

# Kurzfassung

Aufgrund ihrer einzigartigen magnetischen Eigenschaften sind die Lanthanidmetalle seit einigen Jahrzehnten Gegenstand intensiver experimenteller und theoretischer Forschung. In den späten 1950ern wurde der Durchbruch für das Verständnis der magnetischen Kopplung der in hohem Maße lokalisierten  $4f$ -Momente erzielt, indem die RKKY-Theorie der indirekten magnetischen Kopplung auf die Lanthanidmetalle angewendet wurde. Die elektronischen Zustände am Fermi-niveau, d.h. die Fermifläche (FS), spielen dabei die entscheidende Rolle. Das Vorhandensein von parallelen Segmenten der FS (*Nesting*) wurde als Ursache der antiferromagnetischen Phasen identifiziert (die sog. Nestinghypothese), bei denen die magnetischen Momente eine Helix bilden. Zum größten Teil basieren unsere heutigen Kenntnisse der Bandstrukturen und FS der Lanthanide auf theoretischen Rechnungen, wobei nicht klar ist, wie genau diese Vorhersagen zutreffen. Die meisten experimentellen Untersuchungen beschränken sich auf die  $\Gamma$ A-Richtung der Brillouinzone (BZ) und liefern daher kein vollständiges Bild. Positronenannihilationsmessungen zeigen ein Nesting der FS bei Y und Y-Gd-Legierungen. Bis zur vorliegenden Arbeit stand jedoch der direkte experimentelle Nachweis von Nesting bei einem reinen Lanthanidmetall noch aus.

In dieser Dissertation berichte ich detailliert über die Bandstrukturen und FS von Gd, Tb, Dy sowie Y; letzteres dient als unmagnetische Referenz. Die Metalle wurden mittels winkelauflösender Photoemission am Strahlrohr 7.0.1 der Advanced Light Source in Berkeley (USA) untersucht. Als Proben wurden einkristalline Filme von 10–20 nm Dicke verwendet, die *in situ* auf ein W(110)-Substrat aufgedampft wurden. Mittels Variation der Emissionswinkel und der Photonenenergien wurden Daten aufgenommen, die einen weiten Bereich des Impulsraums abdecken und dabei mehrere BZ umspannen. Dies liefert Zugang zum besetzten Teil der Bandstrukturen von Y, Gd, Tb und Dy. Es werden Photoemissionsdaten für alle Hochsymmetrierichtungen, die parallel zur Probenoberfläche liegen, gezeigt sowie die Veränderungen untersucht, die auf der ferromagnetischen Ordnung bei tiefen Temperaturen beruhen. Weiterhin erfolgt ein Vergleich mit theoretischen Ergebnissen. Für alle vier Metalle werden Abbildungen der FS gezeigt, die eine vollständige BZ umfassen. Sie liefern erstmals den direkten experimentellen Nachweis für Nesting bei Tb und Dy und stützen damit die Nestinghypothese. Die Aufnahme solcher Datensätze erfordert nur wenige Stunden. Dies eröffnet die Möglichkeit temperaturabhängiger Messungen und somit die Untersuchung der Umstrukturierung der FS von Gd, Tb und Dy im Zuge der magnetischen Ordnung. Die vorliegende Arbeit stellt meines Wissens die bislang umfassendste experimentelle Studie der elektronischen Eigenschaften von Lanthanidmetallen dar.



# Abstract

Due to their fascinating and unique magnetic properties, lanthanide metals have been in the focus of intense experimental and theoretical research for several decades. A breakthrough in the understanding of the origin of the coupling of the highly localized magnetic  $4f$  moments was achieved in the late 1950s, by applying the RKKY theory of indirect magnetic coupling to lanthanide systems. The electronic states at the Fermi energy, i.e. the Fermi surface (FS), were identified as playing the key role. The existence of parallel sections of the FS—the so-called FS nesting—was linked to the development of antiferromagnetically ordered phases, with a helical arrangement of the spins (this link is commonly referred to as the nesting hypothesis). It is fair to say that most of our knowledge on the electronic structures of the lanthanides and the shapes of their FS is based on theoretical calculations, which is not satisfactory, as it is unclear how accurately the band structures are described within the framework of the theoretical models. Most experimental studies to date have been restricted to the  $\Gamma$ A line of the Brillouin zone (BZ) and provide no complete picture. Positron annihilation studies reveal a FS nesting for Y and Y-Gd alloys; however, for a pure lanthanide metal, nesting has, prior to my work, not been observed in a direct experiment.

In this thesis I report in detail on the electronic band structures and FS of Gd, Tb, Dy, and—as a non-magnetic reference—Y metal. These were investigated by means of angle-resolved photoemission at beamline 7.0.1 of the Advanced Light Source, LBNL, UC Berkeley, Cal., USA. Single-crystalline films of 10–20 nm thickness, grown *in situ* on a W(110) substrate, were used as samples. By varying emission angles and photon energies, I have obtained data that cover a wide region of momentum space, including several BZ. This provides full access to the occupied part of the electronic structures of Y, Gd, Tb, and Dy. I show photoemission data for all high-symmetry lines parallel to the sample surface. I investigate changes that come along with ferromagnetic ordering at low temperatures, and compare experimental with theoretical results. I present data for the FS of the four metals, covering a full BZ. Thus I give the first direct experimental evidence of the existence of nesting of the paramagnetic FS of Tb and Dy, and I provide strong support for the nesting hypothesis. The short time required for data acquisition—only a few hours per data set—opens the possibility to investigate the temperature-induced reconstruction of the Gd, Tb and Dy FS due to magnetic ordering. To my knowledge, this thesis represents the most comprehensive experimental study of the electronic properties of lanthanide metals to date.

