

## 5 Schnitte der Fermiflächen mit Hochsymmetrieebenen

Eine bedeutende, vielleicht die wichtigste Standardmethode zur experimentellen Untersuchung von Fermiflächen nutzt den de-Haas-van-Alphén-Effekt (dHvA) aus, bei dem das magnetische Moment eines Metalls als Funktion der Stärke eines statischen äußeren Magnetfelds oszilliert. Aus den Perioden der beobachteten Oszillationen lassen sich Rückschlüsse auf die Querschnittsflächen der Extremalbahnen der Fermifläche ziehen<sup>1</sup>. Unter Zuhilfenahme von theoretischen Modellen der Fermifläche können solche Extremalbahnen identifiziert werden. Ein vollständiges Bild der Fermifläche entsteht, das in weiten Teilen der Brillouinzone auf theoretischen Rechnungen beruht und dessen Extremalbahnen experimentell verifiziert sind. Diese Vorgehensweise liefert sehr zuverlässige Resultate für einfache, freielektronenartige Fermiflächen mit wenigen Extremalbahnen, wie sie beispielsweise Leicht- und Edelmetalle aufweisen. Bei den komplexen Fermiflächen der Seltenen Erden, die eine Vielzahl von Extremalbahnen besitzen, führen Messungen des dHvA-Effekts zur Aufklärung ihrer Gestalten nur partiell zum Erfolg. Der Vielzahl von beobachteten Oszillationsperioden können häufig nicht eindeutig Bereiche der theoretischen Fermifläche zugeordnet werden. Ein Beispiel hierfür ist die Arbeit von Ahuja *et al.* [Ahu] 94]. Die Autoren bemühen sich um eine Identifikation gemessener dHvA-Frequenzen für Gd und Tb mit Vorhersagen aus ihren berechneten Fermiflächen, was ihnen in einigen Fällen jedoch nicht gelingt. Auch werden bei der dHvA-Methode hochreine Volumeneinkristalle benötigt, deren Herstellung sich zum Teil sehr aufwendig darstellt, und die bei tiefen Temperaturen im Bereich von wenigen Kelvin untersucht werden müssen. Nur so ist eine hinreichend große mittlere freie Weglänge der Elektronen gewährleistet. An magnetischen Metallen lässt sich auf diese Weise lediglich die Fermifläche der Tieftemperaturphase untersuchen.

Für Fragestellungen, die sich mit den temperaturabhängigen Veränderungen der Fermifläche beschäftigen, ist eine Methode unerlässlich, die direkten experimentellen Zugang zur Fermifläche bietet und die darüber hinaus unabhängig von der Proben temperatur einsetzbar ist. Dies ist von besonderer Bedeutung für die Lanthanidmetalle, die mannigfaltige magnetische Ordnungsphänomene zeigen, wie beispielsweise das Ausbilden von paramagnetischen, ferromagnetischen, helikal

---

<sup>1</sup>Ausführliche Beschreibungen der de-Haas-van-Alphén-Methode finden sich beispielsweise in den Lehrbüchern zur Festkörperphysik von N. W. Ashcroft und N. D. Mermin [Ashc 76] sowie von Ch. Kittel [Kitt 99].

antiferromagnetischen sowie konisch ferrimagnetischen Phasen. Zahlreiche umfassende theoretische Studien, die in den sechziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts begonnen wurden und bis heute Gegenstand aktueller Forschung sind<sup>2</sup>, führen Unterschiede bei den magnetischen Eigenschaften auf geringfügige Abweichungen der Fermiflächen der Lanthanidmetalle untereinander zurück. Direkte experimentelle Untersuchungen der Fermiflächen sind in der Literatur nur sporadisch zu finden<sup>3</sup>; temperaturabhängige Studien wurden meines Wissens bislang noch nicht gezeigt.

Winkelauflösende Photoelektronenspektroskopie, wie sie heutzutage an leistungsstarken Synchrotronstrahlungsquellen durchgeführt werden kann, die sich der Möglichkeiten bedient, die moderne abbildende Elektronenanalysatoren bieten, ist in hohem Maße geeignet, diesen Fragenstellungen nachzugehen und die Lücken auf Seiten der experimentellen Datenlage zu schließen. Im vorliegenden Kapitel werden Schnitte der Fermiflächen von Gd, Dy und Tb mit Hochsymmetrieebenen der Brillouinzone gezeigt. Es wird dabei auf Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen den Lanthanidmetallen eingegangen sowie ein Vergleich mit Y vorgenommen. Temperaturbedingte Änderungen der Fermifläche, die auf der Austauschspaltung zwischen Majoritäts- und Minoritätszuständen in der magnetisch geordneten Phase beruhen, werden diskutiert. Auf die Zusammenhänge zwischen Fermifläche und magnetischer Ordnung wird hier in knapper Form eingegangen; eine ausführliche Darstellung erfolgt in Kapitel 6. Als Beispiele für Ergebnisse theoretischer Berechnungen der Fermifläche werden Y und ferromagnetisches Tb gezeigt und mit den Photoemissionsmessungen verglichen.

## 5.1 Schnitte mit der $\Gamma$ MK-Hochsymmetrieebene

Wie auch in Kapitel 4 wird nun zunächst am Beispiel von Y die generelle Gestalt der Fermifläche in der  $\Gamma$ MK-Hochsymmetrieebene der hexagonalen Brillouinzone diskutiert. Die bereits angesprochenen grundsätzlichen Gemeinsamkeiten der Bandstrukturen von Y und schweren hcp-Lanthanidmetalle in der paramagnetischen Phase finden sich auch bei den elektronischen Zuständen an der Fermienergie wieder.

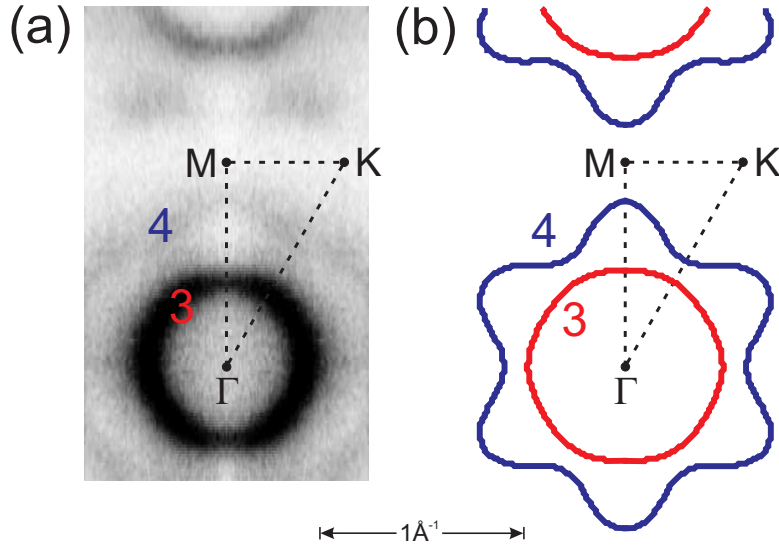
### 5.1.1 Yttrium: Experiment und Theorie

Abbildung 5.1 zeigt den Schnitt der Y-Fermifläche mit der  $\Gamma$ MK-Ebene. In (a) sind Photoemissionsdaten gezeigt, die aus einer Serie von einigen Tausend Einzelspektren bei verschiedenen Emissionswinkeln und auch bei verschiedenen Photonen-

---

<sup>2</sup>siehe hierzu die Referenzen [Louc 66, Keet 68, Jack 69, Even 69] sowie die Übersichtsartikel von Freeman [Free 72] und Liu [Liu 78]; moderne theoretische Arbeiten finden sich beispielsweise in den Referenzen [Ahuj 94, Nord 00, Take 00, Thak 03, Crow 04]

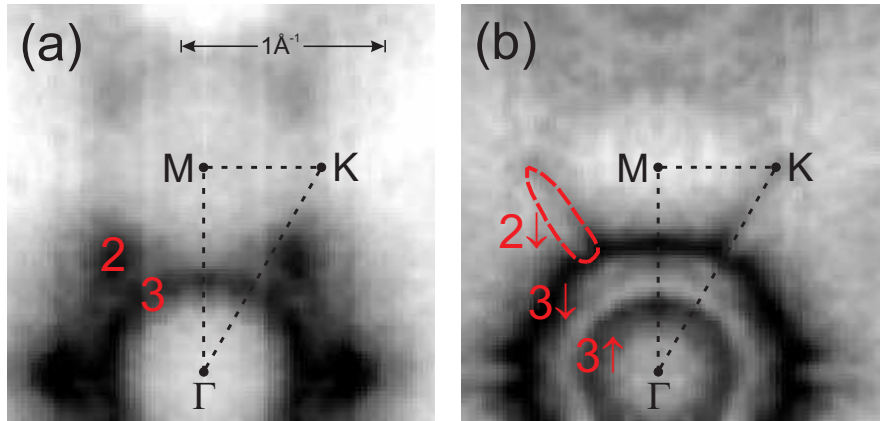
<sup>3</sup>Mittels Positronenannihilation gemessene Fermiflächen von Y und Gd, sowie von  $Y_xGd_{1-x}$  Legierungen werden in den Referenzen [Dugd 97, Fret 99, Crow 04] gezeigt (s. auch Kap. 6).



**Abbildung 5.1:** Fermifläche von Y in der  $\Gamma$ MK-Hochsymmetrieebene. (a) zeigt Photoemissionsmessung; deutlich zu erkennen ist die zentrale ringförmige Struktur des Bandes 3, das aufgrund seiner  $\Delta_2$ -artigen Symmetrie bei diesen Photonenenergien (105 eV bei  $\Gamma$ , 110 eV bei M und 120 eV am oberen Bildrand) mit hoher Photoemissionsintensität (dunkle Graustufen) zu beobachten ist. Ebenfalls zu erkennen ist die Fermikontur von Band 4, deren Intensität aufgrund ihrer  $\Delta_1$ -artigen Symmetrie schwächer ist. In (b) ist der theoretische Verlauf der Fermikonturen abgebildet (nach Ref. [Bihl 06]).

energien zusammengesetzt sind (s. Kap. 3.3.2). Hierbei wurden die Photoemissionsintensitäten der Spektren bei der Energie  $E = E_F$  in eine Graustufenskala übersetzt und in Abhängigkeit des Impulses parallel zur Probenoberfläche ( $k_x, k_y$ ) aufgetragen (s. Abb. 3.8). Die Impulskomponente senkrecht zur Oberfläche  $k_z$  ist in der  $\Gamma$ MK-Ebene konstant. Dunkle Graustufen entsprechen einer hohen Intensität. Die Bestimmung der Positionen der Hochsymmetriepunkte  $\Gamma$ , M und K erfolgte, wie auch bereits in Kapitel 4, aus der Analyse der Symmetrien der elektronischen Bänder und der Fermikonturen. Zur Verbesserung der Klarheit der Darstellungen sind die Photoemissionsdaten in Abbildung 5.1(a) entlang der  $\Gamma$ M-Symmetrielinie gespiegelt; gleiches gilt für alle weiteren Abbildungen in Kapitel 5.1.

Mit starker Photoemissionsintensität ist eine zentrale, nahezu ringförmige Fermikontur zu erkennen, die dort auftritt, wo das  $\Delta_2$ -artige Band 3 das Fermi-niveau schneidet (s. auch Bandstrukturen in Abb. 4.1 und 4.2). Ebenfalls zu beobachten, mit schwacher Intensität, ist die Fermikontur von Band 4, die die zentrale Struktur umschließt. Sie liegt näher am Zonenrand, welcher die Banddispersion und damit auch die Form der Fermikontur beeinflusst. Dies zeigt sich in größeren Komplexität und der deutlicher ausgeprägten Sechszähligkeit der Drehsymmetrie der von Band 4 geformten Fermikontur im Vergleich zu Band 3. Band 4 weist eine  $\Delta_1$ -artige Symmetrie auf, weshalb es gemäß klassischer Dipolauswahlregeln bei Photonenenergien um 105 eV nicht zu sehen sein sollte. Wie bereits in Abschnitt 4.1 diskutiert, können relativistische Effekte wie auch Streuprozesse der

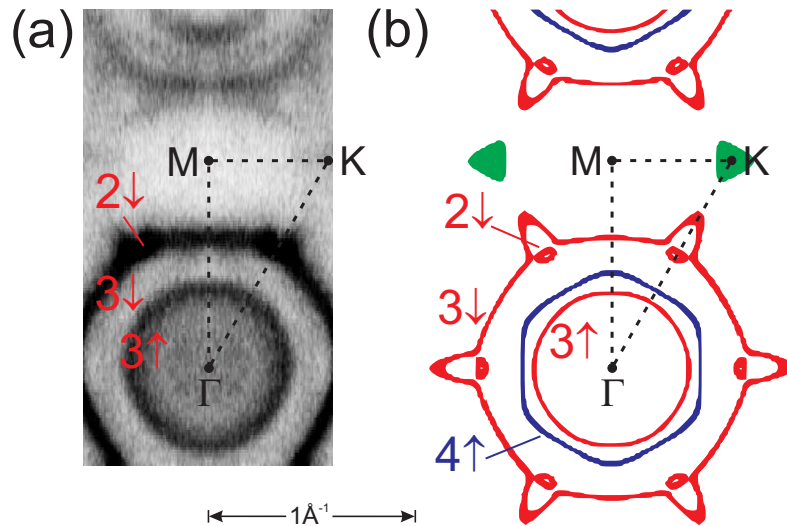


**Abbildung 5.2:** Fermifläche von Gd in der  $\Gamma$ MK-Ebene ( $h\nu=105\text{--}120$  eV), (a) in der paramagnetischen Phase ( $T = 300$  K) und (b) in der ferromagnetischen Phase ( $T = 50$  K). Das Aufspalten der Bänder führt zu signifikanten Änderungen der Fermifläche, wie hier an den Bändern 2 und 3 zu erkennen.

Photoelektronen an Oberflächendefekten als mögliche Ursachen für ihr Auftreten angeführt werden. Die von den Bändern 3 und 4 gebildeten Fermikonturen wiederholen sich in der angrenzenden Brillouinzone, d.h. oberhalb der MK-Linie. Die dabei beobachtete geringere Intensität kann auf unterschiedliche Übergangsmatrixelemente zurückgeführt werden. Beide Bänder formen lochartige Fermiflächen, d.h. sie sind an ihrem Zentrum am  $\Gamma$ -Punkt unbesetzt. Die theoretischen Fermikonturen sind in Abbildung 5.1(b) dargestellt (nach Ref. [Bihl 06]); auch hier ist der zentrale Ring erkennbar, der von Band 3 gebildet wird und der von der Struktur von Band 4 umgeben ist. Es wird hierbei eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt. Die theoretischen Fermikontur von Band 3 ist um etwa 10–15% größer als die experimentelle und liegt somit beispielsweise entlang  $\Gamma$ M näher bei M. Für Band 4 ist die Übereinstimmung besser. Bereits im Jahre 1966 sagten erste Berechnungen von Loucks [Louc 66] eine derartige Form der Fermifläche für Y vorher. Loucks' Fermikonturen sind um 5–10% kleiner als die experimentellen.

### 5.1.2 Para- und ferromagnetisches Gadolinium

Abbildung 5.2(a) zeigt die paramagnetische Fermifläche von Gd ( $T = 300$  K) in der  $\Gamma$ MK-Ebene ( $h\nu=105\text{--}120$  eV). Zu erkennen ist die zentrale nahezu ringförmige Struktur, die von Band 3 geformt wird (Das  $\Delta_1$ -artige Band 4 ist hier nicht zu sehen). Die paramagnetische Fermifläche von Gd weist damit weitgehende Übereinstimmungen mit Y auf. Weiterhin sieht man in  $\Gamma$ K-Richtung außerhalb des Rings Bereiche hoher Photoemissionsintensität, die auf Band 2 zurückzuführen sind. Wie aus Abbildung 4.4(a) erkennbar, kreuzt es das Ferminiveau zwar nicht, kommt diesem aber hinreichend nahe, sodass es aufgrund der experimentellen Auflösung von ca. 60 meV zur gemessenen Intensität bei  $E = E_F$  beiträgt.



**Abbildung 5.3:** Ferromagnetische Fermifläche von Tb in der  $\Gamma$ MK-Ebene, (a) gemessen bei Photonenenergien von 105–120 eV ( $T = 25$  K) und (b) theoretischer Verlauf (publiziert in Ref. [Dobr 07a]). In (a) sind die  $\Delta_2$ -artigen Bänder 2 und 3 zu beobachten.

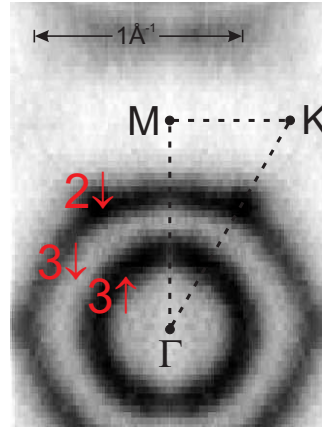
Ein Herunterkühlen der Probe in die ferromagnetische Phase führt zum Ausbilden einer langreichweitigen magnetischen Ordnung, mit der ein Aufspalten der elektronischen Zustände in Majoritäts- und Minoritätsbänder einhergeht (s. Kap. 4.2.2). Dies wird in dem Aufreißen der in Abbildung 5.2(a) dargestellten paramagnetischen Fermikonturen sichtbar. Bei lochartigen Fermikonturen, wie sie hier gezeigt sind, bewegen sich dabei in Abhängigkeit der Austauschspaltung die Majoritätskonturen zum  $\Gamma$ -Punkt hin; die Majoritätsfermifläche wird somit kleiner. Die Minoritätskonturen wandern weg vom  $\Gamma$ -Punkt; sie werden größer.

In Abbildung 5.2(b) ist die ferromagnetische Fermifläche von Gd gezeigt ( $T = 50$  K); die Majoritäts- und Minoritätskonturen sind hier deutlich voneinander separiert. Die zentrale Struktur, die von Band  $3\uparrow$  gebildet wird, ist nahezu ringförmig, wohingegen die sie umgebende Kontur von Band  $3\downarrow$  eine hexagonale Form aufweist. An den Ecken des Hexagons, in  $\Gamma$ K-Richtung, kreuzt nun Band  $2\downarrow$  die Fermienergie und formt eine Kontur, die bis zum K-Punkt reicht. Die rote gestrichelte Hilfslinie zeichnet ihren Verlauf nach. Das Majoritätsband 2 liegt unterhalb der Fermienergie. In Abbildung 5.2 wird erstmals experimentell gezeigt, welche Veränderungen der Fermifläche eines Lanthanidmetalls der magnetische Phasenübergang und die langreichweitige magnetische Ordnung bei tiefen Temperaturen hervorruft.

### 5.1.3 Ferromagnetisches Terbium und Dysprosium

Die ferromagnetischen Fermiflächen von Gd und Tb sind sich sehr ähnlich, wie anhand der hier gezeigten Abbildung 5.3 für Tb in der  $\Gamma$ MK-Ebene deutlich wird. Bei

**Abbildung 5.4:** Ferromagnetische Fermifläche von Dy in der  $\Gamma$ MK-Ebene ( $T = 25$  K). Bei Photonenenergien von 105–120 eV sind die  $\Delta_2$ -artigen Bänder 2 und 3 zu beobachten.

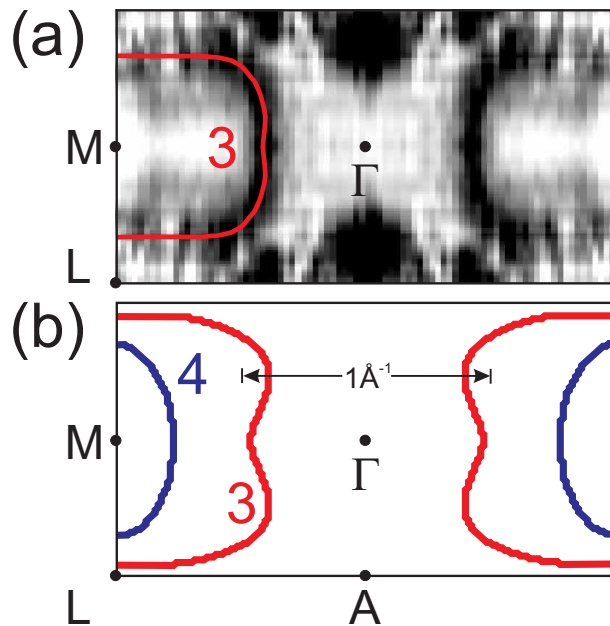


diesen Photonenenergien ( $h\nu=105\text{--}120$  eV) sind die  $\Delta_2$ -artigen Bänder 2 und 3 zu beobachten (Abb. 5.3(a)). Bei Tb liegen die Majoritäts- und Minoritätskonturen im Vergleich zu Gd etwas näher beieinander. Dies ist auf die für Tb geringere Austauschspaltung zurückzuführen. Die theoretischen Fermikonturen von Tb [Dobr 07a] sind in (b) abgebildet, wobei die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten hervorragend ist. Über die  $\Delta_2$ -artigen Bänder 2 und 3 hinaus ist das  $\Delta_1$ -artige Band  $4\uparrow$  dargestellt (blau eingefärbt) dessen ebenfalls lochartige Fermikontur zwischen denen der Bänder  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  liegt. In der Umgebung des K-Punkts schneiden das  $\Delta_1$ -artige Band  $1\downarrow$  und das  $\Delta_2$ -artige Band  $2\uparrow$  das Ferminiveau; dieser Bereich ist in (b) in grün markiert. In (a) findet sich an dieser Stelle eine leicht erhöhte Photoemissionsintensität.

Auch bei ferromagnetischem Dy ist die Fermifläche sehr ähnlich zu denen von Gd und Tb, nicht nur in der  $\Gamma$ MK-Ebene (Abb. 5.4). Der Trend der näher beieinander liegenden Fermikonturen der Bänder  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  setzt sich für Dy fort und folgt damit der mit zunehmender  $4f$ -Besetzung (nahezu) linear abnehmenden Austauschspaltung.

## 5.2 Schnitte mit der $\Gamma$ ALM-Hochsymmetrieebene

Im Folgenden wird die Dispersion der Fermikonturen senkrecht zur Probenoberfläche untersucht ( $k_z$ -Richtung), bei denen die Photonenenergie über einen weiten Bereich abgerastert werden muss. Solche Messungen gestalten sich schwieriger, als die im vorherigen Kapitel gezeigten Messungen parallel zur Oberfläche. Zum einen resultiert dies aus der intrinsischen Auflösung der Photoemission dieser Impulskomponente, die im vorliegenden Energiebereich etwa  $0.1 \text{ \AA}^{-1}$  (FWHM) beträgt (s. Kap. 2.4.3). Zum anderen treten bei Messungen, bei denen die Photonenenergie variiert wird, Intensitätsveränderungen im Photonenfluss auf, die durch Normieren korrigiert werden müssen. Weitere signifikante Intensitätsschwankungen entstehen, die auf Änderungen des Wirkungsquerschnitts der Photoemission beruhen und die teilweise drastische Auswirkungen auf die Messungen haben ( $4d \rightarrow 4f$  Riesenresonanz, s. Kap. 2.4.2).



**Abbildung 5.5:** Fermifläche von Y in der  $\Gamma$ ALM-Ebene. (a) Photoemissionsmessung, die rote Hilfslinie gibt den Verlauf von Band 3 wieder; (b) theoretischer Verlauf der Fermikonturen (nach Ref. [Bihl 06]).

Solche Intensitätsänderungen überlagern die Messsignale der senkrecht zur Probenoberfläche dispergierenden Fermikonturen (wie auch die der Bänder). Sie sind aufwendig zu handhaben und müssen mittels speziell entwickelter Normierungs- und Korrelationsroutinen numerisch unterdrückt werden. Das hierzu von mir implementierte Normierungsverfahren wird in Anhang A an einem Beispiel vorgestellt. Wie zusätzlich mittels numerischer Autokorrelationsoperationen der Verlauf von Fermikonturen senkrecht zur Oberfläche hervorgehoben werden kann, wird in Kapitel 5.2.3 erläutert. Hierzu dient ein Tieftemperaturdatensatz von Tb, der den gesamten Photonenenergiebereich von ca. 80–200 eV abdeckt.

### 5.2.1 Yttrium: Experiment und Theorie

Auch in den Bereichen der Brillouinzone, die außerhalb der  $\Gamma$ MK-Hochsymmetrieebene liegen, wird die Fermifläche von Y von den Bändern 3 und 4 gebildet, wie in Abbildung 5.5 für den Schnitt mit  $\Gamma$ ALM gezeigt ist. Beide Bänder dispergieren von der  $\Gamma$ M-Linie weg, hin zur ML-Linie und erreichen dort den Zonenrand in der Nähe von L. In (a) ist die experimentelle Dispersion des  $\Delta_2$ -artigen Bandes 3 gezeigt (rote Hilfslinie)<sup>4</sup>. Die Photoemissionsintensitäten sind wie in Anhang A beschrieben normiert und entlang der  $\Gamma$ A- sowie der  $\Gamma$ M-Hochsymmetrielinien gespiegelt; gleiches gilt für die in Abbildung 5.6 gezeigten Schnitte der Fermiflächen.

Die elektronischen Zustände entlang der AL-Linie sind bezüglich  $\Delta_1$ - und  $\Delta_2$ -Symmetrie entartet (s. Kap. 2.4.4). Dadurch „weicht“ die durch relativistische Effekte bereits abgeschwächte  $\Delta_1$ - und  $\Delta_2$ -Selektivität der Photoemission in der

<sup>4</sup>Photonenenergiebereich 105 (bei  $\Gamma$ ) bis 130 eV (bei A)

Nähe von AL weiter auf. Daher trägt der  $\Delta_1$ -artige Band 4 im Bereich des horizontalen Verlaufs von Band 3 ebenfalls zur gemessenen Photoemissionsintensität bei. In der Nähe der AL-Linie wird damit eine Überlagerung beider Bänder gemessen. Der Bereich hoher Photoemissionsintensität bei A ist nicht Bestandteil der Volumenfermifläche von Y, sondern auf den Oberflächenzustand zurückzuführen. Er liegt dicht unterhalb des Fermi-niveaus und trägt damit zur gemessenen Intensität bei  $E = E_F$  bei. In der Nähe der AL-Linie weist er eine hohe Photoemissionsintensität auf, die vergleichbar ist mit der der Volumenbänder (s. Abb. 4.3), und ist deshalb in Abbildung 5.5(a) zu sehen.

Abbildung 5.5(b) zeigt den theoretischen Verlauf der Fermikonturen der Bänder 3 und 4. Im Rahmen der experimentellen Auflösung wird eine gute Übereinstimmung erzielt.

### 5.2.2 Magnetischer Phasenübergang bei Gadolinium, Terbium und Dysprosium

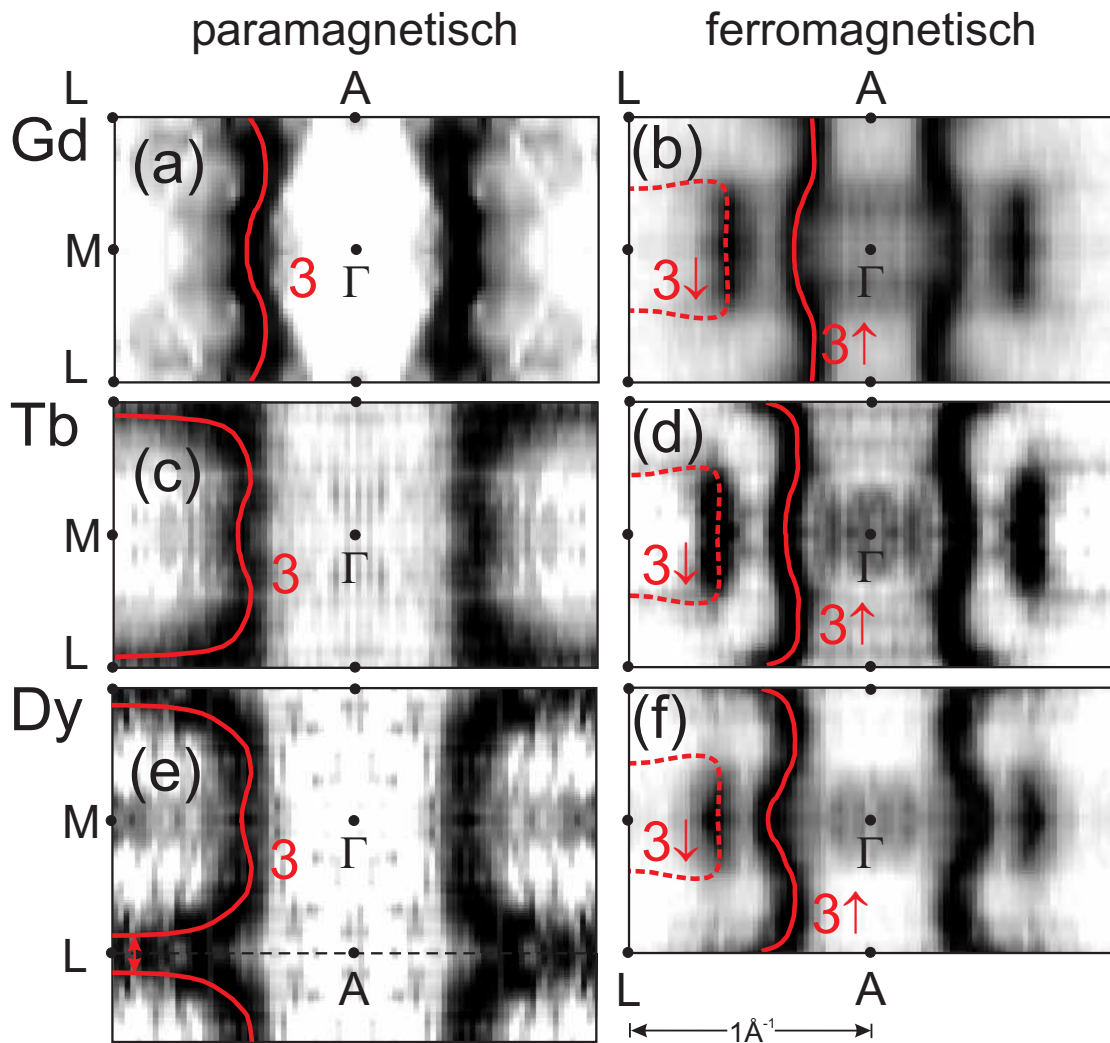
Vergleicht man die Fermikonturen von paramagnetischem Gd in der  $\Gamma$ ALM-Ebene<sup>5</sup> (Abb. 5.6(a),  $T = 300$  K) mit denen von Y, so fallen weitreichende Unterschiede auf. Bei Y (Abb. 5.5) schneidet Band 3 den Brillouin-zonenrand auf der ML-Linie, nahe bei L. Dies führt zu einem ausgedehnten Bereich der Y-Fermifläche mit (nahezu) parallel verlaufenden Flächensegmenten (s. auch Kap. 6.2). Solche Bereiche werden in der Literatur als *Nesting* bzw. *Webbing* der Fermifläche bezeichnet und mit speziellen Merkmalen der magnetischen Suszeptibilität  $\chi$  des Metalls in Verbindung gebracht. Sie ist maximal für ein hypothetisches von außen angelegtes Magnetfeld, dessen Feldstärke sinusförmig moduliert ist. Dabei entspricht die reziproke Periode des Magnetfelds dem Abstand  $\mathbf{q}$  (*Nestingvektor*) der parallelen Bereiche der Fermifläche im  $\mathbf{k}$ -Raum. Die Zusammenhänge zwischen einem Nesting der Fermifläche bei L, einem Maximum in der Suszeptibilität und magnetischer Ordnung werden in Kapitel 6.1 näher erläutert. So viel sei an dieser Stelle bereits vorweggenommen: Die Standardtheorie zur magnetischen Kopplung bei den schweren Lanthanidmetallen führt das Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Phase auf das Vorhandensein eines solchen Nestings zurück. Gd zeigt kein Nesting der Fermifläche, da, wie in Abbildung 5.6(a) zu sehen, Band 3 den Brillouin-zonenrand auf halber Strecke zwischen AL erreicht. Vor dem Hintergrund der Standardtheorie erklärt dies, wieso Gd keine antiferromagnetisch geordnete Phase zeigt.

Bei paramagnetischem Tb (Abb. 5.6(c),  $T = 240$  K) wie auch bei Dy (Abb. 5.6(e),  $T = 200$  K), schneidet Band 3 den Zonenrand auf der ML-Linie, in der Nähe von L. Die Fermifläche beider Metalle ist somit ähnlich zu der von Y. Sie zeigen ebenfalls ein Nesting der Fermifläche am L-Punkt. Dies wird hier erstmals direkt experimentell beobachtet. Zur Verdeutlichung des Nestings wurde in (e) die Fermikontur von Band 3 über die AL-Linie in die angrenzende Brillouinzone

---

<sup>5</sup>Photonenenergiebereiche: 85–105 eV bei Gd, 105–130 eV bei Tb und Dy





**Abbildung 5.6:** Fermiflächen von Gd, Tb und Dy in der  $\Gamma$ ALM-Ebene in paramagnetischer und ferromagnetischer Phase. Bei paramagnetischem Gd (a) erreicht Band 3 (rote Hilfslinie) den Brillouinzonrand auf halber Strecke zwischen A und L, bei Tb (c) und Dy (e) kreuzt Band 3 den Zonenrand nahe bei L auf der ML-Linie. Dieser Unterschied zwischen Gd einerseits sowie Tb und Dy andererseits, wird mit der Ausbildung einer helikal antiferromagnetisch geordneten Phase bei Tb und Dy in Verbindung gebracht (s. Text). In der ferromagnetischen Phase hingegen weisen die Fermiflächen von Gd (b), Tb (d) und Dy (f) eine ähnliche Gestalt auf.

lounzone fortgesetzt (periodisches Zonenschema). Der rote Doppelpfeil gibt den Verbindungsvektor der parallelen Bereiche der Fermifläche an; er entspricht dem Nestingvektor. Terbium bildet eine helikale Ordnung im Temperaturbereich zwischen der Néeltemperatur  $T_N = 230$  K und der Curietemperatur  $T_C = 220$  K aus, bei Dy beträgt  $T_N = 180$  K und  $T_C = 90$  K. Beide Metalle passen somit auch ins Bild der Standardtheorie. Die bei Dy (Abb. 5.6(e)) leicht erhöhte Photoemissionsintensität bei M ist auf Band 4 zurückzuführen, welches dort dicht unterhalb des Ferminiveaus verläuft.

Die unterschiedlichen Dispersionen der Bänder 3 bei Y, Gd, Tb und Dy können auf die geringfügigen Unterschiede bei ihren Gitterkonstanten zurückgeführt werden. In der kürzlich von Hughes *et al.* veröffentlichten theoretischen Studie [Hugh 07] wurden das innerhalb der schweren Lanthanide abnehmende  $c/a$ -Verhältnis, wie auch die gemäß der Lanthanidenkontraktion kleiner werdende Wigner-Seitz-Zelle als Ursachen für eine unterschiedliche Form der Fermiflächen in der Nähe des L-Punkts identifiziert. Eine ausführliche kombinierte experimentelle und theoretische Untersuchung, welchen Einfluss das  $c/a$ -Verhältnis auf die Form der Fermifläche hat findet sich in Referenz [Crow 04].

In der ferromagnetischen Phase hingegen sind die Fermiflächen der drei Metalle von ähnlicher Gestalt (Abb. 5.6(b),(d) und (f), gemessen bei  $T = 50$  K für Gd sowie  $T = 25$  K für Tb und Dy). Die Bänder sind in einen Majoritäts- und einen Minoritätsanteil aufgespalten und die daraus resultierenden Fermikonturen voneinander getrennt. Band  $3\uparrow$  schneidet bei allen drei Metallen den Zonenrand auf der AL- und Band  $3\downarrow$  auf der ML-Linie.

Bei Gd ist der Bereich der Fermifläche, der von Band  $3\uparrow$  geformt wird kleiner als bei Tb und Dy, d.h. er liegt näher an der  $\Gamma$ A-Linie. Dies ist eine Folge der bei Gd größeren Austauschspaltung, die das Energieniveau der Majoritätsbänder stärker absenkt. Lochartige Fermikonturen wandern beim Absenken ihrer Energie Lage in Richtung ihres Zentrums, im abgebildeten Fall also hin zur  $\Gamma$ A-Linie. Im Vergleich zu Tb und Dy fällt auf, dass bei Gd die Krümmung der  $3\uparrow$  Kontur leicht abweichend ist, insbesondere in der Umgebung der AL-Linie, die nahezu senkrecht geschnitten wird. Bei Tb und Dy verbleibt dort für Band  $3\uparrow$  auch bei tiefen Temperaturen die Tendenz einer Krümmung hin zur ML-Linie, die in der paramagnetischen Phase zu beobachten ist. Da der Kreuzungspunkt der  $3\uparrow$  Kontur nun auf halber Strecke AL liegt, ist das Nesting der paramagnetischen Phase verschwunden.

Band  $3\downarrow$  zeigt ebenfalls kein Nesting bei L. Es entfernt sich im Zuge des Ausbildens einer magnetischen Ordnung ebenfalls vom L-Punkt (in umgekehrter Richtung wie Band  $3\uparrow$ ). Sein Schnittpunkt mit dem Brillouinonenrand bewegt sich hin zu M. Hierbei ist der horizontal verlaufende Bereich der Fermifläche mit einer geringen Photoemissionsintensität zu beobachten, die nur geringfügig höher als die des Untergrunds ist. Dies kann auf Matrixelementeffekte zurückgeführt werden. Bei Dy ist dieser Bereich der  $3\downarrow$  Kontur in Abbildung 5.6(f) nicht zu erkennen; der ungefähre Verlauf lässt sich allerdings unzweifelhaft aus der Analogie zu Tb und Gd ableiten.

Das durch die Austauschspaltung hervorgerufene Aufreißen der Fermikonturen beim Herunterkühlen der Proben führt also zu einem Verschwinden des Nestings in der ferromagnetischen Phase. Deutlich zu sehen ist dies auch anhand der vollständigen Datensätze der para- und ferromagnetischen Fermiflächen für Tb und Dy, die in Kapitel 6 gezeigt werden (s. Abb. 6.13, 6.15 sowie 6.14, 6.17).

Bislang bin ich noch nicht auf die Rolle des Bandes 4 eingegangen, dessen Verlauf in Abbildung 5.6 nicht gezeigt ist. Seine  $\Delta_1$ -artige Fermikontur ist im gezeigten Photonenenergiebereich nicht zu beobachten, sondern dort, wo die  $4d \rightarrow 4f$  Resonanz Messungen zur Dispersion senkrecht verlaufender Konturen erschweren. Für ferromagnetisches Tb sind hierzu im folgenden Kapitel 5.2.3 Messungen gezeigt, die den gesamten diesem Experiment zugänglichen Photonenenergiebereich abdecken und Informationen zu Band 4 beinhalten.

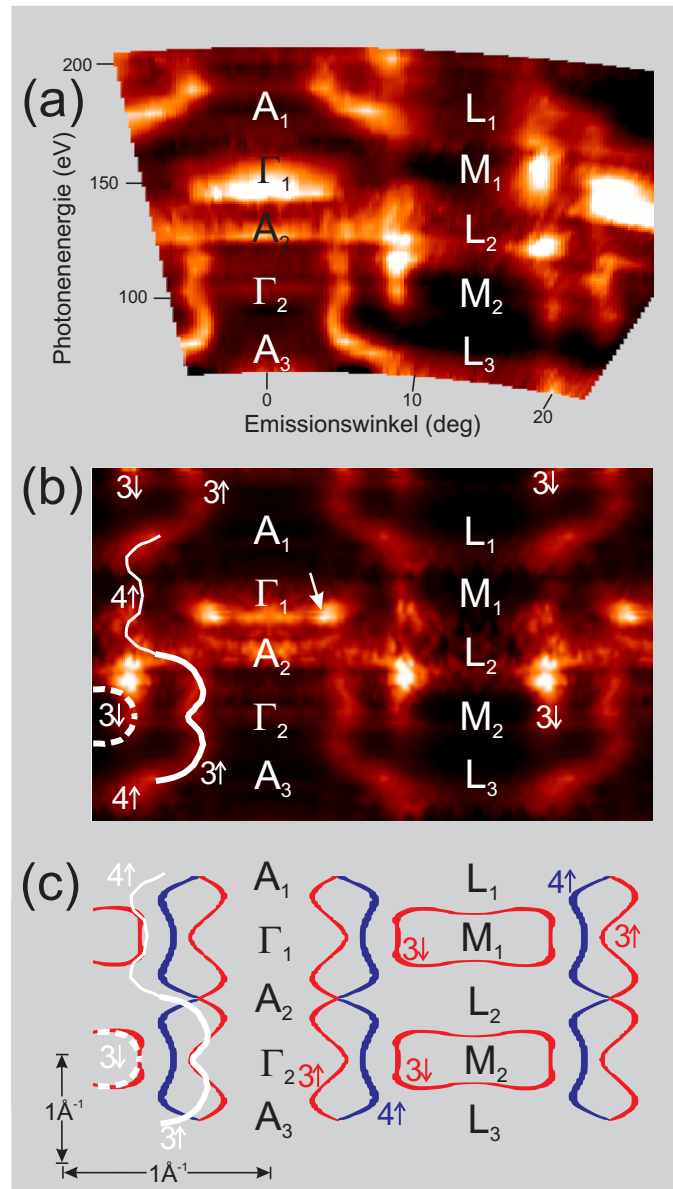
In der ALH-Ebene sind die Bänder 3 und 4 entartet, weshalb — wie bereits erwähnt — Photoemission in der Nähe von ALH diese Bänder nicht separat auflösen kann (Gleiches gilt auch für die Positronenannihilationspektroskopie, deren Ergebnisse zu Y und zu paramagnetischem Gd in Kap. 6 vorgestellt werden). Die Entartung bedingt, dass die Bänder 3 und 4 bei ALH aufeinander zu dispergieren und, sofern ein Nesting bei L vorliegt, beide zu diesem beitragen. Dabei zeigen sie leicht unterschiedliche Nestingvektoren (s. Abb. 6.8). Da also bei paramagnetischem Gd Band 3 kein Nesting bei L zeigt, kann auch Band 4 dort keines ausbilden. Bei Tb und Dy ist ein Nesting bei L in der paramagnetischen Phase vorhanden. Dazu tragen Bänder 3 und 4 bei.

In der ferromagnetischen Phase liegt das Minoritätsband  $4\downarrow$  bei Gd, Tb und Dy vollständig oberhalb der Fermienergie (s. auch Bandstrukturen in Kap. 4.2.2 und 4.3.1). Das Majoritätsband  $4\uparrow$  verläuft in der  $\Gamma$ MK-Ebene zwischen  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  und ist in der ALH-Ebene mit  $3\uparrow$  entartet, welches aus Abbildung 5.7 ersichtlich ist. Es schneidet den Brillouinzone-Rand somit ebenfalls entlang der AL-Linie und zeigt folglich kein Nesting.

### 5.2.3 Ferromagnetisches Terbium: Experiment und Theorie

Abschließend werden nun experimentelle und theoretische Fermikonturen für ferromagnetisches Tb verglichen. In Abbildung 5.7(a) sind Photoemissionsdaten für  $E = E_F$  gezeigt, die über einen ausgedehnten Bereich an Emissionswinkeln und Photonenenergien aufgenommen wurden. Um Intensitätsvariationen auszugleichen, wurden alle Messwerte auf die höchste Photoemissionsintensität bei der jeweiligen Photonenenergie normiert. Helle Farben entsprechen hohen Intensitäten. Trotz Normierung verbleiben sehr helle Bereiche, z.B. in der Region bei  $\Gamma_1M_1$  und  $A_2L_2$ . Die Ursache hierfür ist die Tb  $4d \rightarrow 4f$  Resonanz bei Photonenenergien um 150 eV, die auch den Wirkungsquerschnitt der elektronischen Valenzzustände verstärkt.

Um das Verhältnis von Signal zu Untergrund zu verbessern und um Effekte der resonanten Photoemission zu unterdrücken, habe ich Autokorrelationsoperationen implementiert, die die Symmetrien der hexagonalen Brillouinzone ausnutzen. Fol-



**Abbildung 5.7:** Fermikonturen von ferromagnetischem Tb ( $T = 25$  K) in der  $\Gamma$ ALM-Ebene (publiziert in Ref. [Dobr 07a]). (a) Gemessene Photoemissionsintensitäten in Abhängigkeit des Emissionswinkels und der Photonenenergie; helle Farben entsprechen einer hohen Intensität. Die hellen Stellen im Bereich bei  $\Gamma_1 M_1$  und  $A_2 L_2$  sind auf die Tb  $4d \rightarrow 4f$  Resonanz zurückzuführen. Die in (b) gezeigten Fermikonturen ergeben sich nach Anwendung der Autokorrelationsoperationen (s. Text). Fermikonturen der Bänder  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  ( $\Delta_2$ -artig) sowie  $4\uparrow$  ( $\Delta_1$ -artig) werden beobachtet; ihr Verlauf ist mit weißen Hilfslinien markiert. In (c) ist der theoretische Verlauf der Fermikonturen dargestellt; die weißen Linien auf der linken Seite der Abbildung geben den Verlauf der experimentellen Fermikonturen wieder. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ist für die Bänder  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  auf der  $\Gamma$ M-Linie bemerkenswert gut, in Richtung AL zeigen sich Abweichungen.

gende Symmetrien wurden dabei angewendet: (i) Spiegelung um die  $\Gamma$ A- und um die  $\Gamma$ M-Linie; (ii) Translation um den Abstand  $\Gamma\Gamma$  entlang  $\Gamma$ M und um den zweifachen  $\Gamma\Gamma$ -Abstand entlang  $\Gamma$ A (Dies berücksichtigt die  $\Delta_1$ - und  $\Delta_2$ -Selektivität der Photoemission). Wurde an einem Punkt  $\mathbf{k}_1$  der Brillouinzone die Intensität  $I_1$  gemessen und an einem korrespondierenden äquivalenten Punkt  $\mathbf{k}_2$  die Intensität  $I_2$ , so wurden sie an beiden Punkten durch den Wert  $I_{ac} = (I_1 I_2)^{1/2}$  ersetzt. Die so autokorrelierten Daten sind in Abbildung 5.7(b) dargestellt; dabei wurden zur Verbesserung der Darstellung die autokorrelierten Intensitäten  $I_{ac}$  in die Bereiche kopiert, die nicht von (a) abgedeckt sind.

Im oberen Teil von Abbildung 5.7(b), oberhalb von  $A_1L_1$  sind die Fermikonturen zu erkennen, die von den Bändern  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  geformt werden. An der Linie  $A_1L_1$  wird Band  $3\uparrow$  zu Band  $4\uparrow$  — da in Photoemissionsmessungen die Rückfaltung der Bänder am ALH-Zonenrand nicht beobachtet wird — und setzt sich fort in Richtung  $\Gamma_1M_1$ . Der Bereich oberhalb von  $\Gamma_1M_1$  stellt die Autokorrelation der Photoemissionsintensitäten des Photonenenergiebereichs 80–105 eV mit dem Bereich 160–200 eV dar (Translationssymmetrie mit zweifachem  $\Gamma\Gamma$ -Abstand entlang  $\Gamma$ A). Im Bereich der Resonanz, zwischen  $\Gamma_1M_1$  und  $A_2L_2$ , werden Fermikonturen beobachtet, die eine  $\Delta_2$ -artige Symmetrie besitzen. Besonders deutlich ausgeprägt sind diese in der Nähe von  $\Gamma_1$  (mit Pfeil markiert). Unterhalb von  $A_2L_2$  ( $\Delta_2$ -artige Symmetrie) sind die Bänder  $3\uparrow$  und  $3\downarrow$  erkennbar und unterhalb von  $\Gamma_2M_2$  wiederholen sich die Fermikonturen aus dem oberen Bereich des Bildes aufgrund der Autokorrelationsoperation in  $k_z$ -Richtung. Weiße Hilfslinien geben die Dispersion der experimentellen Fermikonturen wieder.

Abbildung 5.7(c) zeigt die entsprechenden theoretischen Fermikonturen, wobei die weißen Linien auf der linken Seite den experimentellen Verlauf aus (b) anzeigen. Entlang der  $\Gamma_2M_2$ -Linie in Abbildung 5.7(c) liegen Experiment und Theorie übereinander. Dies entspricht der in Abbildung 5.3 bereits beobachteten exzellenten Übereinstimmung der Fermikonturen in der  $\Gamma$ MK-Ebene. In Richtung  $A_2L_2$  verlaufen die theoretischen Konturen zu dicht an der  $\Gamma$ A-Linie, welches sich für Band  $4\uparrow$  oberhalb von  $A_2L_2$  fortsetzt. Alles in allem wird der Verlauf der Fermikonturen in der  $\Gamma$ ALM-Ebene von der Theorie gut wiedergegeben, eine ähnlich genaue Übereinstimmung wie in  $\Gamma$ MK wird jedoch nicht erreicht. Die Rechnungen von Ahuja *et al.* [Ahuj 94] erzielen eine leicht bessere Übereinstimmung auf der AL-Linie, allerdings bei deutlich schlechter Beschreibung der gemessenen Fermikonturen in der  $\Gamma$ MK-Ebene.

In diesem Kapitel wurden anhand von Schnitten mit besonderen Hochsymmetrieebenen experimentell die Formen der Fermiflächen von Y, Gd, Tb und Dy untersucht und miteinander verglichen. Es wurde diskutiert, wie genau moderne theoretische Berechnungen die experimentell bestimmten Merkmale wiedergeben und an welchen Stellen es noch Abweichungen gibt. In der Nähe des L-Punkts zeigten sich Unterschiede bei den paramagnetischen Fermiflächen von Gd einerseits sowie von Tb, Dy und Y andererseits. Letztere zeigen parallele Bereiche der Fermifläche, welche von der Nestinghypothese mit dem Ausbilden einer helikal antiferromagnetischen Phase bei Tb und Dy in Verbindung gebracht werden. Das

Nesting in Tb und Dy konnte hier erstmals direkt experimentell beobachtet werden. Das folgende Kapitel erläutert den physikalischen Zusammenhang zwischen einem Nesting der Fermifläche und helikaler Ordnung. Es werden experimentelle Datensätze der Fermiflächen gezeigt, die eine vollständige Brillouinzone umfassen und weitere Unterschiede zwischen den Metallen deutlich machen.