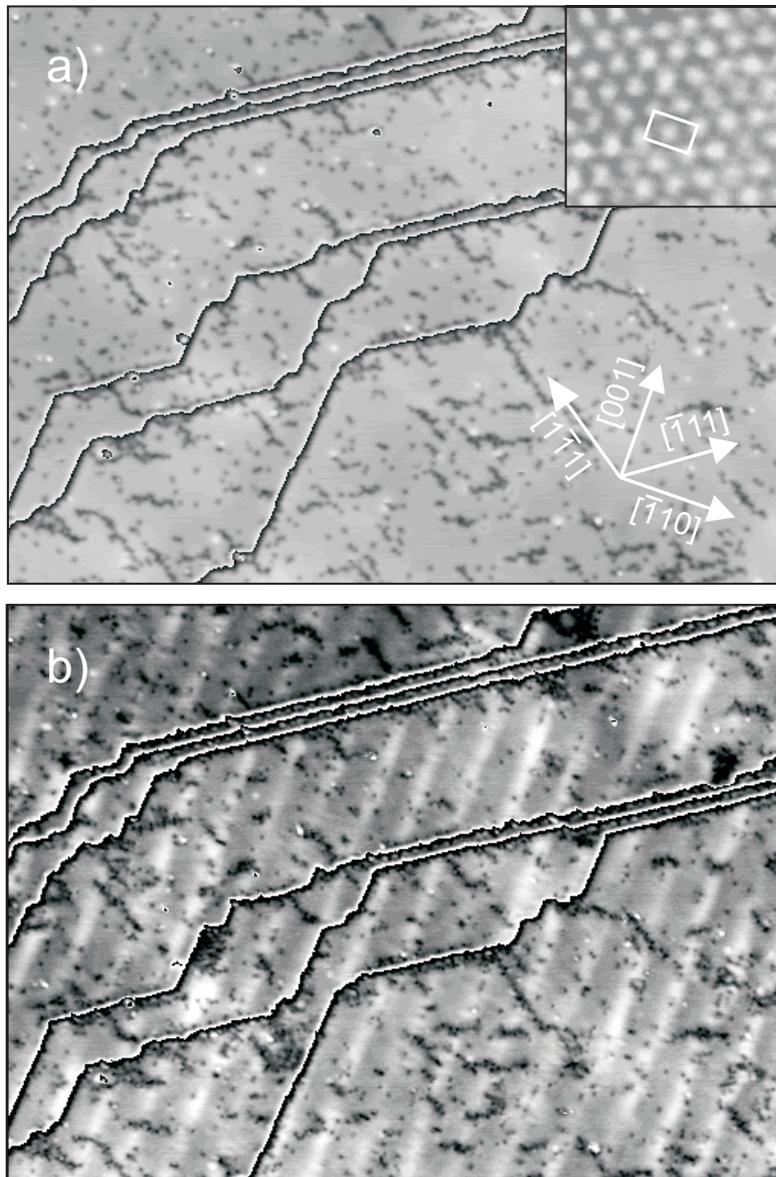


Abbildung 5.5: **a)** Dieses RTM-Bild zeigt sieben Terrassen ( $750 \text{ \AA} \times 560 \text{ \AA}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ,  $U = -1 \text{ V}$ ,  $T = 6 \text{ K}$ ). An die Oberfläche segregierte Verunreinigungen sind als schwarze Vertiefungen abgebildet. Der Einsatz zeigt die Cr(110)-Oberfläche in atomarer Auflösung ( $20 \text{ \AA} \times 18 \text{ \AA}$ ,  $I = 100 \text{ nA}$ ,  $U = +10 \text{ mV}$ ) mit der zentrierten Einheitszelle. **b)** Derselbe Bildausschnitt zeigt bei reduzierter Tunnelspannung ( $U = -10 \text{ mV}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ) Wellenfronten im Abstand von  $42 \text{ \AA}$  entlang der [001]-Richtung.

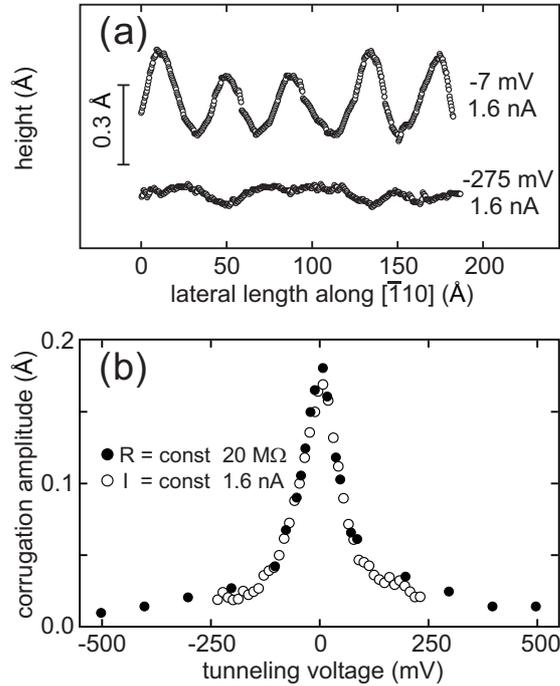


Abbildung 5.6: *Spannungsabhängigkeit des Wellenmusters aus Abbildung 5.5 bei 6 K. a)* Beispiele für Linienscans bei zwei verschiedenen Tunnelspannungen (oben:  $-7$  mV, unten:  $-275$  mV). *b)* Mittlere Korrugationsamplitude in Abhängigkeit der Tunnelspannung bei konstantem Tunnelwiderstand ( $20$  M $\Omega$ , schwarz gefüllte Kreise) und bei konstantem Tunnelstrom ( $1$  nA, leere Kreise). Die Ladungsdichtemodulation ist für Spannungen kleiner als  $\pm 150$  mV stark erhöht und maximal bei  $E_{Fermi}$ .

sters deutet darauf hin, daß es sich um eine Oberflächenladungsdichtewelle handelt, die an die gut untersuchte Ladungsdichtewelle im Volumen von Cr gekoppelt ist. Dies wird anhand von Abbildung 5.6 deutlich, in der die gemessene Korrugationsamplitude der Oberflächenwelle für verschiedene Tunnelspannungen dargestellt ist. Abbildung 5.6 a) zeigt zwei Linienscans mit einer Länge von jeweils  $190$  Å, die bei  $6$  K entlang der  $[\bar{1}10]$ -Richtung aufgenommen wurden (d.h. senkrecht zu den Wellenfronten). Während die Modulation bei  $U = -7$  mV mit einer mittleren Amplitude von  $0.16$  Å leicht abbildbar ist, ist sie bei  $U = -275$  mV stark unterdrückt. Zusätzlich wurde eine kontinuierliche laterale Phasenverschiebung der Modulation in Abhängigkeit von der Tunnelspannung beobachtet. Vergleicht man die Linienscans

in Abbildung 5.6 a), so wird deutlich, daß sich die relative Phasenänderung mit zunehmender Spannung einem Wert von  $\pi$  nähert (bezogen auf die Phasenlage für Spannungen nahe dem Fermi-niveau). In Abbildung 5.6 b) ist die Korrugationsamplitude als Funktion der Tunnelspannung  $U$  aufgetragen, die bei konstantem Tunnelstrom ( $I = 1.6 \text{ nA}$ ) und bei konstantem Tunnelwiderstand von  $20 \text{ M}\Omega$  gemessen wurde (im letzteren Fall wird der Abstand zwischen Spitze und Probe bei verschiedenen Tunnelspannungen konstant gehalten). In beiden Fällen ist die Ladungsdichtemodulation stark erhöht für  $U$  unterhalb von  $\pm 150 \text{ mV}$  und maximal am Fermi-niveau. Man erhält in beiden Fällen denselben Verlauf, d.h. die Amplitude ist lediglich eine Funktion der Tunnelspannung  $U$ . Der Energiebereich der elektronischen Cr-Zustände, die zur beobachteten Modulation beitragen, ist also offenbar auf den Bereich um das Fermi-niveau beschränkt. Diese Charakteristik ist eindeutig eine Eigenschaft der Ladungsdichtewelle, die die Spindichtewelle des Cr-Grundzustandes begleitet und ihre Ursache in der Kopplung der Fermi-flächen der Elektron- und Lochzustände hat [93].

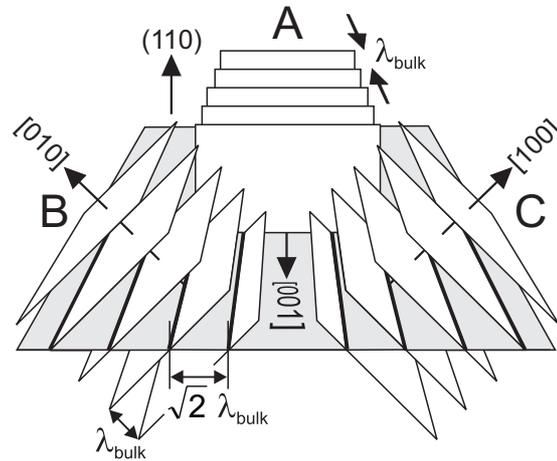


Abbildung 5.7: Schematische Ansicht der Wellenfronten der drei möglichen Ladungsdichtewellen Domänen im Cr Volumen relativ zur (110)-Oberflächenebene. Während planare Wellenfronten der Domäne **A** ( $Q \parallel [001]$ ) die (110)-Ebene im Abstand  $\lambda_{\text{bulk}}$  schneiden, erzeugen die Wellenfronten in Domäne **B** und **C** ( $Q \parallel [001]$  und  $Q \parallel [001]$ ) Schnittlinien entlang der [001]-Richtung in der Ebene mit einem Abstand von  $\sqrt{2} \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ .

Im Folgenden soll nun die Zuordnung zu einer auf die Oberfläche projizierten Ladungsdichtewelle mit Hilfe von bekannter räumlicher Merkmale der Ladungsdichtewelle im Cr-Volumen [74][75] verifiziert werden. Neutronen- und Röntgenstreuungsdaten zeigen, daß die intrinsische Ladungsdichtewelle im Cr-Volumen Domänen mit einem  $\vec{Q}$ -Vektor, der in eine der drei  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen zeigt, zu gleichen Teilen besetzt. Die Wellenlänge im Volumen ist temperaturabhängig und erreicht ein Tieftemperaturlimit von  $\lambda = 29.5 \text{ \AA}$  bei 20 K [79]. Dagegen zeigt die Normale der Wellenfronten in Abbildung 5.5 b) entlang der  $[\bar{1}10]$ -Richtung in der Ebene und die Periode beträgt 42  $\text{\AA}$ . Diese offensichtliche Diskrepanz läßt sich anhand des Schemas in Abbildung 5.7 leicht erklären. Dort sind die drei möglichen Anordnungen der Wellenfronten im Cr-Volumen relativ zur Cr(110)-Oberfläche zu sehen (als **A**, **B** und **C** bezeichnet). In der Domäne **A** schneiden planare Wellenfronten mit  $\vec{Q} \parallel [001]$  die (110)-Ebene in einem Abstand identisch zu  $\lambda_{bulk}$ . Andererseits erzeugen die Wellenfronten in Domäne **B** und **C** ( $\vec{Q} \parallel [010]$  und  $\vec{Q} \parallel [100]$ ) Schnittlinien entlang der  $[\bar{1}10]$ -Richtung in der Ebene mit einem Abstand von  $\sqrt{2} \cdot \lambda_{bulk}$ . Im Temperaturintervall von 6 K bis 145 K erhält man nach [79] für  $\sqrt{2} \cdot \lambda_{bulk}$  einen Wert von 41.7 - 42.9  $\text{\AA}$ , der im Rahmen der experimentellen Genauigkeit sehr gut mit dem gemessenen Wert von 42  $\text{\AA}$  übereinstimmt. Das hier beobachtete Wellenmuster kann also als eine Oberflächen-Ladungsdichtewelle identifiziert werden, die durch diejenigen Ladungsdichtewelledomänen induziert wird, deren  $\vec{Q}$ -Vektor entweder entlang der  $[010]$ - oder der  $[100]$ -Richtung aus der Ebene orientiert ist.

### 5.3 Ladungsdichtewellen-Domänen

Der größte Teil der experimentellen Daten zeigt Wellenmuster wie in Abbildung 5.5 b) abgebildet. Folglich erscheint die Ladungsdichtewelle mit dem  $\vec{Q}$ -Vektor entlang der  $[001]$ -Richtung (Domäne **A**) in der Oberflächenebene stark unterdrückt zu sein. Dies ist konsistent mit Röntgenstreuungsdaten an Cr(100)-Oberflächen [81] und (100)-orientierten Cr-Filmen [80], die ebenfalls zeigen, daß Ladungsdichtewellen mit einem  $\vec{Q}$ -Vektor parallel zur Oberfläche in der oberflächennahen Region unterdrückt sind. In einigen Fällen konnte

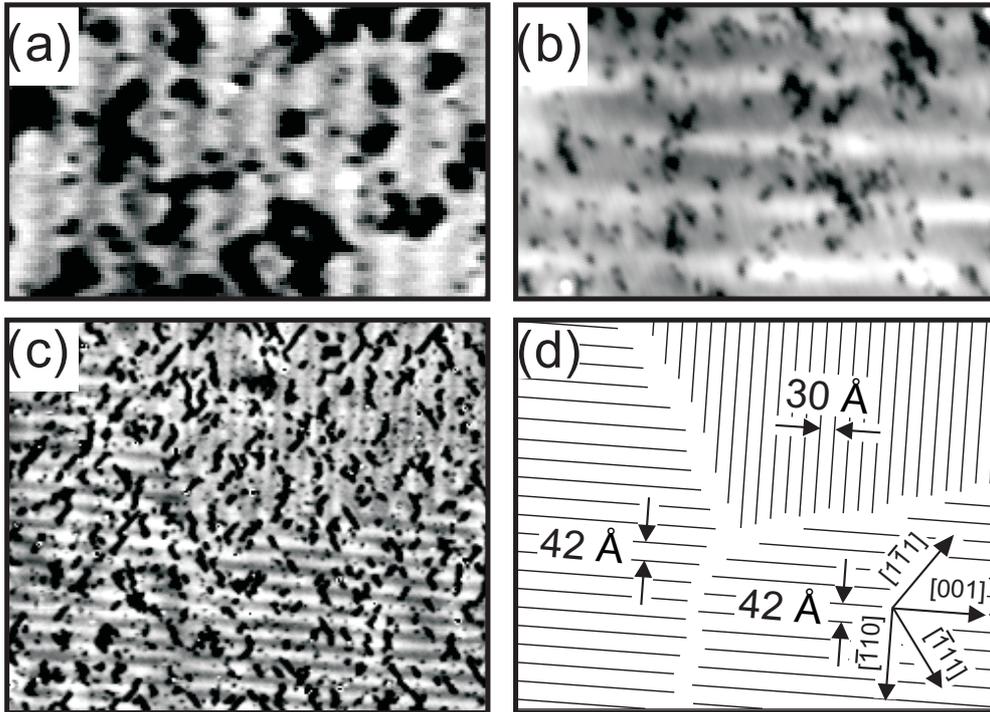


Abbildung 5.8: **a)** RTM-Bild ( $310 \text{ \AA} \times 190 \text{ \AA}$ ,  $I = 1.1 \text{ nA}$ ,  $U = 20 \text{ mV}$ ) mit der Ladungsdichtemodulation der Domäne **A** mit  $Q \parallel [001]$ . Die Wellenfronten laufen entlang der  $[\bar{1}10]$ -Richtung im Abstand von  $\sim 30 \text{ \AA}$ . Für den direkten Vergleich ist die dominierende Domäne in **b)** zu sehen. **c)** Hier koexistiert die LDW mit  $Q \parallel [001]$  mit zwei dominanten LDW-Domänen mit  $Q \parallel [100]$  oder  $Q \parallel [010]$ . **d)** Schematische Ansicht mit den Positionen der Wellenfronten aus **c)**. Aufgrund des erhöhten Kontrastes erscheinen die Verunreinigungen stärker in **a)** und **c)**, verglichen mit **b)**.

in der vorliegenden Arbeit jedoch auch eine Ladungsdichtemodulation abgebildet werden, deren Wellenvektor  $\vec{Q}$  parallel zur  $[001]$ -Richtung in der Oberfläche liegt. Die experimentellen Ergebnisse lassen vermuten, daß diese selten beobachtete Domäne durch Defekte stabilisiert wird, da sie typischerweise nahe ausgedehnten Stufenbündeln gefunden wurde. Abbildung 5.8 a) zeigt die Topographie dieses Wellenmusters mit Wellenfronten parallel zur  $[110]$ -Richtung. Zum Vergleich ist in Abbildung 5.8 b) die dominierende Domäne **B/C** in derselben Größenskala dargestellt. Die kristallographische Orientierung der Bilder ist so gewählt, daß Wellenfronten der Domäne **A**

mit  $\vec{Q} \parallel [001]$  vertikal ausgerichtet sind, während die Wellenfronten der dominierenden Domäne **B/C** horizontal verlaufen. Bei dieser Meßtemperatur ist die mittlere Korrugation der Oberflächenladungsdichte der Domäne **A** mit  $\vec{Q} \parallel [001]$  etwa zweimal kleiner als auf der dominierenden Domäne mit  $\vec{Q} \parallel [010]$  bzw.  $Q \parallel [100]$ . Der Abstand der Wellenfronten in Abbildung 5.8 a) beträgt 30 Å, in guter Übereinstimmung mit dem erwarteten Wert von  $\lambda_{bulk}$  für diese Domäne (vgl. Abb. 5.7). Abbildung 5.8 c) zeigt einen Oberflächenbereich, in dem die Oberflächenladungsdichtewelle mit  $\vec{Q} \parallel [001]$  koexistiert mit zwei Domänen mit  $\vec{Q} \parallel [010]$  oder  $\vec{Q} \parallel [100]$ . Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 5.8 d) die Positionen der Wellenfronten aus Abbildung 5.8 c) schematisch eingezeichnet. Bemerkenswerter Weise beträgt die Breite der Domänenwände in Abbildung 5.8 c) nur wenige nm. Dieser Befund unterstützt theoretische Konzepte bezüglich Domänenwänden im Cr-Volumen [94][95]: Im transversalen SDW-Mode<sup>3</sup> ( $\vec{S} \perp \vec{Q}$ ) sind zwei Polarisierungen möglich, die jeweils eine  $\vec{Q}$ -Domäne bilden können. Polarisationswände innerhalb einer  $\vec{Q}$ -Domäne können reversibel von einem externen Magnetfeld bzw. externen Verspannungen bewegt werden und haben eine Wandstärke in der Größenordnung von 100 nm [94]. Wände zwischen SDW-Domänen mit unterschiedlichem  $\vec{Q}$  sind andererseits wesentlich schwerer zu bewegen und sollten sehr viel dünner sein (typischerweise im Bereich einiger Gitterkonstanten [95]). Unsere experimentellen Ergebnisse belegen den letzteren Fall durch die direkte Abbildung der Domänenstruktur.

## 5.4 Phasenverschiebung und Spektroskopie

Abgesehen von Richtung und Wellenlänge der verschiedenen Domänen **A** und **B/C** unterscheiden sich die beiden Domänen in einer weiteren Eigenschaft. So zeigt die Position der Wellenfronten relativ zum Substrat auf der dominierenden Domäne **B/C** eine Abhängigkeit von der Probenspannung. Dies ist in Abbildung 5.9 demonstriert. In Bild 5.9 a) ist das Wellenmuster bei einer Tunnelspannung von  $U = -40$  mV deutlich abgebildet (beide RTM-Bilder sind

---

<sup>3</sup>SDW = Spindichtwelle

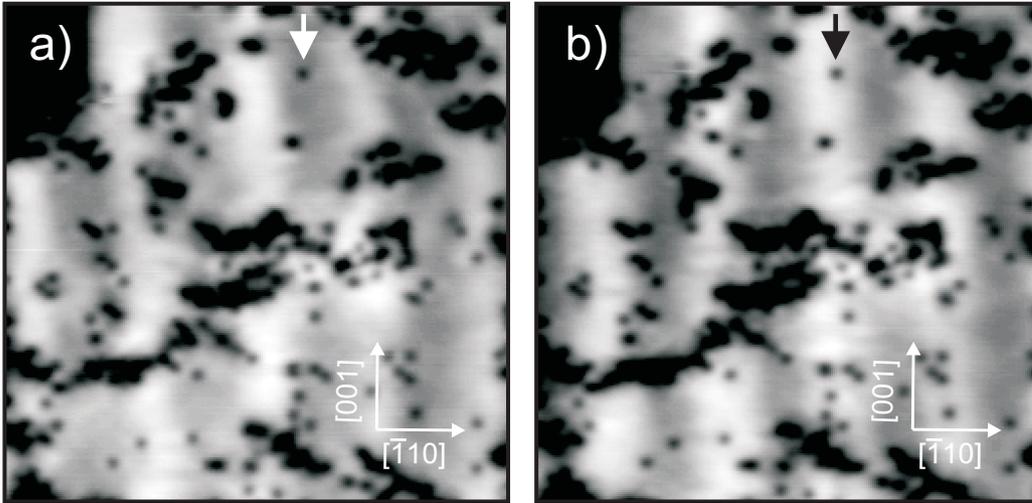


Abbildung 5.9: **a)** RTM Bild eines Ausschnittes der Cr(110) Oberfläche ( $190 \text{ \AA} \times 190 \text{ \AA}$ ,  $U = -40 \text{ mV}$ ,  $I = 2 \text{ nA}$ ,  $T = 6 \text{ K}$ ) mit der Ladungsdichtewelle entsprechend der dominierenden Domäne B/C nach Abbildung 5.7. **b)** Derselbe Ausschnitt bei veränderter Probenspannung ( $U = +40 \text{ mV}$ ) zeigt ein Wellenmuster, dessen Phase in diesem Fall um mehr als  $\pi$  gegenüber der Phase aus **a)** verschoben ist (siehe mit Pfeil gekennzeichnetes Adsorbat als Bezugspunkt).

mit Regelung auf konstanten Strom aufgenommen). Bei Umkehr der Polarität in Bild 5.9 b) zu  $U = +40 \text{ mV}$  hat sich die Position der Wellenfronten verschoben. Die Phasenverschiebung beträgt mehr als  $\pi$ , der exakte Wert ist aufgrund von lokalen Störungen hier nicht zu bestimmen. Im Falle von Domäne **A** gibt es keine spannungsabhängige Phasenverschiebung, wie sie für Domäne **B** und **C** gefunden wurde. Aus Gründen der Symmetrie kann eine derartige Verschiebung dort nicht auftreten: Die planaren Wellenfronten der Volumenladungsdichtewelle sind senkrecht zur (110)-Oberflächenebene orientiert und haben damit eine Spiegelebene bezüglich der (001)-Ebene. Eine Verschiebung der Wellenfronten in Abhängigkeit der Tunnelspannung wäre nicht mehr invariant bezüglich dieser Symmetrietransformation.

Das Vorzeichen der Phasenverschiebung der Ladungsdichtewelle auf der Domäne **B/C** sollte abhängig vom zugehörigen Wellenvektor  $\vec{Q}$  sein. So zeigen die Projektionen der beiden Wellenvektoren in Domäne **B** ( $\vec{Q} \parallel [010]$ ) und Domäne **C** ( $\vec{Q} \parallel [100]$ ) in entgegengesetzte Richtungen (siehe Abbildung

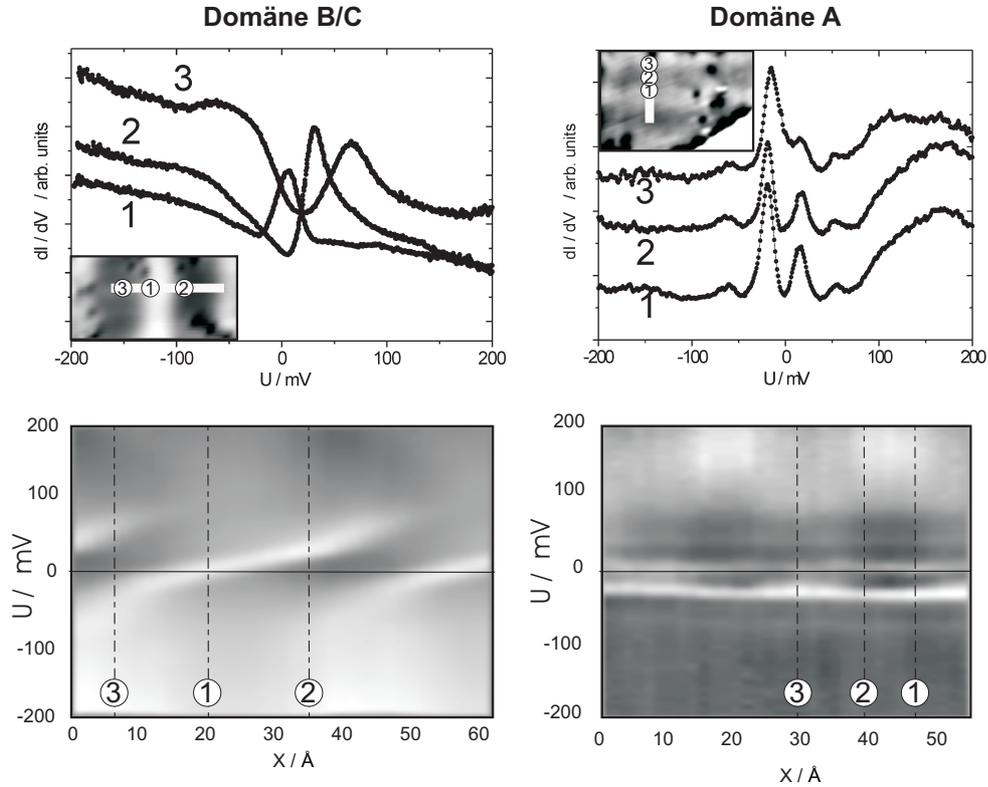


Abbildung 5.10: **Oben:**  $dI/dV$ -Spektren an verschiedenen Punkten der  $Cr(110)$ -Oberfläche bei  $6K$  aufgenommen. In Domäne **B/C** sind die energetischen Positionen der Maxima von der räumlichen Position abhängig, an der das jeweilige Spektrum aufgenommen wurde, auf Domäne **A** ist dies nicht der Fall. **Unten:** Hier sind Punktspektren wie im oberen Teil gezeigt zu einem Graustufengraphen zusammengesetzt. Das  $dI/dV$ -Signal ist dabei als Grauwert dargestellt und die Abzisse des Graustufengraphen verläuft entlang der weißen Linie im Bildausschnitt (Domäne **B/C**:  $90 \text{ \AA} \times 45 \text{ \AA}$ ,  $U = +19 \text{ mV}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ; Domäne **A**:  $80 \text{ \AA} \times 55 \text{ \AA}$ ,  $U = -10 \text{ mV}$ ,  $I = 1 \text{ nA}$ ).

5.7) und lassen das Auftreten einer Phasenverschiebung in beide Richtungen erwarten. Experimentell wurde nur eine Richtung gefunden, jedoch fand die begrenzte Anzahl an Messungen der Phasenverschiebung nur in geringem Abstand voneinander statt und hat damit die unbekannte Ausdehnung dieser Domäne vermutlich nicht überschritten. Abbildung 5.9 ist mit Regelung auf konstanten Strom aufgenommen worden, d.h. alle Zustände zwischen  $E_{Fermi}$  und  $e \cdot U_{Tunnel}$  tragen integral zum Bildsignal bei. Ein detaillierteres Bild er-

gibt sich mit spektroskopischen Daten, die in Abbildung 5.10 zu sehen sind. Im oberen Teil der Abbildung sind  $dI/dV$ -Spektren dargestellt, die an verschiedenen Punkten beider Domänen der Cr(110)-Oberfläche aufgenommen wurden. In Domäne **B/C** zeigen die Positionen der Maxima der LDOS eine starke räumliche Abhängigkeit, die auf der Domäne **A** dagegen nicht. Im unteren Teil der Abbildung 5.10 sind viele Punktspektren zu einem Graustufengraphen zusammengesetzt. Das  $dI/dV$ -Signal ist dabei als Grauwert dargestellt und die x-Achse des Graustufengraphen verläuft längs der weißen Linie im Bildausschnitt senkrecht zu den Wellenfronten. Vor jedem Spektrum wurde der Abstand der Spitze zur Probenoberfläche mit den Tunnelparametern der Bildausschnitte in Abbildung 5.10 eingestellt. Dadurch erhält man eine geringe zusätzliche Modulation der Messwerte in Abhängigkeit der Position, die aber den grundsätzlichen Verlauf nicht verändern. Insbesondere werden oben genannte Symmetrieargumente hier besonders deutlich: Der Graustufengraph der Domäne A bleibt invariant bezüglich einer Spiegelung, für die Domäne **B/C** trifft dies jedoch nicht zu. Eine einfache Erklärung für die Phasenverschiebung auf Domäne **B/C** gibt es bisher nicht und bedarf detaillierter theoretischer Untersuchungen.

Erst vor kurzem wurde die mit dem Spindichtewellengrundzustand von Cr gekoppelte Bandlücke mit ARPES temperaturabhängig vermessen[77][96]. Die Bandlücke wurde in Abhängigkeit der Temperatur untersucht und zu  $\sim 200$  meV bei 300 K bestimmt. Dabei erstreckt sich die Bandlücke im reziproken Raum isotrop um den  $\Gamma$ -Punkt in einem Abstand von  $0.4\Gamma\bar{S}$ . Diese Ergebnisse sind nicht ohne weiteres mit den in diesem Abschnitt gezeigten  $dI/dV$ -Spektren vergleichbar. Einerseits wird mit ARPES die Zustandsdichte über einen makroskopisch großen Bereich gemittelt, dagegen kann man mit RTM die LDOS lokal auf einer einzelnen Domäne spektroskopieren. Andererseits erhält man mit ARPES die Zustandsdichte in Abhängigkeit von  $k$ , dagegen hat man bei der  $dI/dV$ -Spektroskopie mit RTM keine  $k$ -Auflösung. Da nur Teile der Fermifläche von Elektron- und Lochzuständen im antiferromagnetischen Zustand gekoppelt sind, erhält man nicht an allen Punkten der Fermifläche eine Bandlücke und die ungekoppelten Zustände bestimmen das  $dI/dV$ -Signal bei diesen Energien. Für ein vertieftes Verständnis sind

an dieser Stelle ab-initio-Rechnungen notwendig, die für die drei möglichen Domänen separat durchgeführt werden müssen.

## 5.5 Diskussion

Es konnte zum ersten Mal gezeigt werden, daß die Ladungsdichtewelle, die die Spindichtewelle in Cr begleitet, eine Modulation der Ladungsdichte an der Oberfläche erzeugt. Die Cr(110)-Oberfläche wurde bei Temperaturen zwischen 6 K -145 K mit RTM untersucht. Bei Tunnelspannungen zwischen  $\pm 150$  meV wurde eine Ladungsdichtewelle mit einer Wellenlänge von 42 Å beobachtet, deren Wellenfronten entlang der [001]-Richtung verlaufen. Das beobachtete Wellenmuster konnte als die Projektion der Volumenladungsdichtewelle mit einem Wellenvektor  $\vec{Q} \parallel [010]$  bzw.  $\vec{Q} \parallel [100]$  erklärt werden. Die Ladungsdichtewelle mit  $\vec{Q} \parallel [001]$  dagegen ist an der Oberfläche stark unterdrückt. Die Möglichkeit, diese Ladungsdichtemodulation mittels Tieftemperatur-RTM abzubilden ist aus zwei Gründen bemerkenswert: Zum einen kann die Domänenstruktur von Cr an der Oberfläche im antiferromagnetischen SDW-Grundzustand abgebildet und indirekt auf atomarer Skala verifiziert werden. Zum anderen kann man so lokale Oberflächenphänomene untersuchen, die mit der Ladungsdichtewelle (und damit auch der Spindichtewelle) gekoppelt sind. In diesem Zusammenhang wäre es vielversprechend, ferromagnetische Adsorbate aufzuwachsen, die die magnetischen Eigenschaften des Cr-Substrates beeinflussen.