

Atomare und elektronische Struktur niedrigdimensionaler Pb-Quantensysteme mit starker Spin-Bahn-Wechselwirkung

Von der Fakultät für Mathematik und Physik
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

zur Erlangung des Grades

DOKTOR DER NATURWISSENSCHAFTEN

Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

M. Sc. Christian Brand

2021

Promotionskomitee

Vorsitzender des Promotionskomitees: Prof. Dr. Eric Jeckelmann,
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

Referent: Prof. Dr. Herbert Pfnür,
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

Erster Koreferent: Prof. Dr. Christoph Tegenkamp,
Technische Universität Chemnitz

Zweiter Koreferent: Prof. Dr. Jan Hugo Dil,
École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz
und Swiss Light Source, Schweiz

Tag der Promotion: 6. August 2021

Kurzzusammenfassung

Auf dem langen Weg zur Etablierung spintronischer Bauelemente steht die Identifikation geeigneter Materialien an erster Stelle. Die Methoden der Oberflächenphysik erlauben die gezielte Herstellung und Charakterisierung nanoskaliger metallischer Strukturen auf wohlgeordneten halbleitenden Substraten. Starke Korrelationen zwischen atomarer und elektronischer Struktur als auch mit dem orbitalen Charakter und dem Spin-Freiheitsgrad der beteiligten Leitungselektronen des Metalls führen zu einer Vielzahl physikalisch interessanter Effekte.

In dieser Arbeit wurden niedrigdimensionale, atomar dünne Bleifilme auf flachen Si(111)- und gestuften Si(557)-Substraten durch Selbstorganisation erzeugt und ihre Strukturen mittels Elektronenbeugung und Rastertunnelmikroskopie untersucht. Die unter Einfluss starker Spin-Bahn-Kopplung stehende elektronische Struktur in den Filmen wurde bei tiefen Temperaturen mittels Leitfähigkeits- und Magnetotransportmessungen, sowie mit Spin- und winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie evaluiert.

Im Fall der Si(557)-Oberfläche mit 1,31 Monolagen Blei konnte mit diesen Methoden ein neuer hoch korrelierter Quantenzustand der Materie – eine sogenannte Spin-Bahn-Dichtewelle – in einem quasi-eindimensionalen System nachgewiesen und charakterisiert werden. Durch *Fermi-Nesting* der elektronischen Bänder mit maximaler Spin-Aufspaltung öffnet sich unterhalb von 78 K eine unidirektionale Energielücke, während die Bleidrähte in der zweiten Dimension metallisch bleiben. Das einzigartige Zusammenspiel der atomaren Struktur dieses Systems mit seinen elektronischen und Spin-Korrelationen wird durch die starke Spin-Bahn-Kopplung der Bleiatome hervorgerufen. Äußere Störeinflüsse wie die Adsorption zusätzlicher Bleiatome oder Magnetfelder schirmen das Coulomb-Potential ab und schwächen dadurch die langreichweitigen elektronischen Korrelationen und die ausgeprägte antiferromagnetische Spin-Textur der Zustände am Fermi-Niveau bis zum Zusammenbruch des Quantenzustands.

Die atomaren Strukturen von Si(111) mit etwa einer Monolage Blei sind typischerweise zweidimensionaler Natur wie zum Beispiel bei der *Striped Incommensurate*-Phase. Details in der lokalen Adsorptionsgeometrie können die Translations- und Rotationssymmetrie jedoch brechen. So bilden die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und die „Devil’s Staircase“-Phase anisotrope, langreichweitig geordnete, kettenartige Strukturen mit Elementen quasi-eindimensionalen und -zweidimensionalen Charakters in der elektronischen Struktur. *Fermi-Nesting* der Spin-polarisierten Oberflächenzustände der „Devil’s Staircase“-Phase deutet auf ähnliche Korrelationseffekte wie im Pb/Si(557)-System hin, deren eindeutiger Nachweis jedoch noch aussteht. Bei der *Striped Incommensurate*-Phase wird die elektronische Struktur aufgrund der gebrochenen Symmetrie und der damit einhergehenden kurzreichweitigen Ordnung von der lokalen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion dominiert. Die Spin-Bahn-Kopplung führt in diesem System nicht nur zu einer starken nichtlinearen Rashba-Aufspaltung der Bänder, sondern auch zu einem Zeeman-artigen Zustand mit zyklidal rotierender Spin-Textur. Transportmessungen am Pb/Si(111)-System bestätigen nicht nur den starken Einfluss von Spin-Bahn-Streuung auf die elektrische Leitfähigkeit, sondern zeigen auch, dass aktivierter Transport in diesen niedrigdimensionalen Metallfilmen eine große Rolle spielt. Zudem werden die oberflächennahen Quantentrogzustände im Silizium-Valenzband durch die Blei-Adsorption modifiziert.

Abstract

On the long track to the establishment of spintronic devices, the identification of suitable materials is the first priority. Surface science methods allow the targeted fabrication and characterization of nanoscale metallic structures on well-ordered semiconducting substrates. Strong correlations between atomic and electronic structure as well as with the orbital character and spin degree of freedom of the involved conduction electrons of the metal lead to a variety of physically interesting effects.

In this work, low-dimensional atomically thin lead films on flat Si(111) and stepped Si(557) substrates were grown by self-assembly and their structures were investigated by electron diffraction and scanning tunneling microscopy. The electronic structure, influenced by strong spin-orbit coupling, of the films was evaluated at low temperatures using conductivity and magnetotransport measurements, as well as spin- and angle-resolved photoelectron spectroscopy.

In the case of the Si(557) surface with 1,31 monolayers of Pb these methods allowed us to detect and characterize a new highly correlated quantum state of matter – a so-called spin-orbit density wave – in a quasi-one-dimensional system. Fermi-*nesting* of the electronic bands with maximum spin splitting opens a unidirectional energy gap below 78 K, while the lead wires remain metallic in the second dimension. The unique interplay of the atomic structure of this system with its electronic and spin correlations is caused by the strong spin-orbit coupling of the lead atoms. External perturbations such as the adsorption of additional lead atoms or magnetic fields screen the Coulomb potential and thereby weaken the long-range electronic correlations and the pronounced antiferromagnetic spin texture of the states at the Fermi level until the collapse of the quantum state occurs.

The atomic structures of Si(111) around one monolayer Pb coverage are typically of two-dimensional nature, such as in the *Striped Incommensurate* phase. However, details in the local adsorption geometry can break the translational and rotational symmetry. Thus, the $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ reconstruction and the ‘Devil’s Staircase’ phase form anisotropic, long-range ordered, chain-like structures with elements of quasi-one-dimensional and -two-dimensional character in the electronic structure. Fermi-*nesting* of the spin-polarized surface states of the ‘Devil’s Staircase’ phase suggests similar correlation effects as in the Pb/Si(557) system, but their unequivocal demonstration is still pending. In the *striped incommensurate* phase, the electronic structure is dominated by the local $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ reconstruction due to broken symmetry and the associated short-range order. In this system, the spin-orbit coupling leads not only to a strong nonlinear Rashba splitting of the bands, but also to a Zeeman-like state with cycloidally rotating spin texture. Transport measurements on the Pb/Si(111) system not only confirm the strong influence of spin-orbit scattering on the electrical conductivity, but also show that activated transport plays a major role in these low-dimensional metal films. In addition, the surface near quantum well states in the silicon valence band are modified by lead adsorption.

Schlagworte

Niedrigdimensionale Quantensysteme,
Spin-Bahn-Wechselwirkung,
atomare und elektronische Struktur an Oberflächen

Keywords

low-dimensional quantum systems,
spin-orbit interaction,
atomic and electronic structure at surfaces

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	5
2.1. Oberflächensymmetrie	5
2.2. Spin-Bahn-Wechselwirkung	9
2.2.1. Rashba-Effekt	13
2.2.2. Rashba-Zeeman-Effekt	28
2.2.3. Einfluss von Rotations- und Spiegeldomänen, sowie inhomogenen Domänenstrukturen auf die Spin-Polarisation in SR-ARPES-Messungen	31
2.3. Warping	35
2.4. Dichtewellen an Oberflächen	36
2.5. Hybridisierung von Bändern	40
2.6. Effektive Massen von Löchern im Silizium-Valenzband	43
2.7. Dreieckspotential	51
3. Experimentelle Methoden und Apparaturen	53
3.1. Strukturanalyse mit STM und optischen LEED	53
3.1.1. Beugung niederenergetischer Elektronen	53
3.1.2. Rastertunnelmikroskopie	54
3.2. SPA-LEED-, Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen	56
3.2.1. Reflexprofilanalyse mit hochauflösender niederenergetischer Elektronenbeugung	57
3.2.2. Elektrische Leitfähigkeit	58
3.2.3. Magnetotransport	59
3.3. Spin- und winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an der COPHEE-Endstation der Swiss Light Source	60
4. Monolagenstrukturen von Pb auf Si(111) und Si(557)	65
4.1. Si(111)-(7 × 7)-Substrat	65
4.2. Monolagen-Strukturen von Pb/Si(111)	67
4.2.1. β - und γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase	68
4.2.2. ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktionen	71
4.2.3. Striped Incommensurate-Phase	74
4.2.4. „Devil’s Staircase“-Phase	78
4.2.5. Hexagonal Incommensurate-Phasen	81
4.2.6. (1 × 1)-Phase	82
4.3. Si(557)-Substrat	84
4.4. Monolagen-Strukturen von Pb/Si(557)	87
4.4.1. „Devil’s Staircase“-Phase im Pb/Si(557)-System	88
4.4.2. Pb-Nanodrähte auf anderen Si-Oberflächen	93

5. Messungen an Pb/Si(111)	95
5.1. SPA-LEED- und STM-Messungen	95
5.1.1. β - und γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase	95
5.1.2. ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und Striped Incommensurate-Phase	97
5.1.3. „Devil’s Staircase“-Phase	103
5.1.4. (1 \times 1)-Phase	105
5.2. ARPES-Messungen	106
5.2.1. Striped Incommensurate-Phase	106
5.2.2. ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion	148
5.2.3. „Devil’s Staircase“-Phase	167
5.2.4. Pb-induzierte Quantum Well States	177
5.3. Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen	181
5.3.1. Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit	181
5.3.2. Magnetotransport	182
6. Messungen an Pb/Si(557)	185
6.1. STM-Messungen	185
6.1.1. Struktur bei tiefen Temperaturen	185
6.1.2. Strukturänderung beim Phasenübergang	187
6.1.3. Neuinterpretation der SPA-LEED-Messungen zum Phasenübergang	191
6.2. Nachweis und Eigenschaften einer eindimensionalen SODW	195
6.2.1. Einleitung und vorangegangene Ergebnisse aus ARPES-Messungen	195
6.2.2. Störung des SODW-Zustands durch zusätzliche Pb-Adsorption und Magnetfelder	199
6.2.3. Ankopplung des SODW-Zustands an die zweite Dimension	206
6.2.4. Diskussion der Ergebnisse	209
6.3. Vergleich mit anderen Pb/Si-Quantendrahtsystemen	213
7. Zusammenfassung und Ausblick	215
Anhang	221
A. Literaturverzeichnis	221
B. Abbildungsverzeichnis	271
C. Tabellenverzeichnis	275
D. Herleitung der effektiven Massen von Löchern im Silizium-Valenzband im Rahmen der k-p-Theorie	277
D.1. Spin-Bahn-Wechselwirkung im Kane-Modell	277
D.2. Herleitung der Energieeigenwertgleichung im Kane-Modell	278
D.3. Parameterwahl, Winkelabhängigkeiten und Lösung der Energieeigenwertgleichung	283
E. Fit- und Modellparameter der SR-ARPES-Messungen an 1,31 ML Pb/Si(557)	291

Abkürzungsverzeichnis

1DEG	Eindimensionales Elektronengas
2DEG	Zweidimensionales Elektronengas
ARPES	Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy (Winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie)
BCS	BARDEEN-COOPER-SHRIEFFER
BM	Bandmap ((E,k) -Diagramm, das die gemessene Photoelektronenintensität darstellt)
CDW	Charge Density Wave (Ladungsdichtewelle)
CEM	Constant Energy Map (Bandstrukturkarte bei konstanter Bindungsenergie)
COPHEE	COmplete PHotoEmission Experiment
DAS	Dimer-Adatom-Stacking-fault (Dimer-Adatom-Stapelfehler)
DC	Direct Current (Gleichstrom)
DFT	Density Functional Theory (Dichtefunktionaltheorie)
DS	„Devil’s Staircase“
EDC	Energy Distribution Curve (Energieverteilungskurve)
EELS	Electron Energy Loss Spectroscopy (Elektronenenergieverlustspektroskopie)
FFT	Fast Fourier Transform (Schnelle Fourier-Transformation)
FOR1700	Forschergruppe 1700
FSM	Fermi Surface Map (Fermi-Fläche der Oberfläche)
FWHM	Full Width at Half Maximum (Volle Halbwertsbreite)
HH	Heavy Hole (schweres Loch)
HIC	Hexagonal Incommensurate (hexagonal inkommensurabel)
LEED	Low Energy Electron Diffraction (Beugung niederenergetischer Elektronen)
LEEM	Low Energy Electron Microscopy (Mikroskopie mit niederenergetischen Elektronen)
LH	Light Hole (leichtes Loch)
LHe	Liquid Helium (Flüssiges Helium)
LN ₂	Liquid Nitrogen (Flüssiger Stickstoff)
MDC	Momentum Distribution Curve (Impulsverteilungskurve)
ML	Monolage
PSI	Paul Scherrer Institut

QSE	Quantum Size Effect (Quanten-Größeneffekt)
QSHE	Quanten-Spin-Hall-Effekt
QWS	Quantum Well State (Quantentrogzustand)
RAS	Reflectance Anisotropy Spectroscopy (Reflexionsanisotropiespektroskopie)
RHEED	Reflection High Energy Electron Diffraction (Beugung hochenergetischer Elektronen bei Reflexion)
RT	Raumtemperatur
SBZ	Surface Brillouin Zone (Brillouin-Zone der Oberfläche)
SDW	Spin Density Wave (Spin-Dichtewelle)
SHE	Spin-Hall-Effekt
SIC	Striped Incommensurate (gestreift inkommensurabel)
SIS	Surface and Interface Spectroscopy (Ober- und Grenzflächenspektroskopie)
SLS	Swiss Light Source
SO	Split-Off-Band
SOC	Spin-Orbit Coupling (Spin-Bahn-Kopplung)
SODW	Spin-Orbit Density Wave (Spin-Bahn-Dichtewelle)
SOI	Spin-Orbit Interaction (Spin-Bahn-Wechselwirkung)
SPA-LEED	Spot Profile Analysing - Low Energy Electron Diffraction (Beugung niederenergetischer Elektronen mit Spot-Profilanalyse)
SR-ARPES	Spin-Resolved and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy (Spin- und Winkel aufgelöste Photoelektronenspektroskopie)
STM	Scanning Tunneling Microscope (Rastertunnelmikroskop)
STS	Scanning Tunneling Spectroscopy (Rastertunnelspektroskopie)
TI	Topologischer Isolator
TRIM	Time Reversal Invariant Momentum (Punkt im reziproken Raum, im dem die Zeitumkehrinvarianz zu Spin-degenerierten Zuständen führt)
TRS	Time Reversal Symmetry (Zeitumkehrinvarianz)
UHV	Ultrahochvakuum
UPS	Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UV-Lichtspektroskopie)
VBM	Valenzbandmaximum
WAL	Weak Antilocalization (schwache Antilokalisierung)
WL	Weak Localization (schwache Lokalisierung)
XPS	X-Ray Photoelectron Spectroscopy (Röntgenspektroskopie)
XRD	X-Ray Diffraction (Röntgenbeugung)

Symbolverzeichnis

a_B	Bohr'scher Radius; $a_B = 0,529\,177\,210\,67\text{ \AA}$
c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum; $c = 299\,792\,458\text{ m/s}$
e	Elementarladung; $e = 1,602 \cdot 10^{-19}\text{ C}$
G_0	Leitfähigkeitsquantum; $G_0 = e^2/(\pi h) = 7,748 \cdot 10^{-5}\text{ S}$
\hbar	reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum; $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6,582 \cdot 10^{-16}\text{ eV s}$
k_B	Boltzmann-Konstante; $k_B = 8,617 \cdot 10^{-5}\text{ eV/K}$
m_e	Masse des Elektrons; $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}\text{ kg}$
ε_0	elektrische Feldkonstante; $\varepsilon_0 = 8,854\,187\,817 \cdot 10^{-12}\text{ A s/V m}$
μ_0	magnetische Feldkonstante; $\mu_0 = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} = 4\pi \cdot 10^{-7}\text{ N/A}^2 = 1,2566 \cdot 10^{-6}\text{ V s/A m}$
μ_B	Bohr'sches Magneton; $\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24}\text{ J/T} = 5,788 \cdot 10^{-5}\text{ eV/T}$
π	Kreiszahl; $\pi = 3,14159\dots$
A	Massenzahl, Nukleonenzahl
A, B, C	Materialparameter zur Beschreibung der effektiven Massen von Löchern im Festkörper
\AA	Ångström; $1\text{ \AA} = 0,1\text{ nm}$
\mathbf{a}, \mathbf{R}	Gittervektor im Realraum mit Gitterkonstante a oder d
\mathbf{B}	Magnetfeld mit Betrag B
d	Distanz zwischen den Stufenkanten von Pb/Si(557)
d	Dimensionalität
d_i	Stufenhöhe
E	Energie
E_{\pm}	Eigenenergien der Eigenzustände $ \Psi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$
E_a	Aktivierungsenergie
E_B	Bindungsenergie
E_F	Fermi-Energie
E_G	Größe der Bandlücke eines Halbleiters; in Silizium bei Raumtemperatur $E_G = 1,12\text{ eV}$
E_{HH}	Eigenenergie des schweren Lochs des Valenzbandes
E_{kin}	kinetische Energie
E_{LH}	Eigenenergie des leichten Lochs des Valenzbandes
E_{SO}	Eigenenergie des Split-off Lochs des Valenzbandes

E_R	Rashba-Energie
E_{VBM}	Energie des VBMs
E_W	<i>Warping</i> -Energie
E_Z	Zeeman-Energie
\mathbf{E}, \mathcal{E}	elektrisches Feld
\mathbf{e}	Einheitsvektor
\mathbf{F}	Kraftvektor
$\mathbf{G}, \mathbf{g}, \mathbf{b}$	reziproker Gittervektor mit Betrag g
g, g^*	gyromagnetisches Verhältnis eines Materials, auch (effektiver) g -Faktor
$\mathcal{H}, \mathcal{H}_{\text{Ges}}$	Hamilton-Operator des betrachteten Gesamtsystems
\mathcal{H}_0	Hamilton-Operator eines freien Teilchens
$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$	Hamilton-Operator des quasi-freien Elektrons im Kristall
$\mathcal{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$	Hamilton-Operator der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie
\mathcal{H}_R	Hamilton-Operator des Rashba-Effekts
\mathcal{H}_{RZ}	kombinierter Hamilton-Operator von Rashba- und Zeeman-Effekt
\mathcal{H}_{SO}	Hamilton-Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung
$\mathcal{H}_{\text{SODW}}$	Hamilton-Operator des SODW-Zustands
\mathcal{H}_W	Hamilton-Operator zur Beschreibung von <i>Warping</i> -Effekten
\mathcal{H}_Z	Hamilton-Operator des Zeeman-Effekts
I	elektrischer Strom, Tunnelstrom im STM
I	gemessene Intensität in ARPES-Messungen
\mathbf{J}	Gesamtdrehimpuls mit Quantenzahl j
\mathbf{j}	Stromdichte
\mathbb{K}	Symbol für den reziproken Raum
$\bar{\mathbb{K}}$	Eckpunkt der Si(111)-SBZ
\mathbf{k}, \mathbf{Q}	Wellenvektor mit Betrag k
\mathbf{k}_F	Fermi-Wellenvektor
$k_x, k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$	Wellenvektor mit Impuls parallel zur $\bar{\Gamma}\bar{\mathbb{M}}$ -Richtung
$k_y, k_{[1\bar{1}0]}$	Wellenvektor mit Impuls parallel zur $\bar{\Gamma}\bar{\mathbb{K}}$ -Richtung
\mathbf{L}	Bahndrehimpuls mit Quantenzahl ℓ
L	Länge
L, M, N	Materialparameter zur Beschreibung der effektiven Massen von Löchern im Festkörper
ℓ	mittlere freie Weglänge
$\bar{\mathbb{M}}$	Mittelpunkt zwischen zwei benachbarten $\bar{\mathbb{K}}$ -Punkten der Si(111)-SBZ
$\bar{\mathbb{M}}, \bar{\mathbb{X}}, \bar{\mathbb{X}}', \bar{\mathbb{Y}}, \bar{\mathbb{Y}}'$	Hochsymmetriepunkte von SBZs mit C_{1v} - bzw. C_1 -Symmetrie

m^*	effektive Masse
N_i	Flächendichte von Atomen eines Materials auf einer Oberfläche
\mathbb{N}_0, \mathbb{N}	Menge der Natürlichen Zahlen in- bzw. exklusive Null
n, p	Ladungsträgerkonzentrationen, n für Elektronen, p für Löcher
\mathbf{n}	Normalenvektor
n	Hauptquantenzahl
(n,m)	Nomenklatur der DS-Phasen
\mathcal{P}	Störungsoperator, auch Wechselwirkungsoperator mit Komponenten W_i und U, V, W
\mathbf{p}	Impuls des freien Teilchens
p	Druck
q	Abschirmungsparameter
q	elektrische Ladung
\mathbb{R}	Symbol für den Realraum
\mathbf{r}	Ortsvektor mit Betrag r und Koordinaten (x,y,z)
S	Gangunterschied zweier interferierender Wellen
S	Sherman-Funktion
\mathbf{S}	Spin-Drehimpuls mit Quantenzahl s ;
\mathbf{S}^\pm	Spin-Polarisationsvektor der Eigenzustände $ \Psi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ mit Betrag S und Eigenenergie E_\pm
S1–S4, S1*	Oberflächenzustände der SIC-Phase, der DS-Phase und der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von Pb/Si(111) nahe E_F
S1'–S4'	Oberflächenzustände der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bzw. der DS-Phase von Pb/Si(111) nahe E_F aus anderen Rotationsdomänen als S1–S4
s	Modulationslänge entlang der Pb-Drähte von Pb/Si(557)
T	Temperatur
T_C	kritische Temperatur; Temperatur, bei der ein Phasenübergang stattfindet
U	Coulomb-Potential
V	elektrische Spannung, angelegte Spannung im STM
V	Potential
V_{Nuc}	Kernpotential
∇V	Potentialgradient
\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor mit Betrag v
\mathbf{v}_D	Driftgeschwindigkeit
v_F	Fermi-Geschwindigkeit
Z	Kernladungszahl, Ordnungszahl
Z_{eff}	effektive Kernladungszahl

z	Höhenkoordinate
$\boldsymbol{\alpha}$	Vektor des Rashba-Koeffizienten α_R mit Komponenten $\alpha_i^j k^n$ und Betrag α
α	Parameter der SOC im Magnetotransport
Γ	mittlere Terrassenbreite
Γ	Mittelpunkt der Brillouin-Zone; $\mathbf{k} = 0$
$\bar{\Gamma}$	Mittelpunkt der SBZ
$\boldsymbol{\gamma}$	Vektor des Rashba-Zeeman-Koeffizienten mit Betrag γ
γ_i, κ, q	Luttinger-Parameter zur Beschreibung der effektiven Massen von Löchern im Festkörper
Δ	durch Wechselwirkung induzierte Energielücke
Δ_{SO}	Offset des Split-Off-Valenzbandes zum Niveau von leichtem und schwerem Loch im Γ -Punkt; in Silizium $\Delta_{SO} = 0,044$ eV
ΔE	Energiedifferenz
$\Delta \mathbf{k}, \Delta \mathbf{k}_0$	Wellenvektor der Spin-Aufspaltung eines Bandes
$\delta \Theta_i$	zusätzliche Bedeckung eines Materials
$\delta \rho$	Schwankung der Ladungsdichte ρ
ε_r	relative Permittivität; $\varepsilon_{r, Si} = 11,7$
η	Impulsisotropisierungszeit
Θ	Fehlwinkel vizinaler Si-Oberflächen
Θ_D	Debye-Temperatur
Θ_i	Bedeckung eines Materials auf einem anderen Material, z. B. Pb auf Si
θ	Polarwinkel der Kugelkoordinaten
ϑ	Winkel relativ zur Oberflächennormalen
ϑ, φ	Azimuth- und Polarwinkel im ARPES-Experiment
κ, η	Stärke der isotropen Abweichungen vom quasi-freien Elektronengas in 4. bzw. 6. Ordnung in \mathbf{k}
λ	Kopplungsstärke der SOI
λ	Kohärenzlänge im Magnetotransport
λ	Wellenlänge
μ	chemisches Potential
μ	Ladungsträgerbeweglichkeit
μ_r	relative Permeabilitätszahl eines Materials
ν	Lichtfrequenz
ξ	Kohärenzlänge
ρ	quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte
ρ, ρ_0	Ladungsdichte
ϱ	spezifischer Widerstand

σ	Vektor der Pauli-Matrizen $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$
σ_0	vierte Pauli-Matrix; 2×2 -Einheitsmatrix
σ	elektrische Leitfähigkeit
σ	Chern-Zahl
σ, π, δ	Foreman-Parameter zur Beschreibung der effektiven Massen von Löchern im Festkörper
τ	Streuzeit
τ_0	elastische Streuzeit
τ_i	inelastische Streuzeit
τ_{SO}	Spin-Bahn-Streuzeit
τ_s	Spin-Lebensdauer, -Dephasierungszeit, -Relaxationszeit
Φ_A	Austrittsarbeit
Φ_{SB}	Höhe der Schottky-Barriere
ϕ	Phase, z. B. einer Wellenfunktion
φ	Azimutwinkel der Kugelkoordinaten; Winkel bzgl. der x-Richtung in Polarkoordinaten
χ	<i>Warping</i> -Parameter
Ψ, Φ	(Spin-)Wellenfunktion
Ω	Vektor zur Beschreibung des SODW-Zustands mit Komponenten Ω_i und Betrag Ω
Ω_{SODW}	zugehörige Frequenz zur Energielücke Δ_{SODW} des SODW-Zustands
$\mathbb{1}_{n \times n}$	$n \times n$ -Einheitsmatrix
$\dagger, *$	Symbol für komplexe Konjugation eines Vektors oder einer Matrix bzw. eines Elementes davon
$\delta(x)$	Delta-Funktion
\in	Element aus einer Menge
\int	Integralzeichen
∇	vektorieller, räumlicher Differentialoperator
\otimes	Kronecker-Produkt zweier Matrizen oder Vektoren
Σ	Summenzeichen

1. Einleitung

In vielen Quantensystemen tritt ein physikalischer Effekt zu Tage, dem ALBERT EINSTEIN einst eine „spukhafte Fernwirkung“ zusprach. In seinem, BORIS PODOLSKYS und NATHAN ROSENS Gedankenexperiment wechselwirken zwei Teilchen eines Systems anfangs miteinander, die sich im Anschluss daran voneinander entfernen. Bei der Messung z. B. des Impulses von Teilchen 1 der beiden nunmehr räumlich getrennten Teilchen erhält man dann eine exakte Vorhersage für die Messung des Impulses bei Teilchen 2. Umgekehrt lässt sich durch anschließende Messung des zum Impuls komplementären Ortes des Teilchens 2 auch das Ergebnis einer Messung des Ortes von Teilchen 1 exakt vorhersagen. Dieser als EPR-Paradoxon bekannt gewordene Effekt [1] widerspricht somit scheinbar der Heisenbergschen Unschärferelation und zeigt beispielhaft, dass die Quantenmechanik gegen eine der Grundannahmen der klassischen Physik verstößt, die Lokalität. Erst die Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik löste das Paradoxon mit dem Hinweis auf, dass die indirekte Bestimmung über die Messung am zweiten Teilchen gar keine Messung der Eigenschaft des ersten Teilchens darstellt.

Der für EINSTEIN so spukhafte Effekt ist heute nicht mehr aus Wissenschaft und Technik wegzudenken. Es handelt sich bei ihm um die sog. *quantenmechanische Verschränkung*. Beispielsweise beruhen die Quantenkryptographie und Quantencomputer auf ihm. Ein weiteres Beispiel sind verschränkte Photonen, die nicht nur durch parametrische Fluoreszenz in nicht-linearen optischen Kristallen erzeugt werden können, sondern auch bei der Annihilation eines Teilchens mit seinem Antiteilchen entstehen.

DAVID BOHM und YAKIR AHARONOV übertrugen das EPR-Experiment auf eine weitere Eigenschaft der Materie, den Eigendrehimpuls bzw. Spin von Teilchen [2]. Ein Beispiel, bei dem der Spin von zwei Teilchen eines Systems miteinander verschränkt ist, ist die Supraleitung. Nach der BCS¹-Theorie kommt Supraleitung in einem Metall durch die Elektron-Phonon-Kopplung (Wechselwirkung von Elektronen mit den Quasiteilchen der Gitterschwingungen) zustande [3]. Hierbei besitzen die beiden beteiligten Elektronen einen umgekehrten Spin und umgekehrten Impuls. Bei der unkonventionellen Supraleitung spielt zudem die Symmetrie der Wellenfunktion der Elektronen (beteiligte Orbitale) eine wesentliche Rolle [4, 5].

Im Zusammenhang mit der quantenmechanischen Verschränkung von Elektronen mit anderen Quasiteilchen oder Eigenschaften eines Systems spricht man häufig auch von *korrelierten Elektronen* oder *korrelierten Systemen*. Die Korrelation zweier Eigenschaften ist dabei nicht zufällig vorhanden, sondern aufgrund von Wechselwirkungen kausalen Ursprungs. Abb. 1.1 skizziert beispielhaft die Wechselwirkungen zwischen vier Subsystemen eines Festkörpers: Dem Gitter, auf dem die Atome angeordnet sind, den Orbitalen der äußersten Elektronenschale, den Ladungen der Elektronen und Ionenrümpfe und ihren Spins.

Auf der Suche nach neuen Quantenzuständen und für mögliche Anwendungen in spintronischen Bauelementen [6] spielen die Wechselwirkungen korrelierter Elektronen und Spins eine

¹ BARDEEN-COOPER-SHRIEFFER

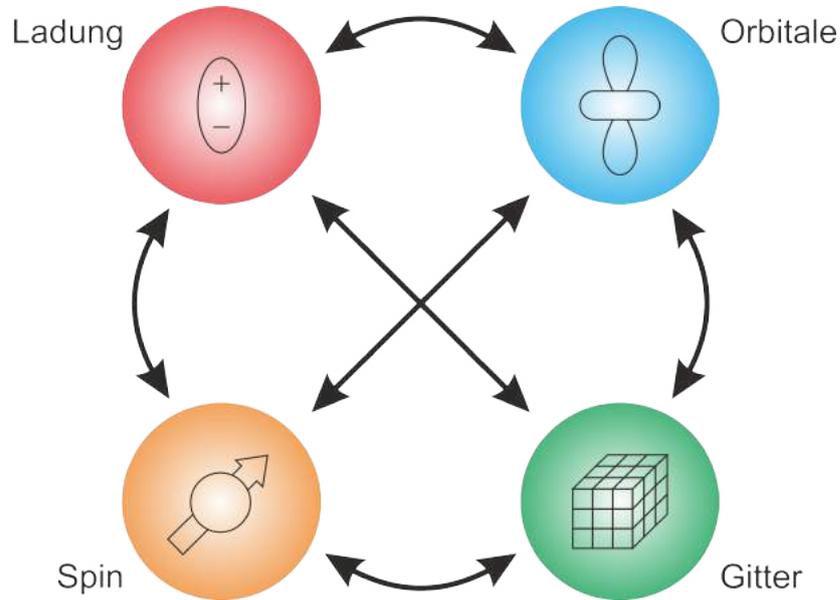


Abbildung 1.1: Wechselwirkende Subsysteme: Als Eigenschaften eines Systems können die Ladung(sdichte), Spin(dichte), das Gitter (Phononen) und die Elektronenorbitale der Atome untereinander isoliert sein oder miteinander wechselwirken. Bei starker Wechselwirkung entstehen kausal zusammenhängende Korrelationen der Subsysteme.

essentielle Rolle. Beispiele hierfür sind der SHE² [7, 8], TIs³ [9], Quanten-Spin-Flüssigkeiten [10–12], Spin-Spiralen [13, 14], magnetische Skyrmionen [15–17] und Majorana-Fermionen [18, 19]. In Systemen mit zusätzlich vorhandener starker Spin-Bahn-Wechselwirkung (SOI⁴) ließen sich prinzipiell z. B. Spin-Filter in Form eines Datta-Das-Transistors realisieren [20–22]. Auch Mott-Isolatoren mit starker Spin-Bahn-Kopplung (SOC⁵) sind verstärkt in den Fokus von Forschungsaktivitäten im Bereich korrelierter elektronischer Zustände gerückt, da sie mit schweren Elementen in Übergangsmetalloxiden [23] und in Metall-Halbleiter-Heterostrukturen an Oberflächen leicht zu realisieren sind und vielfältige Ladungs- und Spin-Zustände aufweisen können [24–29].

Durch starke relativistische Effekte ist bei schweren Elementen wie Au, Tl, Pb oder Bi die Kopplung zwischen Spin und Elektronenorbitalen besonders ausgeprägt. Die gebrochene Inversionssymmetrie an Ober- und Grenzflächen führt zu einer Spin-Aufspaltung der elektronischen Bänder im Bereich des Fermi-Niveaus. Es lassen sich grundsätzlich zwei Typen von Aufspaltungen unterscheiden: Rashba-artige Spin-Aufspaltungen [30, 31] verschieben die Spin-polarisierten Bänder im \mathbf{K} -Raum gegeneinander und Zeeman-artige Spin-Aufspaltungen führen zu energetischen Verschiebungen [31–33]. Im Fokus dieser Arbeit stehen die metallischen Spin-polarisierten Zustände von atomar dünnen Pb-Strukturen auf Si-Halbleiteroberflächen, in denen beide Typen in Abhängigkeit von adsorbierter Menge Pb und Orientierung des Substrats realisiert sind [34–38]. Ein Ziel dieser Arbeit ist es, detaillierte Beschreibungen dieser

² Spin-Hall-Effekt

³ Topologische Isolatoren

⁴ Spin-Orbit Interaction

⁵ Spin-Orbit Coupling

Oberflächenzustände im Pb/Si(111)- und Pb/Si(557)-System anhand von Spin-aufgelösten ARPES⁶-Messungen zu liefern, ebenso wie von Pb-induzierten oberflächennahen Quantenzuständen (QWS⁷). Die Messungen tragen so auch zum Verständnis der Supraleitung in den quasi-zweidimensionalen Monolagenstrukturen von Pb/Si(111) bei [39–43].

In Abhängigkeit von der exakten Bedeckung im Bereich um $\Theta_{\text{Pb}} = 1 \text{ ML}^8$ und der Temperatur formt sich im Pb/Si(111)-System eine Vielzahl an verschiedenen Phasen (Phasendiagramm s. [44]). Neben quasi-zweidimensionalen Strukturen wie den SIC⁹- und HIC¹⁰-Phasen können auch quasi-eindimensionale Strukturen wie die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und die DS¹¹-Phase gebildet werden. Die STM¹²- und SPA-LEED¹³-Untersuchungen in dieser Arbeit bilden daher die Ausgangsbasis für Aussagen über Korrelationen der atomaren mit der elektronischen Struktur dieser Phasen. Wie die ARPES-Messungen zeigen werden, bewegt sich die elektronische Struktur der Oberflächenzustände häufig an der Grenze von ein- und zweidimensionaler Physik, was auch DFT¹⁴-Berechnungen der Bandstruktur belegen [45–48]. Während sich die SIC-Phase als 2DEG¹⁵ beschreiben lässt, tendiert die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion deutlicher in Richtung eines 1DEGs¹⁶ mit zusätzlichen zweidimensionalen Signaturen.

Vizinale Si-Oberflächen bieten die Möglichkeit, Strukturen und elektronische Eigenschaften zweidimensionaler Adsorbatsysteme wie den in dieser Arbeit untersuchten Pb-Monolagenstrukturen auf Si(111) durch *Confinement* auf eine Dimension einzuschränken. Als weiteres Beispiel dieser Familie sei das Au/Si(*hkh*)-System genannt (s. z. B. [49–55]), das einen Schwerpunkt der Forschung der FOR1700¹⁷ bildet. Der sog. Fehlwinkel Θ bestimmt die Orientierung des Si-Substrats und damit die Breite einzelner Terrassen zwischen den atomaren Stufen. Auf diese Weise können bspw. die Anzahl und Kopplung benachbarter atomarer Drähte oder die Zusammensetzung der Strukturelemente variiert [50] und damit auch die Dimensionalität des Systems beeinflusst werden. In solch dimensional eingeschränkten Systemen können die Eigenschaften zudem durch die Temperatur stark beeinflusst werden. Das Subsystem der ungesättigten *Dangling Bonds* der Si-Dimere an der Stufenkante von Au/Si(553) weist z. B. einen 2D-1D-*Crossover* auf, der durch die Anregung sog. Solitonen induziert wird [54]. Dies sind 0D-Verschiebungen der Ladungen der *Dangling Bonds* entlang der Stufenkante, wodurch die Ordnung der Ladungen senkrecht zu den Stufen schneller aufgehoben wird als entlang der Stufen.

Im Pb/Si(557)-System mit 1,31 ML Bedeckung tritt hingegen ein gegenteiliger dimensionaler *Crossover* auf: Durch Abkühlen unter die Phasenübergangstemperatur von $T_C = 78 \text{ K}$ ändert sich die Orientierung von hoch-indizierten Facetten mit z. B. (17 17 25)- zur niedrig-indizierten (223)-Orientierung [56]. Dies geht einher mit einem Metall-Isolator-Übergang in der Richtung senkrecht zu den Stufen, während entlang der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -rekonstruierten Pb-Drähte weiterhin metallisches Verhalten auftritt [57–59]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden

⁶ Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy

⁷ Quantum Well State

⁸ Monolage

⁹ Striped Incommensurate

¹⁰ Hexagonal Incommensurate

¹¹ „Devil’s Staircase“

¹² Scanning Tunneling Microscope

¹³ Spot Profile Analysing - Low Energy Electron Diffraction

¹⁴ Density Functional Theory

¹⁵ Zweidimensionales Elektronengas

¹⁶ Eindimensionales Elektronengas

¹⁷ Forschergruppe 1700

mittels STM hoch aufgelöste Messungen zur atomaren Struktur und der mikroskopischen Orientierung der Facetten durchgeführt bzw. mit SR-ARPES¹⁸ der Ursprung des Metall-Isolator-Übergangs näher untersucht. Frühere Magnetotransportmessungen [60, 61] komplettieren den Erklärungsansatz, dass ein neuartiger hoch korrelierter Quantenzustand, die sog. SODW¹⁹, für die außergewöhnlichen elektronischen Eigenschaften des Systems verantwortlich ist [62, 63]. Die von TANMOY DAS entwickelte Theorie der SODW basiert auf dem Ansatz, dass in einem System mit starker SOC die Gitterstruktur, die beteiligten Elektronenorbitale und die Ladungs- und Spin-Ordnung in abgestimmter Art und Weise miteinander korrelieren und dadurch eine Energielücke am Fermi-Niveau bilden [64, 65]. Dies gilt im Pb/Si(557)-System für die (223)-orientierte Facettenstruktur, die in der Richtung senkrecht zu den Stufen Fermi-Nesting zwischen Zuständen mit umgekehrter Spin-Helizität zeigt [35]. In dieser Arbeit und der Publikation in *Nature Communications* [62, 63] wird der Nachweis der SODW durch Störung des Zustands mittels zusätzlicher Pb-Adsorption und das Anlegen externer Magnetfelder geführt, die zu einer Verkleinerung der Energielücke, Spin-Depolarisation und -Dephasierung bis hin zum Kollaps des Quantenzustands führen.

Die vorliegende Dissertation ist wie folgt strukturiert. Vorangestellt sind Verzeichnisse zum Nachschlagen häufig verwendeter Abkürzungen und Symbole. Der Einleitung folgend werden in Kap. 2 die theoretischen Grundlagen und Modellvorstellungen entwickelt, die zum Verständnis der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente erforderlich sind. Im darauf folgenden Kap. 3 werden die verwendeten experimentellen Methoden und Apparaturen in Kürze vorgestellt. In Kap. 4 werden für diese Arbeit grundlegende Informationen der untersuchten atomaren Strukturen von Si(111) und Si(557) und der auf ihnen adsorbierten, ultradünnen Pb-Filme dargestellt. Neben den unterschiedlichen Strukturmodellen werden physikalische Eigenschaften dargestellt und Literaturverweise auf bereits durchgeführte Messungen mit unterschiedlichen Methoden und theoretische Beschreibungen gegeben. In Kap. 5 werden die Messergebnisse an Pb/Si(111) vorgestellt und diskutiert. Neben strukturellen Untersuchungen mit STM und SPA-LEED wurden ARPES-Messungen (teils auch Spin-aufgelöst) zur Vermessung der elektronischen Struktur der besetzten Zustände der jeweiligen Oberfläche durchgeführt. Ergänzend dazu wurden einige DC²⁰- und Magnetotransportmessungen durchgeführt. Schließlich werden in Kap. 6 die Messergebnisse an Pb/Si(557) vorgestellt und diskutiert. Auch hier wurden strukturelle Untersuchungen zum Phasenübergang des Systems mit dem STM durchgeführt. Auf diesen Erkenntnissen basierend werden frühere SPA-LEED-Ergebnisse diskutiert. Der zweite Schwerpunkt des Kapitels liegt auf dem Nachweis und der Darstellung der Eigenschaften des neuartigen quantenmechanischen Zustands einer SODW mittels Spin-aufgelöster ARPES-Messungen, die mit weiteren Methoden der Oberflächenphysik kombiniert wurden. Abschließend werden in Kap. 7 die Ergebnisse dieser Dissertation kurz zusammengefasst und ein Ausblick auf noch offene Fragestellungen und zukünftig mögliche Forschungsansätze gegeben. Im Anhang befinden sich zudem eine theoretische Herleitung der effektiven Massen des Silizium-Valenzbandes und eine tabellarische Zusammenfassung relevanter Fit- und Modellparameter der Spin-aufgelösten ARPES-Messungen an Pb/Si(557).

Teile dieser Arbeit wurden bereits in wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht, die in der Publikationsliste am Ende aufgeführt sind.

¹⁸ Spin-Resolved and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy

¹⁹ Spin-Orbit Density Wave

²⁰ Direct Current

2. Theoretische Grundlagen

Für das Verständnis der experimentellen Befunde dieser Arbeit bedarf es verschiedener theoretischer Überlegungen, die in diesem Kapitel in unterschiedlicher Tiefe behandelt werden.

Zuerst wird in Kap. 2.1 ein kurzer Überblick über grundlegende Symmetrien von Oberflächen im Real- und \mathbb{K} -Raum gegeben, die in den untersuchten Systemen dieser Arbeit auftreten.

Das folgende Kap. 2.2 beschäftigt sich mit der SOI im Allgemeinen und dem Rashba-(Zeeman-)Effekt in niedrigdimensionalen Elektronengasen als Spezialfall im Speziellen. Neben grundsätzlichen Überlegungen zum Rashba-Effekt wird dabei insbesondere auf Anisotropien und Nichtlinearitäten eingegangen, die zu Abweichungen von der einfachen isotropen und linearen ursprünglichen Beschreibung von RASHBA und BYCHKOV führen [66, 67]. Ebenso wird in diesem Kapitel als zusätzliche Quelle für Spin-polarisierte Oberflächenzustände der Zeeman-Effekt identifiziert und in eine verallgemeinerte Theorie zusammen mit dem Rashba-Effekt als Rashba-Zeeman-Effekt beschrieben. Außerdem wird der Einfluss mehrdomäniger Oberflächen auf die Spin-Polarisation in SR-ARPES-Messungen diskutiert.

In Kap. 2.3 wird mittels eines phänomenologischen Modells anhand eines Beispiels das sog. *Warping* als eine anisotrope Abweichung vom Verhalten eines (quasi-)freien Elektronengases vorgestellt.

Das folgende Kap. 2.4 behandelt verschiedene Typen von Dichtewellen an Oberflächen, die durch ihr gemeinsames Auftreten das quasi-eindimensionale Verhalten des Elektronengases der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ bei Temperaturen unter $T_C = 78 \text{ K}$ erklären (s. Kap. 6.2). Dabei wird auch auf den neuartigen Quantenzustand einer SODW eingegangen, der in [62, 63] erstmals für ein quasi-eindimensionales System nachgewiesen werden konnte.

In Kap. 2.5 folgt anschließend ein kurzer Überblick über die theoretische Beschreibung der Hybridisierung elektronischer Bänder, wie sie aufgrund von SOC und Rückfaltung an Zonengrenzen häufig in den hier untersuchten Systemen vorkommt.

Kap. 2.6 u. Anh. D beschäftigen sich danach umfassend mit der Beschreibung des Verhaltens der effektiven Masse von Löchern im Valenzband des Si-*Bulks*. Bereits die geringe SOI in Si reicht aus, Anisotropien und energetische Aufspaltungen der elementaren lochartigen Bänder hervorzurufen. Eine Erklärung hierfür lässt sich mittels der sog. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie herleiten.

Die so ermittelten lochartigen Dispersionen für den Si-*Bulk* dienen in Kap. 5.2.4 als Ausgangsbasis für die Erklärung von sog. QWSs, die durch die Pb-Adsorption auf einem hochdotierten Si-Substrat in einem dreieckigen, oberflächennahen Potential existieren. Die theoretische Beschreibung eines solchen Dreieckspotentials wird in Kap. 2.7 gegeben.

2.1. Oberflächensymmetrie

Die Symmetrie kristalliner Oberflächen lässt sich mittels 32 verschiedener Punktgruppen in 230 Raumgruppen klassifizieren. An dieser Stelle soll keine vollständige Diskussion dieser Punktgruppen erfolgen, sondern lediglich auf grundsätzliche Eigenschaften von im Rahmen

Struktur	Bedeckung ML	Raum- gruppe	Symmetrie			
			\mathbb{R}	K-Raum		
hexagonal				$\bar{\Gamma}$	\bar{M}	\bar{K}
Si(111)-(7 × 7) & Si(111)-(1 × 1)	-	$p3m1$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_3
β -Pb/Si(111)-(3 × 3)	1/3	$p3m1$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_3
Tl/Si(111)-(1 × 1)	1	$p3m1$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_3
Tl/Ge(111)-(1 × 1)	1	$p3m1$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_3
Bi/Ag(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1/3	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1/3	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
β -Au/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
β -Sb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	1	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
β -Pb/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	4/3	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)	4/3	$p31m$	C_{3v}	C_{3v}	C_{1h}	C_{3v}
zentriert-rechteckig				$\bar{\Gamma}$	\bar{X}	\bar{Y}
Pb/Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)	1,2	$c1m1$	C_{1v}	C_{1v}	C_{1h}	C_1
DS-Phase Pb/Si(111): $n + m = 2p + 1$	1,2-1,31	$c1m1$	C_{1v}	C_{1v}	C_{1h}	C_1
rechtwinklig				$\bar{\Gamma}$	\bar{X}, \bar{X}'	\bar{M}
DS-Phase Pb/Si(111): $n + m = 2p$	1,2-1,31	$p1g1$	C_1	C_1	C_1	C_1
schiefwinklig				$\bar{\Gamma}$		
Pb/Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)	1	$p1$	C_1	C_1		
SIC-Phase Pb/Si(111)	> 1,28	$p1$	C_1	C_1		
Si(557)	-	$p1$	C_1	C_1		
(223)-Facette Pb/Si(557)	1,31	$p1$	C_1	C_1		

Tabelle 2.1: Symmetrien einiger Systeme: $\bar{\Gamma}$, \bar{M} , \bar{K} , \bar{X} , \bar{X}' und \bar{Y} beziehen sich hier auf die jeweils vorliegende Rekonstruktion der Oberfläche. Benennung der Symmetriepunkte nach [68]. In Raumgruppe $p3m1$ liegen die Spiegelachsen entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung, ebenfalls die Drehachse des \bar{M} -Punkts. In Raumgruppe $p31m$ liegen die Spiegelachsen entlang der $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung, während die Drehachse des \bar{M} -Punkts die gleiche wie in Raumgruppe $p3m1$ ist. Die Spiegelachse der Raumgruppe $c1m1$ und die Drehachse des \bar{X} -Punkts liegt in $\bar{\Gamma}\bar{X}$ -Richtung. Die Gleitspiegelebenen der Raumgruppe $p1g1$ liegen entlang der $\bar{\Gamma}\bar{X}$ - und der $\bar{M}\bar{X}'$ -Richtung. Die (223)-Facette von 1,31 ML Pb/Si(557) hat zwar eine rechtwinklige Einheitszelle, jedoch keine Spiegel- oder Gleitspiegelebenen und gehört daher zur Raumgruppe $p1$.

dieser Arbeit vorkommenden Symmetrien eingegangen werden. Weitere Details finden sich bspw. in [68]. Für die Raum- und Punktgruppen gibt es verschiedene Symboliken. In dieser Arbeit sind die Raumgruppen durch die HERMANN-MAUGUIN-Symbolik und die Symmetrien durch SCHÖNFLIES-Symbole dargestellt. Bei den Raumgruppen stehen dabei p und c für eine primitive bzw. basiszentrierte Einheitszelle und m und g für vorhandene Spiegel- bzw.

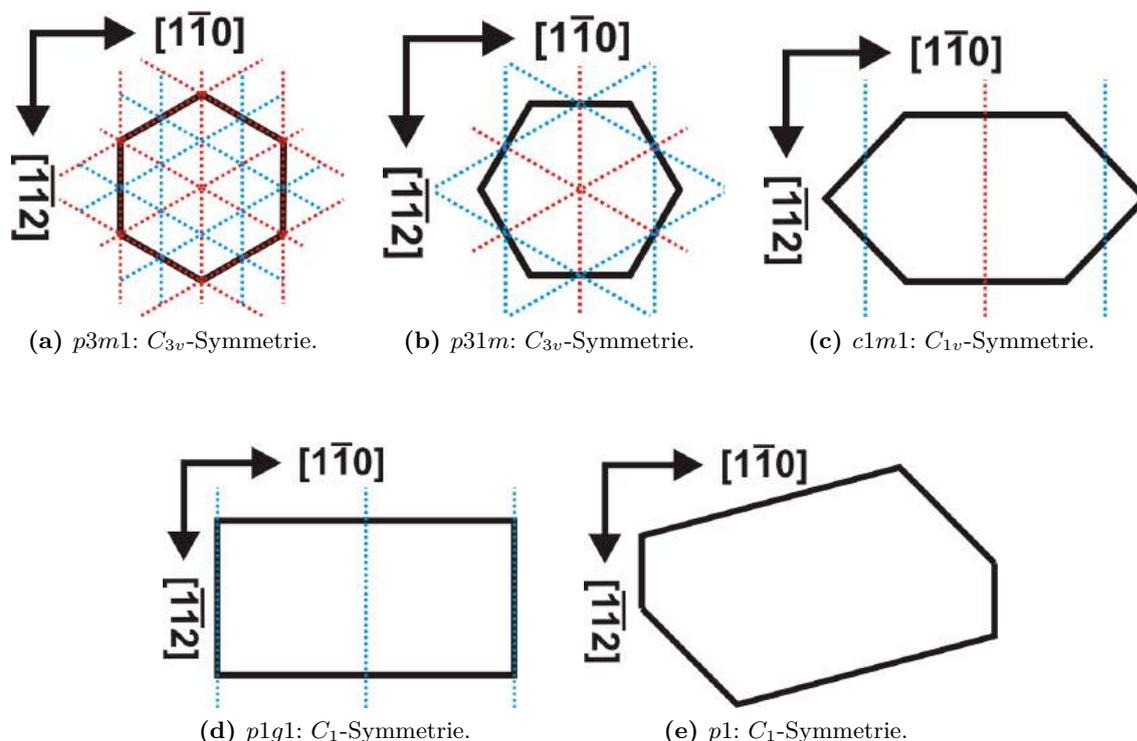


Abbildung 2.1: Symmetrien einiger Raumgruppen im Realraum: Die schwarzen Linien kennzeichnen die Einheitszellen. Die roten gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen und die blauen gepunkteten Linien die Gleitspiegelebenen. Die gezeigte Einheitszelle der Raumgruppe $p1$ in (e) stellt lediglich ein Beispiel von vielen dar.

Gleitspiegelebenen. In der SCHÖNFLIES-Symbolik bedeutet das C die Zugehörigkeit der jeweiligen Punktgruppe zu den Drehgruppen. Die Zahl in den Indizes gibt außerdem die Anzahl an Drehachsen und die Buchstaben v und h vertikale bzw. horizontale Spiegelebenen an, die zusätzlich zu den Drehachsen vorhanden sind. Die höchste in dieser Arbeit vorkommende Symmetrie (C_{3v}) steht damit für eine dreizählige Drehsymmetrie mit drei vertikalen Spiegelebenen, während die niedrigste Symmetrie (C_1) außer der Abbildung auf sich selbst (Drehung um 360°) keine weiteren Symmetrieelemente (neben der Translation des Gitters) besitzt.

Um die Symmetrie einer Festkörperoberfläche zu bestimmen, müssen oft mehrere atomare Lagen betrachtet werden. Insbesondere bei Adsorbatsystemen auf Si- oder Ge-Oberflächen sind die Atome bis zur zweiten Substratlage zu berücksichtigen (auf gestuften Oberflächen ggf. noch weitere). In Tab. 2.1 sind die in dieser Arbeit untersuchten und einige weitere solcher Systeme nach ihrer Symmetrie geordnet aufgelistet.

Oberflächen mit einer hohen Symmetrie (hier hexagonal) sind dabei u. a. die Si(111)-(7×7)- und die β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion aus den Raumgruppen $p3m1$ bzw. $p31m$, die im Realraum beide eine C_{3v} -Symmetrie aufweisen, jedoch mit unterschiedlich angeordneten Spiegel- und Gleitspiegelebenen (s. Abb. 2.1 (a) u. (b)). Im \mathbb{K} -Raum wird der Unterschied dieser zwei Raumgruppen ebenfalls durch die Orientierung der Spiegelebenen und dadurch anhand der Symmetrie der \bar{K} -Punkte sichtbar (s. Abb. 2.2 (a) u. (b)). In diesen Punkten weist

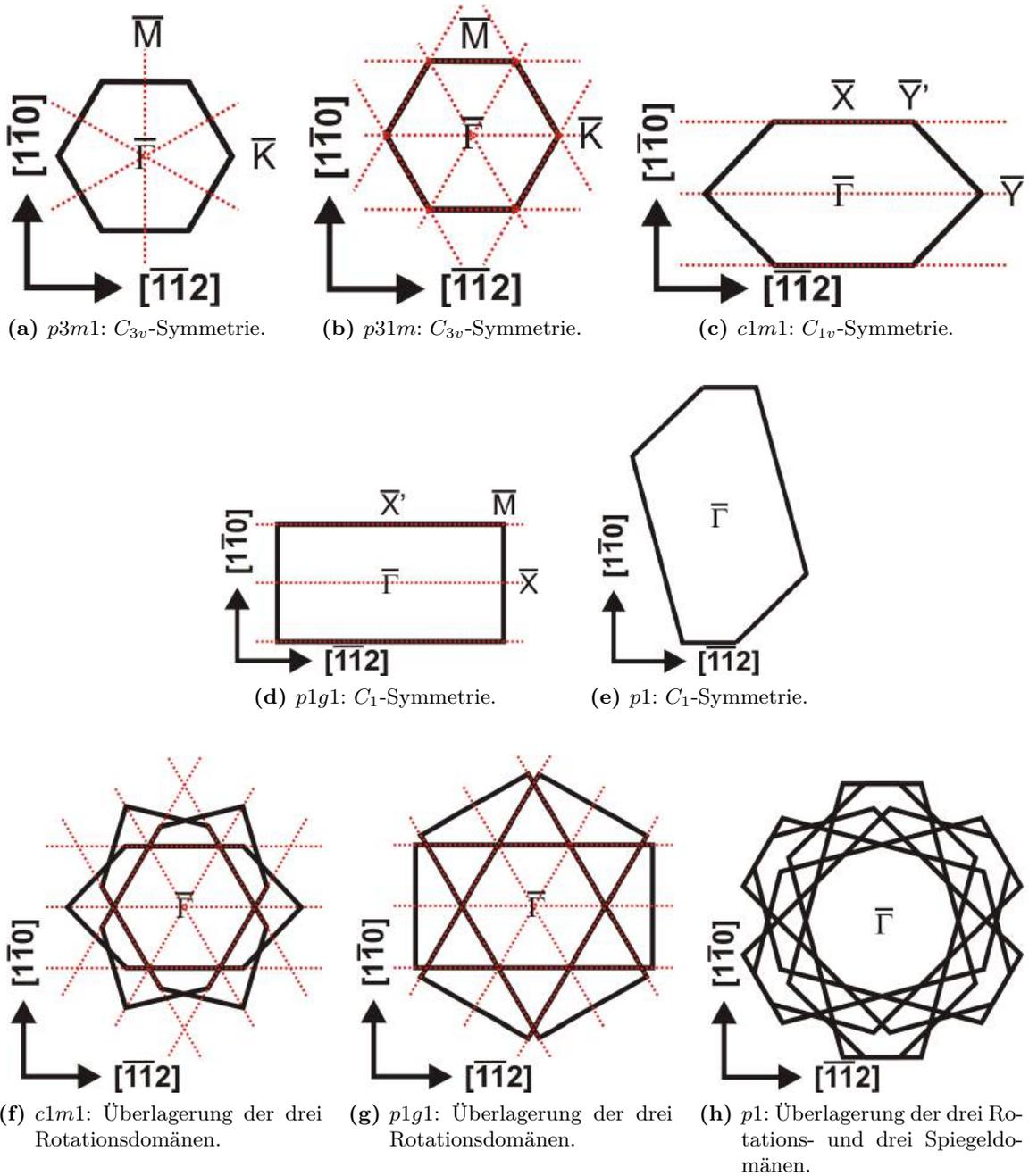


Abbildung 2.2: Symmetrien einiger Raumgruppen im \mathbb{K} -Raum: Die schwarzen Linien kennzeichnen die reziproken Einheitszellen. Die roten gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen. Kennzeichnung der Hochsymmetriepunkte nach [68]. Die gezeigte Einheitszelle der Raumgruppe $p1$ in (e) ist der in Abb. 2.1 (e) gezeigte Einheitszelle im Realraum zugehörig und stellt damit lediglich ein Beispiel von vielen dar. (f)-(h) zeigen die überlagerten 1. SBZs durch Rotations- und Spiegeldomänen, wie sie in ARPES-Messungen auftreten.

die $p3m1$ -Raumgruppe gegenüber der $p31m$ -Raumgruppe keinerlei Spiegelebenen auf und hat daher lediglich C_3 - anstatt C_{3v} -Symmetrie.

Neben den hexagonalen Oberflächen finden sich bei der Adsorption von Pb auf Si(111) und Si(557) auch Phasen mit niedrigeren Symmetrien, die zentriert-rechtwinklige, rechtwinklige oder schiefwinklige Einheitszellen aufweisen (s. Tab. 2.1). Die Symmetrien dieser Oberflächen im Realraum sind in Abb. 2.1 (c)-(e) dargestellt und im \mathbb{K} -Raum in Abb. 2.2 (c)-(e).

Im \mathbb{K} -Raum werden die Einheitszellen auch als SBZ²¹ bezeichnet. Existieren durch die hohe Symmetrie des Substrats wie auf der Si(111)-Oberfläche mehrere Rotations- und/oder Spiegeldomänen in einem System, so überlagern sich die SBZs dieser Systeme im \mathbb{K} -Raum entsprechend ihrer Orientierung relativ zueinander um den sog. $\bar{\Gamma}$ -Punkt herum. Dabei können für niedrigsymmetrische Oberflächengeometrien teils komplizierte Überlagerungen der SBZs entstehen, wie in Abb. 2.2 (f)-(h) dargestellt ist. Die überlagerten SBZs der Rotations- und Spiegeldomänen führen daher bspw. in ARPES- und LEED²²-Messungen zu einer „vorgetäuschten“ Drei- oder Sechszähligkeit der Oberfläche. Daher bedarf es bei der Interpretation solcher Messungen oftmals zusätzlicher Überlegungen hinsichtlich der Rotations- und Spiegeldomänen (s. Kap. 2.2.3 u. 5.2.1-5.2.3).

2.2. Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die SOI beschreibt den Einfluss von Drehimpulsen auf die Energie mikroskopischer Teilchen. Allgemein wird sie direkt aus der relativistischen Dirac-Gleichung hergeleitet [69]. In nicht-relativistischer Näherung resultiert aus ihr der Spin-Bahn-Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = -\frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.1)$$

nach PAULI für das Elektron durch Reduktion des vierkomponentigen Dirac-Spinors auf zwei Komponenten. Dabei ist

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T \quad (2.2)$$

der Vektor der Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

V das Potential des beschriebenen Systems und \mathbf{p} der Impuls-Operator. Für Zentralpotentiale $V(\mathbf{r}) = V(r)$ leichter Atome lässt sich der Hamilton-Operator zu

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \lambda_{n,\ell} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (2.4 \text{ a})$$

mit

$$\lambda_{n,\ell} = -\frac{e}{2m_e^2 c^2} \cdot \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \quad (2.4 \text{ b})$$

²¹ Surface Brillouin Zone

²² Low Energy Electron Diffraction

vereinfachen, wobei \mathbf{L} und \mathbf{S} der Bahn- bzw. der Spin-Drehimpuls des Elektrons sind und $\lambda_{n,\ell}$ die Kopplungsstärke angibt [69]. In diesem Fall der SOI spricht man daher auch von LS -Kopplung. Das Zentralpotential $V(r)$ ist mit dem Potential des jeweiligen Atomkerns

$$V_{\text{Nuc}}(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.5)$$

identisch, mit der elektrischen Feldkonstanten ϵ_0 und dem Abstand vom Kern r [70, 71]. Daraus resultieren der Potentialgradient

$$\nabla V_{\text{Nuc}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV_{\text{Nuc}}(r)}{dr} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (2.6)$$

und nach [71] der zugehörige Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_{\text{Nuc}}^{\text{SO}} = \frac{Ze^2\hbar}{16\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} (\mathbf{r} \times \hbar\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \propto \frac{Z}{r^3} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}. \quad (2.7)$$

In quantenmechanischer Rechnung muss anstatt von r^{-3} in Gl. (2.6) u. (2.7) der Erwartungswert $\langle 1/r^3 \rangle$ verwendet werden [72]. Damit erhält man die Abhängigkeiten bzgl. der Hauptquantenzahl n und der Drehimpulsquantenzahl ℓ nach [73] für $\ell \neq 0$ zu

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \frac{\rho(\mathbf{r})}{r^3} d^3r = \frac{Z^3}{a_B^3} \cdot \frac{1}{n^3 \ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)}, \quad (2.8)$$

wobei

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) | \Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) \rangle = |\Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})|^2 \quad (2.9)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustands $|\Psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})\rangle$ des H-Atoms darstellt und a_B der Bohr'sche Radius ist. Da demnach $r \propto Z^{-1}$ ist, skaliert die SOI insgesamt mit Z^4 [71, 72]. Dies bedeutet für Elemente mit kleiner Ordnungszahl (z. B. C, Si) typischerweise eine kleinere Stärke der SOC im Vergleich zu Elementen mit hoher Ordnungszahl wie z. B. Au, Tl, Pb od. Bi, wie in Tab. 2.2 anhand der Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_{SO} zu sehen ist. Sie lässt sich aus der Verschiebung zweier Energieniveaus mit gleicher Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ aber unterschiedlicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j aufgrund der vektoriellen Addition von \mathbf{L} und \mathbf{S} berechnen:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (2.10 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)], \end{aligned} \quad (2.10 \text{ b})$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{j,\ell,s} &= \frac{\lambda_{n,\ell}}{\hbar^2} \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle \\ &= \frac{\lambda_{n,\ell}}{\hbar^2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)], \end{aligned} \quad (2.10 \text{ c})$$

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{SO}} &= \Delta E_{j_1,\ell_1,s_1} - \Delta E_{j_2,\ell_2,s_2} \\ &= \frac{\lambda_{n,\ell_1}}{\hbar^2} \langle \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 \rangle - \frac{\lambda_{n,\ell_2}}{\hbar^2} \langle \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle \\ &= \frac{\lambda_{n,\ell_1}}{2} [j_1(j_1+1) - \ell_1(\ell_1+1) - s_1(s_1+1)] \\ &\quad - \frac{\lambda_{n,\ell_2}}{2} [j_2(j_2+1) - \ell_2(\ell_2+1) - s_2(s_2+1)]. \end{aligned} \quad (2.10 \text{ d})$$

Element	Kernladungszahl Z	Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_{SO} [eV] [*]	aus/nach
C	6	0,006	[75, 76]
Si	14	0,044	[75, 76]
Ge	32	0,296	[75, 76]
α -Sn	50	0,8	[75, 76]
Sb	51	0,6	[77]
Pb	82	2,0 [†]	[75, 76]
Bi	83	1,25 [◊] -1,5	[78-80]

* Angegeben ist die Aufspaltung der $p_{1/2}$ - und $p_{3/2}$ -Orbitale am Γ -Punkt.

[†] Aufspaltung für neutrale Atome: 0,91 eV [78, 79, 81].

[◊] Aufspaltung für neutrale Atome.

Tabelle 2.2: Spin-Bahn-Aufspaltung ausgewählter Elemente: Die Aufspaltung nimmt mit der vierten Potenz in Z zu.

Insbesondere erhält man für $j_1 = J$ und $j_2 = J - 1$ mit $\ell_1 = \ell_2 = J \pm 1/2$ und $s_1 = s_2 = 1/2$ die Landé'sche Intervallregel

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\text{SO}} &= \Delta E_{J, J \pm 1/2, 1/2} - \Delta E_{J-1, J \pm 1/2, 1/2} \\
 &= \frac{\lambda_{n, J \pm 1/2}}{2} \left\{ \left[J(J+1) - (J \pm 1/2)(J \pm 1/2 + 1) - 1/2(1/2 + 1) \right] \right. \\
 &\quad \left. - \left[(J-1)J - (J \pm 1/2)(J \pm 1/2 + 1) - 1/2(1/2 + 1) \right] \right\} \\
 &= \lambda_{n, J \pm 1/2} \cdot J
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

für zwei benachbarte Energieniveaus [74]. So ergibt sich bspw. für die Spin-Bahn-Aufspaltung der $p_{3/2}$ - und $p_{1/2}$ -Orbitale mit $J = 3/2$ und $\ell = 1$

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\text{SO}, p} &= \Delta E_{3/2, 1, 1/2} - \Delta E_{1/2, 1, 1/2} \\
 &= \frac{\lambda_{n, 1}}{2} \left\{ \left[\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] \right. \\
 &\quad \left. - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] \right\} \\
 &= \frac{3}{2} \lambda_{n, 1}.
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Die Näherung der LS -Kopplung für die SOI in Atomen verliert mit zunehmender Kernladungszahl Z jedoch an Gültigkeit. Aufgrund der Abschirmung S des Kerns durch die Elektronen der inneren Orbitale lässt sich Gl. (2.5) zunächst noch durch eine effektive Kernladungszahl $Z_{\text{eff}} = Z - S$ und eine reduzierte Hauptquantenzahl n_{eff} anstatt von Z und n verwenden²³, doch verändert sich für sehr schwere Atome wie Pb auch der Kopplungsmechanismus der Spin- und Bahndrehimpulse.

²³ Je nach Zweck verwendet man verschiedene $Z_{\text{eff}}, n_{\text{eff}}$. Für das gesamte Pb-Atom erhält man z.B. mit $S = 70$ $Z_{\text{eff}} = 12$ und $n_{\text{eff}} \approx 4,2$ [82, 83], während bei der Betrachtung einzelner Orbitale kleinere Korrekturen dazu gemacht werden, z.B. $Z_{\text{eff}} = 12,39$ für die $6p$ -Orbitale und $Z_{\text{eff}} = 14,1$ für die $6s$ -Orbitale von Pb.

Bei der *LS*-Kopplung werden in Mehrelektronensystemen zunächst alle Bahn- und Spin-Drehimpulse der einzelnen Elektronen aufaddiert und anschließend miteinander gekoppelt. Dagegen spüren in schweren Atomen aufgrund der Z^4 -Abhängigkeit der Stärke der SOI und der Abschirmung die Valenzelektronen relativ gesehen weniger voneinander, sodass zunächst die Spin- und Bahndrehimpulse eines jeden Valenzelektrons zu einem Gesamtdrehimpuls \mathbf{J}_i gekoppelt werden und erst danach diese Gesamtdrehimpulse zu einem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \sum \mathbf{J}_i$ mit Quantisierung J des Atoms gekoppelt werden. Aufgrund dessen heißt dieser Kopplungsmechanismus *jj*-Kopplung.

Die Verschiebung der Energieniveaus bei *jj*-Kopplung wird analog zur *LS*-Kopplung nach Gl. (2.10) berechnet. So weist z. B. Pb mit seiner $[\text{Xe}] 4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$ -Elektronenkonfiguration zwei ungepaarte $6p$ -Valenzelektronen mit Gesamtdrehimpulsen \mathbf{J}_1 und \mathbf{J}_2 und ihren Quantisierungen j_1 und j_2 auf. Damit erhält man

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2, \quad (2.13 \text{ a})$$

$$\langle \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \mathbf{J}^2 - \mathbf{J}_1^2 - \mathbf{J}_2^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)], \quad (2.13 \text{ b})$$

$$\Delta E_{(j_1, j_2)J} = \frac{\lambda_{n, \ell}}{\hbar^2} \langle \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 \rangle = \frac{\lambda_{n, \ell}}{2} [J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]. \quad (2.13 \text{ c})$$

Die Kopplungsstärke $\lambda_{n, \ell}$ ist die gleiche wie in Gl. (2.4 b). Aufgrund der *jj*-Kopplung der Elektronen ist eine Bezeichnung der Zustände mit den ursprünglichen Orbitalen s, p, d und f nicht mehr korrekt. Stattdessen werden die Zustände mittels $(j_1, j_2)_J$ beschrieben. Der orbitale Charakter der Zustände bleibt bei der Kopplung von Zuständen aus gleichen Orbitalen erhalten, z. B. $p^1, p^1 \rightarrow p^2$. Bei einer Mischung von unterschiedlichen Orbitalen erhält man jedoch eine Form der Hybridisierung, z. B. ähnlich wie die *sp*-Hybridisierung von C-Atomen, $s^1, p^1 \rightarrow sp$.

In der hier dargestellten Rechnung sind noch nicht die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander und relativistische Korrekturen einbezogen, wie sie in der Quantenmechanik für die Erklärung der Spektren Wasserstoff-ähnlicher Atome verwendet werden (s. z. B. [69, 72, 73, 84]). Diese sollen an dieser Stelle auch nicht Gegenstand der weiteren Diskussion sein, da die *LS*- und *jj*-Kopplungen lediglich den Ausgangspunkt zum Verständnis des Rashba-Effekts in Festkörpern darstellen.

In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten mit Si-Substraten und Pb-Adsorbaten waren die Valenzelektronen nahe des Fermi-Niveaus von besonderer Bedeutung (s. Kap. 5-6). Die Elektronenkonfigurationen der genannten Elemente sind $[\text{Ne}] 3s^23p^2$ für Si und $[\text{Xe}] 4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$ für Pb. Demnach liegen die $3p$ - bzw. $6p$ -Orbitale der Elemente dem Fermi-Niveau am nächsten. Ihre Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_{SO} lässt sich demnach in erster Näherung durch Gl. (2.12) für Si bzw. mittels Gl. (2.13 c) für die schweren Pb-Atome beschreiben.

Die SOI bewirkt nicht nur eine energetische Aufspaltung der Orbitale bzw. der aus ihnen abgeleiteten Energiebänder in Festkörpern, sondern auch eine Spin-Polarisation \mathbf{S} dieser Zustände. Da sich der Spin-Drehimpuls-Vektor \mathbf{S} aus Gl. (2.4 a) als Orientierung des Spins auffassen lässt, kann dieser sich in quantisierter Art und Weise zwischen paralleler und antiparalleler Orientierung relativ zum Bahndrehimpuls \mathbf{L} ausrichten²⁴. Diese Ausrichtung re-

²⁴ Lediglich für p -Orbitale gibt es ausschließlich parallele und antiparallele Ausrichtung. Eine parallele Ausrichtung entspricht dem $p_{3/2}$ -Zustand und eine antiparallele Ausrichtung dem $p_{1/2}$ -Zustand. In höheren Orbitalen sind weitere quantisierte Ausrichtungen möglich.

suliert in einer messbaren Spin-Polarisation \mathbf{S} der jeweiligen Zustände.

In den folgenden Abschnitten zum Rashba- und Zeeman-Effekt (Kap. 2.2.1 u. 2.2.2) werden die Auswirkungen externer und interner elektrischer und magnetischer Felder auf die elektronischen Zustände und ihre Spin-Polarisation in Spin-Bahn-gekoppelten Systemen diskutiert. Es wird dargestellt, dass derartige Felder die Dispersion und Spin-Polarisation der Bänder in Festkörpern beeinflussen können. Einen Spezialfall stellt dabei die im Pb/Si(557)-System experimentell gefundene SODW dar (s. Kap. 6.2). Die theoretischen Grundlagen hierzu werden in Kap. 2.4 beschrieben. Die genannten Effekte sind abhängig von der jeweiligen Symmetrie des Systems.

Unabhängig von der Symmetrie sind die Auswirkungen der SOI im *Bulk* bzw. in *Bulk*-nahen Strukturen von Si, die auf den Atomorbitalen und ihrer Hybridisierung beruhen. Sie werden in einem gesonderten Kapitel mittels der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie diskutiert (s. Kap. 2.6 u. Kap. D im Anhang). Eine vereinfachte mathematische Beschreibung der Hybridisierung elektronischer Bänder findet sich in Kap. 2.5.

Diese Beispiele stellen nur einen Bruchteil möglicher Spezialfälle der SOI dar. Andere ebenfalls symmetrieabhängige Beispiele sind der Dresselhaus-Effekt [85] und der intrinsische SHE²⁵ [7, 86–89]. Der intrinsische SHE kann dabei z. B. durch den Rashba-Effekt hervorgerufen werden [90].

2.2.1. Rashba-Effekt

Die theoretische Beschreibung des sog. Rashba-Effekts geht auf BYCHKOV und RASHBA zurück [66, 67]. Er ist eine effektive Wechselwirkung des Spin-Bahn-Hamilton-Operators \mathcal{H}_{SO} aus Gl. (2.1) und wurde experimentell bereits in zahlreichen Systemen gefunden [22, 91, 92], so z. B. in 2DEGs von Halbleiter-Heterostrukturen (z. B. [93]), an Metalloberflächen (z. B. [80, 94–102]), in atomar-dünnen Metallfilmen auf isolierenden oder halbleitenden Substraten (z. B. [77, 103–110]), im 2DEG des Oberflächenzustands von SrTiO₃ [31], in QWSs (z. B. [111–117]), in Metall-induzierten oberflächennahen *Bulk*-QWSs (innerhalb der Raumladungszone der Schottky-Barriere; z. B. [104, 118–122]), als *verborgener Zustand* in topologischen Isolatoren [123] und sogar in *Bulk*-Materialien (z. B. [124–126]). Gemeinsam ist allen Systemen die Einschränkung der beweglichen Ladungsträger auf zwei Dimensionen. In diesem Fall bewirkt die SOI eine Spin-Aufspaltung der Zustände im \mathbf{K} -Raum bei gleicher Energie.

Bewegen sich die Ladungsträger innerhalb eines solchen Mediums, interferieren die beiden Spin-Eigenzustände durch Spin-Präzession [22, 127], sodass sich nach einer Länge L zwischen ihnen eine Phasendifferenz von

$$\Delta\phi = \frac{2m^*\alpha_{\text{R}}L}{\hbar^2} \quad (2.14)$$

ergibt, wobei α_{R} der sog. Rashba-Koeffizient und m^* die effektive Masse ist [20–22]. Damit lässt sich prinzipiell ein Spin-Filter realisieren, der sog. Datta-Das-Transistor [20, 21, 128, 129]. Während in Halbleiter-Heterostrukturen wie InGaAs/InAlAs für einen Spin-Flip, d. h. für eine Rotation des Spins um $\Delta\phi = \pi$, Längen von typischerweise mehreren Hundert Nanometern benötigt werden, ist auf Si-Oberflächen mit schweren Elementen wie Bi lediglich eine Länge im Bereich von 1 nm notwendig [108].

²⁵ Hierbei akkumulieren sich Spins aufgrund der SOI an den Rändern eines Systems, wenn ein elektrisches Feld anliegt.

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen des Rashba-Effekts in vereinfachter Art und Weise beschrieben werden, sowie Implikationen bzgl. höherer Ordnungen und reduzierter Symmetrien diskutiert werden. Alternativ lässt sich der Rashba-Effekt z. B. auch im *Tight-Binding*-Modell [126, 130] oder im Rahmen der Gruppentheorie [75] beschreiben.

Zur Beschreibung eines Oberflächenzustands im \mathbb{K} -Raum um einen Hochsymmetriepunkt mit Wellenvektor \mathbf{Q} , in dem aufgrund der TRS²⁶ ein Spin-entarteter Zustand vorliegt, lässt sich die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ in einen räumlichen Anteil $|\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ und in eine Spin-Wellenfunktion (den sog. Spinor) $|\Phi(\mathbf{k})\rangle$ als Produktzustand aufteilen:

$$|\Psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = |\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \otimes |\Phi(\mathbf{k})\rangle . \quad (2.15)$$

In den Hochsymmetriepunkten gilt stets $\mathbf{Q} = -\mathbf{Q} + \mathbf{G}$, wobei \mathbf{G} ein reziproker Gittervektor der Oberfläche ist [131]. Damit lässt sich $|\Psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ mit einem Gittervektor \mathbf{R} des Realraums als (periodische) Bloch-Funktion

$$|\Psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \left| e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right\rangle \otimes |\Phi(\mathbf{k})\rangle = \left| e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathbf{Q}\mathbf{R})} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \right\rangle \otimes |\Phi(\mathbf{k})\rangle \quad (2.16)$$

schreiben [131]. Der Hamilton-Operator \mathcal{H}_{Ges} des Gesamtsystems inklusive SOI wirkt auf die Gesamtwellenfunktion $|\Psi\rangle$. Durch die Separation in räumliche Wellenfunktion und Spin-Wellenfunktion lassen sich jedoch auch \mathcal{H}_{Ges} und andere Operatoren derart aufteilen, dass sie entweder nur auf die räumliche Wellenfunktion, oder nur auf die Spin-Wellenfunktion wirken.

Der verallgemeinerte Hamilton-Operator des Rashba-Effekts

$$\mathcal{H}_{\text{R}} = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} (\mathbf{k}) \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

leitet sich direkt aus dem Hamilton-Operator \mathcal{H}_{SO} der SOI in Gl. (2.1) durch Beschränkung der Bewegungsrichtungen der Ladungsträger auf zwei Dimensionen (o. B. d. A. (x,y)-Ebene, $\mathbf{k}_z = 0$) und einem Potentialgradienten ∇V unter Anwendung der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Störungstheorie her [131, 132]. Der sog. Vektor des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ beinhaltet dabei sämtliche Informationen über den Potentialgradienten und die Symmetrie des Systems [131, 132] und hat die Dimension einer Energie. In Störungstheorie erster Ordnung lässt sich $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ als

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \left\langle \Psi_{\mathbf{k}}^0 \left| \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \left[\nabla V \times (\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p}) \right] \right| \Psi_{\mathbf{k}}^0 \right\rangle \quad (2.18)$$

ausdrücken [131]. Die Wellenfunktion $|\Psi_{\mathbf{k}}^0\rangle$ ist dabei der Eigenzustand des Systems ohne Berücksichtigung der SOI. Führt man nun das Kreuzprodukt in Gl. (2.18) aus, so ergibt sich

²⁶ Time Reversal Symmetry

in Ortsdarstellung mit $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ und $\nabla \times (\nabla V) = 0$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) &= \left\langle \Psi_{\mathbf{k}}^0 \left| \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \begin{pmatrix} \partial_z V k_y \\ -\partial_z V k_x \\ \partial_y V k_x - \partial_x V k_y \end{pmatrix} \right| \Psi_{\mathbf{k}}^0 \right\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[\int \frac{\partial V}{\partial z} \rho(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} d^3\mathbf{r} + \int \frac{\partial V}{\partial y} \rho(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_x \end{pmatrix} d^3\mathbf{r} + \int \frac{\partial V}{\partial x} \rho(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -k_y \end{pmatrix} d^3\mathbf{r} \right] \\
&= \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[\begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \int \frac{\partial V}{\partial z} \rho(z) dz + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_x \end{pmatrix} \cdot \int \frac{\partial V}{\partial y} \rho(y) dy + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -k_y \end{pmatrix} \cdot \int \frac{\partial V}{\partial x} \rho(x) dx \right] \\
&= \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[\begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \langle \frac{\partial V}{\partial z} \rangle + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_x \end{pmatrix} \cdot \langle \frac{\partial V}{\partial y} \rangle + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -k_y \end{pmatrix} \cdot \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Da die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r})$ in den drei Integralen der zweiten Zeile in jeweils zwei Dimensionen lediglich zu einem Faktor 1 führt, lässt sich der zweite Schritt in Gl. (2.19) ausführen. Die einzelnen Integrale zeigen, dass der Vektor des Rashba-Koeffizienten den Erwartungswert des Potentialgradienten ∇V in die entsprechende Raumrichtung darstellt und damit physikalische Bedeutung hat (letzter Schritt; [92]).

Anhand der ersten Zeile von Gl. (2.19) lässt sich zudem die Antisymmetrie des Vektors des Rashba-Koeffizienten

$$\boldsymbol{\alpha}(-\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \tag{2.20}$$

erkennen. Daher sind Terme höherer Ordnung in \mathbf{k} stets ungerade [131].

In der Regel ist der Erwartungswert des Potentialgradienten $\langle \partial_z V \rangle$ wesentlich größer als $\langle \partial_{x,y} V \rangle$, da das *Confinement* der betrachteten Struktur in z-Richtung vorliegt (s. o.). Damit vereinfacht sich Gl. (2.19) nach [92] zu

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \cdot \langle \frac{\partial V}{\partial z} \rangle \cdot \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha_R \cdot \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.21}$$

Die hier nicht mehr berücksichtigten *in-plane*-Erwartungswerte $\langle \partial_{x,y} V \rangle$ können jedoch nicht mehr vernachlässigt werden, sobald Anisotropien vorliegen [131, 133].

Im einfachsten Fall ist das Medium, in dem sich die Ladungsträger bewegen, jedoch isotrop und weist somit eine hohe Symmetrie auf. Oftmals wird \mathcal{H}_R dann unter Verwendung von Gl. (2.21) als

$$\mathcal{H}_R = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \alpha_R(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) = \alpha_R k (\cos \varphi \sigma_y - \sin \varphi \sigma_x) \tag{2.22}$$

dargestellt. Genau genommen gilt diese Darstellung jedoch nur für Systeme mit C_{3v} - und C_{4v} -Symmetrie. Liegt eine niedrigere Symmetrie vor, so folgt aus den minimalen Repräsentationen der Gruppentheorie und Gl. (2.19), dass $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ auch anisotrope Terme bzw. Komponenten aufweisen kann, die mit σ_z multipliziert werden [131]. Außerdem können störungstheoretisch Terme höherer Ordnung in \mathbf{k} hinzugezogen werden [131]. Global weisen die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Systeme C_{3v} -, C_{1v} - oder C_1 -Symmetrie auf. Als lokale Symmetrie im

\mathbf{k}^n	C_1	C_{1v}, C_{1h}	C_{3v}
$n = 1$	$\alpha_1^{xi} k_x \sigma_i,$	$\alpha_1^{xy} k_x \sigma_y,$	$\alpha_1^I (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x)$
	$\alpha_1^{yi} k_y \sigma_i$	$\alpha_1^{yx} k_y \sigma_x,$	
		$\alpha_1^{yz} k_y \sigma_z$	
$n = 3$	$\alpha_3^{xxxi} k_x^3 \sigma_i,$	$\alpha_3^{xxxxy} k_x^3 \sigma_y,$	$\alpha_3^I \left[(k_x^3 + k_x k_y^2) \sigma_y - (k_x^2 k_y + k_y^3) \sigma_x \right],$
	$\alpha_3^{xxyi} k_x^2 k_y \sigma_i,$	$\alpha_3^{xxyx} k_x^2 k_y \sigma_x,$	$\alpha_3^{A,1} (-k_y^3 + 3k_x^2 k_y) \sigma_z,$
	$\alpha_3^{xyyi} k_x k_y^2 \sigma_i,$	$\alpha_3^{xxyyz} k_x^2 k_y \sigma_z,$	$\alpha_3^{A,2} (k_x^3 - 3k_x k_y^2) \sigma_z$
	$\alpha_3^{yyyi} k_y^3 \sigma_i$	$\alpha_3^{xyyy} k_x k_y^2 \sigma_y,$	
		$\alpha_3^{yyyx} k_y^3 \sigma_x,$	
		$\alpha_3^{yyyz} k_y^3 \sigma_z$	

Tabelle 2.3: Mögliche Terme $\alpha_i \cdot \sigma_i$ des Rashba-Effekts bis zur dritten Ordnung in \mathbf{k} für C_1 -, C_{1v} -, C_{1h} - und C_{3v} -Symmetrie: k_x ist als die Richtung definiert, in der bei C_{3v} -Symmetrie die Linie $k_y = 0$ der $\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung entspricht. Für Raumgruppe $p31m$ ist $\alpha_3^{A,2} = 0$, da eine der drei Spiegelebenen senkrecht zur k_y -Richtung liegt. Für Raumgruppe $p3m1$ ist $\alpha_3^{A,1} = 0$, da eine der Spiegelebenen senkrecht zur k_x -Richtung liegt. Die Spiegelachse der C_{1v} - und C_{1h} -Symmetrie ist in dieser Tabelle entlang der k_x -Richtung orientiert (Vgl. Spiegelebenen in Abb. 2.2). Bei der C_1 -Symmetrie sind bei allen aufgeführten Termen jeweils alle drei Pauli-Matrizen σ_i möglich, insgesamt also sechs Terme für $n = 1$ und zwölf Terme für $n = 3$.

\mathbb{K} -Raum kommt zudem C_{1h} -Symmetrie vor. Die möglichen Terme bis zur dritten Ordnung in \mathbf{k} der sich daraus ergebenden Hamilton-Operatoren sind in Tab. 2.3 aufgeführt. Dabei treten bei niedrigen Symmetrien auch einige Terme auf, die in hochsymmetrischen Systemen ausschließlich dem Dresselhaus-Effekt zugeordnet werden.

Formal lässt sich der Hamilton-Operator aus Gl. (2.17) auch durch ein intrinsisches, effektives \mathbf{k} -abhängiges Magnetfeld \mathbf{B}_{SO} als

$$\mathcal{H}_R = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{B}_{SO} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{B}_{SO} \cdot g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \quad (2.23)$$

mit dem Operator des magnetischen Moments \mathbf{m} des Ladungsträgers und seinem gyromagnetischen Verhältnis g , sowie dem Bohr'schen Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5,788 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \quad (2.24)$$

beschreiben [71, 89]. Der Vergleich mit Gl. (2.18) liefert

$$\mathbf{B}_{SO} = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{2c^2} = \frac{\hbar \mathbf{k} \times \nabla V}{2m_e c^2}, \quad (2.25)$$

wobei \mathbf{v} der Geschwindigkeitsoperator des Ladungsträgers und $\mathbf{E} = -\nabla V$ das elektrische Feld ist, das durch das Potential V hervorgerufen wird [71].

Eine weitere alternative Darstellung ergibt sich als

$$\mathcal{H}_R = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \alpha_R \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \quad (2.26)$$

mittels Nutzung des elektrischen Feldes \mathbf{E} [21].

Für das Auftreten des Rashba-Effekts können verschiedene Quellen innerhalb eines Systems existieren, da der Potentialgradient ∇V aus mehreren Komponenten bestehen kann. In Halbleiter-Heterostrukturen z. B. entstehen Potentialgradienten durch unterschiedliche Dotiergrade und -typen und am *Interface* unterschiedlicher Materialien. Feld-Effekt-Transistoren induzieren durch ein externes elektrisches Feld \mathbf{E}_{Ext} einen steuerbaren Potentialgradienten im Kanal zwischen Source und Drain (z. B. im Datta-Das-Transistor). An der Oberfläche von Metallen und (metallisierten) Halbleitern treten darüber hinaus weitere Effekte auf, auf die nun detaillierter eingegangen werden soll.

Als Erstes ist an der Oberfläche im Vergleich zum *Bulk* die Inversionssymmetrie des Kristalls gebrochen. Die Wellenfunktion der zugehörigen Oberflächenzustände spiegelt diese Asymmetrie wider und bestimmt z. B. auf der Au(111)-Oberfläche einen Großteil der Spin-Aufspaltung [134]. Essentiell für den Rashba-Effekt sind zudem Zustände, die einen gemischten orbitalen Charakter besitzen, z. B. durch *sp*- oder *pd*-Hybridisierung [130, 134].

Des Weiteren bildet sich im Bereich der Oberfläche von (metallisierten) Halbleitern eine Raumladungszone aus, die zu *Fermi-Level-Pinning* und einer Schottky-Barriere mit einer Höhe bis $\Phi_{\text{SB}} \approx 1 \text{ eV}$ an Pb/Si(111) führt [135–139]. Diese Schottky-Barriere kann näherungsweise mit einem Dreieckspotential beschrieben werden (d. h. mit einem linearen Potentialgradienten, der sich zum *Bulk* hin jedoch weiter abschwächt; s. Kap. 2.7 u. 5.2.4, [140]), das je nach Material und Dotierung innerhalb weniger bis zu mehreren hundert Nanometern abfällt [141, 142]. An der Oberfläche von Metallen hingegen wird die Raumladungszone wegen der viel höheren Ladungsträgerkonzentration schon innerhalb der ersten atomaren Lage abgeschirmt (Thomas-Fermi-Abschirmung [143]) und erzeugt eine im Vergleich zwei Größenordnungen kleinere Potentialbarriere [144]. So wurde z. B. für die Au(111)-Oberfläche berechnet, dass der Potentialgradient innerhalb eines Bohr'schen Radius a_{B} abfällt [145].

Den dritten Faktor für den Rashba-Effekt stellt die atomare SOI dar. Sie wird dabei auf die Bewegung der Elektronen im Potential des jeweiligen Atomkerns V_{Nuc} zurückgeführt (s. Einleitung von Kap. 2.2, [70, 71]). Schwere Atome wie Au, Tl, Pb od. Bi zeigen größere Spin-Bahn-Aufspaltungen Δ_{SO} als leichte Elemente. In Störungstheorie erster Ordnung ist $\alpha_{\text{R}} \propto \Delta_{\text{SO}}$ und damit die Spin-Aufspaltung beim Rashba-Effekt in Materialien mit schweren Atomen sehr viel größer als in solchen mit leichten Atomen [89].

Da alle Terme des Hamilton-Operators in Gl. (2.17) eine Multiplikation mit einer der Pauli-Matrizen aus Gl. (2.3) aufweisen, lassen sich die Berechnungen von Eigenenergien und -zuständen mit Hilfe der zweikomponentigen Spinoren $|\Phi(\mathbf{k})\rangle$ durchführen. Die Spin-unabhängigen Teile des Hamilton-Operators des Gesamtsystems \mathcal{H}_{Ges} führen lediglich zu additiven Zusatztermen E_0 der Eigenenergien, beeinflussen jedoch nicht die Eigenfunktionen der Zustände innerhalb der gewählten Basis, wie im Weiteren gezeigt wird. Unabhängig von der Symmetrie des zweidimensionalen Systems lässt sich \mathcal{H}_{Ges} wegen Gl. (2.17) als

$$\mathcal{H}_{\text{Ges}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{R}} = E_0 \cdot \sigma_0 + \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.27)$$

schreiben, wobei σ_0 die sog. vierte Pauli-Matrix, d. h. die 2×2 -Einheitsmatrix, des Spin-unabhängigen Teils darstellt. Aufgrund der Dimension der verwendeten Pauli-Matrizen ist ersichtlich, dass der Rashba-Effekt zwei Eigenzustände $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ aufweist.

Im Folgenden sollen nun die allgemeinen Eigenenergien $E_{\pm}(\mathbf{k})$, Eigenzustände $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ und die daraus resultierenden Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k})$ des Rashba-Effekts ohne Beschränkung auf gewisse Symmetrien berechnet werden.

Die Berechnung der Eigenenergien $E_{\pm}(\mathbf{k})$ folgt durch Lösung des Eigenwertproblems

$$\begin{aligned}
 0 &= \det [\mathcal{H}_{\text{Ges}} - E_{\pm}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_0] \\
 &= \det \begin{pmatrix} E_0 + \alpha_z - E_{\pm}(\mathbf{k}) & \alpha_x - i\alpha_y \\ \alpha_x + i\alpha_y & E_0 - \alpha_z - E_{\pm}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 &= E_{\pm}^2(\mathbf{k}) - 2E_0E_{\pm}(\mathbf{k}) + E_0^2 - \alpha_x^2 - \alpha_y^2 - \alpha_z^2
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

zu

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = E_0 \pm \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2} = E_0 \pm |\alpha|, \tag{2.29}$$

wobei

$$|\alpha|^2 = \alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = |\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})|^2 \tag{2.30}$$

das Betragsquadrat des vektoriellen Rashba-Koeffizienten aus Gl.(2.17) u. (2.18) mit Koordinaten (x,y,z) darstellt. Die Energie $E_+(\mathbf{k})$ des Eigenzustands $|\Phi^+(\mathbf{k})\rangle$ liegt wegen der Betragsbildung damit stets oberhalb der Energie $E_-(\mathbf{k})$ des Eigenzustands $|\Phi^-(\mathbf{k})\rangle$. Lediglich in Punkten im \mathbb{K} -Raum, in denen $|\alpha| = 0$ gilt, sind beide Zustände degeneriert. Dies ist u. a. der Fall für die sog. TRIMs²⁷, d. h. für diejenigen Punkte im \mathbb{K} -Raum, an denen die TRS unter Einbeziehung der Symmetrie zu degenerierten Zuständen beider Spin-Orientierungen führt [146]. Wie für β -Bi/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ gezeigt werden konnte, tritt ein Rashba-artiger Effekt jedoch auch bereits auf, wenn dies lediglich durch die Symmetrie vorgegeben ist, ohne dass ein TRIM vorhanden ist [109, 145, 147].

Die Eigenzustände $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ berechnen sich dann mittels Lösung von

$$\begin{aligned}
 0 &= [\mathcal{H}_{\text{Ges}} - E_{\pm}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_0] \cdot |\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle \\
 &= \begin{pmatrix} \alpha_z \mp |\alpha| & \alpha_x - i\alpha_y \\ \alpha_x + i\alpha_y & -\alpha_z \mp |\alpha| \end{pmatrix} \cdot |\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle.
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Die beiden gekoppelten Gleichungen für die Komponenten $\Phi_x^{\pm}(\mathbf{k})$ und $\Phi_y^{\pm}(\mathbf{k})$ von $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$

$$0 = (\alpha_z \mp |\alpha|) \cdot \Phi_x^{\pm}(\mathbf{k}) + (\alpha_x - i\alpha_y) \cdot \Phi_y^{\pm}(\mathbf{k}), \tag{2.32 a}$$

$$0 = (\alpha_x + i\alpha_y) \cdot \Phi_x^{\pm}(\mathbf{k}) + (-\alpha_z \mp |\alpha|) \cdot \Phi_y^{\pm}(\mathbf{k}) \tag{2.32 b}$$

zeigen, dass die Komponenten nicht linear unabhängig voneinander sind. Daher lässt sich z. B. durch Wahl von $\Phi_y^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm 1$ die x-Komponente $\Phi_x^{\pm}(\mathbf{k})$ mittels Gl. (2.32 a) bestimmen:

$$\Phi_x^{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\alpha_x - i\alpha_y}{|\alpha| \mp \alpha_z}. \tag{2.33}$$

Die Normierung auf $\langle \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) | \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) \rangle = 1$ ergibt anschließend die Eigenzustände

$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2|\alpha|(|\alpha| \mp \alpha_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\alpha_x - i\alpha_y) \\ |\alpha| \mp \alpha_z \end{pmatrix}. \tag{2.34}$$

²⁷ Time Reversal Invariant Momenta

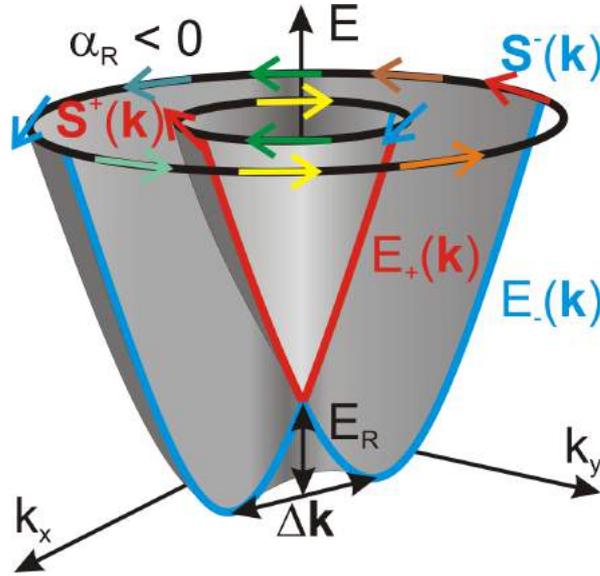


Abbildung 2.3: Vereinfachte Darstellung der Bandstruktur und Spin-Polarisation beim Rashba-Effekt: Die mit $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ Spin-polarisierten Dispersionen $E_\pm(\mathbf{k})$ eines 2DEGs sind bei gleicher Energie E im \mathbf{k} -Raum mit $|\Delta\mathbf{k}| = 4E_R/\alpha_R$ Spin-aufgespalten; nach [146].

Nun lässt sich der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ für die Eigenzustände $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ des Rashba-Effekts als Erwartungswert des Vektors der Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}$ aus Gl. (2.2) berechnen:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \boldsymbol{\sigma} | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \left[\frac{-1}{\sqrt{2|\alpha|(|\alpha| \mp \alpha_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\alpha_x + i\alpha_y) \\ |\alpha| \mp \alpha_z \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \left[\frac{-1}{\sqrt{2|\alpha|(|\alpha| \mp \alpha_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\alpha_x - i\alpha_y) \\ |\alpha| \mp \alpha_z \end{pmatrix} \right] \\
 &= \frac{\hbar}{4|\alpha|(|\alpha| \mp \alpha_z)} \begin{pmatrix} \pm(\alpha_x + i\alpha_y) \\ |\alpha| \mp \alpha_z \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)^T \cdot \begin{pmatrix} \pm(\alpha_x - i\alpha_y) \\ |\alpha| \mp \alpha_z \end{pmatrix} \\
 &= \pm \frac{\hbar}{2|\alpha|} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} \\
 &= \pm \frac{\hbar}{2|\alpha|} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}).
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ zeigt demnach stets in dieselbe (+) bzw. entgegengesetzte (-) Richtung wie der Vektor des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$. Die Zustände $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ sind demzufolge Spin-polarisierte Eigenzustände des Hamilton-Operators aus Gl. (2.27). Der Rashba-Effekt beschreibt damit die Spin-Aufspaltung eines Oberflächenzustands im \mathbf{k} -Raum. Da der Vektor des Rashba-Koeffizienten nach Gl. (2.20) antisymmetrisch in \mathbf{k} ist, ist auch der

Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ antisymmetrisch in \mathbf{k} :

$$\mathbf{S}^\pm(-\mathbf{k}) = -\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}). \quad (2.36)$$

Bei den Messungen wird in Kap. 5.2 mit

$$S = |\mathbf{S}| = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \quad (2.37)$$

die Gesamt-Spin-Polarisation verwendet, wobei S , sowie die S_i typischerweise in Prozent angegeben werden. Dabei ist der Spin-Polarisationsvektor als

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = S \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta \cdot \cos \varphi \\ \cos \theta \cdot \sin \varphi \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

definiert, unter Verwendung der Winkel θ und φ , wobei θ als Polarwinkel von der (x,y)-Ebene aus definiert wird, im Gegensatz zu den Kugelkoordinaten in Kap. D im Anhang, wo θ vom „Nordpol“ aus definiert ist, und dem Winkel φ in der (x,y)-Ebene, festgelegt durch $x = S \cos \varphi$ und $y = S \sin \varphi$.

Abb. 2.3 zeigt eine vereinfachte Darstellung der Bandstruktur und Spin-Polarisation beim Rashba-Effekt. Die mit $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ Spin-polarisierten Dispersionen $E_\pm(\mathbf{k})$ eines 2DEGs sind bei gleicher Energie E im \mathbf{k} -Raum mit $|\Delta\mathbf{k}| = 4E_R/\alpha_R$ Spin-aufgespalten.

In den folgenden Abschnitten werden einzelne Beispiele des Rashba-Effekts für verschiedene Symmetrien sowohl in erster als auch in dritter Ordnung in \mathbf{k} diskutiert. Dabei stellt die C_{3v} -Symmetrie den isotropen Fall dar, der später in Kap. 5.2.1 auf die Messergebnisse der SIC-Phase von Pb/Si(111) angewandt werden wird. Dagegen stellen die C_{1-} , C_{1h} - und C_{1v} -Symmetrie allgemeinere Fälle mit Anisotropien dar. Diese werden ebenfalls zur Beschreibung der Messergebnisse der SIC-Phase von Pb/Si(111) herangezogen, aber auch bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Phase in Kap. 5.2.2 und der DS-Phase in Kap. 5.2.3.

Isotroper Rashba-Effekt erster Ordnung

Der einfachste Fall des Rashba-Effekts ist der in einem isotropen zweidimensionalen System, wenn die Aufspaltung der Bänder nur linear von \mathbf{k} abhängt. In diesem Fall eignen sich die Polarkoordinaten

$$k_x = k \cos \varphi, \quad (2.39 \text{ a})$$

$$k_y = k \sin \varphi \quad (2.39 \text{ b})$$

mit

$$k \geq 0, \varphi \in [0, 2\pi] \quad (2.39 \text{ c})$$

zur Beschreibung. Bei C_{3v} -Symmetrie entspricht die $\overline{\Gamma\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung Wellenvektoren k_x , d. h. $\varphi = 0$. Entsprechend ist der Wellenvektor der $\overline{\Gamma\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung k_y mit $\varphi = \pi/2$.

Die Berechnung der Eigenenergien und -zustände ist in [132] im Rahmen der Gruppentheorie für die C_{3v} -Symmetrie dargestellt worden. Hier sollen lediglich die wichtigsten Erkenntnisse in einer vereinfachten Darstellung formuliert werden.

Der Hamilton-Operator \mathcal{H}_R lässt sich, wie oben beschrieben, als

$$\mathcal{H}_R = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \alpha_1^I (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) = \alpha_1^I k (\cos \varphi \sigma_y - \sin \varphi \sigma_x) \quad (2.40)$$

schreiben. Der Vektor des Rashba-Koeffizienten lautet also nach Tab. 2.3

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} = \alpha_1^I k \cdot \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Nach Gl. (2.29) lassen sich die Eigenenergien $E_{\pm}(\mathbf{k})$ zu

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = E_0 \pm |\alpha| = E_0 \pm |\alpha_1^I| k \quad (2.42)$$

berechnen. Daraus folgen nach Gl. (2.34) die normierten Eigenzustände zu

$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \frac{\text{sgn}(\alpha_1^I)}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\sin \varphi + i \cos \varphi) \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Dem Vorzeichen von α_1^I in Gl. (2.43) kommt dabei eine physikalische Bedeutung zu, wie im Weiteren noch zu zeigen ist.

Bei den ARPES-Untersuchungen in Kap. 5.2 sind insbesondere die beiden Hochsymmetrie-richtungen $\bar{\Gamma}\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ und $\bar{\Gamma}\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ von Bedeutung. In diesen Richtungen lauten die Eigenzustände

$$\bar{\Gamma}\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung:} \quad |\Phi^{\pm}(\varphi = 0)\rangle = \frac{\text{sgn}(\alpha_1^I)}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \pm i \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.44 \text{ a})$$

$$\bar{\Gamma}\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung:} \quad |\Phi^{\pm}(\varphi = \pi/2)\rangle = \frac{\text{sgn}(\alpha_1^I)}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \pm 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (2.44 \text{ b})$$

Nun lässt sich der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k})$ der beiden Eigenzustände $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ nach Gl. (2.35) berechnen (s. a. [21, 71]):

$$\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) | \boldsymbol{\sigma} | \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) \rangle = \pm \frac{\hbar}{2|\alpha|} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \pm \frac{\hbar}{2} \text{sgn}(\alpha_1^I) \cdot \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Der Spin-Polarisationsvektor ist demnach stets senkrecht zum Wellenvektor \mathbf{k} , aber ebenfalls in der (x,y)-Ebene. Ist nun $\alpha_1^I > 0$, so rotiert der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^+(\mathbf{k})$ des Eigenzustands $|\Phi^+(\mathbf{k})\rangle$ stets gegen den Uhrzeigersinn um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt und der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^-(\mathbf{k})$ des Eigenzustands $|\Phi^-(\mathbf{k})\rangle$ stets mit dem Uhrzeigersinn. Dagegen ist die Situation für $\alpha_1^I < 0$ genau umgekehrt und $\mathbf{S}^+(\mathbf{k})$ rotiert stets im Uhrzeigersinn um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt, während $\mathbf{S}^-(\mathbf{k})$ stets gegen den Uhrzeigersinn rotiert (s. Abb. 2.3 mit $\alpha_R = \alpha_1^I$). Da das Vorzeichen von α_1^I wegen der Betragsbildung in Gl. (2.29) jedoch keinen Einfluss auf die Eigenenergien $E_{\pm}(\mathbf{k})$ nimmt, kehren sich die Spin-Polarisationen beim Rashba-Effekt um, wenn sich das Vorzeichen von α_1^I ändert. Damit ist das Vorzeichen des Potentialgradienten ∇V aus Gl. (2.21) nicht nur entscheidend für das Vorzeichen von α_1^I , sondern auch für die Spin-Polarisation. Ein Beispiel für die Umkehr des Vorzeichens des Rashba-Koeffizienten im Experiment sind die QWSs von Pb auf Si(111) [111, 114]. Einen rein negativen Rashba-Koeffizienten zeigt z. B. die Au(111)-Oberfläche [148].

Anisotroper Rashba-Effekt erster Ordnung

Anisotropien des Rashba-Effekts werden durch Symmetriebrechungen hervorgerufen. In den Experimenten in dieser Arbeit wurden C_{1-} , C_{1h-} und C_{1v-} -Symmetrien gefunden (s. Kap. 5.2). Wie auch für die C_{3v-} -Symmetrie wurde die Berechnung der Eigenenergien und -zustände in [132] im Rahmen der Gruppentheorie dargestellt. Wieder sollen hier lediglich die wichtigsten Erkenntnisse in einer vereinfachten Darstellung formuliert werden. Der allgemeinste Fall des Rashba-Effekts liegt bei C_{1-} -Symmetrie vor. Die möglichen Terme des Vektors des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ sind in Tab. 2.3 aufgeführt.

Der Hamilton-Operator des Rashba-Effekts schreibt sich damit als

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_R &= \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\
 &= k_x(\alpha_1^{\text{xx}}\sigma_x + \alpha_1^{\text{xy}}\sigma_y + \alpha_1^{\text{xz}}\sigma_z) + k_y(\alpha_1^{\text{yx}}\sigma_x + \alpha_1^{\text{yy}}\sigma_y + \alpha_1^{\text{yz}}\sigma_z) \\
 &= k [\cos \varphi \cdot (\alpha_1^{\text{xx}}\sigma_x + \alpha_1^{\text{xy}}\sigma_y + \alpha_1^{\text{xz}}\sigma_z) + \sin \varphi \cdot (\alpha_1^{\text{yx}}\sigma_x + \alpha_1^{\text{yy}}\sigma_y + \alpha_1^{\text{yz}}\sigma_z)] \\
 &= k [(\alpha_1^{\text{xx}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yx}} \sin \varphi)\sigma_x + (\alpha_1^{\text{xy}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yy}} \sin \varphi)\sigma_y + (\alpha_1^{\text{xz}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yz}} \sin \varphi)\sigma_z] \\
 &= \alpha_x \sigma_x + \alpha_y \sigma_y + \alpha_z \sigma_z,
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

wobei die Polarkoordinaten aus Gl. (2.39) verwendet werden. Damit ergeben sich die Eigenenergien nach Gl. (2.29) zu

$$\begin{aligned}
 E_{\pm}(\mathbf{k}) &= E_0 \pm |\alpha| \\
 &= E_0 \pm \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2} \\
 &= E_0 \\
 &\quad \pm k \cdot \sqrt{(\alpha_1^{\text{xx}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yx}} \sin \varphi)^2 + (\alpha_1^{\text{xy}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yy}} \sin \varphi)^2 + (\alpha_1^{\text{xz}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yz}} \sin \varphi)^2} \\
 &= E_0 \pm k \cdot \alpha_1^{\text{A}}(\varphi)
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

$\alpha_1^{\text{A}}(\varphi)$ und k sind damit beide positiv.

Die normierten Eigenzustände $|\Psi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ berechnen sich mittels Gl. (2.31) u. (2.34) zu

$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2N(\varphi)}} \cdot \left(\begin{array}{c} \pm [(\alpha_1^{\text{xx}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yx}} \sin \varphi) - i(\alpha_1^{\text{xy}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yy}} \sin \varphi)] \\ \alpha_1^{\text{A}}(\varphi) \mp (\alpha_1^{\text{xz}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yz}} \sin \varphi) \end{array} \right) \tag{2.48 a}$$

mit

$$N(\varphi) = \alpha_1^{\text{A}}(\varphi) \left[\alpha_1^{\text{A}}(\varphi) \mp (\alpha_1^{\text{xz}} \cos \varphi + \alpha_1^{\text{yz}} \sin \varphi) \right]. \tag{2.48 b}$$

In k_x -Richtung ergibt sich daraus

$$|\Phi^{\pm}(\varphi = 0)\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2N(\varphi = 0)}} \cdot \left(\begin{array}{c} \pm(\alpha_1^{\text{xx}} - i\alpha_1^{\text{xy}}) \\ \sqrt{(\alpha_1^{\text{xx}})^2 + (\alpha_1^{\text{xy}})^2 + (\alpha_1^{\text{xz}})^2} \mp \alpha_1^{\text{xz}} \end{array} \right) \tag{2.49 a}$$

mit

$$N(\varphi = 0) = \sqrt{(\alpha_1^{\text{xx}})^2 + (\alpha_1^{\text{xy}})^2 + (\alpha_1^{\text{xz}})^2} \cdot \left(\sqrt{(\alpha_1^{\text{xx}})^2 + (\alpha_1^{\text{xy}})^2 + (\alpha_1^{\text{xz}})^2} \mp \alpha_1^{\text{xz}} \right), \tag{2.49 b}$$

sowie in k_y -Richtung.

$$|\Phi^\pm(\varphi = \pi/2)\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2N(\varphi = \pi/2)}} \cdot \left(\frac{\pm(\alpha_1^{yx} - i\alpha_1^{xy})}{\sqrt{(\alpha_1^{yx})^2 + (\alpha_1^{yy})^2 + (\alpha_1^{yz})^2 \mp \alpha_1^{yz}}} \right) \quad (2.50 \text{ a})$$

mit

$$N(\varphi = \pi/2) = \sqrt{(\alpha_1^{yx})^2 + (\alpha_1^{yy})^2 + (\alpha_1^{yz})^2} \cdot \left(\sqrt{(\alpha_1^{yx})^2 + (\alpha_1^{yy})^2 + (\alpha_1^{yz})^2} \mp \alpha_1^{yz} \right). \quad (2.50 \text{ b})$$

Für den Spin-Polarisationsvektor lässt sich damit

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \boldsymbol{\sigma} | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle = \pm \frac{\hbar}{2|\alpha|} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \\ &= \pm \frac{\hbar}{2\sqrt{(k_x\alpha_1^{xx} + k_y\alpha_1^{yx})^2 + (k_x\alpha_1^{xy} + k_y\alpha_1^{yy})^2 + (k_x\alpha_1^{xz} + k_y\alpha_1^{yz})^2}} \cdot \begin{pmatrix} k_x\alpha_1^{xx} + k_y\alpha_1^{yx} \\ k_x\alpha_1^{xy} + k_y\alpha_1^{yy} \\ k_x\alpha_1^{xz} + k_y\alpha_1^{yz} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.51)$$

als Ergebnis errechnen. In k_x - bzw. k_y -Richtung ist der Spin-Polarisationsvektor somit durch

$$\mathbf{S}^\pm(k_x) = \pm \frac{\hbar}{2\sqrt{(\alpha_1^{xx})^2 + (\alpha_1^{xy})^2 + (\alpha_1^{xz})^2}} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1^{xx} \\ \alpha_1^{xy} \\ \alpha_1^{xz} \end{pmatrix}, \quad (2.52 \text{ a})$$

$$\mathbf{S}^\pm(k_y) = \pm \frac{\hbar}{2\sqrt{(\alpha_1^{yx})^2 + (\alpha_1^{yy})^2 + (\alpha_1^{yz})^2}} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1^{yx} \\ \alpha_1^{yy} \\ \alpha_1^{yz} \end{pmatrix} \quad (2.52 \text{ b})$$

gegeben. Aus der mit SR-ARPES gemessenen Spin-Polarisation $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ lässt sich daher auch bei niedrigen Symmetrien auf einzelne Terme des Vektors des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ schließen, solange lediglich eine Domäne im Messbereich der Probe vorliegt. Auch kann das Vorzeichen der einzelnen Terme bestimmt werden. Auffällig ist, dass es in niedrigsymmetrischen Systemen beim linearen Rashba-Effekt auch Spin-Polarisation senkrecht zur Oberfläche ($S_z \propto (k_x\alpha_1^{xz} + k_y\alpha_1^{yz})$) geben kann. Dieses Phänomen tritt in hochsymmetrischen Systemen nicht auf (s. Abschnitt zum isotropen Rashba-Effekt ab S. 20). Der experimentelle Nachweis dieses Effekts wird in Kap. 5.2 für das Pb/Si(111)-System getätigt und diskutiert.

Für die C_{1v} - und C_{1h} -Symmetrie mit der Spiegelebene in k_x -Richtung fallen einige Terme im Vergleich zur C_1 -Symmetrie der höheren Symmetrie zum Opfer. So ist nach Tab. 2.3 für diese Symmetrien $\alpha_1^{xx} = \alpha_1^{xz} = \alpha_1^{yy} = 0$. Die obigen Gl. (2.46)-(2.52) müssen dementsprechend angepasst werden.

Ein weiteres Beispiel für den anisotropen Rashba-Effekt sind die Oberflächenzustände vizi-naler Au(111)-Oberflächen. Dabei schränkt eine höhere Stufendichte die Wellenfunktion in ein 1D-Potential ein und führt neben Umklapp-Zuständen auch zu einer modifizierten Rashba-Aufspaltung [70, 149]. Auch 1 ML Tl/Si(111)-(1 × 1) mit C_{1h} -Symmetrie am \bar{M} -Punkt [150, 151] und 1 ML Tl/Si(110)-(1 × 1) mit C_{1h} -Symmetrie am $\bar{\Gamma}$ -Punkt [152] sind Beispiele für den anisotropen Rashba-Effekt.

Anisotroper Rashba-Effekt höherer Ordnung

Abweichungen von der linearen Abhängigkeit in \mathbf{k} des Vektors des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ treten z. B. auf, wenn sich die effektive Masse m^* eines Bandes von elektronenartiger zu lochartiger Krümmung ändert. Dies ist insbesondere für halb gefüllte, metallische Bänder am Fermi-Niveau der Fall. Daher ist eine Kenntnis höherer Ordnungen von $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ in \mathbf{k} essentiell zur Bestimmung der Spin-Polarisation metallischer Oberflächen wie z. B. Pb/Si(111) oder auch anderer Strukturen, bei denen z. B. die Spin-aufgespaltenen Bänder mit weiteren Bändern hybridisieren oder weitere Effekte auftreten. Zudem können auch hierbei Anisotropien auftreten, die z. B. in stark sternförmigen oder hexagonalen Isoenergielinien resultieren. Experimentell gefundene Beispiele sind die Oberflächenzustände von 1 ML Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) [105, 153], sowie von Bi(111), Sb(111), Bi/Cu(111) und Bi/Ag(111) [131, 154] und auch die Oberflächenzustände der dreidimensionalen Topologischen Isolatoren Bi₂Se₃ [92], Bi₂Te₃ [92, 155], Bi₂Te₂Se [123, 156], Cu_{0,05}Bi₂Se₃ und (Bi_{1- δ} Sn δ)₂Te₃ [154].

Wegen der Antisymmetrie von $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ in \mathbf{k} (s. Gl. (2.20)) ist die niedrigste nichtlineare Ordnung des Rashba-Effekts eine Funktion der Ordnung k^3 . Dies führt zu einer Abweichung vom Modell des (quasi-)freien Elektronen- bzw. Lochgases. Je nach Symmetrie des Systems können einzelne Terme von $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ genau wie beim linearen Rashba-Effekt erlaubt oder verboten sein (s. Tab. 2.3 für C_{1v} -, C_{1h} - und C_{3v} -Symmetrie).

Die mathematische Beschreibung der Nichtlinearität und ihre Eigenschaften folgen direkt aus der allgemeinen Beschreibung des Rashba-Effekts durch Gl. (2.27)-(2.36). Die einzelnen Komponenten α_i , $i \in \{x, y, z\}$, von $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ werden durch Addition der jeweiligen Terme erster und dritter Ordnung in \mathbf{k} gebildet. Als allgemeinsten Fall ergibt sich so z. B. unter Verwendung der Polarkoordinaten aus Gl. (2.39)

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \left(\alpha_1^{xi} k_x + \alpha_1^{yi} k_y \right) + \left(\alpha_3^{xxxi} k_x^3 + \alpha_3^{xxyi} k_x^2 k_y + \alpha_3^{xyyi} k_x k_y^2 + \alpha_3^{yyyi} k_y^3 \right) \\ &= k_x \left(\alpha_1^{xi} + \alpha_3^{xxxi} k_x^2 \right) + \alpha_3^{xxyi} k_x^2 k_y + \alpha_3^{xyyi} k_x k_y^2 + k_y \left(\alpha_1^{yi} + \alpha_3^{yyyi} k_y^2 \right) \\ &= k \left[\cos \varphi \left(\alpha_1^{xi} + k^2 \cos^2 \varphi \alpha_3^{xxxi} \right) + \sin \varphi \left(\alpha_1^{yi} + k^2 \sin^2 \varphi \alpha_3^{yyyi} \right) \right] \\ &\quad + k^3 \left[\alpha_3^{xxyi} \cos^2 \varphi \sin \varphi + \alpha_3^{xyyi} \cos \varphi \sin^2 \varphi \right] \end{aligned} \quad (2.53)$$

mit insgesamt 18 Einzelbeiträgen zu $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ bei C_1 -Symmetrie. Die Gleichungen vereinfachen sich für die k_x - und k_y -Richtung wesentlich zu

$$k_x\text{-Richtung:} \quad \alpha_i(k_x) = \alpha_1^{xi} k_x + \alpha_3^{xxxi} k_x^3 = k_x \left(\alpha_1^{xi} + k_x^2 \alpha_3^{xxxi} \right), \quad (2.54 \text{ a})$$

$$k_y\text{-Richtung:} \quad \alpha_i(k_y) = \alpha_1^{yi} k_y + \alpha_3^{yyyi} k_y^3 = k_y \left(\alpha_1^{yi} + k_y^2 \alpha_3^{yyyi} \right). \quad (2.54 \text{ b})$$

Unbestimmt bleiben in diesen beiden Richtungen lediglich α_3^{xxyi} und α_3^{xyyi} , da sie keine Beiträge liefern.

Auf eine explizite Darstellung von \mathcal{H}_R , $E_{\pm}(\mathbf{k})$, $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ und $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ wird an dieser Stelle aufgrund der Vielzahl der Terme verzichtet. Sie sind jedoch leicht nachzurechnen. Durch Messung des Spin-Polarisationsvektors $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ bei wenigstens zwei Energien lassen sich sämtliche Komponenten α_i eines Zustands bestimmen.

Bei höheren Symmetrien entfallen wiederum einige der Terme der Komponenten von α_i , wie Tab. 2.3 zeigt. Für C_{1v} - und C_{1h} -Symmetrie verbleiben bis zur dritten Ordnung in \mathbf{k} lediglich neun von 18 Termen, während bei C_{3v} -Symmetrie nur noch drei Terme übrig bleiben. Dabei

entfällt je nach Lage der Spiegelebenen einer der Anisotropieterme, entweder $\alpha_3^{A,1}$ oder $\alpha_3^{A,2}$, die jeweils zu einer S_z -Spin-Polarisation führen (s. u.). Liegt bspw. die Spiegelebene in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung, so sind $\alpha_3^{A,2} = 0$ und $\alpha_3^{A,1} \equiv \alpha_3^A$. Damit ergibt sich der Hamilton-Operator zu

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_R &= \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\
 &= \alpha_1^I (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) + \alpha_3^I \left[(k_x^3 + k_x k_y^2) \sigma_y - (k_x^2 k_y + k_y^3) \sigma_x \right] + \alpha_3^A (-k_y^3 + 3k_y k_x^2) \sigma_z \\
 &= - \left[\alpha_1^I k_y + \alpha_3^I (k_x^2 k_y + k_y^3) \right] \sigma_x + \left[\alpha_1^I k_x + \alpha_3^I (k_x^3 + k_x k_y^2) \right] \sigma_y + \alpha_3^A (-k_y^3 + 3k_y k_x^2) \sigma_z \\
 &= \left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right) k \cdot (-\sin \varphi \sigma_x + \cos \varphi \sigma_y) + \alpha_3^A k^3 \sin(3\varphi) \sigma_z \\
 &= \begin{pmatrix} -k \sin \varphi \left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right) \\ k \cos \varphi \left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right) \\ k^3 \sin(3\varphi) \alpha_3^A \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{\sigma},
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

womit sich die Energieeigenwerte zu

$$\begin{aligned}
 E_{\pm}(\mathbf{k}) &= E_0 \pm |\alpha| \\
 &= E_0 \pm \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2} \\
 &= E_0 \pm k \sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)}
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

bestimmen lassen. Die Eigenzustände des Hamilton-Operators lauten

$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N(\varphi)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm \left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right) e^{i(\pi/2 - \varphi)} \\ -\sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)} \pm \alpha_3^A k^2 \sin(3\varphi) \end{pmatrix}, \tag{2.57 a}$$

mit

$$\begin{aligned}
 N(\varphi) &= \sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)} \times \\
 &\quad \left(\sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)} \mp \alpha_3^A k^2 \sin(3\varphi) \right).
 \end{aligned} \tag{2.57 b}$$

In den beiden Hauptsymmetrierichtungen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion $\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ (k_x -Richtung) und $\overline{\Gamma M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ (k_y -Richtung) vereinfachen sich die Gleichungen der Eigenzustände zu

$$\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung: } |\Phi^{\pm}(\varphi = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \pm i \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{2.58 a}$$

$$\overline{\Gamma M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung: } |\Phi^{\pm}(\varphi = \pi/2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \cdot \begin{pmatrix} \pm \left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2 \right) \\ \pm \alpha_3^A k_y^2 - \sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k_y^4} \end{pmatrix}, \tag{2.58 b}$$

mit

$$N = \sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k_y^4} \cdot \left(\sqrt{\left(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2 \right)^2 + \left(\alpha_3^A \right)^2 k_y^4} \mp \alpha_3^A k_y^2 \right). \tag{2.59}$$

Der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ lässt sich somit als

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \boldsymbol{\sigma} | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle = \pm \frac{\hbar}{2|\alpha|} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \\ &= \pm \frac{\hbar}{2\sqrt{(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2)^2 + (\alpha_3^A)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)}} \cdot \begin{pmatrix} -\sin \varphi (\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2) \\ \cos \varphi (\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2) \\ \sin(3\varphi) \alpha_3^A k^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.60)$$

schreiben. Es ist leicht ersichtlich, dass neben den S_x - und S_y -Komponenten auch eine endliche S_z -Komponente vorliegen kann, wenn $\alpha_3^A \neq 0$ ist. In den beiden Hauptsymmetrierichtungen $\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ und $\overline{\Gamma M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ ergibt sich der Spin-Polarisationsvektor zu

$$\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung: } \mathbf{S}^\pm(k_x > 0) = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \text{sgn}(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_x^2) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.61 \text{ a})$$

$$\overline{\Gamma M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}\text{-Richtung: } \mathbf{S}^\pm(k_y > 0) = \mp \frac{\hbar}{2\sqrt{(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2)^2 + (\alpha_3^A)^2 k_y^4}} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1^I + \alpha_3^I k_y^2 \\ 0 \\ \alpha_3^A k_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.61 \text{ b})$$

Wie leicht zu sehen ist, können damit wiederum negative Terme im Vektor des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ zu einer umgekehrten Textur der Spin-Polarisation der Eigenzustände $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ führen.

Abschätzung der Größenordnung des Rashba-Effekts

Im Experimententeil dieser Arbeit wird der Rashba-Effekt in Monolagen-Filmen von Pb auf Si(111) und Si(557) untersucht (s. Kap. 5 u. 6). Ohne an dieser Stelle bereits auf Details eingehen zu wollen, sollen nun die Größenordnungen der gemessenen Effekte zur besseren Einordnung der oben erwähnten Quellen des Rashba-Effekts dargelegt werden.

Die Pb/Si(111)- und Pb/Si(557)-Strukturen bilden 2DEGs bzw. Quasi-1DEGs an der metallisierten Oberfläche von Silizium aus. Die Bindungen zwischen den Pb- und Si-Atomen sind kovalent und zwischen den Pb-Atomen metallisch. Die Wellenfunktion ist daher an der Oberfläche lokalisiert und erzeugt sp -hybridisierte Zustände mit großen Anteilen der $6p$ -Orbitale von Pb [45, 157, 158]. Am Fermi-Niveau beträgt die Spin-Aufspaltung des elektronenartigen, metallischen Oberflächenzustands der SIC-Phase von Pb/Si(111) $\Delta k \approx 0,04 \text{ \AA}^{-1}$ bei einer effektiven Masse von $m^* = 0,42 - 0,77 m_e$ (in parabolischer Näherung)).

In einer ersten Näherung können die Daten der SIC-Phase von Pb/Si(111) mit Gl. (2.22) unter Verwendung anisotroper effektiver Massen beschrieben werden, sodass man

$$\alpha_R = \frac{\hbar^2 \Delta k}{2m^*} \quad (2.62)$$

als Rashba-Koeffizienten mit Werten von $\alpha_R \approx 0,79 - 1,38 \text{ eV \AA}$ erhält. Nach Gl. (2.21) kann α_R aber auch mittels des Erwartungswertes des Potentialgradienten als

$$\alpha_R = \frac{\hbar^2}{4m^{*2}c^2} \cdot \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle \quad (2.63)$$

ausgedrückt werden. Damit erhält man $\langle \partial_z V \rangle \approx 6,53 - 12,56 \cdot 10^{14} \text{ eV/m}$.

Auf der anderen Seite ist der Erwartungswert der Elektronen im Zentralpotential eines Atomkerns nach Gl. (2.6) mit

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2Z^2}{n^3(2\ell + 1)a_B^2} \quad (2.64)$$

und der Verwendung effektiver Werte für Z und n durch

$$\langle |\nabla V_{\text{Nuc}}(\mathbf{r})| \rangle = \left\langle \frac{Z_{\text{eff}} e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right\rangle = \frac{Z_{\text{eff}}^3 e^2}{2\pi\epsilon_0 a_B^2 n_{\text{eff}}^3 (2\ell + 1)} \quad (2.65)$$

bestimmt. Für Pb-Atome gilt diese Näherung nur grob aufgrund der hohen Kernladungszahl $Z = 82$ und der Nichtberücksichtigung von relativistischen Effekten. Auch wird in der Zentralpotentialnäherung von einem freien, neutralen Atom und nicht von einem (metallischen) Festkörper ausgegangen. Dennoch kann hiermit eine Abschätzung der Größenordnung vorgenommen werden. So ist für Pb-Atome die Abschirmung $S = 70$ und damit $Z_{\text{eff}} = 12$, sowie $n_{\text{eff}} \approx 4,2$ [82, 83]. Besser verwendet man jedoch den Ansatz, die $6s$ - und $6p$ -Elektronen einzeln zu betrachten. Für das $6s$ -Orbital ist $Z_{\text{eff}} = 14,1$ und für das $6p$ -Orbital gilt $Z_{\text{eff}} = 12,39$. Nach Einsetzen in Gl. (2.65) und Summation über die vier Elektronen der $6s$ - und $6p$ -Orbitale erhält man einen Gesamtpotentialgradienten $\langle \nabla V_{\text{Nuc}}^{6s^2+6p^2} \rangle = 9,54 \cdot 10^{13} \text{ eV/m}$. Dieser Wert liegt erstaunlich nahe an dem Wert des Potentialgradienten, der für den Rashba-Effekt berechnet wurde. Folglich kann als Quelle für den Rashba-Effekt in Pb/Si(111) und Pb/Si(557) die atomare SOI der Pb-Atome angenommen werden, da alle weiteren Effekte zu deutlich kleineren Potentialgradienten führen, wie im Folgenden gezeigt wird.

Als weiterer Effekt lassen sich gebundene, lochartige QWSs in den oberflächennahen Bereichen des Si-*Bulk* beobachten (s. Kap. 5.2.4). Sie werden durch die Pb-induzierte Schottky-Barriere hervorgerufen. Der Potentialgradient in dieser Raumladungszone lässt sich durch ein Dreieckspotential mit einer elektrischen Feldstärke von $|\mathbf{E}| \approx 10^4 \text{ kV/cm}$ beschreiben (Vgl. Kap. 2.7). Dies entspricht einem Potentialgradienten von $\partial_z V \approx 10^9 \text{ eV/m}$, der somit fünf Größenordnungen kleiner ist als der Potentialgradient der Pb-Atomkerne. Mittels Gl. (2.62) u. (2.63) erhält man die Spin-Aufspaltung Δk und die sog. Rashba-Energie E_R zu

$$\begin{aligned} \Delta k &= \frac{1}{2m^*c^2} \cdot \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle = \frac{2m^*\alpha_R}{\hbar^2}, \\ E_R &= \frac{\hbar^2 \Delta k^2}{8m^*} = \frac{\hbar^2}{32m^{*3}c^4} \cdot \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle^2 = \frac{m^*\alpha_R^2}{2\hbar^2} = \frac{\alpha_R \Delta k}{4} \end{aligned} \quad (2.66)$$

Mit effektiven Lochmassen von $|m^*| = 0,23 - 2,38 m_e$ in der (x,y)-Ebene ergibt sich damit $\Delta k = 4,1 - 42,5 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-1}$, $E_R = 8,6 \cdot 10^{-16} - 7,5 \cdot 10^{-13} \text{ eV}$ und ein Rashba-Parameter von $\alpha_R = 6,6 \cdot 10^{-8} - 7 \cdot 10^{-6} \text{ eV \AA}$. Der Rashba-Effekt in der Raumladungszone ist also äußerst gering und konnte in den ARPES-Messungen in dieser Arbeit nicht aufgelöst werden, da die instrumentelle Auflösung der COPHEE²⁸-Endstation mit $\Delta E = \pm 12,5 \text{ meV}$ und $\Delta k_{\pm} \approx \pm 0,012 \text{ \AA}^{-1}$ mehrere Größenordnungen schlechter ist (s. Kap. 3.3).

Einen in der Theorie größeren Effekt verursachen die Si-Atomkerne, wie man in analoger Rechnung zu den Pb-Atomkernen zeigen kann. Die Abschirmung eines Kerns von Si lässt

²⁸ Complete PHotoEmission Experiment

sich nach [83, 159] mit $n_{\text{eff}} = n = 3$, $Z_{\text{eff}}^{3s} \approx 9,1$ und $Z_{\text{eff}}^{3p} \approx 9,7$ beschreiben. Der Gesamtpotentialgradient $\langle \nabla V_{\text{Nuc}}^{3s^2+3p^2} \rangle = 1,1 \cdot 10^{13} \text{ eV/m}$ führt dann zu einem theoretischen Rashba-Koeffizienten von $\alpha_{\text{R}} = 41 \text{ meV \AA}$, einer Spin-Aufspaltung von $\Delta k = 1,07 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ und einer Rashba-Energie von $E_{\text{R}} = 1,1 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$. Jedoch bilden die Si-Atome ein isotropes, dreidimensionales Gitter im Festkörper (im Gegensatz zu der quasi-zweidimensionalen Struktur der Pb-Atome auf Si(111) und Si(557)), sodass eigentlich nicht mehr von einem Rashba-Effekt gesprochen werden kann. Auch ist der Effekt zu klein, als dass er in den ARPES-Messungen hätte aufgelöst werden können.

2.2.2. Rashba-Zeeman-Effekt

Historisch gesehen betrachtet man beim Zeeman-Effekt Atome in einem externen Magnetfeld. Jedoch lässt sich das Konzept auch auf Festkörper und mit internen oder effektiven Pseudo-Magnetfeldern, z. B. $\mathbf{B}(\mathbf{k})$, übertragen. Im Folgenden soll daher keine Unterscheidung zwischen diesen Effekten gemacht werden und sie in ihrer Gesamtheit als Zeeman-Effekt bezeichnet werden.

Der Zeeman-Effekt beschreibt die energetische Aufspaltung eines Spin-entarteten Zustands in einem Magnetfeld durch Spin-Polarisation. Mathematisch lässt sich dieser Effekt mit dem Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_Z = \frac{g^*}{2} \mu_{\text{B}} \mu_{\text{r}} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.67)$$

erfassen, wobei μ_{r} die relative Permeabilität des Materials und g^* sein effektiver g -Faktor sind²⁹. Die Aufspaltung der Spin-polarisierten Zustände durch den Zeeman-Effekt beträgt

$$\Delta E = g^* \mu_{\text{B}} \mu_{\text{r}} B. \quad (2.68)$$

Beispiele für Bandstrukturen von Oberflächenzuständen, die mittels des Zeeman-Effekts beschrieben werden können und experimentell belegt sind, sind 1 ML Tl/Si(111)-(1 × 1) und 1 ML Tl/Ge(111)-(1 × 1) [33, 110, 151, 160–165], sowie das 2DEG an der (001)-Oberfläche von SrTiO₃ [31, 92]. Bislang nur theoretisch vorhergesagt ist der Effekt für 1 ML Pb/Si(111)-(1 × 1) und 1 ML Bi/Si(111)-(1 × 1) [166]. Auch im *Bulk* kann der Zeeman-Effekt auftreten [32]. Eine weitere experimentelle Realisierung des Rashba-Zeeman-Effekt könnte auch der Oberflächenzustand von 1 ML Tl/Si(110)-(1 × 1) darstellen, der zudem aufgrund der Symmetrie der Rekonstruktion im K-Raum lediglich C_{1h} -Symmetrie aufweist [152]. Genauere Analysen zur Bestätigung dieser Hypothese stehen noch aus.

Der Vergleich mit dem Hamilton-Operator des Rashba-Effekts in Gl. (2.17) zeigt eine große Analogie. Die Rolle des Vektors des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ übernimmt beim Zeeman-Effekt das Magnetfeld \mathbf{B} . Außerdem werden sowohl $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ als auch \mathbf{B} mit dem Vektor der Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}$ multipliziert. D. h., dass beide Effekte an den Spin der Ladungsträger koppeln. Daher können Rashba- und Zeeman-Effekt nicht separat voneinander behandelt werden, wenn beide innerhalb eines Systems auftreten. Im Folgenden soll deshalb kurz dargestellt werden, welche physikalischen Konsequenzen sich aus diesem *Rashba-Zeeman-Effekt* ergeben. Eine derart allgemeine Beschreibung ist aus der Literatur nicht bekannt. Lediglich Spezialfälle wie der isotrope Rashba-Effekt erster Ordnung zusammen mit einem externen *in-plane*

²⁹ Diamagnetismus für $0 \leq \mu_{\text{r}} < 1$, Paramagnetismus für $\mu_{\text{r}} > 1$, Ferromagnetismus für $\mu_{\text{r}} \gg 1$. In Supraleitern 1. Art ist $\mu_{\text{r}} = 0$. $\mu_{\text{r,Si}} = 0,99999974$, $\mu_{\text{r,Pb}} \approx 0,999$. g^* ist i. A. richtungsabhängig und misst das Verhältnis des magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}$ zum Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} [72, 75].

Magnetfeld [18, 167] oder der Ansatz für 1 ML Tl/Si(111)-(1×1) und 1 ML Tl/Ge(111)-(1×1) [160] behandeln beide Effekte zusammen. Für Quantendrähte wird in der Literatur darüber hinaus der Rashba-Effekt mit und ohne Magnetfeld diskutiert, was im Fall mit Magnetfeld zu einem anisotropen Rashba-Zeeman-Effekt führt, der sog. *spiralen Luttinger-Flüssigkeit* [168–172].

Sämtliche Berechnungen lassen sich in der gleichen Form wie für den Rashba-Effekt darstellen. Der Hamilton-Operator des Rashba-Zeeman-Effekts schreibt sich symmetrieunabhängig als

$$\mathcal{H}_{\text{RZ}} = \mathcal{H}_{\text{R}} + \mathcal{H}_{\text{Z}} = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{g^*}{2} \mu_{\text{B}} \mu_{\text{T}} \mathbf{B}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \left[\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) + \frac{g^*}{2} \mu_{\text{B}} \mu_{\text{T}} \mathbf{B}(\mathbf{k}) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.69)$$

mit

$$\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \gamma_x \\ \gamma_y \\ \gamma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} + \frac{g^*}{2} \mu_{\text{B}} \mu_{\text{T}} \cdot \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

und

$$|\boldsymbol{\gamma}|^2 = \gamma_x^2 + \gamma_y^2 + \gamma_z^2. \quad (2.71)$$

Damit ergeben sich die Eigenenergien $E_{\pm}(\mathbf{k})$ mittels Lösung der Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \det [\mathcal{H}_{\text{Ges}} - E_{\pm}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\sigma}_0] \\ &= \det \begin{pmatrix} E_0 + \gamma_z - E_{\pm}(\mathbf{k}) & \gamma_x - i\gamma_y \\ \gamma_x + i\gamma_y & E_0 - \gamma_z - E_{\pm}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\ &= E_{\pm}^2(\mathbf{k}) - 2E_0 E_{\pm}(\mathbf{k}) + E_0^2 - |\boldsymbol{\gamma}|^2 \end{aligned} \quad (2.72)$$

zu

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = E_0 \pm |\boldsymbol{\gamma}|, \quad (2.73)$$

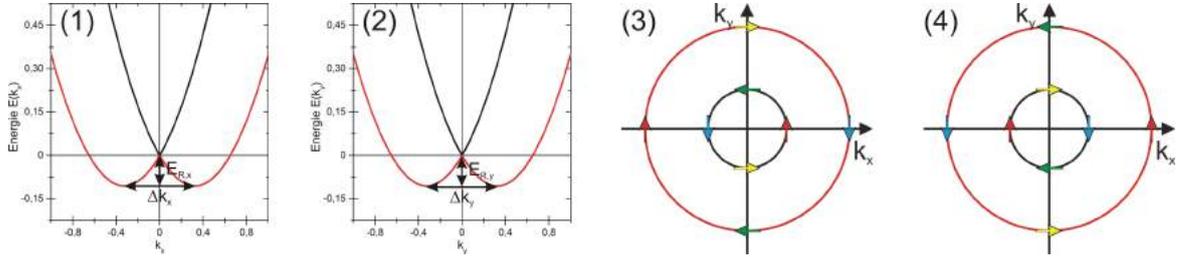
wobei die Spin-unabhängigen Teile des Hamilton-Operators des Gesamtsystems \mathcal{H}_{Ges} zu Eigenenergien E_0 zusammengefasst werden.

Die Berechnung der Eigenzustände $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ durch

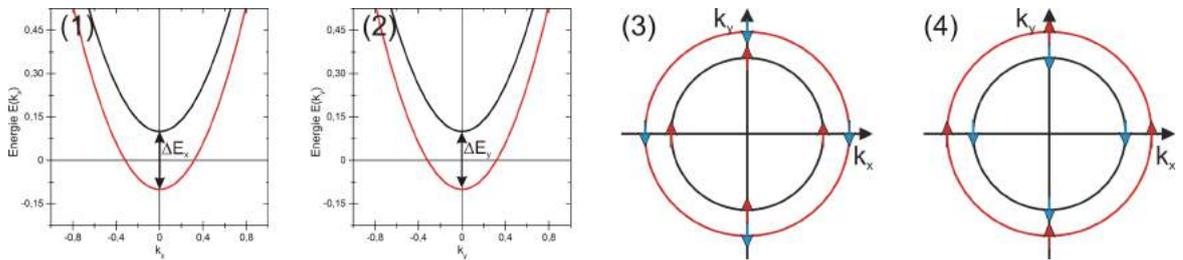
$$\begin{aligned} 0 &= [\mathcal{H}_{\text{Ges}} - E_{\pm}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\sigma}_0] \cdot |\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle \\ &= \begin{pmatrix} \gamma_z \mp |\boldsymbol{\gamma}| & \gamma_x - i\gamma_y \\ \gamma_x + i\gamma_y & -\gamma_z \mp |\boldsymbol{\gamma}| \end{pmatrix} \cdot |\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle \end{aligned} \quad (2.74)$$

inklusive Normierung auf $\langle \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) | \Phi^{\pm}(\mathbf{k}) \rangle = 1$ ergibt

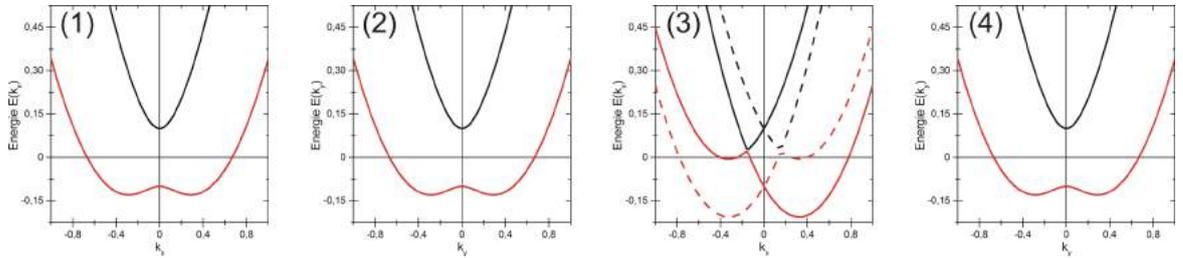
$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2|\boldsymbol{\gamma}|(|\boldsymbol{\gamma}| \mp \gamma_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\gamma_x - i\gamma_y) \\ |\boldsymbol{\gamma}| \mp \gamma_z \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$



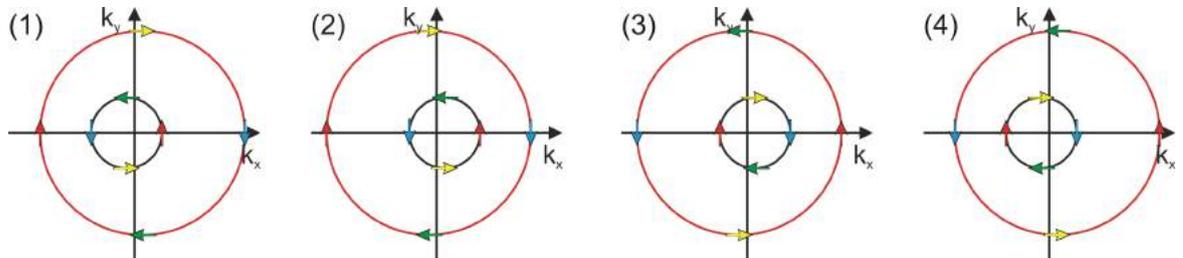
(a) Rashba-Effekt: $|\alpha| = 0,65, B = 0$; Dispersionen $E(k_{x,y})$ in (1,2), Isoenergielinien mit Spin-Polarisation und $E > 0$ für $\alpha > 0$ (3) und $\alpha < 0$ (4).



(b) Zeeman-Effekt: $\alpha = 0, B = 0,1$; Dispersionen $E(k_{x,y})$ in (1,2) gültig für beliebige Richtung von \mathbf{B} , Isoenergielinien mit Spin-Polarisation und $E > 0,15$ für $\mathbf{B} = +B\mathbf{e}_y$ (3) und $\mathbf{B} = -B\mathbf{e}_y$ (4).



(c) Rashba-Zeeman-Effekt: Dispersionen mit $\alpha = 0,65, B = 0,1$; Panels (1,2) $\mathbf{B} = \pm B\mathbf{e}_z$, Panels (3,4) $\mathbf{B} = \pm B\mathbf{e}_y$; durchgezogene Linie in (3) für $\mathbf{B} = +B\mathbf{e}_y$, gestrichelte Linie für $\mathbf{B} = -B\mathbf{e}_y$.



(d) Rashba-Zeeman-Effekt: Isoenergielinien der Dispersionen (3,4) in (c) mit Spin-Polarisation und $|\alpha| = 0,65, |B| = 0,1, E > 0,15$ für $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_y$; Parameter von links nach rechts: (1) $\alpha, B > 0$; (2) $\alpha > 0, B < 0, k\alpha + B > 0$; (3) $\alpha < 0, B > 0, k\alpha + B < 0$; (4) $\alpha, B < 0$. Die Kreise sind nicht mehr in $\mathbf{k} = (0,0)$ zentriert, sondern in $\pm k_x$ -Richtung verschoben.

Abbildung 2.4: Dispersionen, Isoenergielinien und Spin-Polarisationen beim Rashba-Zeeman-Effekt: Berechnung mit dimensionslosen Parametern nach Gl. (2.77).

Damit ist der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ des Zustands $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ mit Energie $E_\pm(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \boldsymbol{\sigma} | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cdot \left[\frac{-1}{\sqrt{2|\gamma|(|\gamma| \mp \gamma_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\gamma_x + i\gamma_y) \\ |\gamma| \mp \gamma_z \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \left[\frac{-1}{\sqrt{2|\gamma|(|\gamma| \mp \gamma_z)}} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\gamma_x - i\gamma_y) \\ |\gamma| \mp \gamma_z \end{pmatrix} \right] \\
 &= \frac{\hbar}{4|\gamma|(|\gamma| \mp \gamma_z)} \cdot \begin{pmatrix} \pm(\gamma_x + i\gamma_y) \\ |\gamma| \mp \gamma_z \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)^T \cdot \begin{pmatrix} \pm(\gamma_x - i\gamma_y) \\ |\gamma| \mp \gamma_z \end{pmatrix} \\
 &= \pm \frac{\hbar}{2|\gamma|} \cdot \begin{pmatrix} \gamma_x \\ \gamma_y \\ \gamma_z \end{pmatrix} \\
 &= \pm \frac{\hbar}{2|\gamma|} \cdot \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}).
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

Dies ist mathematisch die gleiche Lösungsform wie beim Rashba-Effekt in Gl. (2.35). Damit ist auch die Analogie des Rashba- und Zeeman-Effekts gezeigt.

Eine Zusammenfassung der Dispersionen, Isoenergielinien (Fermi-Flächen) und Spin-Polarisationen von Rashba-, Zeeman- und Rashba-Zeeman-Effekt ist in Abb. 2.4 gezeigt. Für die Darstellung wurde der Hamilton-Operator $\mathcal{H}_{\text{Ges}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{RZ}}$ mit den dimensionslosen Parametern α , $k_{x,y}$ und \mathbf{B} verwendet ($\hbar = \mu_B = \mu_r = 1, m^* = 0,5, g^* = 2$) und für den Rashba-Term isotropes Verhalten erster Ordnung angenommen:

$$\mathcal{H}_{\text{Ges}} = k_x^2 + k_y^2 + \alpha (-k_y, k_x, 0)^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{2.77}$$

Ähnlichkeiten zum Rashba-Zeeman-Effekt zeigen sich bei magnetischen Metalloberflächen mit Rashba-Effekt. Die Zeeman-aufgespaltene Bandstruktur der Oberflächenzustände in der Domäne einer Magnetisierungsrichtung ist dann mit ihrem energetischen Minimum von $\mathbf{k} = 0$ zu endlichen Werten \mathbf{k}_0 verschoben. Das energetische Minimum der Bandstruktur der Domäne mit umgekehrter Magnetisierungsrichtung ist entsprechend nach $-\mathbf{k}_0$ verschoben [21, 173, 174].

2.2.3. Einfluss von Rotations- und Spiegeldomänen, sowie inhomogenen Domänenstrukturen auf die Spin-Polarisation in SR-ARPES-Messungen

Bislang wurde davon ausgegangen, dass lediglich Systeme mit einer einzigen, homogenen Domäne auftreten. Rotations- und Spiegeldomänen, sowie inhomogene Domänenstrukturen wie die der SIC-Phase von Pb/Si(111) beeinflussen jedoch die Messsignale in ARPES-Messungen, wenn mehrere von ihnen innerhalb des Messbereichs auf der Probe vorkommen. Im Fall einer inhomogenen Domänenstruktur erzeugt die Struktur selbst eine veränderte Spin-Polarisation im Vergleich zur Spin-Polarisation einer homogenen Domäne. Es können im Extremfall sogar alle drei Effekte zusammen auftreten, so z. B. bei der SIC-Phase von Pb/Si(111) (s. Kap. 5.2.1).

Im K-Raum überlagern sich die Photoelektronenintensitäten I_i der Domänen, da sich die Einheitszellen um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt herum überlagern (Vgl. Abb. 2.2(f)-(h)). In den im Rahmen

dieser Arbeit betrachteten Systemen ist dies bei den Raumgruppen $c1m1$, $p1g1$ und $p1$ der Fall, was zu einer Quasi-Sechszähligkeit der jeweiligen mit ARPES gemessenen elektronischen Struktur führt.

Rotationsdomänen

Die Bandstrukturen $E_i(\mathbf{k})$ der Zustände unterschiedlicher Rotationsdomänen beeinflussen sich nicht gegenseitig, abgesehen von *Confinement*-Effekten und an den Domänenwänden. Somit kann die entsprechende Transformation T_{ij} von Domäne i zu Domäne j (hier eine Drehung D des Koordinatensystems) direkt auf \mathbf{k} angewandt werden, womit für die Energie eines Zustands

$$E_j(\mathbf{k}) = E_i(T_{ij}(\mathbf{k})) \quad (2.78)$$

gilt. Entsprechend ist die Spin-Polarisation durch

$$\mathbf{S}_j(\mathbf{k}) = T_{ij}^{-1}(\mathbf{S}_i(T_{ij}(\mathbf{k}))) \quad (2.79)$$

gegeben. Überlagern sich nun die Photoelektronenintensitäten I_i mehrerer Domänen im Punkt \mathbf{k} aus Zuständen mit gleicher Energie E , lässt sich die Gesamt-Spin-Polarisation als Funktion der Spin-Polarisationen der einzelnen Domänen in \mathbf{k} berechnen. Hierbei ist zu beachten, dass \mathbf{k} gegebenenfalls zuerst mittels eines reziproken Gittervektors \mathbf{G}_i in die 1. SBZ der Rekonstruktion zum Punkt

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k} - \mathbf{G}_i \quad (2.80)$$

verschoben werden sollte, um die Spin-Polarisation korrekt zu berechnen. Der Grund hierfür ist, dass im Modell des Rashba-Zeeman-Effekts keine höheren SBZs berücksichtigt sind und damit der Wert von \mathbf{k} aus einer höheren SBZ falsch interpretiert wird. Dies gilt natürlich nur unter den Annahmen $\mathbf{S}_i(\mathbf{k}) = \mathbf{S}_i(\mathbf{k}_i)$ und $S_i(\mathbf{k}) = S_i(\mathbf{k}_i)$.

Die Spin-Polarisation $\mathbf{S}_i(\mathbf{k}_i)$ einer einzelnen Domäne i mit Rashba-Zeeman-Effekt ist durch Gl. (2.76) gegeben. Die Erweiterung auf n Domänen ergibt für die Messung der Spin-Polarisation in \mathbf{k} die Gesamt-Spin-Polarisation $\mathbf{S}_{\text{Ges}}(\mathbf{k})$ durch Gewichtung mit den gemessenen Photoelektronenintensitäten I_i (z. B. mittels SPA-LEED), der Spin-Polarisation $\mathbf{S}_i(\mathbf{k})$ des jeweiligen Zustands in der Messung (maximal ergibt sich $S_i = 1$ für alle Domänen und Zustände bei vollständiger Spin-Polarisation) und mit Normierung:

$$\mathbf{S}_{\text{Ges}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n I_i \cdot \mathbf{S}_i(\mathbf{k}) \cdot S_i(\mathbf{k})}{\left| \sum_{j=1}^n I_j \cdot \mathbf{S}_j(\mathbf{k}) \right|} = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n I_i \cdot T_{ni}^{-1}(\mathbf{S}_n(T_{ni}(\mathbf{k}_i))) \cdot S_n(T_{ni}(\mathbf{k}_i))}{\left| \sum_{j=1}^n I_j \cdot T_{nj}^{-1}(\mathbf{S}_n(T_{nj}(\mathbf{k}_j))) \right|}. \quad (2.81)$$

Das Koordinatensystem ist dabei so gewählt, dass $T_{nn}(\mathbf{k}) = \mathbf{k}$ gilt. Ebenso gilt $T_{nn}(\mathbf{k}_n) = \mathbf{k}_n$.

In Systemen aus den Raumgruppen $c1m1$, $p1g1$ und $p1$ mit jeweils drei Rotationsdomänen (plus jeweils einer Spiegeldomäne pro Rotationsdomäne in Raumgruppe $p1$; hier nicht mit berechnet) sind die Transformationen T_{ij} Drehungen D in der (k_x, k_y) -Ebene. Die Transformationen T_{31} und T_{32} entsprechen dabei den Drehungen um -240° bzw. -120° und T_{33} der

Identität:

$$T_{31} = D(-240^\circ) = \begin{pmatrix} \cos(-240^\circ) & -\sin(-240^\circ) & 0 \\ \sin(-240^\circ) & \cos(-240^\circ) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ +\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.82 \text{ a})$$

$$T_{32} = D(-120^\circ) = \begin{pmatrix} \cos(-120^\circ) & -\sin(-120^\circ) & 0 \\ \sin(-120^\circ) & \cos(-120^\circ) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & +\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.82 \text{ b})$$

$$T_{33} = \mathbb{1}_{3 \times 3}. \quad (2.82 \text{ c})$$

Die Rücktransformationen T_{31}^{-1} , T_{32}^{-1} und T_{33}^{-1} sind demnach Drehungen um $+240^\circ$ ($= T_{32}$), $+120^\circ$ ($= T_{31}$) bzw. wiederum die Identität.

Damit resultiert für die einzelnen Spin-Polarisationsvektoren:

$$\mathbf{S}_1(\mathbf{k}) = T_{31}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{31}(\mathbf{k}_1))) = \begin{pmatrix} -1/2 & +\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{S}_3 \begin{pmatrix} -1/2 k_{1,x} - \sqrt{3}/2 k_{1,y} \\ +\sqrt{3}/2 k_{1,x} - 1/2 k_{1,y} \\ k_{1,z} \end{pmatrix}, \quad (2.83 \text{ a})$$

$$\mathbf{S}_2(\mathbf{k}) = T_{32}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{32}(\mathbf{k}_2))) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ +\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{S}_3 \begin{pmatrix} -1/2 k_{2,x} + \sqrt{3}/2 k_{2,y} \\ -\sqrt{3}/2 k_{2,x} - 1/2 k_{2,y} \\ k_{2,z} \end{pmatrix}, \quad (2.83 \text{ b})$$

$$\mathbf{S}_3(\mathbf{k}) = T_{33}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{33}(\mathbf{k}_3))) = \mathbf{S}_3(\mathbf{k}_3). \quad (2.83 \text{ c})$$

Die Transformationen T_{31} , T_{32} und T_{33} wirken demnach auf die Koordinate von \mathbf{k}_i , während die Transformationen T_{31}^{-1} , T_{32}^{-1} und T_{33}^{-1} auf die Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}_i(\mathbf{k}_i)$ an den gedrehten Koordinaten wirken und damit Rücktransformationen in das ursprüngliche Koordinatensystem darstellen.

Für die Gesamt-Spin-Polarisation aus Gl. (2.81) gilt somit bei drei Rotationsdomänen

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{Ges}}(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{I_1 \cdot \mathbf{S}_1(\mathbf{k}) \cdot S_1(\mathbf{k}) + I_2 \cdot \mathbf{S}_2(\mathbf{k}) \cdot S_2(\mathbf{k}) + I_3 \cdot \mathbf{S}_3(\mathbf{k}) \cdot S_3(\mathbf{k})}{|I_1 \cdot \mathbf{S}_1(\mathbf{k}) + I_2 \cdot \mathbf{S}_2(\mathbf{k}) + I_3 \cdot \mathbf{S}_3(\mathbf{k})|} \\ &= \frac{\hbar}{2} \cdot \left[I_1 \cdot T_{31}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{31}(\mathbf{k}_1))) \cdot S_3(T_{31}(\mathbf{k}_1)) + I_2 \cdot T_{32}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{32}(\mathbf{k}_2))) \cdot S_2(T_{32}(\mathbf{k}_2)) \right. \\ &\quad \left. + I_3 \cdot T_{33}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{33}(\mathbf{k}_3))) \cdot S_3(T_{33}(\mathbf{k}_3)) \right] \\ &\quad \cdot \left| I_1 \cdot T_{31}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{31}(\mathbf{k}_1))) + I_2 \cdot T_{32}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{32}(\mathbf{k}_2))) + I_3 \cdot T_{33}^{-1}(\mathbf{S}_3(T_{33}(\mathbf{k}_3))) \right|^{-1}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

In diese Relation lassen sich die transformierten Spin-Polarisationsvektoren aus Gl. (2.83) einsetzen. Der Beitrag zur Gesamt-Spin-Polarisation der einzelnen Domänen lässt sich auf diese Weise mathematisch auf die Spin-Polarisation einer einzelnen Domäne (hier Domäne 3) an drei verschiedenen Punkten im \mathbb{K} -Raum zurückführen.

Spiegeldomänen

In Systemen mit C_1 -Symmetrie können neben Rotations- auch Spiegeldomänen existieren (s. Kap. 2.1). Den Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}_{\text{SD}}(\mathbf{k})$ einer solchen Spiegeldomäne erhält man durch Spiegelung der Spin-Wellenfunktion $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ an der Spiegelachse (z. B. an $\mathbf{k} = (k_x, 0)$,

sodass $\mathbf{k} = (k_x, k_y) \leftrightarrow \mathbf{k}' = (k_x, -k_y)$. Im Endeffekt erhält man beim Rashba-Zeeman-Effekt $\mathbf{S}_{\text{SD}}(\mathbf{k})$ zu

$$\mathbf{S}_{\text{SD}}(\mathbf{k}) = \pm \frac{\hbar}{2|\gamma_{\text{SD}}|} \cdot \gamma_{\text{SD}}(\mathbf{k}), \quad (2.85)$$

wobei $\gamma_{\text{SD}}(\mathbf{k})$ der gespiegelte Vektor von $\gamma(\mathbf{k})$ ist:

$$\gamma_{\text{SD}}(\mathbf{k}) = \gamma_{\text{SD}}(k_x, k_y) = \gamma(k_x, -k_y). \quad (2.86)$$

Inhomogene Domänenstrukturen

Einen dritten Spezialfall stellen inhomogene Domänenstrukturen dar. Als solche werden Strukturen verstanden, die aus mehreren unterschiedlichen Einheitszellen zusammengesetzt sind, wie z. B. die Superzellen der SIC-, DS- und HIC-Phasen von Pb/Si(111) (s. Kap. 4.2.3-4.2.5).

Während sich in adiabatischer Näherung die Ortswellenfunktion $|\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$ langsam über die gesamte Domänenstruktur hinweg ändert, reagiert die Spin-Wellenfunktion $|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle$ sensitiv auf die lokale atomare Struktur. Folglich muss der Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k})$ ebenfalls auf lokaler Ebene berechnet werden. Unterschiedliche Symmetrien der Einheitszellen innerhalb einer Superzelle führen damit zu einer gebrochenen Symmetrie der Spin-Polarisation.

Besteht die Superzelle aus N Einheitszellen, so lässt sich die Spin-Wellenfunktion der Superzelle als Gesamt-Spinor der Spin-Wellenfunktion der Einheitszellen als

$$|\Phi^{\pm}(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} |\Phi_1^{\pm}(\mathbf{k})\rangle \\ \vdots \\ |\Phi_N^{\pm}(\mathbf{k})\rangle \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

schreiben. Den Spin-Polarisationsvektor erhält man dann mit dem $(2N \times 2N)$ -dimensionalen

Tensor $\hat{\sigma} = \sigma \cdot \mathbf{1}_{N \times N}$ der Pauli-Matrizen σ durch

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\sigma} \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \hat{\sigma} | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle}{\langle \Phi^\pm(\mathbf{k}) | \Phi^\pm(\mathbf{k}) \rangle} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\begin{pmatrix} \langle \Phi_1^\pm(\mathbf{k}) | \\ \vdots \\ \langle \Phi_N^\pm(\mathbf{k}) | \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} | \Phi_1^\pm(\mathbf{k}) \rangle \\ \vdots \\ | \Phi_N^\pm(\mathbf{k}) \rangle \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \langle \Phi_1^\pm(\mathbf{k}) | \\ \vdots \\ \langle \Phi_N^\pm(\mathbf{k}) | \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} | \Phi_1^\pm(\mathbf{k}) \rangle \\ \vdots \\ | \Phi_N^\pm(\mathbf{k}) \rangle \end{pmatrix}} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sum_{i=1}^N \langle \Phi_i^\pm(\mathbf{k}) | \sigma | \Phi_i^\pm(\mathbf{k}) \rangle}{\sum_{j=1}^N \langle \Phi_j^\pm(\mathbf{k}) | \Phi_j^\pm(\mathbf{k}) \rangle} \\
 &= \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i^\pm(\mathbf{k}).
 \end{aligned} \tag{2.88}$$

Der Spin-Polarisationsvektor einer Superzelle $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ ist damit gegeben als die mit der Anzahl der Einheitszellen der Superzelle normierte Summe der Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}_i^\pm(\mathbf{k})$ der einzelnen Einheitszellen innerhalb der Superzelle. Bspw. ist somit der Spin-Polarisationsvektor der (3,1)-Struktur aus den DS-Phasen durch

$$\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\sigma} \rangle = \frac{1}{4} \left[3 \cdot \mathbf{S}_{\sqrt{7} \times \sqrt{3}}^\pm(\mathbf{k}) + \mathbf{S}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}^\pm(\mathbf{k}) \right] \tag{2.89}$$

bestimmt, d. h., dass $3/4$ des Gewichts auf die Spin-Polarisation einer $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle und $1/4$ des Gewichts auf die Spin-Polarisation einer $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle zurückzuführen sind.

2.3. Warping

Ein weiterer Effekt, der zu Abweichungen vom Modell des (quasi-)freien Elektronen- o. Lochgases führt, ist das sog. *Warping*. In Abhängigkeit von der Symmetrie des Systems und der Wechselwirkung der Bänder treten z. B. Terme in \mathbf{k}^4 oder \mathbf{k}^6 auf. Als Beispiel soll hier lediglich auf den Fall mit \mathbf{k}^6 eingegangen werden, der bspw. im Pb/Si(111)-System auftritt (s. Kap. 5.2). Der vom *Warping* hervorgerufene Effekt ähnelt dem quasi-freien Elektronen- bzw. Lochgas mit anisotroper effektiver Masse m^* . Der Unterschied zum Rashba- und Zeeman-Effekt besteht darin, dass das *Warping* nicht zu einer Spin-Polarisation der Bänder führt, sie also degeneriert vorliegen.

Der Spin-unabhängige Hamilton-Operator für hexagonales *Warping* bei C_{3v} -Symmetrie lässt sich mit Hilfe von $k_\pm = k_x \pm ik_y = k \cdot e^{\pm i\varphi}$ als

$$\mathcal{H}_W(\mathbf{k}) = -\frac{\chi}{2} (k_+^6 + k_-^6) \cdot \sigma_0 = -\chi k^6 \cos(6\varphi) \cdot \sigma_0 \tag{2.90}$$

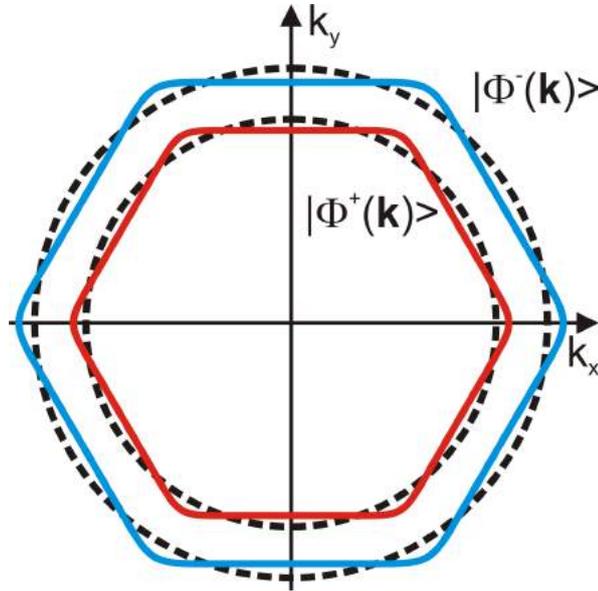


Abbildung 2.5: Deformation der Isoenergielinien durch *Warping*: Die Isoenergielinien des (quasi-)freien Elektronen- bzw. Lochgases (gestrichelte schwarze Linien; inklusive isotroper Rashba-Aufspaltung) werden durch das *Warping* hexagonal deformiert, hier mit $\chi > 0$. $|\Phi^\pm(\mathbf{k})\rangle$ sind dabei die Spin-Eigenzustände beim Rashba-Effekt.

schreiben. Die 6φ -Abhängigkeit sorgt für die Sechszähligkeit des Effekts in der (k_x, k_y) -Ebene. D. h., dass das *Warping* in allen zu k_x äquivalenten Richtungen die Energie des betreffenden Bandes im Vergleich zum selben Band ohne *Warping* um einen Betrag

$$E_W(\varphi) = \chi k^6 \cos(6\varphi) \quad (2.91)$$

verändert (Erniedrigung für $\chi > 0$ und Erhöhung für $\chi < 0$). Demzufolge ist in allen zu k_y äquivalenten Richtungen die Energie genau umgekehrt beeinflusst, da der Kosinus-Term in diesen Richtungen minimal wird. Dieses Verhalten resultiert in einer hexagonalen Deformation der Isoenergielinien des betrachteten Systems, wie auch in Abb. 2.5 dargestellt ist. Für die SIC-Phase von Pb auf Si(111) findet sich $\chi > 0$ (s. Kap. 5.2.1).

Das *Warping* kann auch zusammen mit Spin-polarisierenden Effekten wie dem Rashba- oder Zeeman-Effekt in einem Band auftreten.

Als Beispiele finden sich in der Literatur u. a. die Oberflächenzustände und *Bulk*-nahen QWSs von 1 ML Au/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [104, 105, 153] und von β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [122]. Auch das 2DEG an der Oberfläche von Bi₂Se₃ zeigt ein hexagonales *Warping* [175].

2.4. Dichtewellen an Oberflächen

Beim Abkühlen erfahren die elektrischen Eigenschaften vieler Metalle dramatische Veränderungen durch Phasenübergänge. Magnetische Materialien wie Eisen oder Cobalt werden teils weit oberhalb der RT³⁰ ferromagnetisch. Andere Metalle wie Niob und Blei verlieren hingegen

³⁰ Raumtemperatur

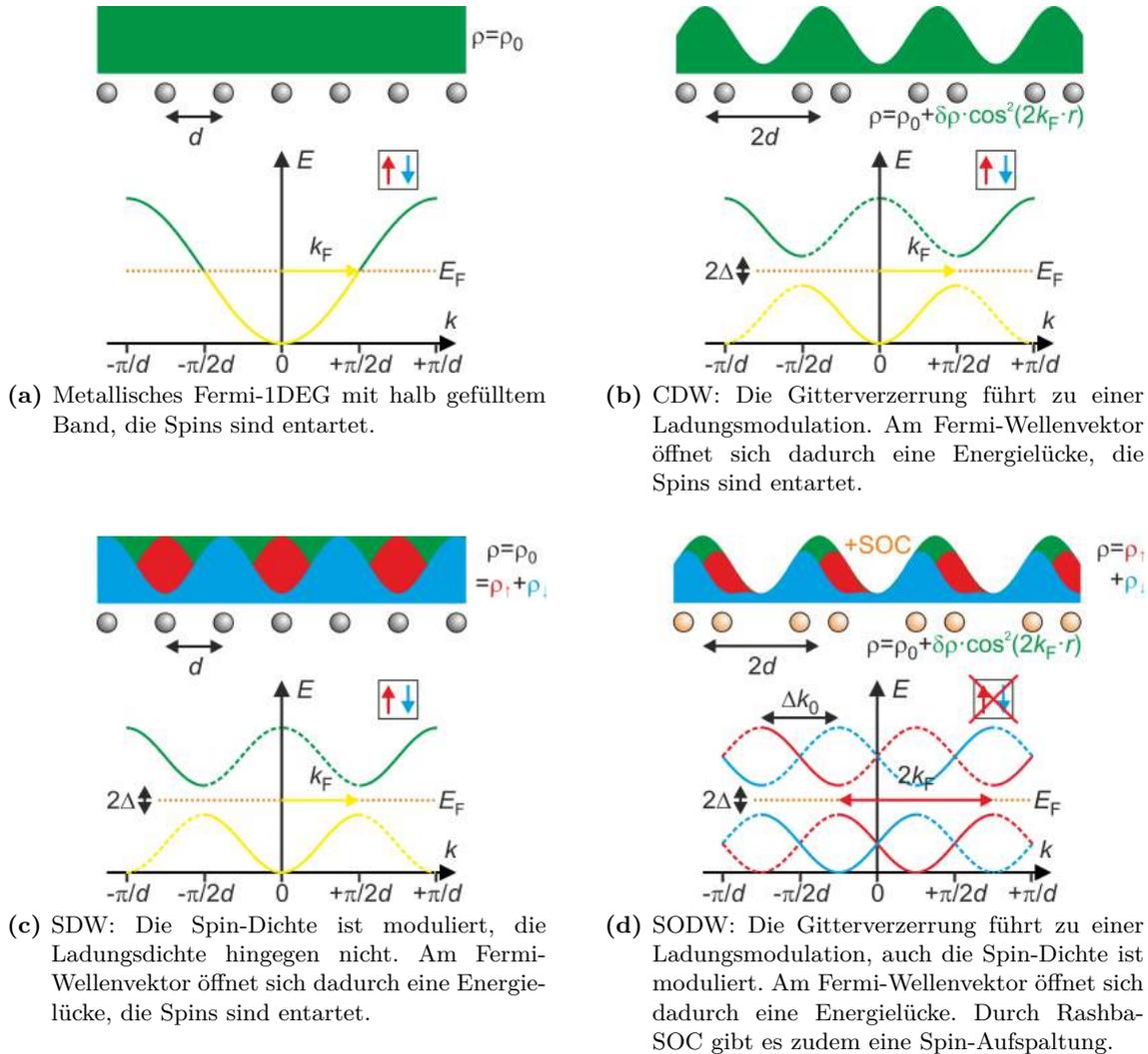


Abbildung 2.6: Korrelationseffekte in eindimensionalen Bandstrukturen: Korrelationen können beim Abkühlen eines Metalls zur Ausbildung neuer isolierender Grundzustände führen. Details s. Text.

bei tiefen Temperaturen plötzlich jeglichen elektrischen Widerstand und werden supraleitend. Beiden Effekten ist gemein, dass Ladung und Spin der Ladungsträger am Fermi-Niveau durch Korrelationen miteinander verknüpft sind. Dadurch ist es dem jeweiligen Material möglich, energetisch günstigere Phasen auszubilden als dies bei Beibehaltung des einfachen metallischen Zustands der Fall wäre.

In niedrigdimensionalen Materialien wie bspw. dem Schichtkristall NbSe₃ [176] oder Monolagen dicken Metalladsorbaten auf Halbleiteroberflächen wie In/Si(111)-(4 × 1) [177, 178] oder β-Pb/Ge(111)-(√3 × √3) [27, 179] kann die Energie des Systems beim Abkühlen jedoch auch auf andere Art und Weise abgesenkt werden. Hier ist das relevante metallische Band gerade halb gefüllt. Diese Situation ist in Abb.2.6(a) für ein eindimensionales Fermi-Gas

dargestellt³¹. Der Fermi-Wellenvektor beträgt hier gerade $k_F = \pi/(2d)$, wobei d die Periodizität der Atome entlang der eindimensionalen Kette ist. Die Ladungsträger sind gleichmäßig im Raum verteilt (Ladungsdichte $\rho = \rho_0$) und die Spins entartet. Eine solche Situation ist unterhalb einer kritischen Temperatur T_C instabil. Die sog. Peierls-Instabilität [180] führt zu einem Energiegewinn des Systems durch Verzerrung des atomaren Gitters. Im Beispiel in Abb. 2.6 (b) verdoppelt sich die Periodizität der Atome entlang der Kette. Dadurch erfährt die Ladungsdichte ρ eine periodische Modulation $\delta\rho(\mathbf{r}) \cdot \cos^2(2\mathbf{k}_F \cdot \mathbf{r})$, aufgrund dessen von einer CDW³² gesprochen wird. Durch die neue Periodizität verschieben sich die Zonengrenzen der Brillouin-Zone von Wellenvektoren $\pm\pi/d$ gerade zum Fermi-Wellenvektor $k_F = \pm\pi/(2d)$. Die rückgefalteten Bänder nahe des Fermi-Niveau haben eine niedrigere Energie als im metallischen Zustand, wodurch sich die CDW stabilisiert. Die Zustände bei $\pm k_F$ sind *genestet*, wodurch sich eine Energielücke 2Δ öffnet, ein Isolator entsteht. Damit sind im CDW-Grundzustand Gitter und Ladung korreliert, die Spins bleiben entartet.

Auf ganz ähnliche Art und Weise kommt die sog. SDW³³ zustande. Hier wird jedoch weder das Gitter, noch die Ladungsdichte periodisch moduliert. Stattdessen erfährt die Spin-Dichte der Zustände *Spin up* und *Spin down* die periodische Modulation (s. Abb. 2.6 (c)). Das Resultat bezüglich der Bandstruktur ist jedoch exakt das gleiche wie bei der CDW. Fermi-*Nesting* an den neuen Zonenrändern führt zur Ausbildung einer Energielücke 2Δ und zu einer Energieabsenkung des Systems, die Spins bleiben jedoch entartet. Beispielsysteme für SDWs sind Chrom [181, 182] und die organischen Bechgaard-Salze [183].

Die bisherige Betrachtung hat Korrelationen zwischen den Spins und dem orbitalen Charakter der elektronischen Zustände am Fermi-Niveau noch nicht berücksichtigt. In Systemen mit Spin-Bahn-Kopplung (SOC) können je nach Stärke der Kopplung solche Korrelationen jedoch hervorgerufen werden (Theorie zur Spin-Bahn-Wechselwirkung s. Kap 2.2). Besonders schwere Elemente wie Gold, Blei oder Bismut besitzen eine starke intrinsische SOI und damit starke Korrelationen zwischen den beteiligten Spins, Ladungsträgern, Orbitalen und auch dem Gitter. Eine besondere Situation stellt sich in Abb. 2.6 (d) dar. Hier hebt der Rashba-Effekt (s. Kap. 2.2.1) die Spin-Entartung der elektronischen Bänder auf. Die Spin-Aufspaltung ist maximal, wenn $\Delta k_0 = k_F = \pi/(2d)$ gilt. In diesem Fall sind sämtliche Zustände beider Spin-Helizitäten am Fermi-Niveau *genestet*, was zur Entstehung der Energielücke 2Δ führt. Zusätzlich treten eine CDW und eine SDW auf, die die Ladungs- und Spin-Dichte modulieren. Diesen hoch korrelierten Zustand hat TANMOY DAS als Erster theoretisch beschrieben [64, 65, 184–188]. Die sog. SODW wird für das Zustandekommen des *Hidden Order*-Zustands in URu₂Si₂ verantwortlich gemacht (dreidimensionaler Zustand) [189, 190] und tritt ebenso in BiAg₂-Oberflächenlegierungen auf (zweidimensionaler Zustand) [65, 184]. In dieser Arbeit und der zugehörigen Publikation [62, 63] in *Nature Communications* wird eine quasi-eindimensionale SODW für den Metall-Isolator-Übergang an der Oberfläche von Pb/Si(557) in der Richtung senkrecht zu den atomaren Stufen des Substrats identifiziert und diskutiert (s. Kap. 6.2). Die theoretische Beschreibung der SODW in einem solchen Quantendrahtsystem wurde in [187] näher ausgeführt.

Die inhärente Spin-Aufspaltung der SOC vom Rashba-Typ führt, wie bereits gesagt, zu Fermi-Flächen mit *Nesting* zwischen entgegengesetzten helikalen Zuständen. Dies ist der

³¹ Sämtliche folgenden eindimensionalen Betrachtungen lassen sich ebenso auf zwei- und dreidimensionale Systeme übertragen.

³² Charge Density Wave

³³ Spin Density Wave

Spin-Bahn-Dichtewellen-Zustand (SODW), der nicht durch unabhängige lokale Ordnungsparameter charakterisiert werden kann [62]. Diese neue emergente Phase der Materie entsteht ohne Bruch der TRS oberhalb eines kritischen Wertes für das Coulomb-Potential U und ihr Ordnungsparameter, d. h. die Energielücke Δ , wird bestimmt durch die Energieskalen sowohl der SOC-Stärke λ als auch der Wechselwirkung U , was sich auch in der Proportionalität von Δ und U widerspiegelt [65]. Außerdem schützt die endliche Energielücke Δ die SODW vor Spin-Dephasierung gegen externe Störeinflüsse wie Magnetfelder, thermische Anregung oder Dotierung [62]. Für den Fall, dass die Wechselwirkungsenergie jedoch groß im Vergleich zum SOC ist, kann das SODW auf Kosten einer SDW umkippen [185]. Experimentell lässt sich eine SODW durch den Unterschied von Ladungs- und Spin-Ordnung, das *Nesting* von Spin-polarisierten Zuständen und der damit einhergehenden Öffnung einer Energielücke am Fermi-Niveau, sowie der Depolarisation der Spin-Ordnung als Funktion der Coulomb-Abschirmung aufgrund der Dephasierung von Spin-Zuständen nachweisen (s. Kap. 6.2).

In vereinfachter Form³⁴ kann der Hamilton-Operator zur Bildung des SODW-Zustands als

$$\mathcal{H}_{\text{SODW}} = \mathcal{H}_{\text{R}} + \frac{\hbar}{2} \Omega_{\text{SODW}}(\mathbf{k}) \cdot \sigma_z = \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.92)$$

geschrieben werden. Im Vergleich zum Rashba-Effekt (Hamilton-Operator \mathcal{H}_{R}) kommt die Komponente $\Omega_{\text{SODW}} = 2\Delta/\hbar$ hinzu, die einen (schwach ausgeprägten) Spin in z-Richtung erzeugt. $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ lässt sich somit schreiben als

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z + k_y \Delta / \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

wobei die effektive Larmor-Frequenz

$$\Omega(\mathbf{k}) = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + (\alpha_z + \Delta \sin \varphi)^2} \quad (2.94)$$

ist (Vgl. [191]). Der Term $k_y/\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \sin \varphi$ ist hier für den Spezialfall von Pb/Si(557) zu sehen, wo der SODW-Zustand nur in $k_y = k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ auftritt (*Nesting*), in $k_x = k_{[\bar{1}\bar{1}0]}$ jedoch nicht.

Der zugehörige Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ lässt sich ebenfalls analog zum Rashba-Effekt als

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^\pm(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})}{|\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})|} \\ &= \pm \frac{\hbar}{2\sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + (\alpha_z + \Delta \sin \varphi)^2}} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z + \Delta \sin \varphi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.95)$$

schreiben.

In Gegenwart von Streuung kann die Spin-Dynamik durch die kinetische Gleichung

$$\frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{k})}{\partial t} + \mathbf{S}(\mathbf{k}) \times \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) = \frac{\langle \mathbf{S}(\mathbf{k}) \rangle - \mathbf{S}(\mathbf{k})}{\eta} + \bar{\mathbf{S}} \quad (2.96)$$

³⁴ Die exakte Formulierung findet sich bspw. in [63, 64, 185, 186], geht aber weit über das hier Benötigte hinaus. Zu beachten ist, dass in der vereinfachten Form Spin-Anregungen auch ohne Translation mit dem *Nesting*-Vektor möglich sind.

beschrieben werden, wobei $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ der Spin-Polarisationsvektor ist [191]. Da der SODW-Zustand die TRS nicht bricht, verschwindet im Mittel die Spin-Polarisation ($\overline{\mathbf{S}} = 0$) [186]. η beschreibt die sog. Impulsisotropierungszeit [191].

Im Fall starker oder mindestens moderater SOC ($\Omega\tau_s/2 \sim 1$ bzw. $\sim 0,5$) relaxieren die Spins in einer gedämpften oszillatorischen Bewegung [192] mit der Spin-Relaxationszeit bzw. -Dephasierungszeit oder -Lebensdauer τ_s . Diese lässt sich allgemein mittels

$$\tau_s^{-1} = \tau^{-1}/2 = (\tau_0^{-1} + \tau_i^{-1} + \tau_{\text{SO}}^{-1})/2 \quad (2.97)$$

ausdrücken [192]. Dabei sind τ_0 die elastische, τ_i die inelastische und τ_{SO} die Spin-Bahn-Streuzeit. Andererseits können in einem anisotropen zweidimensionalen Spin-Bahn-gekoppelten System die Spin-Relaxationszeiten (die sog. D'yakonov-Perel'-Relaxationszeiten) auch durch

$$\tau_{s,x}^{-1} = \frac{4\eta}{\hbar^2} \left[\alpha_y^2 + (\alpha_z + \Delta \sin \varphi)^2 \right], \quad (2.98 \text{ a})$$

$$\tau_{s,y}^{-1} = \frac{4\eta}{\hbar^2} \left[\alpha_x^2 + (\alpha_z + \Delta \sin \varphi)^2 \right] \quad (2.98 \text{ b})$$

beschrieben werden [191].

2.5. Hybridisierung von Bändern

Im Rahmen dieser Arbeit wurden bei ARPES-Messungen an Pb/Si(111) QWS gefunden, die teilweise aufgrund von SOC miteinander hybridisieren (s. Kap. 5.2.4). Hier nun soll eine theoretische Beschreibung der Hybridisierung von elektronischen Bändern gegeben werden, um das Verhalten dieser Zustände besser verstehen zu können.

Kommen sich zwei ungestörte, dispergierende Bänder $E_{1,2}(\mathbf{k})$ in einem Punkt des \mathbf{K} -Raums energetisch nahe, so können sie sich durch eine Wechselwirkung W gegenseitig beeinflussen. Dabei kann es im einfachsten Fall zu einer energetischen Verschiebung beider Bänder kommen. Kreuzen sich die beiden ungestörten Bänder jedoch, so bewirkt die Wechselwirkung, dass diese Kreuzung aufgehoben wird und beide Bänder miteinander hybridisieren (s. Abb. 2.7). Dieses sogenannte *Zwei-Zustands-System* soll im Folgenden mathematisch beschrieben werden.

In Matrixform lassen sich die beiden ungestörten Bänder als Diagonalmatrix beschreiben:

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.99)$$

\mathcal{H}_0 entspricht somit einem Hamilton-Operator, der den Wellenfunktionen $\Psi_{1,2}(\mathbf{k})$ die Energien $E_1(\mathbf{k})$ bzw. $E_2(\mathbf{k})$ zuordnet.

Allgemein lässt sich die Wechselwirkung, die auf beide Bänder wirkt, in Matrixform als

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} W_1 & W \\ W^* & W_2 \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

schreiben. Dabei sind die Elemente W und W^* der Nebendiagonalen für die Hybridisierung verantwortlich und die Elemente W_1 bzw. W_2 auf der Hauptdiagonalen sorgen für eine energetische Verschiebung der Bänder $E_1(\mathbf{k})$ bzw. $E_2(\mathbf{k})$. In physikalischen Systemen ist die Matrix hermitesch, d. h. W^* ist komplex konjugiert zu W .

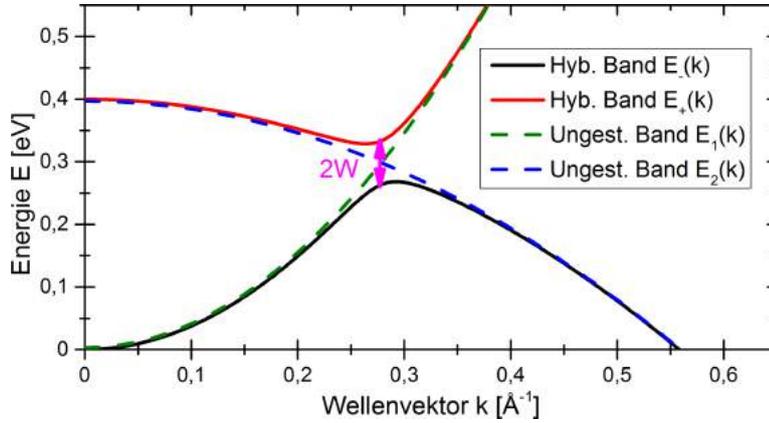


Abbildung 2.7: Hybridisierung zweier Bänder: Die durchgezogenen Linien sind die hybridisierten Bänder und die gestrichelten Linien die ungestörten Dispersionen von quasi-freien Elektronen bzw. Löchern. Der minimale energetische Abstand der hybridisierten Bänder beträgt $\Delta E = 2W$. Verwendete Parameter: effektive Massen $m_1^* = 1 m_e$, $m_2^* = -3 m_e$, $W_1 = 0 \text{ meV}$, $W_2 = 400 \text{ meV}$, $W = 35 \text{ meV}$.

In einer quantenmechanischen Beschreibung wirkt die Störung \mathcal{P} wie ein Operator auf die Wellenfunktionen $\Psi_{1,2}(\mathbf{k})$ der beiden Bänder. Dabei sind insbesondere die Symmetrie und Quantenzahlen (z. B. Hauptquantenzahl n , Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ , magnetische Quantenzahl m_ℓ und magnetische Spin-Quantenzahl m_s) von Wellenfunktion und Störung zu berücksichtigen. Wechselwirken beispielsweise zwei Wellenfunktionen miteinander, deren Bahndrehimpulsquantenzahlen sich voneinander unterscheiden ($\ell \neq \ell'$), so muss der Operator derart sein, dass ein Bahndrehimpulsübertrag ermöglicht wird. Andernfalls sind beide Wellenfunktionen orthogonal zueinander, sodass keine Wechselwirkung zwischen ihnen auftritt:

$$\langle \Psi_{\ell'}(\mathbf{k}) | W_{\ell',\ell} | \Psi_\ell(\mathbf{k}) \rangle = E, \quad (2.101 \text{ a})$$

$$\langle \Psi_{\ell'}(\mathbf{k}) | W_{\ell,\ell} | \Psi_\ell(\mathbf{k}) \rangle = 0. \quad (2.101 \text{ b})$$

Beispiele für eine Hybridisierung zweier umgekehrt Spin-polarisierter Bänder inklusive Spin-Flip sind für p_z -Orbitale Silicen [193, 194], für $p_{x,y}$ -Orbitale freistehende Bi(111)-Lagen [194, 195], jeweils in einem Austauschfeld (Anomaler Quanten-Hall-Effekt), sowie die BiAg₂- und PbAg₂-Oberflächenlegierungen auf Ag-Filmen (Linearkombination der p_x -, p_y - und sp_z -Orbitale mit unterschiedlicher Spin-Orientierung) [98–102, 196] und die QWS einiger Monolagen von Pb auf β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) [111].

Der Hamilton-Operator des gestörten Systems lässt sich durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{P} = \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) + W_1 & W \\ W^* & E_2(\mathbf{k}) + W_2 \end{pmatrix} \quad (2.102)$$

ausdrücken.

Durch Lösen der Eigenwertgleichung

$$\det(\mathcal{H} - E) = 0 \quad (2.103)$$

erhält man die neuen hybridisierten Bänder zu

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(E_1(\mathbf{k}) + W_1 + E_2(\mathbf{k}) + W_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1(\mathbf{k}) + W_1 - E_2(\mathbf{k}) - W_2)^2 + 4|W|^2} \quad (2.104 \text{ a})$$

$$= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 4|W|^2}, \quad (2.104 \text{ b})$$

mit

$$\alpha = E_1(\mathbf{k}) + W_1, \quad (2.104 \text{ c})$$

$$\beta = E_2(\mathbf{k}) + W_2 \quad (2.104 \text{ d})$$

(Vgl. [99, 111]). Anhand dieser Gleichung lässt sich ablesen, dass die zuvor ungestörten Bänder $E_{1,2}(\mathbf{k})$ sich aufgrund der Wechselwirkung W nun nicht mehr im Punkt \mathbf{k}' des reziproken Raums kreuzen, sondern aufgrund der Hybridisierung eine vermiedene Kreuzung vorliegt, wobei sich \mathbf{k}' durch

$$E_1(\mathbf{k}') + W_1 - E_2(\mathbf{k}') - W_2 = \alpha - \beta = 0 \quad (2.105)$$

berechnen lässt. Der minimale energetische Abstand der beiden hybridisierten Bänder beträgt dabei $\Delta E = 2|W|$.

Für die Erklärung der experimentellen Befunde reicht die Beschreibung des bis hier hin beschriebenen *Zwei-Zustands-Systems* nicht aus. Aufgrund der Vielzahl von energetisch dicht beieinander liegenden QWSs, kommt es häufig zu Überschneidungen von drei oder mehr Bändern. Im Folgenden soll daher kurz die Erweiterung des *Zwei-Zustands-Systems* auf drei sich schneidende Bänder erläutert werden.

Der Hamilton-Operator \mathcal{H}_0 lässt sich nun als

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & 0 & E_3(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.106)$$

schreiben. Entsprechend lässt sich auch die Wechselwirkungsmatrix \mathcal{P} zu

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} W_1 & W & U \\ W^* & W_2 & V \\ U^* & V^* & W_3 \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

erweitern. Daraus resultiert der neue Hamilton-Operator \mathcal{H} als

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{P} = \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) + W_1 & W & U \\ W^* & E_2(\mathbf{k}) + W_2 & V \\ U^* & V^* & E_3(\mathbf{k}) + W_3 \end{pmatrix}. \quad (2.108)$$

Es lässt sich erkennen, dass W die Wechselwirkung zwischen den Bändern $E_1(\mathbf{k})$ und $E_2(\mathbf{k})$, U die Wechselwirkung zwischen den Bändern $E_1(\mathbf{k})$ und $E_3(\mathbf{k})$ und V die Wechselwirkung zwischen den Bändern $E_2(\mathbf{k})$ und $E_3(\mathbf{k})$ beschreibt. $W_{1,2,3}$ sind wiederum energetische Verschiebungen der einzelnen Bänder und $\gamma = E_3(\mathbf{k}) + W_3$.

Da die Gesamtmatrix \mathcal{H} wiederum hermitesch ist, lässt sich das Eigenwertproblem

$$\det(\mathcal{H} - E) = 0 \quad (2.109)$$

als Gleichung mit Polynom dritten Grades in E mittels der *Cardanischen Formeln* [197] lösen:

$$E_i^{\text{Hybrid}} = \sqrt{-\frac{4p}{3}} \cdot \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{q}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3}} \right) - c_i \cdot \frac{2\pi}{3} \right] - \frac{a}{3}, i \in \{1,2,3\} \quad (2.110 \text{ a})$$

mit

$$c_i = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}, i \in \{1,2,3\}, \quad (2.110 \text{ b})$$

$$a = -(\alpha + \beta + \gamma), \quad (2.110 \text{ c})$$

$$p = \alpha\beta + \beta\gamma + \gamma\alpha - (|U|^2 + |V|^2 + |W|^2) - a^2/3, \quad (2.110 \text{ d})$$

$$q = \alpha|V|^2 + \beta|U|^2 + \gamma|W|^2 - UV^*W^* - U^*VW - (9p + a^3)/27. \quad (2.110 \text{ e})$$

Für den Fall, dass zwei der drei ursprünglichen Bänder nicht direkt miteinander wechselwirken (o. B. d. A. seien dies $E_1(\mathbf{k})$ und $E_3(\mathbf{k})$, d. h. $U = 0$), vereinfachen sich die Koeffizienten p und q der *Cardanischen Formeln* zu

$$p = \alpha\beta + \beta\gamma + \gamma\alpha - (|V|^2 + |W|^2) - a^2/3, \quad (2.111 \text{ a})$$

$$q = \alpha|V|^2 + \gamma|W|^2 - (9p + a^3)/27. \quad (2.111 \text{ b})$$

Im Experimententeil dieser Arbeit wird gezeigt, dass in den erzeugten QWSs genau solch eine Hybridisierung von drei (Sub-)Bändern stattfindet, wobei $U = 0$ und $V = W = \Delta_{\text{SO}}/2 = 22 \text{ meV}$ die halbe Energie der Spin-Bahn-Aufspaltung des Valenzbandes ist (s. Kap. 5.2.4).

2.6. Effektive Massen von Löchern im Silizium-Valenzband

Mit der sog. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie lässt sich störungstheoretisch erfassen, wie sich Löcher im Valenzband und Elektronen im Leitungsband im Volumen (*Bulk*) eines Festkörpers bewegen. Die Theorie beruht auf der Feststellung, dass in einer Vielzahl von Materialien sich die Ladungsträger nicht völlig frei bewegen, sondern sich aufgrund periodischer Potentiale ihre Bewegungsenergie E abhängig vom Impuls \mathbf{k} verändert. In Systemen, in denen die Bewegung der Ladungsträger nur leicht gestört wird, lässt sich mittels der Definition einer effektiven Masse

$$m^* = \frac{\hbar^2}{m_e} \cdot \left[\frac{d^2 E}{dk^2} \right]^{-1} \quad (2.112 \text{ a})$$

bzw. tensoriell

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{m_e}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (2.112 \text{ b})$$

die Physik im Rahmen *quasi-freier* Teilchen beschreiben³⁵. Dies ist bspw. für die meisten Halbleiter, darunter Silizium, der Fall.

³⁵ Entgegen der sonst üblichen Konvention werden hier und im Folgenden die effektiven Massen als reine Zahlenwerte, d. h. ohne die „Einheit“ m_e angegeben.

Im Valenzband von Silizium und Germanium bewegen sich die Löcher nicht bloß in einem Band, sondern in drei Bändern mit unterschiedlichen effektiven Massen. Die Bänder können mit der Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses $j = |\mathbf{J}|$ und seiner Quantisierung m_j charakterisiert werden. Diese Eigenzustände identifiziert man als das HH³⁶-Band (schweres Loch, $j = 3/2$, $m_j = \pm 3/2$), das LH³⁷-Band (leichtes Loch, $j = 3/2$, $m_j = \pm 1/2$) und das *Spin-Orbit* SO³⁸-Band (Split-off-Loch, $j = 1/2$, $m_j = \pm 1/2$).

Eine ausführliche Herleitung der Energieeigenwertgleichung im Kane-Modell [198] und der effektiven Massen ist in Kap. D im Anhang zu finden. Hier dagegen sollen lediglich die Dispersionen der Valenzbänder auf Basis der Herleitung diskutiert werden. Hierzu wurden einheitlich die Luttinger-Parameter γ_i ($i \in \{1, 2, 3\}$), von HENSEL (s. Tab. D.2) benutzt.

Da alle drei Bänder miteinander wechselwirken, lässt sich die Energieeigenwertgleichung Gl. (D.44) der ansonsten parabolischen Bänder mithilfe der Gleichungen aus Kap. 2.5 lösen. Dafür muss die Gleichung als Funktion von \mathbf{k}^2 betrachtet werden. Durch Lösen der Gleichung mittels der *Cardanischen Formeln* [197] lassen sich die drei Dispersionen $\mathbf{k}_i^2(E)$ für die Hauptrichtungen in Silizium exakt berechnen. Die Dispersionsrelationen lassen sich als

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{\text{HH}}^2(E) &= \frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot E_{\text{HH}} = \frac{\mathbf{k}^2}{m_{\text{HH}}^*} \\ &= \frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot \left[\Xi(E) \cdot \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \Omega(E)\right) - \Sigma(E) \right], \end{aligned} \quad (2.113 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{\text{LH}}^2(E) &= \frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot E_{\text{LH}} = \frac{\mathbf{k}^2}{m_{\text{LH}}^*} \\ &= -\frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot \left[\Xi(E) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \Omega(E)\right) + \Sigma(E) \right], \end{aligned} \quad (2.113 \text{ b})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{\text{SO}}^2(E) &= \frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot (E_{\text{SO}} + \Delta_{\text{SO}}) = \frac{\mathbf{k}^2}{m_{\text{SO}}^*} \\ &= -\frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot \left[\Xi(E) \cdot \cos\left(-\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \Omega(E)\right) + \Sigma(E) \right] \end{aligned} \quad (2.113 \text{ c})$$

mit

$$\Xi(E) = \sqrt{-\frac{4}{3}p(E)}, \quad (2.113 \text{ d})$$

$$\Omega(E) = -\frac{q(E)}{2} \sqrt{-\frac{27}{p^3(E)}}, \quad (2.113 \text{ e})$$

$$\Sigma(E) = \frac{B(E)}{3A} \quad (2.113 \text{ f})$$

³⁶ Heavy Hole

³⁷ Light Hole

³⁸ Split-Off

ausdrücken, wobei

$$p(E) = \frac{C(E)}{A} - \frac{B(E)^2}{3A^2}, \quad (2.113 \text{ g})$$

$$q(E) = \frac{2B(E)^3}{27A^3} - \frac{B(E)C(E)}{3A^2} + \frac{D(E)}{A}, \quad (2.113 \text{ h})$$

$$\Delta(E) = \left(\frac{q(E)}{2}\right)^2 + \left(\frac{p(E)}{3}\right)^3 \quad (2.113 \text{ i})$$

und

$$A = \gamma_1^3 - 12\gamma_1\gamma_2^2 + 16\gamma_2^3 + 36\mu(\theta, \varphi)(\gamma_2^2 - \gamma_3^2)(\gamma_1 - 2\gamma_2) + 216q(\theta, \varphi)(\gamma_2^3 - 3\gamma_2\gamma_3^2 + 2\gamma_3^3), \quad (2.113 \text{ j})$$

$$B(E) = \left(E + \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3}\right) \cdot 3 \left[\gamma_1^2 - 4\gamma_2^2 + 12\mu(\theta, \varphi)(\gamma_2^2 - \gamma_3^2)\right], \quad (2.113 \text{ k})$$

$$C(E) = E \cdot \left(E + \frac{2\Delta_{\text{SO}}}{3}\right) \cdot 3\gamma_1, \quad (2.113 \text{ l})$$

$$D(E) = E^2 \cdot (E + \Delta_{\text{SO}}) \quad (2.113 \text{ m})$$

sind.

In Abb. 2.8 sind der Vorfaktor Ξ , das Argument des Arkuskosinus Ω , sowie die *Diskriminante* Δ und ihr Betrag dargestellt. Der Vorfaktor Ξ fällt zunächst bei kleinen Energien für alle Richtungen bis zu einem globalen Minimum bei $|E| \approx \Delta_{\text{SO}}/3$, anschließend steigt er exponentiell an. Für alle Richtungen ist bei $E = 0$ das Argument $\Omega = -1$, steigt jedoch schon bei kleinen Energien sehr schnell an. In den $\langle 100 \rangle$ -, $\langle 111 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen werden im Bereich $|E| < 0,2 \text{ eV}$ globale Maxima erreicht, anschließend fallen die Funktionen asymptotisch gegen einen festen Wert. Für die $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Richtungen ist dies $\Omega_A = -1$ und für die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen $\Omega_A \approx 0,494$. In den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen wächst das Argument ausschließlich und erreicht bereits bei $|E| = \Delta_{\text{SO}}/2$ nahezu den Grenzwert von $\Omega_A = 1$. Von Bedeutung für das Lösungsverhalten von Polynomen dritter Ordnung ist die *Diskriminante* Δ . Lediglich bei $E = 0$ erhält man $\Delta = 0$, wodurch man analytische Lösungen für die Dispersionsrelationen $E_i(\mathbf{k})$ ohne Zuhilfenahme von trigonometrischen Funktionen erhält. Für $|E| > 0$ fällt die Diskriminante in allen Richtungen exponentiell. Dies lässt sich besonders gut in Abb. 2.8 (d) am Betrag der Diskriminante ablesen. Lediglich im Bereich $|E| < \Delta_{\text{SO}}$ gibt es für die $\langle 111 \rangle$ -, $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen lokale Abflachungen der Kurve.

Abb. 2.9 zeigt die aus Gl. (2.113) resultierenden Dispersionen für die Hauptrichtungen in Silizium. Das HH-Band zeigt jeweils die flachste, anisotrope Dispersion, d. h. seine effektive Masse m^* weist die jeweils größten Werte auf. Die effektive Masse ist in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen jedoch aufgrund der Wechselwirkung mit dem SO-Band und der daraus resultierenden elektronenartigen Bandkrümmung nur in den Bereichen $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ und $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ sinnvoll definiert (s. u.). In den $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Richtungen ist das HH-Band für alle Energien parabolisch, d. h. $E_{\text{HH}} \propto \mathbf{k}^2$, da es nicht mit den anderen Bändern wechselwirkt, für die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen ist es nahezu parabolisch. Aufgrund der SOC mit dem SO-Band ist die Dispersion in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen im Bereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ im Vergleich besonders flach. Die effektive Masse erreicht einen Wert von $m_{\text{HH}}^* = 3,5$, und damit mehr als das Sechsfache des Wertes für $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$. Ein derartiges Verhalten weist kein anderes Band in den betrachteten Richtungen auf.

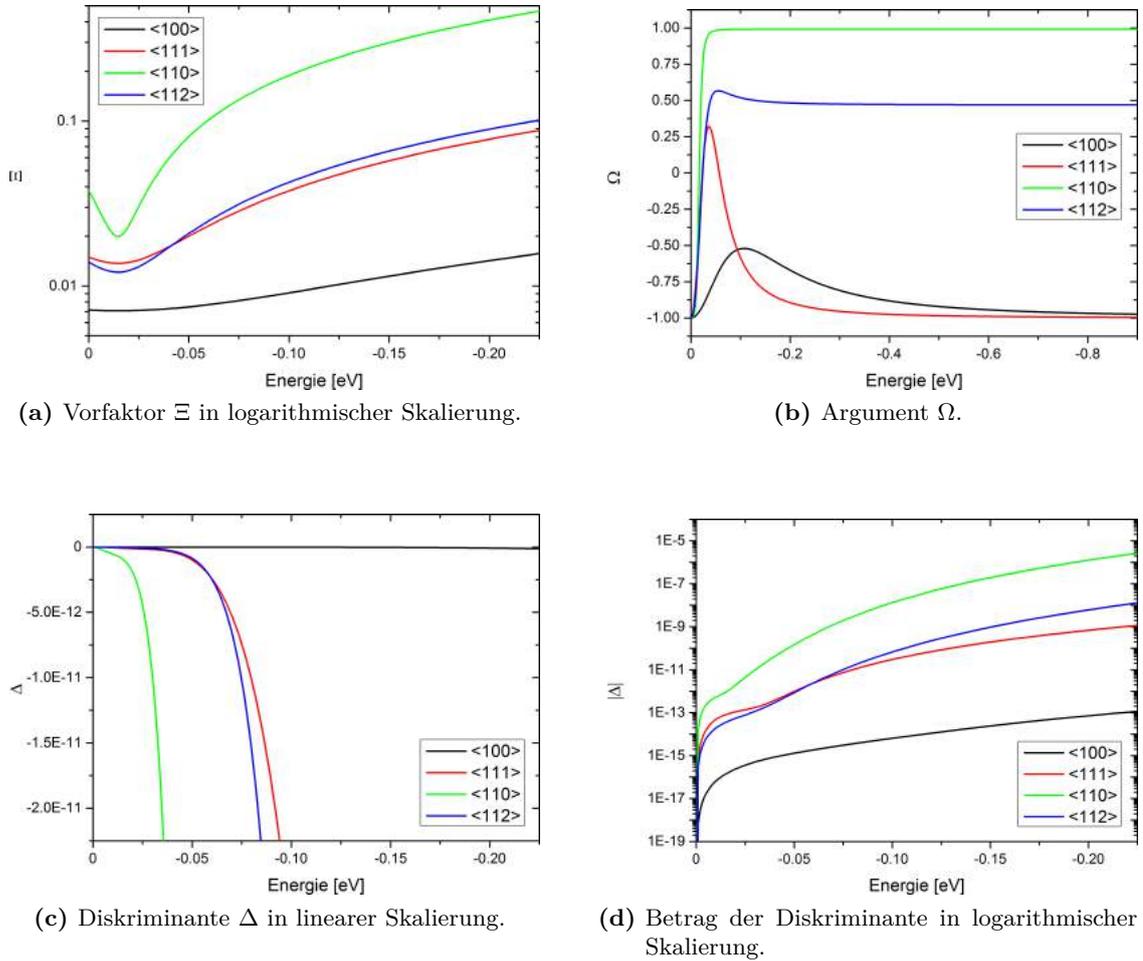


Abbildung 2.8: Parameter der Valenzbanddispersionen in den Si-Hauptrichtungen.

Die Dispersion des LH-Bandes beginnt wie die des HH-Bandes im Ursprung $E(0) = 0$. Da seine effektive Masse für $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ kleiner ist als die des HH-Bandes, dispergiert es stärker, auch ist es anisotrop. Bei $k \approx 0,05 \text{ \AA}^{-1}$ kommt das LH-Band dem SO-Band energetisch in den $\langle 100 \rangle$ -, $\langle 111 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen am nächsten. Durch die SOC hybridisieren LH- und SO-Band, sodass sie sich für $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ energetisch wieder voneinander entfernen. Da in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen das LH- nur schwach mit dem SO-Band hybridisiert, behält es nahezu seinen parabolischen Charakter und seine effektive Masse m_{LH}^* verändert sich nur geringfügig. Im Energiebereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ nähert sich die effektive Masse des LH-Bandes der des HH-Bandes in den $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Richtungen an, sodass das LH-Band eine hohe Anisotropie aufweist.

Das SO-Band hat gegenüber dem LH- und HH-Band bei $\mathbf{k} = 0$ einen energetischen Offset von $E_0 = -\Delta_{\text{SO}} = -44 \text{ meV}$. Aufgrund seiner niedrigen effektiven Masse m_{SO}^* dispergiert es in allen betrachteten Richtungen für $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ zunächst sehr stark, parabolisch und zudem isotrop (s. Tab. D.3). Wegen der SOC mit LH und HH wird seine Dispersion im Bereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ jedoch stark anisotrop.

Abb. 2.10 zeigt die aus den Dispersionsrelationen $E_i(\mathbf{k})$ der Valenzbänder mittels Gl. (2.112)

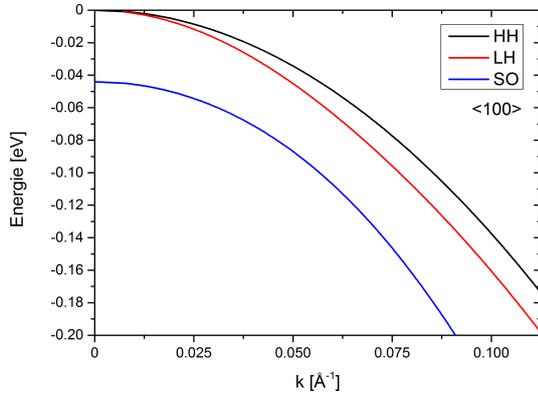
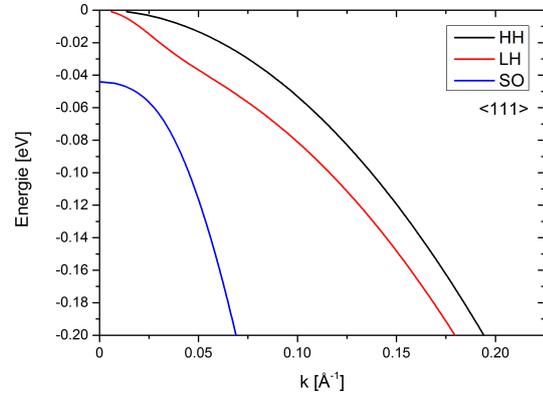
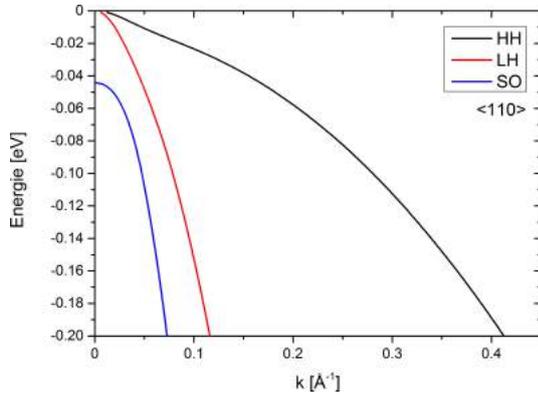
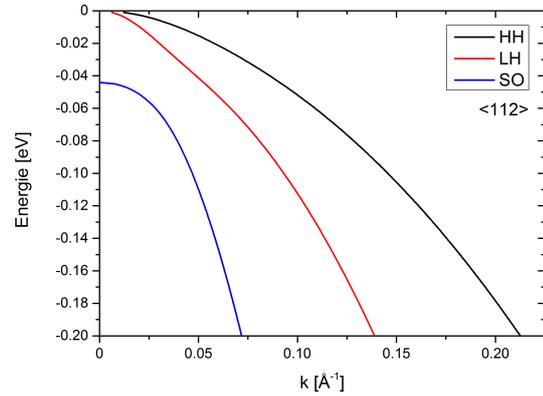

 (a) Dispersion für $\langle 100 \rangle$ -Richtungen.

 (b) Dispersion für $\langle 111 \rangle$ -Richtungen.

 (c) Dispersion für $\langle 110 \rangle$ -Richtungen.

 (d) Dispersion für $\langle 112 \rangle$ -Richtungen.

Abbildung 2.9: Dispersionen der Valenzbänder in den Si-Haupttrichtungen.

berechneten effektiven Massen bzw. deren Beträge für die vier betrachteten Richtungen in Silizium. Für das HH-Band in (a) zeigt sich, dass in den $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -Richtungen die effektive Masse m_{HH}^* konstant ist. Dies bedeutet, dass die Wechselwirkung mit den anderen beiden Valenzbändern in diesen Richtungen keinerlei Einfluss auf das HH-Band hat und dieses somit parabolisch ist. Für die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ergibt sich ein Wert von $m_{\text{HH}}^* \approx 0,277$ und in den $\langle 111 \rangle$ -Richtungen $m_{\text{HH}}^* \approx 0,718$. In den $\langle 112 \rangle$ -Richtungen bewirkt die SOC eine Veränderung von m_{HH}^* von etwa 0,569 bei $k = 0$ zu 0,924 im Bereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$. Dabei erreicht die effektive Masse bei $k \approx 0,075 \text{ \AA}^{-1}$ ein Maximum von etwa 1,22, bevor sie bei größeren Werten von k wieder abfällt. Somit ist das HH-Band in den $\langle 112 \rangle$ -Richtungen nahezu parabolisch, was auch sehr gut bei der Dispersion in Abb. 2.9 (c) sichtbar ist. In den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen dagegen bewirkt die SOC eine starke Hybridisierung mit dem SO-Band, aufgrund derer es im Wechselwirkungsbereich statt einer lochartigen eine elektronenartige Dispersion gibt. Das heißt, dass das Vorzeichen der effektiven Masse in diesem Bereich negativ ist und es an den Übergängen in Folge der Definition der effektiven Masse in Gl. (2.112) Polstellen bei $k \approx 0,037 \text{ \AA}^{-1}$ und $k \approx 0,078 \text{ \AA}^{-1}$ gibt. Deshalb wird zur besseren Sichtbarkeit in Abb. 2.10 (a) lediglich der Betrag von m_{HH}^* gezeigt. Die SOC bewirkt auch, dass das HH-

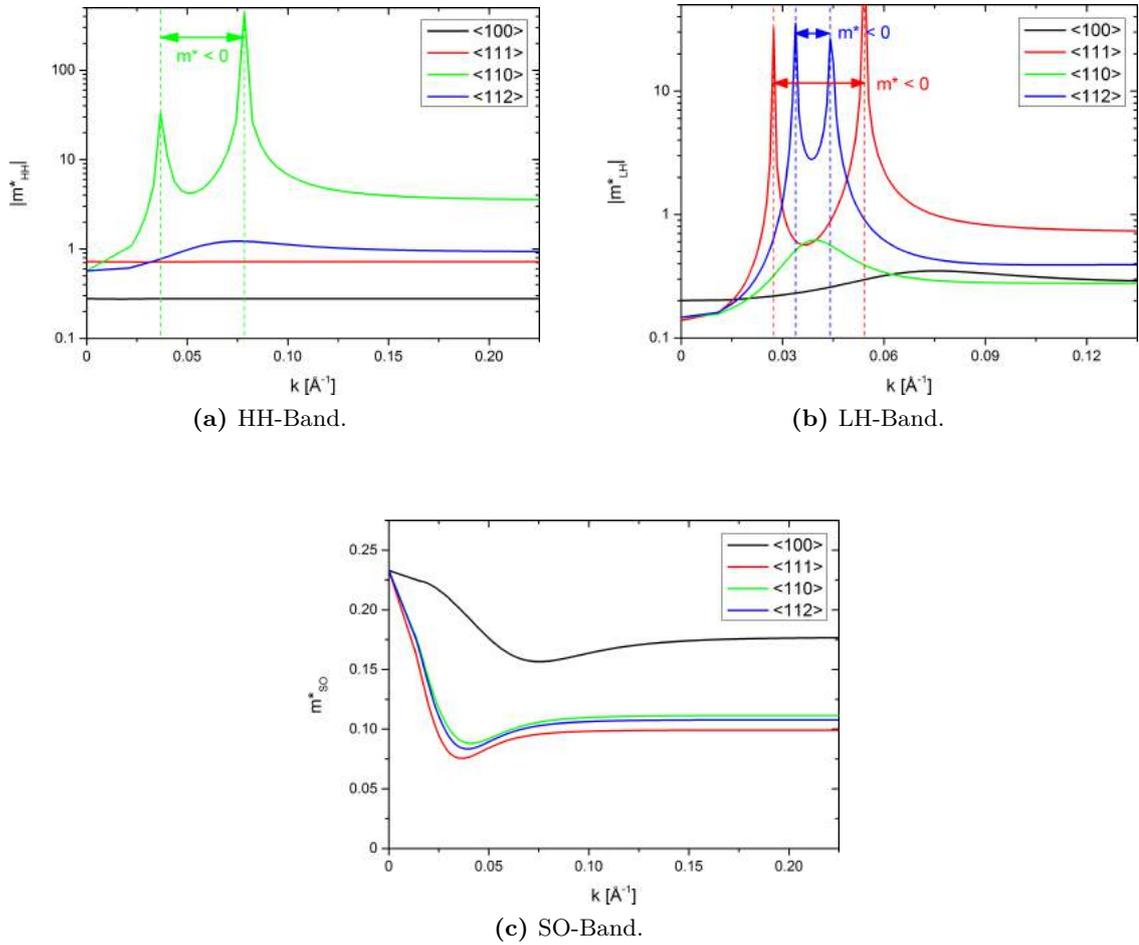


Abbildung 2.10: Effektive Massen bzw. ihre Beträge der Valenzbänder in den Si-Hauptrichtungen. Das HH-Band hat aufgrund der Hybridisierung mit dem SO-Band in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen einen Zwischenbereich mit negativer effektiver Masse, d. h. seine Bandkrümmung ist dort elektronenartig. Gleiches gilt für das LH-Band in den $\langle 111 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen. Die Kurven wurden nach $k = 0$ linear zu den in Tab. D.3 angegebenen Werten extrapoliert.

Band lediglich im Bereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ parabolisch ist. Bei $k = 0$ ist $m_{\text{HH}}^* \approx 0,569$ und für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ $m_{\text{HH}}^* \approx 3,5$. Im elektronenartigen Bereich erreicht $|m_{\text{HH}}^*|$ einen minimalen Wert von 4,17.

Die effektiven Massen des LH-Bandes sind in Abb. 2.10 (b) gezeigt. Die SOC bewirkt, dass sich in allen vier Richtungen die effektive Masse nicht konstant verhält. In den $\langle 100 \rangle$ - und $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ist der Verlauf ähnlich wie in den $\langle 112 \rangle$ -Richtungen des HH-Bandes. Für die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ist bei $k = 0$ $m_{\text{LH}}^* \approx 0,201$, das Maximum bei $k \approx 0,075 \text{ \AA}^{-1}$ hat einen Wert von $m_{\text{LH}}^* \approx 0,35$ und für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ erreicht m_{LH}^* einen Wert von ungefähr 0,277, was dem Wert des HH-Bandes für große Werte von k entspricht. In den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ist der Wert von m_{LH}^* bei $k = 0$ mit 0,147 etwas kleiner als in den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen, dafür ist das

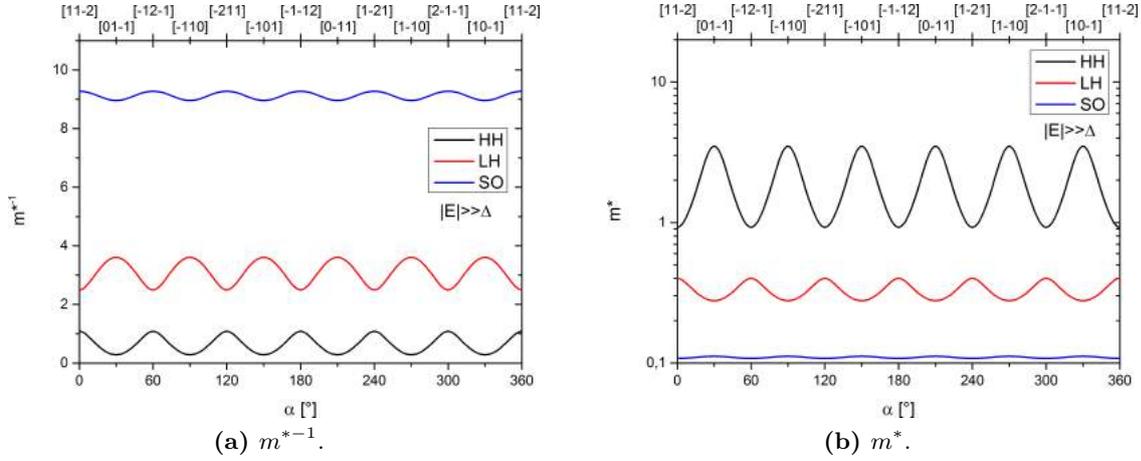


Abbildung 2.11: Inverse effektive Massen und effektive Massen in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene für $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$.

Maximum bei $k \approx 0,04 \text{ \AA}^{-1}$ mit $m_{\text{LH}}^* \approx 0,62$ höher. Der Grenzwert für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ ist der gleiche wie für die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen. Für die $\langle 111 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen ist wiederum der Betrag von m_{LH}^* gezeigt. In beiden Richtungen resultiert aus der SOC wie in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen des HH-Bandes ein Zwischenbereich elektronenartiger Dispersion mit $m_{\text{LH}}^* < 0$. Für die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen liegen die Polstellen bei $k \approx 0,027 \text{ \AA}^{-1}$ und $k \approx 0,054 \text{ \AA}^{-1}$, wohingegen sie für die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen bei $k \approx 0,034 \text{ \AA}^{-1}$ und $k \approx 0,044 \text{ \AA}^{-1}$ liegen. Die Beträge der effektiven Massen erreichen in diesem zwischen den Polstellen liegenden Bereich minimale Werte von 0,566 bzw. 2,782 für die $\langle 111 \rangle$ - bzw. $\langle 112 \rangle$ -Richtungen. Bei $k = 0$ zeigen die Dispersionen effektive Massen von 0,139 für die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen und 0,147 für die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen (gleicher Wert in den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen). Die Grenzwerte für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ sind für die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen $m_{\text{LH}}^* \approx 0,718$ und für die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen $m_{\text{LH}}^* \approx 0,4$. Damit nimmt die effektive Masse des LH-Bandes in den $\langle 111 \rangle$ -Richtungen für große Werte von k den gleichen Wert an, wie die effektive Masse des HH-Bandes.

Das Verhalten der effektiven Massen des SO-Bandes m_{SO}^* ist in Abb. 2.10 (c) gezeigt. Im Vergleich zu (a) und (b) ist die lineare Skalierung zu beachten. Bei $k = 0$ gilt für alle vier Richtungen $m_{\text{SO}}^* \approx 0,233$, das Band ist hier demnach isotrop. Diese Isotropie ist für $k > 0$ jedoch nicht mehr gegeben. Die Kurven fallen für $k > 0$ in allen Richtungen bis zu globalen Minima. Anschließend steigen die effektiven Massen wieder bis zu ihren jeweiligen Grenzwerten an. Das Minimum in den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen findet sich bei $k \approx 0,075 \text{ \AA}^{-1}$ mit einem Wert von $m_{\text{SO}}^* \approx 0,157$, der Grenzwert für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ beträgt $m_{\text{SO}}^* \approx 0,177$. Diese Kurve unterscheidet sich im Vergleich deutlich zu den anderen Richtungen, die sehr ähnliche Verläufe haben. Die Minima der $\langle 111 \rangle$ -, $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen finden sich bei $k \approx 0,036 \text{ \AA}^{-1}$, $k \approx 0,041 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $k \approx 0,039 \text{ \AA}^{-1}$. Der Wert der effektiven Masse im Minimum ist mit $m_{\text{SO}}^* \approx 0,076$ für die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen am niedrigsten und mit $m_{\text{SO}}^* \approx 0,088$ für die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen am höchsten innerhalb dieses Trios. Die $\langle 112 \rangle$ -Richtungen haben im Minimum eine effektive Masse von $m_{\text{SO}}^* \approx 0,083$. Die Grenzwerte für $k \gg 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ betragen für die $\langle 111 \rangle$ -, $\langle 110 \rangle$ - und $\langle 112 \rangle$ -Richtungen $m_{\text{SO}}^* \approx 0,099$, $m_{\text{SO}}^* \approx 0,112$ bzw. $m_{\text{SO}}^* \approx 0,108$. Insgesamt lässt sich für das SO-Band sagen, dass es aufgrund der vergleichsweise geringen

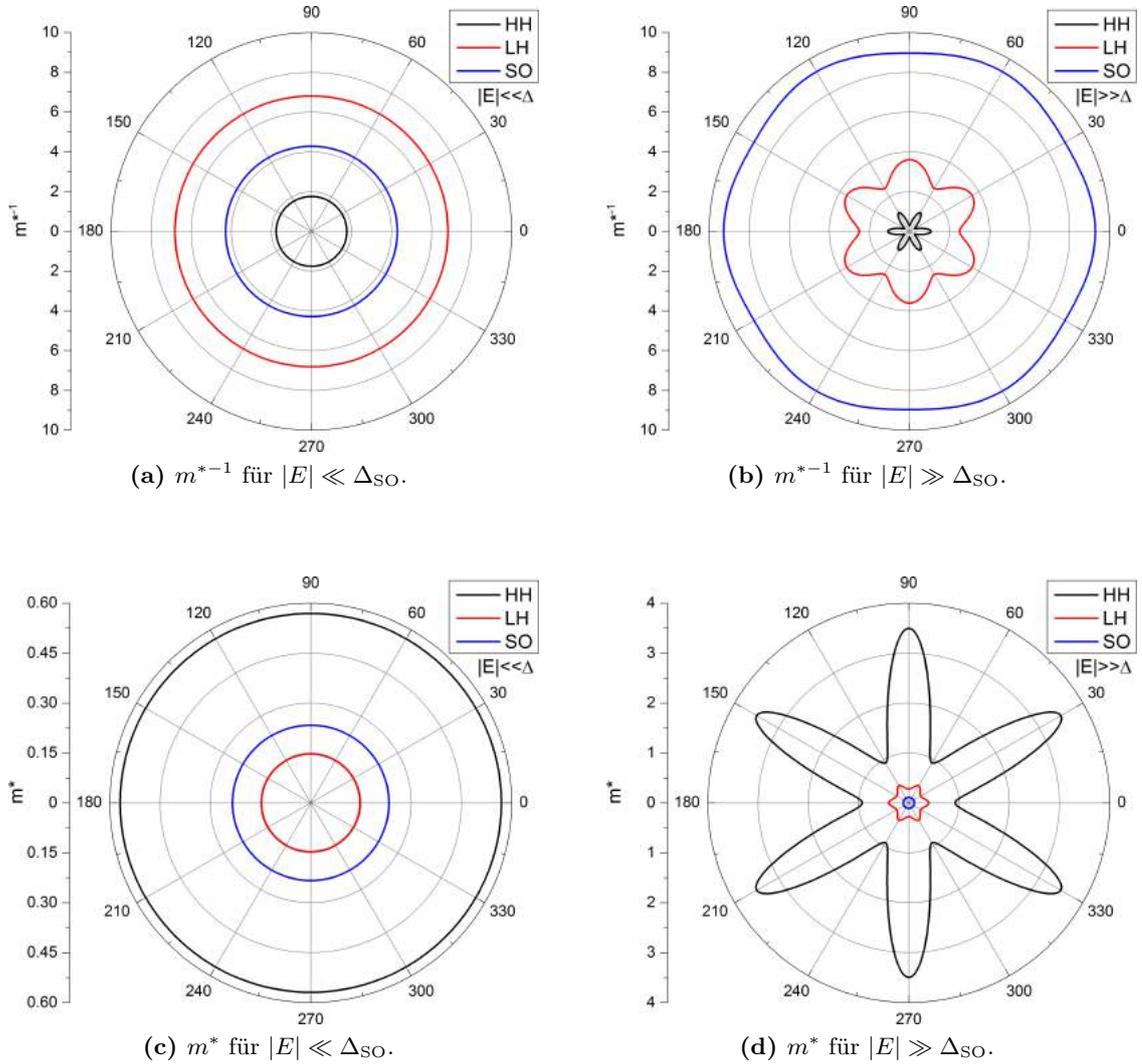


Abbildung 2.12: Polardiagramme der inversen effektiven Massen und der effektiven Massen in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene. Die Winkelangaben in Grad entsprechen dem Winkel α .

Variation seiner effektiven Masse in den vier gezeigten Richtungen die geringste Anisotropie aufweist. Dies ist zum einen auf seinen energetischen Offset E_0 und zum anderen auf seine Quantenzahlen $|j = 1/2, m_j = \pm 1/2\rangle$ (gültig für $\mathbf{k} = 0$) zurückzuführen, da die anderen beiden Bänder mit $j = 3/2$ nur über die SOC mit dem SO-Band wechselwirken können.

Zu guter Letzt sollen noch die Winkelabhängigkeiten der effektiven Massen der Valenzbänder in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene nach Gl. (D.50) für $|E| \ll \Delta_{SO}$ und nach Gl. (D.52) für $|E| \gg \Delta_{SO}$ diskutiert werden, die als Lösungen von Gl. (D.49) bzw. Gl. (D.51) analytisch darstellbar sind. Die Richtungen mit dem Winkel α ergeben sich als Linearkombination nach Gl. (D.47).

Für den Bereich $|E| \ll \Delta_{SO}$ geht aus Gl. (D.50) hervor, dass keinerlei Winkelabhängigkeit für die drei Valenzbänder vorhanden ist, d. h. dass die Bänder isotrop sind. Die effektive

Masse des HH-Bandes beträgt $m_{\text{HH}}^* \approx 0,569$, die des LH-Bandes $m_{\text{LH}}^* \approx 0,147$ und die des SO-Bandes $m_{\text{SO}}^* \approx 0,233$ (s. Tab. D.3 u. Abb. 2.12 (a), (c)).

Im Bereich $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ ist die Symmetrie aufgrund der SOC jedoch gebrochen, es liegt eine Anisotropie vor. Damit variieren die Werte der effektiven Massen abhängig vom Winkel α . Dies ist anhand der Abbildungen 2.11 und 2.12 (b), (d) deutlich erkennbar. Durch die Symmetrie des Silizium-Kristalls ergibt sich eine Sechszähligkeit der Kurvenverläufe, welche besonders eindrucksvoll in den Polardiagrammen von Abb. 2.12 zum Vorschein kommt. Es ergeben sich zudem aus Gl. (D.52) für $\alpha = n \cdot 60^\circ$ und für $\alpha = n \cdot 60^\circ + 30^\circ$ ($n \in \mathbb{N}_0$) die Spezialfälle der $\langle 112 \rangle$ - bzw. der $\langle 110 \rangle$ -Richtungen. Anhand von Abb. 2.12 (b) zeigt sich, dass die inversen effektiven Massen des HH- und des SO-Bandes für $\alpha = n \cdot 60^\circ$ maximal und die des LH-Bandes minimal sind. Entsprechend umgekehrt sind die inversen effektiven Massen des HH- und des SO-Bandes für $\alpha = n \cdot 60^\circ + 30^\circ$ minimal und die des LH-Bandes maximal. Dass die Anisotropie des HH-Bandes im Vergleich besonders stark ist, zeigt Abb. 2.12 (d): Die Kurve verläuft sternförmig mit abgerundeten Maxima bei $\alpha = n \cdot 60^\circ + 30^\circ$ mit Werten von $m_{\text{HH}}^* \approx 3,5$ und spitzeren Minima bei $\alpha = n \cdot 60^\circ$ mit Werten von $m_{\text{HH}}^* \approx 0,924$. Die Kurve des LH-Bandes ist ebenfalls sternförmig, jedoch um 30° gedreht, deren Maxima bzw. Minima Werte von $m_{\text{LH}}^* \approx 0,4$ bzw. $m_{\text{LH}}^* \approx 0,277$ haben. Die Anisotropie des SO-Bandes ist in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene äußerst gering. In Abb. 2.12 (d) lässt sie sich kaum noch ausmachen, da die effektive Masse für $\alpha = n \cdot 60^\circ$ mit $m_{\text{SO}}^* \approx 0,112$ und für $\alpha = n \cdot 60^\circ + 30^\circ$ mit $m_{\text{SO}}^* \approx 0,108$ im Vergleich zu den HH- und LH-Bändern sehr gering ist. Die relative Änderung der effektiven Masse von etwa 3,6% ist jedoch im Polardiagramm der inversen effektiven Masse (Abb. 2.12 (b)) gut sichtbar in Form eines Hexagons mit abgerundeten Ecken und leicht nach innen gezogenen Seiten.

2.7. Dreieckspotential

An metallisierten Oberflächen von n -dotierten Halbleitern bildet sich durch den Kontakt von Metall und Halbleiter eine Schottky-Barriere aus, wodurch sich die Oberflächenzustände energetisch verschieben. Da das Fermi-Niveau am Metall-Halbleiter-Kontakt die gleiche Energie besitzt wie im Volumen des Halbleiters, verbiegen sich die Bänder des Halbleiters in der durch den Kontakt entstandenen oberflächennahen Raumladungszone (Verarmungszone für Elektronen, Inversionsschicht für Löcher) nach oben. Diese Raumladungszone kann mehrere Hundert Nanometer in den Halbleiter hinein reichen.

Das VBM³⁹ bildet dabei in erster Näherung in der Raumladungszone nahe der Oberfläche für die Löcher einen dreieckigen Potentialtopf aus (s. Abb. 2.13). Mathematisch wird das Dreieckspotential durch eine unendlich hohe Potentialstufe an der Oberfläche und einen konstanten Potentialgradienten $\partial_z V = q\mathcal{E}$ im Volumen approximiert, wobei \mathcal{E} das elektrische Feld in der Raumladungszone ist. Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + \frac{q\mathcal{E}}{\varepsilon_r} z \Psi(z) = E_n \Psi(z) \quad (2.114)$$

des Dreieckspotentials für Tiefen $z > 0$ unter der Oberfläche (mit eingeschlossenem Teilchen der Masse m_z und der relativen Permittivität ε_r) lässt sich mittels der Airy-Funktion

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt \quad (2.115)$$

³⁹ Valenzbandmaximum

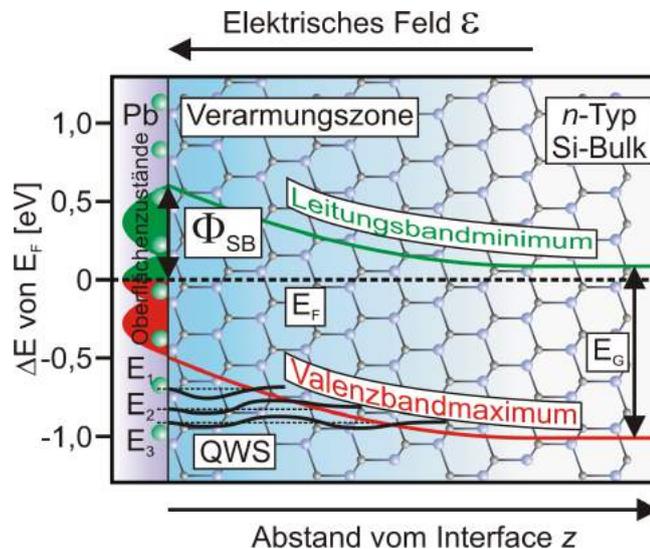


Abbildung 2.13: Schematische Darstellung der Schottky-Barriere des Kontaktes von Pb mit *n*-Si: Durch den Metall-Halbleiter-Kontakt entsteht eine Verarmungszone (für Elektronen) im Si-Bulk nahe der Oberfläche, wodurch ein elektrisches Feld \mathcal{E} entsteht. Der Ausgleich der Fermi-Niveaus der Oberflächenzustände und im Volumen führt zu einer Bandverbiegung mit der Schottky-Barriere Φ_{SB} an der Oberfläche. Im Valenzband bilden sich innerhalb des Dreieckpotentials QWSs aus. Die ersten drei Wellenfunktionen mit Eigenenergien E_n sind ebenfalls schematisch dargestellt.

lösen [199, 200]. Die Eigenenergien E_n der Wellenfunktion

$$\Psi(z) = A \cdot \text{Ai} \left[\left(\frac{2m_z \varepsilon_r^2}{\hbar^2 q^2 \mathcal{E}^2} \right)^{1/3} \cdot \left(\frac{q\mathcal{E}}{\varepsilon_r} z - E_n \right) \right] \quad (2.116)$$

mit der Normalisierungskonstanten A ergeben sich dabei zu

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2 q^2 \mathcal{E}^2}{2m_z \varepsilon_r^2} \right)^{1/3} \cdot a_n + E_0, \quad (2.117)$$

mit $n \in \mathbb{N}_{>0}$, wobei

$$a_n \approx \left[\frac{3\pi}{2} (n - 1/4) \right]^{2/3} \quad (2.118)$$

die n -te Nullstelle der Airy-Funktion ist [199, 200] und E_0 ein Energieoffset.

Die Tiefe d des Dreieckspotentials lässt sich wie bei einer Schottky-Barriere mit der Dotierkonzentration N_D des Substrats im Volumen und der Stärke der Bandverbiegung an der Oberfläche $V_s \approx (E_F - E_{VBM})/e$ durch

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0 V_s}{e N_D}} \quad (2.119)$$

ermitteln [200].

3. Experimentelle Methoden und Apparaturen

In diesem Kapitel werden die für die experimentellen Untersuchungen dieser Arbeit verwendeten experimentellen Methoden und Apparaturen vorgestellt. STM- und optische LEED-Messungen zur Strukturbestimmung wurden an einer UHV⁴⁰-Kammer in Hannover durchgeführt (s. Kap.3.1). Details zum Aufbau sind in [201–203] zu finden. Ergänzende Messungen zur Leitfähigkeit und Magnetotransport, sowie strukturelle Untersuchungen mittels SPA-LEED wurden an einer weiteren UHV-Kammer in Hannover durchgeführt (s. Kap. 3.2). Die Untersuchungen der elektronischen Bandstruktur wurden schließlich am Synchrotron SLS⁴¹ des PSI⁴² in der Schweiz durchgeführt. Die COPHEE-Endstation an der dortigen SIS⁴³-Beamline erlaubt die Charakterisierung der Oberflächenzustände mittels Spin-integrierter und -aufgelöster ARPES-Messungen (s. Kap. 3.3).

3.1. Strukturanalyse mit STM und optischen LEED

Die zur Bestimmung der atomaren Oberflächenstruktur der untersuchten Proben eingesetzte UHV-Kammer besteht im Kern aus zwei durch ein Plattenventil voneinander getrennten Teilkammern. Der als Präparationskammer genutzte Teil mit Verdampfern, Sputter Gun, XPS⁴⁴-, UPS⁴⁵- und Auger-System und optischen LEED (s. Abb. 3.1(a)) hat einen Basisdruck von etwa $p \approx 2 \cdot 10^{-10}$ mbar, bei dem die Proben auf einem Manipulator durch DC-Heizung ausgegast und anschließend präpariert wurden. Nach Prüfung der langreichweitigen Ordnung mittels LEED wurden die Proben in die *UHV 700*-Hauptkammer transferiert (Basisdruck $p < 1 \cdot 10^{-10}$ mbar). In dieser befindet sich neben weiteren Verdampfern ein STM der Firma RHK Technology (s. Abb. 3.1(b)), das bei variablen Temperaturen (25-500 K, Kühlung mit LN₂⁴⁶ oder LHe⁴⁷, Heizen mit DC-Strom) betrieben werden kann [204]. Temperaturen über 300°C wurden mit einem Impac IGA 140-Pyrometer gemessen. Weitere Details zum Aufbau sind in [201] zu finden. Die Probengröße beträgt typischerweise $8 \times 2 \text{ mm}^2$. Die Apparatur wurde für Untersuchungen der Monolagenstrukturen von Pb/Si(111) und Pb/Si(557) genutzt (s. Kap. 5.1 u. 6.1).

3.1.1. Beugung niederenergetischer Elektronen

Mit einem optischen LEED kann die langreichweitige Ordnung einer Oberfläche im UHV untersucht werden. Dabei werden aus einem Filament ausgelöste niederenergetische Elektronen mit Energien von $E \approx 20 - 500 \text{ eV}$ an der Oberfläche gebeugt. Von den rückgebeugten

⁴⁰ Ultrahochvakuum

⁴¹ Swiss Light Source

⁴² Paul Scherrer Instituts

⁴³ Surface and Interface Spectroscopy

⁴⁴ X-Ray Photoelectron Spectroscopy

⁴⁵ Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy

⁴⁶ Liquid Nitrogen

⁴⁷ Liquid Helium

Elektronen werden anschließend mittels feinmaschiger Gitter inelastisch gebeugte Elektronen ausselektiert und lediglich die elastisch gebeugten Elektronen mit einer Hochspannung von 5 – 6 kV auf einen phosphoreszierenden Leuchtschirm beschleunigt. Die von den P-Atomen emittierte elektromagnetische Strahlung wird schließlich mit einer Digitalkamera (Canon EOS1000D) im abgedunkelten Raum fotografiert.

Bei der Beugung niederenergetischer Elektronen wird ausgenutzt, dass die de Broglie-Wellenlänge der Elektronen

$$\lambda_{\text{el}} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \quad (3.1)$$

bei niedrigen Energien im Bereich von $E = 20 - 300$ eV mit wenigen Ångström im Bereich der atomaren Strukturgrößen an Oberflächen liegt [205, 206]. Werden Elektronenstrahlen an einer atomaren Stufe der Höhe d gebeugt, interferieren die beiden Strahlen konstruktiv miteinander, wenn sie die Bragg-Beziehung

$$S \cdot \lambda_{\text{el}} = 2d \cdot \cos \vartheta \quad (3.2)$$

mit einer ganzzahligen Streuphase S erfüllen, wobei ϑ der Winkel relativ zur Oberflächennormalen ist [205, 206]. Für halbzahlige Werte von S interferieren die beiden Strahlen hingegen destruktiv (s. Abb. 3.2 (a)).

Damit Beugungsreflexe der Elektronen auf dem Leuchtschirm detektiert werden können, muss zudem die Laue-Bedingung

$$\mathbf{k}_{i,\parallel} - \mathbf{k}_{f,\parallel} = \mathbf{G} \quad (3.3)$$

erfüllt sein. Hierbei sind $\mathbf{k}_{i,\parallel}$ und $\mathbf{k}_{f,\parallel}$ die Anteile der Wellenvektoren der einfallenden bzw. gebeugten Elektronen parallel zur Oberfläche mit Gesamtbetrag $k_i = 2\pi/\lambda_{\text{el}}$ und \mathbf{G} ein reziproker Gittervektor der Oberfläche. Ist Gl. (3.3) erfüllt, interferieren die Elektronen an der Oberfläche konstruktiv mit der lateralen Gitterstruktur. Da senkrecht zur Oberfläche keine periodische Struktur gegeben ist, entstehen die sog. Beugungsstangen (s. Abb. 3.2 (b)).

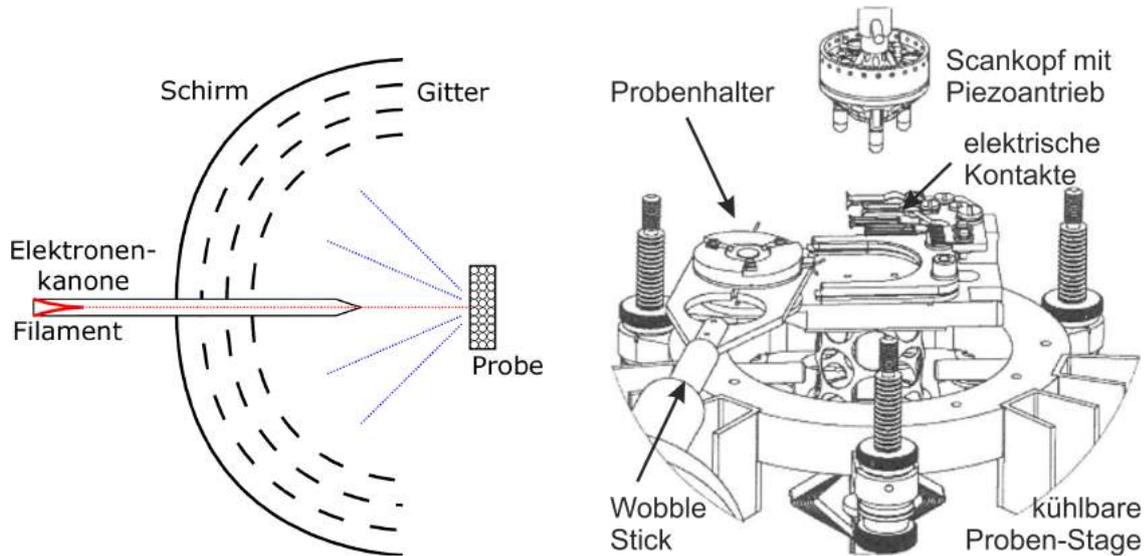
3.1.2. Rastertunnelmikroskopie

Die Rastertunnelmikroskopie (STM) basiert auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt zwischen zwei (halb)leitenden Materialien. Elektronen tunneln dabei zwischen einer metallischen Spitze und der Oberfläche der zu untersuchenden Probe (s. Abb. 3.3). In der Spitze befindliche Elektronen können dabei nur in unbesetzte Zustände der Probe tunneln (positive Tunnelspannungen V) bzw. umgekehrt Elektronen aus besetzten Zuständen der Probe in unbesetzte Zustände der Spitze (negative Tunnelspannungen V). Die theoretische Grundlage des Tunneleffekts beim STM stellten BARDEEN [207], sowie TERSOFF und HAMANN [208, 209] auf.

Der Tunnelstrom I hängt dabei in erster Näherung linear von der Tunnelwahrscheinlichkeit $T(E, V)$ für elastische Tunnelprozesse zwischen Zuständen $|\Psi_\mu\rangle$ und $|\Psi_\nu\rangle$ mit Energien E_μ bzw. E_ν ab. Befinden sich Probe (Austrittsarbeit Φ_P) und Spitze (Austrittsarbeit Φ_S) in einer Distanz z voneinander, kann ein Elektron mit der Energie E mit der Wahrscheinlichkeit

$$T(E, V) = \frac{4\pi^2}{h} |M_{\mu\nu}|^2 \cdot \delta(E_\mu - E_\nu) \approx 16 \frac{E(\Phi_A - E)}{\Phi_A^2} \cdot e^{-2\kappa z} \quad (3.4)$$

durch die Barriere tunneln [210], wobei $\delta(x)$ die Delta-Funktion ist. $M_{\mu\nu}$ ist das Tunnelmatrixelement zwischen den beteiligten Zuständen, $\Phi_A = (\Phi_S + \Phi_P)/2$ die mittlere Austrittsarbeit



(a) LEED: In der Elektronenkanone werden Elektronen aus einem Filament ausgelöst, mit 20-500 V beschleunigt und auf die Probe fokussiert. Rückgebeugte Elektronen werden durch die Gitteroptik selektiert und treffen nach Beschleunigung mit einer Hochspannung von typischerweise 5 – 6 kV auf einen Phosphorschirm, wo sie die Atome zum leuchten anregen; nach [211].

(b) RHK-STM: Mit einem *Wobble Stick* werden die in einem Probenhalter montierten Proben vom Manipulator auf die kühlbare Proben-Stage transferiert. Anschließend kann der Scankopf mit Piezoantrieb auf den Probenhalter abgesenkt werden. Die metallische Spitze befindet sich ebenfalls im Scankopf. Elektrische Kontakte zum Heizen der Probe und zur Messung der Temperatur befinden sich rückseitig an der Stage; angepasst aus [204].

Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau von LEED und STM.

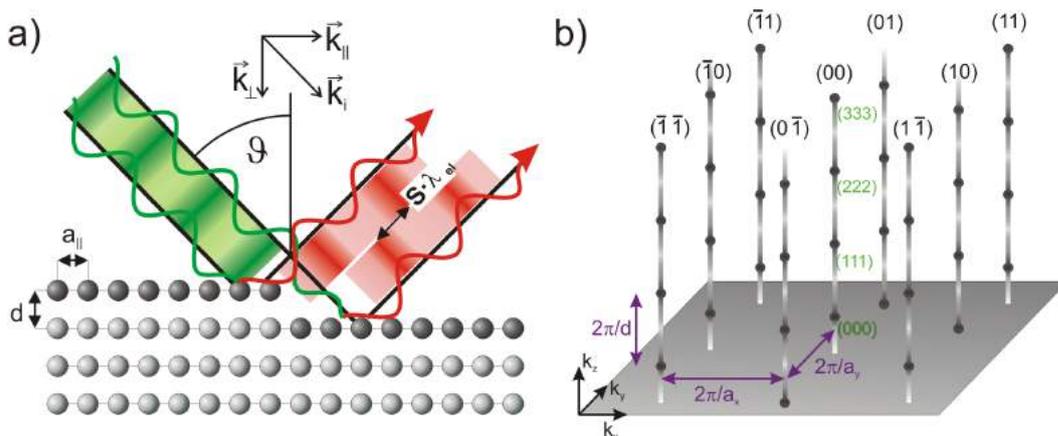
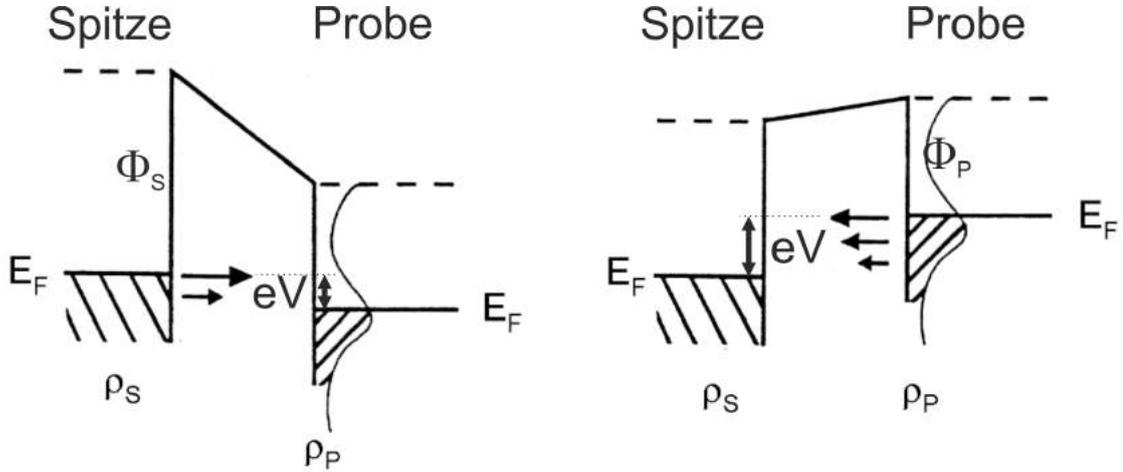


Abbildung 3.2: Elektronenbeugung an Oberflächen: (a) Der Gangunterschied zweier Elektronenwellen nach der Beugung an einer atomaren Stufe beträgt $S \cdot \lambda_{el}$. (b) Die Intensität der Beugungsstangen senkrecht zur Oberfläche (mit Bragg-Punkten) variiert abhängig von der Streuphase S ; aus [212].



(a) Positive Tunnelspannung V : Tunneln in unbesetzte Zustände der Probe.

(b) Negative Tunnelspannung V : Tunneln aus besetzten Zuständen der Probe.

Abbildung 3.3: Tunnelprozess im STM: Liegt eine externe Spannung V zwischen Probe und STM-Spitze an, verschieben sich die Fermi-Niveaus um eV gegeneinander. Durch die Tunnelbarriere der Breite z fließt dann ein Tunnelstrom I , abhängig von den lokalen Zustandsdichten ρ_P und ρ_S der Probe bzw. der Spitze. ρ_S wird als konstant betrachtet.

und

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_e\Phi_A}{\hbar^2} + \frac{eV}{2} - E} \quad (3.5)$$

die inverse Abklinglänge. Der Tunnelstrom nimmt somit exponentiell mit zunehmender Distanz zwischen Spitze und Probe ab.

Für kleine Tunnelspannungen V und Temperaturen T , kann der Tunnelstrom mit der lokalen Zustandsdichte ρ_P der Probe schließlich durch

$$I(V) \propto \int_0^{eV} \rho_P(E) \cdot T(E, V) dE \quad (3.6)$$

ausgedrückt werden [210]. Dabei wird die lokale Zustandsdichte ρ_S der Spitze als konstant angenommen (s. a. Abb. 3.3) und die Spitze durch ein einzelnes metallisches Atom approximiert.

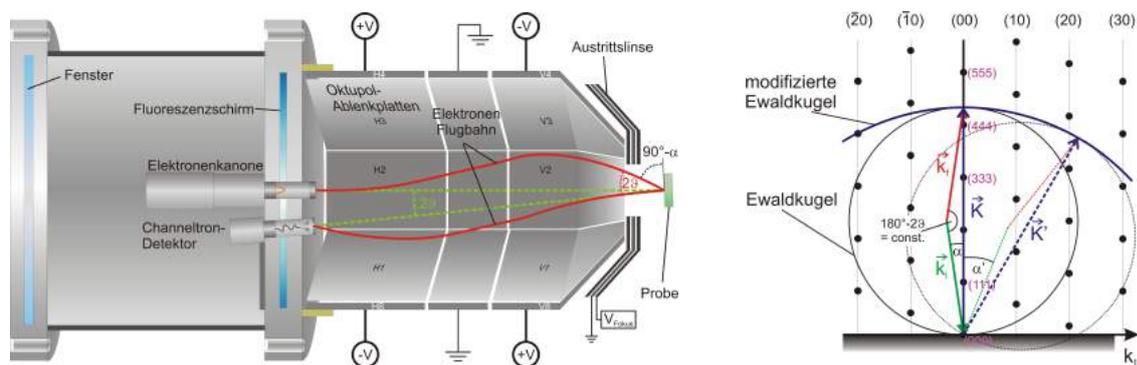
3.2. SPA-LEED-, Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen

In Zusammenarbeit mit PHILIPP KRÖGER und HAIYUE LIU wurden Messungen der Leitfähigkeit und des Magnetotransports an Monolagenstrukturen von Pb/Si(111) durchgeführt (s. Kap. 5.3). In diesem Zuge entstanden auch SPA-LEED-Bilder der selben Strukturen (s. Kap. 5.1). Die Messungen wurden an einer weiteren UHV-Kammer in Hannover durchgeführt. Details zum Aufbau der Apparatur sind z. B. in [212, 213] zu finden.

Entscheidend für die elektrische Charakterisierung der Probenoberflächen ist die modifizierte Van-der-Pauw-Geometrie der $15 \times 15 \text{ mm}^2$ großen Proben [212, 213]. Dazu wurden mit einem Laser insgesamt vier 5 mm lange Schlitze von der Mitte der Kanten zur Mitte der Probe hin geschnitten (die Proben wurden mit einem Resist geschützt). Dank der zusätzlich aufgebracht acht TiSi_2 -Kontakte kann die elektrischen Leitfähigkeit und die Hall-Spannung der Probe besonders genau bestimmt werden. Der über die Probe geleitete elektrische Strom kann mit Hilfe der zusätzlichen Kontakte geometrisch angepasst werden, um die Empfindlichkeit bezüglich der Anisotropie zu maximieren, so dass der Strom nur entweder in die eine oder die andere Richtung fließt. Die Probe kann im UHV (Basisdruck $p < 1 \cdot 10^{-10}$ mbar) bis etwa $T = 10 \text{ K}$ mittels LHe gekühlt werden. Ein externer, supraleitender Elektromagnet (Spectromag SM 400, Oxford) kann überdies *in-situ* ein magnetisches Feld B von bis zu 4 T in der Probe für Magnetotransportmessungen induzieren.

3.2.1. Reflexprofilanalyse mit hochauflösender niederenergetischer Elektronenbeugung

LEED-Experimente mit hoher Auflösung im reziproken Raum (\mathbf{K} -Raum) können zur Reflexprofilanalyse genutzt werden. Diese gibt mannigfaltige Auskünfte über die Morphologie der untersuchten Oberfläche. Da die Verbreiterung der Beugungsreflexe durch den phosphoreszierenden Schirm im optischen LEED in den meisten Fällen kaum quantitative Aussagen zulässt, wurde in den 1980er Jahren von der Arbeitsgruppe HENZLER die Methodik weiterentwickelt [214–216]. Das sog. SPA-LEED besitzt anstelle des phosphoreszierenden Schirms einen ortsfesten Channeltron-Detektor, der $2\vartheta = 2 \times 4 - 7^\circ$ von der Mittelachse angeordnet ist (s. Abb. 3.4 (a)). Um dennoch den gesamten auf der (modifizierten) Ewald-Kugel (s. Abb. 3.4 (b)) liegenden Phasenraum detektieren zu können, werden die Elektronen im SPA-LEED durch eine Oktupol-Ablenkeinheit elektrostatisch auf ihrer Flugbahn von der Elektronenkanone zur Probe und von dort zum Channeltron-Detektor abgelenkt. An den vorderen und hinteren Oktupol-Platten liegen für diesen Zweck paarweise gegensätzlich gepolte Spannungen $\pm V$ an.



(a) Aufbau des Instruments mit Elektronenkanone, Oktupol-Ablenkeinheit und Channeltron-Detektor.

(b) Ewald-Konstruktion im SPA-LEED.

Abbildung 3.4: Aufbau und Ewald-Konstruktion eines SPA-LEEDs: Da der Winkel 2ϑ zwischen ein- und ausfallendem Elektronenstrahl im SPA-LEED konstant ist, ist die modifizierte Ewald-Kugel etwa doppelt so groß wie die Ewald-Kugel im optischen LEED; aus [212].

Durch sukzessive Variation der Ablenkspannungen lässt sich die Ewald-Kugel bei gegebener Elektronenenergie $E = 10 - 500$ eV abrastern. Mit einer elektrostatischen Linse in der Elektronenkanone und der Fokuslinse kann der Elektronenstrahl auf der Probe und im Detektor zudem fokussiert werden. Im Channeltron lösen die eindringenden Elektronen durch Kollisionen mit den auf Hochspannung von 2-3 kV liegenden Innenwänden einen signalverstärkenden Lawineneffekt aus, sodass auch wenige Elektronen detektiert werden können.

Eine umfassende Übersicht über die Beugungstheorie niederenergetischer Elektronen an Oberflächen findet sich bspw. in [205, 206]. Im Rahmen dieser Arbeit beschränkte sich die Datenanalyse hauptsächlich auf die mittleren Domänen- und Terrassengrößen Γ der auf Si(111) gewachsenen Pb-Monolagenstrukturen. Diese Informationen lassen sich mittels einer $H(S)$ -Analyse der vollen Halbwertsbreite FWHM⁴⁸ des (0,0)-Reflexes in Abhängigkeit der Streuphase S ermitteln [205, 217]. Bei einer geometrische Verteilung der Terrassenbreiten kann das Profil des (0,0)-Reflexes mittels einer Summe aus Gauß- und Lorentz-Funktion beschrieben werden. Die Halbwertsbreite H der Lorentz-Funktion oszilliert als Funktion der Streuphase S in einem Zweilevelsystem nach [205, 206] mit

$$H(S) = \frac{4}{\Gamma} \cdot [1 - \cos(2\pi S)] . \quad (3.7)$$

3.2.2. Elektrische Leitfähigkeit

Das klassische Modell der Theorie der elektrischen Leitfähigkeit wurde von DRUDE entwickelt [218]. Unter der Annahme, dass die Leitungselektronen eines Metalls ein Gas aus Teilchen bilden, die zwischen Stößen untereinander oder mit den positiv geladenen Ionenrümpfen der Atome nicht wechselwirken, werden sie in Anwesenheit eines elektrischen Feldes \mathcal{E} in Feldrichtung beschleunigt und durch Stoßprozesse (Stoßzeit τ) abgebremst. Sie driften daher mit der Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}_D = -\frac{e\tau}{m_e} \cdot \mathcal{E} = -\mu\mathcal{E} \quad (3.8)$$

in Feldrichtung. Dabei ist

$$\mu = \frac{e\tau}{m_e} \quad (3.9)$$

die Beweglichkeit der Ladungsträger. Die Stromdichte \mathbf{j} ergibt sich mit der Elektronenkonzentration n der freien Ladungsträger in Richtung des elektrischen Feldes damit zu

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_D = en\mu \cdot \mathcal{E} = \frac{e^2\tau n}{m_e} \cdot \mathcal{E} . \quad (3.10)$$

Damit folgt für die elektrische Leitfähigkeit

$$\sigma = \left| \frac{\mathbf{j}}{\mathcal{E}} \right| = \frac{e^2\tau n}{m_e} . \quad (3.11)$$

Da sich Elektronen in einem Festkörper jedoch nicht völlig frei sondern in (parabolisch angenäherten) Bändern bewegen, muss die Masse in Gl. (3.11) durch die effektive Masse m^* aus Gl. (2.112) ersetzt werden. Ferner muss die Relaxationszeit der Elektronen am Fermi-Niveau betrachtet werden, sodass anstelle von Gl. (3.11)

$$\sigma \cong \frac{e^2\tau(E_F)n}{m^*} \quad (3.12)$$

⁴⁸ Full Width at Half Maximum

gilt.

Die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit von Metallen wird durch die Streuung ihrer Elektronen bestimmt. Während die Streuung der Elektronen an Störstellen τ_{St} temperaturunabhängig ist, hängt die Streuung an Phononen, d. h. an den Quasiteilchen der Gitterschwingungen, von der Temperatur ab. Oberhalb der Debye-Temperatur Θ_{D} gilt für die Streuzeit an Phononen $\tau_{\text{Ph}} \propto \Theta_{\text{D}}^2/T$, während bei niedrigeren Temperaturen weniger Phononen angeregt werden können und daher $\tau_{\text{Ph}} \propto (\Theta_{\text{D}}/T)^5$ gilt [213]. Der spezifische Widerstand $\varrho(T)$ ist der Kehrwert der elektrischen Leitfähigkeit σ und ergibt sich mittels der Matthiessen'sche Regel, nach der das inverse der Gesamtstreuzeit der Elektronen die Summe der inversen Einzelprozessstreuzeiten ist:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{St}}} + \frac{1}{\tau_{\text{Ph}}}. \quad (3.13)$$

Hinzu kommt auch noch die temperaturabhängige Elektron-Elektron-Streuung mit $\tau_{\text{ee}} \propto T^2$ [219], die hauptsächlich in Übergangs- und Alkalimetallen zu relevanten Beiträgen führt.

In Systemen, in der der Spin der Elektronen ebenfalls eine Rolle spielt, kommt als weiterer Beitrag die SOC hinzu. Die Matthiessen'sche Regel lässt sich dann nach der Art des jeweiligen Streuprozesses auch als

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{\text{SO}}} \quad (3.14)$$

schreiben, wobei τ_0 die elastische, τ_i die inelastische und τ_{SO} die Spin-Bahn-Streuzeit sind.

Zusätzlich können auch lokalisierte Elektronen durch thermische Aktivierung zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen (sog. Anderson-Lokalisierung [220]). Hierbei hüpfen die lokalisierten Elektronen von einem Lokalisierungszentrum zu einem anderen [221]. Nach MOTT und DAVIS [222] berechnet sich der Beitrag dieses Prozesses zur elektrischen Leitfähigkeit zu

$$\sigma(T) = \sigma_{\text{A}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{E_{\text{a}}}{k_{\text{B}}T} \right)^{1/(1+d)} \right], \quad (3.15)$$

wobei E_{a} die Aktivierungsenergie und d die Dimensionalität des Systems sind.

Weitere Details zur elektrischen Leitfähigkeit finden sich bspw. in [212, 213, 221].

3.2.3. Magnetotransport

Bewegen sich Elektronen mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} in einem Magnetfeld \mathbf{B} , wirkt auf sie die Lorentz-Kraft

$$\mathbf{F} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (3.16)$$

Diese zwingt die Elektronen auf eine Kreisbahn mit der sog. Zyklotronfrequenz

$$\omega_{\text{c}} = \frac{eB}{m_{\text{e}}} = \frac{\mu B}{\tau}, \quad (3.17)$$

wobei $\mu = \sigma/(ne)$ die Beweglichkeit der Elektronen (mit Dichte n) und τ ihre Streuzeit sind. Im Rahmen dieser klassischen Beschreibung ergibt sich die Änderung der elektrischen Leitfähigkeit im Magnetfeld zu

$$\Delta\sigma_{\text{kl}}(B) = - \frac{\sigma(0)}{1 + \frac{1}{\mu^2 B^2}}. \quad (3.18)$$

Eine quantitative Beschreibung der Magnetleitfähigkeit eines Quantensystems mit starker SOI wurde von HIKAMI erarbeitet [223]. Die Änderung des Magnetleitwerts $\Delta L(B) = L(B) - L(0)$ in einem Magnetfeld \mathbf{B}_\perp senkrecht zur Oberfläche inklusive der logarithmischen Korrekturterme aus [224] ist gegeben durch

$$\Delta L(B) = -\frac{G_0}{2\pi} \cdot \left[f\left(\frac{B_0 + B_{\text{SO}}}{B}\right) - \frac{3}{2}f\left(\frac{4/3 B_{\text{SO}} + B_i}{B}\right) + \frac{1}{2}f\left(\frac{B_i}{B}\right) \right] \quad (3.19 \text{ a})$$

mit

$$f(B_\nu/B) = \Psi(1/2 + B_\nu/B) - \ln(B_\nu/B), \quad (3.19 \text{ b})$$

wobei $\Psi(x)$ die Digamma-Funktion und $G_0 = e^2/(\pi h)$ das Leitfähigkeitsquantum sind. Die B_ν mit $\nu = 0, i, \text{SO}$ sind definiert als $B_\nu = \hbar \cdot d/(4ev_F^2 \tau_0 \tau_\nu)$. Damit können für eine gegebene Fermi-Geschwindigkeit v_F der Elektronen in einem d -dimensionalen System alle wesentlichen Streuparameter τ_0 , τ_i und τ_{SO} bestimmt werden.

Unter der Annahme, dass die inelastische Streuzeit wesentlich kleiner ist als die elastischen Streuzeiten τ_0 und τ_{SO} , kann die Änderung der Leitfähigkeit im Magnetfeld zu

$$\Delta\sigma(B) = \alpha G_0 \cdot f\left(\frac{\hbar}{4e^2 \lambda^2 B}\right) \quad (3.20)$$

vereinfacht werden, wobei λ die Kohärenzlänge ist [223]. Der Parameter α nimmt in Systemen mit starker SOC den Wert -0,5 pro Spin-Kanal an (WAL⁴⁹, niedrigere Leitfähigkeit durch destruktive Quanteninterferenz am Ursprung bei der Spin-Bahn-Streuung der Elektronen). In Systemen mit schwacher SOC nimmt α hingegen den Wert +1 pro Spin-Kanal an (WL⁵⁰, höhere Leitfähigkeit durch konstruktive Quanteninterferenz am Ursprung bei der Spin-Bahn-Streuung der Elektronen). Für weitere Details s. Ref. [212, 213, 221].

3.3. Spin- und winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an der COPHEE-Endstation der Swiss Light Source

Die elektronische Bandstruktur der Oberflächenzustände und von oberflächennahen QWSs von Pb/Si(111) und Pb/Si(557) wurde am Synchrotron SLS untersucht. Die COPHEE-Endstation der dortigen SIS-Beamline erlaubt sowohl Spin-integrierte als auch -aufgelöste Messungen mittels ARPES. Die Endstation besteht aus einer UHV-Kammer (Basisdruck $p \approx 1 \cdot 10^{-10}$ mbar), die neben dem ARPES-Experiment (s. Abb. 3.5) auch mit einem optischen LEED zur strukturellen Charakterisierung der Oberfläche der Proben ($10 \times 5 \text{ mm}^2$) ausgestattet ist und verfügt zudem über einen Schleusenport für Verdampfer. Proben können mit DC-Strom geheizt und mit LHe gekühlt werden. Die Probertemperatur wurde bei der Präparation mit dem Impac-Pyrometer der STM-Kammer in Hannover gemessen.

Alle ARPES-Experimente in dieser Arbeit wurden mit p -polarisiertem, monochromatischem Licht mit einer Photonenenergie von $h\nu = 24 \text{ eV}$ durchgeführt. Die p -Polarisation des Lichts bedeutet, dass in den Messungen die Schwingungsrichtung des einfallenden Lichts vom Synchrotron stets parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung von Si(111) bzw. Si(557) gewählt wurde. Die

⁴⁹ Weak Antilocalization

⁵⁰ Weak Localization

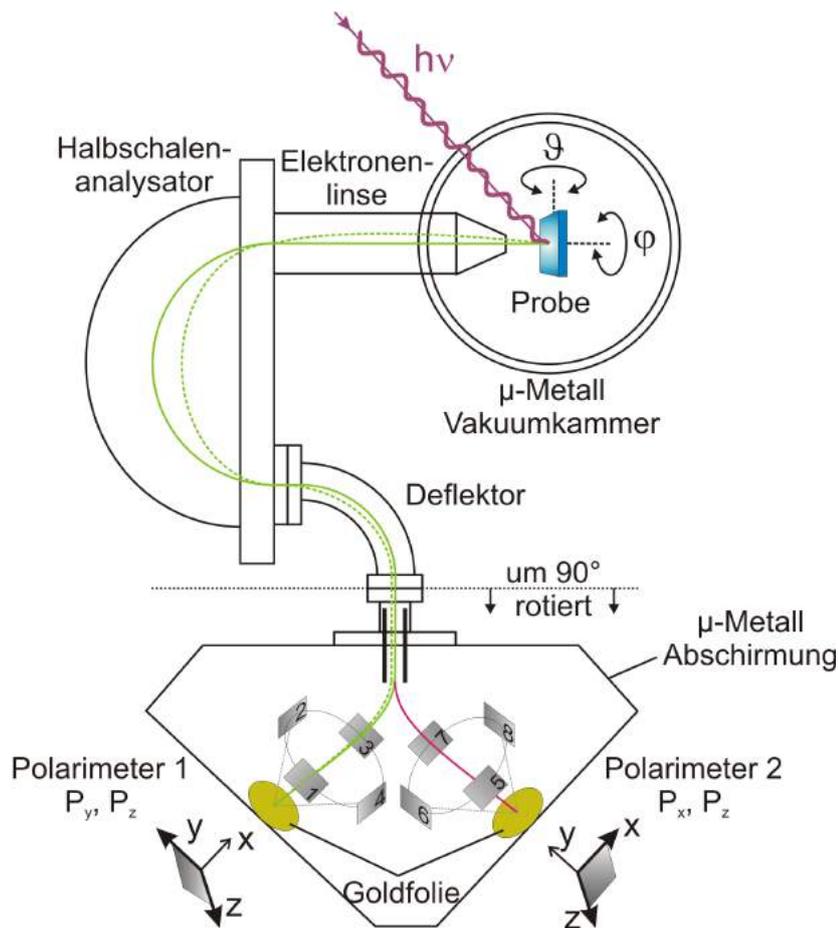


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung des SR-ARPES-Spektrometers an der COPHEE-Endstation: Aus der Probe durch Photonen der Energie $h\nu$ ausgelöste Photoelektronen durchlaufen eine Elektronenlinse und einen Halbkugelanalytator, bevor sie in den Detektor eintreten. Die beiden Mott-Polarimeter zur Spin-Analyse im Detektor stehen senkrecht zueinander; aus [212], nach [225].

Situation ist damit äquivalent zur Anordnung in [226]. Dies ist für die Interpretation der SR-ARPES-Messungen von Relevanz, wie bspw. in [226–228] gezeigt wird, da eine andere Polarisationsrichtung des Lichts die messbare Spin-Polarisation beeinflusst, die auch von der Symmetrie der Wellenfunktion des Zustands abhängt. Bei den Phasen von Pb/Si(111) mit einer Spiegel- oder Gleitspiegelebene in k_x -Richtung (alle hier untersuchten Phasen bis auf die SIC-Phase) invertiert z. B. s -polarisiertes Licht die S_y -Polarisation im Vergleich zu p -polarisiertem Licht auf diesen Spiegel- und Gleitspiegelebenen. Zudem verschwinden für beide Lichtpolarisationen die S_x - und S_z -Komponente ebenda. Für andere Orientierungen linear polarisierten Lichts gilt dieser Zusammenhang allgemein jedoch nicht [226–228], während bei zirkular polarisiertem Licht aufgrund der kohärenten Superposition von p - und s -polarisiertem Licht über all diese Orientierungen während der Messdauer gemittelt wird, sodass hier ebenfalls lediglich die S_y -Komponente in der Messung verbleibt (s. a. [229]).

Photoelektronen mit der kinetischen Energie

$$E_{\text{kin}} = h\nu - E_{\text{B}} - \Phi_{\text{A}} \quad (3.21)$$

von Zuständen mit Bindungsenergie E_{B} innerhalb der untersuchten Probe werden in Abhängigkeit des Azimutwinkels ϑ und des Polarwinkels φ aus der Probe ausgelöst und vom Detektor mit der Austrittsarbeit Φ_{A} detektiert. Der sechsachsige Manipulator hat eine Winkelgenauigkeit von $0,05^\circ$ über einen großen Winkelbereich und ermöglicht Temperaturen bis hinunter zu $T = 10$ K. Der Impuls (Wellenvektor) \mathbf{k}_{\parallel} der ausgelösten Elektronen parallel zur Oberfläche beträgt ungefähr

$$\mathbf{k}_{\parallel} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2m_e E_{\text{kin}}}{\hbar}} \cdot \begin{pmatrix} +\sin\vartheta \\ -\sin\varphi \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Die zu detektierenden Elektronen passieren die Elektronenlinse und den Halbkugelanalysator des Spektrometers. Im Spin-aufgelösten Modus beträgt die Energie- und Winkelauflösung des Halbkugelanalysators 80 meV bzw. $0,75^\circ$, während ohne Spin-Auflösung 25 meV und $0,3^\circ$ erreicht werden.

Bei der verwendeten Photonenenergie von $h\nu = 24$ eV beträgt die Auflösung im K-Raum damit schlechtestenfalls – d. h. am $\bar{\Gamma}$ -Punkt – $0,013 \text{ \AA}^{-1}$ im Spin-integrierten Modus und $0,033 \text{ \AA}^{-1}$ im Spin-aufgelösten Modus. Für typische Werte im Pb/Si(111)-System ($k_{\text{F}} \approx 0,4 \text{ \AA}^{-1}$, $E_0 \approx 700$ meV und $m^* \approx 0,5 m_e$) lässt sich mittels Fehlerrechnung für den Rashba-Effekt erster Ordnung die Größenordnung der Unsicherheit des Rashba-Parameters α_1 bei den Messungen in dieser Arbeit konservativ abschätzen. Mit den angegebenen Werten erhält man nach Gl. (2.42) für eine Spin-aufgelöste Messung $\alpha_1 = 1,298 \text{ eV \AA}^{-1}$ und $\Delta\alpha_1 = 0,227 \text{ eV \AA}^{-1}$. Die relative Unsicherheit des Rashba-Parameters beträgt somit $\Delta\alpha_1/\alpha_1 = 17,5\%$. Bei einer Spin-integrierten Messung beträgt die relative Unsicherheit hingegen lediglich $5,8\%$. Beim Rashba-Effekt höherer Ordnung liegt die relative Unsicherheit wenige Prozentpunkte höher. Die gemessenen und berechneten Werte in dieser Arbeit werden trotz der Unsicherheiten auf bis zu drei Nachkommastellen genau angegeben. Auf die jeweiligen Fehlerrechnungen wird nach der Abschätzung der Unsicherheit an dieser Stelle verzichtet.

Die Spin-integrierten Daten wurden mit 2 eV Durchgangenergie (2 mm Schlitze) aufgenommen und die Spin-aufgelösten Messungen mit 3 eV Durchgangenergie bei einer Spaltbreite von 6 mm. Trotz der höheren Transmissionen bei diesen Spektrometerbedingungen betrug die Integrationszeit pro Datenpunkt immer noch etwa 180 s, d. h. die Gesamtzeit inklusive der Rotationen der Probe für ein komplettes Mott-MDC⁵¹, wie z. B. in Abb. 6.11, lag im Bereich von acht Stunden. Um ein gutes Signal-zu-Rausch-Verhältnis in angemessener Zeit zu erhalten, wurde die Spin-Verteilung in den meisten Fällen 50 meV unterhalb des Fermi-Niveaus gemessen. Die Intensitäten und Spin-induzierte Streuasymmetrien wurden bei Spin-aufgelösten MDCs mit orthogonalen Mott-Detektoren gemessen (gleichzeitige Detektion aller drei räumlichen Komponenten des Spin-Erwartungswertes sowie der Impulsverteilungskurven, die insgesamt vier unabhängige Datensätze bilden). Die Differenz (Asymmetrie)

$$A_i = \frac{N_{\text{L},i} - N_{\text{R},i}}{N_{\text{L},i} + N_{\text{R},i}} \quad (3.23)$$

⁵¹ Momentum Distribution Curve

der in zwei gegenüberliegende Detektoren elastisch gestreuten Spin-polarisierten Elektronen (Anzahlen $N_{L,i}$, $N_{R,i}$) wird mit Hilfe der Sherman-Funktion $S = 0,08$ in die Spin-Polarisation $S_i = A_i/S$ übertragen [146, 230]. Die Anordnung von insgesamt acht Detektoren erlaubt schließlich den vollständigen Spin-Polarisationsvektor

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

zu extrahieren.

Weitere Details zum Aufbau sind z. B. in [126, 225] beschrieben. Die Daten wurden wie in Ref. [230] analysiert. Dazu wurden die MDCs mit Pseudo-Voigt-Funktionen und einem linearen Hintergrund gefittet. Die endliche spektrale Auflösung und inkohärente Effekte wurden bei der experimentellen Bestimmung der Spin-Polarisation nicht miteinbezogen, ansonsten würde diese stets eine vollständige Spin-Polarisation von 100% anzeigen [231].

Neben Mott-MDCs und Spin-integrierten MDCs können im Experiment auch CEMs⁵² bei konstanter kinetischer Energie der Elektronen bzw. BMs⁵³ der Bandstruktur entlang einer zuvor definierten Richtung im \mathbb{K} -Raum aufgenommen werden.

⁵² Constant Energy Maps

⁵³ Bandmaps

4. Monolagenstrukturen von Pb auf Si(111) und Si(557)

In diesem Kapitel werden die atomaren Strukturen von Si(111) und Si(557) und der auf ihnen adsorbierten, ultradünnen Pb-Filme bis $\Theta_{\text{Pb}} = 1,333 \text{ ML}$ vorgestellt. Neben den unterschiedlichen Modellen werden physikalische Eigenschaften dargestellt und Literaturverweise auf bereits durchgeführte Messungen mit unterschiedlichen Methoden und theoretische Beschreibungen gegeben.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden (SPA-)LEED- und STM-Messungen, sowie ARPES- und makroskopische Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Untersuchungen an diesen Strukturen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Messungen werden in den Kapiteln 5 u. 6 dargestellt und diskutiert.

4.1. Si(111)-(7 × 7)-Substrat

Die (111)-Oberfläche von Si hat wegen der Diamantstruktur eine hexagonale Form. Sie bildet nach erstmaligem Erhitzen über 500 K eine (7 × 7)-Rekonstruktion aus [232]. Die (7 × 7)-Einheitszelle besteht aus insgesamt 49 Atomen und hat eine Gitterkonstante von $a_{(7 \times 7)} = 7a_{[1\bar{1}0]} = 2,688 \text{ nm}$. Die Gitterkonstanten des *Bulks* sind dabei in $[11\bar{2}]$ -Richtung $a_{[11\bar{2}]} = 3,326 \text{ \AA}$ und in $[1\bar{1}0]$ -Richtung $a_{[1\bar{1}0]} = 2/\sqrt{3} \cdot 3,326 \text{ \AA} = 3,84 \text{ \AA}$. Das sog. DAS⁵⁴-Modell der Oberfläche [233, 234] ist in Abb. 4.1 neben einem STM-Bild der unbesetzten Zustände und einem SPA-LEED-Bild dargestellt. Die (7 × 7)-Rekonstruktion ist im SPA-LEED-Bild deutlich erkennbar. Nach dem DAS-Modell erscheinen in dem gezeigten STM-Bild hauptsächlich die zwölf Adatome an den T4-Positionen mit je einem *Dangling Bond*. 42 Atome bilden die zweite Lage, bestehend aus den sechs Restatomen mit je einem *Dangling Bond* und 36 weiteren Atomen an den T1- bzw. H3-Positionen. Die Lage mit dem Stapelfehler bilden 30 Atome in T4-Positionen (teils unter den Adatomen gelegen) und 18 Atome, die sich zu neun Dimeren am Rand der beiden Dreieckshälften verbinden. Erst in der vierten Lage befinden sich alle Atome in *Bulk*-Positionen. Somit besteht die gesamte Rekonstruktion aus 102 Atomen. Auch die Atome am Boden der *Corner Holes* haben je ein *Dangling Bond*, deren Gesamtzahl damit 19 beträgt und die alle mit dem STM aufgelöst werden können [144].

Die Si(111)-Oberfläche hat damit insgesamt C_{3v} -Symmetrie und gehört zur Raumgruppe $p3m1$ (s. Tab. 2.1). Ihre drei Spiegelebenen liegen in den drei zur $[11\bar{2}]$ -Richtung äquivalenten Richtungen, ebenso wie die sechs um je eine halbe Einheitszelle verschobenen Gleitspiegelebenen (Vgl. Abb. 2.1 (a)).

Die (7 × 7)-Rekonstruktion bildet Oberflächenzustände aus, die energetisch innerhalb der Si-Bandlücke von $E_{\text{G,Si}} = 1,12 \text{ eV}$ liegen. Der Zustand der *Dangling Bonds* der Adatome pinnt dabei mit $E_{\text{B}} = 0,35 \text{ eV}$ an das Fermi-Niveau E_{F} [235–238]. Dadurch liegt das chemische

⁵⁴ Dimer-Adatom-Stacking-fault

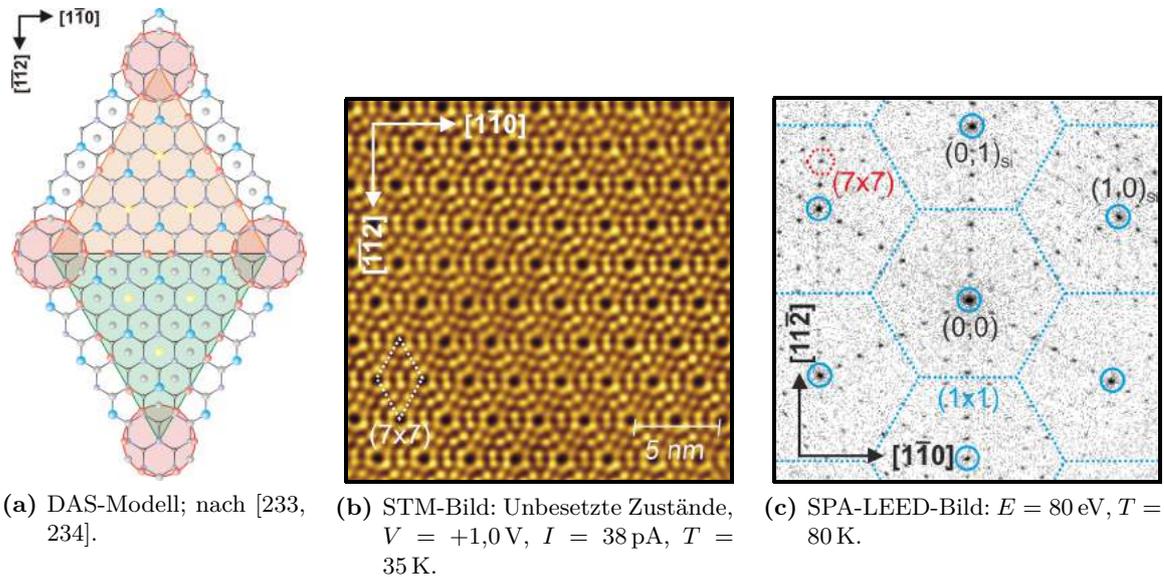


Abbildung 4.1: Si(111)-(7 × 7)-Oberfläche: Farbcodierung der Atome in (a): Adatome in T4-Positionen blau, Dimeratome rot, Restatome gelb, sonstige Atome hellgrau, 3. Lage der Rekonstruktion und des Si-Bulk graublau, 2. Lage Si-Bulk grau. Das orangefarbene und das grüne Dreieck bilden die Hälften der Einheitszelle mit bzw. ohne Stapelfehler. Die roten Kreise markieren die *Corner Holes*.

Potential μ an der Oberfläche höher als im Volumen und es bildet sich eine Raumladungszone aus, die in einer Schottky-Barriere resultiert [238, 239].

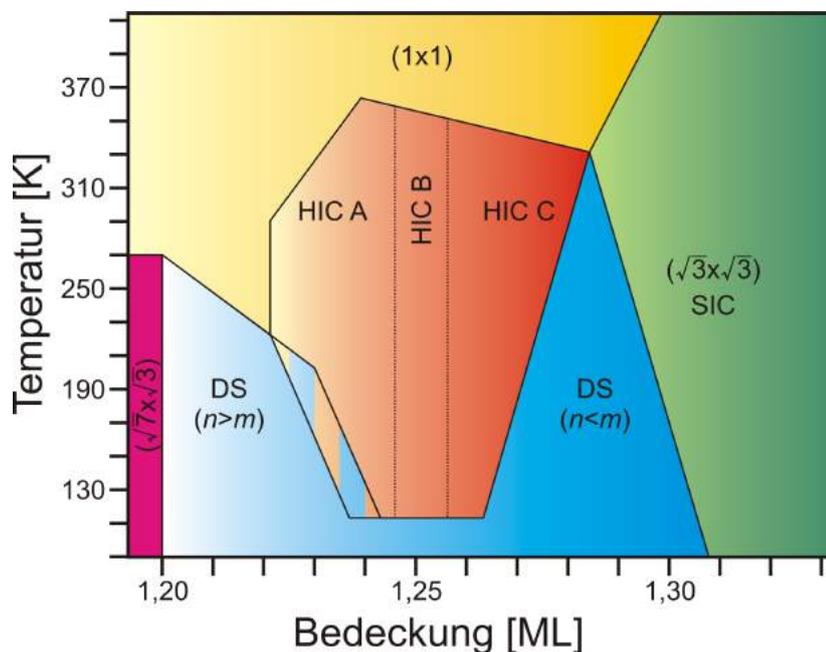


Abbildung 4.2: Phasendiagramm der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase: Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bilden im Bedeckungsbereich zwischen 1,20 ML und 1,333 ML die Grundstrukturen der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase. Sie werden in der DS-Phase zu linearen Strukturen kombiniert, während die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen in den HIC- und SIC-Phasen Domänenwände bilden, sodass hexagonale bzw. gestreifte Strukturen entstehen, in deren Innerem $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen lokalisiert sind. In der (1x1)-Phase ist ein Teil der Pb-Atome nicht mehr an die restlichen Pb- und Si-Atome gebunden und diffundiert über die Oberfläche; nach [44].

4.2. Monolagen-Strukturen von Pb/Si(111)

Im Bedeckungsbereich um 1 ML Pb⁵⁵ auf Si(111) existiert ein mannigfaltiges Spektrum an verschiedenen Oberflächenstrukturen. Dabei unterscheidet man bei steigender Bedeckung die γ -, β - und α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phasen, sowie die (7×7) - und (1×1) -Phasen. Innerhalb der unterschiedlichen Phasen kann die Oberfläche auch unterschiedliche Rekonstruktionen aufweisen, wie z. B. die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion als Grundstrukturen der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase (s. Kap. 4.2.2-4.2.5). Die α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase teilt sich außerdem noch in die „inkommensurablen“ HIC- und SIC-Phasen und die DS-Phase auf (s. Kap. 4.2.3-4.2.5 u. Phasendiagramm in Abb. 4.2).

Bis $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3$ ML ordnen sich die Pb-Atome innerhalb der ersten Lage an. Bei höheren Bedeckungen hängt das Wachstumsverhalten von der Temperatur und QSEs⁵⁶ ab [240–246], wobei bei niedrigen Temperaturen QSE-moduliertes *Stranski-Krastanov*-Wachstum [247, 248] (Inselwachstum) [242, 249–253] und bei höheren Temperaturen *Frank-van-der-Merwe*-Wachs-

⁵⁵ 1 ML: $N_{\text{Pb}} = N_{\text{Si}} = 7,83 \cdot 10^{14}$ Atome/cm².

⁵⁶ Quantum Size Effects

tum [254–256] (Lage für Lage) auftritt [253, 257, 258]. Die gut kontrollierbare Präparation dieser Filme unter UHV-Bedingungen führte etwa seit der Jahrtausendwende zu einer Vielzahl an Publikationen, die den QSE mit starker SOI untersuchten. Die Eigenschaften dünner Pb-Filme unterscheiden sich demnach durch Ausbildung von QWS teils stark von denen von *Bulk*-Pb [112–114, 221, 240, 242, 249, 251, 252, 258–328].

Außerdem zeigen Pb-Filme außergewöhnliche kinetische Eigenschaften: Pb-Atome diffundieren bei Temperaturen um 200 K mit fünfmal höherer Geschwindigkeit auf einer Si(111)-Oberfläche als auf Pb-Kristallen. Dieses Verhalten steht in Verbindung mit dem QSE, der zur Ausbildung von *magischen Höhen* der Pb-Inseln durch Selbstorganisation führt, und wird Superdiffusion genannt [326–333]. Die Superdiffusion limitiert die zeitliche Stabilität atomar dünner Pb-Filme im Experiment durch Zufluss von Pb von Kontakten und Probenhalter auf wenige Stunden.

In [78] wird darüber hinaus die Idee einer künstlichen Graphen-ähnlichen Pb-Monolage auf H-terminiertem Si(111) diskutiert. Dabei soll nach den DFT-Berechnungen der QSHE⁵⁷ entstehen, der je nach Adsorbat (außer Pb werden auch Bandstrukturen von Bi, Ga, In und Tl dargestellt) manipuliert werden kann. Die berechnete Bandstruktur für Pb/H:Si(111) zeigt einen Spin-aufgespaltenen Zustand innerhalb der Si-Bandlücke, der am \bar{K} -Punkt eine Zeeman-artige (Vgl. Kap. 2.2.2) und am $\bar{\Gamma}$ - und \bar{M} -Punkt jeweils Rashba-Aufspaltung zeigt (Vgl. Kap. 2.2.1). Durch *n*-Dotierung soll dabei das Fermi-Niveau in die Energielücke Δ_{SO} der Spin-aufgespaltenen Bänder angehoben werden, um einen zweidimensionalen topologischen Isolator zu erzeugen.

Die Monolagen-Strukturen von Pb/Si(111) werden seit Längerem schon als Substrat für das Wachstum von Si- [334–341] und Ge-Filmen [341–348] genutzt, wobei im Submonolagenbereich neben 2D-Inseln auch atomare Drähte aus Si [338], sowie rekonstruierte Silicen-Nanodrähte gefunden wurden [349]. Seit Kurzem dient Pb/Si(111) auch als Substrat für das Wachstum organischer Molekülfilme. Beispiele hierfür sind die Adsorption von C₆₀- [350, 351] und von PTCDA-Molekülen [352].

4.2.1. β - und γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase

Bei Adsorption von $\Theta_{Pb} = 1/3 \text{ ML} = 0,333 \text{ ML}$ auf Si(111) lässt sich die sog. β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase mit einer Pb-Dichte von $N_{Pb} = 2,61 \cdot 10^{14} \text{ Atome/cm}^2$ erzeugen. Sie entsteht irreversibel durch Erwärmen auf über 420 °C aus einer Oberflächenstruktur mit (7 × 7)-Rekonstruktion [353, 354]. Die Pb-Atome sitzen auf den T4-Positionen der Si(111)-Oberfläche (s. Abb. 4.3 (a)) [355, 356], wie auch DFT-Berechnungen bestätigen [46]. Die Gitterkonstante der Rekonstruktion beträgt $a_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = 6,652 \text{ \AA}$. STM-, (SPA-)LEED- und (zeitaufgelöste) RHEED⁵⁸-Analysen der β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase wurden in [245, 331, 337, 341, 352, 356–367] durchgeführt, wohingegen die elektronischen und chemischen Eigenschaften mittels STS⁵⁹ [368], UPS [135, 136, 361] und XPS [367, 369–371] vermessen wurden. Neben den UPS-Messungen zeigen auch theoretische Berechnungen der Bandstruktur, dass die Oberfläche metallisch ist und einen halb gefüllten Oberflächenzustand aufweist [372–375]⁶⁰.

⁵⁷ Quanten-Spin-Hall-Effekt

⁵⁸ Reflection High Energy Electron Diffraction

⁵⁹ Scanning Tunneling Spectroscopy

⁶⁰ In [373–376] ist die β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase abweichend in Analogie zu Sn/Si(111) als α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase bezeichnet worden.

Abkühlen der β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase unter $T_C = 86 \pm 2$ K führt zu einem strukturellen Phasenübergang mit einer (3×3)-Rekonstruktion (s. Abb. 4.3 (b)) [377, 378]. Strukturelle Untersuchungen bei tiefen Temperaturen wurden sowohl mit dem STM als auch mit SPA-LEED und RHEED durchgeführt [245, 356, 358, 361–363, 376, 379]. Je zwei von drei Pb-Atomen der (3×3)-Rekonstruktion rücken demnach beim Phasenübergang näher an die Si-Oberfläche, was zudem zu einer Ladungsverschiebung führt [370]. Der Phasenübergang ist jedoch reversibel und tritt z. B. auch für die $1/3$ ML-Bedeckungen von Pb/Ge(111) [179, 380–385] und Sn/Ge(111) [25, 26, 386–388] auf. Die metallische (3×3)-Rekonstruktion von Sn/Ge(111) bildet eine CDW aus [25, 26, 388, 389]. Sie geht bei etwa 30 K jedoch aufgrund eines nochmaligen Phasenübergangs, bei dem wiederum eine ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion entsteht, in einen Mott-Isolator als Grundzustand über [390]. Pb/Ge(111) ist im Grundzustand dagegen kein Mott-Isolator, die Ladungsverschiebung führt dennoch durch Bildung einer CDW zu isolierendem Verhalten [27, 179]. Dieses Verhalten wurde bis vor Kurzem auch für Pb/Si(111) angenommen [372, 374]. Neueste STS-Messungen bei sehr tiefen Temperaturen bis $T = 300$ mK und DFT-Berechnungen inklusive SOI deuten jedoch auf ein sog. *korreliertes Metall* mit Ladungsordnung (CDW) durch *in-plane*-Rashba-Aufspaltung der Fermi-Fläche hin [375, 376, 379].

Eine weitere DFT-Studie [392] deutet für die (3×3)-Rekonstruktion von Pb/Si(111) eine noch weit komplexere Situation bei Berücksichtigung der SOI an. Der Grundzustand weist im Gegensatz zu [375, 376] eine antiferromagnetische Ordnung in Reihen auf, deren benachbarte Spins in der Ebene senkrecht zur $[11\bar{2}]$ -Richtung jeweils um 120° gegeneinander gedreht sind (nicht mit kollinearem Antiferromagnetismus zu verwechseln; die magnetischen Einheitszelle hat somit eine Größe von (9×3)). Das Anlegen eines schwachen externen Magnetfelds senkrecht zur Oberfläche der Pb/Si(111)-(3×3)-Rekonstruktion verändert die magnetische Ordnung den Berechnungen zufolge zunächst zu einer Superposition dreier Spin-Spiralen aufgrund der dreizähligen Rotationssymmetrie. Bei höheren Magnetfeldern entstehen außerdem ein antiferromagnetisches Dreiecks-*Skyrmionen*-Gitter, eine Vortex-artige und eine paramagnetische Phase.

Die widersprüchlich erscheinenden Ergebnisse der DFT-Berechnungen in [392] bzw. [375, 376] lassen sich auf die Verwendung unterschiedlicher Funktionale und Berechnungsmethoden zurückführen. Die Übereinstimmung der STS-Messungen bei $T = 300$ mK in einem zur Oberfläche senkrechten Magnetfeld von $B = 0,5$ T in [375, 376] mit den zugehörigen DFT-Berechnungen deuten auf die Richtigkeit der dort verwendeten Methoden hin.

Für Sn/Si(111) wurde dagegen bislang kein struktureller Phasenübergang zu einer (3×3)-Rekonstruktion gefunden [354, 387, 393, 394]. Dennoch weist die Oberfläche ebenfalls einen Metall-Isolator-Übergang bei $T_C \approx 60$ K auf [374, 395, 396]. Oberhalb dieses Phasenübergangs liegt ein Metall mit kollinear antiferromagnetischer Ordnung vor [397], während DFT-Berechnungen für die Tieftemperaturphase einen Mott-Isolator mit nicht-kollinear antiferromagnetischer Ordnung (Néel-Zustände mit 120° -Drehungen in der Ebene zwischen benachbarten Spins) vorhersagen [374, 392, 395]. Die SR-ARPES-Messungen von MONIKA JÄGER zeigen jedoch, dass die Tieftemperaturphase eine kollineare, reihenweise, antiferromagnetische Spin-Ordnung mit einer ($2\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Einheitszelle aufweist [29].

Erwärmen der β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase auf 500 - 580 °C führt zu einer Desorption von Pb-Atomen. Es bildet sich eine weitere (3×3)-Rekonstruktion aus [245, 362]. Heizen auf über 580 °C resultiert in einer weiteren Desorption Pb von der Si(111)-Oberfläche, sodass eine weitere ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase, die sogenannte Mosaik-Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1/6$ ML ($N_{\text{Pb}} =$

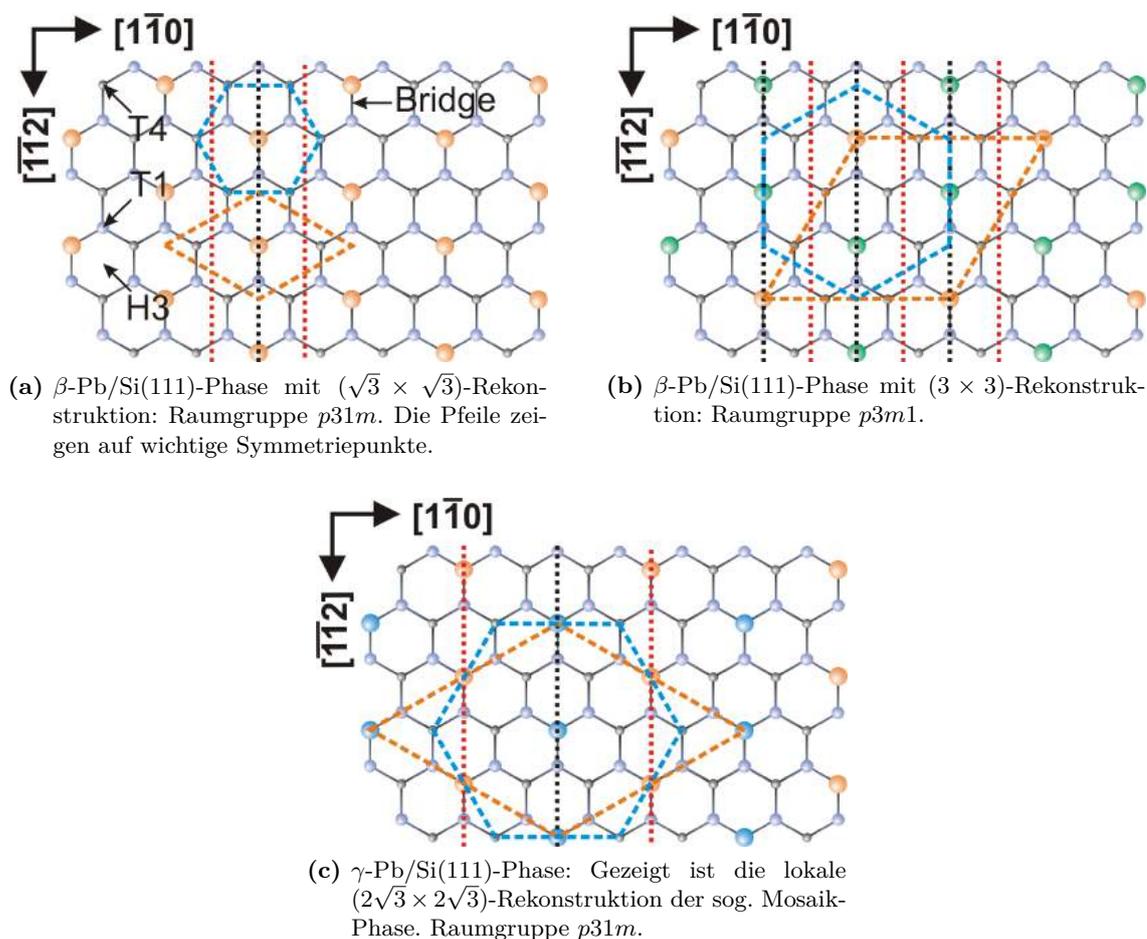


Abbildung 4.3: Strukturmodelle der β -Pb/Si(111)-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1/3 \text{ ML}$ und der γ -Pb/Si(111)-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1/6 \text{ ML}$: Die orangefarbenen gestrichelten Linien zeigen die primitiven Einheitszellen und die blauen gestrichelten Linien zeigen die hexagonalen Einheitszellen. Die schwarzen gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen und die roten gepunkteten Linien die Gleitspiegelebenen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung an. Weitere Spiegel- und Gleitspiegelebenen ergeben sich durch Rotation um 120° und 240° . Farbcodierung der Atome: Pb orange und grün, Si-Adatome blau, 1. Lage Si graublau, 2. Lage Si grau. Die orangefarbenen und grünen Pb-Atome der (3×3) -Rekonstruktion der β -Pb/Si(111)-Phase haben unterschiedliche Höhen über dem Si-Substrat, weshalb keine $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion vorliegt; nach [372, 391].

$1,31 \cdot 10^{14} \text{ Atome/cm}^2$), auch γ -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase genannt, entsteht [245, 362]. Strukturelle LEED- und STM-Untersuchungen zeigen, dass neben den Pb-Atomen nun auch Si-Adatome die T4-Positionen besetzen [352, 366, 398–402]. Diese Atome sind nicht beliebig verteilt, sondern bilden alternierende Drähte, die das Mosaik bilden. Daher lässt sich diese Struktur lokal auch als $(2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3})$ -Rekonstruktion auffassen (s. Abb. 4.3 (c), [391, 403]).

Daneben liegen aber auch weitere Mosaik-artige Strukturen vor, wie mit dem STM gezeigt werden konnte [403]. Die Desorption wurde zudem mit *Monte Carlo*-Methoden simuliert, um die Kinetik des Vorgangs und die Strukturbildung besser zu verstehen [404]. Außerdem wurden für eine Analyse der chemischen Bindungen XPS-Messungen zum Vergleich mit der β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase durchgeführt [369–371, 405]. Die UPS-Messungen in [135, 136] und die STS-Messungen in [398] zeigen zudem, dass auch die γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase metallisch ist, was in früheren winkelaufgelösten UPS- und ARPES-Messungen jedoch nicht belegt werden konnte [405, 406]. Die Mosaik-artige γ -Phase bei einer Bedeckung von $1/6$ ML konnte darüber hinaus auch für Sn/Si(111) nachgewiesen werden [393].

In der Literatur [354, 360, 391, 401] werden zudem weitere Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phasen mit $2/3$ und 1 ML Bedeckung diskutiert, auf die hier nicht weiter eingegangen werden soll. Auch existierten weitere Pb-Rekonstruktionen im Bereich bis 1 ML unterhalb von 420°C , z. B. eine (8×8) -Anordnung der Pb-Atome innerhalb der Si(111)- (7×7) -Einheitszelle mit etwa 1 ML Bedeckung [135, 137, 246, 401, 407–410] und eine $\text{Si}_{0.28}\text{Pb}_{0.72}$ /Si(111)-Phase [411, 412]. Bis $\Theta_{\text{Pb}} = 0,12$ ML Bedeckung ordnen sich die Pb-Atome innerhalb der (7×7) -Rekonstruktion der Si(111)-Oberfläche an, ohne diese zu zerstören [399, 401].

Zudem konnten inkommensurable Pb-Strukturen um 1 ML Bedeckung auf Si(111) beobachtet werden [334, 363, 400, 409, 413]. Ähnliche Strukturen konnten auch durch H-Adsorption auf der (1×1) -Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML erzeugt werden [364].

4.2.2. ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktionen

Im Phasendiagramm von Pb/Si(111) existieren zwei unterschiedliche ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktionen mit verschiedenen Bedeckungen und Symmetrien. Zum einen existiert eine Rekonstruktion mit niedriger Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML bei einer Dichte von $N_{\text{Pb}} = 7,84 \cdot 10^{14}$ Atome/cm², die lediglich C_1 -Symmetrie aufweist [46, 339, 340] und im Experiment ab ca. 0,9 ML Pb-Bedeckung vorkommt [372]. Zum anderen gibt es eine weitere Rekonstruktion mit einer höheren Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML und einer Dichte von $N_{\text{Pb}} = 9,4 \cdot 10^{14}$ Atome/cm², die die erste der beiden Grundstrukturen der historisch sog. α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase bildet [353] und dabei C_{1v} -Symmetrie hat.

In der Literatur gibt es unterschiedliche Schreibweisen für die Einheitszelle der beiden ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktionen. Neben der hier angewandten Schreibweise lässt sie sich auch als $c(5 \times \sqrt{3})$ -Pb/Si(111) [411] und in Matrixdarstellung je nach Wahl des Koordinatensystems als $\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ -Pb/Si(111) [414] oder $\begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$ -Pb/Si(111) darstellen. Die Gittervektoren der primitiven Einheitszelle

$$\mathbf{a}_1 = 6,652 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}, \quad (4.1 \text{ a})$$

$$\mathbf{a}_2 = 9,6 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} + 3,326 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]} \quad (4.1 \text{ b})$$

sind in Abb. 4.4 (b) eingezeichnet, wobei $\mathbf{e}_{[1\bar{1}0]}$ und $\mathbf{e}_{[11\bar{2}]}$ die Einheitsvektoren in $[1\bar{1}0]$ - bzw. $[11\bar{2}]$ -Richtung sind.

Die Gittermodelle in Abb. 4.4 zeigen sowohl die H3- als auch die T4-Konfiguration der Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML (nach [391, 414]), sowie das T1'-Modell für $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML (nach [46, 372]). Bei letzterem Modell liegen die fünf Pb-Atome pro Einheitszelle nahe den T1-Positionen des Si-Gitters, jedoch nicht komplett über diesen. Auch zeigt der Vergleich mit den beiden anderen Strukturmodellen, dass die Pb-Atome nicht symmetrisch angeordnet sind und daher lediglich C_1 -Symmetrie vorliegt (s. a. Tab. 2.1). Dieser Symmetriebruch wurde

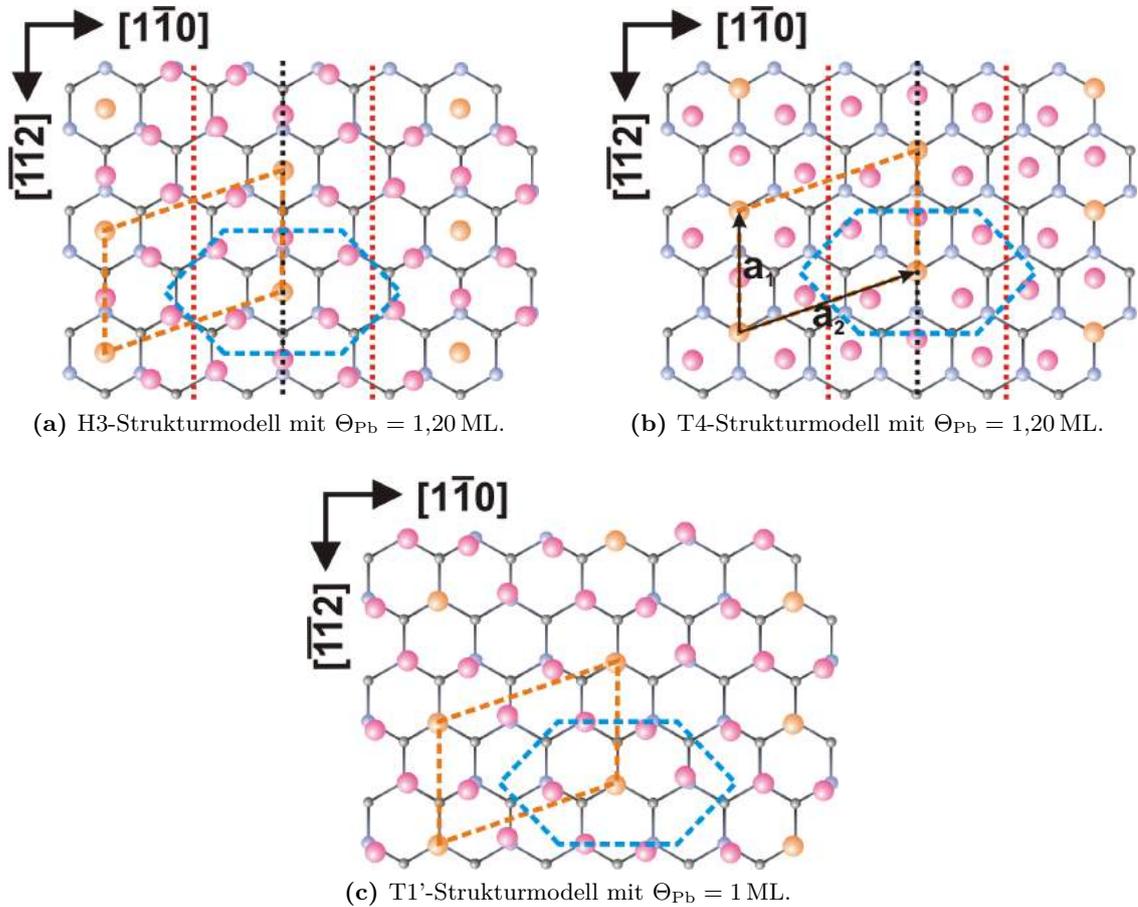


Abbildung 4.4: Strukturmodelle der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Die orangefarbenen gestrichelten Linien zeigen die primitive $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle und die blauen gestrichelten Linien zeigen die zentrierte $c(5 \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle. Die schwarzen gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen und die roten gepunkteten Linien die Gleitspiegelebenen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung an. Die Modelle mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML haben C_{1v} -Symmetrie, während das Modell mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML lediglich C_1 -Symmetrie hat. Insgesamt drei Rotationsdomänen ergeben sich aufgrund der Symmetrie der Si(111)-Oberfläche durch Rotation um 120° und 240° . Farbcodierung der Atome: Pb orange und magenta, 1. Lage Si graublau, 2. Lage Si grau; nach [46, 372, 391, 414].

anhand unterschiedlicher Häufigkeiten der Adsorptionsplätze einzelner Si-Atome auf der Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML mittels STM-Messungen erst kürzlich experimentell bestätigt [339, 340], nachdem DFT-Berechnungen der Struktur dies bereits zuvor gezeigt hatten [46]. Weitere STM-Messungen an dieser Struktur finden sich in [341, 358, 411, 415–417] und zeigen eine Koexistenz mit der β -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase für Gesamtbedeckungen unterhalb von $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML. Außerdem wird die Struktur auch in [328, 418] diskutiert. Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht, sondern lediglich die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML. Im Folgenden ist mit

der Bezeichnung „ $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion“ daher stets diejenige Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML gemeint, sofern nicht explizit die Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML genannt ist.

Bei einer Pb-Bedeckung von 1,20 ML liegen die sechs Pb-Atome der Einheitszelle symmetrisch zu der Spiegelebene entlang der H3-T4-Achse (s. Abb. 4.4 (a) u. (b)). Zusätzlich existiert eine um eine halbe Einheitszelle in $[1\bar{1}0]$ -Richtung verschobenen Gleitspiegelebene. Somit gehört die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML zur Raumgruppe $c1m1$ (Punktgruppe m) und hat C_{1v} -Symmetrie (Vgl. Tab. 2.1). Die in LEED-Messungen bei $E = 80$ eV fehlenden Spots gehen möglicherweise auf die Gleitspiegelebene zurück [419].

Beim sog. H3-Modell sitzt eines der Pb-Atome genau in der Mitte der „Honigwabe“ der ersten beiden Si-Lagen (H3-Position), wohingegen im sog. T4-Modell die Einheitszelle der Rekonstruktion stattdessen so verschoben ist, dass dieses Atom statt in der Mitte der Honigwabe nun über dem Si-Atom der zweiten Si-Lage liegt (jeweils orangefarbenes Atom in Abb. 4.4 (a) u. (b)). Die exakten Positionen der Pb-Atome innerhalb der Einheitszelle wurden vielfach diskutiert [158, 372, 391, 414, 418, 420]. DFT-Rechnungen zeigen z. B., dass die Energiedifferenz zwischen H3- und T4-Modell lediglich 3-10 meV pro (1×1) -Einheitszelle beträgt [45, 46, 391]. Daher ist eine Koexistenz beider Konfigurationen bei endlichen Temperaturen möglich, bislang wurde aber lediglich die H3-Konfiguration bestätigt. Die Vergleiche von simulierten mit experimentellen STM-Bildern [158, 391, 410, 418] und XRD⁶¹-Messungen [414, 420] bestätigen das H3-Modell für $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML. Die Bandstrukturberechnungen in [46] sind für beide Konfigurationen beinahe identisch und spiegeln die Ergebnisse der ARPES-Messungen aus [138] für die meisten Bänder gut wider.

Wegen der dreizähligen Symmetrie des Si-Substrats existieren zudem drei Rotationsdomänen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Dies führt in ARPES-Messungen zu einer Quasi- (1×1) -Periodizität durch Überlagerung der Photoelektronenemissionsspektren im \mathbb{K} -Raum (Vgl. Abb. 2.2 (f)) [138, 142, 421, 422]. Auch in STS-Messungen lässt sich der Einfluss der (1×1) -Periodizität nachweisen [349, 368, 410, 423]. Dies wird auf die Existenz eines Potentials mit der Si-Bulk-Periodizität zurückgeführt, da sowohl die (1×1) -Phase, als auch die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und die SIC-Phase das gleiche Verhalten zeigen [45, 368, 423].

Im \mathbb{K} -Raum werden die Hochsymmetriepunkte mit $\bar{\Gamma}$, \bar{X} und \bar{Y} (bzw. \bar{Y}') bezeichnet (Vgl. Tab. 2.1 u. Abb. 2.2 (c)). Der $\bar{\Gamma}$ - und die \bar{X} -Punkte gehören zur Punktgruppe m und haben damit C_{1v} - bzw. C_{1h} -Symmetrie. Die \bar{Y} -Punkte haben lediglich C_1 -Symmetrie [68].

Strukturelle Untersuchungen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wurden sowohl mit (zeitaufgelöstem) RHEED [356, 365] und (SPA-)LEED [44, 331, 421, 422, 424–426], als auch mit dem STM [39, 40, 349, 368, 410, 418, 423, 425–429] durchgeführt. Demnach transformiert die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion oberhalb von $T_C = 274 - 286,8$ K in eine (1×1) -Struktur (s. Kap. 4.2.6; gilt auch für die Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML) [44, 421, 424]. Der Phasenübergang ist reversibel und wird damit erklärt, dass die Pb-Atome aufgrund der höheren thermischen Energie aus ihren Gleichgewichtslagen heraus diffundieren können und somit eine „geschmolzene“ Pb-Phase bilden [158, 421, 422].

Die Bandstruktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wurde in [138, 142, 421, 422, 424] mittels ARPES untersucht und zeigt einen metallischen Charakter. Durch die Überlagerung der Rotationsdomänen erscheint die Fermi-Fläche eher zwei- als quasi-eindimensional [45]. Die in [45, 46] berechneten Bandstrukturen stimmen gut mit den Messungen überein, vernachlässigen jedoch die SOI – es werden keine Spin-aufgespaltenen Bänder dargestellt. Die chemischen Bindungsverhältnisse der Pb- und Si-Atome wurden sowohl mit XPS und XRD experimentell

⁶¹ X-Ray Diffraction

untersucht [414, 430], als auch mittels DFT berechnet [45, 158, 372, 418, 431]. Demnach binden fünf der sechs Pb-Atome der Einheitszelle kovalent zu den Si-Atomen des Substrats [414, 418], während das Pb-Atom auf der H3-(T4-)Position ausschließlich mit den drei nächstgelegenen Pb-Atomen metallisch bindet [418]. Die weiteren Pb-Atome bilden zudem metallische Bindungen untereinander aus [414, 418].

Außerdem wurde die auf die verschiedenen beteiligten Valenzorbitale projizierte Zustandsdichte berechnet [45, 158, 372]. Demnach ist die Zustandsdichte der $Pb6p_x$ - und $Pb6p_y$ -Orbitale am Fermi-Niveau deutlich größer als die Zustandsdichte der $Pb6p_z$ -, sowie der $Si3p$ -Orbitale. Die Höhe der Schottky-Barriere ist darüber hinaus mittels UPS und ARPES bestimmt worden und beträgt $\Phi_{SB} \approx 0,9 - 0,99$ eV [135, 136, 138].

Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von Pb auf Si(111) wird bei 1,52 K supraleitend [39, 40]. Dies ist im Vergleich mit der Übergangstemperatur des Pb-Bulks von $T_{C,Bulk} = 7,193$ K ungefähr einen Faktor fünf niedriger. Dass diese 2D-Schicht überhaupt supraleitend wird, liegt an der Hybridisierung der Wellenfunktionen von Pb- und Si-Atomen an der Oberfläche [40, 45, 138, 142, 158]. Die Energielücke beträgt bei $T = 0$ K nach BCS-Theorie extrapolierte $\Delta_{SC} = 0,27$ meV. Die Supraleitungskohärenzlänge beträgt $\xi \approx 45$ nm [40]. Weitere Details zur Supraleitung sind in [39, 40, 428, 429, 432, 433] zu finden.

4.2.3. Striped Incommensurate-Phase

Die zweite der beiden Grundstrukturen der α -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase [353] hat mit einer Bedeckung von $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML = 1,333 ML eine Dichte von $N_{Pb} = 1,04 \cdot 10^{15}$ Atome/cm². Sie zeigt im Gegensatz zur $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Struktur eine $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit der Gitterkonstanten $a_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = \sqrt{3}a_{[11\bar{2}]} = 6,652$ Å [359]. In der Literatur werden wie bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion das H3- und das T4-Modell diskutiert. Eines der Pb-Atome besetzt dabei die H3- bzw. T4-Position. Die anderen drei Pb-Atome der Einheitszelle haben relativ zu diesem Atom jeweils einen Abstand von 3,00 Å und sitzen damit leicht verschoben von der *Bridge*-Position zwischen T1- und T4-Position [157], sodass die Gesamtstruktur der Pb-Atome Tetramere bildet (s. Abb. 4.5). Das mittlere Pb-Atom dieser Tetramere sitzt zudem 0,11 Å höher als die anderen Pb-Atome, die zu den nächstgelegenen Si-Atomen der 1. Lage eine kovalente Bindung mit 2,73 Å Bindungslänge eingehen [157]. In neueren DFT-Berechnungen [48, 434] ergeben sich für beide Konfigurationen ähnliche, aber leicht höhere Bindungslängen als in [157]. Zudem befinden sich in dieser Berechnung alle Pb-Atome auf gleicher Höhe über dem Si-Substrat. Insgesamt ergibt sich zusammen mit dem Si-Substrat für beide Konfigurationen eine Dreizähligkeit, sodass die Struktur zur Raumgruppe $p\bar{3}1m$ und Punktgruppe $3m$ mit C_{3v} -Symmetrie im Realraum gehört⁶². Daraus folgt für die Hochsymmetriepunkte im \mathbb{K} -Raum C_{3v} -Symmetrie am $\bar{\Gamma}$ - und $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt (Vgl. Tab. 2.1 u. Abb. 2.2 (b); Punktgruppen $3m$ bzw. m [68, 132]), sowie C_{1h} -Symmetrie am $\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt (Punktgruppe 3 [68, 132]). Darüber hinaus folgt bereits aus der Symmetrie, dass gegenüberliegende $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte inäquivalent sind (Bezeichnung als $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ und $\bar{K}'_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$). Die

⁶² Bei der T4-Konfiguration ergibt die Berechnung in [48] eine minimale Verschiebung eines der Pb-Atome und damit einen Symmetriebruch. In allen vorherigen Messungen und Berechnungen ist ein solches Verhalten nicht dokumentiert. Die Ergebnisse dieser Arbeit deuten ebenfalls nicht auf einen Symmetriebruch hin.

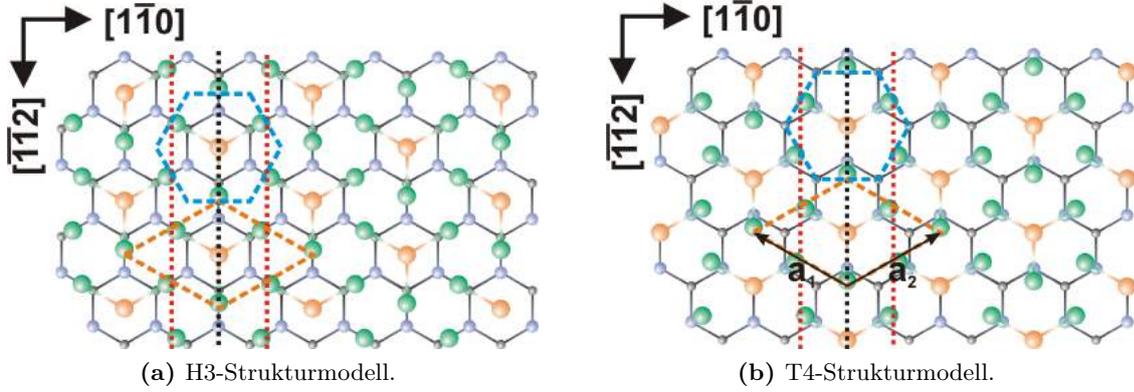


Abbildung 4.5: Strukturmodelle der SIC-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$: Der Abstand der Pb-Atome eines Tetrameres beträgt lediglich $3,00 \text{ \AA}$ im Vergleich zu $3,326 \text{ \AA}$ der Gitterkonstanten von Si in $[11\bar{2}]$ -Richtung. Die orangefarbenen gestrichelten Linien zeigen die primitive $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle und die blauen gestrichelten Linien zeigen die hexagonale Einheitszelle. Die schwarzen gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen und die roten gepunkteten Linien die Gleitspiegelebenen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung an. Weitere Spiegel- und Gleitspiegelebenen ergeben sich durch Rotation um 120° und 240° . Farbcodierung der Atome: Pb orange und grün, 1. Lage Si graublau, 2. Lage Si grau; nach [157, 391].

Gittervektoren der primitiven Einheitszelle

$$\mathbf{a}_1 = -5,76 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} + 3,326 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}, \quad (4.2 \text{ a})$$

$$\mathbf{a}_2 = +5,76 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} + 3,326 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]} \quad (4.2 \text{ b})$$

sind in Abb. 4.5 (b) eingezeichnet.

Aus DFT-Rechnungen geht hervor, dass die Energiedifferenz zwischen H3- und T4-Modell lediglich $6\text{--}10 \text{ meV}$ pro (1×1) -Einheitszelle beträgt [46, 391]. In [48] ergibt sich für die H3-Konfiguration eine um 4 meV niedrigere Energie pro (1×1) -Einheitszelle gegenüber der T4-Konfiguration unter Berücksichtigung der SOI. Zusätzlich zeigen Raman-Spektroskopiemessungen [437], dass bei endlichen Temperaturen ($T = 50 \text{ K}$) beide Konfigurationen vorliegen. Diese Koexistenz führt dazu, dass sich zwei Domänen in Streifenform bilden mit je ca. $1,5\text{--}2,5 \text{ nm}$ Breite in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, in denen jeweils eine der beiden Formen ausgebildet ist (s. Abb. 4.6 u. STM-Bilder in [39, 40, 42, 258, 280–282, 349, 366, 391, 426, 427, 429, 432, 435, 438–440]). Die in [391] simulierten STM-Bilder für das H3- und das T4-Modell stimmen zudem sehr gut mit den Messungen überein. Die Domänenwände bestehen aus mäandrierenden Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen mit besetzten H3- und T4-Positionen, die in $[1\bar{1}0]$ -Richtung gestaucht sind [44, 435]. In $[11\bar{2}]$ -Richtung sind die Domänen im Mittel ca. 16 nm lang, wie (SPA-)LEED- [44, 245, 400, 435, 436]⁶³ und STM-Analysen [258, 391, 435, 438, 439] ergeben. Aufgrund dieser Form der Domänenbildung wird die resultierende Phase auch als SIC-Phase

⁶³ In [245, 436] ist eine Superzelle der SIC-Phase als $(\sqrt{31} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bzw. $\begin{pmatrix} 6 & 5 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ -Pb/Si(111) bezeichnet worden. Die Bedeckung Θ_{Pb} wurde jedoch fälschlicherweise mit Trimeren anstatt Tetrameren berechnet und ist dort somit zu niedrig angenommen worden.

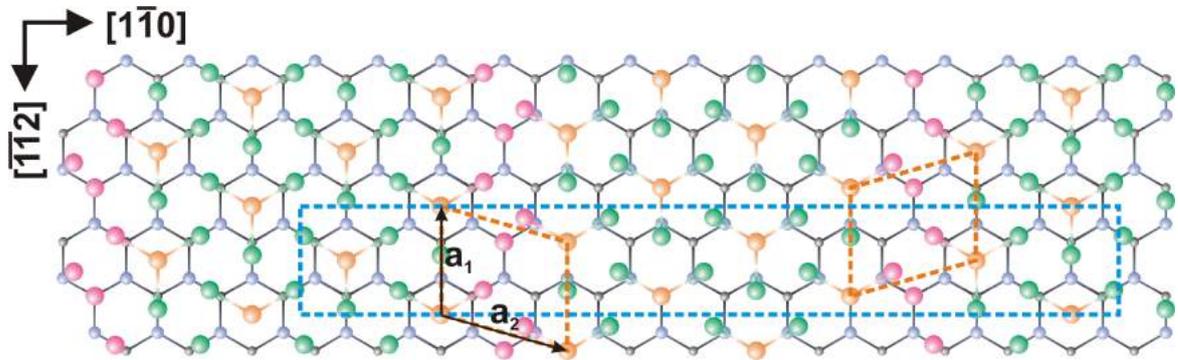


Abbildung 4.6: Strukturmodell der SIC-Phase mit Domänenwänden: Die H3- und T4- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Domänen werden durch Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Domänenwände voneinander getrennt. Die Einheitszellen der beiden Domänenwände weisen je fünf Pb-Atome auf. Der erste Gittervektor $\mathbf{a}_1 = 6,652 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}$ der Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen (orangefarbene Parallelelogramme) verändert sich nicht, jedoch ist der zweite Gittervektor $\mathbf{a}_2 = 7,68 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} \pm 2,217 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}$ gegenüber der normalen $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle um eine halbe atomare Einheit in $[1\bar{1}0]$ -Richtung ($a_{[1\bar{1}0]}/2 = 1,92 \text{ \AA}$) und um ein Drittel der Gitterkonstante in $[11\bar{2}]$ -Richtung ($a_{[11\bar{2}]} / 3 = 1,109 \text{ \AA}$) verkürzt. Die gezeigte lokale Struktur hat eine $(13 \times \sqrt{3})$ -Superzelle mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,308 \text{ ML}$ (blau gestricheltes Rechteck) aus der Raumgruppe $p1$ mit C_1 -Symmetrie und stimmt sehr gut mit der lokalen Struktur in Abb. 6 aus [435] überein. Die Größe der Superzelle stimmt nur zufällig mit der $(13 \times \sqrt{3})$ -Superzelle in [245, 436] überein, die Strukturen unterscheiden sich jedoch. Die Farbco-dierung der Atome folgt denen aus Abb. 4.4 u. 4.5.

bezeichnet⁶⁴. Domänenbildung tritt auch deshalb auf, weil der Nächster-Nachbar-Abstand von Pb im *Bulk* mit $3,50 \text{ \AA}$ größer ist als die Gitterkonstante von Si in $[11\bar{2}]$ -Richtung mit $3,326 \text{ \AA}$ [435]. Der Abstand der Pb-Atome müsste demnach für eine homogene Oberfläche um $5,2\%$ komprimiert werden, welches über große Distanzen energetisch ungünstiger ist als die Bildung von Domänen. Die SIC-Phase tritt oberhalb von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,28 \text{ ML}$ auf (s. Abb. 4.2, [44]). Die Domänenbildung bricht zudem die C_{3v} -Symmetrie der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen, sodass für die SIC-Phase global lediglich C_1 -Symmetrie vorliegt (Vgl. Tab. 2.1). Dabei haben die Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen lediglich C_{1v} - oder C_1 -Symmetrie und können zudem in gespiegelter Form vorliegen. Dies ist der Grund, weshalb neben den drei Rotationsdomänen auch jeweils eine zugehörige Spiegeldomäne vorliegt, sodass die SIC-Phase aus insgesamt sechs unterschiedlichen Domänen besteht.

Im Vergleich zu $4/3 \text{ ML}$ Pb auf Si(111) zeigt die gleiche Menge Pb auf Ge(111) keine Domänenbildung, sondern eine homogene Oberfläche mit $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, die sog. β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase. Dies liegt an der besseren Übereinstimmung der Ge- und Pb-Gitterkonstanten, sodass die Pb-Atome lediglich um 1% gegeneinander komprimiert wer-

⁶⁴ LEED-Bilder suggerieren eine inkommensurable Struktur, da die Spots nicht auf den $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Positionen sind, sondern leicht verschoben. Dies liegt jedoch in einer regelmäßigen, kommensurablen Struktur der Domänen begründet [441].

den müssen, um die idealen Positionen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zu erhalten [435, 442, 443]. SIC- und auch HIC-Phasen treten bei Pb/Ge(111) dennoch auf, jedoch im Vergleich zu Pb/Si(111) bei Bedeckungen über $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$ [435, 439, 444, 445].

Auch die SIC-Phase zeigt Supraleitung [39–42, 266, 428, 429, 440, 446]. Die Übergangstemperatur liegt bei $T_{\text{C}} = 1,83 \text{ K}$ und ihre nach BCS-Theorie extrapolierte Energielücke beträgt bei $T = 0 \text{ K}$ $\Delta_{\text{SC}} = 0,35 \text{ meV}$ ⁶⁵, welche damit beide etwas größer sind als die der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion [39]. Für die SIC-Phase konnte mittels DFT-Berechnungen, Photoelektronenemissionsmessungen und He-Atom-Streuxperimenten gezeigt werden, dass die Elektron-Phonon-Kopplung in den 2D-Schichten gegenüber dem Pb-Bulk deutlich reduziert ist und die Pb-Si-Bindungen die Gitterdynamik modifizieren, was in der deutlich niedrigeren Übergangstemperatur resultiert [47, 157, 260, 429, 434, 447–450]. Das (zeitliche) Verhalten der Phononen in der Pb-Atomlage wurde darüber hinaus in [47, 451] durch Anregung mit ultrakurzen Laserpulsen untersucht. Die Supraleitungskohärenzlänge beträgt mit $\xi \approx 50 \text{ nm}$ ⁶⁶ nur wenig mehr als für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion [40]. Weitere Details zur Supraleitung sind in [39, 40, 42, 43, 428, 429, 432, 440, 452] zu finden.

Wird die SIC-Phase auf einem Si-Substrat präpariert, auf dem zuvor 0,001 ML Co bei RT adsorbiert wurden (die Co-Atome diffundieren dabei in die erste Si-Lage und bilden Cluster), entstehen eindimensionale, topologische, supraleitende Zustände an den Rändern der Co-Cluster. Dies lässt sich mit der Wechselwirkung der (trivialen) supraleitenden Pb-Schicht mit den ferromagnetischen Co-Clustern erklären. Entscheidend hierfür ist zum einen die Rashba-Aufspaltung des metallischen S1/S1*-Oberflächenzustands der SIC-Phase (s. Kap. 5.2.1) und zum anderen die Zeeman-Aufspaltung durch die Co-Cluster, welche die topologischen Randzustände (dispergierende, chirale, eindimensionale Majorana-Zustände) hervorruft, da die Zeeman-Aufspaltung oberhalb der Co-Cluster die triviale in eine chirale Supraleitung überführt [42, 433, 440]. Einzelne Co-Atome als magnetische Störstellen belassen das System dagegen als trivialen Supraleiter und führen lediglich zu gebundenen Zuständen (YU-SHIBARUSINOV-Zustände) [433].

In der Literatur finden sich für die SIC-Phase zudem noch (zeitaufgelöste) RHEED- [47, 309, 356, 361, 365, 435, 451] und winkelaufgelöste UPS- bzw. Photoelektronenemissionsmessungen am Fermi-Niveau [139, 361], sowie XPS-Messungen [367, 430, 431]. Die Höhe der Schottky-Barriere wurde ebenfalls mit XPS zu $\Phi_{\text{SB}} \approx 0,9 \text{ eV}$ vermessen [135, 136]. Auch wurden bereits STS-Untersuchungen oberhalb der Übergangstemperatur zur Supraleitung durchgeführt [42, 349, 368, 423, 427, 440]. SIC-Phasen treten außerdem nicht nur bei der Adsorption von Pb auf Si(111) und Ge(111) auf, sondern auch bei der Adsorption von Ag auf Si(111) [453].

Die DFT-Berechnungen in [48] geben über weitere Eigenschaften der idealen H3- und T4-Strukturen mit $4/3 \text{ ML}$ Pb auf Si(111) Auskunft. So findet sich zwischen diesen beiden Konfigurationen ein um ca. 200 meV pro (1×1) -Einheitszelle höher gelegener Übergangszustand mit durch die Pb-Atome gebildeten atomaren Ketten, der oberhalb von ca. 270 K existieren soll. Ein derartiger Zustand ermöglicht [48] zufolge auch den Übergang zur (1×1) -Phase bei noch höheren Temperaturen (Vgl. Abb. 4.2). Des Weiteren finden sich in [48] Berechnungen der Bandstrukturen und Spin-Texturen der idealen H3- und T4-Konfigurationen bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$. Auch [47] beinhaltet eine Berechnung der Bandstruktur der T4-Konfiguration, die bis auf Details sehr gut mit der Berechnung in [48] übereinstimmt. Weitere Einzelheiten

⁶⁵ In [440] werden etwas kleinere Werte $T_{\text{C}} = 1,6 \text{ K}$, $\Delta_{\text{SC}} = 0,295 \text{ meV}$ angegeben.

⁶⁶ In [429] $\xi = 45 \text{ nm}$, in [280, 282] $\xi = 40,5 \pm 1,7 \text{ nm}$.

zur Bandstruktur werden in Kap. 5.2.1 im Rahmen der erfolgten Messungen diskutiert. In EELS⁶⁷-Messungen wurde die Elektronenkonzentration darüber hinaus zu $n = 2,4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ bestimmt [454].

4.2.4. „Devil’s Staircase“-Phase

Im Phasendiagramm von Pb auf Si(111) bildet die sog. „Devil’s Staircase“-Phase den Tieftemperaturbereich der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase zwischen der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20 \text{ ML}$ und der SIC-Phase ab $\Theta_{\text{Pb}} = 1,28 - 1,333 \text{ ML}$. Abhängig von der jeweiligen Bedeckung transformieren die einzelnen Strukturen bei Erwärmung über $125 - 330 \text{ K}$ reversibel in die (1×1) -, die HIC- oder die SIC-Phase (s. Abb. 4.2). Eine besondere Eigenschaft der DS-Phase ist ihr struktureller Aufbau: Ihre Einheitszelle setzt sich in $[1\bar{1}0]$ -Richtung als lineare Kombination aus n Einheitszellen der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und m Einheitszellen der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion zusammen. In $[11\bar{2}]$ -Richtung setzt sich diese Anordnung über die gesamte Größe einer Si(111)-Terrasse fort. Zwei Beispiele der mit (n, m) bezeichneten Strukturen der DS-Phase sind in Abb. 4.7 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die (n, m) -Strukturen mit geradem $n + m$ eine rechtwinklige Einheitszelle aus der Raumgruppe $p1g1$ mit zwei Gleitspiegelebenen in $[11\bar{2}]$ -Richtung haben (C_1 -Symmetrie), während die (n, m) -Strukturen mit ungeradem $n + m$ eine zentriert-rechteckige Einheitszelle (sechseckige Form) aus der Raumgruppe $c1m1$ mit je einer Spiegel- und Gleitspiegelebene haben (C_{1v} -Symmetrie, Punktgruppe m).

Die Gittervektoren werden durch

$$\mathbf{a}_1 = 6,652 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}, \quad (4.3 \text{ a})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{5n + 3m}{2} \cdot 3,84 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} \quad (4.3 \text{ b})$$

für gerade $n + m$ und

$$\mathbf{a}_1 = 6,652 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]}, \quad (4.3 \text{ c})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{5n + 3m}{2} \cdot 3,84 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} + 3,326 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]} \quad (4.3 \text{ d})$$

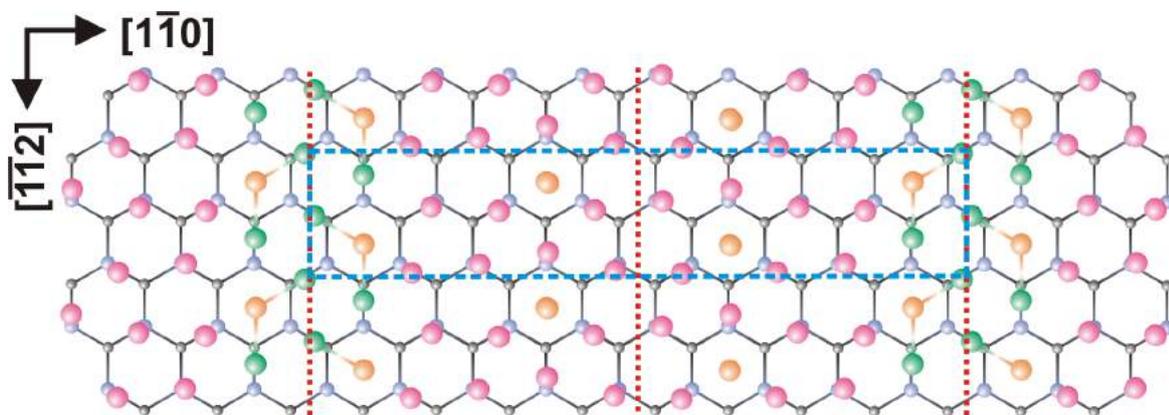
für ungerade $n + m$ beschrieben.

Die einzelnen Strukturen der DS-Phase können sehr gut mittels STM oder SPA-LEED unterschieden werden. In STM-Bildern gibt es einen starken Kontrast zwischen den ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)- und ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Einheitszellen, sodass die Periodizität in $[1\bar{1}0]$ -Richtung $p = (5n + 3m) \cdot 1,92 \text{ \AA}$ leicht auflösbar ist [44, 242, 417, 423, 425, 441, 455, 456]. Bei SPA-LEED-Analysen hängt der Abstand zweier Spots einer Rotationsdomäne von (n, m) ab, sodass hierüber ebenfalls auf die Bedeckung geschlossen werden kann [44, 242, 328, 425, 456].

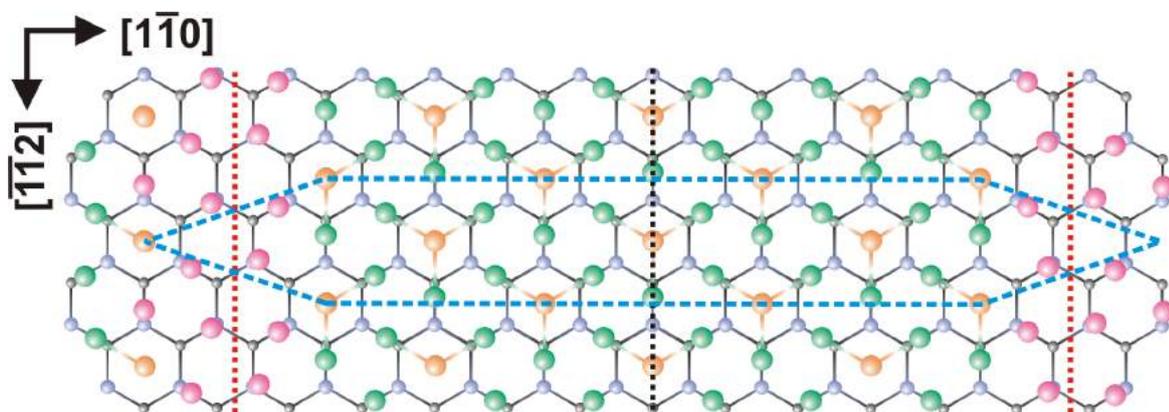
Die Periodizität p bzw. die Größe der Einheitszelle sind nicht immer eindeutig. So haben die (4,1)- und (1,6)-Struktur gleich große Einheitszellen ($\sqrt{133} \times \sqrt{3}$) mit einer Periodizität von $p = 44,16 \text{ \AA}$, aber unterschiedliche Bedeckungen von $1,217 \text{ ML}$ bzw. $1,304 \text{ ML}$. Die Bedeckung einer (n, m) -Struktur lässt sich zu

$$\Theta_{\text{Pb}} = \frac{6n + 4m}{5n + 3m} \text{ ML} \quad (4.4)$$

⁶⁷ Electron Energy Loss Spectroscopy



(a) (3,1)-Struktur: $(9 \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle. Raumgruppe $p1g1$. $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,222$ ML.



(b) (1,6)-Struktur: $(\sqrt{133} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle. Raumgruppe $c1m1$. $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,304$ ML.

Abbildung 4.7: Strukturmodelle der (3,1)- und (1,6)-Struktur der DS-Phase in H3-Konfiguration: Die blauen gestrichelten Linien zeigen die Einheitszellen. Die schwarzen gepunkteten Linien zeigen die Spiegelebenen und die roten gepunkteten Linien die Gleitspiegelebenen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung an. Die Farbcodierung der Atome folgt denen aus Abb. 4.4 u. 4.5.

berechnen [328, 417, 425]. Dies bedeutet, dass z. B. zwischen den Strukturen $(n + 1, m)$ und (n, m) ein Bedeckungsintervall

$$\Delta\Theta_{\text{Pb}} = \frac{2m}{(5n + 3m)(5(n + 1) + 3m)} \text{ ML} \quad (4.5)$$

liegt, in dem entweder beide Strukturen nebeneinander koexistieren, die Bedeckung also inhomogen verteilt ist, oder aber weitere Strukturen (n', m') existieren, die zwischen $(n + 1, m)$ und (n, m) liegen. Diese Frage lässt sich mit der namensgebenden sog. „Devil’s Staircase“ beantworten: Der Unterschied des chemischen Potentials $\Delta\mu$ zwischen zwei (n, m) -Strukturen bildet abhängig von der Bedeckung einen stufenförmigen Verlauf, der die Stabilität einer Struktur (n, m) anzeigt [455, 457]. Die Länge $\Delta\mu$ jeder Stufe ist dabei proportional zur Größe der Einheitszelle [242]. Auf defektfreien Terrassen bildet sich über große Distanzen jeweils nur

eine spezifische Struktur (n,m) aus, wie STM- und SPA-LEED-Messungen zeigen [44, 242, 331, 417, 423, 425, 455–457]. Wichtig erscheint dabei eine auf Stress basierende, langreichweitige, repulsive Wechselwirkung, die die Pb-Atome davon abhält, Bereiche unterschiedlicher Bedeckung zu bilden [441, 457].

Darüber hinaus besitzt die DS-Phase eine weitere unerwartete Eigenschaft: Dampft man kleine Mengen zusätzliches Pb bei tiefen Temperaturen (40 – 120 K) auf eine (n,m) -Struktur auf, transformiert diese zur entsprechenden (n',m') -Struktur mit höherer Bedeckung. Das Erstaunliche daran ist, dass dies während sehr kurzer Zeitintervalle (der Depositionszeit) und über makroskopische Distanzen (Spot-Durchmesser im LEED) geschieht [425, 457]. Dieses Verhalten wird daher als kollektive Kinetik bezeichnet und ist Gegenstand aktueller Untersuchungen zur Selbstorganisation atomarer Schichten [242, 328, 456–459]. Z. B. zeigen Experimente und DFT-Berechnungen zur Adsorption des C₆₀-Fullerens auf der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase, dass lokale Defekte – hier durch die C₆₀-Moleküle induziert – zu Umstrukturierungen der atomaren Pb-Struktur führen und so Bereiche von über $50 \times 50 \text{ nm}^2$ von der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion abhängig von der Menge der Moleküle z. B. in eine (2,1)-Struktur oder HIC-Phase transformieren können [350, 351].

Die spezifischen elektronischen Eigenschaften der DS-Phase sind noch weitgehend unbekannt. Lediglich STS- und ARPES-Messungen wurden bislang publiziert. In den STS-Messungen in [423] zeigt die DS-Phase ähnliche Signaturen wie die ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und die HIC- und SIC-Phasen. Die ARPES-Messungen in [138] der (2,6)-Struktur mit 1,286 ML Pb und einer ($14 \times \sqrt{3}$)-Einheitszelle wurden auf einem Substrat mit 2° Fehlschnitt in $[11\bar{2}]$ -Richtung durchgeführt, sodass im gesamten Messbereich lediglich eine Domäne vorlag. Aufgrund der hohen Bedeckung ist die Bandstruktur ähnlich der der SIC-Phase [47], jedoch mit zusätzlichen Aufspaltungen entsprechend der Größe der Einheitszelle in $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Die Höhe der Schottky-Barriere wurde dabei zu $\Phi_{\text{SB}} = 1,06 \text{ eV}$ bestimmt. In Kombination mit zuvor adsorbierten Co-Atomen finden sich in der DS-Phase ebenfalls wie in der SIC-Phase null- und eindimensionale Majorana-Zustände [43, 452].

Die Eckpunkte der 1. SBZ der Strukturen der DS-Phase – und damit die Größe der 1. SBZ – lassen sich abhängig von der jeweiligen Struktur durch

$$k_x = \pm \frac{2\pi}{4a_{[11\bar{2}]}} , \quad (4.6 \text{ a})$$

$$k_y = \pm \frac{2\pi}{a_{[1\bar{1}0]}} \cdot \frac{1}{5n + 3m} \quad (4.6 \text{ b})$$

für $n + m$ gerade bzw.

$$k_x = \pm \frac{2\pi}{4a_{[11\bar{2}]}} \cdot \left[1 - \left(\frac{2a_{[11\bar{2}]}}{(5n + 3m)a_{[1\bar{1}0]}} \right)^2 \right] , \quad (4.7 \text{ a})$$

$$k_y = \pm \frac{2\pi}{a_{[1\bar{1}0]}} \cdot \frac{1}{5n + 3m} \quad (4.7 \text{ b})$$

und

$$k_x = \pm \frac{2\pi}{4a_{[11\bar{2}]}} \cdot \left[1 + \left(\frac{2a_{[11\bar{2}]}}{(5n + 3m)a_{[1\bar{1}0]}} \right)^2 \right] , \quad (4.7 \text{ c})$$

$$k_y = 0 \quad (4.7 \text{ d})$$

für $n + m$ ungerade berechnen. Somit ergibt sich für gerade $n + m$ eine rechteckige 1. SBZ und für ungerade $n + m$ eine sechseckige 1. SBZ (s. a. Abb. 2.2). Aus den Koordinaten der Eckpunkte lassen sich als Spezialfälle auch die 1. SBZs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit $(n, m) = (1, 0)$ bzw. $(n, m) = (0, 1)$ ableiten. Für ungerades $n + m$ haben die Hochsymmetriepunkte unterschiedliche Symmetrien, nämlich C_{1v} -Symmetrie am $\bar{\Gamma}$ -Punkt, C_{1h} -Symmetrie am \bar{X} -Punkt (jeweils Punktgruppe m) und C_1 -Symmetrie am \bar{Y} -Punkt. Die Strukturen mit geradem $n + m$ haben an allen ihren Hochsymmetriepunkten ($\bar{\Gamma}$, \bar{X} , \bar{X}' , \bar{M}) lediglich C_1 -Symmetrie (Vgl. Tab. 2.1).

Wegen der dreizähligen Symmetrie des Si-Substrats existieren zudem für alle (n, m) -Strukturen je drei Rotationsdomänen. Dies führt in ARPES-Messungen zu einer Quasi-Sechszähligkeit der 1. SBZs durch Überlagerung der Photoelektronenemissionsspektren im k -Raum (Vgl. Abb. 2.2 (f) u. (d)).

4.2.5. Hexagonal Incommensurate-Phasen

Die HIC-Phasen bilden im Phasendiagramm von Pb/Si(111) bei Raumtemperatur ab $\Theta_{\text{Pb}} = 1,22$ ML den Bereich zwischen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei 1,2 ML und der SIC-Phase ab 1,28 ML (s. Abb. 4.2) und gehören damit zur α -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase [353]. Sie sind zwischen minimal 120 K und maximal 370 K stabil und transformieren bei Temperaturerniedrigung in Strukturen der DS-Phase bzw. bei Temperaturerhöhung in die (1×1) -Phase. Genau wie die SIC-Phase sind auch die HIC-Phasen entgegen ihrer Benennung eigentlich kommensurable Strukturen, die wegen ihrer Reflexe im LEED jedoch nicht als solche erkannt wurden [441]. Die Abweichung der Spot-Positionen resultiert aus der Anordnung der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen, die die Domänenwände der Superzellen bilden [441].

Strukturelle Untersuchungen wurden sowohl mit (SPA-)LEED [44, 242, 331, 430, 435, 456, 457] und RHEED [356, 361, 435] als auch mit dem STM [44, 242, 352, 366, 417, 435, 441, 456] durchgeführt. Es wurden drei Bereiche (HIC A-C) mit leicht unterschiedlichen Strukturen identifiziert, die auf unterschiedliche Bedeckungen zurückzuführen sind (s. Abb. 4.2) [44, 242, 456, 457]. Die Superzellen weisen eine hexagonale Form auf, die durch $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen im Inneren und $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Zellen am Rand von zwei gegeneinander rotierten Dreiecken gebildet wird [44, 242, 441]. Ihre Domänengröße variiert von 4,67 nm bei der HIC A-Phase bis zu 5,89 nm bei der HIC C-Phase [44, 242, 456]. Die Domänenwände bestehen nicht aus exakten $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen, da sowohl H3- als auch T4-Positionen besetzt sind, ähnlich wie bei der SIC-Phase [44, 242, 441]. Dies führt bei den HIC-Phasen zu einer leichten Verdrehung gegen die $[11\bar{2}]$ -Richtung und damit zu einer rhombischen Einheitszelle [44, 242]. Die Gittervektoren können als

$$\mathbf{a}_{n,m} = (1 + 1,5n) \cdot 3,84 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} + m \cdot 3,326 \text{ \AA} \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]} \quad (4.8)$$

mit $n + m = 2p, p \in \mathbb{N}_0$ beschrieben werden [44]. Die SPA-LEED-Bilder der zweiten $(\sqrt{31} \times \sqrt{3})$ -Phase in [245, 436] entsprechen einer der HIC-Phasen mit niedriger Bedeckung, wie anhand der Aufspaltung der Reflexe zu sehen ist. Die dort angegebene Bedeckung basiert jedoch auf dem Trimer-Modell für die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und nicht auf dem Tetramer-Modell, sodass die angegebene Bedeckung im Vergleich zur wahren Bedeckung als zu niedrig angenommen wurde.

Neben strukturellen Analysen wurden auch Untersuchungen der elektronischen Struktur mittels winkelaufgelöstem UPS [361], STS [423] und XPS [135, 136, 430] durchgeführt. Die

Oberfläche ist wie bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase metallisch und weist neben einem im Vergleich zur SIC-Phase sehr ähnlichen UPS-Spektrum auch das (1×1) -Potential der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf. Die Höhe der Schottky-Barriere konnte zu $\Phi_{\text{SB}} \approx 0,9 \text{ eV}$ bestimmt werden [135, 136].

4.2.6. (1×1) -Phase

Die (1×1) -Phase bildet den Abschluss der in dieser Arbeit beschriebenen Oberflächenrekonstruktionen von Pb auf Si(111). Sie tritt in einem großen Bedeckungsbereich auf, beginnend mit $\Theta_{\text{Pb}} \approx 0,9 \text{ ML}$ und reicht bis über 1,5 ML hinaus [356, 401]. Die (1×1) -Phase existiert im Temperaturbereich oberhalb der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, den DS-, HIC- und SIC-Phasen (mit $T_{\text{C}} = 225 - 370 \text{ K}$ bis 1,30 ML, s. Abb. 4.2) und wird bei hohen Temperaturen durch Desorption der Pb-Atome zerstört, wodurch sich die β - $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase bei niedrigerer Bedeckung ausbildet.

Strukturelle Untersuchungen wurden mit RHEED [356, 361, 435], LEED [334, 337, 359, 360, 400] und dem STM [341, 352, 357, 358, 364, 366, 411, 412, 415, 417, 427, 435] durchgeführt. Sie zeigen, dass sich beim Phasenübergang die Flächenanteile bei Mischphasen auf der Oberfläche nicht ändern [417], sodass die überschüssigen Pb-Atome auf der (1×1) -Fläche verbleiben müssen. Dies gelingt nur, wenn ein Teil der Pb-Si-Bindungen aufgebrochen wird und die nun „freien“ Pb-Atome als „Flüssigkeit“ auf der Oberfläche zwischen verschiedenen Gleichgewichtslagen diffundieren [158, 412, 421, 435]. Daher wird auch von einem „Ordnungs-Unordnungs“-Phasenübergang gesprochen [44, 435]. Die übrigen Pb-Atome besetzen dann laut STM-Messungen und DFT-Berechnungen die T1-Positionen der Einheitszelle [158, 391]. Neueste DFT-Berechnungen bestätigen die Annahme der T1-Positionen der Pb-Atome durch Berechnung der Energien der verschiedenen Konfigurationen. Demnach liegt die H3-Konfiguration 0,352 eV und die T4-Konfiguration 0,375 eV über der T1-Konfiguration [460].

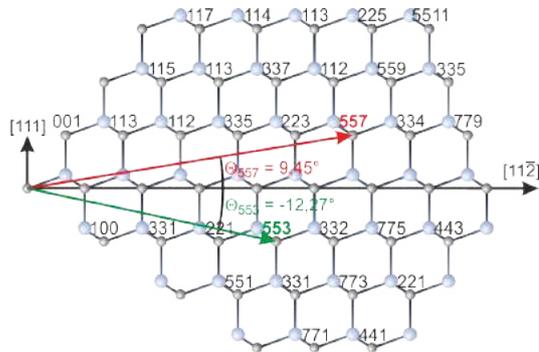
Die elektronischen Eigenschaften der (1×1) -Phase wurden mittels UPS [361], XPS [461], STS [423, 427] und ARPES [421, 422] vermessen. Wie für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wurde auch für die (1×1) -Phase die auf die verschiedenen beteiligten Valenzorbitale projizierte Zustandsdichte in T1-Konfiguration berechnet [158]. Beide Zustandsdichten sind relativ ähnlich, wobei in der (1×1) -Phase die Modulationen weniger stark ausfallen und die Orbitale einen größeren Energiebereich einnehmen.

DFT-Berechnungen der Bandstruktur und der Spin-Textur mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1 \text{ ML}$ wurden in [166, 460] durchgeführt. Die Ergebnisse von [166] zur T4-Konfiguration wurden von [460] exakt reproduziert und durch die berechnete Bandstruktur der T1-Konfiguration und einer freistehenden Pb-Monolage ergänzt. Der wesentliche Unterschied beider Konfigurationen besteht demnach in der stärkeren Spin-Bahn-Aufspaltung der T4-Konfiguration, die durch die veränderten Bindungsverhältnisse der Pb-Atome hervorgerufen wird. In der T4-Konfiguration ist der Anteil der $\text{Pb}6p_z$ -Orbitale an der Zustandsdichte nahe des Fermi-Niveaus aufgrund der Bindung der Pb-Atome zu je drei Si-Atomen größer im Vergleich zur T1-Konfiguration, die am Fermi-Niveau im Wesentlichen nur Zustandsdichte der $\text{Pb}6p_{x,y}$ -Orbitale aufweist, während die kovalenten Pb-Si-Bindungen (basierend auf den $\text{Pb}6p_z$ -Orbitalen) energetisch abgesenkt und lokalisiert sind. Insgesamt ergibt sich damit ein vom Si-Substrat entkoppeltes 2DEG durch die Pb-Atome [460]. Beide Konfigurationen haben am \bar{M} -Punkt zudem einen TRIM, um den herum die Spin-Aufspaltung der Bänder mit dem Rashba-Effekt beschrieben werden kann.

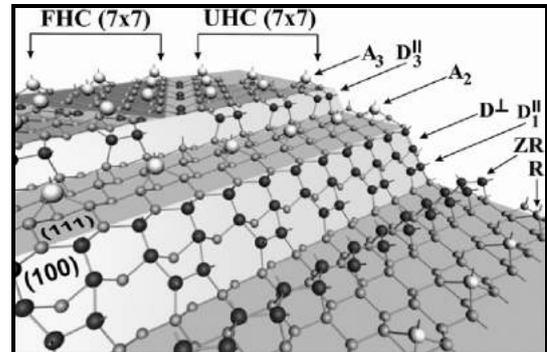
Der Vergleich der DFT-Berechnungen mit den vermessenen Fermi-Flächen und der Bandstruktur bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20 \text{ ML}$ aus [421, 422] erweist sich als nicht eindeutig. Die gemessenen Daten passen sowohl zur Bandstruktur der T1- als auch der T4-Konfiguration, jeweils mit unterschiedlichen Fermi-Niveaus. Die berechnete Fermi-Energie E_{F} in T1-Konfiguration liegt etwa $1,3 \text{ eV}$ unter der gemessenen, während im Fall der T4-Konfiguration Verschiebungen von E_{F} von $-0,5 \text{ eV}$ und $+0,2 \text{ eV}$ zu möglichen Übereinstimmungen mit den Messungen führen. Detailliertere Messungen der Bandstruktur und Spin-Textur sollten Aufschluss über die tatsächliche atomare Struktur geben.

Die in T4-Konfiguration berechnete Bandstruktur zeigt des Weiteren eine hohe Ähnlichkeit mit den Bandstrukturen von $1 \text{ ML Tl/Si}(111)-(1 \times 1)$ und $\text{Tl/Ge}(111)-(1 \times 1)$ [110, 163, 165], die ebenfalls eine T4-Konfiguration aufweisen, wobei der Spin-aufgespaltene, metallische Oberflächenzustand von $\text{Pb/Si}(111)-(1 \times 1)$ mit Minimum der Elektronen-artigen Dispersion am $\bar{\text{K}}$ -Punkt den Zuständen S3 und S4 in [110] entspricht, die in den Tl-Systemen nur durch Dotierung metallisch werden [33, 160, 164]. Im Pb/Si -System ist dieser Oberflächenzustand demnach gegenüber den Tl-Systemen um etwa $1,5 \text{ eV}$ in Richtung der besetzten Zustände verschoben. Am $\bar{\text{K}}$ -Punkt hat dieser Zustand eine Zeeman-artige Spin-Aufspaltung von 820 meV mit Spin-Polarisation senkrecht zur Oberfläche (Vgl. Kap. 2.2.2, [166]; Spin-Aufspaltung am $\bar{\text{K}}$ -Punkt in $\text{Tl/Si}(111)-(1 \times 1)$ etwa $600 - 720 \text{ meV}$ [110, 163] und in $\text{Tl/Ge}(111)-(1 \times 1)$ etwa $570 - 700 \text{ meV}$ [110, 164]) und um den $\bar{\text{M}}$ -Punkt herum eine Rashba-Aufspaltung (Vgl. Kap. 2.2.1).

Eine (1×1) -Phase existiert ebenso bei $\text{Pb/Ge}(111)$. Die Übergangstemperatur ist abhängig von der Bedeckung, beträgt mindestens jedoch $T_{\text{C}} = 170 \text{ }^\circ\text{C}$. Es handelt sich dabei um einen reversiblen Phasenübergang 1. Ordnung [462–464].



(a) Indizierung vizinaler Si-Oberflächen ausgehend von Si(111) mit Fehlschnitt in $[11\bar{2}]$ -Richtung; der Fehlwinkel Θ ist exemplarisch für die (557)- und (553)-Orientierung angegeben; nach [49].



(b) Modell der Si(557)-Oberfläche: Die Triple Steps beinhalten neben Adatomreihen (R, A₂, A₃) und einer Zickzack-Reihe (ZR) auch senkrecht (D[⊥]) und parallel (D₁^{||}, D₃^{||}) zu den Stufen ausgerichtete Dimere. Im oberen Bereich ist die sich anschließende (111)-Terrasse mit (7 × 7)-Rekonstruktion zu sehen; aus [465].

Abbildung 4.8: Indizierung vizinaler Si-Oberflächen und Modell der Si(557)-Oberfläche

4.3. Si(557)-Substrat

Auf der flachen, stufenlosen Si(111)-Oberfläche bilden sich nach Pb-Adsorption wie oben beschrieben im Wesentlichen Phasen aus, die quasi-zweidimensionale Eigenschaften aufweisen. Lediglich die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und die DS-Phasen weisen quasi-eindimensionale Merkmale auf. Strukturen mit quasi-eindimensionalen Eigenschaften lassen sich jedoch auch auf gestuften Substraten erzeugen.

Ausgehend von einer Si(111)-Oberfläche stellt der Fehlwinkel Θ zur $[11\bar{2}]$ -Richtung ein geeignetes Maß zur Wahl der Vizinalität dar (s. Abb. 4.8 (a)). Je steiler dabei der Fehlwinkel ist, desto höher ist die mittlere Stufendichte des Substrats. Bei negativen Winkeln Θ (Oberflächenindizes $(h\bar{h}k)$ mit $h > k$) liegen (110)-artige Einzelstufen mit einzelnen *Dangling Bonds* an der Stufenkante vor. Bei positiven Winkeln Θ (Oberflächenindizes $(h\bar{h}k)$ mit $h < k$) sind die Stufen dagegen (100)-artig. Dadurch haben die Atome an der Stufenkante je zwei *Dangling Bonds*. Eine solche Struktur mit Einzelstufen der Höhe $d_{(111)} = 3,135 \text{ \AA}$ wird ab einer bestimmten kritischen mittleren Stufendichte jedoch energetisch ungünstig. Stattdessen führt

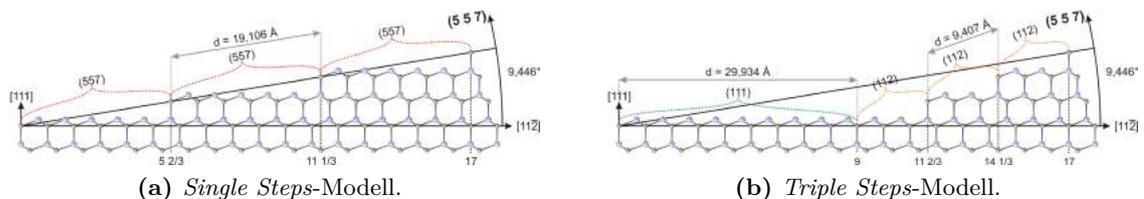


Abbildung 4.9: Strukturmodelle der Si(557)-Stufenstruktur: Aufgrund von Step Bunching und der Bildung der (7 × 7)-Rekonstruktion auf den (111)-Terrassen ist lediglich die in (b) dargestellte Struktur stabil.

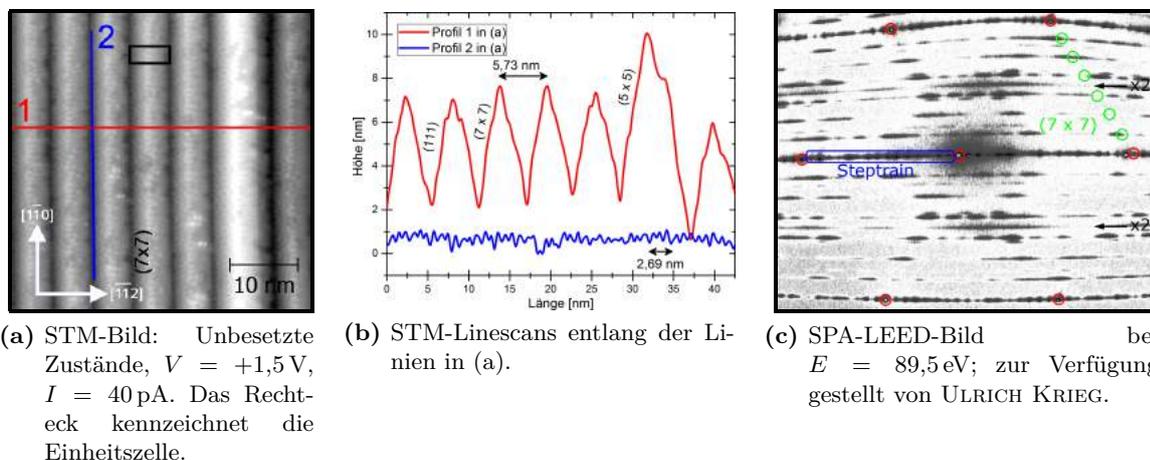


Abbildung 4.10: STM- und SPA-LEED-Analyse der Si(557)-Struktur: Die atomare Struktur lässt sich im STM-Bild und den zugehörigen Linescans deutlich erkennen. Die Korrugation senkrecht zu den Stufen ist dabei deutlich größer als auf der (111)-Terrasse. Das Beugungsbild zeigt deutlich den *Step Train* mit 16 Spots (blau umrandet) zwischen den (1×1) -Reflexen (in rot), die (1×1) -Rekonstruktion, sowie die $(\times 2)$ -Periodizität entlang der Stufen.

Step Bunching in Kombination mit Bildung größerer (7×7) -rekonstruierter Terrassen zu einer Minimierung der Oberflächenenergie [466–468].

Auch die Oberfläche von Si(557) besteht nicht aus einer gleichmäßig gestuften Struktur mit einer Periodizität von $5 \frac{2}{3} a_{[11\bar{2}]} = 1,885\text{ nm}$ in der (111)-Ebene, sondern aus Dreifachstufen (*Triple Steps*), die durch (111) - (7×7) -Terrassen voneinander getrennt sind (s. Abb. 4.8 (b) u. 4.10 (a)) [469–472]. Zum Vergleich sind die Strukturmodelle von Si(557) mit *Single* und *Triple Steps* in Abb. 4.9 dargestellt. Die Stufenstruktur weist anstelle der (557)- eine (112)-Orientierung auf. Dadurch ist die Orientierung der resultierenden vizinalen Oberfläche weiterhin makroskopisch in (557)-Richtung beibehalten und die Periodizität senkrecht zu den Stufen beträgt in der (111)-Ebene $17 a_{[11\bar{2}]} = 5,654\text{ nm}$. Bezieht man zusätzlich die Stufen mit ein, beträgt die Periodizität $5,732\text{ nm}$ (s. Abb. 4.10 (b)) [470].

Entlang der Stufen, also in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, beträgt die Periodizität aufgrund der (7×7) -Rekonstruktion auf der (111)-Terrasse nur $7 a_{[1\bar{1}0]} = 7 \cdot 3,84\text{ \AA} = 2,69\text{ nm}$ (s. Abb. 4.10 (b)). Daraus ergibt sich die Fläche der Einheitszelle zu $15,4\text{ nm}^2$.

Neben dem sog. *Step Train* aus 16 Spots entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung zwischen den (1×1) -Spots, der die Periodizität senkrecht zu den Stufen widerspiegelt und der (7×7) -Rekonstruktion der (111)-Terrassen, weist das SPA-LEED-Bild in Abb. 4.10 (c) auch eine $(\times 2)$ -Periodizität auf. Diese entspringt mehreren Dimerstrukturen auf der (112)-Facette [465, 473].

Die Struktur der Si(557)-Oberfläche war bereits Gegenstand zahlreicher Untersuchungen. Mittels (SPA)-LEED [56, 59, 203, 465, 473–482], STM [58, 59, 203, 465, 470, 476–478, 483–492], Rasterkraftmikroskopie [493] und RAS⁶⁸ [494] konnten die atomare Anordnung der Atome an der Oberfläche und deren Morphology bestimmt werden. DFT-Berechnungen haben diese Ergebnisse bestätigt und ergänzt [483, 487, 494]. Zudem wurden auch XPS- [477, 478,

⁶⁸ Reflectance Anisotropy Spectroscopy

487], ARPES- [490, 491], EELS- [454, 495], Leitfähigkeits- [475] und STS-Messungen [203] zur Bestimmung der elektronischen Struktur an der Si(557)-Oberfläche durchgeführt.

4.4. Monolagen-Strukturen von Pb/Si(557)

Bereits um die Jahrtausendwende begannen Untersuchungen dünner Pb-Filme auf vizinalen Si-Substraten. Exemplarisch sei in diesem Zusammenhang die LEEM⁶⁹-Studie von BAUER und JALOCOWSKI [496] genannt, die die Selbstorganisation von mesoskopischen Pb-Nanodrähten auf verschiedenen Au-dekorierten vizinalen Si-Oberflächen beleuchtete. Hierbei bildeten sich bei RT anisotrope – lang und schmal – Kristallite entlang der Stufen aus, die nach und nach die gesamte Oberfläche bedeckten.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf eine vorherige Au-Dekoration im Submonolagenbereich verzichtet und Pb oberhalb der RT auf Si(557) aufgedampft. Auf dieser Oberfläche existieren ebenso wie auf der Si(111)-Oberfläche zahlreiche verschiedene Strukturen im Bedeckungsbereich um 1 ML Pb⁷⁰. Im Folgenden sollen einige dieser Strukturen näher beleuchtet werden.

Das initiale Wachstum von Pb-Nanodrähten bis zu 1 ML wurde bislang kaum untersucht. Lediglich die STM-Messungen in [497] und SPA-LEED-Mesungen in [474] haben diesen Bedeckungsbereich bislang betrachtet.

⁶⁹ Low Energy Electron Microscopy

⁷⁰ Die Definition der Monolage auf der vizinalen Si(557)-Oberfläche entspricht derjenigen der Si(111)-Oberfläche (s. o.).

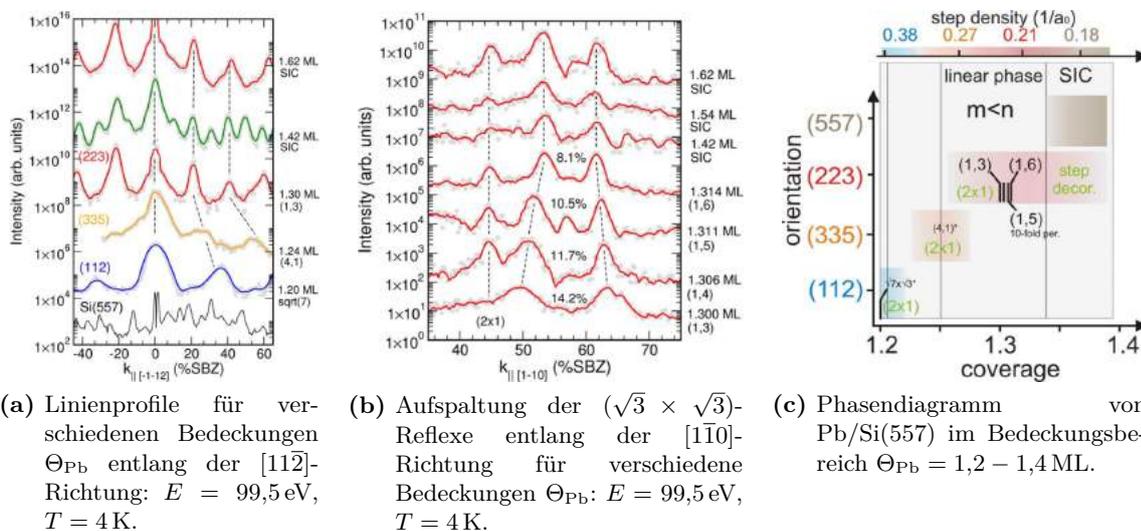


Abbildung 4.11: SPA-LEED-Profil und Phasendiagramm der Pb/Si(557)-Oberfläche: (a) Die Orientierung der Facettenstruktur hängt von der Bedeckung ab. Die (223)-Orientierung liegt erst ab etwa $\Theta_{Pb} = 1,30$ ML vor. Neben der Orientierung der Facetten hat die Bedeckung auch einen Einfluss auf die Aufspaltung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe in (b), die charakteristisch für die verschiedenen Strukturen der DS-Phase ist. Das Phasendiagramm in (c) fasst die gefundenen Strukturen zusammen. Bei niedrigen Bedeckungen liegt die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf der (111)-Terrasse vor, bei mittleren Bedeckungen verschiedene Strukturen der DS-Phase und bei hohen Bedeckungen die SIC-Phase; aus [476].

Die sog. $\alpha \times 2$ - und $\beta \times 2$ -Phasen lagen im Fokus der Studien von YEOM, MORIKAWA und KIM. Hierbei handelt es sich um zur (223)-Orientierung umfacettierte Pb/Si(557)-Strukturen, die *keine* $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf den (223)-Facetten aufweisen. Die $\alpha \times 2$ -Phase entsteht durch Adsorption von ungefähr 2 ML Pb bei Temperaturen von 100 K bis RT und anschließendem Erwärmen bei 600 – 660 K [498]. Die $\beta \times 2$ -Phase wird genauso präpariert, jedoch bei 720 – 740 K ausgeheilt und hat durch die erhöhte Desorptionsrate eine niedrigere Bedeckung [498]. Um den Fehlwinkel zur (557)-Orientierung makroskopisch auszugleichen, besitzen beide Phasen größere (111)-orientierte Terrassen mit der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion [498]. Die Struktur beider Phasen wurde mittels STM [498–500] und LEED [498, 500, 501] untersucht. Die elektronischen Eigenschaften wurden mit μ -Vierpunktmessungen [502], XPS [501] und ARPES [499, 500, 502] evaluiert.

Dickere Pb-Filme ab 2 ML Bedeckung auf Si(557) standen ebenfalls im Fokus mehrerer Studien. Morphologie und Facettierung wurden dabei mittels STM [503, 504] und SPA-LEED [61, 212, 474, 475, 480, 505] untersucht. Der Einfluss der Facettierung auf Transporteigenschaften (Leitfähigkeit, Magnetleitfähigkeit) wurde ebenfalls ermittelt [61, 212, 475, 480, 482, 505].

Im Interesse der Arbeitsgruppe PFNÜR lagen bis dato nicht nur dickere Pb-Filme auf Si(557), sondern insbesondere diejenigen Monolagenstrukturen, die auch von Pb/Si(111) bekannt sind. Im Bedeckungsbereich $\Theta_{\text{Pb}} = 1,2 - 1,65$ ML lassen sich sowohl die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei 1,20 ML [212, 454, 476, 506], als auch die SIC-Phase (ab etwa 1,4 ML) [62, 63, 476, 507] im Pb/Si(557)-System erzeugen. Dazwischen befindet sich wie im Pb/Si(111)-System die DS-Phase mit zahlreichen unterschiedlichen (n,m) -Strukturen [60, 475, 476, 507]. All diese Phasen bilden sich auf den (111)-Terrassen aus. Die Orientierung der Facetten variiert zudem je nach Bedeckung. Zur makroskopischen Beibehaltung der (557)-Orientierung wechseln sich die gestuften Facetten typischerweise auf einer Größenskala von mehreren 10 nm mit größeren (111)-Terrassen ab, die einige Nanometer breit sind. Charakteristische Linienprofile aus SPA-LEED-Messungen für die verschiedenen Phasen und ein einfaches Phasendiagramm sind in Abb. 4.11 abgebildet (aus [476]). Die Präparation dieser Phasen gelingt am besten mit einem zweistufigen Aufdampfprozess [63]: Zunächst werden 3 ML Pb bei 330°C aufgedampft, um die gewünschte Facettierung zu erhalten. Direkt im Anschluss wird die Temperatur auf 300°C verringert und weitere 2 ML Pb aufgedampft, um die (1,5)-Struktur zu erhalten (s. u.). Aufgrund der relativ hohen Temperaturen während des Aufdampfens desorbiert überschüssiges Pb von der Oberfläche. Höhere Bedeckungen lassen sich schließlich durch Aufdampfen kleinster Mengen Pb auf der kalten (1,5)-Struktur ($T \approx 80$ K) erzeugen [476].

4.4.1. „Devil's Staircase“-Phase im Pb/Si(557)-System

Für ein tieferes Verständnis der SR-ARPES-Messungen in Kap. 6.2 dieser Arbeit an der (1,5)-Struktur mit 1,31 ML und mit zusätzlicher Bedeckung im Bereich bis insgesamt 1,53 ML Pb sollen im Weiteren einige Aspekte der DS-Phase auf Pb/Si(557) ausführlicher dargestellt werden. Aufgrund der außergewöhnlichen elektronischen Effekte – wie in Kap. 6.2 gezeigt wird besitzt die (1,5)-Struktur mit 1,31 ML in der Richtung senkrecht zu den Stufen eine quasi-eindimensionale SODW unterhalb von $T_C = 78$ K – wurden bis zum Beleg der Existenz dieses neuartigen, hochgradig korrelierten Quantenzustands bereits zahlreiche Studien an der DS-Phase durchgeführt. So sind bspw. ausführliche Reviews [481, 495, 508, 509] zur geometrischen Struktur, der Leitfähigkeit, dem Magnetotransport und der elektronischen Struktur erschienen.

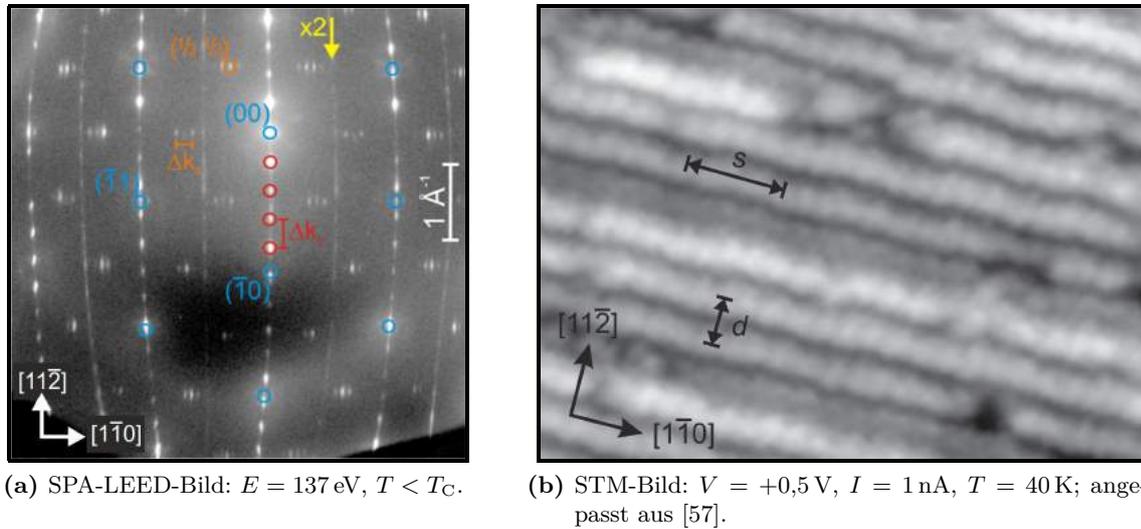
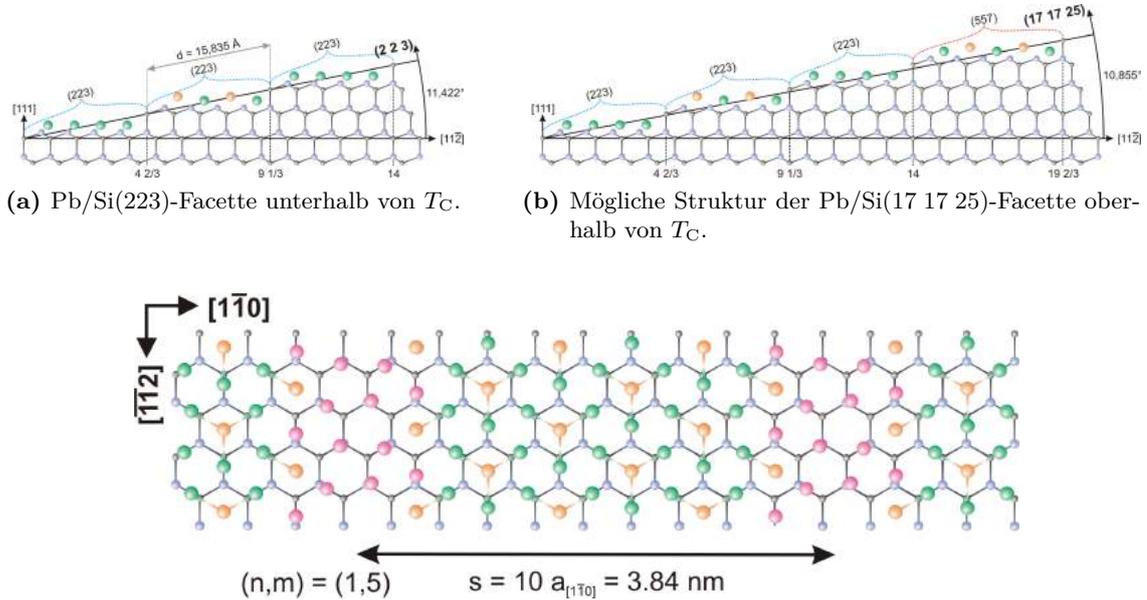


Abbildung 4.12: SPA-LEED- und STM-Bild der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,30 \text{ ML}$: Die Oberfläche weist unterhalb von $T_C = 78 \text{ K}$ (223)-orientierte Facetten mit einer Periodizität von $d = 1,58 \text{ nm}$ in $[11\bar{2}]$ -Richtung auf. Auf den Terrassen befinden sich die Pb-Atome in der (1,5)-Struktur der DS-Phase, wodurch die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe in (a) aufgespalten, bzw. das Erscheinungsbild der Atomdrähte entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung mit $s = 10 a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ nm}$ moduliert sind.

Strukturelle Untersuchungen wurden vor allem mit SPA-LEED [56, 60, 62, 212, 454, 475, 476, 482, 505–507, 510] bzw. LEED [35, 59, 63, 212, 410, 511] und mit dem STM [57–59, 62, 201, 410, 476, 492, 495, 512–514] durchgeführt. Ergänzend wurden auch Messungen mit RHEED [515] und RAS [510, 516] durchgeführt.

In Abb. 4.12 sind ein SPA-LEED- und ein STM-Bild unterhalb des Phasenübergangs gezeigt. Die Beugungsreflexe des *Step Trains* entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung mit Abständen von $\Delta k_y = 2\pi/d = 21,3\% \text{ SBZ} = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ belegen, dass die Facetten eine (223)-Orientierung besitzen (s. Abb. 4.11 (a)). Dies wird durch das STM-Bild bestätigt, das senkrecht zu den Stufen eine Periodizität $d = 1,58 \text{ nm}$ aufweist. Ebenfalls entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung sind streifige ($\times 2$)-Reflexe zu sehen, die auf freiliegende Si-Dimere an der Stufenkante zurückzuführen sind, die von Stufenkante zu Stufenkante nur schwach korreliert sind [476]. Die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe sind in $[1\bar{1}0]$ -Richtung aufgespalten und erscheinen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung länglich. Die Aufspaltung $\Delta k_x = 2\pi/s = 10,5\% \text{ SBZ} \approx 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ (s. Abb. 4.11 (b)) korreliert mit der Periodizität $s = 10 a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ nm}$ entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung im STM-Bild [60, 476]. Sie ist die Signatur der (1,5)-Struktur der DS-Phase, die entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung diese Zehnfachperiodizität besitzt und aus einer Linearkombination der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und fünf $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen besteht. Das Strukturmodell in Abb. 4.13 verdeutlicht die Erkenntnisse der SPA-LEED- und STM-Messungen.

Die elektronische Struktur der DS-Phase auf Pb/Si(557) wurde in [212] mittels XPS und in [35, 62, 212, 495, 512, 515] mit ARPES bzw. SR-ARPES vermessen. Letztere Methode erlaubt zudem Aussagen zur Spin-Struktur der Oberflächenzustände von Pb/Si(557) (Nähe-



(a) Pb/Si(223)-Facette unterhalb von T_C .

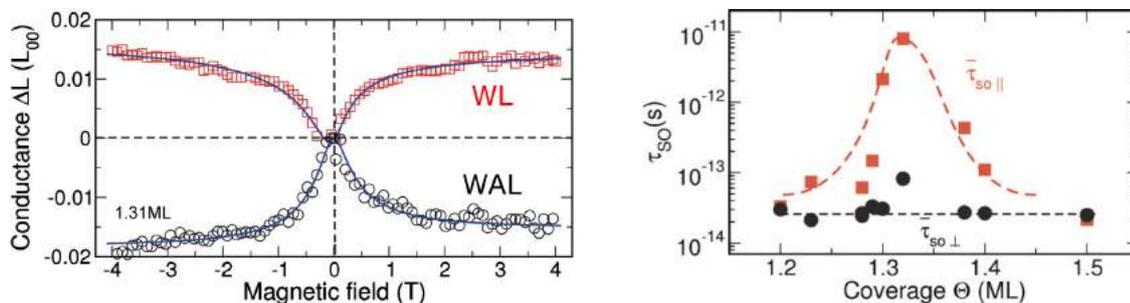
(b) Mögliche Struktur der Pb/Si(17 17 25)-Facette oberhalb von T_C .

(c) Draufsicht auf eine Pb/Si(223)-Terrasse: Bei einer Bedeckung von $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML liegt die (1,5)-Struktur der DS-Phase auf der Terrasse mit einer Periodizität von $s = 10 a_{[110]} = 3,84$ nm entlang des Atomdrahts vor. Dieses einfache Modell kommt dem neuesten Strukturmodell basierend auf hochauflösenden STM-Messungen bei $T = 10$ K von QUENTIN [514] bereits recht nahe.

Abbildung 4.13: Strukturmodelle der Pb/Si(557)-Oberfläche mit (223)- und (17 17 25)-Facette: Der Fehlwinkel Θ beträgt bei der (223)-Facette $11,42^\circ$ und bei der (17 17 25)-Facette $10,86^\circ$. Eine der vier Einzelterrassen der (17 17 25)-Facette zeigt eine lokale Orientierung von (557), während die anderen Einzelterrassen eine lokale Orientierung von (223) aufweisen. In der Draufsicht in (c) auf eine (223)-Terrasse ist die modulierte atomare Anordnung der Pb-Atome entlang des Atomdrahts zu sehen. Die Pb-Atome der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen sind in Magenta und die der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen in Grün und Orange markiert, 1. Lage Si graublau, 2. Lage Si grau.

res hierzu s. Kap. 6.2). Die Bandstruktur im Bereich unbesetzter Zustände und die Dynamik angeregter Elektronen durch ultrakurze Laserpulse wurde mittels Zweiphotonenphotoemission in [511] untersucht. Des Weiteren wurden lokale STS-Messungen [201, 492, 495, 513, 514] durchgeführt, ebenso wie EELS-Messungen, die einen quasi-eindimensionalen Charakter der gefundenen Plasmonen in den metallischen Pb-Drähten belegen [454, 495, 517].

Mit einem supraleitenden Elektromagneten (bis zu ± 4 Tesla magnetische Flussdichte) wurden außerdem Magnetotransportmessungen vorgenommen [61–63, 212, 482, 518]. Entlang der Pb-Drähte bei 1,31 ML Bedeckung wurde dabei im Rahmen der Hikami-Theorie [223] schwache Lokalisierung festgestellt (Erhöhung der Leitfähigkeit durch destruktive Quanteninterferenz am Ursprung bei der Spin-Bahn-Streuung der Elektronen), während senkrecht zu den Stufen schwache Antilokalisierung vorliegt (Verringerung der Leitfähigkeit durch konstruktive Quanteninterferenz am Ursprung bei der Spin-Bahn-Streuung der Elektronen)



(a) Änderung des Leitwerts parallel und senkrecht zu den Stufen für $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML im Magnetfeld bei $T = 50$ K.

(b) Spin-Bahn-Streuzeiten τ_{SO} parallel und senkrecht zu den Stufen für verschiedene Pb-Bedeckungen bei $T = 40 - 50$ K.

Abbildung 4.14: Magnetotransport an der Pb/Si(557)-Oberfläche: (a) Für 1,31 ML Bedeckung zeigt der Magnetoleitwert entlang der Pb-Drähte schwache Lokalisierung (*weak localization*, WL) und senkrecht zu den Pb-Drähten schwache Antilokalisierung (*weak anti-localization*, WAL). (b) Lediglich in der (1,5)-Struktur bei 1,31 ML Bedeckung ist die Spin-Bahn-Streuung entlang der Pb-Drähte stark unterdrückt, bereits für leicht höhere oder niedrigere Bedeckungen gleicht sie sich dem nahezu konstanten Wert in der Richtung senkrecht zu den Stufen an; aus [61].

(s. Abb. 4.14 (a)). Damit einher geht eine um etwa 2,5 Größenordnungen längere Spin-Bahn-Streuzeit entlang der Pb-Drähte im Vergleich zur Richtung senkrecht zu diesen. Diese Anisotropie verschwindet bei Veränderung der Bedeckung um ungefähr 0,1 ML nahezu komplett (s. Abb. 4.14 (b)) und es wurde ausschließlich schwache Lokalisierung festgestellt [61, 212, 482].

In (makroskopischen) Transportmessungen [57–59, 61, 212, 475, 482, 506, 513, 518] wurde ohne angelegtes Magnetfeld die Leitfähigkeit der Pb-Filme analysiert. Bei Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs bei $T_C = 78$ K wurde quasi-eindimensionales Verhalten registriert: isolierend in der Richtung senkrecht zu den Stufen, aber metallisch entlang der Pb-Drähte (s. Abb. 4.15 (a)) [57–59, 212, 506]. Oberhalb des Phasenübergangs wird die mit der SODW assoziierte Energielücke Δ in der Richtung senkrecht zu den Stufen geschlossen (Details s. Kap. 6.2), wodurch auch diese Richtung leitfähig wird. Die Leitfähigkeit entlang der Pb-Drähte nimmt in etwa um einen Faktor zwei ab, diese bleiben jedoch ebenfalls leitfähig, es liegt ein anisotropes 2D-Verhalten vor. Oberhalb der Phasenübergangstemperatur handelt es sich bei der (1,5)-Struktur bei 1,31 ML Bedeckung daher um einen stark anisotropen Metallfilm (s. Abb. 4.15 (a)).

Nicht nur die Leitfähigkeit ändert sich am Phasenübergang, sondern auch die Stufenstruktur erfährt eine Änderung – sie refacettiert von der (223)-Orientierung bei tiefen Temperaturen u. A. zu einer (17 17 25)-Orientierung bei höheren Temperaturen (weitere Details s. Kap. 6.1.2 u. 6.1.3) [56]. Damit einher geht auch eine lokale Erhöhung der Bedeckung auf den Terrassen (s. Kap. 6.1.3).

Wird bei tiefen Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs eine kleine Menge zusätzliches Pb (bis etwa $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1$ ML) auf die (1,5)-Struktur aufgedampft, ordnen sich die Pb-Atome auf spezielle Art und Weise an: Anstelle ungeordnet auf der Oberfläche zu adsor-

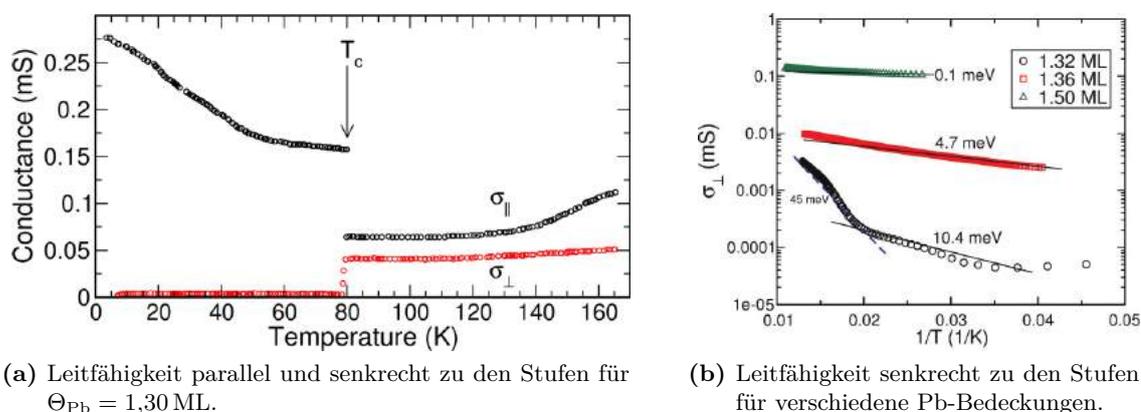


Abbildung 4.15: Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit der Pb/Si(557)-Oberfläche: (a) Oberhalb des Phasenübergangs bei $T_C = 80$ K zeigt die Leitfähigkeit anisotropes 2D-Verhalten. Unterhalb des Phasenübergangs zeigen die Atomdrähte entlang der Stufen metallisches Verhalten, während senkrecht zu den Stufen isolierendes Verhalten vorliegt. (b) Mit zunehmender Bedeckung verringert sich die Aktivierungsenergie bzw. die Energielücke in der Richtung senkrecht zu den Stufen; angepasst aus [509].

bieren, bilden sich an den Stufenkanten weitere atomare Pb-Drähte entlang der Stufen [60, 62, 201, 410, 507, 514]. Dabei werden die Pb-Atome nicht gleichmäßig auf jede Terrasse verteilt, sondern bilden zunächst auf jeder k -ten Terrasse einen zusätzlichen Draht an der Stufenkante, was sich im Beugungsbild durch k zusätzliche Beugungsreflexe zwischen den Reflexen der (223)-Facetten äußert [60, 62, 507] (auch sichtbar im STM [201, 410, 514]). Mit zunehmender Bedeckung werden mehr und mehr solcher Drähte gebildet, bis jede Stufenkante durch einen zusätzlichen Draht dekoriert ist ($\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,2$ ML). Zudem ändert sich durch die Adsorption zusätzlicher Pb-Atome die Aufspaltung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe [476, 507]. Demnach nimmt auch die Bedeckung auf den Terrassen zu, sodass sich weitere Strukturen der DS-Phase wie die (1,6)- und (1,7)-Struktur ausbilden – bei noch höheren zusätzlichen Bedeckungen über $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1$ ML hinaus sogar die SIC-Phase [476].

Das sprunghafte Verhalten in der Leitfähigkeit beim Phasenübergang bei $T_C = 80$ K wird durch die veränderte Bedeckung ausgeschmiert [212, 475, 506]. Gleichzeitig bilden sich durch die zusätzlichen atomaren Pb-Drähte an den Stufenkanten quasi-eindimensionale Zustände (lokalisiert senkrecht zu den Stufen, delokalisiert entlang den Drähten) innerhalb der Energielücke Δ der SODW. Ihre Größe senkrecht zu den Stufen nimmt dadurch exponentiell ab (s. Abb. 4.15 (b)) [62, 212, 475, 506]. Außerdem wurden die Auswirkungen auf den Magnetotransport in [61, 63, 212, 482] untersucht (s. a. Diskussion oben zu Abb. 4.14(b)): Die schwache Lokalisierung entlang der Pb-Drähte wird aufgehoben und wechselt zu schwacher Antilokalisierung, während die Spin-Bahn-Streuzzeit τ_{SO} entlang der Drähte exponentiell abnimmt [61, 62, 212, 482]. Im Rahmen dieser Arbeit und der Publikation in *Nature Communications* [62, 63] wurden zudem SR-ARPES-Messungen bei verschiedenen Zusatzbedeckungen durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Kap. 6.2 diskutiert.

4.4.2. Pb-Nanodrähte auf anderen Si-Oberflächen

Quasi-eindimensionale Pb-Nanostrukturen wurden auch auf einer Reihe anderer Si-Substrate erzeugt. Hier ist insbesondere die Arbeitsgruppe von JALOCHOWSKI zu nennen, die zahlreiche Experimente dieser Art durchgeführt hat. Pb wurde dabei nicht nur auf der nackten Si-Oberfläche adsorbiert, sondern ebenso auf zuvor mit Submonolagenmengen Au dekorierten Substraten.

Ohne Au-Dekoration wurden bereits Studien zu Pb/Si(113) [38, 519], Pb/Si(335) [520, 521], Pb/Si(755) [496], Pb/Si(533) [496, 522], Pb/Si(553) [523–525], Pb auf 4° in [110]-Richtung fehlgeneigtem Si(100) [496], Pb/Si(110) [36, 496, 526] und Pb/Si(100) [37] veröffentlicht. Da die Terrassenbreite des Substrats und die Pb-Nanodrähte von Pb/Si(553) sehr ähnlich zu den Strukturen von Pb/Si(557) sind und auch ähnliche Studien (RHEED, STM, SR-ARPES) durchgeführt wurden, spielt diese Oberfläche später beim Vergleich mit den SR-ARPES-Messungen in dieser Arbeit noch eine Rolle (s. Kap. 6.2).

Mit Au-Dekoration beschränken sich die Studien bislang auf Si(335) [520, 527–530], Si(533) [531] und Si(553) [532–536] als Substrat.

Refacettierung der Pb/Si(223)-Nanostrukturen auf der Si(557)-Oberfläche hin zu größeren Facettenbereichen unterschiedlicher Orientierung unter Beibehaltung der makroskopischen (557)-Orientierung kann durch vielfaches Heizen der Probe erzeugt werden [212, 506]. Solche Strukturen spielten im Rahmen dieser Arbeit jedoch keine Rolle. Da die reine Si(223)-Oberfläche keine stabile Facette (223)-Facette bildet, sondern ebenfalls refacettiert, konnten bislang keine erfolgreichen Experimente zum Wachstum von Pb/Si(223) auf der Si(223)-Oberfläche durchgeführt werden [507].

5. Messungen an Pb/Si(111)

In diesem Kapitel werden die experimentellen Befunde von atomar dünnen Pb-Filmen auf Si(111) vorgestellt und diskutiert, deren Strukturen bereits in Kap. 4.2 vorgestellt wurden. Nach einer Analyse von SPA-LEED- und STM-Bildern in Kap. 5.1 zur Strukturbestimmung werden die Ergebnisse von ARPES-Messungen und ihre Interpretation dargestellt und diskutiert (s. Kap. 5.2). Die ARPES-Messungen an Pb/Si(111) wurden wie die Messungen an Pb/Si(557) (s. Kap. 6.2) an der COPHEE-Endstation der SIS-Beamline der SLS des PSI durchgeführt. Neben Spin-integrierten Messungen zur Analyse der jeweiligen Bandstruktur wurde auch Spin-aufgelöst gemessen, um den Einfluss der SOI im Bereich der Fermi-Energie auf die Bänder bestimmen zu können (s. Kap. 5.2). Komplementär zu den ARPES-Messungen stehen die in Zusammenarbeit mit PHILIPP KRÖGER und HAIYUE LIU erzielten Ergebnisse von Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen (s. Kap. 5.3).

5.1. SPA-LEED- und STM-Messungen

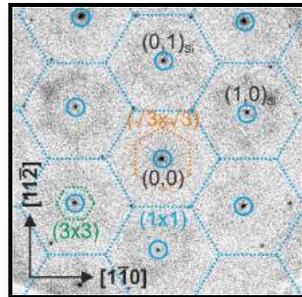
Zur strukturellen Charakterisierung der untersuchten Proben wurden (SPA-)LEED- und STM-Messungen durchgeführt. Exemplarisch werden im Folgenden die Ergebnisse von einer Mischphase aus β - und γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase, von der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und der SIC-Phase, von zwei verschiedenen Strukturen der DS-Phase, sowie von der (1×1)-Phase dargestellt.

5.1.1. β - und γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase

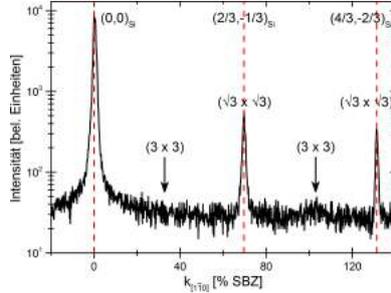
Bei der Adsorption von $\Theta_{\text{Pb}} = 1/3 \text{ ML}$ auf Si(111) entsteht bei RT die sog. β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase (s. Kap. 4.2.1). Durch thermische Desorption kann die Bedeckung auf $\Theta_{\text{Pb}} = 1/6 \text{ ML}$ (γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase) verringert werden. Abb. 5.1 zeigt die STM- und SPA-LEED-Analysen zweier unterschiedlicher Proben, bei denen auf diese Art und Weise ähnliche β/γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Mischphasen präpariert wurden. Die mittels STM untersuchte Probe wurde während der Adsorption von $1/3 \text{ ML}$ Pb auf 330°C erhitzt und anschließend auf RT abgekühlt während die mittels SPA-LEED untersuchte Probe mit $1,25 \text{ ML}$ Pb bedampft, danach für 1 min auf 460°C erhitzt und anschließend mit LN_2 auf $T = 110 \text{ K}$ abgekühlt wurde.

Die Analyse der Bilder und der Vergleich mit der Literatur zeigt, dass die Bedeckung der erzeugten Phasen jeweils zwischen $1/6 \text{ ML}$ und $1/3 \text{ ML}$ beträgt. Zum einen zeigen beide Proben keine zusätzliche (7×7)-Rekonstruktion (typisch für $\Theta_{\text{Pb}} \leq 1/6 \text{ ML}$; [245, 362]), zum anderen ist sowohl im SPA-LEED in Abb. 5.1 (a)-(c), als auch in der Fourier-Transformierten des STM-Bildes der besetzten Zustände in Abb. 5.1 (e) ein diffuser (3×3)-Untergrund mit wenig Intensität sichtbar.

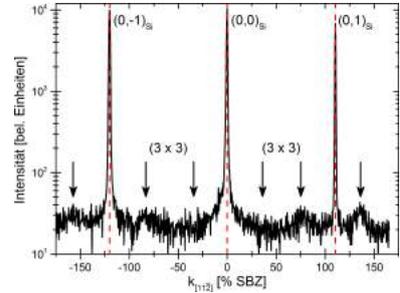
(3×3)-Rekonstruktionen entstehen aus der β -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase durch Erwärmen über $T = 500^\circ\text{C}$ oder durch Abkühlen unter $T = 86 \text{ K}$ (s. Kap. 4.2.1). Deshalb sollte eigentlich keine (3×3)-Rekonstruktion in den Messungen sichtbar sein. Jedoch zeigt die



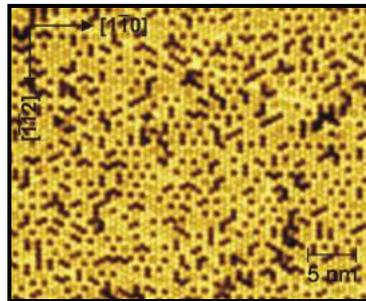
(a) SPA-LEED-Bild:
 $E = 115 \text{ eV}$, $T = 110 \text{ K}$.



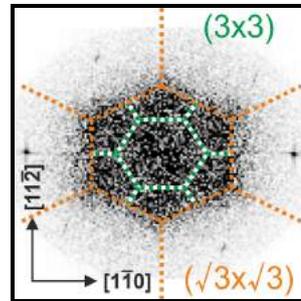
(b) SPA-LEED-Linescan:
 $[1\bar{1}0]$ -Richtung.



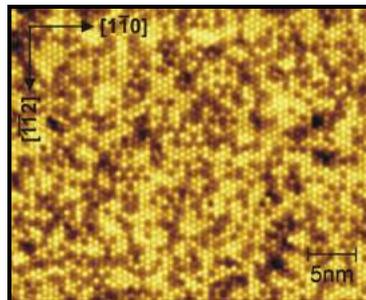
(c) SPA-LEED-Linescan:
 $[11\bar{2}]$ -Richtung.



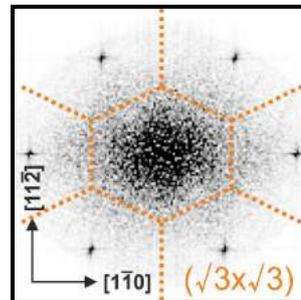
(d) STM-Bild: Besetzte Zustände,
 $V = -1,0 \text{ V}$, $I = 810 \text{ pA}$, $T = \text{RT}$.



(e) Fourier- Transformierte
 des STM-Bildes in (d).



(f) STM-Bild: Unbesetzte Zustände,
 $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 840 \text{ pA}$,
 $T = \text{RT}$.



(g) Fourier- Transformierte
 des STM-Bildes in (f).

Abbildung 5.1: SPA-LEED- und STM-Analyse der β/γ - $Pb/Si(111)$ - $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Mischphase: Das SPA-LEED-Bild und die -Linescans zeigen eine ausgeprägte $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und einen diffusen (3×3) -Untergrund. Die von MONIKA JÄGER an einer Stelle aufgenommenen STM-Bilder zeigen ebenfalls die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Der unterschiedliche Kontrast entsteht durch Pb-Atome (golden), Si-Adatome (braun bzw. dunkel) und Leerstellen innerhalb der 1. Lage (nur dunkel). Die Fourier-Transformierten der STM-Bilder zeigen für die besetzten Zustände einen zusätzlichen diffusen (3×3) -Untergrund, der in den unbesetzten Zuständen nicht zu sehen ist.

genauere Analyse des STM-Bildes der besetzten Zustände bei $V = -1,0\text{ V}$, dass um die dunklen Stellen ein Ring aus sehr hellen Atomen vorliegt (s. Abb. 5.1 (d), [378]). Diese Ringe entsprechen für punktförmige dunkle Stellen gerade einer hexagonalen Einheitszelle der (3×3) -Rekonstruktion. Da diese Stellen über die Oberfläche unregelmäßig – d. h. unkorreliert – verteilt sind, ergeben sich im SPA-LEED und in der Fourier-Transformierten und daraus keine scharfen Reflexe wie die der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, sondern lediglich ein breiter, diffuser Untergrund, wie Abb. 5.1 (a)-(c) u. (e) belegen.

In den unbesetzten Zuständen (s. Abb. 5.1 (f) u. (g)) ist keine solche (3×3) -Rekonstruktion aufzufinden (ebenfalls nicht bei $V = \pm 0,5\text{ V}$; nicht gezeigt). Was zunächst wie ein Widerspruch aussieht, bedeutet jedoch, dass die elektronische Struktur der Atome um die einzelnen dunklen Stellen sich von den anderen Atomen unterscheidet, da das Höhenprofil der unbesetzten Zustände unbeeinflusst ist. Für die γ -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase konnte mittels STS belegt werden, dass Pb-Atome mit unterschiedlicher Anzahl an Pb-Atomen in benachbarten Einheitszellen unterschiedliche Zustandsdichten aufweisen [403]. Dies heißt für den hier vorliegenden Fall, dass sich an den dunklen Stellen im STM-Bild der besetzten Zustände entweder ein Si-Adatom oder eine Leerstelle befinden muss (und ansonsten Pb-Atome). Ein Blick auf das STM-Bild der unbesetzten Zustände liefert Klarheit: Nach [378, 398] lässt sich bei positiven Tunnelspannungen V zwischen Leerstellen (dunkler Kontrast) und Si-Adatomen (bräunliche Färbung) anhand des Höhenprofils unterscheiden, was bei negativen Tunnelspannungen nicht möglich ist.

Somit können die lokalen Anteile an Pb-Atomen, Si-Adatomen und Leerstellen in der 1. Lage für den untersuchten Bereich zu 83,16 % Pb-Atome, 16,25 % Si-Adatome und 0,59 % Leerstellen bestimmt werden. Dies entspricht in absoluten Werten im untersuchten Bildausschnitt von $36,49 \times 29,31\text{ nm}^2$ bei einem Flächeninhalt $A = 76,642\text{ \AA}^2$ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen 1160 Pb-Atomen, 227 Si-Adatomen, sowie 8 Leerstellen. Die lokale Bedeckung lässt sich somit zu $\Theta_{\text{Pb}} = 0,277\text{ ML}$ bestimmen, da 100 % Pb-Atome der β -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase und je 50 % Pb-Atome und Si-Adatome der γ -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase entsprechen. Dies erklärt auch die relativ geringe lokale Dichte dunkler Streifen in Abb. 5.1 (d), die charakteristisch für die γ -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase sind.

Hinsichtlich des Phasenübergangs der β -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase zur Tieftemperatur- (3×3) -Phase lassen sich aus den hier diskutierten Beobachtungen einige Fragestellungen ableiten. Bereits bekannt ist, dass Korngrenzen unterschiedlicher Phasen die Übergangstemperatur herabsetzen können [377] und die resultierende (3×3) -CDW durch Ladungstransfer zwischen den einzelnen Pb-Atomen entsteht [369, 370, 372, 374]. Unbekannt ist hingegen, ob auch die Si-Adatome einen Einfluss auf den Phasenübergang nehmen. Da sie die Zustandsdichten benachbarter Pb-Atome beeinflussen und zu (3×3) -Ringern führen, ist dies ein erstes Anzeichen, dass die Übergangstemperatur für Bereiche mit hohen Si-Adatom-Konzentrationen durch diesen Ladungstransfer womöglich sogar höher liegt. Auch ist die genaue elektronische Struktur dieser atomaren Struktur noch unklar. STM/STS- und XPS-Messungen können hier mehr Klarheit bringen.

5.1.2. $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und Striped Incommensurate-Phase

Die Grundstrukturen der α -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase sind die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20\text{ ML}$ (s. Kap. 4.2.2) und die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,333\text{ ML}$. Die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bildet jedoch keinen homogenen Film auf der Oberfläche, sondern streifenförmige Domänen, SIC-Phase genannt (s. Kap. 4.2.3).

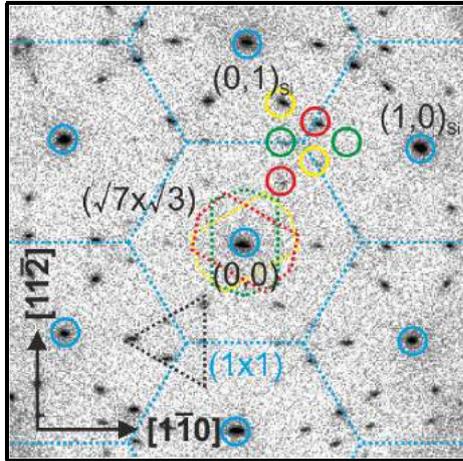
SPA-LEED-Messungen

Die Phasen wurden durch Adsorption der entsprechenden Menge Pb bei Probertemperaturen von $T = 80\text{ K}$ und anschließendem Erhitzen auf 330 °C für 1 min erzeugt. In Abb. 5.2 sind SPA-LEED-Bilder und -Linescans dieser Strukturen bei $T = 80\text{ K}$ dargestellt. Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion hat auf Si(111) dabei drei Rotationsdomänen, die anhand der Orientierung der Spots relativ zu den Si-Spots unterschieden werden können. Bei $E = 80\text{ eV}$ ist die Intensität von insgesamt sechs Spots innerhalb der 1. SBZ von Si stark unterdrückt, was möglicherweise auf die Gleitspiegelebene der Struktur zurückzuführen ist (s. Abb. 4.4) [419]. Der Linescan entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung in Abb. 5.2 (b) zeigt, dass die LEED-Spots einer der Rotationsdomänen der Rekonstruktion jeweils $\frac{1}{5}$ des Abstands der Si-Spots zueinander haben. Die mittlere Terrassenbreite des Films konnte durch eine $H(S)$ -Analyse der Halbwertsbreite des $(0,0)$ -Spots (s. Kap. 3.2.1) nach [205, 206] zu $\Gamma_{(\sqrt{7} \times \sqrt{3})} \approx 180\text{ nm}$ bestimmt werden. Da die Spots der Rekonstruktion die gleiche Halbwertsbreite aufweisen, bedeutet dies, dass die Rotationsdomänen die gesamte Breite einer Terrasse einnehmen. In der Richtung entlang der Stufen, die die Terrassen voneinander trennen, ist die Ausdehnung der Domänen noch wesentlich größer, da die Spots noch schmaler sind. Eine genaue Breite kann nicht angegeben werden, da die Spotgröße durch die instrumentelle Auflösung des SPA-LEEDs begrenzt ist. Die diskutierten Ergebnisse stimmen gut mit den früheren (SPA-)LEED- und STM-Untersuchungen überein [39, 40, 44, 331, 349, 368, 410, 418, 421–425, 427–429].

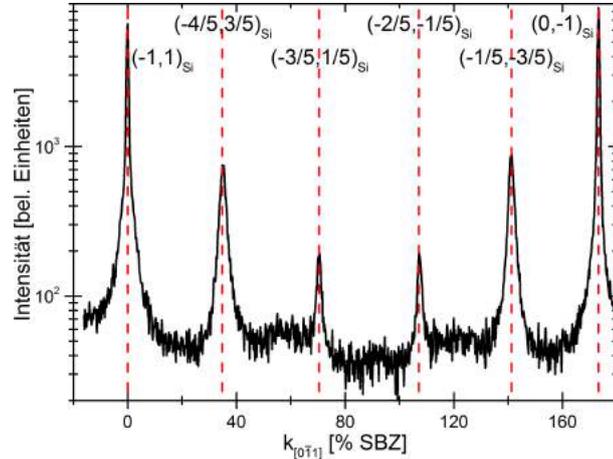
Die Analyse der SPA-LEED-Messungen an der SIC-Phase in Abb. 5.2 (c) u. (d) zeigt, dass die LEED-Spots der Rekonstruktion nicht genau auf den $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Positionen lokalisiert sind, sondern dass die Spots aufgespalten sind und leicht neben den $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Positionen liegen. Die exakte Position eines Spots auf einer Linie zwischen zwei übernächsten Si-Spots (z. B. $(-1,1)_{\text{Si}}$ und $(0,-1)_{\text{Si}}$ wie in Abb. 5.2 (d)) weist auf die Größe der kommensurablen Einheitszelle und ihre Bedeckung hin, während seine Halbwertsbreite die durchschnittliche Domänengröße angibt [245, 436]. Die indirekt geschnittenen LEED-Spots stammen von den jeweils anderen beiden Rotationsdomänen⁷¹. Für das hier gezeigte SPA-LEED-Bild lässt sich aus den Spot-Positionen eine $(10 \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,30\text{ ML}$ ableiten, welche damit drei Si-Einheitszellen kürzer ist als die in Abb. 4.6 gezeigte $(13 \times \sqrt{3})$ -Domänenstruktur. Außerdem ergibt sich mit der Halbwertsbreite von 5,4 % SBZ eine mittlere Domänengröße von 9,27 nm in $[2\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung (etwa 28 Einheitszellen Länge). In $[0\bar{1}1]$ -Richtung ist die Halbwertsbreite eines Spots der gleichen Domäne 3 % SBZ groß, was einer mittleren Domänengröße von 16,63 nm bzw. etwa 4,33 $(10 \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen entspricht. D. h., dass im Mittel nach 8,66 Streifen der lokalen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (beide Konfigurationen zusammengenommen) die Orientierung der Domäne wechselt. Die Streifen sind somit im Vergleich zur mittleren Terrassenbreite des Films von $\Gamma_{\text{SIC}} \approx 90\text{ nm}$ sehr viel schmaler, sodass mehrere Domänen auf einer einzelnen Terrasse vorliegen. Diese Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit früheren SPA-LEED- und STM-Messungen [39, 40, 44, 245, 258, 391, 400, 427, 429, 432, 435, 436, 438, 439].

Im Mittel wird erwartet, dass jede der drei Rotationsdomänen einen Flächenanteil von je $\frac{1}{3}$ hat. Lokal können sich jedoch Unterschiede ergeben, die Auswirkungen auf die ARPES-Messungen der Spin-Polarisation \mathbf{S} haben können (s. Kap. 2.2.3 u. 5.2.1). Aus der integralen Intensität der LEED-Spots einer Domäne lässt sich durch Vergleich mit den anderen Domänen ihr jeweiliger Flächenanteil im Bereich des Elektronenstrahls auf der Probe bestimmen

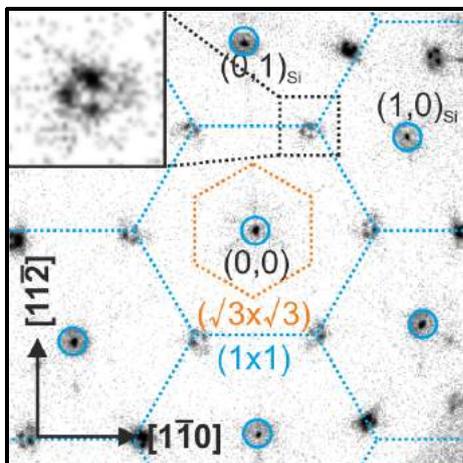
⁷¹ Die Spots einer Rotationsdomäne überlagern sich mit denen ihrer Spiegeldomäne jeweils exakt und können daher nicht unterschieden werden.



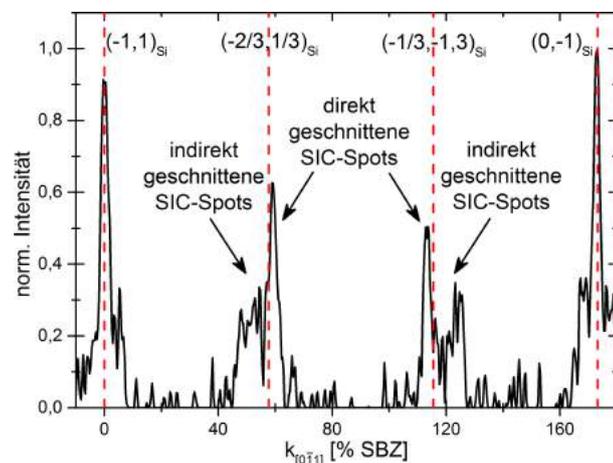
(a) SPA-LEED-Bild der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Die Farben rot, grün und gelb kennzeichnen die drei Rotationsdomänen, wobei die Kreise die LEED-Spots der Rekonstruktion und die gestrichelten Kästen die reziproke Einheitszelle markieren. Das Dreieck markiert den Bereich, innerhalb dessen die LEED-Spots der DS-Phase aufzufinden sind.



(b) SPA-LEED-Linescan der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Der Abstand zweier LEED-Spots einer Rotationsdomäne beträgt entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung jeweils $\frac{1}{5}$ des Abstands der Si-Spots.



(c) SPA-LEED-Bild der SIC-Phase: Die LEED-Spots der Rekonstruktion liegen nicht genau auf den $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Positionen, sondern sind aufgrund der Domänenbildung aufgespalten, wie auch der vergrößerte Ausschnitt im Inset zeigt.



(d) SPA-LEED-Linescan der SIC-Phase: Entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung werden lediglich zwei der aufgespaltenen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Spots direkt geschnitten. Sie gehören zur gleichen Rotationsdomäne und ihre Position und Halbwertsbreite geben Auskunft über die Größe der Einheitszelle bzw. über die durchschnittliche Domänengröße.

Abbildung 5.2: SPA-LEED-Analyse der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase: $E = 80 \text{ eV}$, $T = 80 \text{ K}$.

(Strahldurchmesser $\sim 0,5$ mm [205, 206]), der dann bei der Auswertung der Spin-aufgelösten MDCs berücksichtigt werden kann. Die Domänenverteilung der SIC-Phase im SPA-LEED-Bild in Abb. 5.2 (c) beträgt z. B. 37,4 %, 32,6 % und 30,0 %.

Die diskutierten SPA-LEED-Messungen an der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase wurden auf nacheinander präparierten Phasen auf der selben Si-Probe durchgeführt. Daher bedeutet die doppelte mittlere Terrassenbreite der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, dass bei dieser Phase die einzelnen Terrassen im Vergleich zur SIC-Phase durch Stufen mit doppelter Stufenhöhe voneinander getrennt sind. Unter der Annahme von Einfachstufen der Höhe $d_{(111)} = 3,136$ Å des Bilage-zu-Bilage-Abstands von Si(111) für die SIC-Phase bedeutet dies für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion Stufenhöhen von $d_{(\sqrt{7} \times \sqrt{3})} = 2d_{(111)} = 6,272$ Å. Dieses Ergebnis überrascht, da bislang nicht in der Literatur darüber berichtet wurde.

STM-Messungen

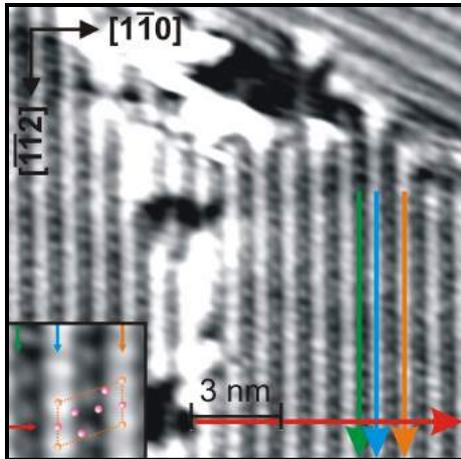
Komplementär wurden auch STM-Messungen an beiden Phasen auf unterschiedlichen Si-Proben durchgeführt. Exemplarisch sind atomar aufgelöste STM-Bilder und -Linescans in Abb. 5.3 dargestellt.

Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wurde durch Aufdampfen von 1,73 ML Pb bei $T = 330$ °C, gefolgt von 1,30 ML bei $T = 300$ °C erzeugt. Da bei diesen hohen Temperaturen gleichzeitig Pb von der Probe desorbiert, stellte sich am Ende eine Gleichgewichtsbedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,15$ ML ein. Das STM-Bild in Abb. 5.3 (a) zeigt einen Teil der Oberfläche, der ausschließlich die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zeigt. Daneben lagen noch Bereiche mit der (8×8) -Rekonstruktion von Pb auf Si(111) vor (Vgl. Kap. 4.2.1, [135, 137, 246, 401, 407–410]).

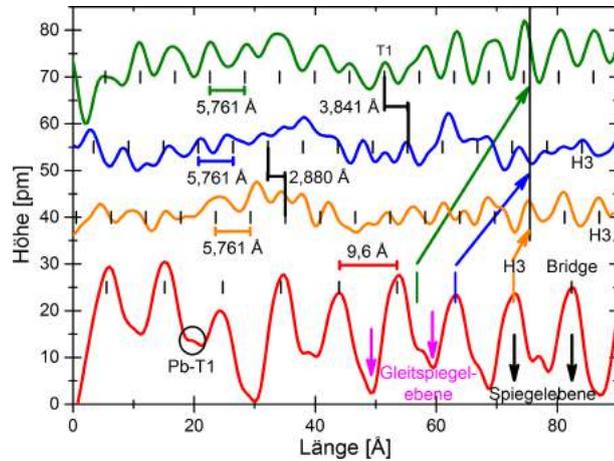
Im betrachteten Ausschnitt liegen insgesamt drei Domänen der Rekonstruktion vor: Die beiden Domänen im linken und rechten, unteren Teil des Bildes haben die gleiche Ausrichtung und sind durch eine defektreiche Domänenwand voneinander getrennt, die eine Breite von $(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}) a_{[1\bar{1}0]} = 15,36$ Å hat. Die Breite der Domänenwand ist damit kein Vielfaches der Periodizität der Rekonstruktion. Wahrscheinlich kommt die Bildung der Domänen durch die schwarz und weiß kontrastierten Defekte im Pb-Film zustande, sodass die sog. kollektive Diffusion bzw. Superdiffusion [326–332] keine homogene Domäne bilden kann. Die dritte Domäne der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im STM-Bild ist ggü. den anderen beiden Domänen um 120° gedreht und damit eine weitere Vertreterin der insgesamt drei Rotationsdomänen.

Die atomare Struktur der mit LHe auf $T = 35$ K gekühlten Oberfläche lässt sich im Inset in Abb. 5.3 (a) durch Überlagerung mit dem Gittermodell aus Abb. 4.4 und den Linescans in Abb. 5.3 (b) noch besser analysieren. In $[1\bar{1}0]$ -Richtung wechseln sich helle und dunkle Kontraste (sehr hohe und sehr tiefe Stellen) mit einer Periodizität von $\frac{5}{2} a_{[1\bar{1}0]} = 9,6$ Å ab. Da die primitive Einheitszelle der Rekonstruktion schiefwinklig ist, ist zusätzlich in jedem zweiten Minimum im Linescan (rote Linie) etwa an der Stelle der T1-Position des Si-Gitters eine leichte Erhebung zu erkennen, die einem der Gleitspiegelebene nächstgelegenen Pb-Atome zugeordnet werden kann. Die Spiegel- und Gleitspiegelebene liegen parallel zur $[11\bar{2}]$ -Richtung und sind in $[1\bar{1}0]$ -Richtung um je eine halbe Einheitszelle der Rekonstruktion gegeneinander verschoben, wobei die Spiegelebenen im hellen und die Gleitspiegelebenen im dunklen Kontrast des STM-Bildes lokalisiert sind, was in guter Übereinstimmung mit den gemessenen und simulierten STM-Bildern in der Literatur ist [39, 40, 158, 349, 368, 391, 410, 418, 423, 425, 427–429].

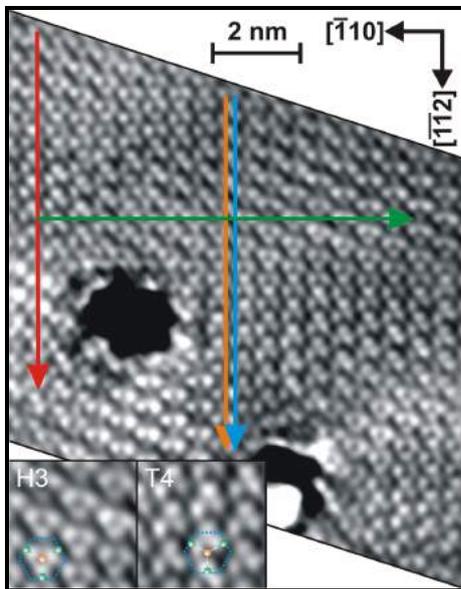
Auf der Oberfläche variiert die Korrugation in $[1\bar{1}0]$ -Richtung deutlich stärker als in $[11\bar{2}]$ -Richtung, wodurch mit dem STM bei $V = +2,0$ V eine streifenförmige Struktur gemessen



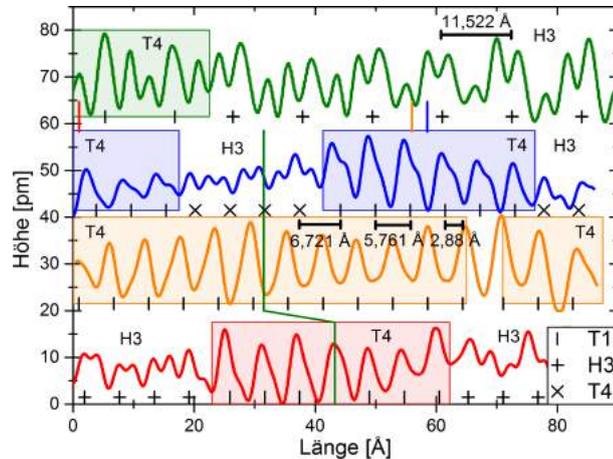
(a) STM-Bild der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Zwischen den Domänen sind defektreiche Domänenwände sichtbar, $V = +2,0$ V, $I = 100$ pA, $T = 35$ K. Inset: Vergrößerter Ausschnitt (2×2 nm²) mit Modell der Einheitszelle aus Abb. 4.4. Die Pfeile kennzeichnen die Positionen der Linescans in (b) relativ zur Einheitszelle.



(b) STM-Linescans der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Die zur besseren Sichtbarkeit gegeneinander verschobenen Höhenprofile verlaufen entlang der Pfeile in (a). Die gemessenen Periodizitäten und Positionen stimmen sehr gut mit dem Modell überein. Weitere Details s. Text.



(c) STM-Bild der SIC-Phase: Neben den streifenförmigen Domänen sind zwei größere Defekte sichtbar, $V = +0,1$ V, $I = 600$ pA, $T = RT$. Insets: Vergrößerte Bereiche (2×2 nm²) mit Modellen der Einheitszellen in H3- und T4-Konfiguration.



(d) STM-Linescans der SIC-Phase entlang der Pfeile in (c): Die farblich hinterlegten Abschnitte markieren Bereiche mit T4-Konfiguration und großer Korrugation, die anderen Bereiche haben H3-Konfiguration mit kleinerer Korrugation und haben eine Substruktur. Die gemessenen Periodizitäten stimmen sehr gut mit dem Modell überein. Zur besseren Sichtbarkeit sind die Höhenprofile gegeneinander verschoben. „+“ und „×“ markieren Hochsymmetriepunkte innerhalb der Einheitszellen. Die farbigen senkrechten Linien markieren die Schnittpunkte der Profile.

Abbildung 5.3: STM-Analyse der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase.

wird. In $[1\bar{1}0]$ -Richtung erreichen die Maxima in H3-Positionen bis zu 30 pm Höhe relativ zum tiefsten Punkt, bzw. in *Bridge*-Position etwa 25 pm. Die Minima liegen in den Schnittpunkten mit den Gleitspiegelebenen relativ bei 0 pm bzw. rund 12 pm, wenn das Pb-Atom nahe der T1-Position geschnitten wird.

In $[11\bar{2}]$ -Richtung werden drei Linescans gezeigt: Die blaue und die orangefarbene Linie verlaufen in zwei benachbarten Spiegelebenen, während die grüne Linie durch das Pb-Atom nahe der T1-Position schneidet. Alle drei Linescans haben im Wesentlichen eine Periodizität von $\sqrt{3}a_{[11\bar{2}]} = 5,761 \text{ \AA}$, wobei die beiden Profile in den Spiegelebenen um eine halbe Einheitszelle ($2,88 \text{ \AA}$) gegeneinander verschoben sind (aufgrund der schwiefwinkligen primitiven Einheitszelle) und eine leichte Substruktur zeigen. Die Maxima des in grün gezeichneten Profils durch die Pb-Atome nahe den T1-Positionen sind um $1,92 \text{ \AA}$ bzw. $3,841 \text{ \AA}$ zu den Maxima des in blau gezeichneten Profils verschoben. Damit sind die Maxima der in den Spiegelebenen verlaufenden Profile genau an den H3-Positionen zu finden, während die Pb-Atome in den *Bridge*-Positionen dazwischen lokalisiert sind und für die Substruktur verantwortlich zeichnen. Die Korrugation der blauen und orangefarbenen Linie beträgt etwa 5 – 8 pm, während die grüne Linie eine Korrugation von bis zu 12 pm aufweist.

Abb. 5.3 (c) u. (d) zeigt das STM-Bild und daraus extrahierte Linescans einer mit der SIC-Phase präparierten Probe bei $T = \text{RT}$. Bei dieser Probe wurden 1,6 ML Pb bei $T = 315 \text{ }^\circ\text{C}$ aufgedampft, wodurch wegen der gleichzeitigen Thermodesorption eine finale Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,32 \text{ ML}$ erzielt wurde. Die namensgebenden Streifen der SIC-Phase sind im dargestellten Bereich nicht sonderlich ausgeprägt, da zwei größere Defekte (dunkle Stellen mit ca. 2 nm Durchmesser in Abb. 5.3 (c)) Einfluss auf die lokale Struktur nehmen und die Übergänge zwischen den Domänen eher fließend sind, als dass die Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Domänenwände aufgelöst werden können.

Dafür lassen sich dank der atomaren Auflösung des STM-Bildes und der vergrößerten Insets die lokale $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auflösen und beide Konfigurationen (H3 u. T4) identifizieren. Bei der H3-Konfiguration ist das zentrale Pb-Atom der Tetramere in der Mitte der dreieckigen Struktur lokalisiert, deren Spitze nach unten zeigt, während bei der T4-Konfiguration dieses Atom bei den gewählten Tunnelparametern von $V = +0,1 \text{ V}$ und $I = 600 \text{ pA}$ quasi nicht sichtbar ist und so eine umgekehrte Dreiecksform erscheint.

Der Vergleich mit den Modellen beider Konfigurationen in Abb. 4.5 belegt, dass die sichtbare integrierte Ladungsdichte nicht genau bei den äußeren Pb-Atomen der Tetramere, sondern leicht daneben in Richtung des zentralen Pb-Atoms verschoben ist. Für die β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase konnte durch DFT-Berechnungen gezeigt werden, dass diese Erscheinung auf die Lokalisierung der kovalenten Pb-Ge-Bindung dieser äußeren Pb-Atome zurückzuführen ist, wobei die Ge-Atome der obersten Lage genau an den entsprechenden Stellen liegen, während die metallischen Pb-Pb-Bindungen durch ihren delokalisierten Charakter kaum zum Kontrast in STM-Bildern beitragen [537]. Übertragen auf die SIC-Phase von Pb/Si(111) ergibt sich damit ein konsistentes Bild, das die Beobachtungen erklärt.

Die Linescans entlang der Linien in Abb. 5.3 (c) sind in Abb. 5.3 (d) dargestellt. Bereiche mit lokaler T4-Konfiguration sind farblich hinterlegt, im Gegensatz zu den Bereichen mit lokaler H3-Konfiguration. Die beiden Strukturen lassen sich anhand der unterschiedlichen Korrugation identifizieren, wobei die H3-Konfiguration in $[11\bar{2}]$ -Richtung bei Schnitt durch das zentrale Pb-Atom des Tetramers im Vergleich zur T4-Konfiguration neben einer geringeren Korrugation (5 pm zu 10 – 15 pm) auch eine Substruktur mit halber Periodizität zeigt (rote und blaue Linie). Die Maxima der Höhenprofile der T4-Konfiguration sind an den T1-

Positionen lokalisiert – wie auch das orangefarbene Profil zeigt – in Übereinstimmung mit der Lage der kovalenten Pb-Si-Bindung. In H3-Konfiguration werden das untere und das zentrale Atom der Tetramere von der roten und blauen Linie direkt geschnitten und erscheinen daher als zwei Maxima im Höhenprofil. Die gemessene Periodizität von $\sqrt{3}a_{[11\bar{2}]} = 5,761 \text{ \AA}$ entspricht gerade der Gitterkonstanten der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Das orangefarbene Höhenprofil zeigt den Schnitt durch Stellen der hohen integrierten Ladungsdichte an den T1-Positionen. Da es zudem lediglich einen Bereich mit T4-Konfiguration schneidet, ist nur eine Periodizität von $\sqrt{3}a_{[11\bar{2}]} = 5,761 \text{ \AA}$ sichtbar.

In $[1\bar{1}0]$ -Richtung hat das Höhenprofil in Abb. 5.3 (d) (grüne Linie) der T4-Konfiguration eine homogenere Korrugation (10 – 15 pm) als das der H3-Konfiguration (5 – 17 pm), die zwei große und ein kleineres Maximum innerhalb der Periodizität der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von 11,522 Å zeigt, während es bei der T4-Konfiguration ähnlich große Maxima sind. Zudem sind die Minima der H3-Konfiguration ebenfalls unterschiedlich, während diese bei der T4-Konfiguration ähnlicher erscheinen. Das gezeigte Profil schneidet dabei genau durch die zentralen Pb-Atome der Tetramere der H3-Konfiguration (also durch die H3-Positionen), während es in der T4-Konfiguration abwechselnd durch die unterschiedlichen T1-Positionen schneidet.

STM-Bilder der SIC-Phase mit $V = -0,1 \text{ V}$ zeigen keine großen qualitativen Unterschiede zu dem gezeigten Bild mit $V = +0,1 \text{ V}$. Die Ergebnisse der hier analysierten Messung stimmen mit den STM-Messungen in der Literatur [39, 40, 258, 349, 391, 427, 429, 432, 435, 438, 439] sehr gut überein.

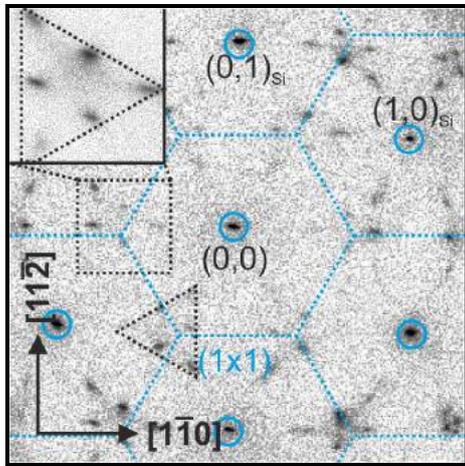
5.1.3. „Devil’s Staircase“-Phase

Zur Identifikation der zu untersuchenden (n,m) -Struktur lassen sich z. B. SPA-LEED- oder STM-Messungen durchführen [44, 242, 328, 331, 417, 423, 425, 441, 455, 456]. Hier sollen exemplarisch lediglich die SPA-LEED-Messungen an zwei unterschiedlichen (n,m) -Strukturen dargestellt und diskutiert werden.

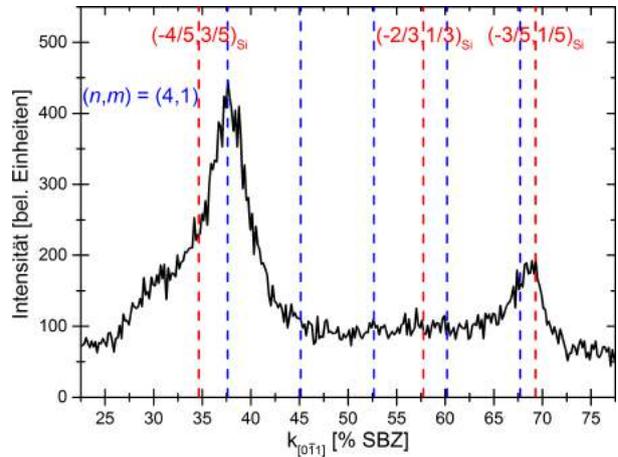
In Abb. 5.4 sind SPA-LEED-Bilder und Linescans der (4,1)- und der (1,4)-Struktur bei $T = 80 \text{ K}$ dargestellt. Die (4,1)-Struktur hat nach Gl. (4.4) eine Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,217 \text{ ML}$, während die (1,4)-Struktur eine Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,294 \text{ ML}$ hat. Bei $T_{\text{C}} \approx 230 \text{ K}$ transformiert die (1,4)-Struktur damit in die SIC-Phase, während die (4,1)-Struktur ebenfalls bei $T_{\text{C}} \approx 230 \text{ K}$ in die (1×1) -Phase transformiert (s. Abb. 4.2). Aus der Analyse der Bilder lässt sich schließen, dass ausschließlich jeweils diese Strukturen im Bereich des Elektronenstrahls auf der Probe existieren, also homogene Phasen vorliegen. Dies lässt sich mittels Vermessung der Positionen der Peaks in den Linescans in Abb. 5.4 (b) u. (d) bestimmen, die charakteristisch für jede (n,m) -Struktur sind [44, 242, 328, 425, 456]. Besonders intensiv sind die LEED-Spots der DS-Phase dabei stets innerhalb der Dreiecke, die in Abb. 5.4 (a) u. (c) für einen der sechs Sektoren eingezeichnet sind.

Die LEED-Spots entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung zwischen dem $(-1,1)_{\text{Si}}$ -Spot bei 0% SBZ und dem $(0,-1)_{\text{Si}}$ -Spot bei 173% SBZ liegen nach [242, 456] bei $[q/(5n + 3m)] \cdot 173\% \text{ SBZ}$ ⁷², mit $q \in \mathbb{N}_0$. Die Positionen der Peaks beider gezeigter Linescans stimmen hervorragend mit den so berechneten Positionen (blaue gestrichelte Linien) überein. An den Positionen der LEED-

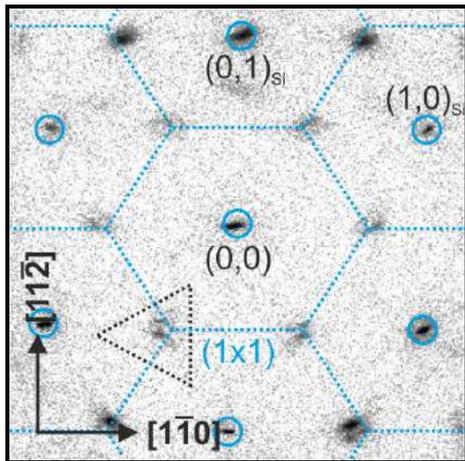
⁷² Eigentlich ist 0% SBZ bei $(0,0)_{\text{Si}}$ und 173% SBZ jeder Punkt auf dem entsprechenden Umkreis mit einem Radius von 173% SBZ. Hier geht es jedoch lediglich um die entsprechende Länge im K-Raum und die Richtung.



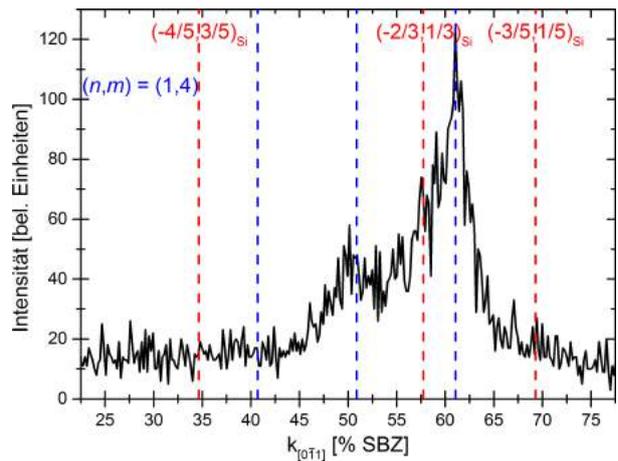
(a) SPA-LEED-Bild der (4,1)-Struktur mit vergrößertem Ausschnitt im Inset.



(b) SPA-LEED-Linescan der (4,1)-Struktur.



(c) SPA-LEED-Bild der (1,4)-Struktur.



(d) SPA-LEED-Linescan der (1,4)-Struktur.

Abbildung 5.4: SPA-LEED-Analyse von Strukturen der DS-Phasen : $E = 80$ eV, $T = 80$ K. Bei den Linescans liegt der $(-1,1)_{Si}$ -Spot bei 0 % SBZ und der $(0,-1)_{Si}$ -Spot bei 173 % SBZ. Weitere Details s. Text.

Spots der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bzw. der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ($q/5 \cdot 173\%$ SBZ bzw. $q/3 \cdot 173\%$ SBZ) ist im Vergleich zu den Spots der jeweiligen (n,m) -Struktur weniger Intensität messbar, jedoch in einer charakteristischen Höhe entsprechend dem Flächenanteil der lokalen Rekonstruktion innerhalb der entsprechenden (n,m) -Struktur.

Für beide Strukturen gilt $n + m = 2p + 1$, mit $p \in \mathbb{N}_0$. Damit gehören sie nach Tab. 2.1 zur Raumgruppe $c1m1$ mit zentriert-rechteckiger Einheitszelle und C_{1v} -Symmetrie im Realraum. Im \mathbb{K} -Raum hat der $\bar{\Gamma}$ -Punkt ebenfalls C_{1v} -Symmetrie. Es existieren jedoch aufgrund der Symmetrie des Si-Substrats jeweils drei Rotationsdomänen, die in einer quasi-sechszähligen Erscheinung des LEED-Bildes resultieren, wie auch Abb. 2.2 (f) zeigt. Ein Ungleichgewicht der Flächenanteile der Rotationsdomänen beeinflusst die gemessene Spin-Polarisation \mathbf{S} bei ARPES-Messungen genau wie bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion oder der SIC-Phase (s.

Kap. 5.1.2), wenngleich die Symmetrie der DS-Phase genau wie die der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im Gegensatz zur SIC-Phase nicht gebrochen ist. Aufgrund der Zugehörigkeit zur Raumgruppe $c1m1$ haben beide Strukturen je eine Spiegel- und eine Gleitspiegelebene (Vgl. Abb. 2.1 (c) u. 4.7 (b)). Genau wie bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion sind bei $E = 80$ eV die Intensitäten von insgesamt sechs Spots innerhalb der 1. SBZ von Si stark unterdrückt (Vgl. Kap. 5.1.2), was möglicherweise auf die Gleitspiegelebene der Strukturen zurückzuführen ist (s. Abb. 4.4) [419].

5.1.4. (1×1) -Phase

Eine Probe mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML wurde nach der Überprüfung der Qualität des Pb-Films mittels SPA-LEED ($(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $T = 80$ K) auf $T = 330$ K erwärmt. Dabei überschritt die Probe die Temperatur des Phasenübergangs zur (1×1) -Phase von $T_C = 274 - 285,46$ K [44, 421]. Ein Bild der anschließenden SPA-LEED-Messung ist in Abb. 5.5 dargestellt. Es sind ausschließlich die (1×1) -Reflexe zu erkennen, obwohl kein Pb von der Oberfläche desorbiert ist, wie weitere SPA-LEED-Messungen im Anschluss nach Abkühlen unter T_C belegen. Dieses Verhalten lässt sich am Besten mit einem teilweise „geschmolzenen“ Pb-Film erklären, bei dem einige Pb-Si-Bindungen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion aufbrechen und sich die Pb-Atome zwischen verschiedenen Gleichgewichtslagen bewegen können (Vgl. Kap. 4.2.6, [158, 412, 421, 435]).

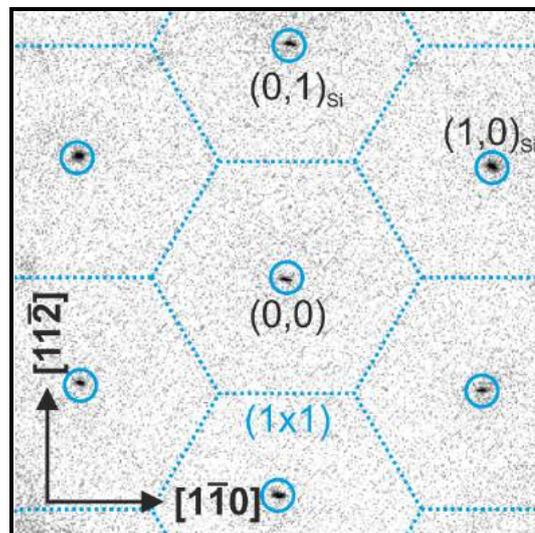


Abbildung 5.5: SPA-LEED-Bild der (1×1) -Phase: $E = 80$ eV, $T = 330$ K. Es sind ausschließlich die (1×1) -Spots sichtbar.

5.2. ARPES-Messungen

Die ARPES- bzw. SR-ARPES-Messungen in dieser Arbeit wurden an der COPHEE-Endstation der SIS-Beamline an der SLS unter Hilfe von JAN HUGO DIL, GABRIEL LANDOLT, STEFAN MUFF und MAURO FANCIULLI durchgeführt. Über die Methodik der SR-ARPES-Messungen ist bereits in Kap. 3.3 berichtet worden. An dieser Stelle sollen nun Messungen an Oberflächenzuständen von Pb/Si(111) und Pb-induzierte Si-*Bulk*-QWS interpretiert werden.

5.2.1. Striped Incommensurate-Phase

Wie bei den STM- und SPA-LEED-Messungen gezeigt wurde (s. Kap. 5.1.2), ist die Symmetrie der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von Pb auf Si(111) bei einer Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} \approx 4/3$ ML durch Domänenbildung mit H3- und T4-Konfiguration gebrochen, was zur Ausbildung der sog. SIC-Phase führt. Daher entstehen insgesamt sechs unterschiedlich orientierte Domänen auf der Oberfläche mit C_1 -Symmetrie (drei Rotationsdomänen plus jeweils eine Spiegeldomäne je Rotationsdomäne; Vgl. Kap. 2.1). Dies ergibt bei der Überlagerung der SBZs im K-Raum um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt eine Quasi-Sechszähligkeit der Fermi-Fläche. Aufgrund der Größe der Superzellen der SIC-Phase sind die einzelnen SBZs sehr klein. Im Vergleich damit ist die SBZ der lokalen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion groß. In der Photoelektronenemission sieht man aufgrund der großen Anzahl von $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen innerhalb der Superzelle vor allem die Bandstruktur der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, die jedoch durch die Domänenbildung moduliert und für H3- bzw. T4-Konfiguration unterschiedlich ist.

In der folgenden Analyse ist es daher sinnvoll, die Messdaten soweit wie möglich im Rahmen der C_{3v} -Symmetrie der idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zu beschreiben. Abweichungen in den Ergebnissen, die nicht mit dieser Symmetrie beschrieben werden können, deuten somit eindeutig auf die gebrochene Symmetrie durch die Domänenbildung hin. Wie gezeigt wird, sind endliche S_x - und S_z -Komponenten der Spin-Polarisation \mathbf{S} bei $k_y = 0 \text{ \AA}^{-1}$ messbar, was der C_{3v} -Symmetrie widerspricht und nur mit der C_1 -Symmetrie der Domänenstruktur (oder der Domänenwände) erklärt werden kann.

In den Experimenten wurden zur Bestimmung der Banddispersionen und Spin-Polarisationen neben BMs auch CEMs, sowie Spin-integrierte und Spin-aufgelöste MDCs aufgenommen. Im Folgenden werden die Ergebnisse dieser Experimente dargestellt, diskutiert und mit den theoretischen Modellen von SAKONG [47] und REN [48] verglichen. Auch lassen sich Vergleiche zu den vorherigen ARPES-Messungen von ZHANG anstellen [39]. Zudem lässt sich aus den Banddispersionen eine Ladungsträgerkonzentration für die SIC-Phase errechnen. Wichtige Details der Bandstruktur werden abschließend mit effektiven Wechselwirkungen basierend auf dem Rashba-(Zeeman-)Effekt (s. Kap. 2.2.1) und *Warping* (s. Kap. 2.3) beschrieben und diskutiert.

Die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels wurden kürzlich auch in [34] publiziert.

Beschreibung der mittels DFT berechneten Bandstrukturen

Eine erste Berechnung der Bandstruktur wurde für die ideale $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in T4-Konfiguration mit $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3$ ML von SAKONG durchgeführt und in [47] publiziert. Neuere Berechnungen zur idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von REN beinhalten neben der T4-Konfiguration auch die H3-Konfiguration [48]. Die Übereinstimmung der beiden Bandstrukturen mit T4-Konfiguration ist qualitativ sehr gut und weicht lediglich in Details voneinander

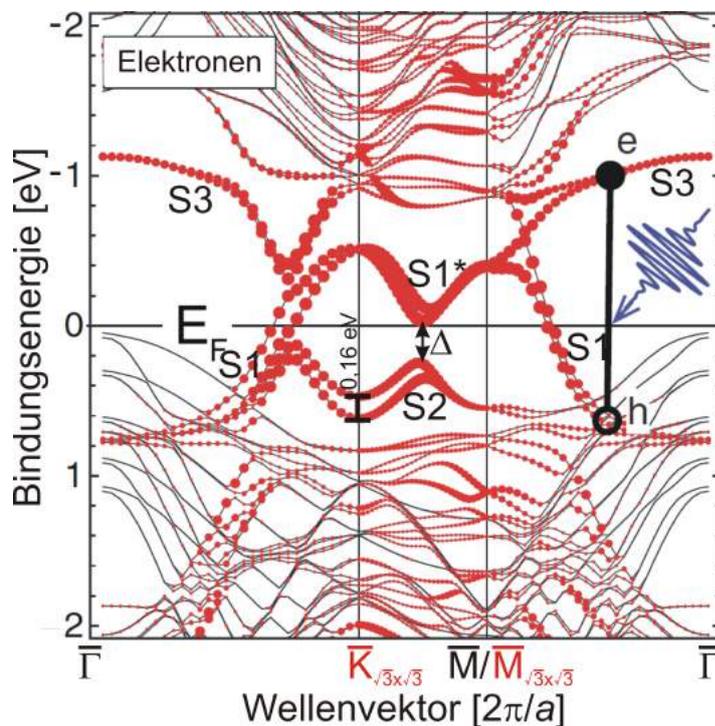


Abbildung 5.6: Berechnete Bandstruktur der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML in T4-Konfiguration: Beiträge der Pb-Atome sind durch rote Punkte dargestellt, graue Linien zeigen die Volumenbänder von Si nahe der Oberfläche. Innerhalb der Si-Bandlücke finden sich drei Pb-induzierte Bänder S1 (S1*), S2 und S3. Die Größe der Pseudo-Bandlücke zwischen S1/S1* und S2 beträgt $\Delta = 275$ meV. Weitere Details s. Text; angepasst, aus [47].

ab. Außerdem zeigen die Berechnungen in [48] die Spin-Polarisation \mathbf{S} am Fermi-Niveau, sowie die „künstlichen“ Bandstrukturen für den Fall verschwindender SOI. Eine weitere DFT-Berechnung der Bandstruktur für die T4-Rekonstruktion beinhaltet zwar die SOI, vernachlässigt jedoch die Spin-Aufspaltung der Bänder [448]. Diese Berechnung kann daher für die Interpretation der SR-ARPES-Experimente nur bedingt verwendet werden. Die berechnete Bandstruktur der H3-Konfiguration in [434, 449] stimmt dagegen quantitativ sehr gut mit der Berechnung von REN in [48] überein.

Im Vergleich mit der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist aufgrund der C_{3v} -Symmetrie und der ausgedehnteren Größe der SBZ die Bandstruktur der SIC-Phase bei alleiniger Betrachtung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion einfacher zu beschreiben. Die Beiträge der drei Rotationsdomänen überlagern sich in den ARPES-Messungen aufgrund der Symmetrie exakt, sodass für die ideale Struktur nicht zwischen unterschiedlichen Rotations- und Spiegeldomänen unterschieden werden muss. Abb. 5.6 zeigt die mittels DFT inklusive SOI berechnete Bandstruktur der Phase für die ideale $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in T4-Konfiguration von SAKONG [47], während Abb. 5.7 die Bandstrukturberechnungen beider Konfigurationen von REN [48] zeigt.

Innerhalb der projizierten Si-Bandlücke finden sich drei dispergierende Pb-induzierte Bänder, im Folgenden als S1 (abschnittsweise S1*), S2 und S3 bezeichnet. S2 ist identifizierbar mit dem mittleren Band der *Tight-Binding*-Berechnungen in [126, 130], wobei die dortigen

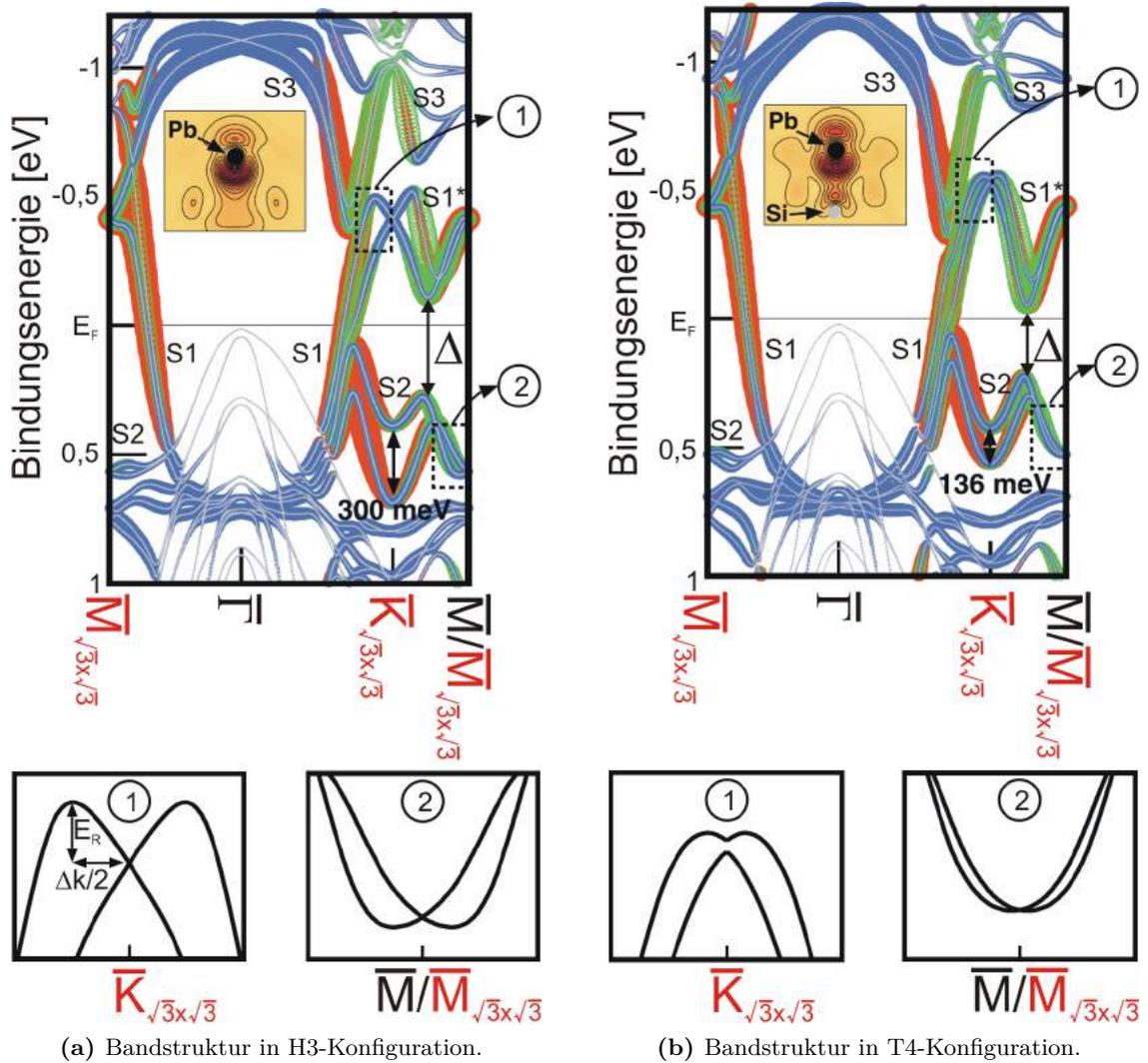


Abbildung 5.7: Berechnete Bandstrukturen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$: Die Größe der Kreise der Oberflächenzustände entspricht dem Beitrag der projizierten $\text{Pb}6p$ -Orbitale: $\text{Pb}6p_x$ rot, $\text{Pb}6p_y$ grün, $\text{Pb}6p_z$ blau. Die grauen Linien zeigen die Volumenbänder von Si nahe der Oberfläche. Innerhalb der Si-Bandlücke finden sich drei Pb-induzierte Bänder S1 (S1*), S2 und S3. Die SOI ist berücksichtigt und führt zu einer Spin-Aufspaltung der Bänder und einer Pseudo-Bandlücke Δ zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und \bar{M} -Punkt. Die Kästen unten zeigen die jeweilige Bandstruktur, basierend auf den gestrichelten Kästchen ①, ② um die $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - bzw. $\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte. Die Konturplots der Insets stellen die Ladungsdichteverteilung des niedrigsten unbesetzten Oberflächenzustands am $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt dar. Weitere Details s. Text; angepasst, aus [48].

Rechnungen lediglich den allgemeinen Fall für p -Orbitale auf einer sechszähligen Oberfläche darstellen. Das obere Band in [126, 130] lässt sich in der Bandstruktur der idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von Pb/Si(111) als Kombination von S3 mit S1* identifizieren, während das untere Band am $\bar{\Gamma}$ -Punkt innerhalb des Si-Valenzbands liegt (hier als S1) und innerhalb der projizierten Si-Bandlücke bei Bindungsenergien um 0,8 eV fast dispersionslos entlang der Hauptsymmetrierichtungen ist. In [126] wurde darüber hinaus bereits festgestellt, dass die Bänder eine signifikante Spin-Polarisation \mathbf{S} zeigen, die vom jeweiligen Punkt im \mathbb{K} -Raum abhängt und in alle drei Raumrichtungen zeigen kann.

Ausgehend vom $\bar{\Gamma}$ -Punkt dispergiert ein Pb-induziertes, unbesetztes Band (S3 in Abb. 5.6 u. 5.7) zunächst lochartig in Richtung $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$. Durch Wechselwirkung mit einem Band unterhalb des Fermi-Niveaus kehrt es seine Dispersion jedoch wieder um, sodass es die Fermi-Energie nicht schneidet. Zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und \bar{M} -Punkt, sowie in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung dispergiert das Band nur schwach, wobei die Dispersion für die T4-Konfiguration noch flacher ist als für die H3-Konfiguration (s. Abb. 5.7). Nahe des \bar{M} -Punktes ist die SOI-bedingte Aufspaltung des Bandes mit ca. 200 meV in beiden Konfigurationen am größten, wobei die H3-Konfiguration auch zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und \bar{M} -Punkt eine ähnlich große Aufspaltung zeigt (s. Abb. 5.7 (a)). Ansonsten zeigt sich in den Berechnungen keine größere Spin-Aufspaltung des Bandes.

Ein weiteres Pb-induziertes Band (S2 in Abb. 5.6 u. 5.7) befindet sich in der Berechnung komplett unterhalb des Fermi-Niveaus. Seine Bandbreite von etwa 500 meV in T4-Konfiguration bzw. 600 meV in H3-Konfiguration ist im Vergleich zu den anderen Bändern sehr gering, dafür weist es eine sehr starke Spin-Aufspaltung von 136 meV (T4) bis zu 300 meV (H3) am $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt auf. Diese Aufspaltung am $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt kann zudem nicht mit herkömmlicher Rashba-Aufspaltung beschrieben werden, da die Verschiebung lediglich in der Energie und nicht im Impulsraum auftritt. Stattdessen kann die Dispersion durch den (Rashba-)Zeeman-Effekt beschrieben werden (Vgl. Kap. 2.2.2). Da der $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt kein TRIM der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist, ist dieses Verhalten quantenmechanisch erlaubt. Das Band tritt ungefähr auf halber Distanz von $\bar{\Gamma}$ nach $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ aus der Volumenbandstruktur elektronenartig hervor, wechselwirkt mit dem S3-Band, wodurch es im Wechselwirkungsbereich lochartig wird, bevor es um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt herum wieder elektronenartig verläuft. Etwa auf $3/4$ der Strecke von $\bar{\Gamma}$ zum \bar{M} -Punkt erscheint das Band nahezu dispersionslos aus der Volumenbandstruktur. Um den \bar{M} -Punkt herum ist es aufgrund der TRS Rashba-aufgespalten (s. a. Kästen ② in Abb. 5.7). Der Rashba-Koeffizient der T4-Konfiguration ist an dieser Stelle mit $|\alpha_{R,T4}| = 0,093 \text{ eV \AA}$ mehr als fünfmal kleiner als der Rashba-Koeffizient der H3-Konfiguration ($|\alpha_{R,H3}| = 0,495 \text{ eV \AA}$) [48]. Zwischen \bar{M} - und $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt wechselwirkt das Band mit dem dritten Band S1/S1*, sodass die von beiden Eckpunkten zunächst elektronenartig verlaufende Dispersion am Wechselwirkungspunkt zu einer lochartigen Dispersion umgekehrt ist und sich eine Pseudo-Bandlücke der Größe Δ öffnet, welche für die H3-Konfiguration mit 385 meV größer ist als für die T4-Konfiguration ($\Delta = 275 \text{ meV}$ in beiden Studien). Zum \bar{M} -Punkt hin kreuzen sich außerdem die beiden Spin-polarisierten Teilbänder von S2 (s. Abb. 5.7).

Das dritte Pb-induzierte Band (S1/S1* in Abb. 5.6 u. 5.7) weist mit ca. 1,4 eV die größte Bandbreite auf. Vom $\bar{\Gamma}$ -Punkt bei ca. 700 meV Bindungsenergie beginnend dispergiert es mit Rashba-Aufspaltung sowohl in Richtung \bar{M} - als auch $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt sehr stark, sodass es das Fermi-Niveau jeweils bei ca. $2/3$ der Distanz schneidet und somit das einzige

metallische Band darstellt⁷³. Am Fermi-Niveau beträgt die Rashba-Aufspaltung in der Berechnung von SAKONG in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung $\Delta k_{R,T4} = 0,016 \text{ \AA}^{-1}$ und in $\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung $\Delta k_{R,T4} = 0,043 \text{ \AA}^{-1}$. Die Berechnungen von REN ergeben ähnliche Werte für beide Konfigurationen. Oberhalb des Fermi-Niveaus wird das Band in beiden Richtungen lochartig mit Maxima um die \overline{M} - bzw. $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte. Die mit ① gekennzeichneten Kästen in Abb. 5.7 zeigen, dass am $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt für S1* der Rashba- (H3) bzw. der Rashba-Zeeman-Effekt (T4) vorliegt, mit $|\alpha_{R,H3}| = 2,775 \text{ eV \AA}$ und $|\alpha_{R,T4}| = 0,523 \text{ eV \AA}$ [48]. Die Berechnung von SAKONG ergibt für die T4-Konfiguration zudem eine Rashba-Energie von $E_{R,T4} = 9 \text{ meV}$ und somit nach Gl. (2.66) $\Delta k_{R,T4} = 0,069 \text{ \AA}^{-1}$ am $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt, was einen um 60 % größeren Wert darstellt als am Fermi-Niveau. In $\overline{\Gamma M}$ -Richtung wechselwirkt außerdem einer der beiden Spin-Zustände mit dem zuerst beschriebenen unbesetzten S3-Band. Zwischen \overline{M} - und $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt nähert sich die Dispersion des Bandes wieder der Fermi-Energie an, ohne sie jedoch zu schneiden. Um das so entstehende Minimum herum ist das Band wiederum elektrodenartig und aufgrund der Wechselwirkung mit dem nur schwach dispergierenden S2-Band mit ca. 100 meV Spin-aufgespalten. Die Dispersion um das Minimum herum kann am Besten mit dem Rashba-Zeeman-Effekt beschrieben werden, wobei zum \overline{M} -Punkt hin wie beim S2-Band ebenfalls eine Kreuzung der beiden Spin-polarisierten Teilbänder von S1* vorliegt.

Die Farbcodierung der Bänder in Abb. 5.7 entspricht der Projektion auf die drei Pb6p-Orbitale, wobei die Breite den Anteil des jeweiligen Orbitals angibt [48]. Demnach besteht das S1/S1*-Band im Wesentlichen aus dem Pb6p_x- und dem Pb6p_y-Orbital und lediglich um den $\overline{\Gamma}$ - und den $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt aus dem Pb6p_z-Orbital. Am Fermi-Niveau dominiert der Anteil der Pb6p_{x,y}-Orbitale, sodass die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion grundsätzlich ein 2DEG darstellt, ähnlich wie die (1×1) -Phase (Vgl. Kap. 4.2.6 u. [460]). Das S2-Band entspricht innerhalb der projizierten Si-Bandlücke großteils dem Pb6p_x-Orbital mit kleineren Anteilen der beiden anderen Pb6p-Orbitale. Beim S3-Band hängt der orbitale Charakter dagegen stark vom jeweiligen Abschnitt der Bandstruktur ab: Um den $\overline{\Gamma}$ - und den $\overline{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt dominiert das Pb6p_z-Orbital, wohingegen am $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt das Pb6p_y-Orbital den Hauptanteil ausmacht. Zwischen den Hauptsymmetriepunkten liegen zudem Abschnitte mit hohen Pb6p_x-Anteilen vor.

Zudem sind die ersten fünf bzw. vier lochartigen HH- und LH-Bänder in Abb. 5.6 u. 5.7 eingezeichnet (die SO-Bänder sind nicht dargestellt). Sie repräsentieren die Pb-induzierten QWS im Si-Bulk (s. Kap. 5.2.4).

Betrachtung der Spin-Polarisationen und -Texturen am Fermi-Niveau

Die Spin-Polarisationen und -Texturen am Fermi-Niveau beider Konfigurationen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der Berechnungen von REN aus [48] sind in Abb. 5.8 dargestellt. Die beiden nahezu hexagonalen FSMs⁷⁴ unterscheiden sich lediglich marginal durch unterschiedlich starkes *Warping* in $\overline{\Gamma K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung, was auch bereits aus den berechneten Bandstrukturen in Abb. 5.7 hervorgeht. Lediglich das Spin-aufgespaltene S1/S1*-Band schneidet das Fermi-Niveau. Die weitere Analyse zeigt, dass eine phänomenologische Beschreibung durch den anisotropen Rashba-Effekt 3. Ordnung in \mathbf{k} nach Kap. 2.2.1 inklusive *Warping* (s. Kap. 2.3) die berechneten Daten reproduziert. Die FSMs haben zudem eine große Ähnlichkeit mit der

⁷³ Das Fermi-Niveau kann im Experiment verschoben sein, sodass weitere metallische Bänder möglich sind.

⁷⁴ Fermi Surface Maps

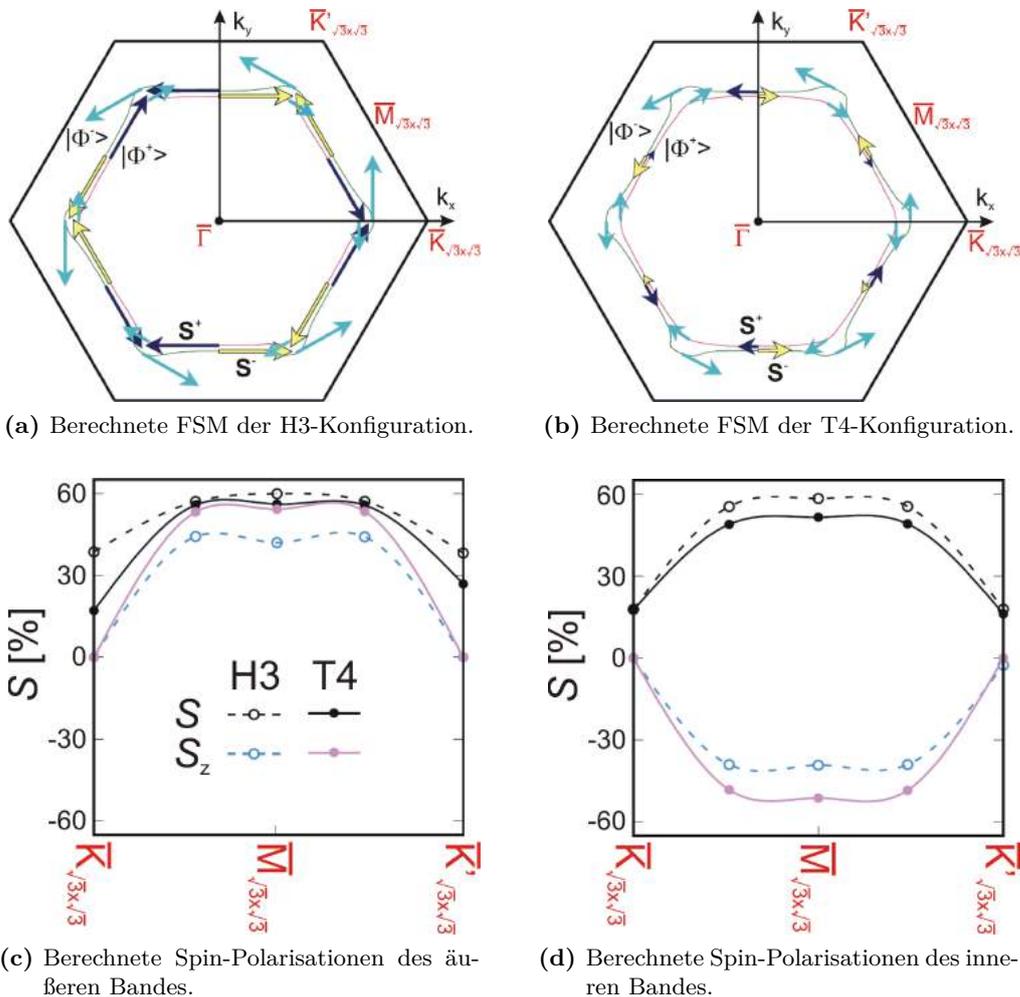


Abbildung 5.8: Berechnete FSM und ihre Spin-Textur der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Lediglich das S1-Band schneidet in der Berechnung die durch *Warping* annähernd hexagonale Fermi-Fläche. Das äußere Band hat dabei in Richtung der $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und $\bar{K}'_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte kleine Ausbuchtungen. Die Spin-Polarisation S ist in H3-Konfiguration höher als in T4-Konfiguration, $|S_z|$ jedoch niedriger. Das äußere Band hat eine etwas größere Spin-Polarisation als das innere Band. Zudem gilt $\text{sgn}(\mathbf{S}^-) = -\text{sgn}(\mathbf{S}^+)$, d. h., dass das Vorzeichen des Spin-Polarisationsvektors in jeder Komponente von \mathbf{S} von äußerem und innerem Band umgekehrt zueinander ist. Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} in (a) u. (b): Die Pfeile zeigen die Richtung von \mathbf{S} in der (k_x, k_y) -Ebene an. Ihre Länge korreliert mit S , ist jedoch nicht maßstabsgetreu dargestellt. Schwarze Pfeile $S_z < 0$, blaue Pfeile $S_z = 0$, gelbe Pfeile $S_z > 0$; angepasst, aus [48].

von β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [538].

Zunächst zeigt sich durch Vergleich der angegebenen Orientierungen von $\mathbf{S}(\mathbf{k})$ anhand der farbigen Pfeile in Abb. 5.8 (a) u. (b), dass die Spin-Textur beider Konfigurationen gleich ist. Zudem ist das Vorzeichen des Spin-Polarisationsvektors des äußeren Bandes $\text{sgn}(\mathbf{S}^-(\mathbf{k}))$ in

Spin-Polarisation	Richtung	Konfiguration		Spin-Polarisation	Richtung	Konfiguration	
		H3	T4			H3	T4
+		%	%	-		%	%
S_x^+	k_y	+44	+6	S_x^-	k_y	-43	-15
S_y^+	k_x	-18	-18	S_y^-	k_x	+38	+22
S_z^+	k_y	+39	+52	S_z^-	k_y	-42	-54
S^+	k_x	18	18	S^-	k_x	38	22
S^+	k_y	59	52	S^-	k_y	60	56

Tabelle 5.1: Berechnete Spin-Polarisationen der FSMs der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Werte ermittelt aus Abb. 5.8 (c) u. (d). Die Spin-Polarisationen $S_{x,z}^\pm$ in k_y - und S_y^\pm in k_x -Richtung verschwinden aus Symmetriegründen. Die Richtungsangaben und Spin-Polarisationen sind explizit für $\mathbf{k} = (k_x > 0, 0)$ bzw. $\mathbf{k} = (0, k_y > 0)$ angegeben.

eine gegebene Richtung stets umgekehrt zu dem des inneren Bandes $\text{sgn}(\mathbf{S}^+(\mathbf{k}))$. Dies entspricht der allgemeinen Spin-Textur des Rashba-(Zeeman-)Effekts, wobei das äußere Band dem Zustand $|\Phi^-(\mathbf{k})\rangle$ und das innere Band dem Zustand $|\Phi^+(\mathbf{k})\rangle$ in Gl. (2.57) mit der zugehörigen Spin-Polarisation

$$S^\pm = |\mathbf{S}^\pm| = \sqrt{(S_x^\pm)^2 + (S_y^\pm)^2 + (S_z^\pm)^2} \quad (5.1)$$

entspricht.

Die Bandstrukturberechnungen zeigen, dass S1/S1* am Fermi-Niveau in etwa halb besetzt ist. Dies hat zur Folge, dass eine alleinige Beschreibung mittels \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_W und α_1^I im Rahmen eines Rashba-aufgespaltenen, quasi-freien Elektronengases mit *Warping* nicht ausreichend ist. Die Dispersion des Bandes ist bei E_F nahezu linear, da das Band oberhalb des Fermi-Niveaus lochartig wird, wodurch in erster Näherung die nichtlinearen Rashba-Koeffizienten α_3^I und $\alpha_3^{A,1}$ berücksichtigt werden müssen. Anhand der Richtung der Pfeile und der jeweiligen Bandstruktur lassen sich die Vorzeichen der Rashba-Koeffizienten α_1^I , α_3^I und $\alpha_3^{A,1} \equiv \alpha_3^A \neq 0$ nach Tab. 2.3 mittels Gl. (2.61) bestimmen. Eine quantitative Analyse der Rashba-Koeffizienten ist mit der Theorie aus Kap. 2.2.1 jedoch nicht möglich, da diese im gesamten \mathbb{K} -Raum für beide Spin-polarisierten Teilbänder stets eine Spin-Polarisation von $S = 100\%$ liefert, im Gegensatz zu den berechneten Werten ($S^\pm = 18 - 60\%$) von REN in [48] (s. Tab. 5.1).

Der Vergleich von Gl. (2.61) mit den Werten der Spin-Polarisation in Tab. 5.1 liefert die folgenden Relationen für die Vorzeichen der Rashba-Koeffizienten, wobei $k_{F,x}$ und $k_{F,y}$ die Fermi-Wellenvektoren in k_x - bzw. k_y -Richtung sind:

$$k_x\text{-Richtung: } S_y^+ < 0, S_y^- > 0 \quad \Rightarrow \text{sgn}(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_{F,x}^2) < 0, \quad (5.2 \text{ a})$$

$$k_y\text{-Richtung: } S_x^+ > 0, S_x^- < 0 \quad \Rightarrow \text{sgn}(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_{F,y}^2) < 0, \quad (5.2 \text{ b})$$

$$k_y\text{-Richtung: } S_z^+ > 0, S_z^- < 0, \sin(3\varphi = 3\pi/2) = -1 \quad \Rightarrow \alpha_3^A < 0. \quad (5.2 \text{ c})$$

In der Erwartung kleiner Absolutwerte für $\alpha_3^I k_{F,i}^2$ im Vergleich zu α_1^I folgt $\alpha_1^I < 0$. Das Vorzeichen von α_3^I bleibt unter dieser Annahme jedoch unbestimmt. Damit hat der Rashba-Effekt der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in erster Ordnung in \mathbf{k} einen negativen Rashba-Koeffizienten α_1^I .

Dieses Resultat stimmt mit der theoretischen Beschreibung aus Kap. 2.2.1 überein, wie auch der Vergleich der Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ von Abb. 5.8 (a) u. (b) mit Abb. 2.4 (a) belegt. Dies bedeutet zudem, dass nach Gl. (2.21) der Erwartungswert des Potentialgradienten senkrecht zur Oberfläche $\langle \partial_z V \rangle$ bereits in der obersten Atomlage negativ ist, Abschirmungseffekte durch positive Bildladungen an der Oberfläche einer Schottky-Barriere also im Vergleich zur atomaren SOI der Pb-Atome (mit Potentialgradient ∇V_{Nuc} aus Gl. (2.65)) vernachlässigbar sind. Da die atomare SOI auch über den (reinen) Beitrag der Schottky-Barriere zum Potentialgradienten dominiert (s. Kap. 2.2.1), lässt sich schlussfolgern, dass die Ladungsdichteverteilung des niedrigsten unbesetzten Zustands nicht am Pb-Atomkern maximal ist, sondern in Richtung des Si-Substrats verschoben ist. Dies ist genau die Situation, wie sie auch aus den Konturplots in Abb. 5.7 hervorgeht.

Ein negativer Rashba-Koeffizient wurde bereits für die QWSs von Pb auf Si(111) gemessen [111, 114], nicht jedoch für Pb-Filme im Schichtdickenbereich um $\Theta_{\text{Pb}} = 1$ ML. Weitere Beispiele für negative Rashba-Koeffizienten sind die Au(111)-Oberfläche [148] und nach DFT-Berechnungen der Spin-Texturen die metallischen Oberflächenzustände von β -Pb/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) [538], sowie der Koadsorptionssysteme von $0,15 \pm 0,05$ ML Tl, In, Na und Cs auf Au/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) mit $\Theta_{\text{Au}} = 1$ ML [539, 540].

Abseits der $\overline{\Gamma\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung ergeben die Berechnungen von REN in [48] endliche Werte der S_z -Komponente der Spin-Polarisation. Damit drehen sich die Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ zum Teil *out-of-plane*, was mit $\alpha_3^{\text{A}} < 0$ nach Gl. (2.60) erklärt werden kann.

Wesentliche Unterschiede beider Konfigurationen zeigen sich lediglich in den Absolutwerten $S^\pm(\mathbf{k})$ der Spin-Polarisation und ihren Komponenten. So ist die S_x^+ -Komponente der H3-Konfiguration in k_y -Richtung mehr als sieben Mal größer als die der T4-Konfiguration. Dahingegen ist die S_z -Komponente der T4-Konfiguration in der gleichen Richtung größer als die der H3-Konfiguration. Dies bedeutet, dass der die S_z -Spin-Polarisation in k_y -Richtung erzeugende *in-plane*-Anteil des Potentialgradienten $\langle \partial_x V \rangle$ aus Gl. (2.19) in der T4-Konfiguration größer ist als in der H3-Konfiguration und beide positiv sind (wegen $\alpha_3^{\text{A}} < 0$) [48] (Vgl. Kap. 2.2.1). Dies passt auch zu den unterschiedlichen Ladungsdichteverteilungen, die in Abb. 5.7 gezeigt sind. Demnach ist die gezeigte Ladungsdichte der H3-Konfiguration im Maximum zwar insgesamt höher als in der T4-Konfiguration und zudem stärker am Pb-Atom lokalisiert, der Einfluss weiterer lokalisierter Ladungsträger durch die Pb-Si-Bindungen und die Ausdehnung der Ladungsdichte in x-Richtung kompensieren den Effekt jedoch, sodass $\langle \partial_x V_{\text{T4}} \rangle > \langle \partial_x V_{\text{H3}} \rangle$ ist. Zudem entfällt der Beitrag von $\langle \partial_y V \rangle$ aus Gl. (2.19) zum Rashba-Effekt aufgrund der Symmetrie beider Konfigurationen, d. h. $\langle \partial_y V \rangle = 0$.

Berechnung der Ladungsträgerkonzentration

Da ausschließlich das S1/S1*-Band das Fermi-Niveau in den Berechnungen schneidet (s. Abb. 5.6-5.8), lässt sich die zur Leitfähigkeit beitragende Ladungsträgerkonzentration in erster Näherung im Rahmen des Modells quasi-freier Elektronen unter Einbeziehung des Rashba-Effekts berechnen. Für isotrope zweidimensionale Elektronengase beträgt die Elektronenkonzentration bei kreisförmiger Fermi-Fläche

$$n_o = \frac{2}{(2\pi)^2} \cdot \pi k_{\text{F}}^2 = \frac{k_{\text{F}}^2}{2\pi}. \quad (5.3)$$

Die Fermi-Fläche der SIC-Phase ist durch *Warping* jedoch annähernd hexagonal (Vgl. Abb. 5.8 (a) u. (b) für die ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion; die kleinen Ausbuchtungen des äußeren

Bandes in $\overline{\Gamma\text{K}}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Richtung werden im Folgenden vernachlässigt), sodass das Verhältnis der Flächen von Hexagon und Kreis berücksichtigt werden muss:

$$n_{\text{Hex}} = n_{\circ} \frac{A_{\text{Hex}}}{A_{\circ}} = \frac{k_{\text{F}}^2}{2\pi} \cdot \frac{\frac{3}{2}\sqrt{3}k_{\text{F},x}^2}{\pi k_{\text{F}}^2} = \frac{3\sqrt{3}k_{\text{F},x}^2}{(2\pi)^2}, \quad (5.4)$$

wobei $k_{\text{F},x}$ der Fermi-Wellenvektor in Richtung der Ecken des Hexagons ist (hier $\overline{\Gamma\text{M}}$ - bzw. $\overline{\Gamma\text{K}}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Richtung). Wegen der Rashba-Aufspaltung des S1-Bandes werden die mittleren Fermi-Wellenvektoren $\bar{k}_{\text{F},i} = (k_{\text{F},i,\uparrow} + k_{\text{F},i,\downarrow})/2$, mit $i \in \{x,y\}$ und der Spin-Polarisation \uparrow, \downarrow ⁷⁵ zur Berechnung verwendet. Aus Abb. 5.6 ergeben sich $\bar{k}_{\text{F},x} = 0,72 \cdot 2\pi/3a_{[11\bar{2}]} = 0,453 \text{ \AA}^{-1}$ und $\bar{k}_{\text{F},y} = 0,732 \cdot 2\pi/\sqrt{12}a_{[11\bar{2}]} = 0,399 \text{ \AA}^{-1}$ mit den Rashba-Aufspaltungen $\Delta k_{\text{R},x} = 0,043 \text{ \AA}^{-1}$ und $\Delta k_{\text{R},y} = 0,016 \text{ \AA}^{-1}$, in guter Übereinstimmung mit den Berechnungen von REN in [48] (s. a. Abb. 5.8 (a) u. (b)). Somit lässt sich eine theoretische Elektronenkonzentration der SIC-Phase (unter ausschließlicher Betrachtung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und Vernachlässigung der Domänenwände) von $n_{\text{Theo}} = 2,70 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ errechnen. Verglichen mit der Flächendichte der Pb-Atome der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von $N_{\text{Pb}} = 1,04 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ergibt sich ein Verhältnis von 26 %. Dies bedeutet, dass die meisten Valenzelektronen der vier Pb-Atome pro $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle für die lokalisierten Bindungen der Atome benötigt werden und damit komplett besetzte Bänder innerhalb der Bandstruktur bilden. Somit tragen sie nicht zur Leitfähigkeit der Struktur bei.

ARPES-Messungen in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung

Beginnend mit der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung sind in Abb. 5.9 ausgehend vom $\overline{\Gamma}$ -Punkt ein Spin-integrierter MDC bei $T = 75 \text{ K}$ und eine BM bei $T = 95 \text{ K}$ gezeigt. Anhand der BM lässt sich erkennen, dass um den $\overline{\Gamma}$ -Punkt herum lediglich die Valenzbänder des Si-Bulks zur Photoelektronenemission beitragen. Das VBM liegt am $\overline{\Gamma}$ -Punkt bei $E_{\text{VBM}} = 165 \text{ meV}$ Bindungsenergie. Damit ist die Höhe der Schottky-Barriere mittels

$$\Phi_{\text{SB}} = E_{\text{G,Si}} - E_{\text{VBM}} - \Delta\Phi \quad (5.5)$$

bestimmbar [541]. Die Erniedrigung der Schottky-Barriere durch Bildladungseffekte an der Oberfläche

$$\Delta\Phi = \sqrt{\frac{e^2 \partial_z V}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}} \quad (5.6)$$

hängt nach [541] vom Potentialgradienten $\partial_z V$ der Raumladungszone ab und ist bei dem hier verwendeten niedrig dotierten Si-Substrat lediglich etwa 0,1 eV groß. Die Größe der Bandlücke von Si ist temperaturabhängig und wird durch

$$E_{\text{G,Si}}(T) = E_{\text{G,Si}}(0) - \frac{4,73 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K} \cdot T^2}{T + \Theta_{\text{D,Si}}} \quad (5.7)$$

mit der Debye-Temperatur $\Theta_{\text{D,Si}} \approx 645 \text{ K}$ und der Größe der Bandlücke am Temperaturnullpunkt $E_{\text{G,Si}}(0) = 1,170 \text{ eV}$ beschrieben [140, 542]. Dies ergibt in der Messung eine Bandlücke

⁷⁵ Die Pfeile \uparrow und \downarrow geben jeweils die Orientierung der Spin-Polarisation bezogen auf eine bestimmte \mathbf{k} -Richtung und Spin-Komponente S_i , $i \in \{x,y,z\}$, an. Beispiel 1: Für Wellenvektoren k_x mit $k_y = 0$ bedeutet $S_y > 0 \uparrow$ und $S_y < 0 \downarrow$. Beispiel 2: Für Wellenvektoren k_y mit $k_x = 0$ bedeutet $S_x < 0 \uparrow$ und $S_x > 0 \downarrow$. Bezogen auf die S_z -Komponente der Spin-Polarisation bedeutet $S_z > 0$ immer \uparrow und $S_z < 0$ immer \downarrow .

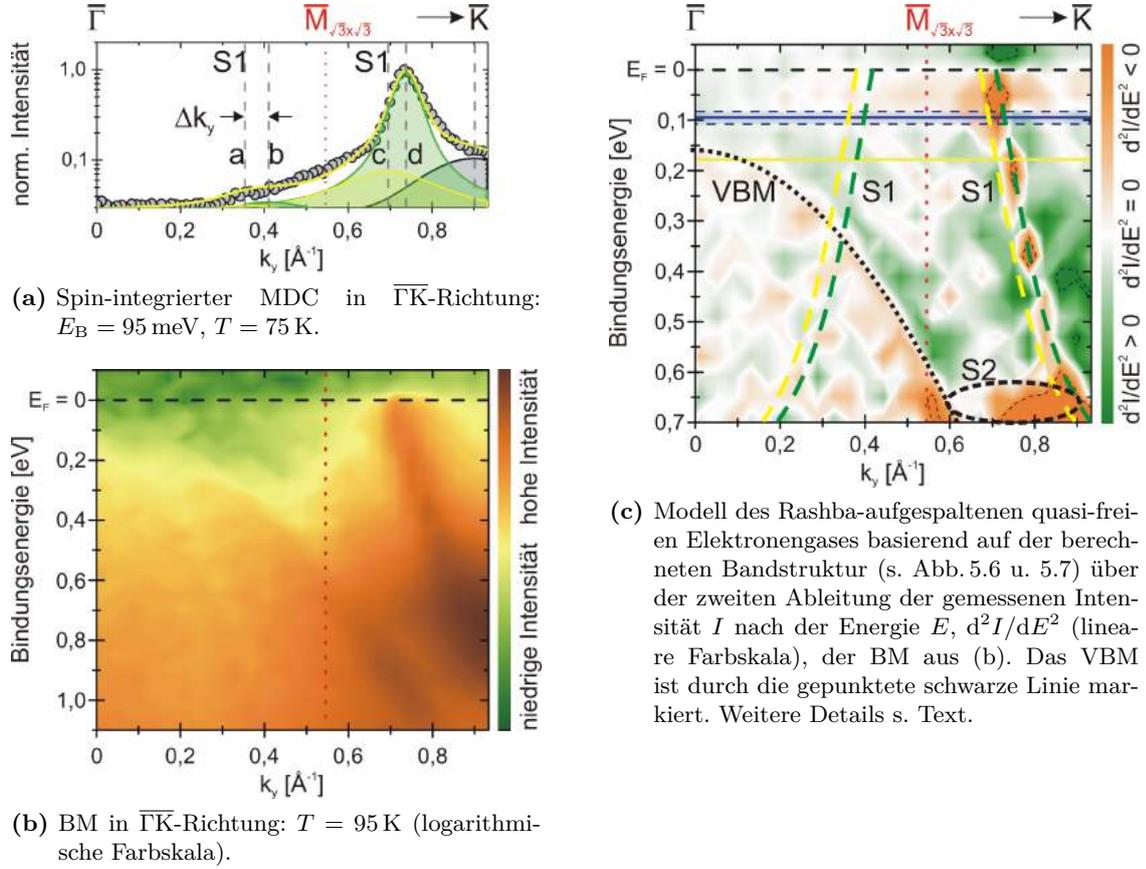


Abbildung 5.9: Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in $\overline{\Gamma\bar{K}}$ -Richtung.

von $E_{G,Si}(95\text{ K}) = 1,164\text{ eV}$ und damit $\Phi_{SB}(95\text{ K}) = 0,899\text{ eV}$. XPS-Messungen ergaben im Vergleich dazu eine Schottky-Barriere von $\Phi_{SB} \approx 0,9\text{ eV}$ bei RT [135, 136].

Als einzig deutlich sichtbarer Oberflächenzustand zeigt sich das S1 genannte Band bei hohen k_y -Werten oberhalb von $0,6\text{ \AA}^{-1}$ mit einer Rashba-Aufspaltung von $\Delta k_{R,y} = 0,038\text{ \AA}^{-1}$. Die gemessene Rashba-Aufspaltung ist mehr als doppelt so groß wie für diese Richtung theoretisch berechnet. Da dieser k_y -Abschnitt bereits in der 2. SBZ der SIC-Phase liegt, handelt es sich hier um ein Umklappband der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Der zugehörige Symmetriepunkt $\overline{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ ist durch die gepunkteten roten Linien in Abb. 5.9 gekennzeichnet. Der Grund für die unterdrückte Photoelektronenemission innerhalb der 1. SBZ liegt in den Übergangsmatrixelementen der beteiligten Pb6p-Orbitale [543].

Das S1-Band lässt sich jedoch auch innerhalb der 1. SBZ nahe der Fermi-Energie ausmachen, indem die zweite Ableitung der gemessenen Photoelektronenintensität I der BM aus Abb. 5.9 (b) nach der Energie E analysiert wird (s. Abb. 5.9 (c)). Die orange gefärbten Bereiche weisen auf den möglichen Verlauf von elektronischen Zuständen hin, da in diesen d^2I/dE^2 negativ ist. Eine Überlagerung des am $\overline{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt gespiegelten Verlaufs des S1-Bandes zeigt zwischen dem Fermi-Niveau und etwa 100 meV Bindungsenergie eine gute Übereinstimmung. Dies belegt auch der Spin-integrierte MDC in Abb. 5.9 (a) bei $E_B = 95$ meV. Die

Pseudo-Voigt-Peaks des Fits bei $0,35 \text{ \AA}^{-1}$ und $0,41 \text{ \AA}^{-1}$ in der 1. SBZ passen gut zu den Peaks bei $0,70 \text{ \AA}^{-1}$ und $0,74 \text{ \AA}^{-1}$ in der 2. SBZ. Die leichten Verschiebungen der gefitteten Peaks des Spin-aufgespaltenen S1-Bandes innerhalb der ersten 1. SBZ zu den erwarteten Positionen lässt sich mit der niedrigen Intensität infolge des Übergangsmatrixelementeffekts erklären, weswegen die Peaks im Fit tendenziell zu höheren k_y -Werten verschoben sind. Bezogen auf die 1. SBZ lassen sich die Spin-abhängigen Fermi-Wellenvektoren $k_{F,y,\uparrow}$ und $k_{F,y,\downarrow}$ anhand von Abb. 5.9 (c) zu $k_{F,y,\uparrow} = 0,41 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{F,y,\downarrow} = 0,372 \text{ \AA}^{-1}$ bestimmen. Daraus ergibt sich der mittlere Fermi-Wellenvektor zu $\bar{k}_{F,y} = 0,391 \text{ \AA}^{-1}$, in guter Übereinstimmung mit den obigen Berechnungen. Aufgrund der Spin-Aufspaltung des S1-Bandes existieren zwei Fermi-Wellenlängen $\lambda_{F,y,\downarrow} = 2\pi/k_{F,y,\downarrow} = 16,89 \text{ \AA} \approx 4,4a_{[1\bar{1}0]}$, $\lambda_{F,y,\uparrow} = 2\pi/k_{F,y,\uparrow} = 15,32 \text{ \AA} \approx 4a_{[1\bar{1}0]}$. Damit passen sie in etwa zur Streifenbreite der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im Strukturmodell der SIC-Phase (Vgl. Abb. 4.6). Für eine $(12 \times \sqrt{3})$ -Superzelle mit $\Theta_{Pb} \approx 1,306 \text{ ML}$ ergibt sich etwa eine Streifenbreite der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von $4a_{[1\bar{1}0]} = 15,36 \text{ \AA}$.

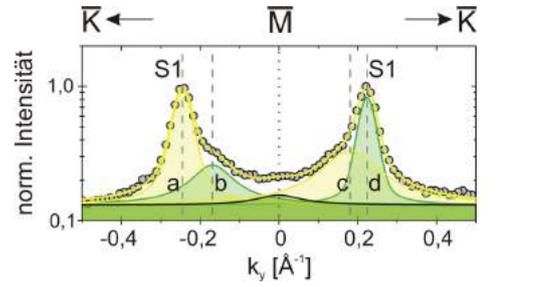
Innerhalb des dargestellten (E, k_y) -Bereichs der BM findet sich außer dem S1-Band lediglich noch ein kleiner, nur schwach dispergierender Teil des S2-Bandes bei $E_B \approx 700 \text{ meV}$ zwischen dem VBM bei $k_y \approx 0,6 \text{ \AA}^{-1}$ und dem S1-Band bei $k_y \approx 0,85 \text{ \AA}^{-1}$ (s. Abb. 5.9 (b) u. (c)). Die effektive Masse m_y^* des S1-Bandes in k_y -Richtung lässt sich in parabolischer Näherung für ein quasi-freies Elektronengas zu $0,42 m_e$ abschätzen. Dieser Wert gilt jedoch nur in einem Bereich zwischen Fermi-Niveau und $E_B \approx 500 \text{ meV}$, da das Band bei noch höheren Bindungsenergien mit den Zuständen des Si-Bulks wechselwirkt und zudem *Warping*-Effekte zu einer veränderten Krümmung beitragen (s. Diskussionsteil ab S. 132 am Ende des Kapitels). Die Energieaufspaltung am Fermi-Niveau zwischen den aufgespaltenen Bändern von S1 beträgt 175 meV .

ARPES-Messungen parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung

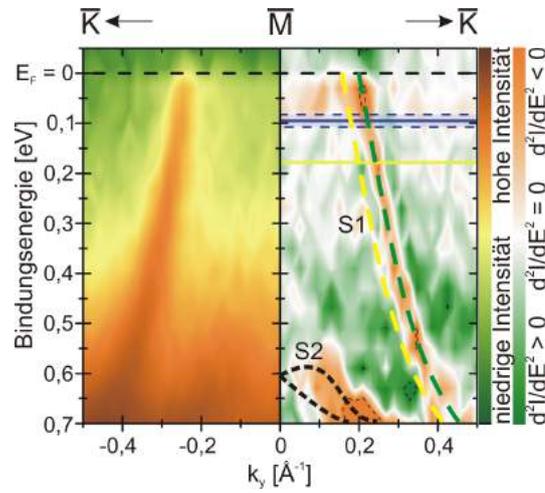
In Ergänzung zur $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung wurden parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung bei $k_x = 0,90 \text{ \AA}^{-1}$ (nahe des $\overline{\text{M}}$ -Punktes) ebenfalls ein Spin-integrierter MDC und eine BM gemessen (s. Abb. 5.10). Da sowohl die $\overline{\text{M}}$ - und $\overline{\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte, als auch die $\overline{\text{K}}$ - und $\overline{\Gamma}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte jeweils äquivalent zueinander sind, stellt die $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung der 1. SBZ der Si(111)- (1×1) -Struktur für die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion die $(\overline{\Gamma\text{M}\overline{\Gamma}})_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Richtung der 2. SBZ der Rekonstruktion dar. Damit lässt sich die gleiche Oberflächenbandstruktur wie in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung erwarten.

Aufgrund des an den $\overline{\text{K}}$ -Punkten energetisch tieferliegenden Si-Bulks fehlt die Hybridisierung der Oberflächenbänder mit den *Bulk*-Zuständen, sodass die gemessene Bandstruktur der $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung der Bandstruktur der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung in der 2. SBZ der Rekonstruktion stark ähnlich ist (Vgl. Abb. 5.9). Das deutlich sichtbare S1-Band ist mit $\Delta k_{R,y} = 0,036 \text{ \AA}^{-1}$ wiederum Spin-aufgespalten (Abweichung zur $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung $-5,3\%$). Für die Fermi-Wellenvektoren ergeben sich aus der Anpassung der Bandstruktur an die Daten $k_{F,y,\uparrow} = 0,409 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{F,y,\downarrow} = 0,373 \text{ \AA}^{-1}$ in sehr guter Übereinstimmung mit der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung und den Berechnungen. Die effektive Masse des S1-Bandes im Bereich der Fermi-Energie beträgt im Modell eines quasi-freien Elektronengases ebenfalls $m_y^* = 0,42 m_e$.

Bei höheren Bindungsenergien als 550 meV findet sich im Bereich zwischen 0 \AA^{-1} und etwa $\pm 0,3 \text{ \AA}^{-1}$ ein Teil des S2-Bandes, das ebenfalls Spin-aufgespalten ist. Bei $k_y = 0 \text{ \AA}^{-1}$, d. h. im $\overline{\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt, treffen sich die beiden Spin-polarisierten Teilbänder, sodass die TRS nicht



(a) Spin-integrierter MDC in \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,90 \text{ \AA}^{-1}$): $E_B = 95 \text{ meV}$, $T = 75 \text{ K}$.



(b) BM in \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,90 \text{ \AA}^{-1}$): $T = 90 \text{ K}$. Links: gemessene Intensität I (logarithmische Farbskala). Rechts: Modell des Rashba-aufgespaltenen quasi-freien Elektronengases für das S1-Band, sowie auf der berechneten Bandstruktur aus Abb. 5.6 u. 5.7 beruhende Dispersion des S2-Bandes über der zweiten Ableitung der gemessenen Intensität I nach der Energie E , d^2I/dE^2 (lineare Farbskala). Weitere Details s. Text.

Abbildung 5.10: Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in \overline{KMK} -Richtung.

verletzt ist. Über die jeweilige Spin-Polarisation der beiden Teile des S2-Bandes lässt sich auf Grundlage der vorhandenen Daten keine Aussage treffen.

ARPES-Messungen in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung

Die Ergebnisse der Spin-integrierten Messungen der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung sind in Abb. 5.11 zusammen mit Ergebnissen der Spin-aufgelösten MDCs aus Abb. 5.12 und einem Ausschnitt des CEMs aus Abb. 5.13(a) dargestellt. Da \overline{M} - und $\overline{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt (schwarze gepunktete Linien in Abb. 5.11) in k_x -Richtung äquivalent sind, liegt bei $k_x = 0,630 \text{ \AA}^{-1}$ der erste $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt (rote gepunktete Linien in Abb. 5.11) in dieser Richtung. Das VBM des Si-Bulks ist

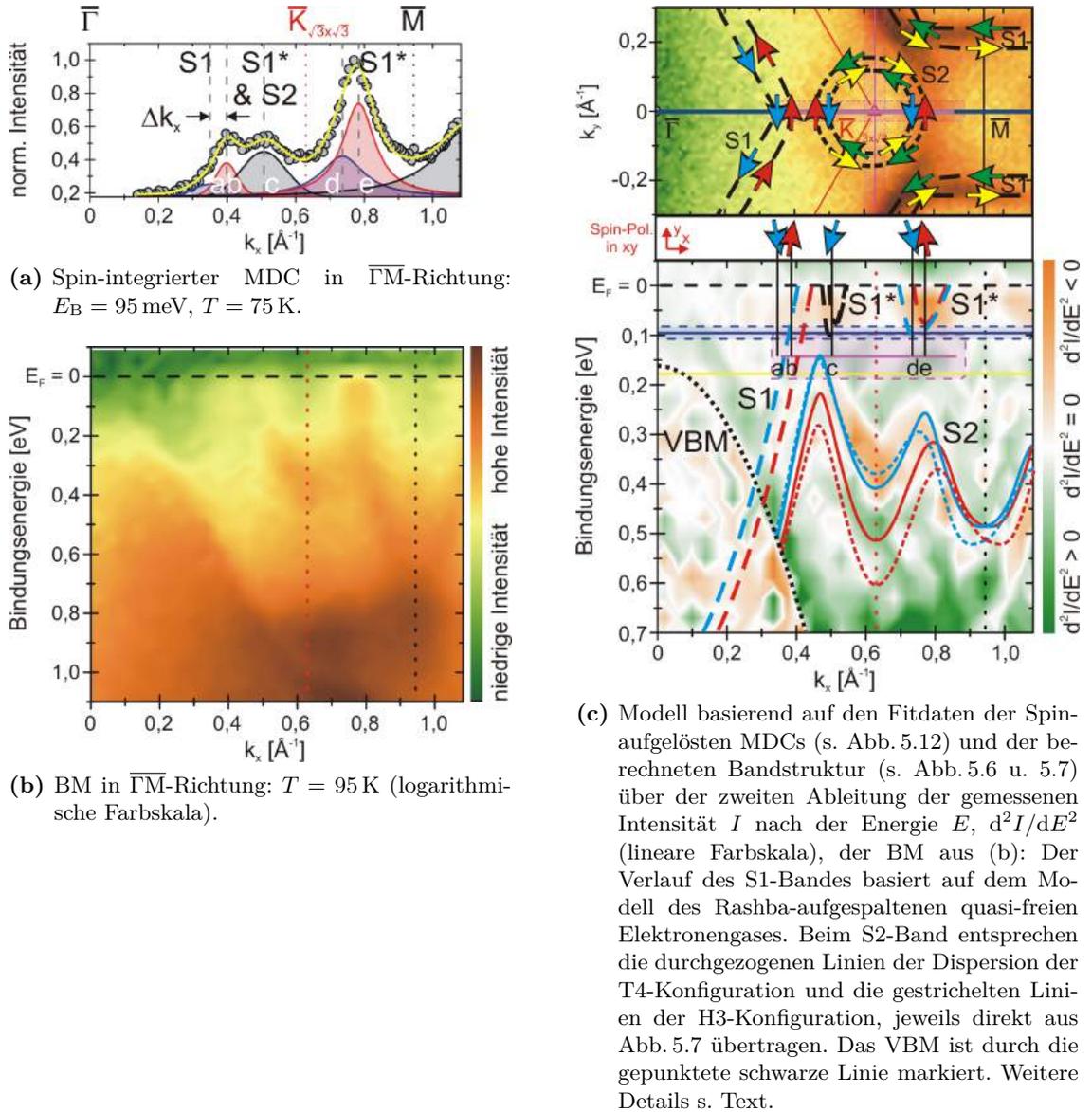


Abbildung 5.11: Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung.

bei niedrigen k_x -Werten um den $\overline{\Gamma}$ -Punkt herum deutlich in Abb. 5.11 (b) u. (c) sichtbar. Bei $k_x \approx 0,3 \text{ \AA}^{-1}$ erscheint das S1-Band aus dem Si-Bulk und dispergiert elektronenartig in Richtung $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt. Das Fermi-Niveau schneidet das S1-Band bei $k_{F,x,\uparrow} = 0,432 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{F,x,\downarrow} = 0,392 \text{ \AA}^{-1}$, d. h. mit einer Rashba-Aufspaltung von $\Delta k_{R,x} = 0,04 \text{ \AA}^{-1}$. Der mittlere Fermi-Wellenvektor ist somit $\overline{k}_{F,x} = 0,412 \text{ \AA}^{-1}$. Die effektive Masse nahe der Fermi-Energie beträgt im Modell des quasi-freien Elektronengases (parabolische Näherung) $m_x^* = 0,77 m_e$ und die Energieaufspaltung zwischen den beiden Bändern liegt am Fermi-Niveau bei 150 meV.

Wie in der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung existieren aufgrund der Spin-Aufspaltung des S1-Bandes auch hier zwei Fermi-Wellenlängen $\lambda_{F,x,\downarrow} = 2\pi/k_{F,x,\downarrow} = 16,03 \text{ \AA} \approx 4,8a_{[11\overline{2}]}$, $\lambda_{F,x,\uparrow} = 2\pi/k_{F,x,\uparrow} = 14,54 \text{ \AA} \approx$

$4,4a_{[11\bar{2}]}$. Damit sind die Fermi-Wellenlängen wesentlich kürzer als die Domänengröße der Streifen der SIC-Phase in $[11\bar{2}]$ -Richtung von im Mittel ca. 16 nm (s. Kap. 4.2.3 u. 5.1.2).

Zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ und \bar{M} -Punkt ist an der Fermi-Energie ein weiterer Punkt erhöhter Photoelektronenemission zu finden. Im Vergleich mit den berechneten Bandstrukturen aus Abb. 5.6 u. 5.7 bedeutet dies, dass das S1-Band (hier zur Unterscheidung als S1* bezeichnet) an dieser Stelle im Experiment das Fermi-Niveau nicht nur berührt, sondern sogar schneidet und eine kleine elektronenartige Tasche bildet. Die in Abb. 5.11 (c) eingezeichnete Dispersion an dieser Stelle beschreibt lediglich den ungefähren Verlauf des Bandes, da die Auflösung der Messung keine bessere Differenzierung erlaubt. Aus den berechneten Bandstrukturen geht hervor, dass die Bänder sich in diesem Bereich nicht wie beim Rashba-Effekt kreuzen, sondern energetisch übereinander liegen wie beim Zeeman-Effekt. Zudem sind ihre Extrema im k -Raum gegeneinander verschoben (Rashba-Zeeman-Effekt, s. Kap. 2.2.2). Die zugehörigen Fermi-Wellenvektoren werden anhand der eingezeichneten Dispersionen zu $k_{F,x,\uparrow} = 0,03 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{F,x,\downarrow} = 0,05 \text{ \AA}^{-1}$ abgeschätzt. Die Bindungsenergie liegt bei maximal 50 meV.

Des Weiteren sind sowohl in der BM, als auch im Spin-integrierten MDC in Abb. 5.11 (a) um $k_x \approx 0,5 \text{ \AA}^{-1}$ endliche Intensitäten des S1*-Zustands zu finden. Dies lässt sich mit der dreizähligen Symmetrie des $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkts erklären, wenn die Isoenergielinien eine stark elliptische Gestalt aufweisen. Der S1*-Zustand ist also zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ und \bar{M} -Punkt stark in k_y -Richtung gestreckt. Die Kontur der daraus folgenden Fermi-Fläche des S1*-Zustands ist in Abb. 5.13 (b) dargestellt.

Das S2-Band verläuft qualitativ wie in Abb. 5.6 u. 5.7 für die H3- und T4-Konfiguration berechnet (s. a. [47, 48]). In Abb. 5.11 (c) sind die von REN in [48] berechneten S2-Bänder beider Konfigurationen eingezeichnet. Beide Konfigurationen zeigen eine gute Übereinstimmung mit der Messung. Aufgrund der Überlagerung beider Konfigurationen in den Photoelektronenemissionsmessungen und der hierfür zu niedrigen Auflösung der Messung lässt sich nur schwer auf den genauen Verlauf des S2-Bands schließen. Aus den berechneten Bandstrukturen ergeben sich jedoch folgende Parameter und Verläufe des S2-Bands: Am Maximum des Bandes zwischen $\bar{\Gamma}$ - und $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt beträgt die Aufspaltung ca. 80 meV für die T4-Konfiguration und ca. 135 meV für die H3-Konfiguration, während die Aufspaltung am $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt ca. 105 meV (T4) bzw. ca. 225 meV (H3) beträgt. In der Berechnung von SAKONG zur T4-Konfiguration beträgt die Zeeman-Aufspaltung am $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt zum Vergleich 160 meV [47]. Zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ und \bar{M} -Punkt nimmt die Aufspaltung stetig ab, die Differenz zwischen den lokalen Maxima beider Teilbänder beträgt rund 60 meV (T4) bzw. 75 meV (H3). Als Besonderheit schneiden sich die Spin-polarisierten Bänder in beiden Konfigurationen nicht nur am Rashba-aufgespaltenen \bar{M} -Punkt, sondern auch bereits bei $k_x \approx 0,81 \text{ \AA}^{-1}$. Die Bindungsenergie am \bar{M} -Punkt beträgt jeweils ca. 500 meV. Außerdem ist die Rashba-Aufspaltung in der H3-Konfiguration deutlich größer als in der T4-Konfiguration [48].

Spin-aufgelöste ARPES-Messungen

Bis hierhin wurden lediglich die Spin-integrierten Messungen betrachtet. An der COPHEE-Endstation der SLS konnten jedoch auch Spin-aufgelöste MDCs der SIC-Phase aufgenommen werden. Die gemessenen Spin-integrierten Intensitäten und die Komponenten S_i des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} zweier dieser MDCs sind in Abb. 5.12 zusammen mit den Ergebnissen der jeweiligen Fits an die Daten dargestellt. Eine Auswahl relevanter Peak-Parameter der Fits finden sich in Tab. 5.2 u. 5.3. Die volle Halbwertsbreite der einzelnen Peaks FWHM und

Band, Peak	Position k_x	FWHM	Kohärenz- länge ξ	Spin-Polari- sationsgrad S	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	\AA^{-1}	\AA	%	%	%	%
S1, a	0,350	0,170	11,750	99,9	-41,1	-49,0	-76,8
S1, b	0,389	0,183	10,910	78,8	+37,0	+44,3	+53,6
S1*/S2, c	0,501	0,138	14,513	44,4	-18,3	-14,8	-37,6
S1*/S2, d	0,737	0,165	12,095	46,6	+25,2	-23,3	+31,5
S1*/S2, e	0,774	0,134	14,964	96,4	-62,7	+47,2	-56,0

Tabelle 5.2: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der SIC-Phase in k_x -Richtung.

Band, Peak	Position k_y	FWHM	Kohärenz- länge ξ	Spin-Polari- sationsgrad S	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	\AA^{-1}	\AA	%	%	%	%
S1, a	-0,343	0,215	9,305	26,0	+6,1	+25,3	+0,9
S1, b	-0,225	0,270	7,407	49,1	-27,8	-15,4	+37,4
S1*/S2, c	-0,148	0,285	7,026	99,9	-39,1	+9,8	-91,4
S1*/S2, d	0,159	0,259	7,766	56,1	+14,0	+12,7	+52,8
S1, e	0,246	0,275	7,261	22,9	+15,6	-6,5	-15,5
S1, f	0,361	0,233	8,591	27,6	-14,6	+16,8	-16,3

Tabelle 5.3: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der SIC-Phase in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{\AA}^{-1}$ durch den $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt.

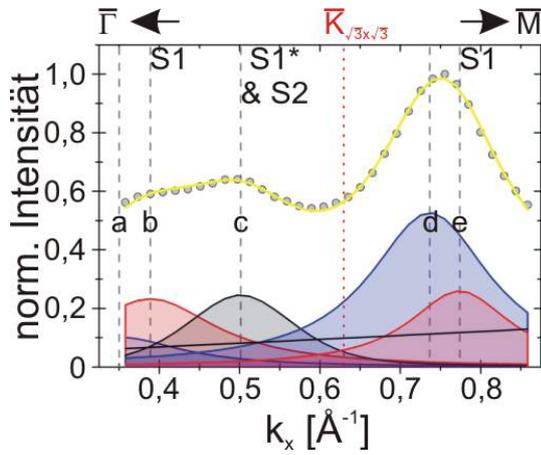
die Kohärenzlänge ξ hängen dabei über die Beziehung

$$\xi \approx \frac{2}{\text{FWHM}} \quad (5.8)$$

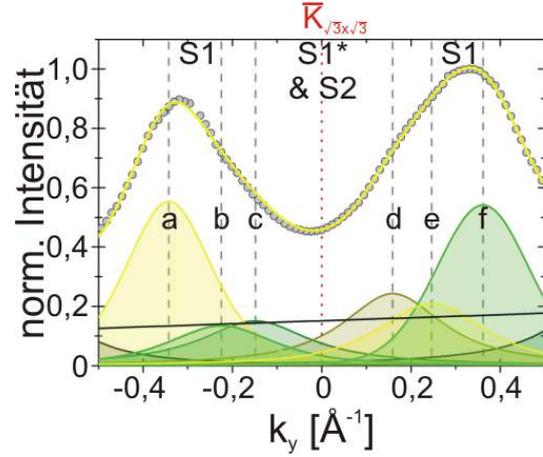
zusammen. Die Spektren wurden bei einer Bindungsenergie von jeweils 143 meV mit einer Energieauflösung von $\Delta E = \pm 45 \text{ meV}$ und einer Winkelauflösung von $\pm 0,75^\circ$ (entspricht $\Delta k_{\pm} \approx \pm 0,03 \text{\AA}^{-1}$) aufgenommen (s. a. magenta hinterlegter Bereich in Abb. 5.11 (c)).

Betrachtet man die in Tab. 5.2 u. 5.3 aufgeführten Kohärenzlängen der Peaks, so ist festzustellen, dass ξ mit 7–15 \AA etwa im Bereich der Breite einzelner Streifen der beiden $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktionen der SIC-Phase liegt (s. Kap. 4.2.3 u. SPA-LEED-Messungen in Kap. 5.1.2). Benachbarte Streifen in unterschiedlicher Konfiguration überlagern sich in der gemessenen Spin-Polarisation daher inkohärent.

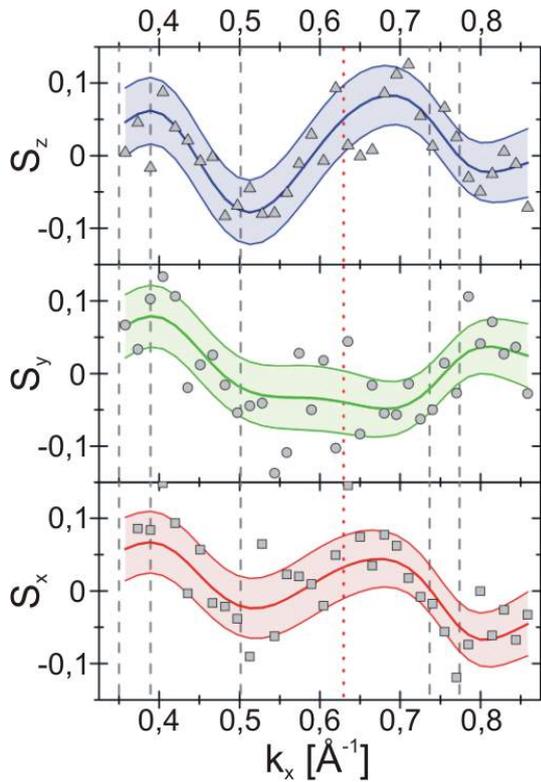
Wie anhand von Abb. 5.11 (c) zu sehen ist, schneidet das Spin-aufgelöste Spektrum in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung lediglich das S1-Band bei $k_x = 0,35 \text{\AA}^{-1}$ und $k_x = 0,389 \text{\AA}^{-1}$ (Peaks **a** und **b**). Die zusätzlich durch die Pfeile im mittleren Teil der Abbildung dargestellte Projektion der Spin-Polarisation \mathbf{S} der gefitteten Peaks auf die (x,y)-Ebene zeigt für das S1-Band, dass das näher am $\bar{\Gamma}$ -Punkt gelegene Teilband in $-y$ -Richtung ($S_{y,\mathbf{a}} = -49,0\%$, \downarrow) und das näher zum $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt gelegene Teilband in $+y$ -Richtung ($S_{y,\mathbf{b}} = +44,3\%$, \uparrow) Spin-polarisiert sind, in Übereinstimmung mit den Berechnungen von REN (Details s. Kap. 5.2.1 u. [48]). Der Fit ergibt Spin-Polarisationsgrade S von 99,9% bzw. 78,8% (s. Tab. 5.2). Auf Basis dieses Ergebnisses lässt sich die Orientierung des Spins für das gesamte S1-Band ableiten



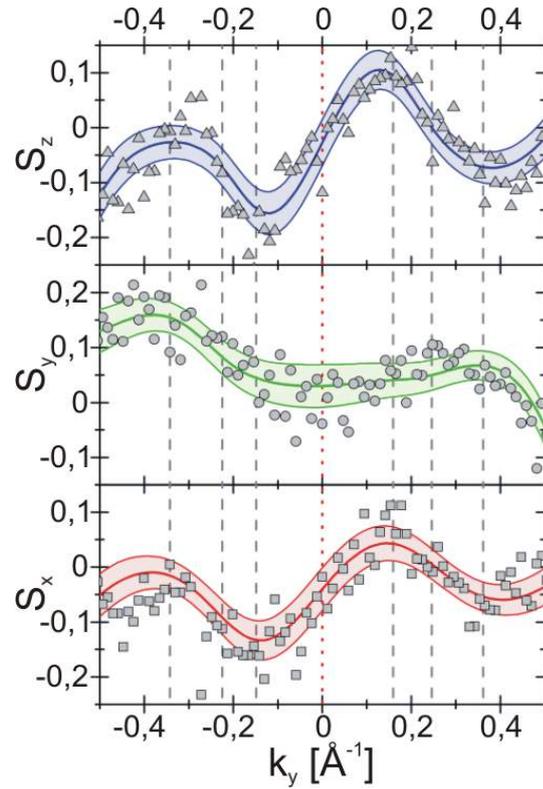
(a) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung.



(b) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{ \AA}^{-1}$.



(c) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung. Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.



(d) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{ \AA}^{-1}$. Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.

Abbildung 5.12: Spin-aufgelöste MDCs der SIC-Phase: Der $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt ist durch die gepunkteten roten Linien markiert. Die gestrichelten grauen Linien markieren die Positionen der gefitteten Peaks; $E_B = 143 \text{ meV}$, $T = 75 \text{ K}$.

(auch für den als S1* bezeichneten Teil), so denn aufgrund der SOI keine Spin-Rotationen, oder Ähnliches wie z. B. in [98–101, 196] für die BiAg₂- und PbAg₂-Oberflächenlegierungen berichtet, auftreten. Die hier gezeigten Daten weisen zumindest auf kein Verhalten dieser Art hin, sodass um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt herum beim S1-Band von einem konventionellen Rashba-aufgespaltenen Band ausgegangen werden kann.

Für das S1*-Band bedeutet dies zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ - und \bar{M} -Punkt, dass das „innere“ Band in +y-Richtung ($S_{y,e} = +47,2\%$, \uparrow) und das „äußere“ Band in –y-Richtung ($S_{y,d} = -23,3\%$, \downarrow) Spin-polarisiert sein sollten. Dies kann anhand der Peaks **d** und **e** im Spin-polarisierten MDC bei $k_x = 0,737 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_x = 0,774 \text{ \AA}^{-1}$ bestätigt werden.

Aus Abb. 5.11 (c) geht aufgrund der grünlichen Färbung der Darstellung hervor (grün für $d^2I/dE^2 > 0$), dass für Wellenvektoren oberhalb von etwa $0,4 \text{ \AA}^{-1}$ keinerlei Zustände im detektierten Energiebereich liegen sollten. Da die energetische Breite des S1*-Bandes hier jedoch vergleichsweise groß zu sein scheint, was sich in der hohen gemessenen Intensität der MDCs zeigt, lassen sich die beiden vorhergesagten Spin-Polarisationen der Teilbänder in diesem Bereich dennoch experimentell bestätigen, zumal das tieferliegende S2-Band einen noch größeren energetischen Abstand vom Vermessungsbereich des Spin-aufgelösten MDCs hat.

Für den in den MDCs gemessenen Peak **c** bei $k_x = 0,501 \text{ \AA}^{-1}$ mit Spin-Polarisation in –y-Richtung ($S_{y,c} = -18,3\%$, \downarrow) lässt sich auf ähnliche Art und Weise argumentieren. Hier liegen jedoch sowohl S1*- als auch S2-Band nahe am bzw. im Vermessungsbereich. Die gemessene Spin-Polarisation lässt sich dennoch eindeutig dem S2-Band zuordnen, da die Symmetrie des S1*-Bandes um den $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt an dieser Stelle zu einer gegenseitigen Auslöschung der Spin-Polarisation in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung führt. Das näher zum Fermi-Niveau gelegene Teilband von S2 ist somit mit $S = 44,4\%$ Spin-down und das tiefer gelegene Teilband Spin-up polarisiert (blau bzw. rot in Abb. 5.11 (c)).

Zur weiteren Verifizierung der Spin-Textur der S1- (S1*-) und S2-Bänder wurde ein zweiter Spin-aufgelöster MDC in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{ \AA}^{-1}$ durch den $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt bei $E_B = 143 \text{ meV}$ aufgenommen (s. Abb. 5.12 (d) u. (b); Fitparameter der Peaks in Tab. 5.3). Der Spin-Polarisationsvektor **S** ist dabei symmetrisch in S_y und antisymmetrisch in S_x und S_z , vereinbar mit der räumlichen Symmetrie und der TRS der C_{3v} -Symmetrie der $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Die Peaks **a**, **b** und **e**, **f** lassen sich jeweils dem S1-Band in der 2. SBZ der Rekonstruktion zuordnen (s. Abb. 5.11 (c)). Die jeweilige Projektion von **S** auf die *in-plane*-Spin-Komponenten S_x und S_y ergibt, dass der Spin der Peaks **a** und **b** (bzw. **e** und **f**) ungefähr in entgegengesetzte Richtungen zeigt und zur Kontur und Spin-Orientierung der Fermi-Fläche in Abb. 5.8 u. 5.13 (b) passt. Die Abweichungen ergeben sich durch den Schnitt des MDCs abseits der Hauptsymmetrierichtungen. Der gemessene Spin-Polarisationsgrad S beträgt jeweils etwa 25% (mit Ausnahme von Peak **b** mit gemessenem $S = 49,1\%$). Die Peaks **c** und **d** bei $k_y = -0,148 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $k_y = +0,159 \text{ \AA}^{-1}$ liegen nahe am $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt. Durch Vergleich mit der berechneten Bandstruktur (s. Abb. 5.6 u. 5.7, [47, 48]) und unter Beachtung der Ergebnisse des Spin-aufgelösten MDCs in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung und der C_{3v} -Symmetrie des $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punktes der $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion folgt, dass die Hauptbeiträge der Peaks durch den S1*-Zustand hervorgerufen werden⁷⁶.

Daraus folgt, dass der S1*-Zustand eine stark elliptische Fermi-Fläche mit großer Halb-

⁷⁶ Der S2-Zustand liegt energetisch weiter von der Bindungsenergie des Spektrums entfernt als der S1*-Zustand.

achse in k_y -Richtung besitzt (s. Abb. 5.13 (b), in Übereinstimmung mit den berechneten Isoenergielinien der SIC-Phase⁷⁷). Die in k_y -Richtung gemessenen Peaks gehören dabei jedoch nicht zu derselben elektronenartigen Tasche, die in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung vermessen wurde, sondern aus Gründen der dreizähligen Symmetrie zu jeweils einer weiteren elliptisch geformten, elektronenartigen Tasche von $S1^*$. Aus den gemessenen *in-plane*-Spin-Komponenten S_x und S_y lässt sich daher folgern, dass diese elektronenartigen Taschen von $S1^*$ Isoenergielinien aufweisen, deren Spin-Orientierung zum größten Teil entlang dieser Linien ausgerichtet ist, d. h. mittels anisotropem Rashba-Zeeman-Effekt beschrieben werden können (s. Kap. 2.2.2). Die Spin-Textur entspricht daher derjenigen, die in Abb. 5.13 (b) für $S1^*$ gezeigt ist.

Die bisherige Betrachtung konzentrierte sich lediglich auf die Projektion der Spin-Polarisation auf die (k_x, k_y) -Ebene und im Fall der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung sogar ausschließlich auf die S_y -Komponente. Aus den Spin-aufgelösten MDCs geht jedoch hervor, dass die Spin-Polarisation S_z senkrecht zur Oberfläche nicht vernachlässigbar ist, genau wie die S_x -Komponente in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung (s. Abb. 5.12 u. Tab. 5.2 u. 5.3). Wegen der Komplexität der Bandstruktur und der sich daraus ergebenden Spin-polarisierten MDCs ist die folgende Betrachtung auf das vom $\overline{\Gamma}$ -Punkt ausgehende $S1$ -Band für die $\overline{\Gamma M}$ -Richtung und das $S2$ -Band um den $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt herum beschränkt. Die sich daraus ergebenden Resultate sind jedoch auch auf alle weiteren Bänder im Messbereich konsistent übertragbar. Die Diskussion der Messergebnisse und ihre physikalische Interpretation erfolgt im letzten Abschnitt dieses Kapitels ab S. 127.

In $\overline{\Gamma M}$ -Richtung ergeben sich für das $S1$ -Band aus dem Fit für die Peaks **a** und **b** $S_{z,\mathbf{a}} = -76,8\%$ (\downarrow) bzw. $S_{z,\mathbf{b}} = +53,6\%$ (\uparrow). Die Spin-Polarisationen der S_x -Komponenten dieser Peaks betragen zudem $S_{x,\mathbf{a}} = -41,1\%$ (\downarrow) bzw. $S_{x,\mathbf{b}} = +37,0\%$ (\uparrow). Somit ist $\mathbf{S}_{\mathbf{a}}$ (nahezu) antiparallel zu $\mathbf{S}_{\mathbf{b}}$ ausgerichtet, was bei einem Spin-aufgespaltenem Band grundsätzlich auch erwartet wird. Überraschend an diesen Fitergebnissen sind die hohen Werte der Spin-Polarisationen, die auch nicht durch Messunsicherheiten revidierbar sind.

Aus dem Spin-aufgelösten MDC in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{ \AA}^{-1}$ durch den $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt gehen auch die S_z -Komponenten der Spin-Polarisation des $S1$ -Bandes in den 2. SBZs der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion hervor (s. Abb. 5.12 (d) u. (b); Fitparameter der Peaks in Tab. 5.3). Die gemessenen Spin-Polarisationen zeigen mit $S_{z,\mathbf{a}} = +0,9\%$ („ \downarrow “), $S_{z,\mathbf{b}} = +37,4\%$ (\uparrow), $S_{z,\mathbf{e}} = -15,5\%$ (\downarrow) und $S_{z,\mathbf{f}} = -16,3\%$ („ \uparrow “) ebenfalls die erwartete Antisymmetrie bezüglich der Spiegelebene entlang der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung, jedoch entsprechen die Vorzeichen von $S_{z,\mathbf{a}}$ und $S_{z,\mathbf{f}}$ nicht den Erwartungen von Spin-aufgespaltenen Paaren mit den Peaks **b** und **e**. Dieser Fehler im Fit mag dem geringen absoluten Messsignal von weniger als 10% in der Spin-aufgelösten Messung der S_z -Komponente geschuldet sein. Die gemessenen Spin-Polarisationen der Peaks **b** und **e** passen jedoch zur Interpretation und Modellierung der übrigen Messergebnisse (s. Diskussionsteil dieses Kapitels ab S. 132).

Bezüglich der Spin-Textur von $S2$ um den $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt herum lassen sich aus den gemessenen Daten des MDCs in k_y -Richtung und dem zugehörigen Fit weitere Details bestimmen. Die in Abb. 5.11 (c) u. 5.13 (b) eingezeichnete *in-plane*-Spin-Textur kann hierdurch bestätigt werden, auch wenn die gemessenen Intensitäten des $S2$ -Bandes im Vergleich zum $S1$ -Band bei höheren k_y -Werten sehr niedrig sind. Da der $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt kein TRIM ist, kann zusätzlich auch die S_z -Komponente der Spin-Polarisation endliche Werte annehmen. Wie die Messdaten zeigen, erreicht der Spin-Polarisationsvektor \mathbf{S} für das „innere“ $S2$ -Band bis zu $-91,4\%$ absolute Spin-Polarisation in S_z -Richtung (Peak **c**, $S_{z,\mathbf{d}} = +52,8\%$). Relativ zum $\overline{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt besteht für die S_z -Komponente Antisymmetrie in k_y -Richtung, sodass das „obere“ $S2$ -Band

⁷⁷ Private Korrespondenz mit PETER KRATZER

bei $k_y = 0,159 \text{ \AA}^{-1}$ Spin-up und bei $k_y = -0,148 \text{ \AA}^{-1}$ Spin-down polarisiert ist, während das „untere“ S2-Band die umgekehrte Spin-Polarisation zeigt.

ARPES-Messung der Fermi-Fläche

Abb. 5.13 zeigt neben einer bei 178 meV Bindungsenergie gemessenen CEM auch ein aus den ARPES-Messdaten angefertigtes Modell der Isoenergielinien und der Spin-Textur, das die CEM beschreibt. Die gemessene CEM bestätigt nochmals alle zuvor vorgestellten ARPES-Messungen. Sie zeigt eine quasi-hexagonale Struktur hoher Intensität in den 2. SBZs der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, die dem S1-Band zuzuordnen ist. Innerhalb der 1. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist die Intensität aufgrund des Matrixelementeffekts erniedrigt (s. vorherige Abschnitte ab S.114). Um die $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte herum zeigt sich eine nahezu kreisförmige Struktur, die mit dem S2-Zustand assoziiert wird.

Diskussion

LADUNGSTRÄGERKONZENTRATION

Mit den gemessenen Daten der Fermi-Wellenvektoren lässt sich die Elektronenkonzentration n_{Exp} der SIC-Phase berechnen. Lediglich der S1- und S1*-Zustand schneidet das Fermi-Niveau. Für den hexagonalen Teil der Fermi-Fläche von S1 um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt ergibt sich mit dem mittleren Fermi-Wellenvektor in k_x -Richtung $\bar{k}_{F,x} = 0,453 \text{ \AA}^{-1}$ mittels Gl. (5.4)

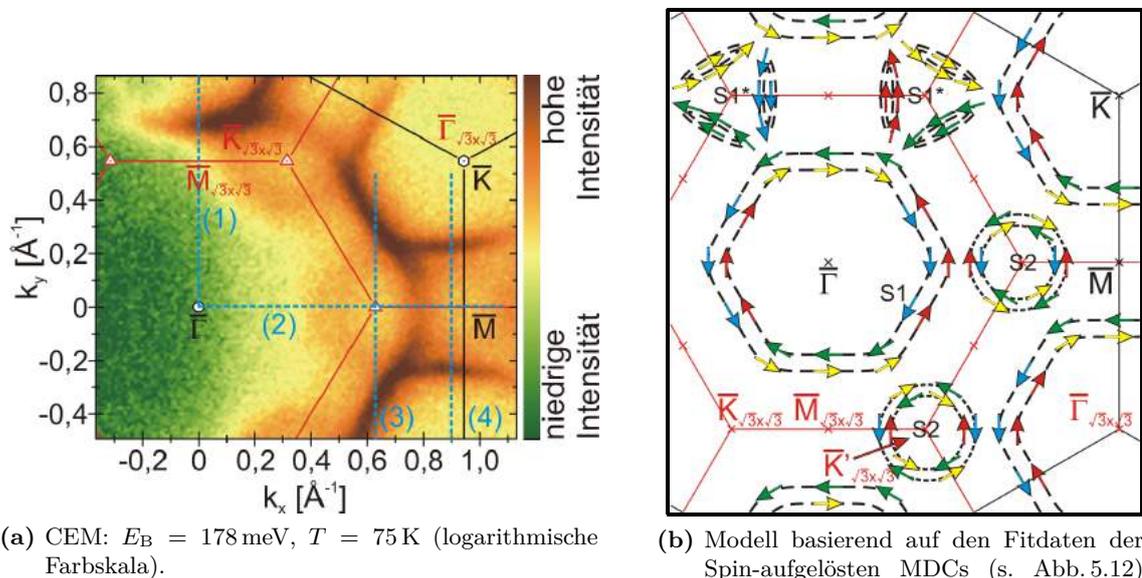


Abbildung 5.13: Gemessene CEM und ihr Modell mit Spin-Aufspaltung der SIC-Phase.

$n_{\text{S1,Hex}} = 2,234 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Die einzelnen Abschnitte des S1*-Zustands sind ellipsenförmig (s. Abb. 5.13 (b)). Die Fermi-Wellenvektoren in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung werden anhand der BM in Abb. 5.9 zu $k_{\text{F},\text{x},\uparrow} \approx 0,03 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{\text{F},\text{x},\downarrow} \approx 0,05 \text{ \AA}^{-1}$ abgeschätzt. Für die k_y -Richtung ergibt sich als Abschätzung $k_{\text{F},\text{y},\uparrow} \approx 0,10 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{\text{F},\text{y},\downarrow} \approx 0,15 \text{ \AA}^{-1}$. Somit erhält man für die insgesamt sechs Abschnitte von S1* pro $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle eine Elektronenkonzentration von

$$n_{\text{S1}^*} = 6 \cdot \frac{\pi (k_{\text{F},\text{x},\uparrow} k_{\text{F},\text{y},\uparrow} + k_{\text{F},\text{x},\downarrow} k_{\text{F},\text{y},\downarrow})}{(2\pi)^2} \approx 5,01 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}. \quad (5.9)$$

Die gesamte Elektronenkonzentration der SIC-Phase beträgt somit $n_{\text{Exp}} = n_{\text{S1,Hex}} + n_{\text{S1}^*} = 2,736 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Dies bedeutet im Vergleich mit der aus der theoretischen Bandstruktur von SAKONG berechneten Elektronenkonzentration von $n_{\text{Theo}} = 2,70 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ eine sehr gute Übereinstimmung (s. Abschnitt zur Berechnung ab S. 113), der Unterschied beträgt lediglich 1,3%. Auch die Abweichung zur in [454] mittels EELS bestimmten Elektronenkonzentration von $n_{\text{EELS}} = 2,4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ beträgt lediglich 14%.

$\overline{\Gamma\text{K}}$ - UND $\overline{\text{KMK}}$ -RICHTUNG

Aus den Messdaten und dem in Abb. 5.9 (c) eingezeichneten Bandverlauf erhält man nach Gl. (2.66) durch parabolische Extrapolation für die $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung eine (theoretische) Rashba-Energie von $E_{\text{R},\text{y}} = 13,1 \text{ meV}$ des S1-Bands am $\overline{\Gamma}$ -Punkt (ohne Hybridisierung mit dem Si-Bulk und dadurch veränderter effektiver Masse m_y^* berechnet). In Verbindung mit dem gemessenen Wert der Rashba-Aufspaltung nahe des Fermi-Niveaus von $\Delta k_{\text{R},\text{y}} = 0,038 \text{ \AA}^{-1}$ ergibt sich so der Rashba-Koeffizient zu $|\alpha_{\text{R},\text{y}}| = 4E_{\text{R},\text{y}}/\Delta k_{\text{R},\text{y}} = 1,38 \text{ eV \AA}$. Im Vergleich zu β -Bi/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ ist dies zwar nur 60% des Wertes von $\alpha_{\text{R},\text{y}}$ [109], jedoch auch das 3,45-fache des Rashba-Koeffizienten von 1 ML Tl/Si(111)-(1 \times 1) [161] und sogar das 5,75-fache des Rashba-Koeffizienten von β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [544]. Auch die QWS einiger ML Pb auf der SIC-Phase zeigen abhängig von der Dotierung des Substrats 12 – 34 mal kleinere Rashba-Koeffizienten [112–114].

Bei Bindungsenergien bis etwa 500 meV ist die Übereinstimmung der gemessenen Dispersion des S1-Bandes mit den berechneten Bandstrukturen von REN und SAKONG sehr gut (s. Abb. 5.14 (a)). Dagegen weicht der Bandverlauf über 500 meV von den Berechnungen ab. Dies ist anhand eines Vergleichs der 1. SBZ mit der 2. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion erklärbar. Innerhalb der 2. SBZ liegt das VBM der besetzten Bänder des Si-Bulks bei höheren Bindungsenergien als in der 1. SBZ. Damit sind in der 2. SBZ die Oberflächenzustände nicht mit dem Si-Bulk hybridisiert, sodass die Bänder zum Ursprung in den $\overline{\Gamma}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkten ($\overline{\text{K}}$ -Punkten) hin im Vergleich höhere Bindungsenergien aufweisen als berechnet.

Die gleiche Argumentation gilt analog für die $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung als Ganzes. Der gesamte in Abb. 5.14 (b) gezeigte Bandverlauf der Oberflächenzustände S1 und S2 liegt weit oberhalb des VBMs des Si-Bulks. Dies resultiert abweichend zur $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung in einem steileren Anstieg des Zustands S1 direkt von den $\overline{\text{K}}$ -Punkten her, sodass die Fermi-Energie vom $\overline{\text{M}}$ -Punkt aus gesehen bei höheren Fermi-Wellenvektoren geschnitten wird als im Modell erwartet.

$\overline{\Gamma\text{M}}$ -RICHTUNG (OHNE BERÜCKSICHTIGUNG DER SPIN-POLARISIERTEN MESSUNGEN)

Die Interpretation des Photoelektronenspektrums in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung unterscheidet sich von der Interpretation in [39] durch ZHANG, bei der der obere Teil des S2-Bandes zusammen mit der elektronenartigen Tasche des S1*-Bandes zwischen $\overline{\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und $\overline{\text{M}}$ -Punkt und dem

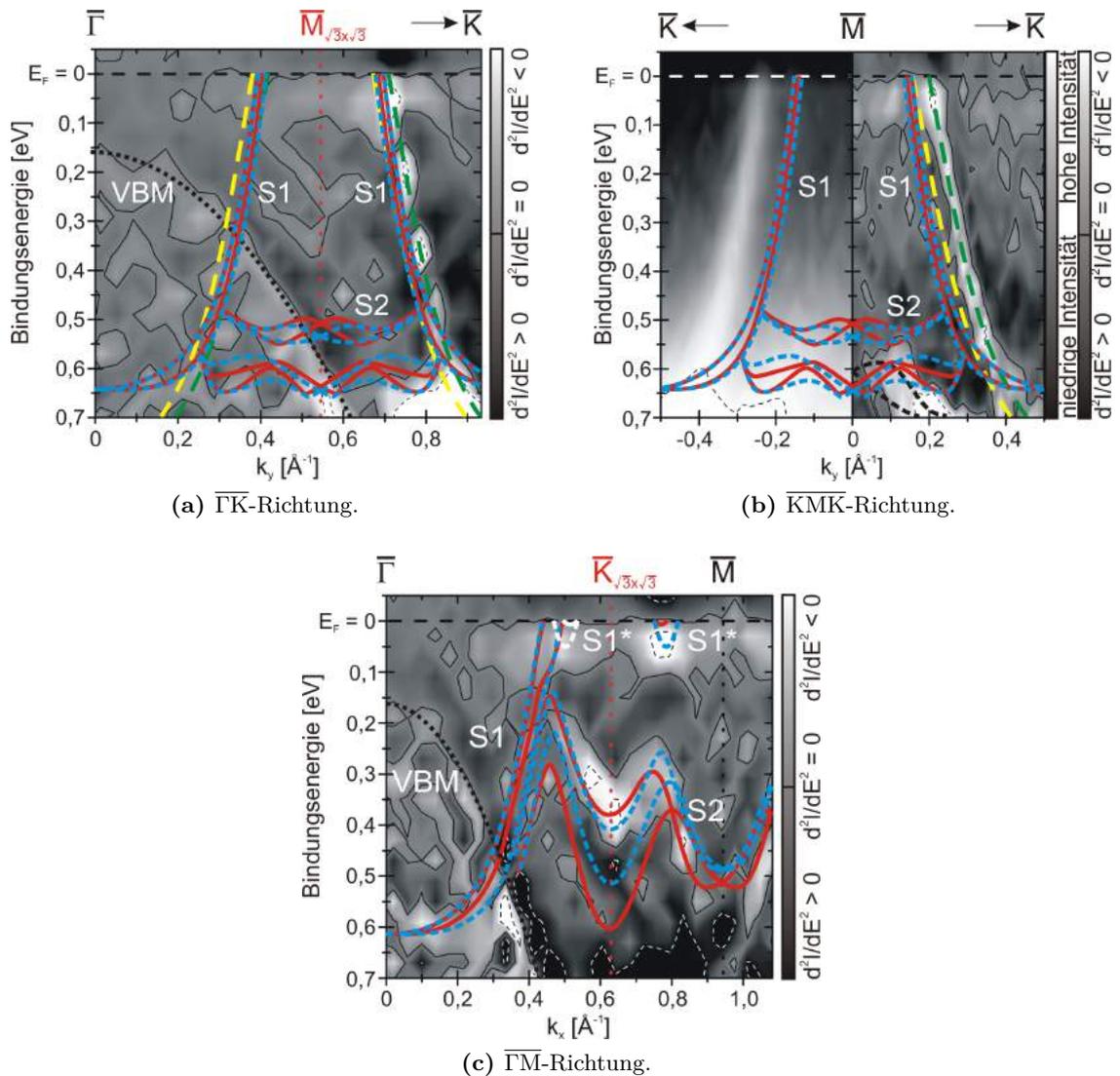


Abbildung 5.14: Vergleich von gemessener und berechneter Bandstruktur der SIC-Phase: Die berechneten Bandstrukturen von REN aus [48] für die H3- und T4-Konfiguration der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (rote bzw. blau-gestrichelte Linien) stimmen qualitativ gut mit der an die gemessenen Daten angepassten Dispersion des Modells des Rashba-aufgespaltenen quasi-freien Elektronengases (grün und gelb in (a) u. (b)) überein. Die Abweichungen bei hohen Bindungsenergien und in $\bar{K}\bar{M}\bar{K}$ -Richtung sind u. a. auf die fehlende Hybridisierung der Oberflächenbänder mit dem Si-Bulk in der 2. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im Vergleich zur Berechnung innerhalb der 1. SBZ zurückzuführen. In (c) sind lediglich die berechneten Bandstrukturen dargestellt. Die Konturplots zeigen die zweite Ableitung der gemessenen Intensität I nach der Energie E , d^2I/dE^2 (lineare Farbskala), sowie auf der linken Seite in (b) die Intensität selbst (logarithmische Farbskala). Die Farbpalette ist zur besseren Darstellung der Bänder angepasst.

Durchstoßpunkt des S1-Bands mit dem Fermi-Niveau eine große elektronenartige Tasche bildet. Dank der höheren Auflösung der hier gezeigten Photoelektronenemissionsdaten und den theoretischen Modellen von SAKONG und REN [47, 48] kann das Modell von ZHANG jedoch widerlegt werden.

Der gemessene Bandverlauf von S1 stimmt sehr gut mit den berechneten Bandstrukturen von SAKONG und REN überein (Vgl. Abb. 5.11 (c) u. 5.14 (c)). Die gemessene Rashba-Aufspaltung des S1-Bands um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt ist dabei mit $\Delta k_{R,x} = 0,04 \text{ \AA}^{-1}$ am Fermi-Niveau etwa 7% kleiner als der aus der Bandstruktur von SAKONG berechnete Wert und der mittlere Fermi-Wellenvektor $\bar{k}_{F,x} = 0,412 \text{ \AA}^{-1}$ ist ebenso um etwa 9% kleiner. Beides lässt sich mit dem sog. *Warping* erklären, bei dem die Kontur der Isoenergielinien gegenüber den kreisförmigen Flächen des Modells des freien Elektronengases durch anisotrope \mathbf{k}^6 -Terme verzerrt sind (s. a. Abb. 5.8 u. 5.13 u. Kap. 2.3). Aus der Energieaufspaltung am Fermi-Niveau ergibt sich eine (theoretische) Rashba-Energie von $E_{R,x} = 7,9 \text{ meV}$ am $\bar{\Gamma}$ -Punkt (unter Vernachlässigung der Hybridisierung mit dem Si-Bulk und durch parabolische Extrapolation des Bandverlaufs), was zudem 12,2% niedriger als der von SAKONG berechnete Wert am $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt ist. Mit den gemessenen Werten von $\Delta k_{R,x}$ und $E_{R,x}$ erhält man nach Gl. (2.66) einen Rashba-Koeffizienten von $|\alpha_{R,x}| = 4E_{R,x}/\Delta k_{R,x} = 0,79 \text{ eV \AA}$. Dies ist etwa 1,7 mal kleiner als in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung.

Die Überlagerung der Messdaten mit den von REN berechneten Dispersionen beider Konfigurationen der $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion für das S2-Band zeigt für die $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung (s. Abb. 5.14 (c)). Da sich die Photoelektronenspektren beider Konfigurationen überlagern und die Auflösung der Messung keine nähere Differenzierung zulässt, kann aus den vorhandenen Daten nicht auf Einzelheiten wie z. B. die Größe der Rashba-Aufspaltung am \bar{M} -Punkt oder die Zeeman-Aufspaltung am $\bar{K}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkt geschlossen werden.

SPIN-AUFGELOSTE ARPES-MESSUNGEN

Die nun folgende Diskussion zeigt die Komplexität von Photoelektronenemissionsmessungen zur Bestimmung der Spin-Polarisation der Oberflächenbänder der SIC-Phase auf. Dabei spielen verschiedene Aspekte eine Rolle. Auf den ersten Blick lassen die Messergebnisse eine Interpretation im Rahmen der idealen $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit C_{3v} -Symmetrie möglich erscheinen. Auf den zweiten Blick jedoch treten Widersprüche zu diesem Modell hervor, die nur noch durch Symmetriebrechung und die Existenz von Rotations- und Spiegeldomänen erklärbar sind.

Die SR-ARPES-Messungen in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung ergeben für die S_y -Komponenten des S1-Bands $S_y^+ = -49\%$ und $S_y^- = +44,3\%$ (s. Tab. 5.2). Im Vergleich dazu sind die berechneten Spin-Polarisationen von REN mit $S_{y,H3,T4}^+ = -18\%$, $S_{y,H3}^- = +38\%$, bzw. $S_{y,T4}^- = +22\%$ deutlich niedriger (Vgl. Tab. 5.1), haben aber das gleiche Vorzeichen. Demnach ist das negative Vorzeichen des dem S1-Band zugehörigen Rashba-Koeffizienten α_R durch die Messung bestätigt (Vgl. Gl. (5.2)). Insgesamt sind unter Verwendung der Rashba-Energien $E_{R,i}$ die Rashba-Koeffizienten in parabolischer Näherung für das quasi-freie Elektronengas somit durch $\alpha_{R,x} = -0,79 \text{ eV \AA}$ und $\alpha_{R,y} = -1,38 \text{ eV \AA}$ gegeben, da sich die Bänder zwischen $\bar{\Gamma}\bar{M}$ - und $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung nicht schneiden. Weitere Beispiele für negative Rashba-Koeffizienten metallischer Oberflächenzustände auf Halbleitern sind die bereits oben genannten Koadsorptionssysteme von $0,15 \pm 0,05 \text{ ML}$ Tl, In, Na und Cs auf Au/Si(111)- $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ mit $\Theta_{Au} = 1 \text{ ML}$ [539, 540] und von β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ [538], sowie die Au(111)-Oberfläche [148] und die QWSs ei-

niger ML Pb auf Si(111) [111, 114]. Ein negativer Rashba-Koeffizient ist auch mit dem Modell der idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion vereinbar. Die im Vergleich zur DFT-Berechnung von REN sehr hohen gemessenen Absolutwerte der Spin-Polarisation werden jedoch womöglich bereits durch die im Experiment vorhandenen Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Domänenwände der SIC-Phase hervorgerufen.

Den stärkeren experimentellen Beleg für die Symmetriebrechung der Spin-Textur und Bandstruktur zeigen jedoch die endlichen Spin-Polarisationen, die die S_x - und die S_z -Komponenten des S1-Bands aufweisen (s. Tab. 5.2). Wie dem Theorieteil zum Rashba-Effekt in Kap. 2.2.1 zu entnehmen ist, ließe sich eine vorhandene S_z -Komponente der Spin-Polarisation auch mit einem Rashba-Effekt 3. Ordnung bei C_{3v} -Symmetrie erklären, da die Symmetriebedingungen der Rekonstruktion dies nicht ausschließen. Jedoch liegt für die lokale $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion die Spiegelebene genau entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung. Aufgrund dieser Spiegelebene erfordert das Einhalten der TRS aber ein Verschwinden sowohl der S_x -, als auch der S_z -Komponenten in $k_y = 0 \text{ \AA}^{-1}$ ($\mathbf{S} \perp \mathbf{n}_{\text{Spiegelebene}}$). Damit liegt hier für beide Komponenten ein messbarer Widerspruch zur angenommenen C_{3v} -Symmetrie vor.

Dies bedeutet, dass endliche gemessene Spin-Polarisationen der S_x - und S_z -Komponenten entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung durch einen Bruch der C_{3v} -Symmetrie hervorgerufen sein müssen. Wie bereits mehrfach erwähnt, besteht die SIC-Phase aus einer (inhomogenen) Domänenstruktur mit C_1 -Symmetrie und hat lediglich lokal Bereiche mit C_{3v} -Symmetrie (beide Konfigurationen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion). Die Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen der Domänenwände haben zudem maximal C_{1v} -Symmetrie. Genau an dieser Stelle ist also in den SR-ARPES-Messungen der Unterschied zwischen einer reinen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (auch unabhängig von der vorliegenden Konfiguration) und einer Domänenstruktur messbar, da nach Tab. 2.3 beim Rashba-Effekt mit C_1 -Symmetrie sowohl in 1., als auch in 3. Ordnung in \mathbf{k} sämtliche Spin-Orientierungen in jeder Raumrichtung erlaubt sind, und bei C_{1v} -Symmetrie zumindest die Hälfte dieser Terme.

Die SIC-Phase besitzt aufgrund der C_{3v} -Symmetrie des Si(111)-Substrats insgesamt drei Rotationsdomänen und zu jeder dieser Rotationsdomänen eine Spiegeldomäne, bei der die asymmetrischen Quasi- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Einheitszellen der Domänenwände gespiegelt sind. Der Einfluss der Rotations- und Spiegeldomänen, sowie der inhomogenen Domänenstruktur auf die Spin-Polarisation im \mathbb{K} -Raum ist bereits in Kap. 2.2.3 beschrieben worden. Daraus geht hervor, dass die Messung einer endlichen Spin-Polarisation von $S_{x,z}$ entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung eine ungleiche Verteilung der Rotations- und Spiegeldomänen in dem Bereich der Probe, der bei der ARPES-Messung erfasst wird, voraussetzt. Dass dies durchaus vorkommen kann, zeigt die Analyse des SPA-LEED-Bildes aus Abb. 5.2 in Kap. 5.1.2.

Unter Berücksichtigung der inhomogenen Domänenstruktur und der Rotations- und Spiegeldomänen, sowie ihrer ungleichen Verteilung lässt sich eine exakte Analyse der gemessenen Spin-Polarisationen auf Basis der vorhandenen Daten nicht durchführen. Selbst für das um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt lediglich Rashba-aufgespaltene S1-Band lassen sich aufgrund der vielen Freiheitsgrade, auch unter Berücksichtigung der von REN berechneten Spin-Polarisationen der reinen H3- und T4-Konfigurationen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, weder quantitative, noch qualitative Aussagen bspw. über die auftretenden Rashba-Koeffizienten α_i^j treffen. Auch helfen die Bandstrukturberechnungen und Messungen zur $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion als Näherung für die Domänenwände nicht wesentlich weiter. Aus den vorgestellten Modellen in Kap. 2.2.3 lässt sich lediglich schließen, dass sich die Spin-Polarisation \mathbf{S} aus den gewichteten Rashba-Koeffizienten α_i^j der Einheitszellen innerhalb der Superzelle und der Verteilung der Rotations-

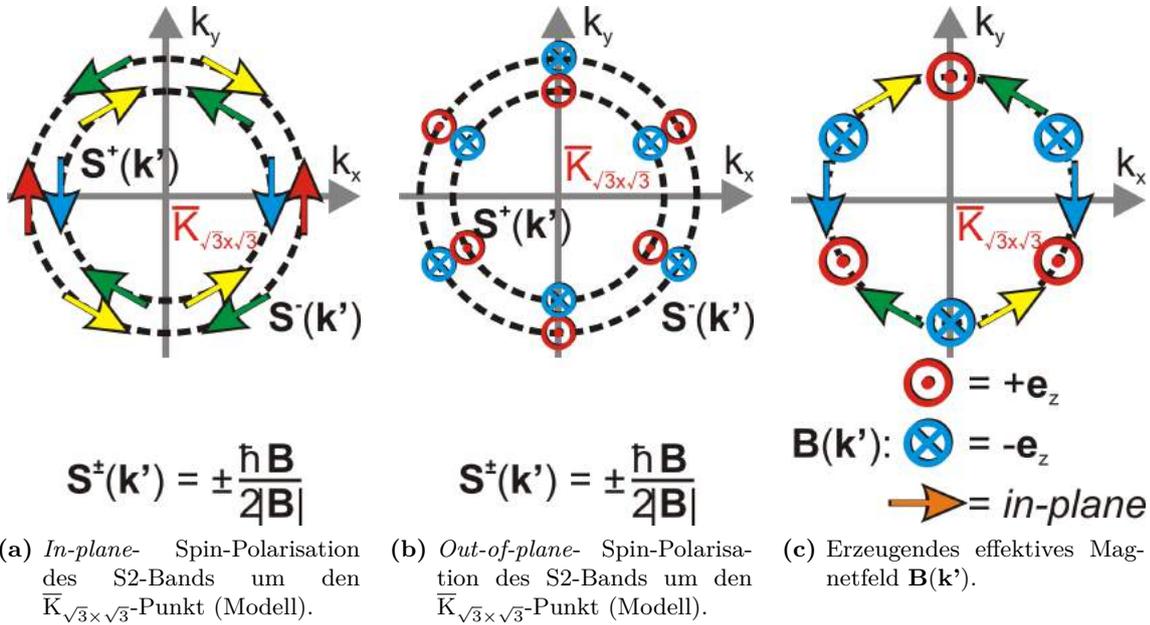


Abbildung 5.15: Zeeman-Effekt des S2-Bands um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt: Das aus den Messdaten bestimmte und mittels Symmetrieüberlegungen konstruierte Modell der Spin-Polarisation des Zeeman-aufgespaltenen S2-Bands zeigt um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt eine komplexe Spin-Textur, die durch ein um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt rotierendes effektives Magnetfeld $\mathbf{B}(\mathbf{k}')$ erzeugt wird.

und Spiegeldomänen zusammensetzt. Das dominante Merkmal der Spin-Polarisation der SIC-Phase ist daher das Signal der idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, das damit auch das Vorzeichen von α_1^j bestimmt. Die gemessenen Abweichungen von dieser idealisierten Struktur sind daher auf die Domänenbildung und die Reduzierung der Symmetrie zurückzuführen.

Ein weiteres Detail der ARPES-Messungen lässt sich im Rahmen der vereinfachten C_{3v} -Symmetrie für das Gesamtsystem betrachten. Um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt herum zeigt das S2-Band eine Zeeman-Aufspaltung mit einer speziellen Spin-Textur (s. Abb. 5.11 (c) u. 5.13 (b)).

Die Analyse der Daten zeigt, dass entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung das „untere“ Teilband von S2 eine Spin-Polarisation $S_y > 0$ (\uparrow) und das „obere“ Teilband eine Spin-Polarisation $S_y < 0$ (\downarrow) haben. Dieses Resultat gilt in beiden Teilabschnitten, sowohl vom $\bar{\Gamma}$ - zum $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt, als auch zwischen $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ - und \bar{M} -Punkt. Darüber hinaus zeigen die SR-ARPES-Messungen in k_y -Richtung durch den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt ergänzend dazu, dass die Spin-polarisierten Teilbänder von S2 in dieser Richtung sehr starke S_z -Komponenten aufweisen (s. Tab. 5.3). Hierbei ist der $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt antisymmetrisch bzgl. der Spin-Polarisation der S_x - und der S_z -Komponenten, sodass für $k_y > 0$ das „obere“ Teilband $S_z > 0$ (\uparrow) und das „untere“ Teilband $S_z < 0$ (\downarrow) zeigen, sowie für $k_y < 0$ das „obere“ Teilband $S_z < 0$ (\downarrow) und das „untere“ Teilband $S_z > 0$ (\uparrow). Da der $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt C_{3v} -Symmetrie aufweist, setzt sich diese Spin-Textur bei Rotation um 120° bzw. 240° entsprechend fort (s. Abb. 5.15 (a) u. (b)) und zeigt somit eine *abrupte* Spin-Rotation um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt.

Dieses Phänomen lässt sich mittels einer effektiven Wechselwirkung für das S2-Band um

den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt mittels des Hamilton-Operators

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}') = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_Z = \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m^*(\mathbf{k}')} + E_0 \right) \cdot \sigma_0 + \frac{g^*}{2} \mu_B \mu_r \mathbf{B}(\mathbf{k}') \cdot \sigma \quad (5.10)$$

des quasi-freien Elektronengases inklusive des Rashba-Zeeman-Effekts aus Gl. (2.69) mit verschwindendem Rashba-Term $\mathcal{H}_R = 0$ physikalisch beschreiben, wobei $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = (k'_x, k'_y)$ der Wellenvektor mit Ursprung im $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt ist (in Polarkoordinaten: $k'_x = k' \cos \varphi'$, $k'_y = k' \sin \varphi'$). Um die gemessene Spin-Textur der Spin-Polarisation $\mathbf{S}_{S_2}^{\pm}(\mathbf{k}')$ zu erhalten, bedarf es nach Gl. (2.76) eines effektiven Magnetfelds $\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')$ mit $|\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')| = B(k') \geq 0$ derart, dass

$$\mathbf{S}_{S_2}^{\pm}(\mathbf{k}') = \pm \frac{\hbar}{2} \frac{\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')}{|\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')|} \quad (5.11)$$

erfüllt ist. Aus den Messergebnissen folgen für verschiedene Winkel φ' daher die Relationen:

$$\varphi' = 0, 2\pi/3, 4\pi/3 : \quad \mathbf{B}_{S_2} = B(k') \cdot (+\sin \varphi', -\cos \varphi', 0)^T \quad (5.12 \text{ a})$$

$$\varphi' = \pi/3, \pi, 5\pi/3 : \quad \mathbf{B}_{S_2} = B(k') \cdot (-\sin \varphi', +\cos \varphi', 0)^T \quad (5.12 \text{ b})$$

$$\varphi' = \pi/6, 5\pi/6, 3\pi/2 : \quad \mathbf{B}_{S_2} = B(k') \cdot (0, 0, -1)^T \quad (5.12 \text{ c})$$

$$\varphi' = \pi/2, 7\pi/6, 11\pi/6 : \quad \mathbf{B}_{S_2} = B(k') \cdot (0, 0, +1)^T. \quad (5.12 \text{ d})$$

In eine mathematisch stetige Form überführt lässt sich $\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')$ unter Verwendung der Einheitsvektoren

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}'} = \begin{pmatrix} \cos \varphi' \\ \sin \varphi' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.13 \text{ a})$$

$$\mathbf{e}_{\varphi'} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi' \\ +\cos \varphi' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.13 \text{ b})$$

$$\mathbf{e}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.13 \text{ c})$$

der Zylinderkoordinaten mittels

$$\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}') = B(k') \cdot \begin{pmatrix} +\cos(3\varphi') \sin \varphi' \\ -\cos(3\varphi') \cos \varphi' \\ -\sin(3\varphi') \end{pmatrix} = -B(k') [\cos(3\varphi') \mathbf{e}_{\varphi'} + \sin(3\varphi') \mathbf{e}_z] \quad (5.14)$$

ausdrücken.

Das effektive Magnetfeld $\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')$ oszilliert demnach entlang $\mathbf{e}_{\varphi'}$ zykloidal mit dreizähliger Symmetrie um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt, d. h. die Rotationsachse von $\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')$ ist stets parallel zu \mathbf{k}' , sodass $\mathbf{B}_{S_2}(\mathbf{k}')$ in der Ebene, die die Einheitsvektoren $\mathbf{e}_{\varphi'}$ und \mathbf{e}_z aufspannen, rotiert. Somit oszillieren die beiden Spin-Polarisationen $\mathbf{S}_{S_2}^{\pm}(\mathbf{k}')$ der Teilbänder von S2 ebenso zykloidal wie ihr erzeugendes effektives Magnetfeld, jedoch in jeweils entgegengesetzte Richtungen mit

$$\mathbf{S}_{S_2}^{\pm}(\mathbf{k}') = \mp \frac{\hbar}{2} [\cos(3\varphi') \mathbf{e}_{\varphi'} + \sin(3\varphi') \mathbf{e}_z]. \quad (5.15)$$

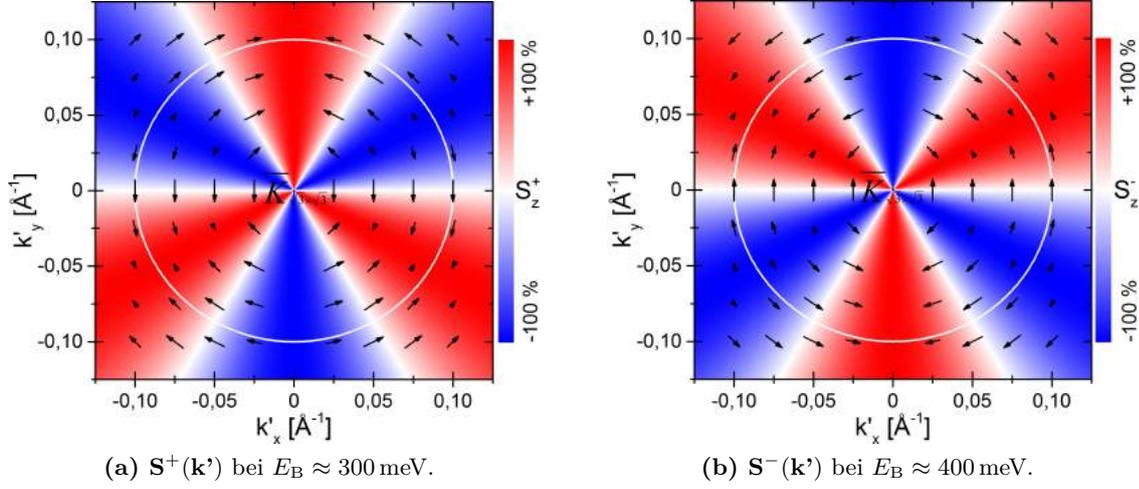


Abbildung 5.16: Berechnete Spin-Textur des S2-Bandes um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase: Die Vektoren zeigen die Richtung der *in-plane*-Spin-Polarisation und mit ihrer Länge ihren Betrag an. Die Länge der Vektoren bei $k'_y = 0$ entspricht $S_z^\pm = 0$. Rot bzw. blau hinterlegte Bereiche kennzeichnen die *out-of-plane*-Spin-Polarisation (S_z^\pm -Komponente, lineare Farbskala). Die Berechnungen sind mit $S^\pm = 100\%$ durchgeführt. Die Kreisform der in weiß eingezeichneten Isoenergielinien bei $E_B \approx 300$ meV bzw. $E_B \approx 400$ meV ist eine auf der CEM aus Abb. 5.13 (a) und den DFT-Berechnungen der Bandstruktur beruhende Schätzung.

Dieses Verhalten ist in Abb. 5.16 für beide Teilbänder von S2 mit $S^\pm = 100\%$ um einen der $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte dargestellt.

Der Zeeman-Effekt schwächt sich mit zunehmendem Abstand vom $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt ab (s. Abb. 5.14 (c)). Das genaue Skalierungsverhalten ist aufgrund der komplexen Dispersion des S2-Bands nicht bestimmbar, denkbar wären aber bspw. $B(k') \propto k'^{-1}$ analog zur Abschwächung sich frei im Raum ausbreitender elektromagnetischer Felder oder eine exponentielle Abschwächung mit $B(k') \propto \exp(-k'/k_0)$ und $k_0 > 0$.

Ein Verhalten wie das des S2-Bands um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt wurde bislang nicht in der Literatur berichtet. Auch gibt es Beispiele von Oberflächenzuständen, die ebenfalls einen Zeeman-Effekt zeigen, jedoch einfachere Spin-Texturen aufweisen. Hierzu zählt z. B. der Zustand an den \bar{K} -Punkten von 1 ML Tl/Si(111)-(1 \times 1), der aufgrund seiner energetischen Lage mittels Dotierung mit zusätzlichem Tl leitend wird [33, 151, 160, 545]. Aufgrund der großen Zeeman-Aufspaltung von $\Delta E = 600$ meV schneidet dabei jedoch zunächst lediglich das „untere“ Teilband das Fermi-Niveau, sodass die Elektronen in diesem Teilband an E_F (je nach \bar{K} -Punkt) $S_z = \pm 100\%$ zeigen (sog. *Valley*-Spin-Polarisation mit unterdrückter elastischer Rückstreuung aufgrund der Inäquivalenz der \bar{K} -Punkte) [33, 151, 160, 162, 163, 545]. Die Spin-Polarisation in z-Richtung wird dabei durch die C_3 -Symmetrie der \bar{K} -Punkte der Oberfläche ermöglicht und liegt auch direkt im \bar{K} -Punkt vor, was aufgrund der TRS für die ideale $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase von Pb/Si(111) nicht möglich ist (Vgl. Tab. 2.1). Die $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte der SIC-Phase von Pb/Si(111) sind ebenfalls inäquivalent. Daher gilt

für ihre Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}(-\mathbf{k}') = -\mathbf{S}(\mathbf{k}')$, womit elastische Rückstreuung ohne Spin-Flip ebenfalls wie bei 1 ML Tl/Si(111)-(1 × 1) unterdrückt ist. Dies, zusammen mit der besonderen Spin-Textur um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt, eröffnet möglicherweise neue Anwendungen in der Spintronik.

Eine *abrupte* Spin-Rotation der S_x - und S_y -Komponenten um seine \bar{K} -Punkte zeigt auch ein energetisch tieferliegender Rashba-Zeeman-aufgespaltener Zustand von Tl/Si(111)-(1 × 1) [147, 151, 161, 163]. Rotationen der Spin-Polarisation in S_z -Richtung, wie hier für Pb/Si(111) nachgewiesen, sind dabei jedoch bislang weder theoretisch vorhergesagt, noch experimentell belegt. Dagegen zeigt der unbesetzte Oberflächenzustand bei $E - E_F \approx 1$ eV von 1 ML Tl/Si(111)-(1 × 1) ebenfalls eine Rotation der Spin-Polarisation mit endlicher S_z -Komponente um seine \bar{M} -Punkte [147, 150, 151, 163, 546]. Hierbei entsteht jedoch im Gegensatz zur hier betrachteten $^{4/3}$ ML Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Struktur keine rein zykloidale Spin-Spirale entlang der Isoenergielinien im \mathbf{K} -Raum, sondern eine Linearkombination aus zykloidaler und helikaler Spin-Spirale im \mathbf{K} -Raum, die auf dem anisotropen Rashba-Effekt 1. Ordnung mit *Warping* basiert (Vgl. Kap. 2.2.1 u. 2.3 mit [150, 151, 547]).

1 ML Tl/Ge(111)-(1 × 1) besitzt die gleichen Oberflächenzustände wie 1 ML Tl/Si(111)-(1 × 1), jedoch aufgrund der im Vergleich größeren SOI der Ge-Atome gegenüber den Si-Atomen mit leicht unterschiedlichen Dispersionen und stellt damit eine weitere Vergleichsmöglichkeit für das S2-Band dar [110, 121, 164, 548, 549].

Interessanterweise tritt ein ähnlicher Zustand wie das S2-Band bei β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) nicht auf, obwohl dieses System wie die ideale $^{4/3}$ ML Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Struktur ebenfalls zur Raumgruppe $p31m$ gehört (Vgl. Tab. 2.1). Stattdessen tritt ein rein auf der C_{3v} -Symmetrie des $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkts beruhender Rashba-Effekt auf [109, 147], der jedoch den DFT-Berechnungen von REN und SAKONG [47, 48] zufolge auch für das S1-Band von Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) im Bereich der unbesetzten Zustände auftritt (Vgl. Abb. 5.6 u. 5.7).

Folglich stellt sich die Frage, warum die effektive Wechselwirkung lediglich für das S2-Band am $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt einen Zeeman-Effekt hervorruft und umgekehrt für das S1-Band einen Rashba-Effekt. Eine mögliche Antwort könnte der Blick auf die Projektion der Oberflächenzustände auf die unterschiedlichen Pb6*p*-Orbitale liefern (s. Abb. 5.7). Während das S1-Band am $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt ausschließlich mit dem Pb6*p_z*-Orbital in Verbindung gebracht wird, ist das S2-Band durch die Hybridisierung von Pb6*p_x*- und Pb6*p_z*-Orbital beschreibbar. Die daraus folgenden Konsequenzen müssten in einer neuerlichen relativistisch-quantenmechanischen Rechnung mit dem Hamilton-Operator des Gesamtsystems ermittelt werden, um die Unterschiede bewerten zu können.

WARPING, NESTING UND RASHBA-EFFEKT – EINFLUSS AUF DIE BANDSTRUKTUR UND SPIN-POLARISATION DES S1-BANDES, ELASTISCHE RÜCKSTREUUNG UND SUPRALEITUNG
 Die Oberflächenbänder der SIC-Phase unterliegen starken Wechselwirkungen, sowohl untereinander, als auch mit den Si-*Bulk*-Zuständen am *Interface*. Hierdurch weicht ihr Verhalten teils deutlich von dem eines quasi-freien Elektronen- oder Lochgases ab.

Wie bereits in den Abschnitten zur Ladungsträgerkonzentration der SIC-Phase beschrieben wurde, hat das S1-Band an der Fermi-Energie eine hexagonale Form (s. a. Abb. 5.8 u. 5.13). Diese Form lässt sich mit einer *Warping* genannten effektiven Wechselwirkung erklären (s. Kap. 2.3). Sie bewirkt, dass eine Spin-unabhängige Anisotropie der Dispersion des S1-Bandes mit $E \propto \mathbf{k}^6$ auftritt, welche auch zu den unterschiedlichen mittleren Fermi-Wellenvektoren $\bar{k}_{F,x} = 0,412 \text{ \AA}^{-1}$ und $\bar{k}_{F,y} = 0,391 \text{ \AA}^{-1}$ führt. Anisotropien in niedrigerer

Ordnung als \mathbf{k}^6 , welche nicht auf den Rashba-Effekt zurückzuführen sind, entfallen aufgrund der weitgehenden C_{3v} -Symmetrie der SIC-Phase, hervorgerufen durch die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der Oberfläche. Des Weiteren kommen durch die Hybridisierung mit dem Si-Bulk auch Spin-unabhängige, isotrope Abweichungen vom Modell des quasi-freien Elektronengases mit $E \propto \mathbf{k}^4$ und $E \propto \mathbf{k}^6$ in Betracht.

Die Dispersionsrelation für das S1-Band um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt, ohne Berücksichtigung der vermiedenen Kreuzungen durch die Hybridisierung mit dem Si-Bulk, wird inklusive des anisotropen Rashba-Effekts 3. Ordnung in \mathbf{k} aus Gl. (2.56) somit allgemein durch

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{k}) &= E_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0^*} + \kappa \mathbf{k}^4 + (\eta - \chi \cos(6\varphi)) \mathbf{k}^6 \pm |\alpha(\mathbf{k})| \\ &= E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} + \kappa k^4 + (\eta - \chi \cos(6\varphi)) k^6 \pm k \sqrt{(\alpha_1^I + \alpha_3^I k^2)^2 + (\alpha_3^A)^2 k^4 \sin^2(3\varphi)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

beschrieben. Dabei ist E_0 die Energie und m_0^* die effektive Masse am $\bar{\Gamma}$ -Punkt. κ und η sind die Spin-unabhängigen, isotropen Abweichungen vom quasi-freien Elektronengas, während die Stärke des *Warpings* durch χ aus Gl. (2.91) festgelegt ist. Der Rashba-Effekt führt zur Spin-abhängigen Energieaufspaltung mit den isotropen Rashba-Koeffizienten α_1^I und α_3^I und dem Anisotropieterm α_3^A (s. Kap. 2.2.1).

Um alle Parameter möglichst genau zu bestimmen, werden die aus den Messungen ermittelten mittleren Fermi-Wellenvektoren $\bar{k}_{F,x}$ und $\bar{k}_{F,y}$, sowie die Rashba-Aufspaltungen am Fermi-Niveau ($\Delta k_{R,x} = 0,04 \text{ \AA}^{-1}$, $\Delta k_{R,y} = 0,038 \text{ \AA}^{-1}$) zur Berechnung der Dispersionsrelation nach Gl. (5.16) genutzt. Ergänzend dazu wird die von REN in [48] berechnete Dispersion des S1-Bandes in H3-Konfiguration berücksichtigt, um den Verlauf der Dispersionsrelation um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt besser nachbilden zu können.

Zunächst wird zur Vereinfachung der Berechnung der Rashba-Effekt vernachlässigt, d. h., dass nur die Spin-unabhängigen Teile von Gl. (5.16) berücksichtigt werden. Damit können die Spin-unabhängigen Parameter zu $E_0 = -663 \text{ meV}$, $m_0^* = 3 m_e$, $\kappa = -8,267 \text{ eV \AA}^4$, $\eta = 60,008 \text{ eV \AA}^6$ und $\chi = 17,184 \text{ eV \AA}^6$ bestimmt werden. Das Anisotropieverhältnis in 6. Ordnung in \mathbf{k} beträgt damit $(\eta + \chi)/(\eta - \chi) = 1,803$ und führt damit zu der starken Ausprägung des *Warpings* am Fermi-Niveau⁷⁸.

Mit den Spin-aufgespaltenen Fermi-Wellenvektoren $k_{F,x}^+ = k_{F,x,\downarrow} = 0,392 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{F,x}^- = k_{F,x,\uparrow} = 0,432 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{F,y}^+ = k_{F,y,\downarrow} = 0,372 \text{ \AA}^{-1}$ und $k_{F,y}^- = k_{F,y,\uparrow} = 0,41 \text{ \AA}^{-1}$ als Randbedingung für Gl. (5.16) lassen sich im Anschluss durch das Hinzufügen des Rashba-Effekts zur Dispersionsrelation und unter Berücksichtigung der gemessenen und berechneten Spin-Polarisationen die Rashba-Koeffizienten α_1^I , α_3^I und α_3^A bestimmen. Als Ergebnisse der Berechnungen und Messungen der Spin-Polarisation sind dabei $\alpha_1^I < 0$, $\text{sgn}(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_{F,x}^2) < 0$, $\text{sgn}(\alpha_1^I + \alpha_3^I k_{F,y}^2) < 0$ und $\alpha_3^A < 0$ als weitere Randbedingungen nach Gl. (5.2) zu beachten. Die Berechnung der Dispersionsrelationen $E_+(k_x)$, $E_-(k_x)$, $E_+(k_y)$ und $E_-(k_y)$ ergibt schließlich $\alpha_1^I = -170 \text{ meV \AA}$, $\alpha_3^I = -835 \text{ meV \AA}^3$ und $\alpha_3^A = -1,209 \text{ eV \AA}^3$ als Rashba-Koeffizienten. Das Vorzeichen von α_3^I lässt sich anschaulich auch damit begründen, dass die beiden Dispersionsrelationen der Spin-polarisierten Teilbänder im betrachteten Energiebereich mit zunehmendem Wellenvektor k einen stetig größer werdenden Energieabstand ΔE aufweisen. Dies ist nur

⁷⁸ Im Vergleich hierzu hat ein isotropes Elektronengas mit einer kreisförmigen Fermi-Fläche wegen $\chi = 0$ ein Anisotropieverhältnis von 1.

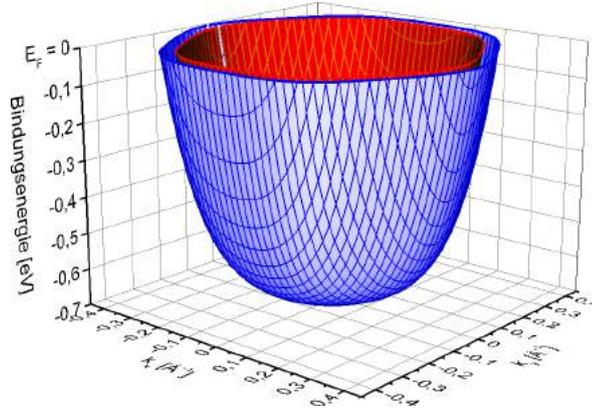


Abbildung 5.17: Berechnete Dispersion des S1-Bandes der SIC-Phase: Berechnung der Dispersionen $E_{\pm}(\mathbf{k})$ mit Rashba-Effekt mittels Gl. (5.16) mit den im Text angegebenen Werten. $E_+(\mathbf{k})$ rot, $E_-(\mathbf{k})$ blau. Zusätzlich sind die Isoenergielinien am Fermi-Niveau eingezeichnet.

möglich, wenn α_3^I das gleiche Vorzeichen hat wie α_1^I .

Berechnet man mit den Spin-aufgespaltenen Fermi-Wellenvektoren $k_{F,i}^{\pm}$, die jeweiligen Rashba-Koeffizienten $\alpha_{R,F,i}^{\pm} = -\alpha(k_{F,i}^{\pm})/k_{F,i}^{\pm}$, so zeigt sich eine deutliche Abweichung zu den Werten der beiden in parabolischer Näherung mittels Gl. (2.66) berechneten Rashba-Koeffizienten am Fermi-Niveau $\alpha_{R,x} = -0,79 \text{ eV \AA}$, $\alpha_{R,y} = -1,38 \text{ eV \AA}$. Die hier ermittelten Werte betragen dabei $\alpha_{R,F,x}^+ = -0,298 \text{ eV \AA}$, $\alpha_{R,F,x}^- = -0,326 \text{ eV \AA}$, $\alpha_{R,F,y}^+ = -0,331 \text{ eV \AA}$ und $\alpha_{R,F,y}^- = -0,371 \text{ eV \AA}$. Dieses Resultat belegt die deutliche Abweichung von einem isotropen, quasi-freien Elektronengas und stellt die Definition und Verwendung des sonst üblichen Rashba-Koeffizienten α_R nach Gl. (2.62) in Frage.

Die mit den berechneten Parametern erhaltenen Dispersionsrelationen $E_{\pm}(\mathbf{k})$ des S1-Bandes sind in Abb. 5.17 als dreidimensionale Flächen gezeigt. Ihre Projektionen in $\overline{\Gamma\bar{K}}$ - und $\overline{\Gamma\bar{M}}$ -Richtung, sowie die Isoenergielinien bei einer Bindungsenergie von $E_B = 178 \text{ meV}$ sind außerdem in Überlagerung mit den gemessenen BMs aus Abb. 5.9 u. 5.11, bzw. der CEM aus Abb. 5.13 in Abb. 5.18 dargestellt und durch die nach Gl. (2.112) berechneten effektiven Massen $m^*(\mathbf{k})$ ergänzt. Die berechneten Kurven zeigen dabei eine hervorragende Übereinstimmung mit den Messdaten und den berechneten Dispersionen von REN (Vgl. Abb. 5.7 u. 5.14). Die kleinen Abweichungen zu den Messdaten der CEM in Abb. 5.18 (c) in der 2. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion sind möglicherweise auf die dort fehlende Hybridisierung des S1-Bandes mit dem Si-Bulk zurückzuführen, dessen VBM an den \bar{K} -Punkten, d. h. an den $\overline{\Gamma}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkten der 2. SBZ, energetisch deutlich tiefer liegt als am $\bar{\Gamma}$ -Punkt in der 1. SBZ, aber auch auf die Wechselwirkung mit dem S2-Band.

Im Modell des quasi-freien Elektronengases ist die effektive Masse $m^*(\mathbf{k})$ aufgrund der parabolischen Dispersion konstant und isotrop. Die Dispersionen $E_{\pm}(\mathbf{k})$ des S1-Bandes nach Gl. (5.16) weichen jedoch deutlich von einer parabolischen Dispersion ab und sind anisotrop. Damit ist nach Gl. (2.112) die effektive Masse nicht mehr konstant und ebenfalls anisotrop, wie Abb. 5.18 (d) zeigt. Am $\bar{\Gamma}$ -Punkt bei $\mathbf{k} = 0$ ergibt sich $m^*(0) = m_0^* = 3m_e$. Die Anisotropie von $m^*(\mathbf{k})$ prägt sich für zunehmende Werte von k zunehmend aus, während die Abhängigkeit bzgl. der beiden Teilbänder $E_{\pm}(\mathbf{k})$ abnimmt. Die aus $E_{\pm}(\mathbf{k})$ berechneten effektiven Massen $m_{x,y}^{*,\pm}(k)$ gleichen sich vielmehr den effektiven Massen $m_{x,y}^*(k)$ an, die den Rashba-Effekt

nicht berücksichtigen und mittels $E(\mathbf{k}) = [E_+(\mathbf{k}) + E_-(\mathbf{k})] / 2$ berechnet werden. Insgesamt zeigt sich, dass alle verschiedenen effektiven Massen mit zunehmendem Wellenvektor k stark abnehmen und am Fermi-Niveau Werte von $m_{F,x}^* = 0,135 m_e$, $m_{F,x}^{*,+} = 0,152 m_e$, $m_{F,x}^{*,-} = 0,12 m_e$, $m_{F,y}^* = 0,106 m_e$, $m_{F,y}^{*,+} = 0,119 m_e$ und $m_{F,y}^{*,-} = 0,094 m_e$ annehmen. Dies entspricht in etwa dem Zusammenhang

$$\frac{2}{m_{F,i}^*} \approx \frac{1}{m_{F,i}^{*,+}} + \frac{1}{m_{F,i}^{*,-}} \quad (5.17)$$

für $i \in \{x,y\}$. Dabei sind $m_{F,x}^*$ und $m_{F,y}^*$ die effektiven Massen am Fermi-Niveau für $\alpha(\mathbf{k}) = 0$. Damit weichen die über Gl. (5.16) ermittelten effektiven Massen deutlich von denen der parabolischen Näherung am Fermi-Niveau ab, bei der sich $m_{F,x}^* = 0,77 m_e$ und $m_{F,y}^* = 0,42 m_e$ ergeben (s. Abschnitte zur $\overline{\Gamma K}$ -, $\overline{K M K}$ - und $\overline{\Gamma M}$ -Richtung ab S. 114). Aufgrund der sehr niedrigen effektiven Massen am Fermi-Niveau kann die SIC-Phase als quasi-relativistisches 2DEG betrachtet werden.

Ein anderer Ansatz zur Bestimmung der effektiven Masse wurde in [142] für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion von Pb auf Si(111) gewählt. Die mittels $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie für zwei verschiedene metallische Oberflächenzustände aus ARPES-Messungen bestimmten effektiven Massen am Fermi-Niveau von nur $0,0074 m_e$ und $0,036 m_e$ werden dabei auf die Linearisierung der Bandstruktur aufgrund einer Wechselwirkung der beiden besetzten Zustände mit unbesetzten Zuständen erklärt. Auf die SIC-Phase lässt sich dieser Ansatz aufgrund ihrer Bandstruktur jedoch nicht übertragen.

Da sowohl die effektive Masse m^* als auch der Fermi-Wellenvektor k_F des metallischen S1-Bandes anisotrop und Spin-abhängig sind, ist auch die Fermi-Geschwindigkeit v_F anisotrop und Spin-abhängig. Sie ist durch

$$v_{F,i}^{\pm} = \frac{\hbar k_{F,i}^{\pm}}{m_{F,i}^{*,\pm}} \quad (5.18)$$

mit $i \in \{x,y\}$ gegeben. Somit ergeben sich Werte der Fermi-Geschwindigkeit von $v_{F,x}^+ = 2,986 \cdot 10^6 \text{ m/s}$, $v_{F,x}^- = 4,168 \cdot 10^6 \text{ m/s}$, $v_{F,y}^+ = 3,619 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ und $v_{F,y}^- = 5,049 \cdot 10^6 \text{ m/s}$, die damit einen Unterschied von 69% zwischen dem kleinsten und dem größten Wert aufweisen. Der Mittelwert über alle Richtungen und Spin-Polarisationen beträgt $\bar{v}_F = 3,956 \cdot 10^6 \text{ m/s}$.

In der Literatur wurde die Fermi-Geschwindigkeit der SIC-Phase bislang stets als isotrop und Spin-unabhängig betrachtet. Aus den ARPES-Messungen an der SIC-ähnlichen (2,6)-Struktur mit $\Theta_{Pb} = 1,286 \text{ ML}$ aus der DS-Phase [138] wurde eine Fermi-Geschwindigkeit von $v_F = 1,313 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ abgeleitet [432], die einen Faktor 3 kleiner ist als der hier ermittelte gemittelte Wert \bar{v}_F . Aus der Anisotropie und Spin-Abhängigkeit ergeben sich auch Abweichungen bei von der Fermi-Geschwindigkeit abgeleiteten Größen, wie z. B. der Diffusionskonstanten D und der Mobilität μ_e der Elektronen, der Leitfähigkeit σ bzw. dem spezifischen Widerstand $\varrho = \sigma^{-1}$, den Supraleitungs-Kohärenzlängen ξ_0 und $\xi_{GL}(0)$ und der kritischen Magnetfeldstärke $B_{c2}(0)$ für Supraleitung bei $T = 0$. Die Anisotropie und Spin-Abhängigkeit der Fermi-Geschwindigkeit hat demnach starken Einfluss auf die Transporteigenschaften der SIC-Phase. Bisherige Ergebnisse von Transportmessungen und im Bereich der Supraleitung müssen somit kontrolliert und gegebenenfalls korrigiert werden. Zukünftige Transportmessungen sollten dieses Ergebnis ebenfalls berücksichtigen.

Die nahezu hexagonale Form der Fermi-Fläche kann nicht nur phänomenologisch mit *Warping* beschrieben, sondern physikalisch auch mit einem *effektiven Nesting* begründet werden.

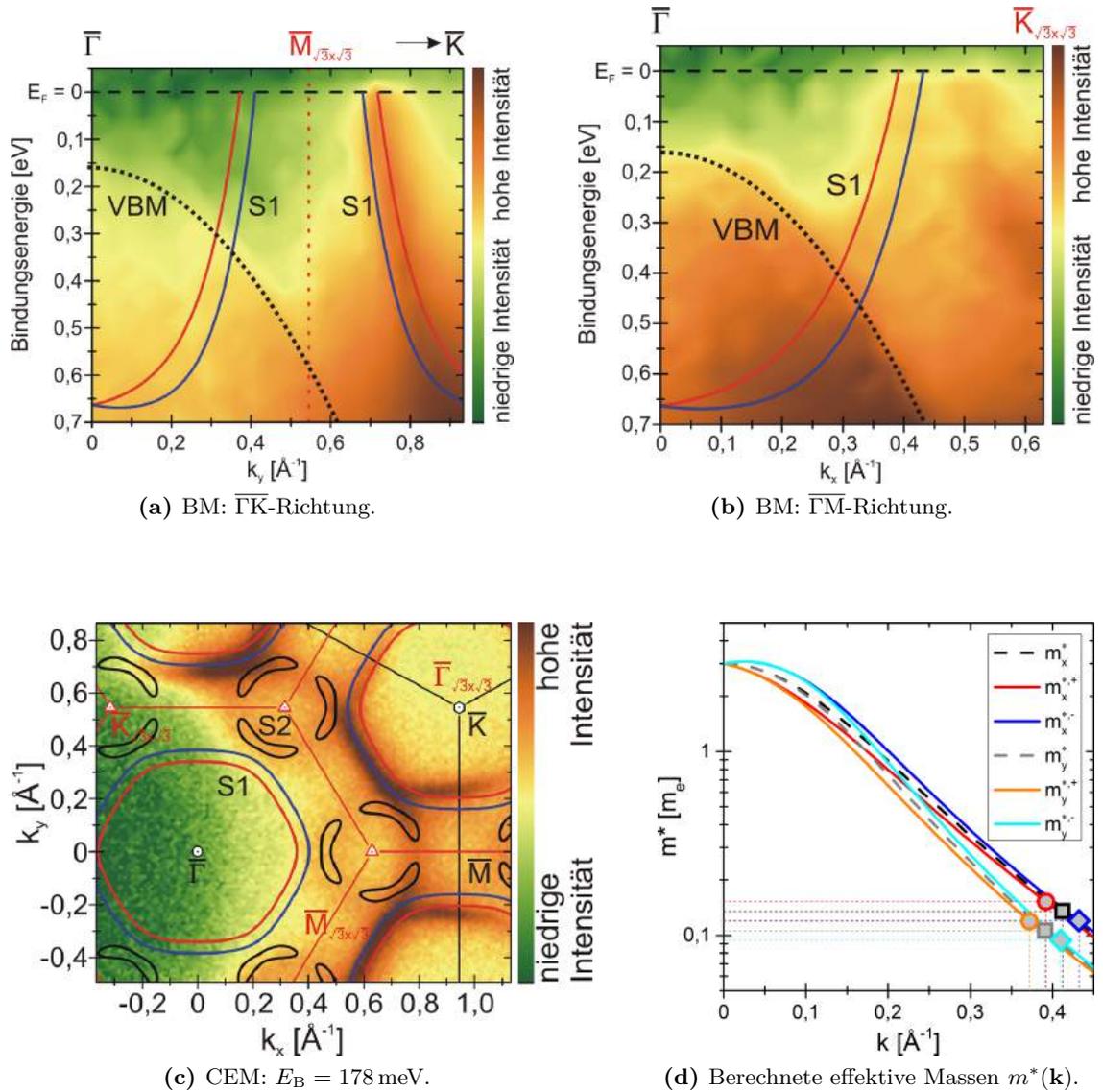
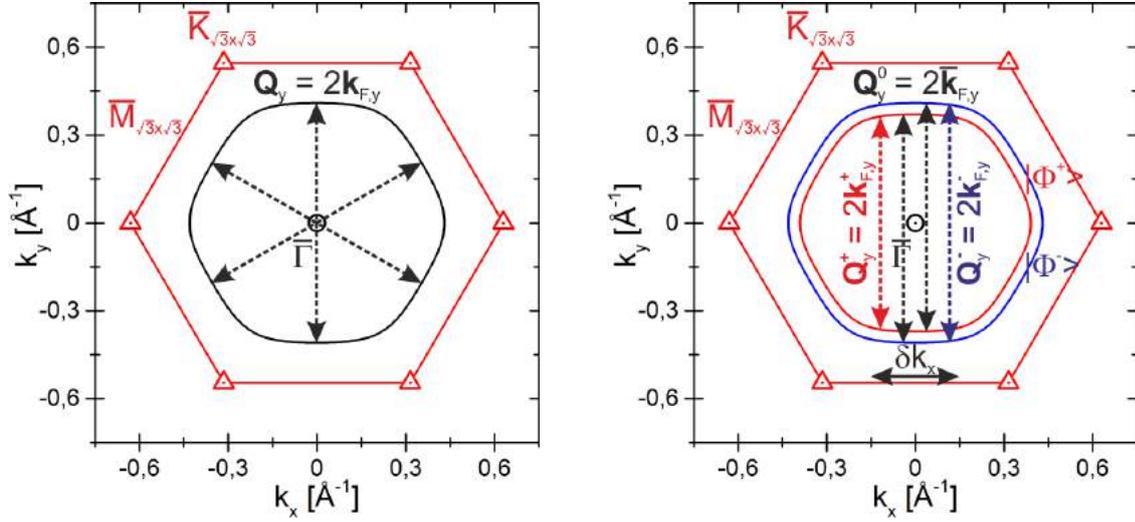


Abbildung 5.18: Vergleich von gemessener und berechneter Dispersion des S1-Bandes der SIC-Phase: Die roten und blauen Linien entsprechen den berechneten Dispersionen $E_+(\mathbf{k})$ und $E_-(\mathbf{k})$ aus Gl. (5.16) mit den im Text angegebenen Parametern für die BMs der $\bar{\Gamma}\bar{K}$ - und $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung in (a) u. (b), sowie den Isoenergielinien bei einer Bindungsenergie von $E_B = 178$ meV für die CEM in (c). Zusätzlich sind in der CEM die bananenförmigen Isoenergielinien des S2-Bandes eingezeichnet (schwarz). Die Konturplots zeigen die gemessene Intensität I mit angepassten Farbpaletten zur besseren Darstellung (logarithmische Farbskala). In (d) sind die für die verschiedenen Richtungen und Teilbänder nach Gl. (2.112) berechneten effektiven Massen $m^*(\mathbf{k})$ dargestellt, wobei $m_{x,y}^*(k)$ unter Vernachlässigung der Rashba-Aufspaltung die effektiven Massen bei Spin-Entartung sind. Die Datenpunkte markieren die Werte am Fermi-Niveau.



(a) Beispiel für *Nesting*-Vektoren von Spin-entarteten Bändern und von Oberflächenzuständen topologischer Isolatoren.

(b) *Nesting*-Vektoren des Spin-aufgespaltenen S1-Bandes der SIC-Phase. Gezeigt sind nur die *Nesting*-Vektoren für eine der drei äquivalenten Raumrichtungen.

Abbildung 5.19: Vergleich der *Nesting*-Vektoren von Spin-entarteten Bändern und Oberflächenzuständen topologischer Isolatoren mit dem Spin-aufgespaltenen S1-Band der SIC-Phase: *Warping* bzw. *Nesting* führt zu hexagonaler Deformation der Isoenergielinien am Fermi-Niveau von Systemen mit drei- oder sechszähliger Symmetrie. Im Vergleich zu (a) treten in (b) aufgrund der Spin-Aufspaltung mehrere *Nesting*-Vektoren \mathbf{Q}_y^i auf.

Über einen Bereich $\delta k_x \approx 0,3 \text{\AA}^{-1}$ sind die Isoenergielinien beider Teilbänder $|\Phi^\pm\rangle$ des S1-Bandes am Fermi-Niveau nahezu parallel zur k_x -Richtung. Aufgrund der Spin-Aufspaltung des S1-Bandes ergeben sich im Vergleich zu Spin-entarteten Bändern und Oberflächenzuständen von TIs (z. B. $\text{Bi}_2\text{Se}_3(111)$ [550], $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ [155]) anstatt jeweils nur eines *Nesting*-Vektors drei verschiedene *Nesting*-Vektoren innerhalb der 1. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in jeder der drei äquivalenten Raumrichtungen der C_{3v} -Symmetrie (s. Abb. 5.19).

Der *Nesting*-Vektor $\mathbf{Q}_y^0 = 2\bar{k}_{F,y}\mathbf{e}_y$ verbindet das innere Teilband $|\Phi^+\rangle$ mit dem äußeren Teilband $|\Phi^-\rangle$ von S1 (asymmetrisch zum $\bar{\Gamma}$ -Punkt) unter Beibehaltung der Orientierung des Spins. Dahingegen verbinden die beiden *Nesting*-Vektoren $\mathbf{Q}_y^\pm = 2k_{F,y}^\pm\mathbf{e}_y$ jeweils das gleiche Teilband bei gleichbleibendem Betrag von $k_{F,y}^\pm$ (symmetrisch zum $\bar{\Gamma}$ -Punkt), jedoch unter Umkehrung der Spin-Polarisation \mathbf{S} .

Die drei *Nesting*-Vektoren innerhalb der 1. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase sind mit $|\mathbf{Q}_y^0| = 2\bar{k}_{F,y} = 0,782 \text{\AA}^{-1}$, $|\mathbf{Q}_y^+| = 2k_{F,y}^+ = 0,744 \text{\AA}^{-1}$ und $|\mathbf{Q}_y^-| = 2k_{F,y}^- = 0,82 \text{\AA}^{-1}$ inkommensurabel mit dem reziproken Gitter der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, der Domänenstruktur und dem Si-Substrat. *Nesting* kann jedoch auch zwischen den Bändern benachbarter SBZs auftreten. Die Beträge dieser *Nesting*-Vektoren werden durch Subtraktion der oben ermittelten \mathbf{Q}_y^i vom reziproken Gittervektor $\mathbf{G} = 1,091 \text{\AA}^{-1} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]}$ zu $|\mathbf{Q}_y^{*,0}| = |\mathbf{G} - \mathbf{Q}_y^0| = 0,309 \text{\AA}^{-1}$, $|\mathbf{Q}_y^{*,+}| = |\mathbf{G} - \mathbf{Q}_y^+| = 0,347 \text{\AA}^{-1}$ und $|\mathbf{Q}_y^{*,-}| = |\mathbf{G} - \mathbf{Q}_y^-| = 0,271 \text{\AA}^{-1}$

bestimmt. Daraus ergeben sich Periodizitäten, die allesamt in der Größenordnung der Streifenbreite der SIC-Phase liegen (s. Kap. 4.2.3), jedoch ebenfalls inkommensurabel mit diesem Gitter sind (keine Vielfache der Gitterkonstanten $a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ \AA}$ von Si).

Ein möglicher Metall-Isolator-Übergang durch Bildung einer CDW (mit Wellenvektor \mathbf{Q}_y^0), SDW (mit Wellenvektoren \mathbf{Q}_y^\pm) oder SODW ist mit diesen *Nesting*-Vektoren daher nicht möglich. Im Gegensatz dazu sind bei Pb/Si(557) die \mathbf{Q} -Vektoren kommensurabel mit dem reziproken Gitter in der $[11\bar{2}]$ -Richtung und ein Metall-Isolator-Übergang findet bei $T_C = 78 \text{ K}$ in dieser Richtung durch Bildung einer SODW statt (s. Kap. 4.4 u. 6).

In TI-Systemen ist der *genestete* Oberflächenzustand durch die Topologie geschützt. *Warping* führt in den oben genannten Systemen daher zwar zu der hexagonalen Deformation der Isoenergielinien, jedoch nicht zu einem Metall-Isolator-Übergang mit Ausbildung eines isolierenden SDW- oder SODW-Grundzustands. Es stellt sich daher lediglich ein *effektives Nesting* ein. Das S1-Band der SIC-Phase ist topologisch nicht geschützt, dennoch lässt sich auch hier von einem *effektiven Nesting* sprechen, da das Band eine *genestete*, aber metallische Fermi-Fläche besitzt.

Hinsichtlich des elektronischen Transports ergeben sich aus diesen Feststellungen folgende Erwartungen für die *genesteten* Richtungen: Da die *Nesting*-Vektoren nicht mit einem reziproken Gittervektor \mathbf{G} zusammenfallen, findet keine elastische Rückstreuung an Phononen in den zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung äquivalenten Richtungen statt. Während in topologisch trivialen, Spin-entarteten Zuständen elastische Rückstreuung an magnetischen und nichtmagnetischen (atomaren) Defekten stattfindet und in TI-Systemen ausschließlich an magnetischen Defekten durch Spin-Flip, ist die Situation für das Spin-aufgespaltene S1-Band der SIC-Phase aufgrund der sechs vorhandenen *Nesting*-Vektoren \mathbf{Q}_y^i und $\mathbf{Q}_y^{*,i}$ pro äquivalenter $[1\bar{1}0]$ -Richtung komplizierter. Elastische Rückstreuung ist hier auf zweierlei Art und Weise möglich. Erstens an magnetischen Defekten durch Spin-Flip mit den Streuvektoren \mathbf{Q}_y^\pm innerhalb der 1. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion:

$$|k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle \leftrightarrow | -k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle, \quad (5.19 \text{ a})$$

$$|k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle \leftrightarrow | -k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle, \quad (5.19 \text{ b})$$

wobei ein Impulsübertrag von $\Delta k = 2k_{F,y}^\pm$ an den Defekt nötig ist, bzw. mit den Streuvektoren $\mathbf{Q}_y^{*,\pm}$ und $\mathbf{G} = 1,091 \text{ \AA}^{-1} \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]}$ von der 1. SBZ in die 2. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion:

$$|k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle \leftrightarrow | \mathbf{G} - k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle, \quad (5.20 \text{ a})$$

$$|k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle \leftrightarrow | \mathbf{G} - k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle, \quad (5.20 \text{ b})$$

mit einem Impulsübertrag von $\Delta k = 2k_{F,y}^\pm - |\mathbf{G}|$ an den Defekt. Zweitens findet elastische Rückstreuung an nichtmagnetischen Defekten mit den Streuvektoren \mathbf{Q}_y^0 bzw. $\mathbf{Q}_y^{*,0}$ statt. Dieses erfordert jedoch einen zusätzlichen Impulsübertrag von der Größe der Rashba-Aufspaltung $\pm \Delta k_{R,y}$ an den Defekt:

$$|k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle \leftrightarrow | -k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle = | -(k_{F,y}^+ + \Delta k_{R,y}) \mathbf{e}_y, \downarrow\rangle, \quad (5.21 \text{ a})$$

$$|k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle \leftrightarrow | -k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle = | -(k_{F,y}^- - \Delta k_{R,y}) \mathbf{e}_y, \uparrow\rangle, \quad (5.21 \text{ b})$$

sowie

$$\left| k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \downarrow \right\rangle \leftrightarrow \left| \mathbf{G} - k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \downarrow \right\rangle = \left| \mathbf{G} - (k_{F,y}^+ + \Delta k_{R,y}) \mathbf{e}_y, \downarrow \right\rangle, \quad (5.21 \text{ c})$$

$$\left| k_{F,y}^- \mathbf{e}_y, \uparrow \right\rangle \leftrightarrow \left| \mathbf{G} - k_{F,y}^+ \mathbf{e}_y, \uparrow \right\rangle = \left| \mathbf{G} - (k_{F,y}^- - \Delta k_{R,y}) \mathbf{e}_y, \uparrow \right\rangle. \quad (5.21 \text{ d})$$

Bei allen Streuprozessen handelt es sich tatsächlich um Rückstreuung, da die Gruppengeschwindigkeit

$$v_{g,y}(k_{F,y}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k_{F,y})}{\partial k_y} \quad (5.22)$$

jeweils im Zustand auf der linken Seite positiv und im Zustand auf der rechten Seite negativ ist.

Magnetische Defekte auf der Oberfläche der SIC-Phase kommen im Idealfall nicht vor, da diese lediglich aus Pb- und Si-Atomen besteht. Somit sind elastische Rückstreuungen an Defekten mit Spin-Flip stark reduziert. Im Experiment sollte daher lediglich elastische Rückstreuung ohne Spin-Flip mit den Streuvektoren \mathbf{Q}_y^\pm und $\mathbf{Q}_y^{*,\pm}$ auftreten. Abseits der *genesteten* Richtungen gelten ähnliche Bedingungen für die elastische Rückstreuung an Defekten, da die Rashba-Aufspaltung des S1-Bandes in allen Richtungen vorhanden ist. Verallgemeinert gelten Gl. (5.19) u. (5.21 a, b) damit für alle Fermi-Wellenvektoren \mathbf{k}_F^\pm für magnetische Defekte (Rückstreuung mit Spin-Flip) bzw. für nichtmagnetische Defekte (Rückstreuung ohne Spin-Flip), auch die Gruppengeschwindigkeit aus Gl. (5.22) lässt sich dahingehend zu $v_g(\mathbf{k}_F)$ verallgemeinern.

Zusätzlich kommen Spin-Bahn-Streuung (mit Spin-Flip) und Elektron-Elektron-Streuung sowie Streuprozesse höherer Ordnung (mit entsprechend geringerer Streurrate) vor. Darüber hinaus sind diverse inelastische Streuprozesse möglich. Thermische Anregung aus dem energetisch tieferliegenden Spin-polarisierten S1-Teilband $|\Phi^-\rangle$ in das energetisch höhere Teilband $|\Phi^+\rangle$ ist aufgrund des großen Energieabstandes beider Teilbänder im Bereich des Fermi-Niveaus äußerst unwahrscheinlich. Mit diesem Prozess verknüpfte elastische und inelastische Streuprozesse können daher ausgeschlossen werden.

Die Spin-Aufspaltung des S1-Bandes am Fermi-Niveau hat auch Konsequenzen für die bei $T_C = 1,83 \text{ K}$ einsetzende Supraleitung. BRUN schließt aufgrund seiner STS-Messungen an der supraleitenden Phase in [432], dass sowohl die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion als auch die SIC-Phase keine reinen BCS-Supraleiter mit *s*-Wellenfunktion sein können. Stattdessen schlägt er einen gemischten Singulett-Triplett-Zustand vor, der neben der *s*-Wellenfunktion auch Anteile der *p*-Wellenfunktion aufweist. Dieses Phänomen wurde bereits zuvor theoretisch für 2DEGs beschrieben und auf die Rashba-Aufspaltung der metallischen Zustände zurückgeführt [5, 551].

Die hier nachgewiesene Spin-Aufspaltung des metallischen S1-Bandes könnte genau diesen Sachverhalt bestätigen. Ein Nachweis für diesen unkonventionellen Typ von Supraleitung stellen die SR-ARPES-Messungen jedoch noch nicht dar, da sie weit oberhalb der Sprungtemperatur T_C durchgeführt wurden. Erst entsprechende Messungen unterhalb von T_C könnten die Idee des gemischten Singulett-Triplett-Zustands belegen.

Die Wellenfunktion dieses Zustandes lässt sich mittels Paarwellenfunktionen

$$|\mathbf{k}_1, \mathbf{S}_1\rangle |\mathbf{k}_2, \mathbf{S}_2\rangle \quad (5.23)$$

der durch Phononen zu Cooper-Paaren gekoppelten Einteilchenwellenfunktionen $|\mathbf{k}_{1,2}, \mathbf{S}_{1,2}\rangle$ der zwei Elektronen mit Wellenvektoren \mathbf{k}_1 und $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$, jeweils mit Betrag k_F , sowie Spins

$\mathbf{S}_{1,2} \in \{\uparrow, \downarrow\}$ aus den Zuständen des S1-Bandes an der Fermi-Energie bestimmen. Die s - und p -Paarwellenfunktionen

$$|s(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle - |\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle \right\}, \quad (5.24 \text{ a})$$

$$|p_1(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle + |\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle \right\}, \quad (5.24 \text{ b})$$

$$|p_2(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle = |\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \uparrow\rangle, \quad (5.24 \text{ c})$$

$$|p_3(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle = |\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle |-\mathbf{k}_F^\pm, \downarrow\rangle \quad (5.24 \text{ d})$$

bilden eine Orthonormalbasis. Dabei ist der Spin-Anteil der s -Paarwellenfunktion antisymmetrisch mit $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = 0$ und $s = 0$, was einer Singulett-Paarung entspricht, während die Spin-Anteile der p -Paarwellenfunktionen symmetrisch sind (Triplett-Paarung mit $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = 1$ und $s \in \{-1, 0, +1\}$) [552]. Aufgrund der Inversionssymmetriebrechung der Oberfläche und des Rashba-Effekts sind lediglich $|\mathbf{k}_F^+, \downarrow\rangle |-\mathbf{k}_F^+, \uparrow\rangle$ und $|\mathbf{k}_F^-, \uparrow\rangle |-\mathbf{k}_F^-, \downarrow\rangle$ mögliche Paarwellenfunktionen der SIC-Phase [553]. Diese lassen sich als Linearkombinationen

$$|\mathbf{k}_F^+, \downarrow\rangle |-\mathbf{k}_F^+, \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_1(\mathbf{k}_F^+)\rangle + |s(\mathbf{k}_F^+)\rangle \right\}, \quad (5.25 \text{ a})$$

$$|\mathbf{k}_F^-, \uparrow\rangle |-\mathbf{k}_F^-, \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_1(\mathbf{k}_F^-)\rangle - |s(\mathbf{k}_F^-)\rangle \right\} \quad (5.25 \text{ b})$$

der s - und p -Paarwellenfunktionen ausdrücken, was die Annahme gemischter Singulett-Triplett-Zustände von BRUN stützt. $|p_2(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle$ und $|p_3(\mathbf{k}_F^\pm)\rangle$ treten aufgrund ihrer parallelen Spin-Ausrichtungen ($s = \pm 1$) der sich im \mathbb{K} -Raum gegenüberliegenden Elektronen nicht auf, da solche nicht mit dem Rashba-Effekt vereinbar sind.

In der supraleitenden Phase finden nach wie vor Streuprozesse der Elektronen statt. Zustände innerhalb der Energielücke Δ_{SC} belegen für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion das Vorhandensein dieser Streuprozesse und eines gemischten Singulett-Triplett-Zustands, da ein Supraleiter mit reiner s -Wellenfunktion keine Streuprozesse aufgrund nichtmagnetischer Defekte erlaubt [40, 432]. Gleiches sollte analog für die SIC-Phase gelten, jedoch finden sich mittels STS-Messungen keine Zustände innerhalb der Energielücke [40, 432]. Die Streuung an nichtmagnetischen Defekten gelingt nach Gl. (5.21) aufgrund der Rashba-Aufspaltung nur durch Interbandstreuung zwischen den beiden Spin-polarisierten Teilbändern von S1 ($|\Phi^\pm\rangle \leftrightarrow |\Phi^\mp\rangle$). Möglicherweise ist dieser Streuprozess bei der SIC-Phase aufgrund der Domänenbildung unterdrückt.

Im Vergleich zur aus der STS-Messung extrapolierten Energielücke der Supraleitung bei $T = 0 \text{ K}$, $\Delta_{\text{SC}} = 0,36 \text{ meV}$ [39], ist die SOC der SIC-Phase wesentlich stärker, da das Produkt aus Rashba-Koeffizient am Fermi-Niveau und Fermi-Wellenvektor mindestens $|\alpha_{\text{R},\text{F},x}^+ k_{\text{F},x}^+ = | -0,298 \text{ eV \AA} | \cdot 0,392 \text{ \AA}^{-1} = 117 \text{ meV}$ beträgt. Nach [551] ist das kritische Magnetfeld für Supraleitung bei $T = 0 \text{ K}$ parallel zur Oberfläche in diesem Fall durch

$$B_{c2,\parallel}(0) = \mu_r \mu_0 H_{c2,\parallel}(0) = \frac{\sqrt{2\Delta_{\text{SC}}\alpha_{\text{R},\text{F}}k_{\text{F}}}}{\mu_{\text{B}}} \quad (5.26)$$

gegeben. Man erhält mit dieser Rechnung $B_{c2,\parallel}(0) = 158,4 \text{ T}$, was mehr als tausendfach größer ist als das kritische Magnetfeld senkrecht zur Oberfläche, $B_{c2,\perp}(0) = 0,11 - 0,145 \text{ T}$ [39, 41].

Eine experimentelle Überprüfung von $B_{c2,\parallel}(0)$ ist daher äußerst schwierig. Unordnung der Atome im Gitter, wie z. B. die Domänenbildung der SIC-Phase im Vergleich zu einer perfekten $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion oder atomare Defekte, verringert den Maximalwert von $B_{c2,\parallel}(0)$, auch einhergehend mit kleineren Streuzeiten τ der Elektronen (sog. *schmutziger Supraleiter*) [432].

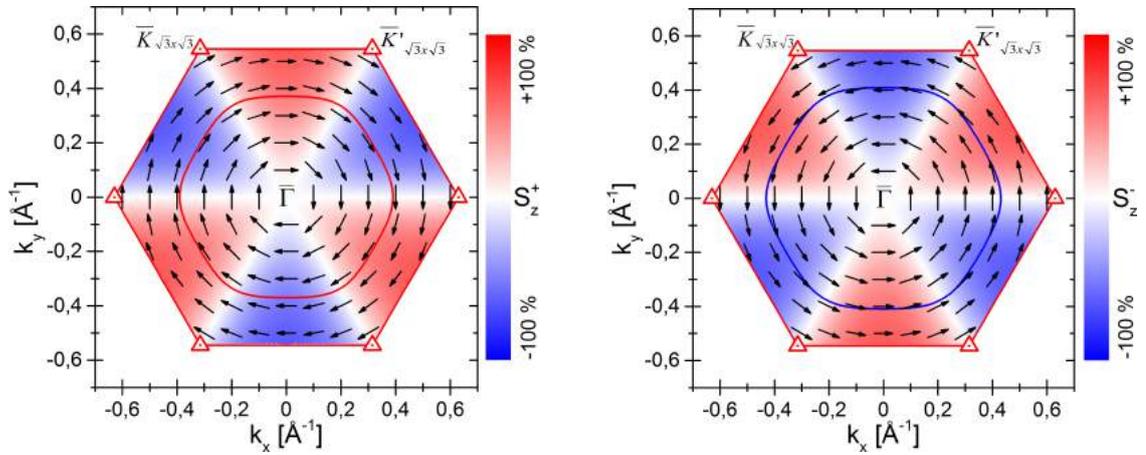
Abschließend zu Diskutieren ist die aus der Berechnung der Dispersion des S1-Bandes ermittelbare Spin-Polarisation. Für die Rechnung wurde implizit eine C_{3v} -Symmetrie der Oberfläche angenommen (s. o.). Die Spin-Polarisationsvektoren $\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k})$ einer solchen Oberfläche sind allgemein in Gl. (2.60) und für die Hauptrichtungen in Gl. (2.61) bereits berechnet worden. Da in den SR-ARPES-Messungen reduzierte Spin-Polarisationsgrade $S^{\pm} < 100\%$ auftreten (Vgl. Tab. 5.2 u. 5.3), müssen diese für den Vergleich mit der Theorie zusätzlich berücksichtigt werden. Zudem werden die mit der Berechnung ermittelten Spin-Polarisationen mit den Werten von REN aus [48] (zusammengefasst in Tab. 5.1) verglichen.

In $\overline{\Gamma M}$ -Richtung sind nach Gl. (2.61), wegen der vorhandenen Spiegelebene, lediglich Spin-Polarisationsvektoren mit einer S_y -Komponente zu erwarten. Die SR-ARPES-Messung in Abb. 5.12 (c) u. (a) u. Tab. 5.2 hat jedoch gezeigt, dass der Symmetriebruch durch die Domänenbildung bei der SIC-Phase zu endlichen S_x - und S_z -Komponenten führt. Der Vergleich der in C_{3v} -Symmetrie berechneten Spin-Polarisationsvektoren mit den Messdaten ist daher lediglich in erster Näherung richtig und muss dementsprechend im Kontext einer hypothetischen idealen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion betrachtet werden. Nach REN sind die Spin-Polarisationen des S1-Bandes in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung $S_{y,H3}^+ = S_{y,T4}^+ = -18\%$, $S_{y,H3}^- = +38\%$ und $S_{y,T4}^- = +22\%$ (s. Tab. 5.1, [48]). Die Messwerte sind im Vergleich dazu mit $S_{y,a} = -49\%$ und $S_{y,b} = +44,3\%$ deutlich höher. Die Abweichungen sind auf den Symmetriebruch zurückzuführen.

Die Spin-aufgelösten Messungen der k_y -Richtung in Abb. 5.12 (d) u. (b) u. Tab. 5.3 zeigen Peaks des S1-Bandes in der 2. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Die Koordinaten relativ zu den jeweiligen $\overline{\Gamma}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkten sind durch k'' und φ'' gegeben. Damit erhält man nach Gl. (2.60) und unter Berücksichtigung der gemessenen Spin-Polarisationsgrade S die in Tab. 5.4 angegebenen Werte. Die einzelnen Komponenten der Spin-Polarisationsvektoren stimmen demnach sehr gut mit den berechneten Werten überein. Lediglich die gemessenen S_z -Komponenten der Peaks **a** und **f** weisen im Vergleich zur Berechnung ein umgekehrtes Vorzeichen auf, was möglicherweise durch das niedrige absolute Messsignal und damit verbundene Ungenauigkeiten in der Rechnung bedingt ist (s. Abschnitt zu den SR-ARPES-Messungen ab S. 119). Die selben Peaks liegen jeweils ungefähr in $\overline{\Gamma K}$ -Richtungen ($\varphi'' = \pm 150^\circ$) und entsprechen dem $|\Phi^+\rangle$ -Zustand. Nach REN sind die Komponenten der Spin-Polarisation dieses Teilbandes in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung (k_y -Richtung mit $k_y > 0$, d. h. $\varphi'' = +90^\circ$) $S_{x,H3}^+ = +44\%$, $S_{x,T4}^+ = +6\%$, $S_{z,H3}^+ = +39\%$ und $S_{z,T4}^+ = +52\%$ (s. Tab. 5.1, [48]). Wegen der zur Berechnung verschiedenen Winkel φ'' ergeben sich aus der Messung umgerechnet $S_{x,a} = +25,0\%$ und $S_{x,f} = +21,8\%$, was in etwa dem Mittelwert $\overline{S_x^+} = +25\%$ von $S_{x,H3}^+$ und $S_{x,T4}^+$ entspricht. Dies passt zur Domänenstruktur der SIC-Phase, die beide Konfigurationen mit gleichen Flächenanteilen beinhaltet. Die von der Messung auf die Koordinaten von REN umgerechnete S_z -Komponente von Peak **a** hat ein umgekehrtes Vorzeichen, sodass $S_{z,a} = -0,9\%$ ist. $S_{z,f} = -16,3\%$ hingegen bleibt unverändert (Vgl. Abb. 5.20). Wie zu sehen ist und bereits erwähnt wurde, stimmen die Vorzeichen der gemessenen S_z -Komponenten nicht zur Theorie. Außerdem sind beide Beträge deutlich kleiner als der Mittelwert $\overline{S_z^+} = +45,5\%$ der Berechnung von REN. Die mit den berechneten Rashba-Parametern erhaltenen Spin-Polarisationen sind analog zu dieser Betrachtung $S_{x,a} = +22,5\%$, $S_{x,f} = +23,9\%$, $S_{z,a} = +13,1\%$ und

Band, Peak	Position		Spin-Polarisation Messung				Spin-Polarisation Berechnung		
	Wellen- vektor k''	Winkel φ''	S	S_x	S_y	S_z	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	$^\circ$	%	%	%	%	%	%	%
S1, a	0,373	147,2	26,0	+6,1	+25,3	+0,9	+12,2	+18,9	-13,1
S1, b	0,448	134,4	49,1	-27,8	-15,4	+37,4	-31,5	-30,8	+21,7
S1, e	0,434	-136,3	22,9	+15,6	-6,5	-15,5	+14,0	-14,7	-10,6
S1, f	0,364	-149,5	27,6	-14,6	+16,8	-16,3	-12,2	+20,6	+13,7

Tabelle 5.4: Vergleich der gemessenen und berechneten Spin-Polarisation des S1-Bandes der SIC-Phase in k_y -Richtung: Die Koordinaten k'' und φ'' sind relativ zu den jeweiligen $\bar{\Gamma}_{\sqrt{3}\times\sqrt{3}}$ -Punkten der 2. SBZs der $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion angegeben. Die berechnete Spin-Polarisation durch Gl. (2.60) folgt aus den berechneten Werten der Rashba-Parameter unter Berücksichtigung der endlichen gemessenen Spin-Polarisationsgrade S .



(a) $S^+(\mathbf{k})$ mit Isoenergielinien von $E_+(\mathbf{k})$ am Fermi-Niveau.

(b) $S^-(\mathbf{k})$ mit Isoenergielinien von $E_-(\mathbf{k})$ am Fermi-Niveau.

Abbildung 5.20: Berechnete Spin-Textur des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase: Die Vektoren zeigen die Richtung der *in-plane*-Spin-Polarisation und mit ihrer Länge ihren Betrag an. Die Länge der Vektoren bei $k_y = 0$ entspricht $S_z^\pm = 0$. Rot bzw. blau hinterlegte Bereiche kennzeichnen die *out-of-plane*-Spin-Polarisation (S_z^\pm -Komponente, lineare Farbskala). Die Berechnungen sind mit $S^\pm = 100\%$ durchgeführt worden. Die Isoenergielinien des S1-Bandes am Fermi-Niveau sind durch die rote Linie in (a) und die blaue Linie in (b) dargestellt. Sie stellen aufgrund der oberhalb von E_F lochartigen Dispersion gleichzeitig den äußeren Rand für die Gültigkeit der gezeigten Spin-Textur dar.

$S_{z,f} = -13,7\%$. Die S_x -Komponenten passen wiederum sehr gut zum Mittelwert $\overline{S_x^+}$ bezüglich der Berechnung von REN, wohingegen für die S_z -Komponenten zumindest das Vorzeichen stimmt.

Die mittels Gl. (2.60) berechnete Spin-Textur und -Polarisation des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase ist mit den berechneten Rashba-Parametern und $S^\pm = 100\%$ in Abb. 5.20 für beide Teilbänder zusammen mit den Isoenergielinien am Fermi-Niveau dargestellt. Die Darstellung zeigt nochmals eindrücklich, dass eine vollständige *in-plane*-Spin-Polarisation im C_{3v} -Modell lediglich in den $\overline{\Gamma M}$ -Richtungen vorliegt.

VERGLEICH MIT DER (1×1) -PHASE

Die SIC-Phase geht bei hohen Temperaturen durch einen reversiblen Phasenübergang Ordnung in die (1×1) -Phase über (Vgl. Abb. 4.2, [44, 356, 401]). Die Bandstruktur der (1×1) -Phase wurde für $\Theta_{Pb} = 1$ ML mittels DFT berechnet [166, 460] und für $\Theta_{Pb} = 1,20$ ML mit ARPES vermessen [421, 422] (Weitere Details s. Kap. 4.2.6). Berechnungen und Messungen für $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML fehlen bislang.

An dieser Stelle soll der Versuch einer rein graphischen Konstruktion der Bandstruktur der (1×1) -Phase bei $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML dargestellt und diskutiert werden. Dies ist u. a. deshalb sinnvoll, um die komplexe Bandstruktur der SIC-Phase besser zu verstehen und um eine Vorhersage für etwaige ARPES-Messungen zu erhalten. Nachteilig ist hingegen, dass eine rein graphische Konstruktion keine Details der Dispersionen der Bänder und kein Strukturmodell liefern kann. Zur Vereinfachung wird zudem auf die Spin-Aufspaltung der Bänder verzichtet. Nach [460] bedeutet diese Vereinfachung bei $\Theta_{Pb} = 1$ ML eine Nichtberücksichtigung des Si-Substrats in der Berechnung der Bandstruktur, sodass lediglich eine freistehende Monolage betrachtet wird.

Die graphische Konstruktion ist in Abb. 5.21 dargestellt und in ihren Teilabbildungen in einzelne Schritte zerlegt. Ausgangspunkte für die Betrachtung sind zum einen die Bandstruktur der (1×1) -Phase bei $\Theta_{Pb} = 1$ ML als freistehende Monolage (s. Abb. 5.21 (a), [325, 460]) und zum anderen die Bandstruktur der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bei $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML in T4-Konfiguration nach SAKONG (s. Abb. 5.6, [47]) unter Vernachlässigung der Spin-Aufspaltung der Oberflächenbänder (schwarze Linien in Abb. 5.21 (d)). Bei der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist neben den bereits diskutierten Pb-induzierten Oberflächenbändern S1/ S1*, S2 und S3 ein weiteres Band S4 aus dem unbesetzten Teil der Bandstruktur eingezeichnet (s. a. Abb. 5.6; dort nicht näher bezeichnet). Wie sich zeigt, ist dieses Band notwendig, um die Konstruktion konsistent mit den vorhandenen Messungen und Berechnungen zu gestalten. Bei der (1×1) -Phase in Abb. 5.21 (a) sind die drei berechneten Bänder der freistehenden Monolage aus [325, 460] sowohl mit (schwarze Linien) als auch ohne SOC (farbige Linien) gezeigt. Im Fall mit SOC sind die Bänder vollständig hybridisiert, sodass keinerlei Kreuzungspunkte mehr vorliegen. Die Bandstruktur ohne SOC entspricht nach [126] der erwarteten Bandstruktur im *Tight-Binding*-Modell für die drei beteiligten $6p$ -Orbitale ($6p_x$, $6p_y$, $6p_z$).

Der erste Schritt der Konstruktion ist die Anpassung der Bandstruktur der (1×1) -Phase mit $\Theta_{Pb} = 1$ ML auf $\Theta_{Pb} = 4/3$ ML (s. Abb. 5.21 (b)). Ohne Berücksichtigung der SOC werden die Dispersionen der drei $6p$ -Orbitale aus (a) direkt übernommen und ein zusätzliches $6p_z$ -Orbital mit einer größeren Bandbreite hinzugefügt (Skalierung der Energie im Vergleich zum anderen $6p_z$ -Orbital; orangefarbene Linie). Dieser Schritt lässt sich mit der erhöhten Pb-Bedeckung begründen und auf das zusätzliche Pb-Atom pro $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle in der Tieftemperaturphase zurückführen. Mit Berücksichtigung der SOC ergeben sich aus diesen

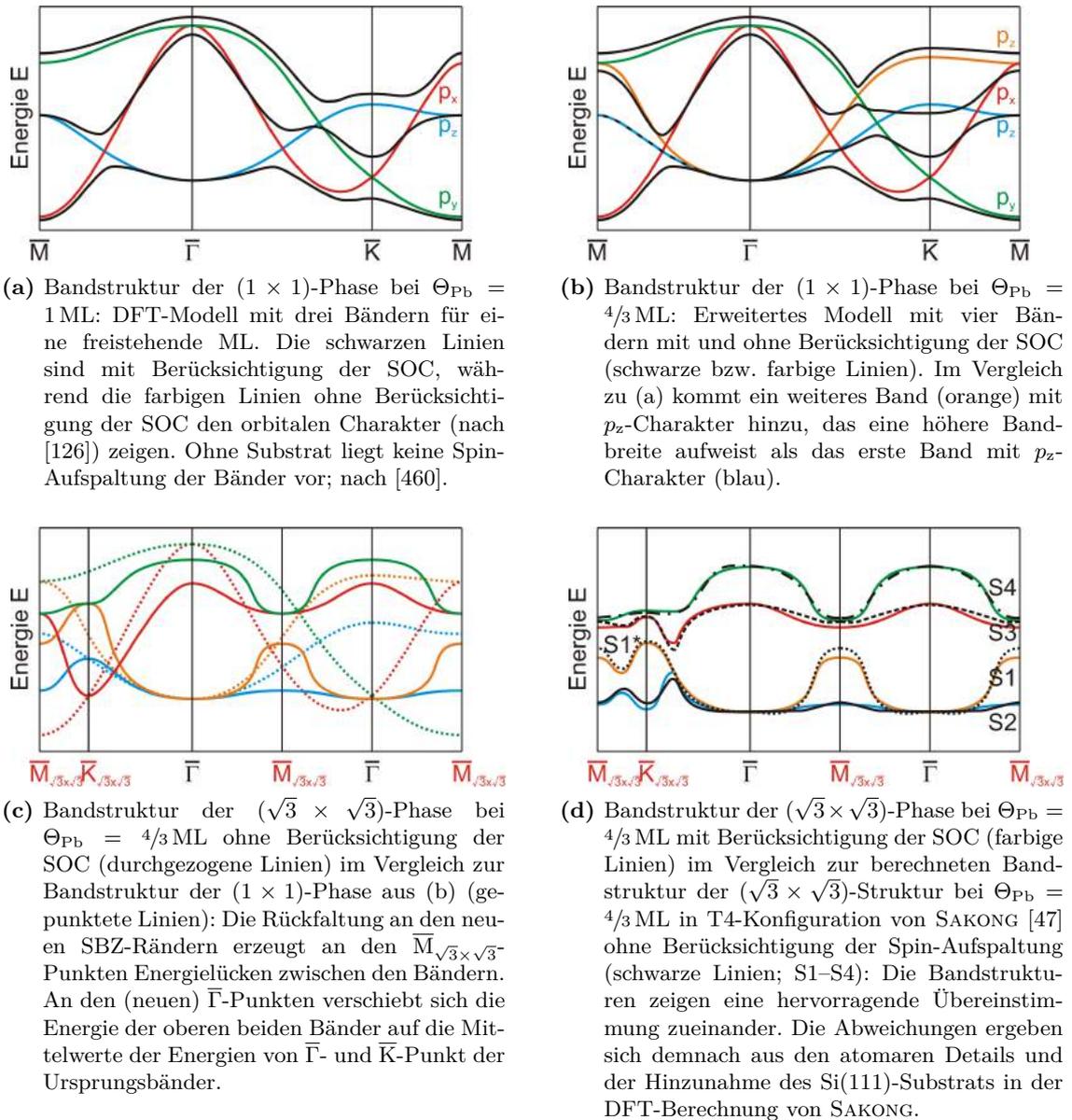


Abbildung 5.21: Graphische Entwicklung der Bandstruktur der SIC-Phase aus der (1×1) -Phase: Eine systematische Konstruktion der Pb-induzierten Oberflächenbänder unter Vernachlässigung der Spin-Aufspaltung durch das Si(111)-Substrat zeigt die Verbindung der SIC-Phase mit der (1×1) -Phase. Weitere Details s. Text.

vier Orbitalen wie in (a) die vollständig hybridisierten Bänder (schwarze Linien).

Der zweite Schritt der Konstruktion ist die Einführung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Periodizität und der damit verbundenen Rückklappprozesse und Bandlückenöffnungen an den neuen Rändern der SBZ. Die gepunkteten Linien in Abb. 5.21 (c) zeigen nochmals den Verlauf der Bänder aus (b) ohne SOC. Durch die neue Periodizität der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wird der ehemalige

\bar{K} -Punkt nun zum $\bar{\Gamma}$ -Punkt. Der neue $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt liegt auf $2/3$ der Strecke zwischen $\bar{\Gamma}$ - und ehemaligem \bar{M} -Punkt (jetzt $\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt). Zwischen den beiden $\bar{\Gamma}$ -Punkten liegt mittig ein weiterer $\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt. Die Banddispersionen (ohne Berücksichtigung der SOC) passen sich nun folgendermaßen an diese neue Periodizität an: An den $\bar{M}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkten hybridisieren jeweils zwei Bänder miteinander (grün und orange gepunktete Linien zu grüner und orange-farbener Linie, sowie rot und blau gepunktete Linien zu roter und blauer Linie) und öffnen dadurch Energielücken. Die Energien der so hybridisierten Bänder an den $\bar{\Gamma}$ -Punkten erhält man aus der Mittelung der Energien der Bänder der (1×1) -Phase an $\bar{\Gamma}$ - und \bar{K} -Punkt. Vom $\bar{\Gamma}$ -Punkt zum $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt ergeben sich lediglich kleine Anpassungen der Bandstruktur.

Der dritte und letzte Schritt ist die erneute Hinzunahme der SOC zu den in Abb. 5.21 (c) erhaltenen hybridisierten Bändern mit $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Periodizität. Das Ergebnis ist in Abb. 5.21 (d) durch die farbigen Linien dargestellt. Die SOC hybridisiert die Bänder erneut, sodass jegliche Kreuzung vermieden wird (Vgl. Kap. 2.5). Die Stärke der SOC (Größe der Energielücken) ist lokal an die Stärke der SOC in (b) angepasst. Der Vergleich mit der mittels DFT berechneten Bandstruktur von SAKONG (schwarze Linien in (d)) zeigt nun eine mehr als eindeutige Übereinstimmung der grundlegenden Dispersionsverläufe der Oberflächenbänder S1/S1*, S2, S3 und S4 der SIC-Phase. Die lediglich kleinen Unterschiede zwischen dieser graphischen Konstruktion und der DFT-Berechnung stecken demnach in der fehlenden Kenntnis der genauen Stärke der SOC in der graphischen Konstruktion, sowie in der Berücksichtigung des Si-Substrats in der DFT-Berechnung im Vergleich zur (1×1) -Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1 \text{ ML}$ in (a).

Hiermit ist durch graphische Entwicklung gezeigt, dass die Bandstrukturen der (1×1) - und der SIC-Phase ineinander überführbar sind. Zudem wird für $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$ ein viertes Oberflächenband in der Hochtemperatur- (1×1) -Phase vorhergesagt, das grundlegend einen $6p_z$ -Charakter aufweist.

VERGLEICH DER SIC-PHASE MIT β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$

Eng mit der SIC-Phase verwandt ist die β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$. Die Dichte der Pb-Atome ist mit $N_{\text{Pb}} = 9,58 \cdot 10^{14} \text{ Atome/cm}^2$ ca. 8,6 % geringer als auf Si(111), da die Gitterkonstante des Ge(111)-Substrats ca. 4,2 % größer ist als die von Si(111). Daher ist die Gitterfehlpassung von Pb auf Ge(111) mit lediglich 1 % deutlich geringer als auf Si(111) (ca. 5 %), sodass kaum mechanischer Stress auftritt (Vgl. Kap. 4.2.3, [435, 442, 445]). Daher und aufgrund der C_{3v} -Symmetrie der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Struktur (s. Tab. 2.1) bildet sie eine homogene Phase, die lediglich durch Substratstufen und Domänenwände an Korngrenzen⁷⁹ unterbrochen wird.

Da die atomare Struktur der β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase somit der idealen Struktur der SIC-Phase von Pb/Si(111) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$ ohne Domänenwänden gleicht und keine lokalen Symmetriebrüche vorliegen, ist grundsätzlich eine ähnliche elektronische Bandstruktur zu erwarten. Die geringere Pb-Konzentration (bzw. die größere Gitterkonstante) auf Ge(111) sollte in diesem Szenario zu einer leicht schwächeren SOI führen. Diese Erwartungen werden durch ARPES-Messungen [537, 544, 554, 555] und DFT-Berechnungen [48, 537, 538, 556] gestützt. Die Oberflächenbänder S1-S3 finden sich dabei aufgrund der veränderten Details der atomaren Geometrien und Bindungen und der schwächeren SOI mit leicht veränderten Dispersionen wieder, entsprechen aber qualitativ den hier gemessenen Dispersionen der

⁷⁹ Hier ist der Versatz der Einheitszellen $1/3$ des Gittervektors.

SIC-Phase von Pb/Si(111). Die Oberflächenbänder zeigen ebenso Spin-Aufspaltungen, deren Größe vergleichbar ist mit denen der SIC-Phase von Pb/Si(111) ($\Delta k = 0,04 \text{ \AA}^{-1}$ bei E_F in [544]), auch ist die Spin-Textur der *in-plane*-Komponenten des S1-Bandes gleich, sodass die Rashba-Koeffizienten $\alpha_{R,i}$ ebenfalls negativ sind (Vgl. [537, 538, 544, 555]; das Vorzeichen der Rashba-Koeffizienten wurde in der Literatur nicht diskutiert und lediglich der Betrag angegeben). Die in der Literatur berechneten Werte der Rashba-Koeffizienten ($|\alpha_R| = 0,24 \text{ eV \AA}$ für $E_B > 0,2 \text{ eV}$ in [544], $|\alpha_R| = 0,35 \text{ eV \AA}$ an E_F in [121]) und effektiven Massen ($m_{F,S1}^* = 0,028 m_e$ in [544]) sind aufgrund der nicht berücksichtigten Abweichungen vom Modell des quasi-freien Elektronengases, wie sie hier betrachtet wurden, jedoch nur schwer vergleichbar. Die Fermi-Fläche zeigt wie auch auf Si(111) ein stark ausgeprägtes hexagonales *Warping* [538, 544]. Das einzige metallische Band der β -Pb/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase ist wie bei Pb/Si(111) das S1-Band. Auch zeigt das S2-Band eine Zeeman-Aufspaltung ΔE_Z vergleichbarer Größe um die $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte [48, 537, 538, 554, 556]⁸⁰. Der orbitale Charakter der Oberflächenbänder und die projizierte Ladungsträgerdichte sind ebenfalls sehr ähnlich zu Pb/Si(111) (Vgl. [48, 537, 556] für Pb/Ge(111) mit [48] für Pb/Si(111)). Die Annahme von MORIKAWA, dass die β -Pb/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase lediglich eine Bedeckung von $\Theta_{Pb} = 1 \text{ ML}$ habe [557], lässt sich aufgrund der vielen anderen Untersuchungen an dieser Phase nicht bestätigen. Vielmehr ist anzunehmen, dass MORIKAWA tatsächlich Messungen an einer Pb/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase mit den angenommenen $\Theta_{Pb} = 1 \text{ ML}$ gemacht hat, da die in [557] gemessene Bandstruktur von den anderen Bandstrukturen stark abweicht.

VERGLEICH MIT WEITEREN VERWANDTEN SYSTEMEN

Auch andere Adsorbate als Pb zeigen auf Si(111) und Ge(111) interessante, durch (effektive) Wechselwirkungen hervorgerufene Effekte, wie Spin-polarisierte Oberflächenbänder, *Warping* und *Nesting*. Aufgrund der Vielzahl der in den letzten Jahren analysierten Systeme soll an dieser Stelle lediglich auf eine kleine Auswahl eingegangen werden, die starke Ähnlichkeiten zu den Effekten der SIC-Phase zeigen. Die Oberflächenzustände von Tl/Si(111)-(1 × 1) und Tl/Ge(111)-(1 × 1) wurden dabei bereits im Vergleich zum S2-Band um den $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt diskutiert (s. Diskussion zu den SR-ARPES-Messungen ab S. 127).

Wie die idealen ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktionen von Pb/Si(111) und Pb/Ge(111) mit $\Theta_{Pb} = 4/3 \text{ ML}$ gehören auch die Rekonstruktionen von Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) und β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) mit je 1 ML Bedeckung zu den Systemen der Raumgruppe $p31m$ mit C_{3v} -Symmetrie im Realraum und an den $\bar{\Gamma}$ - und $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkten im \mathbb{K} -Raum. Auch β -Au/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) und Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) gehören zur selben Raumgruppe.

Für die Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion wurde in ARPES-Messungen wie bei der SIC-Phase von Pb/Si(111) ein ähnlich stark ausgeprägtes hexagonales *Warping* der Fermi-Fläche des metallischen Oberflächenzustandes gefunden [104, 105]. Spin-aufgelöste Messungen und DFT-Berechnungen haben zudem gezeigt, dass dieses Band mit $\Delta k_R = 0,025 \text{ \AA}^{-1}$ ebenso eine Rashba-Aufspaltung in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung mit starker *out-of-plane*-Spin-Polarisation aufweist ($|\overline{S}_z| = 94\%$; Messung SIC-Phase Pb/Si(111) $|\overline{S}_z| \approx 9\%$, s. Tab. 5.4), es in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung jedoch keine Spin-Aufspaltung hat [104, 105, 153]. Die Modellierung der effektiven Wechselwirkung dieses Bandes wurde daher mit einem gegenüber Gl. (5.16) modifizierten Hamilton-Operator durchgeführt, liefert für die \mathbf{k}^6 -Terme und den linearen Rashba-Effekt nahe des Fermi-Niveaus aber ähnliche Werte wie für die SIC-Phase von Pb/Si(111) [105, 153,

⁸⁰ In [554] sind die Hochsymmetriepunkte teilweise falsch bezeichnet worden.

558].

Die β -Au/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Au}} = 1 \text{ ML}$ besitzt wie die SIC-Phase von Pb/Si(111) ebenfalls Domänengrenzen, die jedoch mäandrieren und ungeordnet sind [559, 560]. In ARPES-Messungen ist das metallische Band daher nur schlecht aufzulösen und die Elektronenfüllung zudem sehr gering [561]. Erst die Adsorption kleiner Mengen anderer Metallatome wie Tl, In, Na oder Cs ordnet die Oberflächenstruktur zu einer perfekten ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion [539, 540, 561, 562]. Der nun in ARPES-Messungen deutlich sichtbare metallische Oberflächenzustand zeigt abhängig vom adsorbierten Element und der Zusatzbedeckung unterschiedlich große Rashba-Aufspaltungen (in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung mit starker *out-of-plane*-Spin-Polarisation) und ein ebenfalls stark ausgeprägtes *Warping* [539, 540].

An der Oberfläche der Bi/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Bi}} = 1 \text{ ML}$ wurden ebenfalls bereits SR-ARPES-Messungen durchgeführt. Dabei wurde am $\overline{\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt eine lochartige Rashba-Aufspaltung eines Oberflächenresonanzbandes mit einem Rashba-Parameter $\alpha_{\text{R}} = 1,8 \text{ eV \AA}$ gefunden [563].

Zahlreichere Erkenntnisse gibt es über die β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion. Wie für Bi/Ge(111) existiert am $\overline{\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt eine lochartige Rashba-Aufspaltung eines Bandes mit einem Rashba-Parameter $\alpha_{\text{R}} = 1,4 - 2,3 \text{ eV \AA}$, jedoch handelt es sich hier um einen Oberflächenzustand [108, 109, 564]. Eine Modellierung dieses Zustands erklärt die Dispersion dieses Bandes darüber hinaus mit einem zusätzlichen Anisotropieterm $\alpha_3^{\text{A}} = 4,8 \text{ eV \AA}^3$ des Rashba-Effekts in 3. Ordnung in \mathbf{k} , was zu einer partiellen *out-of-plane*-Spin-Polarisation führen sollte (Vgl. Kap. 2.2.1) [564]. Die Rashba-Aufspaltung des selben Bandes am $\overline{\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt wurde bereits 1987 anhand Spin-integrierter ARPES-Messungen und Symmetrieüberlegungen vorhergesagt [565] und ab 2009 mittels SR-ARPES [109] und DFT-Berechnungen [109, 145, 147] bestätigt. Zudem wurden bereits DFT-Berechnungen und erste ARPES-Messungen durchgeführt, wie Zusatzbedeckungen von Alkaliatomen die SOI dieses Systems beeinflussen [540, 566, 567]. Dabei entsteht ein zusätzlicher metallischer, Spin-aufgespaltener Oberflächenzustand, der ebenso ein sehr starkes *Warping* zeigt [540, 567]. Im Fall der Adsorption von $1/3 \text{ ML}$ Na durchstößt lediglich eines der beiden Teilbänder das Fermi-Niveau nahe des $\overline{\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punktes [540, 567], sodass sich dieses System möglicherweise (nach Verifizierung der Spin-Polarisation) für künftige Anwendungen in der Spintronik eignen könnte.

Da Bi und Sb isoelektronisch sind ($6p^3$ - bzw. $5p^3$ -Valenzelektronen), ähneln sich auch die atomare und elektronische Struktur von β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) und β -Sb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) ($\Theta_{\text{Sb}} = 1 \text{ ML}$). Die atomare SOI von Sb ist jedoch wesentlich geringer als die von Bi (Vgl. Tab. 2.2), sodass die Spin-Aufspaltungen der Bänder kleiner ausfallen ($\alpha_{\text{R}} = 0,66 \text{ eV \AA}$ am $\overline{\text{M}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt) [77].

Auch auf Tl/Si(111)-(1×1) wurde bereits ein weiteres Element adsorbiert, um die Bandstruktur zu beeinflussen. (Tl,Pb)/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1/3 \text{ ML}$ hat im Vergleich zu den bisher betrachteten Systemen zwei jeweils Spin-aufgespaltene, metallische Oberflächenbänder mit starkem hexagonalem *Warping* [540, 567, 568]. Das *Warping* ist für beide Bänder jedoch entgegengesetzt (inneres Band mit $\chi > 0$ wie bei der SIC-Phase von Pb/Si(111) und äußeres Band mit $\chi < 0$). Die Spin-Aufspaltungen und die Spin-Textur am Fermi-Niveau sind für beide Bänder ebenfalls unterschiedlich [540, 567, 568]. Darüber hinaus wird das System bei $T_{\text{C}} = 2,25 - 3,1 \text{ K}$ supraleitend [568, 569].

Im System (Tl,Sn)/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) mit Adsorption von 1 ML Sn auf 1 ML Tl/Si(111)-(1×1) entsteht dagegen lediglich ein metallischer Oberflächenzustand mit schwachem *Warping* und einer Rashba-Aufspaltung um $\Delta k_{\text{R}} = 0,037 \text{ \AA}^{-1}$, die nur minimal anisotrop ist [103].

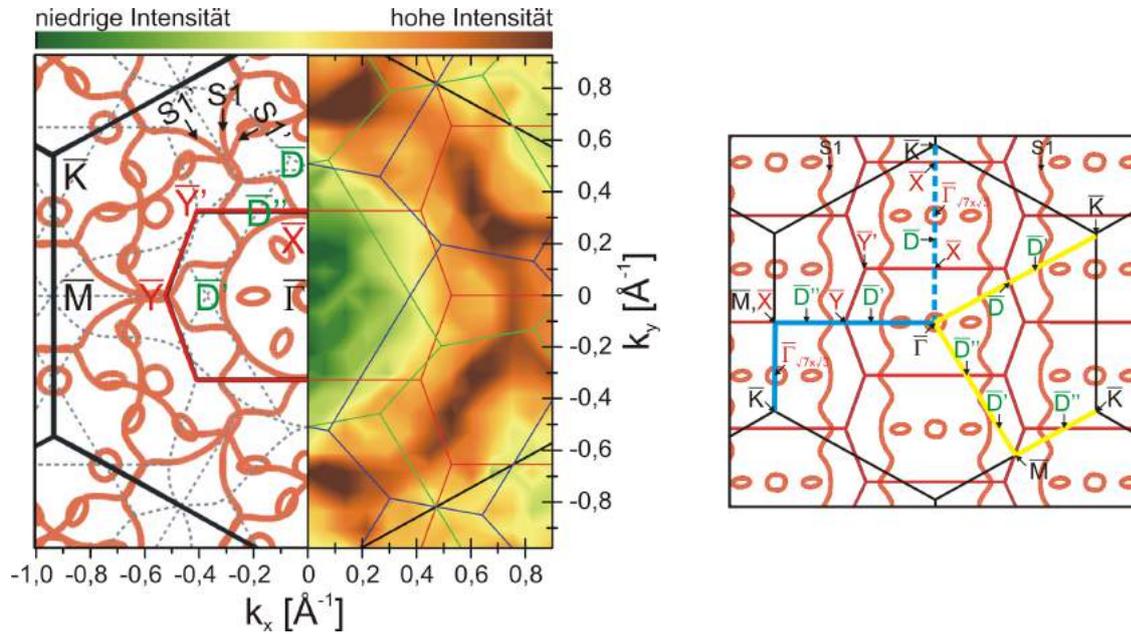
Dafür zeigt das Band eine starke *out-of-plane*-Spin-Polarisation von bis zu $|\overline{S_z}| \approx 45\%$ in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung.

5.2.2. $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion

Die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion gehört wie die SIC-Phase zur sog. α -Phase von Pb/Si(111) und hat eine Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML (s. Kap. 4.2.2). Sie hat aufgrund der C_{3v} -Rotations-symmetrie der Si(111)-Oberfläche insgesamt drei Rotationsdomänen, die jeweils um 120° zueinander gedreht sind. Jede der drei Domänen hat C_{1v} -Symmetrie (Vgl. Tab. 2.1) mit einer Spiegelebene entlang der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung des Si-Substrats bzw. entlang der $\overline{\Gamma Y}$ -Richtung der Rekonstruktion. Im Folgenden wird die Oberflächenstruktur verkürzt auch als *Triple Domain*-Struktur bezeichnet. In der Photoelektronenemission überlagern sich die Intensitäten I_i der einzelnen Rotationsdomänen zu einer Gesamtintensität I (s. a. Abb. 2.2 (c) u. (f)). Ungleiche Flächenanteile der Rotationsdomänen innerhalb des Messbereichs resultieren in asymmetrischen Intensitäten, was die Interpretation der Messdaten erschwert, auch werden dadurch die gemessenen Spin-Polarisationen beeinflusst (Vgl. Kap. 2.2.3). Die Imbalance der Verteilung der Rotationsdomänen im Messbereich der Probe wirkt sich auf die SR-ARPES-Messungen ähnlich aus wie dies bei der SIC-Phase der Fall ist (Vgl. Kap. 5.2.1). Überlagern sich zwei Bänder unterschiedlicher Rotationsdomänen in einem Punkt im \mathbb{K} -Raum, so überlagern sich auch ihre Spin-Polarisationen in der Messung. Den DFT-Berechnungen zufolge lassen sich derartige Effekte für die S1'–S4'-Bänder entlang aller untersuchten Richtungen erwarten (s. folgende Abschnitte). Ebenfalls erschwerend für die Interpretation der Messungen ist die Superdiffusion der Pb-Atome auf dem Si-Substrat (s. Kap. 4.2), aufgrund der sich innerhalb weniger Stunden selbst bei tiefen Temperaturen die Bedeckung der Oberfläche sukzessive erhöht und damit ein Phasenübergang zur DS-Phase stattfindet. Kontrollen der Oberflächenstruktur mit LEED haben während der Messungen an der SLS gezeigt, dass bei $T = 80$ K lediglich 4–8 Stunden für die ARPES-Messungen an der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zur Verfügung standen.

DFT-Berechnungen und ARPES-Messung der Fermi-Fläche

Abb. 5.22 zeigt die mittels DFT berechneten FSMs der *Single Domain*- und der *Triple Domain*-Struktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion aus [45] neben einer mit ARPES gemessenen CEM an der Fermi-Energie E_F bei $T = 83$ K. Die Messung stimmt gut mit der Berechnung als auch mit früheren Messungen [138, 142, 421] überein, wobei in der Berechnung die SOC nicht berücksichtigt wurde, sodass die Spin-Aufspaltung der Bänder die Komplexität der Fermi-Fläche noch weiter vergrößert. Wegen der Überlagerung der Rotationsdomänen zeigt sich in der Messung eine Quasi- (1×1) -Periodizität. Lediglich das quasi-eindimensionale S1-Band (S1' für die anderen beiden Rotationsdomänen) schneidet in der Messung das Fermi-Niveau. Die elektronenartigen Taschen nahe des $\overline{\Gamma}$ -Punktes liegen in der Messung knapp oberhalb des Fermi-Niveaus und sind daher nicht erkennbar. In der 1. SBZ der Rekonstruktion ist die Intensität I der Messung aufgrund des Matrixelementeffekts wie bei der SIC-Phase erniedrigt [543]. Die Spin-Aufspaltung des S1/S1'-Bandes am Fermi-Niveau ist aufgrund der geringen gewählten Auflösung der Messung in Abb. 5.22 (a) nicht erkennbar.



(a) Berechnete FSM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion inklusive der Überlagerung der *Triple Domain*-Struktur in ARPES-Messungen (linke Seite; orangefarbene Linien, ohne Berücksichtigung der SOC; aus [45]) und gemessene CEM bei $E_B = E_F = 0$ eV, $T = 83$ K mit Überlagerung der SBZs (rechte Seite, logarithmische Farbskala). Schwarze Linien $Si(111)-(1 \times 1)$, graue bzw. rote, blaue und grüne Linien $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, sowie einige Hochsymmetriepunkte (Mit \bar{D} und \bar{D}' sind die Schnittpunkte der Ränder der 1. SBZs der beiden Rotationsdomänen in grün und blau mit der $\bar{\Gamma}\bar{K}$ - bzw. $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung bezeichnet, \bar{D}'' kennzeichnet die weiteren Schnittpunkte der Ränder der 1. SBZs in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung. In der CEM sind \bar{D}' und \bar{D}'' für die *Triple Domain*-Struktur äquivalent, für die *Single Domain*-Struktur jedoch nicht.). Das Experiment zeigt eine hohe Übereinstimmung mit der Berechnung. Lediglich das S1-Band (Orientierung s. (b), S1' für die weiteren Rotationsdomänen) schneidet E_F . In der 1. SBZ der Rekonstruktion ist die Intensität I der Messung aufgrund des Matrixelementeffekts wie bei der SIC-Phase erniedrigt [543]. Die Überlagerung der *Triple Domain*-Struktur resultiert in einer Quasi- (1×1) -Periodizität in der Messung.

(b) Berechnete FSM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion für eine einzelne Rotationsdomäne (*Single Domain*-Struktur) ohne Berücksichtigung der SOC. Die Fermi-Fläche zeigt die typische Linienform eines Quasi-1DEGs. Die Kreise und Ellipsen stammen von elektronenartigen Taschen, die das Fermi-Niveau in den Messungen nicht durchstoßen. Die gelben und blauen Linien zeigen die Richtungen der DFT-Berechnungen der Bandstruktur in Abb. 5.23 aus [45, 46] (Berechnung entlang der gestrichelten blauen Linie $[\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung] fehlt). Zudem sind wichtige Hochsymmetriepunkte markiert; angepasst, aus [45].

Abbildung 5.22: Berechnete FSMs und gemessene CEM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion.

DFT-Berechnungen der Bandstruktur

In Abb. 5.23 sind DFT-Berechnungen aus [45, 46] der Bandstruktur der *Single Domain*-Struktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ohne Berücksichtigung der SOC dargestellt⁸¹. Vier Bänder (S1–S4 bzw. S1'–S4'; Bezeichnung je nach Orientierung bzgl. der Spiegelebene

⁸¹ Eine weitere DFT-Berechnung findet sich für einen kleinen Ausschnitt der $\bar{K}\bar{M}\bar{K}$ -Richtung in [142].

der *Single Domain*-Struktur) befinden sich im Energiebereich der hier gezeigten ARPES-Messungen und sind farblich gekennzeichnet, wobei lediglich das S1/S1'-Band metallisch ist. Für die k_y -Richtung (weitere $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung) liegt keine eigene Berechnung vor, wobei es für die wie in Abb. 5.22 (b) orientierte *Single Domain*-Struktur in dieser Richtung keinerlei metallische Zustände gibt (s. Abb. 5.22 (b)), was den Charakter als Quasi-1DEG bestätigt. Die in Abb. 5.24 (c) eingezeichneten Dispersionen für diese Richtung (durchgezogene Linien) beruhen auf dem für die Rekonstruktion äquivalenten $\overline{\text{X}\Gamma}_{\sqrt{7}\times\sqrt{3}}$ -Abschnitt aus Abb. 5.23 (a).

Die Bandbreiten der vier Bänder sind den Berechnungen zufolge lediglich bis zu 1,12 eV groß, wobei das S4/S4'-Band mit nur 270 meV die kleinste und das S1/S1'-Band die größte Bandbreite aufweist. Dies ist vergleichbar mit den Bandbreiten der Zustände der SIC-Phase im selben Energiebereich, die bis zu 1,4 eV betragen (s. Kap. 5.2.1).

Aus den DFT-Berechnungen in [45, 46] lassen sich auch die mittleren Fermi-Wellenvektoren \overline{k}_F des S1/S1'-Bandes für die unterschiedlichen Richtungen (bei der Fermi-Energie des Experiments) bestimmen. In $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung sind nach Abb. 5.23 (a) zwei Werte für das S1-Band ermittelbar. Im Bereich $\overline{\Gamma\text{Y}}$ ist $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1},1} = 0,293 \text{ \AA}^{-1}$ (1. SBZ der Rekonstruktion) und im Bereich $\overline{\text{Y}\text{X}}$ (entlang des Randes der 2. SBZ der Rekonstruktion) $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1},2} = 0,629 \text{ \AA}^{-1}$ [45]. Aus den Schnitten für die beiden weiteren Rotationsdomänen mit der $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung lässt sich außerdem für die S1'-Bänder $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1}'} = 0,495 \text{ \AA}^{-1}$ ermitteln (s. Abb. 5.23 (b) u. (d)) [45, 46]. Im Vergleich dazu wurden auch Fermi-Wellenvektoren aus ARPES-Messungen von CHOI bestimmt [138]. Diese sind mit $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1},1} = 0,360 \text{ \AA}^{-1}$, $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1}'} = 0,510 \text{ \AA}^{-1}$ und $\overline{k}_{F,x}^{\text{S1},2} = 0,684 \text{ \AA}^{-1}$ leicht verschieden von den berechneten Werten, was zum einen an einem anderen Fermi-Niveau bei der Messung, zum anderen auch auf das abweichende Modell der Bandstruktur⁸² von CHOI zurückzuführen ist. Aus den ARPES-Messungen in [39] ergeben sich ähnliche Werte wie in den DFT-Berechnungen.

In $\overline{\text{K}\text{M}\text{K}}$ -Richtung geht aus den DFT-Berechnungen und ARPES-Messungen lediglich ein Fermi-Wellenvektor für die S1'-Bänder hervor. Dieser befindet sich vom $\overline{\text{M}}$ -Punkt aus gesehen nach [45, 46] bei $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}'} = 0,219 \text{ \AA}^{-1}$. Die ARPES-Messungen in [138, 142] kommen im Vergleich dazu auf einen ähnlichen Wert von $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}'} = 0,210 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}'} = 0,215 \text{ \AA}^{-1}$. Im $\overline{\text{M}}$ -Punkt berühren zudem die S2'-Bänder E_F (s. Abb. 5.23 (b)-(d)). Das in [142, 421, 422, 424] mit „R“ bezeichnete Band (hier LH/HH-Band) berührt die Fermi-Energie im $\overline{\Gamma}_{\sqrt{7}\times\sqrt{3}}$ -Punkt bei $k_y = 0,327 \text{ \AA}^{-1}$ dagegen nicht, da es an das Si-VBM gekoppelt ist und sein Maximum daher bei $E_B = 100 \text{ meV}$ liegt (s. Abschnitt zur $\overline{\text{K}\text{M}\text{K}}$ -Richtung ab S. 156).

Da in der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung das S1-Band das Fermi-Niveau nicht schneidet, stammen die Fermi-Wellenvektoren dieser Richtung ausschließlich von den S1'-Bändern der beiden anderen Rotationsdomänen. Aus Abb. 5.23 (c) ergeben sich nach [46] $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}',1} = 0,271 \text{ \AA}^{-1}$ und $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}',2} = 0,772 \text{ \AA}^{-1}$. Die ARPES-Messungen von CHOI in [138] kommen dagegen auf Werte von $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}',3} = 0,562 \text{ \AA}^{-1}$ und $\overline{k}_{F,y}^{\text{S1}',2} = 0,701 \text{ \AA}^{-1}$, wobei der niedrigere Wert nicht mit dem vom $\overline{\Gamma}$ -Punkt aus dispergierenden Band identisch ist, sondern zu einem weiteren Band gehören soll. Diese deutlichen Abweichungen hängen wiederum mit der vereinfachten Modellierung von CHOI zusammen, die hier von den DFT-Berechnungen stark verschieden ist. Die zwei experimentellen Fermi-Wellenvektoren lassen sich mit dem Knick der S1'-Bänder in der Dispersion im $\overline{\text{K}\text{D}'}$ -Abschnitt in Verbindung bringen.

Die Energien eines jeden Bandes sind unabhängig von der Orientierung der Rotationsdo-

⁸² DFT-Berechnungen lagen zum Zeitpunkt der Publikation noch nicht vor.

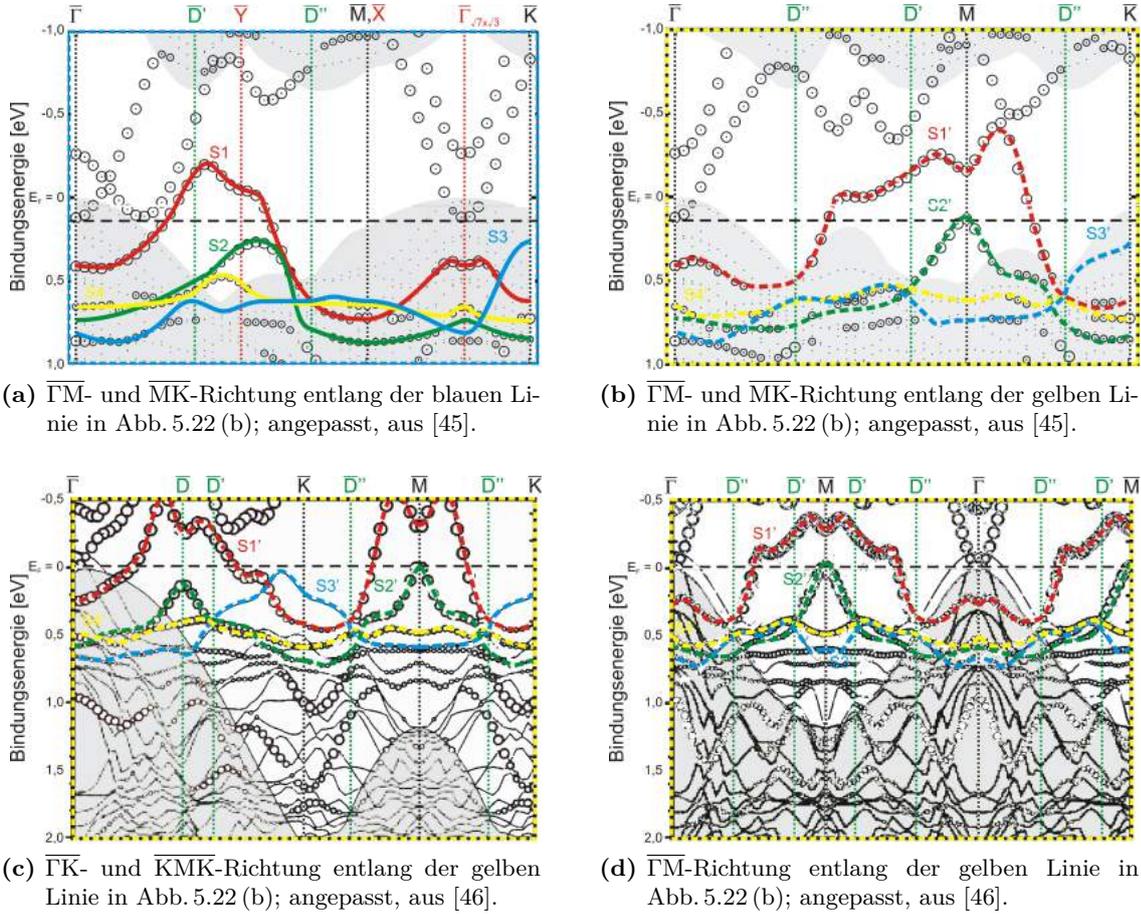


Abbildung 5.23: Berechnete *Single Domain*-Bandstruktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ohne Berücksichtigung der SOC: Die für die ARPES-Messungen relevanten Bänder sind mit farbigen Linien gekennzeichnet (S1–S4 in (a) bzw. S1'–S4' in (b)–(d), je nach Orientierung bzgl. der Spiegelebene der *Single Domain*-Struktur). Lediglich das S1/S1'-Band ist metallisch. Das Fermi-Niveau der hier gezeigten ARPES-Messungen ist durch die gestrichelten schwarzen Linien gekennzeichnet und liegt teilweise tiefer als in den Berechnungen. Die projizierten Zustände des *Si-Bulks* sind grau hinterlegt. Die gelb bzw. blau gestrichelten Ränder dienen der Orientierung in Abb. 5.22 (b).

mänen in den $\bar{\Gamma}$ - und $\bar{\Gamma}\sqrt{7 \times \sqrt{3}}$ -Punkten als auch in den \bar{K} -Punkten gleich. Für die \bar{M} -Punkte gilt dieser Zusammenhang dagegen nicht.

ARPES-Messungen der Bandstruktur

Das VBM am $\bar{\Gamma}$ -Punkt liegt in etwa bei $E_B = 100$ meV, wie die BMs in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ - und $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung zeigen (s. Abb. 5.24 (b) u. 5.26 (b)). Nach Gl. (5.5)–(5.7) ist die Schottky-Barriere damit $\Phi_{SB}(86\text{ K}) = 965$ meV hoch, was gut zu früheren Ergebnissen von UPS- und ARPES-

Messungen passt [135, 136, 138, 142, 421].

ARPES-MESSUNGEN IN $\overline{\Gamma\text{K}}$ -RICHTUNG

In Abb. 5.24 (a) u. (b) sind die Spin-integrierten ARPES-Messungen der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung dargestellt. Der MDC wurde dabei genau am Fermi-Niveau aufgenommen und zeigt lediglich zwei Peaks (**a** und **b**; Werte der Fermi-Wellenvektoren s. Tab. 5.5) im Bereich der 2. SBZ der Rekonstruktion. Die entsprechenden Peaks innerhalb der 1. SBZ der Rekonstruktion sind aufgrund des Matrixelementeffekts nicht auflösbar [543]. Der Vergleich mit der DFT-Berechnung für diese Richtung (s. Abb. 5.23 (c)) zeigt, dass es sich um das S1'-Band handelt, welches eine (mögliche) Spin-Aufspaltung zeigt. Die aus dem Fit an die Daten berechnete Kohärenzlänge dieses Zustands ist mit $\xi = 21,1 \text{ \AA}$ etwas größer als in [421]. Darüber hinaus zeigt die BM, dass dieses Band wie erwartet in Richtung des $\overline{\text{K}}$ -Punktes dispergiert. Die anderen Bänder in diesem Bereich sind aufgrund der geringen experimentellen Auflösung allein anhand der BM nicht einzeln auflösbar. Die BM ähnelt denen früherer ARPES-Messungen in [138, 142, 421].

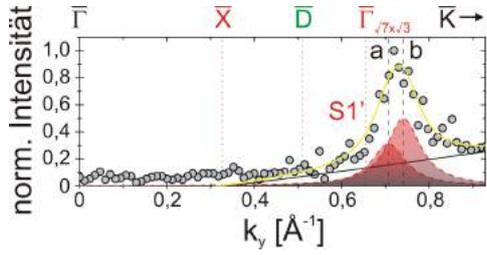
Abb. 5.24 (c) zeigt die selbe BM aus Abb. 5.24 (b), jedoch mit der Überlagerung der DFT-Berechnung der Dispersionen von HSU aus [46] (s. Abb. 5.23 (c); lediglich die Bänder im Bereich der Fermi-Energie sind eingezeichnet) und der Rashba-Aufspaltung des MDCs aus Abb. 5.24 (a). Die Bänder liegen sämtlich im Bereich erhöhter Intensität I (nur im Bereich $\overline{\Gamma\text{X}}$ ist die Intensität aufgrund des Matrixelementeffekts verringert [543]). Lediglich für das S1'-Band sind Spin-Aufspaltungen eingezeichnet, wobei in der Zeichnung lediglich ein Rashba-Effekt 1. Ordnung in \mathbf{k} angenommen wurde. Weitere etwaige Spin-Aufspaltungen der anderen Bänder sind aus den verfügbaren Daten nicht bestimmbar. Die Spin-Aufspaltung des S1'-Bandes im Bereich kleiner k_y -Werte ist mit dem gleichen Wert der Aufspaltung der Peaks **a** und **b** der Spin-aufgelösten Messung angenommen worden.

ARPES-MESSUNGEN IN $\overline{\Gamma\text{M}}$ -RICHTUNG

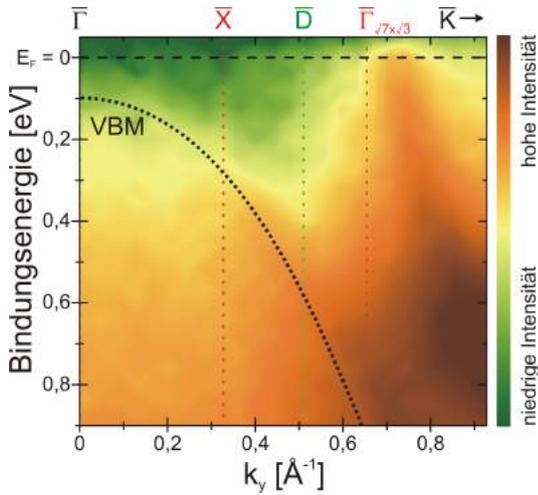
Die Spin-integrierten ARPES-Messungen zur $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung sind in Abb. 5.25 (a) u. (b) dargestellt. Der MDC in (a) wurde wie bei der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung am Fermi-Niveau aufgenommen und zeigt mehrere Peaks, die durch Vergleich mit den DFT-Berechnungen in Abb. 5.23 (a), (b) u. (d) unterschiedlichen Bändern zugeordnet werden können. Die Peaks **a** und **b** stammen vom S1-Band in der 1. SBZ der Rekonstruktion, während die Peaks **d** und **e** zwar ebenfalls zum S1-Band gehören, jedoch auf dem Rand der 2. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion liegen. Die

Richtung	\AA^{-1}	Band						
		S1				S1'	S2'	
$\overline{\Gamma\text{M}}$	$k_{\text{F},x}$	0,314	0,370	0,699	0,748	0,354	0,503	0,844
$\overline{\Gamma\text{K}}$	$k_{\text{F},y}$					0,707	0,741	
$\parallel \overline{\text{KMK}}$	$k_{\text{F},y}$					0,238	0,327	0,045

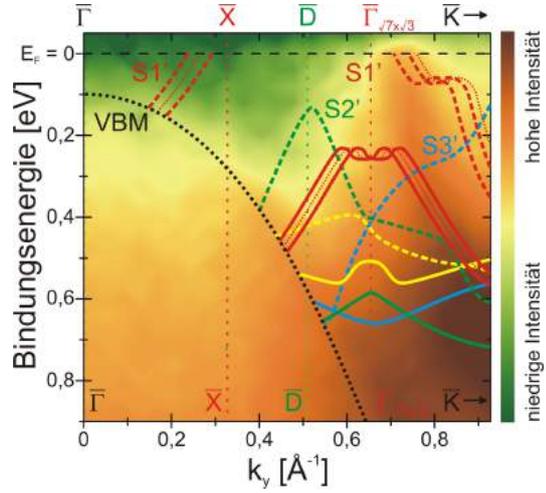
Tabelle 5.5: Fermi-Wellenvektoren der Spin-integrierten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Daten aus den Fits an die MDCs in Abb. 5.24 (a) u. 5.25 (a), sowie Abb. 5.26 (a). Die zwei weiteren Fermi-Wellenvektoren in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung bei kleineren k_y sind im MDC in Abb. 5.24 (a) aufgrund des Matrixelementeffekts innerhalb der 1. SBZ der Rekonstruktion nicht messbar.



(a) Spin-integrierter MDC: $E_B = E_F = 0$ meV, $T = 83$ K.



(b) BM: $T = 86$ K (log. Farbskala).

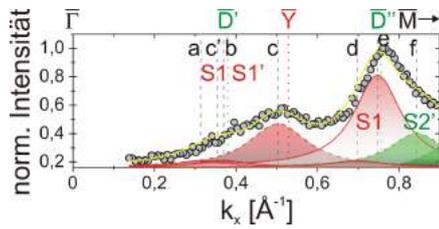


(c) BM aus (b) mit überlagertem Modell der Bandstruktur: Die dünnen gepunkteten Linien in (c) entsprechen den Dispersionen der Bänder in Abb. 5.23 ohne Berücksichtigung der SOC, ebenso wie die sonstigen Linien der Bänder bei höheren Bindungsenergien (Spin-Aufspaltung nicht bestimmt). Die Rashba-Aufspaltung des $S1'$ -Bandes entspricht der Aufspaltung der Peakpositionen des MDCs in (a).

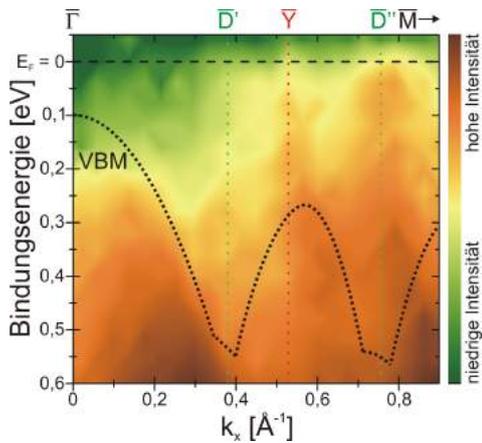
Abbildung 5.24: Spin-integrierter MDC und BM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung: Der Farbverlauf und die gestrichelten Linien der einzelnen Peaks in (a) dienen der Zuordnung nach der Orientierung der Bänder bzgl. der Symmetrieachsen der *Single Domain*-Struktur, ebenso wie die durchgezogenen bzw. gestrichelten Linien in (c). Der Messbereich des MDCs ist in (c) blau hinterlegt. Das VBM ist in (b) u. (c) durch die gepunkteten schwarzen Linien markiert. Die Hochsymmetriepunkte sind durch die weiteren gepunkteten Linien markiert.

Peaks **c** und **c'** stammen von den Schnitten der $S1'$ -Bänder der anderen beiden Rotationsdomänen durch die k_x -Achse. Außerdem berührt das $S2'$ -Band das Fermi-Niveau in Peak **f**. Die zugehörigen Fermi-Wellenvektoren aller Peaks sind in Tab. 5.5 aufgeführt. Insgesamt zeigt der MDC einen ähnlichen Intensitätsverlauf wie in [138], wobei jedoch das Fermi-Niveau leicht verschoben ist, sodass die Peakpositionen und -intensitäten leicht verschieden sind. Die BM in Abb. 5.25 (b) zeigt oberhalb des Si-VBM im Abschnitt $\overline{MD'}$ Bereiche erhöhter Intensität nahe des Fermi-Niveaus und stimmt gut mit den Messungen in [39, 138] überein.

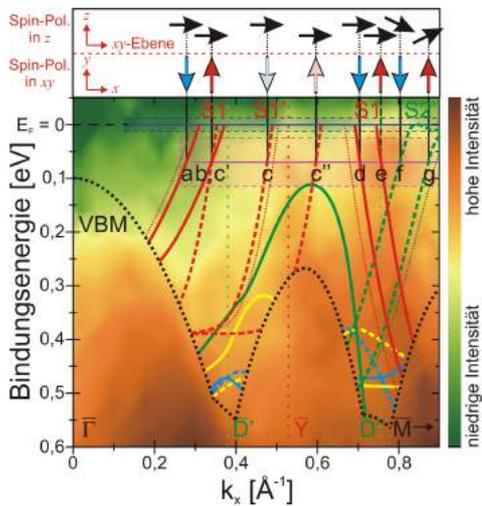
Basierend auf den DFT-Berechnungen in Abb. 5.23 (a), (b) u. (d) aus [45, 46] und dem Fit des Spin-aufgelösten MDCs in Abb. 5.25 (d) u. (e) u. Tab. 5.6 ist in Abb. 5.25 (c) das Modell der Bandstruktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion für die $\overline{\Gamma M}$ -Richtung über die BM aus Abb. 5.25 (b) gelegt. Der Spin-aufgelöste MDC zeigt die Spin-Aufspaltung des $S1$ -, $S1'$ -



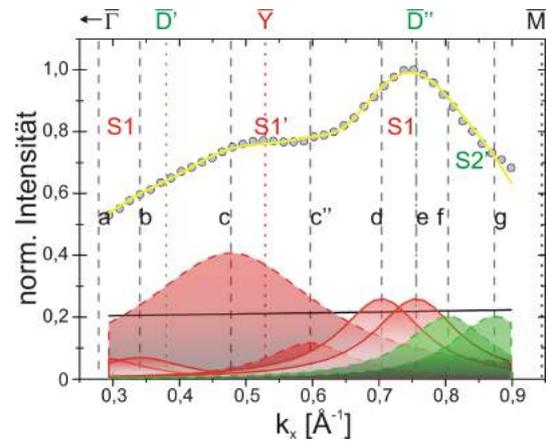
(a) Spin-integrierter MDC: $E_B = E_F = 0$ meV, $T = 83$ K. Fit der Peaks in Analogie zum Spin-aufgelösten MDC in (d).



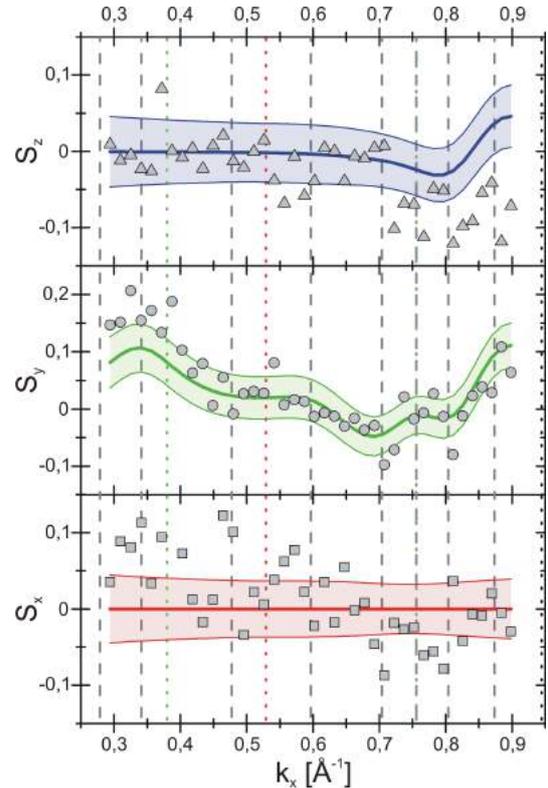
(b) BM: $T = 86$ K (log. Farbskala).



(c) BM aus (b) mit überlagertem Modell der Bandstruktur.



(d) Spin-aufgelöster MDC: Intensitätsverlauf und gefittete Peaks. $E_B = 70$ meV, $T = 75$ K.



(e) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} : $E_B = 70$ meV, $T = 75$ K. Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.

Abbildung 5.25: Spin-integrierte und -aufgelöste MDCs, BM, überlagertes Modell der Bandstruktur und Spin-Polarisation der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung: Die Spin-aufgespaltenen Bänder in (c) wurden in den magenta hinterlegten Bereichen vermessen (s. (d) u. (e)), die Orientierung der Spins ist darüber gezeigt (schwarze und rote/blau Pfeile; Werte in Tab. 5.6). Die weitere Gestaltung ist wie in Abb. 5.24.

Band, Peak	Position k_x	FWHM	Kohärenz- länge ξ	Spin-Polari- sationsgrad S	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	\AA^{-1}	\AA	%	%	%	%
S1, a	0,279*	0,140	14,319	11,3	± 0	-11,3	± 0
S1/S1', b/c'	0,341	0,139	14,375	100	± 0	+100	± 0
S1', c	0,478	0,316	6,333	0,7	± 0	-0,7	± 0
S1', c''	0,597	0,136	14,735	24,9	± 0	+24,9	± 0
S1, d	0,704	0,134	14,958	37,9	± 0	-37,9	± 0
S1, e	0,756	0,133	15,083	37,9	± 0	+37,9	± 0
S2', f	0,804	0,131	15,210	63,3	± 0	-56,8	-28,0
S2', g	0,873	0,130	15,414	63,3	± 0	+56,8	+28,0

* Peakposition außerhalb des Messbereichs, fixiert zur Stabilisierung des Fits.

Tabelle 5.6: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung: Oberflächensymmetrie beachtender Fit. MDC und Spin-Polarisation s. Abb. 5.25 (d) u. (e).

und S2'-Bandes bei einer Bindungsenergie von $E_B = 70$ meV. Die Aufspaltungen sind in Abb. 5.25 (c) durch den Rashba-Effekt in 1. Ordnung in \mathbf{k} , sowie die Spin-Orientierungen des Fits durch Pfeile über der BM dargestellt. Etwaige Spin-Aufspaltungen der anderen dargestellten Bänder konnten nicht mit der Messung ermittelt werden und sind daher nicht dargestellt, sondern lediglich die Dispersionen der DFT-Berechnungen. Aus dem die Oberflächensymmetrie beachtenden Fit an die Daten des Spin-aufgelösten MDC geht hervor, dass die Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} der Peaks **a** und **b**, **d** und **e**, sowie **f** und **g** paarweise antiparallel zueinander sind.

Für das S1-Band (und ebenso für die Bänder S2–S4) liegt in der k_x -Richtung die Spiegelebene der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (Vgl. Abb. 2.2 (c) u. 5.22 (b)). Deshalb sollten die gemessenen Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} der Peaks dieses Bandes in Abb. 5.25 (d) u. (e) u. Tab. 5.6 ausschließlich endliche S_y -Komponenten aufweisen, während $S_{x,z}$ verschwinden. Der dies berücksichtigende Fit erfüllt diese Bedingung für die Peaks **a**, **b**, **d** und **e** im Rahmen der Messgenauigkeit sehr gut. Das S1-Band erfüllt somit die erwartete C_{1v} -Symmetrie der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Wie der Fit der Spin-Polarisation zeigt, haben die Peaks **a** und **d** negative S_y -Komponenten und die Peaks **b** und **e** positive S_y -Komponenten. Dies deutet auf einen negativen Rashba-Koeffizienten hin. Der Spin-Polarisationsgrad von Peak **a** ist im Fit mit lediglich $S_a = 11,3\%$ deutlich geringer als von Peak **b** mit $S_b = 100\%$, was auf die verfälschende Position des Peaks **a** leicht außerhalb des Messbereichs des Spin-aufgelösten MDCs zurückzuführen ist. Die Spin-Polarisationsgrade der Peaks **d** und **e** sind mit $S_{d,e} = 37,9\%$ ebenfalls relativ hoch.

Für das S1'- und das S2'-Band stellt die k_x -Richtung dagegen keine Spiegelebene der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion dar. Somit sind für diese Bänder innerhalb ihrer Rotationsdomäne alle Orientierungen für die Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} entlang der k_x -Richtung möglich. Der Fit an die Daten der SR-ARPES-Messung zeigt nun, dass der Spin-Polarisationsgrad des S2'-Bandes (Peak **f** bei $k_x = 0,804 \text{\AA}^{-1}$ und Peak **g** bei $k_x = 0,873 \text{\AA}^{-1}$ in Abb. 5.25 (d) u. Tab. 5.6) mit $S_{f,g} = 63,3\%$ höher als beim S1-Band ist und die Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} dennoch keine endliche S_x -Komponente aufweisen. Die k_x -Richtung stellt für die beiden

Rotationsdomänen, die diese Bänder bilden, jedoch eine Symmetrieachse in ihrer Überlagerung in den ARPES-Messungen dar (Vgl. Kap. 2.2.3). Daher bedeutet das Messergebnis der Spin-Polarisationsvektoren, dass in etwa gleiche Flächenanteile der beiden Rotationsdomänen im Messbereich auf der Probe vorliegen.

Nach dem Spin-aufgelösten MDC bleiben für das S1'-Band auf den ersten Blick nur noch der sehr breite Peak **c** und Peak **c''** übrig. Die Analyse der CEM zeigt bei nahezu parallelem Verlauf der Spin-aufgespaltenen quasi-eindimensionalen S1/S1'-Bänder jedoch, dass das S1'-Band von Peak **b** bis Peak **c** nahezu parallel zur k_x -Richtung verläuft und ein weiterer Schnittpunkt nahe der Position von Peak **b** des S1-Bandes zu finden ist und sich beide somit überlagern. Der Fit zeigt, dass Peak **c** einen Spin-Polarisationsgrad von nur $S_c = 0,7\%$ hat (s. Tab. 5.6). Dies ist auf die Überlagerung der Intensitäten und Spin-Polarisationen der S1'-Bänder im Messbereich des Spin-aufgelösten MDC zurückzuführen, da auch die Teilbänder mit der umgekehrten Spin-Polarisation über einen größeren Bereich im k -Raum sehr nahe an der k_x -Achse verlaufen und damit mitgemessen wurden (Die Auflösung in k_y -Richtung beträgt in der Messung $\Delta k_{\pm} \approx \pm 0,03 \text{ \AA}^{-1}$; s. Kap. 3.3). Der parallele Verlauf des S1'-Bandes zur k_x -Achse in diesem Bereich erklärt auch die große Halbwertsbreite von Peak **c** mit einer FWHM von $0,316 \text{ \AA}^{-1}$. Der Schnittpunkt **c''** des S1'-Bandes mit der k_x -Achse mit dem im Vergleich zu den Peaks **c** und **c'** umgekehrten Spin-Polarisationsvektor findet sich bei $k_x = 0,597 \text{ \AA}^{-1}$.

Die Spin-Aufspaltungen entlang der $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung betragen nach dieser Analyse bei $E_B = 70 \text{ meV}$ für das S1-Band $\Delta k_{\text{R},x}^{\text{S1},1} = 0,062 \text{ \AA}^{-1}$ in der 1. SBZ der Rekonstruktion bzw. $\Delta k_{\text{R},x}^{\text{S1},2} = 0,052 \text{ \AA}^{-1}$ in der 2. SBZ der Rekonstruktion, für das S2'-Band $\Delta k_{\text{R},x}^{\text{S2}'}, = 0,069 \text{ \AA}^{-1}$ und für das S1'-Band (Peak **c** zu Peak **c''**) $\Delta k_{\text{R},x}^{\text{S1}'}, = 0,119 \text{ \AA}^{-1}$ (Vgl. Tab. 5.6). Legt man den Rashba-Effekt für die Aufspaltungen des S1/S1'-Bandes zugrunde, so lässt sich mit diesen Messdaten nach Tab. 2.3 der Rashba-Koeffizient α_1^{xy} (und in höherer Ordnung auch α_3^{xxxy} und α_3^{xyyy}) aus $\Delta k_{\text{R},x}^{\text{S1},1}$ für dieses Band bestimmen. In den weiteren Spin-Aufspaltungen sind die verschiedenen Rashba-Koeffizienten der C_{1v} -Symmetrie kombiniert (s. Diskussionsteil zum S1/S1'-Band ab S. 160). Beim S2'-Band liegt der Spin-Aufspaltung dagegen eine kompliziertere Struktur zugrunde (s. Diskussionsteil zum S2/S2'-Band ab S. 165).

ARPES-MESSUNGEN PARALLEL ZUR $\overline{\text{KMK}}$ -RICHTUNG

Auf den ersten Blick erscheinen die Spin-integrierten ARPES-Messungen parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung bei $k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$ in Abb. 5.26 (a) u. (b) ähnlich simpel wie die der $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung. Im Bereich der Fermi-Energie ist lediglich ein zur k_x -Achse symmetrisches, dispergierendes, metallisches Band sichtbar, das S1'-Band. Erst durch die Überlagerung mit den Bandstrukturen der DFT-Berechnungen (s. Abb. 5.23 (a)-(c); aus [45, 46] und in [142]) wird die ganze Komplexität deutlich (s. Abb. 5.26 (c)). Während die BM in Abb. 5.26 (b) bis auf das verschobene Fermi-Niveau der Messung in [138] sehr ähnlich ist, sind in [142, 422] an den $\overline{\Gamma_{\sqrt{7} \times \sqrt{3}}}$ -Punkten weitere wenig intensive, das Fermi-Niveau fast berührende Bänder zu finden („R“-Bänder in [142, 422]), die hier jedoch nicht auffindbar sind. Entweder liegt dies an der um $0,041 \text{ \AA}^{-1}$ zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung verschobenen Messung bei einer Auflösung von $\Delta k_{\pm} \approx \pm 0,03 \text{ \AA}^{-1}$ (s. Kap. 3.3) in Verbindung mit einer sehr steilen Dispersion, oder diese Bänder waren in ihrer Intensität zu schwach und/oder nicht auflösbar, oder aufgrund des Matrixelementeffekts aus [543] in Verbindung mit der verwendeten p -Polarisation des auf die Probe einfallenden Lichts waren die Bänder nicht messbar. Bei diesem hier nicht aufgelösten Band handelt es sich um die Replika-

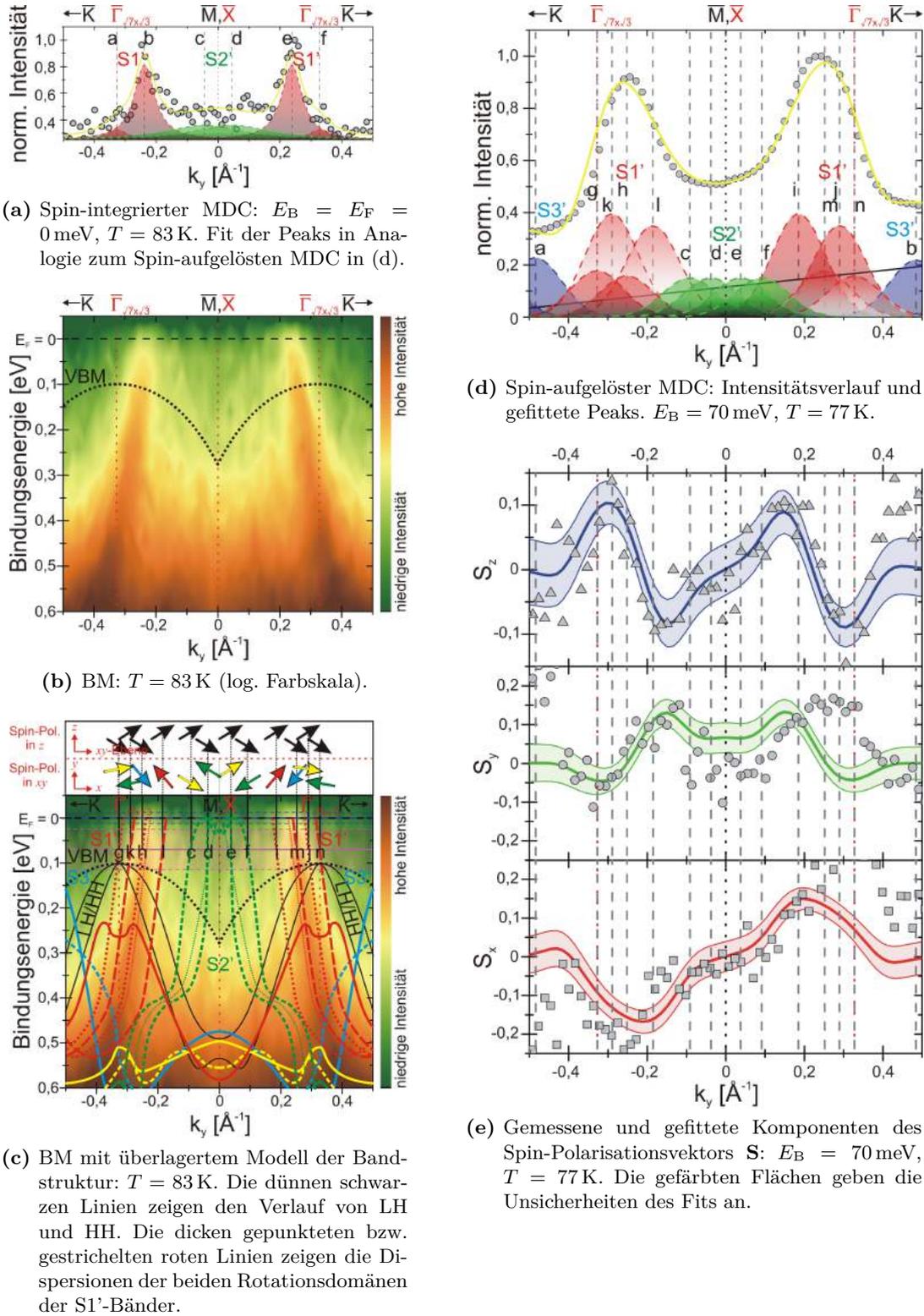


Abbildung 5.26: Spin-integrierte und -aufgelöste MDCs, BM, überlagertes Modell der Bandstruktur und Spin-Polarisation der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion parallel zur \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$): Die gestrichelten grauen Linien in (d) u. (e) markieren die Positionen der gefitteten Peaks (s. a. Tab. 5.7). Die weitere Gestaltung ist wie in Abb. 5.24.

Band, Peak	Position k_y	FWHM	Kohärenz- länge ξ	Spin-Polari- sationsgrad S	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	\AA^{-1}	\AA	%	%	%	%
S3', a	-0,484	0,137	14,643	0,0	–	–	–
S3', b	+0,484	0,137	14,643	0,0	–	–	–
S2', c	-0,092	0,140	14,313	43,8	+31,9	-19,7	+22,6
S2', d	-0,038	0,140	14,303	43,8	-31,9	+19,7	-22,6
S2', e	+0,038	0,140	14,303	43,8	+31,9	+19,7	+22,6
S2', f	+0,092	0,140	14,313	43,8	-31,9	-19,7	-22,6
S1', g	-0,327	0,138	14,454	60,9	+50,7	+8,9	-32,5
S1', h	-0,252	0,139	14,391	60,9	+33,1	-39,4	+32,5
S1', i	+0,185	0,139	14,349	60,9	+33,1	+39,4	+32,5
S1', j	+0,289	0,139	14,420	60,9	+50,7	-8,9	-32,5
S1', k	-0,289	0,139	14,420	60,9	-50,7	-8,9	+32,5
S1', l	-0,185	0,139	14,349	60,9	-33,1	+39,4	-32,5
S1', m	+0,252	0,139	14,391	60,9	-33,1	-39,4	-32,5
S1', n	+0,327	0,138	14,454	60,9	-50,7	+8,9	+32,5

Tabelle 5.7: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung ($k_x = 0,904 \text{\AA}^{-1}$): Symmetrisierter Fit. MDC und Spin-Polarisation s. Abb. 5.26 (d) u. (e).

strukturen des Si-VBM mit LH und HH an den $\overline{\Gamma}_{\sqrt{7} \times \sqrt{3}}$ -Punkten der Rekonstruktion (schwarze Linien in Abb. 5.26 (c)). Neben diesen Bändern existiert nach den DFT-Berechnungen im Bereich der Fermi-Energie zudem das lochartige, semimetallische S2'-Band⁸³, das im MDC in Abb. 5.26 (a) nur durch zwei wenig intensive, breite Peaks bei $k_y = \pm 0,045 \text{\AA}^{-1}$ sichtbar wird. Dieses Band ist in den BMs und MDCs in [138, 142, 422] besser aufgelöst als in den Messungen hier, zumal diese Spektren genau entlang der $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung gemessen wurden. Das S2'-Band scheint in der Messung in [138] aufgrund des verschobenen Fermi-Niveaus zudem selbiges zu durchstoßen, wie die Peaks des MDCs zeigen. Dagegen deuten die Messungen von KIM in einer Detailanalyse auf ein Maximum des S2'-Bandes bei $E_B = 19 \text{ meV}$ hin [142, 424].

Die Fermi-Wellenvektoren der S1'-Bänder aus dem Fit an den MDC in Abb. 5.26 (a) sind in Tab. 5.5 aufgeführt. Es sind bei positiven und negativen k_y -Werten jeweils lediglich zwei Peaks sichtbar. Die Aufspaltung dieser Peaks beträgt $\Delta k_{F,y}^{S1'} = 0,089 \text{\AA}^{-1}$.

Der Spin-aufgelöste MDC in Abb. 5.26 (d) u. (e) u. Tab. 5.7 bei $E_B = 70 \text{ meV}$ zeigt ebenfalls die Peaks der S1'-Bänder, des S2'- und des S3'-Bandes. Die Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S} der Peaks des Fits an die Daten sind zudem über der BM in Abb. 5.26 (c) dargestellt. Der Vergleich des Spin-integrierten mit dem Spin-aufgelösten MDC zeigt, dass sich die Intensitätsprofile der S1'-Bänder am Fermi-Niveau und 70 meV darunter deutlich voneinander unterscheiden, wie auch ein Blick auf die BM in Abb. 5.26 (b) bereits andeutet. Außerdem ist die Intensität nahe des $\overline{\text{X}}$ - bzw. $\overline{\text{M}}$ -Punktes beim Spin-aufgelösten MDC höher (Bereich des S2'-Bandes). Der Fit der Daten gelingt sowohl für die S1'-Bänder als auch das S2'-

⁸³ Das entsprechende Minimum des semimetallischen Valenzbandes befindet sich an den $\overline{\Gamma}_{\sqrt{7} \times \sqrt{3}}$ -Punkten (s. Abb. 5.23).

Band am besten mit insgesamt jeweils vier Peaks im Gegensatz zu zwei Peaks an E_F . Im Bereich der $S1'$ -Bänder lässt sich dies auf die Überlagerung der beiden Rotationsdomänen zurückführen. Beim $S2'$ -Band passt der Effekt – zusammen mit den gemessenen und gefitteten Spin-Polarisationen der Peaks **c-f** mit Spin-Polarisationsgraden $S = 32,5\%$ – zum Rashba-Effekt abseits der Hauptsymmetrierichtungen. Die Orientierung der Spins der Peaks des $S2'$ -Bandes zeigt dabei nicht genau entlang der Symmetrieachse in S_x -Richtung, sondern hat ähnlich große Anteile der S_y -Komponente. Dies lässt sich mit dem Abstand von $0,041 \text{ \AA}^{-1}$ in k_x -Richtung der Messung zur exakten \overline{KMK} -Richtung erklären.

Der Fit im Bereich des $S2'$ -Bandes ist dennoch nicht absolut eindeutig. Es können mehrere verschiedene Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S}_i zu jedem Peak (bei variierender Peakposition) gefittet werden. Im Einklang mit dem Rashba-Effekt, den vorliegenden Messdaten und der hochauflösenden FSM von CHOI in [138], die ein sog. *Fünferkreuz*⁸⁴ für das $S2'$ -Band zeigt, steht jedoch einzig das in Abb. 5.31 gezeigte Modell mit der entsprechenden Spin-Textur, die zur Spin-Polarisation des Fits in Abb. 5.26 (d) u. (e) u. Tab. 5.7 passt. Dabei dispergiert der kreuzförmige Innenteil der Isoenergielinien bei E_F mit zunehmender Bindungsenergie zu einem Oktagon (ggf. bei noch höherer Bindungsenergie zu einer Ellipse). Die äußere Raute rundet sich ebenfalls mit zunehmendem E_B ab.

Das $S3'$ -Band zeigt hingegen keine messbare Spin-Aufspaltung.

Die Spin-Polarisation des symmetrisierten Fits unterscheidet sich im Bereich der $S1'$ -Bänder leicht vom Messwert (s. positiver k_y -Bereich der $S_{x,y}$ -Komponenten in Abb. 5.26 (e)). Der genaue Hintergrund hierfür lässt sich leider nicht aufklären. Der Spin-Polarisationsgrad der Bänder ist mit $S = 60,9\%$ deutlich höher als der des $S2'$ -Bandes. Auch ergibt der Fit an die Daten keine vollständige Ausrichtung der Spin-Polarisierung in x-Richtung für diese Peaks (s. Tab. 5.7), wie dies in exakter \overline{KMK} -Richtung bei gleichen Flächenanteilen beider beteiligter Rotationsdomänen zu erwarten wäre. Stattdessen liegt zwischen den Spin-Polarisationsvektoren der beiden Rotationsdomänen ein *in-plane*-Winkel von jeweils 60° bzgl. dem gleichen Teilband $E_+(\mathbf{k})$ bzw. $E_-(\mathbf{k})$ vor, was an der Orientierung der Domänen relativ zueinander liegt. Die relativ großen $S_{y,z}$ -Komponenten sind somit auf den kleinen Versatz der Messung zur \overline{KMK} -Richtung und die beiden beteiligten Rotationsdomänen rückführbar. Die Spin-Polarisationsvektoren der Peaks der jeweils gleichen Rotationsdomäne im positiven bzw. negativen k_y -Bereich sind außerdem jeweils paarweise antiparallel zueinander.

Diskussion

Die Ergebnisse der ARPES-Messungen stimmen wie gezeigt größtenteils mit den früheren Experimenten überein [39, 138, 142, 421, 422, 424]. Im Folgenden werden einige wichtige Details dieser Ergebnisse diskutiert, wobei der Fokus auf dem $S1/S1'$ - und dem $S2/S2'$ -Band liegt. Lediglich das $S1/S1'$ -Band ist metallisch und zeigt dabei eine quasi-eindimensionale Fermi-Fläche. DFT-Berechnungen der Zustandsdichte zeigen, dass dieses Band am Fermi-Niveau daher $Pb6p_{x,y}$ -Charakter hat [158]. Das $S2/S2'$ -Band ist den Messungen und Berechnungen zufolge dagegen semimetallisch und berührt das Fermi-Niveau nur an seinen Maxima nahe den \overline{M} -Punkten in Form eines Fünferkreuzes (s. Abschnitt zum $S2/S2'$ -Band ab S. 165 u. [138]). Die Ermittlung der Rashba-Koeffizienten beider Bänder wird durch mehrere Punkte erschwert. Zum einen liegen die Rashba-Koeffizienten bei einer gegebenen Spin-Aufspaltung eines Bandes mehrheitlich in Kombination mehrerer unterschiedlicher Koeffizienten nach

⁸⁴ Überlagerung eines Andreaskreuzes mit einer Raute

Tab. 2.3 vor, zum anderen überlagern sich aufgrund der C_{1v} -Rotationssymmetrie die Intensitäten und damit die Bandstrukturen und Spin-Polarisationen der drei Rotationsdomänen (Vgl. Kap. 2.2.3). Außerdem ist die Theorie über den Rashba-Effekt für 2DEGs und nicht für Quasi-1DEGs konzipiert worden. Die Reduzierung der Dimensionalität zusammen mit dem Rashba- und *Warping*-Effekt führt somit zu einer recht großen Parameteranzahl.

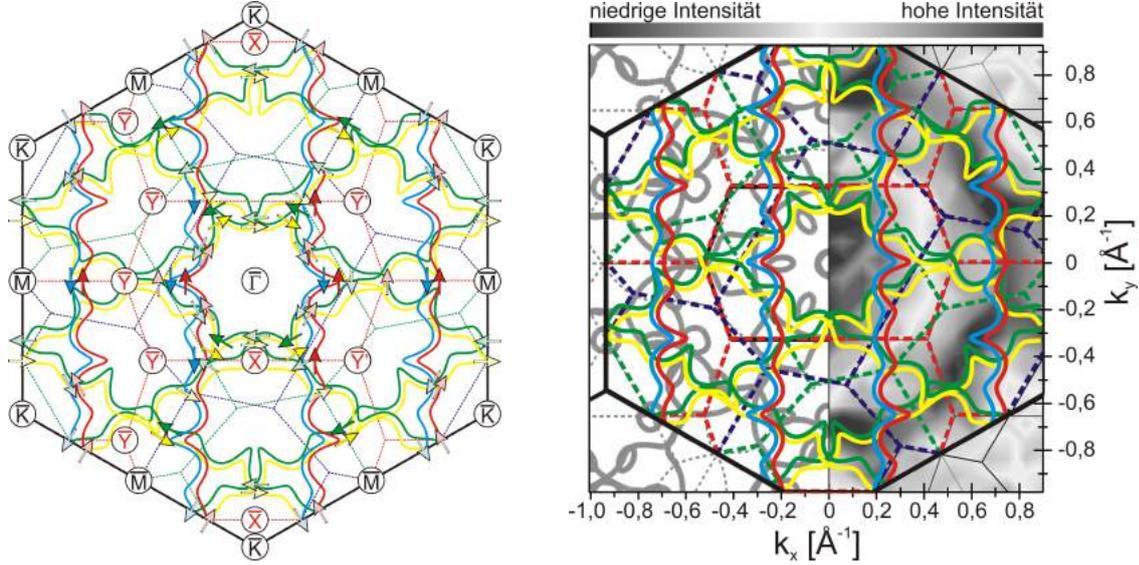
S1/S1'-BAND

Die gemessenen Spin-Aufspaltungen des S1/S1'-Bandes lassen sich zusammen mit den DFT-Berechnungen der Bandstruktur aus [45, 46] zu einer CEM für das S1/S1'-Band zusammenfassen, die die SOI beinhaltet (s. Abb. 5.27 (a)). Dabei sind alle Messwerte der SR-ARPES-Messungen des S1/S1'-Bandes berücksichtigt. Die Überlagerung dieses Modells mit der berechneten FSM aus [45] ist konsistent (s. linker Teil in Abb. 5.27 (b)). Lediglich an den Rändern der 1. SBZs der drei Rotationsdomänen der Rekonstruktion und zwischen den \bar{K} - und \bar{M} -Punkten sind Abweichungen erkennbar. Diese Abweichungen sind letztlich auf die im Vergleich zur Berechnung verschobenen Peaks **d** und **e** des S1-Bandes in $\bar{\Gamma M}$ -Richtung zurückzuführen (s. Abb. 5.25 (c)). Die Übereinstimmung mit der hier gemessenen FSM ist ebenfalls sehr gut (s. rechter Teil in Abb. 5.27 (b)). Die Isoenergielinien sind demnach für jede der drei Rotationsdomänen Spin-aufgespaltene, quasi-eindimensionale Linien mit Wellungen parallel zur jeweiligen $\bar{\Gamma X}$ -Richtung und mit unterschiedlich großen Spin-Aufspaltungen innerhalb der SBZ. Physikalisch sind die Wellungen auf die Kopplung benachbarter atomaren Pb-Ketten zurückzuführen und damit ein *Warping*-Effekt (Vgl. Abb. 5.3 (a) u. s. Kap. 2.3). Das Modell beinhaltet auch die Spiegelsymmetrien der $\bar{\Gamma M}$ - und \bar{XY}' -Richtung (Vgl. Abb. 2.2 (c)). So gilt bspw. für das S1-Band in k_y -Richtung an diesen Spiegelebenen $\mathbf{S}^\pm(k_y) \parallel \mathbf{e}_y$ mit $S_{x,z}^\pm = 0$ und $S_y^\pm \neq 0$.

Aus den Fermi-Wellenvektoren der Spin-integrierten MDCs in Tab. 5.5 lassen sich die Rashba-Aufspaltungen des S1/S1'-Bandes an einigen Punkten im \mathbb{K} -Raum am Fermi-Niveau bestimmen. Nur das S1-Band wird von den Messungen entlang einer kristallographischen Haupttrichtung geschnitten (in k_x -Richtung), die anderen Schnitte sind jeweils unter einem schrägen Winkel zu den Fermi-Wellenvektoren relativ zu den jeweiligen $\bar{\Gamma}_{\sqrt{7} \times \sqrt{3}}$ -Punkten der Rekonstruktion (S1'-Bänder). Für den Abschnitt $\bar{\Gamma Y}$ hat das S1-Band eine Rashba-Aufspaltung $\Delta k_{R,F,x}^{S1,1} = 0,056 \text{ \AA}^{-1}$ und im Bereich \bar{YM} , welcher äquivalent ist zu \bar{XY}' , $\Delta k_{R,F,x}^{S1,2} = 0,049 \text{ \AA}^{-1}$, welche etwas kleiner ist. Aus den Werten für die S1'-Bänder ergeben sich je nach Orientierung größere bzw. kleinere Rashba-Aufspaltungen. Für die $\bar{\Gamma M}$ -Richtung ergibt sich aufgrund der Wellung der Fermi-Fläche des Quasi-1DEGs eine sehr große Aufspaltung von $\Delta k_{R,F,x}^{S1'} = 0,149 \text{ \AA}^{-1}$. Dagegen ist die Aufspaltung in $\bar{\Gamma K}$ -Richtung in der 2. SBZ der Rekonstruktion mit $\Delta k_{R,F,y}^{S1'} = 0,034 \text{ \AA}^{-1}$ wesentlich geringer. Parallel zur \bar{KMK} -Richtung ergibt sich bei $k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$ außerdem $\Delta k_{R,F,y}^{S1'} = 0,089 \text{ \AA}^{-1}$.

Zusammen mit den gemessenen Spin-Aufspaltungen bei $E_B = 70 \text{ meV}$ der SR-ARPES-Messungen und den Ergebnissen der DFT-Berechnungen zur Bandstruktur aus [45, 46] kann damit ein Modell für die Dispersion des S1/S1'-Bandes aufgestellt werden, das den Rashba-Effekt und Korrekturen zum Modell des idealen 1DEGs beinhaltet. Als Ansatz kann hierzu die Dispersionsrelation des S1-Bandes der SIC-Phase aus Gl. (5.16) verwendet werden, wobei noch einzelne Parameter aufgrund der verschiedenen Oberflächensymmetrien und der Dimensionalitäten beider Systeme modifiziert werden müssen.

Das *Confinement* quantisiert die Energie des Elektronengases in einer weiteren Richtung



(a) Die Spin-polarisierten Teilbänder von $S1$ ($S1'$) sind in rot und blau (grün und gelb) dargestellt. Die Aufspaltungen in den Hauptsymmetrierichtungen entsprechen genau denen der SR-ARPES-Messungen. Unter der Annahme gleicher Intensitäten $I_i \equiv 1/3 I_{Ges}$ der Rotationsdomänen der Rekonstruktion ergibt sich die gezeigte Ausrichtung der Spins (Pfeile) der $S1/S1'$ -Bänder. Die gestrichelten Linien zeigen die Ränder der SBZs der drei Rotationsdomänen der Rekonstruktion und das schwarze Hexagon den Rand der $Si(111)-(1 \times 1)$ -SBZ.

(b) Überlagerung des Modells aus (a) mit dem Modell der berechneten FSM von JUNG und KANG aus [45] (links) und der gemessenen FSM als Graustufenbild aus Abb. 5.22 (a) (rechts, logarithmische Farbskala). Insbesondere im Bereich der 2. SBZ der Rekonstruktion zeigt sich eine gute Übereinstimmung des Spin-aufgespaltenen Modells mit der Messung. Die schneeflockenartige Struktur in der DFT-Berechnung am Rand der 1. SBZ der Rekonstruktion tritt nicht auf, da das $S1$ -Band in der Messung im $\bar{Y}\bar{X}$ -Abschnitt im Vergleich zum Modell verschoben ist.

Abbildung 5.27: Modell der Rashba-aufgespaltenen CEM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion für die $S1/S1'$ -Bänder bei $E_B = 70$ meV.

(für das $S1$ -Band in der k_y -Richtung), sodass in dieser Richtung keine Dispersion auftreten sollte. Die DFT-Berechnung der $\bar{K}\bar{M}\bar{K}$ -Richtung in Abb. 5.23 (a) zeigt jedoch, dass das $S1$ -Band in dieser Richtung dennoch eine schwache Dispersion aufweist. Daher sollten die isotropen Parameter aus Gl. (5.16) zur Beschreibung des $S1/S1'$ -Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion grundsätzlich durch zusätzliche anisotrope Terme ergänzt werden.

Aus den DFT-Berechnungen in Abb. 5.23 ergibt sich für die Energie des $S1$ -Bandes am $\bar{\Gamma}$ -Punkt $E(\bar{\Gamma}) = -257$ meV und am \bar{X} -Punkt $E(\bar{X}) = -566$ meV (jeweils bereits bezogen auf E_F in der Messung; die \bar{X} -Punkte der 1. SBZ befinden sich bei $k_{y,0} = \pm 0,327 \text{ \AA}^{-1}$). Nach Abb. 5.23 (a) lässt sich die Dispersion $V(k_y)$ entlang $\bar{\Gamma}\bar{X}$ sehr gut mittels einer Kosinusfunktion mit einer Potentialdifferenz von $V_0 = 154,5$ meV beschreiben.

Mittels der Schnittpunkte des $S1$ -Bandes mit der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung des Spin-aufgelösten MDCs aus Abb. 5.25 (d) u. (e) u. Tab. 5.6 und des Spin-integrierten MDCs am Fermi-Niveau aus Abb. 5.25 u. Tab. 5.5 lassen sich weitere Bandparameter unter Beachtung der C_{1v} -Symmetrie bestimmen. Ebenso sind die Peakpositionen und Spin-Polarisationsvektoren der $S1'$ -Bänder

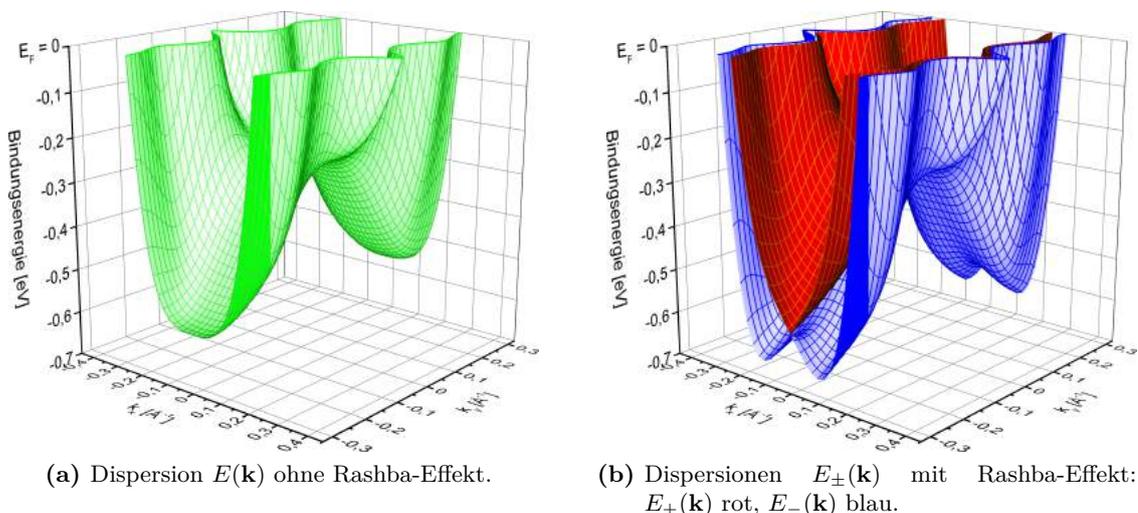


Abbildung 5.28: Berechnete Dispersionen des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Berechnung der Dispersionen mittels Gl. (5.28) u. (5.27) mit den im Text angegebenen Werten. Zusätzlich sind die Isoenergielinien am Fermi-Niveau eingezeichnet.

des Spin-aufgelösten MDCs parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung aus Abb. 5.26 (d) u. (e) u. Tab. 5.7 zu berücksichtigen.

In k_x -Richtung lässt sich das S1-Band als quasi-freies Elektronengas mit Korrekturen höherer Ordnung in k_x betrachten. Da die Schnittpunkte des S1-Bandes mit den Spiegelebenen in den Bereichen $\overline{\Gamma\text{Y}}$ und $\overline{\text{XY}'}$ nicht bei den gleichen k_x -Werten sind (Vgl. MDCs in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung in Abb. 5.25 u. Tab. 5.5 u. 5.6), wird neben einem isotropen Term $\kappa_1 k_x^4$ auch ein Anisotropieterm gleicher Ordnung in k_x zur korrekten Beschreibung der Dispersion benötigt (*Warping*-Effekt). Aus dieser Anisotropie lässt sich auch die Wellung der Fermi-Fläche ableiten. Das *Warping* der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion unterscheidet sich in den ARPES-Messungen dieser Arbeit teils deutlich von den DFT-Berechnungen von JUNG und KANG in [45] (s. Abb. 5.22 u. 5.27). Da innerhalb der 1. SBZ mehrere Wellungen auftreten, reicht es nicht aus die k_y -Abhängigkeit des Anisotropieterms mit einer einfachen Kosinus-Funktion analog zur $\overline{\Gamma\text{X}}$ -Richtung zu modellieren. Es wird zusätzlich ein weiterer Kosinus-Term mit der dreifachen Frequenz benötigt.

Neben diesen Spin-unabhängigen Termen treten auch Spin-abhängige Terme in der Beschreibung der Dispersion des S1-Bandes auf, die sich auf den Rashba-Effekt zurückführen lassen. Neben Einschränkungen, die sich direkt auf die C_{1v} -Symmetrie beziehen (s. Tab. 2.3), reduziert die Spiegelebene entlang der $\overline{\text{XY}'}$ -Richtung die Anzahl möglicher Terme weiter. Um die gemessenen Spin-Aufspaltungen und -Polarisationen korrekt zu reproduzieren, reichen in der y - und z -Komponente von $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ Terme bis zur 3. Ordnung in \mathbf{k} aus, jedoch nicht in der x -Komponente. Aufgrund des *Warping*-Effekts und den damit einhergehenden vier weiteren Linien parallel zur k_x -Richtung bei endlichen k_y -Werten innerhalb der 1. SBZ der Rekonstruktion, in denen $\mathbf{S}^{\pm}(\mathbf{k}) \parallel \mathbf{e}_y$ mit $S_x^{\pm} = 0$ gilt, muss die x -Komponente des Rashba-Effekts durch zwei weitere Terme bis zur 7. Ordnung in k_y erweitert werden. Die minimale Beschreibung

des Rashba-Effekts des S1-Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion lässt sich damit als

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{yx} k_y + \alpha_3^{yyyx} k_y^3 + \alpha_5^{yyyyyx} k_y^5 + \alpha_7^{yyyyyyx} k_y^7 \\ \alpha_1^{xy} k_x + \alpha_3^{xxxy} k_x^3 + \alpha_3^{xyyy} k_x k_y^2 \\ \alpha_1^{yz} k_y + \alpha_3^{yyyz} k_y^3 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

ausdrücken.

Zusammengefasst ergibt sich die mit den Messdaten berechnete Dispersionsrelation $E_{\pm}(\mathbf{k})$ des S1-Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion als Quasi-1DEG mit *Warping*- und Rashba-Effekt in C_{1v} -Symmetrie zu

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{k}) &= E_0 + V(k_y) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{0,x}^*} + \kappa(\mathbf{k}) k_x^4 \pm |\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})| \\ &= E_0 + V_0 \cos\left(\frac{\pi k_y}{k_{y,0}}\right) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{0,x}^*} + \left[\kappa_I - \frac{\kappa_A}{2} \left(\cos\left(\frac{\pi k_y}{k_{y,0}}\right) + \cos\left(\frac{3\pi k_y}{k_{y,0}}\right) \right) \right] k_x^4 \\ &\quad \pm |\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})|, \end{aligned} \quad (5.28)$$

mit den Parametern $E_0 = -411,5 \text{ meV}$, $V_0 = 154,5 \text{ meV}$, $m_{0,x}^* = 4,834 m_e$, $\kappa_I = 109,5 \text{ eV \AA}^4$, $\kappa_A = 97,452 \text{ eV \AA}^4$, $\alpha_1^{yx} = -2,89 \text{ meV \AA}$, $\alpha_3^{yyyx} = 353 \text{ meV \AA}^3$, $\alpha_5^{yyyyyx} = -8,764 \text{ eV \AA}^5$, $\alpha_7^{yyyyyyx} = 53,438 \text{ eV \AA}^7$, $\alpha_1^{xy} = -170 \text{ meV \AA}$, $\alpha_3^{xxxy} = -243 \text{ meV \AA}^3$, $\alpha_3^{xyyy} = -8,401 \text{ eV \AA}^3$, $\alpha_1^{yz} = -341 \text{ meV \AA}$ und $\alpha_3^{yyyz} = 3,18 \text{ eV \AA}^3$. Die mit diesen Parametern berechnete Dispersion ohne und mit Rashba-Effekt ist in Abb. 5.28 dreidimensional dargestellt. Hieraus sind die Anisotropien und die Dimensionalität des S1-Bandes klar ersichtlich. Die Projektion der berechneten Dispersionsrelationen beider Teilbänder ist in Abb. 5.29 (a) auf die BM der $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung gelegt und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Berechnung mit den Messdaten und der (simpliceren) DFT-Berechnung samt Rashba-Effekt 1. Ordnung in \mathbf{k} aus Abb. 5.25 (c).

Das Anisotropieverhältnis 4. Ordnung in \mathbf{k} ist durch $(\kappa_I + \kappa_A(k_y))/(\kappa_I - \kappa_A(k_y))$ gegeben⁸⁵ und ist entlang $\overline{\Gamma\text{Y}}$ minimal mit einem Wert von 0,06 und entlang $\overline{\text{XY}'}$ maximal mit einem Wert von 17,18. Dies bestätigt die starke Kopplung der benachbarten atomaren Pb-Ketten anhand des ausgeprägten *Warping*-Effekts.

In Abb. 5.29 (b) sind die nach Gl. (2.112) berechneten effektiven Massen $m_x^{*,\pm}$ der Dispersionsrelationen der beiden Teilbänder von S1 aus Gl. (5.28) für die $\overline{\Gamma\text{Y}}$ - und die $\overline{\text{XY}'}$ -Richtung dargestellt. Ähnlich wie bei der SIC-Phase sind die effektiven Massen wie erwartet anisotrop und abhängig von der Spin-Polarisation (Vgl. Abb. 5.18 (d)). Letzteres ist jedoch nahezu zu vernachlässigen. Am $\overline{\Gamma}$ -Punkt beträgt die effektive Masse mit $m_x^*(0) = m_{x,0}^* = 4,83 m_e$ etwa das 1,6-fache wie bei der SIC-Phase (s. o.). Zum Fermi-Niveau hin nehmen die effektiven Massen der Teilbänder sowohl entlang $\overline{\Gamma\text{Y}}$ als auch entlang $\overline{\text{XY}'}$ deutlich ab, wobei sich Werte von $m_x^{*,+} = 0,47 m_e$ und $m_x^{*,-} = 0,37 m_e$ für die $\overline{\Gamma\text{Y}}$ -Richtung und $m_x^{*,+} = 0,08 m_e$, $m_x^{*,-} = 0,05 m_e$ für die $\overline{\text{XY}'}$ -Richtung am Fermi-Niveau ergeben. Aufgrund der sehr niedrigen effektiven Massen am Fermi-Niveau in $\overline{\text{XY}'}$ -Richtung kann die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion als quasi-relativistisches 1DEG betrachtet werden.

Die mittels Gl. (5.18) aus den effektiven Massen und Fermi-Wellenvektoren abgeleiteten Fermi-Geschwindigkeiten unterscheiden sich wiederum sehr deutlich für diese beiden Richtungen. In $\overline{\Gamma\text{Y}}$ -Richtung ergeben sich Werte von $v_{F,x}^+ = 7,77 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ und $v_{F,x}^- = 1,17 \cdot 10^6 \text{ m/s}$,

⁸⁵ Definition analog zum Anisotropieverhältnis 6. Ordnung in \mathbf{k} in Kap. 5.2.1. Ein isotropes Elektronengas mit einer geraden Fermi-Fläche hat ein Anisotropieverhältnis von 1.

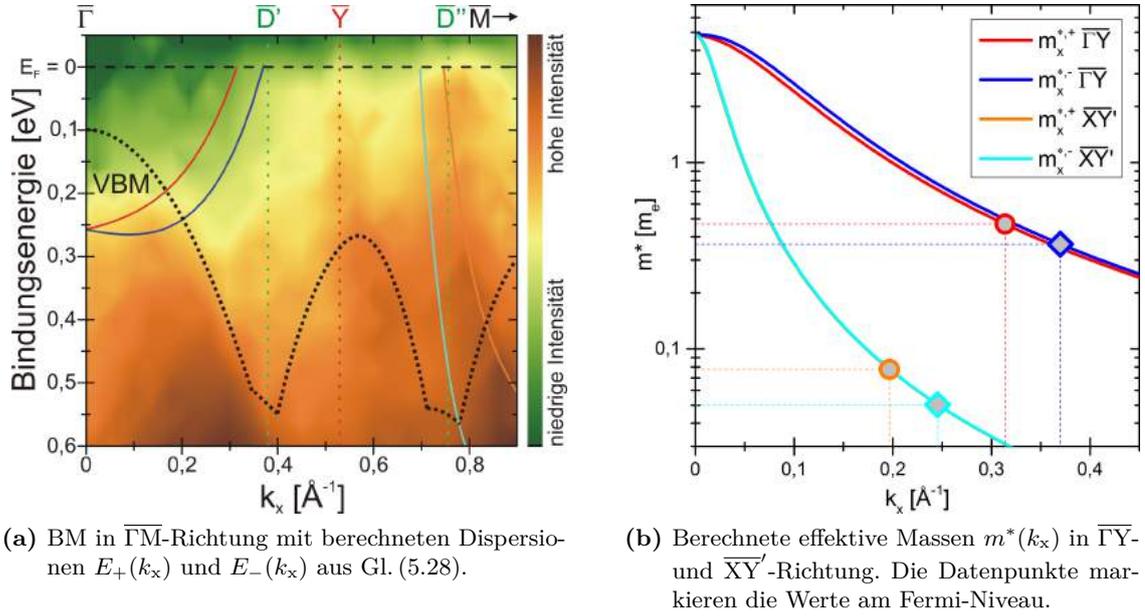


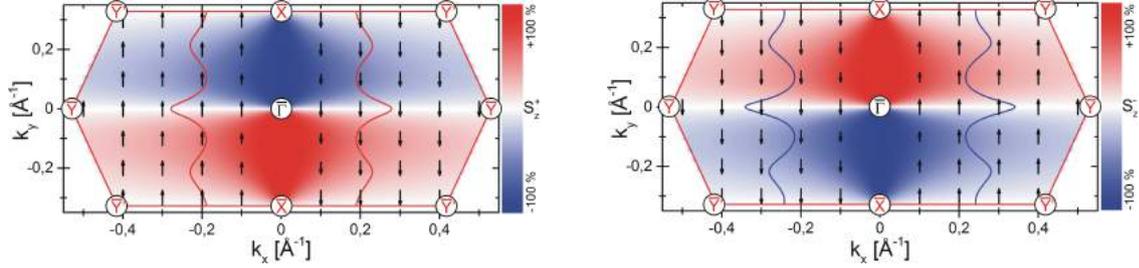
Abbildung 5.29: Vergleich von gemessener und berechneter Dispersion des S1-Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Die roten und blauen bzw. orange- und cyanfarbenen Linien entsprechen den berechneten Dispersionen $E_+(k_x)$ und $E_-(k_x)$ aus Gl. (5.28) mit den im Text angegebenen Parametern für die BM der $\overline{\Gamma\overline{M}}$ -Richtung in (a). In (b) sind die für die beiden Richtungen und Teilbänder nach Gl. (2.112) berechneten effektiven Massen $m^*(k_x)$ dargestellt.

während in $\overline{X\overline{Y}}$ -Richtung Werte von $v_{F,x}^+ = 2,93 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ und $v_{F,x}^- = 5,65 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ abgeleitet werden können.

In [138] wurde die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im Vergleich dazu als Quasi-2DEG mit einer isotropen Fermi-Geschwindigkeit von $v_F = 1,36 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ und einer effektiven Masse von $m_0^* = 1,16 m_e$ bei einem Fermi-Wellenvektor von $k_F = 1,36 \text{ \AA}^{-1}$ angenommen. Dieses Modell widerspricht damit sämtlichen Ergebnissen in dieser Arbeit.

Abb. 5.30 zeigt die Spin-Polarisation beider Spin-polarisierten Teilbänder von S1 (unter der Annahme vollständiger Spin-Polarisation) und deren Isoenergielinien am Fermi-Niveau. Demnach ist das S1-Band hauptsächlich in S_y -Richtung Spin-polarisiert. Lediglich nahe der $\overline{\Gamma\overline{X}}$ -Richtung dreht sich die Spin-Polarisation symmetriebedingt nahezu vollständig in *out-of-plane*-Richtung und mit im Vergleich dazu sehr kleiner, aber endlicher S_x -Komponente. Die S_x -Komponente spielt insgesamt trotz (oder gerade wegen) der Berücksichtigung von Termen bis zur 7. Ordnung in k_y nur eine untergeordnete Rolle.

Die Isoenergielinie am Fermi-Niveau des Spin-unabhängigen Teils von Gl. (5.28) lässt sich als Polynom vierten Grades in $k_{F,x}$ als Funktion von $k_{F,y}$ darstellen. Mit diesem Polynom ist der mittlere Fermi-Wellenvektor (bzgl. des Spins) durch Mittelung entlang k_y innerhalb der 1. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zu $\overline{k}_{F,x} = 0,247 \text{ \AA}^{-1}$ bestimmbar. Damit lässt sich die



(a) $S^+(\mathbf{k})$ mit Isoenergielinien von $E_+(\mathbf{k})$ bei $E_B = 70$ meV. (b) $S^-(\mathbf{k})$ mit Isoenergielinien von $E_-(\mathbf{k})$ bei $E_B = 70$ meV.

Abbildung 5.30: Berechnete Spin-Textur des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion: Die Vektoren zeigen die Richtung der *in-plane*-Spin-Polarisation und mit ihrer Länge ihren Betrag an. Die Länge der Vektoren bei $k_y = 0$ entspricht $S_z^\pm = 0$. Rot bzw. blau hinterlegte Bereiche kennzeichnen die *out-of-plane*-Spin-Polarisation (S_z^\pm -Komponente, lineare Farbskala). Die Berechnungen sind mit $S^\pm = 100\%$ nach Gl. (5.27) durchgeführt worden. Die Isoenergielinien des S1-Bandes am Fermi-Niveau sind durch die rote Linie in (a) und die blaue Linie in (b) dargestellt.

Elektronenkonzentration des Quasi-1DEGs mittels

$$n_{1D} = \frac{2\bar{k}_{F,x}}{\pi} \quad (5.29)$$

zu $n_{1D} = 1,57 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$ berechnen. Im Vergleich dazu wäre die Elektronenkonzentration nach [138] als Quasi-2DEG mit $n_{2D} = 2,94 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ sogar etwa zehnmal so hoch wie in der SIC-Phase, mit dem hier ermittelten Wert für $\bar{k}_{F,x}$ mit $n_{2D} = 9,71 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ jedoch sogar 2,8-fach so klein.

BMs in \overline{KMK} -Richtung der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wurden bereits in [138, 142, 422, 424] vermessen⁸⁶. Ergänzend zum Abschnitt ab S. 156 sei hier nur erwähnt, dass die in [142, 424] bestimmten Bandparameter auf einer parabolischen Näherung beruhen. Die Ergebnisse und die Modellierung der Messungen in dieser Arbeit zeigen jedoch ein komplexeres Verhalten auf, sodass die Parametrisierung der S1'-Bänder als quasi-freies Elektronengas fallen gelassen werden muss. Die effektive Masse m_{S1}^* am Fermi-Niveau entspricht dabei in etwa dem Wert in \overline{XY}' -Richtung (Vgl. Abb. 5.27 u. 5.29 (b)).

S2/S2'-BAND

Das S2'-Band berührt das Fermi-Niveau lediglich am und in der Nähe der \overline{M} -Punkte. Nach [138] bildet die FSM des S2'-Bandes eine kreuz- und rautenförmige Struktur - ein sog. *Fünferkreuz*. Die ARPES-Messungen in dieser Arbeit passen zu solch einem *Fünferkreuz*, jedoch mit anderen Fermi-Wellenvektoren (s. Tab.5.5). In Kombination mit den Spin-aufgelösten MDCs in Abb. 5.25 (d) u. (e) u. 5.26 (d) u. (e), sowie Tab. 5.6 u. 5.7 zeigt sich, dass das S2'-Band Spin-polarisiert ist und das Andreaskreuz des *Fünferkreuzes* am Fermi-Niveau (und nur dort) Spin-entartet ist. Es ergeben sich Rashba-Aufspaltungen von $\Delta k_{R,F,x}^{S2'} = 0,101 \text{ \AA}^{-1}$ für

⁸⁶ In [142, 422, 424] sind die S1'-Bänder mit „S2“ und das S2'-Band mit „S1“ bezeichnet.

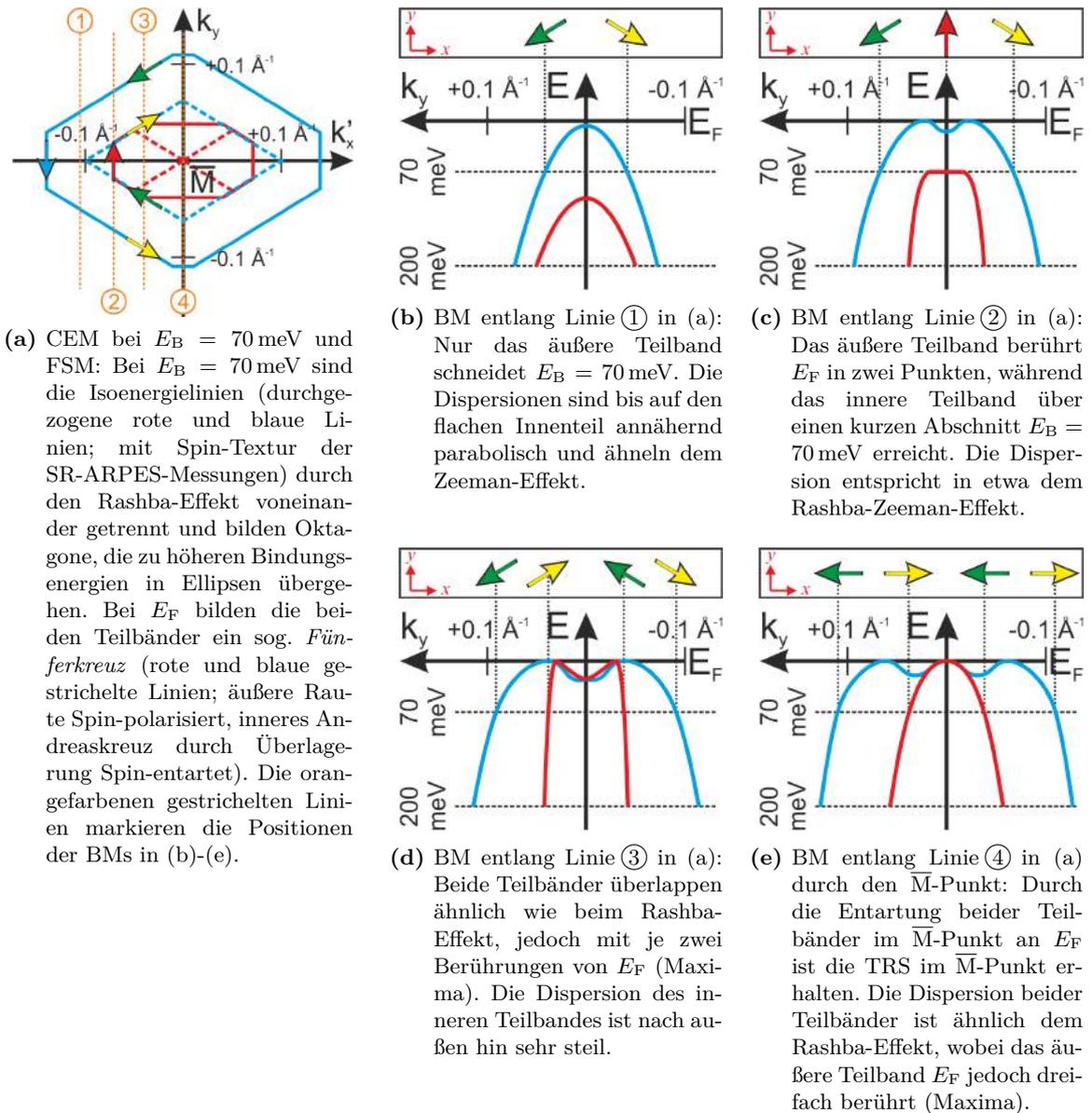


Abbildung 5.31: Modelle der FSM und CEM bei $E_B = 70$ meV und BMs des $S2'$ -Bandes um den \bar{M} -Punkt: Das $S2'$ -Band ist um den \bar{M} -Punkt herum Spin-polarisiert, am \bar{M} -Punkt selbst jedoch nicht (TRIM). Je größer die Entfernung vom \bar{M} -Punkt, desto kleiner erscheint die Spin-Aufspaltung aufgrund des Rashba-Effekts entlang der BMs in (b)-(e). Die Pfeile in den Kästen oberhalb der BMs zeigen die Spin-Orientierungen für $E_B = 70$ meV. Die SR-ARPES-Messung in Abb. 5.26 (d) u. (e) u. Tab. 5.7 entspricht Linie ③ in (a) bzw. (d). Die Koordinaten (k'_x, k_y) sind relativ zum \bar{M} -Punkt definiert. Das Modell gilt analog mit veränderten Fermi-Wellenvektoren auch für die k_x -Richtung.

die $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung und parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung bei $k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$ $\Delta k_{\text{R,F},y}^{\text{S2}'} = 0,046 \text{ \AA}^{-1}$. Extrapoliert auf die $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung ergibt sich daraus $\Delta k_{\text{R,F},y}^{\text{S2}'} = 0,062 \text{ \AA}^{-1}$.

Modelle der FSM und CEM bei $E_{\text{B}} = 70 \text{ meV}$ sind zusammen mit Modellen der Dispersionen und der gemessenen Spin-Textur in Abb. 5.31 dargestellt. Die Dispersionen in k_y -Richtung bei verschiedenen Werten von k_x nahe des $\overline{\text{M}}$ -Punktes zeigen dabei lokal verschiedene Ausprägungen des Rashba-Zeeman-Effekts. Für die $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung ist in Abb. 5.31 (e) jedoch ein drittes Maximum der Dispersion des S2'-Bandes direkt am $\overline{\text{M}}$ -Punkt zu finden, das sich nicht mehr mit dem Rashba-Zeeman-Effekt alleine beschreiben lässt. Dies liegt in der *Fünferkreuz*-förmigen FSM und der Semimetallizität des S2'-Bandes begründet. Das äußere Teilband berührt das Fermi-Niveau demnach in drei Punkten entlang der $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung, während das innere Teilband dies nur im $\overline{\text{M}}$ -Punkt tut. Die gemessene Spin-Textur erfüllt zudem die C_{1h} -Symmetrie des $\overline{\text{M}}$ -Punktes bezogen auf die Si(111)-Oberfläche. Da bisher keine DFT-Berechnung mit SOI für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion vorliegt, gibt es darüber hinaus keine Bestätigung für das *Fünferkreuz* und die modellierte Dispersion des S2'-Bandes.

In [424] wird für das S2'-Band in $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung eine effektive Lochmasse von nur $m_y^* = 0,036 m_e$ als Ergebnis eines Fits mittels $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie angegeben. Aufgrund der nicht berücksichtigten Struktur des *Fünferkreuzes* kann diese Rechnung folglich lediglich für das innere Teilband gelten (rote Kurve in Abb. 5.31 (e)). Für das äußere Teilband werden keine Angaben gemacht. Wegen der komplexen Bandstruktur ist die experimentelle Ermittlung einer effektiven Masse für beide Teilbänder anhand der in dieser Arbeit vorliegenden Daten nicht durchführbar. Dies liegt auch an dem teilweisen Wechsel des äußeren Teilbandes von loch- zu elektronen- und wiederum zu lochartiger Dispersion aufgrund des rautenförmigen Maximums an E_{F} .

5.2.3. „Devil's Staircase“-Phase

Von besonderem Interesse im Bereich der α -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase ist die sog. DS-Phase zwischen $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20 \text{ ML}$ und $\Theta_{\text{Pb}} = 1,33 \text{ ML}$ und bei tiefen Temperaturen. Strukturell bildet sie den Grundzustand in diesem Bereich der Bedeckung (Vgl. Abb. 4.2). Die atomare Struktur dieser Phase ist durch die lineare Kombination von n Einheitszellen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und m Einheitszellen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20 \text{ ML}$ bzw. $\Theta_{\text{Pb}} = 1,333 \text{ ML}$ gekennzeichnet (s. Abb. 4.7). Einige grundlegende physikalische Eigenschaften dieser Phase sind in Kap. 4.2.4 zusammengefasst. Charakteristisch ist vor allem die langreichweitige Ordnung der DS-Phase [242, 328, 456, 457]. Die Kombination aus Einheitszellen der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ - und der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion erlaubt eine nahezu kontinuierliche Einstellung der elektronischen Eigenschaften zwischen der quasi-eindimensionalen $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (1DEG) und der quasi-zweidimensionalen SIC-Phase (2DEG) durch Variation der Bedeckung. Auch lässt sich so die Kopplung benachbarter atomarer „Drähte“ präzise untersuchen.

In diesem Kapitel werden Spin-integrierte und Spin- aufgelöste ARPES-Messungen bei $T = 20 \text{ K}$ vorgestellt und diskutiert. Diese Messungen wurden an der (1,6)-Struktur mit $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,304 \text{ ML}$ durchgeführt. In [138] wurden von CHOI bereits Spin-integrierte ARPES-Messungen an der (2,6)-Struktur ($\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,286 \text{ ML}$) durchgeführt. Die ähnlichen Bedeckungen der (2,6)- und der (1,6)-Struktur lassen ähnliche, vergleichbare Bandstrukturen erwarten. Es wurde jedoch von CHOI im Vergleich zu den Messungen in dieser Arbeit ein um 2° in $[\overline{112}]$ -Richtung fehlgeneigtes Si-Substrat verwendet, sodass anstatt der üblichen *Triple Domain*-Struktur eine *Single Domain*-Struktur vorlag, was die Interpretation der ARPES-Messungen vereinfacht.

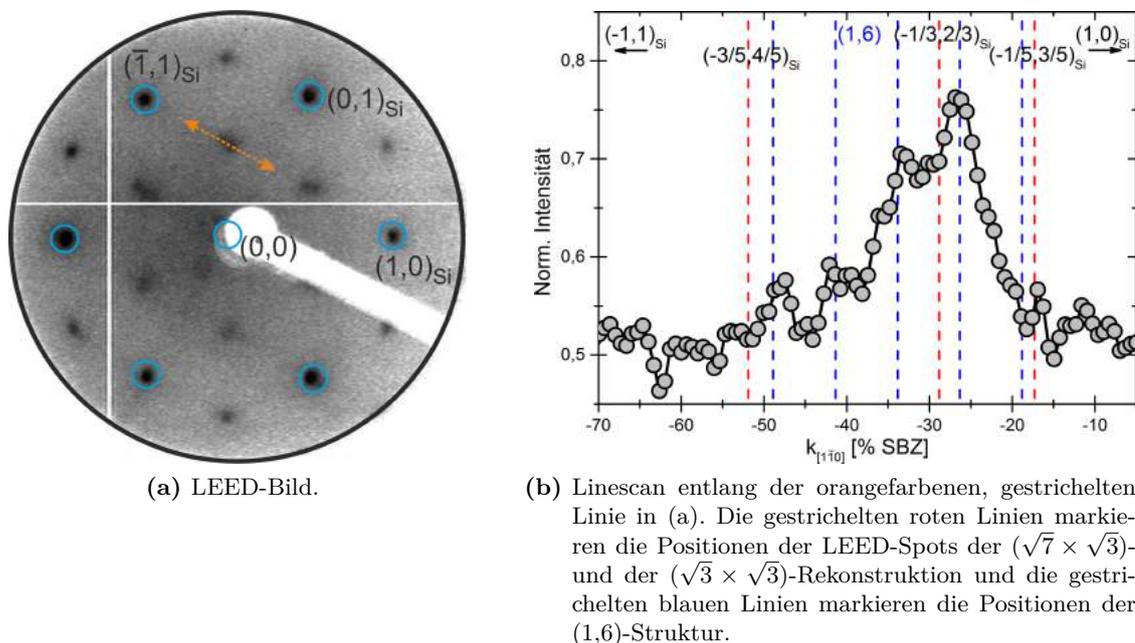


Abbildung 5.32: LEED-Bild der (1,6)-Struktur der DS-Phase: Anhand der charakteristischen Peakpositionen lässt sich aus dem Intensitätsprofil in (b) nach [456] auf die (1,6)-Struktur der DS-Phase schließen; $E = 94$ eV, $T = 20$ K.

Unmittelbar vor den ARPES-Messungen wurde die exakte Struktur mittels LEED bestimmt (s. Abb. 5.32). Das Intensitätsprofil ist für die verschiedenen (n,m) -Strukturen nach [456] unterscheidbar (s. a. Kap. 5.1.3). Der gemessene Intensitätsverlauf passt sehr gut zu den Peakpositionen der (1,6)-Struktur. In Abb. 4.7 (b) ist das Strukturmodell der (1,6)-Struktur dargestellt.

Das bei den ARPES-Messungen verwendete Si-Substrat hatte im Vergleich zur $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und zur SIC-Phase eine höhere n -Dotierung. Daher ist hier der Potentialgradient der Raumladungszone mit $\partial_z V \approx 10^9$ eV/m deutlich stärker (s. Kap. 5.2.4). Dies führt nach Gl. (5.6) zu $\Delta\Phi = 351$ meV. Außerdem entstehen in der Verarmungszone nahe der Oberfläche durch die Bandverbiegung Pb-induzierte QWSs, welche aufgrund der hohen n -Dotierung in den BMs als quantisierte, dispergierende Zustände im Si-Valenzband sichtbar werden (s. Abb. 5.35 (a) u. (c)). Weitere Details hierzu werden in Kap. 5.2.4 diskutiert. Das VBM am $\bar{\Gamma}$ -Punkt liegt zudem bei $E_B = 205$ meV (s. Abb. 5.35 (c)). Nach Gl. (5.5)-(5.7) ergibt sich damit eine Höhe der Schottky-Barriere von lediglich $\Phi_{SB}(20 \text{ K}) = 614$ meV, was im Vergleich zur $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und zur SIC-Phase deutlich niedriger ist als erwartet. Bei den Messungen an der (2,6)-Struktur von CHOI ergab sich dagegen die Höhe der Schottky-Barriere zu $\Phi_{SB} = 1,06$ eV [138].

Mit einer Bedeckung von $\Theta_{Pb} \approx 1,304$ ML gehört die (1,6)-Struktur zu den Strukturen der DS-Phase, die bei Erhöhung der Temperatur einen strukturellen Phasenübergang zur SIC-Phase vollziehen (Vgl. Abb. 4.2; $T_C = 124$ K). Wegen des großen Anteils der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in der Einheitszelle (78,3% der Fläche) lässt sich daher erwarten, dass die Bandstruktur der (1,6)-Struktur große Ähnlichkeiten mit der Bandstruktur der SIC-Phase aufweist. Im Gegensatz zur SIC-Phase weist die DS-Phase jedoch eine viel größere langreich-

weitige Ordnung über die gesamte $Si(111)$ -Terrasse auf, ohne dass andere Rotationsdomänen wie bei der SIC-Phase auftreten [328]. Dies spiegelt sich auch in der Schärfe der Beugungsreflexe im LEED-Bild in Abb. 5.32 (a) und dem daraus entnommenen Linescan in Abb. 5.32 (b) wider.

ARPES-Messungen der Bandstruktur

Die Spin-integrierten ARPES-Messungen der *Single Domain*-(2,6)-Struktur von CHOI in [138] zeigen, dass die FSM der DS-Phase mit Bedeckungen von $\Theta_{Pb} \gtrsim 1,26$ ML starke Ähnlichkeit mit der FSM der SIC-Phase aufweist (s. Abb. 5.33). Aufgrund des großen Flächenanteils mit $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion dominiert ihr Beitrag in der Photoelektronenemission. Die SBZ der (2,6)-Struktur moduliert diese Intensität, wodurch an der Fermi-Energie eine „Aufspaltung“ der *gewarpten*, hexagonalen Fermi-Fläche auftritt. Die genauere Analyse dieser Aufspaltung zeigt, dass sie exakt der Länge des reziproken Gittervektors \mathbf{g} mit $g = 2\Delta k_{F,y} = 0,117 \text{ \AA}^{-1}$ der (2,6)-Struktur entspricht. Zudem sind die zusätzlichen Isoenergielinien in k_x -Richtung über $\Delta k_x \approx 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ weit parallel zu den Isoenergielinien der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, d. h. es handelt sich bei ihnen um *genestete* Replikabänder der Bandstruktur. Da in der Messung ausschließlich eine *Single Domain*-Struktur vorlag, sind die Replikabänder lediglich entlang der k_y -Richtung zu sehen.

Analog zur (2,6)-Struktur finden sich in den ARPES-Messungen an der (1,6)-Struktur ebenfalls *genestete* Replikabänder der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion im Abstand des reziproken Gittervektors \mathbf{g} (mit $g = 2\Delta k_F = 0,143 \text{ \AA}^{-1}$) der (1,6)-Struktur (s. CEMs bei $E_B = 191$ meV in Abb. 5.34 (a)-(c) insbesondere im Bereich um die \bar{M} -Punkte). Aufgrund der *Triple Domain*-Struktur der Probe finden sich die Replikabänder hier jedoch für alle drei Rotationsdomänen.

Die in Abb. 5.34 (d) u. (e) gezeigten Modelle der FSM der *Single* und *Triple Domain*-Struktur beinhalten neben dem *Nesting* der Replikabänder mit dem reziproken Gittervektor \mathbf{g} bereits die zusätzliche Spin-Aufspaltung der Bänder (s. u.). Zudem ist in diesem Modell der Matrixelementeffekt nicht berücksichtigt, sodass alle Replikabänder der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion unabhängig von ihrer Intensität in der Messung dargestellt sind.

In Abb. 5.35 sind BMs der (1,6)-Struktur zusammen mit der modellierten Bandstruktur dargestellt. Das VBM am $\bar{\Gamma}$ -Punkt befindet sich bei $E_B = 177$ meV (gemessen entlang der $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung, s. Abb. 5.35 (c)). In $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung ist es dort aufgrund des Matrixelementeffekts jedoch nicht sichtbar (s. Abb. 5.35 (a)). Innerhalb des Valenzbandes finden sich für höhere

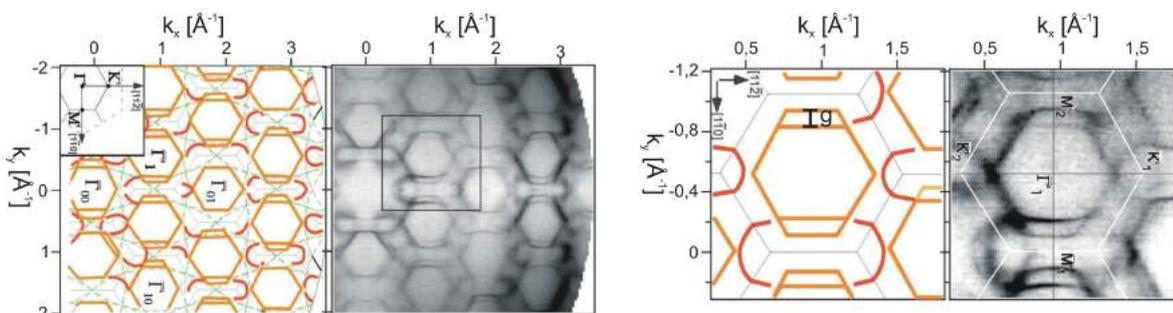
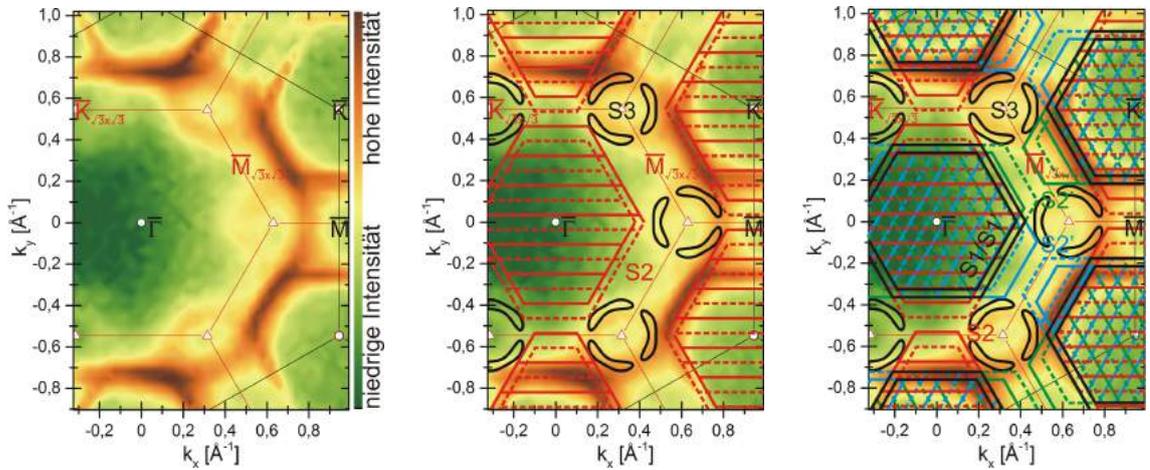
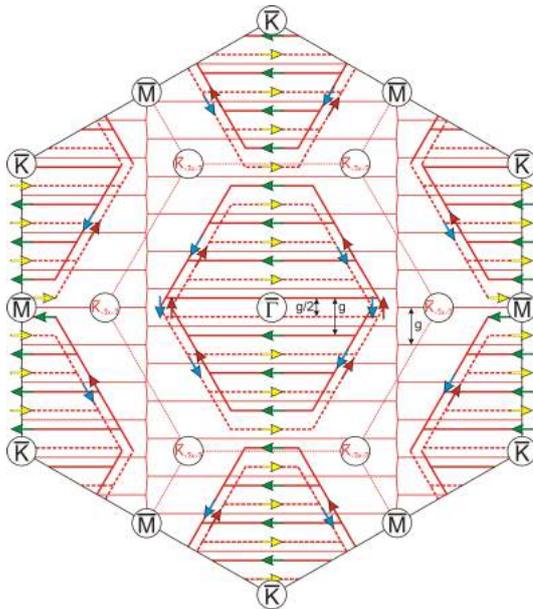


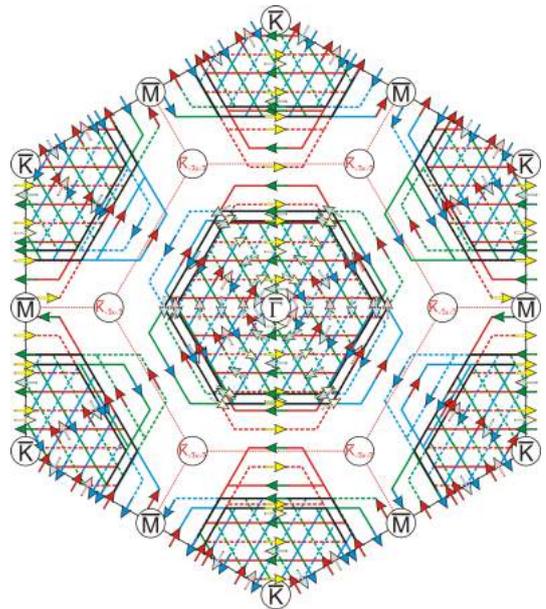
Abbildung 5.33: Messung und Modell der FSM der (2,6)-Struktur von CHOI: Details s. Text; angepasst aus [138].



(a) CEM der (1,6)-Struktur bei $E_B = 191$ meV, $T = 20$ K; logarithmische Farbskala. (b) CEM aus (a) überlagert mit dem Modell der *Single Domain*-Struktur aus (d) (S2-Bänder) und dem S1*-Band der SIC-Phase (hier mit S3 bezeichnet). (c) CEM aus (a) überlagert mit dem Modell der *Triple Domain*-Struktur aus (e).



(d) FSM-Modell der *Single Domain*-Struktur.



(e) FSM-Modell der *Triple Domain*-Struktur.

Abbildung 5.34: Spin-integrierte CEM und ihr Modell mit Spin-Aufspaltung der (1,6)-Struktur der DS-Phase: Dünne schwarze Linien $Si(111)-(1 \times 1)$, dünne rote, blaue und grüne Linien (1,6)-Struktur, sowie einige Hochsymmetriepunkte. Die dicken durchgezogenen und gestrichelten roten, blauen und grünen Linien zeigen die Spin-aufgespaltenen Isoenergielinien der drei Rotationsdomänen (S2/S2'-Bänder). Dicke schwarze Linien in (c) u. (e) zeigen die Überlagerung dieser Isoenergielinien an (S1/S1'-Bänder). Mehr Details s. Text.

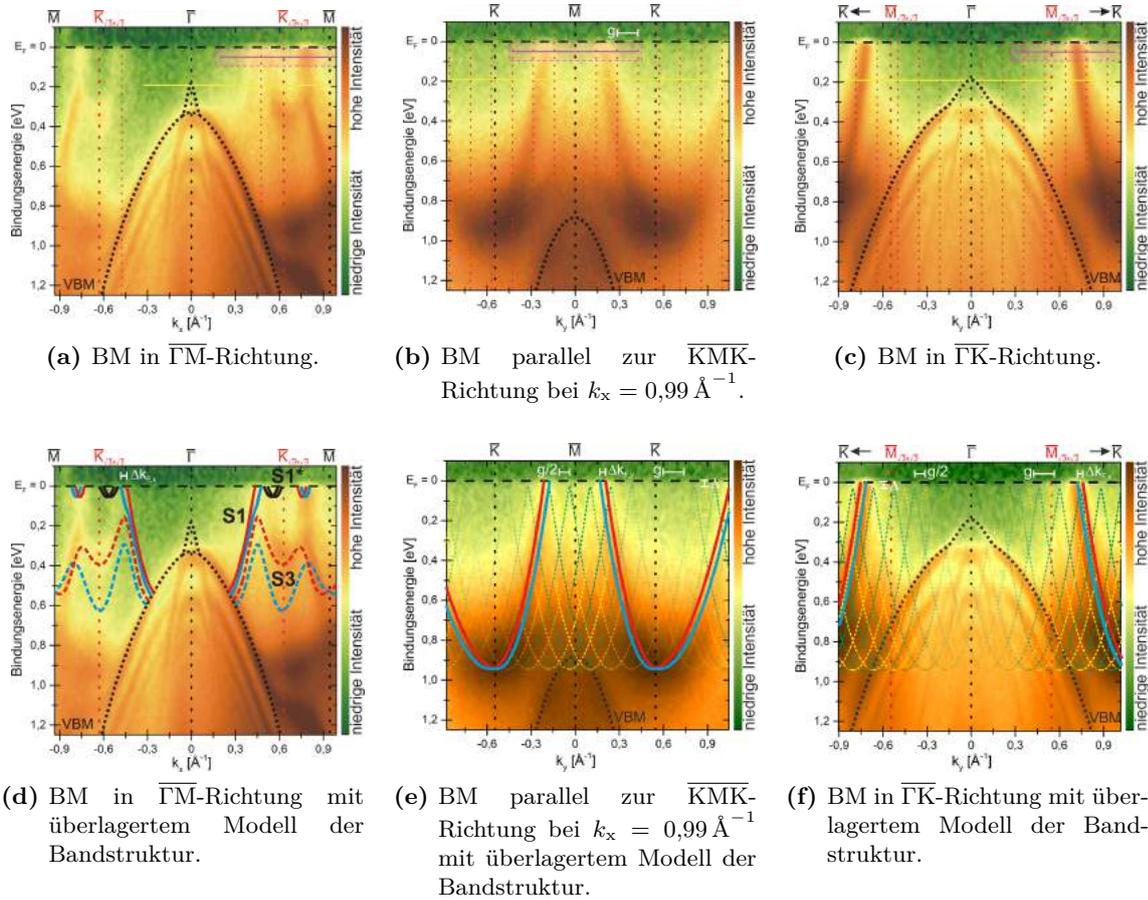
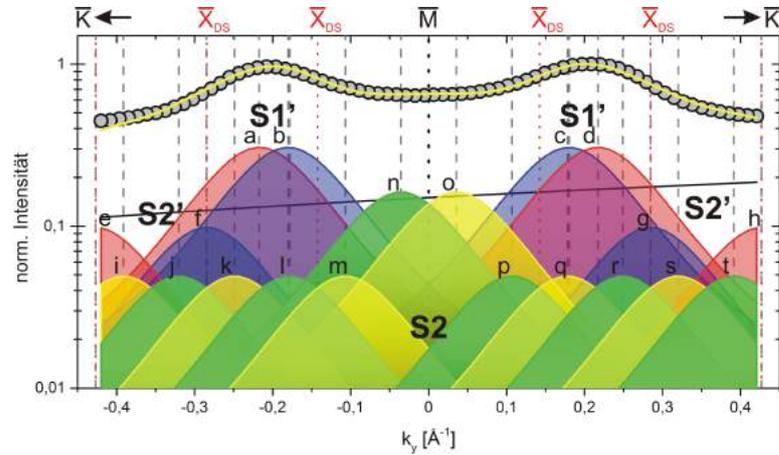


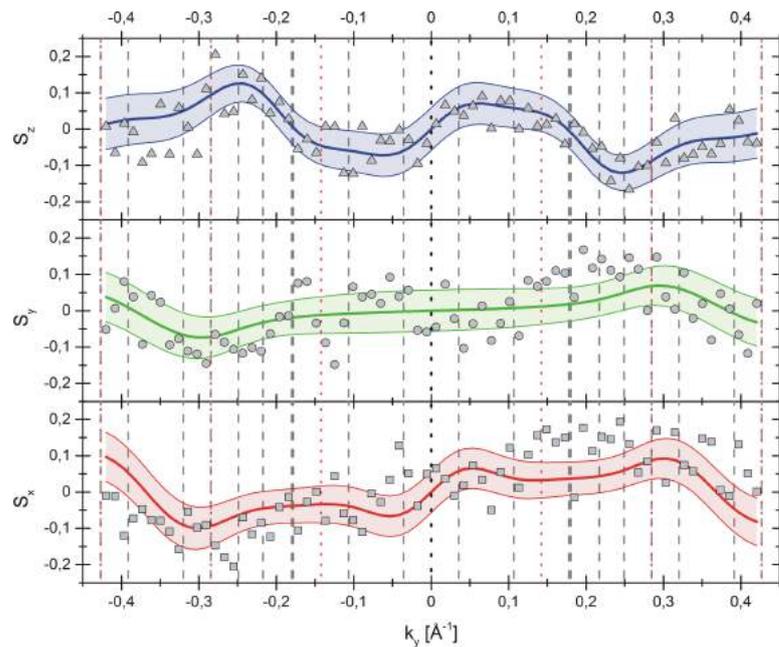
Abbildung 5.35: BMs und Modell der Bandstruktur der (1,6)-Struktur der DS-Phase: Dicke rote und blaue Linien (sowie schwarze Linien für das $S1^*$ -Band) angepasstes Modell der Spin-aufgespaltenen Bandstruktur der SIC-Phase, dünne gelbe und grüne gestrichelte Linien Spin-aufgespaltene Replikabänder einer einzelnen Rotationsdomäne ($S2$ -Band in Abb. 5.34 (b)). Rote und schwarze gepunktete Linien Ränder der SBZs bzw. Hochsymmetriepunkte. Die CEM in Abb. 5.34 (a) wurde im Bereich der gelben Linie aufgenommen. Die Spin-Aufspaltung der Bänder wurde mittels Spin aufgelöster MDCs in den magenta hinterlegten Bereichen (in (a), (b) und (c)) vermessen (s. Abb. 5.36 u. 5.37); $T = 20 \text{ K}$, logarithmische Farbskala.

Bindungsenergien Pb-induzierte QWSs. Diese werden in Kap. 5.2.4 näher beleuchtet.

Alle drei in Abb. 5.35 gezeigten BMs zeigen, dass die hohen gemessenen Intensitäten tatsächlich auf die Bandstruktur der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion der SIC-Phase zurückzuführen sind. Die Bänder sind lediglich leicht modifiziert im Vergleich zur SIC-Phase (Vgl. blaue und rote Linien mit Abb. 5.14). Im Unterschied zur SIC-Phase ist die gemessene relative Intensität in den Bereichen zwischen diesen mit der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion assoziierten Bändern jedoch höher. Durch Vergleich mit der Intensität über dem Fermi-Niveau lässt sich ausschließen, dass es sich lediglich um Rauschen handelt. Stattdessen lässt sich die gemessene Intensität auf

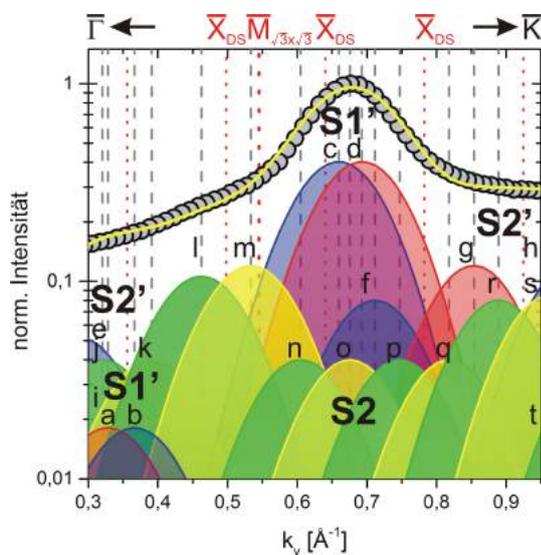


(a) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks.

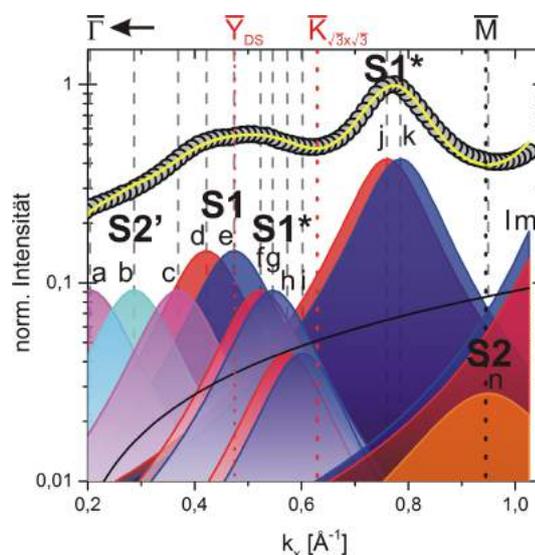


(b) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} : Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.

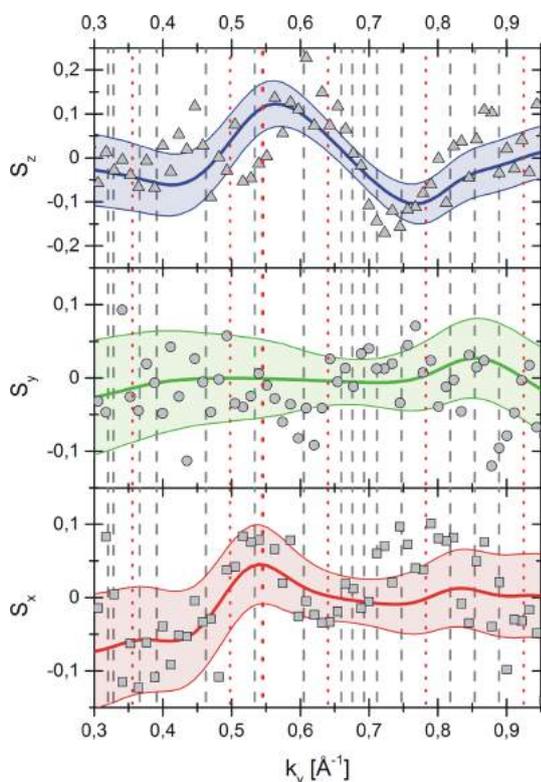
Abbildung 5.36: Spin-aufgelöste MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in \overline{KMK} -Richtung: Die Hochsymmetriepunkte sind durch die gepunkteten Linien markiert. Die gestrichelten grauen Linien markieren die Positionen der gefitteten Peaks (s. a. Tab. 5.8). Die Benennung der Bänder ($S1'$, $S2$, $S2'$) ist konsistent mit den Benennungen in den Abbildungen zur CEM und den BMs; $E_B = 50$ meV, $T = 20$ K.



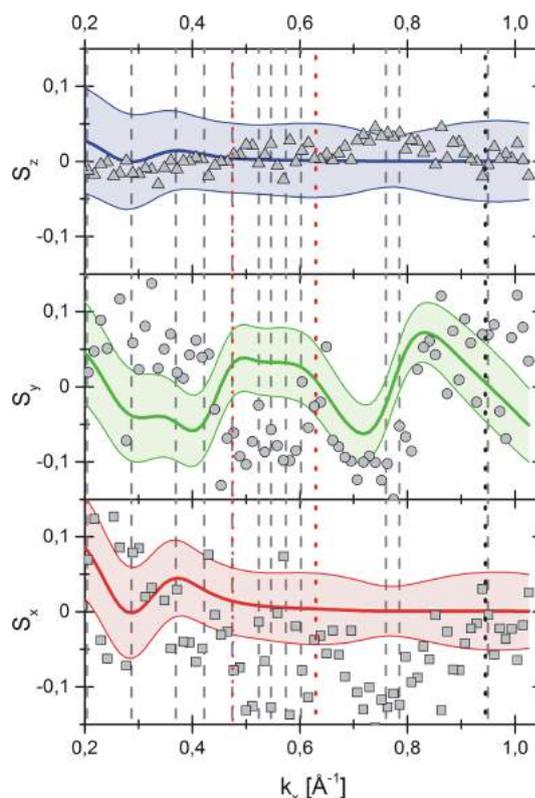
(a) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung.



(b) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung.



(c) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung: Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.



(d) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung: Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.

Abbildung 5.37: Spin-aufgelöste MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\overline{\Gamma K}$ - und $\overline{\Gamma M}$ -Richtung: Die Hochsymmetriepunkte sind durch die gepunkteten Linien markiert. Die gestrichelten grauen Linien markieren die Positionen der gefitteten Peaks (s. a. Tab. 5.9 u. 5.10). Die Benennung der Bänder (S1/S1*, S1', S2, S2') ist konsistent mit den Benennungen in den Abbildungen zur CEM und den BMs; $E_B = 50$ meV, $T = 20$ K.

Band, Peak	Position k_y \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenz- länge ξ \AA	Spin-Polari- sationsgrad S %	S_x %	S_y %	S_z %
S1', a	-0,217	0,141	14,147	93,5	± 0	± 0	+93,5
S1', b	-0,180	0,142	14,127	68,3	± 0	± 0	-68,3
S1', c	+0,180	0,142	14,127	68,3	± 0	± 0	+68,3
S1', d	+0,217	0,141	14,147	93,5	± 0	± 0	-93,5
S2', e	-0,427	0,140	14,337	51,4	+37,0	+29,2	-20,5
S2', f	-0,285	0,141	14,194	100	-77,1	-58,7	-24,7
S2', g	+0,285	0,141	14,194	100	+76,0	+60,1	+24,7
S2', h	+0,427	0,140	14,337	51,4	-37,5	-28,6	+20,5
S2, i	-0,391	0,140	14,296	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, j	-0,320	0,141	14,224	87,2	-64,9	± 0	+58,2
S2, k	-0,249	0,141	14,168	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, l	-0,178	0,142	14,126	87,2	-64,9	± 0	+58,2
S2, m	-0,107	0,142	14,098	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, n	-0,036	0,142	14,084	87,2	-64,9	± 0	+58,2
S2, o	+0,036	0,142	14,084	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, p	+0,107	0,142	14,098	87,2	-64,9	± 0	+58,2
S2, q	+0,178	0,142	14,126	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, r	+0,249	0,141	14,168	87,2	-64,9	± 0	+58,2
S2, s	+0,320	0,141	14,224	87,2	+64,9	± 0	-58,2
S2, t	+0,391	0,140	14,296	87,2	-64,9	± 0	+58,2

Tabelle 5.8: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase parallel zur \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,99 \text{\AA}^{-1}$): Symmetrisierter Fit der Peakpositionen. MDC und Spin-Polarisation s. Abb. 5.36.

die Replikabänder der drei Rotationsdomänen der (1,6)-Struktur zurückführen, die aufgrund des kleinen reziproken Gittervektors der langen Periodizität der Einheitszelle im Realraum senkrecht zu den atomaren Drähten gehäuft auftreten. Allein entlang der \overline{TK} -Richtung finden sich z. B. zehn Replikas zwischen den das Fermi-Niveau schneidenden Bändern.

Mittels Spin-aufgelöster MDCs wurde im Anschluss an die Messung der BMs versucht, die Spin-Struktur der (1,6)-Struktur näher zu bestimmen. Die gemessenen MDCs und die gemessenen und gefitteten Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} entlang der drei kristallographischen Hauptrichtungen sind in Abb. 5.36 u. 5.37 dargestellt. Die Farbcodierung der Peaks entspricht derjenigen der Bänder in den obigen Abbildungen zur CEM und den BMs. Die zugehörigen Peakparameter der Fits finden sich in Tab. 5.8-5.10. Aufgrund der Vielzahl der Replikabänder, die zumeist nur eine relativ geringe Intensität aufwiesen, wurde die Anzahl freier Fitparameter durch Ausnutzen von Symmetrien und Kenntnis der erwarteten Peakpositionen (aufgrund der vorhandenen (1,6)-Struktur bekannt) auf ein Mindestmaß reduziert. Zudem wurde für die Fits vereinfachend angenommen, dass die Peaks von Spin-aufgespaltenen Bändern entlang der gleichen kristallographischen Richtung den gleichen Spin-Polarisationsvektor \mathbf{S} mit dem gleichen Spin-Polarisationsgrad S aufweisen. Aufgrund dieser Vereinfachungen konnte die Zahl der Freiheitsgrade in den Fits soweit reduziert werden,

Band, Peak	Position k_y \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenz- länge ξ \AA	Spin-Polari- sationsgrad S %	S_x %	S_y %	S_z %
S1', a	+0,328	0,137	14,651	45,7	± 0	± 0	+45,7
S1', b	+0,366	0,136	14,717	47,7	± 0	± 0	-47,7
S1', c	+0,660	0,141	14,202	47,7	± 0	± 0	+47,7
S1', d	+0,693	0,140	14,236	45,7	± 0	± 0	-45,7
S2', e	+0,285	0,141	14,169	13,6	-10,5	-8,0	-3,4
S2', f	+0,711	0,136	14,756	13,6	-10,5	-8,0	-3,4
S2', g	+0,854	0,132	15,104	13,6	+10,5	+8,0	+3,4
S2', h	+1,000	0,129	15,554	13,6	-10,5	-8,0	-3,4
S2, i	+0,249	0,141	14,146	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, j	+0,320	0,141	14,196	42,7	-31,8	± 0	-28,5
S2, k	+0,391	0,140	14,260	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, l	+0,462	0,139	14,340	42,7	-31,8	± 0	-28,5
S2, m	+0,534	0,139	14,437	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, n	+0,605	0,137	14,550	42,7	-31,8	± 0	-28,5
S2, o	+0,676	0,136	14,683	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, p	+0,747	0,135	14,835	42,7	-31,8	± 0	-28,5
S2, q	+0,818	0,133	15,009	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, r	+0,889	0,132	15,207	42,7	-31,8	± 0	-28,5
S2, s	+0,960	0,130	15,431	42,7	+31,8	± 0	+28,5
S2, t	+1,032	0,128	15,685	42,7	-31,8	± 0	-28,5

Tabelle 5.9: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung: Symmetrisierter Fit der Peakpositionen. MDC und Spin-Polarisation s. Abb. 5.37 (a) u. (c).

dass zum Einen keine beliebigen Spektren mehr erzeugt und zum Anderen die Messdaten gut reproduziert werden konnten.

Entlang der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung beträgt die Rashba-Aufspaltung des metallischen S1-Bandes bei einer Bindungsenergie $E_B = 50$ meV demnach $\Delta k_{R,x} = 0,052 \text{ \AA}^{-1}$, entlang der $\overline{\Gamma K}$ -Richtung $\Delta k_{R,y} = 0,033 \text{ \AA}^{-1}$ und parallel zur $\overline{KM\overline{K}}$ -Richtung bei $k_x = 0,99 \text{ \AA}^{-1}$ $\Delta k_{R,y} = 0,037 \text{ \AA}^{-1}$. Der Spin-Polarisationsgrad S des S1- bzw. S1'-Bandes beträgt je nach Peak zwischen 45,7% und 93,5%.

Die mit S2 bzw. S2' bezeichneten Replikabänder haben entlang der $\overline{\Gamma M}$ -Richtung einen Spin-Polarisationsvektor mit nicht verschwindenden S_x - und S_z -Komponenten. Dies belegt wie bei der SIC-Phase und der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ungleiche Flächenanteile der drei Rotationsdomänen im Messbereich der Probe. Parallel zur $\overline{KM\overline{K}}$ -Richtung bei $k_x = 0,99 \text{ \AA}^{-1}$ finden sich zwischen den S1'-Bändern zwei Pärchen des S2-Bandes ohne Überlagerung mehrerer Rotationsdomänen (Peaks **m-p**). Aus diesen lässt sich der Spin-Polarisationsvektor bei einem Spin-Polarisationsgrad $S = 87,2\%$ zu $\mathbf{S}^\pm = \pm S \cdot (0,74, 0, 0,67)$ bestimmen. Die endliche S_z -Komponente ist dabei wegen der C_{1v} -Symmetrie der (1,6)-Struktur erlaubt. Analog dazu findet sich für die Spin-Polarisation des S2-Bandes entlang der $\overline{\Gamma K}$ -Richtung ein Spin-Polarisationsgrad $S = 42,7\%$ bei gleicher Spin-Orientierung wie parallel zur $\overline{KM\overline{K}}$ -Richtung.

Band, Peak	Position k_y	FWHM	Kohärenz- länge ξ	Spin-Polari- sationsgrad S	S_x	S_y	S_z
	\AA^{-1}	\AA^{-1}	\AA	%	%	%	%
S2', a	+0,204	0,141	14,140	37,6	+29,0	+22,1	+9,3
S2', b	+0,287	0,141	14,196	37,6	-29,0	-22,1	-9,3
S2', c	+0,369	0,140	14,272	37,6	+29,0	+22,1	+9,3
S1, d	+0,422	0,140	14,331	61,8	± 0	-61,8	± 0
S1, e	+0,474	0,139	14,399	61,8	± 0	+61,8	± 0
S1*, f	+0,523	0,138	14,471	61,8	± 0	-61,8	± 0
S1*, g	+0,547	0,138	14,508	61,8	± 0	+61,8	± 0
S1*, h	+0,573	0,137	14,553	61,8	± 0	-61,8	± 0
S1*, i	+0,602	0,137	14,604	61,8	± 0	+61,8	± 0
S1*, j	+0,760	0,134	14,942	61,8	± 0	-61,8	± 0
S1*, k	+0,785	0,133	15,001	61,8	± 0	+61,8	± 0
S1*, l	+1,108	0,124	16,125	61,8	± 0	-61,8	± 0
S1*, m	+1,131	0,123	16,233	61,8	± 0	+61,8	± 0
S2, n	+0,945	0,279	7,165	0,0	± 0	± 0	± 0

Tabelle 5.10: Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase parallel zur $\overline{\Gamma M}$ -Richtung: MDC und Spin-Polarisation s. Abb. 5.37 (b) u. (d).

Die maximal gemessene Spin-Polarisation der Komponenten entlang der Spin-aufgelösten MDCs ist mit ca. 20% im Vergleich zu den Spin-Polarisationen der einzelnen Peaks deutlich reduziert. Dies liegt in dem endlichen Überlapp benachbarter Peaks der Replikabänder mit invertierten Spin-Polarisationsvektoren \mathbf{S}^\pm , wodurch sich die einzelnen Beiträge größtenteils gegenseitig auslöschen.

Nebeneinander liegende Peaks des S2-Bandes zeigen umgekehrte Spin-Polarisationsvektoren und haben daher eine umgekehrte Helizität. Der Abstand in k_y -Richtung (senkrecht zu den atomaren Drähten) der einzelnen S2-Bänder beträgt gerade den halben reziproken Gittervektor $\Delta k_{R,y} = g/2 \approx 0,072 \text{\AA}^{-1}$. Der Abstand der Bänder mit gleicher Helizität ist daher $2\Delta k_{R,y} = g$. Diese beiden Faktoren zusammen ergeben gerade die maximalen (und regelmäßigen) Abstände zwischen den Spin-polarisierten und zudem *genesteten* Replikabändern. Die in Abb. 5.35 (e) u. (f) eingezeichneten Bandstrukturen spiegeln diese Situation gerade wider.

Vergleich mit der SODW von Pb/Si(557)

Ob sich genau wie bei Pb/Si(557) mit einer Bedeckung von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ (s. Kap. 6.2) aufgrund dieser Eigenschaften bei tiefen Temperaturen eine SODW entlang der k_y -Richtung ausbildet, lässt sich anhand der vorhandenen Messdaten jedoch leider nicht verifizieren. Die niedrige Intensität und die hohe Dichte der Replikabänder der (1,6)-Struktur, sowie die *Triple Domain*-Struktur in der Photoemissionsmessung lassen konkrete Aussagen zu dieser Vermutung nicht zu. Wie CHOI mit seinen Messungen in [138] zeigen konnte, lässt sich die DS-Phase auf leicht vizinalen Si-Substraten jedoch auch als *Single Domain*-Struktur wachsen. Mit einer solchen Probe ließen sich womöglich deutlichere Aussagen mit ARPES- und Leitfähigkeitsmessungen treffen. Besagte Leitfähigkeitsmessungen sollten bei Vorhandensein einer SODW entlang der atomaren Drähte metallisches Verhalten und senkrecht zu den Drähten isolieren-

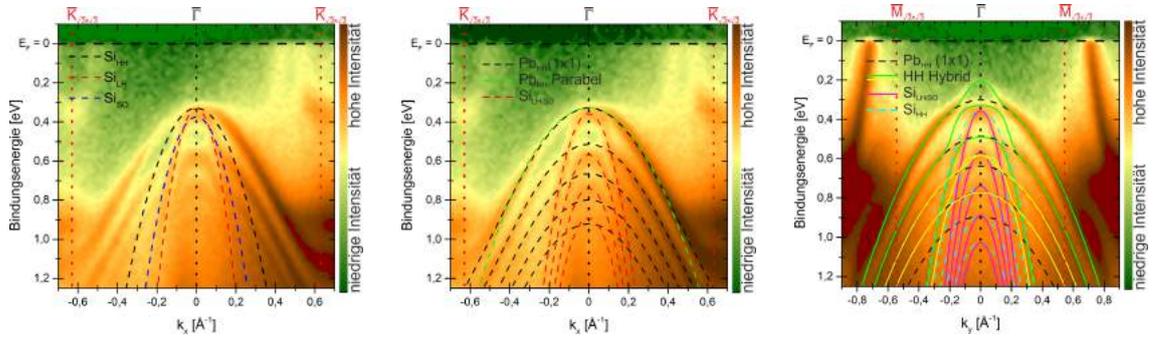
des Verhalten der DS-Phase zeigen. Auch ist denkbar, dass nicht allein die (1,6)-Struktur, sondern die gesamte DS-Phase eine SODW mit bedeckungsabhängiger unidirektionaler Energielücke Δ_{SODW} ausbildet. Die Ausbildung einer SODW könnte zudem der Schlüssel zur Erklärung der langreichweitigen Ordnung der DS-Phase [328] im Vergleich zur SIC-Phase sein, da die DS-Phase durch die Bildung der Energielücke einen Energiegewinn erzielen könnte.

5.2.4. Pb-induzierte Quantum Well States

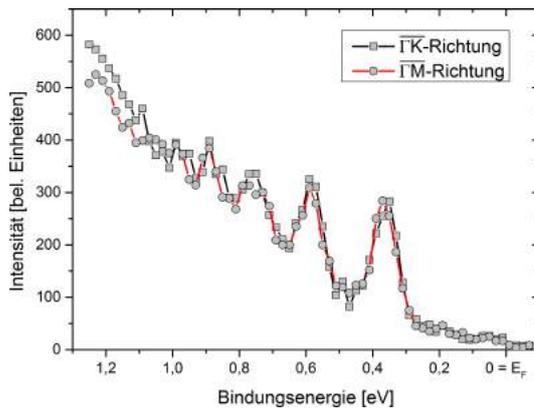
In diesem Abschnitt werden die Pb-induzierten QWSs im oberflächennahen *Bulk* von n -dotierten Si(111) diskutiert, die bei den ARPES-Messungen an der DS-Phase gefunden wurden (s. Kap. 5.2.3). Bei dem verwendeten Si-Substrat handelte es sich im Vergleich zu den Präparationen der SIC-Phase und der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion um hoch dotiertes Si (spezifischer Widerstand $\rho \approx 0,01 \Omega \text{ cm}$, Dotierkonzentration $N_{\text{D}} \approx 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Durch den Metall-Halbleiter-Kontakt bildet sich eine Schottky-Barriere am Interface und eine Raumladungszone im Halbleiter nahe der Oberfläche aus. Die damit einhergehende Bandverbiegung erzeugt einen dreieckigen Potentialtopf für die Löcher im Si-*Bulk* im Bereich der obersten Si-Lagen (die Tiefe d ist abhängig von der Dotierkonzentration und reicht bis zu einigen Nanometer Tiefe bei hoch dotierten Substraten [141, 570]; nach Gl. (2.119) ergibt sich $d \approx 7,3 \text{ nm}$; Theorie s. Kap. 2.7). In niedrig dotierten Substraten ließen sich die im Folgenden diskutierten QWSs in den Messungen nicht auflösen, da die energetischen Abstände der Eigenzustände nach Gl. (2.117) von der Stärke des elektrischen Feldes $\mathcal{E} = \partial_z V/q$ in der Raumladungszone abhängen, welche in hoch dotiertem Si größer ist als in niedrig dotiertem Si. Die Analyse der Messdaten ergab dabei einen Potentialgradienten der Raumladungszone von $\partial_z V \approx 10^9 \text{ eV/m}$ ($\partial_z V$ ist in dem verwendeten niedriger dotiertem Si mindestens eine Größenordnung kleiner). Durch den großen Wert von $\partial_z V$ liegen die energetischen Abstände der Eigenzustände am $\bar{\Gamma}$ -Punkt bei über 100 meV, wodurch sie in den Messungen gut auflösbar waren.

In der Literatur wurden bereits einige verwandte Systeme der DS-Phase von Pb/Si(111) bezüglich dieser Art von QWSs untersucht. Für das Ge(111)-Substrat finden sich bspw. ARPES-Messungen und DFT-Berechnungen für Au/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [104, 153], Bi/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [119–121], Tl/Ge(111)- (1×1) [120, 121], Br/Ge(111)- (1×1) [120, 121, 571] und β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ [118, 121, 122, 554, 572]. So konnte mittels SR-ARPES-Messungen auch bereits nachgewiesen werden, dass diese QWSs eine Rashba-Aufspaltung zeigen [104, 118–122, 153, 571]. Auch für 1 ML Pb/Si(001)- (2×1) wurden bereits ähnliche ARPES-Untersuchungen bereits durchgeführt [573]. Metalladsorbatsysteme auf Si(111) wurden hinsichtlich der QWS dagegen noch nicht so ausführlich untersucht. Hier finden sich ARPES-Messungen zu In/Si(111)- $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ [139, 141, 574] und Ga/Si(111)- $(6,3 \times 6,3)$ sowie (Pb,Ga)/Si(111)- $(3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3})$ [570]. Im Pb-System auf Si(111) wurden bzgl. der QWSs bereits ARPES-Messungen an der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion [142, 424] und an der SIC-Phase [139, 575] durchgeführt.

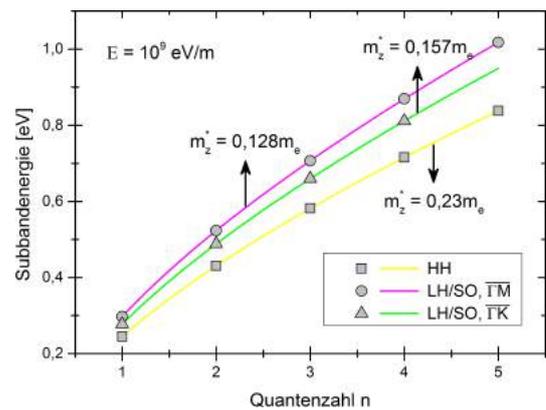
Im Si-*Bulk* hat das Valenzband drei lochartige Bänder mit ihrem energetischen Maximum am Γ -Punkt, das HH-, das LH- und das SO-Band. Letzteres ist gegenüber dem HH- und LH-Band durch die SOI um $\Delta_{\text{SO}} = 44 \text{ meV}$ zu höheren Bindungsenergien verschoben (s. Tab. 2.2 u. Kap. D.3). Die effektiven Massen dieser drei Bänder betragen im Volumen am Γ -Punkt in der (k_x, k_y) -Ebene $m_{\text{HH}}^* = 0,569 m_e$, $m_{\text{LH}}^* = 0,147 m_e$ und $m_{\text{SO}}^* = 0,233 m_e$ (s. Tab. D.3). Innerhalb des Dreieckspotentials nahe der Oberfläche verändern sich die effektiven Massen jedoch aufgrund des veränderten Potentials und durch den Einfluss metallischer Adsorbate auf der Halbleiteroberfläche (s. z. B. [120]), wie in Abb. 5.38 (a) zu sehen ist. Daher



- (a) BM in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung mit Überlagerung der Si-Bulk-QWSs: Die Dispersionen der lochartigen Si-Bulk-Bänder (bzw. effektiven Massen m^*) passen nur bedingt zur gemessenen Intensität. Es sind mehrere Subbänder sichtbar.
- (b) BM in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung mit Überlagerung der Dispersion der QWSs: Das HH-Band im Dreieckspotential erhält durch die Pb-Adsorption eine deutlich größere effektive Masse. Zudem hybridisieren das LH- und SO-Band miteinander ($\text{Si}_{\text{LH/SO}}$).
- (c) BM in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung mit Überlagerung der Dispersion der QWSs: Neben dem hybridisierten $\text{Si}_{\text{LH/SO}}$ -Band hybridisieren auch verschiedene HH-Bänder miteinander.



(d) EDCs am $\overline{\Gamma}$ -Punkt in $\overline{\Gamma M}$ - und $\overline{\Gamma K}$ -Richtung.



(e) Subbandenergien der QWSs am $\overline{\Gamma}$ -Punkt nach Abzug des Energieoffsets E_0 (s. Text).

Abbildung 5.38: Pb-induzierte QWSs der (1,6)-Struktur der DS-Phase: In hoch dotiertem Si(111) bilden sich nach Adsorption von etwa einer Monolage Pb Lochartige QWSs nahe der Oberfläche aus; $T = 20$ K, BMs in logarithmischer Farbskala.

verändern sich auch die wie üblich verwendeten Parameter A , B und C aus Gl. (D.36) zur Beschreibung der Dispersion der lochartigen Bänder im *Bulk*. Selbiges gilt somit auch für die Luttinger-Parameter aus Gl. (D.37) und die Foreman-Parameter aus Gl. (D.38). Da die QWSs im Dreieckspotential eingeschlossen sind, bildet jeder dieser Zustände ein in $[111]$ -Richtung lokalisiertes 2DEG [118, 120] mit mehreren Subbändern, die in der (k_x, k_y) -Ebene dispergieren [575].

Bei der (1,6)-Struktur der DS-Phase von Pb/Si(111) zeigen die ARPES-Messungen in Abb. 5.38 (b) u. (c), dass mehrere Hybridisierungseffekte auf die lochartigen Bänder einwir-

ken. Da lediglich Spin-integrierte ARPES-Messungen durchgeführt wurden, ist jedoch keine Aussage möglich, ob ähnlich wie in Bi/Ag(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) die Hybridisierung der QWS von der Spin-Polarisation abhängt [102].

Das oberste Band (VBM, mit $\text{Pb}_{\text{HH}} (1 \times 1)$ durch schwarze, gestrichelte Linien gekennzeichnet) ist periodisch mit der (1×1) -Periodizität des Si-Substrats und hat bei parabolischer Näherung ($\propto k^2$) effektive Massen im Bereich höherer k -Werte von $m_x^* = 1,28 m_e$ in k_x -Richtung und $m_y^* = 2,38 m_e$ in k_y -Richtung. Die ersten fünf Subbänder sind klar erkennbar. In der Nähe des $\bar{\Gamma}$ -Punktes weicht die Dispersion in k_y -Richtung stark von der erwarteten Parabelform ab (s. Abb. 5.38 (c)). Das Band hybridisiert stattdessen mit dem obersten Si-*Bulk*-HH-Band ($m_{\text{HH},y}^* = 0,52 m_e$, cyanfarbene gestrichelte Linien). Bei genauerer Analyse hybridisiert auch das zweite $\text{Pb}_{\text{HH}} (1 \times 1)$ -Subband mit dem obersten Si-*Bulk*-HH-Band. Diese hybridisierten Bänder sind in Abb. 5.38 (c) mit „HH Hybrid“ bezeichnet und durch grüne Linien gekennzeichnet. Die gleiche Form der Hybridisierung tritt auch für das dritte und vierte $\text{Pb}_{\text{HH}} (1 \times 1)$ -Subband mit dem zweiten Si-*Bulk*-HH-Subband auf (gelbe Linien). Für höhere Subbänder ist eine solche Hybridisierung ebenfalls möglich, konnte jedoch nicht mehr klar aus den Messdaten bestimmt werden. Die gleiche Form der Hybridisierung der HH-Bänder konnte bereits für die In/Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion nachgewiesen werden [574].

In der Nähe des $\bar{\Gamma}$ -Punktes spielt für das oberste $\text{Pb}_{\text{HH}} (1 \times 1)$ -Subband zudem der Matrixelementeffekt [543] eine Rolle. Das spektrale Gewicht des Bandes verschwindet vollständig, sodass am $\bar{\Gamma}$ -Punkt keine Intensität mehr vorhanden ist. Dies täuscht insbesondere in der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung vor, dass es die Hybridisierung gar nicht gäbe. Dass sie dennoch auch in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung vorhanden ist, zeigt nicht zuletzt die effektive Masse des Bandes in dieser Richtung, die sich auch als $m_x^* = 3(1/m_y^* + 1/m_{\text{HH}}^*)^{-1} = 1,28 m_e$ ausdrücken lässt. Dies ähnelt dem Ausdruck für die effektive Masse des zweiten QWSs (s. u.).

Die Hybridisierungen der jeweils zwei $\text{Pb}_{\text{HH}} (1 \times 1)$ -Subbänder mit je einem Si-*Bulk*-HH-Subband zu (mindestens) zwei Tripeln lassen sich mittels der in Kap. 2.6 u. Kap. D im Anhang vorgestellten $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie genauer betrachten. Die originären Subbänder ohne Hybridisierung lassen sich dabei wie in Kap. 2.5 auffassen. Erst durch Wechselwirkung der Bänder untereinander entstehen hybridisierte Bänder, welche sich nicht mehr direkt kreuzen. Aus den Dispersionen der hybridisierten Bänder lassen sich die Terme der Wechselwirkungsmatrix \mathcal{P} aus Gl. (2.107) rekonstruieren. Während sich die Diagonalterme $W_{1,2,3}$ (energetische Verschiebungen der Bänder relativ zueinander) bei beiden Tripeln unterscheiden, gilt für die Wechselwirkungsterme aller Bänder $U = V = W = \Delta_{\text{SO}}/2 = 22 \text{ meV}$.

Vom bereits erwähnten zweiten QWS sind vier bzw. fünf Subbänder klar sichtbar. Diese sind in Abb. 5.38 (b) mit rot gestrichelten Linien, bzw. in Abb. 5.38 (b) mit violetten Linien dargestellt. Die einzelnen Subbänder hybridisieren nicht mit den anderen QWS und dispergieren daher im gesamten Messbereich parabolisch. Dennoch handelt es sich um einen hybridisierten QWS, bestehend aus dem LH- und dem SO-Band des Si-*Bulks*. Seine effektive Masse beträgt in $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung $m_{\text{LH/SO},x}^* = (1/m_{\text{LH}}^* + 1/m_{\text{SO}}^*)^{-1} = 0,103 m_e$ und in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung $m_{\text{LH/SO},y}^* = 3(1/m_{\text{LH}}^* + 2/m_{\text{SO}}^*)^{-1} = 0,23 m_e$. Letztere Formel für eine effektive Masse in Si(111) wurde bereits in [576, 577] gefunden, jedoch handelt es sich dort um eine effektive Masse der $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung, während die effektive Masse hier für die Dispersion in der (k_x, k_y) -Ebene gilt.

Die Energien $E_i(\mathbf{k} = 0)$ der einzelnen Subbänder der HH- und LH/SO-QWSs am $\bar{\Gamma}$ -Punkt

können zudem aus den Intensitätsmaxima der EDCs⁸⁷ beider Hauptrichtungen bestimmt werden (s. Abb. 5.38 (d)). Aus den gemessenen Energien können mittels Gl. (2.117) das elektrische Feld \mathcal{E} und die effektiven Massen m_z^* der QWSs in k_z -Richtung bestimmt werden (s. Abb. 5.38 (e)). Demnach beträgt das elektrische Feld $\mathcal{E} \approx 10^4$ kV/cm. Die Energieoffsets sind mit $E_{0,\text{HH}} = 83,4$ meV und $E_{0,\text{LH/SO}} = 77,5$ meV Verschiebungen zu höheren Bindungsenergien. Die in [575] angegebenen Werte zur SIC-Phase bewegen sich in der gleichen Größenordnung. Die effektive Masse $m_{\text{HH},z} = 0,23 m_e$ der HH-QWSs ist isotrop in der (k_x, k_y) -Ebene, während die effektive Masse der LH/SO-Subbänder anisotrop ist und $m_{\text{LH/SO},z} = 0,157 m_e$ in der $\bar{\Gamma}\text{M}$ -Richtung, sowie $m_{\text{LH/SO},z} = 0,128 m_e$ in der $\bar{\Gamma}\text{K}$ -Richtung beträgt. Die unterschiedlichen Werte für $m_{\text{LH/SO},z}$ sind auf die leicht unterschiedlichen Subbandenergien E_i am $\bar{\Gamma}$ -Punkt in den beiden Richtungen zurückzuführen. Dies sollte jedoch wie bei den HH-QWSs nicht der Fall sein. Eine logische Erklärung für dieses Phänomen konnte leider nicht gefunden werden. Die hier ermittelte effektive Masse $m_{\text{HH},z}$ ist verglichen mit der SIC-Phase einen Faktor 1,4–3 kleiner, während die effektive Masse $m_{\text{LH/SO},z}$ je nach Analyse ähnlich groß bzw. einen Faktor 2–3 kleiner ist [139, 575]. Für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion sind trotz der in [142] publizierten ARPES-Messungen samt Diskussion der QWSs leider keine Werte für die effektiven Massen und Eigenenergien der HH- und LH/SO-Bänder zum Vergleich vorhanden.

⁸⁷ Energy Distribution Curves

5.3. Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen

Komplementär zu den ARPES-Messungen stehen die in Zusammenarbeit mit PHILIPP KRÖGER und HAIYUE LIU erzielten Ergebnisse von Leitfähigkeits- und Magnetotransport-Messungen, die in diesem Kapitel vorgestellt werden.

5.3.1. Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit ultradünner Pb-Schichten auf Si(111) war bereits Gegenstand mehrerer Untersuchungen, u. A. in [221, 240, 277, 299, 300]. Der Fokus dieser Studien lag jedoch nicht auf den in dieser Arbeit untersuchten Pb-Monolagenstrukturen der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase, sondern bei mehreren Monolagen dicken Filmen. In [41] wurde hingegen die Leitfähigkeit der SIC-Phase im Bereich des Phasenübergangs zur Supraleitung bei $T_C \approx 1,1 - 1,8$ K untersucht.

Hier wurde die elektrische Leitfähigkeit $\sigma(T)$ der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML und der SIC-Phase mit $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,30$ ML oberhalb des Phasenübergangs zur Supraleitung untersucht (s. Abb. 5.39 (a)). Elektronische Korrelationen und Supraleitungsfuktuationen spielen im untersuchten Bereich keine große Rolle mehr (Vgl. [221]). Die elektrische Leitfähigkeit kann daher mit den Gleichungen aus Kap. 3.2.2 beschrieben werden. Die Fits an die experimentellen Daten der beiden Strukturen wurden in Analogie zu Bi-Filmen auf Si(111) in [212] mit der Relation

$$\sigma(T) = \frac{1}{\varrho_0 + \varrho_{\text{ee}}(T) + \varrho_{\text{ePh}}(T)} + \sigma_A \cdot \exp \left[- \left(\frac{E_a}{k_B T} \right)^{1/(1+d)} \right] \quad (5.30)$$

durchgeführt. Dabei beschreibt ϱ_0 den spezifischen Widerstand der temperaturunabhängigen elastischen Streuung an Störstellen und die Spin-Bahn Streuung, während die Elektron-Elektron-Streuung ($\varrho_{\text{ee}} \propto T^2$), die Elektron-Phonon-Streuung ($\varrho_{\text{ePh}} \propto T^5$), sowie die Anderson-Lokalisierung nach Gl. (3.15) temperaturabhängig sind. E_a ist die zugehörige Aktivierungsenergie und $d = 2$ die Dimensionalität des Systems⁸⁸. Der Beitrag der Elektron-Phonon-Streuung mit $\varrho_{\text{ePh}} \propto T$ kann in diesem Fall ignoriert werden, da die Temperatur im Experiment unterhalb der Debye-Temperatur von Pb ($\Theta_{\text{D,Pb}} = 88$ K im *Bulk*) gehalten wurde.

Die beiden Fits stimmen sehr gut mit den experimentellen Daten überein. Die zugehörigen Fitparameter sind in Tab. 5.11 zusammengefasst. Der Beitrag der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist demnach wie erwartet gering, da Pb weder ein Alkali- noch ein Übergangsmetall ist. Im höheren Temperaturbereich spielt insbesondere der Beitrag des aktivierten Transports eine wesentliche Rolle. Die Aktivierungsenergien E_a liegen mit 2,5-3,5 meV in

⁸⁸ Bei der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion ergibt sich $d = 2$ durch Transport der Elektronen durch alle drei Rotationsdomänen.

Struktur	ϱ_0 k Ω	ϱ_{ee}/T^2 Ω/K^2	ϱ_{ePh}/T^5 m Ω/K^5	σ_A μS	E_a meV
($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)	196,5	0	2,92	17	3,53
SIC	58,2	11,8	1,05	51	2,51

Tabelle 5.11: Fitparameter zur elektrischen Leitfähigkeit von Pb-Monolagenstrukturen auf Si(111): Die Parameter wurden mit Gl. (5.30) bestimmt.

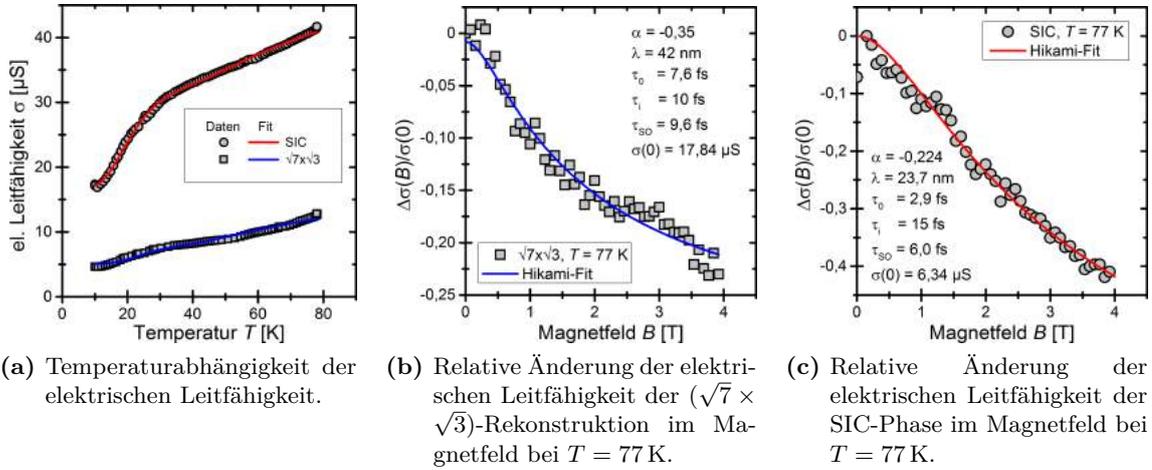


Abbildung 5.39: Elektrische Leitfähigkeit und Magnetotransport an Monolagenstrukturen von Pb/Si(111).

einem ähnlichen Bereich wie für Pb/Si(557) in der Richtung senkrecht zu den Stufen (Vgl. [212, 506, 509]). Alternative Fits an die experimentellen Daten mit der in [221] dargestellten Temperaturabhängigkeit der inelastischen Streuung (schwache Lokalisierung und Coulomb-Wechselwirkung) führt zu deutlich stärkeren Abweichungen und wird hier daher nicht gezeigt.

5.3.2. Magnetotransport

Die Ergebnisse der Magnetotransportmessungen an der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase bei $T = 77 \text{ K}$ mit $B = 0 - 4 \text{ T}$ sind in Abb. 5.39 (b) u. (c) dargestellt⁸⁹. Aus den Hikami-Fits nach Gl. (3.19) bzw. Gl. (3.20) ergeben sich die in den Abbildungen angegebenen Streuzeiten τ_0 , τ_1 und τ_{SO} , sowie die Kohärenzlänge λ und der Parameter α , der ein Maß für die Stärke der SOC ist. Da α für beiden Strukturen negativ ist, liegt in beiden Fällen schwache Antilokalisierung vor (WAL). Die Spin-Bahn-Streuzeiten τ_{SO} von 6 fs bzw. 9,6 fs belegen, dass die SOC in den untersuchten Strukturen stark ist (Vgl. [212]). Das Verhältnis aus Kohärenzlänge und mittlerer Terrassenbreite (s. Kap. 5.1.2) beträgt für beide Strukturen $\lambda/\Gamma = 0,25$. Die klassische Reduktion der Magnetoleitfähigkeit nach Gl. (3.18) ist in beiden Fällen bei $B = 4 \text{ T}$ etwa 4000 mal kleiner als die Änderung nach Hikami [223], die Quanteneffekte dominieren somit die Transporteigenschaften.

Die mittleren Streuzeiten τ ergeben sich aus den einzelnen Streuzeiten nach der Matthiessen'schen Regel aus Gl. (3.14) zu $\tau_{(\sqrt{7} \times \sqrt{3})} = 3,0 \text{ fs}$ bzw. $\tau_{\text{SIC}} = 1,7 \text{ fs}$. Mit der jeweiligen Fermi-Geschwindigkeit ergeben sich daraus die mittleren freien Weglängen $\ell = v_{\text{F}}\tau$ zu $\ell_{(\sqrt{7} \times \sqrt{3})} = 12,8 \text{ nm}$ bzw. $\ell_{\text{SIC}} = 6,8 \text{ nm}$. Letzterer Wert entspricht etwa 73 % der mittleren Domänengröße in $[2\bar{1}1]$ -Richtung bzw. 41 % in $[0\bar{1}1]$ -Richtung (s. Kap. 5.1.2). Die Beweglichkeiten μ der Ladungsträger ergeben sich mittels Gl. (3.9) ebenfalls aus den mittleren Streuzeiten zu $\mu_{(\sqrt{7} \times \sqrt{3})} = 12,7 \text{ cm}^2/\text{Vs} = 1,27 \cdot 10^{-3} \text{ 1/T}$ und $\mu_{\text{SIC}} = 25,7 \text{ cm}^2/\text{Vs} = 2,57 \cdot 10^{-3} \text{ 1/T}$.

Die Ergebnisse sind kaum mit denen der Pb-Filme auf Si(111) in [221, 299] oder [294] ver-

⁸⁹ Verwendete Parameter aus den ARPES-Messungen: $\bar{m}^* = 0,414 m_e$, $\bar{v}_{\text{F}} = 4,29 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ ($\overline{\text{TY}}$ -Richtung der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion), $\bar{m}^* = 0,118 m_e$, $\bar{v}_{\text{F}} = 3,955 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ (SIC-Phase).

gleichbar, da die dortigen Messungen bei $T = 6,8$ K bzw. bei größeren Schichtdicken durchgeführt wurden. Mit den in [61, 212, 482] gemessenen Werten für die Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML (s. a. Kap. 6.2.2) lassen sich die hiesigen Ergebnisse aufgrund der ähnlicheren Messtemperaturen jedoch besser vergleichen. Die elastischen Streuzeiten τ_0 liegen innerhalb eines Faktors 2 um den Wert $\tau_{0,y} = 6$ fs der Richtung senkrecht zu den Stufen ($\tau_{0,xy} = 20$ fs in der Richtung entlang der Pb-Drähte) der Pb/Si(557)-Oberfläche. Die hier gemessenen inelastischen Streuzeiten sind nur knapp kleiner als der zu $\tau_i = 20$ fs bestimmte Wert des quasi-eindimensionalen Systems. Einzig die Spin-Bahn-Streuzeiten τ_{SO} sind etwa einen Faktor 8-14 kürzer als $\tau_{\text{SO},y} = 81$ fs der Richtung senkrecht zu den Stufen ($\tau_{\text{SO},x} = 7,6$ ps in der Richtung entlang der Pb-Drähte) der Pb/Si(557)-Oberfläche. Die Spin-Bahn-Streuung ist damit in beiden untersuchten Strukturen von Pb/Si(111) sogar wesentlich stärker als in Pb/Si(557), obwohl die Rashba-Aufspaltung Δk und der größere der beiden Rashba-Parameter $\alpha_{\text{R},[\bar{1}\bar{1}2]}$ in Pb/Si(557) deutlich größer sind (s. Kap. 6.2.4).

6. Messungen an Pb/Si(557)

In diesem Kapitel werden die experimentellen Befunde an atomaren Pb-Quantendrähten bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ auf Si(557) vorgestellt und diskutiert. Die Proben wurden dabei nach der in Kap. 4.4.1 beschriebenen Prozedur präpariert.

Ein knapper Überblick von bereits bekannten Strukturen ist in Kap. 4.4 dargestellt worden. Nach einer kurzen Darstellung der lokalen atomaren Struktur bei tiefen Temperaturen aus STM-Messungen in Kap. 6.1 folgen in Kap. 6.1.2 u. 6.1.3 lokale und mesoskopische Strukturanalysen zum Phasenübergang der Oberfläche bei $T_C = 78 \text{ K}$, die mit dem STM bzw. SPA-LEED durchgeführt wurden und die Refacettierung der Oberfläche im Fokus haben.

Die ARPES-Messungen an Pb/Si(557) in Kap. 6.2 wurden wie die Messungen an Pb/Si(111) (s. Kap. 5.2) an der COPHEE-Endstation der SIS-Beamline der SLS des PSI durchgeführt. Aufbauend auf den Studien von CHRISTOPH TEGENKAMP und DANIEL LÜKERMANN [35, 512] wurden neben hoch aufgelösten Spin-integrierten Messungen zur Analyse der jeweiligen Impulsverteilung der Bandstruktur auch Spin-aufgelöste Messungen durchgeführt, um den Einfluss der SOI im Bereich der Fermi-Energie näher zu bestimmen. Die Ergebnisse der ARPES-Analyse werden durch SPA-LEED- und Magnetotransportmessungen von MARCIN CZUBANOWSKI [60] bzw. DANIEL LÜKERMANN [61] komplementiert. Die Analysen bei verschiedenen Zusatzbedeckungen $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ belegen die Existenz eines neuen verschränkten quantenmechanischen Zustands, der sog. SODW, die unterhalb von T_C eine eindimensionale Energielücke 2Δ senkrecht zu den Stufen des Substrats öffnet und damit das stark anisotrope Verhalten aus Leitfähigkeitsmessungen [57–59, 212, 506] erklärt.

Abschließend werden die Ergebnisse mit anderen Pb/Si-Quantendrahtsystem verglichen (s. Kap. 6.3).

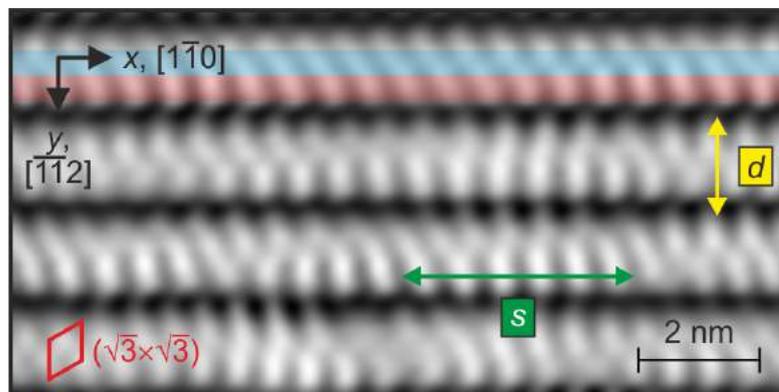
6.1. STM-Messungen

Die hier gezeigten STM-Messungen wurden in Zusammenarbeit mit MONIKA QUENTIN, GEB. JÄGER, im Rahmen ihrer Masterarbeit [410] durchgeführt. Neuere Messungen beschäftigen sich noch detaillierter mit der atomaren Struktur der Pb/Si(557)-Oberfläche und ihren elektronischen Eigenschaften, die mittels STS untersucht wurden [201, 514]. Die Aussagen in [201, 514] ergänzen damit die hier dargestellten Ergebnisse.

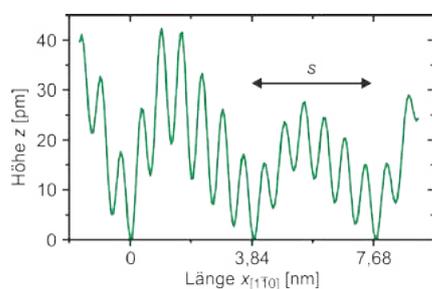
6.1.1. Struktur bei tiefen Temperaturen

Aus früheren SPA-LEED- und STM-Messungen ist die Struktur der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $1,31 \text{ ML}$ Bedeckung bereits gut bekannt (s. Abb. 4.12). Allerdings konnte die Struktur noch nicht atomar aufgelöst werden. Mit diesem Ziel wurden Messungen unterhalb der Phasenübergangstemperatur von $T_C = 78 \text{ K}$ durchgeführt.

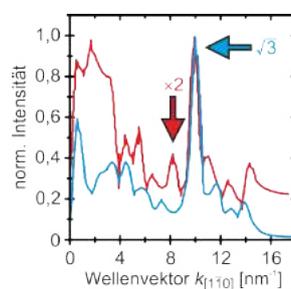
In Abb. 6.1 ist das Resultat dieser Bestrebungen mit dem RHK-STM zu sehen. Der ausgewählte Bereich in Abb. 6.1 (a) zeigt die lokale Struktur von vier nebeneinander liegenden



(a) STM-Bild: $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 100 \text{ pA}$, $T = 35 \text{ K}$.



(b) Linescan entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist mit einer Periodizität $s = 10 a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ nm}$ moduliert.



(c) FFT von Bereichen auf der Terrasse (blau) bzw. an der Stufenkante (rot).

Abbildung 6.1: STM-Bild der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$: Die Oberfläche weist (223)-orientierte Facetten mit einer Periodizität von $d = 1,58 \text{ nm}$ auf. Auf den (111)-Terrassen befinden sich die Pb-Atome in der (1,5)-Struktur der DS-Phase mit einem hohen Anteil der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Entlang der Pb-Drähte (in $[1\bar{1}0]$ -Richtung) ist die Korrugation mit $s = 10 a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ nm}$ moduliert. Die FFT von Bereichen an der Stufenkante (rot schattierter Bereich in (a)) weist anders als die FFT in der Terrassenmitte (blau schattierter Bereich) zusätzlich eine $(\times 2)$ -Periodizität bei $k = 2\pi/(2 \cdot 0,384 \text{ nm}) = 8,18 \text{ nm}^{-1}$ auf. Der intensive Peak bei $10,5 \text{ nm}^{-1}$ stammt von der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion.

(223)-orientierten Einzelstufen. Die Periodizität in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung beträgt $d = 1,58 \text{ nm}$, was $4 \frac{2}{3} a_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ in der (111)-Ebene plus einer atomaren Stufe mit Höhe $d_{(111)} = 3,135 \text{ \AA}$ entspricht.

Auf den (111)-Terrassen der (223)-Facetten befinden sich die meisten Pb-Atom in $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Positionen. Die Korrugation weist jedoch entlang der Drähte (in $[1\bar{1}0]$ -Richtung) eine Modulation mit der Periodizität $s = 10 a_{[1\bar{1}0]} = 3,84 \text{ nm}$ auf, was sich im STM-Bild durch eine wellenförmige, hellere und dunklere Erscheinung bemerkbar macht. Im Linescan in Abb. 6.1 (b) ist dies ebenfalls deutlich zu sehen. Dies ist auf die lokale (1,5)-Struktur der DS-Phase mit 1,30 ML Bedeckung zurückzuführen (s. Kap 4.2.4 u. 4.4.1), bei der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -artige Domänenwände die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion periodisch unterbrechen. Das Wellenmuster

kommt nun dadurch zustande, dass sich die Domänenwände entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf den einzelnen Terrassen an der Stufenkante bzw. in der Mitte der Terrasse nicht an der selben Stelle befinden. Die Pb-Drähte auf der Si(553)-Oberfläche zeigen ebenfalls eine periodisch modulierte $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf den (111)-Terrassen, die jedoch lediglich $s = 7 a_{[1\bar{1}0]} = 26,9 \text{ nm}$ lang ist [524].

Als drittes Strukturelement der Pb/Si(557)-Oberfläche ist in SPA-LEED-Bildern eine $(\times 2)$ -Periodizität entlang der Pb-Drähte zu sehen [56, 60, 62, 212, 454, 475, 476, 482, 505–507, 510]. Diese Periodizität stammt von dimerisierten Si-Atomen an der Stufenkante, wie sich im STM am besten via FFT⁹⁰ erkennen lässt (s. Abb. 6.1 (c)). Im Vergleich des blau bzw. rot schraffierten Bereichs in Abb. 6.1 (a) tritt an der Stufenkante ein zusätzlicher Peak bei $k = 2\pi/(0,768 \text{ nm}) = 8,18 \text{ nm}^{-1}$, was genau der $(\times 2)$ -Periodizität entspricht. Auch die überlagerte Zehnfachperiodizität entlang der Pb-Drähte zeigt sich in den Fourier-Spektren bei $1 - 2 \text{ nm}^{-1}$.

Da die makroskopische (557)-Orientierung der Oberfläche auch nach der Pb-Adsorption bestehen bleibt, muss die lokale (223)-Orientierung der Facetten durch größere (111)-Terrassen von mehreren Nanometern Breite ausgeglichen werden. Diese Inhomogenität wurde auch bereits in SPA-LEED-Messungen beobachtet [56, 475]. Die detaillierten STM-Messungen von MONIKA QUENTIN bei Temperaturen von wenigen Kelvin über dem Temperaturnullpunkt in [201, 514] hatten u. A. diese Terrassen im Blick. Es zeigt sich, dass die lokale Bedeckung auf diesen Terrassen von ihrer Breite abhängig ist und demnach entweder eine der DS- oder die SIC-Phase der Pb-Atome gebildet wird. Damit einher gehen auch unterschiedlich lange Modulationen der Korrugation entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung, da diese durch die lokale atomare Struktur bestimmt sind.

6.1.2. Strukturänderung beim Phasenübergang

Die Orientierung der Facetten ändert sich beim Phasenübergang, wie SPA-LEED-Messungen von MARCIN CZUBANOWSKI zeigen [56, 475]. Aus den Messdaten leiten die Autoren oberhalb von T_C eine (17 17 25)-Orientierung mit $\Theta = 10,855^\circ$ relativ zur (111)-Oberfläche ab. Dies bedeutet eine Abflachung gegenüber der (223)-Orientierung der Facetten unterhalb von T_C ($\Theta = 11,422^\circ$ relativ zu (111)), sodass auf vier (223)-Einzelstufen eine zusätzliche atomare Einheit in $[11\bar{2}]$ -Richtung kommt. Im Stufenmodell heißt das für die Zusammensetzung der gesamten Facette, dass drei Einzelstufen mit einer (223)-Orientierung und eine Einzelstufe mit einer (557)-Orientierung die (17 17 25)-Facette bilden. Da die Oberfläche aufgrund des Si-Substrats aber insgesamt eine (557)-Orientierung aufweist, müssen daher die ausgleichenden, größeren (111)-Terrassen oberhalb von T_C im Schnitt entsprechend kleiner sein als unterhalb von T_C . Wie der Prozess der Umfacettierung genau abläuft ist unklar, jedoch handelt es sich um einen kollektiven Prozess, der die Atome an der Oberfläche auf makroskopischen Distanzen neu anordnet.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit dem STM versucht, die umfacettierte Struktur lokal aufzulösen (s. Abb. 6.2 u. 6.3) und damit die Ergebnisse der SPA-LEED-Messungen von MARCIN CZUBANOWSKI [56, 475] zu ergänzen, die – methodisch bedingt – lediglich eine Mittelung der Orientierung über die gesamte Oberfläche im Messbereich darstellen und mögliche Inhomogenitäten der Oberflächenorientierung durch geringere Intensitäten nur ungenau abbilden. Da jedoch aus den STM-Messergebnissen mehrerer Proben bei Temperaturen $T < T_C$ hervorgeht, dass nach durchschnittlich fünf bis sechs (223)-Einzelstufen eine größere (111)-Terrasse

⁹⁰ Fast Fourier Transform

in $[11\bar{2}]$ -Richtung auftritt (in diesem Fall mit ebenfalls fünf bis sechs atomaren Einheiten) um den Fehlwinkel zur (557)-Orientierung ($\Theta = 9,446^\circ$) auszugleichen, ist es kaum möglich, die Umfacettierung direkt aufzulösen. Dies liegt auch daran, dass die größeren (111)-Terrassen teils in unterschiedlichen Breiten vorliegen (durch *Bundeling* und *Step Bunching* der Substratfläche). Außerdem weisen die Wafer, aus denen die Proben geschnitten wurden, Fehlwinkel zur (557)-Orientierung von typischerweise $\pm 0,2 - 0,5^\circ$ auf. Damit variiert die Oberfläche des Wafers etwa zwischen (7 7 10)-Orientierung mit $\Theta = 10,025^\circ$ und (8 8 11)-Orientierung mit $\Theta = 8,93^\circ$ relativ zur (111)-Ebene um die (557)-Orientierung, wobei der Unterschied ∓ 1 atomare Einheiten auf drei (557)-Einzelstufen in $[11\bar{2}]$ -Richtung beträgt. Die Verkleinerung bzw. Vergrößerung der (111)-Terrassen beträgt nach sechs (223)-Einzelstufen damit durchschnittlich zwei atomare Einheiten bei einem Fehlwinkel von $\pm 0,5^\circ$. Einzelne, mittig in die Facetten eingebaute (557)-Einzelstufen können dennoch anhand der leicht größeren Terrasse und des damit veränderten Kontrasts in den STM-Bildern erkannt werden (s. Abb. 6.2 (a)-(c) u. 6.3 (a)-(e)). Auch treten lokal größere (223)-Facetten mit bis zu elf Einzelstufen auf.

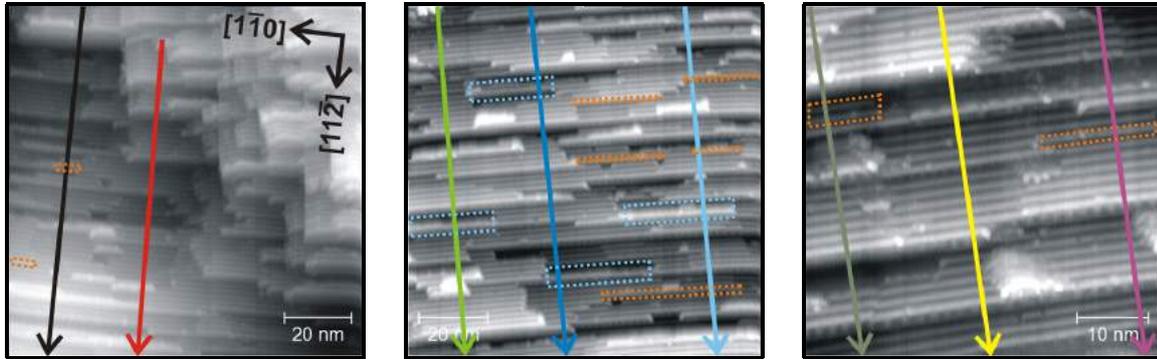
Mittels Linescans über die Stufenstruktur über ca. 100 nm an beliebig ausgewählten Stellen der STM-Bilder bei Temperaturen oberhalb und unterhalb von T_C lassen sich die Details besser analysieren (s. Abb. 6.2 (d) u. 6.3 (f)). Dazu wurden zunächst die Ableitungen dz/dL der Höhenprofile $z(L)$ berechnet (s. Abb. 6.2 (e) u. 6.3 (g)). Die größeren (111)-Terrassen sind anhand der längeren Abschnitte mit negativer Steigung, d. h. $d^2z/dL^2 < 0$, zu erkennen und die Facetten anhand der periodischen Strukturen.

Zur Ermittlung der auftretenden Periodizitäten wurden die Ableitungen dz/dL anschließend Fourier-transformiert (ohne Berücksichtigung des Faktors 2π) und – separiert in $T > T_C$ und $T < T_C$ – gemittelt. Die gemittelten Fourier-Transformierten sind in Abb. 6.4 dargestellt. Die Höhe einzelner Peaks korrespondiert mit dem Auftreten einer Struktur der entsprechenden Länge L . Der Peak bei $L = \sqrt{(4^{2/3} a_{[11\bar{2}]})^2 + d_{(111)}^2} = 15,835 \text{ \AA}$ entspricht einer einzelnen (223)-Einfachstufe und ist sowohl oberhalb als auch unterhalb des Phasenübergangs deutlich ausgeprägt, wobei der Peak für $T < T_C$ deutlich breiter ist als für $T > T_C$, was durch die lokale Struktur der Pb-Atome auf der Terrasse der Einfachstufe erklärbar ist (s. Kap. 6.1.1 und Vgl. Pb/Si(553) [524]). Bei $L = \sqrt{(5^{2/3} a_{[11\bar{2}]})^2 + d_{(111)}^2} = 19,106 \text{ \AA}$ ist in beiden Temperaturbereichen kein signifikanter Beitrag der (557)-Periodizität zu sehen. Daraus lässt sich schließen, dass (557)-Einzelstufen nur selten auftreten.

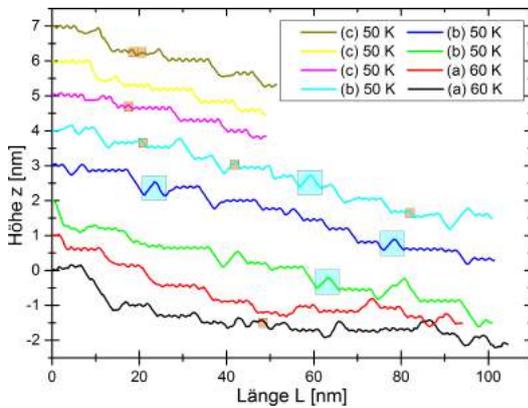
Bei inversen Längen $L^{-1} < 1/4 \text{ nm}^{-1}$ befinden sich die Signale der größeren Facettenstrukturen, die aus mindestens zwei Stufen zusammengesetzt sind. Für $T < T_C$ finden sich Peaks von Facetten der Größe und Orientierung $2 \times (223)$, $3 \times (223)$, $(7\ 7\ 10)$, $4 \times (223)$, $5 \times (223)$, $7 \times (223)$ und $8 \times (223)$. Die Situation ändert sich für $T > T_C$ derart, dass Peaks von Facetten der Größe und Orientierung $2 \times (557)$, $(7\ 7\ 10)$, $4 \times (223)$, $(17\ 17\ 25)$, $6 \times (223)$ und $(42\ 42\ 62)$ auftreten.

Der stark ausgeprägte Peak der (7 7 10)-Orientierung lässt sich mit einer Facettenstruktur ähnlich der von Ag/Si(557) mit $\Theta_{Ag} = 1,2 \text{ ML}$ erklären [578, 579]. Hierbei bildet sich eine Dreifachstufe mit einer Orientierung zwischen (112) und (113) zusammen mit einer entsprechend vergrößerten (111)-Terrasse zur Beibehaltung der (7 7 10)-Orientierung mit einer Gesamtlänge von $16a_{[11\bar{2}]}$ in $[11\bar{2}]$ -Richtung (s. hellblaue Markierungen in den STM-Bildern und Linescans in Abb. 6.2 u. 6.3). Die weiteren Peaks weisen für $T < T_C$ sämtlich eine (223)-Orientierung bei unterschiedlichen Facettenbreiten mit bis zu acht Einzelstufen auf, wie auch in den STM-Bildern in Abb. 6.2 (a)-(c) zu sehen ist.

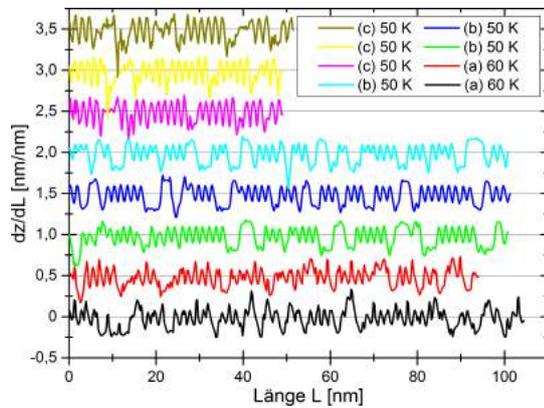
Bei $T > T_C$ hingegen verringert sich die gemessene Intensität der großen (223)-Facetten.



(a) $V = +0,5 \text{ V}$, $I = 110 \text{ pA}$, $T = 60 \text{ K}$. (b) $V = +0,5 \text{ V}$, $I = 115 \text{ pA}$, $T = 50 \text{ K}$. (c) $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 100 \text{ pA}$, $T = 50 \text{ K}$.



(d) Linescans entlang der Pfeile in (a)-(c): Facettenstrukturen sind anhand gezackter, horizontaler Abschnitte erkennbar, während größere (111)-Terrassen negative Steigungen dz/dL aufweisen.



(e) Ableitungen dz/dL der Linescans aus (d): Die periodischen Abschnitte entsprechen den Facettenstrukturen und die größeren (111)-Terrassen sind durch längere Bereiche mit $dz/dL < 0$ erkennbar.

Abbildung 6.2: STM-Analyse der Oberflächenorientierung bei $T < T_C$: Anhand des Kontrasts identifizierte (557)-Einfachstufen sind durch die orangefarbenen, gepunkteten Kästen in den STM-Bildern in (a)-(c) markiert und treten zufällig verteilt auf. Strukturen mit einer $(7\ 7\ 10)$ -Orientierung sind mit hellblau gepunkteten Kästen markiert. Die Linescans wurden beliebig ausgewählt. Die Markierungen an den Linescans in (d) geben die Positionen der Strukturen wider.

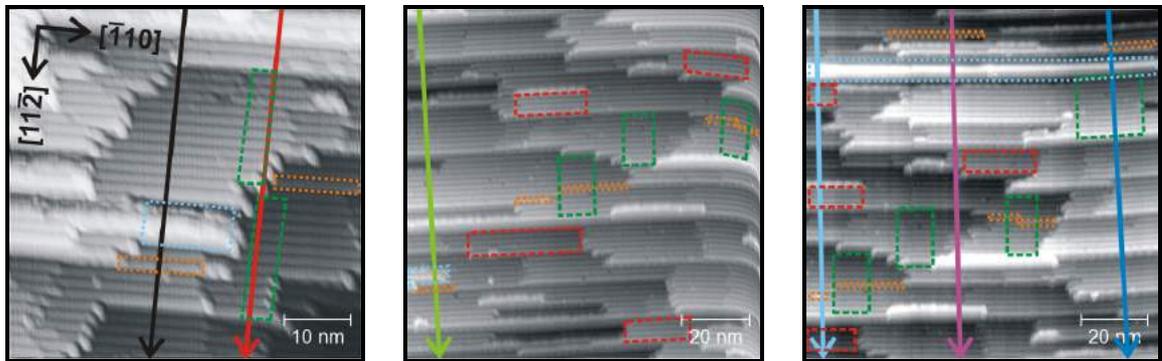
Stattdessen erscheint ein Peak genau bei der Länge $L = \sqrt{(48\ 2/3\ a_{[11\bar{2}]})^2 + (10\ d_{(111)})^2}$ der $(42\ 42\ 62)$ -Facette (s. grün gestrichelte Kästen in (b)-(d) und grün hinterlegte Bereiche der Linescans in (f) von Abb. 6.3). Diese besteht aus acht (223) -orientierten Einzelstufen und zwei (557) -orientierten Einzelstufen, die zusammen nicht derart angeordnet sind, dass eine (2×1) -Überstruktur in Form von zwei $(21\ 21\ 31)$ -Facetten entsteht⁹¹ und hat einen Winkel von $\Theta = 10,964^\circ$ relativ zur (111) -Ebene. Betrachtet man die aufgenommenen STM-Bilder

⁹¹ Die $(21\ 21\ 31)$ -Facette bestünde in diesem Fall aus einer Abfolge von zwei (223) -Einzelstufen unten, einer (557) -Einzelstufe in der Mitte und wiederum zwei (223) -Einzelstufen oben.

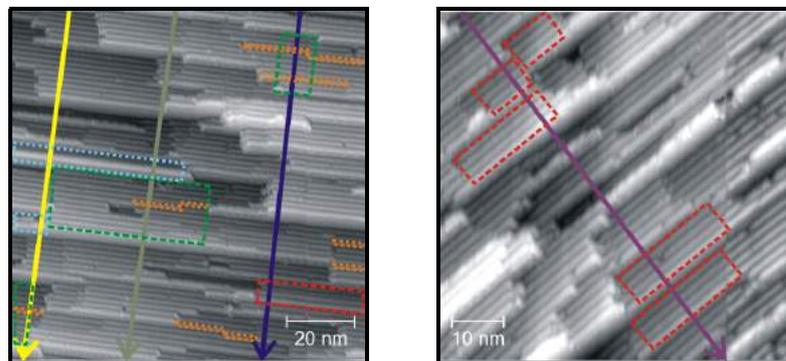
in Abb. 6.3 (a)-(e), so sticht die (42 42 62)-Facette nicht sonderlich hervor. Daher lässt sich annehmen, dass die (557)-Einzelstufen vermehrt am oberen bzw. unteren Ende der Facette lokalisiert sind, sodass der lokale Kontrast in den STM-Bildern nur kaum verändert ist, da sie so an die ausgleichenden (111)-Terrassen angrenzen. Der Peak bei $L = 38,213 \text{ \AA}$ korreliert mit einer Abfolge von zwei (557)-Einzelstufen, was diese Vermutung nährt.

Ein weiterer Peak bei $L = \sqrt{(19^{2/3} a_{[11\bar{2}]})^2 + (4 d_{(111)})^2} = 66,603 \text{ \AA}$ korreliert mit einer (17 17 25)-Facette bestehend aus einer (557)-orientierten und drei (223)-orientierten Einzelstufen, welche bereits in den SPA-LEED-Messungen von MARCIN CZUBANOWSKI [56, 475] beobachtet wurde (s. rot gestrichelte Kästen in (b)-(e) und rot hinterlegte Bereiche der Linesscans in (f) von Abb. 6.3). Weitere ausgeprägte Peaks für $T > T_C$ weisen auf $4 \times (223)$ - und $6 \times (223)$ -Strukturen hin. Diese Strukturen sind deutlich in den STM-Bildern sichtbar und können durch *Bundeling* und *Step Bunching* der Substratfläche erklärt werden.

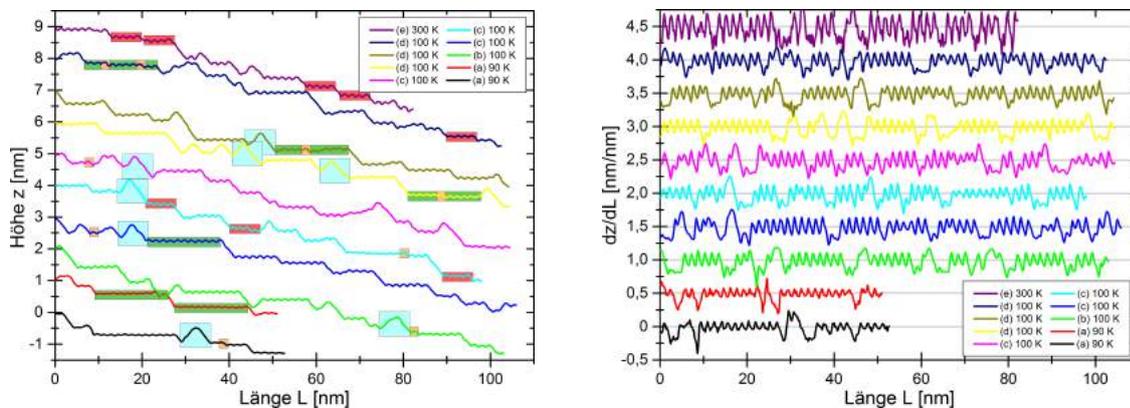
Zusammenfassend weist die Analyse der STM-Bilder somit auf eine Umfacettierung von (223)-Orientierung bei $T < T_C$ zu (42 42 62)-Orientierung größerer Facetten und (17 17 25)-Orientierung kleinerer Facetten bei $T > T_C$ hin (s. a. Abb. 6.5), sodass die grundlegenden Ergebnisse der SPA-LEED-Untersuchungen aus [56, 475] durch lokale Messungen bestätigt werden können.



(a) $V = +0,5 \text{ V}$, $I = 100 \text{ pA}$, $T = 90 \text{ K}$. (b) $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 100 \text{ pA}$, $T = 100 \text{ K}$. (c) $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 110 \text{ pA}$, $T = 100 \text{ K}$.



(d) $V = +0,5 \text{ V}$, $I = 105 \text{ pA}$, $T = 100 \text{ K}$. (e) $V = +1,0 \text{ V}$, $I = 125 \text{ pA}$, $T = 300 \text{ K}$.



(f) Line scans entlang der Pfeile in (a)-(e): Facettenstrukturen sind anhand gezackter, horizontaler Abschnitte erkennbar, während größere (111)-Terrassen negative Steigungen dz/dL aufweisen.

(g) Ableitungen dz/dL der Line scans aus (f): Die periodischen Abschnitte entsprechen den Facettenstrukturen und die größeren (111)-Terrassen sind durch längere Bereiche mit $dz/dL < 0$ erkennbar.

Abbildung 6.3: STM-Analyse der Oberflächenorientierung bei $T > T_C$ (Fortsetzung): Anhand des Kontrasts identifizierte (557)-Einfachstufen sind durch die orangefarbenen, gepunkteten Kästen in den STM-Bildern in (a)-(e) markiert und treten zufällig verteilt auf. Strukturen mit einer (7 7 10)-Orientierung sind mit hellblau gepunkteten Kästen markiert. Die rot und grün gestrichelten Kästen kennzeichnen größere Facetten mit (17 17 25)- bzw. (42 42 62)-Orientierung. Die Line scans wurden beliebig ausgewählt. Die Markierungen an den Line scans in (f) geben die Positionen der Strukturen wider.

6.1.3. Neuinterpretation der SPA-LEED-Messungen zum Phasenübergang

Refacettierung beim Phasenübergang

Im Rahmen der im vorherigen Abschnitt dargestellten STM-Analyse zur Umfacettierung beim Phasenübergang der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML wurde bereits auf die SPA-LEED-Messungen von MARCIN CZUBANOWSKI [56, 475] hingewiesen, die auch die Motivation für diese Messungen darstellten. Die Messdaten stellen hierbei jeweils eine Mittlung über sämtliche (möglicherweise inhomogene) Strukturen im Messbereich der Probe dar, während mit dem STM die lokale Struktur atomar aufgelöst werden konnte. Bei der eingehenden Lektüre von [56, 475] und im Vergleich mit den im Rahmen dieser Arbeit gemachten Ergebnissen lassen die Messdaten in [56, 475] neben der dort ermittelten (17 17 25)-Orientierung bei $T > T_C$ ebenso auf eine (42 42 62)-Orientierung schließen, wenn man die Ergebnisse der Abb. 3, 5 u. 6 in [56] neu bewertet, wie im Folgenden dargelegt wird. Hierzu wurden die Abb. 3 u. 5 aus [56] graphisch überarbeitet (s. Abb. 6.6).

Der Abstand der Hauptpeaks Δk_y entlang des *Step Trains* beträgt bei $T = 75$ K 21,3% SBZ und bei $T = 80$ K 20,4% SBZ (s. Abb. 3 u. 6 in [56] u. Abb. 6.6 (a)). Unterhalb von T_C entspricht der Abstand Δk_y damit der Periodizität einer (223)-Oberfläche mit $4^{2/3}$ atomaren Einheiten in $[11\bar{2}]$ -Richtung. Oberhalb von T_C ist der Abstand der Hauptpeaks geringer und die Aufspaltung des Hauptpeaks bei etwa 105% SBZ in Abb. 3 zum Nebenpeak beträgt in etwa 2,0 – 2,1% SBZ, was einem Zehntel der Distanz der Hauptpeaks entspricht. Die ge-

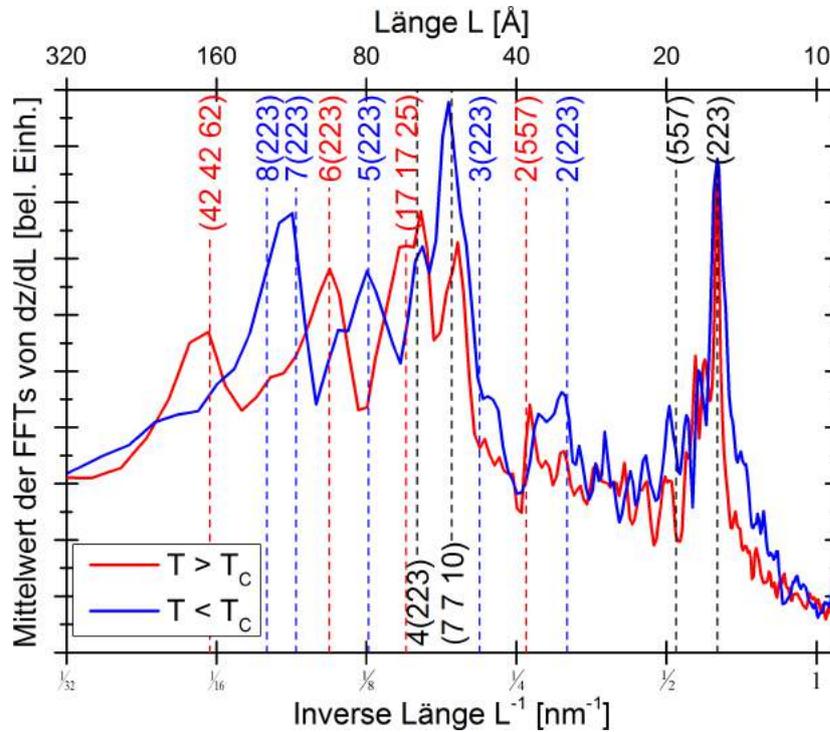
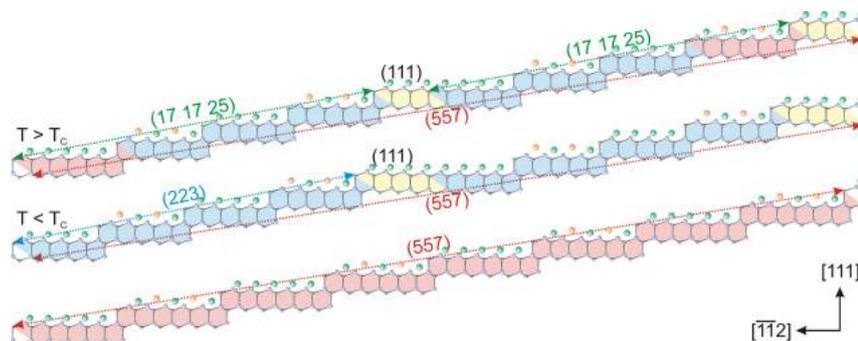


Abbildung 6.4: Mittelwerte der FFTs der Ableitungen dz/dL der Linescans über die Stufenstruktur von 1,31 ML Pb/Si(557): Deutlich ausgeprägt ist insbesondere der Peak der (223)-Einzelstufe. Darüber hinaus treten bei $T < T_C$ hauptsächlich größere Facetten mit (223)-Orientierung auf. Die Umfacettierung bei $T = T_C$ ist durch das Auftreten von Peaks im Bereich $T > T_C$ gekennzeichnet, die von der (223)-Orientierung abweichen, wie (17 17 25) und (42 42 62). Die Spektren wurden nicht normiert.

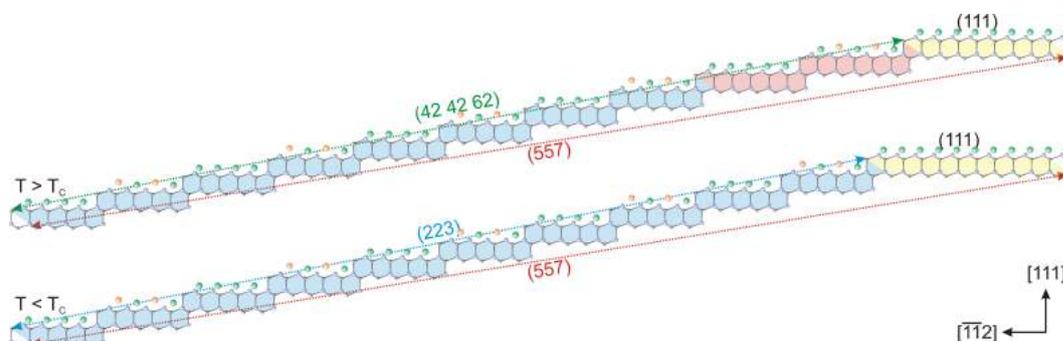
gemessene Intensität passt auch zu einer Periodizität mit weiteren Nebenpeaks im Abstand von 2,04 % SBZ, auch wenn diese teils nur sehr geringe Intensitäten aufweisen. Dies lässt sich mit einer Faltung des Signals der Facettenstruktur mit dem Signal einer reinen (223)-Stufenstruktur erklären. Aus der Aufspaltung von 2,04 % SBZ lässt sich eine Periodizität von $48 \frac{2}{3}$ atomaren Einheiten in $[11\bar{2}]$ -Richtung ableiten. Der Vergleich mit dem Stufenmodell zeigt, dass dies genau einer (42 42 62)-Facette entspricht, was ein erster Hinweis für eine weitere Interpretation der Messdaten ist. Bei der (17 17 25)-Facette beträgt die Aufspaltung dagegen 5,08 % SBZ, was $\Delta k_y/4$ entspricht und somit ebenfalls eine Erklärung für die Veränderung von Δk_y am Phasenübergang liefert. Die gemessene Aufspaltung des Peaks um 105 % SBZ passt jedoch nicht perfekt zu einer (17 17 25)-Facette und weist daher auf eine inhomogen gestufte Oberfläche hin.

Der zweite Punkt ergibt sich durch Analyse der Messdaten aus Abb. 5 in [56], hier dargestellt in Abb. 6.6 (b). Es wurden die Peakpositionen des $(2,0)_{\text{Si}}$ -Reflexes und eines Facettenpeaks in Abhängigkeit von $k_{\parallel, [11\bar{2}]}$ und $k_{\perp, [111]}$ am (662)-Bragg-Punkt vermessen und dargestellt. Aus der Analyse der Steigung

$$\tan(\Theta) = \frac{\Delta k_{\parallel, [11\bar{2}]}}{\Delta k_{\perp, [111]}} \quad (6.1)$$



(a) Unten: (557)-Oberfläche mit Einzelstufen. Mitte: Pb/Si(557)-Oberfläche bei $T < T_C$ mit kleinen (223)-Facetten und (111)-Terrassen. Oben: Pb/Si(557)-Oberfläche bei $T > T_C$ mit zwei möglichen (17 17 25)-Facetten und verkleinerten (111)-Terrassen.



(b) Unten: Pb/Si(557)-Oberfläche bei $T < T_C$ mit großen (223)-Facetten und (111)-Terrassen. Oben: Pb/Si(557)-Oberfläche bei $T > T_C$ mit einer möglichen (42 42 62)-Facette und verkleinertter (111)-Terrasse.

Abbildung 6.5: Schematische Darstellung der Stufenstrukturen der Pb/Si(557)-Oberfläche: Durch die Bedeckung mit ca. 1,30 ML Pb (grüne und orangefarbene Atome in unterschiedlicher Koordination) entstehen unterschiedliche Facettenstrukturen auf der Si(557)-Oberfläche in Abhängigkeit von der Temperatur T . Da die (557)-Orientierung insgesamt erhalten bleibt, gleichen (111)-Terrassen (gelb) den Fehlwinkel der Facetten aus. Die Einzelstufen haben (223)- bzw. (557)-Orientierung (blau bzw. rot) und damit unterschiedliche Breiten.

durch Fit mit einer Ausgleichsgerade lässt sich der Winkel Θ der Facette zur [111]-Richtung bestimmen. In [56] ergibt sich für $T \ll T_C$ ein Winkel $\Theta = 11,4 \pm 0,3^\circ$, was genau der (223)-Orientierung entspricht. Bei $T = 80$ K, also $T > T_C$, wird der sich ergebende Winkel mit $\Theta = 10,5 \pm 0,3^\circ$ angegeben, was relativ nahe an den $\Theta = 10,855^\circ$ der (17 17 25)-Facette liegt. Damit kommen die Autoren in Summe zu dem Schluss, dass eine Umfacettierung zur (17 17 25)-Orientierung bei $T > T_C$ vorliegt. Bei genauer Betrachtung von Abb. 6.6 (b) fällt jedoch auf, dass die Datenpunkte, die dieser Schlussfolgerung zugrunde liegen, teilweise recht deutlich von der Ausgleichsgerade entfernt liegen. Ohne Weiteres lässt sich eine neue Ausgleichsgerade an die Datenpunkte anpassen, die einen steileren Winkel zur [111]-Richtung aufweist und mit dem Winkel der (42 42 62)-Facette übereinstimmt ($\Theta = 10,964^\circ$).

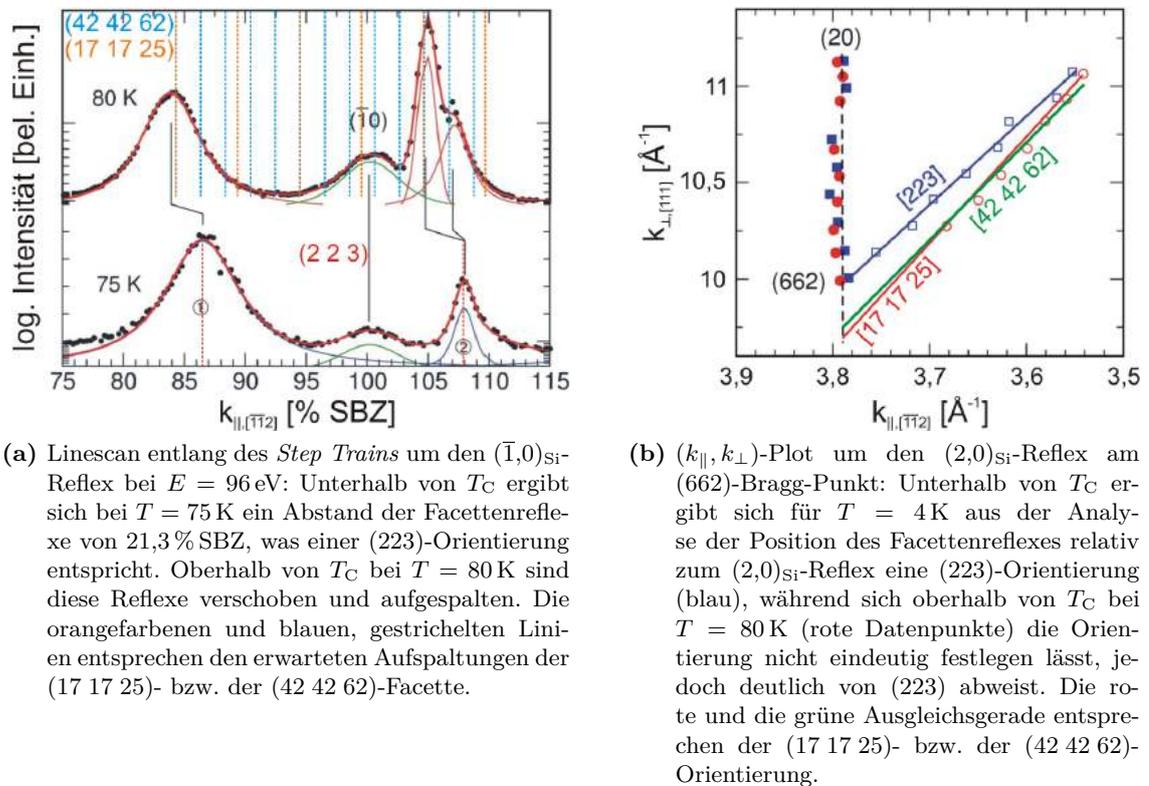


Abbildung 6.6: SPA-LEED-Analyse der Oberflächenorientierung; angepasst, aus [56].

Somit erscheint es möglich, dass die in dieser Arbeit festgestellte (42 42 62)-Orientierung größerer Facetten der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ bei $T > T_C$ bereits von MARCIN CZUBANOWSKI in [56, 475] gemessen wurde, diese jedoch aufgrund eines möglicherweise größeren Anteils an (17 17 25)-Orientierung auf den verwendeten Proben weniger deutlich aus der Datenanalyse hervorgegangen ist. Dies erscheint umso mehr möglich, da die (17 17 25)-Orientierung ebenfalls in der obigen STM-Analyse auftritt. Außerdem können sich bei unterschiedlichen Proben aufgrund der oben aufgeführten Einflüsse auf die Oberflächenorientierung lokal und global unterschiedliche Facettenstrukturen oberhalb von T_C stabilisieren. Festzuhalten bleibt der Nachweis lokaler und globaler (17 17 25)- und (42 42 62)-Facettenstrukturen mittels der durchgeführten STM- und SPA-LEED-Messungen und damit die Korrelation der Ergebnisse beider Messmethoden.

Bedeckungsänderung der (111)-Terrassen beim Phasenübergang

Abb. 7 in [56] zeigt die Abhängigkeit der doppelten Aufspaltung Δk_x eines $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexes im SPA-LEED in Abhängigkeit von der Temperatur T . Unterhalb von T_C beträgt Δk_x konstant 10,2% SBZ und oberhalb von T_C konstant 9,8% SBZ. Der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflex und seine Aufspaltung stammt von den (n,m) -Strukturen der DS-Phase auf den größeren (111)-Terrassen der mit Pb bedeckten Si(557)-Oberfläche. Die Größe der Aufspaltung lässt sich mit der Bedeckung Θ_{Pb} dieser Terrassen korrelieren (Vgl. Kap. 4.2.4 u. [456]). Ein Δk_x von 10% SBZ entspricht z. B. der (1,5)-Struktur mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,300 \text{ ML}$. Da die gemessenen Auf-

spaltungen Δk_x leicht größer bzw. kleiner sind als die Reflexaufspaltung der (1,5)-Struktur, liegen jeweils Mischstrukturen vor.

Im Fall von $T < T_C$ bedeutet die größere Aufspaltung eine Mischung mit der (1,4)-Struktur, sodass sich rechnerisch eine Gesamtbedeckung der (111)-Terrassen von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,299$ ML ergibt. Der Flächenanteil der (1,4)-Struktur beträgt dabei 11,3% und der Anteil der (1,5)-Struktur 88,7%. Die auf 9,8% SBZ verringerte Reflexaufspaltung für $T > T_C$ lässt sich dagegen durch eine Mischung der (1,5)-Struktur mit der (1,6)-Struktur erklären, sodass sich in diesem Fall eine rechnerische Gesamtbedeckung der (111)-Terrassen von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,301$ ML ergibt. Die (1,5)-Struktur behält dabei ihren Flächenanteil von 88,7% und die (1,6)-Struktur hat entsprechend einen Anteil von 11,3%. Dies bedeutet, dass sich beim Phasenübergang bei Temperaturerhöhung neben der Verringerung der Terrassenbreite durch die Umfacettierung auch die Bedeckung der (111)-Terrassen um etwa 0,1% erhöht. Daraus lässt sich folgern, dass die Bedeckung der Facettenstrukturen beim Phasenübergang einer Verringerung bei Erhöhung der Temperatur unterliegt, die Pb-Atomdichte auf den (557)-Einzelstufen demnach geringer ist als auf den (223)-Einzelstufen.

6.2. Nachweis und Eigenschaften einer eindimensionalen SODW

6.2.1. Einleitung und vorangegangene Ergebnisse aus ARPES-Messungen

Das folgende Kapitel beschäftigt sich mit dem Nachweis und den Eigenschaften einer eindimensionalen sog. SODW im Pb/Si(557)-System. Die neuesten Erkenntnisse hierzu wurden in *Nature Communications* [62, 63] veröffentlicht. In diesem Text werden die dortigen Ergebnisse aufgegriffen, zusammengefasst und um weitere Ergebnisse vorangegangener Studien und weitere Messungen ergänzt.

Ensembles aus Quantendrähten mit SOC bieten eine einzigartige Möglichkeit, gleichzeitiger Kopplungsstärke und ihre abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkungen zu kontrollieren (Vgl. Abb. 1.1), wodurch neue exotische Phasen der Materie erforscht werden können. In diesem Kapitel steht die Untersuchung einer exotischen SDW (sog. SODW) in Pb-Atomdrähten auf Si(557)-Oberflächen im Fokus des Interesses. Die atomare Struktur dieser Drähte wurde bereits zuvor (s. Kap. 6.1) beleuchtet. Hier wurden hingegen SR-ARPES-Messungen zur Bestimmung der Spin-Textur und (Magneto-)Transportmessungen kombiniert, um bei verschiedenen Zusatzbedeckungen $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ die Störeinflüsse auf den SODW-Zustand zu evaluieren. Die Spin-Polarisation S , die Kohärenzlänge ξ , die Spin-Dephasierungsrate τ_{SO} und die mit dem Zustand assoziierte Quasiteilchen-Energielücke Δ nehmen gleichzeitig mit der Coulomb-Abschirmung ab, während $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ zunimmt. Damit wird ein neuer Mechanismus zur Erzeugung und Manipulation eines Spin-Bahn-Verschränkungseffekts durch elektronische Wechselwirkung belegt. Trotz eindeutiger Beweise für spontane Spin-Rotationssymmetriebrechung und die Modulation der Spin-Impulsverteilung als Funktion von $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ verschwindet die durchschnittliche Spin-Polarisation über die SBZ, was darauf hinweist, dass die TRS intakt ist, wie auch theoretisch vorhergesagt wurde [65].

Liegt eine starke SOC im System vor, kann die daraus resultierende Rashba-Aufspaltung zu Fermi-Flächen mit *Nesting* zwischen entgegengesetzten helikalen Zuständen führen. Dies ist der sog. SODW-Zustand, der nicht durch unabhängige lokale Ordnungsparameter charakterisiert werden kann [64, 65]. Diese neue Phase der Materie entsteht ohne Bruch der TRS oberhalb eines kritischen Wertes für das Coulomb-Potential U und ihr Ordnungsparameter,

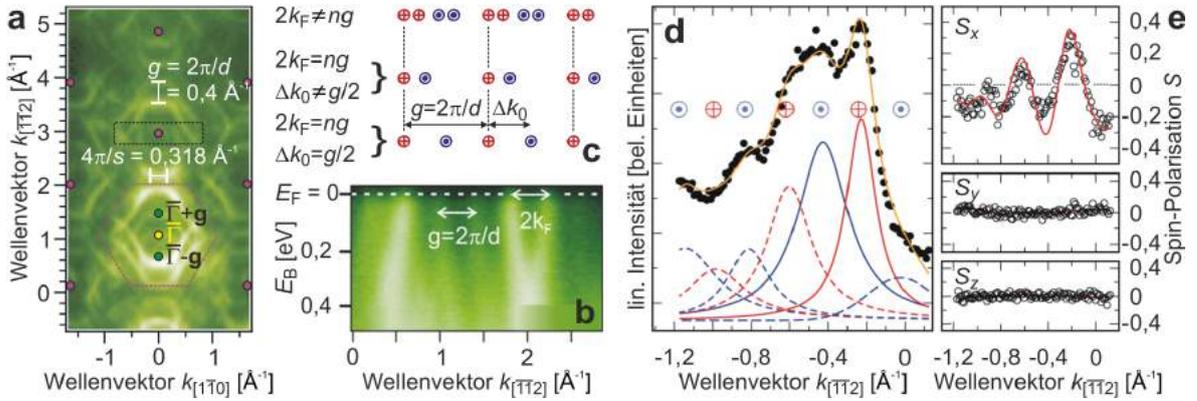


Abbildung 6.7: Vorangegangene ARPES- und SR-ARPES-Messungen an Pb/Si(557) mit 1,31 ML Bedeckung: (a) CEM ($E_B = 100 \text{ meV}$) und (b) BM bei $h\nu = 160 \text{ eV}$, $T = 40 \text{ K}$; angepasst aus [512]. In der CEM in (a) zeigen die Replikabänder der SBZs der (223)-Oberfläche (schwarz gestricheltes Rechteck) Fermi-Nesting entlang der $[\bar{1}12]$ -Richtung mit $g = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ über eine Breite von $4\pi/s = 0,318 \text{ \AA}^{-1}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Zudem sind die $\bar{\Gamma}$ -Punkte der (1×1) -Periodizität von Si und die zugehörige 1. SBZ durch lilafarbene Punkte bzw. durch das gestrichelte Hexagon gekennzeichnet. Die BM bei $k_{[1\bar{1}0]} = 0,24 \text{ \AA}^{-1}$ entlang der $[\bar{1}12]$ -Richtung verdeutlicht das Fermi-Nesting der Bänder ($2k_F = g$ im einfachsten Fall). (c) Mögliche Spin-Abfolgen der S_x -Komponente entlang der $[\bar{1}12]$ -Richtung mit und ohne Fermi-Nesting; aus [35]. (d) Spin-aufgelöster MDC entlang der $[\bar{1}12]$ -Richtung bei $h\nu = 24 \text{ eV}$, $E_B = 100 \text{ meV}$ und $T = 60 \text{ K}$ und (e) zugehörige Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} : Die Daten belegen eine dynamische antiferromagnetische Kopplung der Spins auf benachbarten Terrassen durch den Rashba-Effekt mit $\Delta k_0 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$, wobei die Spins (Spin-Polarisationsgrad bis zu $S = 40 \%$) entlang der Drähte (in $[1\bar{1}0]$ -Richtung) ausgerichtet sind; aus [35].

d. h. die Energielücke Δ , wird durch die Energieskalen sowohl der SOC-Stärke λ (s. Gl. (2.4)) als auch der Wechselwirkung U bestimmt [65]. Außerdem schützt eine endliche Lücke Δ die SODW vor Spin-Dephasierung gegen externe Störeinflüsse wie Magnetfelder, thermische Anregung und Dotierung durch zusätzliche Atome (s. u.). Für den Fall, dass die Wechselwirkungsenergie groß im Vergleich zur SOC ist, kann die SODW auf Kosten einer SDW jedoch umkippen (weitere Details zur Theorie s. Kap. 2.4).

Experimentell lässt sich eine SODW durch Unterschieden in der Ladungs- und Spin-Ordnung, das Nesting von Spin-polarisierten Zuständen und der damit einhergehenden Öffnung einer Energielücke, sowie der Depolarisation der Spin-Ordnung als Funktion der Coulomb-Abschirmung aufgrund der Dephasierung von Spin-Zuständen nachweisen. Beobachtungen all dieser Signaturen in den experimentellen Daten werden nachfolgend gezeigt und diskutiert.

Probenpräparation und Ergebnisse früherer ARPES-Messungen

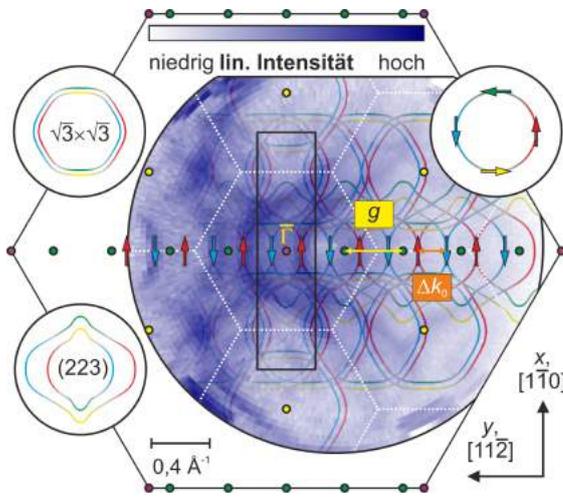
Die Präparation der Proben der hier vorgestellten Experimente wurde wie in Kap. 4.4.1 beschrieben durchgeführt. Alle im Folgenden gezeigten Daten wurden unterhalb der Phasenübergangstemperatur $T_C = 78$ K der Pb/Si(557)-Oberfläche mit 1,31 ML Bedeckung aufgenommen, die als Ausgangsbasis für weitere Experimente mit zusätzlich adsorbierten Pb-Atomen diente. Die ARPES-Messungen wurden mit Ausnahme der in [512] publizierten Daten mit p -polarisiertem Licht bei $h\nu = 24$ eV und $p \approx 1 \cdot 10^{-10}$ mbar an der COPHEE-Endstation der SIS-Beamline an der SLS aufgenommen (Details s. Kap. 3.3).

Ausgangspunkt der in *Nature Communications* [62, 63] veröffentlichten Ergebnisse sind die SPA-LEED-Messungen in Kap. 4.4.1 und die STM-Messungen in Kap. 6.1.1 zu den strukturellen Eigenschaften, sowie die Spin-integrierten bzw. -aufgelösten ARPES-Studien von CHRISTOPH TEGENKAMP und DANIEL LÜKERMANN [35, 512] an der Pb/Si(557)-Oberfläche mit 1,31 ML Bedeckung. Die wichtigsten Erkenntnisse dieser ARPES-Messungen sind in Abb. 6.7 abgebildet. Die Spin-integrierten Messungen (CEM und BM bei $h\nu = 160$ eV, $T = 40$ K) aus [512] zeigen deutlich, dass die Oberflächenbänder entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung am Fermi-Niveau durch den reziproken Gittervektor $\mathbf{g} = 2\pi/d \cdot \mathbf{e}_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ der (223)-Facettenstruktur senkrecht zu den Stufen mit $g = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ genestet sind. Das bedeutet, dass die elektronischen Korrelationen dieser Bänder zum Einen periodisch mit dem reziproken Gittervektor der atomaren Struktur senkrecht zu den Stufen auftreten und zum Anderen zur Bildung einer ein-dimensionalen Bandlücke unterhalb von $T_C = 78$ K führen [57–59, 212, 506].

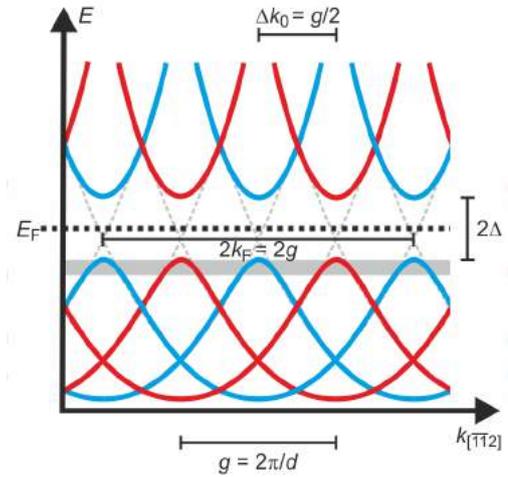
Die strukturellen Veränderungen bei diesem Phasenübergang (s. Kap. 6.1.3) lassen sich *per se* noch mit der Ausbildung einer CDW erklären, die auch zu einer Energielücke am Fermi-Niveau führt. Jedoch deuten bereits hier Details in MDCs darauf hin, dass eine zusätzliche elektronische Struktur darin verborgen liegt. Um diesen Punkt näher zu beleuchten wurden SR-ARPES-Messungen bei $T = 60$ K durchgeführt. Der Spin-aufgelöste MDC in Abb. 6.7 (d) und die zugehörige Spin-Polarisation in Abb. 6.7 (e) entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung (senkrecht zu den Stufen) bei $E_B = 100$ meV machen die versteckte Struktur sichtbar: Um den halben reziproken Gittervektor $g/2 = \Delta k_0$ verschoben finden sich im MDC weitere Peaks, welche im Vergleich die umgekehrte Spin-Orientierung (sog. Helizität) in der S_x -Komponente besitzen [35]. Die S_y - und S_z -Komponenten sind hingegen vernachlässigbar klein. Die Spin-Aufspaltung $\Delta k_0 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ am Fermi-Niveau wird durch den Rashba-Effekt (s. Kap. 2.2.1) hervorgerufen (mit dem Rashba-Parameter $\alpha_R = -1,9 \text{ eV \AA}$ [35]).

Diese Erkenntnisse und die Ergebnisse zur SIC-Phase von Pb/Si(111) (s. Kap. 5.2.1) zusammengenommen sind in die im Rahmen dieser Arbeit entstandenen neuen Darstellungen in Abb. 6.8 eingeflossen, um die Fermi-Fläche und die Bandstruktur gesamtheitlich zu erklären. Im Vergleich zur Publikation in *Nature Communications* [62] ist das Modell der Fermi-Fläche daher in Details nochmals überarbeitet worden (s. u.). Den Ergebnissen nach liegt nicht nur eine durch die Struktur hervorgerufene CDW unterhalb von T_C entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung vor, sondern auch eine dynamische antiferromagnetische Kopplung benachbarter Terrassen, die auch als linear polarisierte SDW [35] oder zykloidale Spin-Spirale beschreibbar ist (schematische Darstellung s. Abb. 6.10 (e)).

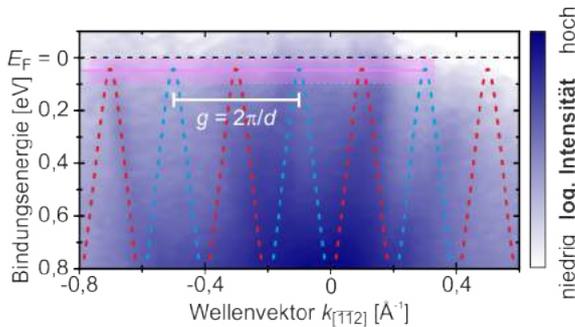
Die unterschiedlichen Periodizitäten von Spin und Ladung sind eine notwendige Voraussetzung für eine nicht-triviale Kopplung zwischen beiden Größen [62]. Im Kontext der SODW-Theorie sind damit alle Grundvoraussetzungen zur Bildung einer SODW erfüllt (s. o.). Im Folgenden geht es daher darum zu zeigen, dass dieser Zustand auch gegen Störungen wie äu-



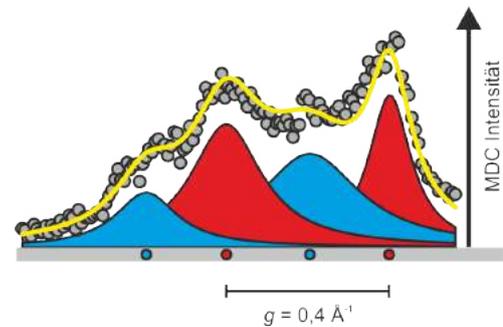
(a) CEM ($E_B = 100$ meV, $T = 60$ K) aus [35] und überlagertes neues Modell der Fermi-Fläche: Die Fermi-Fläche wird durch quasi-zweidimensionale Replikate der Fermi-Flächen der (223)-Facette und der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion gebildet (s. Insets). Die Renormierung der Fermi-Fläche führt zu einem *Hotspot*-Wellenvektor $\Delta k_0 = g/2$ zwischen Bändern umgekehrter Helizität entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung. Die Richtung entlang der Pb-Drähte wird im Zusammenhang mit Abb. 6.15 u. Abb. 6.16 (a) u. (c) diskutiert.



(b) Schematische Darstellung der Bandstruktur entlang der $[1\bar{1}2]$ -Richtung: Die beiden Farben bezeichnen die Spin-Orientierung der Teilbänder. Der Abstand zwischen Bändern gleicher Spin-Helizität beträgt $g = 2\pi/d$. Die Größe der durch Fermi-Nesting getriebenen Energielücke $\Delta = 20$ meV wurde in ARPES- und Transportmessungen [56, 57, 512] bestimmt.



(c) BM entlang der $[1\bar{1}2]$ -Richtung ($T = 60$ K): Das Modell aus (b) stimmt gut mit der gemessenen Intensität überein und bricht knapp unterhalb des Fermi-Niveaus aufgrund der Bandlücke Δ ein. Die Spin-Aufspaltung der Bänder wurde mittels Spin-aufgelöster MDCs im magenta hinterlegten Bereich vermessen (s. Abb. 6.10 (c), 6.11 u. 6.12; angepasst aus [35]).



(d) MDC entlang der $[1\bar{1}2]$ -Richtung ($E_B = 100$ meV, $T = 60$ K): Die Spin-Signatur der Teilbänder wurde aus Spin-aufgelösten Messungen abgeleitet [35]. Die Abfolge der Bänder mit umgekehrter Helizität ist äquidistant. Der graue Streifen in (b) symbolisiert den Messbereich des MDCs.

Abbildung 6.8: Spin-integrierte ARPES-Messungen an der (1,5)-Struktur der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML: Die starke SOC sorgt für eine konstruktive Interferenz von Fermi-Flächen mit der gleichen Helizität im \mathbb{K} -Raum entlang der $[1\bar{1}2]$ -Richtung senkrecht zu den Stufen. Dadurch öffnet sich in dieser Richtung eine Energielücke $\Delta = 20$ meV.

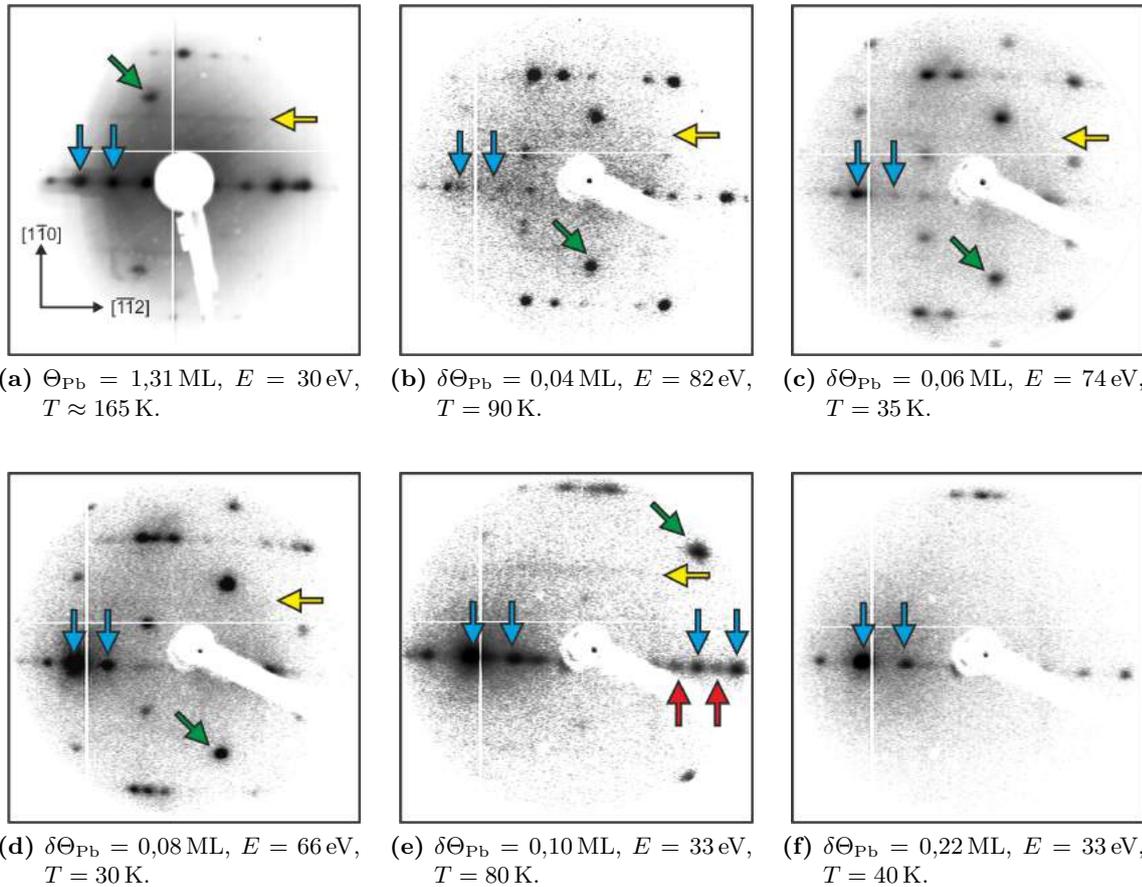


Abbildung 6.9: Optische LEED-Bilder der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{\text{Pb}}$: Die Pfeile zeigen charakteristische Merkmale – Reflexaufspaltung der (223)-Facetten (blau), ($\times 2$)-Periodizität an den Stufenkanten (gelb), ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion auf den (111)-Terrassen (grün). Die roten Pfeile bei $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1 \text{ ML}$ markieren die Verdoppelung des Periodizität durch Dekoration der übernächsten Stufenkanten.

ßere Magnetfelder oder Dotierung durch zusätzliche Pb-Atome zunächst robust ist und erst durch stärkere Veränderungen am System zusammenbricht.

6.2.2. Störung des SODW-Zustands durch zusätzliche Pb-Adsorption und Magnetfelder

Beeinflussung der Ladungsordnung durch zusätzliche Pb-Adsorption

Die Adsorption kleinster Mengen zusätzlicher Pb-Atome $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ auf der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $1,31 \text{ ML}$ bei $T = 80 \pm 10 \text{ K}$ führt nicht wie in anderen Atomdrahtsystem wie Ag/Si(557) [579, 580] oder Au/Si(111)-(5×2) [581] zu ungeordneten Strukturen, deren Elektronen das System lediglich dotieren, sondern es entstehen langreichweitig geordnete zusätzliche Pb-Atomdrähte an der Stufenkante der (111)-Terrassen (s. Kap. 4.4.1) [60, 62, 410, 507, 514]. Dies lässt besonders gut in Beugungsexperimenten wie LEED und SPA-LEED beobachten.

In Abb. 6.9 sind optische LEED-Bilder für verschiedene Zusatzbedeckungen bis 0,22 ML dargestellt⁹². Alle wesentlichen Strukturelemente der Pb/Si(557)-Oberfläche finden sich in ihnen wieder. Neben dem *Step Train* der (223)-Facetten in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung sind dies auch die ($\times 2$)-Periodizität von Si-Dimeren an den Stufenkanten und die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf den (111)-Terrassen, deren Reflexaufspaltung aufgrund der limitierten Auflösung des Instruments nur undeutlich zu erkennen ist. Bei $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1$ ML sind zudem deutlich die zusätzlichen Reflexe der Periodenverdopplung entlang des *Step Trains* sichtbar (s. Abb. 6.9(e)). Bei größeren Zusatzbedeckungen über 0,2 ML verschwinden hingegen die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ - und ($\times 2$)-Reflexe (s. Abb. 6.9(f)), da nun sämtliche Stufenkanten dekoriert sind und sich überschüssige Pb-Atome ungeordnet auf der Oberfläche verteilen.

Wesentlich besser als in den optischen LEED-Bildern lassen sich die jeweiligen Details jedoch in den in Abb. 6.10 (a,b) abgebildeten SPA-LEED-Daten erkennen. Hier zeigen die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe die in LEED kaum auflösbare Aufspaltung, die auf die Bildung eines regelmäßigen Netzwerks von Domänenwänden entlang der Drähte ($[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung) hinweist. Die Aufspaltung von etwa 10 % SBZ stimmt gut mit der überlagerten Korrugationsmodulation überein, die im STM-Linescan in Abb. 6.1 (b) gezeigt ist.

In den Linienprofilen in Abb. 6.10 (a) entlang des *Step Trains* treten für verschiedene Zusatzbedeckungen zwischen den (223)-Reflexen zusätzliche Peaks auf (markiert mit grünen Pfeilen). Diese Peaks in der Richtung senkrecht zu den Stufen reflektieren die periodischen Abstände $n \cdot d$ ($n \in \mathbb{N}$, ($n \times$) in Abb. 6.10 (a), sog. Superperiodizität) der zusätzlichen Pb-Atomdrähte an den Stufenkanten, die mit zunehmendem $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ abnehmen [60, 476]. Die mit diesen zusätzlichen Pb-Atomdrähten assoziierten elektronischen Zustände sind in $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung innerhalb der Bandlücke $E_G = 2\Delta$ lokalisiert (s. Abb. 6.10 (d)) und stehen damit stellvertretend für die vorherrschende Ladungsordnung des Systems.

Ob das SODW-Konzept tatsächlich zutrifft, kann durch die Betrachtung von Anregungen des Grundzustands mit der kritischen Pb-Konzentration von $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML geprüft werden. Der Ordnungsparameter Δ des SODW-Zustands lässt sich bspw. durch zusätzlich adsorbierte Pb-Atome oder externe Magnetfelder beeinflussen.

Beeinflussung der Energielücke durch zusätzliche Pb-Adsorption

Aus DC-Transportmessungen senkrecht zu den Stufen lässt sich die Größe der Energielücke Δ als Funktion der Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ bestimmen (s. Abb. 4.15 (b)) [509]. Wie in Abb. 6.10 (f) zu sehen ist, nimmt die Energielücke exponentiell ab mit

$$\Delta(\delta\Theta_{\text{Pb}}) = \Delta(0) \cdot e^{-q\delta\Theta_{\text{Pb}}}, \quad (6.2)$$

wobei $\Delta(0) = 20$ meV die Energielücke der Pb/Si(557)-Oberfläche ohne Zusatzbedeckung und $q = 26,3$ ML⁻¹ der Abschirmungsparameter sind. Der Abschirmungsparameter ist dabei auf das abgeschirmte Coulomb-Potential

$$U(\delta\Theta_{\text{Pb}}) = U(0) \cdot e^{-q\delta\Theta_{\text{Pb}}}, \quad (6.3)$$

mit der gleichen exponentiellen Abhängigkeit zurückzuführen, da $U \propto \Delta$ gilt [65]. Dieses Resultat ist im Einklang mit der Überlegung, dass die zusätzlichen Pb-Atomdrähte Subbänder innerhalb der Bandlücke bilden (s. schematische Darstellung in Abb. 6.10 (d)), die die Lücke

⁹² Den im Folgenden gezeigten ARPES-Messungen ging jeweils eine LEED-Messung voraus. Diese Daten sind hier abgebildet.

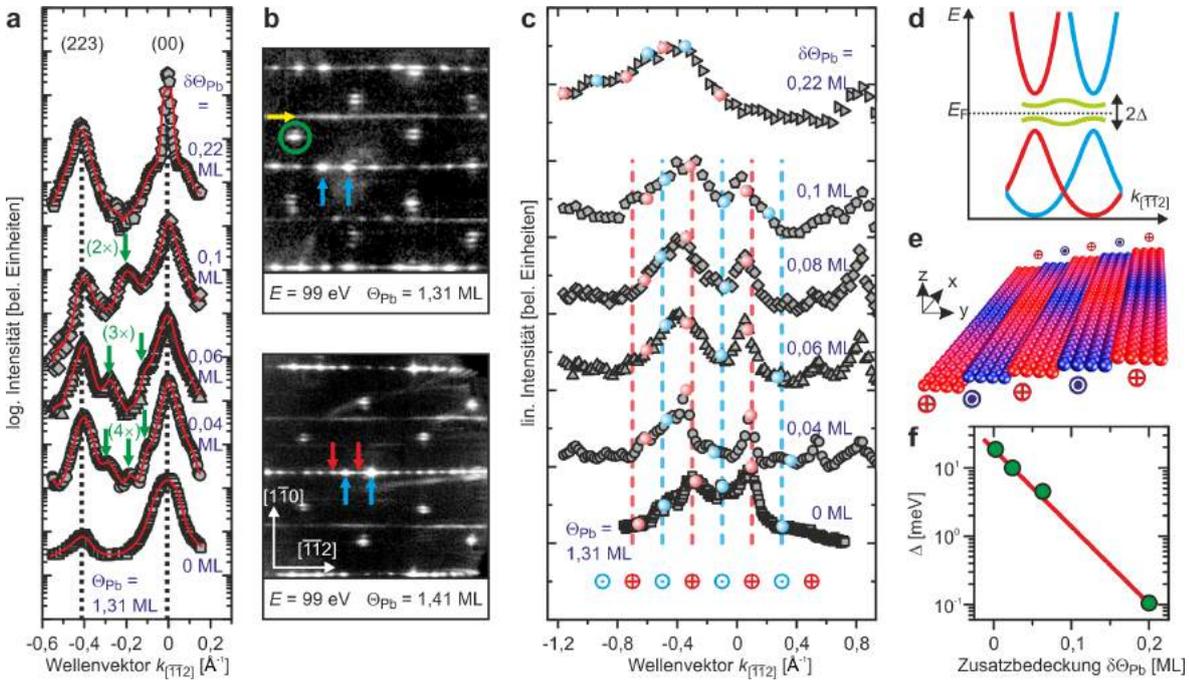


Abbildung 6.10: Entwicklung der Drahtstruktur mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$: (a) SPA-LEED-Beugungsprofile entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung für verschiedene $\delta\Theta_{Pb}$. Die Bildung langreichweitig geordneter Ketten an der Stufenkante ist durch Pfeile markiert. (b) SPA-LEED-Bilder mit $\delta\Theta_{Pb} = 0$ ML und 0,1 ML. Die Verdoppelung der Periodizität entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung ist bei $\delta\Theta_{Pb} = 0,1$ ML deutlich sichtbar (rote Pfeile); angepasst aus [60]. Optische LEED-Bilder sind in Abb.6.9 gezeigt. (c) Sequenz der Spin-integrierten MDCs aufgenommen entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung bei $E_B = 50$ meV für verschiedene Zusatzbedeckungen. Die roten und blauen Symbole bezeichnen die Spin-Textur und wurden aus Spin-aufgelösten Messungen abgeleitet (s. Abb.6.11). (d) Schematische Darstellung des Auftretens neuer *In Gap*-Zustände, exemplarisch mit einer $(2\times)$ -Periodizität gezeigt. (e) Realraum-Skizze von antiferromagnetisch gekoppelten Spin-Spiralen (in y -Richtung), die sich entlang der Drähte (in x -Richtung) ausbreiten. Die zehnfache Periodizität entlang der Pb-Drähte ist der Einfachheit halber nicht dargestellt. (f) Die Energielücke Δ nimmt mit zunehmendem $\delta\Theta_{Pb}$ – abgeleitet aus einer früheren Transportmessung [506] – exponentiell ab. Die aus den Transportexperimenten bestimmten Fehlerbalken liegen bei etwa 10 %. Der Fit (rote Linie) folgt $\Delta = 20 \text{ meV} \cdot \exp(-26,3 \text{ ML}^{-1} \cdot \delta\Theta_{Pb})$.

als Funktion von $\delta\Theta_{Pb}$ allmählich auffüllen. Folglich reduziert die Verringerung der Energielücke auch die effektive Kopplung zwischen Spins auf verschiedenen Terrassen. Mit anderen Worten erhöht die Dekoration der Stufenkanten die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung, die über die Spin-Bahn-Wechselwirkung an die Spin-Ordnung koppelt. Dies ist genau das SODW-Szenario [62].

Komplementäre Messungen mit STS bestätigen die Größe der Energielücke Δ [201, 514].

Beeinflussung der Spin-Ordnung durch zusätzliche Pb-Adsorption

Neben dem Verhalten der Ladungsordnung mit zunehmender Zusatzbedeckung ist auch die Spin-Ordnung (und mit ihr die Spin-Bahn-Ordnung) von elementarem Interesse bezüglich der Robustheit des SODW-Zustands. Hierzu wurden SR-ARPES-Messungen bei $E_B = 50$ meV unternommen, die die Spin-Polarisation bei verschiedenen $\delta\Theta_{Pb}$ beleuchten. Die aus dieser Analyse abgeleitete Spin-Textur wird durch die farbkodierten Peaks und Kreise der MDCs in Abb. 6.8 (d) bzw. Abb. 6.10 (c) dargestellt⁹³. Die Ladungs- und Spin-Ordnung senkrecht zu den Stufen zeigt die Periodizität der Facettenstruktur in der Spektroskopie durch Umklappstreuung. Aus der MDC-Peakstruktur des perfekten Drahtensembles (s. a. Abb. 6.8 (d)) lässt sich ein Modulationsvektor von $g = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ ableiten, in Übereinstimmung mit der Reflexaufspaltung entlang der $[\bar{1}12]$ -Richtung, die im SPA-LEED sichtbar ist. Allerdings zeigt das MDC-Signal wie bereits erwähnt eine zusätzliche Substruktur, die um $\Delta k_0 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ verschoben ist und die entgegengesetzte Spin-Helizität aufweist [35]. Die Maxima der S_x -Komponente der Spin-Polarisation sind in Abb. 6.10 (c) durch rot und blau gefärbte Kreise markiert. Die Abstände der Maxima sind offensichtlich bis mindestens $\delta\Theta_{Pb} = 0,1$ ML äquidistant, im Gegensatz zur Reflexaufspaltung in der Elektronenbeugung (s. Abb. 6.10 (a,b)). Die äquidistanten Abstände sind ein spektroskopisches Merkmal für eine SODW in ihrem Grundzustand [65]. In der schematische Darstellung der SODW im Realraum \mathbb{R} in Abb. 6.10 (e) ist die Äquidistanz von Δk_0 durch die antiferromagnetische Kopplung auf benachbarten Terrassen ausgedrückt, welche sich direkt aus der FFT der S_x -Komponente der Spin-Polarisation ergibt (nicht gezeigt).

Die Kopplung zwischen Ladungs- und Spin-Ordnung wird durch die eindimensionalen *In Gap*-Zustände vermittelt und wird mit zunehmendem $\delta\Theta_{Pb}$ schwächer. Bei einer Zusatzbedeckung von 0,22 ML kollabiert auch die ursprüngliche SODW-Phase, was sich in der vernachlässigbaren Spin-Polarisation niederschlägt (Spin-Depolarisation, s. u.). Da die Spin-Textur entlang der Fermi-*Nesting*-Richtung nur unterhalb von $\delta\Theta_{Pb} = 0,22$ ML und unterhalb von $T_C = 78$ K auftritt, deutet dies stark darauf hin, dass es sich um einen Wechselwirkungseffekt handelt und nicht um einen Einzelteilchen-SOC-Effekt [62]. Daraus lässt sich schließen, dass die Periodizität der Spin-Ordnung bis zu $0,1 \text{ ML} < \delta\Theta_{Pb} < 0,22 \text{ ML}$ ausschließlich durch die Periodizität \mathbf{g} der (223)-Facetten bestimmt wird. Diese facetteninduzierte Spin-Ordnung wird mit maximaler Spin-Polarisation $S \approx 40\%$ bei der kritischen Bedeckung $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML erreicht und wird daher als der SODW-Grundzustand interpretiert.

Spin-Depolarisation durch zusätzliche Pb-Adsorption

Neben Veränderungen der Spin- und Ladungsordnung stellt die Spin-Polarisation S der Oberflächenbänder einen weiteren durch zusätzliche Pb-Adsorption beeinflussbaren Parameter dar, da die Spin-Dephasierungszeit τ_{SO} proportional zur Größe der elektronischen Lücke Δ ist [65]. Abb. 6.12 zeigt die gemessenen und gefitteten Spin-Polarisationskurven entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung, die ausschließlich in der S_x -Komponente eine ausgeprägte Spin-Polarisation entlang der Drähte ($[1\bar{1}0]$ -Richtung) zeigen. Bis zu $\delta\Theta_{Pb} = 0,1$ ML zeigen die S_x -Polarisationskurven

⁹³ Aufgrund der besseren Auflösung wurden in Abb. 6.10 (c) Spin-integrierte MDCs anstelle der Spin-aufgelösten MDCs verwendet.

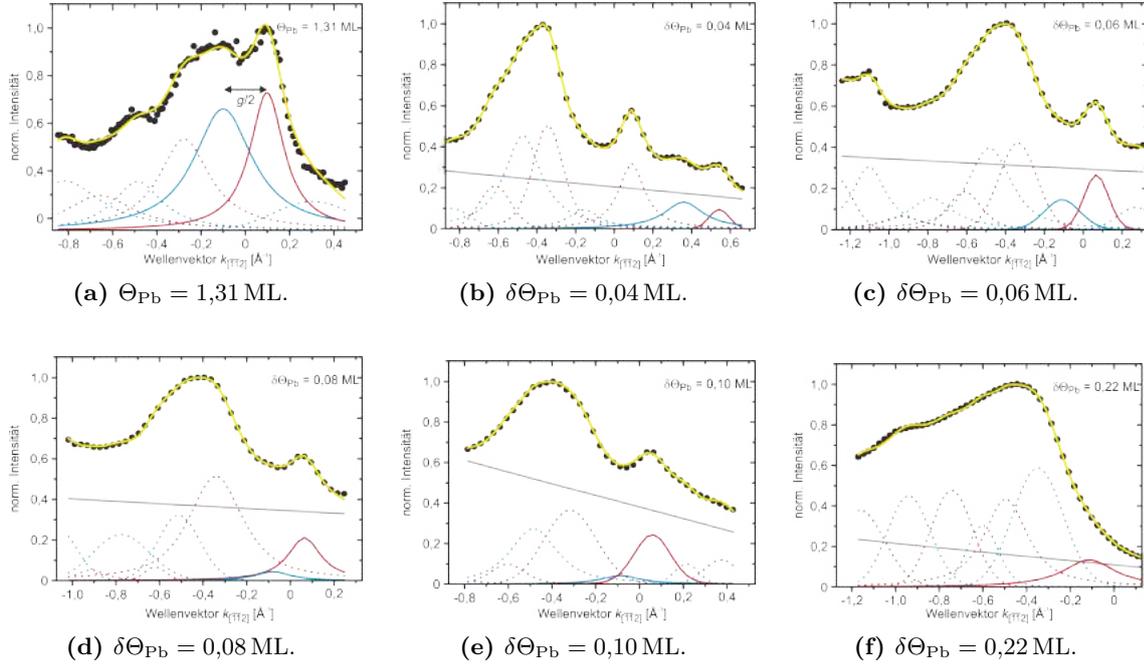


Abbildung 6.11: Spin-aufgelöste MDCs der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{\text{Pb}}$: Die MDCs wurden durch den $\bar{\Gamma}$ -Punkt entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung aufgenommen ($T = 60 \text{ K}$). Die gelben Linien sind die Summen aus den unten dargestellten, gefitteten Peaks (rote und blaue Linien entsprechend der Spin-Textur dieser Peaks, die aus der S_x -Komponente in Abb. 6.12 (a) abgeleitet wurde) an die experimentellen Daten (Punkte). Wichtige Fit-Parameter finden sich in Tab. E.1-E.6 im Anhang.

ein harmonisches, aber gedämpftes oszillatorisches Verhalten. Die Periode von $g = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$ sowie die die nahezu symmetrischen Amplituden führen zu einer verschwindenden mittleren Spin-Polarisation innerhalb der 1. SBZ $\bar{S} = 0$, was auf Einhaltung der TRS hinweist. Diese Beobachtung schließt die Möglichkeit einer SDW aus und begünstigt das SODW-Szenario [65].

Um die Spin-Depolarisation zu quantifizieren, wurden die *Peak-to-Peak-Werte* S_{P2P} der stärksten Oszillationen für alle drei Spin-Komponenten aufgetragen (s. Abb. 6.13 (a)). Die S_x -Komponente fällt exponentiell mit zunehmender Zusatzbedeckung und kann gut durch

$$S_x(\delta\Theta_{\text{Pb}}) = S_x(0) \cdot e^{-q\delta\Theta_{\text{Pb}}} + S_{\text{Rest},x} \quad (6.4)$$

mit $S_x(0) = 56 \%$ und $q = 27,8 \text{ ML}^{-1}$ beschrieben werden. Der so bestimmte Abschirmungsparameter q weicht nur um $5,7 \%$ von dem über DC-Transportmessungen bestimmten Wert ab (s. o.).

Wie in Abb. 6.12 u. 6.13 (a) gezeigt ist, sind die S_y - und S_z -Komponenten deutlich schwächer ausgeprägt als die S_x -Komponente. In einem idealen Rashba-System sollten diese Komponenten sogar gänzlich verschwinden, während durch Zusatzbedeckungen diese Regel aufgehoben wird und ein Hinweis für Spin-Spiralen sein könnte [64].

Nachdem die Energielücke Δ bei höheren Zusatzbedeckungen $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ verschwunden ist, kommt es zu einer schnellen Dephasierung der Spin-polarisierten Photolöcher innerhalb des SODW-Zustands, was in nahezu unpolarisierten Oberflächenbändern resultiert.

Zudem verringert sich die Kohärenzlänge $\xi = 2/\text{FWHM}$ der einzelnen Peaks in den MDCs exponentiell mit steigender Zusatzbedeckung, wobei FWHM die volle Halbwertsbreite der Peaks im K-Raum ist. Dies ist in Abb. 6.13 (b) für zwei MDC-Peaks dargestellt.

Spin-Dephasierung durch externe Magnetfelder

Das Spin-Dephasierungsverhalten lässt sich aus der Magnetoleitfähigkeit ableiten, die hauptsächlich durch die elektronischen Zustände an E_{F} bestimmt ist [61]. Exemplarisch sind die Magnetotransportkurven für $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ und $1,5 \text{ ML}$ im Inset von Abb. 6.13 (c) für die Richtung entlang der Drähte (x, $[1\bar{1}0]$ -Richtung) dargestellt. Eine quantitative Beschreibung der SOI im Zusammenhang mit dem Magnetowiderstand wurde von HIKAMI erarbeitet [223]. Die entsprechenden Fits sind ebenfalls im Inset dargestellt. Die Änderung der Magnetoleitfähigkeit $\Delta L(B) = L(B) - L(0)$ ist in Gl. (3.19) beschrieben. Unter Kenntnis der Fermi-Geschwindigkeit v_{F} der Elektronen in einem n -dimensionalen System können alle wesentli-

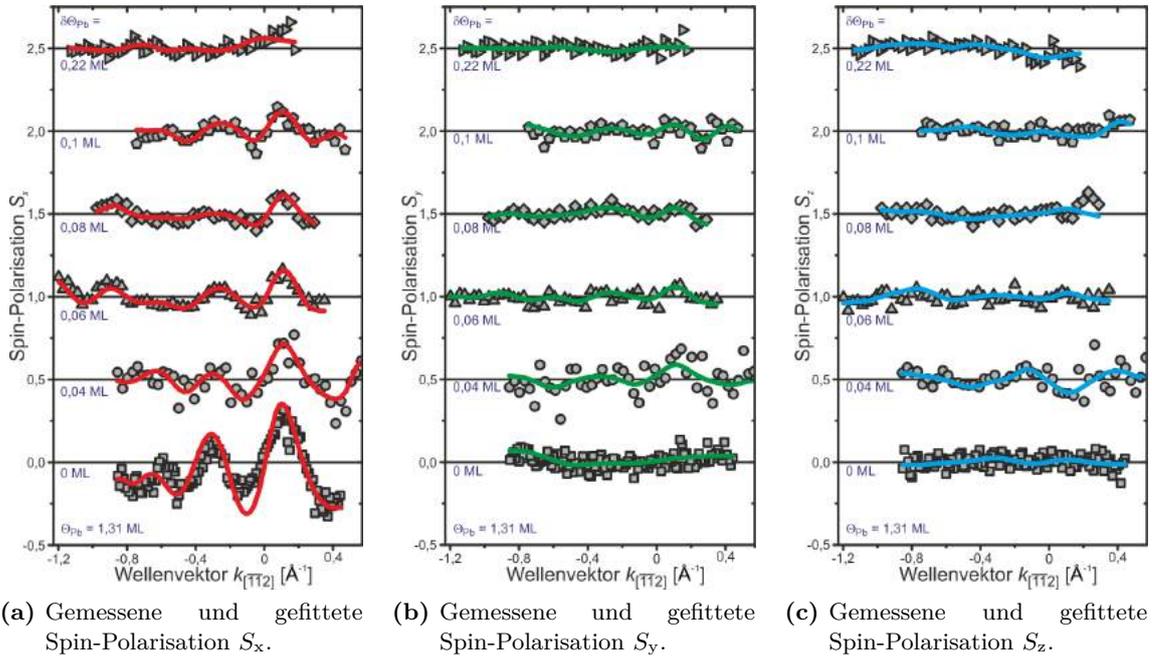
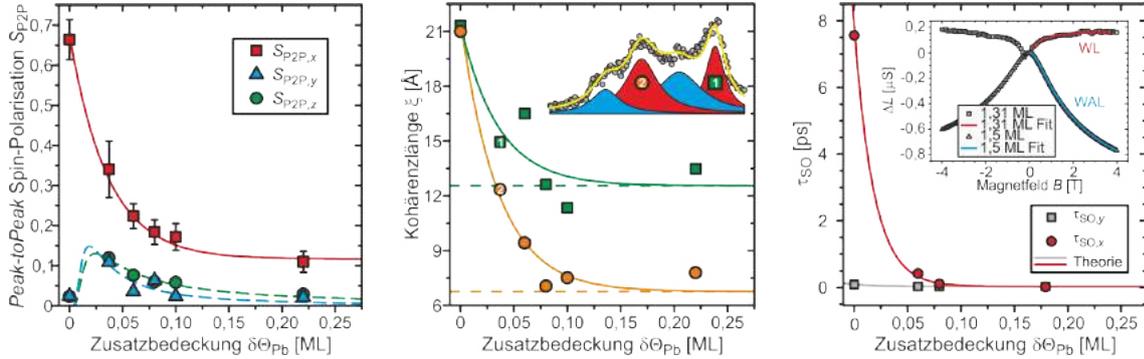


Abbildung 6.12: Komponenten des Spin-Polarisationsvektors senkrecht zu den Stufen der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{\text{Pb}}$: Die Spektren entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung bei $E_{\text{B}} = 50 \text{ meV}$, $T \approx 25 \text{ K}$ (zugehörige Mott-MDCs s. Abb. 6.11) sind zur besseren Sichtbarkeit verschoben dargestellt. Die S_y - und S_z -Komponenten der MDCs sind nahezu Null, so dass nur S_x , d. h. die Spin-Komponente entlang der Drähte (in $[1\bar{1}0]$ -Richtung) relevant ist. Wichtige Fit-Parameter finden sich in Tab. E.1-E.6 im Anhang.



- (a) Dämpfung der *Peak-to-Peak* Spin-Polarisation S_{P2P} : Die Fehlerbalken sind aus Fits an die Daten abgeleitet. Die rote Linie ist aus der Theorie abgeleitet, die gestrichelten Linien dienen der besseren Orientierung.
- (b) Dämpfung der Kohärenzlänge $\xi = 2/\text{FWHM}$ (nach Entfaltung der Spektromerterfunktion) der beiden intensivsten Peaks der Mott-MDCs: Die Datenpunkte bei $\delta\Theta_{Pb} = 0\text{ML}$ wurden aus Spektren bei $T = 60\text{K}$ berechnet.
- (c) Dämpfung der Spin-Bahn-Streuzeiten τ_{SO} , abgeleitet aus Magnetotransportmessungen [61]. Inset: Leitfähigkeitsänderung im Magnetfeld senkrecht zur Oberfläche und entlang der Drähte für zwei Bedeckungen.

Abbildung 6.13: Spin-Polarisation, Spin-Kohärenzlänge und Spin-Bahn-Streuzeiten der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31\text{ML}$ und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$: (a) Die *Peak-to-Peak*-Maximalwerte aller drei Spin-Komponenten nehmen exponentiell mit der Zusatzbedeckung ab. Auch die Kohärenzlänge in (b) der einzelnen Peaks in den MDCs fällt exponentiell ab, stabilisiert sich jedoch bei endlichen Werten. Die Spin-Bahn-Streuzeiten $\tau_{SO,x}$ entlang der Drähte in (c) klingen ebenfalls exponentiell mit zunehmendem $\delta\Theta_{Pb}$ ab. Die gestrichelte Linie ist ein Fit der SODW-Theorie nach Gl. (2.98) in Kombination mit Gl. (2.97). In der Richtung senkrecht zu den Stufen ist $\tau_{SO,y}$ nur etwa 1% so groß wie $\tau_{SO,x}$. Inset: Magnetotransport gemessen entlang der Drähte für 1,31 ML (aufgenommen bei $T = 40\text{K}$) bzw. 1,5 ML ($T = 50\text{K}$); aus [61]. Die durchgezogenen Linien sind eine Anpassung an die experimentellen Daten gemäß der Hikami-Theorie [223]. Die unterschiedlichen Vorzeichen in der Änderung von ΔL spiegeln direkt den Unterschied von τ_{SO} beide Fälle wider (τ_0 und τ_i sind nahezu konstant).

chen Streuparameter τ_0 (elastisch), τ_i (inelastisch) und τ_{SO} (Spin-Bahn) bestimmt werden. Für weitere Details zu den Experimenten und den Fits s. Ref. [61, 212, 482].

Die Änderung des Leitwertes als Funktion des Magnetfeldes ist in beiden dargestellten Fällen grundlegend unterschiedlich. Die Abnahme des Leitwertes mit zunehmendem Magnetfeld im Fall von $\Theta_{Pb} = 1,5\text{ML}$ ist ein deutlicher Hinweis auf eine starke SOC (WAL). Im Gegensatz dazu zeigt sich für $\Theta_{Pb} = 1,31\text{ML}$, wo die Stufenkanten nicht mit zusätzlichen Pb-Atomen dekoriert sind, das gegenteilige Verhalten (WL). Die detaillierte Analyse der Magnetotransportdaten ergab für den letzteren Fall $\tau_{SO,x} = 7,6\text{ps}$. Bei $\Theta_{Pb} = 1,5\text{ML}$ beträgt die Spin-Bahn-Streuzeit entlang der Pb-Drähte nur noch etwa 21 fs, also mehr als zweieinhalb Größenordnungen weniger. Die elastischen Streuzeiten entlang der Drähte unterscheiden sich hingegen nur um einen Faktor drei ($\tau_{0,x,1,31\text{ML}} = 20\text{fs}$, $\tau_{0,x,1,50\text{ML}} = 7,5\text{fs}$), während die in-

elastische Streuzzeit $\tau_1 = 20$ fs beträgt. In der Richtung senkrecht zu den Stufen betragen die elastischen Streuzzeiten $\tau_{0,y,1,31\text{ ML}} = 6$ fs und $\tau_{0,y,1,50\text{ ML}} = 3$ fs. Der Fehler der berechneten Streuzzeiten beträgt typischerweise etwa 10-30 %. Weitere Details finden sich in Ref. [61, 212].

Im Zusammenhang mit der oben diskutierten Spin-Depolarisation ist die Spin-Bahn-Streuzzeit τ_{SO} von besonderem Interesse. Sie bestimmt die Zeitskala von Streuprozessen, bei denen der Spin des Ladungsträgers geflippt wird und beschreibt daher die Spin-Dephasierung des Systems. Sie zeigt eine enge Korrelation mit dem Spin-Depolarisations- und Dekohärenzverhalten, die in den SR-ARPES-Messungen zu sehen sind. Der exponentielle Fit an die Messdaten mit

$$\tau_{\text{SO}}(\delta\Theta_{\text{Pb}}) = \tau_{\text{SO}}(0) \cdot e^{-q\delta\Theta_{\text{Pb}}} + \tau_{\text{SO,Rest}} \quad (6.5)$$

liefert $\tau_{\text{SO,x}}(0) = 7,8$ ps und $q_x = 54,4\text{ ML}^{-1}$ entlang der Drähte und $\tau_{\text{SO,y}}(0) = 59$ fs und $q_y = 51,1\text{ ML}^{-1}$ senkrecht zu den Stufen, sowie $\tau_{\text{SO,Rest}} \approx 22$ fs. Dies bedeutet eine starke Unterdrückung der Spin-Bahn-Streuung im Spin-polarisierten Transport entlang der Drähte für den ungestörten SODW-Zustand. Der Abschirmungsparameter q ist hier etwa doppelt so groß wie bei der Energielücke, der Spin-Depolarisation und dem Dekohärenzverhalten.

Es ist darauf hinzuweisen, dass das gefundene Abschirmungsverhalten der Transport- und ARPES-Messungen *per se* nicht selbstverständlich ist, da die beiden Methoden Elektronen bei unterschiedlichen Energien untersuchen. Dennoch ist es bemerkenswert, dass Spin-Polarisation und Spin-Bahn-Streuzzeiten dem gleichen Trend folgen, was wiederum die enge Verschränkung beider Größen demonstriert und ein Kennzeichen einer starken elektronischen Korrelation ist [62]. Wie in der Diskussion unten gezeigt wird, lassen sich beide Größen konsistent mit dem SODW-Formalismus erklären.

6.2.3. Ankopplung des SODW-Zustands an die zweite Dimension

Die Physik der Pb/Si(557)-Oberfläche mit 1,31 ML Bedeckung bei Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs bei $T_C = 78$ K und in der Richtung senkrecht zu den Stufen wird, wie in den oberen Abschnitten beschrieben, durch den SODW-Zustand dominiert. Die Transportmessungen entlang dieser Richtung zeigen isolierendes Verhalten (s. Abb. 4.15). Gleichzeitig zeigen die selben Messungen entlang der Pb-Drähte jedoch metallisches Verhalten [57–59, 212, 506]. Um diesen fundamentalen Unterschied zu erklären, bedarf es eines genaueren Blickes auf die Fermi-Fläche.

Wie oben bereits ausgeführt wurde, sind die Spin-polarisierten Bänder entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung am Fermi-Niveau *genestet*, was das isolierende Verhalten unterhalb von T_C erklärt. Oberhalb von 78 K ist die *Nesting*-Bedingung $2k_{\text{F},[\bar{1}\bar{1}2]} = n \cdot g$ ($n \in \mathbb{N}$) durch den strukturellen Phasenübergang (s. Kap. 6.1.2 u. 6.1.3) zerstört, sodass aktivierter Transport über die Stufenkanten hinweg ermöglicht wird.

Entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung gibt es jedoch keinen *Nesting*-Vektor, sodass ausschließlich metallisches Verhalten entlang der Pb-Drähte feststellbar ist. Dies ist mit den schmalen Streifen der DS-Phase auf den (111)-Terrassen erklärbar, die diese Drähte bilden (s. Kap. 6.1.1 u. Abb. 4.13 (c)) und die über die Stufen hinweg elektrisch nicht miteinander verbunden sind. Die Fermi-Fläche der DS-Phase im Pb/Si(111)-System wurde in dieser Arbeit in Kap. 5.2.3 untersucht. Für hohe Anteile der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion – wie hier im Fall von Pb/Si(557) mit der (1,5)-Struktur – zeigt die Fermi-Fläche der DS-Phase hauptsächlich die Signatur der SIC-Phase (s. Abb. 5.33 u. 5.34 (d)) und zusätzliche Replikabänder, die die Periodizität entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung reflektieren. Um die mit der DS-Phase verbundenen Teil der

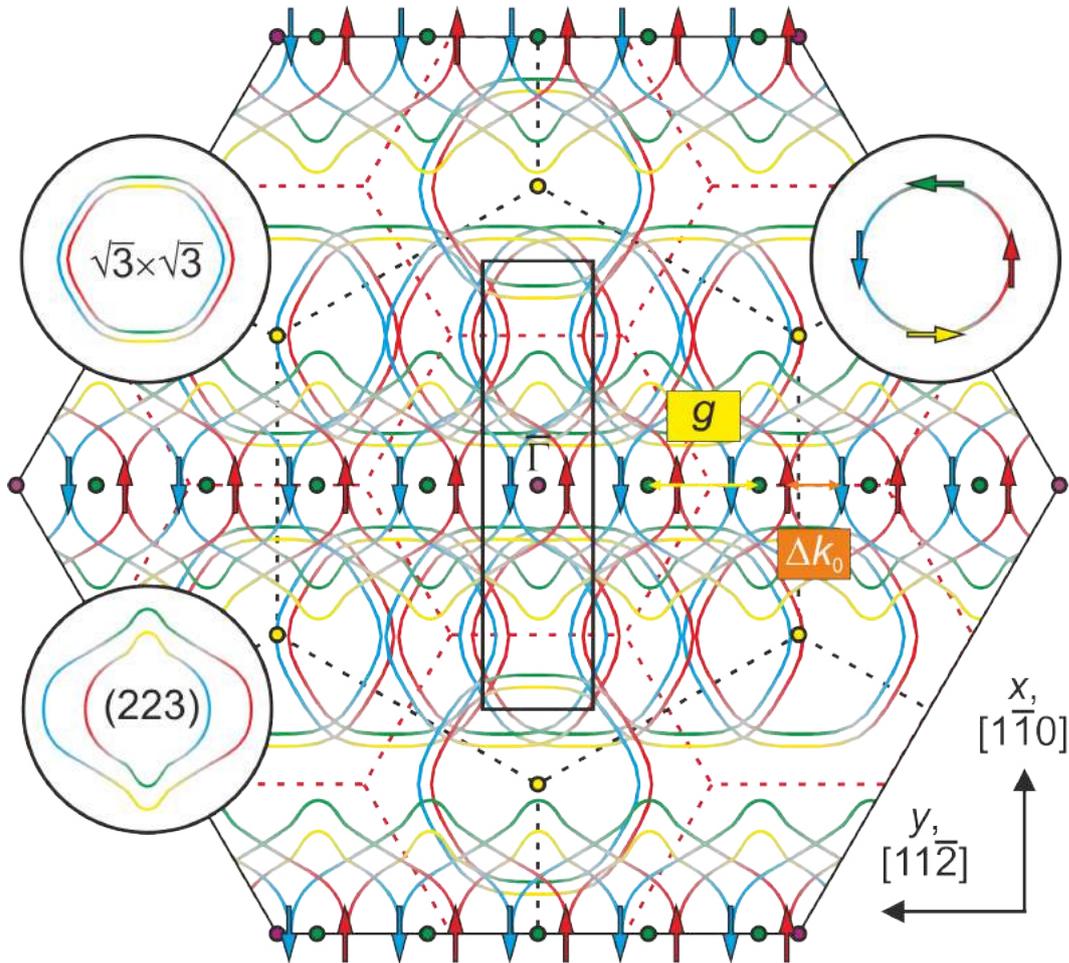
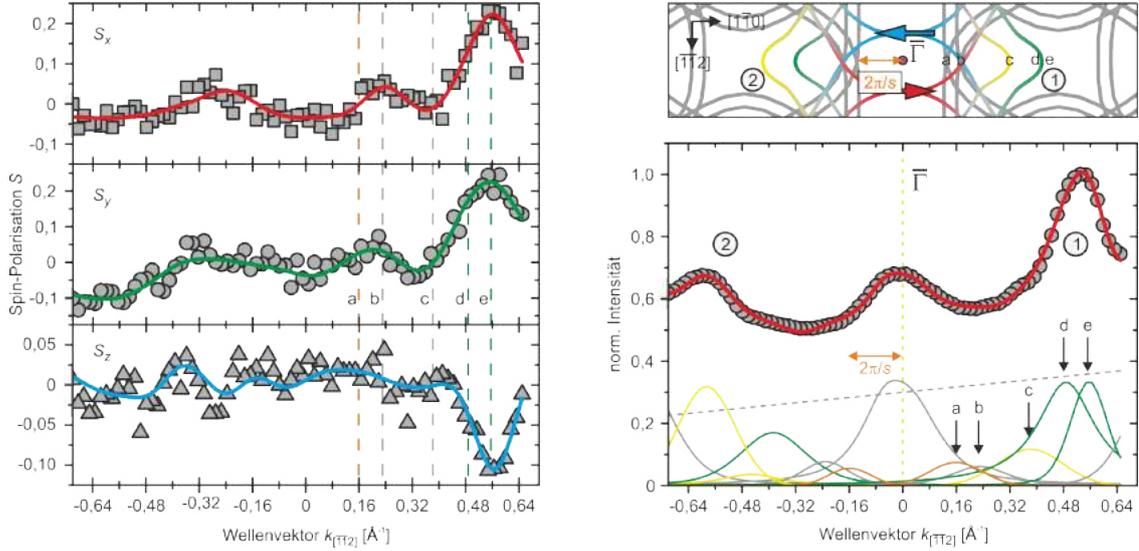


Abbildung 6.14: Schematische Darstellung der Fermi-Fläche von 1,31 ML Pb/Si(557): Die grünen und gelben Punkte sind die $\bar{\Gamma}$ -Punkte der SBZs der (223)-Oberfläche bzw. der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf den (111)-Terrassen, von denen jeweils Rashba-aufgespaltene, Spin-polarisierte (Replika-)Bänder ausgehen. Die farbigen Linien beschreiben die Isoenergielinien und deren Spin-Orientierung (Inset rechts) am Fermi-Niveau. Die gestrichelten schwarzen und roten Linien zeigen die 1. SBZs von Si(111) und der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, das Rechteck die 1. SBZ der (223)-Facette. Die Fermi-Flächen der beiden Strukturelemente sind in den runden Insets links abgebildet.

Fermi-Fläche von Pb/Si(557) zu erklären, reicht der leicht vereinfachende Blick auf die durch den *Warping*-Effekt hexagonal geformte, Spin-aufgespaltene Fermi-Fläche des S1-Bandes der SIC-Phase aus (s. Kap. 5.18 (c)). Diese ist in Abb. 6.14 um die sechs $\bar{\Gamma}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte herum eingezeichnet. Zusätzlich eingezeichnet sind einige dieser Isoenergielinien, die um Vielfache des reziproken Gittervektors \mathbf{g} entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung verschoben sind. In der Überlagerung mit der CEM in Abb. 6.8 (a) zeigt sich eine exzellente Übereinstimmung dieses Teils der Fermi-Fläche mit den Messdaten.



(a) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} : $E_B = 100$ meV, $T = 60$ K.

(b) Modell der Fermi-Fläche in der (223)-SBZ (oben) und Intensitätsverlauf und gefittete Peaks des Spin-aufgelösten MDCs (unten).

Abbildung 6.15: Spin-Polarisation der Pb/Si(557)-Oberfläche in $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,80 \text{ \AA}^{-1} = -2g$ mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML: (a) Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} ($E_B = 50$ meV). Die S_z -Komponente des Zustands am $\bar{\Gamma}$ -Punkt trägt nicht zum Spin-Polarisationsvektor bei. (b) Fermi-Fläche der 1. SBZ der (223)-Oberfläche mit Replikabändern aus benachbarten $\bar{\Gamma}$ -Punkten (oben). Die Beschriftungen **a-e** beziehen sich auf die markierten Positionen in (a) und im MDC unten. Der Abstand $2\pi/s = 0,158 \text{ \AA}^{-1}$ des Peaks **a** zum $\bar{\Gamma}$ -Punkt korreliert mit der Zehnfachperiodizität s entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Die Peaks des Spin-aufgelösten MDCs (unten) passen perfekt zu den Replikabändern benachbarter SBZs (graue Linien oben). Die Spin-Polarisation des Peaks am $\bar{\Gamma}$ -Punkt zeigt ausschließlich in S_x -Richtung (senkrecht zu den Stufen). Wichtige Fit-Parameter finden sich in Tab. E.7 im Anhang; angepasst aus [62, 63].

Spin-aufgelöste MDCs entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -2g = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$ durch den $\bar{\Gamma}_{(223)}$ -Punkt in Abb. 6.15 [62, 63] und bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,30 \text{ \AA}^{-1}$ in Abb. 6.16 (a) u. (c) zeigen neben dem *genesteten* SODW-Zustand um $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -2g$ als nächste Peaks (**a**, **b**) die der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zugehörigen Teilbänder. Da die beiden Teilbänder umgekehrte Spin-Polarisationen besitzen und lediglich $\Delta k_{\text{R},[1\bar{1}0]} = 0,072 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $\Delta k_{\text{R},[1\bar{1}0]} = 0,041 \text{ \AA}^{-1}$ auseinander liegen⁹⁴, ist die gemessene Spin-Polarisation netto beinahe Null. Entscheidender ist jedoch die Peakposition $k_{\text{F},[1\bar{1}0]}^- = 2\pi/s = 0,158 \text{ \AA}^{-1}$ der Peaks **a**. Die zugehörige Periodizität $s = 3,977$ nm entspricht bis auf eine Abweichung von lediglich 3,6 % der Periodizität von

⁹⁴ Im Vergleich dazu beträgt die Spin-Aufspaltung der SIC-Phase $\Delta k_{\text{R},[1\bar{1}0]} = 0,038 \text{ \AA}^{-1}$.

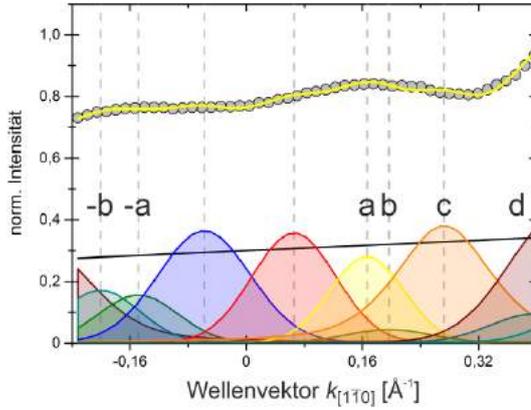
3,84 nm entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung der (1,5)-Struktur, die sich auch als Modulation des STM-Signals entlang der Pb-Drahnte bzw. als Aufspaltung der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Reflexe im SPA-LEED [60, 476] manifestiert. Die Fullung des der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zugeordneten Bandes reflektiert somit die Superperiodizitat der atomaren Struktur (Vgl. [512]).

Neben der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist als weiteres Element der in Abb. 6.14 konstruierten Fermi-Flache ein zusatzlicher Spin-aufgespaltener Zustand um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt eingezeichnet, der der (223)-Stufenstruktur zuzuordnen ist. Entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung sind die um Vielfache des reziproken Gittervektors \mathbf{g} verschobenen Replikabander dieses Zustands ebenfalls eingezeichnet. Die Spin-Aufspaltung der Teilbander betragt jeweils $\Delta k_0 = g/2 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ zueinander, wodurch diese *genestet* sind. Diese Bander bilden daher den SODW-Zustand. Vergleichende Uberlegungen mit dem Zustand der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bzgl. des Bandverlaufs in der BM in Abb. 6.8 (c) lassen den Schluss zu, dass fur die Fermi-Wellenvektoren beider Helizitaten des Zustands entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung die Relation $2k_F = 2g$ als *Nesting*-Bedingung erfullt ist (s. Abb. 6.8 (b)). Die Peaks $\mathbf{c-e}$ in den beiden Spin-aufgelosten MDCs entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung in Abb. 6.15 bzw. Abb. 6.16 (a) u. (c) passen aufgrund ihrer Positionen im \mathbf{K} -Raum nicht zu den Replikabandern der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Folglich liegt der Verdacht nahe, dass diese Peaks die zweidimensionale Fortsetzung des SODW-Zustands zu deformierten Fermi-Kreisen bilden. Die in Abb. 6.14 im Inset unten links eingezeichnete Form (direkt aus den Peakpositionen der MDCs bestimmt) der Isoenergielinien des Zustands erklart tatsachlich die periodisch in $[11\bar{2}]$ -Richtung auftretenden Intensitaten um $k_{[1\bar{1}0]} \approx 0,38 - 0,56 \text{ \AA}^{-1}$ in der CEM in Abb. 6.8 (a). Die Spin-Aufspaltung in $[1\bar{1}0]$ -Richtung betragt bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$ (MDC in Abb. 6.15) $\Delta k_{R,[1\bar{1}0]} = 0,086 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,3 \text{ \AA}^{-1}$ (MDC in Abb. 6.16 (a) u. (c)) $\Delta k_{R,[1\bar{1}0]} = 0,126 \text{ \AA}^{-1}$, was etwa einen Faktor 2 geringer ist als entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung. Der mittlere Fermi-Wellenvektor $\bar{k}_{F,[1\bar{1}0]}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$ ist zudem $0,427 \text{ \AA}^{-1}$ gro.

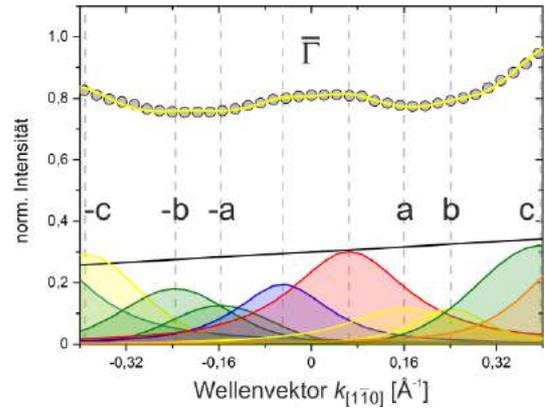
Bei einer Zusatzbedeckung von $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08 \text{ ML}$ wurde ebenfalls ein Spin-aufgeloster MDC entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei $k_{[1\bar{1}2]} = -2g = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$ durch den $\bar{\Gamma}_{(223)}$ -Punkt aufgenommen (s. Abb. 6.16 (b) u. (d)), um etwaige Veranderungen entlang der Pb-Drahnte zu evaluieren. Die Peakpositionen andern sich im Vergleich zum in Abb. 6.15 dargestellten MDC entlang der gleichen Koordinaten bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ nur marginal (Vgl. Tab. E.7 u. E.9). Die leicht vergroerte Rashba-Aufspaltung von $\Delta k_{R,[1\bar{1}0]} = 0,08 \text{ \AA}^{-1}$ des Bandes der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion ist noch die auffalligste Veranderung. Auf die Periodizitat der DS-Phase entlang der Pb-Drahnte auf den (111)-Terrassen hat dies jedoch keinen Einfluss, da sich die Relation $k_{F,[1\bar{1}0]}^+ = 2\pi/s = 0,158 \text{ \AA}^{-1}$ der Peaks $\pm\mathbf{a}$ nicht verandert hat. Auch bei den Spin-Polarisationen ist keine groe Veranderung feststellbar.

6.2.4. Diskussion der Ergebnisse

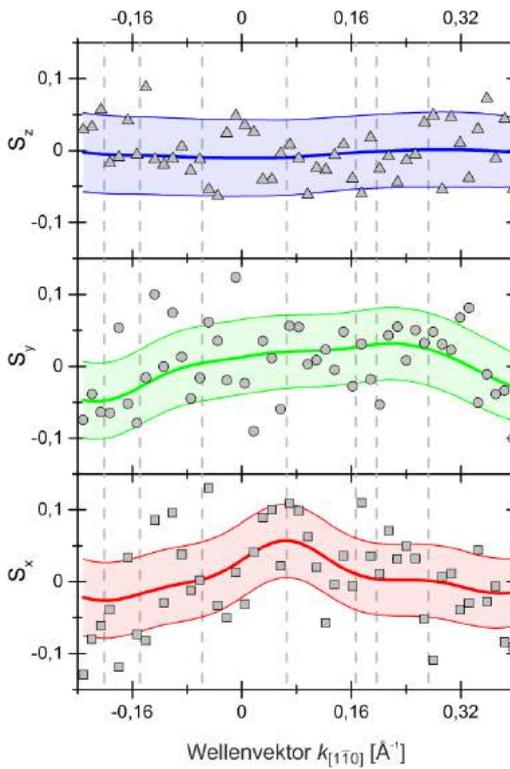
Aus den Daten der SR-ARPES- und Magnetotransportmessungen lasst sich mit einigen weiteren Uberlegungen auf die Streumechanismen der Elektronen innerhalb der Pb/Si(557)-Struktur und Details der Spin-polarisierten Bandstruktur, sowie des SODW-Zustands nach Kap. 2.4 schließen. Hierzu gilt es, das mit der (223)-Facette assoziierte Band naher zu betrachten. Aus der EELS-Messung in [454] folgt in der Naherung eines quasi-freien eindimensionalen Elektronengases entlang der Pb-Drahnte $n_{1D}/m_{[1\bar{1}0]}^* = 0,9 \text{ \AA}^{-1}/m_e$. Gleichzei-



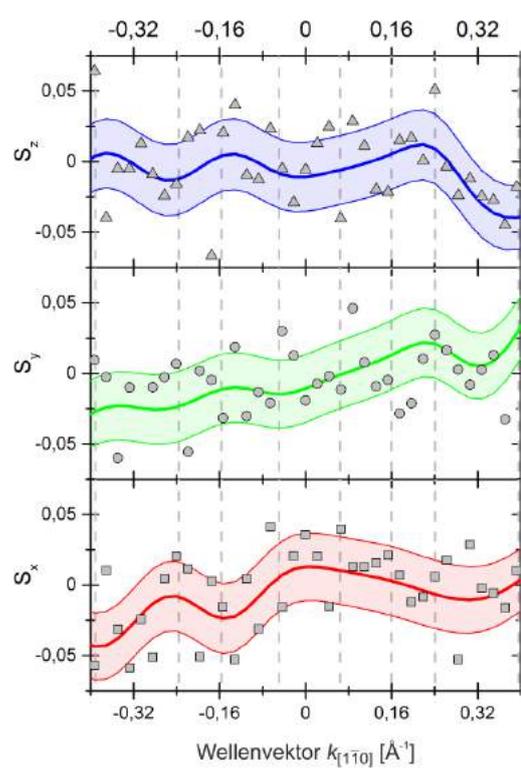
(a) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,30 \text{ \AA}^{-1}$ (entspricht $k_{[1\bar{1}2]} = 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ in der 1. (223)-SBZ).



(b) Intensitätsverlauf und gefittete Peaks bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,80 \text{ \AA}^{-1} = -2g$ mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08 \text{ ML}$.



(c) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,30 \text{ \AA}^{-1}$ (entspricht $k_{[1\bar{1}2]} = 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ in der 1. (223)-SBZ: Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.



(d) Gemessene und gefittete Komponenten des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} bei $k_{[1\bar{1}2]} = -0,80 \text{ \AA}^{-1} = -2g$ mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08 \text{ ML}$: Die gefärbten Flächen geben die Unsicherheiten des Fits an.

Abbildung 6.16: Spin-aufgelöste MDCs von 1,31 ML Pb/Si(557) und mit Zusatzbedeckung in $k_{[1\bar{1}0]}$ -Richtung: Spin-polarisierte Peaks (Farbe entsprechend der Spin-Orientierung in der xy-Ebene und ein linearer Untergrund (schwarze Linie) beschreiben sehr gut den Verlauf der Intensität der Spin-aufgelösten MDCs (Messdaten: Punkte, Fit: gelbe Linie) entlang der Pb-Drähte. Wichtige Fit-Parameter finden sich in Tab. E.7 u. E.9 im Anhang.

tig gilt $n_{1D} = 2\bar{k}_{F,[1\bar{1}0]}^2/\pi$. Unter der Annahme, dass die Elektronendichte auch auf das (223)-Band übertragbar ist, ergibt sich für die effektiven Massen $m_{[1\bar{1}0]}^* = 0,302 m_e$ und $m_{[\bar{1}\bar{1}2]}^* = m_{[1\bar{1}0]}^* \cdot (\bar{k}_{F,[\bar{1}\bar{1}2]}/\bar{k}_{F,[1\bar{1}0]}) = 0,265 m_e$. Die Fermi-Energie beträgt damit $E_F = 2,3 \text{ eV}$. Aus den Spin-Aufspaltungen $\Delta k_0 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ und $\Delta k_{R,[1\bar{1}0]} = 0,126 \text{ \AA}^{-1}$ lassen sich mittels Gl. (2.62) damit auch die Rashba-Koeffizienten am Fermi-Niveau ermitteln. Unter Berücksichtigung der Spin-Orientierung ergeben sich $\alpha_{R,[1\bar{1}0]} = -1,589 \text{ eV \AA}$ und $\alpha_{R,[\bar{1}\bar{1}2]} = -2,875 \text{ eV \AA}$. Das Anisotropieverhältnis beträgt damit $\alpha_{R,[1\bar{1}0]}/\alpha_{R,[\bar{1}\bar{1}2]} = 0,55$. In [35] wurde dagegen nur $\alpha_{R,[\bar{1}\bar{1}2]} \approx -1,9 \text{ eV \AA}$ für die $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung aufgrund einer etwas zu hoch angenommenen effektiven Masse ($m^* = 0,4 m_e$ nach [454, 512]) abgeschätzt. Der neue Wert des Rashba-Koeffizienten $\alpha_{R,[\bar{1}\bar{1}2]}$ schlägt den Wert der β -Bi/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion mit $\alpha_R = 1,4 - 2,3 \text{ eV \AA}$ [108, 109, 564] als bisherigen bekannten Rekordhalter ähnlicher Metalladsorbat/Halbleiter-Systeme deutlich. Die beiden (neuen) Rashba-Koeffizienten von Pb/Si(557) sind auch etwa doppelt so groß wie diejenigen der SIC-Phase von Pb/Si(111), was nach Gl. (2.21) auf einen doppelt so großen Erwartungswert des Potentialgradienten $\langle \partial_z V \rangle$ senkrecht zur Oberfläche zurückgeht. Dieser ist offensichtlich durch die atomare Stufenstruktur induziert. Diskutiert wurde der Stufeneinfluss an der Au(23 23 21)-Oberfläche ebenfalls anhand von ARPES-Messungen [70]. Bei der Au-Oberfläche ist die Variation des Oberflächenpotentials durch die Stufen offenbar verschwindend gering, obwohl diese einen lateralen eindimensionalen QWS bilden. Jedoch wurde keine Energieaufspaltung senkrecht zu den Stufen durch den anisotropen Rashba-Effekt festgestellt. Auch der Beitrag der Kernpotentiale der vizinalen und der flachen Au(111)-Oberflächen sind gleich. Der QWS modifiziert demnach den Rashba-Effekt durch das *Confinement*. Ähnliches liegt im hier diskutierten Pb/Si(557)-System mit den CDW-Zuständen senkrecht zu den Stufen ebenfalls vor.

Aus der SR-ARPES-Messung in Abb. 6.15 lassen sich nach Mittelung der Spin-Orientierungen der Peaks $\pm \mathbf{c}$ und $\pm \mathbf{d}$ mit dem Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ aus Gl. (2.95) die einzelnen Komponenten des Vektors des Rashba-Koeffizienten $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k})$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung entlang der Pb-Drähte mittels Gl. (2.51) bestimmen. Dies ist möglich, da sich der Hamilton-Operator $\mathcal{H}_{\text{SODW}}$ aus Gl. (2.92) zur Beschreibung des SODW-Zustands des (223)-Bandes in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf den Hamilton-Operator \mathcal{H}_R des Rashba-Effekts reduziert ($\varphi = 0^\circ$). Da die Pb/Si(223)-Facette lediglich C_1 -Symmetrie besitzt, sind nach Tab. 2.3 für den Rashba-Effekt erster Ordnung sämtliche Spin-Orientierungen möglich. Die Fermi-Fläche ist in dieser Richtung nicht *genestet*, sodass der Einfluss der Energielücke Δ ignoriert werden kann. Es ergeben sich $\alpha_1^{xx} = -1,080 \text{ eV \AA}$, $\alpha_1^{xy} = -0,633 \text{ eV \AA}$ und $\alpha_1^{xz} = -0,979 \text{ eV \AA}$ für den anisotropen Rashba-Effekt erster Ordnung (s. Kap. 2.2.1). Der Gesamtwert $\alpha_{R,[1\bar{1}0]} = -1,589 \text{ eV \AA}$ folgt aus der Relation

$$\left| \alpha_{R,[1\bar{1}0]} \right| = \sqrt{(\alpha_1^{xx})^2 + (\alpha_1^{xy})^2 + (\alpha_1^{xz})^2}. \quad (6.6)$$

In $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung senkrecht zu den Stufen lässt sich keine solch detaillierte Aussage treffen. Da sich die Replikabänder in dieser Richtung am Fermi-Niveau gerade überlappen und daher lediglich eine sich abwechselnde Spin-Textur aus *Spin up* und *Spin down* in der S_x -Komponente bilden, löschen sich die S_y - und S_z -Komponenten gerade jeweils gegenseitig aus. Es kann aber angenommen werden, dass α_1^{yx} , der Rashba-Koeffizient der Spin-Polarisation S_x , aufgrund der geometrischen Struktur der Pb/Si(223)-Facette betragsmäßig deutlich größer ist als α_1^{yy} und α_1^{yz} . Für die folgenden Berechnungen wird daher $\alpha_1^{yy} = \alpha_1^{yz} = 0$ angenommen. Somit gilt $\alpha_{R,[\bar{1}\bar{1}2]} = \alpha_1^{yx} = -2,875 \text{ eV \AA}$. Zusätzlich zum Rashba-Effekt führt jedoch auch

Komponente Ω_{SODW} wegen $\varphi = 90^\circ$ zu einem Beitrag im Spin-Polarisationsvektor $\mathbf{S}^\pm(\mathbf{k})$ in Gl. (2.95). Am Fermi-Niveau ist jedoch $\alpha_{\text{R},[\bar{1}\bar{1}2]}\bar{k}_{\text{F},[\bar{1}\bar{1}2]}/\Delta = 57,5$, sodass 99,9% der Spin-Polarisation tatsächlich in der S_x -Komponente beheimatet sind und lediglich 0,1% in der S_z -Komponente. Dies entspricht der obigen Beobachtung (s. Abb. 6.7 (d,e) u. [35, 62, 63]). Der SODW-Zustand induziert somit zwar die Energielücke am Fermi-Niveau, hat jedoch nur minimalen Einfluss auf die Spin-Textur.

Aus den mittels Magnetotransport ermittelten Streuzeiten bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML und $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,19$ ML lassen sich schließlich die Spin-Lebensdauern τ_s entlang der Pb-Drähte und senkrecht zu den Stufen bestimmen und damit die kinetische Gleichung der Spin-Dynamik (Gl. (2.96)) lösen. Nach Gl. (2.97) berechnen sich die Spin-Lebensdauern nach [192] zu $\tau_{s,[\bar{1}\bar{1}0]}(\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}) = 20$ fs und $\tau_{s,[\bar{1}\bar{1}2]}(\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}) = 8,7$ fs bzw. $\tau_{s,[\bar{1}\bar{1}0]}(\Theta_{\text{Pb}} = 1,5 \text{ ML}) = 8,8$ fs und $\tau_{s,[\bar{1}\bar{1}2]}(\Theta_{\text{Pb}} = 1,5 \text{ ML}) = 4,7$ fs. Mit zunehmender Bedeckung nimmt die Spin-Dephasierung somit zu (wie auch oben bereits ermittelt wurde). Auf der anderen Seite lassen sich die Spin-Relaxationszeiten jedoch auch nach D'YAKONOV und PEREL' mittels Gl. (2.98) berechnen [191]. Da Gl. (2.98) und Gl. (2.97) die gleichen Resultate ergeben müssen, lässt sich Gl. (2.98) nutzen, um die Impulsisotropisierungszeit η und die Streuvektoren k_s entlang der Isoenergielinien am Fermi-Niveau zu bestimmen. Nach Einsetzen der Fermi-Wellenvektoren ergeben sich $\eta = 45,9$ fs, also die 2-10-fache Spin-Relaxationszeit, und $k_{s,x} = 0,014 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $k_{s,y} = 0,160 \text{ \AA}^{-1}$. Der sehr kleine Wert von $k_{s,x}$ bedeutet, dass die sich entlang der Drähte bewegendes Spins durch Intrabandstreuung auf der sehr langen Längenskala von $l_y = 2\pi/k_{s,x} = 28,4d \approx 45$ nm senkrecht zu den Stufen geflippt werden. Dies wiederum erklärt die Unempfindlichkeit der sich ausbreitenden Elektronen entlang der Drähte gegenüber Defekten von atomarer Größe [57]. In der Richtung senkrecht zu den Stufen bedeutet der Wert von $k_{s,y} \approx 2\pi/s$ wiederum, dass die Spins vom (223)-Band in das $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Band gestreut werden (Interbandstreuung), wo sie dann auch entlang der Pb-Drähte transportiert werden können. Stellt man Gl. (2.97) nach τ_{SO} um und benutzt Gl. (2.98), um eine Verbindung mit der exponentiellen $\delta\Theta_{\text{Pb}}$ -Abhängigkeit der Energielücke Δ herzustellen, lässt sich überdies der doppelt so große Abschirmungsparameter q der Magnetotransportdaten im Vergleich zu SR-ARPES reproduzieren.

In der Richtung entlang der Pb-Drähte, kann die emergente modulierte Spin-Textur im Realraum \mathbb{R} durch dynamische Spin-Spiralen beschrieben werden, die antiferromagnetisch zwischen den Drähten gekoppelt sind, wie in Abb. 6.10 (e) dargestellt ist [62]. Die antiferromagnetische Kopplung entlang der $[\bar{1}\bar{1}2]$ -Richtung ist eine Folge des helikalen *Nestings*, die in SR-ARPES-Messungen [35] gefunden wurde. Die Spin-Textur entlang der Pb-Drähte stellt damit das dynamische Analogon zu statischen eindimensionalen Skyrmionen dar, wie die mit dem STM an magnetischen Strukturen beobachtet werden [16, 582]. Die hier ermittelten Ergebnisse sind repräsentativ für Systeme, in denen SOC- und Elektronenkorrelationen von vergleichbarer Stärke und mit negativer Austauschkopplung auftreten. Während der SODW-Zustand robust und unempfindlich gegenüber diesen Kopplungen ist, wird die Spin-Polarisation stark beeinflusst und nur in der reinen SODW-Phase ist ein stark Spin-polarisierter Transport zu erwarten [62]. In dieser Hinsicht ist es die kontinuierliche Verbesserung auf dem Gebiet der ultrahochaufgelösten Spektroskopie, die es in Zukunft erlauben wird, diese neue Quantenphase und die damit verbundene Bandlücke baldmöglichst genauer zu untersuchen [583, 584]. Die Untersuchungen haben ferner gezeigt, dass die Elektronen innerhalb der SODW-Phase stark mit Elektronen korreliert sind, die sich innerhalb der Energielücke befinden (CDW-Zustände mit langreichweitiger Periodizität senkrecht zu

den Stufen). Im idealen System bei $\Delta\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ sind wegen der großen abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung die elektronischen Zustände senkrecht zu den Stufen isolierend, was eine Möglichkeit für die Realisierung einer SODW-ordnungsinduzierten Luttinger-Flüssigkeit in Quantendrähten darstellt [62]. Daher hat dieser Mechanismus viel grundlegendere fundamentale Konsequenzen als die Bandverschiebung, die mit Standarddotierung in anderen metallischen Kettensystemen auf Oberflächen [580, 581] erreicht wurde.

6.3. Vergleich mit anderen Pb/Si-Quantendrahtsystemen

Ähnlich wie im Au/Si(*hkk*)-System [49] eignen sich auch im Pb/Si(*hkk*)-System diverse Oberflächenorientierungen für die Ausbildung von Pb-Quantendrähten (s. a. Kap. 4.4.2). Im Au/Si(*hkk*)-System können die verschiedenen Stufenabstände des Substrats dafür genutzt werden, die Kopplungen der atomaren Au-Drähte zu beeinflussen, was Auswirkungen auf die Bandfüllung und Dimensionalität im Elektronensystem hat [49–52, 54, 55].

Unter Federführung von JAŁOCHOWSKI wurden in den letzten Jahren bei diversen Orientierungen im Pb/Si(*hkk*)-System Messungen zur Ermittlung der Spin-polarisierten quasi-eindimensionalen Oberflächenzustände durchgeführt. Den Pb-Nanodrähten der hier vorgestellten Pb/Si(557)-Oberfläche am Ähnlichsten sind die auf Si(553) durch Selbstorganisation gewachsenen Strukturen. Bei etwa $\Theta_{\text{Pb}} \approx 1,3 \text{ ML}$ Bedeckung bilden sich ebenfalls $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -rekonstruierte Pb-Drähte auf den (111)-Terrassen, jedoch ohne dass die Oberfläche refacettiert [523, 524]. Die atomare Struktur ist daher bis $T \approx 550 \text{ K}$ stabil. Die den Pb-Atomen assoziierten Oberflächenzustände sind wie bei Pb/Si(557) ebenfalls quasi-eindimensional, die entlang der Pb-Drähte dispergieren und das Fermi-Niveau schneiden und senkrecht dazu lokalisiert sind [525]. Diese Zustände sind ebenfalls Spin-polarisiert und werden von den Pb6*p*-Orbitalen gebildet. Im Vergleich zu Pb/Si(557) zeigt die Spin-Polarisation eine starke *out-of-plane*-Komponente S_z , welche auf die Pb-Atome direkt an der Stufenkante zurückgeführt wird, die Rashba-Aufspaltung ist hingegen von vergleichbarer Größe [525].

Die Distanz der Pb-Drähte ist bei Pb/Si(113) deutlich geringer, jedoch bilden sie auch keine $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, sondern *Zickzack*-Drähte mit einer ($\times 2$)-Periodizität entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung [38, 519]. Die ARPES-Messungen offenbaren dennoch quasi-eindimensionale metallische und Spin-polarisierte Oberflächenzustände mit einer Rashba-Aufspaltung von etwa 160 meV um das Fermi-Niveau [38].

Auch auf Pb/Si(100) bilden sich durch Selbstorganisation atomare Pb-Ketten in zwei Konfigurationen aus, die quasi-eindimensionale, metallische, Rashba-aufgespaltene Bänder besitzen [37]. Der Rashba-Koeffizient α_{R} beträgt hier bis zu $1,29 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ und ist damit nur etwa halb so groß wie in Pb/Si(557) entlang der Drähte (s. o.). Die Spin-Polarisation beschränkt sich im Gegensatz zu Pb/Si(553) auf die *in-plane*-Komponenten.

Auf Si(110) bilden Pb-Atome durch Selbstorganisation u. A. eine kompliziertere hutförmige Struktur aus, die ebenfalls quasi-eindimensionale metallische Bänder aufweist [36, 526]. In der zweiten Dimension findet sich überdies eine rund 15 meV große Energielücke am Fermi-Niveau. Die Rashba-Aufspaltung von $\Delta k_{\text{R}} = 0,045 - 0,14 \text{ \AA}^{-1}$ liegt hingegen zwischen denjenigen der SIC-Phase von Pb/Si(111) und der von Pb/Si(557) [36].

7. Zusammenfassung und Ausblick

Im Fokus der Experimente dieser Arbeit standen die niedrigdimensionalen Monolagenstrukturen von Pb auf den Oberflächen von Si(111) und Si(557). Die Ergebnisse der Messungen sollten dabei helfen, die folgenden Fragestellungen zu beantworten:

1. Wie wirkt sich die atomare Struktur auf die Dimensionalität der elektronischen Bandstruktur aus?
2. Wie stark ist der Einfluss der SOC der Pb-Atome auf die elektronische Bandstruktur und Spin-Polarisation der Oberflächenzustände?
3. Welche Rolle spielen Korrelationen zwischen atomarem Gitter, Ladungs- und Spin-Ordnung und Orbitalbesetzung im Zusammenspiel mit der SOC?

Zur Beantwortung der ersten Frage wurden den STM- und SPA-LEED-Messungen DFT-Berechnungen aus der Literatur und ARPES-Messungen gegenübergestellt.

Im Fall des Pb/Si(111)-Systems stellt sich dabei heraus, dass die Dimensionalität der Bandstruktur eng mit den Strukturelementen der jeweiligen Rekonstruktion verknüpft ist. Die drahtartigen Strukturen entlang der $[11\bar{2}]$ -Richtung der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,20$ ML spiegeln sich in der quasi-eindimensionalen und -relativistischen Bandstruktur wider. In den ARPES-Messungen ist die Identifizierung der eindimensionalen Signatur durch die Überlagerung der Rotationsdomänen im \mathbb{K} -Raum und der SBZs höherer Ordnung erschwert. Dank der vorhandenen DFT-Berechnungen lassen sich die Bänder dennoch eindeutig zuordnen. Die Interdrahtkopplung lässt sich anhand des *Warping*-Effekts quantifizieren, der zu stark verbogenen Isoenergielinien am Fermi-Niveau führt und so die Ankopplung an die zweite Dimension beschreibt.

Dahingegen stellt die SIC-Phase eine quasi-zweidimensionale inhomogene Domänenstruktur dar. Ihre Bandstruktur lässt sich im Bereich des Fermi-Niveaus als quasi-relativistisches 2DEG mit einem inkommensurablen Fermi-*Nesting* auffassen, das durch *Warping* keine kreisförmige, sondern eine hexagonale Fermi-Fläche besitzt.

Von den DS-Phasen wurde mittels ARPES die (1,6)-Struktur untersucht. Ihre Bandstruktur ähnelt der der SIC-Phase, jedoch treten entlang der k_y -Richtung, d. h. in $[1\bar{1}0]$ -Richtung, an E_F periodische Replikastrukturen mit Abständen von $2\Delta k_F$ zu Tage, die dem reziproken Gittervektor \mathbf{g} entsprechen. Diese quasi-eindimensionale periodische Modulation der quasi-zweidimensionalen Fermi-Fläche spiegelt sich auch in der atomaren drahtartigen Struktur [44, 455, 456] der DS-Phase wider.

Im Pb/Si(557)-System mit 1,31 ML Bedeckung bestimmen die atomaren Stufen der (223)-Facetten zu wesentlichen Teilen die Dimensionalität des Systems mit. Durch sie sind die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -rekonstruierten Pb-Nanodrähte auf benachbarten (111)-Terrassen elektrisch voneinander getrennt, sodass unterhalb von $T_C = 78$ K metallisches Verhalten lediglich entlang der Drähte feststellbar ist. In der Bandstruktur spiegelt sich dies anhand des Fermi-*Nestings* mit $2k_F = 2g$ in der Richtung senkrecht zu den Stufen wider.

Die Beantwortung der zweiten Frage ergibt sich direkt aus den Ergebnissen der Spin-aufgelösten ARPES-Messungen. Zu ihrer Interpretation wurde das Konzept des Rashba-Effekts (Spin-Aufspaltung im \mathbf{K} -Raum) für verschiedene Symmetriegruppen und in linearer und höherer nichtlinearer Approximation in \mathbf{k} ausgearbeitet. Der zusätzliche Einfluss von (effektiven) Magnetfeldern auf die Spin-Aufspaltung der Bandstruktur manifestiert sich im Rashba-Zeeman-Effekt. Die im Experiment gemessene Spin-Polarisation wird jedoch auch von der Existenz von Rotations- und Spiegeldomänen, sowie inhomogenen Domänenstrukturen beeinflusst, was bei der Analyse dementsprechend Berücksichtigung finden musste.

Die metallischen S1-Bänder (um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt) der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, der SIC- und der DS-Phase weisen im Bereich des Fermi-Niveaus Rashba-Spin-Aufspaltungen von $\Delta k_{R,\sqrt{7} \times \sqrt{3}} = 0,049 - 0,056 \text{ \AA}^{-1}$, $\Delta k_{R,SIC} = 0,036 - 0,04 \text{ \AA}^{-1}$ bzw. $\Delta k_{R,DS} = 0,033 - 0,052 \text{ \AA}^{-1}$ auf. Die Spin-Aufspaltung der *genesteten* Replikabänder der (1,6)-Struktur der DS-Phase beträgt in k_y -Richtung $\Delta k_{R,y,DS} = 0,072 \text{ \AA}^{-1} = g/2$, was in Analogie zum Pb/Si(557)-System auf das Vorhandensein einer unidirektionalen Energielücke 2Δ in der Richtung senkrecht zu der atomaren Drahtstruktur hindeuten könnte.

Bei der SIC-Phase weisen die zugehörigen Rashba-Koeffizienten allesamt ein negatives Vorzeichen auf. Es legt den Drehsinn des Spin-Polarisationsvektors \mathbf{S} um den $\bar{\Gamma}$ -Punkt fest und resultiert aus dem Potentialgradienten ∇V der Valenzelektronen im Zentralpotential der Pb-Atomkerne. Die Rashba-Koeffizienten der SIC-Phase lassen sich mittels des anisotropen Rashba-Effekts dritter Ordnung beschreiben. Am Fermi-Niveau beträgt der Rashba-Koeffizient in parabolischer Näherung im Mittel dabei etwa -1 eV \AA und ist damit ungefähr dreimal so groß wie in der β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase. Die Teilbänder sind mit $S = 44 - 100 \%$ stark Spin-polarisiert. Außerdem weist die SIC-Phase in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ -Richtung eine starke *out-of-plane*-Spin-Komponente auf. Die gemessenen Werte entlang der $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung zeigen überdies, dass die Domänenstruktur die C_{3v} -Rotationssymmetrie der lokalen $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion bricht. Die SIC-Phase zeigt um die $\bar{K}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkte aufgrund eines komplexen effektiven Magnetfeldes eine Zeeman-artige Bandaufspaltung mit einer zyklidal rotierenden Spin-Textur.

Für eine adäquate Beschreibung des Rashba-Koeffizienten des S1-Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion müssen gar Terme bis zur 7. Ordnung in \mathbf{k} herangezogen werden. Die gemessenen Spin-Polarisationen betragen $S = 11 - 100 \%$. Am \bar{M} -Punkt weist die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion eine komplexe Bandstruktur in Form eines Spin-aufgespaltenen *Fünferkreuzes* am Fermi-Niveau auf.

Die gemessene Spin-Polarisation der Replikabänder der untersuchten DS-Phase beträgt $S = 43 - 87 \%$ und weist neben der S_x -Komponente entlang der Isoenergielinien auch eine starke S_z -Komponente auf.

Im Pb/Si(557)-System wird die Bandstruktur aus derjenigen der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion auf den Pb-Nanodrähten und derjenigen der (223)-Facettenstruktur gebildet. In der Richtung senkrecht zu den Stufen liegt *Fermi-Nesting* zwischen Zuständen mit umgekehrter Spin-Helizität vor ($\Delta k_0 = g/2$) und der Spin-Polarisationsvektor \mathbf{S} zeigt ausschließlich in Richtung entlang der Pb-Drähte ($S_{x,\max} = 56 \%$). Der Rashba-Koeffizient dieses Zustands ist mit bis zu $\alpha_R = -2,875 \text{ eV \AA}$ etwa doppelt so groß wie bei der SIC-Phase und ist damit im Spitzenfeld bekannter Rashba-Koeffizienten zu finden. Die anisotrope Facettenstruktur schlägt sich auch in einem anisotropen Rashba-Koeffizienten mit C_1 -Symmetrie nieder, der zu einer *out-of-plane*-Komponente der Spin-Polarisation in der Richtung entlang der Pb-Drähte führt.

Bezüglich der dritten Frage gilt es, die Messergebnisse der verschiedenen Untersuchungsmethoden miteinander zu vergleichen und darin Korrelationen ausfindig zu machen.

Im Pb/Si(111)-System sind starke Korrelationen zwischen allen untersuchten Subsystemen feststellbar. Die $Pb6s^26p^2$ -Valenzelektronenkonfiguration macht je zwei p -Elektronen pro Pb-Atom für Bindungen und Oberflächenbänder verfügbar⁹⁵. In der SIC-Phase bedeutet dies mit ihren vier Pb-Atomen pro lokaler $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Einheitszelle, dass drei der acht verfügbaren Elektronen für die Bindungen mit dem Substrat benötigt werden und die anderen fünf Elektronen zwei gefüllte Bänder und ein halbvolles Band mit $6p_{x,y}$ -Charakter bilden. Ein ähnliches Bild ergibt sich für die zwölf verfügbaren Elektronen der sechs Pb-Atome in der Einheitszelle der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion, die fünf Bindungen zum Substrat eingehen, drei gefüllte Bänder und ein halbvolles Band mit $6p_{x,y}$ -Charakter bilden. Der $6p_{x,y}$ -Charakter der Oberflächenzustände im Pb/Si(111)-System wird bestätigt durch die DFT-Berechnungen der Bandstrukturen und die ARPES-Messungen in dieser Arbeit. Somit korreliert die Orbitalbesetzung stark mit der Gitterstruktur.

Die Besetzung der Oberflächenzustände und der kovalenten Pb-Si-Bindungen spiegelt selbstredend auch die vorherrschende Ladungsordnung wider, sodass die Korrelation zwischen Ladung und Gitter leicht aus den STM-, SPA-LEED- und ARPES-Messungen bestimmbar ist. So zeigt bspw. die Ladungsdichte der gezeigten STM-Bilder, obwohl bei Energien der unbesetzten Zustände gemessen, im Wesentlichen die lokalisierten kovalenten Bindungen zwischen den Pb- und den Si-Atomen. Auch die Ergebnisse der SPA-LEED-Messungen zeigen direkt die starke Korrelation der Gitterstruktur mit der Ladungsordnung, da die Elektronen an den Ladungsträgern der Oberflächenatome gebeugt werden und so die Periodizität des Gitters wiedergeben. In den ARPES-Experimenten spiegeln sich die Korrelationen in mehreren Gesichtspunkten. Zum Einen wiederholen sich die gemessenen Zustände periodisch in höheren SBZs unter Beteiligung eines reziproken Gittervektors ($\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{G}$), zum Anderen reflektieren *Warping* und *Fermi-Nesting* mögliche CDW-Zustände. So lassen sich die langreichweitig geordneten Drahtstrukturen der DS-Phase mit dem stark ausgeprägtem *Fermi-Nesting* in der Richtung senkrecht zu den Drähten womöglich durch eine kommensurable CDW erklären.

Der Einfluss der SOC auf Korrelationen im Pb/Si(111)-System lässt sich anhand der SR-ARPES- und Magnetotransportmessungen bestimmen. Letztere zeigen, dass sowohl in der SIC-Phase als auch in der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion schwache Antilokalisierung vorliegt. Die Spin-Bahn-Streuzeiten τ_{SO} von 6 fs bzw. 9,6 fs belegen auch, dass die SOC in den untersuchten Strukturen stark ist (Vgl. [212]). Dies lässt sich ebenso mit den starken Spin-Aufspaltungen und -Polarisationen der Oberflächenbänder in den SR-ARPES-Experimenten belegen. Die Rashba-Aufspaltung in der SIC-Phase und der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion führt jedoch zu keiner magnetischen Ordnung der Spins. Im Fall der DS-Phase ergibt sich durch die Replikabänder aufgrund des kleinen reziproken Gittervektors in der Richtung senkrecht zu den Drähten jedoch eine ähnliche Situation wie im Pb/Si(557)-System. Die Messdaten belegen eine Rashba-Aufspaltung von $\Delta k_R = g/2$, sodass *Fermi-Nesting* zwischen Zuständen mit umgekehrter Spin-Helizität besteht. Die Spin-Ordnung reflektiert damit die gleiche Ordnung wie die Ladung, sodass neben einer CDW zusätzlich eine SDW vorliegt. In Analogie zum Pb/Si(557)-System könnte somit auch in der DS-Phase ein stark korrelierter SODW-Zustand vorliegen – dem Phasendiagramm nach möglicherweise sogar bei RT für bestimmte Bedeckungen ($\Theta_{Pb} \approx 1,285$ ML).

Aus der Rashba-Aufspaltung der Spin-polarisierten Oberflächenbänder und ihrem $6p$ -Cha-

⁹⁵ Die $6s$ -Elektronen liegen in Pb etwa 6 eV niedriger [537].

rakter am Fermi-Niveau ergeben sich weitere interessante Rückschlüsse auf die Eigenschaften der SIC-Phase und der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Nach BRUN lässt sich die Supraleitung der atomar dünnen Pb-Filme nur mittels eines gemischten Singulett-Tripletts-Zustands erklären [432]. Dies setzt aber voraus, dass sich im \mathbb{K} -Raum gegenüberliegende Zustände umgekehrte Spin-Polarisation besitzen und sich als Linearkombination von s - und p -Wellenfunktion darstellen lassen. Exemplarisch wurde beides in dieser Arbeit für die SIC-Phase gezeigt, für die $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion gelten diese Implikationen jedoch ebenso.

Im Pb/Si(557)-System führen die starken Korrelationen der Gitterstruktur, der Ladungs- und Spin-Ordnung und des orbitalen Charakters der beteiligten Oberflächenzustände in Verbindung mit der starken SOC unterhalb von $T_C = 78$ K zur Ausbildung des neuartigen quantenmechanisch verschränkten Zustands einer SODW, die die unidirektionale Leitfähigkeit entlang der Pb-Drähte bzw. das isolierende Verhalten senkrecht zu den Stufen erklärt. Die Korrelationen können auf mehrere Arten aufgehoben werden. Mittels STM und SPA-LEED konnte eine Refacettierung beim Phasenübergang festgestellt werden. Dadurch sind oberhalb von T_C die Zustände am Fermi-Niveau nicht mehr *genestet* und der SODW-Zustand bricht zusammen. Auch die Adsorption kleiner Mengen zusätzlichen Bleis bei tiefen Temperaturen stört den SODW-Zustand durch Bildung zusätzlicher Pb-Atomketten an der Stufenkante (Veränderung der Gitterstruktur und Ladungs-Ordnung durch Superperiodizitäten, Beibehaltung der Spin-Ordnung, Verringerung der Energielücke), ebenso wie externe Magnetfelder.

Neben diesen Hauptexperimenten wurden auch QWS im Dreieckspotential des oberflächennahen, stark n -dotierten Si-Bulks unter der DS-Phase untersucht. Die (theoretische) Spin-Aufspaltung der Loch-artigen Bänder war jedoch zu gering, als dass sie mittels SR-ARPES-Messungen an der COPHEE-Endstation nachgewiesen werden konnte. Zudem wurden strukturelle Untersuchungen an der β - und γ -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase mittels STM und SPA-LEED durchgeführt.

Aus den Ergebnissen dieser Arbeit ergeben sich einige weitergehende Fragestellungen für mögliche zukünftige Studien.

Im Pb/Si(111)-System sind insbesondere die Eigenschaften der DS-Phase bei tiefen Temperaturen von Interesse. Die Erkenntnisse aus dieser Arbeit deuten darauf hin, dass die Bildung der Phase mit der Existenz einer SODW verknüpft sein könnte. Um dies zu belegen, wären DC-Transport- oder Vierpunktmessungen, Magnetotransport-Experimente und weitere SR-ARPES-Messungen auf Si-Oberflächen mit lediglich einer Rotationsdomäne hilfreich. Dazu müssten leicht fehlgelegte Substrate genutzt werden, wie bereits CHOI mit seinen ARPES-Messungen gezeigt hat [138]. Im Bedeckungsbereich unter $\Theta_{\text{Pb}} = 1,25$ ML wurden noch keine ARPES-Messungen an der DS-Phase durchgeführt. Hier könnte man den Übergang von der quasi-eindimensionalen Bandstruktur der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion zur zweidimensionalen Bandstruktur der SIC-Phase näher studieren. Da beide benachbarte Phasen bei tiefen Temperaturen unter 2 K einen supraleitenden Zustand ausbilden, steht auch die DS-Phase im Verdacht, diesen korrelierten Zustand zu zeigen. DC-Transportmessungen oder STM/STS-Experimente könnten die Supraleitung nachweisen. Auf der anderen Seite stellt die Supraleitung einen konkurrierenden Zustand zur möglichen SODW dar. Unter welchen Bedingungen sich der eine oder der andere Zustand bevorzugt ausbilden könnte, ist noch völlig offen. Hier könnten auch DFT-Berechnungen für eine Vorhersage hilfreich sein.

In der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion und der SIC-Phase ist der Mechanismus zu Bildung des

supraleitenden Zustands noch nicht vollends verstanden. SR-ARPES- und Magnetotransportmessungen an den supraleitenden Phasen könnten hier Aufschluss geben. Ebenso fehlen bislang DFT-Berechnungen inklusive SOC der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion. Für ein besseres Verständnis der Spin-polarisierten Bandstruktur wären derartige Berechnungen äußerst hilfreich. Ebenso sollten SR-ARPES-Messungen an einer leicht fehlgeneigten Si(111)-Probe mit der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion wiederholt werden, um die Überlagerung durch Rotationsdomänen im Messsignal zu vermeiden und so die Interpretation der Messdaten zu vereinfachen.

Weitere Erkenntnisse zum Pb/Si(111)-System konnten im Rahmen dieser Arbeit anhand von temperaturabhängigen Leitfähigkeits- und Magnetotransportmessungen gewonnen werden. Da bei den Monolagenstrukturen mit Rotationsdomänen die Ergebnisse jedoch nicht so einfach zu interpretieren sind, sollten die Messungen ebenfalls an eindomänigen Strukturen auf fehlgeneigten Substraten wiederholt werden.

Bei hohen Temperaturen bildet die (1×1) -Phase den Gleichgewichtszustand im Pb/Si(111)-System, ein sog. „flüssiges Metall“. Anhand von ARPES- oder XRD-Messungen ließe sich klären, ob die Pb-Atome in der T1- oder der T4-Konfiguration vorliegen. Es wird erwartet, dass die Fermi-Fläche auch dieser Phase Spin-polarisierte Zustände mit Rashba-Aufspaltung am \bar{M} -Punkt bzw. eine Zeeman-artige Aufspaltung am \bar{K} -Punkt ($\Delta E \approx 800$ meV) aufweist [460]. Die DFT-Berechnungen legen zudem Nahe, dass die Spin-Polarisation eine besonders starke *out-of-plane*-Komponente an den \bar{K} -Punkten besitzt. In [421, 422] wurden ARPES-Experimente bei 1,20 ML durchgeführt – Messungen bei 1 ML und $4/3$ ML stehen bislang noch aus. Die Bandstruktur für $4/3$ ML wurde durch Entfaltung der Einheitszelle in Kap. 5.2.1 dieser Arbeit modelliert.

Nach [538] liegt die Wahrscheinlichkeit für einen Spin-Flip durch Licht-Adsorption in den Rashba-aufgespaltenen Zuständen der β -Pb/Ge(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ bei 6%. Ein ähnliches Resultat erwartet man aufgrund der vergleichbaren Bandstruktur auch für Pb/Si(111). Mit gezielter Wahl der Lichtpolarisation könnte damit ein Spin-polarisierter elektrischer Strom in der Pb-Monolage erzeugt werden, was für Anwendungen in der Spintronik von Interesse ist.

An der β -Pb/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase wurden bislang noch keine SR-ARPES-Messungen durchgeführt. Die DFT-Berechnungen von HANSMANN in [374] zeigen, dass diese Phase bei tiefen Temperaturen genau im Grenzbereich zwischen metallischer und isolierender, Ladungsgeordneter (3×3) -Phase (mit CDW) liegt. Es könnte aber auch genau wie in der α -Sn/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Phase ein Mott-Isolator mit starker SOC vorliegen [29].

Ein weiteres Feld zur gezielten Manipulation der atomaren und elektronischen Struktur und der Spin-Aufspaltungen und -Textur ergibt sich, wenn man Teile der Pb-Bedeckung durch andere Elemente substituiert. Erste Experimente wurden bspw. an (Tl,Pb)/Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ mit $\Theta_{\text{Tl}} = 1$ ML und $\Theta_{\text{Pb}} = 1/3$ ML durchgeführt [540, 567–569]. Auch die vollständige Substitution der Pb-Atome durch andere Elemente wäre denkbar. So könnte z. B. aus der Adsorption von 1 ML Bi (mit $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion) und anschließend $1/3$ ML Au trotz der gleichen Anzahl an Valenzelektronen wie bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3$ ML eine veränderte Bandstruktur resultieren, da die Au-Atome das $6s$ -Orbital als höchsten besetzten Zustand besitzen. Mit je $2/3$ ML Bedeckung von Bi und Tl könnte man hingegen vermutlich die C_{3v} -Symmetrie des Systems brechen, obwohl auch hier die gleiche Anzahl an Valenzelektronen wie bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3$ ML vorliegt. Mittels Spin-integrierter und -aufgelöster ARPES-Messungen könnten auf diese Art und Weise geeignete Materialien für Anwendungen in der Spintronik identifiziert werden.

Im Pb/Si(557)-System gibt es ebenfalls noch einige offene Fragen zu beantworten. So ist

bislang noch unklar, wie die Bandstruktur oberhalb von $T_C = 78\text{ K}$ beschaffen ist und ob das Fermi-*Nesting* tatsächlich aufgehoben ist. Ebenso wie im Pb/Si(111)-System ist es denkbar, dass die Pb-Nanodrähte bei sehr tiefen Temperaturen supraleitend werden, oder ob der SODW-Zustand dies verhindert. Falls Supraleitung in den Pb-Nanodrähten möglich ist, stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen wie externe Magnetfelder oder Zusatzbedeckungen sich diese beeinflussen lässt.

Ein neues Feld für Experimente an Oberflächen bietet die Anregung mit Terahertzstrahlung. Da die Energielücke der Pb/Si(557)-Facettenstruktur $2\Delta = 40\text{ meV}$ beträgt, ließen sich Elektronen bereits mit einer Lichtfrequenz ν von etwa 10 THz in das Leitungsband anregen. Möglicherweise ließe sich der Phasenübergang auf diese Art und Weise kohärent anregen und kontrollieren. KAMPFRATH hat bspw. an NiO-Kristallen gezeigt, dass mit dieser Methode antiferromagnetische Spin-Wellen kohärent kontrolliert werden können [585]. Aufgrund der Spin-polarisierten Bandstruktur lässt sich die Anregung auch über die Lichtpolarisation manipulieren und ggf. sogar unterdrücken.

Ohne die größeren (111)-orientierten Terrassen auf der gestuften Oberfläche, dafür mit breiteren (223)-orientierten Facetten, könnte der Phasenübergang zum SODW-Zustand bereits bei höheren Temperaturen einsetzen. Erste Messungen von MONIKA QUENTIN auf Si-Substraten mit (223)-Orientierung zeigen, dass sich eine stabile Facettenstruktur mit einer Periodizität von $9\frac{1}{3} a_{[11\bar{2}]}$ mit Doppelstufen ($d = 2d_{(111)}$) und schmalen (111)-Terrassen bildet. Dieses Verhalten ähnelt dem von Si(557), das auf 17 atomare Einheiten eine Dreifachstufe mit (112)-Orientierung und eine (111)-Terrasse mit (7×7) -Rekonstruktion und zwei Adatomreihen zeigt. Auf einem derartig regelmäßig gestuften Substrat ohne große (111)-Terrassen über Distanzen über 100 nm sollte es möglich sein, die Pb/Si(223)-Struktur mit Einfachstufen genauso zu erzeugen wie auf dem Si(557)-Substrat. Dies alles erlaubt verbesserte Möglichkeiten z. B. für Transport- und ARPES-Messungen. Dem entgegen stehen jedoch die SPA-LEED-Experimente in [507], die auf eine Refacettierung der Si(223)-Oberfläche zu stabileren Stufenstrukturen hindeuten. Möglicherweise ließe sich die (223)-Orientierung jedoch auch durch Adsorption kleiner Mengen Au stabilisieren bevor Pb aufgedampft wird, ähnlich wie dies JAŁOCHOWSKI für diverse vizinale Si-Oberflächen bereits gezeigt hat (s. Kap. 4.4.2).

Von Interesse ist auch die Kombination von anderen Materialien mit starker SOI mit den Nanodrähten der Selten-Erd-Silizide, die je nach Struktur 1DEGs oder 2DEGs bilden. Ein Beispiel hierfür wäre (Bi,Er)/Si(557), wobei die atomaren und elektronischen Strukturen der einzeln adsorbierten Systeme, Bi/Si(557) und Er/Si(557), zum Teil bereits untersucht wurden [490, 491, 586].

A. Literaturverzeichnis

- [1] EINSTEIN, A., PODOLSKY, B. & ROSEN, N.: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, Physical Review **47**, 777–780, 1935 (siehe S. 1).
DOI 10.1103/PhysRev.47.777.
- [2] BOHM, D. & AHARONOV, Y.: *Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky*, Physical Review **108**, 1.070–1.076, 1957 (siehe S. 1).
DOI 10.1103/PhysRev.108.1070.
- [3] BARDEEN, J., COOPER, L. N. & SCHRIEFFER, J. R.: *Theory of Superconductivity*, Physical Review **108**, 1.175–1.204, 1957 (siehe S. 1).
DOI 10.1103/PhysRev.108.1175.
- [4] SIGRIST, M. & UEDA, K.: *Phenomenological theory of unconventional superconductivity*, Reviews of Modern Physics **63**, 239–311, 1991 (siehe S. 1).
DOI 10.1103/RevModPhys.63.239.
- [5] GOR'KOV, L. P. & RASHBA, E. I.: *Superconducting 2D System with Lifted Spin Degeneracy: Mixed Singlet-Triplet State*, Physical Review Letters **87**, 037004, 2001 (siehe S. 1, 139).
DOI 10.1103/PhysRevLett.87.037004.
- [6] SINOVA, J. & ŽUTIĆ, I.: *New moves of spintronics tango*, Nature Materials **11**, 368–371, 2012 (siehe S. 1).
DOI 10.1038/nmat3304.
- [7] KATO, Y. K. et al.: *Observation of the Spin Hall Effect in Semiconductors*, Science **306**, 1.910–1.913, 2004 (siehe S. 2, 13).
DOI 10.1126/science.1105514.
- [8] KÖNIG, M. et al.: *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, Science **318**, 766–770, 2007 (siehe S. 2).
DOI 10.1126/science.1148047.
- [9] HSIEH, D. et al.: *A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase*, Nature **452**, 970–974, 2008 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/nature06843.
- [10] BROHOLM, C. et al.: *Quantum spin liquids*, Science **367**, eaay0668, 2020 (siehe S. 2).
DOI 10.1126/science.aay0668.
- [11] BALENTS, L.: *Spin liquids in frustrated magnets*, Nature **464**, 199–208, 2010 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/nature08917.
- [12] BANERJEE, A. et al.: *Proximate Kitaev quantum spin liquid behaviour in a honeycomb magnet*, Nature Materials **15**, 733–740, 2016 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/nmat4604.

- [13] BODE, M. et al.: *Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry*, Nature **447**, 190–193, 2007 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/nature05802.
- [14] FERRIANI, P. et al.: *Atomic-Scale Spin Spiral with a Unique Rotational Sense: Mn Monolayer on W(001)*, Physical Review Letters **101**, 027201, 2008 (siehe S. 2).
DOI 10.1103/PhysRevLett.101.027201.
- [15] MÜHLBAUER, S. et al.: *Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet*, Science **323**, 915–919, 2009 (siehe S. 2).
DOI 10.1126/science.1166767.
- [16] ROMMING, N. et al.: *Writing and deleting single magnetic skyrmions*, Science **341**, 636–639, 2013 (siehe S. 2, 212).
DOI 10.1126/science.1240573.
- [17] HSU, P.-J. et al.: *Electric-field-driven switching of individual magnetic skyrmions*, Nature Nanotechnology **12**, 123–126, 2017 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/nnano.2016.234.
- [18] MOURIK, V. et al.: *Signatures of Majorana Fermions in Hybrid Superconductor-Semiconductor Nanowire Devices*, Science **336**, 1.003–1.007, 2012 (siehe S. 2, 29).
DOI 10.1126/science.1222360.
- [19] FU, L. & KANE, C. L.: *Superconducting Proximity Effect and Majorana Fermions at the Surface of a Topological Insulator*, Physical Review Letters **100**, 096407, 2008 (siehe S. 2).
DOI 10.1103/PhysRevLett.100.096407.
- [20] DATTA, S. & DAS, B.: *Electronic analog of the electro-optic modulator*, Applied Physics Letters **56**, 665–667, 1990 (siehe S. 2, 13).
DOI 10.1063/1.102730.
- [21] HEIDE, M. et al.: *Spin Orbit Driven Physics at Surfaces*, Newsletter of the Psi-K Network **78**, 2006 (siehe S. 2, 13, 17, 21, 31).
- [22] MANCHON, A. et al.: *New perspectives for Rashba spin-orbit coupling*, Nature Materials **14**, 871–882, 2015 (siehe S. 2, 13).
DOI 10.1038/nmat4360.
- [23] WITCZAK-KREMPA, W. et al.: *Correlated Quantum Phenomena in the Strong Spin-Orbit Regime*, Annual Review of Condensed Matter Physics **5**, 57–82, 2014 (siehe S. 2).
DOI 10.1146/annurev-conmatphys-020911-125138.
- [24] SANTORO, G., SANDRO, S. & TOSATTI, E.: *Charge-density waves and surface Mott insulators for adlayer structures on semiconductors: Extended Hubbard modeling*, Physical Review B **59**, 1.891–1.901, 1999 (siehe S. 2).
DOI 10.1103/PhysRevB.59.1891.
- [25] WEITERING, H. H. et al.: *Defect-Mediated Condensation of a Charge Density Wave*, Science **285**, 2.107–2.110, 1999 (siehe S. 2, 69).
DOI 10.1126/science.285.5436.2107.

- [26] CARPINELLI, J. M. et al.: *Surface Charge Ordering Transition: α Phase of Sn/Ge(111)*, Physical Review Letters **79**, 2.859–2.862, 1997 (siehe S. 2, 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.79.2859.
- [27] CARPINELLI, J. M. et al.: *Direct observation of a surface charge density wave*, Nature **381**, 398–400, 1996 (siehe S. 2, 37, 69).
DOI 10.1038/381398a0.
- [28] KIM, B. J. et al.: *Novel $J_{\text{eff}} = 1/2$ Mott State Induced by Relativistic Spin-Orbit Coupling in Sr_2IrO_4* , Physical Review Letters **101**, 076402, 2008 (siehe S. 2).
DOI 10.1103/PhysRevLett.101.076402.
- [29] JÄGER, M. et al.: *α -Sn phase on Si(111): Spin texture of a two-dimensional Mott state*, Physical Review B **98**, 165422, 2018 (siehe S. 2, 69, 219).
DOI 10.1103/PhysRevB.98.165422.
- [30] ROJAS SÁNCHEZ, J. C. et al.: *Spin-to-charge conversion using Rashba coupling at the interface between non-magnetic materials*, Nature Communications **4**, 2944, 2013 (siehe S. 2).
DOI 10.1038/ncomms3944.
- [31] SANTANDER-SYRO, A. F. et al.: *Giant spin splitting of the two-dimensional electron gas at the surface of SrTiO_3* , Nature Materials **13**, 1.085–1.090, 2014 (siehe S. 2, 13, 28).
DOI 10.1038/nmat4107.
- [32] RILEY, J. M. et al.: *Direct observation of spin-polarized bulk bands in an inversion-symmetric semiconductor*, Nature Physics **10**, 835–839, 2014 (siehe S. 2, 28).
DOI 10.1038/nphys3105.
- [33] SAKAMOTO, K. et al.: *Valley spin polarization by using the extraordinary Rashba effect on silicon*, Nature Communications **4**, 2073, 2013 (siehe S. 2, 28, 83, 131).
DOI 10.1038/ncomms3073.
- [34] BRAND, C. et al.: *Spin-resolved band structure of a densely packed Pb monolayer on Si(111)*, Physical Review B **96**, 035432, 2017 (siehe S. 2, 106).
DOI 10.1103/PhysRevB.96.035432.
- [35] TEGENKAMP, C. et al.: *Fermi Nesting between Atomic Wires with Strong Spin-Orbit Coupling*, Physical Review Letters **109**, 266401, 2012 (siehe S. 2, 4, 89, 185, 196–198, 202, 211, 212, 291).
DOI 10.1103/PhysRevLett.109.266401.
- [36] KOPCIUSZYŃSKI, M. et al.: *Hut-shaped lead nanowires with one-dimensional electronic properties*, Physical Review B **102**, 125415, 2020 (siehe S. 2, 93, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.102.125415.
- [37] MIHALYUK, A. N. et al.: *One-dimensional Rashba states in Pb atomic chains on a semiconductor surface*, Physical Review B **102**, 035442, 2020 (siehe S. 2, 93, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.102.035442.
- [38] ŻURAWEK, L. et al.: *Partially embedded Pb chains on a vicinal Si(113) surface*, Physical Review B **101**, 195434, 2020 (siehe S. 2, 93, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.101.195434.
- [39] ZHANG, T. et al.: *Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on*

- Si(111)*, Nature Physics **6**, 104–108, 2010 (siehe S. 3, 73–75, 77, 98, 100, 103, 106, 125, 140, 150, 153, 159).
DOI 10.1038/nphys1499.
- [40] BRUN, C. et al.: *Remarkable effects of disorder on superconductivity of single atomic layers of lead on silicon*, Nature Physics **10**, 444–450, 2014 (siehe S. 3, 73–75, 77, 98, 100, 103, 140).
DOI 10.1038/nphys2937.
- [41] YAMADA, M., HIRAHARA, T. & HASEGAWA, S.: *Magnetoresistance Measurements of a Superconducting Surface State of In-Induced and Pb-Induced Structures on Si(111)*, Physical Review Letters **110**, 237001, 2013 (siehe S. 3, 77, 140, 181).
DOI 10.1103/PhysRevLett.110.237001.
- [42] MÉNARD, G. C. et al.: *Two-dimensional topological superconductivity in Pb/Co/Si(111)*, Nature Communications **8**, 2040, 2017 (siehe S. 3, 75, 77).
DOI 10.1038/s41467-017-02192-x.
- [43] MÉNARD, G. C. et al.: *Isolated pairs of Majorana zero modes in a disordered superconducting lead monolayer*, Nature Communications **10**, 2587, 2019 (siehe S. 3, 77, 80).
DOI 10.1038/s41467-019-10397-5.
- [44] STEPANOVSKY, S. et al.: *The dense $\alpha - \sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Pb/Si(111) phase: A comprehensive STM and SPA-LEED study of ordering, phase transitions and interactions*, Surface Science **600**, 1.417–1.430, 2006 (siehe S. 3, 67, 73, 75, 76, 78, 80–82, 98, 103, 105, 143, 215).
DOI 10.1016/j.susc.2005.12.041.
- [45] JUNG, S. C. & KANG, M. H.: *Triple-domain effects on the electronic structure of Pb/Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$): Density-functional calculations*, Surface Science **605**, 551–554, 2011 (siehe S. 3, 26, 73, 74, 148–151, 153, 156, 160–162).
DOI 10.1016/j.susc.2010.12.015.
- [46] HSU, C.-H. et al.: *Electronic structure of the Pb/Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$) surface reconstruction: A first-principles study*, Physical Review B **81**, 033407, 2010 (siehe S. 3, 68, 71–73, 75, 149–153, 156, 160).
DOI 10.1103/PhysRevB.81.033407.
- [47] SAKONG, S. et al.: *Mode conversion and long-lived vibrational modes in lead monolayers on silicon (111) after femtosecond laser excitation: A molecular dynamics simulation*, Physical Review B **88**, 115419, 2013 (siehe S. 3, 77, 80, 106, 107, 119, 122, 127, 132, 143, 144).
DOI 10.1103/PhysRevB.88.115419.
- [48] REN, X.-Y. et al.: *Spin-orbit coupling effects on the stability of two competing structures in Pb/Si(111) and Pb/Ge(111)*, Physical Review B **94**, 075436, 2016 (siehe S. 3, 74, 75, 77, 106–114, 119, 120, 122, 126, 127, 132, 133, 141, 145, 146).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.075436.
- [49] CRAIN, J. N. et al.: *Chains of gold atoms with tailored electronic states*, Physical Review B **69**, 125401, 2004 (siehe S. 3, 84, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.69.125401.
- [50] AULBACH, J. et al.: *Spin Chains and Electron Transfer at Stepped Silicon Surfaces*, Nano Letters **16**, 2.698–2.704, 2016 (siehe S. 3, 213).
DOI 10.1021/acs.nanolett.6b00354.

- [51] LICHTENSTEIN, T. et al.: *Probing quasi-one-dimensional band structures by plasmon spectroscopy*, Physical Review B **97**, 165421, 2018 (siehe S. 3, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.97.165421.
- [52] SANNA, S. et al.: *How One-Dimensional Are Atomic Gold Chains on a Substrate*, The Journal of Physical Chemistry C **122**, 25.580–25.588, 2018 (siehe S. 3, 213).
DOI 10.1021/acs.jpcc.8b08600.
- [53] EDLER, F. et al.: *Charge-transfer transition in Au-induced quantum wires on Si(553)*, Physical Review B **100**, 045419, 2019 (siehe S. 3).
DOI 10.1103/PhysRevB.100.045419.
- [54] HAFKE, B. et al.: *Thermally Induced Crossover from 2D to 1D Behavior in an Array of Atomic Wires: Silicon Dangling-Bond Solitons in Si(553)-Au*, Physical Review Letters **124**, 016102, 2020 (siehe S. 3, 213).
DOI 10.1103/PhysRevLett.124.016102.
- [55] MAMIYEV, Z. et al.: *Enforced Long-Range Order in 1D Wires by Coupling to Higher Dimensions*, Physical Review Letters **126**, 106101, 2021 (siehe S. 3, 213).
DOI 10.1103/PhysRevLett.126.106101.
- [56] CZUBANOWSKI, M. et al.: *Temperature-driven refacetting phase transition in Pb chains on Si(557)*, Physical Review B **77**, 174108, 2008 (siehe S. 3, 85, 89, 91, 187, 190–194, 198).
DOI 10.1103/PhysRevB.77.174108.
- [57] TEGENKAMP, C. et al.: *Switching Between One and Two Dimensions: Conductivity of Pb-Induced Chain Structures on Si(557)*, Physical Review Letters **95**, 176804, 2005 (siehe S. 3, 89, 91, 185, 197, 198, 206, 212).
DOI 10.1103/PhysRevLett.95.176804.
- [58] TEGENKAMP, C. et al.: *Anisotropic conductance of Pb-induced chain structures on Si(557) in the monolayer regime*, The European Physical Journal B **43**, 557–564, 2005 (siehe S. 3, 85, 89, 91, 185, 197, 206).
DOI 10.1140/ebjb/e2005-00090-x.
- [59] TEGENKAMP, C. & PFNÜR, H.: *Switching between one- and two-dimensional conductance: Coupled chains in the monolayer of Pb on Si(557)*, Surface Science **601**, 2.641–2.646, 2007 (siehe S. 3, 85, 89, 91, 185, 197, 206).
DOI 10.1016/j.susc.2006.11.068.
- [60] CZUBANOWSKI, M., PFNÜR, H. & TEGENKAMP, C.: *Atomic chain ordering with ultra-long periods: Pb/Si(557)*, Surface Science **603**, L121–L124, 2009 (siehe S. 4, 88, 89, 92, 185, 187, 199–201, 209).
DOI 10.1016/j.susc.2009.08.013.
- [61] LÜKERMANN, D. et al.: *Magnetotransport in anisotropic Pb films and monolayers*, Physical Review B **81**, 125429, 2010 (siehe S. 4, 88, 90–92, 183, 185, 204–206).
DOI 10.1103/PhysRevB.81.125429.
- [62] BRAND, C. et al.: *Observation of correlated spin-orbit order in a strongly anisotropic quantum wire system*, Nature Communications **6**, 8118, 2015 (siehe S. 4, 5, 38, 39, 88–90, 92, 187, 195, 197, 199, 201, 202, 206, 208, 212, 213).
DOI 10.1038/NCOMMS9118.

- [63] BRAND, C. et al.: *Observation of correlated spin-orbit order in a strongly anisotropic quantum wire system – Supplement*, Nature Communications **6**, 8118, 2015 (siehe S. 4, 5, 38, 39, 88–90, 92, 195, 197, 208, 212).
DOI 10.1038/NCOMMS9118.
- [64] DAS, T.: *Spin-orbit density wave induced hidden topological order in URu₂Si₂*, Scientific Reports **2**, 596, 2012 (siehe S. 4, 38, 39, 195, 203).
DOI 10.1038/srep00596.
- [65] DAS, T.: *Interaction induced staggered spin-orbit order in two-dimensional electron gas*, Physical Review Letters **109**, 246406, 2012 (siehe S. 4, 38, 39, 195, 196, 200, 202, 203).
DOI 10.1103/PhysRevLett.109.246406.
- [66] BYCHKOV, Y. A. & RASHBA, É. I.: *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, JETP Letters **39**, 78–81, 1984 (siehe S. 5, 13).
- [67] BYCHKOV, Y. A. & RASHBA, É. I.: *Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers*, Journal of Physics C: Solid State Physics **17**, 6.039–6.045, 1984 (siehe S. 5, 13).
DOI 10.1088/0022-3719/17/33/015.
- [68] BECHSTEDT, F.: *Principles of Surface Physics*, Advanced Texts in Physics, 2003, Springer-Verlag (siehe S. 6, 8, 73, 74).
DOI 10.1007/978-3-642-55466-7.
- [69] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/2 – Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*, 6. Auflage, 2006, Springer-Verlag (siehe S. 9, 10, 12).
- [70] MUGARZA, A. et al.: *Lateral quantum wells at vicinal Au(111) studied with angle-resolved photoemission*, Physical Review B **66**, 245419, 2002 (siehe S. 10, 17, 23, 211).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.245419.
- [71] GAMBARDELLA, P. & MIRON, I. M.: *Current-induced spin-orbit torques*, Philosophical Transactions of The Royal Society A **369**, 3.175–3.197, 2011 (siehe S. 10, 16, 17, 21).
DOI 10.1098/rsta.2010.0336.
- [72] HAKEN, H. & WOLF, H. C.: *Atom- und Quantenphysik – Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, 7. Auflage, 2000, Springer Lehrbuch (siehe S. 10, 12, 28).
- [73] MAYER-KUCKUK, T.: *Atomphysik*, 3. Auflage, 1985, B. G. Teubner (siehe S. 10, 12).
- [74] HERTEL, I. V. & SCHULZ, C.-P.: *Atome, Moleküle und optische Physik 1 – Atomphysik und Grundlagen der Spektroskopie*, 2008, Springer Lehrbuch (siehe S. 11).
DOI 10.1007/978-3-540-30617-7.
- [75] WINKLER, R.: *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, 2003, Springer-Verlag (siehe S. 11, 14, 28, 277, 279, 284).
- [76] PHILLIPS, J. C.: *Bonds and Bands in Semiconductors*, Material Science Series, 1973, Academic Press, New York und London (siehe S. 11).
- [77] ZHU, X.-G. et al.: *Observation of Rashba splitting on $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Sb/Si}(111)$* , Surface Science **618**, 115–119, 2013 (siehe S. 11, 13, 147).
DOI 10.1016/j.susc.2013.08.011.

- [78] ZHOU, M. et al.: *Formation of quantum spin Hall state on Si surface and energy gap scaling with strength of spin orbit coupling*, Scientific Reports **4**, 7102, 2014 (siehe S. 11, 68).
DOI 10.1038/srep07102.
- [79] WITTEL, K. & MANNE, R.: *Atomic spin-orbit interaction parameters from spectral data for 19 elements*, Theoretica chimica acta **33**, 347–349, 1974 (siehe S. 11).
DOI 10.1007/BF00551162.
- [80] KOROTEEV, Y. M. et al.: *Strong Spin-Orbit Splitting on Bi Surfaces*, Physical Review Letters **93**, 046403, 2004 (siehe S. 11, 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.93.046403.
- [81] TURRO, N. J., RAMAMURTHY, V. & SCAIANO, J. C.: *Principles of Molecular Photochemistry – An Introduction*, 2009, University Science Books (siehe S. 11).
- [82] CLEMENTI, E., RAIMONDI, D. L. & REINHARDT, W. P.: *Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons*, The Journal of Chemical Physics **47**, 1.300–1.307, 1967 (siehe S. 11, 27).
DOI 10.1063/1.1712084.
- [83] SLATER, J. C.: *Atomic Shielding Constants*, Physical Review **36**, 57–64, 1930 (siehe S. 11, 27, 28).
DOI 10.1103/PhysRev.57.36.
- [84] DEMTRÖDER, W.: *Experimentalphysik 3 – Atome, Moleküle und Festkörper*, 3. Auflage, 2005, Springer Lehrbuch (siehe S. 12).
- [85] DRESSELHAUS, G.: *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*, Physical Review **100**, 580–586, 1955 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRev.100.580.
- [86] D’YAKONOV, M. I. & PEREL’, V. I.: *Possibility of Orienting Electron Spins with Current*, JETP Letters **13**, 467–469, 1971 (siehe S. 13).
- [87] D’YAKONOV, M. I. & PEREL’, V. I.: *Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors*, Physics Letters A **35**, 459–460, 1971 (siehe S. 13).
DOI 10.1016/0375-9601(71)90196-4.
- [88] KIMURA, T. et al.: *Room-Temperature Reversible Spin Hall Effect*, Physical Review Letters **98**, 156601, 2007 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.98.156601.
- [89] MAEKAWA, S. et al., Eds.: *Spin Current*, Series on Semiconductor Science and Technology, 2012, Oxford University Press (siehe S. 13, 16, 17).
- [90] SINOVA, J. et al.: *Universal Intrinsic Spin Hall Effect*, Physical Review Letters **92**, 126603, 2004 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.92.126603.
- [91] BIHLMAYER, G., RADER, O. & WINKLER, R.: *Focus on the Rashba effect*, New Journal of Physics **17**, 050202, 2015 (siehe S. 13).
DOI 10.1088/1367-2630/17/5/050202.

- [92] KRASOVSKII, E. E.: *Spin-orbit coupling at surfaces and 2D materials*, Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 493001, 2015 (siehe S. 13, 15, 24, 28).
DOI 10.1088/0953-8984/27/49/493001.
- [93] NITTA, J. et al.: *Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ Heterostructure*, Physical Review Letters **78**, 1.335–1.338, 1997 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.78.1335.
- [94] LAsHELL, S., MCDougALL, B. A. & JENSEN, E.: *Spin Splitting of an Au(111) Surface State Band Observed with Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy*, Physical Review Letters **77**, 3.419–3.422, 1996 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.77.3419.
- [95] HENK, J. et al.: *Spin-orbit coupling in the L-gap surface states of Au(111): spin-resolved photoemission experiments and first-principles calculations*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 7.581–7.597, 2004 (siehe S. 13).
DOI 10.1088/0953-8984/16/43/002.
- [96] BENTMANN, H. et al.: *Origin and manipulation of the Rashba splitting in surface alloys*, Europhysics Letters **87**, 37003, 2009 (siehe S. 13).
DOI 10.1209/0295-5075/87/37003.
- [97] KIMURA, A. et al.: *Strong Rashba-Type Spin-Polarization of the Photocurrent from Bulk Continuum States: Experiment and Theory for Bi(111)*, Physical Review Letters **105**, 076804, 2010 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.105.076804.
- [98] AST, C. R. et al.: *Giant Spin Splitting through Surface Alloying*, Physical Review Letters **98**, 186807, 2007 (siehe S. 13, 41, 122).
DOI 10.1103/PhysRevLett.98.186807.
- [99] BENTMANN, H. et al.: *Direct Observation of Interband Spin-Orbit Coupling in a Two-Dimensional Electron System*, Physical Review Letters **108**, 196801, 2012 (siehe S. 13, 41, 42, 122).
DOI 10.1103/PhysRevLett.108.196801.
- [100] EL-KAREH, L. et al.: *Quantum Interference Mapping of Rashba-Split Bloch States in Bi/Ag(111)*, Physical Review Letters **110**, 176803, 2013 (siehe S. 13, 41, 122).
DOI 10.1103/PhysRevLett.110.176803.
- [101] EL-KAREH, L. et al.: *A combined experimental and theoretical study of Rashba-split surface states on the $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ Pb/Ag(111)R30° surface*, New Journal of Physics **16**, 045017, 2014 (siehe S. 13, 41, 122).
DOI 10.1088/1367-2630/16/4/045017.
- [102] HE, K. et al.: *Direct Spectroscopic Evidence of Spin-Dependent Hybridization between Rashba-Split Surface States and Quantum-Well States*, Physical Review Letters **104**, 156805, 2010 (siehe S. 13, 41, 179).
DOI 10.1103/PhysRevLett.104.156805.

- [103] GRUZNEV, D. V. et al.: *Electronic band structure of a Tl/Sn atomic sandwich on Si(111)*, Physical Review B **91**, 035421, 2015 (siehe S. 13, 147).
DOI 10.1103/PhysRevB.91.035421.
- [104] HÖPFNER, P. et al.: *Electronic band structure of the two-dimensional metallic electron system Au/Ge(111)*, Physical Review B **83**, 235435, 2011 (siehe S. 13, 36, 146, 177).
DOI 10.1103/PhysRevB.83.235435.
- [105] HÖPFNER, P. et al.: *Three-Dimensional Spin-Rotations at the Fermi Surface of a Strongly Spin-Orbit Coupled Surface System*, Physical Review Letters **108**, 186801, 2012 (siehe S. 13, 24, 36, 146).
DOI 10.1103/PhysRevLett.108.186801.
- [106] HIRAHARA, T. et al.: *Direct observation of spin splitting in bismuth surface states*, Physical Review B **76**, 153305, 2007 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevB.76.153305.
- [107] HIRAHARA, T. et al.: *Origin of the surface-state band-splitting in ultrathin Bi films: from a Rashba effect to a parity effect*, New Journal of Physics **10**, 083038, 2008 (siehe S. 13).
DOI 10.1088/1367-2630/10/8/083038.
- [108] GIERZ, I. et al.: *Silicon Surface with Giant Spin Splitting*, Physical Review Letters **103**, 046803, 2009 (siehe S. 13, 147, 211).
DOI 10.1103/PhysRevLett.103.046803.
- [109] SAKAMOTO, K. et al.: *Peculiar Rashba Splitting Originating from the Two-Dimensional Symmetry of the Surface*, Physical Review Letters **103**, 156801, 2009 (siehe S. 13, 18, 125, 132, 147, 211).
DOI 10.1103/PhysRevLett.103.156801.
- [110] EICKHOLT, P. et al.: *Effects of orbital composition in a pair of spin-orbit-split surface bands at Tl/Ge(111)*, Physical Review B **93**, 085412, 2016 (siehe S. 13, 28, 83, 132).
DOI 10.1103/PhysRevB.93.085412.
- [111] SLOMSKI, B. et al.: *Interband spin-orbit coupling between anti-parallel spin states in Pb quantum well states*, New Journal of Physics **15**, 125031, 2013 (siehe S. 13, 21, 41, 42, 113, 128).
DOI 10.1088/1367-2630/15/12/125031.
- [112] SLOMSKI, B. et al.: *Manipulating the Rashba-type splitting and spin-texture of Pb quantum well states*, Physical Review B **84**, 193406, 2011 (siehe S. 13, 68, 125).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.193406.
- [113] SLOMSKI, B. et al.: *Tuning of the Rashba effect in Pb quantum well states via a variable Schottky barrier*, Scientific Reports **3**, 1963, 2013 (siehe S. 13, 68, 125).
DOI 10.1038/srep01963.
- [114] DIL, J. H. et al.: *Rashba-Type Spin-Orbit Splitting of Quantum Well States in Ultrathin Pb Films*, Physical Review Letters **101**, 266802, 2008 (siehe S. 13, 21, 68, 113, 125, 128).
DOI 10.1103/PhysRevLett.101.266802.
- [115] HIRAHARA, T. et al.: *Quantum well states in ultrathin Bi films: Angle-resolved photoemission*

- spectroscopy and first-principles calculations study*, Physical Review B **75**, 035422, 2007 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.035422.
- [116] HIRAHARA, T. et al.: *Role of Spin-Orbit Coupling and Hybridization Effects in the Electronic Structure of Ultrathin Bi Films*, Physical Review Letters **97**, 146803, 2006 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.97.146803.
- [117] MATHIAS, S. et al.: *Quantum-Well-Induced Giant Spin-Orbit Splitting*, Physical Review Letters **104**, 066802, 2010 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevLett.104.066802.
- [118] YAJI, K. et al.: *Experimental evidence for two-dimensional states localized in subsurface region of Ge(111)*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **201**, 92–97, 2015 (siehe S. 13, 177, 178).
DOI 10.1016/j.elspec.2014.09.005.
- [119] OHTSUBO, Y. et al.: *Spin-polarized semiconductor surface states localized in subsurface layers*, Physical Review B **82**, 201307(R), 2010 (siehe S. 13, 177).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.201307.
- [120] OHTSUBO, Y. et al.: *Two-dimensional states localized in subsurface layers of Ge(111)*, Physical Review B **88**, 245310, 2013 (siehe S. 13, 177, 178).
DOI 10.1103/PhysRevB.88.245310.
- [121] ARUGA, T.: *Different types of Rashba spin-split surface states on Ge(111)*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **201**, 74–80, 2015 (siehe S. 13, 132, 146, 177).
DOI 10.1016/j.elspec.2014.10.004.
- [122] LIN, C.-H. et al.: *Rashba effect within the space-charge layer of a semiconductor*, New Journal of Physics **16**, 045003, 2014 (siehe S. 13, 36, 177).
DOI 10.1088/1367-2630/16/4/045003.
- [123] MIYAMOTO, K. et al.: *The gigantic Rashba effect of surface states energetically buried in the topological insulator $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$* , New Journal of Physics **16**, 065016, 2014 (siehe S. 13, 24).
DOI 10.1088/1367-2630/16/6/065016.
- [124] ISHIZAKA, K. et al.: *Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI* , Nature Materials **10**, 521–526, 2011 (siehe S. 13).
DOI 10.1038/nmat3051.
- [125] CREPALDI, A.: Dissertation, *Strong Spin-Orbit Coupling in Low Dimensional Systems Investigated by Static and Time-Resolved ARPES*, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2013 (siehe S. 13).
- [126] LANDOLT, G.: Dissertation, *Spin- and Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy on Topological Insulators and Bulk Rashba Systems*, Universität Zürich, Schweiz, 2014 (siehe S. 13, 14, 63, 107, 109, 143, 144).
- [127] KOGA, T. & SEKINE, Y.: *Electron Spin Rotation and Quantitative Determination of Spin-Orbit Coefficients*, NTT Technical Review **10**, 2012 (siehe S. 13).
- [128] LIU, M.-H., CHANG, C.-R. & CHEN, S.-H.: *Spin precession due to spin-orbit coupling in a*

- two-dimensional electron gas with spin injection via ideal quantum point contact*, Physical Review B **71**, 153305, 2005 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevB.71.153305.
- [129] LIU, M.-H. & CHANG, C.-R.: *Datta-Das transistor: Significance of channel direction, size dependence of source contacts, and boundary effects*, Physical Review B **73**, 205301, 2006 (siehe S. 13).
DOI 10.1103/PhysRevB.73.205301.
- [130] PETERSEN, A. & HEDEGÅRD, P.: *A simple tight-binding model of spin-orbit splitting of sp-derived surface states*, Surface Science **459**, 49–56, 2000 (siehe S. 14, 17, 107, 109).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)00441-6.
- [131] VAJNA, S. et al.: *Higher-order contributions to the Rashba-Bychkov effect with application to the Bi/Ag(111) surface alloy*, Physical Review B **85**, 075404, 2012 (siehe S. 14, 15, 24).
DOI 10.1103/PhysRevB.85.075404.
- [132] OGUCHI, T. & SHISHIDOU, T.: *The surface Rashba effect: a $k \cdot p$ perturbation approach*, Journal of Physics: Condensed Matter **21**, 092001, 2009 (siehe S. 14, 20, 22, 74).
DOI 10.1088/0953-8984/21/9/092001.
- [133] SIMON, E. et al.: *Anisotropic Rashba splitting of surface states from the admixture of bulk states: Relativistic ab initio calculations and $k \cdot p$ perturbation theory*, Physical Review B **81**, 235438, 2010 (siehe S. 15).
DOI 10.1103/PhysRevB.81.235438.
- [134] BIHLMAYER, G. et al.: *The Rashba-effect at metallic surfaces*, Surface Science **600**, 3.888–3.891, 2006 (siehe S. 17).
DOI 10.1016/j.susc.2006.01.098.
- [135] WEITERING, H. H., ETTEMA, A. R. H. F. & HIBMA, T.: *Surface states and Fermi-level pinning at epitaxial Pb/Si(111) surfaces*, Physical Review B **45**, 9.126–9.135, 1995 (siehe S. 17, 68, 71, 74, 77, 81, 82, 100, 115, 152).
DOI 10.1103/PhysRevB.45.9126.
- [136] HIBMA, T. et al.: *Interface structure and Schottky barriers of epitaxial Pb on Si(111)*, Applied Surface Science **48–49**, 209–214, 1991 (siehe S. 17, 68, 71, 74, 77, 81, 82, 115, 152).
DOI 10.1016/0169-4332(91)90332-E.
- [137] HESLINGA, D. R. et al.: *Atomic-Structure-Dependent Schottky Barrier at Epitaxial Pb/Si(111) Interfaces*, Physical Review Letters **64**, 1.589–1.592, 1990 (siehe S. 17, 71, 100).
DOI 10.1103/PhysRevLett.64.1589.
- [138] CHOI, W. H. et al.: *Electronic structure of dense Pb overlayers on Si(111) investigated using angle-resolved photoemission*, Physical Review B **75**, 075329, 2007 (siehe S. 17, 73, 74, 80, 135, 148, 150, 152, 153, 156, 158, 159, 164, 165, 167–169, 176, 218).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.075329.
- [139] TAKEDA, S. N., HIGASHI, N. & DAIMON, H.: *Effect of surface carrier concentration on valence subbands in Si(111) p-type inversion layers: Angle-resolved photoemission spectroscopy*, Physical Review B **82**, 035318, 2010 (siehe S. 17, 77, 177, 180).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.035318.

- [140] KITTEL, C.: *Einführung in die Festkörperphysik*, 14. Auflage, 2006, Oldenbourg Verlag München Wien (siehe S. 17, 114).
- [141] AYOB, N. I. et al.: *Unusual energy separation of subbands in Si(111) p-channels induced by In adsorption*, Japanese Journal of Applied Physics **54**, 065702, 2015 (siehe S. 17, 177). DOI 10.1143/JJAP.54.065702.
- [142] KIM, K. S. et al.: *Nearly Massless Electrons in the Silicon Interface with a Metal Film*, Physical Review Letters **104**, 246803, 2010 (siehe S. 17, 73, 74, 135, 148–150, 152, 156, 158, 159, 165, 177, 180). DOI 10.1103/PhysRevLett.104.246803.
- [143] IBACH, H. & LÜTH, H.: *Festkörperphysik – Einführung in die Grundlagen*, 7. Auflage, 2009, Springer Lehrbuch (siehe S. 17). DOI 10.1007/978-3-540-85795-2.
- [144] MÖNCH, W.: *Semiconductor Surfaces and Interfaces*, 3rd Edition, Vol. **26**, Springer Series in Surface Sciences, 2001, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (siehe S. 17, 65). DOI 10.1007/978-3-662-04459-9.
- [145] NAGANO, M. et al.: *A first-principles study on the Rashba effect in surface systems*, Journal of Physics: Condensed Matter **21**, 064239, 2009 (siehe S. 17, 18, 147). DOI 10.1088/0953-8984/21/6/064239.
- [146] DIL, J. H.: *Spin and angle-resolved photoemission on non-magnetic low-dimensional systems*, Journal of Physics: Condensed Matter **21**, 403001, 2009 (siehe S. 18, 19, 63). DOI 10.1088/0953-8984/21/40/403001.
- [147] NAKAJIN, K. & MURAKAMI, S.: *Theory of unconventional spin states in surfaces with non-Rashba spin-orbit interaction*, Physical Review B **91**, 245428, 2015 (siehe S. 18, 132, 147). DOI 10.1103/PhysRevB.91.245428.
- [148] HOESCH, M. et al.: *Spin structure of the Shockley surface state on Au(111)*, Physical Review B **69**, 241401(R), 2004 (siehe S. 21, 113, 127). DOI 10.1103/PhysRevB.69.241401.
- [149] LOBO-CHECA, J. et al.: *Robust Spin Polarization and Spin Textures on Stepped Au(111) Surfaces*, Physical Review Letters **104**, 187602, 2010 (siehe S. 23). DOI 10.1103/PhysRevLett.104.187602.
- [150] STOLWIJK, S. D. et al.: *Spin texture with a twist in momentum space for Tl/Si(111)*, Physical Review B **91**, 245420, 2015 (siehe S. 23, 132). DOI 10.1103/PhysRevB.91.245420.
- [151] STOLWIJK, S. D.: Springer Theses – Recognizing Outstanding Ph. D. Research, *Spin-Orbit-Induced Spin Textures of Unoccupied Surface States on Tl/Si(111)*, Universität Münster, 2015 (siehe S. 23, 28, 131, 132). DOI 10.1007/978-3-319-18762-4.
- [152] ANNESE, E. et al.: *Nonvortical Rashba Spin Structure on a Surface with C_{1h} Symmetry*, Physical Review Letters **117**, 016803, 2016 (siehe S. 23, 28). DOI 10.1103/PhysRevLett.117.016803.
- [153] FLESZAR, A. & HANKE, W.: *Two-Dimensional Metallicity with a Large Spin-Orbit Splitting:*

- DFT Calculations of the Atomic, Electronic, and Spin Structures of the Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° Surface*, Advances in Condensed Matter Physics **2015**, 531498, 2015 (siehe S. 24, 36, 146, 177).
DOI 10.1155/2015/531498.
- [154] FRANTZESKAKIS, E. & GRIONI, M.: *Anisotropy effects on Rashba and topological insulator spin-polarized surface states: A unified phenomenological description*, Physical Review B **84**, 155453, 2011 (siehe S. 24).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.155453.
- [155] FU, L.: *Hexagonal Warping Effects in the Surface States of the Topological Insulator Bi₂Te₃*, Physical Review Letters **103**, 266801, 2009 (siehe S. 24, 137).
DOI 10.1103/PhysRevLett.103.266801.
- [156] MICHIARDI, M. et al.: *Strongly anisotropic spin-orbit splitting in a two-dimensional electron gas*, Physical Review B **91**, 035445, 2015 (siehe S. 24).
DOI 10.1103/PhysRevB.91.035445.
- [157] NOFFSINGER, J. & COHEN, M. L.: *Superconductivity in monolayer Pb on Si(111) from first principles*, Solid State Communications **151**, 421–424, 2011 (siehe S. 26, 74, 75, 77).
DOI 10.1016/j.ssc.2011.01.006.
- [158] JUNG, S. C. & KANG, M. H.: *Dynamical nature of the high-temperature Pb/Si(111)-1 × 1 phase*, Physical Review B **84**, 155422, 2011 (siehe S. 26, 73, 74, 82, 100, 105, 159).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.155422.
- [159] CLEMENTI, E. & RAIMONDI, D. L.: *Atomic Screening Constants from SCF Functions*, The Journal of Chemical Physics **38**, 2.686–2.689, 1967 (siehe S. 28).
DOI 10.1063/1.1733573.
- [160] SAKAMOTO, K. et al.: *Low energy ion scattering study of adsorption and desorption processes of Pb on Si(111) surfaces*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **201**, 88–91, 2015 (siehe S. 28, 29, 83, 131).
DOI 10.1016/j.e1spec.2014.09.008.
- [161] SAKAMOTO, K. et al.: *Abrupt Rotation of the Rashba Spin to the Direction Perpendicular to the Surface*, Physical Review Letters **102**, 096805, 2009 (siehe S. 28, 125, 132).
DOI 10.1103/PhysRevLett.102.096805.
- [162] STOLWIJK, S. D. et al.: *Rotating Spin and Giant Splitting: Unoccupied Surface Electronic Structure of Tl/Si(111)*, Physical Review Letters **111**, 176402, 2013 (siehe S. 28, 131).
DOI 10.1103/PhysRevLett.111.176402.
- [163] IBAÑEZ-APIROZ, J., EIGUREN, A. & BERGARA, A.: *Relativistic effects and fully spin-polarized Fermi surface at the Tl/Si(111) surface*, Physical Review B **84**, 125435, 2011 (siehe S. 28, 83, 131, 132).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.125435.
- [164] OHTSUBO, Y. et al.: *A metallic surface state with uniaxial spin polarization on Tl/Ge(111)-(1 × 1)*, Journal of Physics: Condensed Matter **24**, 092001, 2012 (siehe S. 28, 83, 132).
DOI 10.1088/0953-8984/24/9/092001.
- [165] LAFUENTE-BARTOLOME, J., GURTUBAY, I. G. & EIGUREN, A.: *Relativistic response and novel*

- spin-charge plasmon at the Tl/Si(111) surface*, Physical Review B **96**, 035416, 2017 (siehe S. 28, 83).
DOI 10.1103/PhysRevB.96.035416.
- [166] ARAKI, A. et al.: *Spin-splitting band dispersions of the heavy elements on Si(111)-(1 × 1) surface*, Journal of Physics: Conference Series – International Conference on Magnetism (ICM 2009) **200**, 062001, 2009 (siehe S. 28, 82, 83, 143).
DOI 10.1088/1742-6596/200/6/062001.
- [167] TANG, C.-S. et al.: *Double-finger-gate controlled spin-resolved resonant quantum transport in the presence of a Rashba-Zeeman gap*, Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 085801, 2015 (siehe S. 29).
DOI 10.1088/0953-8984/27/8/085801.
- [168] MENG, T., KLINOVAJA, J. & LOSS, D.: *Renormalization of anticrossings in interacting quantum wires with Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings*, Physical Review B **89**, 205133, 2014 (siehe S. 29).
DOI 10.1103/PhysRevB.89.205133.
- [169] BRAUNECKER, B. et al.: *Spin-selective Peierls transition in interacting one-dimensional conductors with spin-orbit interaction*, Physical Review B **82**, 045127, 2010 (siehe S. 29).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.045127.
- [170] BRAUNECKER, B., BENA, C. & SIMON, P.: *Spectral properties of Luttinger liquids: A comprehensive analysis of regular, helical, and spiral Luttinger liquids*, Physical Review B **85**, 035136, 2012 (siehe S. 29).
DOI 10.1103/PhysRevB.85.035136.
- [171] SCHMIDT, T. L.: *Finite-temperature conductance of interacting quantum wires with Rashba spin-orbit coupling*, Physical Review B **88**, 235429, 2013 (siehe S. 29).
DOI 10.1103/PhysRevB.88.235429.
- [172] LIU, D. E. & LEVCHENKO, A.: *Tunneling spectroscopy of a spiral Luttinger liquid in contact with superconductors*, Physical Review B **88**, 155315, 2013 (siehe S. 29).
DOI 10.1103/PhysRevB.88.155315.
- [173] KRUPIN, O. et al.: *Rashba effect at magnetic metal surfaces*, Physical Review B **71**, 201403(R), 2005 (siehe S. 31).
DOI 10.1103/PhysRevB.71.201403.
- [174] KRUPIN, O.: Dissertation, *Dichroism and Rashba effect at magnetic crystal surfaces of rare-earth metals*, Freie Universität Berlin, 2004 (siehe S. 31).
- [175] BIANCHI, M. et al.: *Coexistence of the topological state and a two-dimensional electron gas on the surface of Bi₂Se₃*, Nature Communications **1**, 1131, 2010 (siehe S. 36).
DOI 10.1038/ncomms1131.
- [176] MONÇEAU, P. et al.: *Electric Field Breakdown of Charge-Density-Wave – Induced Anomalies in NbSe₃*, Physical Review Letters **37**, 602–606, 1976 (siehe S. 37).
DOI 10.1103/PhysRevLett.37.602.

- [177] YEOM, H. W. et al.: *Instability and Charge Density Wave of Metallic Quantum Chains on a Silicon Surface*, Physical Review Letters **82**, 4.898–4.901, 1999 (siehe S. 37).
DOI 10.1103/PhysRevLett.82.4898.
- [178] AHN, J. R. et al.: *Mechanism of Gap Opening in a Triple-Band Peierls System: In Atomic Wires on Si*, Physical Review Letters **93**, 106401, 2004 (siehe S. 37).
DOI 10.1103/PhysRevLett.93.106401.
- [179] MASCARAQUE, A. et al.: *Symmetry breaking and atomic displacements in the 3×3 surface phase of Pb/Ge(111)*, Surface Science **454–456**, 191–195, 2000 (siehe S. 37, 69).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)00210-7.
- [180] PEIERLS, R.: *Zur Theorie der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit von Metallen*, Annalen der Physik **396**, 121–148, 1930 (siehe S. 38).
DOI 10.1002/andp.19303960202.
- [181] OVERHAUSER, A. W.: *Spin Density Waves in an Electron Gas*, Physical Review **128**, 1.437–1.452, 1962 (siehe S. 38).
DOI 10.1103/PhysRev.128.1437.
- [182] FAWCETT, E.: *Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium*, Reviews of Modern Physics **60**, 209–283, 1988 (siehe S. 38).
DOI 10.1103/RevModPhys.60.209.
- [183] GRÜNER, G.: *The dynamics of spin-density waves*, Reviews of Modern Physics **66**, 1–24, 1994 (siehe S. 38).
DOI 10.1103/RevModPhys.66.1.
- [184] DAS, T.: *Staggered Spin-Orbit Order: A New Paradigm of Broken Symmetry Phase of Matter*, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism **26**, 1.673–1.677, 2013 (siehe S. 38).
DOI 10.1007/s10948-012-2008-0.
- [185] DAS, T.: *Spin-orbit density wave: a new phase of matter applicable to the hidden order state of URu_2Si_2* , Philosophical Magazine **94**, 3.838–3.862, 2014 (siehe S. 38, 39).
DOI 10.1080/14786435.2014.916425.
- [186] DAS, T.: *Imprints of spin-orbit density wave in the hidden-order state of URu_2Si_2* , Physical Review B **89**, 045135, 2014 (siehe S. 38–40).
DOI 10.1103/PhysRevB.89.045135.
- [187] DAS, T.: *Tuning directional dependent metal-insulator transitions in quasi-1D quantum wires with spin-orbit density wave instability*, Journal of Physics: Condensed Matter **28**, 294001, 2016 (siehe S. 38).
DOI 10.1088/0953-8984/28/29/294001.
- [188] DAS, T.: *A pedagogic review on designing model topological insulators*, arXiv, 1604.07546, 2016 (siehe S. 38).
- [189] SANTANDER-SYRO, A. F. et al.: *Fermi-surface instability at the 'hidden-order' transition of URu_2Si_2* , Nature Physics **5**, 637–641, 2009 (siehe S. 38).
DOI 10.1038/nphys1361.
- [190] MENG, J.-Q. et al.: *Imaging the Three-Dimensional Fermi-Surface Pairing near the Hidden-*

- Order Transition in URu₂Si₂ Using Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy*, Physical Review Letters **111**, 127002, 2013 (siehe S. 38).
DOI 10.1103/PhysRevLett.111.127002.
- [191] TARASENKO, S. A.: *Scattering Induced Spin Orientation and Spin Currents in Gyrotropic Structures*, JETP Letters **84**, 199–203, 2006 (siehe S. 39, 40, 212).
- [192] SZOLNOKI, L. et al.: *Spin-relaxation time in materials with broken inversion symmetry and large spin-orbit coupling*, Scientific Reports **7**, 9949, 2013 (siehe S. 40, 212).
DOI 10.1038/s41598-017-09759-0.
- [193] CHEN, T.-W. et al.: *High Chern number quantum anomalous Hall phases in single-layer graphene with Haldane orbital coupling*, Physical Review B **84**, 165453, 2011 (siehe S. 41).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.165453.
- [194] ZHANG, H. et al.: *Engineering quantum anomalous Hall phases with orbital and spin degrees of freedom*, Physical Review B **87**, 205132, 2013 (siehe S. 41).
DOI 10.1103/PhysRevB.87.205132.
- [195] ZHANG, H. et al.: *Topological phases of Bi(111) bilayer in an external exchange field*, Physical Review B **86**, 035104, 2012 (siehe S. 41).
DOI 10.1103/PhysRevB.86.035104.
- [196] BIHLMAYER, G., BLÜGEL, S. & CHULKOV, E. V.: *Enhanced Rashba spin-orbit splitting in Bi/Ag(111) and Pb/Ag(111) surface alloys from first principles*, Physical Review B **75**, 195414, 2007 (siehe S. 41, 122).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.195414.
- [197] MERZIGER, G. et al.: *Formeln + Hilfen zur höheren Mathematik*, 4. Auflage, 2004, Binomi Verlag (siehe S. 43, 44, 282, 289).
- [198] KANE, E. O.: *Energy band structure in p-type Germanium and Silicon*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **1**, 82–99, 1956 (siehe S. 44, 279, 281–285, 288).
DOI 10.1016/0022-3697(56)90014-2.
- [199] STERN, F.: *Self-Consistent Results for n-Type Si Inversion Layers*, Physical Review B **5**, 4.891–4.899, 1972 (siehe S. 52).
DOI 10.1103/PhysRevB.5.4891.
- [200] LÜTH, H.: *Surfaces and Interfaces of Solids*, 2nd Edition, 1993, Springer-Verlag (siehe S. 52).
DOI 10.1007/978-3-662-10159-9.
- [201] QUENTIN, M.: Dissertation, *Finite-size effects and spin-orbit coupling in low-dimensional systems*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2019 (siehe S. 53, 89, 90, 92, 185, 187, 202).
- [202] SCHMEIDEL, J.: Dissertation, *Molekulare Elektronik: Struktur und Transportverhalten von einzelnen Ferrocen Molekülen auf Metall-Halbleiter Oberflächen*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2011 (siehe S. 53).
- [203] BRAND, C.: Masterarbeit, *STM- und STS-Untersuchungen an epitaktischen Ag-Quantendrähten auf Si(557)*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2012 (siehe S. 53, 85, 86).

- [204] TECHNOLOGY, R.: *UHV 700 – Variable Temperature Ultra-High Vacuum Scanning Tunneling Microscope – User’s Guide*, Document Version 1.0, 2009 (siehe S. 53, 55).
- [205] HORN-VON HOEGEN, M.: *Growth of semiconductor layers studied by spot profile analysing low energy electron diffraction – Part 1*, Zeitschrift für Kristallographie **214**, 591–629, 1999 (siehe S. 54, 58, 98, 100).
DOI 10.1524/zkri.1999.214.10.591.
- [206] HORN-VON HOEGEN, M.: *Growth of semiconductor layers studied by spot profile analysing low energy electron diffraction – Part 2*, Zeitschrift für Kristallographie **214**, 684–721, 1999 (siehe S. 54, 58, 98, 100).
DOI 10.1524/zkri.1999.214.11.684.
- [207] BARDEEN, J.: *Tunnelling from a Many-Particle Point of View*, Physical Review Letters **6**, 57–59, 1961 (siehe S. 54).
DOI 10.1103/PhysRevLett.6.57.
- [208] TERSOFF, J. & HAMANN, D. R.: *Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope*, Physical Review Letters **50**, 1.998–2.001, 1983 (siehe S. 54).
DOI 10.1103/PhysRevLett.50.1998.
- [209] TERSOFF, J. & HAMANN, D. R.: *Theory of the scanning tunneling microscope*, Physical Review B **31**, 805–813, 1985 (siehe S. 54).
DOI 10.1103/PhysRevB.31.805.
- [210] TROMP, R. M.: *Spectroscopy with the scanning tunnelling microscope: a critical review*, Journal of Physics: Condensed Matter **1**, 10.211–10.228, 1989 (siehe S. 54, 56).
DOI 10.1088/0953-8984/1/51/001.
- [211] WOODRUFF, D. P. & DELCHAR, T. A.: *Modern techniques of surface science*, Eds.: CAHN, R. W., DAVIS, E. A. & WARD, I. M., Cambridge Solid State Science Series, 1986, Cambridge University Press (siehe S. 55).
- [212] LÜKERMANN, D.: Dissertation, *Spin-Bahn-Kopplung in niedrigdimensionalen Strukturen auf Oberflächen – Wachstum und elektronischer Transport*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2013 (siehe S. 55–57, 59–61, 88–93, 181–183, 185, 187, 197, 205, 206, 217).
- [213] KRÖGER, P. C.: Dissertation, *Elektronischer Transport in spinpolarisierten Oberflächen*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2017 (siehe S. 56, 57, 59, 60).
- [214] GRONWALD, K. D. & HENZLER, M.: *Epitaxy of Si(111) as studied with a new high resolving LEED system*, Surface Science **117**, 180–187, 1982 (siehe S. 57).
DOI 10.1016/0039-6028(82)90498-8.
- [215] HENZLER, M.: *Defects at semiconductor surfaces*, Surface Science **152–153**, 963–976, 1985 (siehe S. 57).
DOI [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(85\)90511-4](https://doi.org/10.1016/0039-6028(85)90511-4).
- [216] SCHEITHAUER, U., MEYER, G. & HENZLER, M.: *A new LEED instrument for quantitative spot profile analysis*, Surface Science **178**, 441–451, 1986 (siehe S. 57).
DOI 10.1016/0039-6028(86)90321-3.

- [217] WOLLSCHLÄGER, J., FALTA, J. & HENZLER, M.: *Electron diffraction at stepped homogeneous and inhomogeneous surfaces*, Applied Physics A **50**, 57–68, 1990 (siehe S. 58).
DOI 10.1007/BF00323955.
- [218] DRUDE, P.: *Zur Elektronentheorie der Metalle*, Annalen der Physik **306**, 566–613, 1900 (siehe S. 58).
DOI <https://doi.org/10.1002/andp.19003060312>.
- [219] BABER, W. G.: *The contribution to the electrical resistance of metals from collisions between electrons*, Proceedings of the Royal Society A **158**, 383–396, 1937 (siehe S. 59).
DOI 10.1098/rspa.1937.0027.
- [220] ANDERSON, P. W.: *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, Physical Review **109**, 1.492–1.505, 1958 (siehe S. 59).
DOI 10.1103/PhysRev.109.1492.
- [221] PFENNIGSTORF, O.: Dissertation, *Quantisierter elektronischer Transport in ultradünnen Bleischichten*, Universität Hannover, 2001 (siehe S. 59, 60, 68, 181, 182).
- [222] MOTT, N. F. & DAVIS, E. A.: *Electronic Processes In Non-Crystalline Materials*, 2nd Edition, 1979, Oxford University Press (siehe S. 59).
- [223] HIKAMI, S., LARKIN, A. I. & NAGAOKA, Y.: *Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System*, Progress of Theoretical Physics **63**, 707–710, 1980 (siehe S. 60, 90, 182, 204, 205).
DOI 10.1143/PTP.63.707.
- [224] ALTSHULER, B. L. et al.: *Magnetoresistance and Hall effect in a disordered two-dimensional electron gas*, Physical Review B **22**, 5.142–5.153, 1980 (siehe S. 60).
DOI 10.1103/PhysRevB.22.5142.
- [225] HOESCH, M. et al.: *Spin-polarized Fermi surface mapping*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **124**, 263–279, 2002 (siehe S. 61, 63).
DOI 10.1016/S0368-2048(02)00058-0.
- [226] YAJI, K. et al.: *Spin-dependent quantum interference in photoemission process from spin-orbit coupled states*, Nature Communications **8**, 14588, 2017 (siehe S. 61).
DOI 10.1038/ncomms14588.
- [227] KURODA, K. et al.: *Coherent control over three-dimensional spin polarization for the spin-orbit coupled surface state of Bi₂Se₃*, Physical Review B **94**, 165162, 2016 (siehe S. 61).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.165162.
- [228] KOBAYASHI, K. et al.: *Calculation of spin states of photoelectrons emitted from spin-polarized surface states of Bi(111) surfaces with a mirror symmetry*, Physical Review B **95**, 205436, 2017 (siehe S. 61).
DOI 10.1103/PhysRevB.95.205436.
- [229] RAZZOLI, E. et al.: *Selective Probing of Hidden Spin-Polarized States in Inversion-Symmetric Bulk MoS₂*, Physical Review Letters **118**, 086402, 2017 (siehe S. 61).
DOI 10.1103/PhysRevLett.118.086402.

- [230] MEIER, F., DIL, J. H. & OSTERWALDER, J.: *Measuring spin polarization vectors in angle-resolved photoemission spectroscopy*, New Journal of Physics **11**, 125008, 2009 (siehe S. 63). DOI 10.1088/1367-2630/11/12/125008.
- [231] DIL, J. H.: *Spin- and angle-resolved photoemission on topological materials*, Electronic Structure **1**, 023001, 2019 (siehe S. 63). DOI 10.1088/2516-1075/ab168b.
- [232] EASTMAN, D. E.: *Geometrical and electronic structure of Si(001) and Si(111) surfaces: A status report*, Journal of Vacuum Science and Technology **17**, 492-500, 1980 (siehe S. 65). DOI 10.1116/1.570492.
- [233] TAKAYANAGI, K. et al.: *Structural analysis of Si(111)-7×7 by UHV-transmission electron diffraction and microscopy*, Journal of Vacuum Science and Technology A **3**, 1.502-1.506, 1985 (siehe S. 65, 66). DOI 10.1116/1.573160.
- [234] TAKAYANAGI, K. et al.: *Structure analysis of Si(111)-7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction*, Surface Science **164**, 367-392, 1985 (siehe S. 65, 66). DOI 10.1016/0039-6028(85)90753-8.
- [235] HAMERS, R. J., TROMP, R. M. & DEMUTH, J. E.: *Surface Electronic Structure of Si (111)-(7×7) Resolved in Real Space*, Physical Review Letters **56**, 1.972-1.975, 1986 (siehe S. 65). DOI 10.1103/PhysRevLett.56.1972.
- [236] NORTHRUP, J. E.: *Origin of Surface States on Si(111)(7×7)*, Physical Review Letters **57**, 154-157, 1986 (siehe S. 65). DOI 10.1103/PhysRevLett.57.154.
- [237] HIMPSEL, F. J., HOLLINGER, G. & POLLAK, R. A.: *Determination of the Fermi-level pinning position at Si(111) surfaces*, Physical Review B **28**, 7.014-7.018, 1983 (siehe S. 65). DOI 10.1103/PhysRevB.28.7014.
- [238] HANSSON, G. V. & UHRBERG, R. I. G.: *Photoelectron spectroscopy of surface states on semiconductor surfaces*, Surface Science Reports **9**, 197-292, 1988 (siehe S. 65, 66). DOI 10.1016/0167-5729(88)90003-9.
- [239] HEIKE, S. et al.: *Electron Conduction through Surface States of the Si(111)-(7×7) Surface*, Physical Review Letters **81**, 890-893, 1998 (siehe S. 66). DOI 10.1103/PhysRevLett.81.890.
- [240] PFENNIGSTORF, O. et al.: *Electronic transport in ultrathin epitaxial Pb films on Si(111) surface*, Applied Surface Science **162-163**, 537-546, 2000 (siehe S. 67, 68, 181). DOI 10.1016/S0169-4332(00)00247-6.
- [241] YAKES, M. & TRINGIDES, M. C.: *Probing the Buried Pb/Si(111) Interface with SPA-LEED and STM on Si(111)-Pb√3×√3*, The Journal of Physical Chemistry A **115**, 7096-7104, 2011 (siehe S. 67). DOI 10.1021/jp1124266.
- [242] YAKES, M. K.: Retrospective Theses and Dissertations, *Self assembled nano-structures of Pb on Si(111) studied by SPA-LEED: Quantum Size Effect driven Pb islands and the "Devil's Staircase"*, Iowa State University, Ames, Iowa, USA, 2006 (siehe S. 67, 68, 78-81, 103, 167).

- [243] PETKOVA, A. D. et al.: *Order and disorder in ultrathin Pb films grown on Si(111) 7×7 substrates at low temperatures*, Surface Science **482**, 922–927, 2001 (siehe S. 67).
DOI 10.1016/S0039-6028(01)00866-4.
- [244] PETKOVA, A. D. et al.: *Deviations from exact epitaxial positions in heteroepitaxy*, Surface Science **542**, 211–220, 2003 (siehe S. 67).
DOI 10.1016/S0039-6028(03)00914-2.
- [245] PETKOVA, A. D.: Dissertation, *Epitaktische Bleimonolagen auf Si(111)-Oberflächen: Struktur und Defekte*, Universität Hannover, 2001 (siehe S. 67–70, 75, 76, 81, 95, 98).
- [246] GRAMLICH, M. W. R.: Dissertation, *X-Ray Diffraction Studies on the Pb/Si(111) System*, University of Missouri, USA, 2011 (siehe S. 67, 71, 100).
- [247] STRANSKI, I. N. & KRASTANOV, L.: *Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander*, Monatshefte für Chemie **71**, 351–364, 1938 (siehe S. 67).
DOI 10.1007/BF01798103.
- [248] STRANSKI, I. N. & KRASTANOV, L.: *Berichtigung zur Arbeit „Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander“*, Monatshefte für Chemie **72**, 76, 1938 (siehe S. 67).
DOI 10.1007/BF02716117.
- [249] BUDDE, K. et al.: *Uniform, self-organized, seven.step height Pb/Si(111)-(7×7) islands at low temperatures*, Physical Review B **61**, R10.602–R10.605, 2000 (siehe S. 67, 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.61.R10602.
- [250] HUPALO, M. et al.: *Interface relaxation and electronic corrugation in the Pb/Si(111)-Pb- $\alpha - \sqrt{3} \times \sqrt{3}$* , Physical Review B **71**, 193408, 2005 (siehe S. 67).
DOI 10.1103/PhysRevB.71.193408.
- [251] LU, S. M. et al.: *Strength modulation of quantum-well states in Pb islands with periodic distortions on Si(111)*, Physical Review B **75**, 113402, 2007 (siehe S. 67, 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.113402.
- [252] JIAN, W. B. et al.: *Vertical Friedel Oscillations in Interface-Induced Surface Charge Modulations of Ultrathin Quantum Islands*, Physical Review Letters **90**, 196603, 2003 (siehe S. 67, 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.90.196603.
- [253] ZHANG, Y.-F. et al.: *Growth, stability and morphology evolution of Pb films on Si(111) prepared at low temperature*, Surface Science **596**, L331–L338, 2005 (siehe S. 67, 68).
DOI 10.1016/j.susc.2005.09.006.
- [254] FRANK, F. C. & VAN DER MERWE, J. H.: *One-Dimensional Dislocations – I. Static Theory*, Proceedings of the Royal Society of London – Series A – Mathematical and Physical Sciences **198**, 205–216, 1949 (siehe S. 68).
- [255] FRANK, F. C. & VAN DER MERWE, J. H.: *One-Dimensional Dislocations – II. Misfitting Monolayers and Oriented Overgrowth*, Proceedings of the Royal Society of London – Series A – Mathematical and Physical Sciences **198**, 216–225, 1949 (siehe S. 68).
- [256] FRANK, F. C. & VAN DER MERWE, J. H.: *One-Dimensional Dislocations – III. Influence of the Second Harmonic Term in the Potential Representation, on the Properties of the Model*,

- Proceedings of the Royal Society of London – Series A – Mathematical and Physical Sciences **200**, 125–134, 1949 (siehe S. 68).
- [257] JAŁOCHOWSKI, M. & BAUER, E.: *Formation of regular step arrays on Si(111)7 × 7*, Journal of Applied Physics **63**, 4.501–4.504, 1988 (siehe S. 68).
DOI 10.1063/1.340145.
- [258] LI, W.-J. et al.: *Enhancement of superconductivity of Pb ultra-thin films by the interface effect*, Surface Review and Letters **17**, 437–440, 2010 (siehe S. 68, 75, 98, 103).
DOI 10.1142/S0218625X10014235.
- [259] BAO, X.-Y. et al.: *Quantum Size Effects on the Perpendicular Upper Critical Field in Ultrathin Lead Films*, Physical Review Letters **95**, 247005, 2005 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.95.247005.
- [260] BENEDEK, G. et al.: *Phonons and electron-phonon anomalies in ultra-thin Pb films on Si(111) and Ge(111)*, Surface Science **678**, 38–45, 2018 (siehe S. 68, 77).
DOI 10.1016/j.susc.2018.02.009.
- [261] BRUN, C. et al.: *Reduction of the Superconducting Gap of Ultrathin Pb Islands Grown on Si(111)*, Physical Review Letters **102**, 207002, 2009 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.102.207002.
- [262] BRUN, C. et al.: *Dynamical Coulomb Blockade Observed in Nanosized Electrical Contacts*, Physical Review Letters **108**, 126802, 2012 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.108.126802.
- [263] CAMINALE, M. et al.: *Threshold of magnetic field response of the superconducting proximity effect for ultrathin Pb/Ag metallic films*, Physical Review B **90**, 220507(R), 2014 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.90.220507.
- [264] CHAN, T.-L. et al.: *Quantum Size Effects on the Diffusion Barriers and Growth Morphology of Pb/Si(111)*, Physical Review Letters **96**, 226102, 2006 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.96.226102.
- [265] CHAN, T.-L. et al.: *The role of quantum confinement in the formation of Schottky barriers in Pb-Si interfaces*, Solid State Communications **217**, 43–46, 2015 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/j.ssc.2015.05.014.
- [266] CHERKEZ, V. et al.: *Proximity Effect between Two Superconductors Spatially Resolved by Scanning Tunneling Spectroscopy*, Physical Review X **4**, 011033, 2014 (siehe S. 68, 77).
DOI 10.1103/PhysRevX.4.011033.
- [267] CREN, T. et al.: *Ultimate Vortex Confinement Studied by Scanning Tunneling Spectroscopy*, Physical Review Letters **102**, 127005, 2009 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.102.127005.
- [268] CREN, T. et al.: *Vortex Fusion and Giant Vortex States in Confined Superconducting Condensates*, Physical Review Letters **107**, 097202, 2011 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.107.097202.
- [269] CZOSCHKE, P. et al.: *Quantum size effects in the surface energy of Pb/Si(111) film nano-*

- structures studied by surface x-ray diffraction and model calculations*, Physical Review B **72**, 075402, 2005 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.72.075402.
- [270] EOM, D. et al.: *Persistent Superconductivity in Ultrathin Pb Films: A Scanning Tunneling Spectroscopy Study*, Physical Review Letters **96**, 027005, 2006 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.96.027005.
- [271] FENG, R. et al.: *Wetting-layer transformation for Pb nanocrystals grown on Si(111)*, Applied Physics Letters **85**, 3.866–3.868, 2004 (siehe S. 68).
DOI 10.1063/1.1812593.
- [272] FU, Y.-S. et al.: *Manipulating the Kondo Resonance through Quantum Size Effects*, Physical Review Letters **99**, 256601, 2007 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.99.256601.
- [273] GUO, Y. et al.: *Superconductivity Modulated by Quantum Size Effects*, Science **306**, 1.915–1.917, 2004 (siehe S. 68).
DOI 10.1126/science.1105130.
- [274] HE, S. et al.: *Band structure and Fermi surface of atomically uniform lead films*, New Journal of Physics **12**, 113034, 2010 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/1367-2630/12/11/113034.
- [275] HONG, I.-P. et al.: *Decay mechanisms of excited electrons in quantum-well states of ultrathin Pb islands grown on Si(111): Scanning tunneling spectroscopy and theory*, Physical Review B **80**, 081409(R), 2009 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.80.081409.
- [276] HUPALO, M. & TRINGIDES, M. C.: *Correlation between height selection and electronic structure of the uniform height Pb/Si(111) islands*, Physical Review B **65**, 115406, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.65.115406.
- [277] JAŁOCHOWSKI, M. & BAUER, E.: *Quantum size and surface effects in the electrical resistivity and high-energy electron reflectivity of ultrathin lead films*, Physical Review B **38**, 5.272–5.280, 1988 (siehe S. 68, 181).
DOI 10.1103/PhysRevB.38.5272.
- [278] JAŁOCHOWSKI, M., ZDYB, R. & TRINGIDES, M. C.: *Correlations between In Situ Conductivity and Uniform-Height Epitaxial Morphology in Pb/Si(111)-(7×7)*, Physical Review Letters **116**, 086101, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.116.086101.
- [279] JIA, Y. et al. in *Nanophenomena at Surfaces – Fundamentals of Exotic Condensed Matter Properties*, Springer Series in Surface Sciences, Vol. **47**, Ed.: MICHAİLOV, M., Springer Berlin Heidelberg, 2011, Chap. 4: *Quantum Size Effects in the Growth and Properties of Ultrathin Metal Films, Alloys, and Related Low-Dimensional Structures*, 67–112 (siehe S. 68).
DOI 10/d7d2mn.
- [280] KIM, H. et al.: *Electrical Conductivity through a Single Atomic Step Measured with the Proximity-Induced Superconducting Pair Correlation*, Physical Review Letters **117**, 116802, 2016 (siehe S. 68, 75, 77).
DOI 10.1103/PhysRevLett.117.116802.

- [281] KIM, H. et al.: *Electrical Conductivity through a Single Atomic Step Measured with the Proximity-Induced Superconducting Pair Correlation – Supplement*, Physical Review Letters **117**, 116802, 2016 (siehe S. 68, 75).
DOI 10.1103/PhysRevLett.117.116802.
- [282] KIM, H. et al.: *Enhancement and termination of the superconducting proximity effect due to atomic-scale defects visualized by scanning tunneling microscopy*, arXiv, 1401.2602, 2014 (siehe S. 68, 75, 77).
- [283] KIM, H. & HASEGAWA, Y.: *Spatial variation in local work function as an origin of moiré contrast in scanning tunneling microscopy images of Pb thin films/Si(111)*, Japanese Journal of Applied Physics **55**, 08NA03, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.7567/JJAP.55.08NA03.
- [284] KIM, J. et al.: *Anomalous phase relations of quantum size effects in ultrathin Pb films on Si(111)*, Physical Review B **87**, 245432, 2013 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.87.245432.
- [285] KIM, J. et al.: *Visualization of geometric influences on proximity effects in heterogeneous superconductor thin films*, Nature Physics **8**, 464–469, 2012 (siehe S. 68).
DOI 10.1038/nphys2287.
- [286] KIM, J. et al.: *Quantum size effects on the work function of metallic thin film nanostructures*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **107**, 12.761–12.765, 2010 (siehe S. 68).
DOI 10.1073/pnas.0915171107.
- [287] KIRCHMANN, P. S. et al.: *Quasiparticle lifetimes in metallic quantum-well nanostructures*, Nature Physics **6**, 782–785, 2010 (siehe S. 68).
DOI 10.1038/nphys1735.
- [288] KIRCHMANN, P. S. et al.: *Quantum size effects in Pb/Si(111) investigated by laser-induced photoemission*, Physical Review B **76**, 075406, 2007 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.76.075406.
- [289] KIRCHMANN, P. S. & BOVENSIEPEN, U.: *Ultrafast electron dynamics in Pb/Si(111) investigated by two-photon photoemission*, Physical Review B **78**, 035437, 2008 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.78.035437.
- [290] KRATZER, P. & ZAHEDIFAR, M.: *Relaxation of electrons in quantum-confined states in Pb/Si(111) thin films from master equation with first-principles-derived rates*, New Journal of Physics **21**, 123023, 2019 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/1367-2630/ab5c76.
- [291] LIGGES, M. et al.: *Electron-phonon coupling in quantum-well states of the Pb/Si(111) system*, Journal of Physics: Condensed Matter **26**, 352001, 2014 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/0953-8984/26/35/352001.
- [292] LIU, Y. et al.: *Interface-Induced Zeeman-Protected Superconductivity in Ultrathin Crystalline Lead Films*, Physical Review X **8**, 021002, 2018 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevX.8.021002.

- [293] MANS, A. et al.: *Quantum electronic stability and spectroscopy of ultrathin Pb films on Si(111)7 × 7*, Physical Review B **66**, 195410, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.195410.
- [294] MIYATA, N. et al.: *Electronic transport properties of quantum-well states in ultrathin Pb (111) films*, Physical Review B **78**, 245405, 2008 (siehe S. 68, 182).
DOI 10.1103/PhysRevB.78.245405.
- [295] NAM, H. et al.: *Ultrathin two-dimensional superconductivity with strong spin-orbit coupling*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **113**, 10.513-10.517, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.1073/pnas.1611967113.
- [296] NING, Y. X. et al.: *Vortex properties of two-dimensional superconducting Pb films*, Journal of Physics: Condensed Matter **22**, 065701, 2010 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/0953-8984/22/6/065701.
- [297] NISHIO, T. et al.: *Superconducting Pb Island Nanostructures Studied by Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy*, Physical Review Letters **101**, 167001, 2008 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.101.167001.
- [298] OTERO, R. et al.: *Observation of preferred heights in Pb nanoislands: A quantum size effect*, Physical Review B **66**, 115401, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.115401.
- [299] PFENNIGSTORF, O. et al.: *Conduction mechanism in ultrathin metallic films*, Physical Review B **65**, 045412, 2002 (siehe S. 68, 181, 182).
DOI 10.1103/PhysRevB.65.045412.
- [300] PFENNIGSTORF, O. et al.: *Conductivity of ultrathin Pb films during growth on Si(111) at low temperatures*, The European Physical Journal B **30**, 111-115, 2002 (siehe S. 68, 181).
DOI 10.1140/epjb/e2002-00364-9.
- [301] QIN, S. et al.: *Superconductivity at the Two-Dimensional Limit*, Science **324**, 1.314-1.317, 2009 (siehe S. 68).
DOI 10.1126/science.1170775.
- [302] RAFIEE, M. & JALALI ASADABADI, S.: *Quantum size effects in Pb/Si(111) thin films from density functional calculations*, Computational Materials Science **47**, 584-592, 2009 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/j.commatsci.2009.09.027.
- [303] RETTIG, L., KIRCHMANN, P. S. & BOVENSIEPEN, U.: *Ultrafast dynamics of occupied quantum well states in Pb/Si(111)*, New Journal of Physics **14**, 023047, 2012 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/1367-2630/14/2/023047.
- [304] RODITCHEV, D. et al.: *Direct observation of Josephson vortex cores*, Nature Physics **11**, 332-337, 2015 (siehe S. 68).
DOI 10.1038/nphys3240.
- [305] ROLF-PISSARCZYK, S. et al.: *Closing the superconducting gap in small Pb nanoislands with high magnetic fields*, Physical Review B **94**, 224504, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.224504.

- [306] SANDMANN, M.: Dissertation, *Elektron-Phonon Kopplung und impuls aufgelöste elektronische Eigenschaften des Pb/Si(111) Hybridsystems*, Universität Duisburg-Essen, 2015 (siehe S. 68).
- [307] SERRIER-GARCIA, L. et al.: *Scanning Tunneling Spectroscopy Study of the Proximity Effect in a Disordered Two-Dimensional Metal*, Physical Review Letters **110**, 157003, 2013 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.110.157003.
- [308] SKLYADNEVA, I. Y. et al.: *Mass enhancement parameter in free-standing ultrathin Pb(111) films: The effect of spin-orbit coupling*, Physical Review B **87**, 085440, 2013 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.87.085440.
- [309] SCHNEIDER, P.: Diplomarbeit, *Zeitaufgelöste Elektronenbeugung an Pb und In Adsorbatlagen auf Si(111)*, Universität Duisburg-Essen, 2008 (siehe S. 68, 77).
- [310] SLOMSKI, B. et al.: *Controlling the effective mass of quantum well states in Pb/Si(111) by interface engineering*, Physical Review B **83**, 035409, 2011 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.83.035409.
- [311] SOUTO-CASARE, J. et al.: *Structural evolution of the Pb/Si(111) interface with metal overlayer thickness*, Physical Review B **92**, 094103, 2015 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.92.094103.
- [312] SPÄTH, T., POPP, M. & HOFFMANN-VOGEL, R.: *Film Thickness of Pb Islands on the Si(111) Surface*, Physical Review Letters **124**, 016101, 2020 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.124.016101.
- [313] SU, W. B. et al.: *Correlation between Quantized Electronic States and Oscillatory Thickness Relaxations of 2D Pb Islands on Si(111)-(7 × 7) Surfaces*, Physical Review Letters **86**, 5.116–5.119, 2001 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.86.5116.
- [314] SU, W. B. et al.: *Correlation between morphological transition and preferred thickness of Pb and Ag islands on Si(111)7 × 7*, Physical Review B **71**, 073304, 2005 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.71.073304.
- [315] SU, W. B., CHANG, C. S. & TSONG, T. T.: *Quantum size effect on ultra-thin metallic films*, Journal of Physics D: Applied Physics **43**, 013001, 2010 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/0022-3727/43/1/013001.
- [316] UPTON, M. H., MILLER, T. & CHIANG, T.-C.: *Unusual band dispersion in Pb films on Si(111)*, Physical Review B **71**, 033403, 2005 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.71.033403.
- [317] VALENTINIS, D., VAN DER MAREL, D. & BERTHOD, C.: *Rise and fall of shape resonances in thin films of BCS superconductors*, Physical Review B **94**, 054516, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.054516.
- [318] VILFAN, I. et al.: *Anomalous thickness dependence of the Hall effect in ultrathin Pb layers on Si(111)*, Physical Review B **66**, 241306, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.241306.

- [319] WEI, C. M. & CHOU, M. Y.: *Theory of quantum size effects in thin Pb(111) films*, Physical Review B **66**, 233408, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.233408.
- [320] WITTE, T. et al.: *Nanoscale interfacial heat transport of ultrathin epitaxial hetero films: Few monolayer Pb(111) on Si(111)*, Applied Physics Letters **110**, 243103, 2017 (siehe S. 68).
DOI 10.1063/1.4986509.
- [321] WITTE, T.: Masterarbeit, *Ultraschnelle zeitaufgelöste Elektronenbeugung: Elektron-Phonon-Kopplung in ultradünnen Bleischichten*, Universität Duisburg-Essen, 2015 (siehe S. 68).
- [322] ZAHEDIFAR, M. & KRATZER, P.: *Coupling of quantum well states and phonons in thin multi-layer Pb films on Si(111)*, Physical Review B **96**, 115442, 2017 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.96.115442.
- [323] ZHANG, Y.-F. et al.: *Band Structure and Oscillatory Electron-Phonon Coupling of Pb Thin Films Determined by Atomic-Layer-Resolved Quantum-Well States*, Physical Review Letters **95**, 096802, 2005 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.95.096802.
- [324] ZHAO, W. et al.: *Evidence for Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition in atomically flat two-dimensional Pb superconducting films*, Solid State Communications **165**, 59–63, 2013 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/j.ssc.2013.04.025.
- [325] ZUBIZARRETA, X. et al.: *Quantum-size effects in the loss function of Pb(111) thin films: an ab initio study*, Physical Review B **95**, 235405, 2017 (siehe S. 68, 143).
DOI 10.1103/PhysRevB.95.235405.
- [326] HUPALO, M. & TRINGIDES, M. C.: *Ultrafast kinetics in Pb/Si(111) from the collective spreading of the wetting layer*, Physical Review B **75**, 235443, 2007 (siehe S. 68, 100).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.235443.
- [327] TRINGIDES, M. C. et al. in *Nanophenomena at Surfaces – Fundamentals of Exotic Condensed Matter Properties*, Springer Series in Surface Sciences, Vol. **47**, Ed.: MICHAÏLOV, M., Springer Berlin Heidelberg, 2011, Chap. 3: *Wetting Layer Super-Diffusive Motion and QSE Growth in Pb/Si*, 39–65 (siehe S. 68, 100).
DOI 10/bxh6km.
- [328] TRINGIDES, M. C., HUPALO, M. & YAKES, M.: *Novel diffusion pathways in low temperature self-organization of nanostructures*, Physica A **357**, 216–249, 2005 (siehe S. 68, 72, 78–80, 100, 103, 167, 169, 177).
DOI 10.1016/j.physa.2005.06.028.
- [329] HATTAB, H. et al.: *A combined STM and SPA-LEED study of the “explosive” nucleation and collective diffusion in Pb/Si(111)*, Surface Science **646**, 50–55, 2016 (siehe S. 68, 100).
DOI 10.1016/j.susc.2015.08.017.
- [330] MAN, K. L. et al.: *Anomalous Mass Transport in the Pb Wetting Layer on the Si(111) Surface*, Physical Review Letters **101**, 226102, 2008 (siehe S. 68, 100).
DOI 10.1103/PhysRevLett.101.226102.

- [331] MAN, K. L. et al.: *Superdiffusive Motion of the Pb Wetting Layer on the Si(111) Surface*, Physical Review Letters **110**, 036104, 2013 (siehe S. 68, 73, 80, 81, 98, 100, 103).
DOI 10.1103/PhysRevLett.110.036104.
- [332] HERSHBERGER, M. T. et al.: *Nonclassical “Explosive” Nucleation in Pb/Si(111) at Low Temperatures*, Physical Review Letters **113**, 236101, 2014 (siehe S. 68, 100).
DOI 10.1103/PhysRevLett.113.236101.
- [333] GRANATO, E. et al.: *Mass transport of adsorbates near a discontinuous structural phase transition*, Physical Review B **94**, 235412, 2016 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.235412.
- [334] EVANS, P. G. et al.: *Low-temperature homoepitaxial growth on Si(111) through a Pb monolayer*, Applied Physics Letters **73**, 3.120–3.122, 1998 (siehe S. 68, 71, 82).
DOI 10.1063/1.122660.
- [335] WEI, L.-C. & SU, C.-s.: *Low-temperature homoepitaxial growth on high-miscut Si(111) mediated by thin overlayers of Pb*, Applied Physics Letters **75**, 2.954–2.956, 1999 (siehe S. 68).
DOI 10.1063/1.125199.
- [336] DUBON, O. D. et al.: *Doping by metal-mediated epitaxy: Growth of As delta-doped Si through a Pb monolayer*, Applied Physics Letters **78**, 1.505–1.507, 2001 (siehe S. 68).
DOI 10.1063/1.1352692.
- [337] ZHAO, H., TEAR, S. P. & JONES, A. H.: *LEED I(V) study of the Si/Pb/Si(111) system*, Surface Science **307–309**, 645–649, 1994 (siehe S. 68, 82).
DOI 10.1016/0039-6028(94)91470-2.
- [338] CHANG, T.-C. et al.: *Nucleation and growth of Si on Pb monolayer covered Si(111) surfaces*, Surface Science **605**, 1.249–1.256, 2011 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/j.susc.2011.04.010.
- [339] KUMAR, R. et al.: *Adsorption and dynamics of Si atoms at the monolayer Pb/Si(111) surface*, Physical Review B **95**, 245311, 2017 (siehe S. 68, 71, 72).
DOI 10.1103/PhysRevB.95.245311.
- [340] KUMAR, R. et al.: *Adsorption and dynamics of Si atoms at the monolayer Pb/Si(111) surface – Supplement*, Physical Review B **95**, 245311, 2017 (siehe S. 68, 71, 72).
DOI 10.1103/PhysRevB.95.245311.
- [341] LEE, Y.-H. et al.: *Nucleation and Growth Mechanism of a Covalent Material: Magic Clusters and Chemical Reactions*, arXiv, 1501.03934, 2015 (siehe S. 68, 72, 82).
- [342] HWANG, I.-S., CHANG, T.-C. & TSONG, T. T.: *Exchange-Barrier Effects on Nucleation and Growth of Surfactant-Mediated Epitaxy*, Physical Review Letters **80**, 4.229–4.232, 1998 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevLett.80.4229.
- [343] BEBEN, J. et al.: *Model for surfactant-mediated growth of Ge on Pb-covered Si(111) surfaces*, Physical Review B **63**, 033304, 2000 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.63.033304.

- [344] BEBEN, J., HWANG, I.-S. & TSONG, T. T.: *Analysis of island morphology in a model for Pb-mediated growth of Ge on Si(111)*, Physical Review B **64**, 235328, 2001 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.64.235328.
- [345] HWANG, I.-S., CHANG, T.-C. & TSONG, T. T.: *Growth mechanism and morphology of Ge on Pb covered Si(111) surfaces*, Surface Science **410**, L741–L747, 1998 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/S0039-6028(98)00323-9.
- [346] HWANG, I.-S., CHANG, T.-C. & TSONG, T. T.: *Nucleation and Growth of Ge at Pb/Si(111) Surfaces: Reaction-Limited Aggregation*, Japanese Journal of Applied Physics **39**, 4.100–4.109, 2000 (siehe S. 68).
DOI 10.1143/JJAP.39.4100.
- [347] BEBEN, J., HWANG, I.-S. & TSONG, T. T.: *Morphology of ramified islands in growth of Ge on Si(111) using Pb as surfactant*, Surface Science **507–510**, 281–284, 2002 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/S0039-6028(02)01398-5.
- [348] BEBEN, J. et al.: *Mean-field approach to Pb-mediated growth of Ge on Si(111): Comparison with experiment and kinetic Monte Carlo simulations*, Physical Review B **75**, 045410, 2007 (siehe S. 68).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.045410.
- [349] STĘPNIAK-DYBALA, A., JAŁOCHOWSKI, M. & KRAWIEC, M.: *Silicene Nanoribbons on Pb-Reconstructed Si(111) Surface*, Condensed Matter **1**, 8, 2016 (siehe S. 68, 73, 75, 77, 98, 100, 103).
DOI 10.3390/condmat1010008.
- [350] MATETSKIY, A. V. et al.: *Structural transformations in Pb/Si(111) phases induced by C₆₀ adsorption*, Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 395006, 2013 (siehe S. 68, 80).
DOI 10.1088/0953-8984/25/39/395006.
- [351] WANG, L.-L. et al.: *C₆₀-induced Devil's Staircase transformation on a Pb/Si(111) wetting layer*, Physical Review B **92**, 245405, 2015 (siehe S. 68, 80).
DOI 10.1103/PhysRevB.92.245405.
- [352] NICOARA, N., MÉNDEZ, J. & GÓMEZ-RODRÍGUEZ, J. M.: *Growth of ordered molecular layers of PTCDA on Pb/Si(111) surfaces: a scanning tunneling microscopy study*, Nanotechnology **27**, 365706, 2016 (siehe S. 68, 70, 81, 82).
DOI 10.1088/0957-4484/27/36/365706.
- [353] YAGUCHI, H., BABA, S. & KINBARA, A.: *RHEED study of superstructures of submonolayer lead films on silicon (111) surfaces*, Applied Surface Science **33–34**, 75–80, 1988 (siehe S. 68, 71, 74, 81).
DOI 10.1016/0169-4332(88)90290-5.
- [354] ESTRUP, P. J. & MORRISON, J.: *Studies of monolayers of lead and tin on Si(111) surfaces*, Surface Science **2**, 465–472, 1964 (siehe S. 68, 69, 71).
DOI 10.1016/0039-6028(64)90088-3.
- [355] ROESLER, J. M. et al.: *Photoelectron holography of Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° - β* , Surface Science **329**, L588–L592, 1995 (siehe S. 68).
DOI 10.1016/0039-6028(95)00232-4.

- [356] HORIKOSHI, K. et al.: *Structural phase transitions of Pb-adsorbed Si(111) surfaces at low temperatures*, Physical Review B **60**, 13.287–13.290, 1999 (siehe S. 68, 69, 73, 77, 81, 82, 143). DOI 10.1103/PhysRevB.60.13287.
- [357] CUSTANCE, O. et al.: *STM study of dynamical effects on submonolayer phases of Pb/Si(111)*, Surface Science **482–485**, 878–885, 2001 (siehe S. 68, 82). DOI 10.1016/S0039-6028(01)00776-2.
- [358] CUSTANCE, O. et al.: *Low temperature phases of Pb/Si(111)*, Surface Science **482–485**, 1399–1405, 2001 (siehe S. 68, 69, 72, 82). DOI 10.1016/S0039-6028(01)00774-9.
- [359] SAITOH, M. et al.: *Low energy ion scattering study of adsorption and desorption processes of Pb on Si(111) surfaces*, Surface Science **154**, 394–416, 1985 (siehe S. 68, 74, 82). DOI 10.1016/0039-6028(85)90041-X.
- [360] LE LAY, G. et al.: *Surface Spectroscopy Studies of Pb Monolayers on Si(111)*, Surface Science **204**, 57–68, 1988 (siehe S. 68, 71, 82). DOI 10.1016/0039-6028(88)90268-3.
- [361] TONG, X., HORIKOSHI, K. & HASEGAWA, S.: *Structure and electrical conductance of Pb-covered Si(111) surfaces*, Physical Review B **60**, 5.653–5.658, 1999 (siehe S. 68, 69, 77, 81, 82). DOI 10.1103/PhysRevB.60.5653.
- [362] PETKOVA, A. D. et al.: *Formation of an intermediate 3×3 phase from Pb on Si(111) at high temperature*, Journal of Physics: Condensed Matter **11**, 9.925–9.932, 1999 (siehe S. 68–70, 95). DOI 10.1088/0953-8984/11/49/310.
- [363] XIONG, F. et al.: *In situ RBS and channeling study of molecular beam epitaxial growth of metals and semiconductors on semiconductors*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B **56/57**, 780–784, 1991 (siehe S. 68, 69, 71). DOI 10.1016/0168-583X(91)95026-A.
- [364] HWANG, I.-S. et al.: *Hydrogen-Adsorption Induced Atomic Rearrangement of a Pb Monolayer on Si(111)*, Physical Review Letters **94**, 045505, 2005 (siehe S. 68, 71, 82). DOI 10.1103/PhysRevLett.94.045505.
- [365] MÖLLENBECK, S.: Dissertation, *Ultraschnelle zeitaufgelöste Elektronenbeugung an Adsorbatsystemen auf Siliziumoberflächen: Vibrationsanregung in Monolagen und Dynamik von Phasenübergängen*, Universität Duisburg-Essen, 2011 (siehe S. 68, 73, 77).
- [366] SEIFERT, C.: Diplomarbeit, *STM-Untersuchungen Blei-induzierter Rekonstruktionen auf Si(111)*, Universität Hannover, 1999 (siehe S. 68, 70, 75, 81, 82).
- [367] OWCZAREK, S. & MARKOWSKI, L.: *The role of surfactant in two-components structures formation on Si(111)*, Surface Science **693**, 121552, 2020 (siehe S. 68, 77). DOI 10.1016/j.susc.2019.121552.
- [368] LU, S.-M. et al.: *Scanning Tunneling Spectroscopy Observation of Electronic Resonances Ori-*

- ginating from 1×1 Potential on the Dense Pb Overlayer on Si(111)*, Japanese Journal of Applied Physics **51**, 015702, 2012 (siehe S. 68, 73, 77, 98, 100).
DOI 10.1143/JJAP.51.015702.
- [369] DUDR, V. et al.: *Evidence for valence-charge fluctuation in the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb/Si(111) system*, Physical Review B **70**, 155334, 2004 (siehe S. 68, 71, 97).
DOI 10.1103/PhysRevB.70.155334.
- [370] ŠVEC, M. et al.: *Intra-atomic charge re-organization at the Pb-Si interface: Bonding mechanism at low coverage*, Surface Science **603**, 2.861–2.869, 2009 (siehe S. 68, 69, 71, 97).
DOI 10.1016/j.susc.2009.07.033.
- [371] DUDR, V. et al.: *Photoemission study of two dimensional phase transitions on the Pb/Si(111) surface*, Surface Science **566–568**, 804–809, 2004 (siehe S. 68, 71).
DOI 10.1016/j.susc.2004.06.014.
- [372] CUDAZZO, P., PROFETA, G. & CONTINENZA, A.: *Low temperature phases of Pb/Si(111) and related surfaces*, Surface Science **602**, 747–754, 2008 (siehe S. 68–74, 97).
DOI 10.1016/j.susc.2007.12.001.
- [373] HANSMANN, P. et al.: *What about U on surfaces? Extended Hubbard models for adatom systems from first principles*, Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 094005, 2013 (siehe S. 68).
DOI 10.1088/0953-8984/25/9/094005.
- [374] HANSMANN, P. et al.: *Long-Range Coulomb Interactions in Surface Systems: A First-Principles Description within Self-Consistently Combined GW and Dynamical Mean-Field Theory*, Physical Review Letters **110**, 166401, 2013 (siehe S. 68, 69, 97, 219).
DOI 10.1103/PhysRevLett.110.166401.
- [375] TRESKA, C. et al.: *Chiral Spin Texture in the Charge-Density-Wave Phase of the Correlated Metallic Pb/Si(111) Monolayer – Supplement*, Physical Review Letters **120**, 196402, 202018 (siehe S. 68, 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.120.196402.
- [376] TRESKA, C. et al.: *Chiral Spin Texture in the Charge-Density-Wave Phase of the Correlated Metallic Pb/Si(111) Monolayer*, Physical Review Letters **120**, 196402, 202018 (siehe S. 68, 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.120.196402.
- [377] BRIHUEGA, I. et al.: *Intrinsic Character of the (3×3) to $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ Phase Transition in Pb/Si(111)*, Physical Review Letters **94**, 046101, 2005 (siehe S. 69, 97).
DOI 10.1103/PhysRevLett.94.046101.
- [378] BRIHUEGA, I. et al.: *Defects in the $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) \Leftrightarrow (3 \times 3)$ phase transition in the Pb/Si(111) system*, Physical Review B **75**, 155411, 2007 (siehe S. 69, 97).
DOI 10.1103/PhysRevLett.75.155411.
- [379] ADLER, F. et al.: *Correlation-driven charge order in a frustrated two-dimensional atom lattice*, arXiv, 1802.00219v2, 2018 (siehe S. 69).
- [380] MASCARAQUE, A. et al.: *Fermi surface and electronic structure of Pb/Ge(111)*, Physical Review B **57**, 14.758–14.765, 1998 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevB.57.14758.

- [381] MASCARAQUE, A. et al.: *Band structure and gap opening in Pb/Ge(111)*, Surface Science **402–404**, 742–745, 1998 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/S0039-6028(97)01003-0.
- [382] MASCARAQUE, A. et al.: *Electronic band structure of Ge(111)(3 × 3)-Pb*, Surface Science **433–435**, 337–341, 1999 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/S0039-6028(97)01003-07.
- [383] AVILA, J. et al.: *Fermi surface of a triangular lattice overlayer: Pb/Ge(111) α-phase*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **101–103**, 361–365, 1999 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/0368-2048(98)00388-0.
- [384] FUKAYA, Y. et al.: *Surface structure and phase transition of Ge(111)-3 × 3-Pb studied by reflection high-energy positron diffraction*, Applied Surface Science **254**, 7.827–7.830, 2008 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/j.apsusc.2008.02.093.
- [385] GUO, J., SHI, J. & PLUMMER, E. W.: *Low Temperature Disordered Phase of α-Pb/Ge(111)*, Physical Review Letters **94**, 036105, 2005 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.94.036105.
- [386] MELECHKO, A. V. et al.: *Role of defects in two-dimensional phase transitions: An STM study of the Sn/Ge(111) system*, Physical Review B **61**, 2.235–2.245, 2000 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevB.61.2235.
- [387] YI, I. et al.: *Non-contact AFM observation of the ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) to (3 × 3) phase transition on Sn/Ge(111) and Sn/Si(111) surfaces*, Applied Surface Science **253**, 3.072–3.076, 2007 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/j.apsusc.2006.06.061.
- [388] MELECHKO, A. V. et al.: *Two-Dimensional Phase Transition Mediated by Extrinsic Defects*, Physical Review Letters **83**, 999–1.002, 1999 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.83.999.
- [389] LE LAY, G. et al.: *Surface charge density waves at Sn/Ge(111)?*, Applied Surface Science **123/124**, 440–444, 1998 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/S0169-4332(97)00470-4.
- [390] CORTÉS, R. et al.: *Observation of a Mott Insulating Ground State for Sn/Ge(111) at Low Temperature*, Physical Review Letters **96**, 126103, 2006 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.96.126103.
- [391] CHAN, T.-L. et al.: *First-principles studies of structures and stabilities of Pb/Si(111)*, Physical Review B **68**, 045410, 2003 (siehe S. 70–73, 75, 82, 98, 100, 103).
DOI 10.1103/PhysRevB.68.045410.
- [392] BADRTDINOV, D. I. et al.: *Spin-orbit coupling and magnetic interactions in Si(111):{C,Si,Sn,Pb}*, Physical Review B **94**, 224418, 2016 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.224418.
- [393] RESSEL, B. et al.: *Scanning tunneling spectroscopy investigation of the ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° Sn/Si(111) α and γ surfaces*, Surface Science **562**, 128–136, 2004 (siehe S. 69, 71).
DOI 10.1016/j.susc.2004.05.121.

- [394] OTTAVIANO, L. et al.: *STM investigation of the α -Sn/Si(111) phase at 120 K*, Surface Science **445**, L41–L46, 2000 (siehe S. 69).
DOI 10.1016/S0039-6028(99)00974-7.
- [395] PROFETA, G. & TOSATTI, E.: *Triangular Mott-Hubbard Insulator Phase of Sn/Si(111) and Sn/Ge(111) Surfaces*, Physical Review Letters **98**, 086401, 2007 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.98.086401.
- [396] MODESTI, S. et al.: *Insulating Ground State of Sn/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°*, Physical Review Letters **98**, 126401, 2007 (siehe S. 69).
DOI 10.1103/PhysRevLett.98.126401.
- [397] LI, G. et al.: *Magnetic order in a frustrated two-dimensional atom lattice at a semiconductor surface*, Nature Communications **4**, 1620, 2013 (siehe S. 69).
DOI 10.1038/ncomms2617.
- [398] GÓMEZ-RODRÍGUEZ, J. M., VEUILLEN, J.-Y. & CINTI, R. C.: *Scanning tunneling microscopy study of the Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Pb mosaic phase*, Surface Science **377–379**, 45–49, 1997 (siehe S. 70, 71, 97).
DOI 10.1016/S0039-6028(97)01325-3.
- [399] GANZ, E. et al.: *Submonolayer phases of Pb on Si(111)*, Physical Review B **43**, 7.316–7.319, 1991 (siehe S. 70, 71).
DOI 10.1103/PhysRevB.43.7316.
- [400] GANZ, E. et al.: *Growth and morphology of Pb on Si(111)*, Surface Science **257**, 259–273, 1991 (siehe S. 70, 71, 75, 82, 98).
DOI 10.1016/0039-6028(91)90797-V.
- [401] LIFSHITS, V. G., SARANIN, A. A. & ZOTOV, A. V.: *Surface Phases on Silicon – Preparation, Structures, and Properties*, 1994, Wiley-VCH (siehe S. 70, 71, 82, 100, 143).
- [402] HIBINO, H. & OGINO, T.: *Exchanges between Si and Pb adatoms on Si(111)*, Surface Science **328**, L547–L552, 1995 (siehe S. 70).
DOI 10.1016/0039-6028(95)00231-6.
- [403] ŠVEC, M. et al.: *Local atomic and electronic structure of the Pb/Si(111) mosaic phase: STM and ab initio study*, Physical Review B **77**, 125104, 2008 (siehe S. 70, 71, 97).
DOI 10.1103/PhysRevB.77.125104.
- [404] KOCÁN, P., SOBOTÍK, P. & OŠT’ÁDAL, I.: *Desorption-induced structural changes of metal/Si(111) surfaces: Kinetic Monte Carlo simulations*, Physical Review E **88**, 022403, 2013 (siehe S. 71).
DOI 10.1103/PhysRevE.88.022403.
- [405] KARLSSON, C. J. et al.: *Photoemission study of the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb mosaic phase: Observation of a large charge transfer*, Physical Review B **45**, 6.321–6.324, 1992 (siehe S. 71).
DOI 10.1103/PhysRevB.45.6321.
- [406] CRICENTI, A., GOTHELID, M. & LE LAY, G.: *Optical transitions at the Si(111)-Pb($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) mosaic phase*, Surface Science **382**, 182–186, 1997 (siehe S. 71).
DOI 10.1016/S0039-6028(97)00130-1.

- [407] WEITERING, H. H., HESLINGA, D. R. & HIBMA, T.: *Structure and growth of epitaxial Pb on Si(111)*, Physical Review B **45**, 5.991–6.002, 1995 (siehe S. 71, 100).
DOI 10.1103/PhysRevB.45.5991.
- [408] WEITERING, H. H. et al.: *Interface structure and Schottky barriers at epitaxial Si(111)/Pb interfaces*, Surface Science **251/252**, 616–620, 1991 (siehe S. 71, 100).
DOI 10.1016/0039-6028(91)91066-7.
- [409] HWANG, I.-S. et al.: *High coverage phases of Pb on the Si(111) surface: structures and phase transitions*, Surface Science **323**, 241–257, 1995 (siehe S. 71, 100).
DOI 10.1016/0039-6028(94)00613-X.
- [410] JÄGER, M.: Masterarbeit, *Rastertunnelmikroskopie an niedrigdimensionalen Bleistrukturen auf Halbleiteroberflächen*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2015 (siehe S. 71, 73, 89, 92, 98, 100, 185, 199).
- [411] SLEZÁK, J., MUTOMBO, P. & CHÁB, V.: *STM study of a Pb/Si(111) interface at room and low temperature*, Physical Review B **60**, 13.328–13.330, 1999 (siehe S. 71, 72, 82).
DOI 10.1103/PhysRevB.60.13328.
- [412] SLEZÁK, J., MUTOMBO, P. & CHÁB, V.: *Temperature study of phase coexistence in the system Pb on an Si(111) surface*, Surface Science **454–456**, 584–590, 2000 (siehe S. 71, 82, 105).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)00273-9.
- [413] HWANG, I.-S. et al.: *Soft incommensurate reconstruction on Pb/Si(111): Structure, stress modulation, and phase transition*, Physical Review B **51**, 10.193–10.196, 1995 (siehe S. 71).
DOI 10.1103/PhysRevB.51.10193.
- [414] KUMPF, C. et al.: *Structural study of the commensurate-incommensurate low-temperature phase transition of Pb on Si(111)*, Surface Science **448**, L213–L219, 2000 (siehe S. 71–74).
DOI 10.1016/S0039-6028(99)01224-8.
- [415] HWANG, I.-S. et al.: *Observation of Finite-Size Effects on a Structural Phase Transition of 2D Nanoislands*, Physical Review Letters **93**, 106101, 2004 (siehe S. 72, 82).
DOI 10.1103/PhysRevLett.93.106101.
- [416] HWANG, I.-S., FANG, C.-K. & CHANG, S.-H.: *Effects of boundaries and point defects on energetics and dynamics of domain walls*, Physical Review B **83**, 134119, 2011 (siehe S. 72).
DOI 10.1103/PhysRevB.83.134119.
- [417] ŠVEC, M., CHÁB, V. & TRINGIDES, M. C.: *Resolving the coverage puzzle of the Pb/Si(111)- $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ phase*, Journal of Applied Physics **106**, 053501, 2009 (siehe S. 72, 78–82, 103).
DOI 10.1063/1.3197033.
- [418] BROCHARD, S. et al.: *Ab initio calculations and scanning tunneling microscopy experiments of the Si(111)-($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Pb surface*, Physical Review B **66**, 205403, 2002 (siehe S. 72–74, 98, 100).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.205403.
- [419] HALLAND, B. W. & WOODRUFF, D. P.: *Missing spots in low energy electron diffraction*, Surface Science **36**, 488–493, 1973 (siehe S. 73, 98, 105).
DOI 10.1016/0039-6028(73)90397-X.

- [420] KUMPF, C. et al.: *Covalent-bond stabilization of the Si(111)- $\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ -Pb*, Surface Science **486**, L495–L501, 2001 (siehe S. 73).
DOI 10.1016/S0039-6028(01)01092-5.
- [421] KIM, K. S. & YEOM, H. W.: *Radial Band Structure of Electrons in Liquid Metals*, Physical Review Letters **107**, 136402, 2011 (siehe S. 73, 82, 83, 98, 105, 143, 148, 150, 152, 159, 219).
DOI 10.1103/PhysRevLett.107.136402.
- [422] KIM, K. S. & YEOM, H. W.: *Radial Band Structure of Electrons in Liquid Metals – Supplement*, Physical Review Letters **107**, 136402, 2011 (siehe S. 73, 82, 83, 98, 143, 150, 156, 158, 159, 165, 219).
DOI 10.1103/PhysRevLett.107.136402.
- [423] CHAN, W.-Y. et al.: *Energy spacing between electronic resonances: A physical quantity correlating to diverse phases of the dense Pb overlayers on Si(111)*, Journal of Vacuum Science & Technology B **32**, 011801, 2014 (siehe S. 73, 77, 78, 80–82, 98, 100, 103).
DOI 10.1116/1.4832336.
- [424] KIM, K. S. et al.: *Nearly Massless Electrons in the Silicon Interface with a Metal Film – Supplement*, Physical Review Letters **104**, 246803, 2010 (siehe S. 73, 98, 150, 158, 159, 165, 167, 177).
DOI 10.1103/PhysRevLett.104.246803.
- [425] YEH, V. et al.: *Low temperature formation of numerous phases in Pb/Si(111)*, Surface Science **562**, L238–L244, 2004 (siehe S. 73, 78–80, 98, 100, 103).
DOI 10.1016/j.susc.2004.05.133.
- [426] LONGO, D. et al.: *Surface Phase Nucleation of Lead Monoatomic Layers on Si(111) Induced by Manganese Phthalocyanine Molecules*, The Journal of Physical Chemistry C **124**, 19.829–19.840, 2020 (siehe S. 73, 75).
DOI 10.1021/acs.jpcc.0c05278.
- [427] EILERS, S., DU, Y. & DOU, S. X.: *Pb Thin Films on Si(111): Local Density of States and Defects*, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology, 54–56, 2014 (siehe S. 73, 75, 77, 82, 98, 100, 103).
DOI 10.1109/ICONN.2014.6965260.
- [428] BRUN, C. et al.: *Remarkable effects of disorder on superconductivity of single atomic layers of lead on silicon – Supplement*, Nature Physics **10**, 444–450, 2014 (siehe S. 73, 74, 77, 98, 100).
DOI 10.1038/nphys2937.
- [429] ZHANG, T. et al.: *Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on Si(111) – Supplement*, Nature Physics **6**, 104–108, 2010 (siehe S. 73–75, 77, 98, 100, 103).
DOI 10.1038/nphys1499.
- [430] CHOI, W. H., KIM, K. S. & YEOM, H. W.: *High-resolution core-level photoemission study of dense Pb overlayers on Si(111)*, Physical Review B **78**, 195425, 2008 (siehe S. 74, 77, 81).
DOI 10.1103/PhysRevB.78.195425.
- [431] OWCZAREK, S. et al.: *Characterization of (In,Pb)/Si(111): Tuning normal and lateral atom distributions in mixed metal systems*, Journal of Alloys and Compounds **819**, 153030, 2020 (siehe S. 74, 77).
DOI <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.153030>.

- [432] BRUN, C., CREN, T. & RODITCHEV, D.: *Review of 2D superconductivity: the ultimate case of epitaxial monolayers*, Superconductor Science and Technology **30**, 013003, 2017 (siehe S. 74, 75, 77, 98, 103, 135, 139–141, 218).
DOI 10.1088/0953-2048/30/1/013003.
- [433] MÉNARD, G. C. et al.: *Yu-Shiba-Rusinov bound states versus topological edge states in Pb/Si(111)*, The European Physical Journal Special Topics **227**, 2.303–2.313, 2019 (siehe S. 74, 77).
DOI 10.1140/epjst/e2018-800056-3.
- [434] SKLYADNEVA, I. Y. et al.: *Electron-phonon coupling and superconductivity in the (4/3)-monolayer of Pb on Si(111): Role of spin-orbit interaction*, Physical Review B **97**, 195409, 2018 (siehe S. 74, 77, 107).
DOI 10.1103/PhysRevB.97.195409.
- [435] SEEHOFER, L. et al.: *Structural study of the close-packed two-dimensional phases of Pb on Ge(111) and Si(111)*, Physical Review B **51**, 13.503–13.515, 1995 (siehe S. 75–77, 81, 82, 98, 103, 105, 145).
DOI 10.1103/PhysRevB.51.13503.
- [436] PETKOVA, A. D. et al.: *Formation and commensurate analysis of “incommensurate” superstructures of Pb on Si(111)*, Surface Science **471**, 11–20, 2001 (siehe S. 75, 76, 81, 98).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)00910-9.
- [437] SPEISER, E. et al.: *Surface vibrations in the T_4 and H_3 Pb phases on Si(111)*, Physical Review B **98**, 195427, 2018 (siehe S. 75).
DOI 10.1103/PhysRevB.98.195427.
- [438] LI, W.-J. et al.: *Growth and stability of ultra-thin Pb films on Pb/Si(111)- α - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$* , Surface Review and Letters **18**, 77–82, 2011 (siehe S. 75, 98, 103).
DOI 10.1142/S0218625X11014473.
- [439] SEEHOFER, L. et al.: *STM study of the incommensurate structures of Pb on Ge(111) and Si(111) surfaces*, Surface Science **307–309**, 698–703, 1994 (siehe S. 75, 77, 98, 103).
DOI 10.1016/0039-6028(94)91479-6.
- [440] MÉNARD, G. C. et al.: *Two-dimensional topological superconductivity in Pb/Co/Si(111) – Supplement*, Nature Communications **8**, 2040, 2017 (siehe S. 75, 77).
DOI 10.1038/s41467-017-02192-x.
- [441] HUPALO, M. et al.: *Atomic models, domain-wall arrangement, and electronic structure of the dense Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) phase*, Physical Review B **66**, 161410(R), 2002 (siehe S. 76, 78, 80, 81, 103).
DOI 10.1103/PhysRevB.66.161410.
- [442] OHTSUBO, Y. et al.: *Structure determination of Pb/Ge(111)- β -($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ by dynamical low-energy electron diffraction analysis and first-principles calculation*, Journal of Physics: Condensed Matter **23**, 435001, 2011 (siehe S. 77, 145).
DOI 10.1088/0953-8984/23/43/435001.
- [443] KIM, H., MIYATA, Y. & HASEGAWA, Y.: *Superconducting proximity effect on a Rashba-split*

- Pb/Ge(111)- $\beta\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ surface*, Superconductor Science and Technology **29**, 084006, 2016 (siehe S. 77).
DOI 10.1088/0953-2048/29/8/084006.
- [444] SEEHOFER, L., FALKENBERG, G. & JOHNSON, R. L.: *STM study of the structure and phases of Pb on Ge(111)*, Surface Science **290**, 15–25, 1993 (siehe S. 77).
DOI 10.1016/0039-6028(93)90584-7.
- [445] SEEHOFER, L. et al.: *Reconstructions formed by Pb on Ge(111) surfaces reexamined by STM*, Surface Science **314**, L879–L883, 1994 (siehe S. 77, 145).
DOI 10.1016/0039-6028(94)90221-6.
- [446] STĘPNIAK, A. et al.: *Atomic layer superconductivity*, Surface and Interface Analysis **46**, 1.262–1.267, 2014 (siehe S. 77).
DOI 10.1002/sia.5516.
- [447] HUANG, G. Q.: *Surface lattice vibration and electron-phonon interaction in Pb(111) ultrathin superconducting films from first principles: both with and without Si substrate*, New Journal of Physics **13**, 093023, 2011 (siehe S. 77).
DOI 10.1088/1367-2630/13/9/093023.
- [448] LINSCHIED, A., SANNA, A. & GROSS, E. K. U.: *Ab initio calculation of a Pb single layer on a Si substrate: two-dimensionality and superconductivity*, arXiv, 1503.00977, 2015 (siehe S. 77, 107).
- [449] SKLYADNEVA, I. Y. et al.: *Phonon-induced linewidth of quantum-well states in monolayer Pb on Si(111)*, Surface Science **678**, 86–90, 2018 (siehe S. 77, 107).
DOI 10.1016/j.susc.2018.01.012.
- [450] SKLYADNEVA, I. Y. et al.: *Electron-Phonon Interaction in the 4/3-Monolayer of Pb on Si(111): Theory Versus He-Atom Scattering Experiments*, The Journal of Physical Chemistry C **122**, 29.039–29.043, 2018 (siehe S. 77).
DOI 10.1021/acs.jpcc.8b10081.
- [451] HANISCH-BLICHARSKI, A. et al.: *Ultra-fast electron diffraction at surfaces: From nanoscale heat transport to driven phase transitions*, Ultramicroscopy **127**, 2–8, 2013 (siehe S. 77).
DOI 10.1016/j.ultramic.2012.07.017.
- [452] MÉNARD, G. C. et al.: *Isolated pairs of Majorana zero modes in a disordered superconducting lead monolayer – Supplement*, Nature Communications **10**, 2587, 2019 (siehe S. 77, 80).
DOI 10.1038/s41467-019-10397-5.
- [453] OSHIMA, Y. et al.: *Commensurate and incommensurate striped structure of Ag film growth on Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ surface at room temperature*, Surface Science **498**, 307–313, 2002 (siehe S. 77).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)01800-3.
- [454] BLOCK, T. et al.: *Plasmons in Pb nanowire arrays on Si(557): Between one and two dimensions*, Physical Review B **84**, 205402, 2011 (siehe S. 78, 86, 88–90, 125, 187, 209, 211).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.205402.

- [455] HUPALO, M., SCHMALIAN, J. & TRINGIDES, M. C.: “Devil’s Staircase” in *Pb/Si(111) Ordered Phases*, *Physical Review Letters* **90**, 216106, 2003 (siehe S. 78–80, 103, 215).
DOI 10.1103/PhysRevLett.90.216106.
- [456] YAKES, M. et al.: *Self-organization at finite temperatures of the devil’s staircase in Pb/Si(111)*, *Physical Review B* **69**, 224103, 2004 (siehe S. 78, 80, 81, 103, 167, 168, 194, 215).
DOI 10.1103/PhysRevB.69.224103.
- [457] YAKES, M. et al.: *Low-Temperature Ultrafast Mobility in Systems with Long-Range Repulsive Interactions: Pb/Si(111)*, *Physical Review Letters* **98**, 135504, 2007 (siehe S. 79–81, 167).
DOI 10.1103/PhysRevLett.98.135504.
- [458] GRANATO, E. et al.: *Anomalous Fast Dynamics of Adsorbate Overlayers near an Incommensurate Structural Transition*, *Physical Review Letters* **111**, 126102, 2013 (siehe S. 80).
DOI 10.1103/PhysRevLett.111.126102.
- [459] HUANG, L. et al.: *Coverage-Dependent Collective Diffusion of a Dense Pb Wetting Layer on Si(111)*, *Physical Review Letters* **108**, 026101, 2012 (siehe S. 80).
DOI 10.1103/PhysRevLett.108.026101.
- [460] PIECZYRAK, B. et al.: *Spin polarization of two-dimensional electronic gas decoupled from structural asymmetry environment*, *Physical Review B* **93**, 195318, 2016 (siehe S. 82, 110, 143, 144, 219).
DOI 10.1103/PhysRevB.93.195318.
- [461] NAKAMURA, D., YUHARA, J. & MORITA, K.: *Self-recovery of monolayer Pb adsorbates on the Si(111)-1 × 1-Pb surface under ion irradiation at room temperature*, *Surface Science* **425**, 174–179, 1999 (siehe S. 82).
DOI 10.1016/S0039-6028(99)00173-9.
- [462] DEV, B. N. et al.: *High-Temperature X-Ray Standing-Wave Study: Application to Melting of Monolayers of Pb on Ge(111) Surfaces*, *Europhysics Letters* **6**, 311–316, 1988 (siehe S. 83).
DOI 10.1209/0295-5075/6/4/006.
- [463] SATO, Y. & CHIANG, S.: *Phase coexistence between the $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ - \beta$ and (1×1) phases on Pb/Ge(111)*, *Surface Science* **603**, 2.300–2.304, 2009 (siehe S. 83).
DOI 10.1016/j.susc.2009.05.008.
- [464] SATO, Y. & CHIANG, S.: *Growth and morphology of Pb phases on Ge(111)*, *Journal of Vacuum Science and Technology A* **35**, 061405, 2017 (siehe S. 83).
DOI 10.1116/1.4999458.
- [465] TEYS, S. A. et al.: *Orientation and structure of triple step staircase on vicinal Si(111) surfaces*, *Surface Science* **600**, 4.878–4.882, 2006 (siehe S. 84, 85).
DOI 10.1016/j.susc.2006.08.009.
- [466] SWARTZENTRUBER, B. S. et al.: *Scanning tunneling microscopy studies of structural disorder and steps on Si surfaces*, *Journal of Vacuum Science and Technology A* **7**, 2.901–2.905, 1989 (siehe S. 85).
DOI 10.1116/1.576167.

- [467] MEN, F. K. et al.: *Self-Organized Nanoscale Pattern Formation on Vicinal Si(111) Surfaces via a Two-Stage Faceting Transition*, Physical Review Letters **88**, 096105, 2002 (siehe S. 85). DOI 10.1103/PhysRevLett.88.096105.
- [468] LIN, J.-L. et al.: *Formation of regular step arrays on Si(111)7 × 7*, Journal of Applied Physics **84**, 255–260, 1998 (siehe S. 85). DOI 10.1063/1.368077.
- [469] PETROVYKH, D. Y. & HIMPSEL, F. J.: *Self-assembled Nanostructures at Silicon Surfaces*, Encyclopedia of nanoscience and nanotechnology **9**, 497–528, 2004 (siehe S. 85).
- [470] KIRAKOSIAN, A. et al.: *Atomically accurate Si grating with 5.73 nm period*, Applied Physics Letters **79**, 1.608–1.610, 2001 (siehe S. 85). DOI 10.1063/1.1401788.
- [471] WANG, X.-S. et al.: *Terrace-Width Distributions on Vicinal Si(111)*, Physical Review Letters **65**, 2.430–2.433, 1990 (siehe S. 85). DOI 10.1103/PhysRevLett.65.2430.
- [472] WANG, X.-S. et al.: *Terrace-Width Distributions on Vicinal Si(111)*, Physical Review Letters **66**, 677, 1991 (siehe S. 85). DOI 10.1103/PhysRevLett.66.677.
- [473] HENZLER, M. & ZHACHUK, R. A.: *The step structure of the Si(557) surface*, Thin Solid Films **428**, 129–132, 2003 (siehe S. 85). DOI 10.1016/S0040-6090(02)01236-1.
- [474] HOQUE, E., PETKOVA, A. & HENZLER, M.: *Growth mode of Pb films on vicinal Si(111)*, Surface Science **515**, 312–322, 2002 (siehe S. 85, 87, 88). DOI 10.1016/S0039-6028(02)01887-3.
- [475] CZUBANOWSKI, M.: Dissertation, *Correlation of electronic transport and structure in Pb atomic wires on Si(557) surfaces*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2009 (siehe S. 85, 86, 88, 89, 91, 92, 187, 190, 191, 194).
- [476] CZUBANOWSKI, M. et al.: *Adsorbate induced refaceting: Pb chains on Si(557)*, New Journal of Physics **9**, 338, 2007 (siehe S. 85, 87–89, 92, 187, 200, 209). DOI 10.1088/1367-2630/9/9/338.
- [477] CHAIKA, A. N. et al.: *Atomic structure of a regular Si(223) triple step staircase*, Surface Science **603**, 752–761, 2009 (siehe S. 85). DOI 10.1016/j.susc.2009.01.007.
- [478] CHAIKA, A. N. et al.: *STM and LEED Studies of Atomically Ordered Terraced Si(557) Surfaces*, Semiconductors **41**, 431–435, 2007 (siehe S. 85). DOI 10.1134/S1063782607040136.
- [479] MORIKAWA, H., KANG, P. G. & YEOM, H. W.: *Electronic structure of Ag-induced atomic wires on Si(557) investigated by STS and angle-resolved photoemission*, Surface Science **602**, 3.745–3.749, 2008 (siehe S. 85). DOI 10.1016/j.susc.2008.09.044.

- [480] LÜKERMANN, D., PFNÜR, H. & TEGENKAMP, C.: *Anisotropic conductance oscillations in Pb films on Si(557)*, Physical Review B **82**, 045401, 2010 (siehe S. 85, 88).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.045401.
- [481] PFNÜR, H. in *Nanophenomena at Surfaces – Fundamentals of Exotic Condensed Matter Properties*, Springer Series in Surface Sciences, Vol. **47**, Ed.: MICHAÏLOV, M., Springer Berlin Heidelberg, 2011, Chap. 9: *Metallic Nanowires on the Atomic Scale: Correlation Between Structure, Electronic Properties, and Electronic Transport*, 205–218 (siehe S. 85, 88).
DOI 10/d2d34r.
- [482] GAUCH, M.: Diplomarbeit, *Magnetotransportmessungen an stark anisotropen metallischen Pb-Monolagenstrukturen auf Si(557)*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2009 (siehe S. 85, 88–92, 183, 187, 205).
- [483] KIM, M. K. et al.: *Control of a quasi-one-dimensional phase of a Si nanostructure: Vicinal Si(557) surfaces*, Physical Review B **81**, 085312, 2010 (siehe S. 85).
DOI 10.1103/PhysRevB.81.085312.
- [484] CHAIKA, A. N. et al.: *Regular Step Systems on Clean Si(hhm) 7 × 7 Surfaces*, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **73**, 676–678, 2009 (siehe S. 85).
DOI 10.3103/S106287380905044X.
- [485] CHAIKA, A. N. et al.: *Scanning tunneling microscopy with single crystalline W[001] tips: High resolution studies of Si(557) 5 × 5 surface*, Applied Physics Letters **95**, 173107, 2009 (siehe S. 85).
DOI 10.1063/1.3254240.
- [486] ZVEREV, A. V. et al.: *Causes of the stability of three-bilayer islands and steps on a Si(111) surface*, Semiconductors **39**, 967–977, 2005 (siehe S. 85).
DOI 10.1134/1.2010695.
- [487] OH, D.-H. et al.: *Atomic structure model of the reconstructed Si(557) surface with a triple step structure: Adatom-parallel dimer model*, Physical Review B **77**, 155430, 2008 (siehe S. 85).
DOI 10.1103/PhysRevB.77.155430.
- [488] ZHACHUK, R. A. & PEREIRA, S.: *Comment on „Atomic structure model of the reconstructed Si(557) surface with a triple step structure: Adatom-parallel dimer model“*, Physical Review B **79**, 077401, 2009 (siehe S. 85).
DOI 10.1103/PhysRevB.79.077401.
- [489] NEIZVESTNY, I. G. et al.: *Edge-dimer row – The reason of three-bilayer steps and islands stability on Si(111)-7 × 7*, Surface Science **600**, 3.079–3.086, 2006 (siehe S. 85).
DOI 10.1016/j.susc.2006.05.055.
- [490] WANKE, M. et al.: *Structural and electronic properties of rare earth silicide nanowires on Si(557)*, Physical Review B **79**, 155428, 2009 (siehe S. 85, 86, 220).
DOI 10.1103/PhysRevB.79.155428.
- [491] WANKE, M.: Dissertation, *Rare earth silicide nanowires on silicon surfaces*, Technische Universität Berlin, 2008 (siehe S. 85, 86, 220).
DOI 10.14279/depositonce-2026.

- [492] RÖNSPIES, J. P.: Dissertation, *Potentiometrische Charakterisierung von nanolithographisch strukturierten metallischen Drähten auf vizinalem Silizium*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2010 (siehe S. 85, 89, 90).
- [493] PÉREZ LEÓN, C. et al.: *Atomically resolved scanning force studies of vicinal Si(111)*, Physical Review B **95**, 245412, 2017 (siehe S. 85).
DOI 10.1103/PhysRevB.95.245412.
- [494] HOGAN, C., MCALINDEN, N. & MCGILP, J. F.: *Optical characterization of gold chains and steps on the vicinal Si(557) surface: Theory and experiment*, Physica Status Solidi B **249**, 1.095–1.104, 2012 (siehe S. 85).
DOI 10.1002/pssb.201100759.
- [495] PFNÜR, H. et al.: *Between one and two dimensions: Pb/Si(557) close to monolayer coverage*, Surface Science **643**, 79–86, 2016 (siehe S. 86, 88–90).
DOI 10.1016/j.susc.2015.08.007.
- [496] JAŁOCHOWSKI, M. & BAUER, E.: *Growth of metallic nanowires on anisotropic Si substrates: Pb on vicinal Si(001), Si(775), Si(533), and Si(110)*, Surface Science **480**, 109–117, 2001 (siehe S. 87, 93).
DOI 10.1016/S0039-6028(01)00825-1.
- [497] ZHACHUK, R. A., TEYS, S. A. & OLSHANETSKY, B. Z.: *Study of Initial Stages of Pb Growth on the Si(7 7 10) Surface by the Method of Scanning Tunneling Spectroscopy*, Semiconductors **41**, 560–563, 2007 (siehe S. 87).
DOI 10.1134/S1063782607050168.
- [498] MORIKAWA, H. et al.: *Scanning tunneling microscopy observation of Pb-induced superstructures on Si(557)*, Physical Review B **76**, 165406, 2007 (siehe S. 88).
DOI 10.1103/PhysRevB.76.165406.
- [499] KIM, K. S. et al.: *Strong Lateral Electron Coupling of Pb Nanowires on Stepped Si(111): Angle-Resolved Photoemission Studies*, Physical Review Letters **99**, 196804, 2007 (siehe S. 88).
DOI 10.1103/PhysRevLett.99.196804.
- [500] KIM, K. S. & YEOM, H. W.: *Giant Kink in Electron Dispersion of Strongly Coupled Lead Nanowires*, Nano Letters **9**, 1.916–1.920, 2009 (siehe S. 88).
DOI 10.1021/nl900052s.
- [501] KIM, K. S., CHOI, W. H. & YEOM, H. W.: *Photoemission study of the anisotropic phase formation on Si(557)*, Physical Review B **75**, 195324, 2007 (siehe S. 88).
DOI 10.1103/PhysRevB.75.195324.
- [502] MORIKAWA, H. et al.: *Conductance transition and interwire ordering of Pb nanowires on Si(557)*, Physical Review B **82**, 045423, 2010 (siehe S. 88).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.045423.
- [503] HUPALO, M. & TRINGIDES, M. C.: *Self-organization and geometry control of Pb islands grown on anisotropic substrates*, Physical Review B **73**, 041405(R), 2006 (siehe S. 88).
DOI 10.1103/PhysRevB.73.041405.

- [504] FOKIN, D. A. et al.: *Electronic growth of Pb on the vicinal Si surface*, Physica Status Solidi C **7**, 165–168, 2010 (siehe S. 88).
DOI 10.1002/pssc.200982480.
- [505] AKBARI, S.: Diplomarbeit, *Untersuchung an ultradünnen Bleischichten auf Si(557): Struktur- und Leitfähigkeitsuntersuchung*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2007 (siehe S. 88, 89, 187).
- [506] TEGENKAMP, C. et al.: *Pb nanowires on vicinal Si(111) surfaces: Effects of refacetting on transport*, Physical Review B **82**, 205413, 2010 (siehe S. 88, 89, 91–93, 182, 185, 187, 197, 201, 206).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.205413.
- [507] SCHUSTER, A.: Diplomarbeit, *Strukturänderungen von vicinalem Silizium durch Phasenübergänge in Adsorbatmonolagen*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2008 (siehe S. 88, 89, 92, 93, 187, 199, 220).
- [508] PFNÜR, H. et al.: *Geometrical and electronic properties of ultra thin epitaxial metal nanowires on flat and vicinal Si surfaces*, Material Science-Poland **23**, 861–876, 2005 (siehe S. 88).
DOI 10.1016/j.susc.2015.08.007.
- [509] PFNÜR, H. et al.: *Correlation of geometrical and electronic properties in metallic nanowires*, Physica Status Solidi B **247**, 2.509–2.521, 2010 (siehe S. 88, 92, 182, 200).
DOI 10.1002/pssb.201046103.
- [510] KRICH, C.: Bachelorarbeit, *Pb/Si(557): Struktur und optische Leitfähigkeit in Quantendraht-Strukturen*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2012 (siehe S. 89, 187).
- [511] SAMAD SYED, A. et al.: *Unoccupied electronic structure and momentum-dependent scattering dynamics in Pb/Si(557) nanowire arrays*, Physical Review B **92**, 134301, 2015 (siehe S. 89, 90).
DOI 10.1103/PhysRevB.92.134301.
- [512] TEGENKAMP, C. et al.: *Coupled Pb Chains on Si(557): Origin of One-Dimensional Conductance*, Physical Review Letters **100**, 076802, 2008 (siehe S. 89, 185, 196–198, 209, 211).
DOI 10.1103/PhysRevLett.100.076802.
- [513] RÖNSPIES, J. P., WIESELL, S. & PFNÜR, H.: *The resistence of single atomic steps in ultrathin Pb nanowires on Si(557)*, Applied Physics A **100**, 1.007–1.012, 2010 (siehe S. 89–91).
DOI 10.1007/s00339-010-5902-y.
- [514] QUENTIN, M. et al.: *Electronic correlation effects in Pb quantum wires on Si(557)*, Physical Review B **102**, 035438, 2020 (siehe S. 89, 90, 92, 185, 187, 199, 202).
DOI 10.1103/PhysRevB.102.035438.
- [515] KISIEL, M., SKROBAS, K. & JAŁOCHOWSKI, M.: *Photoelectron diffraction effect in the highly ordered Si(557)/Pb surface*, Applied Surface Science **254**, 4.313–4.317, 2008 (siehe S. 89).
DOI 10.1016/j.apsusc.2008.01.052.
- [516] BAUMANN, A. et al.: *Vibrational properties of Pb reconstructions on the Si(557) surface studied by in-situ Raman spectroscopy – unveröffentlicht* (siehe S. 89).
- [517] PFNÜR, H., TEGENKAMP, C. & VATTUONE, L. in *Springer Handbook of Surface Science*,

- Eds.: ROCCA, M., RAHMAN, T. S. & VATTUONE, L., Springer International Publishing, 2020, Chap. 19: *Plasmons in One and Two Dimensions*, 557–584 (siehe S. 90).
DOI 10.1007/978-3-030-46906-1_19.
- [518] PFNÜR, H., LÜKERMANN, D. & TEGENKAMP, C.: *The dominance of surfaces and interfaces: A view to magnetoconductance and structure in low-dimensional crystalline films*, Physica Status Solidi A **209**, 627–635, 2012 (siehe S. 90, 91).
DOI 10.1002/pssa.201127751.
- [519] ZHAO, R. G., HU, C. & YANG, W. S.: *Interfacial reaction and surface structures of the Pb/Si(113) system*, Surface Review and Letters **02**, 245–254, 1995 (siehe S. 93, 213).
DOI 10.1142/S0218625X95000261.
- [520] KRAWIEC, M.: *Pb chains on reconstructed Si(335) surface*, Physical Review B **79**, 155438, 2009 (siehe S. 93).
DOI 10.1103/PhysRevB.79.155438.
- [521] JAŁOCHOWSKI, M., STRÓŻAK, M. & ZDYB, R.: *Reflectance anisotropy during growth of Pb nanowires on well ordered Si(335) surface*, Applied Surface Science **211**, 209–215, 2003 (siehe S. 93).
DOI 10.1016/s0169-4332(03)00228-9.
- [522] JAŁOCHOWSKI, M.: *Self-assembled parallel mesoscopic Pb wires on vicinal Si(111)*, Acta Physica Polonica A **98**, 259–269, 2000 (siehe S. 93).
- [523] KOPCIUSZYŃSKI, M. et al.: *Ordering of the Si(553) surface with Pb atoms*, Applied Surface Science **305**, 139–142, 2014 (siehe S. 93, 213).
DOI 10.1016/j.apsusc.2014.03.009.
- [524] KOPCIUSZYŃSKI, M. et al.: *Pb nanoribbons on the Si(553) surface*, Physical Review B **88**, 155431, 2013 (siehe S. 93, 187, 188, 213).
DOI 10.1103/PhysRevB.88.155431.
- [525] KOPCIUSZYŃSKI, M. et al.: *Purely one-dimensional bands with a giant spin-orbit splitting: Pb nanoribbons on Si(553) surface*, Scientific Reports **7**, 46215, 2017 (siehe S. 93, 213).
DOI 10.1038/srep46215.
- [526] KOPCIUSZYŃSKI, M. et al.: *Quasi one-dimensional lead ribbons on the Si(110) surface*, Applied Surface Science **373**, 8–12, 2016 (siehe S. 93, 213).
DOI 10.1016/j.apsusc.2015.11.147.
- [527] KORCZAK, Z., KWAPIŃSKI, T. & MAZUREK, P.: *Conductance of Pb on a modified Si(335) vicinal surface*, Surface Science **604**, 54–58, 2010 (siehe S. 93).
DOI 10.1016/j.susc.2009.10.019.
- [528] ZDYB, R.: *Influence on substrate morphology on Pb growth*, Applied Surface Science **254**, 4.408–4.413, 2008 (siehe S. 93).
DOI 10.1016/j.apsusc.2008.01.023.
- [529] KISIEL, M. et al.: *Pb chains on ordered Si(335) surface*, Physics Letters A **364**, 152–156, 2007 (siehe S. 93).
DOI 10.1016/j.physleta.2006.11.086.

- [530] STRÓŻAK, M., HNATYUK, V. & JAŁOCHOWSKI, M.: *Optical properties of Pb nanowires on Si(335)*, *Vacuum* **74**, 241–245, 2004 (siehe S. 93).
DOI 10.1016/j.vacuum.2003.12.132.
- [531] JAŁOCHOWSKI, M. & STRÓŻAK, M.: *Optical anisotropy of Pb nanowires on Si(533) surface*, *Optica Applicata* **XXXII**, 373–379, 2002 (siehe S. 93).
- [532] NITA, P. et al.: *One-Dimensional Diffusion of Pb Atoms on the Si(553)-Au Surface*, *Physical Review Letters* **107**, 026101, 2011 (siehe S. 93).
DOI 10.1103/PhysRevLett.107.026101.
- [533] NITA, P. et al.: *Structural and electronic properties of Pb chains on the Si(553)-Au surface*, *Physical Review B* **84**, 085453, 2011 (siehe S. 93).
DOI 10.1103/PhysRevB.84.085453.
- [534] NITA, P. et al.: *Surface diffusion of Pb atoms on the Si(553)-Au surface in narrow quasi-one-dimensional channels*, *Physical Review B* **89**, 165426, 2014 (siehe S. 93).
DOI 10.1103/PhysRevB.89.165426.
- [535] KLEVENZ, M. et al.: *Infrared resonances of self-assembled Pb nanorods*, *Applied Physics Letters* **92**, 133116, 2008 (siehe S. 93).
DOI 10.1063/1.2904645.
- [536] JAŁOCHOWSKI, M. et al.: *Correlation between morphology, electron band structure, and resistivity of Pb atomic chains on the Si(553)-Au surface*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 284003, 2016 (siehe S. 93).
DOI 10.1088/0953-8984/28/28/284003.
- [537] YAJI, K. et al.: *Structural and electronic properties of the Pb/Ge(111)- $\beta(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ surface studied by photoelectron spectroscopy and first-principles calculations*, *Physical Review B* **86**, 235317, 2012 (siehe S. 102, 145, 146, 217).
DOI 10.1103/PhysRevB.86.235317.
- [538] IBAÑEZ-APIROZ, J. et al.: *Spin-Flip Transitions Induced by Time-Dependent Electric Fields in Surfaces with Strong Spin-Orbit Interaction*, *Physical Review Letters* **109**, 156401, 2012 (siehe S. 111, 113, 127, 145, 146, 219).
DOI 10.1103/PhysRevLett.109.156401.
- [539] BONDARENKO, L. V.: *Large spin splitting of metallic surface-state bands at adsorbate-modified gold/silicon surfaces*, *Scientific Reports* **3**, 1826, 2013 (siehe S. 113, 127, 147).
DOI 10.1038/srep01826.
- [540] GRUZNEV, D. V., ZOTOV, A. V. & SARANIN, A. A.: *Tailoring of spin-split metallic surface-state bands on silicon*, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **201**, 81–87, 2015 (siehe S. 113, 127, 147, 219).
DOI 10.1016/j.elspec.2014.09.006.
- [541] SZE, S. M.: *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd & 3rd Edition, 1981 & 2007, John Wiley & Sons (siehe S. 114).
- [542] VARSHNI, Y. P.: *Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*, *Physica* **34**, 149–154, 1967 (siehe S. 114).
DOI 10.1016/0031-8914(67)90062-6.

- [543] DAIMON, H. et al.: *Structure factor in photoemission from valence band*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **76**, 487–492, 1995 (siehe S. 115, 148, 149, 152, 156, 179).
DOI 10.1016/0368-2048(95)02478-6.
- [544] YAJI, K. et al.: *Large Rashba spin splitting of a metallic surface-state band on a semiconductor surface*, Nature Communications **1**, 17, 2010 (siehe S. 125, 145, 146).
DOI 10.1038/ncomms1016.
- [545] STOLWIJK, S. D. et al.: *Valley spin polarization of Tl/Si(111)*, Physical Review Materials **1**, 064604, 2017 (siehe S. 131).
DOI 10.1103/PhysRevMaterials.1.064604.
- [546] STOLWIJK, S. D. et al.: *Thin line of a Rashba-type spin texture: Unoccupied surface resonance of Tl/Si(111) along $\overline{\Gamma M}$* , Physical Review B **90**, 161109(R), 2014 (siehe S. 132).
DOI 10.1103/PhysRevB.90.161109.
- [547] ZIMMERMANN, B. et al.: *First-principles analysis of a homochiral cycloidal magnetic structure in a monolayer Cr on W(110)*, Physical Review B **90**, 115427, 2014 (siehe S. 132).
DOI 10.1103/PhysRevB.90.115427.
- [548] HATTA, S. et al.: *Atomic and electronic structure of Tl/Ge(111)-(1 × 1): LEED and ARPES measurements and first-principles calculations*, Physical Review B **76**, 075427, 2007 (siehe S. 132).
DOI 10.1103/PhysRevB.76.075427.
- [549] EICKHOLT, P.: Masterarbeit, *Spinstrukturen in der unbesetzten elektronischen Struktur von Tl/Ge(111)*, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2014 (siehe S. 132).
- [550] KURODA, K. et al.: *Hexagonally Deformed Fermi Surface of the 3D Topological Insulator Bi_2Te_3* , Physical Review Letters **105**, 076802, 2010 (siehe S. 137).
DOI 10.1103/PhysRevLett.105.076802.
- [551] BARZYKIN, V. & GOR'KOV, L. P.: *Inhomogeneous Stripe Phase Revisited for Surface Superconductivity*, Physical Review Letters **89**, 227002, 2002 (siehe S. 139, 140).
DOI 10.1103/PhysRevLett.89.227002.
- [552] GROSS, R. & MARX, A.: *Festkörperphysik*, 2. aktualisierte Auflage, 2014, Walter de Gruyter (siehe S. 140).
- [553] HASEGAWA, S.: *Charge and spin transport on surfaces and atomic layers measured by multi-probe techniques*, Journal of Physics: Condensed Matter **31**, 223001, 2019 (siehe S. 140).
DOI 10.1088/1361-648X/ab0bf4.
- [554] TANG, S.-J. et al.: *Dispersive resonance bands within the space-charge layer of a metal-semiconductor junction*, Physical Review B **81**, 245406, 2010 (siehe S. 145, 146, 177).
DOI 10.1103/PhysRevB.81.245406.
- [555] HATTA, S. et al.: *Anomalous electrical conduction in a monatomic Pb layer on Ge(111)*, Physical Review B **90**, 245407, 2014 (siehe S. 145, 146).
DOI 10.1103/PhysRevB.90.245407.
- [556] REN, X.-Y. et al.: *Spin-orbit coupling effects on the stability of two competing structures in*

- Pb/Si(111) and Pb/Ge(111) – Supplement*, Physical Review B **94**, 075436, 2016 (siehe S. 145, 146).
DOI 10.1103/PhysRevB.94.075436.
- [557] MORIKAWA, H., MATSUDA, I. & HASEGAWA, S.: *Absence of charge-density waves on the dense Pb/Ge(111)- β - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ surface*, Physical Review B **77**, 193310, 2008 (siehe S. 146).
DOI 10.1103/PhysRevB.77.193310.
- [558] HÖPFNER, P. et al.: *Three-Dimensional Spin-Rotations at the Fermi Surface of a Strongly Spin-Orbit Coupled Surface System – Supplement*, Physical Review Letters **108**, 186801, 2012 (siehe S. 146).
DOI 10.1103/PhysRevLett.108.186801.
- [559] GROZEA, D., BENGU, E. & MARKS, L. D.: *Surface phase diagrams for the Ag-Ge(111) and Au-Si(111)*, Surface Science **461**, 23–30, 2000 (siehe S. 147).
DOI 10.1016/S0039-6028(00)00491-X.
- [560] MARKS, L. D. et al.: *Au 6×6 on Si(111): Evidence for a 2D Pseudoglass*, Surface Review and Letters **5**, 459, 1998 (siehe S. 147).
DOI 10.1142/S0218625X98000827.
- [561] KIM, J. K. et al.: *Two-dimensional electron gas formed on the indium-adsorbed Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au surface*, Physical Review B **80**, 075312, 2009 (siehe S. 147).
DOI 10.1103/PhysRevB.80.075312.
- [562] BONDARENKO, L. V. et al.: *Effect of Na adsorption on the structural and electronic properties of Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au surface*, Journal of Physics: Condensed Matter **26**, 055009, 2014 (siehe S. 147).
DOI 10.1088/0953-8984/26/5/055009.
- [563] HATTA, S. et al.: *Large Rashba spin splitting of surface resonance bands on semiconductor surface*, Physical Review B **80**, 113309, 2009 (siehe S. 147).
DOI 10.1103/PhysRevB.80.113309.
- [564] FRANTZESKAKIS, E., PONS, S. & GRIONI, M.: *Band structure scenario for the giant spin-orbit splitting observed at the Bi/Si(111) interface*, Physical Review B **82**, 085440, 2010 (siehe S. 147, 211).
DOI 10.1103/PhysRevB.82.085440.
- [565] KINOSHITA, T., KONO, S. & NAGAYOSHI, H.: *Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy Study of the Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi Surface*, Journal of the Physical Society of Japan **56**, 2.511–2.515, 1987 (siehe S. 147).
DOI 10.1143/JPSJ.56.2511.
- [566] EREMEEV, S. V. et al.: *Atomic arrangement and electron band structure of Si(111)- β - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi reconstruction modified by alkali-metal adsorption: ab initio study*, Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 305003, 2015 (siehe S. 147).
DOI 10.1088/0953-8984/27/30/305003.
- [567] GRUZNEV, D. V. et al.: *A Strategy to Create Spin-Split Metallic Bands on Silicon Using a Dense Alloy Layer*, Scientific Reports **4**, 4742, 2014 (siehe S. 147, 219).
DOI 10.1038/srep04742.

- [568] MATETSKIY, A. V. et al.: *Two-Dimensional Superconductor with a Giant Rashba Effect: One-Atom-Layer Tl-Pb Compound on Si(111)*, Physical Review Letters **115**, 147003, 2015 (siehe S. 147, 219).
DOI 10.1103/PhysRevLett.115.147003.
- [569] NAKAMURA, T. et al.: *Unconventional superconductivity in the single-atom-layer alloy Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl,Pb)*, Physical Review B **98**, 134505, 2018 (siehe S. 147, 219).
DOI 10.1103/PhysRevB.98.134505.
- [570] MORITA, M. et al.: *ARPES measurements on Si(111) hole subband induced by Pb and Ga adsorption*, Applied Surface Science **254**, 7.872–7.876, 2008 (siehe S. 177).
DOI 10.1016/j.apsusc.2008.03.068.
- [571] OHTSUBO, Y. et al.: *Spin-polarized surface states of Br/Ge(111)-(1 × 1): Surface spin polarization without heavy elements*, Physical Review B **86**, 165325, 2012 (siehe S. 177).
DOI 10.1103/PhysRevB.86.165325.
- [572] TANG, S.-J. et al.: *Electronic versus Lattice Match for Metal-Semiconductor Epitaxial Growth: Pb on Ge(111)*, Physical Review Letters **107**, 066802, 2011 (siehe S. 177).
DOI 10.1103/PhysRevLett.107.066802.
- [573] TANIGAWA, Y. et al.: *Hole Subband Dispersion in Space Charge Layers under Pb/Si(001) Surfaces Measured by Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy*, e-Journal of Surface Science and Nanotechnology **7**, 641–648, 2009 (siehe S. 177).
DOI 10.1380/ejssnt.2009.641.
- [574] TAKEDA, S. N., HIGASHI, N. & DAIMON, H.: *Visualization of In-Plane Dispersion of Hole Subbands by Photoelectron Spectroscopy*, Physical Review Letters **94**, 037401, 2015 (siehe S. 177, 179).
DOI 10.1103/PhysRevLett.94.037401.
- [575] TAKEDA, S. N. et al.: *Disentangling hole subbands dispersion in Si(111): In- and out-of-plane effective masses and anisotropy*, Physical Review B **93**, 125418, 2016 (siehe S. 177, 178, 180).
DOI 10.1103/PhysRevB.93.125418.
- [576] STERN, F. & HOWARD, W. E.: *Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit*, Physical Review **163**, 816–835, 1967 (siehe S. 179).
DOI 10.1103/PhysRev.163.816.
- [577] ANDO, T., FOWLER, A. B. & STERN, F.: *Electronic properties of two-dimensional systems*, Reviews of Modern Physics **54**, 438–672, 1982 (siehe S. 179).
DOI 10.1103/RevModPhys.54.437.
- [578] KRIEG, U. et al.: *One-dimensional collective excitations in Ag atomic wires grown on Si(557)*, Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 014013, 2013 (siehe S. 188).
DOI 10.1088/0953-8984/25/1/014013.
- [579] KRIEG, U. et al.: *Origin of metallicity in atomic Ag wires on Si(557)*, New Journal of Physics **17**, 043062, 2015 (siehe S. 188, 199).
DOI 10.1088/1367-2630/17/4/043062.

- [580] KRIEG, U. et al.: *Tuning of one-dimensional plasmons by Ag-Doping in Ag- $\sqrt{3}$ -ordered atomic wires*, New Journal of Physics **16**, 043007, 2014 (siehe S. 199, 213).
DOI 10.1088/1367-2630/16/4/043007.
- [581] KIRAKOSIAN, A. et al.: *Silicon adatoms on the Si(111)5 \times 2-Au surface*, Surface Science **532–535**, 928–933, 2003 (siehe S. 199, 213).
DOI 10.1016/S0039-6028(03)00097-9.
- [582] HEINZE, S. et al.: *Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions*, Nature Physics **7**, 1–6, 2011 (siehe S. 212).
DOI 10.1038/nphys2045.
- [583] OKUDA, T. & KIMURA, A.: *Spin- and Angle-Resolved Photoemission of Strongly Spin-Orbit Coupled Systems*, Journal of the Physical Society of Japan **82**, 021002, 2013 (siehe S. 212).
DOI 10.7566/JPSJ.82.021002.
- [584] STROCOV, V. N., PETROV, V. N. & DIL, J. H.: *Concept of a multichannel spin-resolving electron analyzer based on Mott scattering*, Journal of Synchrotron Radiation **22**, 708–719, 2015 (siehe S. 212).
DOI 10.1107/S160057751500363X.
- [585] KAMPFRATH, T. et al.: *Coherent terahertz control of antiferromagnetic spin waves*, Nature Photonics **5**, 31–34, 2010 (siehe S. 220).
DOI 10.1038/nphoton.2010.259.
- [586] LÜKERMANN, D. et al.: *Growth of epitaxial Bi-films on vicinal Si(111)*, Surface Science **621**, 82–87, 2014 (siehe S. 220).
DOI 10.1088/1367-2630/17/4/04306.
- [587] DRESSELHAUS, G., KIP, A. F. & KITTEL, C.: *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Physical Review **98**, 368–384, 1955 (siehe S. 277, 279, 284, 285).
DOI 10.1103/PhysRev.98.368.
- [588] LUTTINGER, J. M. & KOHN, W.: *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Physical Review **97**, 869–883, 1955 (siehe S. 277, 279, 284, 285).
DOI 10.1103/PhysRev.97.869.
- [589] LEW YAN VOON, L. C. & WILLATZEN, M.: *The $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Method – Electronic Properties of Semiconductors*, 2009, Springer-Verlag (siehe S. 277, 278, 284).
DOI 10.1007/978-3-540-92872-0.
- [590] RIDLEY, B. K.: *Quantum Processes in Semiconductors*, 5th Edition, 2013, Oxford University Press (siehe S. 278, 279).
- [591] KANE, E. O.: *Band structure of Indium Antimonide*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **1**, 249–261, 1957 (siehe S. 278).
DOI 10.1016/0022-3697(57)90013-6.
- [592] BIRNER, S.: Dissertation, *Modeling of semiconductor nanostructures and semiconductor-electrolyte interfaces*, Technische Universität München, 2011 (siehe S. 278–280, 283, 284).

- [593] GROVES, S. H. et al.: *Interband magnetoreflexion of α -Sn*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **31**, 2.031–2.049, 1970 (siehe S. 278, 285).
DOI 10.1016/0022-3697(70)90006-5.
- [594] LAWAEZT, P.: *Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors*, Physical Review B **4**, 3.460–3.467, 1971 (siehe S. 278, 285, 286).
DOI 10.1103/PhysRevB.4.3460.
- [595] CARDONA, M. & POLLAK, F. H.: *Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Method*, Physical Review **142**, 530–543, 1966 (siehe S. 278, 284).
DOI 10.1103/PhysRev.142.530.
- [596] FISCHETTI, M. V. et al.: *Six-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness*, Journal of Applied Physics **94**, 1.079–1.095, 2003 (siehe S. 279).
DOI 10.1063/1.1585120.
- [597] HENSEL, J. C. & FEHER, G.: *Cyclotron Resonance Experiments in Uniaxially Stressed Silicon: Valence Band Inverse Mass Parameters and Deformation Potentials*, Physical Review **129**, 1.041–1.062, 1963 (siehe S. 279, 284, 285).
DOI 10.1103/PhysRev.129.1041.
- [598] HASEGAWA, H.: *Theory of Cyclotron Resonance in Strained Silicon Crystals*, Physical Review **129**, 1.029–1.040, 1963 (siehe S. 279).
DOI 10.1103/PhysRev.129.1029.
- [599] LUTTINGER, J. M.: *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Physical Review **102**, 1.030–1.041, 1956 (siehe S. 279, 285).
DOI 10.1103/PhysRev.102.1030.
- [600] CHAO, C. Y.-O. & CHUANG, S. L.: *Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells*, Physical Review B **46**, 4.110–4.122, 1992 (siehe S. 283).
DOI 10.1103/PhysRevB.46.4110.
- [601] ASCHE, M. & VON BORZESZKOWSKI, J.: *On the Temperature Dependence of Hole Mobility in Silicon*, Physica Status Solidi B **37**, 433–438, 1970 (siehe S. 284, 286).
DOI 10.1002/pssb.19700370148.
- [602] HUMPHREYS, R. G.: *Valence band averages in silicon: Anisotropy and non-parabolicity*, Journal of Physics C: Solid State Physics **14**, 2.935–2.942, 1981 (siehe S. 284, 286–288).
DOI 10.1088/0022-3719/14/21/011.
- [603] MADELUNG, O. & POERSCHKE, R., Eds.: *Semiconductors – Group IV Elements and III-V Compounds*, Data in Science and Technology, 1991, Springer-Verlag (siehe S. 284).
DOI 10.1007/978-3-642-45681-7.
- [604] LOS, J., FASOLINO, A. & CATELLANI, A.: *Generalization of the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ approach for strained layered semiconductor structures grown on high-index-planes*, Physical Review B **53**, 4.630–4.648, 1996 (siehe S. 284).
DOI 10.1103/PhysRevB.53.4630.
- [605] DONETTI, L. et al.: *Hole effective mass in silicon inversion layers with different substrate*

- orientations and channel directions*, Journal of Applied Physics **110**, 063711, 2011 (siehe S. 284).
DOI 10.1063/1.3639281.
- [606] DEXTER, R. N. & LAX, B.: *Effective Masses of Holes in Silicon*, Physical Review **96**, 223–224, 1954 (siehe S. 285).
DOI 10.1103/PhysRev.96.223.
- [607] BALSLEV, I. & LAWAETZ, P.: *On the interpretation of the observed hole mass shift with Uniaxial stress in silicon*, Physics Letters **19**, 6–7, 1965 (siehe S. 285, 286).
DOI 10.1016/0031-9163(65)90937-6.
- [608] HENSEL, J. C. & SUZUKI, K.: *Anisotropy of the g factor of the free hole in Ge and conduction-band spin-orbit splitting*, Physical Review Letters **22**, 838–840, 1969 (siehe S. 285).
DOI 10.1103/PhysRevLett.22.838.
- [609] BIMBERG, D. et al.: *The electron-hole liquid in a polar semiconductor: cubic SiC*, Journal of Luminescence **18/19**, 542–546, 1979 (siehe S. 286, 287).
DOI 10.1016/0022-2313(79)90190-X.
- [610] FOREMAN, B. A.: *Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures*, Physical Review B **48**, 4.964–4.967, 1993 (siehe S. 285).
DOI 10.1103/PhysRevB.48.4964.
- [611] CHELIKOWSKY, J. R. & COHEN, M. L.: *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*, Physical Review B **14**, 556–582, 1976 (siehe S. 285).
DOI 10.1103/PhysRevB.14.556.
- [612] ONTON, A., FISHER, P. & RAMDAS, A. K.: *Spectroscopy Investigation of Group-III Acceptor States in Silicon*, Physical Review **163**, 686–703, 1967 (siehe S. 286).
DOI 10.1103/PhysRev.163.686.
- [613] ZWERDLING, S. et al.: *Internal Impurity Levels in Semiconductors: Experiments in p-Type Silicon*, Physical Review Letters **4**, 173–176, 1960 (siehe S. 286).
DOI 10.1103/PhysRevLett.4.173.

B. Abbildungsverzeichnis

1.1. Wechselwirkende Subsysteme	2
2.1. Symmetrien einiger Raumgruppen im Realraum	7
2.2. Symmetrien einiger Raumgruppen im \mathbb{K} -Raum	8
2.3. Vereinfachte Darstellung der Bandstruktur und Spin-Polarisation beim Rashba-Effekt	19
2.4. Dispersionen, Isoenergielinien und Spin-Polarisationen beim Rashba-Zeeman-Effekt	30
2.5. Deformation der Isoenergielinien durch <i>Warping</i>	36
2.6. Korrelationseffekte in eindimensionalen Bandstrukturen	37
2.7. Hybridisierung zweier Bänder	41
2.8. Parameter der Valenzbanddispersionen in den Si-Hauptrichtungen	46
2.9. Dispersionen der Valenzbänder in den Si-Hauptrichtungen	47
2.10. Effektive Massen bzw. ihre Beträge der Valenzbänder in den Si-Hauptrichtungen	48
2.11. Inverse effektive Massen und effektive Massen in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene für $ E \gg \Delta_{\text{SO}}$	49
2.12. Polardiagramme der inversen effektiven Massen und der effektiven Massen in den Richtungen senkrecht zur (111)-Ebene	50
2.13. Schematische Darstellung der Schottky-Barriere des Kontaktes von Pb mit n -Si	52
3.1. Schematischer Aufbau von LEED und STM	55
3.2. Elektronenbeugung an Oberflächen	55
3.3. Tunnelprozess im STM	56
3.4. Aufbau und Ewald-Konstruktion eines SPA-LEEDs	57
3.5. Schematische Darstellung des SR-ARPES-Spektrometers an der COPHEE-Endstation	61
4.1. Si(111)-(7 × 7)-Oberfläche	66
4.2. Phasendiagramm der α -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Phase	67
4.3. Strukturmodelle der β -Pb/Si(111)-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1/3 \text{ ML}$ und der γ -Pb/Si(111)-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1/6 \text{ ML}$	70
4.4. Strukturmodelle der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion	72
4.5. Strukturmodelle der SIC-Phase bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$	75
4.6. Strukturmodell der SIC-Phase mit Domänenwänden	76
4.7. Strukturmodelle der (3,1)- und (1,6)-Struktur der DS-Phase in H3-Konfiguration	79
4.8. Indizierung vizinaler Si-Oberflächen und Modell der Si(557)-Oberfläche	84
4.9. Strukturmodelle der Si(557)-Stufenstruktur	84

4.10. STM- und SPA-LEED-Analyse der Si(557)-Struktur	85
4.11. SPA-LEED-Profil und Phasendiagramm der Pb/Si(557)-Oberfläche	87
4.12. SPA-LEED- und STM-Bild der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{\text{Pb}} = 1,30 \text{ ML}$	89
4.13. Strukturmodelle der Pb/Si(557)-Oberfläche mit (223)- und (17 17 25)-Facette	90
4.14. Magnetotransport an der Pb/Si(557)-Oberfläche	91
4.15. Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit der Pb/Si(557)-Oberfläche	92
5.1. SPA-LEED- und STM-Analyse der β/γ -Pb/Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Mischphase	96
5.2. SPA-LEED-Analyse der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und der SIC-Phase	99
5.3. STM-Analyse der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion und der SIC-Phase	101
5.4. SPA-LEED-Analyse von Strukturen der DS-Phase	104
5.5. SPA-LEED-Bild der (1×1)-Phase	105
5.6. Berechnete Bandstruktur der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$ in T4-Konfiguration	107
5.7. Berechnete Bandstrukturen der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion bei $\Theta_{\text{Pb}} = 4/3 \text{ ML}$	108
5.8. Berechnete FSM und ihre Spin-Textur der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion	111
5.9. Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung	115
5.10. Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung	117
5.11. Spin-integrierter MDC und BM der SIC-Phase in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung	118
5.12. Spin-aufgelöste MDCs der SIC-Phase	121
5.13. Gemessene CEM und ihr Modell mit Spin-Aufspaltung der SIC-Phase	124
5.14. Vergleich von gemessener und berechneter Bandstruktur der SIC-Phase	126
5.15. Zeeman-Effekt des S2-Bands um den $\overline{\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt	129
5.16. Berechnete Spin-Textur des S2-Bandes um den $\overline{\text{K}}_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}}$ -Punkt der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion der SIC-Phase	131
5.17. Berechnete Dispersion des S1-Bandes der SIC-Phase	134
5.18. Vergleich von gemessener und berechneter Dispersion des S1-Bandes der SIC-Phase	136
5.19. Vergleich der <i>Nesting</i> -Vektoren von Spin-entarteten Bändern und Oberflächenzuständen topologischer Isolatoren mit dem Spin-aufgespaltenen S1-Band der SIC-Phase	137
5.20. Berechnete Spin-Textur des S1-Bandes in der 1. SBZ der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion der SIC-Phase	142
5.21. Graphische Entwicklung der Bandstruktur der SIC-Phase aus der (1×1)-Phase	144
5.22. Berechnete FSMs und gemessene CEM der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion	149
5.23. Berechnete <i>Single Domain</i> -Bandstruktur der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion ohne Berücksichtigung der SOC	151
5.24. Spin-integrierter MDC und BM der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion in $\overline{\Gamma\text{K}}$ -Richtung	153
5.25. Spin-integrierte und -aufgelöste MDCs, BM, überlagertes Modell der Bandstruktur und Spin-Polarisation der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion in $\overline{\Gamma\text{M}}$ -Richtung	154
5.26. Spin-integrierte und -aufgelöste MDCs, BM, überlagertes Modell der Bandstruktur und Spin-Polarisation der ($\sqrt{7} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion parallel zur $\overline{\text{KMK}}$ -Richtung ($k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$)	157

5.27. Modell der Rashba-aufgespaltenen CEM der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion für die S1/S1'-Bänder bei $E_B = 70$ meV	161
5.28. Berechnete Dispersionen des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion	162
5.29. Vergleich von gemessener und berechneter Dispersion des S1-Bandes der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion	164
5.30. Berechnete Spin-Textur des S1-Bandes in der 1. SBZ der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion	165
5.31. Modelle der FSM und CEM bei $E_B = 70$ meV und BMs des S2'-Bandes um den \bar{M} -Punkt	166
5.32. LEED-Bild der (1,6)-Struktur der DS-Phase	168
5.33. Messung und Modell der FSM der (2,6)-Struktur von CHOI	169
5.34. Spin-integrierte CEM und ihr Modell mit Spin-Aufspaltung der (1,6)-Struktur der DS-Phase	170
5.35. BMs und Modell der Bandstruktur der (1,6)-Struktur der DS-Phase	171
5.36. Spin-aufgelöste MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\bar{K}\bar{M}\bar{K}$ -Richtung	172
5.37. Spin-aufgelöste MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\bar{\Gamma}\bar{K}$ - und $\bar{\Gamma}\bar{M}$ -Richtung	173
5.38. Pb-induzierte QWSs der (1,6)-Struktur der DS-Phase	178
5.39. Elektrische Leitfähigkeit und Magnetotransport an Monolagenstrukturen von Pb/Si(111)	182
6.1. STM-Bild der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML	186
6.2. STM-Analyse der Oberflächenorientierung bei $T < T_C$	189
6.3. STM-Analyse der Oberflächenorientierung bei $T > T_C$	191
6.4. Mittelwerte der FFTs der Ableitungen dz/dL der Linescans über die Stufenstruktur von 1,31 ML Pb/Si(557)	192
6.5. Schematische Darstellung der Stufenstrukturen der Pb/Si(557)-Oberfläche	193
6.6. SPA-LEED-Analyse der Oberflächenorientierung	194
6.7. Vorangegangene ARPES- und SR-ARPES-Messungen an Pb/Si(557) mit 1,31 ML Bedeckung	196
6.8. Spin-integrierte ARPES-Messungen an der (1,5)-Struktur der Pb/Si(557)-Oberfläche mit $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML	198
6.9. Optische LEED-Bilder der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$	199
6.10. Entwicklung der Drahtstruktur mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$	201
6.11. Spin-aufgelöste MDCs der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$	203
6.12. Komponenten des Spin-Polarisationsvektors senkrecht zu den Stufen der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$	204
6.13. Spin-Polarisation, Spin-Kohärenzlänge und Spin-Bahn-Streuzeiten der Pb/Si(557)-Oberfläche bei $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML und mit Zusatzbedeckung $\delta\Theta_{Pb}$	205
6.14. Schematische Darstellung der Fermi-Fläche von 1,31 ML Pb/Si(557)	207
6.15. Spin-Polarisation der Pb/Si(557)-Oberfläche in $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,80 \text{ \AA}^{-1} = -2g$ mit $\Theta_{Pb} = 1,31$ ML	208

6.16. Spin-aufgelöste MDCs von 1,31 ML Pb/Si(557) und mit Zusatzbedeckung in $k_{[1\bar{1}0]}$ -Richtung 210

C. Tabellenverzeichnis

2.1. Symmetrien einiger Systeme	6
2.2. Spin-Bahn-Aufspaltung ausgewählter Elemente	11
2.3. Mögliche Terme $\alpha_i \cdot \sigma_i$ des Rashba-Effekts bis zur dritten Ordnung in \mathbf{k} für C_{1-} , C_{1v-} , C_{1h-} und C_{3v-} -Symmetrie	16
5.1. Berechnete Spin-Polarisationen der FSMs der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion . . .	112
5.2. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der SIC-Phase in k_x -Richtung . .	120
5.3. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der SIC-Phase in k_y -Richtung bei $k_x = 0,631 \text{ \AA}^{-1}$	120
5.4. Vergleich der gemessenen und berechneten Spin-Polarisation des S1-Bandes der SIC-Phase in k_y -Richtung	142
5.5. Fermi-Wellenvektoren der Spin-integrierten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion	152
5.6. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung	155
5.7. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der $(\sqrt{7} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion parallel zur \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,904 \text{ \AA}^{-1}$)	158
5.8. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase parallel zur \overline{KMK} -Richtung ($k_x = 0,99 \text{ \AA}^{-1}$)	174
5.9. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\overline{\Gamma K}$ -Richtung	175
5.10. Peakparameter des Spin-aufgelösten MDCs der (1,6)-Struktur der DS-Phase in $\overline{\Gamma M}$ -Richtung	176
5.11. Fitparameter zur elektrischen Leitfähigkeit von Pb-Monolagenstrukturen auf Si(111)	181
D.1. Werte der L -, M - und N -, bzw. A -, B - und C -Parameter für Silizium	285
D.2. Werte der Luttinger-Parameter für Silizium	286
D.3. Inverse effektive Masseparameter und effektive Massen des Valenzbandes in Silizium für einige Hochsymmetrierichtungen	287
D.4. Winkelabhängigkeiten von $\mu(\theta, \varphi)$ und $q(\theta, \varphi)$	288
E.1. Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ in $k_{[\overline{112}]}$ -Richtung bei $k_{[\overline{110}]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	291
E.2. Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,04 \text{ ML}$ auf $1,31 \text{ ML}$ Pb/Si(557) in $k_{[\overline{112}]}$ -Richtung bei $k_{[\overline{110}]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	291
E.3. Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,06 \text{ ML}$ auf $1,31 \text{ ML}$ Pb/Si(557) in $k_{[\overline{112}]}$ -Richtung bei $k_{[\overline{110}]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	292

E.4.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	292
E.5.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	292
E.6.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,22$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$	293
E.7.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML in $k_{[\bar{1}\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$	293
E.8.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML in $k_{[\bar{1}\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,3 \text{ \AA}^{-1}$	294
E.9.	Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,8 \text{ \AA}^{-1}$	294

D. Herleitung der effektiven Massen von Löchern im Silizium-Valenzband im Rahmen der $k \cdot p$ -Theorie

Die folgende Beschreibung bildet lediglich einen Bruchteil der Erkenntnisse aus über 60 Jahren ab, in denen u. a. DRESSELHAUS, KIP und KITTEL [587] sowie LUTTINGER und KOHN [588] mit der Theorie der Bewegung von Elektronen und Löchern in Silizium- und Germaniumkristallen begannen, Befunde von Zyklotron-Resonanz-Experimenten (ebenfalls in [588]) zu erklären. Umfassende theoretische Behandlungen auch zu vielen weiteren Kristallen liefern z. B. WINKLER [75] und LEW YAN VOON und WILLATZEN [589].

D.1. Spin-Bahn-Wechselwirkung im Kane-Modell

Da Kristalle periodische Anordnungen von Atomen sind, besitzen sie periodische Potentiale $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, wobei \mathbf{R} ein beliebiger Gittervektor ist. Die Bewegung der Ladungsträger lässt sich durch Lösen der Schrödinger-Gleichung

$$\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{D.1})$$

beschreiben. Als Ansatz für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r})$ der Ladungsträger lässt sich die Bloch-Funktion

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{D.2})$$

mit dem Band-Index n nutzen. In die Schrödinger-Gleichung fließt neben dem Hamilton-Operator des freien Teilchens \mathcal{H}_0 auch der Hamilton-Operator der SOI aus Gl. (2.1) ein:

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SO}})\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E_{n\mathbf{k}}\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{l0}) + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{l0})$ ist dabei das periodische Gitterpotential.

Durch Einsetzen der Bloch-Funktion aus Gl. (D.2) und Eliminierung der ebenen Welle $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ auf beiden Seiten der Gleichung erhält man unter Verwendung des Impuls-Operators

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (\text{D.4})$$

die Schrödinger-Gleichung mit dem periodischen Teil der Bloch-Funktion [590]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ \left(\frac{(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \\ \left(\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) \right) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \\ (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mathbf{k}} + \mathcal{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} + \mathcal{H}_{\text{SO}}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Dabei ist \mathcal{H}_0 der Hamilton-Operator des Teilchens mit Masse m_e im periodischen Potential $V(\mathbf{r})$.

Unter der Annahme $\hbar\mathbf{k} \ll \mathbf{p}$ ist in störungstheoretischer Rechnung

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \quad (\text{D.6})$$

die Störung in 1. Ordnung in \mathbf{k} und

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \quad (\text{D.7})$$

die Störung in 2. Ordnung in \mathbf{k} [590]. Die SOI wird mittels \mathcal{H}_{SO} ebenfalls störungstheoretisch behandelt.

Je nachdem wie viele Bänder in der Berechnung mit einbezogen werden sollen, ergibt sich die Größe der korrespondierenden Matrix \mathcal{H} bzw. die Anzahl an benötigten Basisvektoren zu $n \times n$ bzw. n . In der hier vorgestellten Berechnung wurden lediglich die dem Fermi-Niveau nahegelegensten drei Valenzbänder betrachtet, sodass sich unter Einbeziehung des Elektronenspins $n = 6$ ergibt (KANE-Modell). Andere Modelle benutzen zusätzlich das dem Fermi-Niveau nahegelegenste Leitungsband ($8 \times 8\text{-}\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Theorie, z. B. [589–593]), oder gar bis zu 15 verschiedene Bänder zur störungstheoretischen Korrektur (erweitertes KANE-Modell, [589, 594, 595]).

D.2. Herleitung der Energieeigenwertgleichung im Kane-Modell

Die Basisvektoren $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ in Gl. (D.5) lassen sich mittels der Bloch-Faktoren als

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^6 a_i(\mathbf{k}) u_{i0}(\mathbf{r}) \quad (\text{D.8})$$

darstellen, wobei als Notation häufig

$$\{|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle\} \quad (\text{D.9})$$

benutzt wird. X, Y und Z stellen die p -Typ-Bloch-Funktionen bezüglich der korrespondierenden kristallographischen Richtungen in tetraedischen Kristall dar und die Pfeile stehen entsprechend für die Spin-Orientierung *up* bzw. *down* [592].

Ohne SOI, Einfluss mechanischer Spannung und externe Magnetfelder⁹⁶ kann der 6×6 -Hamilton-Operator \mathcal{H} innerhalb dieser Basis auf zwei gleiche 3×3 -Blöcke $\mathcal{H}_{3 \times 3}$ reduziert werden, da keine Wechselwirkung zwischen Spin *up*- und Spin *down*-Bändern vorliegt, die Bänder also Spin-entartet sind:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{3 \times 3} & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

Diese 3×3 -Blöcke können für Kristalle in Diamantstruktur wie Diamant, Silizium und Germanium in der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{3 \times 3} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mathbf{k}} + \mathcal{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \\ &= \left(E_{V, \text{av}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right) \cdot \mathbf{1}_{3 \times 3} \\ &\quad + \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

geschrieben werden [198, 587, 588]. Die Parameter L , M und N sind dabei materialabhängig und in [587] definiert und die einzelnen Komponenten der $\mathcal{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}$ -Matrix sollen im Folgenden als H_{ij} bezeichnet werden.

Die drei Energieeigenwerte ergeben sich wegen

$$\det(\mathcal{H}_{3 \times 3} - E_i(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{1}_{3 \times 3}) = 0 \quad (\text{D.12})$$

zu

$$E_i(\mathbf{k}) = E_{V, \text{av}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} + \lambda_i, \quad (\text{D.13})$$

wobei λ_i die Eigenwerte der zweiten ausgeschriebenen Matrix in Gl. (D.11) sind. \mathcal{H}_0 ergibt dabei die durchschnittliche Energie der drei Valenzbänder $E_{V, \text{av}}$ am Γ -Punkt (bei $\mathbf{k} = 0$) und

$$\langle \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (\text{D.14})$$

ist der Beitrag des freien Elektrons im Kristall.

Die Berechnung der Determinante resultiert in einem Polynom dritten Grades in der Energie bzw. in \mathbf{k}^2 , soll an dieser Stelle jedoch noch nicht durchgeführt werden, sondern am Ende des Kapitels, nachdem die SOI störungstheoretisch hinzugezogen wurde.

Der Hamilton-Operator \mathcal{H}_{SO} lässt sich für kugelsymmetrisches Potential $V(\mathbf{r})$ (passend für sp^3 -hybridisierte Kristalle wie Silizium) nach [590] mit dem Bahndrehimpulsoperator \mathbf{L} und dem Spin-Drehimpulsoperator \mathbf{S} zu

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{SO}} &= \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \cdot \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

⁹⁶ Mechanische Spannung und externe Magnetfelder erfordern eine detailliertere Diskussion als dies hier gezeigt wird. Da in den durchgeführten Experimenten beide Einflüsse nicht genutzt wurden, kann auf eine Diskussion im Rahmen dieser Arbeit verzichtet werden. Für weitergehende Informationen sei auf die Literatur verwiesen, z. B. [75, 587, 592, 596–599].

umschreiben.

Mittels der in Gl. (D.9) definierten Basisvektoren lässt sich die Stärke der SOI als

$$\Delta_{\text{SO}} = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \langle X | (\nabla V \times \mathbf{p})_y | Z \rangle \quad (\text{D.16})$$

schreiben [592]. Der Hamilton-Operator lässt sich dann als 6×6 -Matrix ausdrücken:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^\dagger & -\mathbf{A} \end{pmatrix} = \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.17})$$

Offensichtlich hebt die SOI zum einen die Spin-Entartung auf, da in den 3×3 -Blöcken \mathbf{B} und \mathbf{B}^\dagger endliche Terme auftreten. Zum anderen koppeln die beiden 3×3 -Blöcke \mathbf{A} und $-\mathbf{A}$ die Valenzbänder untereinander. Die mathematische Beschreibung wechselwirkender Bänder wird in Kap. 2.5 nochmals aufgegriffen, jedoch ist die SOI in diesem konkreten Fall komplizierter und bedarf weiterer Analyse.

Dazu wird zunächst eine Basistransformation des Spin-Bahn-Hamilton-Operators durchgeführt. Da \mathbf{L} und \mathbf{S} vektoriell additiv sind, lässt sich durch den Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} mit Gl. (2.10) der Hamilton-Operator aus Gl. (D.15) in der Basis

$$\begin{aligned} |u_{\text{HH}} \uparrow\rangle &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|X \uparrow\rangle + i|Y \uparrow\rangle), \\ |u_{\text{LH},1}\rangle &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|X \downarrow\rangle + i|Y \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle), \\ |u_{\text{SO},1}\rangle &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|X \downarrow\rangle + i|Y \downarrow\rangle + |Z \uparrow\rangle), \\ |u_{\text{HH}} \downarrow\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|X \downarrow\rangle - i|Y \downarrow\rangle), \\ |u_{\text{LH},2}\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} (|X \uparrow\rangle - i|Y \uparrow\rangle - 2|Z \downarrow\rangle), \\ |u_{\text{SO},2}\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} (|X \uparrow\rangle - i|Y \uparrow\rangle - |Z \downarrow\rangle) \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

schreiben. Dabei werden die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses $j = |\mathbf{J}|$ und seine Quantisierung m_j mit Zuständen $|j, m_j\rangle$ assoziiert.

Innerhalb dieser Basis identifiziert man die Eigenzustände als das HH-Band (schweres Loch, $j = 3/2$, $m_j = \pm 3/2$), LH-Band (leichtes Loch, $j = 3/2$, $m_j = \pm 1/2$) und *Spin-Orbit* SO-Band (Split-off-Loch, $j = 1/2$, $m_j = \pm 1/2$). Die Transformationsmatrix zwischen beiden Basen ist dabei

$$\mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_1 & \mathbf{R}_1 \\ -\mathbf{R}_1^\dagger & \mathbf{S}_1^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & -i/\sqrt{6} & -i/\sqrt{3} \\ 0 & \sqrt{2/3} & -1/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -i/\sqrt{6} & -i/\sqrt{3} & i/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/3} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (\text{D.19})$$

mit den 3×3 -Blöcken \mathbf{R}_1 und \mathbf{S}_1 [198].

Bezogen auf die in Gl. (D.18) angegebene Reihenfolge der Eigenzustände, lässt sich der Spin-Bahn-Hamilton-Operator nun als

$$\mathcal{H}'_{\text{SO}} = \mathbf{U}_1^{-1} \mathcal{H}_{\text{SO}} \mathbf{U}_1 = \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (\text{D.20})$$

schreiben [198]. Daraus ist zudem ersichtlich, dass es eine Verschiebung der Nullpunktsenergie um $-\Delta_{\text{SO}}/3$ gibt, wodurch

$$E_{\text{V,av}} = \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \quad (\text{D.21})$$

ist.

Analog wird $\mathcal{H}_{\mathbf{k},\mathbf{p}}$ unter Berücksichtigung der Nullpunktsenergie transformiert:

$$\mathcal{H}'_{\mathbf{k},\mathbf{p}} - \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \cdot \mathbb{1}_{3 \times 3} = \mathbf{U}_1^{-1} \mathcal{H}_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \mathbf{U}_1 - \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \cdot \mathbb{1}_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{F}_1 \\ -\mathbf{F}_1^\dagger & \mathbf{G}_1^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{D.22})$$

Die 3×3 -Matrizen \mathbf{G}_1 und \mathbf{F}_1 ergeben sich so zu

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) & \frac{-1}{\sqrt{3}}(H_{13} - iH_{23}) & \frac{1}{\sqrt{6}}(H_{13} - iH_{23}) \\ \frac{-1}{\sqrt{3}}(H_{13} + iH_{23}) & \frac{1}{6}(H_{11} + H_{22} + 4H_{33}) & \frac{1}{3\sqrt{2}}(H_{11} + H_{22} - 2H_{33}) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(H_{13} + iH_{23}) & \frac{1}{3\sqrt{2}}(H_{11} + H_{22} - 2H_{33}) & \frac{1}{3}(H_{11} + H_{22} + H_{33}) - \Delta_{\text{SO}} \end{pmatrix} \quad (\text{D.23 a})$$

und

$$\mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{2\sqrt{3}}(H_{11} - H_{22} - 2iH_{12}) & \frac{-1}{\sqrt{6}}(H_{11} - H_{22} - 2iH_{12}) \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}(H_{11} - H_{22} - 2iH_{12}) & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(H_{13} - iH_{23}) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(H_{11} - H_{22} - 2iH_{12}) & \frac{-1}{\sqrt{2}}(H_{13} - iH_{23}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.23 b})$$

Ziel dieser Transformationen ist es, eine Matrix zu erhalten, die so weit wie möglich Block-diagonalisiert ist, um die Berechnung der Eigenenergien $E_i(\mathbf{k})$ über die Determinante des Gesamt-Hamilton-Operators so einfach wie möglich zu gestalten:

$$\det(\mathcal{H} - E_i(\mathbf{k}) \cdot \mathbb{1}_{3 \times 3}) = 0 \quad (\text{D.24})$$

Da Basistransformationen keinen Einfluss auf die Eigenenergien haben, kann die Gesamtenergie der Zustände inklusive SOC nach Gl. (D.13) nun als

$$E_i(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} + \lambda_i + \lambda_{\text{SO},i} \quad (\text{D.25})$$

geschrieben werden, wobei

$$\det(\mathcal{H}'_{\mathbf{k},\mathbf{p}} + \mathcal{H}'_{\text{SO}} - (\lambda_i + \lambda_{\text{SO},i}) \cdot \mathbb{1}_{3 \times 3}) = 0 \quad (\text{D.26})$$

ist.

Mit weiteren Transformationen lässt sich $\mathbf{F} = 0$, also eine Block-Diagonalform von \mathcal{H}' , erreichen, wobei \mathbf{G}_2 eine komplizierte Form annimmt. Jedoch genügt es nach [198] bereits eine Transformation \mathbf{U}_2 durchzuführen, bei der als Ergebnis bis auf F_{23} und F_{32} alle Terme von \mathbf{F}_2 null sind. Dies resultiert für die Determinante in einem Produkt zweier Polynome dritten Grades in $(\lambda_i + \lambda_{\text{SO},i})$, womit die Lösungen mittels der *Cardanischen Formeln* [197] leicht zu finden sind (s. u.).

Die Transformation \mathbf{U}_2 ist dabei folgendermaßen durchzuführen:

$$\mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_2 & \mathbf{R}_2 \\ -\mathbf{R}_2^\dagger & \mathbf{S}_2^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{D.27 a})$$

mit

$$\mathbf{S}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i[(\chi+\eta)/2-\pi/4]} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i[(\chi-\eta)/2-\pi/4]} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i[(\chi-\eta)/2-\pi/4]} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.27 b})$$

$$\mathbf{R}_2 = \frac{-1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i[(\chi+\eta)/2-\pi/4]} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i[(\chi-\eta)/2-\pi/4]} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i[(\chi-\eta)/2-\pi/4]} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.27 c})$$

wobei die Definitionen

$$Xe^{i\chi} = -(H_{11} - H_{22} - 2iH_{12}), \quad (\text{D.27 d})$$

$$Ye^{i\eta} = H_{13} - iH_{23}, \quad (\text{D.27 e})$$

$$Z = H_{11} + H_{22} - 2H_{33} \quad (\text{D.27 f})$$

benutzt werden. So erhält man für \mathbf{G}_2 und \mathbf{F}_2 [198]:

$$\mathbf{G}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) & \frac{-1}{\sqrt{3}}(Y - iX/2) & \frac{1}{\sqrt{6}}(Y + iX) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(Y - iX/2) & \frac{1}{6}(H_{11} + H_{22} + 4H_{33}) & \frac{1}{\sqrt{2}}(Z/3 + i\cos(\chi - 2\eta)) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(Y - iX) & \frac{1}{\sqrt{2}}(Z/3 - i\cos(\chi - 2\eta)) & \frac{1}{3}(H_{11} + H_{22} + H_{33}) - \Delta_{\text{SO}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.28 a})$$

$$\mathbf{F}_2 = \frac{Y}{\sqrt{2}} \sin(\chi - 2\eta) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.28 b})$$

Damit ergibt sich die (hier diskutierte) finale Form für den Hamilton-Operator zu

$$\mathcal{H}'' = \mathbf{U}_2^{-1} \mathcal{H}' \mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2 & \mathbf{F}_2 \\ -\mathbf{F}_2^\dagger & \mathbf{G}_2^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{D.29})$$

Gl. (D.26) für die Eigenenergien $E_i(\mathbf{k})$ lässt sich nun mittels der mathematischen Identität

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & x \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & -x & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & x & 0 & a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \left[\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} - a_{11}x^2 \right]^2 \quad (\text{D.30})$$

aus [600] mit

$$H'_{jj} = H_{jj} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \quad (\text{D.31})$$

zu

$$\begin{aligned} 0 &= H'_{11}H'_{22}H'_{33} + 2H_{12}H_{23}H_{13} - H'_{11}H_{23}^2 - H'_{22}H_{13}^2 - H'_{33}H_{12}^2 \\ &\quad - \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3}(H'_{11}H'_{22} + H'_{11}H'_{33} + H'_{22}H'_{33} - H_{12}^2 - H_{13}^2 - H_{23}^2) \\ &= \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k})\right)^2 \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k})\right) - \Delta_{\text{SO}}\right] \\ &\quad + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k})\right) \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k})\right) - \frac{2\Delta_{\text{SO}}}{3}\right] \cdot (H_{11} + H_{22} + H_{33}) \\ &\quad + \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k})\right) - \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3}\right] \cdot \left[(H_{11}H_{22} + H_{11}H_{33} + H_{22}H_{33}) - (H_{12}^2 + H_{13}^2 + H_{23}^2)\right] \\ &\quad + \left[H_{11}H_{22}H_{33} + 2H_{12}H_{13}H_{23} - (H_{11}H_{23}^2 + H_{22}H_{13}^2 + H_{33}H_{12}^2)\right] \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

vereinfachen [198]. Anhand von Gl. (D.30) lässt sich zudem erkennen, dass jeweils zwei Energieeigenwerte entartet vorliegen.

Durch die vorgenommenen Basistransformationen und Berücksichtigung der SOI bilden zudem die Basis-Wellenfunktionen aus Gl. (D.18) lediglich für $\mathbf{k} = 0$ die Eigenzustände korrekt ab. Für $\mathbf{k} \neq 0$ mischen sich die Wellenfunktionen mittels Linearkombinationen [592]. Im Folgenden sollen zur Vereinfachung dennoch die kompletten Bänder nach ihrem Zustand bei $\mathbf{k} = 0$ nach HH-, LH- und SO-Band benannt werden.

D.3. Parameterwahl, Winkelabhängigkeiten und Lösung der Energieeigenwertgleichung

An Gl. (D.32) lassen sich in dieser Form noch keine Dispersionen der einzelnen Bänder ablesen. Jedoch lässt sich dies mittels Einsetzen der L -, M - und N -Parameter aus Gl. (D.11) für die Einzelterme ändern:

$$(H_{11} + H_{22} + H_{33}) = (L + 2M)\mathbf{k}^2, \quad (\text{D.33 a})$$

$$(H_{11}H_{22} + H_{11}H_{33} + H_{22}H_{33}) = [M(M + 2L) + \mu(L - M)^2]\mathbf{k}^4, \quad (\text{D.33 b})$$

$$(H_{12}^2 + H_{13}^2 + H_{23}^2) = \mu N^2 \mathbf{k}^4, \quad (\text{D.33 c})$$

$$H_{11}H_{22}H_{33} = [LM^2 + \mu M(L - M)^2 + q(L - M)^3]\mathbf{k}^6, \quad (\text{D.33 d})$$

$$H_{12}H_{13}H_{23} = qN^3 \mathbf{k}^6, \quad (\text{D.33 e})$$

$$(H_{11}H_{23}^2 + H_{22}H_{13}^2 + H_{33}H_{12}^2) = [\mu MN^2 + 3q(L - M)N^2]\mathbf{k}^6, \quad (\text{D.33 f})$$

mit den beiden Winkelabhängigkeiten

$$\mu(\theta, \varphi) = \sin^2 \theta \cdot (\sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi + \cos^2 \theta), \quad (\text{D.33 g})$$

$$q(\theta, \varphi) = \sin^4 \theta \cdot \cos^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi \quad (\text{D.33 h})$$

aus [601, 602], wobei θ und φ die Winkel der Kugelkoordinaten

$$k_x = k \sin \theta \cdot \cos \varphi, \quad (\text{D.34 a})$$

$$k_y = k \sin \theta \cdot \sin \varphi, \quad (\text{D.34 b})$$

$$k_z = k \cos \theta \quad (\text{D.34 c})$$

sind.

Nun vereinfacht sich Gl. (D.32) zu

$$\begin{aligned} 0 = & \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \right)^2 \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \right) - \Delta_{\text{SO}} \right] \\ & + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \right) \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \right) - \frac{2\Delta_{\text{SO}}}{3} \right] \cdot (L + 2M) \mathbf{k}^2 \\ & + \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - E_i(\mathbf{k}) \right) - \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \right] \cdot \left[M(M + 2L) + \mu(\theta, \varphi) \left((L - M)^2 - N^2 \right) \right] \mathbf{k}^4 \\ & + \left[LM^2 + \mu(\theta, \varphi) M \left((L - M)^2 - N^2 \right) + q(\theta, \varphi) (L - M) \left((L - M)^2 - 3N^2 \right) \right] \mathbf{k}^6, \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

womit ersichtlich wird, dass aus der Winkelabhängigkeit von $\mu(\theta, \varphi)$ und $q(\theta, \varphi)$ eine Richtungsabhängigkeit der Dispersionen der drei Lochbänder folgt. Dieses Phänomen spielt für vielerlei Anwendungen eine wichtige Rolle, da aus der Dispersion der Lochbänder in parabolischer Näherung die effektiven Massen m^* bestimmt werden, die wiederum Einflussparameter z. B. der Loch-Mobilität μ_p und somit der Leitfähigkeit σ_p sind [603].

Die Dispersion der Lochbänder konnte in Pb-induzierten QWSs nahe der Si(111)-Oberfläche im Rahmen dieser Arbeit mit ARPES untersucht werden (s. Kap. 5.2.4). Dabei wurden BMs im \mathbf{K} -Raum in $[11\bar{2}]$ - und $[1\bar{1}0]$ -Richtung gemessen. Aus Gl. (D.35) lassen sich für diese (und alle anderen Richtungen) die Dispersionen von HH-, LH- und SO-Band bestimmen. In der Literatur wurde dabei zumeist lediglich auf den Fall $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ eingegangen und dabei auch nur auf die Hauptrichtungen in Silizium: $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ und $\langle 110 \rangle$ ⁹⁷ [587, 588, 592, 597]. Für einige weitere Richtungen gibt [604] Lösungen für Zinkblende-Kristalle wie z. B. GaAs an. Den Fall $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ betrachten zusätzlich zu $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ [75, 198, 589, 595, 601, 602, 605], ohne jedoch z. B. auf die hier untersuchte $[11\bar{2}]$ -Richtung einzugehen. Im Weiteren sollen deshalb die Energieeigenwerte durch Lösen von Gl. (D.35) für alle relevanten Richtungen und Energiebereiche bestimmt werden.

In der Literatur wird Gl. (D.35) in unterschiedlichen Varianten angegeben. Abhängig von den verwendeten Parametern lassen sich die Dispersionen $E_i(\mathbf{k})$ z. B. einfacher darstellen bzw. kann dadurch auch der orbitale Charakter eines Bandes bestimmt werden (s. u.). Ausgehend von den in [587] von DRESSELHAUS, KIP und KITTEL eingeführten Parametern L , M und N werden daher zunächst einige dieser Parameter definiert und danach weitergehend analysiert.

Im Energiebereich $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ ist es sinnvoll, die ebenfalls in [587] definierten Parameter

⁹⁷ Miller'sche Indizes in spitzen Klammern geben die Menge aller äquivalenten Richtungen $[hkl]$ an, d. h. z. B. für $\langle 100 \rangle$: $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$ und $[00\bar{1}]$.

L	M	N	A	B	C	aus/nach
-7,2	-3,9	-7,67	$-4,0\pm 0,2$	$-1,1\pm 0,5$	$-4,0\pm 0,5$	Theorie, [587]
-7,2	-3,9	-7,7	-4,0	-1,1	-4,0	Theorie, [198]
-6,8	-4,5	$-9,36\pm 0,1$	$-4,28\pm 0,02$	$-0,75\pm 0,04$	-5,2	Exp., [597]
-7,6	-3,7	-7,35	-4,0	-1,3	-3,6	Exp., [606]
-6,5	-4,6	$-8,75\pm 0,25$	-4,27	$-0,63\pm 0,08$	-4,9	Exp., [607]

Tabelle D.1: Werte der L -, M - und N -, bzw. A -, B - und C^2 -Parameter für Silizium: Die Werte sind angegeben in Einheiten von $\hbar^2/(2m_e)$.

A , B und C^2 zu verwenden⁹⁸:

$$A = \frac{1}{3}(L + 2M) + \frac{\hbar^2}{2m_e}, \quad (\text{D.36 a})$$

$$B = \frac{1}{3}(L - M), \quad (\text{D.36 b})$$

$$C^2 = \frac{1}{3} [N^2 - (L - M)^2]. \quad (\text{D.36 c})$$

Werte für L , M und N , bzw. A , B und C in Silizium sind in Tab. D.1 angegeben.

LUTTINGER führte in [599] die später nach ihm benannten dimensionslosen Luttinger-Parameter γ_1 , γ_2 , γ_3 , κ und q ein, mit denen sich die inversen effektiven Massen m^{*-1} besonders gut darstellen lassen. Im Folgenden werden resultierende Faktoren mit κ und q aber vernachlässigt, da diese den Einfluss eines externen Magnetfeldes auf die effektiven Massen beschreiben. Dies ist jedoch für die Untersuchungen in dieser Arbeit irrelevant, zumindest für *Bulk*-Silizium. Berechnungen und experimentelle Befunde unter Einfluss von κ und q finden sich z. B. in [588, 593, 594, 599, 608]. Die Luttinger-Parameter sind wie folgt definiert:

$$\gamma_1 = -\frac{1}{3}(L + 2M) \frac{2m_e}{\hbar^2} - 1, \quad (\text{D.37 a})$$

$$\gamma_2 = -\frac{1}{6}(L - M) \frac{2m_e}{\hbar^2}, \quad (\text{D.37 b})$$

$$\gamma_3 = -\frac{1}{6}N \frac{2m_e}{\hbar^2}. \quad (\text{D.37 c})$$

Die Subtraktion von „-1“ im Term für γ_1 ist dabei mit der Masse des freien Elektrons verknüpft. Werte für die Luttinger-Parameter in Silizium sind in Tab. D.2 angegeben.

Um den Einfluss der jeweiligen Symmetrie (d. h. des orbitalen Charakters) besser darzustellen, führte FOREMAN die nach ihm benannten Parameter σ , π und δ (passend zur Notation der Orbitale s , p und d) in [610] ein, wobei er jedoch die f -Orbitale vernachlässigte, die im Wesentlichen in den Valenzbändern von Halbleitern irrelevant sind [610, 611]:

$$\sigma \approx \bar{\gamma} - \frac{1}{2}\delta, \quad (\text{D.38 a})$$

$$\pi \approx \mu + \frac{3}{2}\delta, \quad (\text{D.38 b})$$

$$\delta \approx \frac{1}{9}(1 + \gamma_1 + \gamma_2 - 3\gamma_3) \quad (\text{D.38 c})$$

⁹⁸ In [588, 599] wurden die Parameter L , M und N noch als A , B und C bezeichnet.

mit

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{2}(\gamma_2 + \gamma_3), \quad (\text{D.38 d})$$

$$\mu = \frac{1}{2}(\gamma_3 - \gamma_2). \quad (\text{D.38 e})$$

Werte für die Foreman-Parameter in Silizium sind in ebenfalls Tab. D.2 angegeben. Die umgekehrten Relationen im Verhältnis zu den Luttinger-Parametern lauten

$$\gamma_1 \approx 2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1, \quad (\text{D.39 a})$$

$$\gamma_2 \approx \sigma - \pi + 2\delta, \quad (\text{D.39 b})$$

$$\gamma_3 \approx \sigma + \pi - \delta. \quad (\text{D.39 c})$$

ASCHE und VON BORZESZKOWSKI haben Gl. (D.35) mithilfe der Parameter A , B , C und N ausgedrückt [601]. So ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 = & E^2 \cdot (E + \Delta_{\text{SO}}) - E \cdot \left(E + \frac{2\Delta_{\text{SO}}}{3} \right) \cdot 3A\mathbf{k}^2 \\ & + \left(E + \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \right) \cdot 3 \left[(A^2 - B^2) - \mu(\theta, \varphi)C^2 \right] \mathbf{k}^4 \\ & + \left[-(A + 2B)(A - B)^2 + 3\mu(\theta, \varphi)(A - B)C^2 - q(\theta, \varphi)(N - 3B)^2(2N + 3B) \right] \mathbf{k}^6. \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

Diese Gleichung vereinfacht sich für $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ mit der Näherung $\mathbf{k}^6/\Delta_{\text{SO}} \approx 0$ zu

$$0 \approx E^2 - 2A\mathbf{k}^2 E + \left[(A^2 - B^2) - \mu(\theta, \varphi)C^2 \right] \mathbf{k}^4. \quad (\text{D.41})$$

Man erhält somit als Lösungen für die Energieeigenwerte

$$E_{\text{HH}}(\mathbf{k}) = A\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}^2 \sqrt{B^2 + \mu(\theta, \varphi)C^2}, \quad (\text{D.42 a})$$

$$E_{\text{LH}}(\mathbf{k}) = A\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}^2 \sqrt{B^2 + \mu(\theta, \varphi)C^2}, \quad (\text{D.42 b})$$

$$E_{\text{SO}}(\mathbf{k}) = A\mathbf{k}^2 - \Delta_{\text{SO}}. \quad (\text{D.42 c})$$

Die dritte Lösung $E_{\text{SO}}(\mathbf{k})$ erhält man direkt aus Gl. (D.40). Da in Silizium $\Delta_{\text{SO}} = 44 \text{ meV}$ ist [612, 613], ist der Anwendungsbereich dieser Näherung weitestgehend eingeschränkt.

Für $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ lässt sich Gl. (D.40) als

$$\begin{aligned} 0 = & E^3 - E^2 \cdot 3A\mathbf{k}^2 + E \cdot 3 \left[(A^2 - B^2) - \mu(\theta, \varphi)C^2 \right] \mathbf{k}^4 \\ & + \left[-(A + 2B)(A - B)^2 + 3\mu(\theta, \varphi)(A - B)C^2 - q(\theta, \varphi)(N - 3B)^2(2N + 3B) \right] \mathbf{k}^6 \end{aligned} \quad (\text{D.43})$$

γ_1	γ_2	γ_3	κ	q	σ	π	δ	aus/nach
4,22	0,39	1,44	-0,26	0,01	0,843	0,74	0,143	Theorie, [594]
4,23	0,31	1,46	—	—	0,821	0,768	0,129	Exp., [607]
4,285	0,339	1,446	—	—	0,821	0,768	0,143	Exp., [609]

Tabelle D.2: Werte der Luttinger-Parameter für Silizium: Für die hier gemachten Berechnungen wurden im Weiteren die Parameter von HENSEL (Werte in [609]) benutzt, aus [594, 602].

Richtung (Energie)	Schweres Loch		Leichtes Loch		Split-off Loch	
	Inv. Masseparameter	m_{HH}^{*-1}	Inv. Masseparameter	m_{LH}^{*-1}	Inv. Masseparameter	m_{SO}^{*-1}
$(E \ll \Delta_{\text{SO}})$						
$\langle 100 \rangle$	$\gamma_1 - 2\gamma_2$	3,607	$\gamma_1 + 2\gamma_2$	4,963	γ_1	4,285
$\langle 111 \rangle$	$\gamma_1 - 2\gamma_3$	1,393	$\gamma_1 + 2\gamma_3$	7,177	γ_1	4,285
$\langle 110 \rangle$	$\gamma_1 - \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2}$	1,758	$\gamma_1 + \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2}$	6,812	γ_1	4,285
$\langle 112 \rangle$	$\gamma_1 - \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2}$	1,758	$\gamma_1 + \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2}$	6,812	γ_1	4,285
$(E \gg \Delta_{\text{SO}})$						
$\langle 100 \rangle$	$\gamma_1 - 2\gamma_2$	3,607	$\gamma_1 - 2\gamma_2$	3,607	$\gamma_1 + 4\gamma_2$	5,641
$\langle 111 \rangle$	$\gamma_1 - 2\gamma_3$	1,393	$\gamma_1 - 2\gamma_3$	1,393	$\gamma_1 + 4\gamma_3$	10,069
$\langle 110 \rangle$	$\gamma_1 + \gamma_2 - 3\gamma_3$	0,286	$\gamma_1 - 2\gamma_2$	3,607	$\gamma_1 + \gamma_2 + 3\gamma_3$	8,962
$\langle 112 \rangle$	$\gamma_1 + (\gamma_2 + \gamma_3)/2$	1,082	$\gamma_1 - \gamma_2 - \gamma_3$	2,5	$\gamma_1 + (\gamma_2 + \gamma_3)/2$	9,273
	$-\frac{1}{2}\sqrt{(3\gamma_2 - \gamma_3)^2 + 32\gamma_3^2}$				$+\frac{1}{2}\sqrt{(3\gamma_2 - \gamma_3)^2 + 32\gamma_3^2}$	0,108
$(E \ll \Delta_{\text{SO}})$						
$\langle 100 \rangle$	$6\pi - 1$		$4\sigma + 2\pi + 8\delta - 1$		$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$	
$\langle 111 \rangle$	$2\pi + 6\delta - 1$		$4\sigma + 6\pi + 2\delta - 1$		$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$	
$\langle 110 \rangle$			$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$		$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$	
			$-\sqrt{4(\sigma^2 + \sigma\pi + \pi^2) - 2\delta(\sigma + 5\pi) + 7\delta^2}$		$+\sqrt{4(\sigma^2 + \sigma\pi + \pi^2) - 2\delta(\sigma + 5\pi) + 7\delta^2}$	
$\langle 112 \rangle$			$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$		$2\sigma + 4\pi + 4\delta - 1$	
			$-\sqrt{4(\sigma^2 + \sigma\pi + \pi^2) - 2\delta(\sigma + 5\pi) + 7\delta^2}$		$+\sqrt{4(\sigma^2 + \sigma\pi + \pi^2) - 2\delta(\sigma + 5\pi) + 7\delta^2}$	
$(E \gg \Delta_{\text{SO}})$						
$\langle 100 \rangle$	$6\pi - 1$		$6\pi - 1$		$6\sigma + 12\delta - 1$	
$\langle 111 \rangle$	$2\pi + 6\delta - 1$		$2\pi + 6\delta - 1$		$6\sigma + 8\delta - 1$	
$\langle 110 \rangle$	$9\delta - 1$		$6\pi - 1$		$6\sigma + 6\pi + 3\delta - 1$	
$\langle 112 \rangle$	$3\sigma + 4\pi + \frac{9}{2}\delta - 1 - \frac{1}{2}[(2\sigma + 4\pi - 3\delta)^2 + (2\pi - 4\delta)^2 + 4(2\sigma^2 - \pi^2)]^{1/2}$		$4\pi + 3\delta - 1$		$3\sigma + 4\pi + \frac{9}{2}\delta - 1 + \frac{1}{2}[(2\sigma + 4\pi - 3\delta)^2 + (2\pi - 4\delta)^2 + 4(2\sigma^2 - \pi^2)]^{1/2}$	

Tabelle D.3: Inverse effektive Masseparameter und effektive Massen des Valenzbandes in Silizium für einige Hochsymmetrierichtungen: Oben mit Luttinger-Parametern γ_i (zum Teil aus [602]) und errechnete Zahlenwerte mit Luttinger-Parametern aus [602, 609]; unten mit Foreman-Parametern σ, π, δ .

	<100>	<111>	<110>	<112>
$\mu(\theta, \varphi)$	0	$1/3$	$1/4$	$1/4$
$q(\theta, \varphi)$	0	$1/27$	0	$1/54$

Tabelle D.4: Winkelabhängigkeiten von $\mu(\theta, \varphi)$ und $q(\theta, \varphi)$.

schreiben, die Energieeigenwerte lassen sich mittels der Luttinger-Parameter jedoch einfacher berechnen.

Mit Hilfe der Luttinger-Parameter hat HUMPHREYS die Lösungen von Gl. (D.35) für beide Energiebereiche, $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ und $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$, berechnet [602]. Die dort angegebenen Gleichungen und Parameter weisen in der abgedruckten Version jedoch zum Teil Vorzeichenfehler auf⁹⁹, die errechneten und abgedruckten reziproken effektiven Massen m^{*-1} sind aber richtig. Die richtige Gleichung lautet

$$\begin{aligned}
 0 = & E^2 \cdot (E + \Delta_{\text{SO}}) + E \cdot \left(E + \frac{2\Delta_{\text{SO}}}{3} \right) \cdot 3\gamma_1 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right) \\
 & + \left(E + \frac{\Delta_{\text{SO}}}{3} \right) \cdot 3 \left[\gamma_1^2 - 4\gamma_2^2 + 12\mu(\theta, \varphi)(\gamma_2^2 - \gamma_3^2) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right)^2 \\
 & + \left[\gamma_1^3 - 12\gamma_1\gamma_2^2 + 16\gamma_2^3 + 36\mu(\theta, \varphi)(\gamma_2^2 - \gamma_3^2)(\gamma_1 - 2\gamma_2) \right. \\
 & \left. + 216q(\theta, \varphi)(\gamma_2^3 - 3\gamma_2\gamma_3^2 + 2\gamma_3^3) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right)^3.
 \end{aligned} \tag{D.44}$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind in Tab.D.3 zusammengefasst. Die dort angegebenen Werte Γ_i stehen mit der jeweiligen Dispersion über

$$E_{\text{HH}}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \Gamma_{\text{HH}}, \tag{D.45 a}$$

$$E_{\text{LH}}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \Gamma_{\text{LH}}, \tag{D.45 b}$$

$$E_{\text{SO}}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \Gamma_{\text{SO}} - \Delta_{\text{SO}} \tag{D.45 c}$$

in Beziehung. Als Lösungsansatz wurde dabei jeweils

$$\begin{aligned}
 0 = & (E - E_{\text{HH}}(\mathbf{k})) \cdot (E - E_{\text{LH}}(\mathbf{k})) \cdot (E - E_{\text{SO}}(\mathbf{k})) \\
 = & E^3 - E^2 \cdot [E_{\text{HH}}(\mathbf{k}) + E_{\text{LH}}(\mathbf{k}) + E_{\text{SO}}(\mathbf{k})] \\
 & + E \cdot [E_{\text{HH}}(\mathbf{k})E_{\text{LH}}(\mathbf{k}) + E_{\text{HH}}(\mathbf{k})E_{\text{SO}}(\mathbf{k}) + E_{\text{LH}}(\mathbf{k})E_{\text{SO}}(\mathbf{k})] \\
 & - E_{\text{HH}}(\mathbf{k})E_{\text{LH}}(\mathbf{k})E_{\text{SO}}(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{D.46}$$

zwecks Koeffizientenvergleich benutzt.

Zu Diskutieren bleiben die Winkelabhängigkeiten von $\mu(\theta, \varphi)$ und $q(\theta, \varphi)$. Mit den Kugelkoordinaten aus Gl. (D.34) erhält man die in Tab.D.4 dargestellten Werte für die Hauptrichtungen. Interessant ist zudem die Darstellung für beliebige Richtungen in der (111)-Ebene.

⁹⁹ Dies fällt im Vergleich mit Gl. (D.40) von ASCHE und VON BORZESZKOWSKI und in der Herleitung von KANE [198] auf.

Diese lassen sich durch Linearkombination der Einheitsvektoren in $[1\bar{1}0]$ - und $[11\bar{2}]$ -Richtung ausdrücken:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}(\alpha) &= \cos \alpha \cdot \mathbf{e}_{[11\bar{2}]} + \sin \alpha \cdot \mathbf{e}_{[1\bar{1}0]} \\ &= \cos \alpha \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} + \sin \alpha \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{D.47})$$

Durch Umstellen der Gleichung erhält man die Abhängigkeiten $\theta(\alpha)$ und $\varphi(\alpha)$. Mit diesen lassen sich $\mu(\alpha)$ und $q(\alpha)$ zu

$$\begin{aligned} \mu(\alpha) &= \frac{1}{4}, \\ q(\alpha) &= \frac{1}{54} \cos^2(3\alpha) \end{aligned} \quad (\text{D.48})$$

bestimmen.

Für $|E| \ll \Delta_{\text{SO}}$ vereinfacht sich Gl. (D.44) so zu

$$0 \approx \Delta_{\text{SO}} \left[E^2 + 2E\gamma_1 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right) + (\gamma_1^2 - \gamma_2^2 - 3\gamma_3^2) \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right)^2 \right] \quad (\text{D.49})$$

mit den Lösungen

$$E_{\text{HH}}(\mathbf{k}) = - \left[\gamma_1 + \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right), \quad (\text{D.50 a})$$

$$E_{\text{LH}}(\mathbf{k}) = - \left[\gamma_1 - \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right), \quad (\text{D.50 b})$$

$$E_{\text{SO}}(\mathbf{k}) = -\gamma_1 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right) - \Delta_{\text{SO}}. \quad (\text{D.50 c})$$

Im Fall $|E| \gg \Delta_{\text{SO}}$ wird Gl. (D.44) zu

$$\begin{aligned} 0 &= E^3 + E^2 \cdot 3\gamma_1 \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right) + E \cdot 3 \left[\gamma_1^2 - \gamma_2^2 - 3\gamma_3^2 \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right)^2 \\ &\quad + \left[\gamma_1^3 - 3\gamma_1\gamma_2^2 - 9\gamma_1\gamma_3^2 - 2\gamma_2^3 + 18\gamma_2\gamma_3^2 + 4 \cos^2(3\alpha) \cdot (\gamma_2^3 - 3\gamma_2\gamma_3^2 + 2\gamma_3^3) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \right)^3. \end{aligned} \quad (\text{D.51})$$

Die reellen, analytischen Lösungen dieser Gleichung lassen sich mittels der *Cardanischen Formeln* [197] ermitteln. Sie lassen sich mithilfe von trigonometrischen Funktionen in der

Form von Gl. (D.45) als

$$E_{\text{HH}}(\mathbf{k}(\alpha)) = - \left[\gamma_1 + 2\sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \omega(\alpha)\right) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right), \quad (\text{D.52 a})$$

$$E_{\text{LH}}(\mathbf{k}(\alpha)) = \left[-\gamma_1 + 2\sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \cos\left(-\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \omega(\alpha)\right) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right), \quad (\text{D.52 b})$$

$$E_{\text{SO}}(\mathbf{k}(\alpha)) = \left[-\gamma_1 + 2\sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \omega(\alpha)\right) \right] \cdot \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) - \Delta_{\text{SO}} \quad (\text{D.52 c})$$

mit

$$\mathbf{k}(\alpha) = k \cdot (\cos(\alpha), \sin(\alpha)), \quad (\text{D.52 d})$$

$$\omega(\alpha) = \frac{2 \sin^2(3\alpha) \cdot (\gamma_2^3 - 3\gamma_2\gamma_3^2 + 2\gamma_3^3) - \gamma_2(\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2) - 4\gamma_3^3}{(\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2)^{3/2}} \quad (\text{D.52 e})$$

darstellen, wobei mit $\mathbf{k}(\alpha)$ der 2D-Wellenvektor in der (111)-Ebene mit dem Einheitsvektor $(\cos(\alpha), \sin(\alpha))$ nach Gl. (D.47) verwendet wird.

E. Fit- und Modellparameter der SR-ARPES-Messungen an 1,31 ML Pb/Si(557)

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell) \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}
2	+0,303	0,393	5,095	+0,3	+0,003
3	+0,095	0,196	10,227	+0,1	-0,005
4	-0,100	0,314	6,372	-0,1	0
5	-0,279	0,273	7,326	-0,3	+0,021
6	-0,490	0,265	7,547	-0,5	+0,010
7	-0,660	0,368	5,438	-0,7	+0,040
8	-0,813	0,396	5,049	-0,9	+0,087

Tabelle E.1: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$: Daten reproduziert aus [35], grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (a) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell)* \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}	xy -Polarisationswinkel** $^{\circ}$	S_z $^{\circ}$	Spin-Polarisationsgrad %
1	+0,543	0,088	22,800	+0,5	+0,043	+83,4	+3,9	79,3
2	+0,360	0,225	8,883	+0,3	+0,060	-110,0	+65,7	24,4
3	+0,091	0,134	14,941	+0,1	-0,009	+71,7	-14,7	62,8
4	-0,156	0,173	11,588	-0,1	-0,056	-112,0	+33,1	67,2
5	-0,343	0,162	12,346	-0,3	-0,043	+84,3	-5,4	20,6
6	-0,473	0,207	9,664	-0,5	+0,027	-96,8	-31,9	27,1
7	-0,615	0,171	11,703	-0,7	+0,085	+130,0	-4,1	34,1
8	-0,836	0,192	10,421	-0,9	+0,074	-114,0	-5,1	20,6

* Modell für 1,31 ML Pb/Si(557).

** $90^{\circ} = [1\bar{1}0]$ -Richtung (x), $0^{\circ} = [11\bar{2}]$ -Richtung (y).

Tabelle E.2: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,04 \text{ ML}$ auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{ \AA}^{-1}$, grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (b) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell*) \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
2	+0,269	0,198	10,077	+0,3	-0,031	-40,8	+30,7	15,5
3	+0,068	0,121	16,497	+0,1	-0,032	+64,3	+10,2	57,5
4	-0,108	0,198	10,110	-0,1	-0,008	-72,9	-10,2	13,5
5	-0,336	0,212	9,429	-0,3	-0,036	+65,6	+2,5	27,1
6	-0,483	0,248	8,078	-0,5	+0,017	-121,0	-10,6	25,4
7	-0,611	0,184	10,908	-0,7	+0,089	+60,6	-57,0	25,9
8	-0,785	0,267	7,498	-0,9	+0,115	-137,0	+15,6	33,7
9	-0,936	0,242	8,282	-1,1	+0,164	+80,1	-10,7	99,9
10	-1,103	0,190	10,518	-1,3	+0,197	-129,0	-39,0	36,0
11	-1,273	0,178	11,266	-1,5	+0,227	+125,0	-43,0	46,5

* Modell für 1,31 ML Pb/Si(557).

Tabelle E.3: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,06$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}12]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}10]} = \pm 0 \text{\AA}^{-1}$, grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (c) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell*) \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
3	+0,064	0,158	12,625	+0,1	-0,036	+62,2	+9,1	75,3
4	-0,080	0,170	11,788	-0,1	+0,010	-101,0	-1,6	99,9
5	-0,342	0,283	7,061	-0,3	-0,042	+31,6	-20,4	20,7
6	-0,511	0,208	9,601	-0,5	-0,011	-87,0	-68,6	19,6
7	-0,620	0,076	26,157	-0,7	+0,080	+83,3	-69,1	20,0
8	-0,777	0,290	6,899	-0,9	+0,123	-116,0	-54,2	19,1
9	-0,915	0,125	15,996	-1,1	+0,185	+77,0	-28,7	77,7
10	-1,062	0,184	10,891	-1,3	+0,238	-136,0	-49,9	24,1

* Modell für 1,31 ML Pb/Si(557).

Tabelle E.4: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}12]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}10]} = \pm 0 \text{\AA}^{-1}$, grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (d) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell*) \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
1	+0,373	0,156	12,829	+0,5	-0,127	+40,7	+27,5	68,2
2	+0,214	0,092	21,633	+0,3	-0,086	-120,0	-81,5	4,6
3	+0,059	0,176	11,352	+0,1	-0,041	+65,5	-1,3	64,9
4	-0,086	—**	—**	-0,1	+0,014	-99,3	+23,3	100
5	-0,317	0,266	7,515	-0,3	-0,017	+71,4	-7,0	33,8
6	-0,485	0,238	8,390	-0,5	+0,015	-118,0	+22,2	45,6
7	-0,602	0,163	12,242	-0,7	+0,098	+116,0	+3,1	43,5

* Modell für 1,31 ML Pb/Si(557).

** Halbwertsbreite aus Fit kleiner als physikalisch möglich (Vgl. Instrumentenfunktion).

Tabelle E.5: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,1$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}12]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}10]} = \pm 0 \text{\AA}^{-1}$, grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (e) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	Position (Modell) [*] \AA^{-1}	Abweichung absolut \AA^{-1}	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
-**	-0,113	0,274	7,312	-0,1	-0,011	+81,2	-44,9	21,7
-**	-0,348	0,257	7,793	-0,3	-0,048	-130,0	-3,9	5,6
-**	-0,495	0,220	9,102	-0,5	+0,005	+71,7	+66,1	8,7
-**	-0,602	-***	-***	-0,7	+0,098	-76,2	-35,0	11,4
-**	-0,743	0,206	9,710	-0,9	+0,157	+90,7	+41,6	6,2
-**	-0,940	0,217	9,225	-1,1	+0,160	-92,0	+50,5	4,9
-**	-1,163	0,250	8,014	-1,3	+0,137	+48,8	-68,6	2,0

* Modell für 1,31 ML Pb/Si(557).

** Keine Bandzuordnung möglich, da SODW-Zustand zerstört.

*** Halbwertsbreite aus Fit kleiner als physikalisch möglich (Vgl. Instrumentenfunktion).

Tabelle E.6: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,22$ ML auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} = \pm 0 \text{\AA}^{-1}$, grafische Darstellung des MDCs s. Abb. 6.11 (f) und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.12.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
-e	-0,586	0,178	11,217	-162,0	-5,1	19,0
-d	-0,453	0,191	10,483	-155,0	-52,3	99,9
-c	-0,387	0,219	9,137	+11,0	+66,1	21,4
-b	-0,231	0,137	14,620	+82,0	-42,5	35,4
-a	-0,159	0,118	16,946	-156,0	+83,8	29,7
-*	-0,054	0,162	12,367	-101,0	-35,4	11,1
-*	+0,033	0,179	11,145	-156,0	+20,6	20,2
a	+0,159	0,161	12,389	-81,7	+8,6	46,7
b	+0,231	0,177	11,314	+68,3	+0,8	99,4
c	+0,381	0,210	9,540	-142,0	-6,9	83,1
d	+0,488	0,187	10,723	+26,4	+11,7	46,5
e	+0,556	0,100	19,991	+52,2	-28,5	78,4

* Intensität von Peaks bei $k_{[\bar{1}\bar{1}0]} \approx \pm 0 \text{\AA}^{-1}$ in $k_{[\bar{1}\bar{1}2]}$ -Richtung.

Tabelle E.7: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31$ ML in $k_{[\bar{1}\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}\bar{1}2]} = -0,8 \text{\AA}^{-1}$: Band-Label, grafische Darstellung des MDCs und der Spin-Polarisation s. Abb. 6.15.

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
-b	-0,200	0,092	21,812	-143,0	-7,7	20,3
-a	-0,149	0,094	21,226	+175,0	-7,4	2,4
-*	-0,058	0,123	16,319	-25,6	-55,9	2,2
-*	+0,066	0,104	19,284	+73,5	-7,8	13,6
a	+0,166	0,083	24,059	+29,5	-87,1	0,4
b	+0,196	0,109	18,335	-9,5	-69,0	39,9
c	+0,272	0,128	15,597	+18,0	+5,0	4,1
d	+0,399	0,120	16,671	-69,1	+14,4	43,0
e	+0,435	0,148	13,474	+149,0	-16,3	13,9

* Intensität von Peaks bei $k_{[1\bar{1}0]} \approx \pm 0 \text{\AA}^{-1}$ in $k_{[\bar{1}12]}$ -Richtung.

Tabelle E.8: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs von Pb/Si(557) mit $\Theta_{\text{Pb}} = 1,31 \text{ ML}$ in $k_{[1\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}12]} = -0,3 \text{\AA}^{-1}$: Band-Label nach Abb. 6.15 (b) (oben), grafische Darstellung des MDCs und der Spin-Polarisation in Abb. 6.16 (a) u. (c).

Band-Label	Position (Fit) \AA^{-1}	FWHM \AA^{-1}	Kohärenzlänge ξ \AA	xy -Polarisationswinkel $^\circ$	S_z $^\circ$	Spin-Polarisationsgrad %
-d	-0,470	0,197	10,146	+154,0	-42,7	21,6
-c	-0,391	0,203	9,855	-79,8	+33,7	24,7
-b	-0,235	0,200	10,010	+123,0	-38,1	28,0
-a	-0,157	0,182	10,987	-72,7	+32,8	47,4
-*	-0,050	0,168	11,928	+130,0	-30,7	15,6
-*	+0,065	0,224	8,917	+6,3	+1,8	0,6
a	+0,160	0,211	9,491	-73,2	+8,2	0,1
b	+0,241	0,127	15,705	-4,7	+46,5	30,2
c	+0,396	0,241	8,301	-151,0	-38,1	23,2
d	+0,470	0,197	10,146	+21,3	+3,8	39,3

* Intensität von Peaks bei $k_{[1\bar{1}0]} \approx \pm 0 \text{\AA}^{-1}$ in $k_{[\bar{1}12]}$ -Richtung.

Tabelle E.9: Fit- und Modellparameter eines Spin-aufgelösten MDCs mit $\delta\Theta_{\text{Pb}} = 0,08 \text{ ML}$ auf 1,31 ML Pb/Si(557) in $k_{[1\bar{1}0]}$ -Richtung bei $k_{[\bar{1}12]} = -0,8 \text{\AA}^{-1}$: Band-Label nach Abb. 6.15 (b) (oben), grafische Darstellung des MDCs und der Spin-Polarisation in Abb. 6.16 (b) u. (d). Die Peak-Positionen und Spin-Polarisationsrichtungen weichen nur wenig von der ideal präparierten Fläche ab (Vgl. Tab. E.7).

Publikationsliste

MÜLLER-SAJAK, D., COSCEEV, A., BRAND, C., HOFMANN, K. R., PFNÜR, H.: *Preparation and electrical characterization of amorphous BaO, SrO and Ba_{0.7}Sr_{0.3}O as high-k gate dielectrics*, Physica Status Solidi C **7**, No. 2, pp. 316–320, 2010.
DOI 10.1002/pssc.200982477.

KRIEG, U., BRAND, C., TEGENKAMP, C., PFNÜR, H.: *One-dimensional collective excitations in Ag atomic wires grown on Si(557)*, Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 014013, 2013.
DOI 10.1088/0953-8984/25/1/014013.

LÜKERMANN, D., BANYOUDEH, S., BRAND, C., SOLOGUB, S., PFNÜR, H., TEGENKAMP, C.: *Growth of epitaxial Bi-films on vicinal Si(111)*, Surface Science **621**, pp. 82–87, 2014.
DOI 10.1016/j.susc.2013.10.024.

KRIEG, U., LICHTENSTEIN, T., BRAND, C., TEGENKAMP, C., PFNÜR, H.: *Origin of metallicity in atomic Ag wires on Si(557)*, New Journal of Physics **17**, 043062, 2015.
DOI 10.1088/1367-2630/17/4/043062.

BRAND, C., PFNÜR, H., LANDOLT, G., MUFF, S., DIL, J.-H., DAS, T., TEGENKAMP, C.: *Observation of correlated spin-orbit order in a strongly anisotropic quantum wire system*, Nature Communications **6**, 8118, 2015.
DOI 10.1038/NCOMMS9118.

PFNÜR, H., BRAND, C., JÄGER, M., RÖNSPIES, J. P., TEGENKAMP, C.: *Between one and two dimensions: Pb/Si(557) close to monolayer coverage*, Surface Science **643**, pp. 79–86, 2015.
DOI 10.1016/j.susc.2015.08.007.

BRAND, C., MUFF, S., FANCIULLI, M., PFNÜR, H., TRINGIDES, M. C., DIL, J.-H., TEGENKAMP, C.: *Spin-resolved band structure of a densely packed Pb monolayer on Si(111)*, Physical Review B **96**, 035432, 2017.
DOI 10.1103/PhysRevB.96.035432.

JÄGER, M., BRAND, C., WEBER, A. P., FANCIULLI, M., DIL, J.-H., PFNÜR, TEGENKAMP, C.: *α -Sn phase on Si(111): Spin texture of a two-dimensional Mott state*, Physical Review B **98**, 165422, 2018.
DOI 10.1103/PhysRevB.98.165422.

HAFKE, B., WITTE, T., BRAND, C., DUDEN, TH., HORN-VON HOEGEN, M.: *Pulsed electron gun for electron diffraction at surfaces with femtosecond temporal resolution and high coherence length*, Review of Scientific Instruments **90**, 045119, 2019.

DOI 10.1063/1.5086124.

OMAMBAC, K. M., HATTAB, H., BRAND, C., JNAWALI, G., N'DIAYE, A. T., CORAUX, J., VAN GASTEL, R., POELSEMA, B., MICHELY, T., MEYER ZU HERINGDORF, F.-J., HORN-VON HOEGEN, M.: *Temperature-Controlled Rotational Epitaxy of Graphene*, Nano Letters **19**, pp. 4594–4600, 2019.

DOI 10.1021/acs.nanolett.9b01565.

HAFKE, B., WITTE, T., BRAND, C., JANOSCHKA, D., DREHER, P., MEYER ZU HERINGDORF, F.-J., HORN-VON HOEGEN, M.: *Structural Dynamics in the Si(111)-In atomic wire systems studied by femtosecond-RHEED: excitation, metastable states and relaxation*, Proceedings of the ALC '19, 228–233, 2019.

HAFKE, B., BRAND, C., WITTE, T., SOTHMANN, B., HORN-VON HOEGEN, M., ERWIN, S. C.: *Thermally Induced Crossover from 2D to 1D Behavior in an Array of Atomic Wires: Silicon Dangling-Bond Solitons in Si(553)-Au*, Physical Review Letters **124**, 016102, 2020.

DOI 10.1103/PhysRevLett.124.016102.

HAFKE, B., WITTE, T., BRAND, C., HORN-VON HOEGEN, M.: *Adsorbate induced manipulation of 1D atomic wires: Degradation of long-range order in the Si(553)-Au system*, Surface Science **700**, 121673, 2020.

DOI 10.1016/j.susc.2020.121673.

OMAMBAC, K. M., PETROVIĆ, M., BAMPOULIS, P., BRAND, C., KRIEGEL, M. A., DREHER, P., JANOSCHKA, D., HAGEMANN, U., HARTMANN, N., VALERIUS, P., MICHELY, T., MEYER ZU HERINGDORF, F.-J., HORN-VON HOEGEN, M.: *Segregation-Enhanced Epitaxy of Borophene on Ir(111) by Thermal Decomposition of Borazine*, ACS Nano **15**, 7.421–7.429, 2021.

DOI 10.1021/acsnano.1c00819.

OMAMBAC, K. M., KRIEGEL, M. A., BRAND, C., FINKE, B., KREMEYER, L., HATTAB, H., JANOSCHKA, D., DREHER, P., MEYER ZU HERINGDORF, F.-J., MOMENI PAKDEHI, D., PIERZ, K., SCHUMACHER, H. W., PETROVIĆ, VAN HOUSELT, A., POELSEMA, B., TRINGIDES, M. C., M., HORN-VON HOEGEN, M.: *Non-conventional bell-shaped diffuse scattering in low-energy electron diffraction from high-quality epitaxial 2D-materials*, Applied Physics Letters **118**, 241902, 2021.

DOI 10.1063/5.0051220.

HANISCH-BLICHARSKI, A., TINNEMANN, V., WALL, S., THIEMANN, GROVEN, T., FORTMANN, J., TAJIK, M., BRAND, C., FROST, B.-O., VON HOEGEN, A., HORN-VON HOEGEN, M.: *Violation of Boltzmann Equipartition Theorem in Angular Phonon Phase Space Slows down Nanoscale Heat Transfer in Ultrathin Heterofilms*, Nano Letters **21**, 7.145–7.151, 2021. DOI 10.1021/acs.nanolett.1c01665.

Vorträge

Quasi-1D metallic Ag-wires grown on vicinal Silicon surfaces,
DPG-Frühjahrstagung 2012, Berlin.

Quasi-1D metallic Ag-wires grown on vicinal Silicon surfaces,
NTH-School for Nanocontacts Symposium 2012, Goslar.

Growth and properties of thin Bismuth films on vicinal Silicon substrates,
DPG-Frühjahrstagung 2013, Regensburg.

Growth of Bismuth on vicinal Si(111) substrates studied by STM and LEED,
FOR 1700 PhD and Postdoc Meeting 2013, Winklmoosalm.

Obsevation of correlated spin-orbit order in a strongly anisotropic quantum wire system,
FOR 1700 PhD and Postdoc Meeting 2014, Hannover.

Observation of correlated spin-orbit order in a strongly anisotropic quantum wire system,
DPG-Frühjahrstagung 2015, Berlin.

From Wires to Layers: Pb/Si(111) and the Role of Spin Orbit-Interaction,
FOR 1700 PhD and Postdoc Meeting 2015, Heidelberg.

Spin-Orbit Interaction in Low-Dimensional Electron Gases of Anisotropic Atomic Layers of Pb on Si Surfaces,
Eingelandener Vortrag 2018, Duisburg.

A new State of Quantum Matter: Spin-Orbit Density Waves in the Pb/Si System,
FOR 1700 Mini-Symposium on „Atomic wires on vicinal Si surfaces“ 2018, Duisburg.

Spin-Orbit Interaction in Low-Dimensional Electron Gases of Anisotropic Atomic Layers of Pb on Si Surfaces,
SFB 1242 PhD Retreat 2018, Meinerzhagen.

Spin-Orbit Interaction in Low-Dimensional Electron Gases of Anisotropic Atomic Layers of Pb on Si Surfaces,
Eingelandener Vortrag 2018, Münster.

Spin-Orbit Interaction in Low-Dimensional Electron Gases of Anisotropic Atomic Layers of Pb on Si Surfaces,

FOR 1700 PhD and Postdoc Meeting 2018, Berlin.

Ultrafast Electron Diffraction in Few Monolayer Pb/Si(111) Films & Temperature Controlled Rotational Epitaxy of Graphene,

SFB 1242 Nationaler Workshop 2019, Wermelskirchen.

Structural Dynamics in the Si(111)-In Atomic Wire Systems Studied by Femtosecond-RHEED: Excitation, Metastable States and Relaxation,

„12th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '19 (ALC '19)“ 2019, Kyoto, Japan.

Structural Dynamics at Surfaces: Current State and Prospects of tr-RHEED,

Teilnahme mit dem Poster an der *Round table poster discussion* im Rahmen des Mini-Symposiums „Ultrafast surface dynamics at the space-time limit“, DPG-Frühjahrstagung „SurfaceScience21“ des Verbandes Oberflächenphysik 2021, online.

Poster

Adsorption of metalorganic molecules on metal-semiconductor systems,
DPG-Frühjahrstagung 2011, Dresden.

Adsorption of metalorganic molecules on metal-semiconductor systems,
NTH-School for Nanocontacts Symposium 2012, Goslar.

Monolayer phases of Ag and Bi grown on vicinal Silicon surfaces,
FOR 1162 International Workshop on „Correlated Electrons at Surfaces and Interfaces“ 2012,
Würzburg.

Ag/Si(557): Tailoring of 1D plasmon dispersion by doping,
Nanowire Network (FOM-1D, FOR 1162, FOR 1700) Workshop on „Physics at the borderline
between 1D and 2D“ 2013, Bad Honnef.

Growth of epitaxial Bismuth films on vicinal Si(111),
DPG-Frühjahrstagung 2014, Dresden.

Evidence of Spin-Orbit Density Waves in Atomic Pb-Wires on Si(557),
DPG-Frühjahrstagung 2014, Dresden.

Observation of correlated spin-orbit order on Pb/Si(557),
FOR 1700 Symposium on „Low dimensional order mediated by interfaces“ 2015, Hannover.

Spin-orbit interaction in Pb monolayers on Si(111),
DPG-Frühjahrstagung 2016, Regensburg.

Spin-polarized surface states of Pb monolayers on Si(111),
SFB 1242 International Conference on „Non-equilibrium Dynamics of Condensed Matter in
the Time Domain“ 2018, Kerkrade, Niederlande.

Spin-polarized surface states of Pb monolayers on Si(111),
SPA-LEED Workshop 2018, Remagen.

*Pulsed electron gun for electron diffraction at surfaces with femtosecond temporal resolution
and high coherence length,*
6th Banff Meeting on „Structural Dynamics“ 2019, Banff, Kanada.

Pulsed electron gun for electron diffraction at surfaces with femtosecond temporal resolution and high coherence length,

SFB 1242 PhD Retreat 2019, Kleve.

Pulsed electron gun for electron diffraction at surfaces with femtosecond temporal resolution and high coherence length,

SFB 1242 Workshop 2019, Wermelskirchen.

Pulsed electron gun for electron diffraction at surfaces with femtosecond temporal resolution and high coherence length,

CENIDE Jahresfeier 2019, Duisburg.

Non-Equilibrium Dynamics of the Phonon System (Projekt B04),

SFB 1242 Begehung 2020, Duisburg.

Driven Phase Transitions at Surfaces: Initial Dynamics, Hidden States and Relaxation (Projekt C03),

SFB 1242 Begehung 2020, Duisburg.

Twisted Graphene on Ir(111) and SiC(0001) Studied by SPA-LEED,

CENIDE Conference 2020, Bergisch Gladbach.

Twisted Graphene on Ir(111) and SiC(0001) Studied by SPA-LEED,

SFB 1242 PhD Retreat 2020, Meinerzhagen.

Lebenslauf

Persönliche Angaben:

Geboren: 21.02.1987 in Rinteln
Familienstand: ledig
Nationalität: deutsch

Ausbildung:

1993–1997: Grundschule Krankenhagen
1997–1999: Orientierungsstufe Rinteln
1999–2006: Gymnasium Ernestinum in Rinteln
Juni 2006: Abitur
2006–2012: Studium der Physik an der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
seit April 2012: Promotionsstudium am Institut für Festkörperphysik der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
April 2012–August 2016: Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Festkörperphysik der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
seit März 2018: Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen

Akademische Abschlüsse:

September 2009: Bachelor of Science in Physik, *Herstellung und Untersuchung amorpher und kristalliner Erdalkalioxide auf n-Si(001)*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover.
Februar 2012: Master of Science in Physik, *STM- und STS-Untersuchungen an epitaktischen Ag-Quantendrähten auf Si(557)*, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover.

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während der Promotion und im Studium begleitet und unterstützt haben.

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. Herbert Pfnür für die Möglichkeit an seinem Lehrstuhl promovieren zu dürfen, für die wissenschaftlichen Diskussionen und die konstruktive Kritik bei der Interpretation von Messdaten und Denkanstöße, die mir einen neuen Blickwinkel auf komplexe Problematiken ermöglicht haben. Nicht weniger maßgeblich am Erfolg dieser Arbeit beteiligt gebührt mein Dank ebenso Prof. Dr. Christoph Tegenkamp, der diese Arbeit in wesentlichen Teilen betreut hat. Sein Interesse am Fortschritt meiner Experimente und die unzähligen Diskussionen haben diese Arbeit erst möglich gemacht. Besonders im Gedächtnis bleiben mir unsere gemeinsamen Experimente an der Swiss Light Source in Villigen, bei denen wir als Gäste von Prof. Dr. Jan Hugo Dil die maßgeblichen Ergebnisse dieser Arbeit erzielen konnten.

Prof. Dr. Jan Hugo Dil gebührt mein Dank auch für die Übernahme des Koreferats meiner Dissertation, ebenso wie Prof. Dr. Eric Jeckelmann für den Vorsitz des Prüfungskollegiums bei der Disputation.

Monika Quentin danke ich für die immer gute Arbeitsatmosphäre, die Zusammenarbeit im STM-Labor und tiefgreifende Diskussionen bei der Analyse unserer beider Messdaten. Philipp Kröger gilt mein Dank für die Unterstützung bei den Leitfähigkeits- und Magneto-transportmessungen. Gabriel Landolt, Stefan Muff und Mauro Fanciulli möchte ich für ihren Einsatz und die gastfreundliche Atmosphäre bei unseren Experimenten am Paul Scherrer Institut danken.

Meinen ehemaligen Betreuern Dirk Müller-Sajak und Jędrzej Schmeidel danke ich für Ihre Hilfestellungen während meiner Bachelor- bzw. Masterarbeit.

Allen weiteren Mitarbeitern der Abteilung ATMOS des Instituts für Festkörperphysik gilt ein ebenso großer Dank für die angenehme Arbeitsatmosphäre, die gute Zusammenarbeit und viele gemeinsame Kaffeepausen. Ein lieber Gruß geht an Karthiga Kanthasamy, mit der ich das Büro teilen durfte.

Den Mitarbeitern der Feinmechanikwerkstatt Andreas Wittig, Jens Wiegmann und Matthias Rabe danke ich dafür, dass sie mir bei technischen Problemen und Umbauarbeiten behilflich waren und auch in Notfällen immer schnell helfen konnten.

Den Doktoranden der Forschergruppe 1700 danke ich für die vielen gemeinsamen Diskussionen über unsere Atomdrahtsysteme, aber auch über die schöne Zeit darüber hinaus.

Der Expertenrunde danke ich für so manches gemeinsame Kaltgetränk und die Diskussionen abseits der Physik.

Ein weiterer Dank gilt meinen Kommilitonen Nils Scharnhorst und Hauke Bensch, die mich nahezu während des gesamten Studiums begleitet haben und Sarah Dittmer und Stephanie Schneider für viele kurzweilige Zugfahrten.

Besonders möchte ich mich bei meinen früheren Physiklehrern Einhard Bormann und Andreas Gruner bedanken. Sie haben mein Interesse für die Physik geweckt und ohne sie wäre ich bestimmt niemals hierhin gekommen.

Bei Prof. Dr. Michael Horn-von Hoegen und Prof. Dr. Frank-J. Meyer zu Heringdorf möchte ich mich dafür bedanken, dass ich seit nunmehr drei Jahren Teil ihres Teams sein darf. Die Arbeit in verantwortungsvoller Position und mit dem fs-Lasersystem hat meinen Horizont deutlich erweitert. Ich hoffe, es gelingen uns noch viele spannende Experimente mit ebenso spannenden und faszinierenden Erkenntnissen bei unserer gemeinsamen Arbeit. Allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe gilt mein Dank für die herzliche Aufnahme in Duisburg und die tolle Arbeitsatmosphäre. Den Kollegen und Doktoranden des Sonderforschungsbereichs 1242 danke ich ebenfalls für die vielen gemeinsamen wissenschaftlichen und nicht ganz so wissenschaftlichen Diskussionen.

Zu guter Letzt möchte ich mich bei meinen Freunden, Bekannten und besonders bei meiner Familie bedanken, die mich immer unterstützt und mir den Rücken gestärkt haben.