

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «САНКТ-
ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

ПЕТРОВ Владимир Никифорович

СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТИ

Специальность 01.04.04 – физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург
2005

Работа выполнена в Санкт – Петербургском государственном политехническом университете на кафедре экспериментальной физики.

Научный консультант:
доктор физико-математических наук В.М. Уздин

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
член-корреспондент РАН В.В. Устинов

доктор физико-математических наук
профессор В.В. Кораблев

доктор физико-математических наук
профессор М.В. Гомоюнова

Ведущая организация:
Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ)

Защита состоится 28 апреля 2005 года в ___ часов на заседании диссертационного Совета Д 212.229.01 в Санкт-Петербургском государственном университете по адресу: Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, II учебный корпус, ауд. 470.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке университета.

Автореферат разослан 27 марта 2005 года.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

А.И. Титов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Прогресс технологий создания низкоразмерных магнитных систем, открытие в них новых фундаментальных явлений, важных для понимания самой природы магнетизма, а также перспективы использования наноструктур в новейших приборах и устройствах, в том числе при разработке современных компьютеров, определяют постоянно растущий интерес к этой области физики. Антиферромагнитное межслойное взаимодействие и гигантское магнетосопротивление, открытые в металлических магнитных сверхрешетках, не только заложили новое направление физики магнитных явлений, но также привели к качественному усовершенствованию памяти компьютеров и появлению нового поколения сенсорных устройств. В созданных в последнее время электронных устройствах используется спиновая степень свободы заряженных частиц. В научной литературе даже появился специальный термин «спинтроника». Поэтому изучение спиновых состояний поверхности приобретает огромное значение.

Анализ поляризации электронов служит основой для целого ряда экспериментальных методов изучения поверхности. В диссертации особое внимание уделено двум подходам, существенный прогресс в развитии которых достигнут благодаря работам автора. Это Спин-Поляризационная Электронная Оже-Спектроскопия (СПЭОС) дающая возможность по отдельности исследовать магнитную структуру каждой из компонент, входящих в сложную магнитную систему, и метод Спин-Поляризационной Томографии Ферми Поверхности (СПТФП), позволяющий исследовать поверхности Ферми электронов с каждой из проекций спина и, таким образом, изучать спиновую структуру электронных состояний поверхности твердых тел и тонких пленок в k-пространстве.

При исследовании свободных и заполненных поверхностных электронных состояний на одних и тех же образцах использовались различные экспериментальные методы. В ряде случаев образцы были специально изготовлены под экспериментальную технологию.

Цель диссертационной работы состояла в выяснении природы спиновых электронных состояний поверхности твердого тела и развитии методов спин-поляризационных экспериментов на базе инструментов нового поколения, созданных под руководством автора. Физико-химические свойства поверхности твердых тел в значительной мере определяются энергетической структурой электронных (как заполненных, так и свободных) состояний. Поэтому результаты исследования спиновых структур в реальном и/или обратном пространстве позволяют учитывать и контролировать многие явления на поверхности твердого тела.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить три основных задачи:

- 1). Создать инструменты нового поколения для спин-поляризационных экспериментов.

2). Разработать методики экспериментов по анализу спиновых электронных состояний поверхности на базе этих инструментов.

3). Провести исследование свободных и заполненных спиновых электронных состояний как магнитных, так и немагнитных материалов, используя взаимодополняющие экспериментальные методы.

Научная новизна работы определяется тем, что в ней впервые: при исследовании *свободных состояний в немагнитных материалах*

- Обнаружены свободные резонансные электронные состояния на поверхности кристалла PbS(100). Экспериментально установлены дисперсионные зависимости энергии этих состояний от квазимпульса в плоскости поверхности $E(k_{\parallel})$. Показано, что такие состояния поляризованы по спину.
- Экспериментально доказано наличие спин-расщепленных объемных электронных свободных состояний кристалла PbS в L точке зоны Бриллюэна. Определена величина спинового расщепления этого состояния.

при исследовании *свободных состояний в магнитных материалах*

- Установлены дисперсионные зависимости $E(k_{\parallel})$ спин-расщепленных свободных электронных состояний для FeNi₃(110). Показано, что при объединении чистых металлов Fe и Ni в сплавы происходит как модификация свободных электронных состояний, так и поляризация глубоких уровней под действием магнитных моментов локализованных на соответствующих атомах. Установлено, что в упорядоченном сплаве FeNi₃ железо становится «сильным» ферромагнетиком.
- Определены величины спиновых расщеплений для объемных и поверхностных свободных состояний FeNi₃(110). Показано, что в первом приближении расщепление спиновых состояний в упорядоченном сплаве является взвешенным средним его компонент. Установлено, что температурные зависимости приповерхностной намагниченности Fe и Ni имеют вид, характерный для объемного магнетизма.

при исследовании *заполненных состояний в магнитных материалах*

- Получены спин-разрешенные Оже-спектры Fe и Ni поверхности кристалла FeNi₃(110) и разработана методика, позволяющая анализировать магнитные свойства компонент сплавов на основе таких спектров. Установлена значительная поляризация глубоких уровней Fe под действием локальных магнитных моментов.
- Обнаружен эффект изменения направления поверхностной намагниченности FeNi₃(110) при изменении величины внешнего магнитного поля.
- Показано, что электронная структура пленки никеля на поверхности меди приобретает все признаки объемной при толщине 3,5 монослоя. При этом объемная структура *sp* электронов формируется уже при толщине 1,2 монослоя, тогда как в случае *d* электронов, она начинает формироваться только при толщине 2,4 монослоя. Установлено, что при толщине

пленки Ni ~3 монослоя происходит пара-ферромагнитной переход (при T=150K).

при исследовании *заполненных состояний в немагнитных материалах*

- Установлено, что тонкая пленка ванадия на поверхности ферромагнетика FeNi₃(110) приобретает индуцированный магнитный момент, направленный антипараллельно моменту подложки. При возрастании толщины пленки ванадия до 12 монослоев индуцированный момент уменьшается, но не исчезает.
- Исследованы поверхностные состояния Au(111) в окрестностях Г точки зоны Бриллюэна. Установлено, что дисперсионные кривые этих состояний имеют параболический вид, причем состояния с противоположными спинами расщеплены по энергии за счет спин-орбитального взаимодействия. Показано, что спины электронов таких состояний всегда параллельны поверхности кристалла.

Научная и практическая значимость работы.

Научная ценность работы состоит в том, что в ней определены основные характеристики спиновых заполненных и свободных электронных состояний поверхности ряда магнитных и немагнитных элементов и соединений, а также проанализирована динамика изменения электронных состояний и механизмы их формирования в тонких пленках в зависимости от толщины. На этой основе создана целостная физическая картина спиновых электронных состояний поверхности, позволяющая интерпретировать многочисленные поверхностные спиновые эффекты и объяснять результаты экспериментов с разрешением по спину.

Практическая ценность диссертации состоит в создании спин-поляризационных приборов нового поколения, которые легко встраиваются в высоковакуумные исследовательские установки: компактного классического детектора Мотта для экспериментов со спиновым анализом и энергоанализатора для спин-поляризационной электронной Оже-спектроскопии. На созданных под руководством автора компактных классических детекторах Мотта, которыми оснащены несколько синхротронных ускорителей и лабораторий Европы, к настоящему времени уже выполнены многочисленные эксперименты. Разработанные автором методики позволяют сделать спин-поляризационные эксперименты такими же надежными и доступными, как и традиционные методы анализа поверхности.

На защиту выносятся:

1. Разработанные под руководством автора экспериментальное оборудование и новые методики спин-поляризационных экспериментов, позволяющие получить уникальную информацию о поверхностных спиновых состояниях.

2. Обнаружение поляризованных по спину свободных резонансных электронных состояний на поверхности кристалла PbS(100); модели образования спиновых состояний; экспериментально определенные

дисперсионные зависимости $E(k_{\parallel})$ поверхностных состояний для PbS(100).

3. Экспериментально определенные спин-расщепленные дисперсионные зависимости $E(k_{\parallel})$ свободных электронных состояний поверхности FeNi₃(110); различия между магнитными свойствами чистых элементов и элементов в сплавах, возникающие из-за изменений в плотностях свободных состояний и из-за химического сдвига глубоких уровней; идентичность температурного поведения намагниченностей Fe и Ni в сплаве FeNi₃.

4. Результаты исследования поляризации Оже-пиков Fe и Ni поверхности сплава FeNi₃(110) и методы вычисления, позволяющие определять магнитные моменты, локализованные на соответствующих атомах; наблюдение эффекта поляризации глубоких уровней; обнаружение эффекта изменения направления намагниченности поверхности FeNi₃(110) под действием слабого внешнего магнитного поля.

5. Физическая картина формирования электронной структуры при росте пленки Ni на поверхности Cu(100), характеризующаяся образованием *sp* зон при малых толщинах и формированием *d* зон при толщине пленки в несколько монослоев; наблюдение параферромагнитного перехода электронных *d* состояний в пленке.

6. Обнаружение индуцированного магнитного момента в пленке немагнитного V толщиной в 2 монослоя на поверхности FeNi₃(110), направленного антипараллельно моменту подложки.

7. Результаты исследования квазисвободных электронных состояний на поверхности Au(111), демонстрирующие расщепление на две параболические подзоны; установление механизма этого расщепления вследствие спин-орбитального взаимодействия.

Апробация работы. Основные результаты исследований, вошедших в диссертацию, были доложены и обсуждены на отечественных и международных конференциях, симпозиумах и семинарах: 6-8-ом Всесоюзных симпозиумах по ВЭЭ, ФЭЭ и СПТТ (Рязань, 1986, Ташкент, 1990, Рязань, 1996), 20-ой и 21-ой Всесоюзных конференциях по эмиссионной электронике (Киев, 1987, Ленинград, 1990), Европейских конференциях по изучению поверхности (ECOSS-13, Ворвик, Англия, 1993; ECOSS-14, Лейпциг, Германия, 1994; ECOSS-15, Лилль, Франция, 1995; ECOSS-16, Генуя, Италия, 1996; ECOSS-17, Энхеде, Голландия, 1997; ECOSS-18, Вена, Австрия, 1999; ECOSS-20, Краков, Польша, 2001; ECOSS-21, Мальме, Швеция, 2002), 13-ом Международном вакуумном конгрессе (13th IVC, Иокогама, Япония, 1995), Международном симпозиуме по кристаллографии (Нанси, Франция, 2000), Международных конференциях по синхротронному излучению (Ле Диаблеретс, Швейцария, 2000; Виллиген, Швейцария, 2002), Международных семинарах участников проекта INTAS (Бохум, Германия, 2003; Санкт-Петербург, Россия, 2004; Страсбург, Франция, 2004), конференциях по проблемам науки и высшей школы (Санкт-Петербург, Россия, 2002, 2003), на рабочих семинарах сотрудников синхротронных ускорителей (Дарсбери, Англия, 1998; Виллиген,

Швейцария, 2000; Орсей, Франция, 2002; Берлин, Германия, 2004), на семинарах кафедры экспериментальной физики СПбГПУ.

Публикации. По теме диссертации опубликовано более 60 печатных работ. Список основных статей приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, основных выводов и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации 289 страниц, включая 72 рисунка, а также списка литературы из 185 наименований. Структура диссертации отражена в таблице, представленной на следующей странице. Таблица представляет собой идеализированную энергетическую диаграмму твердого тела в верхней части которой располагаются свободные, а в нижней - заполненные электронные состояния. Вертикальными линиями диаграмма разделена на колонки, одна из которых соответствует магнитным, а другая - немагнитным материалам. В ячейках содержатся сведения об объектах исследования, образцах и применяемых экспериментальных методах, а также о соответствующих главах диссертации.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, показаны новизна, научная и практическая значимость полученных результатов, приведены положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации содержится краткий обзор экспериментальных и теоретических работ, посвященных, в основном, спин-поляризационной электронной Оже-спектроскопии (СПЭОС). В первом параграфе главы изложены современные представления о спине электрона и связанным с ним магнитным моментом. Спин- собственный момент импульса элементарной частицы, имеющий квантовую природу и не связанный с перемещением частицы как целого. Проекция спина электрона на ось квантования может принимать два значения $S_z = +\hbar/2$ и $S_z = -\hbar/2$ (модуль спина равен $S = \sqrt{3}\hbar/2$). Со спином электрона связан его магнитный момент (собственный, или спиновый магнитный момент). Проекция собственного магнитного момента электрона равна магнетону Бора $\mu_B = e\hbar/2m$. Собственный магнитный момент электрона всегда направлен в сторону, противоположную направлению спина.

Электронные пучки, в которых спины имеют преимущественную ориентацию, называются поляризованными. Количественной характеристикой поляризации пучка является вектор

	Немагнитные материалы	Магнитные материалы
Незаполненные электронные состояния	<i>объекты исследования</i> – поверхностные состояния, электронная	<i>Объекты исследования</i> – поверхностные состояния, электронная

<p><i>спин-чувствительный инструмент для исследования – первичный поляризованный пучок электронов</i></p>	<p>структура образцы - W(100), PbS(100) методы - Спин-Поляризационная Дифракция Медленных Электронов (СПДМЭ), Спин-Поляризационная Инверсная Фотоэмиссия (СПИФЭ)</p> <p>ГЛАВА 3</p>	<p>структура, магнитная структура образцы – FeNi₃(110), FeNi₃(111) методы - Спин-Поляризационная Инверсная Фотоэмиссия (СПИФЭ), Спин-Поляризационная Спектроскопия Потенциалов Появления (СПСПП)</p> <p>ГЛАВА 4</p>
	У р о в е н ь	Ф е р м и
<p>Заполненные электронные состояния</p> <p><i>спин-чувствительный инструмент для исследования – спин-детектор вторичных или фотоэлектронов</i></p>	<p>объекты исследования – электронная структура, магнитная структура, поверхностные состояния образцы – пленки V на FeNi₃(110), Au(111) методы - Спин-Поляризационная Электронная Оже-Спектроскопия (СПЭОС), Спин-Поляризационная Томография Ферми Поверхности (СПТФП)</p> <p>ГЛАВА 6</p>	<p>Объекты исследования – электронная структура, магнитная структура образцы – FeNi₃(110), Ni(111), пленки Ni на Cu(100) методы - Спин-Поляризационная Электронная Оже-Спектроскопия (СПЭОС), Спин-Поляризационная Томография Ферми Поверхности (СПТФП)</p> <p>ГЛАВА 5</p>

поляризации **P**. Его направление совпадает с направлением суммарного спина электронов, а длина, называемая степенью поляризации, определяется формулой: $P = (N^\uparrow - N^\downarrow) / (N^\uparrow + N^\downarrow)$, где N^\uparrow и N^\downarrow - число электронов со спинами, направленными параллельно и антипараллельно оси квантования. Спиновая зависимость процессов рассеяния электронов твердым телом может быть обусловлена, во-первых, спин-орбитальным взаимодействием и, во-вторых, магнитной упорядоченностью электронов мишени (т. е. обменным взаимодействием). Как правило, при рассеянии электронов на магнитных материалах возникают оба эти взаимодействия. Рассмотрены примеры спин-поляризационных эффектов при спин-орбитальном и обменном взаимодействии.

Во втором параграфе главы проанализированы работы, в которых исследовались спин-поляризационные эффекты при вторично-электронной эмиссии. Сравнение спектров интенсивности и поляризации показало, что они простым образом связаны друг с другом через смешивание поляризованных электронов зоны проводимости и неполяризованных неупругорассеянных первичных электронов. В цитированных работах делаются выводы о том, что спектр вторичных электронов может быть понят в терминах некогерентной суперпозиции двух компонент, каждая из которых имеет постоянную поляризацию. Рассмотрены также вопросы, связанные с традиционной Оже-спектроскопией (без анализа по спине).

В третьем параграфе главы рассмотрены и описаны экспериментальные и теоретические работы, посвященные спин-поляризационной электронной Оже-спектроскопии (СПЭОС). Было показано, что испущенные из ферромагнетика оже-электроны являются поляризованными. Показано также, что поляризация оже-электронов, вследствие элементной чувствительности оже-процесса, может быть использована для определения магнитных моментов различных атомов в композитных магнитных системах. Был сделан вывод, что это дает возможность рассматривать ключевые проблемы, связанные с пониманием природы магнитных сплавов, изучением магнитных смесей, адсорбатов, ферромагнитных систем и т.д. В работах было показано, что спин-поляризационный оже-спектр, в котором участвуют два валентных электрона (т. е. CVV оже-переход), несет информацию о поляризации валентной зоны исследуемого образца. Исследовалась связь между величиной поляризации валентной зоны и поляризацией CVV оже-линии. Основным результатом данных работ можно считать следующий: CVV оже-спектр чистого железа с разрешением по спине описывается сверткой соответствующих плотностей электронных состояний. В работах представлены примеры расчетов матричных элементов оже-переходов. В конце главы сформулированы выводы из обзора и поставлены задачи настоящей работы при использовании метода СПЭОС.

Во второй главе диссертации описаны методы спин-поляризационных экспериментов, разработанные под руководством автора диссертации. В первом параграфе главы рассмотрена экспериментальная установка, созданная для исследования спиновых состояний поверхности методами спин-поляризационной электронной Оже-спектроскопии (СПЭОС), спин-поляризационной вторичной электронной эмиссии (СПВЭЭ) и методом магнито-оптического эффекта Керра (МОКЕ). Для проведения исследований методом СПЭОС был создан специальный спектрометрический комплекс. Он состоит из энергоанализатора электронов и детектора Мотта – анализатора спиновой поляризации электронов. Для управления экспериментом использовались созданные для этих целей электронные блоки. Во время проведения измерений управление работой спектрометра осуществлялось компьютером по специально разработанным программам. При этом проводилось два типа

измерений: записывались петли гистерезиса и регистрировались энергетические спектры с разрешением по спине.

При записи петель гистерезиса энергия пропускания энергоанализатора оставалась неизменной, а измерялась зависимость поляризации вторичных или Оже-электронов от тока, протекающего через катушку намагничивания. При записи энергетических спектров регистрировались зависимости числа электронов в двух каналах детектора Мотта от энергии вторичных электронов. Измерения проводились путем многократного сканирования выбранного диапазона.

Во втором параграфе главы описан энергоанализатор типа “цилиндрического зеркала” разработанный специально для СПЭОС (рис.1). Вначале были определены требования, которые необходимо учитывать при создании анализатора: 1. Светосила должна обеспечивать такой поток электронов, чтобы скорость счета в одном канале детектора Мотта была не менее 10^6 имп/сек при токе первичного пучка в несколько мкА. 2. Угол выхода электронов должен быть малым настолько, насколько это возможно. Традиционные анализаторы типа “ц.з.” имеют угол выхода около 43° . Сбор электронов и их транспортировка в детектор Мотта при таком угле выхода вызывает определенные трудности. 3. Расстояние между входом анализатора и образцом должно быть не менее 25 мм. Это вызвано необходимостью работы с магнитными образцами, занимающими большой объем из-за катушек намагничивания.

Электроны, которые необходимо анализировать по энергии и в дальнейшем по спине (см. рис.1), проходят сквозь входную щель анализатора. Входная щель обеспечивает сбор электронов в пределах конусов от 18.5 до 21.5 градусов. Электроны выходят из анализатора под углом примерно в 35 градусов. Такой угол позволяет без особых проблем собирать и направлять электроны в детектор Мотта. Анализатор может функционировать в двух режимах: при фиксированном относительном разрешении $\Delta E/E = \text{const}$ и при фиксированном абсолютном разрешении $\Delta E = \text{const}$. Экспериментально определенная величина $\Delta E/E$, измеренная по пику упруго отраженных электронов, составила $\sim 0.7\%$. Полные размеры спектрометра (включая детектор Мотта) – 25×55 см.

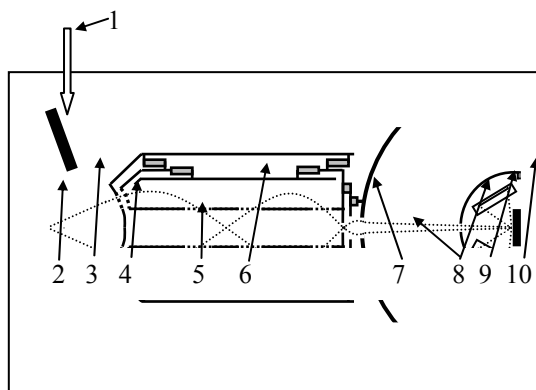


Рис. 1 Схема спектрометра: энергоанализатор (АЦЗ)-детектор Мотта. 1 – входной электронный пучок; 2 – исследуемый образец; 3 – электронные траектории; 4 – входные сетки; 5 – керамические кольца; 6 – проходные сетки; 7 – фокусирующий электрод; 8 – полусферические электроды детектора Мотта; 9 – PIPS - детекторы; 10 – золотая фольга.

В третьем параграфе главы описан новый компактный классический детектор Мотта (рис.2). В диссертации сформулированы основные требования, которые выдвигались при проектировании нового моттовского детектора: 1. Максимально возможная эффективность прибора; 2. Измеряемая поляризация должна соответствовать истинной поляризации электронов и не должна зависеть от положения пучка; 3. Детектор должен быть готов к работе через несколько минут после включения. Не должно быть никаких процедур по введению прибора в строй ни до, ни в процессе работы. Детектор должен работать без изменения основных параметров в течение многих лет в условиях любого вакуума; 4. Прибор должен быть компактным и размещаться на фланце ДУ100.

Для удовлетворения этим условиям была выбрана схема классического детектора Мотта. Особенностью классического моттовского детектора является то, что электроны в нем после рассеяния движутся в свободном от электрического поля пространстве. Существуют также спин-детекторы, в которых электроны после

рассеяния движутся в задерживающем электрическом поле. Ранее нами было показано, что моттовские детекторы с задерживающим полем очень чувствительны к изменению параметров пучка и только

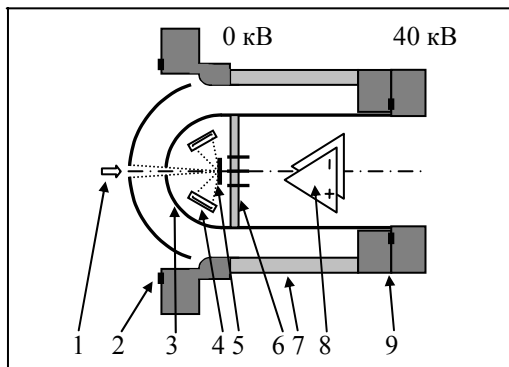


Рис. 2 Схема 40 кВ детектора Мотта. 1 – входной электронный пучок; 2 – фланец ДУ 100; 3 – полусферы; 4 – PIPS детекторы; 5 – золотая фольга; 6 – вакуумный ввод; 7 – керамический изолятор; 8 – предусилители; 9 – фланец ДУ 63.

классический детектор Мотта обеспечивает необходимую стабильность. Известно, что для селекции электронов, которые рассеялись на золоте в классическом моттовском поляриметре необходимо использовать детекторы, чувствительные к энергии электронов. Применявшиеся ранее поверхностно барьерные детекторы (ПБД) большой площади в паре с входными предусилителями имели низкое разрешение и значительный собственный шум. Все это не позволяло успешно селективировать сигнал и шум при энергиях электронов значительно меньших 100 кэВ. Поэтому раньше классические детекторы Мотта имели весьма большие размеры из-за необходимости использовать столь высокое напряжение. В настоящее время появились новые PIPS-детекторы (Passivated Implanted Planar Silicon) с малыми обратными токами, новые мал шумящие транзисторы и на их основе были разработаны новые электронные схемы. Это позволило понизить высокое напряжение до 40 кВ и создать достаточно компактный прибор. Эффективность представленного детектора в настоящее время является рекордной ($\epsilon = 5.6 \times 10^{-4}$).

Третья глава диссертации посвящена исследованию свободных электронных спиновых состояний немагнитных материалов. В первом параграфе представлены результаты исследования PbS(100) и W(100) методом спин-поляризационной дифракции медленных электронов (СПДМЭ). На процесс взаимодействия электронов низких энергий с кристаллами влияют состояния, локализованные вблизи поверхности. Информация о таких поверхностных состояниях может быть получена методом дифракции медленных электронов (ДМЭ). Учет спинового состояния при взаимодействии электронов с твердым телом может дать дополнительную, а зачастую существенно новую информацию о механизмах рассеяния, характеристиках потенциального барьера на границе твердое тело-вакуум, физико-химических свойствах поверхности. Если энергия и импульс падающих электронов таковы, что они не могут, с одной стороны, войти в твердое тело из-за высокого коэффициента отражения на поверхности а, с другой стороны, преодолеть электростатическое притяжение, то они оказываются локализованными у поверхности (поверхностные резонансы). Выход в вакуум возможен за счет дифракции с изменением параллельной компоненты волнового вектора k_{\parallel} на вектор поверхностной обратной решетки \mathbf{g} . Электроны, локализованные в таких поверхностных состояниях, двигаясь вдоль поверхности, испытывают многократное упругое рассеяние на атомах кристалла. Спин-орбитальное взаимодействие при этом приводит к повороту спина и к небольшому изменению параллельной компоненты волнового вектора электронов. Энергия спин-орбитального взаимодействия будет различной для электронов с противоположными направлениями спинов. Все это вызывает различие в сечениях процессов дифракции (с временным захватом в поверхностное состояние) для противоположным образом поляризованного первичного электронного пучка. Спиновая зависимость процесса рассеяния приводит к возникновению асимметрии: $A = (1/P)(\Gamma^+ - \Gamma)/(\Gamma^+ + \Gamma)$, где Γ^+, Γ - интенсивности вторичных пучков рассеянных на фиксированный угол, при изменении направления поляризации (P) первичного пучка. Использование поляризованных пучков электронов многократно увеличивает вероятность обнаружения таких резонансов. Выбор объектов исследования определялся следующими обстоятельствами: 1. Поверхностные состояния W(100) достаточно хорошо изучены, поэтому сравнение полученных экспериментальных результатов с имеющимися в литературе позволило провести отработку экспериментальной методики СПДМЭ; 2. Сульфид свинца PbS - полупроводник, содержащий элемент (Pb) с высоким атомным номером, что обуславливает большую величину потенциала спин-орбитального взаимодействия. Исследование спин-зависимого рассеяния низкоэнергетичного пучка поляризованных электронов от поверхности PbS(100) проводилось как в азимутальной плоскости (010) при изменении угла падения θ , так и для фиксированного θ при изменении азимутального угла ϕ . Исследовались спектры $A(E_p)$ при рассеянии в плоскости (010) для различных углов падения (E_p - энергия первичного

пучка). Анализ экспериментальных результатов проводился с использованием диаграммы $E(k_{\parallel})$, представляющей собой проекцию объемной зонной структуры в зеркальной плоскости ГХWK зоны Бриллюэна на поверхностную зону Бриллюэна (ПЗБ) вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{M}$. При построении диаграммы использовались дисперсионные соотношения $E(k)$ вдоль направлений высокой симметрии кристалла PbS.

Во втором параграфе главы представлены результаты исследования объемных спин-расщепленных свободных электронных состояний PbS(100). При низких энергиях первичного пучка основным механизмом наряду с упругим отражением является электрон-электронное рассеяние с возбуждением внутри- и межзонных переходов. При этом как медленный первичный, так и возбужденный вторичный электроны могут переходить в свободные состояния ниже уровня вакуума. При наличии спинового расщепления таких состояний может возникать асимметрия поглощения поляризованных противоположным образом первичных электронов, что также будет приводить к возникновению асимметрии рассеяния. Анализ такой асимметрии дает информацию о наличии и величине спинового расщепления в свободной от электронов зоне. Объектом наших исследований был выбран кристалл PbS(100), поскольку сульфид свинца имеет, согласно теоретическим расчетам, значительное спин-орбитальное расщепление в L-точке зоны Бриллюэна в зоне проводимости ниже уровня вакуума. Экспериментально исследовалось спин-зависимое рассеяние в диапазоне энергий первичных поляризованных электронов $E_p = 0-6$ eV. Наиболее ярко выраженные особенности спектров наблюдались при $E_p \approx 2$ eV и $E_p = 3-5$ eV. В диссертации представлены расчеты модельной асимметрии и проведено сравнение с экспериментальными результатами. Показано, что особенности асимметрии рассеяния при энергии первичного пучка $E_p \approx 2$ эВ обусловлены заселением поляризованными электронами спин-расщепленных уровней в зоне проводимости кристалла ниже уровня вакуума.

В третьем параграфе главы приводятся результаты исследования спиновой асимметрии (т.е. спин зависимой фотонной интенсивности) методом спин-поляризационной инверсной фотоэлектронной спектроскопии (ИФЭС). Материалом, выбранным для этих исследований, также являлся сульфид свинца PbS(100).

Измерения выполнялись при комнатной температуре изохроматным методом, с регистрацией фотонов с энергией 9.50 эВ при помощи твердотельного детектора. Детектор фотонов располагался под углом в 71 градус по отношению к направлению входящего электронного луча. Спин поляризованные ИФЭС спектры, снятые для $\bar{\Gamma}\bar{M}$ направления поверхностной зоны Бриллюэна PbS(100), представлены в левой части рис. 3. В правой части рисунка показана спиновая асимметрия. $\bar{\Gamma}\bar{M}$ направление соответствует волновому вектору электронов

расположенному в ГХУК симметричной плоскости зоны Бриллюэна PbS. Видно, что спиновая асимметрия присутствует при всех углах падения электронов. Спектры, записанные при угле наклона 18 градусов, демонстрируют спиновую асимметрию вплоть до 18%, с отрицательными и положительными значениями. В диссертации делается вывод, что электроны, проникающие в твердое тело, захватываются в поверхностные электронные состояния, и спиновое расщепление возникает за счет резонансных эффектов. Особенности в области энергий 2-4 эВ и при малых углах входа (до 25 градусов) как раз и обусловлены такими эффектами. При спине падающих электронов, перпендикулярном к плоскости, образованной пучком и нормалью к поверхности, и волновом векторе электронов k , лежащем в ГХУК симметричной плоскости, экспериментально обнаружено спиновое расщепление свободных электронных состояний в L точке зоны Бриллюэна. Оно проявляется как смещение низковольтной части пика интенсивности фотонов (для электронов с противоположными направлениями спинов) на величину примерно в 0.4 эВ, что соответствует теоретическим оценкам спинового расщепления.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию свободных электронных спиновых состояний магнитных сплавов. В первом параграфе представлены результаты исследования поверхности кристалла $FeNi_3(110)$ методом спин-поляризационной инверсной фотоэмиссии (СПИФЭ). Поверхностные магнитные свойства кристалла могут быть охарактеризованы обменным расщеплением кристаллически- индуцированных поверхностных состояний, а также

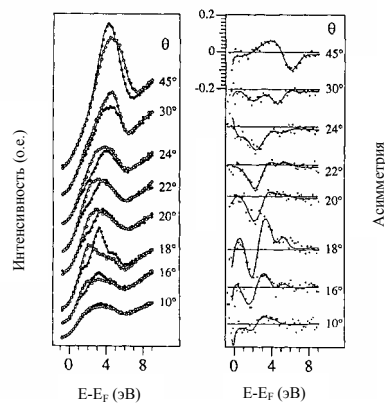


Рис. 3 Спин-поляризованные ИФЭ спектры интенсивности PbS(100) в направлении $\bar{\Gamma}\bar{M}$ азимута при различных углах падения электронов (θ) относительно нормали к поверхности. Соответствующие спиновые асимметрии показаны справа.

расщеплением

проекций объемных состояний. Методом магнито-оптического эффекта Керра (МОКЕ) *in situ* были проведены измерения по определению магнитного поля, необходимого для достижения намагниченности насыщения и оценки возможности работы с остаточной намагниченностью. В экспериментах измерялись СПИФЭ спектры FeNi₃ (110) при различных углах падения электронов. Положения пиков были определены после обработки каждого спектра. Как и ожидалось, пики спин-вниз спектров имели более высокие энергии, чем соответствующие пики спин-вверх кривых. Проекция объемных зонных структур и поверхностные состояния показаны на диаграмме (рис. 4): энергии как функции от параллельного поверхности волнового вектора $E(k_{\parallel})$. Особенность С при энергии примерно 2,5 эВ выше энергии Ферми интерпретируется в диссертации как поверхностное состояние. Расчеты электронной структуры, выполненные из первых принципов для FeNi₃, подтвердили наличие поверхностных зон вдоль $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ направления. Пик А является

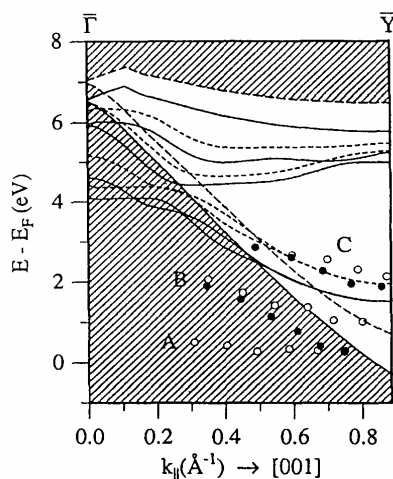


Рис. 4 Диаграмма в координатах энергии, как функции параллельного поверхности волнового вектора для $\text{FeNi}_3(110)$. Проекции объемных зон заштрихованы. Открытые (заполненные) кружки соответствуют спин-вниз (спин-вверх) положениям экспериментальных пиков.

особенностью спин-вниз спектра, возникающей из-за переходов электронов в свободные 3d зоны. Особенность В, возникающая для двух спиновых направлений связана с переходами в состояния, имеющие s-p характер, хотя и со значительной гибридизацией с 3d зонами. Для особенностей типа s-p в случае $\text{FeNi}_3(110)$ обменное расщепление составило около 550 мэВ по сравнению с 300 мэВ для чистого Ni (110). Поверхностные состояния $\text{FeNi}_3(110)$ расщеплены на величину около 320 мэВ по сравнению с 190 мэВ для чистого Ni(110). Величина наблюдаемого обменного расщепления поверхностного состояния согласуется с имеющимися расчетами.

Второй параграф главы посвящен исследованию спин-расщепленных свободных электронных состояний поверхности $\text{FeNi}_3(111)$, а также развитию экспериментального метода, который позволяет получать магнитную информацию с элементной разрешающей способностью. Спин-поляризационная спектроскопия потенциалов появления (СПСПП) - один из немногих экспериментальных методов, которые удовлетворяют этим критериям. Идея метода заключается в следующем: образец облучается электронами, энергия которых плавно возрастает. В то же самое время регистрируется возникающее рентгеновское излучение. При достижении первичными электронами некоторой пороговой энергии, электроны глубоких уровней возбуждаются в свободные состояния выше энергии Ферми (потенциал появления). При этом количество испускаемых частиц возрастает из-за рекомбинации начальной дырки посредством рентгеновского излучения или эмиссии Оже электронов. Поскольку возбуждающий и возбужденный электроны рассеиваются в свободные состояния, число возможных переходов зависит от плотности электронных состояний (ПЭС) выше уровня Ферми. Элементарная разрешающая способность обусловлена тем, что подключаются глубокие уровни, энергии которых характеризуют различные элементы. С использованием поляризованных электронов СПП становится магнито-чувствительным методом.

В диссертации приведены результаты исследования $\text{FeNi}_3(111)$, выполненного методом спин-разрешенной СПП, используемым для получения локальной магнитной информации. Результаты для сплава сравниваются с данными для чистых элементов. Различия между спин-разрешенными СПП интенсивностями для чистых элементов и для этих элементов в сплаве более выражены у железа, чем у никеля. Этот результат объясняется, в основном, двумя причинами: во-первых, атомы Ni в упорядоченном сплаве FeNi_3 имеют в качестве ближайших соседей в два раза большее число атомов Ni, чем Fe, тогда как у атомов Fe все

ближайшие соседи - это атомы Ni. Во-вторых, кристаллическая структура сплава и чистого никеля одинаковы (ГЦК), а чистое железо имеет другую кристаллическую решетку (ОЦК).

Детальный анализ данных был выполнен при помощи расчетов спин-зависимых плотностей свободных состояний для Fe и Ni в чистых веществах и в сплаве. Показано, что экспериментально наблюдаемые различия между чистыми элементами и элементами в сплавах в СПП спектрах возникают из-за изменений в плотностях свободных состояний и из-за химического сдвига основных уровней. В частности, Fe - «слабый» ферромагнетик как чистое вещество, становится «сильным» ферромагнетиком в упорядоченном сплаве FeNi₃. СПСПП оправдал себя как эффективный метод изучения многокомпонентных магнитных структур. Поскольку интенсивность СПП пиков определяется плотностью электронных состояний выше энергии Ферми, этот метод особенно подходит для изучения элементов с высокой плотностью свободных состояний, таких как переходные металлы и их сплавы.

В третьем параграфе методом СПСПП было исследовано температурное поведение намагниченности железа и никеля в сплаве FeNi₃(111). Внутри изучаемой температурной области от 100 до 1100 К в объеме FeNi₃ возникает два фазовых перехода: структурный переход типа порядок-беспорядок между 770 и 785 К и переход типа ферромагнетик-парамагнетик с температурой Кюри 863 К. Поведение спиновой асимметрии A(T) оказалось одинаковым для Fe и Ni когда они находятся в сплаве и когда образец намагничен внешним полем «до насыщения». Как для Fe, так и для Ni A(T) следуют объемному характеру намагниченности и асимметрия исчезает при объемной температуре Кюри T_c. Данные СПСПП экспериментов показали, что спиновая асимметрия СПП сигнала пропорциональна намагниченности. Однако, поскольку различия в плотности электронных состояний FeNi₃ в фазах порядок-беспорядок слишком малы, в диссертации делается вывод, что определить фазовый переход типа порядок-беспорядок методом СПСПП невозможно.

Пятая глава диссертации посвящена исследованию заполненных электронных спиновых состояний магнитных материалов. В первом параграфе представлены результаты исследования поляризации оже-электронов монокристалла FeNi₃(110). Для этого сплава хорошо известны объемные концентрации и намагниченности входящих в него компонентов, поэтому он удобен для проверки новых методик. В диссертации представлены результаты исследования поляризации всех основных оже-пиков Fe и Ni. На рис. 5 приведены низковольтные пики. Анализ экспериментальных данных показал, что задача получения намагниченности элементов в магнетонах Бора из спин-разрешенных оже-спектров является достаточно сложной. В диссертации предложены два пути решения этой проблемы: 1. Необходимо накопить как можно большее число экспериментальных данных по чистым элементам, таким как Fe, Co, Ni для каждой оже-

линии, а также набрать как можно большее число экспериментальных данных по этим линиям для элементов, входящих в состав различных сплавов, для которых известны намагниченности входящих в них компонент. Тогда можно будет построить таблицы или диаграммы, позволяющие оценивать намагниченность исходя из поляризации оже-пиков. Спин-поляризационная оже-спектроскопия имеет то важное преимущество, что при расчетах поляризации нет необходимости знать абсолютные значения интенсивности оже-пиков, поскольку поляризация является нормированной величиной; 2. Необходимо совершенствовать методики теоретических расчетов. Эта задача является сложной, поскольку требуется по отдельности рассчитывать

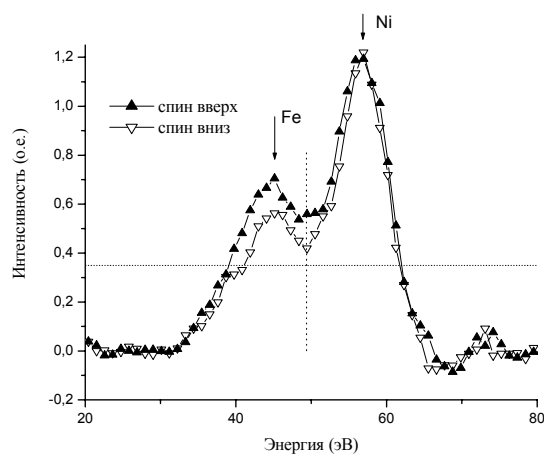


Рис. 5 Спин-разрешенные оже-спектры поверхности $\text{FeNi}_3(110)$ после вычитания фона, соответствующие $M_{23}M_{45}M_{45}$ ($3p3d3d$) переходам железа и никеля.

плотности заполненных электронных состояний компонент сплава. Необходимо также учитывать наличие двух дырок в оже-процессе и дополнительную поляризацию глубоких уровней.

Намагниченность переходных 3d-металлов определяется поляризацией валентной зоны и может быть рассчитана на основе известных спин-разрешенных плотностей электронных состояний. В диссертации на основе расчетных состояний Fe и Ni в сплаве FeNi₃ вычислялась средняя поляризация валентной зоны. Известно, что при формировании CVV оже-пика происходит процесс, который хорошо описывается самосверткой плотностей электронных состояний. Поэтому в диссертации вычислялась также средняя поляризация валентной зоны после самосвертки. Было установлено, что проведение самосверток спин-разрешенных плотностей электронных состояний приводит к возрастанию средней поляризации зоны, что в свою очередь должно приводить к увеличению поляризации оже-пика. В то же самое время, в ходе оже-эмисии происходят процессы с переворачиванием спина, которые уменьшают поляризацию оже-электронов. Таким образом, существует два процесса, один из которых должен увеличивать, а другой уменьшать поляризацию оже-пиков. В диссертации на основе экспериментальных данных предлагается феноменологическая формула оценки намагниченности атомов железа в составе сплавов: $I = \mu_B n (S_{\text{эксп}}^{\uparrow} - S_{\text{эксп}}^{\downarrow}) / (S_{\text{эксп}}^{\uparrow} + S_{\text{эксп}}^{\downarrow})$, где $S_{\text{эксп}}^{\uparrow}$ и $S_{\text{эксп}}^{\downarrow}$ - площади под соответствующими спин-разрешенными CVV оже-пиками, μ_B - магнетон Бора, n - концентрация валентных электронов. Установлено, что в случае высоковольтных пиков спин-обменные процессы оказывают более существенное влияние на поляризацию, чем в случае низковольтных CVV оже-переходов. Обнаружена значительная поляризация глубоких уровней в FeNi₃ под действием магнитных моментов локализованных на соответствующих атомах. Результатом этого является сильная поляризация оже-пиков образованных переходами, в которых не участвуют 3d электроны.

В следующем параграфе приведены результаты исследования температурной зависимости намагниченности поверхности монокристалла FeNi₃(110). Изучалась поляризация низковольтных оже-пиков железа и никеля как функция температуры [$P_{\text{оже}}(T)$]. Для этого при различных температурах в режиме «с остаточной намагниченностью» записывался спин-поляризационный оже-спектр в диапазоне 20÷80 эВ, включающем пики Fe и Ni. Поведение кривых $P_{\text{оже}}(T)$ носило немонотонный характер. Поляризация пиков железа и никеля, оставаясь положительной, убывала с ростом температуры. При температурах 720÷730 К начинался резкий спад поляризации, которая при температуре 760 К становилась отрицательной и при температуре порядка 780 К достигала своего минимума. При дальнейшем повышении температуры поляризация увеличивалась и при температурах выше 800 К снова становилась положительной. Для более тщательного исследования такого поведения кривых при энергии 47 эВ (соответствующей низковольтному пику Fe) записывались петли гистерезиса (рис. 6). По горизонтальной оси отложен ток, который пропорционален намагниченности образца, а по вертикальной оси – поляризация электронов. При низких температурах петли гистерезиса ведут себя обычным образом, когда для перемагничивания образца требуется приложение некоторого внешнего поля противоположного

направления. Однако при температуре 780 К наблюдается аномальное поведение петель. Переориентация намагниченности происходит без приложения внешнего поля противоположного знака. В диссертации делается вывод о том, что в отсутствие поля поверхность антиферромагнитным образом упорядочена относительно объема. Приложение внешнего поля в несколько эрстед ориентирует магнитный момент поверхности. Уменьшение этого поля приводит к тому, что оно больше не «удерживает» намагниченность поверхности, и ее магнитный момент меняется на противоположный. Данное явление представляет собой «триггерный» эффект. В диссертации предлагается модель, позволяющая на качественном уровне объяснить поведение намагниченности поверхности (110) кристалла FeNi_3 в широком диапазоне температур и в различных магнитных полях.

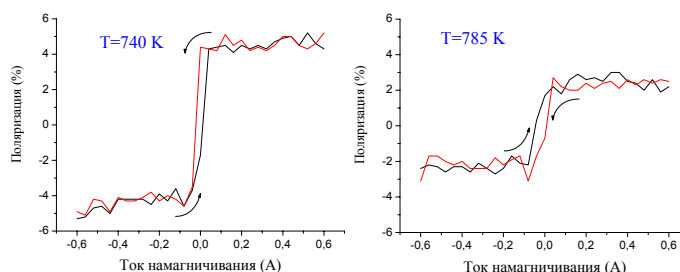


Рис. 6 Петли гистерезиса при различных температурах, записанные для электронов с энергией 47 эВ (соотв. низковольтному пику Fe).

Третий параграф посвящен исследованию поверхности Ферми Ni методом спин-поляризационной томографии Ферми поверхности (СПТФП). Изучалась поверхность кристалла Ni(111), а также пленки Ni на Cu(100). Ферми поверхность представляет собой поверхность некоторого объема, образованного полностью заполненными электронными состояниями, в обратном пространстве твердого тела (при $T=0\text{K}$). В случае ферромагнетиков, обладающих зонным магнетизмом, энергетические уровни электронов с противоположным значениям проекции спина сдвинуты друг относительно друга. Поэтому поверхности Ферми различны для этих электронов. Отображение картин постоянной энергии в k -пространстве (томография Ферми поверхности) представляет собой результат измерения интенсивностей фотоэлектронов фиксированной энергии с высоким угловым

разрешением, при прецизионном сканировании обоих эмиссионных углов во всей полусфере над поверхностью образца. Спектрометр для Спин-Поляризационной Томографии Ферми Поверхности (СПТФП) объединяет спиновый поляриметр с электронным энергоанализатором.

Полный трехмерный поляризационный вектор может быть определен при направлении электронов в два независимых перпендикулярно ориентированных детектора Мотта. На рис. 7 показан результат спин-разрешенного сканирования поверхности Ферми при изменении

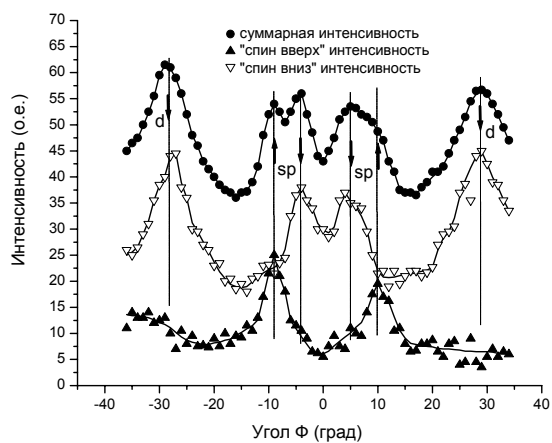


Рис. 7. Спин-интегральное и спин-разрешенные сечения поверхности Ферми Ni(111).

азимутального угла (полярный угол $\theta=78^\circ$ относительно нормали к поверхности). На рисунке также представлена спин-интегральная кривая. Видно, что d – зоны характеризуются только спин-вниз состояниями.

Тонкие пленки Ni на Cu(100) вызывают большой интерес, поскольку представляют собой ферромагнитную пленочную систему с анизотропией перпендикулярной поверхности. В таких пленках магнитные данные могут храниться с большей плотностью, чем в традиционных твердых дисках, где намагниченность лежит в плоскости поверхности. В работе исследовалась электронная структура Ni при его напылении на поверхность Cu(100). При использовании канального детектора измерения осуществлялись достаточно быстро и в широкой области k-пространства.

Спин-разрешенные исследования были проведены в наиболее симметричных участках этих областей. Электронная структура пленок Ni-Cu (100) приобретала вид характерный для объемного материала уже при толщине 2,4 монослоя. Однако особенности поверхности Ферми, связанные с *sp* электронами, имели вид объемных уже при толщине 1,2 монослоя. *d* зоны поверхности Ферми подвергались радикальному изменению при возрастании толщин от 2,4 до 3,5 монослоев. Установлено, что *d* зона поверхности Ферми при толщине 2,4 монослоя лучше описывается двумерной теорией. Двумерные интерфейсные состояния были идентифицированы около M-точки зоны Бриллюэна. При 3,5 монослоях и выше экспериментальные данные лучше описываются трехмерной теорией. Формирование *d* зоны заканчивается при толщине примерно в 6 монослоев. Методом спин-поляризационного анализа был обнаружен пара-ферромагнитный переход электронных *d* состояний ($T=150$ К) при толщине пленки никеля ~ 3 монослоя. Для *sp* электронов с этим переходом связан коллапс некоторых состояний.

Шестая глава диссертации посвящена исследованию заполненных электронных спиновых состояний немагнитных материалов. В первом параграфе диссертации представлены результаты исследования тонких V пленок, нанесенных на поверхность (110) кристалла FeNi₃. Использовался метод Спин-Поляризационной Электронной Оже Спектроскопии (СПЭОС), который давал возможность оценивать величину и знак намагниченности V на FeNi₃, а также определять толщину пленки V, при которой еще существует индуцированный магнитный момент. Данная методика позволяла также оценивать магнитные свойства верхних слоев Fe и Ni кристалла FeNi₃, на которые напылялся V. Пленки ванадия наносились с помощью термического испарительного устройства на хорошо подготовленную FeNi₃ поверхность монокристалла при комнатной температуре. Чистота подложки и слоев контролировалась с помощью оже - электронного анализа. Толщина пленок определялась посредством относительного изменения интенсивностей Fe, Ni и V Оже-пииков во время напыления. Спин-разрешенные оже-пиики V и Fe регистрировались для пленок толщиной в 1, 2, 5 и 12 монослоев. При толщине V пленки в 1 монослой расщепления оже-пиика V обнаружено не было (в пределах погрешности эксперимента). На рис. 8 представлен спин-разрешенный оже-пик V при толщине пленки в 2 монослоя. Видно, что поляризация пика V отрицательна (интенсивность оже-электронов со спином вниз больше,

чем со спином вверх), что говорит об антиферромагнитном упорядочении индуцированных моментов в пленке V относительно подложки. Большая интегральная поляризация пика подтверждает значительный магнитный момент на атомах V. Используя методику расчета намагниченности пиков, соответствующих $L_3M_{23}M_{45}$ – переходам, описанную в главе 3 диссертации, была произведена оценка намагниченности V в магнетонах бора. Особый интерес представляет поведение намагниченности подрешетки Fe при напылении пленки V.

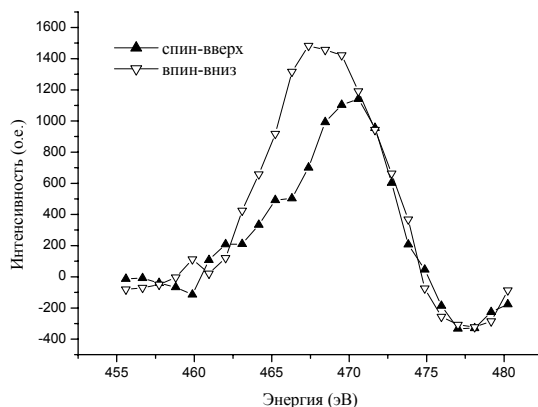


Рис. 8 Спин-разрешенный оже-пик (не производная) пленки ванадия толщиной 2 монослоя, напыленной на поверхность монокристалла $FeNi_3$ (0).

Вместо убывания намагниченности было обнаружено ее незначительное возрастание, находящееся в пределах ошибки эксперимента.

В следующем параграфе представлены результаты детального исследования спиновой структуры электронов в k-пространстве для системы, где этот эффект велик. Экспериментально изучались поверхностные состояния типа Шокли на Au (111). Для решения подобных задач был построен фотоэлектронный спектрометр высокого разрешения с возможностью полного спинового анализа. Известно, что поверхностные состояния на поверхностях (111) благородных металлов (Cu, Ag, Au), образованные *sp* электронами, заполнены квазисвободным электронным газом, который хорошо ограничен в направлении перпендикулярном к поверхности. Расщепление дисперсионных кривых на две параболические подзоны с одинаковыми эффективными массами и максимумами, расположенными при одной и

той же энергии связи было обнаружено несколько лет назад в случае Au (111) и было интерпретировано несколькими моделями, в том числе и посредством спин-орбитального взаимодействия. Вопрос о том какая из моделей реализуется был открыт вплоть до экспериментальных исследований, изложенных в диссертации.

Исследовалось сечение Ферми поверхности и регистрировались дисперсионные кривые Au (111) поверхностного состояния типа Шокли. При исследовании Ферми поверхности без анализа по спину были зарегистрированы два концентрических кольца, соответствующих сечению двух Ферми поверхностей. Небольшое искажение картины было связано с неоднородностью поверхности образца, которая проявлялась при его вращении. Анализ дисперсионных кривых позволил определить величину эффективной массы квазисвободных электронов на поверхности $m^*=(0.25\pm 0.02)m_e$ и расщепление $2k_0=(0,026\pm 0,002)\text{Å}^{-1}$. Были сняты спин-разрешенные спектры поверхностного состояния Au(111) для различных полярных эмиссионных углов в направлении азимутального угла, соответствующего направлению $\bar{\Gamma}\bar{M}$ зоны Бриллюэна. Данные экспериментов подтвердили предположение о том, что расщепление есть следствие спин-орбитального взаимодействия. Было установлено, что перпендикулярная поверхности компонента вектора поляризации всегда равна нулю, с точностью до экспериментальной ошибки.

Основные научные результаты

1. Для спин-поляризационных измерений созданы приборы нового поколения (детектор Мотта и энергоанализатор) и на их базе разработаны методики, позволяющие эффективно переходить от традиционных методов анализа поверхности к спин-разрешенным.

Свободные электронные состояния (немагнитные материалы)

2. Обнаружены поверхностные состояния, индуцированные потенциалом изображения перед порогом появления дифракционных рефлексов, в PbS(100). Установлено, что происходит захват первичных поляризованных электронов в эти поверхностные состояния. В направлениях перпендикулярных плоскости рассеяния это приводит к возникновению асимметрии рассеяния поляризованных электронов до 15%. Экспериментально определено энергетическое положение поверхностных состояний/резонансов PbS(100) и W(100) в функции k_{\parallel} для зеркальной плоскости ГХWK обратной решетки и в функции азимутального угла ϕ , при рассеянии в не зеркальных плоскостях для PbS(100).

3. Исследованы спин-расщепленные свободные электронные состояния PbS в L точке зоны Бриллюэна. Показано, что особенности асимметрии рассеяния при энергии первичного пучка $E_p \approx 2$ эВ обусловлены заселением поляризованными электронами спин-расщепленных уровней в зоне проводимости кристалла ниже уровня вакуума. Представлены расчеты модельной асимметрии и проведено сравнение с экспериментальными результатами. Определено энергетическое положение спин-расщепленного уровня в зоне проводимости. Согласно экспериментальным и расчетным данным его положение составило ≈ 2.2 эВ (относительно вершины валентной зоны).

4. Обнаружена значительная спиновая асимметрия при инверсной фотоэмиссии из PbS(100), которая очевидным образом не следует из классической трехстадийной модели. Показано, что происходит захват электронов, проникающих в твердое тело, в поверхностные электронные состояния, и, вследствие этого, за счет резонансных эффектов возникает спиновое расщепление. Электроны, локализованные в поверхностных состояниях, двигаясь вдоль поверхности, испытывают многократное упругое рассеяние на атомах кристалла. Возникающее при этом спин-орбитальное взаимодействие приводит к повороту спина и к небольшому изменению волнового вектора электронов. Энергия спин-орбитального взаимодействия различна для электронов с противоположными направлениями спинов. Экспериментально обнаружено спиновое расщепление свободных электронных состояний в L точке зоны Бриллюэна.

Свободные электронные состояния (магнитные материалы)

5. Исследована спин-расщепленная структура свободных электронных состояний FeNi₃(110) методом инверсной фотоэмиссии с разрешением по спину. Рассчитаны проекции объемных зонных структур, а также поверхностные зоны и представлены на диаграмме, как функции энергии от параллельного волнового вектора $E(k_{\parallel})$ вдоль направлений экспериментально наблюдаемых пиков. Экспериментально установлены дисперсионные зависимости $E(k_{\parallel})$ поверхностных состояний типа Шокли для $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ азимута. Поверхностные состояния демонстрируют обменное расщепление величиной около 320 мэВ, которое доказывает ферромагнитную природу поверхности сплава FeNi₃(110) и его ферромагнитную связь с объемом.

6. Исследована электронная структура сплава FeNi₃(111) (для каждого из элементов в отдельности). Спектры плотностей свободных электронных состояний Fe и Ni в этом сплаве, сравниваются с результатами для чистых элементов. Детальное описание и объяснение экспериментальных спектров достигается методом сравнения с теоретическими спектрами. Экспериментально наблюдаемые различия между чистыми элементами и элементами в сплавах возникают из-за изменений в плотностях свободных состояний и из-за химического сдвига глубоких уровней. В частности, Fe «слабый» ферромагнетик, как чистое вещество, становится «сильным» ферромагнетиком в сплаве.

7. Исследованы (по отдельности для Fe и Ni) температурные зависимости магнитных моментов поверхности FeNi₃(111). Внутри изучаемой температурной области от 100 до 1100 К исследованы два

фазовых перехода: структурный переход типа порядок-беспорядок между 770 и 785 К и переход типа ферромагнетик-парамагнетик с температурой Кюри 863 К. Показано, что первый переход не обнаруживается в зависимостях спиновой асимметрии от температуры как для Fe, так и для Ni. Обнаружено, что температурное поведение намагниченности одинаково для Fe и Ni, когда они находятся в сплаве и когда образец намагничен внешним полем «до насыщения».

Заполненные электронные состояния (магнитные материалы)

8. Исследованы локальные магнитные свойства подрешеток Fe и Ni в сплаве FeNi₃(110). Установлено, что при формировании CVV оже-пика происходит процесс, который хорошо описывается самосверткой плотностей электронных состояний. Предлагается феноменологическая формула для оценки намагниченности подрешеток:

$$I = \mu_B n (S_{\text{экс}}^{\uparrow} - S_{\text{экс}}^{\downarrow}) / (S_{\text{экс}}^{\uparrow} + S_{\text{экс}}^{\downarrow}),$$

где $S_{\text{экс}}^{\uparrow}$ и $S_{\text{экс}}^{\downarrow}$ - площади под соответствующими спин-разрешенными низковольтными оже-пиками, n - концентрация валентных электронов, μ_B - магнетон Бора. Установлено, что в случае высоковольтных пиков спин-обменные процессы оказывают более существенное влияние на поляризацию, чем в случае низковольтных CVV оже-электронов. Обнаружена значительная поляризация глубоких уровней в FeNi₃ под действием локальных магнитных моментов соответствующих атомов.

9. Установлено, что температурная зависимость поляризации *вторичных* электронов FeNi₃(110), намагниченного до насыщения, имеет вид, характерный для большинства ферромагнитных элементов и их сплавов. Исследована поляризация низковольтных *оже-электронов* железа и никеля в зависимости от температуры в режиме «с остаточной намагниченностью». Установлено, что в диапазоне температур 760-800К поляризация оже-пиков как Fe так и Ni становится отрицательной, что служит доказательством антиферромагнитной упорядоченности поверхности относительно объема.

10. Исследовано сечение Ферми поверхности Ni(111). Установлено, что d - зоны характеризуются только спин-вниз состояниями. sp контуры образованы спин-вверх и спин-вниз электронами. Эти данные хорошо соответствуют ожидаемым результатам и подтверждают справедливость предложенного метода анализа Ферми поверхности.

11. Экспериментально изучена электронная структура пленок Ni на поверхности Cu(100). Показано, что электронная структура пленок Ni-Cu (100) начинает приобретать вид характерный для объемного материала уже при толщине 2,4 ML. Особенности sp зоны, связанные с поверхностью Ферми имеют вид объемных уже при толщине 1,2 монослоя. d зоны поверхности Ферми подвергаются радикальному изменению при возрастании толщины пленки от 2,4 до 3,5 монослоев. Формирование d зоны заканчивается при толщине примерно 6 монослоев. Обнаружен пара-ферромагнитный переход электронных d состояний ($T=150$ К) при толщине пленки ~3 монослоя. Для sp электронов с этим переходом связан коллапс некоторых состояний.

Заполненные электронные состояния (немагнитные материалы)

12. Исследованы магнитные свойства пленок ванадия на поверхности $\text{FeNi}_3(110)$. Установлено, что пленки ванадия антиферромагнитным образом упорядочены относительно подложки. Индуцированный магнитный момент пленки толщиной в 2 монослоя составляет $\sim 0,35$ μ_B . Уменьшения намагниченности подрешетки железа при напылении ванадия в пределах точности эксперимента обнаружено не было. Установлено, что слабая намагниченность наблюдается и для пленки толщиной в 12 монослоев, хотя здесь величина магнитного момента на ванадии составляет менее 0.1 μ_B . Наведенный момент на столь большом расстоянии от интерфейса подтверждает вывод о шероховатости интерфейса и наличии в пленке достаточно большой концентрации диффузных атомов Fe и Ni.

13. Исследованы квазисвободные электронные состояния типа Шокли на поверхности золота (111), демонстрирующие расщепление на две параболические подзоны. Установлено, что это расщепление обусловлено спин-орбитальным взаимодействием. Спин-разрешенная картина сечения Ферми поверхности подтверждает, что перпендикулярная поверхности компонента вектора поляризации всегда равна нулю. Несмотря на то, что спин-орбитальное расщепление может возникать только как следствие сильных атомных электрических сил никакой модуляции направления спинов, связанных с симметрией поверхности кристалла, обнаружено не было.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих статьях

1. Мамаев Ю.А., Петров В.Н., Старовойтов С.А. Антиферромагнитная связь на поверхности FeNi_3 // Письма в ЖТФ.-1987.- Т. 13.-№ 24.-С. 1530-1532.

2. Петров В.Н., Мамаев Ю.А., Старовойтов С.А. Асимметрия рассеяния поляризованных электронов на поликристаллическом золоте // ЖЭТФ.-1989.-Т. 95.-вып. 3-С. 966-974.

3. Петров В.Н., Мамаев Ю.А., Старовойтов С.А. Неупругое рассеяние поляризованных электронов // Поверхность, Физика, Химия, Механика-1990.-№ 10.-С. 46-51.

4. Мамаев Ю.А., Овсянникова Л.П., Фишкова Т.Я., Петров В.Н., Шпак Е.В. Электронно-оптическая система для детектора Мотта с низким рабочим потенциалом // ЖТФ.-1993.-Т. 63.-№ 9.-С. 178-181.

5. Fishkova T.Ya., Mamaev Yu.A., Ovsyannikova L.P., Petrov V.N., Shpak E.V. Electron-optical system for Mott polarimeters // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.-1994.-V. A348.-P. 56-60.

6. Petrov V.N., Starovoitov S.A., Galaktionov M.S., Yushenkov B.V., Mamaev Yu.A. Spin-polarized-Electron-Spectroscopy Study of the Mechanism of Electron Reflection from $\text{PbS}(100)$ at Low Energies // Phys. Low-Dim. Struct.-1995.-V. 10/11.-P. 57-60.

7. Петров В.Н., Старовойтов С.А., Галактионов М.С., Юшенков Б.В., Мамаев Ю.А. Исследование поверхностных состояний

индуцированных потенциалом изображения W(100) и PbS(100) методом спектроскопии поляризованных электронов // ФТТ.-1996.-Т. 38.-№ 5.-С. 1423-1433.

8. Петров В.Н., Старовойтов С.А., Галактионов М.С., Юшенков Б.В., Мамаев Ю.А. Спиновое расщепление свободных электронных состояний в сульфиде свинца // ФТТ-1996-Т. 38-№ 11-С. 3312-3321.

9. Fuchs P., Petrov V.N., Totland K., Landolt M. Magnetic moment in thin epitaxial Cr films on Fe(100) // Phys. Rev. B.-1996.-V 54.-№ 13.- P. 9304-9307.

10. Petrov V.N., Landolt M., Galaktionov M.S., Yushenkov B.V. A New Compact 60 kV Mott polarimeter for Spin Polarized Electron Spectroscopy // Rev. Sci. Instrum.-1997.-V. 68.-№ 12.-P. 4385-4389.

11. Reinmuth J., Passek F., Petrov V.N., Donath M., Ebert H., Popesku V. Spin-dependent local density of empty electronic states in FeNi₃ // Phys. Rev. B.-1997-II.-V. 56.-№ 20-P. 12893-12898.

12. Schedin F., Thornton G., Petrov V.N. Spin-asymmetries in inverse photoemission from PbS (100) // Surf. Sci.-1997.-377-379.-P.229-232.

13. Петров В.Н., Ландольт М., Галактионов М.С., Юшенков Б.В., Мамаев Ю.А. Новый компактный 60 кВ детектор Мотта для спин-поляризованной электронной спектроскопии // ЖТФ.-1998.-68.-С. 125-130.

14. Reinmuth J., Passek F., Petrov V.N., Donath M. Temperature-dependent surface magnetization of FeNi₃ // J. Phys.: Condens. Matter.-1998.-10.-P. 4027-4034.

15. Schedin F., Hewitt M., Petrov V.N., Thornton G., Case S., Thomas M., Uzdin V.M. In-plane magnetization of an ultrathin film of Fe₃O₄(111) grown epitaxially on Pt(111) // Phys. Rev. B, Rapid Comm.-1998.-R11861.

16. Schedin F., Hewitt M., Petrov V.N., Thornton G. Exchange splitting of FeNi₃(110) bulk and surface bands // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.-1999.-198-199.-P. 555-557.

17. Schedin F., Hewitt M., Petrov V.N., Thornton G., Guo G.Y. Observation of an exchange-split alloy surface state // Phys. Rev. B.-2000.-V. 61.- № 13. P. 8932-8935.

18. Schedin F., Morral P., Petrov V.N., Case S., Thomas M., Dudzik E., van der Laan G., Thornton G. Magnetic properties of ultrathin epitaxial Fe₃O₄ films on Pt(111) // Journal of Magnetism and Magnetic Materials.-2000.-203.-P. 337-342.

19. Петров В.Н., Галактионов М.С., Камочкин А.С. Исследование стабильности моттовских анализаторов поляризации электронов // ЖТФ.-2001.-том 71.-вып 12.-С. 79-82.

20. Petrov V.N., Galaktionov M.S, Kamochkin A.S. Comparative tests of conventional and retarding-potential Mott polarimeters // Review of Scientific Instruments.-2001.-V. 72.- № 9.-P. 3728-3730.

21. Hoesch M., Greber T., Petrov V.N., Muntwiler M., Hengsberger M., Auwarter W., Osterwalder J. Spin Polarized Fermi Surface Mapping // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.-2002.-124.-P. 263-279.

22. Petrov V.N., Grebenshikov V.V., Grachev B.D., Kamochkin A.S. New compact classical 40 kV Mott polarimeter // Review of Scientific Instruments.-2003.-V. 74.-№ 3.-P. 1278-1281.
23. Petrov V.N., Kamochkin A.S. Energy analyser for spin polarized Auger electron spectroscopy // Review of Scientific Instruments.-2004.- V. 75.- № 5.-P. 1274-1279.
24. Hoersh M., Muntwiler M., Petrov V.N., Hengsberger M., Patthey L., Shi M., Falub., Greber T., Osterwalder J. Spin structure of the Shockley surface state on Au(111) // Phys. Rev. B, Rapid Comm.-2004.- 69.- R241401.
25. Петров В.Н., Камочкин А.С., Уздин В.М. Спин-поляризационная электронная оже-спектроскопия пленок ванадия на поверхности FeNi₃(110) // Письма в ЖТФ.-2004.-т. 30.-вып. 7.-С. 54-59.
26. Петров В.Н., Гребенщиков В.В., Грачев Б.Д., Камочкин А.С., Ярмаркин М.К. Эффективный компактный анализатор электронной спиновой поляризации // Письма в ЖТФ.-2004.-т. 30.-вып. 4.-С. 62-70.
27. Muntwiler M., Hoersh M., Petrov V.N., Hengsberger M., Patthey L., Shi M., Falub M., Greber T., Osterwalder J. Spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy study of the Au (111) Shockley surface state // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.-2004.-137-140.-P. 119-123.
28. Toulemonde O., Petrov V.N., Nait Abdi A., Bucher J.P. Magnetic anisotropies of ultrathin Fe films on Au(111) as function of iron thickness and gold capping // Journal of Applied Physics.-2004.-V. 95.- № 11.-P. 6565-6567.