

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	iii
Abstract	v
Abkürzungen	xi
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	7
2.1 Strukturelle Eigenschaften der untersuchten Metalle	7
2.2 Elektronische und magnetische Eigenschaften	9
2.3 Fermiflächen	12
2.4 Winkelauflösende Photoelektronenspektroskopie	14
2.4.1 Dreistufenmodell	15
2.4.2 Resonante Photoemission	19
2.4.3 Intrinsische Auflösung	20
2.4.4 Besonderheiten der hcp-Kristallstruktur	21
3 Durchführung der Experimente	25
3.1 Experimenteller Aufbau	25
3.1.1 Undulator-Strahlrohr 7.0.1 an der ALS	25
3.1.2 ESF-Vakuumkammer	26
3.2 Probenpräparation	29
3.2.1 Aufdampfen der Metallfilme	29
3.2.2 LEED-Aufnahmen und Rumpfniveauspektren	32
3.3 Bandstruktur und Fermifläche mittels ARPES	34
3.3.1 Messungen mit der ESF- <i>Endstation</i>	34
3.3.2 Transformation in den Impulsraum	36
3.3.3 Verwendete Software	41
4 Elektronische Bandstrukturen	43
4.1 Yttrium: Experiment und Theorie	43
4.2 Gadolinium	49
4.2.1 Paramagnetische Phase	50
4.2.2 Ferromagnetische Phase	52

4.2.3	Theorie	53
4.3	Terbium in der ferromagnetischen Phase	56
4.3.1	Vergleich experimenteller und theoretischer Ergebnisse	57
4.3.2	Austauschspaltung in Abhängigkeit von \mathbf{k}	63
5	Schnitte der Fermiflächen mit Hochsymmetrieebenen	67
5.1	Γ MK-Hochsymmetrieebene	68
5.1.1	Yttrium: Experiment und Theorie	68
5.1.2	Para- und ferromagnetisches Gadolinium	70
5.1.3	Ferromagnetisches Terbium und Dysprosium	71
5.2	Γ ALM-Hochsymmetrieebene	72
5.2.1	Yttrium: Experiment und Theorie	73
5.2.2	Magnetischer Phasenübergang	74
5.2.3	Ferromagnetisches Terbium: Experiment und Theorie	77
6	Fermiflächen-Nesting und magnetische Phasenübergänge	81
6.1	Nesting der Fermifläche und helikale Ordnung	82
6.1.1	Standardtheorie der Kopplung mittels Valenzelektronen	83
6.1.2	Anwendung der Theorie auf die schweren Lanthanidmetalle	86
6.1.3	Beispiele aus der aktuellen Forschung	88
6.2	Yttrium: Experiment und Theorie	90
6.3	Gadolinium	95
6.3.1	Paramagnetische Fermifläche	95
6.3.2	Ferromagnetische Fermifläche	96
6.4	Terbium und Dysprosium	97
6.4.1	Paramagnetische Fermiflächen	97
6.4.2	Ferromagnetische Fermiflächen	100
6.4.3	Weiterführende Experimente	102
7	Zusammenfassung und Ausblick	107
A	Normierung und Symmetrisierung der Photoemissionsdaten	113
	Literaturverzeichnis	115
	Publikationen	127
	Danksagung	129
	Lebenslauf	131

Abbildungsverzeichnis

2.1	Hexagonal dicht gepackte Kristallstruktur	8
2.2	Hexagonale Brillouinzone	9
2.3	Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Gd	11
2.4	Magnetisches Phasendiagramm und antiferromagnetische Helix . .	12
2.5	Fermiflächen eines freien Elektronengas in 1D, 2D und 3D	13
2.6	Aufbau eines winkelauflösenden Photoemissionsexperiments	15
2.7	Energieschema beim Photoemissionsprozess	16
2.8	Impulserhaltung an der Kristall/Vakuum-Grenzfläche	19
2.9	Komplexer Phasenfaktor α	22
2.10	Symmetrie des Endzustands in Abhängigkeit von k_z	23
3.1	UHV-Aufbau am Strahlrohr 7.0.1	27
3.2	Probentransfer	28
3.3	Tiefemperaturgoniometer	28
3.4	Skizze der Verdampfer	30
3.5	LEED an Dy, verschiedene Temperschritte	32
3.6	Tb/W(110)-Rumpfniveauspektren, verschiedene Temperschritte .	33
3.7	Messgeometrie und Definition der Drehwinkel	35
3.8	Bandstrukturen und Fermiflächen mittels ARPES	37
4.1	Bandstruktur von Y, Theorie	44
4.2	Bandstruktur von Y entlang ΓM , MK und $K\Gamma$	46
4.3	Bandstruktur von Y entlang AL , LH und HA	49
4.4	Paramagnetische Bandstruktur von Gd entlang ΓM , MK und $K\Gamma$	50
4.5	Paramagnetische Bandstruktur von Gd entlang AL , LH und HA .	51
4.6	Ferromagnetische Bandstruktur von Gd entlang ΓM , MK und $K\Gamma$	53
4.7	Ferromagnetische Bandstruktur von Gd entlang AL , LH und HA .	54
4.8	Ferromagnetische Bandstruktur von Gd, Theorie	55
4.9	Ferromagnetische Bandstruktur von Tb entlang ΓM , MK und $K\Gamma$, Photoemission und Theorie	58
4.10	Ferromagnetische Bandstruktur von Tb entlang AL , LH und HA , Photoemission und Theorie	59
4.11	Ferromagnetische Bandstruktur von Tb entlang ΓA , KH und ML , Theorie	60
4.12	Austauschauftspaltung von Tb bei verschiedenen \mathbf{k}	65

5.1	Fermifläche von Y, Γ MK-Ebene	69
5.2	Para- und ferromagnetische Fermiflächen von Gd, Γ MK-Ebene . .	70
5.3	Ferromagnetische Fermifläche von Tb, Γ MK-Ebene	71
5.4	Ferromagnetische Fermifläche von Dy, Γ MK-Ebene	72
5.5	Fermifläche von Y, Γ ALM-Ebene	73
5.6	Para- und ferromagnetische Fermiflächen von Gd, Tb und Dy, Γ ALM-Ebene	75
5.7	Ferromagnetische Fermifläche von Tb, Γ ALM-Ebene, Photoemis- sion und Theorie	78
6.1	Magnetische Suszeptibilität, Theorie	85
6.2	Nicht perfektes Nesting und magnetische Suszeptibilität	86
6.3	Nesting in Y und magnetische Suszeptibilität	88
6.4	Gesamtenergie E von Tm in Abhängigkeit von q	89
6.5	Fermifläche von Y, Theorie	91
6.6	Fermifläche von Y	92
6.7	Fermifläche von Y, Positronenannihilation	93
6.8	Fermifläche von Y, MKHL-Ebene, Photoemission, Theorie und Positronenannihilation	94
6.9	Paramagnetische Fermifläche von Gd	95
6.10	Paramagnetische Fermifläche von Gd, Positronenannihilation . . .	96
6.11	Ferromagnetische Fermifläche von Gd	97
6.12	Paramagnetische Fermifläche von Tb, Theorie	98
6.13	Paramagnetische Fermifläche von Tb	98
6.14	Paramagnetische Fermifläche von Dy	99
6.15	Ferromagnetische Fermifläche von Tb	100
6.16	Ferromagnetische Fermifläche von Tb, Theorie	101
6.17	Ferromagnetische Fermifläche von Dy	102
6.18	Fermiflächen von Tb bei 210 K und Dy bei 140 K	104
A.1	Symmetrisierung der Photoemissionsdaten	114

Abkürzungen

ALS	Advanced Light Source, Lawrence Berkeley National Laboratory, USA
ARPES	<i>angle-resolved photoelectron spectroscopy</i>
bcc	<i>body-centered cubic</i>
BZ	Brillouinzone
DFT	<i>density functional theory</i>
dHvA	de-Haas-van-Alphen
EDC	<i>energy distribution curve</i>
fcc	<i>face-centered cubic</i>
FLAPW	<i>full-potential linearized augmented plane-wave</i>
FWHM	<i>full width at half maximum</i>
hcp	<i>hexagonally closed packed</i>
IEC	<i>interlayer exchange coupling</i>
IPES	<i>inverse photoelectron spectroscopy</i>
LDA	<i>local density approximation</i>
LEED	<i>low-energy electron diffraction</i>
MDC	<i>momentum distribution curve</i>
PES	<i>photoelectron spectroscopy</i>
FS	<i>Fermi surface</i>
SGM	<i>spherical grating monochromator</i>
SOC	<i>spin-orbit coupling</i>
SS	<i>surface state</i>
STS	<i>scanning tunneling spectroscopy</i>
T_C	Curietemperatur
T_N	Neeltemperatur
UHV	<i>ultrahigh vacuum</i>
XMCD	<i>x-ray magnetic circular dichroism</i>

