

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

Spinpolarisation bei der Beugung nieder-
energetischer Elektronen an einer Gold-(110)-
Oberfläche

Spin Polarization in Low-Energy Electron
Diffraction from the (110) Surface of Gold

Norbert Müller

IPP 9/23

Juli 1979

Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Sonder-
forschungsbereichs 128 "Elementare Anregungen an
Oberflächen" in Zusammenarbeit mit dem Institut für
Kristallographie und Mineralogie der Universität
München durchgeführt.

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

July 1979 (in German)

ABSTRACT

The effects of spin polarization in LEED from a gold (110) surface have been investigated. To determine the spin polarization in diffracted electron beams, a special diffraction apparatus was constructed. In a conventional diffraction apparatus the electron gun is fixed in space and diffracted beams are observed at various directions on a screen or in a Faraday cup. Inelastically scattered electrons are thereby mostly separated by means of a retarding field between spherical grids. In contrast to a conventional apparatus, the beam path is reversed here. The electron gun can be moved in front of the spherical grids and selected diffracted beams can be extracted from the apparatus through a probe hole in the screen. The spin polarization of these beams can then be measured by means of Mott scattering after being accelerated to about 120 keV.

Under some diffraction conditions the degree of polarization may be as large as 80 %. The results show that the polarization effects depend very strongly on the multiple scattering in the crystal. Some particularly pronounced structures in angle-dependent polarization curves can be ascribed to resonances with eigenstates of the electrons in the crystal lattice. Measurements equivalent by symmetry show that the results are very reliable.

The order-disorder transition of the gold (110) surface is used for comparing experiment and theory. Measurements in the high-temperature phase, which is characterized by the dis-

+) This report essentially is identical with the Ph.D. thesis (dissertation) "Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an einer Gold-(110)-Oberfläche" submitted to the University of München in December 1977.

appearance of the superstructure beams in the diffraction pattern, are compared with calculations made by R. Feder for an unreconstructed surface. The comparison yields reasonable agreement between theory and experiment. Deviations can be ascribed to peculiarities of the disordered, real surface.

The sensitivity of the spin polarization to structural changes is used to investigate the order-disorder transition of the gold (110) surface. For the decay of the superstructure, temperature-dependent polarization curves give a characteristic temperature $T = 700 \pm 20$ K similar to that found by D. Wolf in his analysis of reflex profiles. The behaviour of the spin polarization in the phase transition suggests the possibility of investigating structures of adsorbate layers.

The results of the study as a whole show that the physical properties of crystal surfaces can be determined with high sensitivity by means of spin polarization.

Juli 1979

ZUSAMMENFASSUNG

Effekte der Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an einer Gold-(110)-Oberfläche werden untersucht. Um die Spinpolarisation in gebeugten Elektronenstrahlen erfassen zu können, ist eine spezielle Beugungsanordnung aufgebaut worden: In üblichen Beugungsanordnungen steht die Elektronenkanone im Raum fest, gebeugte Strahlen werden in wechselnden Raumrichtungen auf einem Leuchtschirm oder in einem Meßkäfig beobachtet. Inelastisch gestreute Elektronen werden dabei meist zwischen Kugelnetzen durch ein Gegenfeld abgetrennt. Im Gegensatz zu den üblichen Anordnungen ist hier der Strahllauf umgekehrt: die Elektronenkanone kann vor den Kugelnetzen bewegt werden; einzelne gebeugte Strahlen lassen sich durch ein Loch im Leuchtschirm aus der Beugungsanordnung hinausleiten. Die Spinpolarisation dieser Strahlen kann dann nach einer Beschleunigung auf etwa 120 keV durch Mott-Streuung ausgemessen werden.

Für einige Beugungsbedingungen treten Polarisationsgrade bis zu 80 % auf. Die Ergebnisse zeigen, daß die Polarisations-effekte sehr stark von der Vielfachstreuung im Kristall abhängen. Einigen besonders auffallenden Strukturen in winkelabhängigen Polarisationskurven sind dabei Resonanzen mit Eigenzuständen der Elektronen im Kristallgitter zuzuordnen. Zueinander symmetrische Messungen weisen auf eine hohe Zuverlässigkeit der Ergebnisse hin.

Der Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold-(110)-Fläche wird für eine Gegenüberstellung von Experiment und Theorie ausgenutzt; Messungen an der Hochtemperaturphase, die durch

+) Diese Arbeit ist bis auf Änderungen in den Kapiteln 2.3, 4.3.3 und 5 identisch mit einer Dissertation gleichen Titels, die im Dezember 1977 bei der Universität München eingereicht worden ist.

ein Verschwinden der Überstrukturstrahlen im Beugungsbild gekennzeichnet ist, werden mit Rechnungen von R. Feder für eine nicht rekonstruierte Oberfläche verglichen. Beim Vergleich ergibt sich teilweise eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Abweichungen können durch Eigenheiten der fehlgeordneten, realen Fläche erklärt werden.

Die Empfindlichkeit der Spinpolarisation auf Strukturänderungen wird zur Untersuchung des Ordnungs-/Unordnungsübergangs der Gold-(110)-Oberfläche angewandt. Der Verlauf temperaturabhängiger Polarisationskurven gibt für den Zerfall der Überstruktur eine ähnliche charakteristische Temperatur $T = 700 \pm 20$ K, wie sie von D. Wolf bei der Analyse von Reflexprofilen gefunden worden ist. Aus dem Verhalten der Spinpolarisation bei dem Phasenübergang werden Möglichkeiten, Strukturen von Adsorbatschichten zu untersuchen, abgeleitet.

Die Ergebnisse der Arbeit zeigen insgesamt, daß über die Spinpolarisation physikalische Eigenschaften von Kristalloberflächen empfindlich erfaßt werden können.

INHALTSVERZEICHNIS

1.	EINFÜHRUNG	1
1.1	Historischer Rückblick	3
1.2	Formale Beschreibung der Spinpolarisation und der spinabhängigen Streuung	6
1.2.1	Spinfunktion und Definition der Spinpolarisation	7
1.2.2	Streuung an einem Zentralpotential	10
1.2.3	Spinpolarisation bei der Beugung	15
2.	AUFBAU DES EXPERIMENTES	20
2.1	Grundsätzliches	20
2.2	Beugungsanordnung und Strahlführung	23
2.2.1	Elektronenkanone	25
2.2.2	Kristallmanipulator	25
2.2.3	Netze-Leuchtschirm	27
2.3	Der Polarisationsdetektor (Mott-Detektor)	27
2.3.1	Streugeometrie und Kalibrierung	28
2.3.2	Besonderheiten des Mott-Detektors -Elektronik, Auswertung-	31
2.4	Der Kristall	32
2.4.1	Auswahlkriterien	32
2.4.2	Struktur der Gold-(110)-Oberfläche	33
2.4.3	Kristallpräparation	38
3.	DURCHFÜHRUNG DER MESSUNGEN	40
3.1	Nomenklatur	40
3.2	Polarisationsmessung	41
3.3	Intensitätsbestimmung	43

3.4	Parameter der Messungen	43
3.4.1	Meßprinzip	43
3.4.2	Winkelangaben	45
3.4.3	Energie	45
3.4.4	Kristalltemperatur und Kristall- heizung	46
4.	ERGEBNISSE UND DISKUSSION	47
4.1	Verhalten der Meßgröße "Spin- polarisation"	47
4.1.1	Energie- und Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation -Dynamische Effekte-	47
4.1.2	Korrelation mit Gitterrichtungen - Resonanzen -	57
4.1.3	Reproduzierbarkeit der Effekte bei Symmetrieoperation -Reziprozität-	63
4.2	Vergleich Rechnung - Experiment	67
4.2.1	Theoretische Behandlung: Prinzip	67
4.2.2	Parameter der Rechnung	70
4.2.3	Bestimmung des realen inneren Potentials V_{or}	71
4.2.4	Winkelabhängige Rechnungen und Messungen	78
4.3	Untersuchungen zum Ordnungs-/Unord- nungsübergang der Gold-(110)-Fläche	86
4.3.1	Experimenteller Befund	86
4.3.2	Phänomenologische Beschreibung der Polarisationsänderungen	90
4.3.3	Diskussion der temperaturabhängigen Messungen	100
5.	SCHLUSSFOLGERUNGEN UND AUSBLICK	105
6.	DANKSAGUNG	109
7.	LITERATURVERZEICHNIS	111

1. EINFÜHRUNG

Bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen - englisch: Low Energy Electron Diffraction (LEED) - werden in der Regel Intensitäten elastisch gebeugter Strahlen in Abhängigkeit von der Energie und von der Orientierung des einfallenden Strahls zum Kristall gemessen. Damit werden neben dem Teilchenstrom nur zwei Observable, die Energie und der Impuls der Elektronen, erfaßt. Elektronen haben jedoch eine weitere beobachtbare Eigenschaft, den Spin. Treten bei der Beugung spinabhängige Wechselwirkungen auf, sollte den Elektronen eines gebeugten Strahls eine Richtung zugeordnet sein, für die eine der beiden möglichen Spineinstellungen parallel bzw. antiparallel bevorzugt ist. Ein Ensemble von Elektronen, für das eine derartige Spinvorzugsrichtung existiert, nennt man spinpolarisiert.

In dem hier beschriebenen Experiment werden Effekte der Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an einer Gold-(110)-Oberfläche untersucht.

Die Zielsetzung ist dabei,

- zu zeigen, daß signifikante, von der Struktur der Kristalloberfläche abhängige Effekte der Spinpolarisation existieren und zuverlässig erfaßbar sind,
- vorzuführen, daß ein Vergleich von Polarisationsmessungen mit Ergebnissen einer spinabhängigen Theorie der Beugung sinnvoll möglich ist und gegenüber reinen Intensitätsmessungen einen Gewinn an Aussagen bringt,
- nachzuweisen, daß die Beobachtung der spinabhängigen Effekte bei der Beugung eine nützliche und empfindliche neue Informationsquelle für die Untersuchung thermodynamischer Eigenschaften der Kristalloberflächen bietet.

Um diese Ziele erreichen zu können, ist das Experiment so aufgebaut, daß nicht nur die Energie der Elektronen, sondern auch die Orientierung des Kristalls zum einfallenden und auslaufenden Strahl in einem weiten Bereich variiert werden kann.

Zwei kurze Veröffentlichungen sind bislang erschienen, in denen über den Nachweis spinabhängiger Effekte berichtet wird: O'Neill et al. (1975) und Calvert et al. (1977) beschreiben jeweils erste Ergebnisse von Polarisationsmessungen an einem Elektronenstrahl, der an einer Wolfram-(001)-Fläche spiegelnd reflektiert worden ist⁺). Nur O'Neill et al. können dabei den Einfallswinkel in einem kleinen Bereich von 11° - 20° ändern und den Kristall azimuthal ausrichten, Calvert et al. arbeiten bei festem Strahllauf und (nicht justierbarer) fester Orientierung des Kristalls zu der Streuebene. In beiden Experimenten treten dazu Schwierigkeiten mit Adsorption von Restgas an der Kristalloberfläche auf; die oben abgesteckten Ziele sind daher in ihnen noch nicht erreicht.

Die historische Entwicklung des Arbeitsgebietes enthält interessante Aspekte, sie sei im nächsten Abschnitt (1.1) dargestellt, bevor in 1.2 als Abschluß der Einleitung eine einfache formale Beschreibung der Spinpolarisation folgt.

⁺) Zusätzlich sind in Konferenzbeiträgen Ergebnisse dargestellt worden, die in den oben genannten Veröffentlichungen nicht enthalten sind: Kalisvaart et al. (1977) haben über eine Fortsetzung des Experiments von O'Neill et al. berichtet und Teile der hier wiedergegebenen Arbeit sind vorgetragen worden (Müller und Wolf 1976, 1977, Müller 1977, Müller et al. 1977).

1.1 Historischer Rückblick

Die wesentlichen Erkenntnisse zur Beschreibung der Eigenschaften der Elektronen wurden in den Jahren 1924/1925 gewonnen: de Broglie (1924) postulierte ihre Welleneigenschaft, Uhlenbeck und Goudsmit (1925) ordneten ihnen einen inneren Drehimpuls, den Spin, zu. Die Wellennatur der Elektronen konnte bereits 1927 experimentell nachgewiesen werden: Davisson und Germer (1927) fanden Beugungseffekte bei der Streuung niederenergetischer Elektronen an einer Nickeloberfläche, Thomson (1928) beobachtete Beugungsringe beim Durchstrahlen einer polykristallinen Metallfolie.

Der nächste experimentelle Schritt war der Versuch, eine Polarisation der Elektronenwellen zu erzeugen und zu analysieren, d.h. einen Elektronenstrahl teilweise in einem Spinzustand zu präparieren und anschließend eine Spinvorzugsrichtung nachzuweisen. Theoretische Grundlagen für ein derartiges Experiment waren zunächst noch nicht entwickelt. Bekannt waren Polarisationserscheinungen bei Photonen; Analogieschlüsse aus dem Nörrenberg-Spiegelexperiment mit Licht und aus dem Barkla-Experiment mit Röntgenstrahlen leiteten erste Untersuchungen.

Davisson und Germer führten bereits 1928 ein zweifaches Beugungsexperiment an Nickelkristallen durch. Das Prinzip ihres Experiments veranschaulichten sie in dem hier als Bild 1 wiedergegebenen Schema: Durch Glühemission erzeugten sie einen unpolarisierten Elektronenstrahl, bei einer Energie von 20 - 120 eV streuten sie ihn an dem ersten Kristall, dem Polarisator. Den spiegelnd reflektierten Strahl streuten sie erneut an dem zweiten Kristall, dem Analysator. Den wiederum spiegelnd reflektierten Strahl fingen sie in einem Faraday-Becher auf. Den Analysator-Kristall und den Faradaybecher drehten sie um eine Achse, die mit dem Strahllauf zwischen den beiden Kristallen zusammenfiel. In Analogie zu den Experimenten mit Photonen erwarteten sie für die

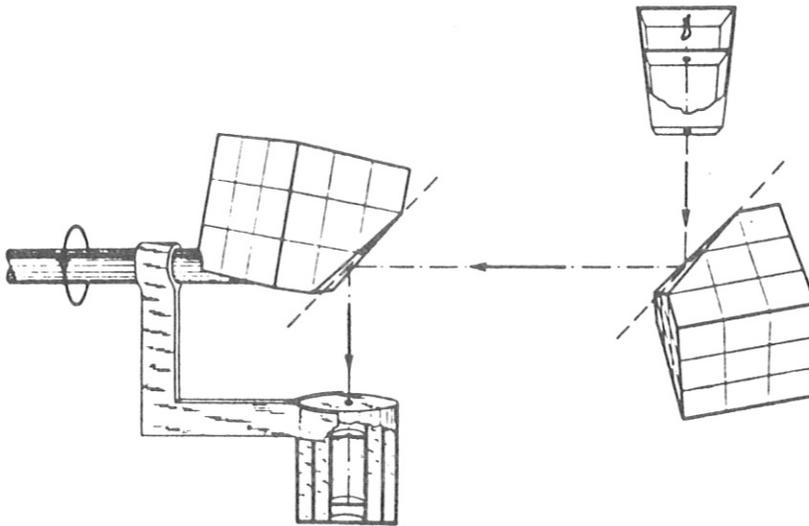


Bild 1: Prinzip des Experimentes von Davisson und Germer zum Nachweis der Spinpolarisation durch Beugung (nach Davisson und Germer 1929)

Intensität I nach der zweiten Streuung folgende Abhängigkeit von der Drehung φ :

$$I = I_0 (1 + p \cos 2\varphi). \quad (1)$$

p sollte dabei ein den Polarisierungseffekt kennzeichnender "Amplitudenkoeffizient" sein. Die Auswertung ergab $|p| < 0,005$. Dieses negative Resultat hemmte zusammen mit anderen nicht erfolgreichen Experimenten für viele Jahre die Entwicklung der Technik und der Theorie der spinabhängigen Streuung an Kristallen. Zu einem vorläufigen Abschluß kam das Gebiet mit einer Arbeit von Weisskopf (1934); er zeigte, daß bei der Bragg-Reflexion von Elektronen an Netzebenen eines Kristalls keine meßbaren Polarisierungseffekte auftreten können. Er führte dabei für das periodische Kristallpotential eine Fourierentwicklung durch und brach diese zu hohen Gliedern hin ab. Damit vernachlässigte er die Potentialbereiche mit hohem Gradienten und erhielt dadurch für die Auswirkungen der Spin-Bahn-Kopplung eine zu

niedrige Schranke. Diesen Fehler vermied Mott (1932) in seiner zweiten Arbeit zur spinabhängigen Streuung von Elektronen am Coulomb-Potential; er fand signifikante Polarisationseffekte. Shull, Chase und Myers (1942) bestätigten erstmals eindeutig die Rechnung von Mott; sie führten an Goldfolien mit einem 400 keV-Elektronenstrahl ein Doppelstreuexperiment durch. Untersuchungen zur Spinpolarisation bei der Elektron-Atomstreuung nahmen dann ab etwa 1956, ausgelöst durch Experimente zur Paritätsverletzung beim β -Zerfall, einen raschen Aufschwung, Ende der sechziger Jahre war das Gebiet experimentell gut erforscht und theoretisch beherrscht (siehe hierzu zusammenfassende Arbeiten von Kessler 1967, 1976, und von Eckstein 1970). In dieser Situation wurde 1964 von Siegmann an das Beugungsexperiment von Davisson und Germer erinnert - es begann gerade der große Aufschwung der Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen. Maison (1966) prüfte daraufhin die Vorstellungen zum Problem der Spinpolarisation bei der Beugung, fand den oben erwähnten Irrtum von Weisskopf und schlug als erste Stufe eines Experiments die Streuung niederenergetischer Elektronen an polykristallinen Festkörperoberflächen vor. Kurz darauf konnten Loth und Eckstein (1966) entsprechende Experimente erfolgreich durchführen (siehe auch Eckstein 1967, Loth 1967).

Die Theorie zur spinabhängigen Beugung niederenergetischer Elektronen wurde ab etwa 1970 von Jennings (1970,1971a) und Feder (1971,1972) in Analogie zur nichtrelativistischen Theorie der Beugung entwickelt. Die Streuung an den Ionenrümpfen behandelten sie dabei mit der auf Mott zurückgehenden, in der Elektron-Atomstreuung bewährten relativistischen Verallgemeinerung der Partialwellenmethode.

Über ein erstes erfolgreiches Beugungsexperiment berichteten O'Neill et al. 1975. Dieses Jahr brachte jedoch eine Überraschung. Kuyatt (1975) bemerkte, daß Davisson und

Germer 1928 der Analogie zu Experimenten mit Photonen zu weit gefolgt waren; hätten sie nach der richtigen Winkelabhängigkeit der Intensität

$$I = I_0 (1 + p \cos \varphi) \quad (2)$$

gesucht, hätten sie eine Spinpolarisation von 30 % angeben können. Feder (1977a) zeigte dann allerdings, daß dieser Meßeffect auch durch eine Fehljustierung der Drehachse des Analysators von etwa 1° gegeben sein könnte.

Der historische Abriß weist auf einen Teil der Schwierigkeiten und Irrtümer hin, die über lange Zeit Experimente mit spinpolarisierten Elektronen behindert haben. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, daß mit vertretbarem Aufwand aus Polarisationseffekten bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Einkristallobereflächen zuverlässige und aussagekräftige Informationen zu gewinnen sind, die über die aus Intensitätsanalysen erhältlichen hinausgehen.

1.2 Formale Beschreibung der Spinpolarisation und der spinabhängigen Streuung

In dieser Arbeit werden Spineffekte bei der Streuung niederenergetischer Elektronen experimentell untersucht. Die Spinzustände der einlaufenden und ausfallenden Elektronen sind zu beschreiben. Dafür genügt die nichtrelativistische Näherung, wie sie im Rahmen der Pauli-Gleichung gegeben ist, obwohl die spinabhängige Wechselwirkung bei der Streuung selbst nur im vollen Formalismus der Dirac-Gleichung exakt behandelt werden kann (Meister und Weiss 1968).

1.2.1 Spinfunktionen und Definition der Spinpolarisation

Die Elektronenzustände der Pauli-Gleichung sind zwei-komponentige Spinfunktionen, in denen der vom Ortsvektor \underline{r} abhängige Anteil separiert werden kann:

$$\psi(\underline{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\underline{r}) \\ \varphi_2(\underline{r}) \end{pmatrix} = \varphi(\underline{r}) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \varphi(\underline{r}) \cdot \chi \quad (3)$$

Für χ gilt dabei

$$\langle \chi | \chi \rangle = a_1^* \cdot a_1 + a_2^* \cdot a_2 = 1 \quad (4)$$

Die so definierten ψ beschreiben reine Spinzustände. Der Spinoperator \underline{s} wird aus den Pauli-Matrizen gebildet:

$$\underline{s} = \frac{1}{2} \hbar \underline{\sigma} = \frac{1}{2} \hbar (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (5)$$

mit $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Für die Untersuchungen zur Spinpolarisation interessiert im wesentlichen die Richtung des Spins. Daher wird im folgenden stets nur der Polarisations-(Vektor-)Operator $\underline{\sigma}$ benutzt.

Da die Komponenten von $\underline{\sigma}$ nicht miteinander vertauschbar sind, kann an einem Elektron die Spinorientierung stets nur bezogen auf eine Richtung gemessen werden. Die auf die feste Richtung \hat{n} bezogene Komponente von $\underline{\sigma}$ ist $\underline{\sigma} \cdot \hat{n}$. Zu $\underline{\sigma} \cdot \hat{n}$ existieren genau die zwei Eigenwerte +1 und -1; sie entsprechen den Einstellungen parallel (\uparrow) und antiparallel (\downarrow) der mittleren Spinrichtung zu \hat{n} . Zeigt \hat{n} in z-Richtung, - die Richtung wird durch die Wahl der Spinmatrizen festgelegt - sind die zugeordneten Spinfunktionen die Eigenfunktionen zu σ_z

$$\chi^\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \chi^\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (6)$$

$\chi^{\uparrow}, \chi^{\downarrow}$ bilden eine orthogonale Basis des Raums der Spin-
funktionen.

Für einen durch ψ dargestellten Elektronenzustand existiert genau eine Richtung \hat{p} , $|\hat{p}| = 1$, für die ψ ein Eigenzustand von $\underline{\sigma} \cdot \hat{p}$ mit dem Eigenwert +1 ist. \hat{p} gibt die Polarisationsrichtung des Zustands ψ . \hat{p} ist dabei als der Erwartungswert des Operators $\underline{\sigma}$ gegeben:

$$\hat{p} = \frac{\langle \psi | \underline{\sigma} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (7)$$

Gemessen werden kann \hat{p} nur über ein Ensemble von Elektronen im gleichen Zustand ψ ; an Teilen des Ensembles sind nacheinander die drei Komponenten p_x, p_y, p_z zu bestimmen. Das Ensemble selbst wird als total polarisiert bezeichnet; sein Polarisationsvektor ist gegeben durch $\underline{p} = \hat{p}$.

Ein Strahl von Elektronen ist in der Regel eine inkohärente Mischung von Elektronen in Zuständen ψ_i . Der Polarisationsvektor \underline{p} der Mischung ist als statistisches Mittel definiert:

$$\underline{p} = \frac{\sum_i \langle \psi_i | \underline{\sigma} | \psi_i \rangle}{\sum_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle} \quad (8)$$

$|\underline{p}|$ ist der Polarisationsgrad, $\hat{p} = \underline{p}/|\underline{p}|$ die Spinvorzugsrichtung des Strahls ^{+) . \hat{n} sei eine beliebige Referenzrichtung; die ψ_i seien in Eigenfunktionen $\psi_i^{\uparrow\downarrow}$ zu}

^{+) In der hier gegebenen Darstellung wird zugunsten einer besseren Übersicht auf Dichtematrizen zur Beschreibung der inkohärenten Mischung verzichtet. Der Dichtematrixformalismus wird in mehreren Übersichtsartikeln ausführlich behandelt (siehe z.B. Farago 1971 oder Kessler 1976).}

$\underline{S} \cdot \hat{n}$ zerlegt. Für die Komponente P_n von \underline{P} in Richtung \hat{n} folgt

$$\begin{aligned}
 P_n = \underline{P} \cdot \hat{n} &= \frac{\sum_{\lambda} (\langle \psi_{\lambda}^{\uparrow} | \underline{S} \cdot \hat{n} | \psi_{\lambda}^{\uparrow} \rangle + \langle \psi_{\lambda}^{\downarrow} | \underline{S} \cdot \hat{n} | \psi_{\lambda}^{\downarrow} \rangle)}{\sum_{\lambda} (\langle \psi_{\lambda}^{\uparrow} | \psi_{\lambda}^{\uparrow} \rangle + \langle \psi_{\lambda}^{\downarrow} | \psi_{\lambda}^{\downarrow} \rangle)} \\
 &= \frac{\sum_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\uparrow} | \psi_{\lambda}^{\uparrow} \rangle - \sum_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\downarrow} | \psi_{\lambda}^{\downarrow} \rangle}{\sum_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\uparrow} | \psi_{\lambda}^{\uparrow} \rangle + \sum_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\downarrow} | \psi_{\lambda}^{\downarrow} \rangle} \quad (9)
 \end{aligned}$$

Mit den Teilintensitäten (Dichten) $I^{\uparrow\downarrow} = \sum_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\uparrow\downarrow} | \psi_{\lambda}^{\uparrow\downarrow} \rangle$ ergibt sich

$$P_n = \frac{I^{\uparrow} - I^{\downarrow}}{I^{\uparrow} + I^{\downarrow}} \quad (10)$$

P_n ist also die Differenz der relativen Dichten $I^{\uparrow} / (I^{\uparrow} + I^{\downarrow})$ und $I^{\downarrow} / (I^{\uparrow} + I^{\downarrow})$ der Elektronen mit dem Erwartungswert des Spins "parallel" bzw. "antiparallel" zu \hat{n} . P_n wird als die auf \hat{n} bezogene Polarisation des Strahls bezeichnet; es ist $-1 < P_n < +1$.

Entsprechend (8) bzw. (10) kann ein Strahl mit dem Polarisationsvektor $\underline{P} = P \cdot \hat{p}$ als inkohärente Mischung zweier total polarisierter Teilstrahlen mit den Polarisationsvektoren $\underline{P} = \hat{p}$ und $\underline{P} = -\hat{p}$ dargestellt werden; für das Verhältnis der Teilstrahlintensitäten $I^{\uparrow}, I^{\downarrow}$ ist zu fordern

$$\frac{I^{\uparrow}}{I^{\downarrow}} = \frac{1 + P}{1 - P} \quad (11)$$

Zur Darstellung eines unpolarisierten Strahls kann \hat{p} ein beliebig gewählter Einheitsvektor sein. Für die Intensitäten gilt dann $I^{\uparrow} = I^{\downarrow}$.

1.2.2 Streuung an einem Zentralpotential

Bei der Streuung von Elektronen an einem elektrostatischen Zentralpotential $V(r)$ "sehen" die Elektronen in ihrem Ruhesystem in dem elektrischen Feld $\underline{E} = -\frac{r}{r} \frac{dV}{dr}$ ein Magnetfeld $\frac{1}{mc} \cdot [\underline{E} \times \underline{p}]$. Mit ihm tritt das dem Spin zugeordnete magnetische Moment $\mu = e\hbar/2mc$ der Elektronen in Wechselwirkung. \underline{p} ist dabei der Impuls der Elektronen, m ihre Masse, c die Lichtgeschwindigkeit und e die Elementarladung. Für den zugeordneten Spin-Bahn-Kopplungsoperator folgt

$$H_{SB} = \frac{e\hbar}{4 m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \underline{\sigma} \cdot [\underline{r} \times \underline{p}] \quad (12)$$

(siehe dazu Kessler 1967 und 1976 oder Eckstein 1970, Faktor 1/2 von Thomaspräzession).

Entsprechend der Singularität des elektrostatischen Zentralpotentials für $r \rightarrow 0$ wird die Wechselwirkung für kleine r besonders groß (vergleiche 1.1).

Die Quantisierungsrichtung \hat{p} ist bei dieser Wechselwirkung die Normale \hat{n}_s zur Streuebene. Für zwei Basisfunktionen $\chi^\uparrow, \chi^\downarrow$ mit \hat{p} als Referenzrichtung folgt

$$H_{SB} \chi^\uparrow = -H_{SB} \chi^\downarrow \quad (13)$$

Da die spinabhängige Wechselwirkung nach (13) für χ^\uparrow und χ^\downarrow unterschiedlich ist, wird im allgemeinen für Spinzustände, die eine (kohärente) Linearkombination von χ^\uparrow und χ^\downarrow sind, der Polarisationsvektor \underline{p} bei der Streuung gedreht.

Eine interessantere Folge der Antisymmetrie in (13) zeigt sich bei der Streuung eines unpolarisierten Elektronenstrahls; er kann polarisiert werden:

W^\uparrow und W^\downarrow seien die differentiellen Wirkungsquerschnitte für die Streuung von Elektronen in den Spinzuständen χ^\uparrow , χ^\downarrow . Mit (13) ergibt sich

$$\begin{aligned} W^\uparrow &= W + W_{SB} = W (1+P) \\ W^\downarrow &= W - W_{SB} = W (1-P) \end{aligned} \quad (14)$$

wobei $W = 1/2 (W^\uparrow + W^\downarrow)$ der spinunabhängige und $W_{SB} = W \cdot P$ der durch H_{SB} bestimmte spinabhängige Anteil der Wirkungsquerschnitte ist.

Ein unpolarisierter Strahl der Intensität I_0 sei nach (11) in zwei entgegengesetzt polarisierte Teilstrahlen der Intensitäten $I_0^\uparrow = I_0^\downarrow = I_0/2$ zerlegt. Er werde entsprechend (14) gestreut. Für die Intensitäten I_1^\uparrow , I_1^\downarrow der Teilstrahlen nach dieser (ersten) Streuung ergibt sich

$$I_1^{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{2} I_0 (W \pm W_{SB}) = \frac{1}{2} I_0 W (1 \pm P) \quad (15)$$

Die Polarisation P_1 der Mischung ist

$$P_1 = \frac{I_1^\uparrow - I_1^\downarrow}{I_1^\uparrow + I_1^\downarrow} = \frac{W_{SB}}{W} = P \quad (16)$$

Der Strahl wird also $-P \neq 0$ vorausgesetzt - polarisiert. Nach (14), (16) ist P_1 bei gleichbleibender Spinwechselwirkung H_{SB} dann maximal, wenn W minimal ist. Werden Streuparameter variiert, kann P korreliert mit dem Minimum von W einen Nulldurchgang zeigen (siehe Bild 2).

Folgt der obigen Streuung eine zweite Streuung mit derselben Streuebene ($\hat{n}_{S1} = \hat{n}_{S2}$), dem Wirkungsquerschnitt W_2 und

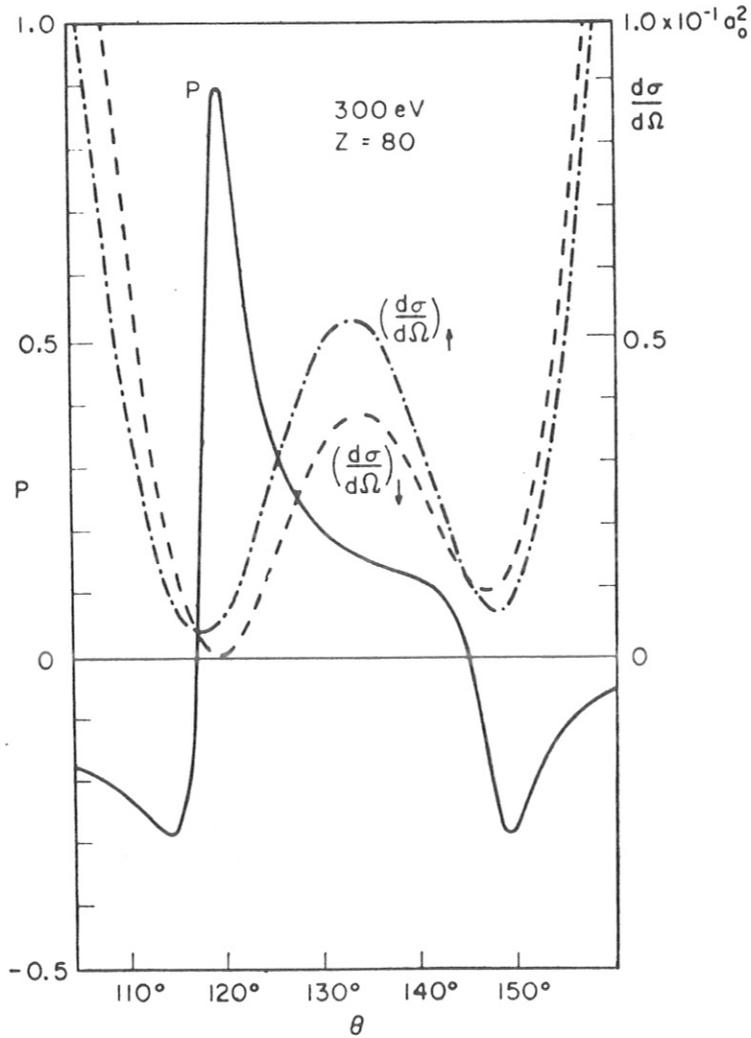


Bild 2: quantitatives Beispiel für die spinabhängige Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen: Zusammenhang zwischen den differentiellen Wirkungsquerschnitten $W^\uparrow = (d\sigma/d\Omega)^\uparrow$; $W^\downarrow = (d\sigma/d\Omega)^\downarrow$ für Elektronen mit Spinvorzugsrichtung parallel (\uparrow) bzw. antiparallel (\downarrow) zur Normalen der Streuebene und der Spinpolarisation P . $a_0 = 0.5292 \text{ \AA}$ ist der Wasserstoffradius. (Nach Daten von Holzwarth und Meister (1964) aus einem Übersichtsartikel von Kessler (1967)).

dem Polarisierungseffekt D (anstatt P), gilt für die Teilintensitäten mit $W_1 = W$

$$\begin{aligned}
 I_2^{\uparrow\downarrow} &= I_1^{\uparrow\downarrow} \cdot W_2 (1 \pm D) \\
 &= \frac{1}{2} I_0 W_1 W_2 (1 \pm P) (1 \pm D), \quad (17)
 \end{aligned}$$

ELEKTRONENQUELLE

(UNPOLARISIERT)

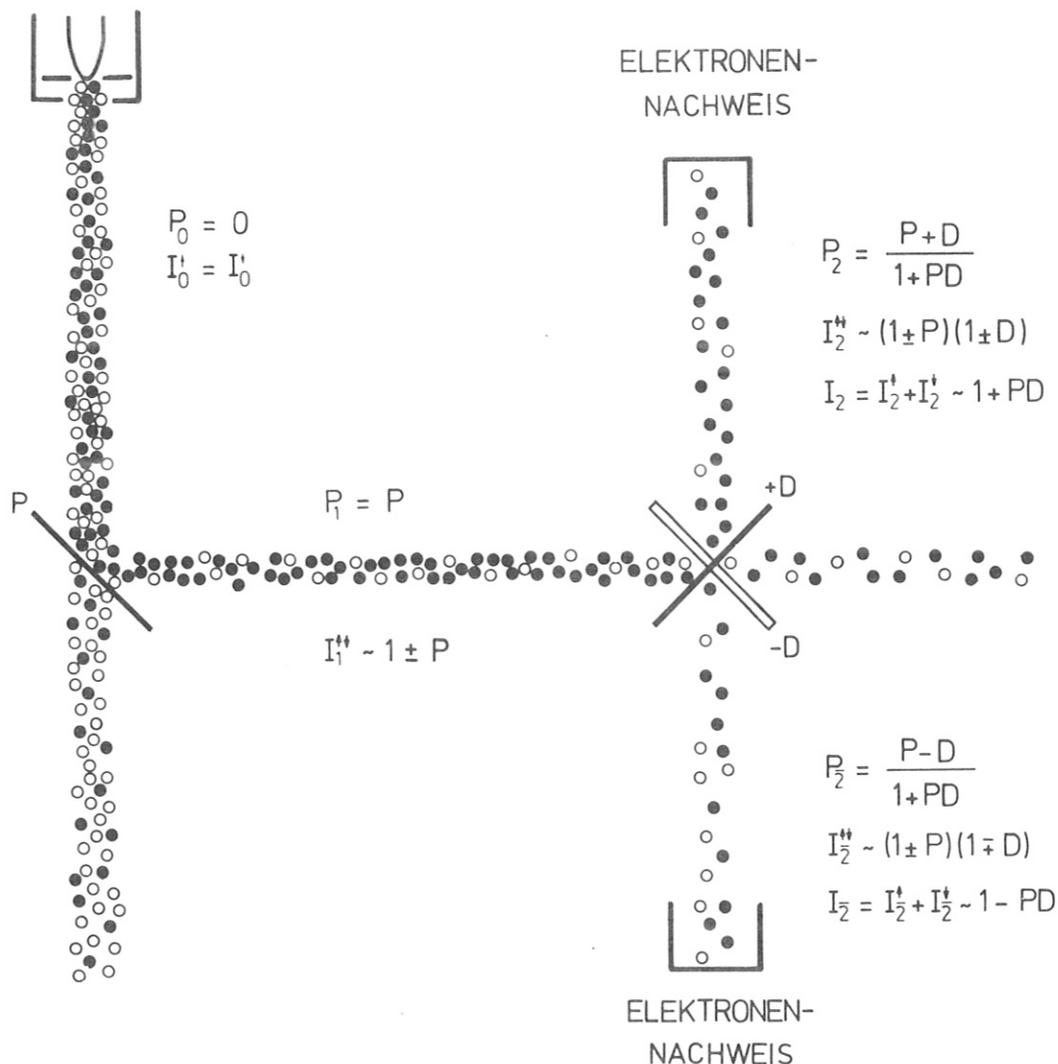


Bild 3: Schema eines Doppelstreuexperimentes. Gefüllte Kreise veranschaulichen Elektronen mit (\uparrow)-Spin, offene Kreise Elektronen mit (\downarrow)-Spin. Quantisierungsrichtung ist die Normale zur Zeichenebene. Aus der Asymmetrie der Intensitäten I_2 und I_2 nach der zweiten Streuung folgt entsprechend (21) die Polarisation P . Es sind die Werte $W_1 = W_2 = 0,4$, $P = 0,5$, $D = 0,3$ angenommen. (W_1 und W_2 liegen in Streuexperimenten normalerweise bei $\sim 10^{-4}$, $P = 0,5$ und $D = 0,3$ sind dagegen typische Werte).

Für die Polarisation ergibt sich

$$P_2 = \frac{P + D}{1 + PD} \quad (18)$$

Polarisationseffekte können sich also bei Vielfachstreuung verstärken. Für die Gesamtintensität folgt

$$I_2 = I_2^\uparrow + I_2^\downarrow = I_0 W_1 W_2 (1 + PD) \quad (19)$$

Wird bei der zweiten Streuung (oder bei der ersten Streuung) die Quantisierungsrichtung gespiegelt, gilt

$$I_{\bar{2}} = I_0 W_1 W_2 (1 - PD) \quad (20)$$

Die aus I_2 und $I_{\bar{2}}$ gebildete Intensitätsasymmetrie ist dann

$$A := \frac{I_2 - I_{\bar{2}}}{I_2 + I_{\bar{2}}} \quad (21)$$

$$A = P \cdot D$$

Ist D bekannt (oder ist $P = D$), ist damit P bestimmt; der bei der ersten Streuung polarisierte Strahl ist in der zweiten Streustufe analysiert worden (siehe dazu Bild 3). Wird der zweiten Streustufe, dem Detektor, ein Detektorvektor $\underline{D} = D \cdot \hat{n}_{s2}$ zugeordnet, können (19) und (20) zusammengefaßt (und erweitert) werden zu

$$I_2(\varphi) \propto 1 + \underline{P} \cdot \underline{D}, \quad (22)$$

wobei $\varphi = \angle(\underline{P}, \underline{D})$ und $\underline{P} = P \cdot \hat{n}_{s1}$

Das hier beschriebene Doppelstreuprinzip wird sowohl im ersten Experiment zur Spinpolarisation gebeugter Elektronen von Davisson und Germer (1928, 1929), als auch in dem in die-

ser Arbeit dargestellten Experiment angewandt. Gleichung (22) entspricht der Gleichung (2) im historischen Abriß (Abschnitt 1.1).

1.2.3 Spinpolarisation bei der Beugung

In der theoretischen Beschreibung der Beugung langsamer Elektronen an Kristalloberflächen werden die einfallenden und auslaufenden Elektronen als ebene Wellen ψ_0, ψ mit den Wellenvektoren $\underline{k}_0, \underline{k}$ dargestellt ($\hbar \cdot \underline{k} = \underline{p}, \underline{p}$ der Impuls). Unter Berücksichtigung des Spins durch normierte Spinfunktionen χ_0, χ kann für den Streuprozess formal geschrieben werden:

$$\psi_0 \longrightarrow \psi \quad (23a)$$

$$\psi_0 = e^{i\underline{k}_0 \underline{r}} \chi_0 \quad (23b)$$

$$\psi = A(\underline{k}_0, \underline{k}, \hat{p}_0) e^{i\underline{k} \underline{r}} \chi \quad (23c)$$

A ist die Amplitude der gebeugten Welle. Sie hängt außer von $\underline{k}_0, \underline{k}$ und dem Gitter auch von der Polarisationsrichtung $\hat{p}_0 = \langle \chi_0 | \underline{\sigma} | \chi_0 \rangle$ der einfallenden Welle ab. Sie enthält dabei die volle Vielfachstreuung im Gitter (den Strukturfaktor) und die Interferenzfunktion.

Im allgemeinen wird die Polarisationsrichtung bei der Streuung gedreht, d.h. es $\hat{p}_0 \neq \hat{p} = \langle \chi | \underline{\sigma} | \chi \rangle$. Sind $\chi_0^\uparrow, \chi_0^\downarrow$ jedoch zwei orthogonale Spinfunktionen (eine Basis), so sind bei rein elastischer Streuung und bei Vernachlässigung der Austauschstreuung $\chi^\uparrow, \chi^\downarrow$ ebenfalls orthogonal; denn sonst wäre die Zeitumkehrsymmetrie gebrochen. Ist die durch $\underline{k}_0, \underline{k}$

aufgespannte Streuebene eine Symmetrieebene des Kristalls und ist ihre Normale $\hat{n}_s = [\underline{k}_0 \times \underline{k}] / |\underline{k}_0 \times \underline{k}|$ die Quantisierungsrichtung \hat{p}_0 für $\chi_0^\uparrow, \chi_0^\downarrow$, so ist stets $\chi^\uparrow = \chi_0^\uparrow$ (Feder 1970). In einem kinematischen Modell der Beugung, in dem nur Einzelstreuungsprozesse an den Ionenrümpfen des Gitters berücksichtigt werden, ist, falls $\hat{p}_0 = \hat{n}_s$, die Beziehung $\chi^\uparrow = \chi_0^\uparrow$ unabhängig von der Lage der Streuebene im Kristall erfüllt. Gilt $\chi^\uparrow = \chi_0^\uparrow$, werden die Spinpolarisationseffekte in der Beugung eindeutig erfaßt, wenn die Streuung von Strahlen in den Spinzuständen $\chi_0^\uparrow, \chi_0^\downarrow$ getrennt behandelt wird.

Für ein Gitter aus Ionenrümpfen (i) an den Gitterpunkten $\underline{r}_i = m_1 \underline{a} + m_2 \underline{b} + m_3 \underline{c}$, $0 < m_j < M_j$ folgt mit einem "kinematischen" Ansatz (d.h. unter Vernachlässigung aller Mehrfachstreuungsprozesse am Gitter) für die Amplituden der gebeugten Elektronenwellen (23c) im Spinzustand $\chi_0^{\uparrow\downarrow}$:

$$A^{\uparrow\downarrow} = \sum_i \alpha_i^{\uparrow\downarrow} \cdot f_i^{\uparrow\downarrow}(\theta, E) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{r}_i} \quad (24)$$

wobei $f_i^{\uparrow\downarrow}(\theta, E)$ ein vom Streuwinkel $\theta = \sphericalangle(\underline{k}_0, \underline{k})$, von der Energie $E = \frac{1}{2m} \hbar^2 \cdot k_0^2$ und von der Spinorientierung \uparrow, \downarrow zu \hat{n}_s abhängiger Streufaktor für den Ionenrumpf (i) ist. Das innere Potential ist vernachlässigt, es würde nur θ und E ändern. Die α_i berücksichtigen die Abschwächung der einfallenden Welle durch Rückstreuung und Dämpfung beim Hineinlaufen in den Kristall (siehe Webb und Lagally 1973)⁺⁾ . Sind alle Ionenrümpfe gleich, ergibt sich

$$A^{\uparrow\downarrow} = f^{\uparrow\downarrow}(\theta, E) \cdot \sum_i \alpha_i^{\uparrow\downarrow} \cdot e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{r}_i} \quad (25)$$

⁺⁾ Bei der Diskussion der Spinpolarisation im Rahmen des kinematischen Modells durch Jennings und Sim (1972) und durch Kessler (1976) wird die Abschwächung der einfallenden Welle vernachlässigt.

Damit ist die Streuung an den Ionenrümpfen von der Gitterbedingung abgetrennt.

Ein unpolarisierter einfallender Strahl sei dargestellt als inkohärente Mischung zweier Teilstrahlen gleicher Intensität $I_0^\uparrow = I_0^\downarrow$ in den Spinzuständen $\chi_0^\uparrow, \chi_0^\downarrow$. Die Quantisierungsrichtung für $\chi_0^{\uparrow\downarrow}$ sei $\hat{p}_0 = \hat{n}_s$. Die Elektronen in den beiden Teilstrahlen seien entsprechend (23a) durch $\psi_{oi}^\uparrow, \psi_{oj}^\downarrow$ mit $\sum_i \langle \psi_{oi}^\uparrow | \psi_{oi}^\uparrow \rangle = I_0^\uparrow, \sum_j \langle \psi_{oj}^\downarrow | \psi_{oj}^\downarrow \rangle = I_0^\downarrow$ beschrieben. Wird der Strahl an dem Kristall gebeugt und ist $\alpha_i^\uparrow = \alpha_i^\downarrow$, ergeben (10) und (25) für die Spinpolarisation P eines gebeugten Strahls

$$P(\underline{k}_0, \underline{k}) = \frac{I^\uparrow - I^\downarrow}{I^\uparrow + I^\downarrow} = \frac{\sum_i \langle \psi_i^\uparrow | \psi_i^\uparrow \rangle - \sum_j \langle \psi_j^\downarrow | \psi_j^\downarrow \rangle}{\sum_i \langle \psi_i^\uparrow | \psi_i^\uparrow \rangle + \sum_j \langle \psi_j^\downarrow | \psi_j^\downarrow \rangle} \quad (26)$$

$$P(\underline{k}_0, \underline{k}) = \frac{|f^\uparrow(\theta, E)|^2 - |f^\downarrow(\theta, E)|^2}{|f^\uparrow(\theta, E)|^2 + |f^\downarrow(\theta, E)|^2},$$

also unabhängig vom Gitter den Wert der Elektron-Atomstreuung (in der Schreibweise der Gleichung (14) ist $|f^{\uparrow\downarrow}|^2 = W^{\uparrow\downarrow}$). Die Spinvorzugsrichtung ist $\hat{p} = \hat{p}_0 = \hat{n}_s$.

Die Intensität I gebeugter Strahlen hängt dagegen wie die Amplituden A von der Gitterbedingung und den atomaren Streufaktoren ab: Die Gittervektoren \underline{a} und \underline{b} mögen in der Oberfläche des Kristalls liegen, \underline{c} weise aus dem Kristall hinaus. Nach Webb und Lagally (1973) folgt

$$I(\underline{k}_0, \underline{k}) = I^\uparrow + I^\downarrow = \sum_i \langle \psi_i^\uparrow | \psi_i^\uparrow \rangle + \sum_j \langle \psi_j^\downarrow | \psi_j^\downarrow \rangle$$

$$I = (|f^\uparrow|^2 + |f^\downarrow|^2) \frac{\sin \frac{1}{2} M_1 (\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{a}}{\sin \frac{1}{2} (\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{a}} \times \quad (27)$$

$$\times \frac{\sin \frac{1}{2} M_2 (\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{b}}{\sin \frac{1}{2} (\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{b}} \cdot \frac{1}{1 + \alpha^2 - 2\alpha \cos(\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{c}}$$

α ist dabei als mittlerer Amplituden-Abschwächungsfaktor angenommen, der senkrecht zur Oberfläche des Kristalls zwischen einzelnen Schichten des Gitters wirkt:

$$\alpha = \alpha_{i+j} (\underline{r}_i + m_1 \underline{a} + m_2 \underline{b} - \underline{c}) / \alpha_i (r_i) \quad (28)$$

Die Intensität zeigt also scharfe Maxima, wenn $(\underline{k}_0 - \underline{k})$ die Laue-Bedingungen des zweidimensionalen Gitters $(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{a} = 2\pi n_1$, $(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{b} = 2\pi n_2$ (n_1 und n_2 ganze Zahlen) erfüllt, wenn also die zur Oberfläche parallele Komponente $(\underline{k}_{0\parallel} - \underline{k}_{\parallel})$ des Beugungsvektors $(\underline{k}_0 - \underline{k})$ ein Punkt des zweidimensionalen reziproken Gitters $g_{n_1, n_2} = n_1 \underline{a}^* + n_2 \underline{b}^*$ ist. Die dritte Laue-Bedingung $(\underline{k}_0 - \underline{k}) \cdot \underline{c} = 2\pi n_3$ bringt ebenso wie die Streufaktoren $f^{\uparrow\downarrow}(\theta, E)$ nur eine zusätzliche Modulation. Wird die Dämpfung vernachlässigt ($\alpha_i \rightarrow 0$), ist es im Falle der Beugung niederenergetischer Elektronen sinnvoll, das Gitter auf zwei Dimensionen zu beschränken, denn freie Weglängen liegen für niederenergetische Elektronen (Energie $E < 200$ eV) bei etwa 10 \AA .

Da Spineffekte bei der Elektron-Atom-Streuung existieren, gibt das dargestellte kinematische Modell Hinweise, daß Spineffekte auch bei der Beugung von Elektronen zu erwarten sind. In Abschnitt 4.1 der Arbeit wird die Gültigkeit des primitiven kinematischen Modells geprüft. Dabei zeigen sich krasse Abweichungen von dem Modell. Sie sind zu erwarten; denn wegen der relativ großen Wirkungsquerschnitte für die Streuung der einfallenden Elektronen an den Ionenrümpfen werden im Kristall Wellenfelder angeregt, deren Amplituden die Größe der durch elastische und inelastische Streuungen abgeschwächten Amplitude des Primärstrahls erreichen können (siehe z.B. Webb und Lagally 1973).

Der Gang einer Behandlung des Problems in einer vollen dynamischen Theorie (Jennings 1970, 1974, Feder 1971, 1972, Feder et al. 1976) wird in Abschnitt 4.2 in Zusammenhang

mit einem Vergleich von theoretischen und experimentellen Ergebnissen skizziert. Für eine qualitative Beschreibung der Spineffekte bei Ordnungs-/Unordnungsübergängen wird in 4.3 eine auf Jagodzinski (1977) zurückgehende Cluster-Einbettungsnäherung formal angewandt. In ihr wird die Vielfachstreuung innerhalb von zweidimensional angeordneten dreidimensionalen Mehrfachstreubereichen exakt behandelt, außerhalb durch die Näherung einer strukturunabhängigen, mittleren Streuung. Wie in dem kinematischen Modell ist dann die Spinpolarisation unabhängig von der Anordnung der Mehrfachstreubereiche; sie wird allein durch die Nahordnung in den Mehrfachstreubereichen bestimmt.

2. AUFBAU DES EXPERIMENTES

2.1 Grundsätzliches

Das Prinzip des Experimentes veranschaulicht Bild 4. Ein unpolarisierter Elektronenstrahl wird an einem Kristall gebeugt, die Spinpolarisation auslaufender Strahlen in einem Mott-Detektor analysiert⁺⁾ . In dem Experiment wird damit

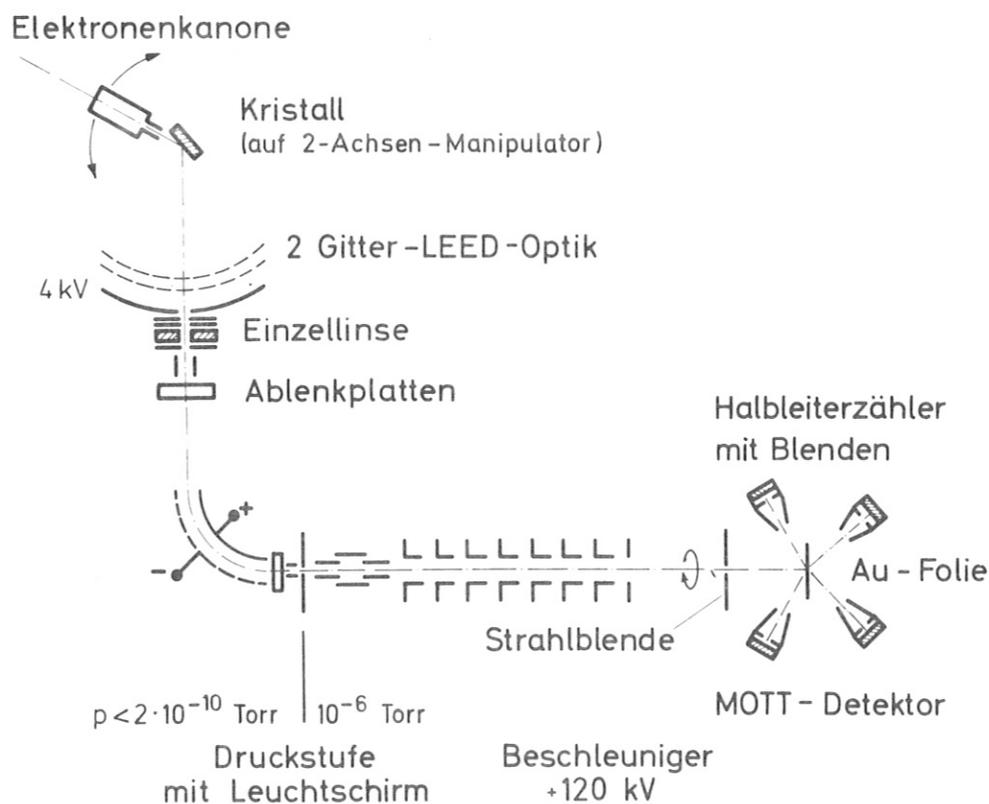


Bild 4 : Schematische Darstellung des Experimentes

⁺⁾ Die Alternative zu dieser Arbeitsweise, einen spinpolarisierten Elektronenstrahl an einem Kristall zu beugen und polarisationsabhängige Intensitätsänderungen zu messen, ist hier nicht angewendet, da geeignete Quellen spinpolarisierter Elektronen noch nicht voll entwickelt sind. Es sei aber darauf hingewiesen, daß in mehreren Laboratorien eine Quelle mit modulierbarer Polarisationsrichtung entwickelt wird, die für eine Untersuchung von Polarisierungseffekten bei der Beugung sehr günstig sein wird (Pierce und Meier 1975, 1976, Erbudak und Siegmann 1977, Pierce et al. 1977, Garwin und Kirby 1977).

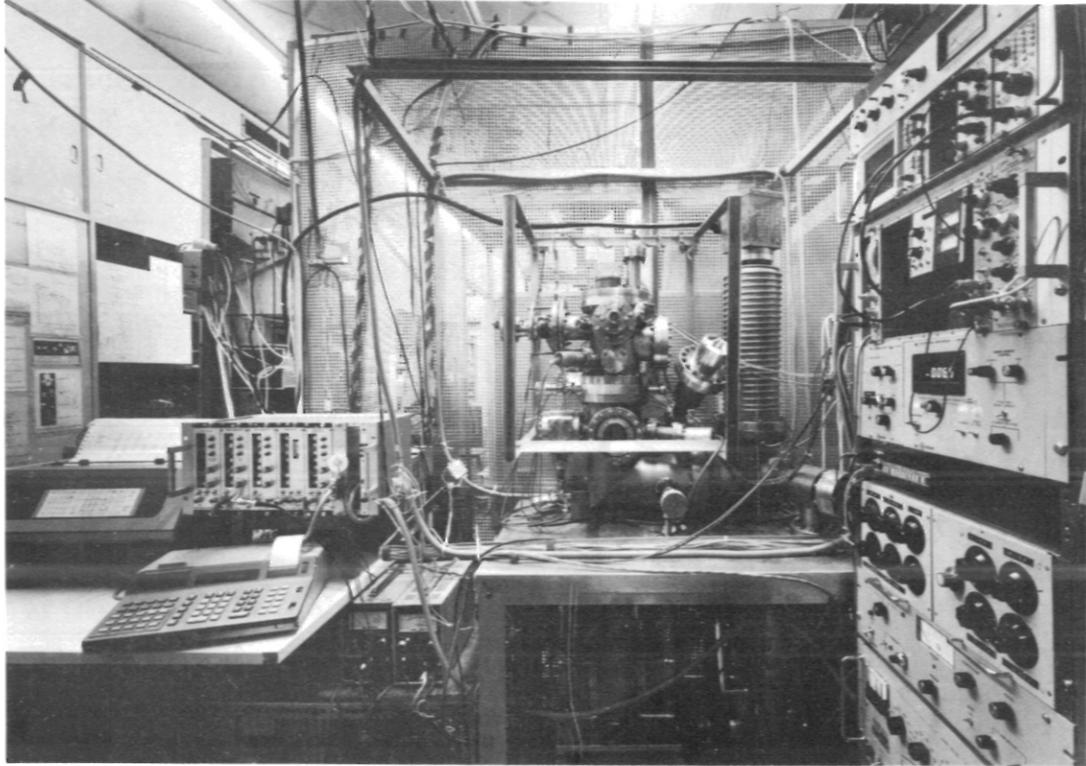


Bild 5: Ansicht der Beugungsapparatur

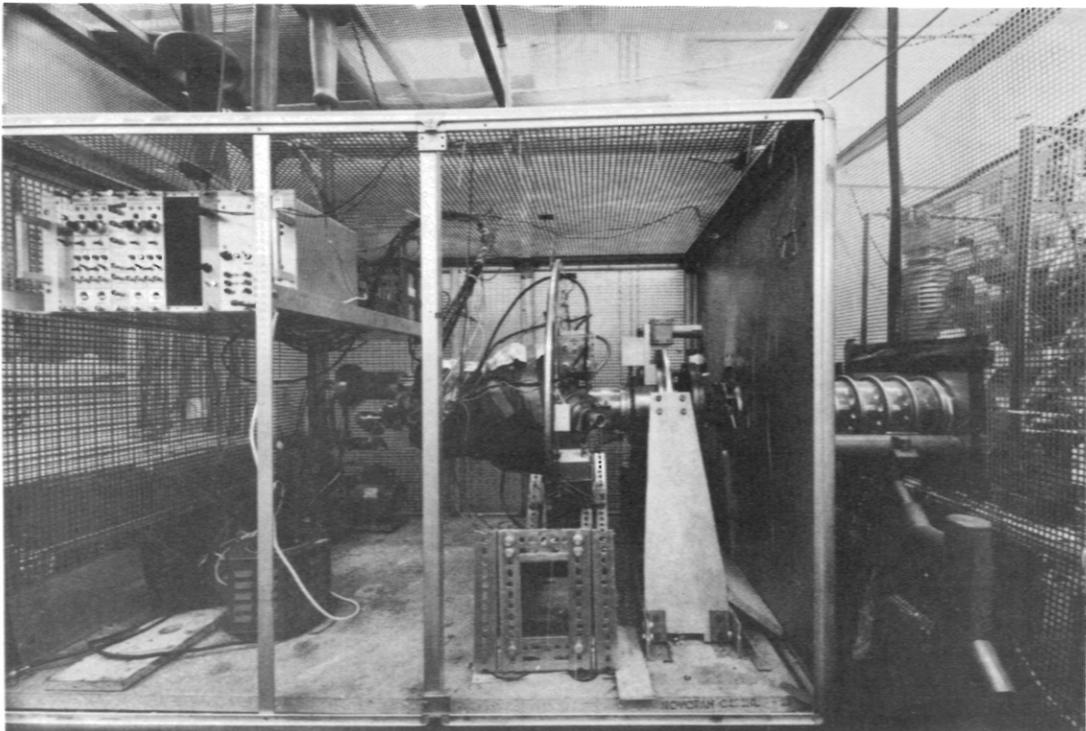


Bild 6: Ansicht des Polarisationsdetektors

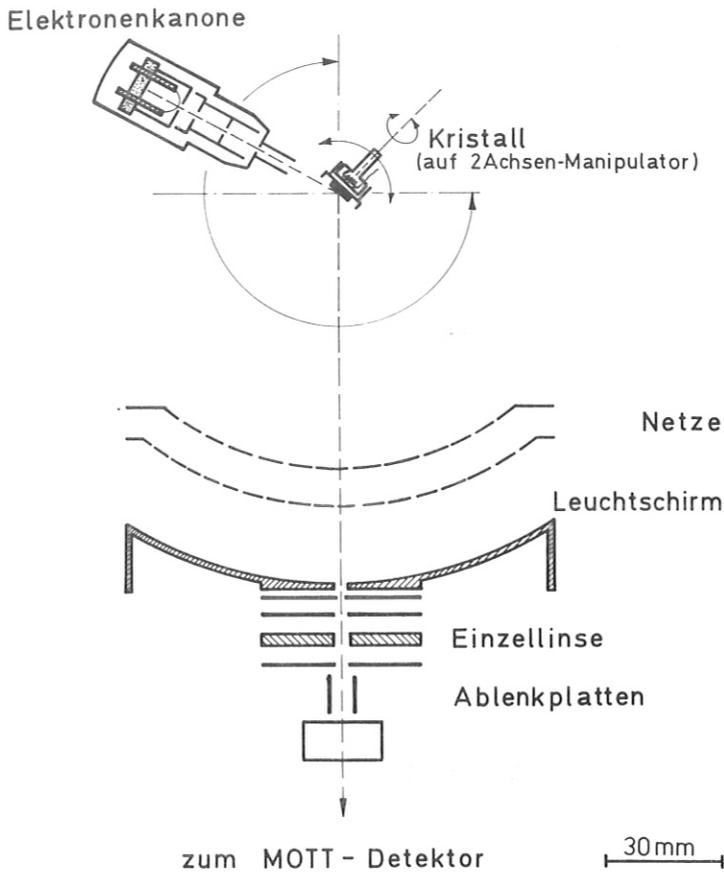


Bild 7:
Beugungsanordnung



Bild 8:
Blick in die Beugungskammer. Links ist die Elektronenkanone, rechts der Kristallmanipulator zu erkennen. Der schwarze Fleck rechts vom mittleren Reflex ist das Ausfädelloch.

der Grundsatz verfolgt, die unbekanntenen Effekte der Spinpolarisation bei der Beugung mit einem gut bekannten Analysator zu untersuchen. In dem von Davisson und Germer gegebenen Schema (Bild 1) ist also der Analysatorkristall durch den Mott-Detektor ersetzt; unbekanntene Effekte der Beugung sind an dem Polarisationskristall lokalisiert.

Für die Durchführung des Experiments werden Teile einer Apparatur zur Untersuchung der Spinpolarisation feldemittierter Elektronen (Müller et al. 1972, Müller 1975) verwendet. Das Feldemissionssystem ist durch eine spezielle Beugungsanordnung ersetzt worden, der Mott-Detektor mit dem gesamten Pumpsystem und damit Eigenheiten des Strahlwegs sind unverändert übernommen. Ein typisches Relikt des Feldemissionsexperimentes ist dabei der Zylinderkondensator; seine einzige Funktion ist jetzt, die Bahn der Elektronen von dem aus der Druckstufe kommenden Gasstrahl zu trennen und so den Kristall vor Verschmutzung zu schützen.

Die Bilder 5 und 6 geben Ansichten der Beugungsapparatur, des Mott-Detektors und der Zusatzgeräte. Im Folgenden werden zunächst diese Teile der Apparatur beschrieben; anschließend werden die Eigenschaften und die Vorbehandlung des Kristalls dargestellt.

2.2 Beugungsanordnung und Strahlführung

Die Beugungsanordnung wird in den Bildern 7 und 8 detailliert gezeigt. Ihre Grundzüge gehen auf Wolf (1972) zurück. Da mit einem ortsfesten Polarisationsdetektor gearbeitet wird, liegt die Richtung des zu untersuchenden, gebeugten Strahls im Raum fest. Um die Beugungsbedingungen variieren zu können, müssen daher die Elektronenkanone und der Kristall bewegt werden. Um alle möglichen Strahlen zu erfassen, wären mindestens vier unabhängige Drehungen nötig. Zur Vereinfachung wird hier die Vielfalt der möglichen Beugungsbedingungen eingeschränkt; nur die einfallenden und die auslaufenden

Strahlen werden zugelassen, die in einer festen, zur Kristallfläche senkrechten Streuebene liegen. Drei Drehungen reichen dann aus:

Voneinander unabhängige Bewegungen von Kanone und Kristall um eine gemeinsame Achse erlauben die Wahl der auf den Kristall bezogenen Polarwinkel des einfallenden und des auslaufenden Strahls. Die Achse steht dabei senkrecht zur Streuebene und liegt in der Kristalloberfläche. Die dritte Drehung läßt die Einstellung des Azimutwinkels zu, sie ist eine Drehung des Kristalls um seine Oberflächennormale.

Beugungsbilder können auf dem sphärischen Leuchtschirm beobachtet werden. Dazu werden die elastisch gestreuten Elektronen durch ein Gegenfeld zwischen den beiden sphärischen Netzen von dem unelastischen Untergrund abgetrennt (Hochpaß) und anschließend auf den Leuchtschirm hin beschleunigt (Beschleunigungsspannung einige kV). Kanone und Netze sind so dimensioniert, daß die Kanone vor den Netzen bewegt werden kann. Für die Reinigung des Kristalls durch Ionenbeschuß ist in dem Beugungsteil eine Ionenkanone (Varian 981-2043) vorgesehen. Der zu untersuchende Elektronenstrahl wird durch ein Loch im Leuchtschirm aus dem Beugungssystem herausgeleitet. Eine 1 mm-Strahlblende liegt außerhalb des Durchgriffs des Beschleunigungsfeldes hinter dem Leuchtschirmloch. Mit einer Einzellinse wird der Strahl durch den Zylinderkondensator hindurch auf die Druckstufe abgebildet. Zwei Ablenkplattenpaare dienen der Zentrierung. In die Seiten des Zylinderkondensators sind Zusatzelektroden eingefügt. Mit ihnen wird ein stigmatisch abbildendes Kugelfeld angenähert. Das Beugungssystem ist zum Zylinderkondensator so orientiert, daß die Bahn der Elektronen stets in der oben definierten Streuebene verläuft. Zur Streuebene normale Polarisationskomponenten bleiben daher stets senkrecht zum Impuls der Elektronen und können so in dem anschließenden Mott-Detektor erfaßt werden. Einige wichtige Komponenten des Beugungssystems seien näher beschrieben:

2.2.1 Elektronenkanone

Die elektronenoptische Konzeption der Elektronenkanone folgt im wesentlichen einem Entwurf von Cooper (1970): die Elektronen werden von der Kathode durch den Wehnelt-Zylinder hindurch mit hoher Feldstärke abgesaugt, in einem anschließenden feldfreien Raum durch eine Blende begrenzt und dann mit einer Verzögerungslinse auf den Kristall bzw. den Leuchtschirm fokussiert. Dabei wird in der ersten Stufe auf etwa dreifache Endenergie beschleunigt. Der Aufbau ist unter Verwendung einer kommerziellen Wehnelt-Kathodeneinheit (Varian) mit Edelstahl- und Keramikdrehteilen realisiert. Das einfache Prinzip erlaubt die notwendigen kleinen Dimensionen. Typische Strahleigenschaften sind: Strahlstrom bei 50 eV Endenergie max. ca. $10 \mu\text{A}$, Öffnungswinkel $< 1^\circ$ für einen Strom $\leq 3 \mu\text{A}$. Betrieben wird die Kanone zusammen mit dem gesamten Beugungssystem an einer modifizierten Varian-LEED-Versorgung (Typ 981-2145/48). Zur Winkeleinstellung der Kanone dient eine Schiebedurchführung, die über eine Zahnstange ein Zahnrad treibt. Für die Einstellgenauigkeit gilt: Linearitätsfehler $< 2^\circ$, Reproduzierbarkeit besser $0,2^\circ$. Der Schwenkbereich von 270° erlaubt symmetrische Messungen und damit Kontrollen der Nullpunktlagen von Streuwinkel und Polarisation. Die Abschattung gestreuter Elektronen durch die Kanone ist in einem Kegel mit einem halben Öffnungswinkel von ca. 10° wirksam. Damit sind maximale Streuwinkel von etwa 170° möglich.

2.2.2 Kristallmanipulator

Für den Kristallmanipulator wird ein Varian-Drehmanipulator mit koaxialer Schiebedurchführung verwendet (Typ 981-0539). Die Schubstange treibt über einen Seilzug gegen eine Feder die Drehung des Kristalls in seiner Oberfläche (Winkelbereich ca. 150°). Die Achse für diese Drehung ist in Kugellagern

gehalten; sie ist als Hohlwelle ausgeführt. Durch die Achsbohrung werden die Heizstromleitungen und ein PtRh10-Pt Thermoelement zum Kristall geführt. Der Kristall ist mit einer Tantal-Halterung auf einem Varian-Heizelement montiert. Das Thermoelement ist in Kristallnähe an einem Haltebügel durch Punktschweißen angeheftet. Alle Tantalteile in der Umgebung der Kristalloberfläche sind durch Goldblech abgedeckt. Das Heizelement mit dem Kristall ist mit der Achse durch ein Justierdreibein isoliert verbunden. Die Kristalloberfläche kann unter Verwendung optischer Hilfsmittel (Justierfernrohr, Laser) mit einer Genauigkeit von 0,1 mm gegen die Hauptdrehachse (polare Achse) ausgerichtet und mit einer Genauigkeit von etwa $0,5^{\circ}$ zur azimuthalen Drehachse senkrecht gestellt werden.

Der Varian-Drehmanipulator ist auf einem Dreibein montiert, dessen Basis auf einer transversal verschiebbaren Kugelschale gekippt werden kann. Dadurch läßt sich die Hauptdrehachse des Kristalls (polare Drehung) zur Achse der Kanonenbewegung ausrichten. Die entsprechenden Einstellungen können allerdings nur beschränkt überprüft werden, da das Vakuumgefäß Kontrollen behindert. Hier liegt eine Fehlerquelle für die Winkelangaben.

Polare Kristallwinkel werden an der Varian-Drehdurchführung eingestellt bzw. abgelesen. Ihre Einstellgenauigkeit liegt bei $0,2^{\circ}$ (differentiell $0,1^{\circ}$). Die azimuthale Drehung wird für die Messungen dieser Arbeit stets an dem Beugungsbild kontrolliert.

2.2.3. Netze - Leuchtschirm

Die Netze sind Edelstahlnetze mit einer Maschengröße von $(0,5 \times 0,5)\text{mm}^2$. Zur Formgebung sind sie über Kugelschalen gespannt und durch elektrolytische Beschichtung mit Kupfer stabilisiert worden. Ihre Kugelradien sind 70 mm und 80 mm, der Radius des Leuchtschirms ist 100 mm. Die wechselseitigen Abstände sind mit 10 bzw. 20 mm möglichst groß gewählt, um an den Maschen des Retardierungsnetzes eine möglichst kleine Feldstärke und damit einen geringen Durchgriff zu erreichen. Ebenso wird durch diese Wahl die Brechkraft des Ausfädellochs im Leuchtschirm verkleinert.

Bei Polarisationsmessungen wird mit einem Gegenfeld nahe der Abschneideschwelle des Retardierungsnetzes gearbeitet. Die durch die Maschen gegebene räumliche Modulation des durchlaufenden Strahls ist so stark, daß sie auf die Druckstufe und auf die Blende im Polarisationsdetektor vergrößert abgebildet wird. Die effektive Aperturblende für den ausgefädelten Strahl ist damit der Durchlaßbereich einer Netzmasche, ihr entspricht eine Winkelauflösung $< 0,5^\circ$. Die ausgewählte Masche ist jedoch nicht reproduzierbar einzustellen.

2.3 Der Polarisationsdetektor (Mott-Detektor)

Mott-Detektoren zur Polarisationsanalyse nutzen die durch Spin-Bahn-Kopplung gegebene Anisotropie der Elektron-Atom-Streuung bei typischen Streuenergien von 50 - 400 keV. Prinzipien dieses Polarisationsnachweises sind gründlich untersucht (Raith 1962, van Klinken 1964, Müller 1966, Eckstein 1970); darüber hinaus ist der hier verwendete Mott-Detektor in seiner Grundauführung ausführlich beschrieben (Müller 1966). Daher wird nur kurz auf den Detektor eingegangen.

Der zu untersuchende Elektronenstrahl wird auf eine Energie von 120 keV beschleunigt, an einer Strahlblende begrenzt (zentriert) und an freitragenden Goldfolien mit einer Massenbelegung von $90 - 315 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ gestreut. Zwei Oberflächen-Sperrschichtzähler in zwei zum einfallenden Strahl symmetrischen Positionen bei einem mittleren Streuwinkel von 120° registrieren die polarisationsabhängige Asymmetrie. Ihr sind apparative Asymmetrien überlagert. Zwei mit den 120° -Zählern komplanare Zähler in zwei symmetrischen 45° -Positionen dienen als Monitor für die Asymmetrie des Strahllaufs. Die Streuebene ist dabei parallel zur in 2.2 definierten Streuebene der Beugung. Die gesamte Streuanordnung kann um ihre Symmetrieachse, die Sollbahn des zu untersuchenden Strahls, gedreht werden. Die durch eine 180° Drehung mögliche Rechts-Links-Vertauschung gestattet zusammen mit der Kontrolle durch die 45° -Zähler eine weitgehende Reduzierung apparativer Asymmetrien. Konusblenden vor den Zählern und eine Streukammer aus Materialien mit niedrigem Rückstreuvermögen (Aluminium, Glas, Graphitbelag) unterdrücken Störungen durch rückdiffundierende Elektronen.

2.3.1 Streugeometrie und Kalibrierung

Für fast alle Messungen dieser Arbeit - ausgenommen sind einige temperaturabhängige Messungen im Abschnitt 4.3 - wurden 120° -Zähler mit einem durch eine Lochblende gegebenen effektiven Durchmesser von 5 mm in 40 mm Abstand von der Streufolie und eine Strahlblende mit einem Durchmesser von $\sim 1,5$ mm verwendet. Die 45° -Zähler sind ebenfalls 40 mm von der Streufolie entfernt. Um in ihnen ähnlich hohe Zählraten wie in den 120° -Zählern zu erhalten, sind sie mit einer Aperturblende von ca. 1 mm Durchmesser versehen. (Das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte ist für $E = 121$ keV nach Holzwarth und Meister $W(45^\circ)/W(120^\circ) \approx 14$).

Für diese Streuanordnung ist die Polarisationsempfindlichkeit bei Einzelstreuprozessen (Foliendicke $d = 0$) nach Rechnungen von Holzwarth und Meister (1964) $D(0) = S = 0,4$ (Mittelwert für $120^\circ \pm 4^\circ$ $E = 121$ keV^{+) . Für Schichten endlicher Dicke d wird durch Mehrfachstreuung die Polarisationsempfindlichkeit erniedrigt; näherungsweise gilt}

$$D(d) = D(0) \frac{1}{1 + \alpha d} \quad (29)$$

wobei α eine von der Geometrie und dem Folienmaterial abhängige Konstante ist. (Cavanagh et al. 1957, siehe auch Eckstein 1970). Um in Polarisationsmessungen an den theoretischen Wert $D(0) = S = 0,4$ der Polarisationsempfindlichkeit anschließen zu können, müssen also die für eine Folie der Dicke d gemessenen Asymmetrien $A = P \cdot D(d)$ entsprechend (29) korrigiert werden. Zur Durchführung dieser "Extrapolation auf Schichtdicke $d = 0$ " ist mit Beugungsbedingungen, bei denen eine Polarisationsänderung $P_{\max} - P_{\min} = 150$ % auftritt, die polarisationsabhängige Asymmetrie $A = (P_{\max} - P_{\min}) \cdot D(d)$ im Mott-Detektor unter Variation der Foliendicke d ermittelt worden. Die Ergebnisse und ihre Auswertung zeigt Bild 9. Für zwei Standardstreufohlen I und II der Dicken $d = 162 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ und $d = 192 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ folgen die Polarisationsempfindlichkeiten $D(I) = D(162) = 0,291 \pm 0,015$ und $D(II) = D(192) = 0,273 \pm 0,014$. In dem angegebenen Eichfehler von ± 5 % ist dabei eine Unsicherheit von $D(0) = S$ berücksichtigt.

Für die Messungen in Abschnitt 4.3 (Temperaturabhängigkeit) ist die Streugeometrie verändert worden, um eine höhere An-

^{+) Experimentelle Werte für S liegen unter dem hier angenommenen theoretischen Wert (siehe van Klinken 1965). In den Doppelstreuexperimenten zur Bestimmung von S sind stets auf Träger aufgedampfte Folien verwendet worden. Der Träger kann neben anderen experimentellen Effekten für die Abweichungen verantwortlich sein.}

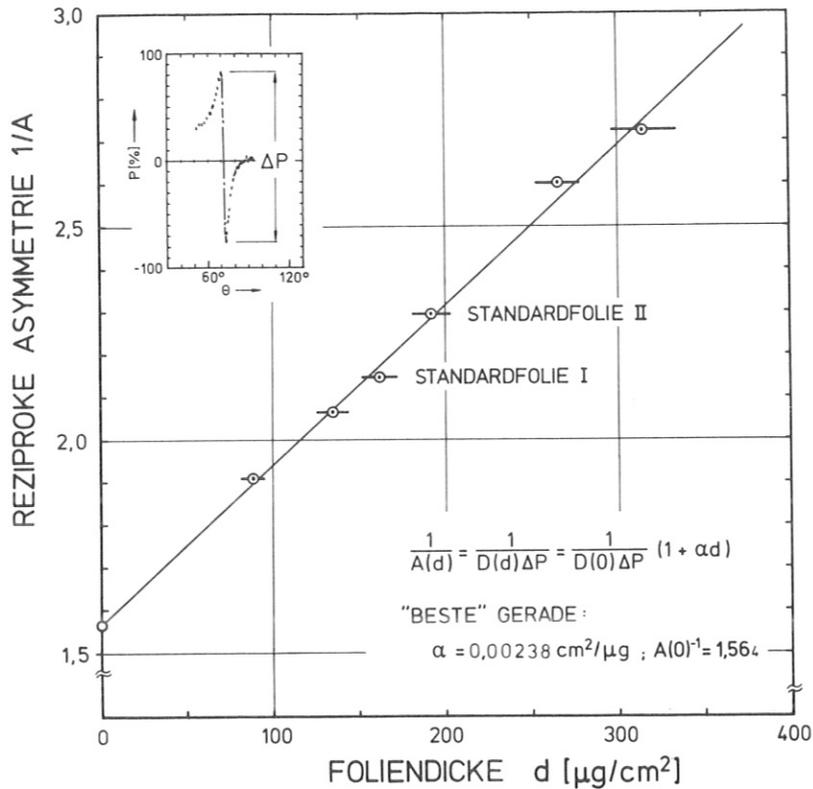


Bild 9 Abhängigkeit der inversen Polarisationsempfindlichkeit $1/D$ des Mott-Detektors von der Schichtdicke d der Streufolie. Durch die lineare Extrapolation auf Schichtdicke $d = 0$ sind Standardstreufolien I und II "geeicht" worden.

sprechwahrscheinlichkeit $W = I/I_0$ des Detektors zu erhalten: Alle Zählerabstände sind auf ca. 32 mm verringert, die 120° -Zähler auf eine ausgenutzte Fläche von ca. 200 mm^2 vergrößert (300 mm^2 Zähler hinter einer Blende mit D-förmigem Loch), und die effektiven Zählflächen der 45° -Zähler auf einen Durchmesser von 2,8 mm erweitert. Zur Verbesserung der Nullpunktstabilität ist gleichzeitig die Strahlblende auf 1,1 mm \varnothing verkleinert. Die Nachweisqualität der polarisationsempfindlichen 120° -Zähleranordnung $K = 1/\sqrt{W} \cdot D(d)$ hat sich dadurch etwa um den Faktor 2,8 verbessert, d.h. bei Vernachlässigung der 45° -Zähler hat sich die Meßzeit, die für das Unterschreiten eines festen statistischen Fehlers notwendig ist, auf weniger als 1/8 reduziert (siehe dazu Müller 1966, Eckstein 1970).

Da die 45° -Zähler aus geometrischen Gründen nicht im gleichen Maße wie die 120° -Zähler vergrößert werden konnten, ist das Zählratenverhältnis $N(45^\circ)/N(120^\circ)$ ungünstiger geworden (ca. 1:2). Über die Korrektur der apparativen Asymmetrie durch die 45° -Zählung (siehe unten 2.3.2) wird der statistische Fehler der Gesamtmessung bezogen auf den der 120° -Zählung etwa um den Faktor 1,2 vergrößert. Die erreichte Meßzeitverkürzung wird dadurch wieder verringert (ca. 1,5 x).

Die Kalibrierung ergibt sich durch Anschluß an Messungen mit der "kleinen" Streugeometrie. Die obere Schranke für den Eichfehler ist jetzt allerdings mit $\pm 10\%$ anzugeben.

2.3.2 Besonderheiten des Mott-Detektors - Elektronik, Auswertung -

Eine Besonderheit des hier eingesetzten Polarisationsdetektors ist, daß die Zählimpulse über hochspannungsisolierte, elektrostatisch geschirmte Trenntransformatoren ausgekoppelt werden. Um den Aufwand bei 4 Zählkanälen einzuschränken, wird die Differenz zwischen zwei symmetrischen Zählkanälen übertragen; die Zählimpulse werden dabei über die Polarität den Zählern zugeordnet. Die Transformatoren können zwischen dem Vorverstärker und dem Hauptverstärker oder nach den Diskriminatoren eingesetzt werden. Bei der "kleinen" Streuanordnung ist stets die erste Auskoppelweise verwendet worden. Bei dem Einsatz der großflächigen Halbleiterzähler ergeben sich mit ihr jedoch Schwierigkeiten; das addierte Rauschen der zwei überlagerten Zählkanäle wird zu groß. Hauptverstärker und Diskriminatoren müssen jetzt mit ins Hochspannungssystem hineingenommen werden (2. Auskoppelart).

Die Zählergebnisse werden zusammen mit der Zählzeit von einem Tischrechner (HP 9815) übernommen, ausgewertet und zusammen mit allen für die Messung wichtigen Parametern sowohl auf Magnetband gespeichert, als auch von einem

Druckwerk (HP 9871 A) in Protokollform ausgegeben. Von dem Magnetband aus können die Meßergebnisse nach entsprechender Abfrage und Aufarbeitung durch den Rechner mit Hilfe des Druckwerks in Diagrammform dargestellt werden. Nahezu alle in dieser Arbeit wiedergegebenen Meßergebnisse sind direkte Rechnerausdrucke. In der Auswertung werden jeweils zwei Zählungen mit rechts/links vertauschten Detektorstellungen (180° -Drehung) zu einem Meßpunkt verarbeitet. Dabei werden zunächst für die 45° - und 120° -Zähler die Verhältnisse der Zählraten mit einer festen "Nullpunktsasymmetrie" korrigiert, die durch Fehler in der rechts/links-Vertauschung entsteht. Sie ist durch direktes Ausfädeln des unpolarisierten Kanonenstrahls ausgemessen. (Für die 120° -Zähler liegt sie bei 2 %). Anschließend werden die durch Schwankungen im Strahl Lauf ausgelösten, stets wechselnden apparativen Asymmetrien berücksichtigt, die in den 45° Zählern mit großer Empfindlichkeit (Faktor 2-3 gegenüber den 120° -Zählern) als Abweichungen von der "Nullpunktsasymmetrie" erfaßt werden (siehe hierzu Müller 1966, Eckstein 1970; das Einführen der Soll-Nullage ist durch die Größe der Nullpunktsasymmetrie bei der hier benutzten Detektorstellung notwendig geworden). Insgesamt ist durch diese Auswertung der durch apparative Asymmetrien gegebene Fehler, der Nullpunktsfehler, in den Polarisationsangaben auf ± 1 % (absolut) beschränkt.

2.4 Der Kristall

2.4.1 Auswahlkriterien

In dieser Arbeit wird ein Goldkristall mit (110)-Oberfläche untersucht. Die Auswahl des Kristalls und seiner Oberfläche ist durch mehrere Gesichtspunkte beeinflusst:

- a) Die Spin-Bahn-Wechselwirkung, die die gewünschte spinabhängige Streuung bestimmt, steigt mit wachsender Kernladungszahl Z ; Gold ist eins der in Frage kommenden schweren Metalle (Wolfram: $Z = 76$, Platin: $Z = 78$, Gold: $Z = 79$).

- b) Die saubere Gold-(110)-Oberfläche ist ohne Schwierigkeiten mit reproduzierbarem Beugungsbild ((1x2)-Überstruktur) darstellbar. Sie ist von Fedak und Gjostein (1967) und von Wolf (1972) durch Beugung niederenergetischer Elektronen gründlich untersucht.

- c) Im Temperaturbereich von 700 - 750 K zeigt die Gold-(110)-Fläche einen strukturellen Phasenübergang (Wolf 1972, Wolf et al. 1977). Korreliert mit diesem Übergang ändert sich das Beugungsbild: es geht von einem (1x2)-Bild in ein (1x1)-Bild über. Zusammenhänge zwischen Ordnungszustand und Spinpolarisation sind von Interesse.

- d) Der Haftkoeffizient für Gase ist auf Gold sehr klein. Störende Restgasadsorption ist damit - hinreichend gutes Vakuum vorausgesetzt - auch bei langen Meßzeiten nicht zu erwarten.

2.4.2 Struktur der Gold-(110)-Oberfläche

Gold kristallisiert kubisch flächenzentriert (fcc). Bei diesem Gitter bestehen die (110)-Flächen aus nebeneinander liegenden dichtest gepackten Ketten in Richtung $[110]$, den Diagonalen der Würfel Flächen. Die primitive Einheitszelle wird entsprechend von den orthogonalen Vektoren

$\underline{a} = \frac{1}{2} (\underline{a}_0 - \underline{b}_0)$ und $\underline{b} = \underline{c}_0$ mit $a = |\underline{a}| = 1/2 \sqrt{2} a_0$,
 $b = |\underline{b}| = a_0$ aufgespannt, wobei $\underline{a}_0, \underline{b}_0, \underline{c}_0$ die Basisvektoren des Grundgitters sind und $a_0 = |\underline{a}_0| = |\underline{b}_0| = |\underline{c}_0|$. Das zu diesem Flächengitter reziproke Gitter hat die Basisvektoren $\underline{a}^* = \underline{a}/a^2$, $\underline{b}^* = \underline{b}/b^2$ mit $a^* = |\underline{a}^*| = 2\pi\sqrt{2}/a_0$, $b^* = |\underline{b}^*| = 2\pi/a_0$ (siehe dazu Bild 10).

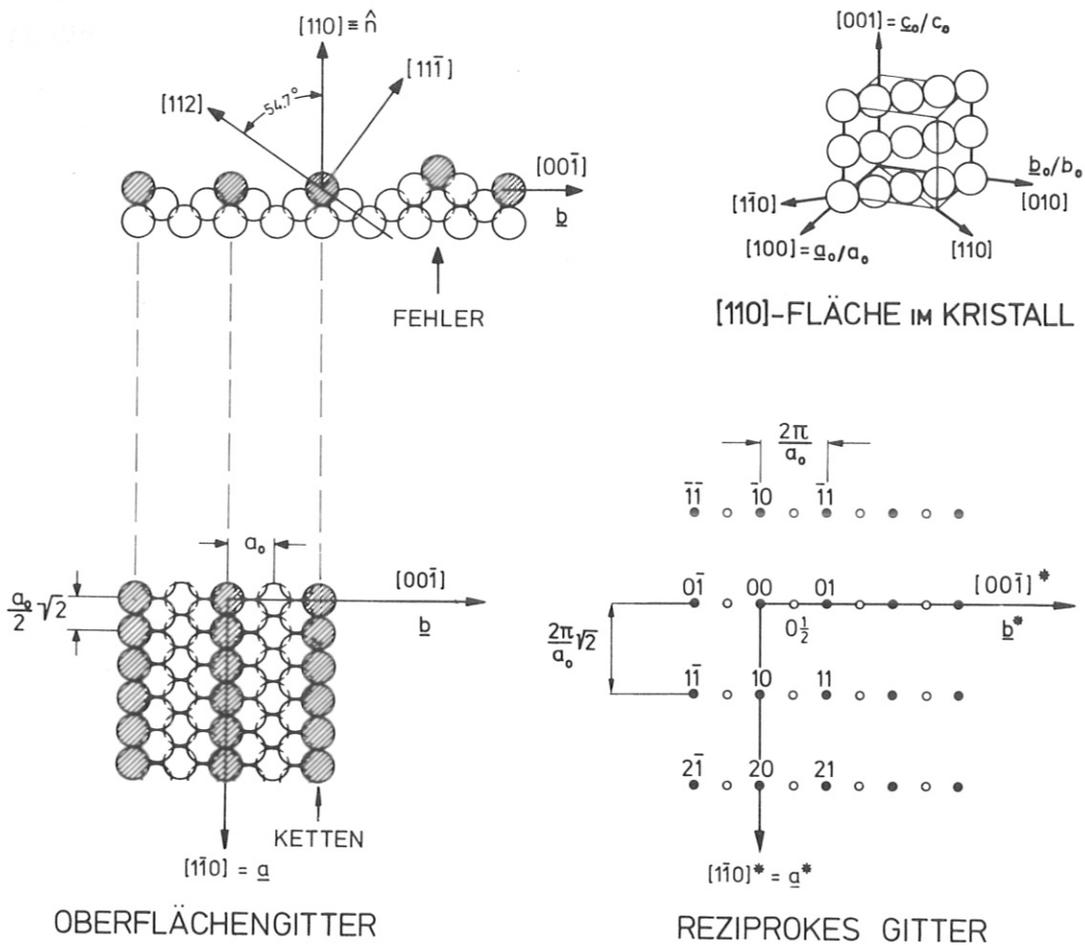


Bild 10: Geometrie der Gold-(110)-Oberfläche und zugeordnetes zweidimensionales reziprokes Gitter.

Das Beugungsbild der sauberen Gold-(110)-Oberfläche - siehe Bild 11 - enthält bezogen auf dieses reziproke Gitter in b^* -Richtung bei Raumtemperatur halbzahlige Reflexe (Strahlen). Außerdem zeigen alle Reflexe in b^* -Richtung eine mit der Streuenergie E und dem Einfallswinkel ϑ_0 wechselnde Diffusität, während sie in a^* -Richtung gleichmäßig scharf sind (Wolf 1972). Das Beugungsbild mit der (1×2) Überstruktur kann durch eine Oberflächenstruktur erklärt werden, bei der gegenüber dem Grundgitter im Mittel jede zweite dichtest

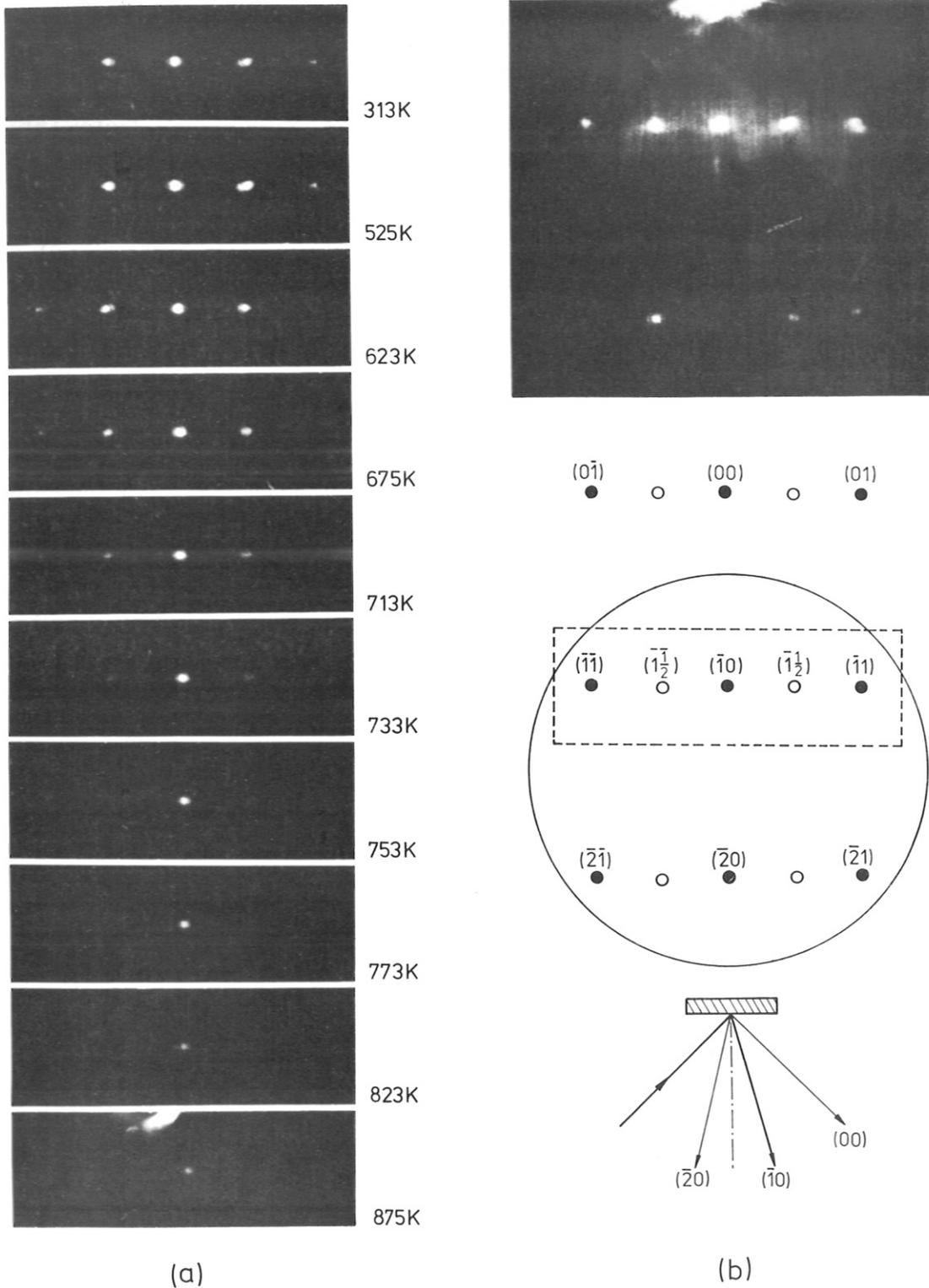


Bild 11: Beugungsdiagramme der Gold-(110)-Oberfläche bei verschiedenen Kristalltemperaturen unter schrägem Einschluß (ca. 45° zur Flächennormalen) längs der dichtest gepackten Ketten ($[110]$ -Richtung). Die Primärenergie ist $E = 83 \text{ eV}$ (a). Als Orientierungshilfe gibt Teil (b) eine Gesamtansicht des Beugungsbildes sowie schematische Darstellungen des Beugungsdiagramms und des Strahlflusses. (Fehler der Temperaturangabe siehe 3.4.4).

gepackte Kette fehlt (Wolf 1972). Statistische Fehler in der Folge der auf dem Grundgitter liegenden Ketten verursachen die Diffusität der Reflexe in b^* -Richtung. Die Fehler können dabei statistisch verteilte Aufrauungen oder Domänen sein, in denen Flächenbereiche um Grundgittervektoren \underline{t} versetzt sind. Wenn Domänen existieren, wird die diffuse Streuung besonders durch die Mehrfachstreuung von den Versetzungsbereichen an den Domänengrenzen bestimmt (siehe Jagodzinski 1977). Ihr Einfluß ist um so größer, je kleiner die Domänen im Vergleich zu den Kohärenzbereichen der Elektroden sind. Durch Heizen des Kristalls wächst die Fehlordnung der Oberfläche, d.h. die Rauigkeit nimmt zu und/oder die Domänen werden kleiner. Entsprechend werden die Reflexe in b^* -Richtung diffuser. In einem kritischen Temperaturbereich von 700 - 750 K wächst die Diffusität stark an; die halbzahlig Reflexe und die mit der Überstrukturschicht korrelierten diffusen Anteile in den Grundgitterreflexen verschwinden schließlich im Untergrund. Die Grundgitterreflexe selbst bleiben erhalten (siehe Bild 11)⁺).

Dieses Verhalten kann mit einem Ordnungs-/Unordnungsübergang der Anordnung der dichtgepackten Ketten erklärt werden. Mit einer eindimensionalen Fehlordnungstheorie erhalten Wolf (1972) und Wolf et al. (1977) aus temperaturabhängigen Reflexprofilmessungen Aussagen über die Statistik der Kettenfolge und deren Temperaturabhängigkeit. Im Rahmen der hier dargestellten Arbeit ergeben sich zusätzliche Aussagen zu dem Fehlordnungsproblem der Gold-(110)-Oberfläche (siehe dazu Abschnitte 4.2.4 und 4.3.3).

⁺) Fedak und Gjostein (1967) sowie Kostelitz et al. (1973) geben für den Übergang von der (1x2) zur (1x1) Struktur im Beugungsbild eine charakteristische Temperatur nahe 870 K an; diese Temperatur kann die Grenztemperatur einer verbleibenden Nahordnung sein (siehe 4.3.3).

Andere Modelle, die die (1x2)-Überstruktur der reinen Gold-(110)-Fläche erklären können, sind:

- a) das Verrückungsmodell: je 2 Ketten rücken in b-Richtung der Oberfläche zusammen bzw. auseinander.
- b) das Wellenmodell: Ketten werden alternierend aus der Oberfläche herausgehoben oder hineingezogen. Es entsteht eine Wellung der Periode 2 b.

Das Verrückungsmodell (a) ist durch Untersuchungen mit Rückstreuung und Gitterführung (Channeling) von Heliumionen hoher Energie (ca. 1 MeV) ausgeschlossen worden (Zehner 1977). Das Wellenmodell (b) haben Felner et al. (1977) und Debe und King (1977) zur Erklärung einer Überstruktur beim Wolfram herangezogen. Ähnlich wie das Verrückungsmodell entspricht es einer (weichen) Oberflächenschwingungsmode (soft surface phonon mode). Sie sollte empfindlich auf Temperaturerhöhungen reagieren. Wesentliche Änderungen der Struktur sind jedoch bis zu Kristalltemperaturen nahe 700 K (vierfache Debye-Temperatur des Goldes) nicht zu beobachten. Das Modell (b) erscheint damit gleichfalls unzutreffend.

Ebenso sind Verunreinigungen der Oberfläche - ausgenommen Wasserstoff - als Ursache der Überperiode auszuschließen; die (1x2) Überstruktur tritt auch direkt nach einer Oberflächenreinigung durch Ionenbeschuss und schwachen Tempern auf (siehe im nächsten Abschnitt). Wasserstoff könnte die Überstrukturbildung auslösen, jedoch ist nicht zu erwarten, daß sein Einfluß bis zu einer Kristalltemperatur von 700 K stabil ist; nach Hart und Stiddard (1974) ist Wasserstoff bei Raumtemperatur in einem Vakuum besser 10^{-9} Torr "vollständig" desorbiert. (Eine Nachweisgrenze wird nicht angegeben, sie dürfte unter dem Wert von 10^{13} Atomen/cm² liegen, vergleiche Knapp und Stiddard 1972).

2.4.3 Kristallpräparation

Der verwendete Kristall ist von einem stabförmigen [110]-orientierten Einkristall (Materials Research, Reinheitsgrad 6N) mit einer Funkensäge abgeschnitten, mit Funkenerosion planiert und anschließend elektrochemisch poliert worden. Er ist ca. 2 mm dick und hat einen Durchmesser von 6 mm. Die (optische) Oberfläche des Kristalls liegt mit einer Genauigkeit besser $0,5^\circ$ normal zur [110]-Richtung.

Unter Ultravakuumbedingungen (UHV) ist der Kristall zunächst durch vielfachen Wechsel zwischen Beschuß mit Argon-Ionen und tagelangem Tempern bei $400 - 800^\circ\text{C}$ an der Oberfläche gesäubert, ausgeheilt und vor allem an Verunreinigungen im Volumen verarmt worden. Um eine möglichst glatte Oberfläche zu erhalten, ist der Beschuß unter ständigem Wechsel von Einfallrichtung und Energie ($0,3 - 3 \text{ keV}$) durchgeführt worden. Nach der Behandlung mit Argon-Ionen gibt kurzes Tempern bei 800°C stets zuverlässig ein scharfes Beugungsbild mit (1x2)-Überstruktur; je nach Stärke der Schädigung kann auch Tempern bei niedrigerer Temperatur ausreichen.

Nach dieser gründlichen Kristallsäuberung reicht anschließend zum Entfernen geringer Verunreinigungen eine das Gold-Gitter schonende Behandlung mit Neon-Ionen: der Neon-Beschuß wird bei Ionenenergien um 300 eV bei flachem Einfall (ca. 60° zur Flächennormalen) unter ständigem Drehen des Kristalls um seine Oberflächennormale durchgeführt (siehe dazu Taglauer et al., 1976). Anschließend genügt ein Heizen auf etwa 300°C , um ein scharfes (1x2)-Beugungsbild zu erhalten.

Kontrollen der Verunreinigungen (z.B. durch Auger-Elektronenspektroskopie) sind im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt. Die sehr gute Reproduzierbarkeit der Messungen und Untersuchungen an einer vom gleichen Stab abgeschnittenen Kristallscheibe (Wolf und Zimmer 1977) geben jedoch die Sicherheit, daß die Ergebnisse nicht durch Verunreinigungen beeinflußt sind.

3. DURCHFÜHRUNG DER MESSUNGEN

In diesem Abschnitt werden zunächst die verwendeten Bezeichnungen angegeben sowie Eigenheiten und Fehler der erfaßten Meßgrößen Polarisation und Intensität/Zählrate dargestellt. Anschließend werden die Meßmethode und die in die Messungen eingehenden Parameter beschrieben.

3.1 Nomenklatur

Alle Winkel und Richtungen werden nach dem Schema von Bild 12 a, b angegeben. Bezugssystem ist die Kristalloberfläche (siehe Bild 10).

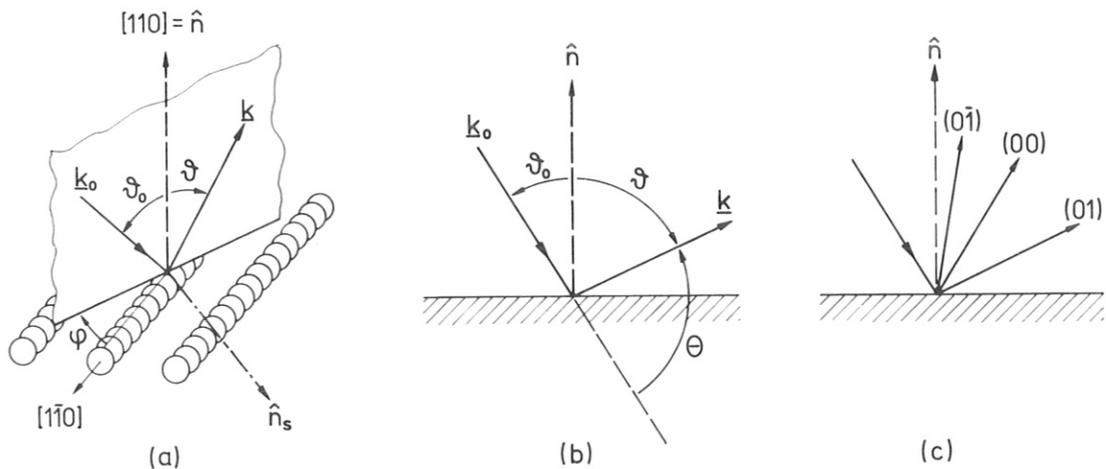


Bild 12: Bezeichnung der Winkel beim Streuprozeß (a, b) und Vorzeichen der Reflexindizierung (c).

φ_0 ist der (polare) Einfallswinkel, φ der (polare) Ausfallswinkel und θ der Streuwinkel. Es gilt $\theta = 180^\circ - (\varphi_0 + \varphi)$. Der Winkel φ gibt den Azimut an, d.h. die Orientierung der Streuebene (der Beugung) zu den dichtest gepackten Ketten in der (110) -Kristalloberfläche. \underline{k}_0 und \underline{k} sind die Wellenvektoren des einfallenden und des auslaufenden Strahls. $\hat{n}_s = [\underline{k}_0 \times \underline{k}] / |\underline{k}_0 \times \underline{k}|$ ist die Normale zur Streuebene, \hat{n} die Normale zur Kristalloberfläche. \hat{n} und \hat{n}_s stehen zueinander senkrecht (Streuebene \perp Kristalloberfläche; siehe 2.2). Die Indizierung der Beugungsbilder folgt der Indizierung im

reziproken Gitter (siehe Bild 10). Bei schrägem Einfall ($\mathcal{L}_0 \neq 0$) wird die zur Oberfläche parallele Komponente des Impulses \underline{k}_0 in den 1. Quadranten des reziproken Flächen- gitters gerichtet. Entsprechend sind die Indizes negativ, wenn der auslaufende Strahl zwischen dem einfallenden und dem spiegelnd reflektierten Strahl liegt (siehe Bild 12c).

3.2 Polarisationsmessung

Bis auf wenige Ausnahmen sind die Beugungsbedingungen so gewählt, daß die Streuebene eine $(1\bar{1}0)$ -Fläche und damit eine Symmetrieebene des Kristalls ist (Einschuß senkrecht zu den Ketten, $\varphi = 90^\circ$). Aus der Symmetriebedingung folgt, daß für den auslaufenden Strahl die Spinvorzugsrichtung \hat{p} senkrecht zur Streuebene steht ($\hat{p} \parallel \hat{n}_s$). Die resultierende Polarisation wird damit durch den Mott-Detektor voll erfaßt; denn seine Streuebene ist parallel zur Streuebene der Beugung gestellt (siehe 2.2). Ist die Streuebene keine Symmetrieebene des Kristalls, wird stets nur die Normalkomponente $P_\perp = \underline{P} \cdot \hat{n}_s$ gemessen (z.B. beim (11) -Strahl in Bild 16).

Bei niedrigen Intensitäten I_c eines kohärent gebeugten Strahls kann seine Polarisation P_c in der Messung durch Überlagerung eines inkohärent gestreuten Untergrundes verfälscht werden. Sind I_b, P_b Intensität und Polarisation des Untergrundes und wird für beide Strahlanteile eine gleiche Spinvorzugsrichtung \hat{p} angenommen, so folgt aus (10) für die Polarisation P des Gemisches

$$P = P_c \frac{1 + P_b I_b / P_c I_c}{1 + I_b / I_c} \quad (30)$$

Mit $P_b = 0$ ergibt sich daraus

$$P = P_c \frac{1}{1 + I_b/I_c} \quad (30a)$$

Der Winkelbereich des gebeugten Strahls, der für die Messung am Leuchtschirm ausgeblendet wird, ist konstant. I_c hängt daher von der Diffusität des Beugungsreflexes, die durch den Kristall bestimmt wird (siehe 2.4.2), sowie von der Stromdichte und Divergenz des einfallenden Strahls ab. I_b ist dagegen direkt proportional zum Kanonenstrom. Um den Untergrundeinfluß reproduzierbar zu halten und zu beschränken, wird die Elektronenkanone unter konstanten Arbeitsbedingungen mit nicht zu hohem Strahlstrom betrieben ($3 \mu\text{A}$ bei einer Strahlenergie von 50 eV und "kleiner" Streugeometrie im Mott-Detektor, $< 1,5 \mu\text{A}$ bei der "großen" Streugeometrie, siehe dazu 2.3.1). Eine Korrektur für den diffusen Untergrund wird nicht durchgeführt.

Die durch den Mott-Detektor gegebenen Genauigkeitsgrenzen der Polarisationsbestimmung sind bereits in den Abschnitten 2.3.1 und 2.3.2 diskutiert: Der Eichfehler für die "kleine" ("große") Streugeometrie liegt bei $\pm 5 \%$ ($\pm 10 \%$) vom angegebenen Polarisationswert, der Nullpunktsfehler bei $\pm 1 \%$ (absoluter Fehler). Bei der Darstellung der Ergebnisse sind diese Fehler nicht berücksichtigt; es werden stets nur statistische Fehler angezeigt. Zusätzlich zu den systematischen Meßfehlern enthalten die Darstellungen Ungenauigkeiten des Ausgabesystems.

3.3 Intensitätsbestimmung

Die Intensität gebeugter Strahlen enthält Information, die z.B. für den Vergleich zwischen Theorie und Experiment in Abschnitt 4.2 von Nutzen ist. Der experimentelle Aufbau ist jedoch nicht zum Messen der Intensitäten vorbereitet. Als Ersatz werden die Zählraten im Mott-Detektor verwendet. Sie geben Intensitäten nur qualitativ wieder; zwei Fehlerquellen wirken sich aus:

Nur ein kleiner, wechselnder Bruchteil der gebeugten Strahlen wird an dem Leuchtschirm ausgefädelt; denn der Akzeptanzwinkel ist kleiner als $0,5^\circ$ (siehe 2.2.3), während auf Grund der Fehlordnung der Oberfläche gebeugte Strahlen eine Diffusität mit Winkelbreiten bis zu 3° haben. Die Diffusität ändert sich dazu mit der Kristalltemperatur, der Streuenergie und dem Streuwinkel (siehe Wolf 1972, Wolf et al. 1977).

Längs seines Weges bis zur Streufolie durchläuft der Strahl zwei weitere Blenden, die Druckstufe und die Strahlblende vor der Streufolie (siehe Bild 4). An diesen Blenden geht ein weiterer Anteil der Intensität verloren. Er hängt von der Qualität der Strahljustierung ab, die über die für die Ausmessung einer Kurve notwendige Meßzeit (typisch 10 Stunden bei der meist verwendeten "kleinen" Streugeometrie) nicht konstant gehalten werden kann.

3.4 Parameter der Messungen

3.4.1 Meßprinzip

In der Regel werden die Messungen bei fester Energie durchgeführt, variiert wird die Orientierung der einfallenden und auslaufenden Strahlen zum Kristall. Die Meßkurven sind dann winkelabhängige Polarisations- bzw. Zählratenprofile.

Diese Meßmethode bringt Vorteile:

- a) Strukturen in Meßkurven, die von der Energie E abhängen, haben wegen der beschränkten elastischen Reichweite der Elektronen im Festkörper meist eine minimale Halbwertsbreite von 5-10 eV ($15 \text{ eV} < E < 100 \text{ eV}$, siehe Pendry (1974) S. 37), nur in Resonanzen sind schärfere Strukturen mit Halbwertsbreiten $< 1 \text{ eV}$ zu beobachten (siehe z.B. Adnot und Carette 1977, Henrich 1975, McRae und Caldwell 1976, siehe auch 4.1.2). Ein Fehler $\Delta E = 1 \text{ eV}$ in der Definition der Energie ist daher nicht sehr kritisch. Strukturen in winkelabhängigen Meßkurven sind dagegen vergleichsweise scharf; Änderungen des Einfallswinkels von 1° können z.B. Intensitäten stärker variieren als Energieverschiebungen von 1 eV (Sinharoy et al. 1972). Die Strahlenergien sind ohne Schwierigkeit auf 1 eV, Winkeländerungen auf $0,2^\circ$ genau zu bestimmen; absolute Winkelangaben mit einer Genauigkeit besser 1° erfordern dagegen im allgemeinen großen Aufwand (Aberdam et al. 1974); nur bei senkrechtem Einfall ist die Kontrolle durch Symmetriebedingungen erleichtert. Während sich in einer winkelabhängigen Messung der absolute Winkelfehler nur in einer Verschiebung der Kurve äußert und die Strukturen voll erfaßt werden, kann ein Fehler in der Winkelangabe von 1° eine energieabhängige Messung wertlos machen (siehe Abschnitt 4.2.3, Bild 22).
- b) In die Rechnungen zur Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen gehen der Energiegewinn der Elektronen beim Eintritt in den Kristall (Realteil V_{or} des inneren Potentials) und die Dämpfung der Elektronenwellen (Imaginärteil V_{oi} des inneren Potentials) als Parameter ein. Beide hängen von der Energie der einfallenden Elektronen ab (siehe z.B. Pendry 1974, für V_{or} : Jepsen et al. 1972, vergl. auch 4.2.3). Wird die Energie konstant gehalten, kann das innere Potential $V_o = V_{or} + iV_{oi}$ als Konstante optimiert werden⁺⁾ .

⁺⁾ Unter diesen Gesichtspunkten sind Rotationsdiagramme besonders günstig (Kirschner und Feder 1977).

3.4.2 Winkelangaben

In den winkelabhängigen Messungen wird der direkt erfaßbare Streuwinkel θ als variabler, der Azimut φ als fester Parameter benutzt (siehe Bild 12a, b). Im Gegensatz zu θ ist bei der verwendeten Beugungsanordnung der Einfallswinkel \mathcal{I}_0 nicht direkt ablesbar; um ihn zu erfassen, muß zusätzlich zu θ der Ausfallswinkel \mathcal{I} bestimmt werden. \mathcal{I}_0 ergibt sich dann aus der Beziehung $\mathcal{I}_0 = 180^\circ - (\theta + \mathcal{I})$. Die Verwendung von θ bringt im Abschnitt 4.1.1 bei dem Vergleich mit der Elektron-Atom-Streuung Vorteile, beim Bezug auf spezielle Richtungen im Kristall Nachteile.

Die angegebenen Winkel können durch magnetische Störfelder (das Erdfeld ist durch 3 Helmholtz-Spulenpaare kompensiert) und durch Justierfehler in der Beugungsanordnung (siehe 2.2.2) Fehler enthalten. Unter Berücksichtigung der Störfaktoren kann bei Streuenergien $E > 40$ eV für θ ein absoluter Fehler $\Delta\theta_{\text{abs}} = \pm 2^\circ$, und ein differentieller Fehler $\Delta\theta_{\text{diff}} = \pm 0,2^\circ$ angegeben werden. Der Fehler in φ liegt bei $\pm 1^\circ$ (siehe dazu 4.1.3).

3.4.3 Energie

Die Energie E wird stets als Potentialdifferenz zwischen der Heizfadenmitte - sie wird durch eine Widerstandskette simuliert - und dem Kristall, der mit dem Vakuumgefäß und dem ersten Netz leitend verbunden ist, gemessen. Kontaktpotentiale werden nicht kompensiert. Unter Berücksichtigung der Energiebreite der von der Glühkathode emittierten Elektronen (ca. 0,2 eV) ist als Schranke für den Fehler der Energieangabe $E = \pm 1$ eV anzusetzen ⁺⁾ .

⁺⁾ Bei Retardierung des Kristalls auf $U_K = 0,5$ V, U_K das Kathodenpotential, setzt die Spiegelung des einfallenden Strahls ein.

3.4.4 Kristalltemperatur und Kristallheizung

Die Kristalltemperatur wird über ein PtRh 10-Pt-Thermoelement bestimmt (siehe 2.2.2). Die Lötstellentemperatur wird an einem digital anzeigenden Temperaturmeßgerät mit einer absoluten Genauigkeit von ± 2 K und einer differentiellen Genauigkeit von etwa $\pm 0,2$ K direkt angezeigt (Doric Transicator Type 410). Die "wahre" Kristalltemperatur kann von der so gemessenen Temperatur abweichen, der Fehler wird für Temperaturen oberhalb von $T = 700$ K auf ± 20 K, für Temperaturen bis zu 400 K auf ± 5 K geschätzt. Der resultierende absolute Fehler der Temperaturangabe liegt damit unter ± 20 K. Temperaturmessungen im Bereich von $1000 - 1100$ K, die mit einem optischen Pyrometer (Pyrowerk Hannover) durchgeführt sind, liegen in dieser Schwankungsbreite.

Geheizt wird der Kristall bei fast allen Hochtemperaturmessungen in Gleichstrombetrieb. Magnetfelder des Heizstroms können über Strahlablenkung und Bildrotation Fehler in der Bestimmung des Streuwinkels θ und des Azimutwinkels φ auslösen, die mit steigender Temperatur zunehmen. Bei einer Kristalltemperatur von 730 K liegt der Fehler im Azimut bei etwa $1^\circ - 2^\circ$, im Streuwinkel ist er ebenfalls in dieser Größenordnung anzusetzen. Bei Messungen mit konstanter Temperatur sind diese Fehler ohne Bedeutung (siehe oben), symmetrische Messungen sind konsistent durchzuführen (siehe 4.2.3). Bei temperaturabhängigen Messungen an stark winkelabhängigen Strukturen können die Messungen jedoch verfälscht werden. Daher ist für die letzten Messungen dieser Arbeit, bei den Untersuchungen zum Ordnungs-/Unordnungsproblem (4.3), der Kristall im Pulsbetrieb geheizt worden. Für die Dauer der Heizperiode - sie umfaßt weniger als $1/10$ der Zykluszeit - werden dabei die Zählimpulse am Mott-Detektor nicht registriert.

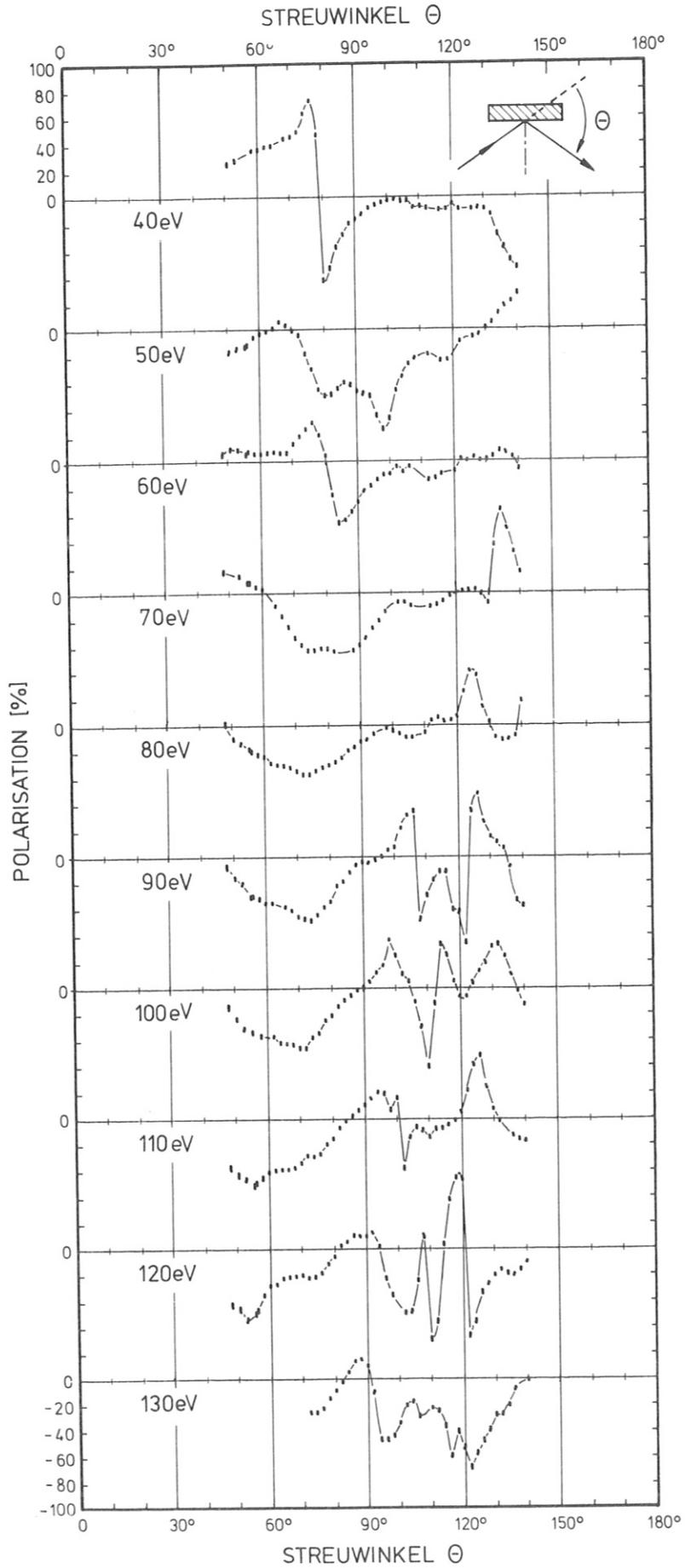
4. ERGEBNISSE UND DISKUSSION

In Abschnitt 4.1 wird zunächst an Hand einer Serie von Messungen gezeigt, daß signifikante Polarisierungseffekte existieren und Strukturen in der Spinpolarisation besonderen Kristallrichtungen zuzuordnen sind. Anschließend wird über zueinander symmetrische Messungen die Zuverlässigkeit der Ergebnisse demonstriert. In 4.2 werden Messungen an der Hochtemperaturphase der Oberfläche, die durch den Übergang zu dem (1x1)-Beugungsbild des Grundgitters gekennzeichnet ist, mit Rechnungen von R. Feder verglichen. In 4.3 schließlich wird das Temperaturverhalten der Spinpolarisation unter einigen ausgezeichneten Streubedingungen mit Blickrichtung auf den Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold(110)-Fläche untersucht.

4.1 Verhalten der Meßgröße "Spinpolarisation"

4.1.1 Energie- und Winkelabhängigkeit der Spinpolarisation - Dynamische Effekte -

Bild 13 zeigt für feste Energien $E = 40, 50, \dots, 130$ eV die Spinpolarisation des (00)-Strahls in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ . Die Streuebene steht dabei senkrecht zu den dichtest gepackten Ketten ($\varphi = 90^\circ$), die Kristalltemperatur ist 320 K. Deutlich treten signifikante Spinpolarisationseffekte hervor, Polarisationsgrade $|P|$ bis zu 80 % und scharfe Änderungen der Polarisation bei Variation des Streuwinkels θ sind zu beobachten. Bild 14 gibt zum Vergleich entsprechende Kurven für die Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen bei Energien $E = 50, 60, \dots, 100$ eV. Sie sind von Coulthard und Walker (1968) unter Benutzung eines statischen relativistischen Hartree-Potentials berechnet worden. Für die Streuung an Goldatomen ist nahezu dieselbe Abhängigkeit der Polarisation vom Streuwinkel θ zu erwarten, da die Kernladungszahlen von Gold ($Z = 79$) und



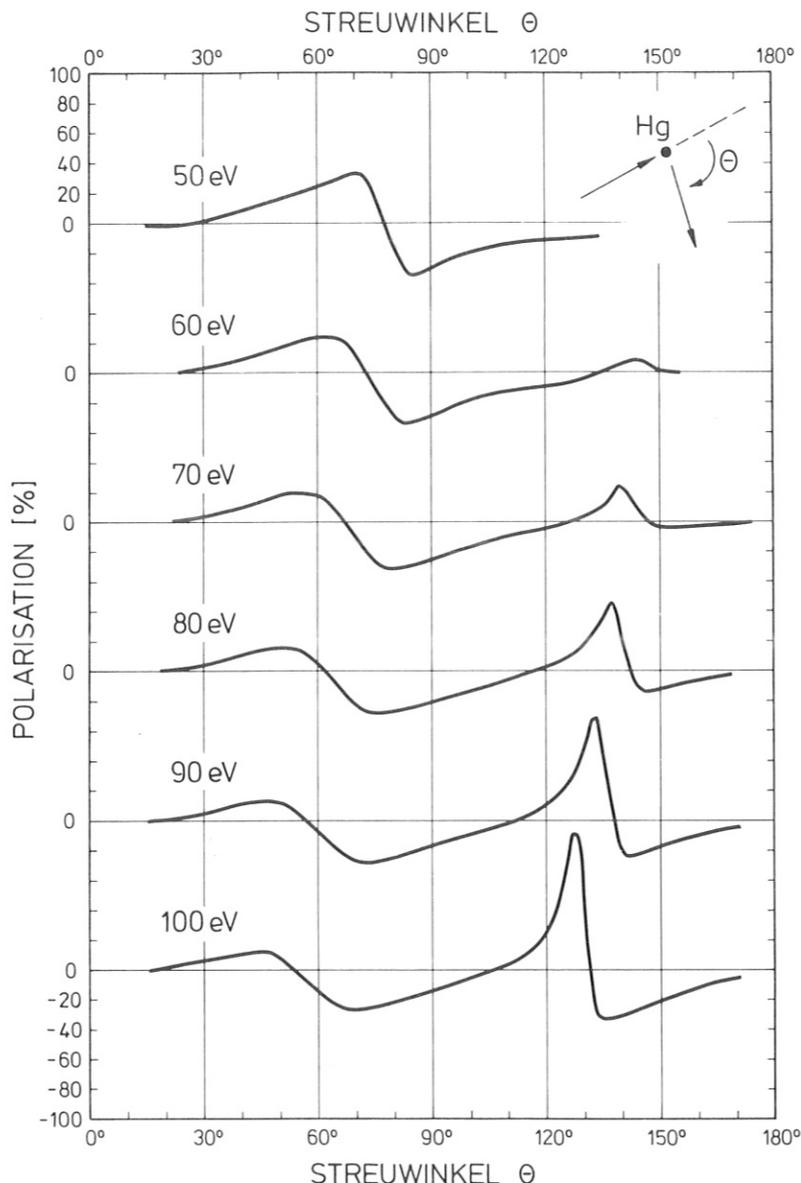


Bild 14: Spinpolarisation bei der Streuung von Elektronen an Quecksilberatomen (nach Rechnungen von Coulthard und Walker 1968).



Bild 13: Spinpolarisation des (00)-Strahls bei Einschluß senkrecht zu den dichtest gepackten Ketten der Gold-(110)-Oberfläche ($\phi = 90^\circ$). Bei festen Energien $E = 40, 50, \dots, 130$ eV ist der Streuwinkel θ variiert. Die Kristalltemperatur ist $T = \sim 320$ K. Die Meßpunkte enthalten nur die statistischen Fehler. Zusätzliche experimentelle Fehler sind: Streuwinkel $\pm 2^\circ$, Azimutwinkel $\pm 1^\circ$, Energie ± 1 eV, Nullpunktslage der Polarisation $\pm 1\%$, Eichung der Polarisation $\pm 5\%$ vom angegebenen Wert.

Quecksilber ($Z = 80$) benachbart sind. Zu der 100 eV-Kurve existiert eine Polarisationsmessung an Quecksilber von Eitel et al. (1967), die mit der Rechnung gut übereinstimmt; die Kurven aus Bild 14 stellen so die Verhältnisse der Elektron-Atom-Streuung zumindest qualitativ gut dar⁺).

Sind die Atome zu einem Festkörper kondensiert, wird ein gleiches Verhalten der Spinpolarisation zu erwarten sein, wenn zur Beschreibung der Beugung eine "kinematische" Theorie ausreicht, die Streuung an den Ionenrümpfen also von dem Gitteranteil abgetrennt und als Elektron-Atom-Streuung aufgefaßt werden kann (siehe 1.2.3). Für den Vergleich ist das (reale) innere Potential V_{or} - für die Gold-(110)-Fläche liegt es zwischen 10 und 14 eV - und die Brechung an der ihm zugeordneten Potentialschwelle in der Grenzfläche Kristall-Vakuum zu berücksichtigen: die Streuenergie E ist um V_{or} zu erhöhen, der Streuwinkel θ entsprechend dem Brechungsgesetz für den Einfallswinkel ϑ_0 bzw. den Ausfallswinkel ϑ

$$\frac{\sin \vartheta'}{\sin \vartheta} = \frac{\sin \vartheta'_0}{\sin \vartheta_0} = \frac{\sqrt{E + V_{or}}}{\sqrt{E}} \quad (31)$$

zu korrigieren. ϑ'_0 und ϑ' sind dabei die Winkel im Kristall.

Ein grober Vergleich der Meßkurven in Bild 13 mit den Polarisationskurven für eine um 10 eV erhöhte Energie in Bild 14 zeigt, daß ein kinematisches Modell die Effekte

⁺) Für die Intensität ist diese Aussage von Eitel et al. (1968) geprüft, Die Streuung von Elektronen an Goldatomen ist für 50, 75, 150 eV von Fink und Yates (1969) berechnet. Für die Streuung von Elektronen an den Ionenrümpfen eines Goldkristalls hat Feder (1977 b) eine Höhenlinienverteilung errechnet. Beide Rechnungen sind für einen Vergleich jedoch ungünstig: bei der ersten sind die Energieabstände zu groß, die zweite liegt nicht in geeigneter Form vor.

der Spinpolarisation bei der Beugung nicht zutreffend beschreibt. Bei einigen Energien gilt es jedoch näherungsweise; z.B. wird der Verlauf der Meßkurven für $E = 70$ eV und $E = 80$ eV durch die Polarisationskurven der Elektron-Atom-Streuung für $E = 80$ eV bzw. $E = 90$ eV angenähert wiedergegeben. Einige kräftige Strukturen sind überlagert. Zur Verdeutlichung ist in Bild 15 eine detaillierte winkelabhängige Messung der Polarisation im (00)-Strahl bei $E = 70$ eV, $\varphi = 90^\circ$ dargestellt (gleiche Parameter wie in Bild 13). Sie wird mit 80-eV-Kurven der Elektron-Atom-Streuung verglichen, in denen einmal die Brechung an der Potentialbarriere mit $V_{or} = 10$ eV gemäß (31) berücksichtigt ist, das andere Mal nicht.

Bei der Gegenüberstellung der Kurven fällt auf, daß unter Einschluß der Brechung (Kurve b) die Lage des gemessenen Polarisationsmaximums bei dem Streuwinkel $\theta = 132^\circ$ durch den Einzelstreuprozeß gut wiedergegeben wird, unter Vernachlässigung der Brechung (Kurve a) der Nulldurchgang bei $\theta \approx 60^\circ$. Das Zusammenfallen der Maximumlagen kann zufällig sein; denn in der gemessenen Kurve enthält der Winkelbereich mit $\theta > 130^\circ$ starke Änderungen der Polarisation, die nur durch dynamische Streuprozesse zu erklären sind. Allerdings gibt ein Vergleich der Messung am (00)-Strahl bei 80 eV (Bild 13) mit einer für die Brechung korrigierten 90 eV-Kurve der Elektron-Atom-Streuung bei $\theta \approx 125^\circ$ eine ähnlich gute Übereinstimmung der Maximumlagen.

Der bei $\theta = 60^\circ$ gemessene Nulldurchgang der Polarisation erfordert zu seiner Erklärung durch Einfachstreuprozesse eine besondere Form der Oberflächenbarriere; sie darf in der Nähe von $\theta = 60^\circ$ keine Verschiebung der Winkel durch Brechung ergeben. Nach Smoluchowski (1941) folgt bei einer (rauh) (110)-Oberfläche die Elektronenverteilung nur beschränkt der Anordnung der Atome. An den in der Oberfläche

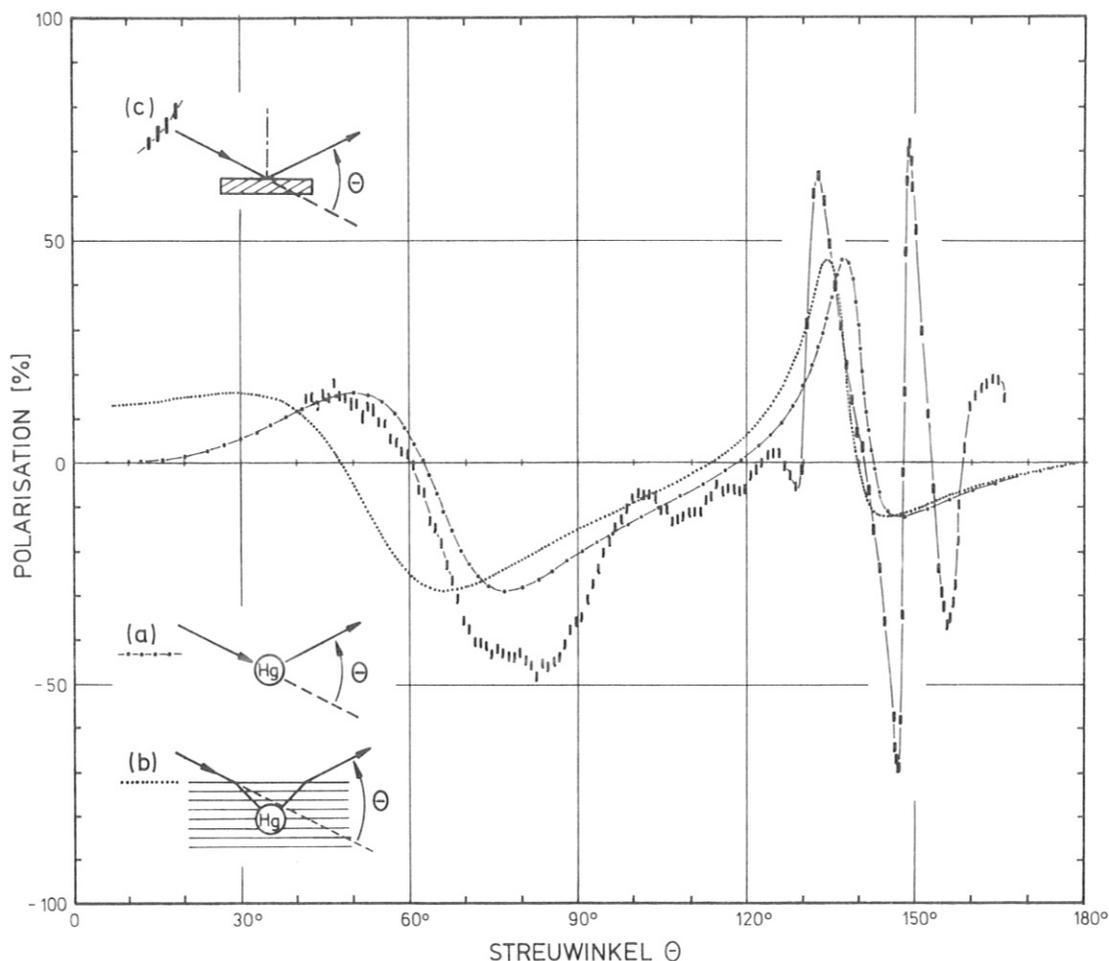


Bild 15: Vergleich von Polarisierungseffekten bei der Elektron-Atom-Streuung und der Beugung:

Kurve (a) gibt die vom Streuwinkel Θ abhängige Polarisierung für die Streuung an Quecksilber bei der Energie $E = 80$ eV nach Rechnungen von Coulthard und Walker (1968).

In Kurve (b) sind die Winkel entsprechend der Brechung eines 70 eV-Strahls an einer Oberflächenbarriere mit $V_{Or} = 10$ eV korrigiert.

Kurve (c) zeigt die Messung für den (00)-Strahl bei $E = 70$ eV, $\psi = 90^\circ$ und $T \approx 320$ K (Meßfehler wie bei Bild 13).

liegenden dichtest gepackten Ketten ist daher die positive Ladung der Ionenrümpfe durch das Elektronengas nicht voll kompensiert; in den Mulden zwischen den Ketten ist dagegen ein Elektronenüberschuß vorhanden (siehe Bild 16, vergleiche auch Besocke et al. 1977). Entsprechend ist eine wellige Potentialbarriere anzusetzen, mit der bei Einfallswinkeln um 60° die Brechung für die am Kristall gestreuten Elektro-

nen vernachlässigbar sein könnte (die Elektronen werden im wesentlichen an den oberen, dichtest gepackten Ketten gestreut, siehe Abschattungseffekte in Abschnitt 4.2.4).

Aus dem Verhalten dieser einen Meßkurve für den (00)-Strahl bei 70 eV darf jedoch nicht gefolgert werden, daß bei flachem Einfall Einzelstreuereprozesse vorherrschen ⁺); denn bei

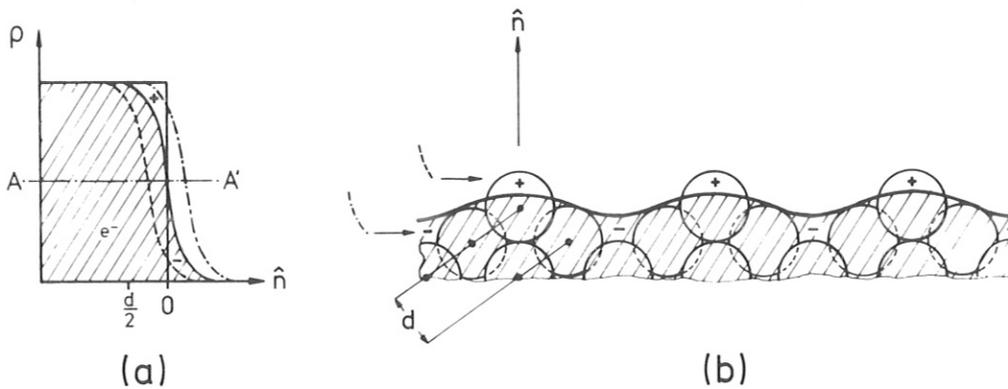


Bild 16: Elektronenverteilung an der rauhen Gold-(110)-Oberfläche, qualitative Darstellung in Anlehnung an Smoluchowski (1941): (a) "Verschmierung" (spreading) der Elektronendichte an der Grenzfläche für eine "Ecke" (---), für eine "Mulde" (-.-.-.) und für die Mitte einer (111)-Facette (—), die Rechteckverteilung gibt die Dichte der positiv geladenen Ionenrümpfe. \hat{n} ist die Oberflächennormale. (b) "Glättung" (smoothing) der elektronischen Oberfläche. Die dicke Wellenlinie veranschaulicht die Gleichgewichts-Ladungsverteilung (Schnitt längs AA' senkrecht zur Zeichenebene in (a)).

den benachbarten Energien 60 eV und 80 eV weichen die gemessenen Lagen der Nulldurchgänge deutlich von denen der zugeordneten 70 eV- und 90 eV-Atomstreuerekurven ab (vergleiche Bilder 13 und 14). Außerdem sind die in der Messung gefundenen Polarisationsgrade im Vergleich zu denen der Elektron-Atom-Streuung zu groß.

⁺) Calvert et al. (1977) leiten dieses Verhalten aus einer (ungeeigneten) Meßkurve ab, die sie einem Vorabdruck über einen Bestandteil dieser Arbeit ohne Erlaubnis entnommen haben.

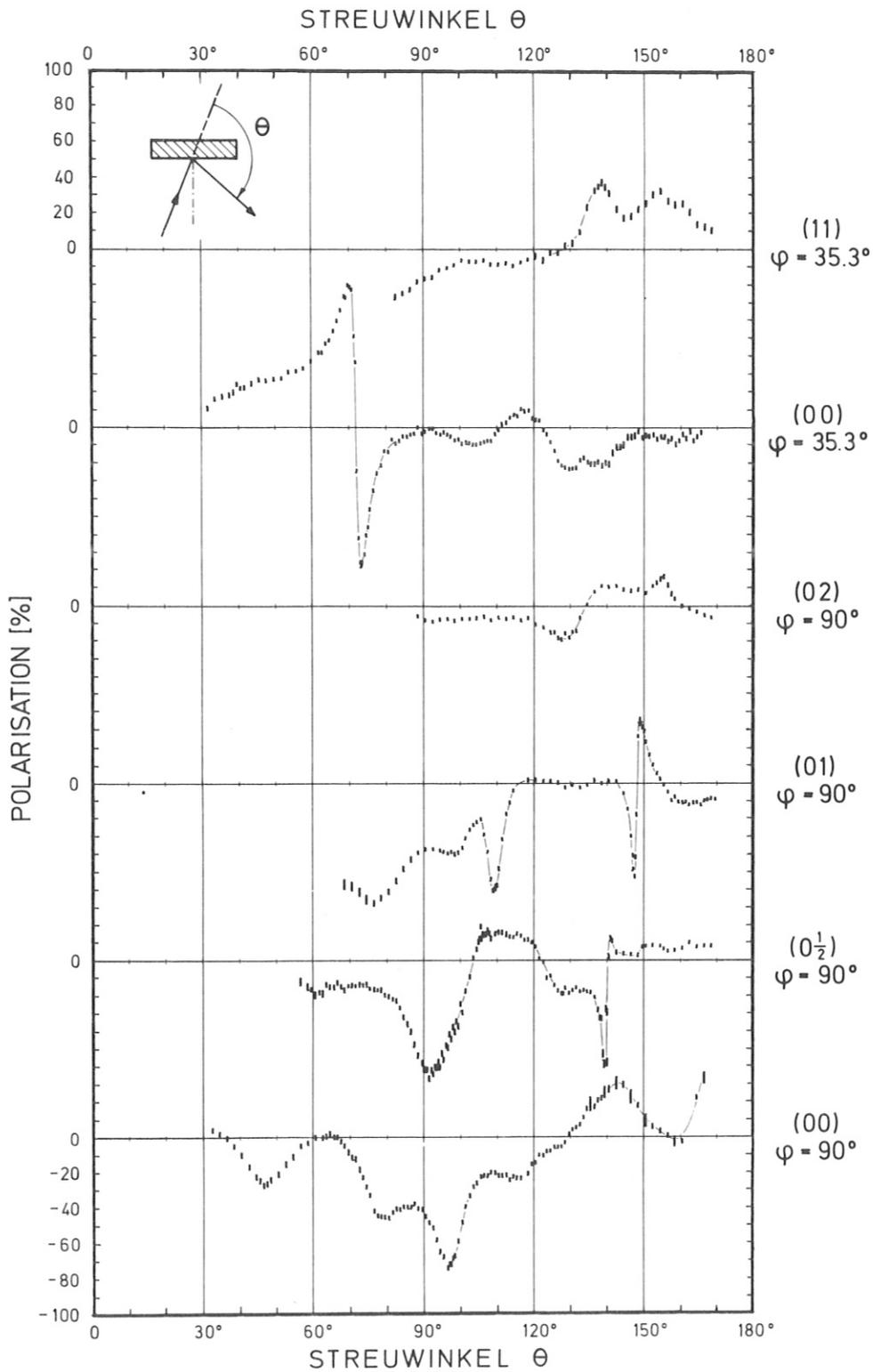


Bild 17: Polarisation als Funktion des Streuwinkels θ für verschiedene Strahlen bei konstanter Primärstrahlenergie $E = 50$ eV und fester Temperatur $T = 320$ K (experimentelle Fehler siehe Bild 13)

Wie stark dynamische Streuprozesse die Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen beeinflussen, wird besonders deutlich durch Bild 17 gezeigt: In ihm sind Polarisationskurven dargestellt, die bei fester Energie E und bei festem Azimut $\varphi = 90^\circ$ oder $\varphi = \sim 35^\circ$ an verschiedenen Strahlen in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ gemessen sind. ($\varphi = 35,3^\circ$ entspricht der 11-Richtung im reziproken Gitter). Würde die kinematische Näherung gelten, müßte die Polarisation entsprechend (26) für jeden beobachteten Strahl bei gleichem Streuwinkel θ den gleichen Wert annehmen; die Unterschiede zwischen den gemessenen Polarisationskurven sind jedoch kraß.

In der Elektron-Atom-Streuung sind Extrema und Nulldurchgänge der Spinpolarisation stets einem relativen Minimum in dem differentiellen Wirkungsquerschnitt zugeordnet (siehe 1.2.2). Die Frage taucht auf, ob bei der Beugung eine entsprechende Korrelation mit der Intensität existiert. Jennings und Sim (1972) folgern aus dem kinematischen Modell, daß für dieses keine Zuordnung dieser Art besteht, und erweitern diese Aussage auch auf die Beugung unter Einschluß der Mehrfachstreuung. Bei der Durchführung der dargestellten Messungen ist die Intensität nicht systematisch erfaßt worden (siehe 3.3); jedoch vermitteln alle Experimente den Eindruck, daß in den gebeugten Strahlen die Polarisationsmaxima stets in der Nähe von relativen Minima der Intensität auftreten. Absolut kann die Intensität dabei durchaus groß sein (siehe dazu Bild 18).

Die scharfen Änderungen in der gemessenen Polarisation, die in vielen Winkelbereichen auftreten, demonstrieren, wie stark Winkelfehler energieabhängige Messungen verfälschen können (siehe 3.4.1). Zusammenhänge zwischen auffallenden Minimum-Maximum-Strukturen in den Polarisationskurven und Richtungen im Kristall werden im nächsten Abschnitt behandelt.

Nr.	Energie E [ev]	Strahl	Bild	Azimit- winkel φ [grd]	Streuwinkel θ [grd]	Einfallswinkel φ_0 [grd]	Ausfallswinkel φ [grd]	Strahlaustritts- schwelle (Einfall mit φ_0)	Strahlaustritts- schwelle bei reziproken Ein- fall mit φ
1	50	$0\frac{1}{2}$	13	90	91	36	52	01	$0\frac{1}{2}$
2	50	01	13	90	109	20	51	$0\frac{3}{2}$	$0\frac{1}{2}$
3	50	02	(13)	(90)	(129)	(-2)	(54)	$0\frac{5}{2}$	$0\frac{1}{2}$
4	40	00	10	90	78	51	51		
5	60	00	10	90	79	51	51		
6	50	00	10,13	90	96	42	42	$0\frac{5}{2}$	$0\frac{7}{2}$?
7	50	01	13	90	147	3	29	?	
8	70	00	12	90	147	16	16	02	
9	50	00	13	35	72	54	54	01	?

Tabelle 1:

Streuparameter einiger auffallender Strukturen in den winkelabhängigen Polarisationskurven. Bei schwächeren Strukturen sind die Werte eingeklammert. Fehler der absoluten Winkelangaben liegen bei ± 20 . In den beiden letzten Spalten sind zugeordnete Strahlaustritte angegeben (für Einfall mit φ_0 und für die reziproke Streubedingung, bei der Einfall und Ausfall vertauscht sind).

4.1.2 Korrelation mit Gitterrichtungen

- Resonanzen -

Einige auffallende Strukturen in den Polarisationskurven, die alle auf einen starken Einfluß von Mehrfachstreuungsprozessen hinweisen, seien näher betrachtet.

In der Tabelle 1 sind Streuparameter auffallender Extrema und scharfer Nulldurchgänge aus den Messungen, die in den Bildern 13, 15 und 17 enthalten sind, zusammengestellt. Die unübersichtlichen Oszillationen für die Kurven mit Energien ≥ 90 eV sind dabei nicht berücksichtigt.

In allen aufgeführten Beispielen liegt die Struktur der Polarisationskurve in der Nähe eines relativen Minimums der Intensität. Minima (und auch Maxima) in der Intensität einzelner Strahlen oder in dem gesamten Rückstreuvermögen des Kristalls können entstehen, wenn für gewisse Streuparameter (quasistationäre) Eigenzustände im Kristall resonant angeregt und dadurch die Amplituden der gestreuten Wellen verändert werden (siehe z.B. Pendry 1974, S. 109). Bevor die Tabelle 1 näher diskutiert wird, seien diese Anregungen kurz behandelt:

Elektronenzustände im Kristall sind in dem Energiebereich von 30 - 200 eV, in dem bei der Beugung "niederenergetischer" Elektronen an Oberflächen gearbeitet wird, durch inelastische Wechselwirkungen mit dem Elektronengas stark gedämpft. In der Nähe der Kristalloberfläche ist die Dichte der Elektronen niedriger als im Kristallinnern (siehe Bild 16). Entsprechend werden Zustände, die an die Kristalloberfläche gebunden sind, schwächer gedämpft und können merkbar resonant angeregt werden (McRae und Caldwell 1967, McRae 1971, Sinharoy et al. 1972, Bedell und Farnsworth 1973, Henrich 1975, Adnot und Carette 1977, McRae et al. 1977 u.a.).

Änderungen in der Intensität gebeugter Strahlen, die von Resonanzen abhängen, können beobachtet werden,

- (a) wenn die Schwelle für den Austritt eines Strahls ins Vakuum erreicht wird ("Strahl-Schwellen-Effekt", Gersten und McRae 1972). An der Austrittsschwelle gilt für als frei betrachtete Elektronen

$$k_{\perp}^2 = k^2 - |k_{\parallel} + g_{ij}|^2 = 0 \quad (31)$$

k_{\perp} ist dabei die Komponente des Wellenvektors \underline{k} in Richtung der Oberflächennormalen, k_{\parallel} die in der Oberfläche liegende Komponente von \underline{k}_0 , \underline{g}_{ij} ein Vektor des zweidimensionalen, reziproken Gitters (siehe Bild 10) und $k = |\underline{k}| = |\underline{k}_0| = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2mE}$ (E die Energie, m die Masse der Elektronen).

- (b) wenn die Elektronen in Eigenzustände der obersten Netzebene (Atomlage) des Kristalls hineingestreuert werden ("in plane"-Resonanz, McRae 1966, Kambe 1970). Für diese Zustände verschwindet wie an der Austrittsschwelle der Teilchenstrom senkrecht zur Oberfläche*).
- (c) wenn Oberflächenzustände, die zwischen der obersten Netzebene und der äußeren Oberflächen-Potentialbarriere gebunden sind, angeregt werden. Für Elektronen in diesen Zuständen liegt die Energie einerseits unterhalb der Schwellenergie für den Austritt ins Vakuum (siehe a), andererseits liegt sie in einer Bandlücke des Kristalls (also oberhalb der Energie einer "in plane"-Resonanz (b)). Sie werden daher an der Oberflächenbarriere und - bei Ver-

*) Falls auch hier die Elektronen als frei betrachtet werden, muß wie im Fall (a) die Komponente des Wellenvektors senkrecht zur Oberfläche verschwinden. Dabei ist der Energiegewinn in der Oberflächen-Potentialbarriere zu berücksichtigen. Wie in 31 gilt dann

$$k'_{\perp}{}^2 = k'^2 - |k'_{\parallel} + g_{ij}|^2 = 0 \quad (31^*)$$

wobei $k' = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(E+V_{or})}$ der Betrag des Wellenvektors \underline{k}' in der obersten Atomlage, k'_{\perp} seine Komponente senkrecht zur Oberfläche und V_{or} der Realteil des inneren Potentials ist.

nachlässigung inelastischer Effekte - auch an der obersten Netzebene vollständig reflektiert. Ihre Energie liegt dabei in der Regel knapp unter der, die der Austrittsbedingung (31) für einen gebeugten Strahl entspricht (Oberflächen-Barrieren-Resonanz, Hirabayashi 1968, McRae 1971).

Alle Resonanzarten können durchlaufen werden, wenn entweder die Streuerenergie E oder die Orientierung des Kristalls zum einfallenden Strahl variiert wird. Sie rufen dann deutliche Änderungen in der Intensität gestreuter Strahlen hervor. Dabei schwächen sie die Amplitude eines gebeugten Strahls oder verstärken sie, indem sie Partialwellen entziehen oder zuführen.

Die Energiebreite Γ der Resonanzen (Halbwertsbreite) hängt von der Dämpfung der beteiligten Zustände ab. Für Energien E unter der Anregungsschwelle für Plasmonen liegt Γ stets unter 1 eV, für größere Energien kann Γ bis auf 20 eV anwachsen (siehe z.B. McRae 1971, Sinharoy 1972, Bedell und Farnsworth 1973, Adnot und Carette 1977, McRae et al. 1977). Werte von Γ unterhalb von 1 eV sind an der Austrittsschwelle auch für Energien E oberhalb der Plasmonen-Anregungsschwelle zu beobachten (siehe Henrich 1975).

Ausgeprägte Minima in Intensitätskurven sind in der Regel durch Resonanzen verursacht. Die eindeutige Zuordnung zum Austritt bestimmter Strahlen bzw. zur Anregung einzelner Zustände ist jedoch nur bei ausführlicher Untersuchung ihres Verhaltens unter Änderung der Beugungsbedingungen möglich (siehe z.B. Sinharoy et al. 1972).

Im Hinblick auf Polarisierungseffekte sind scharfe und tiefe Resonanzminima der Intensität von besonderem Interesse. Spalten sie infolge von Spin-Bahn-Wechselwirkung auf oder existieren sie nur für eine Spinkomponente, sind in ihrer Nähe ähnlich wie bei der Elektron-Atom-Streuung auffallende Polarisationsstrukturen zu erwarten (vergleiche 1.2.2). Jennings (1971 b) hat in Rechnungen für eine Oberflächen-Barrieren-

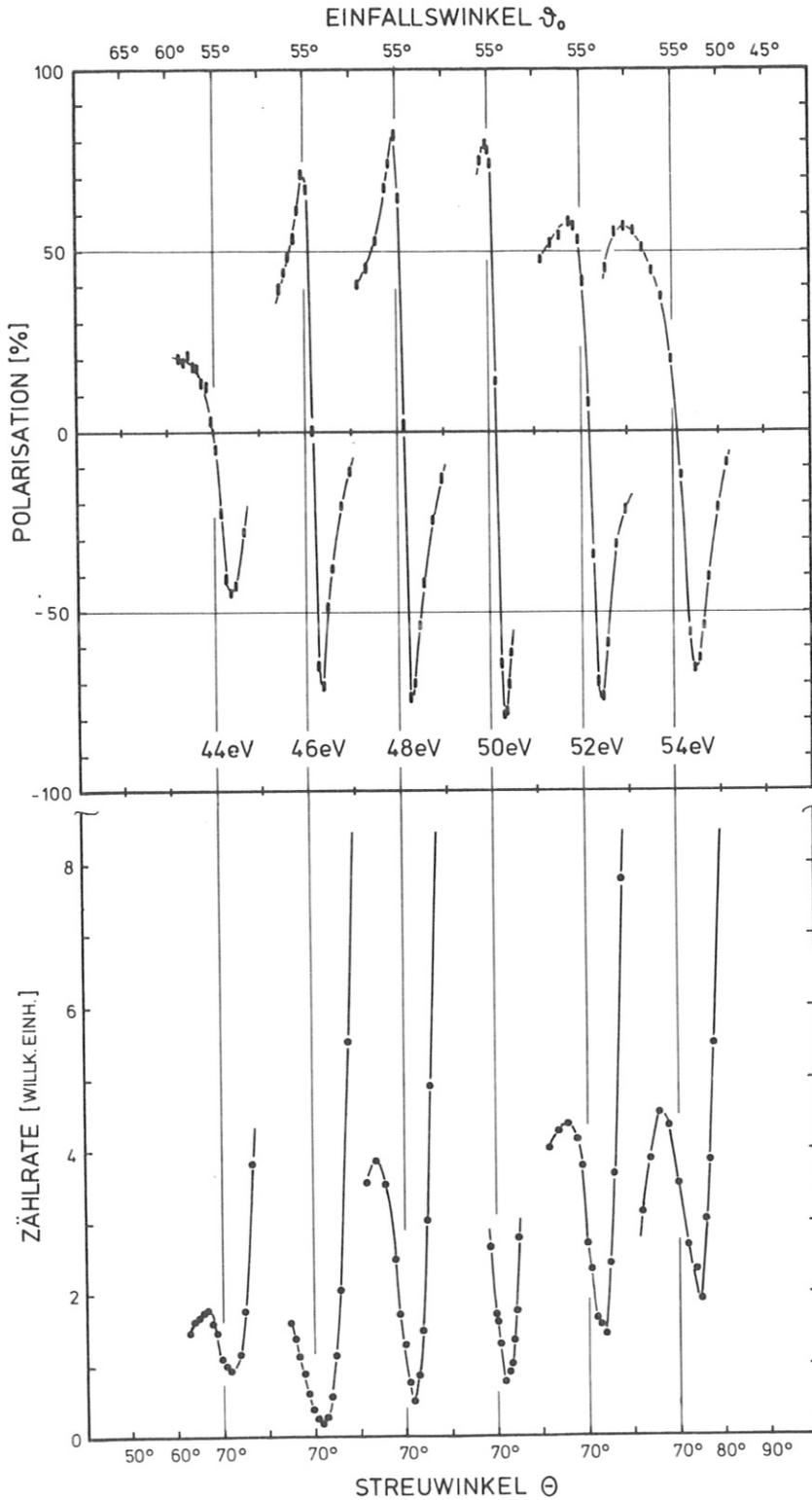


Bild 18: Beispiel für ein Resonanzminimum der Intensität (Zählrate) und für die zugeordnete Polarisationsstruktur. Untersucht ist der (OO)-Strahl mit dem Azimut $\varphi \approx 35^\circ$ (Beispiel 9 aus Tabelle 1).

resonanz an einer Kupfer-(001)-Oberfläche entsprechende Effekte gefunden; für die eine Spinkomponente hat er ein tiefes Minimum und ein nachfolgendes Maximum der Intensität als Funktion der Energie erhalten, für die andere Spinkomponente dagegen einen glatten Kurvenverlauf.

Die in Tabelle 1 angegebenen Beispiele weisen darauf hin, daß mit Resonanzen verkoppelte Polarisierungseffekte auch in Messungen auftreten. Deutlich ist in Bild 18 - es zeigt Spinpolarisation und Zählrate (Intensität) bei Variation der Streubedingungen für das Beispiel 9 - die Zuordnung der Polarisationsstruktur zum Zählratenminimum zu erkennen. Eine Korrelation mit einem austretenden (01)-Strahl könnte existieren, sie ist jedoch den Messungen nicht eindeutig zu entnehmen.

Der Änderung ΔE der Streuenergie E müßte, falls eine der Beziehungen (31a) oder (31b) gilt, eine Änderung $\Delta \vartheta_0$ des Einfallswinkels ϑ_0 entsprechen. Für sie folgt nach Einsetzen von $E + \Delta E$ und $\vartheta_0 + \Delta \vartheta_0$ in (31a) oder (31b)

$$\Delta \vartheta_0 \approx \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} \frac{(1 - \sin \vartheta_0)}{\cos \vartheta_0} \quad (32)$$

Mit $\Delta E = 2 \text{ eV}$, $E = 50 \text{ eV}$, $\vartheta_0 = 54^\circ$ ergibt sich aus (32) $\Delta \vartheta_0 \approx 0,4^\circ$. Eine systematische Verschiebung der Extrema der Polarisierung und ihrer Nulldurchgänge in dieser Größe ist in den Messungen nicht zu erkennen. Zusätzlich fällt auf, daß die symmetrische Resonanzform nur in einem engen Energiebereich existiert. Ein ähnliches Verhalten von Resonanzstrukturen haben Adnot und Carette (1977) bei Intensitätsmessungen beobachtet.

Wenn die hier gefundenen Polarisierungseffekte auf eine Aufspaltung einer Resonanz zurückzuführen wären, könnte aus der Winkeldifferenz zwischen dem Maximum und dem Minimum der Polarisierung über (32) eine obere Schranke von etwa 3 eV für

die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie bestimmt werden. Die fehlenden energieabhängigen Verschiebungen der Kurven weisen jedoch darauf hin, daß entweder keine einfache Aufspaltung existiert, oder daß apparative Effekte (Energieunschärfe, Winkeldivergenz des Strahls) einen zu großen Winkelabstand der Extrema vortäuschen.

Für einige der Beispiele in Tabelle 1 ist die Austrittsschwellenbedingung (31a) für die in den beiden letzten Spalten angegebenen Strahlen gut erfüllt; trotzdem wären für eine sichere Zuordnung ausführlichere Messungen unter Variation der Winkel und der Energie nötig (siehe Sinharoy et al. 1972). In der Gruppe der Beispiele 1-5 der Tabelle 1 fällt auf, daß die Ausfallswinkel jeweils nahezu gleich sind, obwohl die Energie verändert wird. Der Ausfallswinkel liegt für alle 5 Streubedingungen in der Nähe des Neigungswinkels von $54,7^\circ$ der (111)-Facetten der rauhen Gold-(110)-Oberfläche (siehe Bild 10). Für die Streubeispiele 4 und 5 ist es nicht gelungen, eine zugeordnete Strahlaustrittsschwelle zu finden. Der Strahlfluss längs der (111)-Facetten könnte daher bei allen fünf Streubedingungen die resonanzartigen Strukturen hervorrufen. (Dieser besondere Strahlfluss wird in Abschnitt 4.2.4 ausführlicher diskutiert).

Zusammenfassend gesehen, ergibt sich aus den hier dargestellten Ergebnissen, daß in Resonanzen auffallende Polarisierungseffekte existieren. Für ein genaueres Verständnis müßte jedoch einerseits ausführlicher gemessen, andererseits die Theorie weiter entwickelt werden. Interessant für eine Anwendung in einem Polarisationsdetektor ist, daß als Funktion des Einfallswinkels relativ breite Polarisationsmaxima am Rand von breiten Intensitätsmaxima auftreten können (siehe Bild 18, Kurven für 52 eV und 54 eV).

4.1.3 Reproduzierbarkeit der Effekte bei Symmetrie-Operationen - Reziprozität -

Die stark strukturierten Polarisationsprofile lösen die Frage aus, wie zuverlässig die Messungen sind.

Wird vorausgesetzt, daß der Kristallzustand stets reproduzierbar ist, bleiben nur systematische Fehlerquellen, z.B. Fehljustierungen der Beugungsanordnung oder magnetische Störfelder. Um Störungen zu erkennen, können Symmetrieoperationen ausgenutzt werden, die die Polarisierungseffekte nicht ändern. Geeignet sind

- a) die Spiegelung S in der Streuebene an dem auslaufenden Strahl (siehe Bild 19)

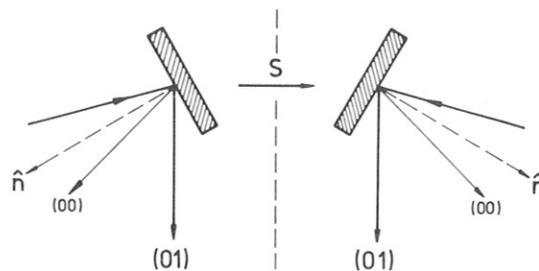


Bild 19: Spiegelung S in der Streuebene

Sie ist in der Beugungsanordnung zu realisieren, da die Kanone in einem zum auslaufenden Strahl teilweise symmetrischen Winkelbereich bewegt werden kann (siehe 2.2) und da die Kristalloberfläche selbst zweizählige Symmetrie hat. Die Spinvorzugsrichtung \hat{p} bleibt bezogen auf den Vektor $\hat{p} = \hat{n}_S = \frac{[\underline{k}_O \times \underline{k}]}{|\underline{k}_O \times \underline{k}|}$ erhalten, im Raum geht sie in antiparallele Richtung über.

- b) Die Zeitumkehr T : der einfallende und auslaufende Strahl werden miteinander vertauscht (Woodruff und Holland 1970, Lagally et al. 1971). Bei der Zeitspiegelung bleibt die Spinvorzugsrichtung ebenfalls bezüglich $\hat{p} = \hat{n}_s = [\underline{k}_0 \times \underline{k}] / |\underline{k}_0 \times \underline{k}|$ erhalten.

Einfallender und auslaufender Strahl können in diesem Experiment nicht miteinander vertauscht werden. Möglich ist jedoch, den Strahlweg einer Zeitspiegelung durch eine Drehung D des Kristalls einzustellen. Bild 20 gibt ein Schema der dazu notwendigen Symmetrieoperationen; bei ihnen ist wieder die zweizählige Symmetrie des Kristalls ausgenutzt. Für einen (00)-Strahl folgt bei Ausführung dieser Operationen die Identität.

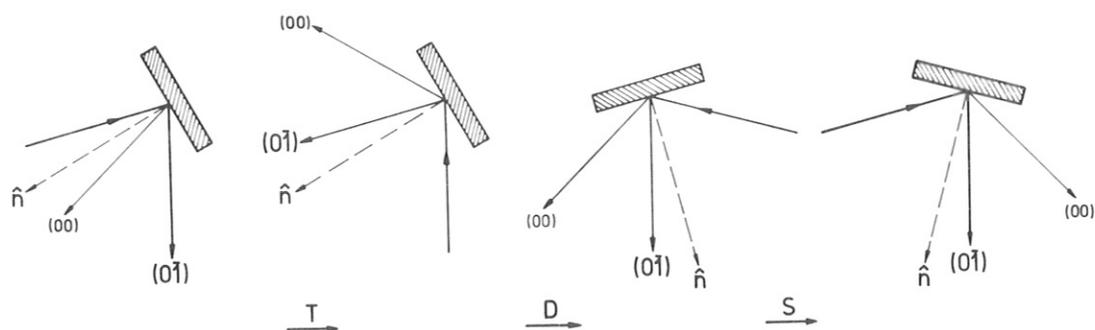


Bild 20: Anwendung der Zeitspiegelung T im Experiment

Bild 21 zeigt Polarisationsprofile $P(\theta)$ für den (01)- bzw. (01)-Strahl, die mit vier möglichen äquivalenten Strahl-läufen gemessen sind. Die erzielte Übereinstimmung ist überraschend gut, sie ist besser als die, die in Intensitätsmessungen zum Reziprozitätstheorem von Lagally et al. (1971) erreicht worden ist.

Die Kurvenpaare, bei denen der Strahlweg konstant gehalten worden ist, sind die Kurven 1 und 2 bzw. 3 und 4 (Operation TDS) die Paare, die spiegelsymmetrisch gemessen sind, die Kurven 1 und 3 bzw. 2 und 4 (Operation S). Die Kurven 1 und 3 stimmen quantitativ innerhalb der statistischen Fehler überein, zwi-

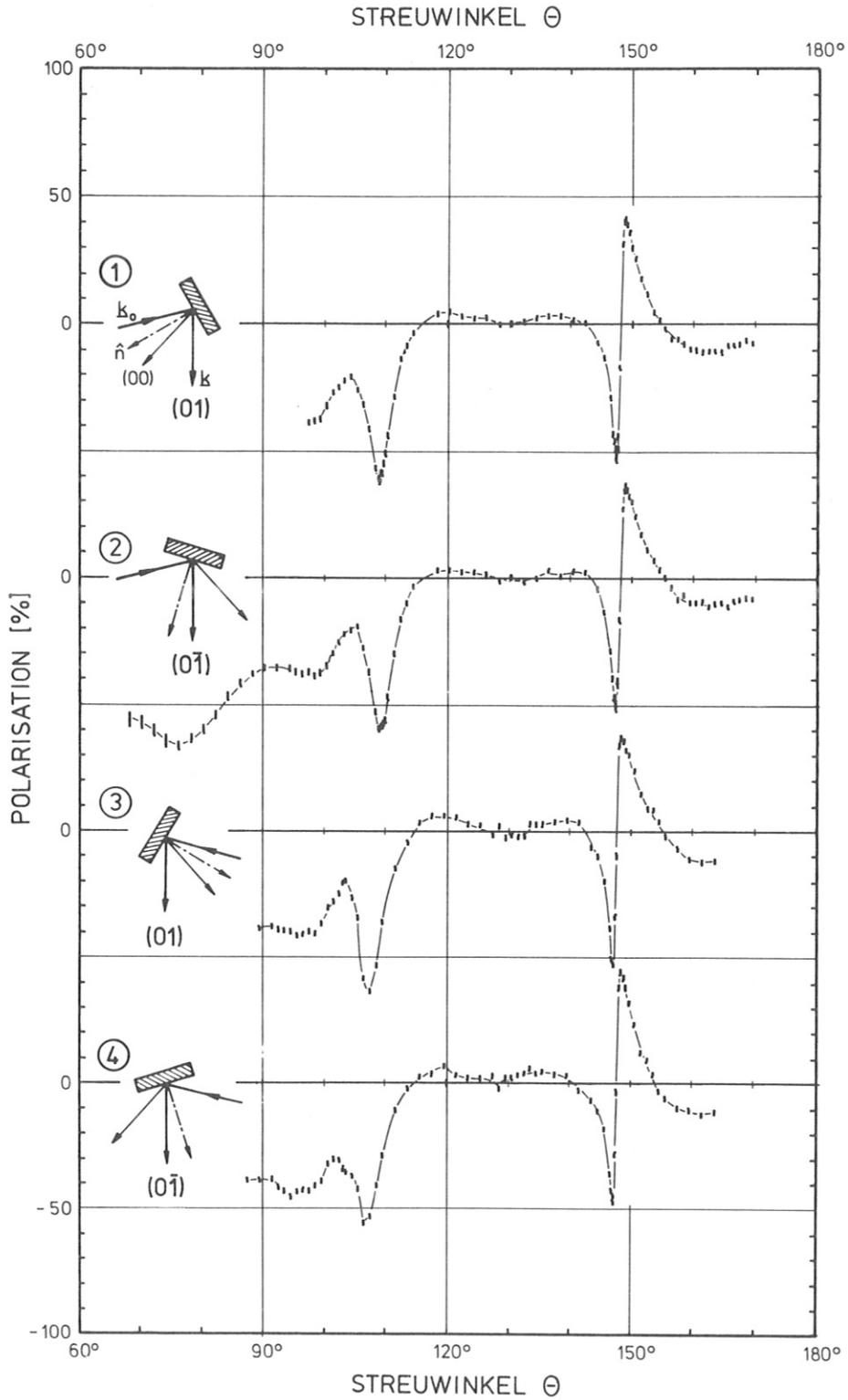


Bild 21: Symmetrie-Messungen zur Kontrolle apparativer Fehler (siehe Text)

schen den Kurven 2 und 4 treten in den Polarisationspitzen Abweichungen auf, die auf Fehler in der Justierung des Beugungssystems schließen lassen. Die Kurven 1 und 2 bzw. 3 und 4 zeigen bei dem Polarisationsminimum in der Nähe von $\theta = 110^\circ$ eine Winkeldifferenz $\Delta\theta = 2^\circ$. Dieser Fehler kann sowohl durch magnetische Störfelder als auch durch Ungenauigkeiten in der Justierung der Apparatur ausgelöst sein. Z.B. ist die Justierung des Primärstrahls zur Achse des Kanonenmanipulators fehlerhaft; die Abweichung liegt bei etwa 1 mm. Der Auftreffbereich des Primärstrahls auf dem Kristall ändert sich damit, Winkelfehler können entstehen - besonders bei streifendem Einfall. Der streifende Einfall ist prinzipiell problematisch, da die vom Strahl getroffene Fläche mit $1/\cos \vartheta_0$ wächst. Da die Kristalloberfläche nicht ideal ist, bricht dieser Effekt einerseits die T-Symmetrie in einem realen Experiment, andererseits verfälscht er winkelabhängige Meßreihen. Ein Zusammenwirken dieses Fehlers mit Justierfehlern kann für das Auffüllen der Mulde (Absenken des Maximums) bei $\theta \approx 105^\circ$ in der Kurve 4 verantwortlich sein. Es könnte günstig sein, winkelabhängige Kurven aus Teilstücken mit zueinander reziproken Strahlläufen zusammensetzen, für die ϑ_0 stets kleiner 50° gehalten wird.

Insgesamt zeigt das hier gebrachte Beispiel die hohe Zuverlässigkeit der Ergebnisse; trotz des einfachen, gewiß nicht optimalen experimentellen Aufbaus sind die Messungen in sich konsistent. Die in 3.4.2 gegebene Fehlerschranke $\Delta\theta = \pm 2^\circ$ für den Streuwinkel θ ist unter Verwendung dieser Messungen geschätzt.

Die allgemeine Justierung des Beugungssystems ist später noch verbessert worden. Gearbeitet wird bei fast allen Untersuchungen im Kanoneneinstellbereich der Kurven 1 und 3.

4.2 Vergleich Rechnung - Experiment ⁺⁾

4.2.1 Theoretische Behandlung: Prinzip

Nachdem gezeigt ist, daß starke Polarisierungseffekte existieren und die Meßmethode zuverlässig ist, folgt als nächster interessanter Schritt ein Vergleich mit der Theorie. Dieser Vergleich ist durch Zusammenarbeit mit R. Feder möglich geworden. Feder (1971, 1972, 1976) hat die Theorie der Beugung niederenergetischer Elektronen im Formalismus der Dirac-Gleichung ausgearbeitet. Seine Behandlung des Problems ist durch geschicktere Wahl der Summationen einer von Jennings (1970, 1974) entwickelten spinabhängigen Theorie bezüglich Rechenzeit und Flexibilität überlegen (siehe Feder et al. 1976). Das theoretische Modell ist in beiden Theorien das folgende (Feder et al. 1976):

- (a) der einfallende Strahl ist eine ebene Welle,
- (b) die Kristalloberfläche hat eine ideale zweidimensionale Periodizität,
- (c) die Streupotentiale der Ionenrümpfe sind in der "muffin-tin"-Form darstellbar,
- (d) die inelastischen Effekte können durch Dämpfung der elastisch gestreuten Wellen berücksichtigt werden.

⁺⁾ Dieser Vergleich ist Thema einer gemeinsamen Arbeit R. Feder, N. Müller, D. Wolf "Spin Polarization in Low Energy Electron Diffraction from Au (110): Theory and Experiment", die zur Veröffentlichung in Z. Physik B angenommen ist.

Das Beugungsproblem wird dann in drei Stufen gelöst:

- (1) Einzelstreuung an den Ionenrümpfen,
- (2) Zusammensetzung der Streuung an den Ionenrümpfen zur Mehrfachstreuung innerhalb einer zur Oberfläche parallelen Schicht ("intra-layer scattering"),
- (3) Kombination der Streuung einzelner Schichten ("inter-layer scattering").

In Stufe (1) wird dabei die radiale Dirac-Gleichung mit einem in der Elektron-Atom-Streuung bewährten Programm (Bunyan und Schönfelder 1965) gelöst. Bei Stufe (2) und (3) folgen dann Jennings und Feder jeweils Verallgemeinerungen unterschiedlicher, nichtrelativistischer Beugungstheorien (Einzelheiten siehe bei Feder et al. 1976 und in der dort genannten Literatur).

Bei dem derzeitigen Entwicklungsstand der Untersuchungen zur Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen ist es nicht sinnvoll, Rechnungen für rekonstruierte Oberflächen durchzuführen. Im Hinblick auf eine Überprüfung theoretischer Ergebnisse ist mit der Entscheidung, in diesem Experiment die Gold-(110)-Oberfläche zu untersuchen, eine ungünstige Wahl getroffen worden. Der strukturelle Übergang der Fläche bei 700 - 750 K, bei dem sich das (1x2)-Überstruktur-Beugungsbild in ein (1x1)-Grundgitter-Beugungsbild wandelt, erlaubt jedoch eine Gegenüberstellung von Theorie und Experiment. Diese Möglichkeit wird hier ausgenutzt; Rechnungen für eine nicht rekonstruierte Gold-(110)-Oberfläche werden mit Hochtemperaturmessungen verglichen, für die der Einfluß der Überstruktur stark zurückgedrängt ist.

Zwischen den beiden gegenübergestellten Systemen bestehen dabei erhebliche Unterschiede:

In der Rechnung wird angenommen, daß der (unpolarisiert) einfallende Strahl an einer fehlerfreien Kristalloberfläche gestreut wird, deren Atome voneinander unabhängige, isotrope thermische Schwingungen ausführen. Im Experiment dagegen trifft der Primärstrahl auf eine stark fehlgeordnete, rauhe Oberfläche, in der die Atome gekoppelt (anisotrop) schwingen. Die gebeugten Strahlen enthalten also stets Streuanteile der fehlgeordneten Schicht (siehe z.B. Duke und Liebsch 1974) und Auswirkungen gekoppelter Schwingungen.

In den Rechnungen werden wie im Experiment die Polarisation (und die Intensität) als Funktion der Streuenergie E und der Orientierung des einfallenden Strahls zum Gitter bestimmt. Dabei wird die Streuung an 8 monoatomaren Schichten berücksichtigt. Bis zu etwa 37 Strahlen (reziproke Gittervektoren) werden für die Streuung innerhalb einer einzelnen Schicht mitgenommen, die Auswahl wird dabei den Einfallsbedingungen angepaßt. Auswahlkriterium ist immer die Konvergenz der Rechnung.

Die Streuung an den Ionenrümpfen wird mit einem "muffin-tin" Bandstrukturpotential (nach Andersen) behandelt; sie wird dabei durch spinabhängige Streuphasen bis zu $l = 7$ beschrieben.

4.2.2 Parameter der Rechnung

Das innere Potential

In den Rechnungen werden der Realteil V_{or} und der Imaginärteil V_{oi} des inneren Potentials als konstant angenommen (siehe dazu 3.4.1). Der Realteil wird durch Vergleich mit Messungen ermittelt, für den Imaginärteil - er bestimmt die Dämpfung der Elektronenwellen durch inelastische Streuung - wird $V_{oi} = 4$ eV angesetzt ($V_{oi} = 4$ eV entspricht dem Amplituden-Abschwächungskoeffizienten $\lambda_{ee} \approx 7 \text{ \AA}$, siehe Demuth et al. 1975).

Für die dem Realteil zugeordnete Potentialbarriere an der Oberfläche werden zwei eindimensionale Modelle benutzt: eine brechende, aber nicht reflektierende Stufenbarriere, und eine exponentialartig abfallende, glatte Funktion, die den Ergebnissen von Lang und Kohn (1970) für das freie Elektronengas angepaßt ist (siehe Feder et al. 1976). Strukturierungen der Barriere parallel zur Oberfläche, die beim realen Kristall auftreten, werden vernachlässigt (vergleiche 4.1.1, Bild 16).

Gitterkontraktion

Für den Abstand zwischen der ersten und der zweiten Atom-schicht wird eine Kontraktion von 0 - 10 % bezogen auf den Grundgitterabstand $c = a_o / \sqrt{2} = 2,88 \text{ \AA}$ angenommen. Bei einer Kontraktion von 10 % ist der Abstand nächster Nachbarn mit $2,49 \text{ \AA}$ kleiner als es Tabellenwerte für den Ionenradius ($1,34 \text{ \AA}$) erlauben. Der Ionenradius ist jedoch keine absolute untere Schranke für Atomabstände; denn z.B. im zwei-atomigen Molekül Au_2 ist der Kernabstand signifikant kleiner als der zweifache Ionenradius (Huber 1972).

Kristalltemperatur

Da ein Vergleich mit Messungen bei hohen Kristalltemperaturen durchgeführt werden soll, sind Temperatureffekte zu berücksichtigen. Die thermische Ausdehnung des Gitters wird vernachlässigt, ihr Einfluß ist im Vergleich zu dem der thermischen Gitterschwingungen unbedeutend. Die Schwingungen selbst können wegen der Vielfachstreuung nicht einfach durch einen Debye-Waller Faktor berücksichtigt werden. Um ihren Einfluß zu erfassen, wird die Streuung an den Ionenrümpfen mit Streuamplituden beschrieben, die die Auslenkung der Ionen aus der Ruhelage enthalten. Für die Auslenkungen wird ein Debye-Schwingungsspektrum angesetzt. Eine Mittelung ergibt dann temperaturabhängige komplexe Streuphasen (Pendry 1974, Seite 201 ff). An dieser Stelle geht die Debye-Temperatur T_D in die Theorie ein. Für sie wird in allen Schichten des Kristalls der gleiche Wert angesetzt; denn bei den prinzipiellen Unterschieden zwischen der realen Oberfläche und der Oberfläche des theoretisch behandelten Modells ist es nicht sinnvoll, durch Variation über die Schichten zusätzlich Komplikationen einzuführen. Stattdessen werden Extremwerte, die Grundgitter-Debye-Temperatur $T_{D1} = 170$ K (Henry und Lonsdale 1959) und die Oberflächen-Debye-Temperatur $T_{D2} = 111$ K (Jackson 1974), benutzt. Als Kristalltemperatur wird $T = 723$ K, also $T/T_{D1} = 4,25$ bzw. $T/T_{D2} = 6,5$ angenommen.

4.2.3 Bestimmung des realen inneren Potentials V_{or}

Der erste Schritt in einem Vergleich zwischen Rechnung und Experiment ist die Anpassung des Realteils V_{or} des inneren Potentials. Dazu ist günstig, bei senkrechtem Einfall des Primärstrahls einen gebeugten Nebenstrahl zu untersuchen. In diesem Fall ist nämlich V_{or} gleich der Verschiebung einer energieabhängig gemessenen Intensitäts- oder Polari-

sationskurve $I(E)$ bzw. $P(E)$ gegen die entsprechende für $V_{or} = 0$ berechnete Kurve, denn Rechnungen für Nebenstrahlen sind von der Form der angesetzten eindimensionalen Potentialbarriere nahezu unabhängig ⁺⁾ . Das Meßprinzip, bei fester Energie den Streuwinkel zu variieren, wird bei diesen Messungen allerdings durchbrochen (siehe 3.4.1).

Mit dem senkrechten Einfall tritt ein experimentelles Problem auf: Sowohl der Kristall als auch die Kanone müssen verdreht werden, um nach einer Energieänderung den auslaufenden Strahl durch das Loch im Leuchtschirm hindurch in den Polarisationsdetektor zu leiten und gleichzeitig den senkrechten Einfall beizubehalten. Die erforderliche Bewegung um gleiche Winkel ist eine Quelle für Fehler. Das bereits in 4.1.3 benutzte Reziprozitätstheorem (Zeitumkehrsymmetrie) bietet einen Ausweg: werden senkrecht auslaufende, gebeugte Strahlen untersucht, braucht der Kristall nicht verdreht zu werden. Stattdessen wird allein der Einfallswinkel ϑ_0 so verändert, daß der gebeugte Strahl optimal auf dem Ausfädelloch des Leuchtschirms zentriert ist. Die notwendige Bewegung der Kanone kann sowohl visuell als auch über die durchgelassene Intensität (Zählrate im Mott-Detektor) gut kontrolliert werden.

In den Bildern 22 und 23 werden für den (10) Strahl bzw. (11) Strahl bei senkrechtem Einfall berechnete, energieabhängige Intensitäts- und Polarisationskurven mit entsprechenden, reziprok gemessenen Zählraten- und Polarisationskurven verglichen (Indizierung siehe Bild 10). Die Kristalltemperatur liegt in diesen Messungen bei $T = 745 \pm 20$ K.

Es ist damit eine Temperatur gewählt worden, bei der noch Reste der halbzahligen Reflexe vorhanden sind ("Nahordnungs-

⁺⁾ Ein Einfluß der Barrierenform entsteht, wenn Oberflächen-Barrieren-Resonanzen auftreten.

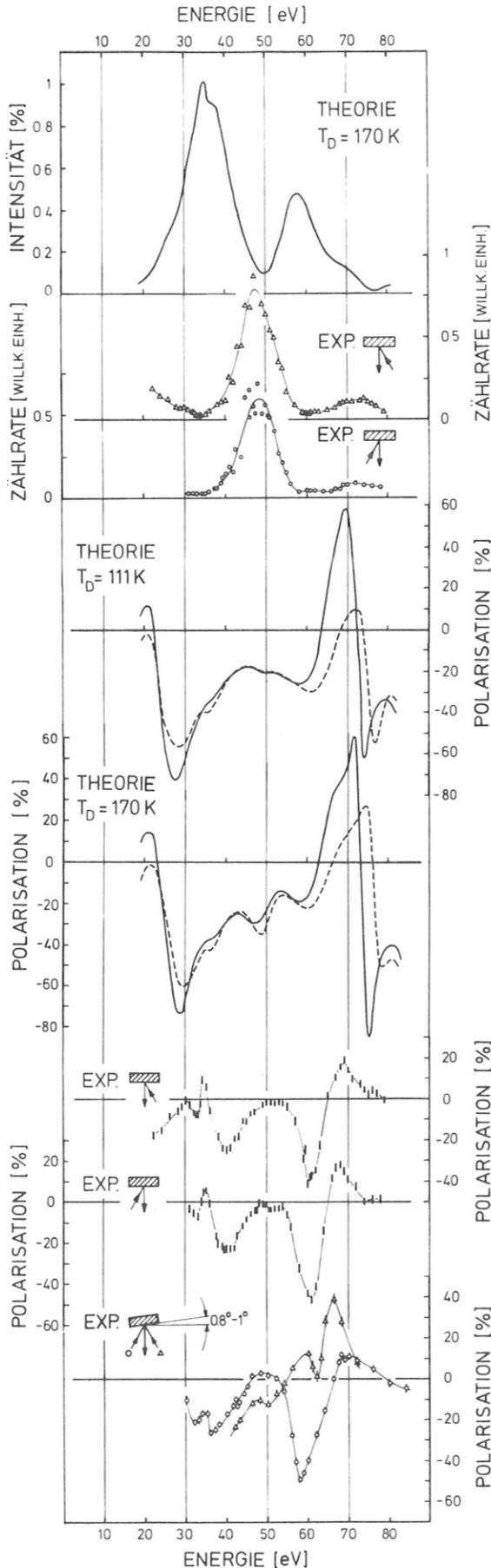


Bild 22:

(10)-Strahl: Intensität, Zählrate und Spinpolarisation für senkrechten Einfall als Funktion der Energie E (— 0 % Kontraktion, --- 5 % Kontraktion). Für die Rechnung ist die Kristalltemperatur $T = 723\text{ K}$ angesetzt, in den Messungen liegt sie bei $T = 745 \pm 20\text{ K}$. Die berechneten Kurven sind für $V_{\text{or}} = 14\text{ eV}$ gezeichnet. (Fehler der Messung siehe bei Bild 13).

reste"), denn bei noch höherer Temperatur werden einerseits die Meßzeiten wegen der sinkenden Intensität zu lang, andererseits können die Ergebnisse durch Überlagerung aus dem diffusen Untergrund stärker verfälscht werden (vergleiche 3.2; die günstigere "große" Streugeometrie im Polarisationsdetektor - siehe 2.3.1 - konnte für diese Messungen noch nicht eingesetzt werden). Dazu besteht bei höheren Temperaturen die Gefahr, daß vermehrt Verunreinigungen aus dem Kristallinnern an die Oberfläche diffundieren, sich eventuell eine hexagonale Überstruktur ausbildet (siehe Wolf 1972) und die Oberfläche zunehmend aufgeraut wird (siehe Jackson und Gilmer 1976).

Da im Polarisationsdetektor nur die zur Streuebene (der Beugung) senkrechte Polarisationskomponente P_{\perp} erfaßt wird, ist in den Rechnungen nur diese Komponente berücksichtigt (beim 11-Strahl sind Komponenten in der Streuebene zu erwarten). Die berechneten Kurven werden dabei mit einer Energieskala gezeigt, der ein reales inneres Potential $V_{or} = 14$ eV zugeordnet ist.

Die gemessenen und berechneten Polarisationskurven $P(E)$ für den (10)-Strahl (Bild 22) unterscheiden sich stark voneinander sowohl in ihrem Verlauf, als auch in der Größe der Polarisation $P(E)$, nur die Lage der Extrema stimmt innerhalb weniger eV überein. Die Intensitätskurven $I(E)$ würden für ein inneres Potential $V_{or} = 4$ eV zusammenpassen. Ein so kleiner Wert erscheint jedoch physikalisch nicht sinnvoll; denn schon allein die Austrittsarbeit ist bei Gold mit 4,8 eV (nach Formenko 1966) größer als 4 eV, und zu ihr wäre noch eine Energie von der Größenordnung der Fermienergie zu addieren (siehe Pendry 1974, Seite 35 ff). Die erheblichen Abweichungen sind nur als Ausdruck der Unterschiede zwischen der realen Oberfläche, an der gemessen wird, und der in der Theorie vorausgesetzten idealen Oberfläche zu verstehen.

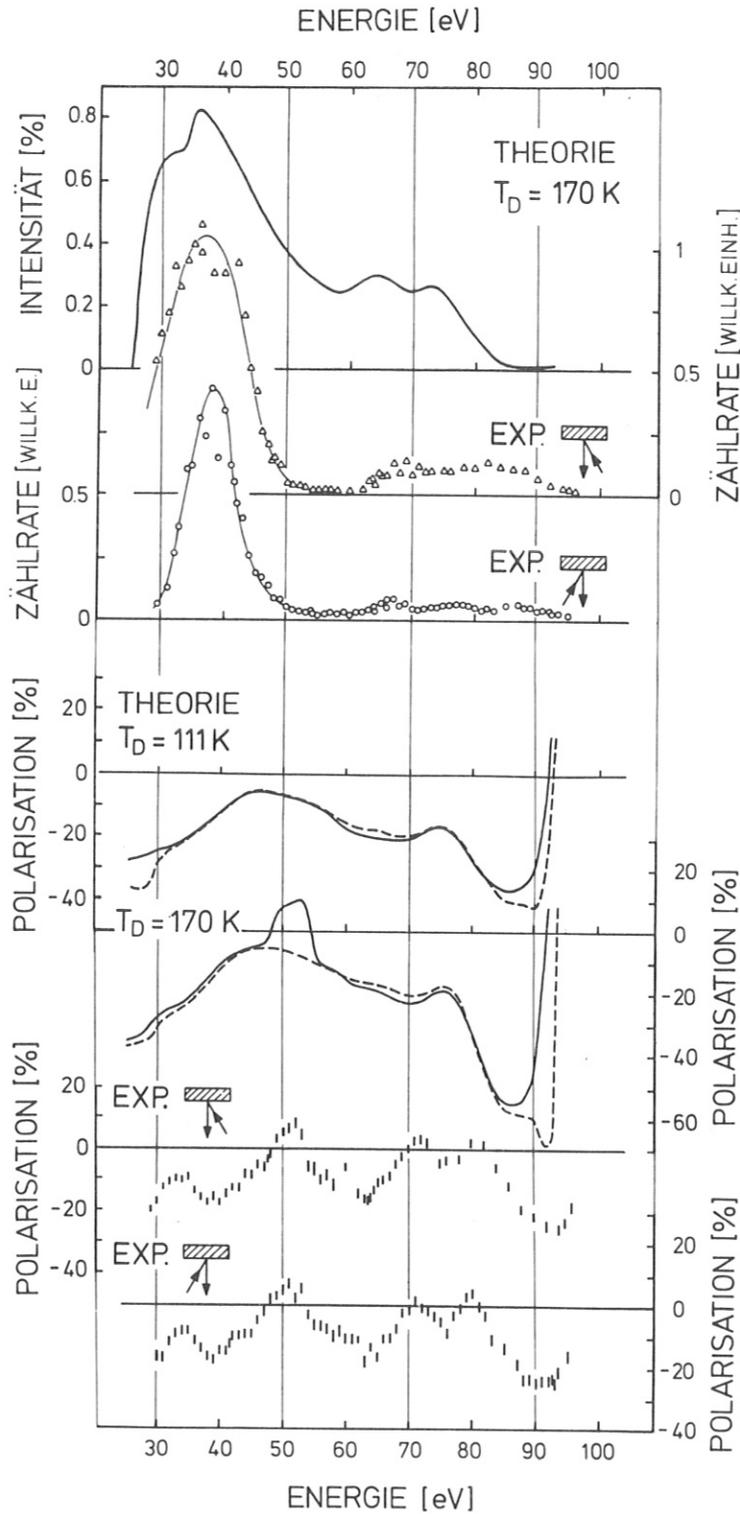


Bild 23: (11)-Strahl: Intensität, Zählrate und Spinpolarisation für senkrechten Einfall als Funktion der Energie E (— 0 % Kontraktion, --- 5 % Kontraktion). Für die Rechnung ist die Kristalltemperatur $T = 723\text{ K}$ angesetzt, in den Messungen liegt sie bei $T = 745 \pm 20\text{ K}$. Die berechneten Kurven sind für $V_{\text{or}} = 14\text{ eV}$ gezeichnet. (Fehler der Messung siehe bei Bild 13).

Für die gemessenen Intensitäten und Polarisierungen sind zwei Meßreihen für zwei zum auslaufenden Strahl symmetrische Kanonenpositionen gegeben. Wird vorausgesetzt, daß unabhängig von der Streuenergie E der Primärstrahl den Kristall immer in dem gleichen Oberflächenbereich trifft und keine magnetischen Störfelder existieren, ist eine Äquivalenz der beiden symmetrischen Meßkurven eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Richtigkeit der Daten. Störeffekte können in diesem Experiment nicht ausgeschlossen werden, trotzdem gibt die Übereinstimmung der symmetrischen Messungen in Bild 22 Zutrauen zu den Ergebnissen.

Die Kontrolle der Symmetrie ist notwendig: weicht nämlich der auslaufende Strahl von der Normalen zur Kristallfläche ab, können sich die Kurven drastisch ändern. Die Kurven am unteren Rand von Bild 22 zeigen dieses Verhalten für eine Fehljustierung im Polarwinkel des auslaufenden (10)-Strahls von $\Delta\vartheta = 0,8 - 1^\circ$. Die Polarisationskurven ändern sich kräftig. Hier wird deutlich demonstriert, wie kritisch Fehljustierungen in energieabhängigen Messungen sein können.

Für den (11)-Strahl (Bild 23) stimmen die gemessenen Polarisationskurven mit den für die Debye-Temperatur $T_D = 170$ K berechneten gut überein, wenn in der Nähe von $E = 50$ eV - wie in der Darstellung der gerechneten Kurven - für den Realteil des inneren Potentials $V_{or} = 14$ eV angesetzt wird und V_{or} mit steigender Energie E bis auf $V_{or} = 10$ eV bei $E = 90$ eV fällt. Eine Abhängigkeit des inneren Potentials von der Energie ist auch in anderen Untersuchungen gefunden worden (z.B. Jepsen et al. 1972); sie ist auf Austausch- und Korrelationsbeiträge zum Potential zurückzuführen.

Auf eine Änderung im Abstand der obersten Atomlage (des Kristallmodells der Theorie) gegen das Grundgitter ist der Bereich um $E = 50$ eV empfindlich; durch Vergleich der Rechnung für $T_D = 170$ K mit dem Experiment folgt für die Kontraktion ein Wert nahe 0 %. Da aber das Polarisationsmaximum bei 50 eV auch von der gewählten Debye-Temperatur, also von den thermischen Schwingungen abhängt - in den Kurven für $T_D = 111$ K ist es wie bei der Kontraktion von 5 % verschwunden - , ist diese Aussage nicht zweifelsfrei.

Für $T_D = 111$ K zeigen die berechneten Polarisationskurven insgesamt weniger Strukturen; sie stimmen mit dem Experiment schlechter überein. Dieses Verhalten ist zu erwarten, denn bei dem senkrechten Einfall bzw. Ausfall tragen auch tiefer im Kristall liegende Schichten stark zur Streuung bei; ihre Gitterschwingungen werden durch die Debye-Temperatur des Grundgitters besser charakterisiert.

Die sehr gute Übereinstimmung der beiden symmetrisch gemessenen Polarisationskurven gibt hier wieder einen Hinweis auf die Qualität der Messungen. Die Unterschiede zwischen den gemessenen und den berechneten Polarisationskurven zeigen eine ähnliche Tendenz wie die beim (10)-Strahl in Bild 22: Positionen der Extrema stimmen sehr gut überein, Polarisationswerte und ihre Änderungen etwas schlechter. Die gewünschte Aussage über das innere Potential ist für den 50 eV-Bereich an dem signifikanten Polarisationsmaximum zuverlässig zu entnehmen. Auch der Vergleich der berechneten Intensität mit den Zählratenkurven bringt keinen Widerspruch zu $V_{or} = 14$ eV bei $E = 50$ eV.

4.2.4 Winkelabhängige Rechnungen und Messungen

Der nächste Schritt für den Vergleich zwischen Theorie und Experiment ist, winkelabhängige Kurven gegenüberzustellen.

Mit dem realen Potential $V_{\text{or}} = 14$ eV als konstantem Parameter sind bei fester Energie $E = 50$ eV und bei festem Azimut $\varphi = 90^\circ$ (Einschuß senkrecht zu den Ketten) vom Streuwinkel θ abhängige Polarisations- und Intensitätskurven $P(\theta)$ bzw. $I(\theta)$ für den (01)- und für den (00)-Strahl berechnet. Sie werden mit entsprechenden Messungen bei der Kristalltemperatur $T = 735 \pm 20$ K verglichen. (Zur Wahl der Temperatur siehe 4.2.3; Messungen bei höheren Temperaturen sind hier möglich gewesen, sie ergeben praktisch identische Resultate: vergleiche Bild 25 für den (01)-Strahl, Bild 27 für den (00)-Strahl.) Während in den Rechnungen für den (01)-Strahl kein direkter Beitrag von der Barriere auftritt, ist diese Komplikation beim (00)-Strahl zu beachten; daher werden in Bild 24 zunächst Ergebnisse für den (01)-Strahl gezeigt.

Für Streuwinkel $\theta > 115^\circ$ stimmt die gemessene Polarisationskurve $P(\theta)$ sehr gut mit der für die Debye-Temperatur $T_D = 170$ K berechneten überein, wenn in der Modelloberfläche eine geringe Kontraktion des Abstandes zwischen den beiden oberen Atomschichten angenommen wird. In diesem Winkelbereich mit $\theta > 115^\circ$ liegen beim (01)-Strahl die Einfallswinkel \mathcal{I}_0 und Ausfallswinkel \mathcal{I} stets zwischen 0 und 45° , und mindestens einer der beiden Strahlen verläuft nahe der Flächennormalen; für die Debye-Temperatur gilt also dasselbe Argument wie beim (11)-Strahl in Bild 23. Auch die schwache Kontraktion ist nicht im Widerspruch zu dem Ergebnis vom (11)-Strahl. Zu beachten ist, daß im Bereich des sehr tiefen Minimums der Intensität, das in der Rechnung sowie in der Zählratenmessung gleichartig auftritt, eine Überlagerung thermisch diffuser Streuung ein schmales

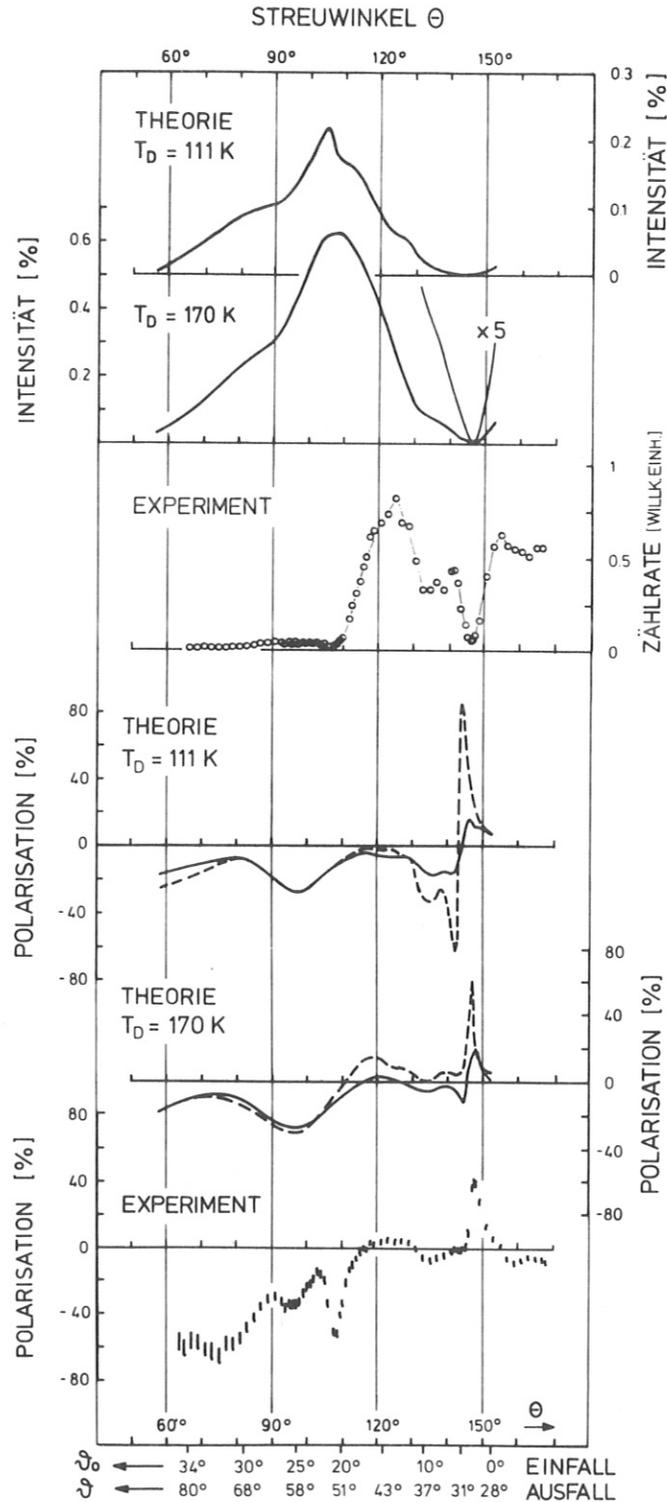


Bild 24: (01)-Strahl: Intensität, Zählrate und Spinpolarisation für $E = 50$ eV und $\varphi = 90^\circ$ als Funktion des Streuwinkels θ (— 0 % Kontraktion, --- 10 % Kontraktion). Für die Rechnung ist die Kristalltemperatur $T = 723$ K angenommen, in der Messung liegt sie bei $T = 735 \pm 20$ K. (Fehler der Messung siehe Bild 13).

Minimum in der Polarisation verfälschen (siehe 3.2) und so die Forderung nach einer Kontraktion abschwächen kann. Auffällig ist, daß in Messungen nahe Raumtemperatur diesem Intensitätsminimum eine symmetrische resonanzartige Minimum/Maximum-Polarisationsstruktur zugeordnet ist (siehe Abschnitt 4.1.2 sowie Bild 25).

Für Streuwinkel $\theta < 115^\circ$ stimmen berechnete und gemessene Polarisationswerte nur in einem kleinen Winkelbereich um $\theta = 100^\circ$ überein, signifikante Unterschiede bestehen in der Nähe von $\theta = 110^\circ$ und für $\theta < 90^\circ$. Auffallend in den Messungen ist, daß verbunden mit dem Polarisationsminimum bei $\theta \sim 110^\circ$ die Zählrate im Widerspruch zur Theorie zu kleinen Winkeln hin drastisch abfällt und dann im Vergleich zu der berechneten Intensität stets sehr klein bleibt. Hier zeigt sich deutlich ein Unterschied zwischen der idealisierten Oberfläche, für die gerechnet wird, und der realen Oberfläche, an der gemessen wird. In der realen Oberfläche existieren noch die ungeordnet an Plätzen des Grundgitters liegenden Bruchstücke der Ketten, die bei Kristalltemperaturen unter 700 K die (1x2) Überstruktur bilden (siehe 2.4.2). Wird der Streuwinkel θ kleiner als 110° , wird der Ausfallwinkel ϑ größer als 50° . Die Neigung der (111)-Flächenstücke, die die Facetten der Überstruktur bilden, ist - wenn Grundgittergeometrie angenommen wird - $54,7^\circ$ (siehe Bild 10). Die Vermutung liegt nahe, daß ab einem kritischen Ausfallswinkel ϑ_c (bzw. ab einem kritischen Einfallswinkel ϑ_{oc} bei einer reziproken Messung) eine Art Abschattung auftritt, d.h. daß Streuprozesse zunehmend bevorzugt sind, in denen eine Streuung an einem der Überstruktur-schicht zugeordneten Kettenatom enthalten ist. Die totalen Wirkungsquerschnitte sind für eine derartige "Abschattung" hinreichend groß; sie liegen in der Größenordnung von 10 \AA^2 (vergleiche Webb und Lagally 1973). Eventuell werden bei diesem kritischen Ausfalls- bzw. Einfallswinkel

\mathcal{D}_c (\mathcal{D}_{oc}) zusätzlich Resonanzen mit Zuständen in den (111)-Facettenflächen angeregt. Ein Zusammenhang mit dem Erreichen der Austrittsschwelle für einen halbzahligen Strahl (siehe 4.1.2, Tabelle 1) erscheint bei der relativ hohen Temperatur unwahrscheinlich, obwohl für Nahordnungsreste die entsprechende Resonanzbedingung noch gelten könnte (siehe dazu 4.1.2 und 4.3.1, vergleiche auch bei Bild 25).

Eine genaue Angabe von \mathcal{D}_c ist dabei schwierig, da die spezielle Form der Oberflächenbarriere an der atomar rauhen Fläche (siehe Bild 16), die genaue Höhenlage für die auf dem Grundgitter liegenden Ketten und die Streuquerschnitte berücksichtigt werden müssen.

Die bei \mathcal{D}_c einsetzende Abschattung kann den Unterschied zwischen dem Verlauf der Zählratenmessung im scharfen (01)-Reflex und der berechneten Kurve erklären: Die Atome (Ionen) der Überstrukturschicht sind auch nach einem Zerfall der Ketten auf Plätzen zu lokalisieren, die die Periodizität des Grundgitters haben. Werden Stufen in der Oberfläche vernachlässigt⁺⁾ , kann nach Duke und Liebsch (1974) für die Streuung an der ungeordneten oberen Schicht ein Wellenfeld angesetzt werden, das zwar dem für die Streuung an einer Grundgitterschicht ähnlich ist, dessen Amplituden jedoch stark abgeschwächt sind. Zusätzlich vermindert die thermisch diffuse Streuung, die in der zerfallenen Überstrukturschicht verstärkt ist, das Streuvermögen der Schicht. Gewinnt also diese Schicht durch "Abschattung" einen bevorzugten Anteil an der Beugung, ist bei gleichbleibender Struktur des Beugungsdiagramms ein Abfall der Intensität in den scharfen Reflexpositionen zu erwarten. Die Abschattung kann spinabhän-

⁺⁾ Die Vernachlässigung der Stufen in der Oberfläche ist bei dieser Betrachtung zulässig, denn die den Stufen zugeordneten Antiphasenbereiche mit Verschiebungsvektoren senkrecht zur Oberfläche beeinflussen die Beugung nicht in weiten Bereichen des Einfallswinkels gleichartig.

gig sein und so - wie beobachtet - zu einer signifikanten Struktur in der Polarisationskurve $P(\theta)$ führen.

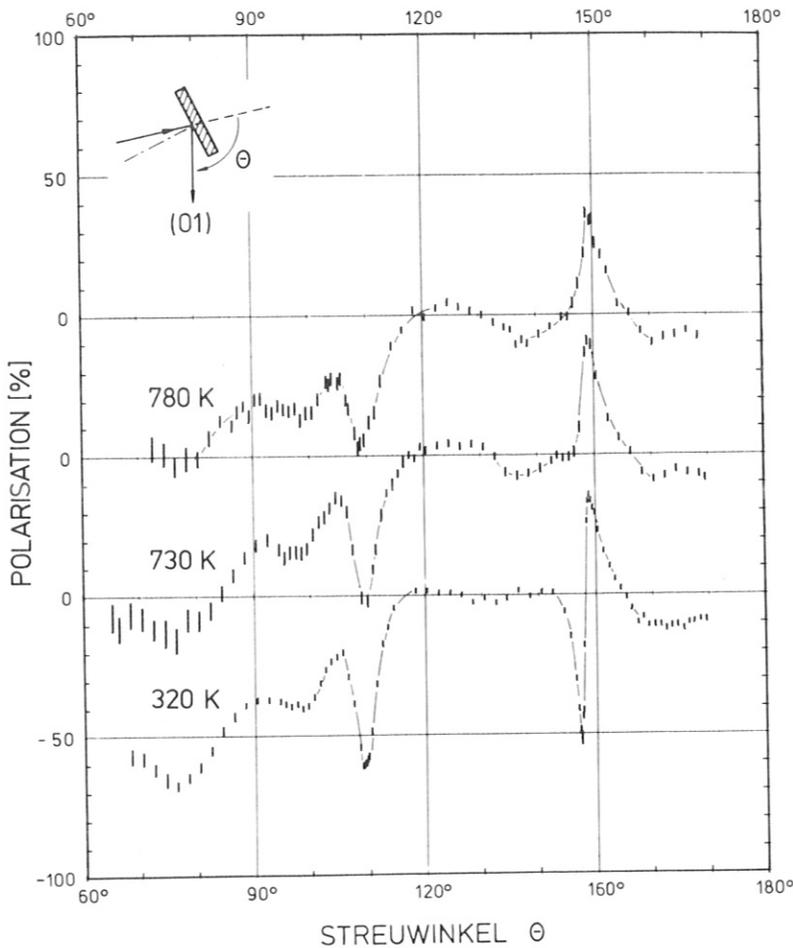


Bild 25:

Spinpolarisation im (01)-Strahl als Funktion des Streuwinkels θ bei Kristalltemperaturen $T = 320 \text{ K} \pm 5 \text{ K}$, $T = 730 \text{ K} \pm 20 \text{ K}$, $T = 780 \text{ K} \pm 20 \text{ K}$. Die Streuenergie ist $E = 50 \text{ eV}$, der Azimut $\varphi = 90^\circ$ (Fehler der Messung wie in Bild 13).

Das Polarisationsminimum bei $\theta \approx 110^\circ$ zeigt zusätzlich ein interessantes Verhalten: es ändert sich zwischen $T = 320 \text{ K}$ und $T = 780 \text{ K}$ nur geringfügig; der dieses Minimum bestimmende Streuprozess scheint nahezu temperaturunabhängig zu sein (vergleiche Bild 25). Dieser geringe Temperatureinfluss spricht einerseits gegen einen Zusammenhang des Polarisationsminimums mit einem austretenden Überstrukturstrahl, andererseits bestätigt er, daß beim Zerfall der Überstrukturschicht Kettenbruchstücke erhalten bleiben und so (111)-Facetten auch bei hoher Temperatur bestehen. Auf den Zusammenhang des Polarisationsminimums mit einer speziellen Eigenschaft der realen Fläche weisen dabei zusätzliche Rechnungen für die idealisierte Oberfläche hin; auch bei vielfältiger Variation von Parametern können sie das Minimum nicht darstellen.

In Bild 26 werden für den (00)-Strahl Rechnung und Experiment gegenübergestellt. Der Streuanteil der Barriere ist in den Rechnungen mit der kontinuierlichen Barriere berücksichtigt, die Stufenbarriere ist als nicht reflektierend angesetzt. Wesentlich deutlicher als die Intensitätsprofile zeigen die berechneten Polarisationsprofile den starken Einfluß der Barrierenart und außerdem die Auswirkungen einer Kontraktion sowie der thermischen Gitterschwingen.

Beim Vergleich von gemessenen und berechneten Polarisationskurven ist zunächst überraschend, daß die nicht reflektierende Barriere zusammen mit der Debye-Temperatur $T_D = 111$ K in dem Bereich des Streuwinkels θ zwischen 70 und 100° die beste Übereinstimmung bringt. Die Bevorzugung der Stufenbarriere kann in diesem Winkelbereich durch die ungeordnete atomare Rauigkeit, die sich insbesondere über die hervorstehenden Ionenrümpfe mit fehlender Kompensation der positiven Ladung (siehe Bild 16) auf die Barriere überträgt, ausgelöst sein. Die niedrig anzusetzende Debye-Temperatur entspricht dem starken Anteil der obersten (abschattenden) Atomlage an der Streuung (vergl. (01)-Strahl). Bei Streuwinkeln $\theta < 60^\circ$ scheint die kontinuierliche Barriere die Messung besser zu beschreiben. Wegen der Rauigkeiten der realen Oberfläche sollte dieser Vergleich jedoch bei dem hier gegebenen streifenden Einfall nicht durchgeführt werden; die gemessenen Zählraten weichen auch deutlich von der berechneten Intensitätskurve ab.

Für Streuwinkel $\theta > 120^\circ$ gibt - wie bei den kleineren Einfallswinkeln für den (01)-Strahl - die Debye-Temperatur $T_D = 170^\circ$ eine bessere Übereinstimmung. Die Barrierenform ist weniger kritisch. Aus dem Vergleich für den Winkelbereich $100 < \theta < 120$ könnte wieder eine geringe Kontraktion für den obersten Schichtabstand der Modelloberfläche abgeleitet werden.

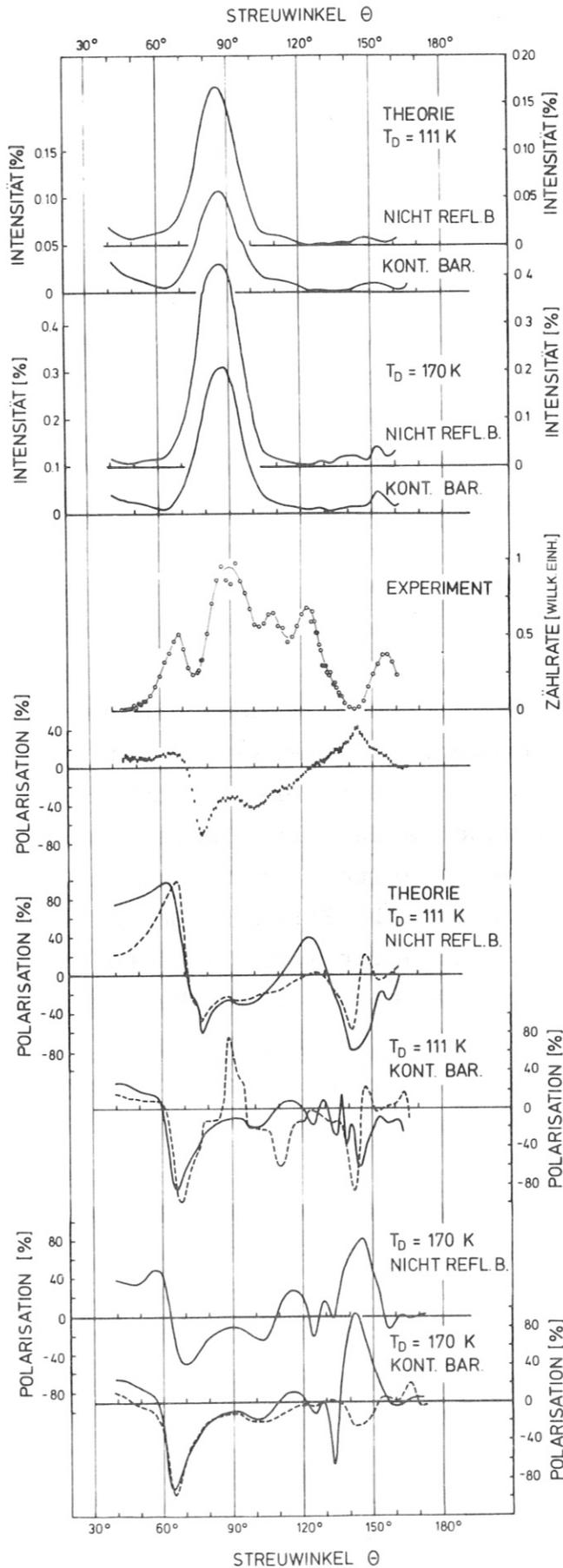


Bild 26:

(00)-Strahl:
 Intensität, Zähl-
 rate und Spin-
 polarisation für
 $E = 50$ eV und
 $\varphi = 90^\circ$ als
 Funktion des Streu-
 winkels θ
 (— 0 % Kontraktion,
 --- 10 % Kontraktion).
 Für die Rechnung ist
 die Kristalltempera-
 tur $T = 723$ K ange-
 setzt, in der Mes-
 sung liegt sie bei
 $T = 735 \pm 20$ K.
 (Fehler der Messung
 siehe Bild 13).

In der Diskussion des (00)-Strahls ist bislang der beim (01)-Strahl gefundene "kritische" Ausfall (Einfall) nicht berücksichtigt worden. Er sollte sich gerade in der Nähe des Polarisationsminimums bei $\theta \approx 76^\circ$ auswirken. Dieses Minimum ist das "Warm"-Minimum der in Abschnitt 4.3.1 dargestellten temperaturabhängigen Messungen; sein dort gefundenes Verhalten zeigt deutlich, daß eine dem Austritt eines halbzahligen Strahls (siehe 4.1.2, Tabelle 1) zugeordnete Resonanz auszuschließen ist; eine Resonanz mit einem Zustand in den (111)-Facettenflächen wäre jedoch möglich (siehe (01)-Strahl). Da einfallender und auslaufender Strahl im Falle der spiegelnden Reflexion ((00)-Strahl) zueinander symmetrisch sind, könnte eine solche Resonanz zu einem Intensitätsmaximum führen, dem dann ein Abfall des Polarisationsgrades $|P|$ zuzuordnen wäre. Der Unterschied zwischen der Rechnung für die kontinuierliche Barriere und der Rechnung für die nicht reflektierende Stufenbarriere bei $\theta = 111^\circ$ könnte so durch Berücksichtigung dieser Resonanz beseitigt werden. Die Zählratenkurve zeigt in der Nähe des "kritischen" Einfalls eine deutliche Minimum-Maximumstruktur. Das Auftreten dieser Struktur weist auf eine Resonanz hin; für eine eindeutige Klärung sind jedoch weitere Messungen und Rechnungen nötig.

Eine Folgerung ergibt sich zwangsläufig aus der hier gegebenen Gegenüberstellung von Experiment und Rechnung: die ausgesuchte Au-(110)-Oberfläche ist zu kompliziert, um ihre Streueigenschaften bei dem derzeitigen Entwicklungsstand des Gebiets der Spinpolarisation bei der Beugung voll zu erfassen. Trotzdem ist es nützlich, Messungen an der realen Kristalloberfläche mit Rechnungen für eine idealisierte Oberfläche zu vergleichen; es ist zu erkennen, daß die Theorie bei geeigneter, physikalisch sinnvoller Wahl der Parameter zutreffende Ergebnisse liefert und daß Unterschiede der Resultate durch spezielle Eigenschaften der realen Oberfläche bedingt sind.

4.3 Untersuchungen zum Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold-(110)-Oberfläche

Den vorangegangenen Abschnitten ist zu entnehmen, daß die Spinpolarisation gebeugter Strahlen über die Vielfachstreuung von der Struktur der Kristalloberfläche abhängt.

Die strukturelle Ordnung der Gold-(110)-Oberfläche ändert sich - wie bereits in 2.4.2 beschrieben - mit der Temperatur. In diesem Teil der Arbeit wird versucht, Änderungen der Spinpolarisation in den scharfen Reflexpositionen bei Änderung der Struktur einer Oberflächenschicht qualitativ zu verstehen und aus temperaturabhängigen Polarisationsmessungen Aussagen zu dem Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold-(110)-Oberfläche zu gewinnen.

4.3.1 Experimenteller Befund

Für die Untersuchungen sind die gebeugten Strahlen (die Reflexe) in zwei Gruppen einzuteilen, in Grundgitterstrahlen und in Überstrukturstrahlen. Die Grundgitterstrahlen enthalten Streuanteile aus Strukturen mit Grundgitter- und mit Überstrukturperiode, die Überstrukturstrahlen nur aus Strukturen mit Überstrukturperiode. Entsprechend verschwinden beim Zerfall der Überstruktur die Intensitäten der ihr zugeordneten Strahlen, während die der Grundgitterstrahlen im wesentlichen erhalten bleibt. Auch die Spinpolarisation sollte sich für beide Strahltypen unterschiedlich verhalten.

Die in Bild 27 dargestellten Messungen bestätigen, daß verbunden mit der Strukturumwandlung signifikante Änderungen in der Spinpolarisation auftreten. Für Kristalltemperaturen $T = 320, 420, \dots, 830$ K ist bei der Energie $E = 50$ eV und bei Einschub senkrecht zu den dichtest gepackten Ketten ($\varphi = 90^\circ$) die Polarisation im (scharfen) (00)-Strahl in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ erfaßt. Zur Heizung ist

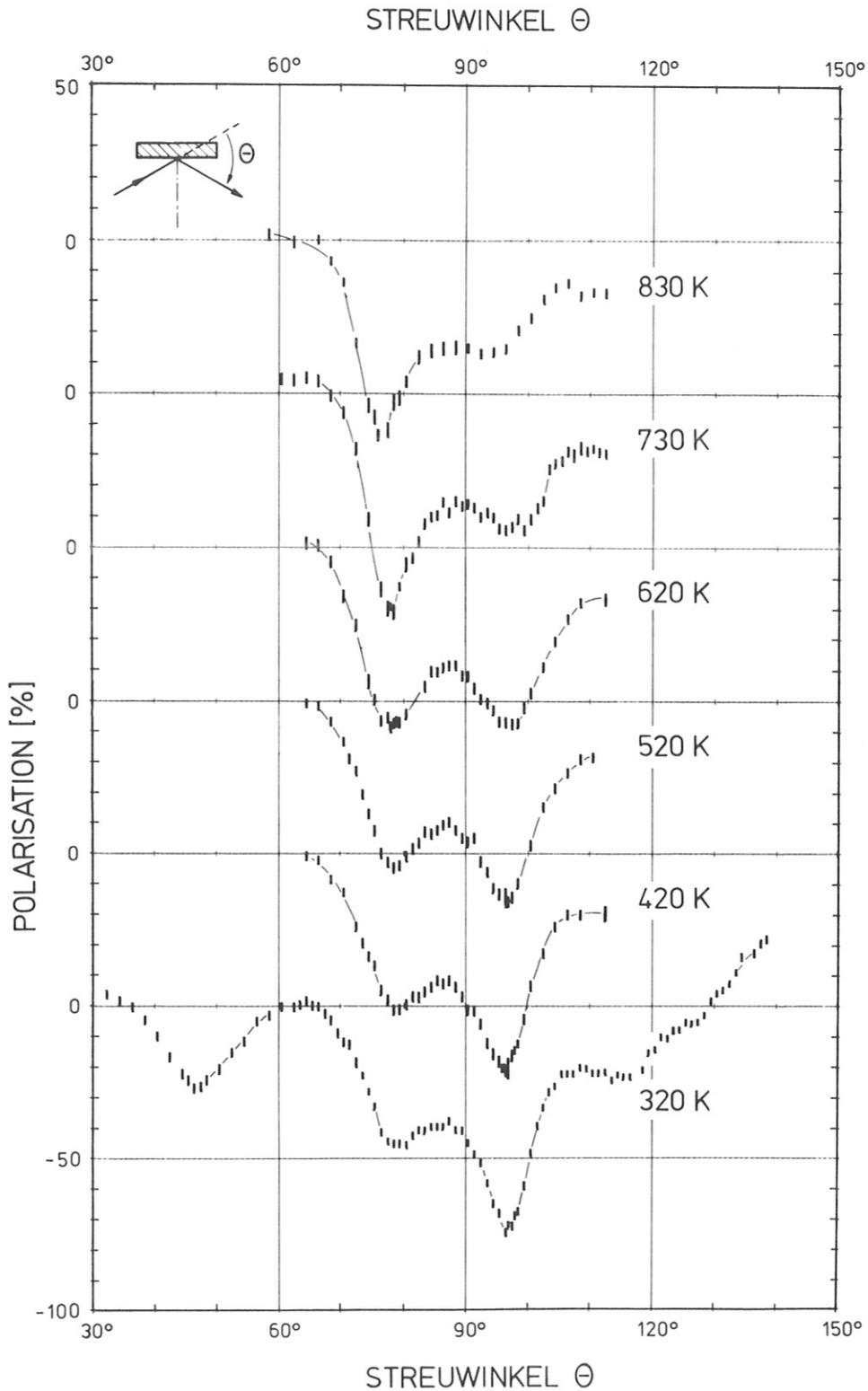


Bild 27 : Spinpolarisation im (00)-Strahl bei Einschub senkrecht zu den dichtest gepackten Ketten der Gold-(110)-Oberfläche. Für feste Energie und feste Temperaturen $T = 320 \text{ K}$, 420 K ... 830 K ist der Streuwinkel θ variiert. Fehler in der Temperaturangabe: $\pm 5 \text{ K}$ bei $T = 320 \text{ K}$ bis $\pm 20 \text{ K}$ bei $T = 830 \text{ K}$. (Weitere Fehler der Messung siehe Bild 13).

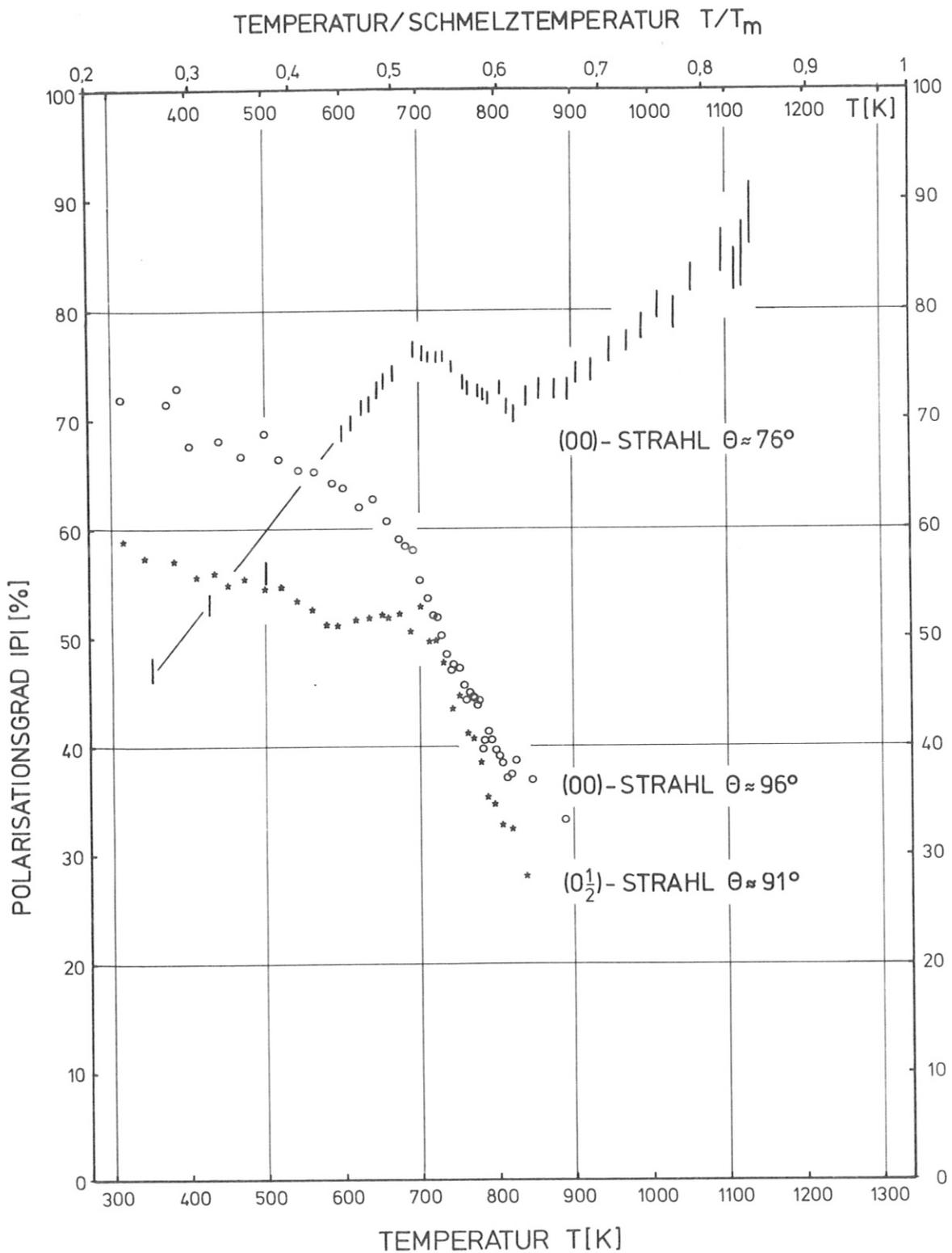


Bild 28: Polarisationsgrad $|P|$ in Abhängigkeit von der Kristalltemperatur T bei $E = 50$ eV, $\varphi = 90^\circ$ für das "Warm"-Minimum der Polarisation im (00) Strahl bei $\theta = 76^\circ$, für das "Kalt"-Minimum des (00)-Strahls bei $\theta = 96^\circ$ (siehe Bild 27) und für das Polarisationsminimum im (0 1/2)-Strahl bei $\theta = 91^\circ$ (siehe Bild 17). Der Fehler in der Temperaturangabe ist kleiner ± 20 K. In dem "Warm"-Minimum ist mit Gleichstrom geheizt, bei den beiden anderen Streubedingungen gepulst. (Die Messungen im "Kalt"-Minimum und im (0 1/2)-Strahl sind in Bild 29 ausführlicher dargestellt, Fehler der Messung im "Warm"-Minimum wie bei Bild 13).

Gleichstrom benutzt worden; Fehler durch magnetische Störfelder des Heizstroms sind bei dieser winkelabhängigen Messung unkritisch (siehe 3.4.1).

Bei zwei Streuwinkeln ist Auffallendes zu beobachten: bei $\theta \approx 96^\circ$ verschwindet das ausgeprägte "Kalt"-Minimum mit dem Heizen, während bei $\theta \approx 76^\circ$ gleichzeitig aus einer schwachen Struktur ein deutliches "Warm"-Minimum herauswächst.

Bild 28 zeigt für diese zwei Streubedingungen den Polarisationsgrad $|P|$ in Abhängigkeit von der Temperatur. Er ist jeweils in der Position des scharfen Reflexes gemessen. Zusätzlich ist in Bild 28 eine gleichartige Messung für den $(0\ 1/2)$ -Strahl gegeben; für die Energie $E = 50\text{ eV}$ und für den Azimut $\varphi = 90^\circ$ ist die Polarisation im ausgeprägten Minimum bei $\theta = 91^\circ$ beobachtet (vergleiche Bild 17). Bei der Kurve für das "Warm"-Minimum ist mit Gleichstromheizung gemessen worden, bei den beiden anderen mit gepulster Heizung (siehe 3.4.4). Deutlich ändert sich der Verlauf der drei Polarisationskurven in der Nähe der Temperatur, bei der sich die Ordnung der Oberfläche ändert (nach Wolf et al. 1977 $T_c \approx 700\text{ K}$, siehe auch Jagodzinski 1977). In dem Überstrukturstrahl setzt dabei der mit T_c korrelierte Abfall des Polarisationsgrades bei höherer Temperatur ein als im Grundgitterstrahl. An der (00) -Strahl Messung bei $\theta = 76^\circ$ ("Warm"-Minimum in Bild 28) fällt der fortlaufende Anstieg des Polarisationsgrades weit oberhalb T_c bis zur Meßgrenze $T = 1120\text{ K}$ auf ($1120\text{ K} = 0,84 \times$ Schmelztemperatur T_m , $T_m = 1336\text{ K}$). Die hohen Werte des Polarisationsgrades bei $T \approx 1100\text{ K}$ sind nur durch einen günstigen Mehrfachstreuprozess zu erklären; thermische Schwingungen benachbarter Atome müssen dazu gekoppelt sein. Dem Streuwinkel $\theta = 76^\circ$ entspricht der Einfallswinkel bzw. Ausfallswinkel $\vartheta_o = \vartheta = 52^\circ$. Der einfallende und der auslaufende Strahl liegen damit in

der Nähe des in Abschnitt 4.2.4 diskutierten kritischen Strahllaufs längs der (111)-Facetten der Oberfläche. Eigenarten dieses besonderen Strahllaufs bestimmen offensichtlich das Verhalten der Polarisation; denn der Anstieg des Polarisationsgrades oberhalb von $T = 850$ K schließt deutlich den Einfluß einer Resonanz mit dem austretenden ($0\ 1/2$)-Strahl aus; Nahordnungsreste der Überstruktur sollten bei diesen Temperaturen zerfallen sein (siehe dazu auch 4.2.4).

Um den Verlauf der Kurven in Hinblick auf den Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold-(110)-Oberfläche näher zu diskutieren, sei zunächst dargestellt, in welcher Weise die Polarisation durch Änderungen in der Struktur einer Oberflächenschicht beeinflusst wird.

4.3.2 Phänomenologische Beschreibung der Polarisationsänderungen

In diesem Abschnitt wird versucht, im Verhalten der Spinpolarisation bei Änderungen der Überstruktur Unterschiede zwischen (scharfen) Überstrukturstrahlen und (scharfen) Grundgitterstrahlen aufzuzeigen. Zur Erleichterung wird dabei ein vereinfachtes zweidimensionales Modell der Gold-(110)-Oberfläche angenommen:

Die oberste Atomschicht der Fläche, die die Überstruktur bildet, sei als eine Schicht von Adatomen auf einem festen Grundgitter behandelt. Sie sei also als zweidimensionales Gittergas aufgefaßt.^{+) Die Adatome seien an Grundgitter-}

^{+) Ein Modell unter Einschluß von Verschiebungen senkrecht zur Oberfläche beschreibt die Fehlordnung der Gold-(110)-Fläche richtiger (siehe 2.4.2), erschwert aber die Diskussion. Die Ergebnisse sollten qualitativ ähnlich sein.}

plätzen gebunden. Zwischen Adatomen auf benachbarten Plätzen bestehe in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, der a-Richtung des Oberflächengitters, eine anziehende Wechselwirkung mit der Energie $J_a < 0$, in $[001]$ -Richtung, der b-Richtung, eine abstoßende mit $J_b > 0$. Die Teilchenzahl in der Adatomschicht entspreche einer halben Monolage. Thermische Schwingungen der Atome seien vernachlässigt.

Für die Besetzung der Grundgitterplätze bestehen damit genau zwei Zustände, besetzt und unbesetzt. Die Dichte beider Zustände ist gleich. Dieses Modell ist als zweidimensionales Ising-Modell mit Beschränkung auf die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn aufzufassen (vergleiche Lee und Yang 1952). Der Grundzustand ist die (1×2) -Überstruktur mit dichtest gepackten Ketten in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, die in $[001]$ -Richtung jeden zweiten möglichen Platz besetzen (vergleiche Abschnitt 2.4.2, Bild 10). Für die Anordnung der Adatome besteht ein Ordnungs-/Unordnungsübergang, bei dem auch oberhalb der kritischen Temperatur Nahordnungen erhalten bleiben (siehe z.B. Green und Hurst 1964). Bei entsprechender Wahl der Wechselwirkungen kann Nahordnung in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung stärker ausgeprägt sein als in der $[001]$ -Richtung (siehe Wolf 1972 und Wolf et al. 1977, das System ist dort auf eine eindimensionale Anordnung von Ketten reduziert). Unordnung kann in diesem Modell durch Bildung einzelner Fehlstellen oder durch (Antiphasen-) Domänen entstehen, in denen wechselseitig die dichtest gepackten Ketten um $\frac{b}{2}$ verschoben sind (Verrückung um eine Furche im Grundgitter, Domänengrenzen längs b-Richtung); denn wegen $J_b > 0$ ist ein Nebeneinanderliegen geschlossener Ketten unwahrscheinlich (siehe z.B. Green und Hurst 1964).

Die spinabhängige Beugung an diesem System sei in Fortführung von Abschnitt 1.2.3 behandelt:

Die Streuebene der Beugung sei eine Spiegelebene des Kristalls. Der unpolarisierte Primärstrahl sei gemäß (11) in zwei entgegengesetzt total polarisierte Teilstrahlen zerlegt. Ihre Vorzugsrichtungen mögen senkrecht zur Streuebene stehen, ihre Intensitäten seien $I_0^\uparrow = I_0^\downarrow = 1$. Alle Elektronen jedes Teilstrahls seien im gleichen Anfangszustand

$$\psi_0^{\uparrow\downarrow} = e^{i \cdot \underline{k}_0 \cdot \underline{r}} \chi_0^{\uparrow\downarrow} \quad (33)$$

Bei der Beugung an dem System Adatom-Grundgitterfläche können die möglichen Streuprozesse in zwei Gruppen eingeteilt werden (Duke und Liebsch 1974):

- (a) Streuprozesse, die keine Wechselwirkungen mit den Adatomen enthalten (reine Streuung vom Grundgitter)
- (b) Streuprozesse, die Wechselwirkungen mit den Adatomen enthalten.

Für die gebeugten Teilstrahlen folgt entsprechend dieser Aufteilung

$$\psi^{\uparrow\downarrow} = [A^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) + B^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k})] \cdot e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \chi_0^{\uparrow\downarrow} \quad (34)$$

Die Amplituden $A^{\uparrow\downarrow}$, $B^{\uparrow\downarrow}$ sind dabei den Gruppen (a), (b) zugeordnet. $B^{\uparrow\downarrow}$ kann in Grundgitter- und Überstrukturstrahlen von 0 verschieden sein, $A^{\uparrow\downarrow}$ nur in Grundgitterstrahlen. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann angesetzt werden

$$A^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) = |A^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k})|, \quad \text{also } A^{\uparrow\downarrow} \text{ reell und } > 0 \quad (35)$$

$$B^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) = b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) \cdot e^{i\beta^{\uparrow\downarrow}}; \quad b^{\uparrow\downarrow} \text{ reell und } > 0$$

$$\beta^{\uparrow\downarrow} = \beta^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k})$$

Der Phasenfaktor $e^{i\beta^{\uparrow\downarrow}}$ enthält sowohl die dem Streuweg als auch die der Streuung an den Ionenrümpfen zugeordnete Phasendifferenz. Außer von \underline{k}_0 und \underline{k} hängen die Amplituden $A^{\uparrow\downarrow}$ und $B^{\uparrow\downarrow}$ dabei von der Struktur der Adatomschicht ab.

Für die gestreute Intensität folgt in Grundgitterstrahlen

$$\begin{aligned} I_{a+b}^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) &= |A^{\uparrow\downarrow} + b^{\uparrow\downarrow} e^{i\beta^{\uparrow\downarrow}}|^2 \\ &= A^{\uparrow\downarrow 2} + 2A^{\uparrow\downarrow} b^{\uparrow\downarrow} \cos \beta^{\uparrow\downarrow} + b^{\uparrow\downarrow 2} \end{aligned} \quad (36)$$

und in Überstrukturstrahlen (halbzahlig)

$$I_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) = b^{\uparrow\downarrow 2} \quad (37)$$

Die Polarisation der Strahlen ergibt sich aus den Intensitäten nach (10) zu:

$$P_{(a+b), b} = \frac{I_{(a+b), b}^{\uparrow} - I_{(a+b), b}^{\downarrow}}{I_{(a+b), b}^{\uparrow} + I_{(a+b), b}^{\downarrow}} \quad (38)$$

Die Frage ist jetzt, wie sich die Polarisation P_{a+b} und P_b bei Strukturänderungen (zunehmender Fehlordnung) in der Adatomschicht verhalten. Zunächst seien Überstrukturstrahlen behandelt, anschließend Grundgitterstrahlen.

Überstrukturstrahlen

Um den Einfluß von Strukturänderungen in der Adatomschicht auf die Streuamplituden B^{\uparrow} und B^{\downarrow} und damit auf die Polarisation P_b qualitativ zu erkennen, sei das Streuproblem im Rahmen der Cluster-Einbettungsnaherung behandelt (siehe Wolf 1972, Jagodzinski 1977, Jagodzinski et al. 1977,

Moritz et al. 1977). Das Ziel ist dabei, Streufaktoren mit pseudo-kinematischer Form zu erhalten. Die spinabhängigen Effekte bei der Streuung sind dann von Gitterbedingungen separiert.

Alle Streuprozesse, die zur Amplitude $B^{\uparrow\downarrow}$ Partialwellen beitragen, enthalten nach Voraussetzung mindestens eine Wechselwirkung mit einem Adatom. Sie seien dem Adatom (i) am Gitterplatz $\underline{r}_i = m_i \cdot \underline{a} + n_i \cdot \underline{b}$ zugeordnet, das dem Ort des letzten Streuprozesses im System Grundgitter + Adatomschicht am nächsten liegt.

Jedem Adatom (i) seien dreidimensionale Mehrfachstreubereiche zugeteilt. Ihre Ausdehnung sei so gewählt, daß sie die wesentlichen strukturabhängigen Streuprozesse, die dem Adatom (i) zugeordnet sind, voll enthalten. Elektronen, die nach einer Wechselwirkung mit der Adatomschicht aus anderen Kristallbereichen in sie hineingestreut werden, seien durch eine strukturunabhängige mittlere Streuung berücksichtigt. Alle betrachteten Streuprozesse sind damit durch ein Adatom (i) einem Mehrfachstreubereich (i) zugeordnet. Die für die Mehrfachstreubereiche notwendige Größe hängt von der Streuenergie, der Orientierung der einfallenden und auslaufenden Strahlen zum Kristall, von der Dämpfung der Elektronenwellen im Kristall und von der gewünschten Güte der Näherung ab. Entsprechend der Größe des Amplituden-Abschwächungskoeffizienten $\lambda_{EE} = 7 \text{ \AA}$ für $E = 50 \text{ eV}$ (siehe 4.2.2) sollten Mehrfachstreubereiche mit einer Ausdehnung bis zu den drittnächsten Nachbarn ausreichen⁺⁾ . In der Adatomschicht ist

⁺⁾ Von Moritz et al. (1977) ist eine Modellrechnung für die Silber-(110)-Oberfläche unter Einschluß nächster und übernächster Nachbarn durchgeführt. Energieabhängige Intensitätskurven geben eine relativ gute Übereinstimmung mit Ergebnissen der vollen dynamischen Rechnung. Die vorhandenen Abweichungen können jedoch nach den Erfahrungen aus 4.2 Spineffekte bereits merkbar ändern.

wegen der geringeren Elektronendichte die Dämpfung jedoch schwächer (siehe Bild 16 und 4.1.2). Daher ist für die Wellenausbreitung in der Adatomschicht eine vergrößerte Reichweite anzusetzen (bis zu etwa $6 \cdot a$ in Kettenrichtung und $4 \cdot b$ senkrecht dazu).

Der spinabhängige Streufaktor der Mehrfachstreubereiche sei $F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i)$. Für die Amplituden folgt dann

$$B^{\uparrow\downarrow} = \sum_i F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{r}_i} \quad (39)$$

$F_b^{\uparrow\downarrow}$ sei in einen über alle Positionen \underline{r}_i gemittelten Strukturfaktor $\bar{F}_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k})$ und einen Rest $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i)$ zerlegt:

$$F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i) = \bar{F}_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) + \Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i) \quad (40)$$

Damit folgt

$$B^{\uparrow\downarrow} = \bar{F}_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}) \sum_i e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{r}_i} + \sum_i \Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{k}_0, \underline{k}, \underline{r}_i) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{r}_i} \quad (41)$$

In dem ersten Term sind Effekte der Spinpolarisation von der Anordnung der Mehrfachstreubereiche auf den Grundgitterplätzen unabhängig; Fehlordnung führt in den hier behandelten scharfen Überstrukturstrahlen über Antiphasenbeziehungen nur zu einer gleichmäßigen Abschwächung der beiden Amplituden B^\uparrow und B^\downarrow .

Ist die Überstrukturschicht geordnet (1x2 Überstruktur), verschwinden alle $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_i)$; existiert dagegen in der Überstrukturschicht Fehlordnung (Punktfehler, Antiphasendomenen), ist für die Mehrfachstreubereiche (j), die Fehler

enthalten, $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_j) \neq 0$. Die $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_j)$ zeigen im allgemeinen eine andere Spinabhängigkeit als die $\overline{F}_b^{\uparrow\downarrow}$; sie können damit die Spinpolarisation des auslaufenden Strahls ändern. Ihr Streuanteil in den scharfen halbzahligen Reflexen kann jedoch durch Antiphasenbeziehungen zwischen Partialwellen benachbarter Mehrfachstrebereiche teilweise ausgelöscht werden. Insgesamt werden die $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_j)$ die Spinpolarisation in den scharfen Überstrukturstrahlen nur schwach beeinflussen, solange sie als Störung zu behandeln sind.

Sind die Längen der dichtest gepackten Ketten in der Überstrukturschicht größer als die Ausdehnung der Mehrfachstrebereiche in a-Richtung, ist wegen der dann auch in b-Richtung bestehenden Nahordnungen die Aufspaltung (40) der Streufaktoren $F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_i)$ in einen gemittelten Anteil $\overline{F}_b^{\uparrow\downarrow}$ und eine Störung $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_i)$ sinnvoll möglich. Die Spinpolarisation in scharfen halbzahligen Strahlen sollte sich also erst dann wesentlich ändern, wenn die Kettenlängen die Ausdehnung der Mehrfachstrebereiche erreichen und unterschreiten; in temperaturabhängigen Messungen sollte die Polarisation über einen weiten Temperaturbereich nahezu konstant sein.

Dieses Verhalten der Spinpolarisation im scharfen halbzahligen Strahl könnte bei der Untersuchung von Adsorbatsystemen Vorteile bringen. Im Gegensatz zu den Intensitäten ist die Polarisation eine von der Fehlordnung in der Adsorbatschicht (von der Domänenstruktur) weitgehend unbeeinflusste Meßgröße. Die Lage des Adsorbats zum Grundgitter sollte damit bei einem Vergleich von Polarisationsmessungen mit entsprechenden Rechnungen sicherer bestimmt werden können als über Intensitätsmessungen.

Grundgitterstrahlen

In der Polarisation der Grundgitterstrahlen wirkt sich die Streuung von der Adatomschicht sowohl über ihre Polarisationsabhängigkeit als auch über ihren Anteil an der Intensität aus. Die Polarisation von Grundgitterstrahlen ist daher auch auf Fernordnung in der Adatomschicht empfindlich.

Durch Einsetzen von (36), (37) in (38) folgt

$$P_{a+b} = \frac{(A^{\uparrow 2} - A^{\downarrow 2}) + (b^{\uparrow 2} - b^{\downarrow 2}) + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos \beta^{\uparrow} - 2A^{\downarrow} b^{\downarrow} \cos \beta^{\downarrow}}{(A^{\uparrow 2} + A^{\downarrow 2}) + (b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2}) + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos \beta^{\uparrow} + 2A^{\downarrow} b^{\downarrow} \cos \beta^{\downarrow}} \quad (42)$$

Wesentlich an diesem Ausdruck sind die Interferenzterme $A^{\uparrow} \cdot b^{\uparrow} \cdot \cos \beta^{\uparrow}$; verschwänden sie, wäre das Ergebnis identisch mit dem einer inkohärenten Überlagerung der beiden entgegengesetzt polarisierten Teilstrahlen (\uparrow) und (\downarrow) (siehe Abschnitt 3.2). Eine Auswertung ist im allgemeinen schwierig, jedoch ist zu erkennen, daß bei geeigneter Wahl von b^{\uparrow} , b^{\downarrow} und β^{\uparrow} , β^{\downarrow} der Überstrukturanteil die "partielle" Polarisation $\tilde{P}_a = (A^{\uparrow 2} - A^{\downarrow 2}) / (A^{\uparrow 2} + A^{\downarrow 2})$ des Grundgitteranteils beliebig verändern kann.

Zu der "partiellen" Polarisation \tilde{P}_a seien noch zusätzliche gleichartige Kürzungen eingeführt:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_b &= (b^{\uparrow 2} - b^{\downarrow 2}) / (b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2}) \\ \tilde{I}_a &= A^{\uparrow 2} + A^{\downarrow 2} \\ \tilde{I}_b &= b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2} \end{aligned}$$

Wird die Streuung an der Überstrukturschicht wie für die halbzahligen Strahlen behandelt, so ist jetzt zu beachten, daß durch Fehler keine Antiphasenbeziehungen entstehen.

Änderungen in den Streuamplituden und in der partiellen Polarisation \tilde{P}_b werden jetzt im wesentlichen durch die $\Delta F_b^{\uparrow\downarrow}(\underline{r}_j)$ hervorgerufen.

Für einen Spezialfall sei das Verhalten der Polarisation P_{a+b} im Grundgitterstrahl näher betrachtet:

Es sei $\tilde{P}_a = 1$, $(\tilde{I}_b/\tilde{I}_a)^2 \ll 1$

Aus dieser Voraussetzung folgt wegen $A^\downarrow = 0$

$$P_{a+b} = \frac{A^{\uparrow 2} + b^{\uparrow 2} - b^{\downarrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}}{A^{\uparrow 2} + b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}} \quad (43)$$

$$= \frac{1 + \frac{b^{\uparrow 2} - b^{\downarrow 2}}{A^{\uparrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}}}{1 + \frac{b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2}}{A^{\uparrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}}}$$

$$\approx 1 + \frac{b^{\uparrow 2} - b^{\downarrow 2}}{A^{\uparrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}} - \frac{b^{\uparrow 2} + b^{\downarrow 2}}{A^{\uparrow 2} + 2A^{\uparrow} b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}} + \mathcal{O}\left(\frac{\tilde{I}_b^2}{\tilde{I}_a^2}\right)$$

$$\approx 1 - \frac{2b^{\downarrow 2}}{A^{\uparrow 2}} \left(1 - \frac{2b^{\uparrow} \cos\beta^{\uparrow}}{A^{\uparrow}} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{\tilde{I}_b^2}{\tilde{I}_a^2}\right) \quad (44)$$

Mit $2b^{\uparrow 2} = \tilde{I}_b(1 \pm \tilde{P}_b)$ (siehe (15)) und $\tilde{I}_a = A^{\uparrow 2}$ ergibt sich

$$P_{a+b} = 1 - (1 - \tilde{P}_b) \frac{\tilde{I}_b}{\tilde{I}_a} \left(1 - \sqrt{2(1 + \tilde{P}_b) \frac{\tilde{I}_b}{\tilde{I}_a} \cdot \cos \beta^{\uparrow}} \right) \quad (45)$$

Sind \tilde{P}_b und β^{\uparrow} konstant, so sind Polarisationsänderungen in einem (scharfen) Grundgitterreflex ein Maß für Änderungen im Verhältnis \tilde{I}_b/\tilde{I}_a . Die Empfindlichkeit hängt dabei von der Reproduzierbarkeit ΔP der Polarisationsmessung und den Parametern \tilde{P}_b und β^{\uparrow} ab. Mit Mott-Detektoren ist $|\Delta P| < 0,5\%$ erreichbar. In dem Sonderfall $\tilde{P}_b = -1$ geht (45) in die einfache Form

$$1 - P_{a+b} \approx 2 \tilde{I}_b/\tilde{I}_a \quad (46)$$

über und die Empfindlichkeit auf relative Intensitätsänderungen wird mit $1/2 \cdot (\Delta P) < 0,25\%$ besonders groß. Dieser Sonderfall wird allerdings nur schwer zu realisieren sein.

Im Hinblick auf Adsorbatsysteme ist interessant, daß bei Variation der Bedeckung t aus dem Verlauf einer Meßkurve $P_{a+b} = P(t)$ über (45) die Größen \tilde{P}_b und β^{\uparrow} bestimmt werden können, sofern sie ebenso wie \tilde{P}_a (und \tilde{I}_a) von der Bedeckung unabhängig sind und \tilde{I}_b proportional zu t ist (Grenzfall kleiner Bedeckung).

Der Spezialfall mit der zu $\tilde{P}_a = 1$ entgegengesetzten Voraussetzung wäre $\tilde{P}_b = 1$. Für $\tilde{I}_b^2 \gg \tilde{I}_a^2$ ist er identisch mit Fall $\tilde{P}_a = 1$, wenn alle Größen entsprechend vertauscht werden. Für $\tilde{I}_b < \tilde{I}_a$ läßt sich P_{a+b} nur bei Vernachlässigung von \tilde{I}_b/\tilde{I}_a gegen 1, also in wesentlich schlechterer Näherung, vereinfacht darstellen. Das Ergebnis ist qualitativ ähnlich, wie im Fall $\tilde{P}_a = 1$, $\tilde{I}_b^2 \ll \tilde{I}_a^2$, ist aber wesentlich schlechter zu überschauen.

Der Fall $\tilde{I}_b \gg \tilde{I}_a$ kann verbunden mit einer Resonanz in der Überstrukturschicht bei gewissen Streubedingungen auftreten. Beim Verschwinden der Resonanz, also beim Zerfall einer Überstruktur, ist dann aber zu erwarten, daß \tilde{I}_b und \tilde{I}_a vergleichbar werden und daher die volle Gleichung (42) zu diskutieren ist.

Zusammenfassend betrachtet zeigt diese phänomenologische Beschreibung, daß die in der Position der scharfen Strahlen gemessene Spinpolarisation als Kenngröße für die Überstruktur - sowohl für ihre Nahordnung, als auch für ihre Fernordnung - verwendet werden kann. Für eine quantitative Diskussion wäre eine genaue Kenntnis der spinabhängigen Streufaktoren und ihrer Änderungen durch Fehler in der Struktur nötig. Rechnungen hierzu existieren noch nicht.

4.3.3 Diskussion der temperaturabhängigen Messungen

In Bild 28 sind drei temperaturabhängige Meßkurven gegeben. Von diesen wird die im wesentlichen ansteigende Kurve für das "Warm"-Minimum des (00)-Strahls bei $\theta \approx 76^\circ$ in der folgenden Diskussion nicht berücksichtigt. In ihr wird das Verhalten der Polarisation offensichtlich durch Eigenarten des Strahlwegs längs der (111)-Facetten bestimmt. Das Heizen führt dabei zu einer stetigen Änderung der Gitterstreuung. Die Voraussetzungen des im vorausgehenden Abschnitt benutzten Modells sind damit schlecht erfüllt.

Für die beiden anderen Strahlen, den (0 1/2)-Strahl bei $\theta \approx 91^\circ$ und den (00)-Strahl bei $\theta \approx 96^\circ$ sind in Bild 29 die Messungen aus Bild 28 in einem vergrößerten Ausschnitt dargestellt.

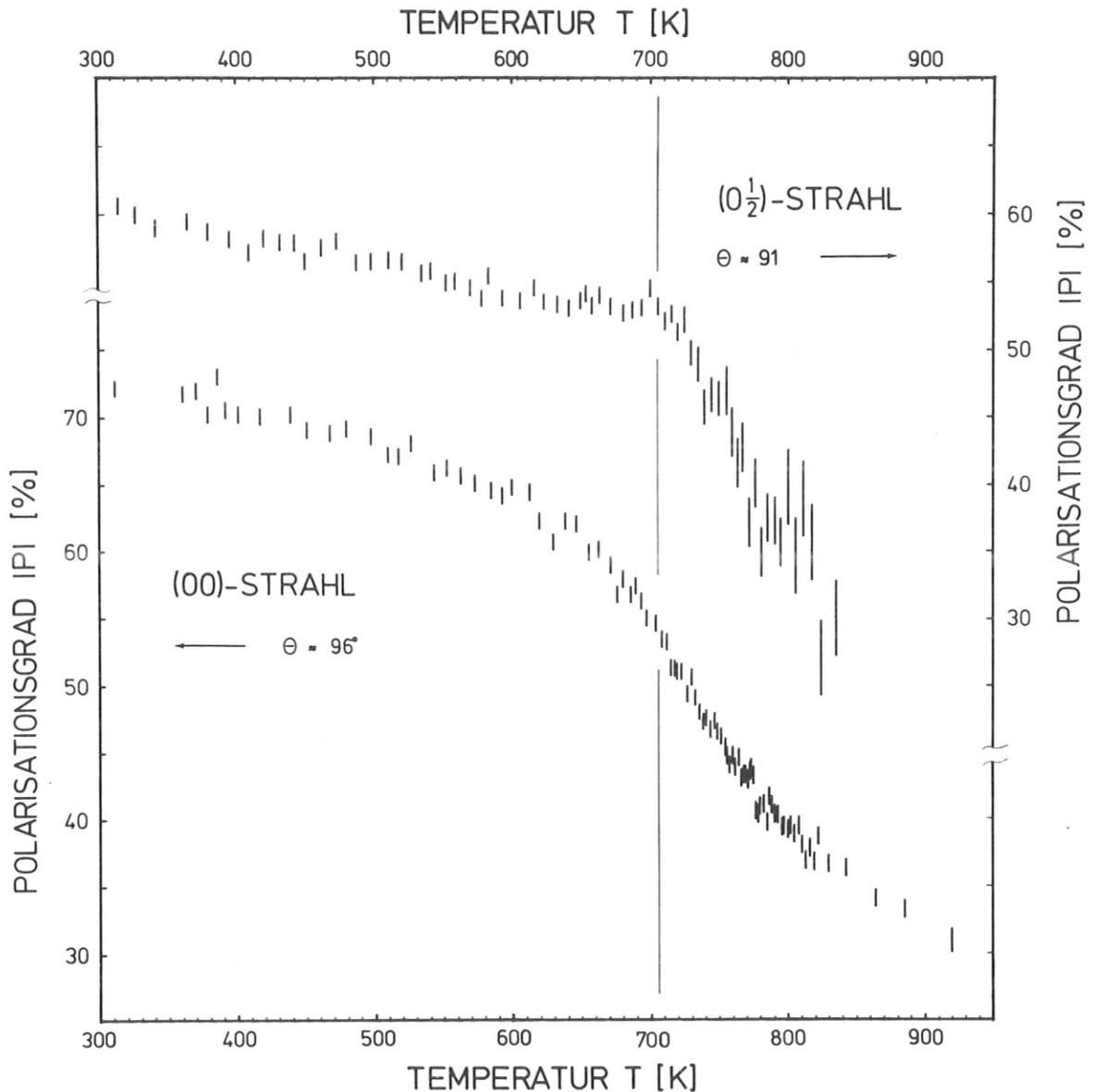


Bild 29: Polarisationsgrad $|P|$ in Abhängigkeit von der Kristalltemperatur für das "Kalt"-Minimum der Polarisation im (00)-Strahl bei $E = 50$ eV, $\varphi = 90^\circ$, $\theta = 96^\circ$ und für das Polarisationsminimum des $(0 \frac{1}{2})$ -Strahls bei $E = 50$ eV, $\varphi = 90^\circ$, $\theta = 91^\circ$. Zur Messung ist die "große" Streuanordnung im Mott-Detektor benutzt; geheizt ist im Pulsbetrieb. Die Fehlerbalken geben den statistischen Fehler der Polarisationsbestimmung. Zusätzliche Fehler der Messung sind: Eichung der Polarisation $\pm 10\%$ vom angegebenen Wert, Nullpunktsslage der Polarisation $\pm 1\%$, Temperatur ± 20 K (Winkelfehler siehe bei Bild 13).

Der (0 1/2)-Strahl zeigt das aus den obigen Überlegungen (4.3.2) geforderte Verhalten: der Polarisationsgrad des Strahls bleibt über einen großen Temperaturbereich bis etwa $T = 700$ K nahezu unabhängig von der Temperatur und wird dann stufenartig kleiner. Dieses Verhalten ist mit einer bei der kritischen Temperatur merkbar einsetzenden Änderung in der Struktur der Mehrfachstrebereiche, d.h. mit einsetzenden Änderungen der Cluster-Streufaktoren $F_b^{\uparrow\downarrow}$ zu erklären. Der schwache Abfall bis $T = 700$ K kann durch den zunehmenden Einfluß eines unpolarisierten thermisch diffusen Streuanteils verursacht sein, denn die kohärent gestreute Intensität nimmt in den Messungen mit steigender Temperatur fortlaufend ab, während die diffus gestreute anwächst (siehe 2.4.2, Gleichung (30)).

Auch das Verhalten des (00)-Strahls ordnet sich in die oben in 4.3.2 angegebene phänomenologische Beschreibung ein: Einer Grundgitterstreuung mit einer "partiellen" Polarisation $\tilde{P}_a \approx -35\%$ ist eine Überstrukturstreuung kohärent beigemischt, deren "partielle" Polarisation \tilde{P}_b bei etwa -75% liegt und deren Amplituden b^\uparrow , b^\downarrow mit wachsender Temperatur abnehmen. Solange die Struktur der Mehrfachstrebereiche im wesentlichen erhalten bleibt, also nach dem Verhalten des (0 1/2)-Strahls bis etwa $T = 700$ K, ist \tilde{P}_b konstant und die Phasenbeziehungen bleiben fest; der Polarisationsgrad P_{a+b} des Strahls fällt dann entsprechend (45) durch die Abnahme der Amplituden b^\uparrow , b^\downarrow .

Einen Fehler kann diese Beschreibung enthalten: die Voraussetzung, daß die Amplituden b^\uparrow , b^\downarrow mit steigender Temperatur kleiner werden. Das Wellenfeld der total ungeordneten Überstrukturschicht ist in den Positionen der scharfen Reflexe, in denen gemessen wird, ein abgeschwächtes Wellenfeld der Grundgitterschicht, bei Ordnung zeigen sich dagegen im Wellenfeld Einflüsse der Überstruktur (Duke und Liebsch 1974). Die Amplituden b^\uparrow , b^\downarrow könnten daher mit steigender Temperatur auch wachsen.

Offen ist jetzt noch die Frage, was aus den temperaturabhängigen Messungen über den Ordnungs-/Unordnungsübergang der Gold-(110)-Oberfläche zu lernen ist. Die Messungen zeigen eine ähnliche charakteristische Temperatur der Umwandlung, wie sie von Wolf (1972) und Wolf et al. (1977) angegeben wird: $T = 700 \text{ K} \pm 20 \text{ K}$. Diese Temperatur ist jedoch nicht die kritische Temperatur des zweidimensionalen Systems. Sie ist eine Grenztemperatur, bis zu der die Ketten so lang sind, daß die Struktur der Mehrfachstreubreiche nahezu gleich bleibt. Ab etwa $T = 700 \text{ K}$ ändert sich die Struktur dieser Bereiche wirkungsvoll.

Der Abfall des Polarisationsgrades selbst ist durch das Verhalten des Gesamtsystems (gestreute Elektronen + Kristall) bestimmt. Da die Ausdehnung der Kohärenzbereiche für die einfallenden Elektronen in der Größenordnung von etwa 100 \AA liegt (Park et al. 1971), wird in dem Experiment nur die Nahordnung in Bereichen von der Ausdehnung weniger 100 \AA Größe untersucht (Lagally et al. 1977). Daher ist - wie beobachtet - nicht eine scharfe, sondern eine auslaufende Änderung des von der Strukturwandlung abhängigen Meßeffekts zu erwarten, denn Nahordnung existiert auch oberhalb der Umwandlungstemperatur einer Struktur (vergl. z.B. Doyen et al. 1975).

Auffallend sind die Schwankungen im Verlauf der gemessenen Polarisationswerte. Sie könnten durch temperaturabhängige Wechsel in der Oberflächenstruktur oder durch Moden thermischer Schwingungen (Phononen) hervorgerufen sein. Da sie jedoch in der Größenordnung der statistischen Schwankungen liegen, könnten sie auch vorgetäuscht sein.

Für eine genauere Diskussion des gesamten Temperaturverhaltens sollten Messungen mit besserer Statistik für verschiedene Beugungsbedingungen (Strahlen) vorliegen. Insge-

samt paßt das hier gefundene Verhalten zu den Resultaten von Wolf (1972) und Wolf et al. (1977); mit einer Auswertung temperaturabhängiger Reflexprofile im Rahmen einer Fehlordnungstheorie erhalten sie ebenfalls einen Hinweis auf den Zerfall der Ketten bei der charakteristischen Temperatur von etwa 700 K. Daß Kettenbruchstücke bei den in Frage kommenden Temperaturen existieren und nicht durch Abdampfen verlorengelangen, zeigt sich in den Messungen am (01)-Strahl am Verhalten des Minimums der Polarisation bei $\theta \approx 110^\circ$; es existiert nahezu unverändert bis 780 K (vergl. 4.2.4, Bild 25) und weist deutlich auf das Vorliegen einer rauhen Oberflächenstruktur hin.

5. SCHLUSSFOLGERUNGEN UND AUSBLICK

In dieser Arbeit zur Beugung spinpolarisierter Elektronen an einer Gold-(110)-Oberfläche wird demonstriert, daß die Meßgröße Spinpolarisation sinnvoll zur Untersuchung vielfältiger Eigenschaften der Kristalloberflächen eingesetzt werden kann.

Die Spinpolarisation ist hier unter weitgehender Variation der experimentellen Parameter - der Streuenergie, der Orientierung des einfallenden Strahls zum Kristall und der Kristalltemperatur - systematisch untersucht worden. An dem Datensatz ist zu erkennen:

- signifikante spinabhängige Effekte existieren; Polarisationsgrade bis zu 80 % und Sprünge der Polarisation von etwa + 75 % auf - 75 % bei einer Änderung des Einfallswinkels um weniger als 3° sind zu beobachten,
- dynamische Streuprozesse bestimmen die Spinpolarisation wesentlich; bei festem Strahl Lauf und konstanter Energie ändert sich die Polarisation bei Variation der Kristallstellung oder der Oberflächenstruktur drastisch,
- den Resonanzen mit Zuständen im Kristall sind, wie von Jennings (1971b) für die Resonanz mit einem Oberflächenzustand vorausgesagt, auffallende Polarisationsstrukturen zugeordnet,
- die Zuverlässigkeit der Messungen kann unter Ausnutzen von Symmetrien überprüft werden,

- der Vergleich mit Rechnungen ist trotz Schwierigkeiten mit der Überstruktur der Gold-(110)-Fläche sinnvoll durchzuführen; Hinweise auf spezielle Eigenschaften der Oberfläche werden gewonnen,
- die Empfindlichkeit der Spinpolarisation auf Strukturänderungen kann zur Untersuchung von Ordnungs-/Unordnungsübergängen eingesetzt werden; Änderungen der Atomanordnungen in der Oberfläche äußern sich in Änderungen der Spinpolarisation,
- Kopplungen zwischen thermisch schwingenden Atomen scheinen erfaßbar; bei einer Temperatur, die nur etwa 15 % unterhalb der Schmelztemperatur des Goldes liegt, existieren noch Mehrfachstreuprozesse, die ferngeordnete Gruppen gekoppelter Atome voraussetzen.

Viele der in dieser Aufzählung enthaltenen Effekte sind im Rahmen dieser Arbeit nur kurz behandelt, es ist dabei das Ziel verfolgt, Möglichkeiten für nachfolgende Untersuchungen aufzuweisen.

Ein nächster Beitrag zum Problemkreis der Spinpolarisation bei der Beugung sollte sein, eine nicht rekonstruierte Oberfläche, z.B. eine Gold-(111)-Fläche, sowohl experimentell als auch theoretisch gründlich zu untersuchen. Die Unterschiede zwischen dem im Experiment und dem in der Theorie behandelten System wären dann beseitigt; die Nützlichkeit und Empfindlichkeit der Spinpolarisation zur Erforschung von Oberflächenstrukturen könnte im Vergleich zur herkömmlichen Intensitätsanalyse an einem quantitativ behandelten Beispiel gezeigt werden. Erst anschließend ist eine Weiterentwicklung der Theorie zum Einschluß von Überstrukturen sinnvoll durchzuführen (Feder 1977c).

Während die rekonstruierte Gold-(110)-Fläche für einige Teile dieser Arbeit deutliche Nachteile gebracht hat, hat sie jedoch gerade wegen ihrer Überstruktur Hinweise auf zusätzliche Anwendungen der Spinpolarisation gegeben. Ordnungs-/Unordnungsübergänge sowie Strukturen "leichter" Adsorbate auf einem "schweren" Grundgitter, z.B. Wasserstoff auf Wolfram, könnten untersucht werden.

Alle bislang diskutierten Fragen beschäftigen sich damit, spinabhängige Effekte bei der Beugung zur Untersuchung der streuenden Oberfläche zu verwenden. Die Frage stellt sich, ob die gefundenen Effekte mit Nutzen auch in einem Analysator oder Polarisator bei der Erforschung anderer spinabhängiger Wechselwirkungen einzusetzen sind. Einen Analysator unter Verwendung der Beugung zu bauen, ist ein naheliegender Schritt, da die für einen Mott-Detektor notwendige Hochspannungstechnologie entfällt. Jedoch birgt die primitive symmetrische Zwei-Strahl-Anordnung nach Art des Mott-Detektors wegen der Justierempfindlichkeit der Beugung die Gefahr, daß apparative Asymmetrien Meßeffekte vortäuschen (vergleiche Bild 22, untere Meßkurven). In jedem Fall sollten mehrere sich gegenseitig kontrollierende Strahlen erfaßt werden. Aus Intensitätsgründen und wegen abnehmender Justierempfindlichkeit erscheint ein schräger Einfall des zu untersuchenden Strahls besonders günstig. Die Nachweisempfindlichkeit kann noch nicht abgeschätzt und mit der des Mott-Detektors verglichen werden; die dazu notwendigen Intensitätsmessungen fehlen. Jedoch erscheint es schwierig, einen guten Mott-Detektor wesentlich zu überbieten, da große Polarisierungseffekte auch bei der Beugung stets in der Nähe eines relativen Minimums der Intensität liegen. Randbereiche von Resonanzen könnten dabei besonders günstige Streubedingungen bieten (vergleiche 4.1.2 Bild 18).

Eine zuverlässige Quelle für Strahlen spinpolarisierter Elektronen ließe sich unter Verwendung der Beugung aufbauen; jedoch liegen bei Streubedingungen mit hohem Polarisationsgrad $|P|$ die erreichbaren Strahlintensitäten auch bei Kühlung des Kristalls wahrscheinlich stets unter 1 % der Primärstrahlintensität (für das Minimum der Polarisation bei $E = 50 \text{ eV}$, $\varphi = 90^\circ$, $\theta = 96^\circ$ - das "Kalt"-Minimum, siehe Bild 17, 27 - ist bei $T \approx 320 \text{ K}$ ein Intensitätsverhältnis $I/I_0 < 10^{-4}$ gefunden worden). Bei Berücksichtigung der Vorteile, die eine modulierbare GaAs-Quelle für polarisierte Elektronen nach Pierce und Meier (1976) bietet, erscheint es uninteressant, eine Quelle zu entwickeln, die spinabhängige Effekte bei der Beugung ausnutzt.

Meßtechnisch bringt das Erfassen der Polarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen gegenüber Intensitätsmessungen Vorteile: Es ist nicht nötig, Reflexprofile zu integrieren, eine einzige Messung in der scharfen Position eines Reflexes enthält die volle Information über den (scharfen) Reflex. Dazu ist die Empfindlichkeit unabhängig von der Intensität, die gerade in Minima der Intensität starken dynamischen Effekte sind voll erfassbar. Der thermisch diffuse Untergrund stört dabei allerdings ähnlich wie bei Intensitätsmessungen durch Überlagerung.

Zum Abschluß dieser Arbeit kann die Vermutung ausgedrückt werden, daß in der Folgezeit die Spinpolarisation bei der Beugung niederenergetischer Elektronen an Kristalloberflächen an Bedeutung für die Klärung der Eigenschaften von Festkörperoberflächen gewinnen wird; vielfältige Arbeitsrichtungen sind aufgezeigt, die ersten Ergebnisse sind ermutigend.

6. DANKSAGUNG

Die Vorstellungen, die diese Arbeit geleitet haben, sind in den Jahren 1964/67 in der Arbeitsgruppe von Herrn Dr. Siegmann am Institut für Theoretische Physik der Universität München entstanden. Herrn Professor Dr. Siegmann danke ich für die vielen Anregungen, die ich damals durch ihn erhalten habe.

Herrn Professor Dr. Jagodzinski danke ich für sein großes Interesse an dieser Arbeit und für seine Förderung der Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Wolf.

Dem Max-Planck-Institut für Plasmaphysik danke ich, daß ich diese Arbeit als Beitrag des Projekts Plasma-Wand-Wechselwirkung zum Sonderforschungsbereich 128 "Elementare Anregungen an Oberflächen" durchführen durfte. Insbesondere gilt mein Dank Herrn Dr. Vernickel - er hat die Arbeit großzügig gefördert - und Herrn Dr. Eckstein - er hat diese Arbeit tatkräftig unterstützt und auf Grund seiner Erfahrungen in dem Gebiet der Elektronen-Spinpolarisation oft wertvolle Hinweise gegeben.

Dem Sonderforschungsbereich 128 danke ich für die Bereitstellung der persönlichen Mittel; diese Unterstützung erlaubte, die Arbeit durchzuführen.

Herrn Dr. Wolf danke ich für seinen Einsatz bei der Vorbereitung des Experiments, für seine Mitarbeit bei der Durchführung wichtiger Messungen und für viele wertvolle Diskussionen.

Herrn Dr. Feder danke ich für die umfangreiche Zusammenarbeit und für viele anregende Gespräche.

Herrn Dipl.Phys. Ertl und Herrn Dipl.Ing. Bauer danke ich für viele Hilfen beim Aufbau und bei der Durchführung des

Experiments. Dazu schulde ich vielen anderen Kollegen im Projekt Plasma-Wand-Wechselwirkung und im Institut für Kristallographie Dank für ihre Bereitschaft zu Gespräch und Unterstützung.

Herr Nagleder und Herr Plöckl haben mit ihrem technischen Können und mit ihrer Sorgfalt wesentlich zum Zustandekommen dieser Arbeit beigetragen. Ihnen gilt mein besonderer Dank. Einbeziehen in diesen Dank möchte ich auch alle die technischen Mitarbeiter des IPP und des Instituts für Kristallographie, die in vielerlei Weise an dieser Arbeit ihren Anteil haben.

Fräulein Fritschke schulde ich Dank für die Herstellung der freitragenden Goldfolien, Herrn Ing. Dinklage für die Anfertigung der Kugelnetze. Nicht zuletzt danke ich Frau Kraus für die Herstellung des Manuskriptes.

7. LITERATURVERZEICHNIS

- Aberdam D., Baudoing R., De Bersuder L. (1974).
Rev. Sci. Instrum. 45, 1573
- Adnot A., Carette J.D. (1977).
Phys. Rev. Lett. 38, 1084
- Andersen O.K., unveröffentlicht
- Bedell L.R., Farnsworth H.E. (1973).
Surface Sci. 41, 165
- Besocke K., Krahl-Urban B., Wagner H. (1977).
Surface Sci. 68, 39
- de Broglie L. (1924). These Paris,
abgedruckt in Journ. de Phys. 7 (1926)
- Bunyan P.J., Schönfelder J.L. (1965).
Proc. Phys. Soc. (London) 85, 455
- Calvert R.L., Russell G.J., Haneman D. (1977).
Phys. Rev. Lett. 39, 1226
- Cavanagh P.E., Turner J.F., Coleman G.F.,
Gard G.A., Ridley B.W. (1957).
Phil. Mag. VIII 2, 1105
- Cooper T. (1970). "A Study of the Energy and Angular
Distributions of Electrons Scattered from Tungsten",
CSL Coordinated Science Lab., Urbana Ill.,
Report R-491/UIIU-ENG 70-236
- Coulthard M.A., Walker J.W. (1968).
Unveröffentlicht (siehe Eitel et al. 1968)
- Davisson C.J. und Germer L.H. (1927).
Phys. Rev. 30, 705
- Davisson C.J. und Germer L.H. (1928). Nature 122, 809

- Davisson C.J. und Germer L.H. (1929). Phys. Rev. 33, 760
- Debe M.K., King D.A. (1977). J.Phys. C, 10, L 303
- Demuth J.E., Marcus P.M., Jepsen D.W. (1975).
Phys. Rev. B 11, 1460
- Doyen G., Ertl G., Plancher M. (1975).
J. Chem. Phys. 62, 2957
- Duke C.B., Liebsch A. (1974). Phys.Rev. B9, 1126 und 1150
- Eckstein W. (1967). Z. Phys. 203, 59
- Eckstein W. (1970). "Polarisationseffekte bei der
elastischen Elektronenstreuung", interner Bericht
IPP 7/1, Institut für Plasmaphysik, Garching
- Eitel W., Jost K., Kessler J. (1967). Phys. Rev. 159, 47
- Eitel W., Jost K., Kessler J. (1968).
Z. Naturforschung 23a, 2122
- Erbudak M., Siegmann H.C. (1977). Satellit Conf. of the
 10^{th} Int. Conf. on Physics of Electronic and
Atomic Collisions, Juli 1977. Paris (unveröffentlicht)
- Fedak D.G., Gjostein N.A. (1967). Acta Metallurgica 15, 827
- Farago P-S. (1971). Rep. Prog. Phys. 34, 1055
- Feder R. (1970). Unveröffentlicht, siehe Jennings 1971a
- Feder R. (1971). Phys. stat. sol. (b) 46 K 31
- Feder R. (1972). Phys. stat. sol. (b) 49, 699
- Feder R. (1976). Phys. Rev. Lett. 36, 598
- Feder R. (1977a). Phys.Rev. B15, 1751
- Feder R. (1977b). Surface Sci. 68, 229
- Feder R. (1977c). persönliche Mitteilung
- Feder R., Jennings P.J., Jones R.O. (1976).
Surface Sci. 61, 307
- Felter T.E., Barker R.A., Estrup P.J. (1977).
Phys. Rev. Lett. 38, 1139

Fink M., Yates A.C. (1970).

"Tables of Scattering Amplitudes and Spin Polarizations of....", Electronic Research Center, Univ. of Texas at Austin, Technical Report No. 88

Formenko V.S. (1966).

Handbook of Thermionic Properties, G.V. Samsonov ed., Plenum Press Data Div., New York

Garwin E.L., Kirby R.E. (1977).

Proc. 7th Intern. Vac. Congr. and 3rd Intern. Conf. Solid Surfaces (Wien 1977) Vol. III, 2399

Gersten J.I., McRae E.G. (1972). Surface Sci. 29, 483

Green H.S., Hurst C.A. (1964).

Order-Disorder Phenomena
Interscience Publishers (Wiley), London

Hart C.G., Stiddard M.H.B. (1974).

Surface Sci. 44, 638

Henrich V.E. (1975). Surface Sci. 49, 675

Hirabayashi K. (1968). J.Phys.Soc. Japan 25, 856

Holzwarth G., Meister H.J. (1964).

"Tables of Asymmetry, Cross Section and Related Functions for Mott Scattering of Electrons by Screened Gold and Mercury Nuclei"
(Universität München, 1964)

Huber K.P. (1972). American Institute of Physics

Handbook, McGraw Hill, New York, Section 7g

Jackson D.P. (1974). Surface Sci. 43, 431

Jackson K.A., Gilmer G.H. (1976), Faraday Discuss 61, 53

Jagodzinski H. (1977). Proc. 7th Intern.Vac.Congr. and 3rd Intern.Conf. Solid Surf. (Wien 1977), Vol.III, 2391

Jagodzinski H., Moritz W., Wolf D. (1977). Vorabdruck,
(Teil I einer Serie)

- Jennings P.J. (1970). Surface Sci. 20, 18
- Jennings P.J. (1971a). Surface Sci. 26, 509
- Jennings P.J. (1971b). Surface Sci. 27, 221
- Jennings P.J. (1974). Japan J.Appl.Phys.Suppl. 2, Pt.2, 661
- Jennings P.J., Sim B.K. (1972). Surface Sci. 33, 1
- Jepsen D.W., Marcus P.M., Jona F. (1972).
Phys. Rev. 35, 3933
- Kalisvaart M., Riddle T.W., Dunning F.B., Walters G.K.(1977)
37th Annual Physical Electronics Conf., Stanford
(unveröffentlicht)
- Kambe K. (1970). Surface Sci. 20, 213
- Kessler J. (1967).Rev. Mod. Phys. 41, 3
- Kessler J. (1976). Polarized Electrons, (Texts and
Monographs in Physics), Springer-Verlag Berlin, Heidelberg
- Kirschner J., Feder R. (1977).
Conf. 50th Anniversary of the Discovery of Electron
Diffraction, Imperial College London
(veröffentlicht Surf. Sci. 79, 176 (1979))
- van Klinken J. (1966). Nuclear Physics 75, 161
- Knapp A.G., Stiddard M.H.B. (1972).
J.Chem.Soc. Faraday Trans. I 68, 2139
- Kostelitz M., Domange J.L., Dudar J. (1973).
Surface Sci. 34, 431
- Kuyatt C.E. (1975). Phys. Rev. B 12, 4581
- Lagally M.G., Ngoc T.C., Webb M.B. (1971).
Surface Sci. 2, 444
- Lagally M.G., Wang G.-C., Lu T.-M. (1977).
3rd Int. Summer Inst. in Surf. Sci. Milwaukee
(veröffentlicht in CRC Crit. Reviews of Solid
State Sciences 7, 233 (1978)).

- Lang N.D., Kohn W. (1970). Phys. Rev. B 1, 4555
- Lee T.D., Yang C.N. (1952). Phys. Rev. 87, 410
- Henry N.F.M., Lonsdale K. (1959). Internat. tables for
X-ray crystallography, vol. III
- Loth R. (1967). Z. Physik 203, 66
- Loth R., Eckstein W. (1966). Phys. Lett. 20, 390
- Maison D. (1966). Phys. Lett. 19, 654
- McRae E.G. (1966). J. Chem. Phys. 45, 3258
- McRae E.G. (1971). Surface Sci. 25, 491
- McRae E.G., Caldwell C.W. (1967). Surface Sci. 7, 41
- McRae E.G., Caldwell C.W. (1976). Surface Sci. 57, 63
- McRae E.G., Landwehr J.M., Caldwell C.W. (1977).
Phys.Rev.Lett. 38, 1422
- Meister H.J., Weiss H.F. (1968). Z. Physik. 216, 165
- Moritz W., Jagodzinski H., Wolf D. (1977).
Vorabdruck (Teil II einer Serie)
- Mott N.F. (1932). Proc. Roy. Soc. (A) 135, 429
- Müller N. (1966). "Ein Detektor für Elektronenpolarisation
mit direkter Registrierung", Diplomarbeit,
Universität München
- Müller N. (1975). Phys. Letters 54a, 415
- Müller N. (1977). Verhandl. DPG (VI) 12, 334, O-38
- Müller N., Eckstein W., Heiland W., Zinn W. (1972).
Phys. Rev. Letters 29, 1651
- Müller N., Wolf D. (1976). Bull.Am.Phys.Soc.II 21, 944
- Müller N., Wolf D. (1977).
Proc. 7th Intern. Vac.Congr. and 3rd Intern. Conf.
Solid Surf. (Wien 1977), Vol. III, 2754
- Müller N., Wolf D., Feder R. (1977).
Conf. 50th Anniversary of the Discovery of Electron
Diffraction, Imperial College, London

- O'Neill M.R., Kalisvaart M., Dunning F.B., Walters G.K.
(1975). Phys. Rev. Letters 34, 1167
- Park R.L., Houston J.E., Schreiner D.G. (1971).
Rev. Sci. Instrum. 42, 60
- Pendry J.B. (1974). Low Energy Electron Diffraction
(Academic Press, London)
- Pierce D.T., Meier F., Zürcher P. (1975).
Appl. Phys. Letters 26, 670
- Pierce D.T., Meier F. (1976).
Phys. Rev. B13, 5484
- Pierce D.T., Celotta R.J., Unertl W.N. (1977).
Proc. 7th Intern. Vac. Congr. and 3rd Intern. Conf.
Solid Surf. (Wien 1977), Vol. II, 1297
- Raith W. (1962). "Zur Messung der Spinpolarisation
von Elektronenstrahlen", Dissertation,
TU Berlin
- Siegmann H.C. (1964). Persönliche Mitteilung
- Sinharoy S., Stern R.M., Goldstone P.D. (1972).
Surface Sci. 30, 207
- Shull C.G., Chase C.T., Myers F.E. (1943).
Phys. Rev. 63, 29
- Smoluchowski R. (1941). Phys. Rev. 60, 661
- Taglauer E., Beitat U., Marin G., Heiland W. (1976).
J. Nucl. Mat. 63, 193
- Thomson G.P. (1928). Proc. Roy. Soc. (A)
117, 600 und 119, 651
- Uhlenbeck G.E. und Goudsmit S. (1925).
Die Naturwissenschaften 13, 953
- Webb M.B. und Lagally M.G. (1973).
Solid State Physics 28, 302 (Ehrenreich H.,
Seitz F., Turnbull D., ed., Academic Press,
New York).

Weisskopf V. (1935). Z. Physik 93, 561

Wolf D. (1972). "Beugung niederenergetischer Elektronen
an Gold-Oberflächen", Dissertation,
Universität München

Wolf D., Jagodzinski H., Moritz W. (1977).
Vorabdruck (Teil III und IV einer Serie)

Wolf D. und Zimmer A. (1977). Persönliche Mitteilung

Woodruff D.P. und Holland B.W. (1970).
Physics Letters 31A, 207

Zehner D.M., B.R. Appleton, J.H. Barrett (1977).
Persönliche Mitteilung.