



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

**Spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie
magnetischer Nanostrukturen am Beispiel
von bcc-Co/Fe(110), Fe/Mo(110) und
Kupfer-Phthalocyanin/Fe(110)**

Dissertation

zur Erlangung des Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“
am Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik
der Johannes Gutenberg-Universität
in Mainz

vorgelegt von

Torsten Methfessel
geboren in Oldenburg(Oldb)

Mainz, September 2010

1. Berichterstatter:
2. Berichterstatter:

Tag der mündlichen Prüfung: 9. Dezember 2010

D77 Mainzer Dissertation

Kurzfassung

In dieser Arbeit werden, nach einer Einführung in die spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie als experimentelle Methode zur Untersuchung magnetischer Nanostrukturen, Ergebnisse zur spinpolarisierten elektronischen Struktur in Abhängigkeit von der Kristallstruktur am Beispiel ultradünner Co-Schichten sowie in Abhängigkeit von der Magnetisierungsrichtung für ultradünne Fe-Schichten vorgestellt. Hochaufgelöste Messungen zeigen die ortsabhängige Spinpolarisation auf einem einzelnen Kupfer-Phthalocyanin Molekül.

Kobalt wurde durch pseudomorphes Wachstum auf den (110)-Oberflächen der kubisch raumzentrierten Metalle Chrom und Eisen deponiert. Im Unterschied zu früheren Berichten in der Literatur lassen sich nur zwei Lagen Co in der kubisch raumzentrierten (bcc) Ordnung stabilisieren. Die bcc-Co Schichten auf der Fe(110)-Oberfläche zeigen keine Anzeichen von epitaktischen Verzerrungen. Dickere Schichten rekonstruieren in eine dicht gepackte Struktur (hcp/fcc). Durch die bcc Ordnung wird die Spinpolarisation von Kobalt auf $P = 62\%$ erhöht (hcp-Co: $P = 45\%$).

Die temperaturabhängige Spinreorientierung (SRT) ultradünner Filme Fe/Mo(110) wurde mit spinpolarisierter Spektroskopie untersucht. Eine Neuausrichtung der Magnetisierung aus der senkrechten [110]-Achse in die in der Ebene liegenden [001]-Achse wird bei $T = (13, 2 \pm 0, 5)$ K festgestellt, wobei es sich um einen diskontinuierlichen Reorientierungsübergang handelt, d.h. die freie Energie weist innerhalb eines bestimmten Temperaturbereichs gleichzeitig zwei Minima auf. Weiterhin wird in der Mono- und Doppellage Fe/Mo(110) eine Abhängigkeit der elektronischen Struktur von der Ausrichtung der magnetischen Achse und von der Magnetisierung beobachtet.

Die Untersuchung des spinpolarisierten Ladungstransports durch ein Kupfer-Phthalocyanin-Molekül auf der Fe/Mo(110) Oberfläche liefert einen wesentlichen Beitrag zum Verständnis des Spintransports an der Grenzfläche zwischen Metall und organischem Molekül. Die HOMO-LUMO-Energielücke des freien Moleküls wird durch die Wechselwirkung mit der Metalloberfläche mit Grenzflächenzuständen gefüllt. Diese Zustände reduzieren die Spinpolarisation des durch das Molekül fließenden Tunnelstroms durch einen zusätzlichen unpolarisierten Strombeitrag um einen Faktor zwei. Spinpolarisierte hybridisierte Grenzflächenzustände mit größerem Abstand zur Fermi-Energie führen in Abhängigkeit von der Position auf dem Molekül zu weiteren Beiträgen zur effektiven Spinpolarisation. Diese Untersuchungen belegen die Möglichkeit einer effektiven Spininjektion in organische Halbleiter und damit das Potential dieser Materialien für die weitere Entwicklung von Spintronik-Bauteilen.

abstract

This thesis provides an introduction into the technique of spin polarized scanning tunnelling microscopy and spectroscopy as an experimental method for the investigation of magnetic nanostructures. Experimental results for the spin polarized electronic structure depending on the crystal structure of ultrathin Co layers, and depending on the direction of the magnetization for ultrathin Fe layers are presented. High-resolution measurements show the position-dependent spin polarization on a single copper-phthalocyanine molecule deposited on a ferromagnetic surface.

Co was deposited by molecular beam epitaxy on the (110) surface of the body-centered cubic metals Cr and Fe. In contrast to previous reports in the literature only two layers of Co can be stabilized in the body-centered cubic (bcc) structure. The bcc-Co films on the Fe(110) surface show no signs of epitaxial distortions. Thicker layers reconstruct into a closed-packed structure (hcp / fcc). The bcc structure increases the spin-polarization of Co to $P = 62\%$ in comparison to hcp-Co ($P = 45\%$).

The temperature-dependent spinreorientation of ultrathin Fe/Mo(110) films was investigated by spinpolarized spectroscopy. A reorientation of the magnetic easy axis from the [110] direction along the surface normal to the in-plane [001] axis is observed at $T = (13, 2 \pm 0, 5)$ K. This process can be identified as a discontinuous reorientation transition, revealing two simultaneous minima of the free energy in a certain temperature range. The electronic structure of mono- and doublelayer Fe/Mo(110) shows a variation with the reorientation of the magnetic easy axis and with the direction of the magnetization.

The investigation of the spin polarized charge transport through a copper-phthalocyanine molecule on the Fe/Mo(110) surface provides an essential contribution to the understanding of spin-transport at the interface between metal and organic molecule. Due to the interaction with the surface of the metal the HOMO-LUMO energy gap of the free molecule is filled with interface states. These states reduce the spin polarization of the tunneling current through the molecule by an additional unpolarized current contribution, which leads to an energy-independent reduction of the spin polarization by a factor of two. Spinpolarized interface states with larger distance from the Fermi-edge lead to further contributions to the effective spinpolarization that are different for ligands and center positions. These studies demonstrate the possibility of an efficient spin-injection into organic semiconductors, and thus the potential of these materials for further development of spintronic devices.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung und Motivation | 5 |
| 2 | Physikalische Grundlagen und Messmethode | 9 |
| 2.1 | Rastertunnelmikroskopie | 9 |
| 2.1.1 | Theoretische Beschreibung des Tunnelprozesses | 9 |
| 2.2 | Rastertunnelspektroskopie | 13 |
| 2.2.1 | Bestimmung der lokalen Zustandsdichte | 16 |
| 2.2.2 | Spinpolarisierte Rastertunnelspektroskopie | 19 |
| 2.3 | LEED | 20 |
| 2.4 | Magnetische Anisotropie | 22 |
| 3 | Experimentelles | 28 |
| 3.1 | Prinzipieller Aufbau eines Rastertunnelmikroskop | 28 |
| 3.2 | Tunnelspektroskopie | 30 |
| 3.2.1 | Rastertunnelstromspektroskopie | 33 |
| 3.3 | Das Raumtemperatur-STM | 34 |
| 3.4 | Das Tieftemperatur-STM | 37 |
| 3.4.1 | Kalibration des Tieftemperatur-STMs | 43 |
| 3.5 | Probenpräparation | 44 |
| 3.5.1 | Die Substrate | 44 |
| 3.5.2 | Das Verdampfersystem | 47 |
| 3.5.3 | Epitaxie | 50 |
| 3.6 | Präparation der STM-Spitzen | 53 |
| 3.6.1 | Präparation von magnetisch sensitiven STM-Spitzen | 55 |
| 3.7 | STM-Untersuchungen an in-situ gespaltenen Heusler Volumenproben | 56 |
| 3.7.1 | Messungen an Co_2TiSn | 57 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4 | Wachstum und elektronische Struktur von bcc-Kobaltschichten | 68 |
| 4.1 | Präparation der Fe und Cr Unterlagen | 70 |
| 4.1.1 | Das Wachstum von Fe und Cr auf W(110) | 71 |
| 4.1.2 | Das Wachstum von Fe(110) auf Mo(110) | 77 |
| 4.2 | Wachstum ultradünner bcc-Co Filme auf Cr(110) | 85 |
| 4.2.1 | Morphologie und langreichweitige Ordnung | 85 |
| 4.2.2 | Atomar aufgelöste STM-Aufnahmen | 91 |
| 4.2.3 | Spektroskopie | 94 |
| 4.2.4 | Rekonstruktion dickerer Schichten | 96 |
| 4.3 | Wachstum ultradünner bcc-Co Filme auf Fe(110) | 99 |
| 4.3.1 | Morphologie und langreichweitige Ordnung | 100 |
| 4.3.2 | Atomar aufgelöste STM-Aufnahmen | 104 |
| 4.3.3 | Spektroskopie | 107 |
| 4.3.4 | Rekonstruktion verborgener Lagen | 109 |
| 4.4 | Wachstum von Co/Fe(110) bei erhöhter Temperatur | 113 |
| 4.5 | spinpolarisierte STS-Untersuchungen auf Co/Fe(110) | 121 |
| 4.5.1 | Magnetischer Kontrast unbedeckter Fe(110)-Inseln | 122 |
| 4.5.2 | Magnetischer Kontrast von bcc Co/Fe(110) | 126 |
| 4.5.3 | Abstandsabhängige spinpolarisierte Tunnelstromspektroskopie | 138 |
| 5 | Temperaturabhängiger SRT-Prozess von Fe/Mo(110) | 154 |
| 5.1 | Temperaturabhängige STS-Messungen | 155 |
| 5.1.1 | Temperaturverlauf der Asymmetrie | 160 |
| 5.1.2 | Spektroskopie | 165 |
| 5.1.3 | Domänenwandbreiten | 170 |
| 5.2 | Diskussion | 177 |
| 6 | Spinabhängiger Ladungstransport durch Kupfer-Pc/Fe(110) | 182 |
| 6.1 | Probenpräparation | 184 |
| 6.2 | Morphologie | 185 |
| 6.3 | Spinabhängiger Ladungstransport | 189 |
| 6.4 | Diskussion | 193 |
| 7 | Zusammenfassung | 198 |

Literaturverzeichnis **202**

Abkürzungsverzeichnis **218**

Kapitel 1

Einleitung und Motivation

Das Phänomen des Magnetismus ist bereits seit der Antike bekannt. 500 v.Chr. beschreibt Thales von Milet im alten Griechenland zum ersten Mal die Kraftwirkungen von Steinen auf Eisengegenstände. Der Fundort dieser Steine, die Provinz Magnesia, gibt diesem Phänomen seinen Namen. Um 1000 n.Chr. wurde in China der erste magnetische Kompass entwickelt, was die erste technische Anwendung des Magnetismus darstellt. Seit der Renaissance beschäftigte der Magnetismus viele Forscher, wobei es immer wieder zu Verwechslungen zwischen Magnetismus und Elektrizität kam. Der Zusammenhang von Magnetismus und Elektrizität, und dessen Bedeutung für die moderne Anwendung, wurde erst 1820 von Hans Christian Oersted erkannt. In der heutigen Technologie ist der Magnetismus nicht mehr wegzudenken. Elektromotoren, Transformatoren, Lautsprecher und viele weitere technische Anwendungen basieren auf diesem Phänomen. Die magnetische Speicherung von Daten, vom Tonband über den Magnetstreifen auf der Kreditkarte bis hin zur Festplatte im PC, ist ein Anwendungsgebiet, das im täglichen Leben allgegenwärtig ist und einen Antrieb zur weiteren Forschung darstellt.

Die erste Festplatte, die *IBM 350*, vorgestellt 1956, besaß eine Speicherkapazität von 5 MB verteilt auf 50 Platten mit einem Durchmesser von jeweils 61 cm. Heutige Festplatten können bis zu 500 Gigabyte auf einer Scheibe mit etwa 9 cm Durchmesser speichern [Sea09]. Das entspricht einer Speicherdichte von 329 GBit pro Quadratzoll. In der Vergangenheit hat sich die Speicherkapazität etwa alle 5 Jahre verzehnfacht. Diese immense Erhöhung der Speicherdichte war unter anderem nur durch Entdeckungen in der Grundlagenforschung des Magnetismus, wie zum Beispiel der 1988 von P. Grünberg an Eisen-Chrom-Eisen-Schichtsystemen entdeckte GMR-Effekt (Giant Magneto Resistance) [Bin89], welcher heutzutage in jedem Festplattenlesekopf angewendet wird, möglich. Der GMR ist ein quantenmechanischer Effekt, der in mehrlagigen magnetischen Schichtsystemen, die aus alternierenden Lagen von ferromagnetischen und unmagnetischen Materialien bestehen, beobachtet werden kann. Stehen die magnetischen Momente der ferromagnetischen Schichten parallel zueinander, ist der elektrische Widerstand durch das Schichtsystem hindurch geringer als im Falle einer antiparallelen Ausrichtung. Eine weitere interessante Entwicklung stellt

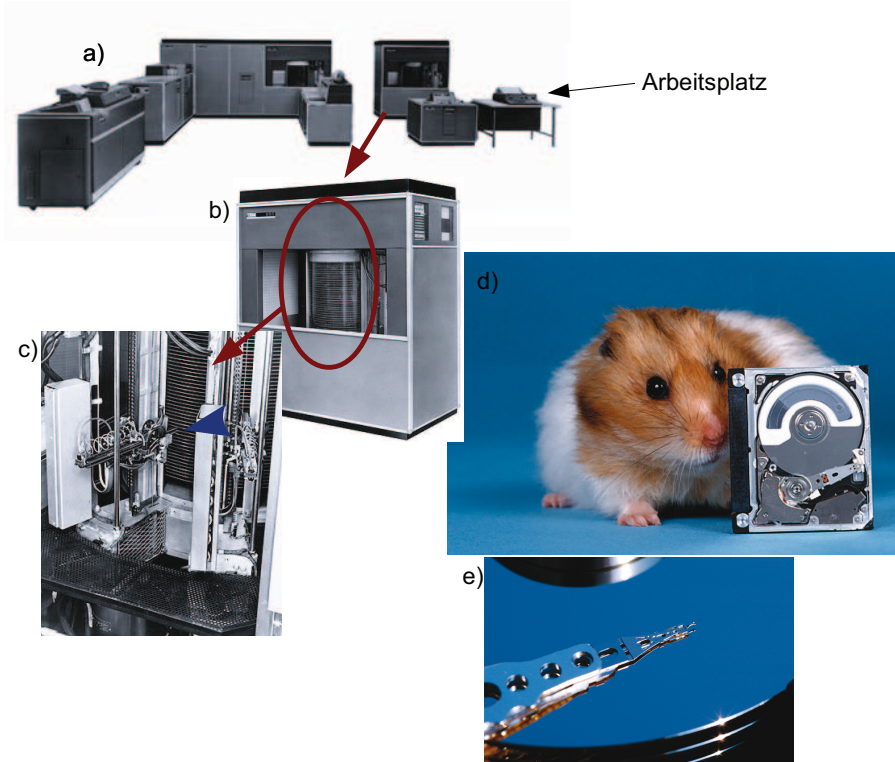


Abbildung 1.1: a) IBM 305 RAMAC Datenverarbeitungsmaschine. Bestandteil die Anlage ist die erste Festplatte, die *IBM 350* (b). Das Gehäuse dieser Festplatte ist $1,52 \times 1,72 \times 74 \text{ m}^3$ groß. c) Vergrößerung der Magnetscheiben mit Leseschreibkopf (blauer Pfeil) Die *IBM 350* wog ca. 1 Tonne und benötigte eine elektrische Leistung von 12 kW. Die 50 magnetbeschichteten Eisenplatten von 61 Zentimeter Durchmesser rotierten mit 1200 Umdrehungen pro Minute und machten zusammen mit den Kompressoren für die Leseschreibköpfe einen derartigen Lärm, dass die RAMAC-Operatoren nur mit Ohrenschutz arbeiteten. Das Laufwerk wurde nicht verkauft, sondern für ca. 10.000 DM (5000 EUR) pro Monat an Unternehmen vermietet. d) Moderne Computerfestplatte mit einer Kapazität von mehreren Gigabyte. Das Prinzip ist das gleiche wie bei der *IBM 350*. e) Der Leseschreibkopf einer modernen Festplatte.

der auf dem TMR basierende magnetische RAM-Speicher (*Magneto-resistive Random Access Memory*, M-RAM) dar. Durch eine parallele- bzw. antiparallele Ausrichtung der beiden ferromagnetischen Elektroden kann eine logische Eins oder Null realisiert werden.

Mit der Erhöhung der Speicherdichte geht eine Miniaturisierung der datenspeichernden Bauteile einher, so dass in diesem Zusammenhang Schlagworte wie Mikro- oder Nanotechnologie zu nennen sind. Die Eigenschaften von Nanostrukturen lassen sich jedoch nicht einfach von den Eigenschaften entsprechender makroskopischer Strukturen ableiten. So wird zum Beispiel in einer makroskopischen Volumenlegierung aus Eisen und Kobalt die Curie-Temperatur im Ver-

gleich zu reinem Eisen erhöht [Han58], während die gleiche Legierung als atomare Monolage auf Wolfram(110) ein ganz anderes Verhalten zeigt, nämlich eine rapide Abnahme der Curie-Temperatur mit Zunahme des Kobaltgehalts (vgl. [Pra00][Pra04c]). Die Größe des Widerstandseffektes, und somit die Empfindlichkeit von magnetischen Sensoren, wird hauptsächlich durch die Spinpolarisation der ferromagnetischen Elektroden bestimmt, so dass die Suche nach Materialien mit möglichst hoher, oder sogar 100%-iger, Spinpolarisation ein aktuell sehr aktives Forschungsgebiet darstellt. Weiterhin sind Materialien mit großer magnetischer Anisotropie besonders interessant, da mit solchen Materialien die geometrische Größe von Bits einer magnetischen Festplatte (Domänengröße) reduziert werden kann (superparamagnetischer Effekt).

Im Rahmen dieser Arbeit werden drei unterschiedliche Beispiele für magnetische Nanostrukturen untersucht. Das erste Beispiel ist die in Nanostrukturen stabilisierte -metastabile kubisch-raumzentrierte (bcc) Phase von Kobalt. Die Präparation von Materialien in solchen metastabilen Strukturen ist von besonderem wissenschaftlichen Interesse, da sich hierdurch interessante neue Materialeigenschaften, wie z.B. ein gegenüber Gleichgewichtsstrukturen geändertes magnetisches und elektronisches Verhalten, ergeben. Mit bcc Co als Elektrode in TMR-Elementen konnte von Yuasa et al. [Yua06] ein außergewöhnlich großer TMR-Effekt gemessen werden, der unter anderem der hohen Spinpolarisation von bcc Co in Kombination mit einer außergewöhnlich hohen Curie-Temperatur zugeschrieben wird. In Kapitel 4 wird das Wachstum von bcc Co auf Cr(110) sowie Fe(110) anhand atomar aufgelöster STM-Aufnahmen untersucht. Spinpolarisierte STS-Messungen an bcc-Co Schichten zeigen eine Erhöhung der Spinpolarisation von bcc-Co infolge der bcc-Ordnung.

Als weiteres Beispiel wird die Spinreorientierung (*engl.: Spin Reorientation Transition*, SRT) in ultradünnen Eisenschichten auf der Mo(110)-Oberfläche in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht. Eine Spinreorientierung bedeutet eine Neuausrichtung der Magnetisierung infolge einer Veränderung der magnetischen Anisotropie des Materials. Experimentell entdeckt wurde dieser Effekt 1968 an NiFe(111)/Cu(111) Schichten. [Gra68] und ist seit einiger Zeit in den wissenschaftlichen Fokus gerückt [San99, Far98, San04, Jen06, vB06, Kuk07], da das Verständnis des SRT und der damit verbundenen Anisotropie eine Grundlage für die Entwicklung von Schichtsystemen mit senkrechter leichter Achse darstellt. Eine senkrechte Magnetisierung ist beispielsweise bei der magnetischen Speicherung von Daten vorteilhaft, da hierdurch, aufgrund der Reduzierung der Fläche je Bit, die Speicherdichte einer Festplatte im Vergleich zu Festplatten mit paralleler Magnetisierung um etwa das Dreifache erhöht werden kann (Stichwort: *perpendicular recording*).

Im dritten Beispiel wird die Spininjektion in das nichtmagnetische Kupfer-Phthalocyanin-Molekül als Beispiel für Organische Halbleiter (*engl. Organic Semi Conductor*, OSC) untersucht. OSCs ermöglichen die Entwicklung von sehr günstigen und zuverlässigen elektronischen Anwendungen [For04]. Organische

lichtemittierende Dioden (OLEDs) und Photovoltaikzellen sind Beispiele für bereits realisierte kommerzielle Anwendungen, die auf dem nicht-spinpolarisierten Ladungstransport basieren. Neuere Experimente haben jedoch gezeigt, dass OSCs auch ein viel versprechendes Material für Spintronik Anwendungen sind, d.h. spinpolarisierter Ladungstransport, da ihre meist leichten Elemente nur eine geringe Spin-Bahn-Wechselwirkung aufweisen. [Ded02, Wol01, Pra07] Eine kommerzielle Anwendung finden Phthalocyanin-Moleküle bereits unter anderem als Pigmente bzw. Farbstoffe in optoelektronischen Elementen [Fly77, For97, Xue05] und Solarzellen [Gho74]. Als Prototyp für molekulare Halbleiter wurden Phthalocyanin-Moleküle auch zur Herstellung von Feldeffekttransistoren (FET) verwendet [Mad88, Mai87]. Mittels Zwei-Photonen Photoemission wurde von Cinchetti et al. [Cin09] die Spin Injektion an der Co-CuPc Grenzfläche untersucht, wobei für die Spininjektion in unbesetzte Molekülorbitale bei +2.7 eV eine Effizienz von 90 % festgestellt wurde. Die für die Anwendung bedeutungsvollen Spintransporteigenschaften an der Fermikante können sehr gut mit Hilfe der spinpolarisiertet Rastertunnelmikroskopie untersucht werden. Die Ergebnisse hierzu werden in Kapitel 6 präsentiert.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen und Messmethode

2.1 Rastertunnelmikroskopie

Die Grundlage für die Funktionsweise eines Rastertunnelmikroskops ist der quantenmechanische Tunneleffekt. Werden zwei elektrisch leitende Elektroden so nahe zusammengebracht, dass sie nur noch durch eine dünne isolierende Schicht, wie zum Beispiel durch ein Vakuum, getrennt werden, kommt es zu einem Überlapp der Wellenfunktionen und Elektronen können von der einen Elektrode zur anderen durch die Barriere hindurch tunneln. Wird zwischen die Elektroden eine Spannung von etwa $U \approx 1$ V angelegt, so ist ein makroskopischer Strom in der Größenordnung weniger nA messbar.

Bei dem Rastertunnelmikroskop (engl.: *Scanning Tunneling-Microscope*, STM) ist eine der beiden Elektroden durch eine feine Spitze realisiert, die als Sonde fungiert [Bin82a, Bin82b, Bin87]. Der Radius der Spitze beträgt typischerweise 20 – 500 nm und wird auf etwa 1 – 5 Å an die Oberfläche einer Probe, die die zweite Elektrode des Tunnelkontaktes darstellt, angenähert. Aufgrund der im Folgenden zu zeigenden starken Abhängigkeit des Tunnelstromes vom Abstand zwischen Spitze und Probe kann die Oberfläche einer Probe, indem diese zeilenweise abgerastert und dabei der Tunnelstrom als Funktion des Ortes gemessen wird, atomar aufgelöst untersucht werden.

2.1.1 Theoretische Beschreibung des Tunnelprozesses

Nach Tersoff und Hamann [Ter83] ist für kleine Spannungen $eU \ll \Phi$, wobei Φ der gemittelten Austrittsarbeit von Spitze und Probe entspricht, und für $T = 0$ K der Tunnelstrom gegeben durch

$$I_T = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu,\nu} |M_{\mu,\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_F) \delta(E_\nu - E_F), \quad (2.1)$$

mit der Elementarladung e und dem Tunnelmatrixelement $M_{\mu,\nu}$. Die Indices μ und ν zählen die Zustände von Probe und Spitze durch. Durch die δ -Funktionen

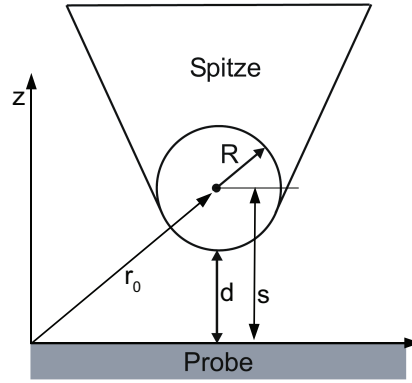


Abbildung 2.1: Modell des Tunnelkontaktes bei einem Rastertunnelmikroskop nach Tersoff und Hamann. [Ter85] Die Spitze besitzt ein sphärisches Ende mit dem Krümmungsradius R um den Mittelpunkt am Ort \vec{r}_0 . Der Abstand zwischen Spitze und Probe wird mit s bezeichnet.

wird ein elastisches Tunneln garantiert. Nach Bardeen [Bar61] kann $M_{\mu,\nu}$ bei bekannten Wellenfunktionen Ψ_μ und Ψ_ν durch

$$M_{\mu,\nu} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int (\Psi_\mu^* \vec{\nabla} \Psi_\nu) - (\Psi_\nu \vec{\nabla} \Psi_\mu^*) d\vec{A} \quad (2.2)$$

berechnet werden. Das Problem dabei ist allerdings, dass die Wellenfunktionen Ψ_μ der Spitze im Allgemeinen nicht bekannt sind, da hierzu die genaue atomare Struktur der Spitze bekannt sein müsste. Durch spontane Umordnungen an der Spitze, z.B. einer Umplatzierung des tunnelnden Atoms an der Spitze, wird diese Wellenfunktion verändert. Um dieses Problem zu umgehen nehmen Tersoff und Hamann in ihrem Modell eine sphärische s-Wellenfunktion für die Spitze an, womit der Tunnelstrom durch

$$I_T \propto U D_s(E_F) e^{-2\kappa R} \sum_\nu |\Psi(\vec{r}_0)_\nu|^2 \delta(E_\nu - E_F) \quad (2.3)$$

beschrieben werden kann, wobei $D_s(E_F)$ der Zustandsdichte der Spitze an der Fermi-Energie entspricht. Mit der Definition der Zerfallskonstanten

$$\kappa \equiv \sqrt{\frac{2m_e \Phi_{eff}}{\hbar^2}} \quad (2.4)$$

und der Zustandsdichte der Probe am Ort \vec{r}_0 ,

$$D_p(\vec{r}_0, E_F) = \sum_\nu |\Psi(\vec{r}_0)_{\nu u}|^2 \delta(E_\nu - E_F), \quad (2.5)$$

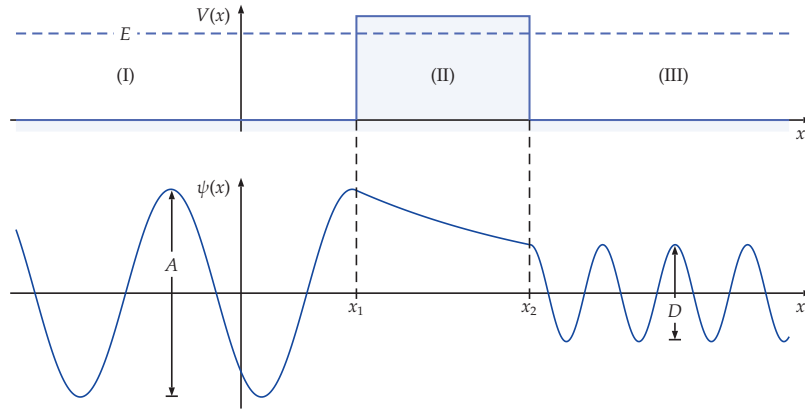


Abbildung 2.2: Schematische Skizze zum Tunneffekt: Eine Teilchenwelle mit der Energie E gelangt in Bereich I von links an eine Barriere (Bereich II) heran. Das Potential dieser Barriere $V(x)$ ist größer als E , so dass klassisch eine Reflektion der Welle zu erwarten wäre. Quantenmechanisch dringt die Welle jedoch in die Barriere ein, wobei die Amplitude der Welle innerhalb der Barriere exponentiell abfällt. Bei einem Rastertunnelmikroskop entspricht diese Barriere dem Spalt zwischen der Probenoberfläche und der Spitze.

folgt aus Gleichung 2.3:

$$I_T \propto U e^{-2\kappa R} D_s(E_F) D_p(\vec{r}_0, E_F). \quad (2.6)$$

In der Barriere fällt die Wellenfunktion eines tunnelnden Elektrons gemäß

$$\Psi(z) = \Psi(0) e^{-\kappa z} \quad (2.7)$$

exponentiell ab und die Wahrscheinlichkeit ein Elektron auf der anderen Seite der Vakuumbarriere, d.h. am Ort $S = R + d$ (vgl. Abbildung 2.1), vorzufinden, ist somit durch

$$\int \Psi(S)^* \Psi(S) = |\Psi(S)|^2 = |\Psi_0| e^{-2\kappa S} \quad (2.8)$$

gegeben.

Die effektive Austrittsarbeit Φ_{eff} kann in erster Näherung durch

$$\Phi_{eff} = \frac{\Phi_{Spitze} + \Phi_{Probe} - |eU_G|}{2} \quad (2.9)$$

abgeschätzt werden. [Ebe05] In Tabelle 2.1 ist eine Aufstellung der in dieser Arbeit verwendeten Metalle gegeben.

Für kleine Spannungen, d.h. $eU \ll \Phi$ und unter der Annahme annähernd konstanter Zustandsdichten ergibt sich ein linearer Zusammenhang zwischen

| Metall | Austrittsarbeit Φ |
|--------|------------------------|
| Au | 4,8 eV |
| W | 4,6 eV |
| Mo | 4,2 eV |
| Co | 5,0 eV |
| Cr | 4,5 eV |
| Fe | 4,5 eV |

Tabelle 2.1: Austrittsarbeiten der in dieser Arbeit für Spitze und Probe verwendeten Metalle. [Ber05]

Tunnelstrom und Spannung:

$$I = K \cdot U \cdot e^{-2\kappa \cdot z}, \quad (2.10)$$

wobei K eine Konstante ist und unter anderem von der effektiven Größe des Tunnelkontaktes abhängt. Aus einem typischen Wert für die Austrittsarbeit von Metallen $\Phi \approx 4,5$ eV ergibt sich eine Zerfallskonstante von $\kappa \approx 10 \text{ nm}^{-1}$. Daraus resultiert bei einer Vergrößerung des Probe-Spitze-Abstandes von 100 pm eine Reduzierung des Tunnelstroms um etwa den Faktor $1/e^2$, woraus eine hohe vertikale Auflösung des STMs resultiert.

Näherungsweise kann bei der Interpretation des Tunnelstroms davon ausgegangen werden, dass aus dem Abrastern der Oberfläche bei konstantem Tunnelstrom ein topographisches Abbild der Oberfläche entsteht. Genau genommen misst ein Rastertunnelmikroskop, wie viele Elektronen mit einer bestimmten Energie am Ort der Spitze (r_D^z) (vgl. Gleichung 2.3) vorhanden sind, was als lokale Zustandsdichte (*engl.: Local Density Of States, LDOS*) der Probe am Ort der Spitze bezeichnet wird. Das bedeutet, dass keine echte Topographie, sondern eine Ebene mit konstanter Tunnelleitfähigkeit, gemessen wird. Bei Oberflächen, die nur aus einer Sorte Atome oder Molekülen bestehen, wird durch diese die Topographie sehr gut wiedergegeben. Allerdings wird zum Beispiel ein einzelnes Sauerstoffatom auf einer Metalloberfläche mit einem STM nicht als Erhebung, sondern als Vertiefung sichtbar, da die Tunnelwahrscheinlichkeit von Elektronen aus einem Sauerstoffatom, aufgrund eines geringen Überlapps der Wellenfunktionen, niedriger ist, als aus einem Metallatom.

Die mit einem STM erreichbare hohe laterale Auflösung wird durch das Modell von Tersoff und Hamann nicht ausreichend beschrieben. Mit der Definition einer effektiven Länge L nach Tersoff und Hamann [Ter83, Ter85]

$$L = \sqrt{\frac{R + d}{\kappa}} \quad (2.11)$$

ergibt sich unter Verwendung typischer Werte für den Spitzenradius von $R =$

100 nm und einem Probe-Spitze-Abstand von $d = 5 \text{ \AA}$ eine Auflösung von $L \approx 3 \text{ nm}$. Dieser Wert ist um eine Größenordnung größer als die typische Gitterkonstante von Metallen ($a \approx 0,3 \text{ nm}$) und lässt daher eine Auflösung der atomaren Gitterstruktur einer Metalloberfläche nicht erwarten. Diese Diskrepanz wird durch die Tatsache aufgelöst, dass Tersoff und Hamann die Spitze mit einer sphärischen S-Wellenfunktion beschreiben und für den Tunnelprozess jedoch auch lokalisierte Orbitale mit einer d_{z^2} -Symmetrie oder $p_{x,y,z}$ -Symmetrien von Bedeutung sind [Che90]. Durch eine Berücksichtigung solcher Wellenfunktionen kann die hohe Auflösung eines Rastertunnelmikroskopes erklärt werden. Die p- und d-artigen Orbitale der Spitze reichen weiter in das Vakuum hinein, und somit näher an die Probe heran, als s-Orbitale und können dadurch die lokale Zustandsdichte in einem geringeren Abstand von der Probenoberfläche messen. Da die Zustandsdichte im Vakuum exponentiell mit dem Abstand abnimmt, führt dieser geringer Abstand zu einer stärkeren Höhenkorrigation, so dass somit die Variation der lokalen Ladungsdichte aufgrund einzelner Atome gemessen werden kann und daher die Atome einer Oberfläche „sichtbar“ werden. Die Atome sind also nicht direkt sichtbar, sondern es wird eine Ladungsdichtewolke abgebildet, die bei der Interpretation einer STM-Aufnahme als Atome gedeutet werden.

2.2 Rastertunnelspektroskopie

Die Rastertunnelspektroskopie (engl.: *Scanning Tunneling Spectroscopy*, STS) ermöglicht die Untersuchung der elektronischen Struktur einer Probenoberfläche mit hoher Ortsauflösung. Wie in Gleichung 2.6 gezeigt, ist im Tunnelstrom eine Information über die Zustandsdichte der Probe am Ort der Spitze enthalten.

Der Tunnelstrom I kann als die Differenz zweier Tunnelströme I^+ und I^- (Tunnelstrom von der Probe in die Spitze und von der Spitze in die Probe)

$$I = I^+ - I^- \quad (2.12)$$

beschrieben werden. Dabei beschreibt I^- den Strom der aus besetzten Zuständen der Probe in unbesetzte Zustände der Spitze tunnelnden Elektronen und ist gegeben als

$$I^- = \int_{-\infty}^{\infty} dE M(E) \cdot D_s(E - eU) \cdot [1 - F(E - eU)] \cdot D_p(E) \cdot f(E), \quad (2.13)$$

mit der Fermifunktion $f(E)$, die definiert ist als

$$f(E) = \frac{1}{e^{E/KT} + 1}. \quad (2.14)$$

Die Fermi-Energie der Probe wird als Nullpunkt gesetzt, d.h.

$$E_{F,p} = 0. \quad (2.15)$$

Der Strom der aus besetzten Zuständen der Spitze in unbesetzte Zustände der Probe tunnelnden Elektronen wird entsprechend durch

$$I^+ = \int_{-\infty}^{\infty} dE M(E) \cdot D_p(E) \cdot [1 - f(E)] \cdot D_s(E - eU) \cdot f(E - eU) \quad (2.16)$$

beschrieben. Unter der Vereinfachung, dass das Tunnelmatrixelement $M = M_{\mu\nu}$ für alle Zustände konstant ist, ergibt sich der Tunnelstrom zu

$$\begin{aligned} I = I^+ - I^- &\propto M \int_{-\infty}^{\infty} dE D_p(E) \cdot D_s(E - eU) \cdot [f(E - eU) - f(E)] \\ &\propto M \int_0^{eU} dE D_p(E) \cdot D_s(E - eU). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Für $U = 0$ gilt

$$I^+ = I^- \Rightarrow I = 0. \quad (2.18)$$

Erst durch das Anlegen einer endlichen Spannung U kommt es zu einem messbaren Tunnelstrom zwischen Spitze und Probe. Für Spannungen $U > 0$ ergibt sich nach obiger Gleichung ein Elektronenfluss aus der Spitze in die Probe und für $U < 0$ tunneln die Elektronen aus der Probe in die Spitze. Betrachtet man die Ableitung von Gleichung 2.17, erhält man für kleine Spannungen und tiefe Temperaturen

$$\frac{dI}{dU} \propto \frac{d}{dU} M \int_{-\infty}^{\infty} dE D_p(E) \underbrace{D_s(E - eU)}_{=const.} [f(E - eU) - f(E)] \quad (2.19)$$

$$\propto M \int_{-\infty}^{\infty} dE D_p(E) D_s(E - eU) \cdot \underbrace{f'(E - eU)}_{=\delta(E - eU)} \quad (2.20)$$

$$\propto D_p(eU) \cdot D_s(0), \quad (2.21)$$

d.h die Ableitung des Tunnelstromes ist proportional zur Zustandsdichte der Probe:

$$dI/dU(U) \propto D_p(eU). \quad (2.22)$$

Durch die Messung der differentiellen $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeit kann also die elektronische Struktur der Probe untersucht werden.

In Abbildung 2.3 ist das Prinzip bei positiver und negativer Spannung U der Tunnelstromspektroskopie skizziert. [Pra04c] Die Elektronen durchtunneln die Vakuumbarriere vorwiegend an der Fermikante der Spitze für $U > 0$ bzw. der Probe für $U < 0$, da die Potentialbarriere für diese Zustände am Niedrigsten ist.

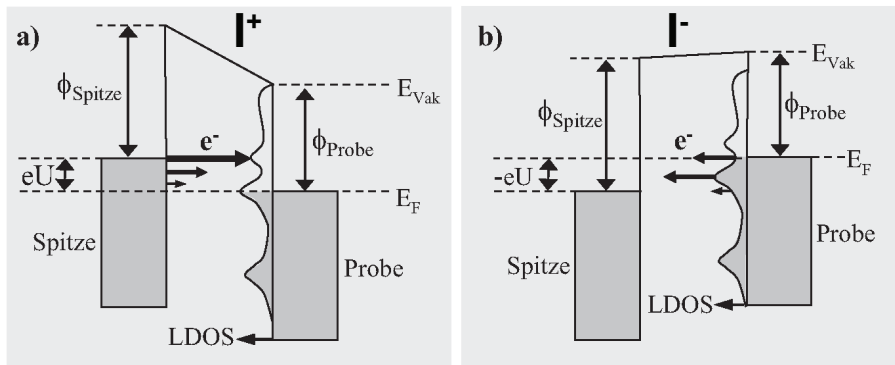


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Tunnelprozesse. a) Bei Spannungen von $U_{\text{Gap}} > 0$ V, d.h. positive Spannung an der Spitze, tunneln die Elektronen von der Spitze zur Probe. Aufgrund der Tunnelwahrscheinlichkeit ist der Tunnelstrom an der Fermi-Kante der Spitze am größten. Bei negativen Spannungen tunneln die Elektronen entsprechend von der Fermikante der Probe in die Spitze (Abbildung entnommen aus [Pra04c]).

Bei positiven Spannungen ergibt sich daraus eine Sensitivität auf unbesetzte Probenzustände, während bei negativen Spannungen besetzte Zustände der Probe einen Beitrag liefern.

Allerdings muss beachtet werden, dass im Experiment bei negativen Spannungen auch unbesetzte Spitzenzustände zum Spektrum beitragen. Durch die Annahme einer energieunabhängigen Zustandsdichte der Spitze wird dieser Beitrag in erster Näherung vernachlässigt. Weiterhin tragen nur diejenigen Zustände zu einem Tunnelstromspektrum bei, deren Wellenfunktion Ψ_μ einen Überlapp mit der Wellenfunktion der Spitze Ψ_ν besitzen, d.h. für die $M_{\mu\nu} > 0$ gilt. Typischerweise gilt dies für Zustände mit einer d_{z^2} -Symmetrie am Γ -Punkt der Brillouin-Zone. Dieser Umstand schränkt die Vergleichbarkeit von differentiellen $dI/dU(U)$ -Leitfähigkeitsspektren mit der Zustandsdichte einer Probe ein. Weiterhin spielen bei der Tunnelstromspektroskopie resonante Oberflächenzustände eine bedeutende Rolle. [Kim01] Trotz dieser Einschränkungen stellt die Tunnelstromspektroskopie eine sehr gute Methode zur Untersuchung der elektronischen Struktur einer Probe bei gleichzeitiger hoher räumlicher Auslösung dar.

2.2.1 Bestimmung der lokalen Zustandsdichte

Nach V. Ukraintsev [Ukr96] lässt sich die Tunnelstromdichte schreiben als

$$J(S, U) \cong \frac{2\pi e}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} T[f(E - eU) - f(E)] D_p(E) D_s(E - eU) dE. \quad (2.23)$$

Die Funktion $T = T(S, U, E)$ beschreibt die Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit für ein Elektron mit der Energie E bei einem Abstand S (vgl. Abbildung 2.1) und einer Gap-Spannung U . Die Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit wird mit zunehmender Energie größer, so dass die differentielle Tunnelleitfähigkeit mit zunehmender Energie, d.h. mit zunehmender Gapspannung, steigt.

Für tiefe Temperaturen, d.h. $k_B T \ll eU$ kann die Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit T mit

$$T(S, U, E) \cong \exp \left\{ -2S \sqrt{\frac{2m_e^2}{\hbar} \left(\Phi_{eff} + \frac{eU}{2} - E \right)} \right\} \quad (2.24)$$

abgeschätzt werden. Wird statt der Fermifunktion $f(E)$ eine Stufenfunktion angenommen, so erhält man für die Tunnelstromdichte

$$J(S, U) \cong \frac{2\pi e}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right) \int_0^{eU} T(S, U, E) \rho_p(E) \rho_s(E - eU) dE \quad (2.25)$$

und die differentielle Tunnelleitfähigkeit kann mit

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dU} \cong & A \left[eT(S, U, E) \rho_p(E) \rho_s(E - eU) \Big|_{E=eU} \right. \\ & + \int_0^{eU} T(S, U, E) \rho_p(E) \frac{d\rho_s(E - eU)}{dU} dE \\ & \left. + \int_0^{eU} \frac{dT(S, U, E)}{dU} \rho_p(E) \rho_s(E - eU) dE \right], \end{aligned} \quad (2.26)$$

beschrieben werden. Dabei ist A ein Proportionalitätsfaktor, der die effektive Kontaktfläche zwischen Probe und Spitze darstellt. Der zweite und dritte Term werden in der Regel unter der Annahme einer konstanten Spitzenzustandsdichte und nur geringen Änderungen der Tunnelstromdichte bei kleinen Gapspannungen vernachlässigt. [Sel85] Diese Näherungen können zwar zu qualitativ falschen Ergebnissen führen, vereinfachen aber das Verständnis der Tunnelspektroskopie.

Führt man in Gleichung 2.26 die Substitution $\varepsilon = E - eU/2$ durch, lässt sich die differentielle Leitfähigkeit bezüglich den Zustandsdichten von Spitze und Probe

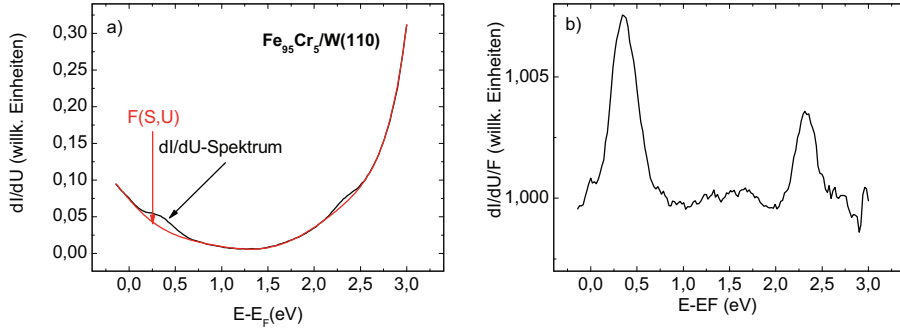


Abbildung 2.4: a) Beispiel zur Bestimmung der Tunneltransmissionsfunktion $F(S, U)$ am Beispiel des $dI/dU(U)$ -Spektrums einer $\text{Fe}_{0,95}\text{Cr}_{0,05}$ -Legierung auf $\text{W}(110)$. b) Normiertes $dI/dU/F$ -Spektrum.

symmetrisieren und es ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \frac{dI}{dU} \cong & \frac{eA}{2} \left[\tilde{T}(S, \varepsilon) \rho_p(\varepsilon + eU/2) \rho_s(\varepsilon - eU/2) \Big|_{\varepsilon=eU/2} \right. \\
 & + \tilde{T}(S, \varepsilon) \rho_p(\varepsilon + eU/2) \rho_s(\varepsilon - eU/2) \Big|_{\varepsilon=-eU/2} \\
 & + \int_{eU/2}^{eU/2} \tilde{T}(S, \varepsilon) \frac{d\rho_p(\varepsilon + eU/2)}{d\varepsilon} \rho_s(\varepsilon - eU/2) d\varepsilon \\
 & \left. - \int_{-eU/2}^{eU/2} \tilde{T}(S, \varepsilon) \rho_s(\varepsilon + eU/2) \frac{d\rho_s(\varepsilon - eU/2)}{d\varepsilon} d\varepsilon \right], \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

wobei $\tilde{T}(s, \varepsilon) := T(S, U, E)$.

Die Tunnelwahrscheinlichkeit für Elektronen von oder zur Fermi-Kante der Spitze wird durch $\tilde{T}(s, eU/2)$ ausgedrückt und entsprechend $\tilde{T}(s, -eU/2)$ an der Probe. Setzt man dies in Gleichung 2.27 ein, kann entsprechend die differentielle Tunnelleitfähigkeit mit

$$\frac{dI}{dU} \cong \frac{eA}{2} \tilde{T}(S, eU/2) \quad (\text{Spitze}) \quad (2.28)$$

und

$$\frac{dI}{dU} \cong \frac{eA}{2} \tilde{T}(S, -eU/2) \quad (\text{Probe}). \quad (2.29)$$

abgeschätzt werden. Addiert man Gleichung 2.28 und 2.29, so erhält man die Tunneltransmissionsfunktion

$$F(S, U) = \frac{eA}{2} [B \cdot \tilde{T}(S, eU/2) + C \cdot \tilde{T}(S, -eU/2)], \quad (2.30)$$

wobei B und C zu bestimmende Parameter sind. Die Tunneltransmissionsfunk-

tion $F(S, U)$ wird durch Anpassung an ein gemessenes differentielles $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeitsspektrum bestimmt. Die verwendete Fitfunktion lautet

$$F(x) = A \cdot e^{-S \cdot U} + B \cdot e^{+S' \cdot U} - O. \quad (2.31)$$

Die Parameter A, B, S, S' und O werden durch Anpassen der Funktion an bestimmt. Der Parameter O dient zur Kompensation eines möglichen Offsets. Beim Anpassen der Funktion muss beachtet werden, dass die Werte von $F(S, U)$ immer kleiner oder gleich der dI/dU -Werte des gemessenen Spektrums sind. Durch eine anschließende Normierung des dI/dU -Spektrum mit $F(S, U)$ erhält man die lokale Zustandsdichte der Probe am Ort der Spitze, wobei die in Abschnitt 2.2 genannten Einschränkungen bezüglich der „sichtbaren“ Zustände zu beachten sind. In Abbildung 2.4 ist die Bestimmung von $F(S, U)$ anhand eines $dI/dU(U)$ -Spektrums, sowie eine daraus ermittelte lokale Zustandsdichte gezeigt.

2.2.2 Spinpolarisierte Rastertunnelspektroskopie

Ferromagnetische Materialien besitzen eine spin-abhängige Zustandsdichte, d.h. die Zustandsdichten von spin-down- (\downarrow) und spin-up-Elektronen (\uparrow) unterscheiden sich. Durch diesen Unterschied kommt es zu einer beobachtbaren Magnetisierung. [Iba08] Die Zustandsdichte, die aufsummiert über alle besetzten Zustände die größere Anzahl Zustände aufweist, wird als Majoritätszustandsdichte und die andere entsprechend als Minoritätszustandsdichte bezeichnet. Im Allgemeinen wird den Majoritätselektronen, d.h. den Elektronen der Majoritätszustandsdichte, ein spin-up-Charakter zugeschrieben.

Bestehen nun Spitze und Probe aus einem magnetischen Material, kommt es aufgrund der Abhängigkeit des Tunnelstromes von der Zustandsdichte zu einem spinabhängigen Tunnelstrom. Die Tunnelstromspektroskopie mit einer magnetischen Spitze wird daher als *spin-polarisierte Rastertunnelspektroskopie* (engl.: *spin-polarized scanning tunnelling spectroscopy*, sp-STS) bezeichnet.

Der spinpolarisierte Tunnelstrom ist gegeben durch

$$I_{sp}(\vec{r}, U) = I_0[1 + \tilde{P}_{eff} \cos(\vec{M}_s, \vec{M}_t)] \quad (2.32)$$

[Miy95, Wor96, Slo89], wobei I_0 dem nicht spin-polarisierten Tunnelstrom entspricht. \tilde{P}_{eff} beschreibt die energieabhängige effektive Spinpolarisation des Tunnelkontaktes. Nach Wortmann et al. [Wor01] kann die spinpolarisierte differentielle Tunnelleitfähigkeit als

$$\frac{dI}{dU_{sp}} = \frac{dI}{dU_0} [1 + P_{eff} \cos \varphi] \quad (2.33)$$

geschrieben werden. Es muss allerdings beachtet werden, dass \tilde{P}_{eff} und P_{eff} nicht identisch sind, da die Spinpolarisationen von Spitze und Probe von der

Energie abhängen. φ beschreibt den azimuthalen Winkel zwischen den Magnetisierungen von Probe und Spitze. Durch \tilde{P}_{eff} wird die, über die Energie integrierte, Polarisation im Intervall $[E_F, E_F + eU]$ bezeichnet, wohingegen P_{eff} die Polarisation an der Energie $E_F + eU$ beschreibt. [Kub03]

Aus den beiden differentiellen Tunnelleitfähigkeiten zwischen paralleler und antiparalleler Ausrichtung der Magnetisierungen von Probe und Spitze kann eine magnetische Asymmetrie gemäß

$$A = \frac{dI/dU(U)(\uparrow\uparrow) - dI/dU(U)(\uparrow\downarrow)}{dI/dU(U)(\uparrow\uparrow) + dI/dU(U)(\uparrow\downarrow)} \quad (2.34)$$

definiert werden. Setzt man Gleichung 2.33 in Gleichung 2.34 ein, so erhält man

$$A = A(U) = P_{eff}, \quad (2.35)$$

wobei $A(E + eU)$ die energieabhängige Asymmetrie beschreibt. Unter der Annahme, dass die effektive Polarisation durch

$$P_{eff} = P_t \cdot P_s \cdot \cos \varphi \quad (2.36)$$

gegeben ist, wobei P_s und P_p die effektiven Spinpolarisationen von Spitze (s) und Probe (p) darstellen [Jul75], erhält man

$$P_p(U) = \frac{A(U)}{P_s \cdot \cos \varphi}. \quad (2.37)$$

Aus den Gleichungen 2.33 und 2.34 folgt, dass die messbare Asymmetrie mit $\cos \varphi$ skaliert und maximal wird für eine kollineare Ausrichtung der Magnetisierungen von Spitze und Probe.

Weiterhin setzt Gleichung 2.36 voraus, dass das Tunnelmatrixelement $M_{\mu\nu}$ eine Konstante ist, d.h. alle Zustände von Spitze und Probe tragen gleichermaßen zum Tunnelstrom bei. Obwohl diese Annahme im Allgemeinen nicht korrekt ist, erlaubt sie eine näherungsweise quantitative Bestimmung der Spinpolarisation der Probe, wenn die Spinpolarisation der Spitze bekannt ist.

2.3 LEED

Die Beugung von Elektronen mit kinetischen Energien zwischen 20 und 500 eV (engl.: *Low Energy Electron Diffraction*, LEED) an einer Oberfläche bietet eine einfache Möglichkeit, die Struktur einer Probenoberfläche zu untersuchen. Bei einer Elektronenenergie von 20 eV beträgt die de Broglie Wellenlänge $\lambda = 2,7 \text{ \AA}$ und bei 500 eV ist $\lambda = 0,6 \text{ \AA}$. Diese Werte liegen in der Größenordnung der Gitterkonstanten, so dass die Beugungsreflexe geometrisch sehr gut getrennt sind.

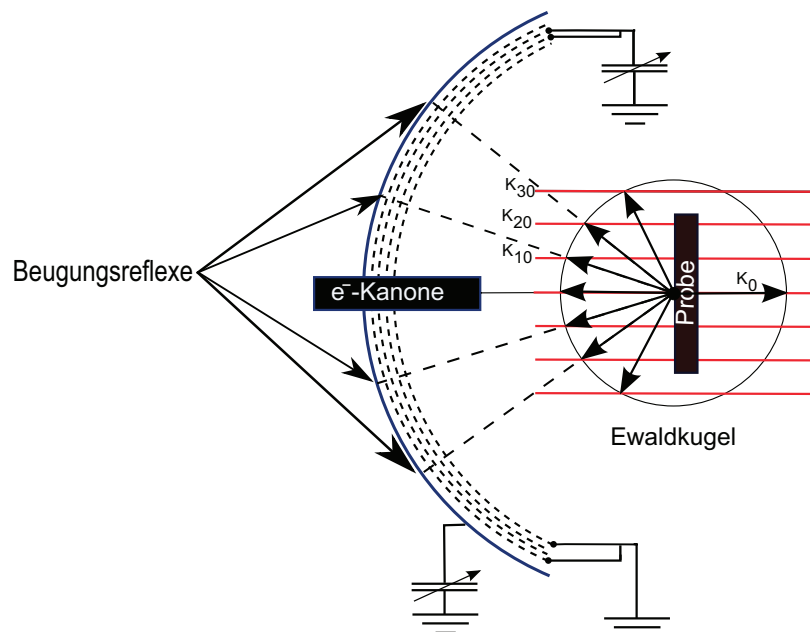


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung eines LEED-Systems. Die von der Elektronenkanone emittierten Elektronen werden an der Probenoberfläche reflektiert. Die Oberfläche des Leuchtschirms ist ein Ausschnitt einer Kugeloberfläche, deren Zentrum in der Probenebene liegt. Vor dem Leuchtschirm befinden sich vier Gitter. Die gestreuten Elektronen fliegen potentialfrei bis zum ersten Gitter, das wie die Probe geerdet ist. Der Leuchtschirm liegt auf einer hohen positiven Spannung (+4 kV), um die Elektronen vom letzten Gitter auf den Schirm zu beschleunigen. Durch die mittleren beiden Gitter werden inelastisch gestreute Elektronen mittels eines Gegenfeldes vom Leuchtschirm abgehalten.

Die mittlere freie Weglänge niederenergetischer Elektronen beträgt etwa 6 \AA , d.h. etwa zwei bis drei Monolagen, da der Streuquerschnitt niederenergetischer Elektronen sehr groß ist. Elektronen, die tiefer als die freie Weglänge eindringen, werden inelastisch gestreut.

Abb. 2.5 zeigt schematisch den Aufbau eines LEED-Systems. Die Elektronen werden aus der Quelle heraus auf die Oberfläche der Probe beschleunigt. Dieser Elektronenstrahl wird von der Probe zurückgestreut und die gebeugten Elektronen werden auf einem Leuchtschirm durch Fluoreszenzstrahlung sichtbar gemacht. Der Leuchtschirm ist ein Ausschnitt einer Kugeloberfläche, deren Mittelpunkt in der Probenoberfläche liegt.

Das erste Gitter liegt auf demselben Potential wie die Probe, so dass die Elektronen eine gerade Flugbahn haben. Die Gitter 2 und 3 liegen auf einem Gegenfeldpotential, um inelastisch gestreute Elektronen vom Leuchtschirm abzuhalten. Gitter 4 liegt wieder auf Probenpotential, um einen Felddurchgriff des Leuchtschirms, der auf einem hohen positiven Potential (+4 kV) liegt, zu

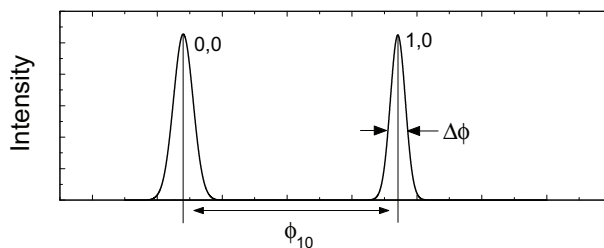


Abbildung 2.6: Definition der Transferweite.

verhindern.

Ein wichtiges Kriterium für die Untersuchung mit LEED ist die Transferweite t . Sie macht eine Aussage über die räumliche Kohärenz des von der Elektronenquelle ausgehenden Elektronenstrahls und ist definiert als die Breite des parallelen Elektronenstrahls, die bei perfekter Quelle und perfekter Abbildung die gleiche Breite der Beugungsreflexe bewirkt wie der reale Elektronenstrahl bei der Beugung an einem idealen Kristall. Anhand der in Abbildung 2.6 definierten Halbwertsbreite eines LEED-Reflexes ergibt sich die Transferweite durch

$$t = a \cdot \frac{\varphi_{10}}{\Delta\varphi}, \quad (2.38)$$

wobei a die Gitterkonstante der Probenoberfläche ist. Bei einem Standard LEED-System beträgt t typischerweise 150 \AA .

2.4 Magnetische Anisotropie

Für die Ausrichtung der Magnetisierung bezogen auf die Kristallebenen in magnetischen Materialien existieren sogenannte leichte Achsen, in denen die Magnetisierung bevorzugt zeigt. Diese Tatsache wird als magnetische Anisotropie bezeichnet.

Der *Spinreorientierungsübergang* (engl.: *spinreorientation transition*, SRT) in ferromagnetischen dünnen Schichten beschreibt eine Veränderung der leichten magnetischen Achse und somit eine Neuausrichtung der Magnetisierung. In diesem Abschnitt wird eine kurze zusammenfassende Darstellung der für die Diskussion des SRT relevanten Anisotropieerme gegeben. [Elm99]

Für eine Diskussion des SRTs ist eine Betrachtung von Beiträgen der zweiten und vierten Ordnung zur magnetischen Asymmetrie notwendig [Fri94], woraus, wie im Folgenden gezeigt wird, in Abhängigkeit vom Anisotropiebeitrag der vierten Ordnung, drei verschiedene Arten des SRTs resultieren. Der SRT kann durch eine allmähliche Rotation der Magnetisierung (*kontinuierlicher SRT*) oder durch einen Zustand der Koexistenz von lokalen Bereichen mit senkrechter bzw.

ebener Magnetisierung (*diskontinuierlicher SRT*) beschrieben werden. Die dritte Möglichkeit ist ein Verschwinden der vierten Ordnung, was zu einem Wegfall der magnetischen Anisotropie und somit zum Verlust der ferromagnetischen Ordnung während des SRT führt (*spezieller SRT*) [Mer66, Ban88].

Der Ursprung der magnetischen Anisotropie liegt in der freien Energie F eines magnetischen Materials, die aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung einen kleinen richtungsabhängigen Anteil besitzt. Die Richtungen, in denen die freie Energie minimal wird, sind die bevorzugten Richtungen (die leichte Achsen) für die Magnetisierung \vec{M} . Maxima in F entsprechen den schweren Achsen. In magnetischen Körpern tragen die Form des magnetischen Körpers (*Formanisotropie*) und die Kristallstruktur (*Kristallanisotropie*) zur magnetischen Anisotropie bei. In dünnen Schichten kommt als weiterer Beitrag die *Oberflächenanisotropie* hinzu. Dominiert wird die Anisotropie in dünnen Schichten durch die Formanisotropie, die stets eine Magnetisierung in der Schichtebene begünstigt. Die Oberflächenanisotropie, die aufgrund der Symmetriebrechung an der Oberfläche (bezeichnet als *Néel'sche Oberflächenanisotropie*) entsteht, kann sowohl eine leichte Achse senkrecht zur Oberfläche, als auch eine Ausrichtung in der Ebene begünstigen. Wird durch die Oberflächenanisotropie eine senkrechte Magnetisierung bevorzugt, kann es unterhalb einer kritischen Schichtdicke zu einer Neuausrichtung der leichten Achse aus der Schichtebene in die Schichtnormale kommen. Dieser SRT wird als *schichtdickenabhängiger SRT* bezeichnet. Ein Beispiel hierfür ist Fe/Mo(110). In den ersten beiden Lagen auf Mo(110) besitzt Eisen eine senkrechte leichte Achse und ab der dritten Lage überwiegt die Formanisotropie, wodurch die leichte Achse in die [001]-Richtung, d.h. in die Ebene, wechselt. [Uso04]

Die Winkelabhängigkeit der freien Energie F kann am Einfachsten in einem Polarkoordinatensystem beschrieben werden, d.h. $F = F(\vartheta, \varphi)$, wobei ϑ dem Polarwinkel zwischen der Oberflächennormalen und der Magnetisierung \vec{M} und φ dem Azimutalwinkel in der Schichtebene zwischen einer niedrig indizierten Kristallrichtung und der in die Ebene projizierten Magnetisierung entspricht. In dem hier diskutierten System Fe/Mo(110) beschreibt ϑ den Winkel zwischen der [110]-Achse und \vec{M} . Dementsprechend ist φ der Winkel zwischen der [001]-Achse und \vec{M} . Interessante Sonderfälle für $F(\vartheta, \varphi)$ sind eine leichte Achse senkrecht zur Oberfläche, d.h. ein Minimum für $F(\vartheta = 0, \varphi)$, sowie eine leichte Achse in der Schichtebene ($F(\vartheta = \pi/2, \varphi)$).

Phänomenologisch kann die freie Energiedichte in einem dünnen Film als Summe von Formanisotropie, Kristallanisotropie F_v und Oberflächenanisotropie F_s als

$$\frac{1}{V}F(\vartheta, \varphi) = \frac{J_s^2}{2\mu_0} \cos^2 \vartheta + f_v(\vartheta, \varphi) + \frac{1}{d}f_s(\vartheta, \varphi), \quad (2.39)$$

mit der Schichtdicke d , dem Volumem V und der Formanisotropie $\frac{J_s^2}{2\mu_0} \cos^2 \vartheta$ geschrieben werden.

Allgemein kann die freie Energiedichte folgendermaßen formuliert werden:

$$\begin{aligned}
 f(\vartheta, \varphi) &= \frac{F(\vartheta, \varphi)}{V} \\
 &= \left(\frac{J_s^2}{2\mu_o} + K_{v,2\perp} + \frac{1}{d}K_{s,2\perp} \right) \beta_3^2 + \left(K_{v,2p} + \frac{1}{d}K_{s,2p} \right) \beta_3^2 \\
 &+ \left(K_{v,4xy} + \frac{1}{d}K_{s,4xy} \right) \beta_1^2 \beta_2^2 + \left(K_{v,4yz} + \frac{1}{d}K_{s,4yz} \right) \beta_2^2 \beta_3^2 \\
 &+ \left(K_{v,4xz} + \frac{1}{d}K_{s,4xz} \right) \beta_1^2 \beta_3^2. \tag{2.40}
 \end{aligned}$$

Die Variablen $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ sind entsprechend der Darstellung der Kugelkoordinaten in einem kubischen Koordinatensystem gemäß

$$\begin{aligned}
 \beta_1 &= \sin \vartheta \cos \varphi \\
 \beta_2 &= \sin \vartheta \sin \varphi \\
 \beta_3 &= \cos \vartheta
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

definiert. Setzt man den Azimutalwinkel φ in Gleichung 2.40 auf Null, ergibt sich für die ϑ -abhängige Komponente der Anisotropie

$$\begin{aligned}
 f(\vartheta, \varphi = 0) &= \left\{ \left(\frac{J_s^2}{2\mu_o} + K_{v,2\perp} \right) + \frac{1}{d}K_{s,2\perp} \right\} \cos^2 \vartheta \\
 &+ \left\{ K_{v,4xz} + \frac{1}{d}K_{s,4xz} \right\} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta. \tag{2.42}
 \end{aligned}$$

Die Bezeichnung der *Ordnung* eines Anisotropieterms bezieht sich auf die Ordnung der zugehörigen Winkelfunktion, d.h. die Anisotropiebeiträge zweiter Ordnung ($K_{v,2}$ und $K_{s,2}$) skalieren in Gleichung 2.42 mit dem \cos^2 und die vierte Ordnung entsprechend mit $\sin^2 \cos^2$.

Im Folgenden wird ein Reorientierungsübergang aus der Senkrechten ($\vartheta = 0$) in die Ebene ($\vartheta = \pi/2$) betrachtet. Hierbei kann die Abhängigkeit der freien Energie von φ vernachlässigt werden und $F(\vartheta, \varphi)$ wird zu $F(\vartheta)$ vereinfacht. Mit Hilfe einer Neuformulierung der Anisotropiekonstanten K_2 zu \varkappa_2 und K_4 zu \varkappa_4 mittels

$$\varkappa_2 = \left(\frac{J_s^2}{2\mu_o} + K_{v,2\perp} \right) \cdot d + K_{s,2\perp} \quad \text{und} \quad \varkappa_4 = K_{v,4xz} \cdot d + K_{s,4xz}, \tag{2.43}$$

kann die freie Energie pro Fläche aus Gleichung 2.42 zu

$$\frac{F(\vartheta)}{A} = f(\vartheta) \cdot d = \varkappa_2 \cos^2 \vartheta + \varkappa_4 \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta, \tag{2.44}$$

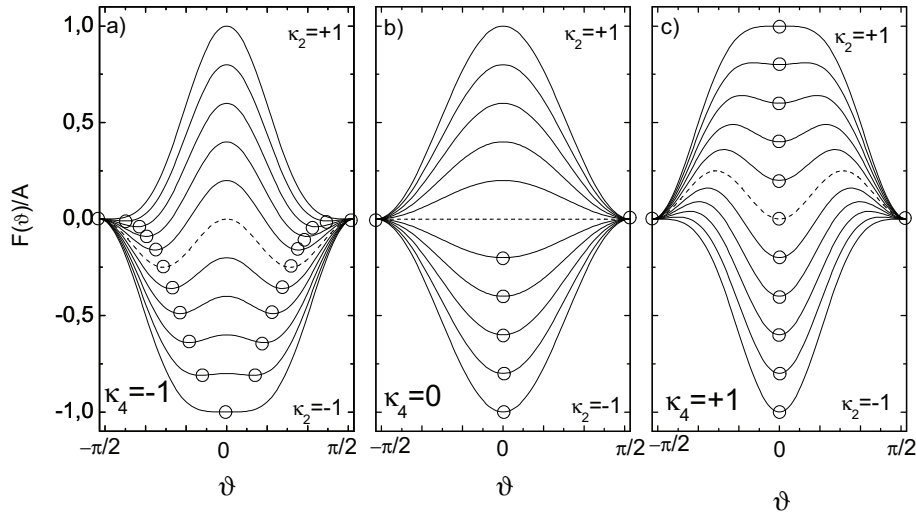


Abbildung 2.7: Darstellung der freien Energie als Funktion des Polarwinkel ϑ für jeweils konstante Werte von $\kappa_4 = -1; 0; +1$. κ_2 wird jeweils in regelmäßigen Schritten im Intervall $[-1; +1]$ erhöht. Die Minima der freien Energie sind durch Kreise markiert. Abhängig vom Vorzeichen von κ_4 ergeben sich drei verschiedene Reorientierungsübergänge. a) Kontinuierlicher SRT $\kappa < 0$ ($\kappa = -1 < 0$). Das Minimum der freien Energie wandert von $\vartheta = 0$ für $\kappa_2 = -1$ kontinuierlich nach $\vartheta = \pi/2$ für $\kappa_2 = +1$. b) Spezieller SRT für $\kappa_4 = 0$. Das Minima wechselt von $\vartheta = 0$ für $\kappa_2 < 0$ nach $\vartheta = \pi/2$ für $\kappa_2 > 0$. c) Diskontinuierlicher SRT für $\kappa > 0$ ($\kappa = +1$). Für $\kappa_2 > -1$ treten zwei Minima bei $\vartheta = 0$ und $\vartheta = \pi/2$ auf.

vereinfacht werden.

Durch κ_2 wird in dieser Darstellung die Energiedifferenz zwischen senkrechter und ebener Magnetisierung beschrieben, während κ_4 , wie im Folgenden diskutiert wird, die Krümmung von $f(\vartheta)$ beschreibt und somit die Form des Reorientierungsprozess festlegt.

Aufgrund der Dominanz der Formanisotropie nimmt κ_2 üblicherweise mit der Schichtdicke zu und wird für große Schichtdicken immer positiv, wodurch, wie bereits oben beschrieben, dickere Schichten in der Regel leichte magnetische Achsen in der Schichtebene besitzen. Je nach Vorzeichen von κ_4 wird die Art des SRTs bestimmt, wobei drei verschiedene Reorientierungsübergänge unterschieden werden können. Diese drei Möglichkeiten für die freie Energie als Funktion des Winkels ϑ sind in Abbildung 2.7 dargestellt. Die freie Energie ist jeweils bei einem festem Wert von κ_4 und für $-1 < \kappa_2 < +1$ in willkürlichen Einheiten aufgetragen.

Der von ϑ abhängige Verlauf der freien Energie bei verschiedenen Werten von κ_2 im Intervall $[-1; +1]$ ist für $\kappa_4 = 0$ in Abbildung 2.7 a) gezeigt. Das Minimum von $f(\vartheta)$ liegt in diesem Fall für $\kappa_2 < 0$ bei $\vartheta = 0$, d.h. die leichte Achse zeigt senkrecht zur Oberfläche. Für $\kappa_2 = 0$ ergibt sich der Sonderfall einer nicht

definierten magnetisch leichten Achse und einem damit einhergehenden Verlust der magnetischen Ordnung. Für Werte von $\kappa_2 > 0$ liegt das Minimum von F konstant bei $\vartheta = \pi/2$, d.h. in der Schichtebene. Dieser Fall für $\kappa_4 = 0$ wird als *spezieller SRT* bezeichnet.

Die Situation für $\kappa_4 < 0$ ist in Abbildung 2.7 b) dargestellt. Für $\kappa_2 = -1$ liegt auch in die Fall das Minimum von F bei $\vartheta = 0$. Mit Zunahme von κ_2 bildet sich bei $\vartheta = 0$ ein lokales Maximum mit zwei lokalen Minima auf beiden Seiten heraus. Mit zunehmendem κ_2 bewegt sich die Position dieser Minima in Richtung $\pm\pi/2$, d.h. die leichte Achse dreht sich kontinuierlich aus der Oberflächennormalen in die Schichtebene. Dieser Fall wird daher auch als *kontinuierlicher SRT* bezeichnet.

In Abbildung 2.7 c) ist die Situation für $\kappa_4 > 0$ gezeigt. Auch hier liegt das Minimum von F für $\kappa_2 = -1$ bei $\vartheta = 0$. Im Unterschied zu den beiden ersten Fällen bleibt dieses Minimum als lokales Minimum erhalten, solange $\kappa_2 < +1$ ist. Für $-1 < \kappa_2 < 0$ entstehen mit Erhöhung von κ_2 bei $\vartheta = \pm\pi/2$ zwei weitere lokale Minima, die für $\kappa_2 > 0$ das absolute Minimum der freien Energie darstellen. Für den SRT bedeutet dies eine Co-Existenz zweier leichter Achsen, weshalb gleichzeitig Bereiche mit senkrechter oder ebener Magnetisierung auftreten können. Die Stabilität der leichten Achsen hängt von κ_2 ab. Für $\kappa_2 < 0$ ist die stabilere leichte Achse bei $\vartheta = 0$ und für Werte von $\kappa_2 > 0$ bei $\vartheta = \pm\pi/2$. Durch Anregung, z.B. aufgrund von thermischer Energie, kann die Magnetisierung aus der einen leichten Achse in die andere umschwenken und innerhalb dieser Bereiche zu sprunghaften Änderungen der Magnetisierungsrichtung führen. Dieser Fall der Reorientierung wird als *diskontinuierlicher SRT* bezeichnet.

Durch die Untersuchung des Verlaufes der Spinreorientierung kann aufgrund dieser Diskussion eine qualitative Information über die Anisotropiekonstante κ_4 gewonnen werden. Eine solche Kenntnis über κ_4 kann im Hinblick auf die technische Anwendung Hinweise auf die Stabilität der magnetisch leichten Achsen, und somit der Stabilität des magnetischen Systems, liefern.

Kapitel 3

Experimentelles

Die experimentellen Arbeiten im Rahmen dieser Dissertation wurden an zwei unterschiedlichen UHV-Apparaturen (Ultra Hoch Vakuum, Basisdruck $\approx 1 \times 10^{-10}$ mbar) durchgeführt. Beide Anlagen sind jeweils mit einer Vorrichtung zur Probenpräparation, einem LEED-Instrument, einem Kerr-Magnetometer sowie einem Rastertunnelmikroskop ausgestattet.

Bei den Rastertunnelmikroskopen handelt es sich zum einen um ein Omicron μ -STM, mit dem Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt werden können, und um ein Helium-gekühltes Tieftemperatur STM (Omicron LT-STM), mit dem bei 5 K Proben­temperatur gemessen werden kann. In beiden Apparaturen können die Proben unter UHV-Bedingungen präpariert und in-situ untersucht werden.

3.1 Prinzipieller Aufbau eines Rastertunnelmikroskop

Im Wesentlichen besteht ein Rastertunnelmikroskop aus einer Scannereinheit und einer Regelungselektronik. Bei beiden verwendeten Rastertunnelmikroskopen ist die Scannereinheit als sogenannter Röhrenchscanner realisiert, auf dem die Tunnel­spitze fixiert ist. Das Röh­rchen besteht aus einem Piezo-Kristall in Form einer Röhre, die eine Innenelektrode und eine in vier Quadranten aufgeteilte Außenelektrode hat. Durch Anlegen einer elektrischen Spannung zwischen der Innen- und allen vier Außenelektroden wird das Röh­rchen in der Länge gestreckt bzw. gestaucht und die Spitze in z-Richtung positioniert. Die vier Außenelektroden können aber auch unterschiedliche Spannungen zur Innenelektrode haben. Somit kann eine Seite des Röh­rchens gedehnt und die andere Seite gestaucht werden, wodurch sich das Röh­rchen verbiegt und die Spitze in x- und y-Richtung auf den Bruchteil eines Atomdurchmessers genau positioniert werden kann.

Die Messung der Proben­topologie kann auf zwei verschiedene Weisen geschehen:

- Im sogenannten *Konstanthöhenmodus* (engl.: *Constant-Height-Mode*, CHM) wird die z-Position der Spitze konstant gehalten und die Probe in

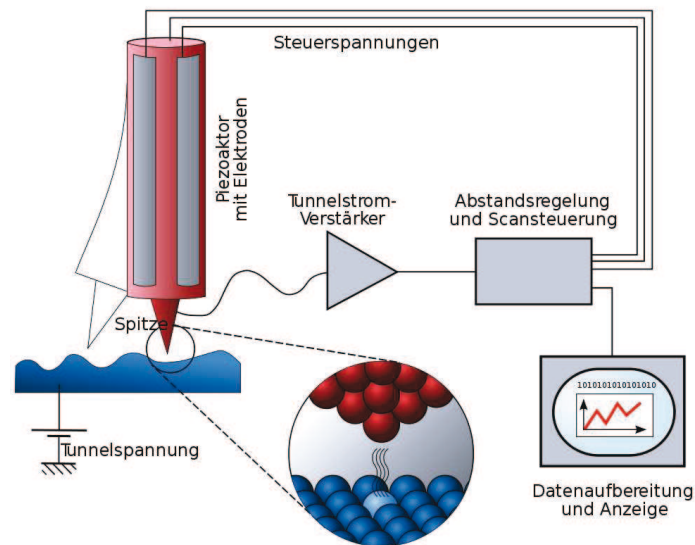


Abbildung 3.1: Prinzipieller Aufbau eines Rastertunnelmikroskops

x- und y-Richtung zeilenweise abgerastert. Durch Höhenunterschiede auf der Probenoberfläche variiert der Tunnelstrom und wird als Funktion des Ortes gemessen. Für die Darstellung der Probenmorphologie wird der Tunnelstrom in Helligkeitswerte übersetzt und in einem Bild als Helligkeitskontrast dargestellt. Der Vorteil dieser Methode liegt in der erreichbaren hohen Scangeschwindigkeit, so dass mit einer Bildwiederholrate von mehr als 25 Bildern pro Sekunde gemessen werden kann. Allerdings eignet sich dieser Modus nur für flache Oberflächen, da sonst die Gefahr eines Kontakts mit der Probenoberfläche besteht.

- Eine andere Methode stellt der *Konstantstrommodus* (engl.: *Constant-Current-Mode*, CCM) dar. Hierbei wird der Tunnelstrom durch eine Regelung des Abstandes zwischen Probe und Spitze bei der Rasterung über der Probenoberfläche konstant gehalten und dabei die z-Bewegung des Scanners als Funktion des Ortes gemessen. Diese Höheninformationen lassen sich wie oben in Helligkeitswerte übersetzen und die Topographie kann somit in einem Bild dargestellt werden. Dieser Modus stellt den am Häufigsten verwendeten Betriebsmodus von Rastertunnelmikroskopen dar und bietet eine höhere vertikale Auflösung als der Konstanthöhenmodus. Die erreichbare Scangeschwindigkeit in diesem Modus ist jedoch weitaus geringer als im Konstanthöhenmodus, da die z-Position des Scanners permanent durch einen Regelkreis kontrolliert und geregelt wird. Die Aufnahme eines STM-Bildes dauert in der Regel zwischen wenigen Minuten bis hin zu mehreren Stunden.

Bei den Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurde der Konstantstrommodus verwendet.

3.2 Tunnelspektroskopie

Für die Messung von Tunnelstromspektren wird die Spitze an der zu untersuchende Stelle positioniert und die Regelschleife deaktiviert. Das bedeutet, dass der Spitze-Probe-Abstand während der Messung konstant ist. Der Abstand für die Messung der Spektren wird durch die Wahl der Stabilisierungsparameter (Gap-Spannung und Tunnelstrom-Setpoint) vor Beginn der Messung festgelegt. Bei der Messung eines Spektrums wird die Spannung innerhalb eines vorher definierten Intervalls in diskreten Schritten variiert und der Strom als Funktion der Spannung $I(U)$ gemessen. Wie in Abbildung 3.2 gezeigt, erhält man durch ein nachträgliches Differenzieren der gemessenen $I(U)$ -Kurve ein differentielles $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeitsspektrum. Da der Tunnelstrom meist mit einem Rauschen behaftet ist, führt die Messung und Differenzierung eines einzelnen Tunnelstromspektrums zu keinem verwertbaren Ergebnis. Zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses müssen möglichst viele (> 10) $I(U)$ Spektren gemessen und gemittelt werden.

Simultan zur Messung eines $I(U)$ -Tunnelstromspektrums kann mittels eines Lock-In-Verfahrens direkt ein differentielles $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeitsspektrum gemessen werden. Für eine solche Lock-In-Messung wird die Biasspannung, und somit auch der Tunnelstrom, mit einer Frequenz ν moduliert. Der Lock-In-Verstärker misst somit direkt die Ableitung des Tunnelstroms als Funktion der Spannung U , d.h. $dI/dU(U)$. Zur Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses kann mit dem Lock-In Verstärker das dI/dU -Signal über eine voreingestellte Zeit gemittelt werden. Bei der Messung von differentiellen Tunnelleitfähigkeitsspektren beträgt diese Mittelungszeit (*Zeitkonstante*) zwischen 30 und 300 ms. Wegen dieser Mittellung muss bei der Messung von $dI/dU(U)$ -Spektren vor der Aufnahme eines dI/dU -Wertes in jedem Messpunkt eine Mindestzeit (*Delay*) gewartet werden. Da dieses *Delay* zur Vermeidung von Messfehlern, wie z.B. der Verschiebung von Peaks, mindestens das Dreifache der Zeitkonstanten betragen sollte, dauert die Messung eines dI/dU Spektrum mit 100 Messpunkten bei einer Zeitkonstante von 100 ms und einer Akquisitionszeit von 5 ms

$$\begin{aligned}
 t &= 100 \cdot (3 \cdot \text{Zeitkonstante} + \text{Akquisitionszeit}) \\
 \Rightarrow t &= 100 \cdot (300 \text{ ms} + 5 \text{ ms}) \\
 &= 30,5 \text{ s.}
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

Da der Probe-Spitze Kontakt im Vakuum wie ein Kondensator wirkt, liefert das kapazitive Übersprechen den größten Beitrag zum modulierten Strom. Da dieser Anteil jedoch um 90° phasenverschoben zum eigentlichen Tunnelstrom ist, kann der eigentliche Tunnelstrom durch die Einstellung einer Phasenverschiebung am Lock-In-Verstärker herausgefiltert werden. Die Bestimmung der notwendigen Phasenverschiebung erfolgt durch eine Minimierung des Untergrundsignals bei

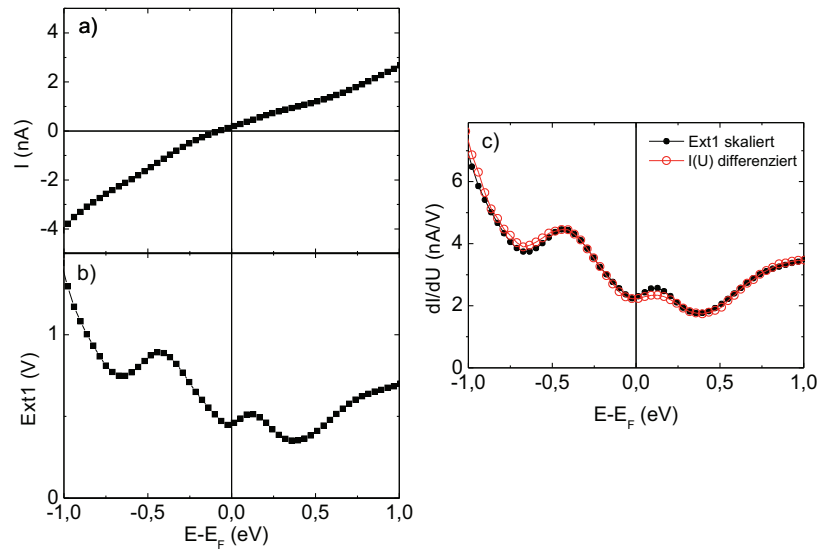


Abbildung 3.2: a) Tunnelstrom als Funktion der Gap-Spannung. Die $I(U)$ besitzt einen leichten Offset aufgrund einer nicht korrekten Einstellung des Tunnelstromverstärkers. Bei korrekter Einstellung des Verstärker ist der Strom $I(U = 0 \text{ V}) = 0 \text{ nA}$. b) Zeitgleich gemessenes Ext1(U)-Signal, $U_{mod} = 20 \text{ mV}$, $sensitivity = 30 \text{ mV}$, $\nu = 6 \text{ kHz}$. c) Vergleich skaliertes Ext1(U) Signal mit differenziertem Tunnelstrom.

der Messung von $dI/dU(U)$ -Spektren.

Die Frequenz ν der Modulation sollte möglichst hoch gewählt werden. Bei einer zu geringen Frequenz ist es möglich, dass die Regelschleife die Modulation des Tunnelstroms durch eine Anpassung der z-Position kompensiert und es somit zu einer Modulation des Abstands zwischen Probe und Spitze kommt. Bei einer hohen Frequenz kann bei gleicher Mittelungszeit des Lock-In-Verstärkers über mehr Schwingungsperioden gemittelt werden als bei einer niedrigeren Frequenz. Daraus folgt, dass die Mittelungszeit bei einer hohen Modulationsfrequenz reduziert werden kann und somit eine schnellere Messung von dI/dU -Spektren möglich ist. Begrenzende Faktoren für die Modulationsfrequenz stellen die Resonanzfrequenz des Scanners und die Grenzfrequenz des, durch den kapazitiven Probe-Spitze-Tunnelkontakt in Verbindung mit dem Widerstand des tunnelstromführenden Kabels entstehenden, Tiefpasses dar. Gute Werte für die Modulationsfrequenz liegen zwischen 5 – 9 kHz bei einer Amplitude von etwa 20 bis 50 mV.

Der Lock-In-Verstärker gibt als Messwert für die differentielle dI/dU -Tunnelleitfähigkeit eine analoge Spannung zwischen 0 V und 10 V aus. Diese Spannung wird in die Steuerelektronik des STM eingespeist und kann von der Software verarbeitet werden. Da diese Spannung über den Ext1-Eingang der Steuerelektronik eingelesen wird, wird dieses Signal als Ext1(U) bezeichnet. Um den tatsächlichen dI/dU -Wert aus dieser Spannung zu bestimmen, muss das Ext1(U)-Signal

mit

$$\frac{dI}{dU} = \underbrace{\frac{Ext1 \cdot sensitivity}{10 \text{ V}}}_{=dI(nA)} \cdot \frac{10^9}{IVC} \cdot \underbrace{\frac{1}{U_{mod}}}_{=1/dU(1/U)} \quad (3.2)$$

umgerechnet werden. In diese Rechnung geht unter anderem der Verstärkungsfaktor IVC des Tunnelstromverstärkers ein. Weitere Parameter sind die Eingangsverstärkung des Lock-In-Verstärkers ($sensitivity$) und die Amplitude der Modulationsspannung (U_{mod}). In Abbildung 3.2 a) ist eine über mehrere (>100) $I(U)$ Einzelspektren gemittelte Tunnelstromkurve als Funktion der Spannung dargestellt. Das simultan gemessene Ext1(U)-Signal ist in Abbildung 3.2 b) gezeigt. Die Ableitung der $I(U)$ -Tunnelstromkurve, dargestellt in Abbildung 3.2 c), ergibt das $dI/dU(U)$ -Spektrum in der absoluten Einheit nA/V . Eine Skalierung des gemessenen Ext1(U)-Signales gemäß Gleichung 3.2 führt zum gleichen absoluten $dI/dU(U)$ -Spektrum. Leichte Unterschiede in der absoluten Peakhöhe zwischen den beiden Messmethoden können durch die Tatsache erklärt werden, dass in beiden Fällen nicht über exakt die gleichen Einzelspektren gemittelt wurde. Weiterhin kommt es durch die Modulation der Biasspannung zu einer Mittelung der Tunnelleitfähigkeit innerhalb des Energieintervalls $[(E - E_F) - U_{mod}; (E - E_F) + U_{mod}]$.

Zusätzlich zur Messung eines Spektrums an einer einzelnen Stelle auf der Probe kann mittels STS (eng.: *Scanning Tunneling Spectroscopy*) die elektronische Struktur der Probe ortsaufgelöst untersucht werden. Bei der Aufnahme von solchen Spektroskopiebildern wird eine feste Spannung eingestellt, bei der gleichzeitig sowohl die Topographie als auch die differentielle dI/dU -Tunnelleitfähigkeit bei dieser Spannung gemessen werden. Die differentielle Tunnelleitfähigkeit wird in eine Farbwertskala übersetzt und ortsaufgelöst dargestellt. Für die Messung solcher differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarten muss am Lock-In-Verstärker eine kürzere Zeitkonstante als für die Messung der differentiellen Tunnelleitfähigkeitsspektren gewählt werden. Um eine gute Auflösung zu erhalten, sollte, bei einer Zeitkonstante von 10 ms, die Scangeschwindigkeit etwa ein Viertel der Bildbreite in nm/s betragen. Mit Hilfe diese Methode lassen sich sehr leicht ortsaufgelöst Unterschiede der elektronischen Struktur auf der Probenoberfläche sichtbar machen.

3.2.1 Rastertunnelstromspektroskopie

Eine interessante Messmethode stellt die Rastertunnelstromspektroskopie dar. Hierbei wird auf einem vorgegebenen ($x \times y$)-Raster, d.h. in jedem x-ten Bildpunkt in jeder y-ten Zeile, ein $I(U)$ -Tunnelstromspektrum gemessen. Daraus resultiert zusätzlich zur Topographie ein ortsaufgelöster Datensatz mit $I(U)$ -Spektren.

Prinzipiell ist es auch möglich $dI/dU(U)$ -Spektren auf einem solchen Raster zu messen, allerdings führt dies zu sehr langen Messzeiten, da, wie oben beschrie-

ben, bei der Messung von $dI/dU(U)$ -Spektren bei jedem Messpunkt des Spektrums eine Mindestzeit gewartet werden muss, bevor der Messwert aufgenommen werden kann. Bei einer Auflösung der STM-Bilder von 500×500 Bildpunkten werden auf einem 3×3 -Raster 27 556 Spektren gemessen. Bei 30 s Messdauer je $dI/dU(U)$ -Spektrum (vgl. Gleichung 3.1) dauert allein die Messung aller 27 566 $dI/dU(U)$ Spektren ca. 229 Stunden. Die Messung der gleichen Anzahl $I(U)$ Spektren hingegen benötigt bei lediglich 240 μ s Messdauer je Messwert (160 μ s Akquisitionszeit + 80 μ s Delay) nur 11 Minuten. Hinzu kommt noch die Messzeit des „normalen“ STM/STS-Scans (Topographie), die bei 500 Scanlinien und einer Scangeschwindigkeit von 4 Sekunden je Scanlinie etwa 55 Minuten beträgt. Der Vorteil des besseren Signal-zu-Rausch-Verhältnisses eines einzelnen $dI/dU(U)$ Spektrums im Vergleich zu einem $I(U)$ -Spektrum wird durch die hohe Zahl der $I(U)$ Spektren bei der Rastermessung ausgeglichen, wodurch ebenfalls ein sehr gutes Signal-Rausch-Verhältnis realisierbar ist. Die gemessenen $I(U)$ Spektren werden, wie oben beschrieben, bei der Datenauswertung differenziert. Ebenso können aus dem $I(U)$ Datensatz differentielle dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarten bei beliebigen Energien innerhalb des vorher ausgewählten Messintervalls der Spektren erstellt werden.

3.3 Das Raumtemperatur-STM

Die Apparatur besteht im Wesentlichen aus zwei Kammern. In der größeren Kammer (in Abbildung 3.3 a) mit A markiert) finden die Probenpräparation und LEED-Untersuchungen statt. Weiterhin besteht in dieser Kammer die Möglichkeit, das Magnetisierungsverhalten der Proben mittels Kerr-Magnetometrie temperaturabhängig zu vermessen (vgl. [Pra04c]). Die Probe befindet sich in diesem Kammerteil in einem Manipulator, welcher sich in x-, y-, und z-Richtung bewegen und entlang der x-Achse drehen lässt. Weiterhin kann die Neigung des Kristalls in der y-Achse innerhalb eines kleinen Bereiches variiert werden. Durch ein Filament kann das Substrat indirekt geheizt werden. Über einen Kupferblock, durch den flüssiger Stickstoff geleitet werden kann, ist es möglich, die Probe auf ca. 150 K zu kühlen. Zur Bestimmung der Restgaszusammensetzung befindet sich in der Hauptkammer ein Quadrupolmassenspektrometer.

In der kleineren Kammer (Abbildung 3.3 a), (B)) befindet sich das Rastertunnelmikroskop (Omicron μ -STM). Mithilfe eines Transferstab können die Proben aus der Hauptkammer in die STM-Kammer transportiert werden. In der Hauptkammer kann die Probe mit Hilfe des XYZ-Manipulator in eine Tasche am Transferstab gesteckt werden. In der STM-Kammer befindet sich ein Wobble-Stick, um die Probe aus dem Transferstab in den Probenstisch am STM zu stecken.

Um Störungen der Messungen durch Vibrationen und Schwingungen zu vermeiden, steht die Anlage auf vier Luftkissenfederfüßen. Als einzige fest installierte Pumpe befindet sich unterhalb der Hauptkammer eine Ionen-Getter-Pumpe.

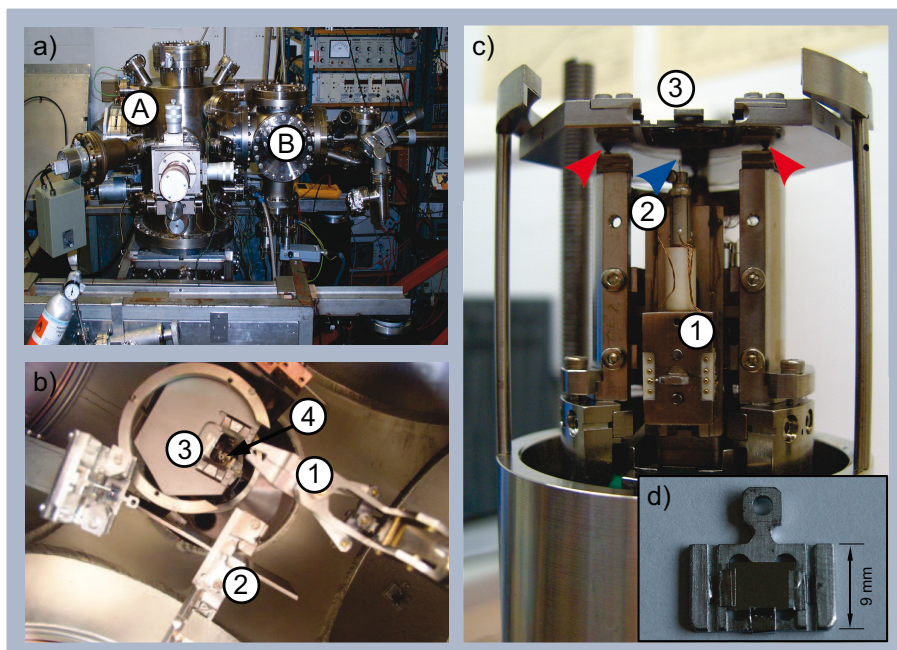


Abbildung 3.3: a) Foto der Raumtemperatur-STM Apparatur. Das STM befindet sich in der kleineren Kammer (B) im linken Teil. Die Probenpräparation und Charakterisierung mittels LEED findet in der größeren Kammer (A) statt. b) Blick von oben in die STM-Kammer. Zu sehen sind der Greifer des Wobblesticks (1), der Transferstab (2) sowie der Probentisch (3) und der Scanner (4) des STMs. c) Foto des STM von der Seite. Auf dem Microslide (1), der den Scanner z-Richtung bewegt, ist das Scannerröhrchen (2) aufgeklebt. Gut erkennbar ist die Kontaktierung der xy-Piezos des Scanners (y-Piezo vorn sichtbar). Oben auf dem Scannerröhrchen befindet sich die Spitze (blauer Pfeil), welche mittels einer kleinen Schraube fixiert wird. Über der Spitze ist die Probe zu sehen, welche in den Probentisch (3) des STM hineingesteckt wird. Der Probentisch kann mit drei Piezostacks (rote Pfeile) grob in x und y Richtung verfahren werden. d) Foto des W-Kristalls im Probenhalter. Der Kristall wird durch Mo-Bleche in dem aus Mo gefrästen Probenhalter fixiert. Die Führungsrillen sichern den Probenhalter gegen seitliches Verrutschen im Manipulator. An der Halteöse kann der Probenhalter mit dem Wobblestick gegriffen und transferiert werden.

Um die Kammer nach einem Belüftungsvorgang wieder zu evakuieren, kann über einen KF-Flansch ein externer Turbopumpenstand angeschlossen werden.

Die Kontrolle des Messvorgangs erfolgt softwaregesteuert mit dem Programm Scala Pro, das in der Version 2.1 vorliegt und auf einer Sun Solaris Workstation installiert ist.

Die Grobpositionierung von Probe und Spitze wird mittels einer kabelgebundenen Steuerbox (*Remotebox*) vorgenommen und wird mit Hilfe einer CCD-Kamera kontrolliert. Dabei kann die Spitze durch einen Microslide, der nach dem sog. *stick-slip*-Prinzip funktioniert, in z-Richtung (senkrecht) bewegt werden. Dabei

werden die Piezoelemente des Microslide durch eine Sägezahnspannung angesteuert. Durch das Wechselspiel zwischen Haftreibung und Trägheit bewegt sich der Scanner nur während der langsam ansteigenden Sägezahnabschnitte (*stick*), während bei den steilen Spannungsflanken der Piezo auf der Gleitfläche durchrutscht (*slip*) und der Scanner somit nicht bewegt wird (vgl. Abbildung 3.4).

Die Annäherung der Spitze an die Probe erfolgt in drei Schritten:

1. Als erstes wird der Scanner mit einem *microslide*-Piezomotor von unten an die Probe herangefahren. Im Kamerabild ist bei korrekter (x,y)-Position der Probe auf der Oberfläche der Probe die Spitze als Spiegelbild sichtbar. Mithilfe dieses Abbildes lässt sich der Abstand zwischen Probenoberfläche und Spitze bis auf etwa $\pm 0,1$ mm genau abschätzen und dementsprechend wird die Spitze möglichst nah an die Probenoberfläche herangebracht.
2. Durch eine Automatik wird die Spitze weiter an die Probenoberfläche angenähert. Hierzu wird eine Biasspannung von +1 V und ein Tunnelstromsetpoint von 2,3 nA im Kontrollfenster der Steuersoftware eingestellt. Die Empfindlichkeit der Regelung (*Feedbackschleife*) wird auf 25 % eingestellt. Bei der automatischen Annäherung wird der Scanner schrittweise (1 Schritt entspricht zwischen 40 und 140 nm) an die Probe herangefahren. Nach jedem Schritt wird gemessen, ob bei der eingestellten Spannung der vorausgewählte Tunnelstrom fließt. Fließt kein, oder ein zu geringer, Tunnelstrom wird der Scanner einen weiteren Schritt an die Probe herangefahren und erneut der Tunnelstrom gemessen, bis der voreingestellte Tunnelstrom zwischen Probe und Spitze fließt.
3. Nach der automatischen Annäherung befindet sich die Spitze gerade eben in Tunneldistanz von der Probenoberfläche. Damit sich die Spitze in einem guten „Arbeitsabstand“ von der Probenoberfläche befindet, muss der Scanner mit der Remotebox ein bis zwei weitere Schritte an die Probe herangefahren werden. Ohne diese weitere manuelle Annäherung besteht die Gefahr, dass der Abstand während der Messung zu groß wird und somit der Tunnelkontakt verloren geht.

Bei der Messung von $dI/dU(U)$ -Spektren wird die Biasspannung mit einer Frequenz von 8,44 kHz bei einer Amplitude von 50 mV moduliert. Für die Zeitkonstante am Lock-In-Verstärker wird dabei ein Wert von 300 ms eingestellt. Weiterhin wird für die Eingangsverstärkung ein Wert von 300 mV eingestellt. Für die Aufnahme von differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarten wird eine Zeitkonstante von 10 ms eingestellt. Bei der Messung der in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse ist die Phasenverschiebung am Lock-In-Verstärker auf -63° eingestellt. Die Verstärkung des Tunnelstromvorverstärkers beträgt $IVC = 1 \times 10^8$ V/A und die erreichbare laterale Auflösung beträgt etwa 1 pm.

Nähere Einzelheiten zur Apparatur sind in der Referenz [Hau98] zu finden und weitere technische Details des μ -STMs können in den technischen Handbüchern des Gerätes (Referenzen [Omi94] und [Omi96]) nachgelesen werden.

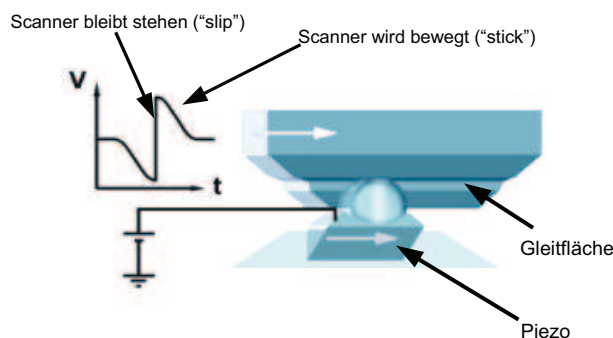


Abbildung 3.4: Illustration der Funktion eines Piezo-Microslides nach dem „stick-slip“-Prinzip (Zeichnung entnommen aus [Mai06])

3.4 Das Tieftemperatur-STM

Die Rastertunnelmikroskopie bei tiefen Temperaturen bietet gegenüber der Messung bei Raumtemperatur diverse Vorteile. Zum Einen sind stabilere Tunnelbedingungen vorhanden, da thermische Effekte, wie zum Beispiel die Bewegung von Atomen auf der Oberfläche, unterdrückt sind, wodurch eine Auflösung auf atomarer Ebene ermöglicht wird. Zum Anderen ist die Untersuchung magnetischer Strukturen möglich, da bei Temperaturen unterhalb der Curietemperatur ferromagnetischer Schichten gemessen werden kann. Die Curietemperaturen von ultradünnen Schichten sind weitaus geringer, als diejenigen von entsprechenden Volumenproben. So beträgt beispielsweise die Curietemperatur von Volumeneisen 1041 K und von einer monoatomar dicken Schicht (d.h. eine Monolage) auf der Wolfram (110)-Oberfläche etwa 220 K [Pra04c].

Bei dem verwendeten Tieftemperatur STM handelt es sich um ein mit flüssigem Helium gekühltes Omicron LT-STM, welches die Messung bei einer Proben-temperatur von 5 K ermöglicht. Die Anlage des Tieftemperatur-STMs ist, wie auch beim Raumtemperatur-STM, ein zwei-Kammern System. In Abb. 3.5 a) ist ein Foto dieser Apparatur zu sehen. Der prinzipielle Aufbau der Apparatur entspricht der oben beschriebenen Raumtemperatur-STM Anlage. Die Präparation und Charakterisierung mittels LEED werden in der linken Kammer (Präparationskammer) durchgeführt. Mittels eines Transferstabes werden die Proben in die STM-Kammer (rechte Kammer) überführt. Zwischen Präparations- und STM-Kammer befindet sich seitlich, durch ein Ventil getrennt, eine Schleusenkammer, mit deren Hilfe Proben und Spitzen in das Vakuum eingebracht werden können, ohne die eigentliche Kammer zu belüften. Da das LT-STM über eine interne Schwingungsdämpfung verfügt, steht diese Anlage nicht auf Luftfederfüßen. Im Unterschied zur RT-STM-Anlage wird die Probe in der Präparationskammer

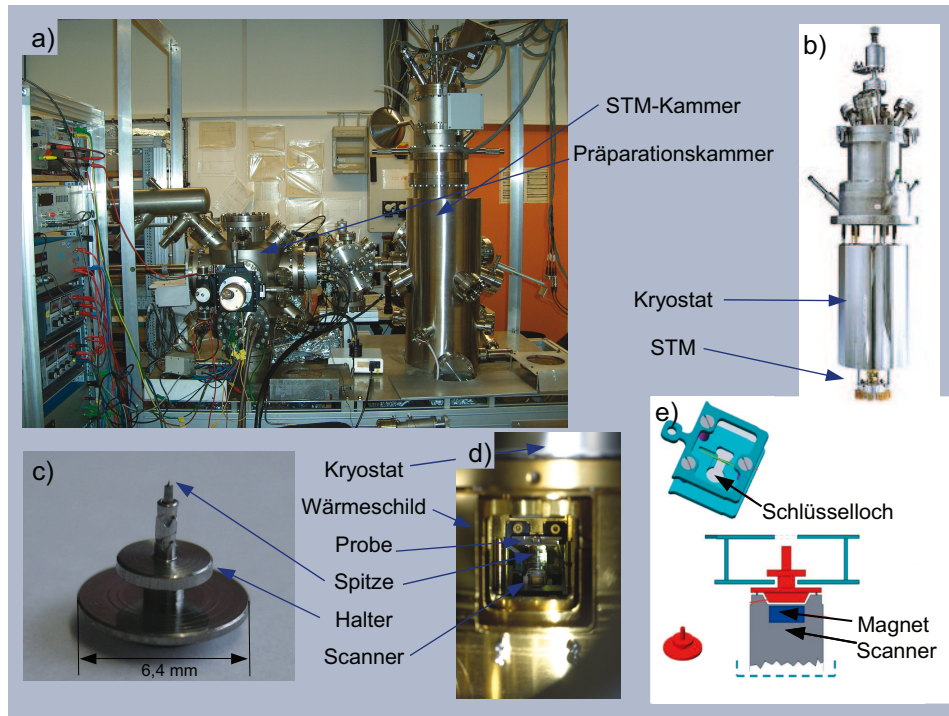


Abbildung 3.5: a) Foto der Tieftemperatur-STM-Anlage. b) Foto des Tieftemperatur-STM (Omicron LT-STM). Unterhalb des zwei-Kammer-Kryostaten befindet sich das Mikroskop. c) Foto einer STM-Spitze. Die Spitze ist in einem Halter montiert, welcher durch einen Magneten auf dem Scanner fixiert wird. d) Blick auf das Mikroskop durch den geöffneten Wärmeschild hindurch. e) Die Spitze kann mittels eines Transporthalters in-situ vom Scanner genommen und zur Reinigung und Beschichtung (vgl. Abschnitt 3.6) in die Präparationskammer transferiert werden. (Skizzen entnommen aus [Mai06]) Der in dieser Arbeit verwendete Spitzentransporthalter besitzt im Vergleich zum gezeigten Halter ein um 90° gedrehtes Schlüsselloch.

mit einem Wobblestick in die Probenaufnahme des XYZ-Manipulators gesteckt. Mithilfe dieses Manipulators wird die Probe über den Verdampfern oder vor der LEED-Optik positioniert.

Abbildung 3.5 c) zeigt eine STM-Spitze in einem Halter. Das Material des Halters ist magnetisch und wird durch einen Magneten auf dem Scanner fixiert (vgl. Abbildung 3.5 e). Der Aufbau des Röhrenscanners entspricht dem des Raumtemperatur-STMs. Durch die Montage der Spitze in dem magnetischen Halter ergibt sich hier die Möglichkeit des Transfers der STM-Spitze. Hierzu wird die Spitze in einen Transporthalter eingesetzt. In Abbildung 3.5 e) ist dies schematisch gezeigt. Die äußeren Abmessungen der oberen Platte des Transporthalters sind identisch mit denen des Probenhalters. Der Transporthalter wird für einen Transfer der Spitze aus dem STM heraus in die Probenaufnahme des STMs gesteckt und die Spitze mittels des Piezoantriebs des Scanners in das

im Halter vorhandene Schlüsseloch eingefahren. Anschließend wird der Transporthalter samt Spitze mittels eines Wobblesticks aus dem STM herausgezogen und kann entweder in ein neben dem STM montiertes Probenkarussell oder in eine Probenaufnahme am Transferstab geschoben werden. Das Probenkarussell bietet mit seinen sechs Steckplätzen die Möglichkeit, mehrere Proben und Spitzen im Vakuum zu lagern. Mit dem Transferstab kann die Spitze, wie auch die Probe, in die Präparationskammer transferiert und beschichtet werden. Die Beschichtung von STM-Spitzen wird detailliert in Abschnitt 3.6 beschrieben.

Mittels einer eingebauten PBN-Heizkeramik kann die Temperatur der Probenaufnahme des STMs variiert werden. Die Temperatur der Probenaufnahme und somit die Temperatur der Probe wird durch eine Si-Diode gemessen. Der verwendete PID-Temperaturcontroller (LakeShore 331) kann über eine digitale Schnittstelle mittels LabView vom PC gesteuert und die Probertemperatur als Funktion der Zeit protokolliert werden.

Der Tunnelstromverstärker befindet sich außerhalb des Vakuums und die Verstärkung IVC lässt sich mittels der Steuersoftware (Scala Pro, Version 4.1) zwischen $IVC = 3 \times 10^7$ V/A (Tunnelstrom zwischen 0,6 nA und 333 nA) und $IVC = 3 \times 10^9$ V/A (Tunnelstrom von 1 pA bis 3 nA) umschalten. Durch die unterschiedliche Verstärkung ergeben sich verschiedene Bandbreiten des Verstärkers. Im 333 nA Bereich beträgt die Bandbreite 40 kHz und im 3 nA Bereich 800 Hz. Mithilfe eines zuschaltbaren Filters lässt sich die Bandbreite auf 20 kHz (33 nA) bzw. 200 Hz (3 nA) reduzieren. Durch diese Begrenzung kann der störende Einfluss höher frequenter Schwingungen gemindert werden. Gleichzeitig wird dabei jedoch auch die maximal mögliche Scangeschwindigkeit begrenzt. So muss zum Beispiel bei einer Bandbreite von 200 Hz und einer Bildauflösung von 500 Punkten je Zeile die Scannergeschwindigkeit soweit reduziert werden, dass die Zeitdauer je Zeile mindestens

$$t_{min} = \frac{2 \cdot 500 \text{ Bildpunkte/Zeile}}{200 \text{ Hz}} = 5 \text{ s/Zeile} \quad (3.3)$$

beträgt. Der Faktor 2 kommt daher, dass der Scanner jede Bildzeile zweimal abrastert (Hin- und Zurückbewegung) durchführt. Daraus ergibt sich eine Messzeit von etwa 42 Minuten je STM-Bild

Die Probenaufnahme und somit auch die Probe sind bei diesem STM geerdet und die Spannung wird an die Spitze angelegt. Das bedeutet, dass bei positiven Spannungen die Elektronen von besetzten Probenzuständen in unbesetzte Spitzenzustände tunneln.

Zur groben Positionierung der Spitze befindet sich der Scanner auf einem x-y-Tisch, welcher mit Microslides bewegt wird. Der maximale Verfahrensweg beträgt in x- und y-Richtung jeweils $\pm 2,5$ mm, so dass ein maximaler Probenausschnitt von 5×5 mm² untersucht werden kann. In z-Richtung kann der Scanner über eine Distanz von 10 nm gefahren werden. Bei Raumtemperatur beträgt die Schritt-

weite der Microslides zwischen 40 und 400 nm [Omi06].

Aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Piezosensitivität des Scanners ist das maximale Gesichtsfeld eines STM-Bildes bei tiefen Temperaturen weitaus kleiner als bei Raumtemperatur. Bei Raumtemperatur beträgt die Piezosensitivität bei einem maximalen Gesichtsfeld von $(10 \times 10) \mu\text{m}^2$ in x- und y-Richtung 20 nm/V und in z-Richtung 6,7 nm/V. Bei 5 K ist die Piezosensitivität auf 3,6 nm/V in x- und y-Richtung und 6,7 nm/V in z-Richtung reduziert. Das maximale Gesichtsfeld des Scanners ist bei dieser Temperatur $(1,8 \times 1,8) \mu\text{m}^2$. Bei Raumtemperatur beträgt der maximale z-Hub des Scanners 1 μm und bei 5 K kann eine vertikale Auflösung von weniger als 0,5 pm erreicht werden.

Die Kühlung des Mikroskops erfolgt durch tiefkaltverflüssigten Stickstoff und Helium. Bei dem Kryostaten handelt es sich um ein zylindrisches, konzentrisches Doppelkryostaten-System, d.h. ein zylinderförmiger innerer Kryostat, der von einem äußeren Kryostaten umgeben ist. Das Volumen beider Kryostate beträgt 3,5 Liter. Der innere Kryostat kann entweder mit flüssigem Stickstoff (für Messungen bei etwa 78 K Proben temperatur) oder mit flüssigem Helium (für Messungen bei 5 K) gefüllt werden und steht in direktem thermischen Kontakt mit dem Mikroskop, das sich direkt unter dem Kryostaten befindet. Um das STM herum befindet sich ein Kupfertopf, der fest an den inneren Kryostaten angeschraubt ist und somit die gleiche Temperatur wie dieser hat. Dadurch ist das STM vollständig von kalten Oberflächen umgeben, so dass kein signifikanter thermischer Einfluss der warmen Umgebung auf das Mikroskop besteht und sich das STM, solange der Kryostat gefüllt ist, in einem thermischen Gleichgewicht befindet. Dieser Kupfertopf ist mit einem weiteren umgeben, welcher auf Kugellagern aufgehängt ist und mithilfe des Wobblesticks gedreht werden kann. In den Kupfertöpfen befinden sich Sichtfenster und eine Öffnung. Durch diese Öffnung hindurch können die Probe und die Spitze in das STM eingesetzt werden. Durch den drehbaren äußeren Topf kann dieser Zugang geöffnet, bzw. geschlossen, werden. In Abbildung 3.5 b) ist der Kryostat mit dem STM ohne die Wärmeabschirmung gezeigt und Abbildung 3.5 d) zeigt einen Blick auf das STM durch die geöffnete Wärmeabschirmung hindurch.

Der äußere Kryostat wird mit flüssigem Stickstoff gefüllt und dient als Wärmeschild für den inneren Kryostaten, um somit die Vorhaltezeit des flüssigen Heliums zu vergrößern. Auch an diesen Kryostaten sind als Wärmeschild zwei Kupfertöpfe (ein fester Topf, der mit einem drehbaren Topf umgeben ist) montiert, die die Kupfertöpfe des inneren Kryostaten umgeben.

Die maximale Vorhaltezeit flüssigen Heliums beträgt etwa 24 Stunden, d.h. spätestens nach dieser Zeit muss der innere Kryostat erneut mit flüssigem Helium befüllt werden, um ein Aufwärmen des Mikroskops zu verhindern. Die Vorhaltezeit des Stickstoff im äusseren Kryostaten beträgt 12 bis 16 Stunden.

Das Uühlen des STMs von Raumtemperatur auf 5 K geschieht in zwei Schritten.

1. Zunächst werden beide Kryostate mit flüssigem Stickstoff gefüllt, um das Mikroskop vorzukühlen und dadurch den Verbrauch an flüssigem Helium zu reduzieren. Nach etwa $3\frac{1}{2}$ Stunden beträgt die Temperatur der Probenaufnahme etwa 79 K.
2. In die Auslaßöffnung des Heliumkryostaten wird ein langer Tubus, der bis an den Boden des Kryostaten reicht, eingeführt. Mittels einer Heliumgasflasche wird ein Heliumüberdruck im Kryostaten erzeugt und auf diese Weise der noch vorhandene flüssige Stickstoff aus dem Kryostaten durch den Tubus hindurch ausgeblasen. Nachdem der Stickstoff restlos entfernt ist, wird die Auslassöffnung an die Heliumrückführungsleitung des Labors angeschlossen.¹ In den Einfüllstutzen wird der *Heber* eingeführt, durch den das flüssige Helium aus der Kanne in den Kryostaten gefüllt wird. Die Kanne wird hierzu mithilfe eines Hubwagens auf etwa die gleiche Höhe wie der Kryostat angehoben und das Helium durch einen Überdruck von maximal 200 mbar in den Kryostaten gedrückt. Der Einfüllvorgang dauert etwa 45 min, da in dem anfangs noch warmen Kryostaten das Helium sofort verdampft und erst bei Temperaturen unterhalb von etwa 40 K im flüssigen Zustand im Kryostaten verbleibt. Nachdem der Kryostat mit Helium gefüllt ist, wird der Heber entfernt und die Einfüllöffnung verschlossen. Nach etwa 4 Stunden befindet sich das STM in einem stabilen thermischen Gleichgewicht bei einer Temperatur von 5 K.

Eine detaillierte Beschreibung der Füllprozedur findet sich ebenfalls im Benutzerhandbuch des LT-STM [Omi06]. Das Nachfüllen des Kryostaten verläuft ähnlich, mit dem Unterschied, dass der innere Kryostat nicht mit flüssigem Stickstoff gefüllt wird. Auch ist die Zeit des Füllvorgangs des Heliums beim Nachfüllen geringer als beim Einkühlen und beträgt etwa 20 Minuten.

3.4.1 Kalibration des Tieftemperatur-STM's

Die Kalibration der x- und y-Richtung eines STM-Scanners erfolgt anhand bekannter Strukturen, z.B. einer lithographisch erzeugten Gitterstruktur. Allerdings führt eine solche Kalibration anhand relativ großer Strukturen bei atomar aufgelösten STM-Aufnahmen zu geringen Fehlern führt, da die Piezosensitivität, d.h. die Auslenkung in Abhängigkeit von der angelegten Spannung, von eben dieser Spannung (Auslenkung) abhängt.

Um aus STM-Aufnahmen absolute Aussagen über atomare Abstände treffen zu können, ist daher eine Korrektur dieser Bilder notwendig. Hierzu muss die x- und die y-Richtung des Scanners anhand von einer bekannten atomaren Struktur kalibriert werden. In Abbildung 3.6 a) ist eine atomar aufgelöste STM-Aufnahme

¹Durch diese Rückführungsleitung wird das im Kryostat verdampfende Helium wieder der im Institut vorhandenen Heliumverflüssigungsanlage zugeführt.

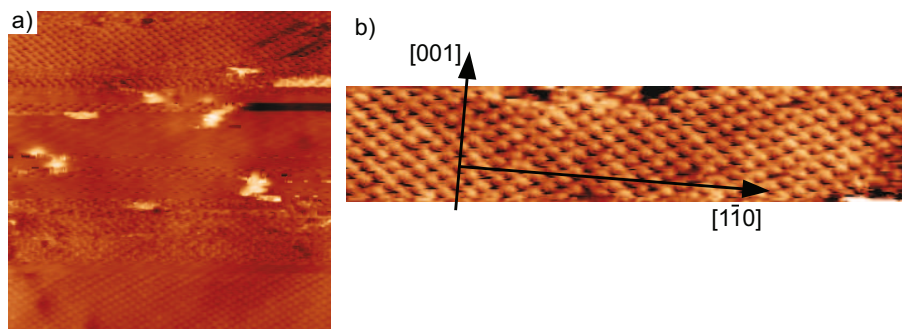


Abbildung 3.6: a) nominell $(13,4 \times 13,4) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf Fe(110) ($U = 0,005 \text{ V}$, $I = 102 \text{ nA}$). Gemessen mit dem Tieftemperatur-STM bei $T = 5 \text{ K}$. b) Ausschnittvergrößerung aus dem oberen Teil in a). Aus den gemessenen Atomabständen entlang den $[001]$ - und $[1\bar{1}0]$ -Richtungen können im Vergleich mit der Gitterkonstante von Eisen Korrekturfaktoren für atomar aufgelöste STM-Aufnahmen ermittelt werden.

auf einer Eisen (110)-Oberfläche gezeigt. Das Bild wurde mit dem LT-STM bei 5 K Proben temperatur aufgenommen.

Entlang $[001]$ beträgt der gemessene Atomabstand $a_{[001]} = 2,92 \text{ \AA}$ und in $[1\bar{1}0]$ -Richtung $a_{[1\bar{1}0]} = 4,55 \text{ \AA}$. Aus dem Wert der Gitterkonstante von Eisen ($a_{Fe} = 2,87 \text{ \AA}$) lassen sich mit

$$k_{[001]} = \frac{a_{Fe}}{a_{[001]}} \quad \text{und} \quad k_{[1\bar{1}0]} = \frac{a_{Fe} \cdot \sqrt{2}}{a_{[001]}} \quad (3.4)$$

Korrekturfaktoren entlang der $[001]$ ($k_{[001]} = 0,979$) und der $[1\bar{1}0]$ -Richtung ($k_{[1\bar{1}0]} = 0,889$) ermitteln. Mit diesen Faktoren müssen die Atomabstände in den, mit dem LT-STM aufgenommenen, atomar aufgelösten Bildern korrigiert werden.

3.5 Probenpräparation

Die Proben wurden mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (engl.: *Molecular Beam Epitaxie*, MBE) unter UHV-Bedingungen ($p < 6 \cdot 10^{-10} \text{ mbar}$) präpariert. Bei dieser Methode wird das zu verdampfende Material in einem kleinen resistiv geheiztem BeO-Tiegel erhitzt und der dabei entstehende Metalldampf kondensiert auf der Oberfläche eines Substrats.

3.5.1 Die Substrate

Als Substrate für die zu untersuchenden Filme dienten zwei unterschiedliche Einkristalle. In der Raumtemperaturanlage wurde ein Wolfram-Einkristall und

in der Tieftemperaturanlage ein Molybdän-Einkristall verwendet. Beide Kristalle sind in der (110)-Orientierung geschnitten und eignen sich aufgrund ihrer sehr hohen freien Oberflächenenthalpien sehr gut als Substrat für das Wachstum dünner Filme aus Übergangsmetallen.

Die Abmessungen des Wolframkristalls betragen $(7 \times 5 \times 0,2)$ mm. Eine Hälfte des Kristalls ist um $(1,4 \pm 0,1)^\circ$ gegenüber der (110)-Oberfläche geschliffen, wodurch dieser Teil Stufen entlang der [001]-Richtung mit einer durchschnittlichen Breite von 9,1 nm aufweist und im Folgenden als *gestufter Teil* bezeichnet wird. Die andere Hälfte ist optimal orientiert. Auf diesem Teil (*glatter Teil*) gibt es zwar auch Stufenkanten, allerdings haben die Terrassen in diesem Teil Breiten von bis zu mehreren hundert Nanometern. Abbildung 3.3 d) zeigt ein Foto des W-Kristalls im Probenhalter.

Die Oberfläche des Mo-Einkristall ist ebenfalls wie die des W-Kristalls in einen glatten und einen gestuften Bereich aufgeteilt. Die Abmessungen des Kristalls betragen ca. $(6 \times 4 \times 0,2)$ mm. Die Außenmaße des Probenhalters sind etwas größer als die des Probenhalters vom W-Kristall und betragen etwa (18×15) mm².

Die hohen Schmelztemperaturen von Wolfram ($T_{Schmelz} = 3695$ K,) und Molybdän ($T_{Schmelz} = 2896$ K) ermöglichen eine Reinigung der Kristalloberflächen durch sogenanntes *flashen*. Dabei wird der Kristall durch aus dem glühenden Filament emittierte Elektronen, die durch eine Hochspannung U_{HV} , welche zwischen Filament und Probe angelegt ist, beschleunigt werden, geheizt. Durch die Abgabe ihrer kinetischen Energie an den Kristall heizen diese Elektronen den Kristall auf ungefähr 2000 K. Bei dieser hohen Temperatur verdampfen jegliche Adsorbate und die Kristalloberfläche ist somit für eine neue Präparation vorbereitet.

Aufgrund unterschiedlicher Geometrien der Manipulatoren und Probenhalter der beiden Apparaturen, sind zum *flashen* verschiedene Parameter notwendig. In der RT-STM Apparatur wird der W-Kristall bei einer Hochspannung von $U = 800$ V und einem Strom der emittierten Elektronen von $I = 150$ mA *geflasht*. Der Mo-Kristall in der Tieftemperatur Apparatur wird bei $U_{HV} = 700$ V und $I = 160$ mA *geflasht*. Der Emissionsstrom wird durch den Strom durch das Filament geregelt und für eine Zeitdauer von ca. 5 s gehalten.

Da beim *flashen* auch der Probenhalter sehr stark erwärmt wird, kann der Druck in der Kammer kurzzeitig auf bis zu 4×10^8 mbar ansteigen. Daher ist es weiterhin empfehlenswert, das Substrat zweimal innerhalb von etwa 5 Minuten zu *flashen*, da beim zweiten Mal der Druck mehr nicht so sehr ansteigt (bis etwa 2×10^9 mbar) und somit eine erneute Verunreinigung der Substratoberfläche gemindert werden kann. Damit die Oberfläche bei der Präparation so sauber wie möglich ist, wird das Substrat erst kurz vor Beginn der Präparation einer Probe gereinigt.

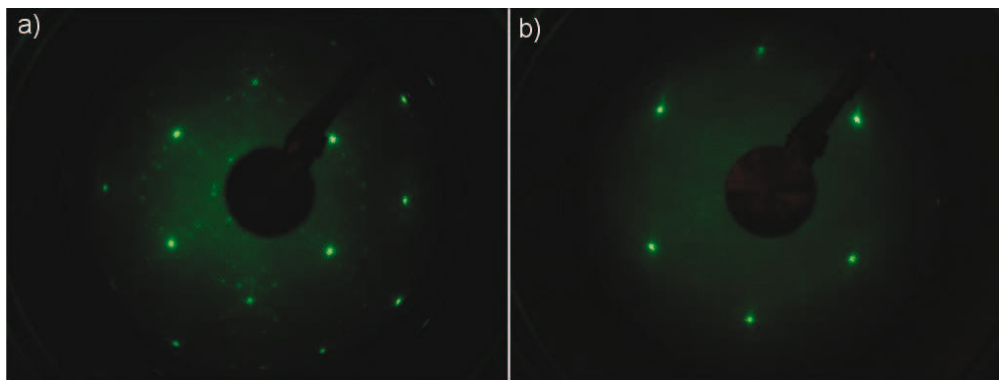


Abbildung 3.7: LEED-Aufnahmen bei des W(110)-Kristalls: a) Wolframkristall mit Kohlenstoffverunreinigung auf der Oberfläche. Deutlich ist die für Wolframcarbid typische Überstruktur zu erkennen. b) Kristall ohne Kohlenstoffverunreinigung. Es sind nur die bcc-Peaks des Wolfram zu sehen. Aufgenommen bei $E = 80 \text{ eV}$.

Kohlenstoff, in Form von Wolframkarbid (WC) (bzw. MoC, Molybdänkarbid), stellt dabei ein Problem dar. Durch diesen Kohlenstoff an der Oberfläche wird das Wachstum von Metallfilmen auf der Oberfläche beeinträchtigt und somit die elektronischen und magnetischen Eigenschaften verändert. Daher muss die Oberfläche der Kristalle möglichst frei von Kohlenstoff sein. Eine Verunreinigung der Oberfläche beider Kristalle mit Kohlenstoff kann sehr gut mittels LEED erkannt werden. Abbildung 3.7 a) zeigt als Beispiel eine LEED-Aufnahme des Wolfram-Kristalls mit Kohlenstoff auf der Oberfläche. Sehr deutlich ist die typische Überstruktur einer mit Kohlenstoff verunreinigten Oberfläche zu erkennen. In Abbildung 3.7 b) ist eine LEED-Aufnahme des Wolframkristall ohne Kohlenstoffverunreinigung gezeigt.

Der Kohlenstoff befindet sich zum einen im Inneren der Kristalle und gelangt durch *flashen* nach und nach aus dem Volumen an die Oberfläche. Weiterhin kann Kohlenstoff beim *flashen* durch Verkohlung adsorbierter organischer Moleküle, z.b. bei schlechtem Vakuum, entstehen. Durch einfaches *flashen* lässt sich der Kohlenstoff nicht von der Oberfläche entfernen. Um die Oberfläche zu reinigen, muss die WC-Verbindung (bzw. MoC-Verbindung) durch eine ausreichend hohe Temperatur des Kristalles ($T \approx 1000 \text{ K}$) aufgebrochen werden. Wird gleichzeitig ausreichend Sauerstoff angeboten, indem Sauerstoff mit einem Partialdruck von ca. $p = 4 \cdot 10^{-8} \text{ mbar}$ in die Kammer eingeleitet wird, reagiert der freigewordene Kohlenstoff mit dem Sauerstoff gemäß



zu Kohlendioxid. Wichtig ist dabei, dass die Temperatur nicht zu hoch ist, da sonst die Verweildauer des Sauerstoff auf der Oberfläche zu klein ist und eine Reaktion mit dem Kohlenstoff nicht stattfinden kann. Das entstandene Koh-

lendioxid kann anschließend durch *flashen* entfernt werden. Als wirkungsvolle Reinigungsprozedur hat sich ein *flashen* des Kristalles alle 10 Minuten während des Glühens des Kristalls in der Sauerstoffatmosphäre herausgestellt. Nach einer Stunde ist die Oberfläche in der Regel ausreichend gereinigt. Empfehlenswert ist es, vor dem letzten *flashen* die Sauerstoffzufuhr zu schließen und den Sauerstoff restlos abpumpen zu lassen. Je nach Kohlenstoffgehalt im Kristall ist ein erneutes Reinigen nach einigen Präparationsvorgängen nötig. Auch ein Wechsel des Heizfilamentes kann ein erneutes Reinigen des Kristalles erfordern, da durch eine evtl. geänderte Geometrie, aus kohlenstoffreichen Bereichen wieder Kohlenstoff an die Oberfläche gelangt.

3.5.2 Das Verdampfersystem

In Abbildung 3.8 a) ist ein Foto eines Verdampfers gezeigt. Der BeO-Tiegel ist mit einem Woframdraht als Heizwendel umwickelt. Um die Tiegel zu Heizen wird, je nach Anzahl der Wicklungen der Heizwendel und Temperatur, eine elektrische Leistung von 50 bis 110 Watt benötigt. Die Temperatur des Tiegels beträgt etwa 1000 bis 1500 K.

In der RT-STM-Anlage befinden sich drei solcher Verdampfer in einem wassergekühlten Kupferblock (siehe Abbildung 3.8 b). Der Kupferblock dient als Hitzeschild um ein unnötiges Erwärmen der Umgebung zu vermeiden. Eine schematisch stark vereinfachte Skizze der Anordnung von Verdampfer und Probe ist in Abbildung 3.8 c) zu sehen. Zur Bestimmung der Menge des aufgedampften Materials befindet sich oberhalb der Verdampfer ein Schwingquarz, der bei der Probenpräparation mit bedampft wird. Dieser Schwingquarz wird durch einen Schwingkreis mit der Eigenfrequenz des Quarzes von ca. 10 MHz zum Schwingen angeregt. Durch die Bedampfung verringert sich die Eigenfrequenz des Quarzes, so dass die Schwingungsdauer als Maß für die aufgedampfte Materialmenge verwendet werden kann. Als Verdampferrate ist die Zunahme der Schwingungsdauer in Skalenteilen (SKT) pro Sekunde definiert. 1 SKT entspricht einer Verlängerung der Schwingungsdauer um 1/10 MHz. In der RT-STM-Apparatur werden die Verdampfer mit Verdampferraten von etwa 0,1 bis 0,5 SKT/s betrieben. Eine Monolage Eisen auf W(110) entsprechen in dieser Anlage 116 SKT. Somit ergibt sich eine Depositionsrate von etwa 0,05 bis 0,25 Monolage pro Minute.

In der LT-STM-Anlage befinden sich sechs Verdampfer, angeordnet in zwei nebeneinander liegenden Reihen, wobei über jedem Verdampfer in den Kupferblock ein Schwingquarz integriert ist und die Verdampfer werden bei Verdampferraten von bis zu 0,7 Monolagen pro Minute betrieben.

Zur Kalibration der Schwingquarze wurde die Bedeckung der Probenoberfläche anhand von STM-Aufnahmen bestimmt. Während der Deposition der Schichten wird die Schwingungsdauer des Quarzes über ein in der Labview®-Umgebung geschriebenes Programm protokolliert und die aus der Zunahme der Schwingungs-

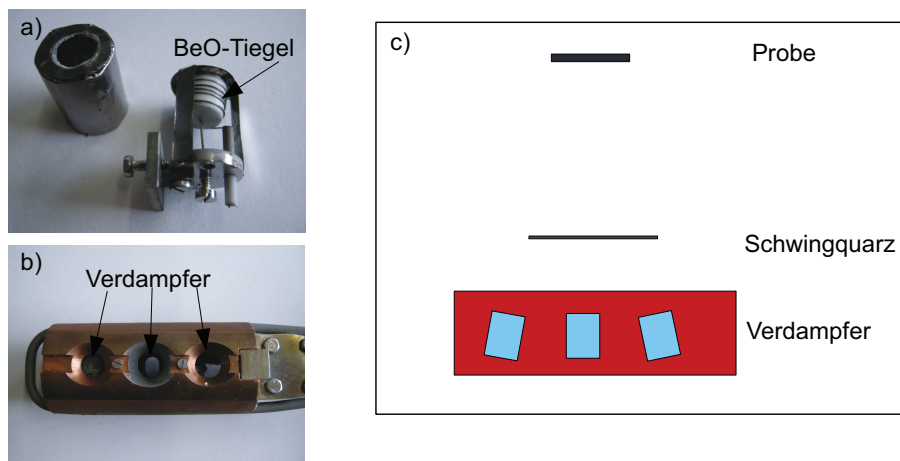


Abbildung 3.8: a) Foto eines Verdampfers. Der BeO-Tiegel ist mit einem Woframdraht als Heizwendel umwickelt. Die Hülse, links im Bild, wird über den Verdampfer geschoben und dient als mechanischer Schutz. b) Foto des in der RT-STM-Kammer verwendeten Verdampferblocks, in dem drei Verdampfer integriert sind. Der aus Kupfer gefertigte Verdampferblock ist wassergekühlt. c) Schematische Skizze der Verdampferanordnung in der RT-STM-Kammer. Zwischen Probe und Verdampfer befindet sich seitlich ein Schwingquarz zur Bestimmung der Menge verdampfenden Materials. In der LT-STM-Anlage befinden sich sechs Verdampfer, angeordnet in zwei Reihen nebeneinander. Über jedem Verdampfer ist in den Kupferblock ein Schwingquarz integriert.

dauer die Verdampferrate kontinuierlich bestimmt. Die Frequenz des Schwingquarzes ist auch temperaturabhängig, wobei sich die Schwingungsdauer verringert, wenn der Quarz wärmer wird. Daher muss nach Änderungen der Verdampfertemperatur oder nach Öffnen der, zwischen Verdampfer und Quarz angeordneten, Blende gewartet werden, bis die Temperatur des Schwingquarzes konstant ist, bevor mit der Bedampfung der Probe begonnen werden kann.

In beiden Kammern steigt der Druck während der Deposition nur um etwa $0,5 - 2 \times 10^{-10}$ mbar an. Ein höherer Druckanstieg deutet Verunreinigungen der Verdampfer durch Restgas an. In diesem Fall müssen die Verdampfer einige Stunden *ausgegast* werden. *Ausgasen* bedeutet, dass die Verdampfer auf Betriebstemperatur gebracht werden und Verunreinigungen abdampfen. Verunreinigungen der Verdampfer treten auf, wenn die Verdampfer einige Tage nicht betrieben werden und sich Restgasmoleküle auf den Verdampfern ablagern.

Auch nachdem die Kammern belüftet waren, müssen die Verdampfer durch *Ausgasen* gereinigt werden. In einem solchen Fall muss jedoch die Temperatur der Verdampfer in Schritten auf Betriebstemperatur gebracht werden, da sonst der Druck zu stark ansteigt (bis auf 10^{-4} mbar und höher).

3.5.3 Epitaxie

Unter dem von L. Royer [Roy28] eingeführten Begriff der *Epitaxie* versteht man ein geordnetes Aufwachsen einer Substanz auf einem Substrat. Die Struktur der aufwachsenden Schicht wird dabei maßgeblich durch das Substrat bestimmt. Unter geeigneten Bedingungen nimmt die Schicht innerhalb der ersten Atomlagen die Struktur des Substrates an. Dies bezeichnet man als pseudomorphes Wachstum.

In dicken epitaktischen Schichten, d.h. Schichten mit mehr 3 nm Schichtdicke (≈ 10 Lagen), wird die Struktur, wie z.B. die Gitterkonstante, der Schicht in der Regel nicht mehr durch das Substrat bestimmt. Stattdessen nimmt die Schicht ihre jeweilige Struktur ein, d.h. die Schicht *rekonstruiert*. Im Zwischenbereich von den pseudomorphen ersten Lagen zu den rekonstruierten höheren Lagen findet ein unter Umständen kontinuierlicher Übergang der Gitterstruktur statt. Mit diesem Übergang kann die Bildung einer sogenannten Überstruktur aufgrund von Versetzungen einhergehen. Als Versetzungen werden Abweichungen der Gitterpositionen einzelner oder mehrerer Atome von der Mehrzahl der Atome bezeichnet.

Prinzipiell kann zwischen drei verschiedene Wachstumsmodi von Schichten auf einem Substrat unterschieden werden:

- Lagen-Wachstum (Frank-van der Merwe-Wachstum): Eine atomare Lage beginnt erst zu wachsen, nachdem die darunter liegende Lage vollständig geschlossen gewachsen ist.
- Inselwachstum (Volmer-Weber-Wachstum): Weitere Lagen beginnen auf noch nicht abgeschlossenen Lagen zu wachsen, so dass es zur Bildung von dreidimensionalen Inseln kommt. Geschlossene Schichten entstehen erst bei vergleichsweise dicken Schichten.
- Misch-Wachstum (Stranski-Krastanov-Wachstum): Die ersten Lagen wachsen Lagenweise. Weitere Lagen wachsen im Inselwachstum.

Für ein spezifischen System aus Substrat und Adsorbatschicht kann der Wachstumsmodus auf Basis thermodynamischer Überlegungen aus der Bilanz der Oberflächenenergien von Substrat und Schicht abgeschätzt werden [Bau58, Bau82]. Die folgende Gleichung wurde von Bauer [Bau58] aufgestellt und von Markov und Kaischew [Mar76] erweitert:

$$S \equiv \gamma_a + \gamma_{ab} + \gamma_b - \frac{\Delta p}{2A}, \quad (3.6)$$

wobei γ_a und γ_b die Oberflächenenergien des Substrates und der Schicht darstellen. Die Energie der Grenzfläche wird von γ_{ab} beschrieben. A ist die Fläche

| | Wolfram W | Molybdän Mo | Chrom Cr | Eisen Fe | Kobalt Co | Gold Au |
|------------------------------|--------------|----------------|-------------|-------------|--------------|------------|
| Struktur | bcc | bcc | bcc | bcc | hcp | fcc |
| a (Å) | 3,165 | 3,147 | 2,91 | 2,866 | 2,51 | 4,08 |
| c (Å) | - | - | - | - | 4,07 | - |
| γ (J/m ²) | 3,486 | 2,877 | 2,056 | 2,939 | 2,709 | 1,626 |

Tabelle 3.1: Gitterstruktur und Oberflächenenthalpien der der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Materialien [Win10, Mez82b]

der Elementarzelle und Δp stellt die Übersättigung des Dampfstrahles gemäß

$$\Delta p = k_B T \cdot \ln \left(\frac{p_D}{p_S(T)} \right), \quad (3.7)$$

wobei T der Substrattemperatur, $p_s(T)$ dem entsprechenden Sättigungsdampfdruck und p_D dem Dampfdruck des kondensierten Materials entspricht, dar.

Für $S < 0$ ist eine geschlossene erste Lage zu erwarten. Weitere geschlossene Lagen sind zu erwarten, wenn die Bilanz gemäß Gleichung 3.6, wobei das Substrat nun durch die erste Lage der Schicht ersetzt wird, ebenfalls negativ ist. Ist für höhere Lagen $S > 0$, wächst die Schicht im Stranski-Krastanov-Modus. Ist die Bilanz bereits für die erste Lage positiv, wächst die komplette Schicht ab der ersten Lage im Inselwachstum.

In Tabelle 3.1 sind die Gitterkonstanten, der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Schichtmetalle, sowie die Oberflächenenthalpien nach Mezey und Gibber [Mez82b] angegeben. Die Oberflächenenergien von Eisen und Wolfram betragen $\gamma_{Fe} = 2,939 \text{ J/m}^2$ und $\gamma_W = 3,468 \text{ J/m}^2$ [Mez82b, Mez82a]. Da die Grenzflächenenergie γ_{ab} vergleichsweise klein ist, kann für Chrom und Eisen auf Wolfram ein Lagenwachstum erwartet werden, da S in diesen Fällen negativ ist. Im Experiment wird jedoch kein reines Lagenwachstum von Eisen und Chrom auf W(110) bzw. Mo(110) beobachtet. Dies ist auf weitere wachstumsbeeinflussende Parameter, wie zum Beispiel der Gitterfehlanpassung und der Temperatur des Substrates, zurückzuführen, die in dem auf rein thermodynamischen Überlegungen basierten Kriterium nicht berücksichtigt sind.

Die Gitterfehlanpassung ist definiert als

$$f = \frac{a_{substrat} - a_{schicht}}{a_{schicht}}, \quad (3.8)$$

wobei a_{xx} der Gitterkonstante des Substrates bzw. der Schicht entspricht. Die resultierenden Gitterfehlanpassungen für Eisen und Chrom auf W(110) bzw. Mo(110) betragen

- Auf W(110) Fe: 10,2 % Cr: 8,6 %

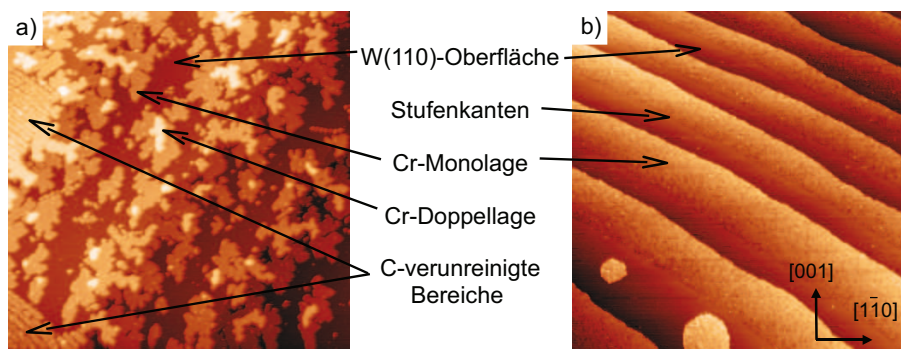


Abbildung 3.9: a) (150×150) nm² STM-Aufnahme von 0,6 ML Chrom bei Raumtemperatur auf dem W(110)-Substrat deponiert ($U = 1$ V, $I = 0,6$ nA). Auf der Substratoberfläche haben sich Chrom-Inseln gebildet. b) Die gleiche Probe nachdem diese bei ca. 700 K getempert wurde. Das Chrom hat sich in Streifen entlang der Stufenkanten des Wolframsubstrates angelagert.

- Auf Mo(110) Fe:9,9 % Cr:8,2 %.

So zeigt zum Beispiel Eisen auf W(110) bei einer Substrattemperatur von 300 K ein Frank-van der Merwe-Wachstum bei bis zu 3 Lagen und ein Stranski-Krastanov-Wachstum bei 500 K Substrattemperatur [Prz89, Fri93]. Anschaulich kann man die Temperaturabhängigkeit des Schichtwachstums verstehen, indem man sich vorstellt, dass die Beweglichkeit der Adatome auf dem Substrat begrenzt ist und daher die nach Gleichung 3.6 thermodynamisch günstigste Konfiguration oftmals nicht erreicht werden kann. Bei einer Erhöhung der Substrattemperatur wird die kinetische Energie der Adatome angehoben, so dass die Beweglichkeit dieser erhöht wird. So kann es beispielsweise sein, dass bei Raumtemperatur die Beweglichkeit von Adatomen zu gering ist, um den energetisch günstigsten Platz, z.B. auf dem Substrat statt auf der ersten Monolage, einzunehmen, so dass es zur Bildung von dreidimensionalen Inseln kommt, obwohl aufgrund der Energiebilanz (vgl. Gleichung 3.6) ein Lagenwachstum zu erwarten wäre. Durch Erhöhen der Substrattemperatur während des Aufdampfens bekommen die Atome die notwendige thermische Energie zugeführt, um sich auf der Oberfläche ausreichend weit bewegen zu können und den energetisch günstigsten Platz einnehmen können und somit die Schicht ein Lagenwachstum aufweist. Dies kann auch durch ein nachträgliches Heizen der Probe nach der Deponierung der Schicht erreicht werden. Dieser Vorgang wird als *tempern* bezeichnet.

In Abbildung 3.9 a) ist eine STM-Aufnahme von 0,6 ML Cr auf dem W(110)-Substrat dargestellt, bei der die Temperatur des Substrates während der Deposition 300 K (Raumtemperatur) betrug. Auf der Woframoberfläche haben sich Cr-Inseln mit einer Höhe von einer Monolage gebildet. Teilweise liegt auf den Monolageninseln eine weitere Lage Chrom. Diese obere Lage wird als Doppellage bezeichnet. Am linken Rand und in der linken unteren Ecke zeigt das Chrom

eine andere Morphologie, die durch eine lokale Kohlenstoffverunreinigung des Substrates (vgl. Abschnitt 3.5.1) hervorgerufen wird. Bei einer Erhöhung der Temperatur des Substrates bewegen sich die Adatome auf der Oberfläche an die Stufenkanten des Substrates heran und bilden, wie in Abbildung 3.9 b) gezeigt, monoatomar hohe Streifen entlang der Stufenkanten der vizinalen Substratoberfläche aus.

3.6 Präparation der STM-Spitzen

Für die Aufnahme von hochaufgelösten-STM Bildern sind Spitzen mit möglichst kleinem Radius notwendig (vgl. Gleichung 2.11). Idealerweise fließt der Tunnelstrom über ein einzelnes Atom an der Spitze zur Probe. Adsorbate an der Oberfläche der Spitze wirken sich störend aus, da sie die Zustandsdichte der Spitze verändern können, was die Tunnelstromspektroskopie stört, oder sie führen zu Instabilitäten in der Bildgebung. Daher sollten STM-Spitzen aus einem möglichst chemisch inerten Material gefertigt sein.

Im RT-STM werden Spitzen aus einer $\text{Pt}_{0,8}\text{Ir}_{0,2}$ -Legierung verwendet. Diese können durch einfaches Anquetschen und Abreißen des Drahtes mit Hilfe einer stumpfen Kneifzange präpariert werden. Mittels einer einfachen Klemmschraube wird die Spitze im Scanner fixiert, was ein einfaches Austauschen der Spitze ermöglicht.

Die aus Wolfram bestehenden Spitzen des LT-STMs können aufgrund der Härte und Sprödigkeit des Materials nicht mit der oben beschriebenen Methode hergestellt werden. Es würden dabei glatte Bruchflächen entstehen, die einem sehr großen Spitzenradius entsprechen würden. STM-Spitzen aus Wolfram werden daher elektrochemisch in einer NaOH-Lösung geätzt.

Die Spitzen des LT-STMs werden in einem kleinen Metallröhrchen durch Quetschen fixiert. Der Halter ist aus einem magnetischen Material gefertigt und wird durch einen Magneten auf dem Scanner gehalten. Die in dieser Arbeit verwendeten W-Spitzen des LT-STMs wurden von der Firma Omicron geliefert und sind bereits in einem Halter montiert (Abbildung 3.5 c). Mithilfe eines speziellen Probenhalters kann ein solcher Spitzenhalter samt Spitze vom Scanner heruntergenommen werden. Die Spitze kann mit dem Transfersystem der Apparatur in die Präparationskammer gebracht werden, um durch *flashen* gereinigt und anschließend mit einem magnetischen Material, wie zum Beispiel Eisen, bedeckt zu werden. Beim *flashen* kann die Spitze unter Umständen kurzzeitig schmelzen, wodurch der Radius der Spitze vergrößert wird. Daraus ergibt sich ein „Alterungsprozess“ der Spitze in Abhängigkeit der *flash*-Zyklen, wodurch ein Austausch der Spitze nach einigen Reinigungsvorgängen (zwischen 20 – 50 Zyklen) notwendig ist.

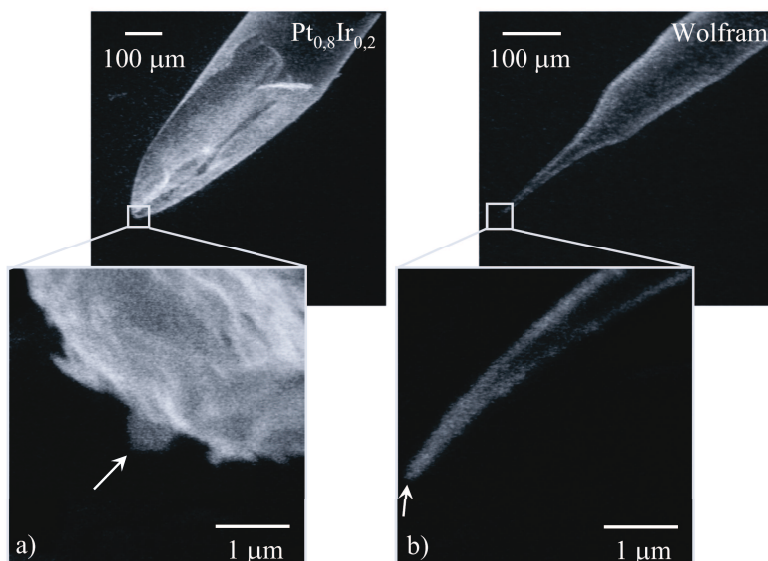


Abbildung 3.10: STM-Spitzen mittels Rasterelektronenmikroskopie aufgenommen. a) Von einem $\text{Pt}_{0,8}\text{Ir}_{0,2}$ -Draht abgeschnittene Spitze. b) geätzte Wolframspitze. Die geätzte W-Spitze besitzt einen kleineren Spitzenradius als die geschnittene $\text{Pt}_{0,8}\text{Ir}_{0,2}$ -Spitze. Die effektive Spitze, d.h. die Stelle, über die der Tunnelstrom fließt, ist bei beiden Spitzen mit einem Pfeil gekennzeichnet. Bei der PtIr-Spitze fließt der Tunnelstrom über kleine Partikel auf der Oberfläche der Spitze. (Abbildung übernommen aus [Pra04c])

In Abbildung 3.10 sind Rasterelektronenmikroskopieaufnahmen (engl.: *Scanning Elektron Microscope*,) einer PtIr-Spitze und einer W-Spitze gezeigt.

Durch Anlegen von elektrischen Feldpulsen können die Spitzen im STM nachbearbeitet werden. Hierzu wird bei abgeschalteter Regelung die Gap-Spannung kurzzeitig um bis zu einen Faktor zehn erhöht, wodurch Restgasadsorbate von der Spitze entfernt werden und die Form der Spitze verändert werden kann.

Spitzen aus W und PtIr bieten den Vorteil, dass sie in der Nähe der Fermikante d-Orbitale besitzen, über die der Hauptteil des Tunnelstroms fließt. Somit wird zum Einen eine hohe laterale Auflösung ermöglicht (vgl. Kapitel 2.1.1). Zum Anderen wird dadurch die Näherung der lokalen Zustandsdichte der Spitze als eine δ -Funktion gerechtfertigt, so dass bei der Messung von Tunnelstromspektren Einflüsse durch die Zustandsdichte der Spitze (vgl. Kapitel 2.2) in erster Näherung vernachlässigt werden können.

3.6.1 Präparation von magnetisch sensitiven STM-Spitzen

Für die Untersuchung von magnetischen Strukturen mit einem STM muss eine ferromagnetische Spitze verwendet werden, so dass ein spinpolarisierter Tunnelstrom fließt (vgl. Kapitel 2.2.2). Diese Technik wurde zum ersten Mal 1988 von

Pierce et. al vorgeschlagen. [Pie88] Die Verwendung von magnetischen Drähten aus z.B. Eisen [Wie91, Shv92], CoCr [All87] oder CrO_2 [Wie90, Tar91] ist problematisch, da aufgrund des hohen Streufeldes, das von diesen Spitzen ausgeht, die Probe beeinflusst und unter Umständen ummagnetisiert werden kann. Durch Beschichtung einer Wolframspitze mit einer ferromagnetischen Schicht erhält man spinpolarisierte STM-Spitzen mit einem, im Vergleich zu Volumenspitzen, deutlich geringeren Streufeld. Die in situ Präparation einer magnetischen Dünnschichtspitze wird zum ersten Mal von Bode et al. [Bod97] beschrieben. Hierbei wurde eine polykristalline W-Spitze mit mehreren Lagen eines ferromagnetischen Metalls beschichtet. In Abhängigkeit von Material und Schichtdicke (vgl. Abschnitt 2.4 (Magnetische Anisotropie)) ergeben sich so Spitzen mit Sensitivitäten auf Magnetisierungen, die in der Probenenebene oder senkrecht zur Probenoberfläche stehen.

Zur Präparation einer Dünnschichtspitze wird die W-Spitze des LT-STMs, wie in Abschnitt 3.4 beschrieben, in die Probenaufnahme in der Präparationskammer transferiert. Bevor die Spitze beschichtet wird, muss die Spitze mittels Elektronenstoßheizung bei einer Temperatur von etwa 2200 K gereinigt werden. Die Spitze wird hierzu, wie auch die Substrate, mittels Elektronenstoßheizung, bei $U = 700 \text{ V}$ und $I = 160 \text{ mA}$, *geflasht* (vgl. Abschnitt 3.5.1).

Im einfachsten Fall wird als magnetische Schicht auf die geflashte Wolframspitze 5 ML Fe bei Raumtemperatur aufgedampft und anschließend bei 500 K getempert. Derartig präparierte STM-Spitzen besitzen eine Magnetisierung parallel zum Apex der Spitze und sind somit sensitiv auf eine Spinkomponente in der Probenebene („in-plane“-Kontrast, bzw. „in-plane“-Magnetisierung) [Bod03, Pro06].

Eine weitere Möglichkeit stellt die Beschichtung der Spitze mit einer Doppelschicht aus Kobalt und Gold da. Hierbei wird die Spitze zunächst mit 10 atomaren Lagen Gold bedeckt und in einem weiteren Schritt wird eine Kobaltschicht auf dem Gold deponiert. Bei der Deposition beider Schichten beträgt die Temperatur der Spitze etwa 300 K, d.h. Raumtemperatur.

Aufgrund eines Schichtdickenabhängigen Reorientierungsprozesses der leichten Achse der Magnetisierung kann durch die Dicke der Kobaltschicht die magnetische Sensitivität der Spitze eingestellt werden. Bei einer Schichtdicke von 4 Lagen liegt die Magnetisierung senkrecht zur Oberfläche [Pro06]. Obwohl Kobalt auf Gold bei Schichtdicken von mehr als 4 Monolagen eine Spinreorientierung in die Ebene zeigt [All90, Püt01], weisen auch Spitzen mit einer Kobaltbedeckung von bis zu 8 Lagen eine senkrechte Magnetisierung auf, was durch eine Verschiebung der Spinreorientierung zu höheren Schichtdicken erklärt werden kann. [Pro06, Sel01] Bei einer Schichtdicke von 16 atomaren Monolagen und mehr besitzt die Spitze eine Magnetisierung in der Ebene [All90, Püt01, Sel01, Pro06].

3.7 STM-Untersuchungen an in-situ gespaltenen Heusler Volumenproben

Neben der Molekularstrahlepitaxie stellt das Spalten von Volumenproben unter UHV-Bedingungen eine weitere Möglichkeit zur Präparation von sauberen Oberflächen dar. In Abbildung 3.11 a) ist eine schematische Zeichnung einer Apparatur gezeigt, mit der etwa 1-2 mm dicke metallische Probenstäbchen mit einer Zangenkonstruktion gespalten werden können. Hierbei wird die zu spaltende Probe in einem Probenhalter zwischen die Schneidflächen einer Kneifzange gehalten und die Zange mithilfe einer Lineardurchführung betätigt. Diese Spaltvorrichtung wurde im Rahmen einer Diplomarbeit zum Spalten von Heusler-Volumenproben konstruiert und getestet. Eine genaue Beschreibung der Spaltvorrichtung findet sich in der Diplomarbeit von P. Klaer [Kla08].

In der Literatur wurde bisher noch nicht von STM-Untersuchungen auf den Bruchflächen metallischer Volumenproben berichtet. Die Frage beim Spalten von metallischen Proben ist, ob die Bruchfläche Ebenen aufweist, die ausreichend flach sind, so dass mit einem STM auf diesen Flächen gemessen werden kann. Die beiden Halbleiter GaAs und Si besitzen atomar glatte Spaltflächen, auf denen STM-Untersuchungen möglich sind. So wird zum Beispiel in der Literatur u.a. von STM-Untersuchen auf GaAs [Fee87, Sal92, May10] Si(111) [Fee90, Fee91, Tok91], Si(110) [Lut95] und Si(001) [Yu92] berichtet.

Im folgenden wird ein kurzer Überblick über eine Machbarkeitsstudie von STM-Untersuchungen auf den Bruchflächen von gespaltenen Co_2TiSn -Volumenproben gezeigt. Zu diesem Zweck wurde die Spaltkammer, wie in Abbildung 3.11 b) gezeigt, statt der Schleusenkammer an die Apparatur des Tieftemperatur-STM angeflanscht.

3.7.1 Messungen an Co_2TiSn

Bei der Legierung Co_2TiSn handelt es sich um eine Heuslerverbindung. Diese Bezeichnung geht zurück auf F. Heusler, der 1903 diese neue Klasse von magnetischen Verbindungen entdeckte. Er stellte fest, dass die aus nicht magnetischen Elementen bestehende Verbindungen Cu_2MnAl ferromagnetische Eigenschaften aufwies [Heu03]. Der Ferromagnetismus dieser Verbindung kann auf die Strukturordnung des Mangans zurückgeführt werden [Pot29, Per29, Web71]. Allgemein versteht man unter Heuslerverbindungen ternäre intermetallische Verbindungen der Form X_2YZ mit zwei verschiedenen Übergangsmetallen X und Y und einem Hauptgruppenelement Z. Y kann auch ein Seltenerdmetall sein. In Abbildung 3.12 a) ist die Einheitszelle einer solchen Verbindung gezeigt. Die Struktur dieser Einheitszelle wird als L2_1 -Struktur bezeichnet.

Aktuell sind Heuslerverbindungen von besonderem Interesse, da aufgrund von Bandstrukturrechnungen von einigen Vertretern dieser Klasse ein halbmetalli-

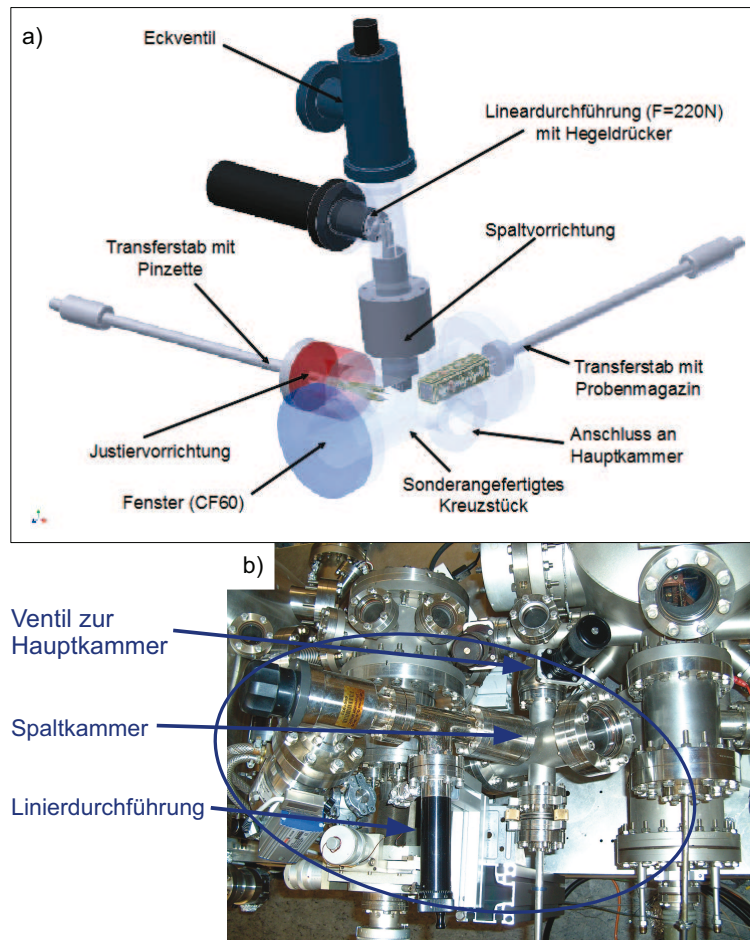


Abbildung 3.11: a) Beschriftete Skizze der Spaltkammer (Abbildung entnommen aus [Kla08]). b) Foto der, an die Apparatur des Tieftemperatur-STMs angeflanschten, Spaltkammer. Zur Orientierung sind die Spaltkammer, die Linierdurchführung und das Ventil zur Hauptkammer gekennzeichnet.

sches Verhalten erwartet wird [Küb83, Gal05, Bal06, Kan06, Kal06, Kan07a, Kan07b, Fel07]. Als halbmetallisches Verhalten wird die Tatsache bezeichnet, dass die Spinpolarisation an der Fermikante 100 % beträgt. Dabei zeigt in der Regel die Zustandsdichte der Minoritätsladungsträger eine Bandlücke an der Fermikante, wohingegen für die Majoritätsladungsträger Zustände an der Fermikante existieren. Aufgrund dieser Eigenschaft sind Heuslerverbindungen interessant für Spintronik-Anwendungen [Pri98, Fel07].

Ein Foto eines gespaltenen Co_2TiSn Probenstäbchen ist in Abbildung 3.12 a) gezeigt. Eine Rasterelektronenmikroskopieaufnahme (REM) dieser Bruchfläche ist in Abbildung 3.12 a) gezeigt. Die Bruchfläche ist keine glatte Fläche, sondern läuft, aufgrund eines Schneidens der Probe mit der Zange, spitz zusammen. Das

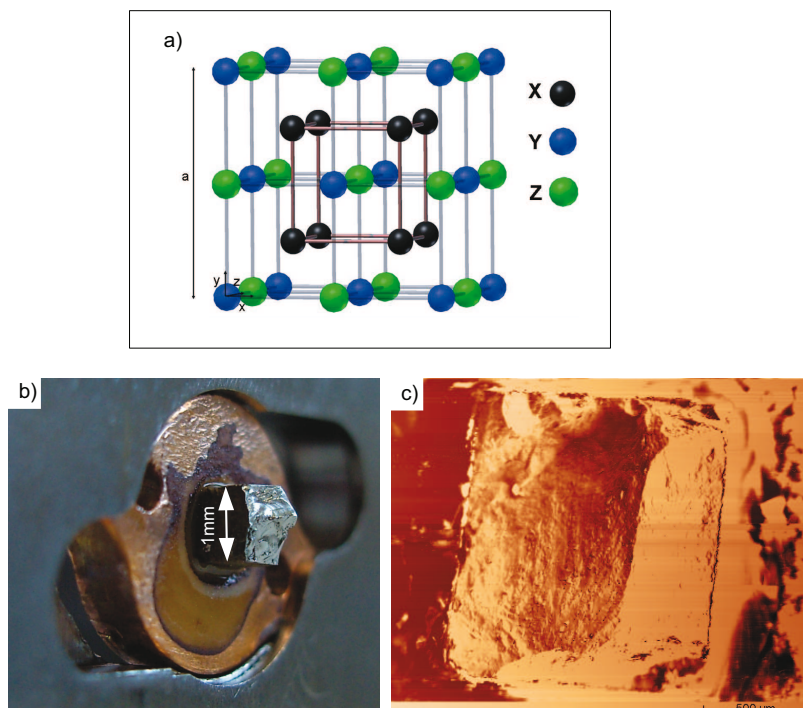


Abbildung 3.12: a) Einheitszelle der L₂₁-Heuslerstruktur X₂YZ. b) Foto eines gespaltenen Co₂TiSn Probenstäbchens in der Probenhalterung, die eine Eigenentwicklung für den Probentransport in der XMCD-Apparatur ist [Kla08]. Diese Halterung kann in einen speziell konstruierten Probenträger gesteckt werden, der in die Probenaufnahme des Tieftemperatur-STMs passt. c) REM-Aufnahme der Bruchfläche. Das Größe des Probenstäbchens beträgt etwa $(1 \times 1 \times 5) \text{ mm}^3$.

deutet daraufhin, dass die Probe eher weich und nicht spröde ist.

Die STM-Untersuchungen wurden bei einer Probentemperatur von $T = 5 \text{ K}$ durchgeführt. Abbildung 3.13 a) zeigt ein $(50 \times 50) \text{ nm}^2$ STM-Bild, aufgenommen auf der in Abbildung 3.12 gezeigten Bruchfläche. Die Vergrößerung des markierten Bereiches zeigt einen Bereich mit atomar glatten Terrassen (Abbildungen 3.13 b) und c)). Die Höhe der Stufe beträgt von Terrasse (1) nach (2) $d = (1, 2 \pm 0, 3) \text{ \AA}$ und von Terrasse (2) nach (3) $d = (1, 3 \pm 0, 3) \text{ \AA}$. In der dI/dU -Aufnahme (Abbildungen 3.13 d) erscheint die mittlere Terrasse (2) etwas heller als die obere (3) und untere Terrasse (1). Dieser spektroskopische Unterschied lässt auf chemisch verschiedene Kristallebenen schließen. Eine Fourier-gefilterte Vergrößerung eines Ausschnittes auf Terrasse (1) ist in Abbildung 3.13 e) gezeigt. Die in Abbildung 3.13 e) eingezeichnete Einheitszelle kann in Verbindung mit dem Öffnungswinkel der $\langle 111 \rangle$ -Achsen von $\alpha = (122 \pm 2)^\circ$ als eine dicht gepackte (111) Einheitszelle identifiziert werden. Eine dicht gepackte (111) Oberfläche besitzt eine sechszählige Symmetrie mit einem Öffnungswinkel von $\alpha = 120^\circ$.

In der L₂₁ Struktur besteht eine (111)-Oberfläche aus nur einer Atomsorte.

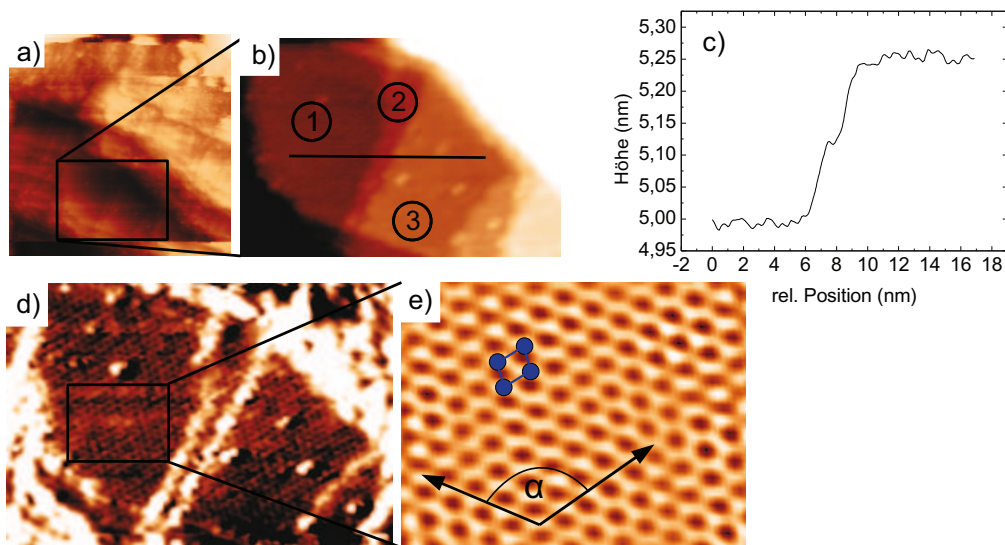


Abbildung 3.13: a) $(50 \times 50) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf der Bruchfläche einer unge-tempernten Co_2TiSn -Probe, gemessen bei einer Gap-Spannung von $U = 0,7 \text{ V}$ und einem Tunnelstrom von $I = 2,5 \text{ nA}$ b) Mittels Bildbearbeitung erstellte Vergrößerung des in a) markierten Gebietes ($(25,4 \times 18,0) \text{ nm}^2$). c) Höhenprofil entlang der in b) eingezeichneten Linie. Die Höhe der Terrassenkanten beträgt $1,23 \pm 0,1 \text{ \AA}$. d) Ausschnittsvergrößerung der simultan mit a) aufgenommenen differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarte (gleicher Bildausschnitt wie b). Die Terrassen 1 und 3 sind im Vergleich zu Terrasse 2 etwas dunkler. Dies deutet auf eine zur den Ebenen 1 und 3 chemisch verschiedene Ebene 2 hin. e) $(6,3 \times 4,9) \text{ nm}^2$ Fouriergefilterter Ausschnitt $(6,3 \times 4,9) \text{ nm}^2$ auf Terrasse (1).

Wie dem Strukturbild in Abbildung 3.12 a) entnommen werden kann, lautet die Atomsortenfolge in der $[111]$ -Richtung $\text{Co-Ti-Co-Sn-Co-Ti} \dots$. Demzufolge sind für die in Abbildung 3.13 b) sichtbaren Terrassen folgende Kombinationen möglich:

1. Co-Ti-Co
2. Ti-Co-Sn
3. Co-Sn-Co
4. Sn-Co-Ti.

Eine genaue Zuordnung der möglichen Lagenfolgen 1 bis 4 zu den beobachteten Terrassen erfordert die Messung von Tunnelstromspektren im Vergleich mit theoretischen Rechnungen.

Aus der Gitterkonstante von Co_2TiSn $a = 6,1 \text{ \AA}$ lässt sich mit

$$d = \frac{1}{12} \sqrt{3 \cdot a^2} \quad (3.9)$$

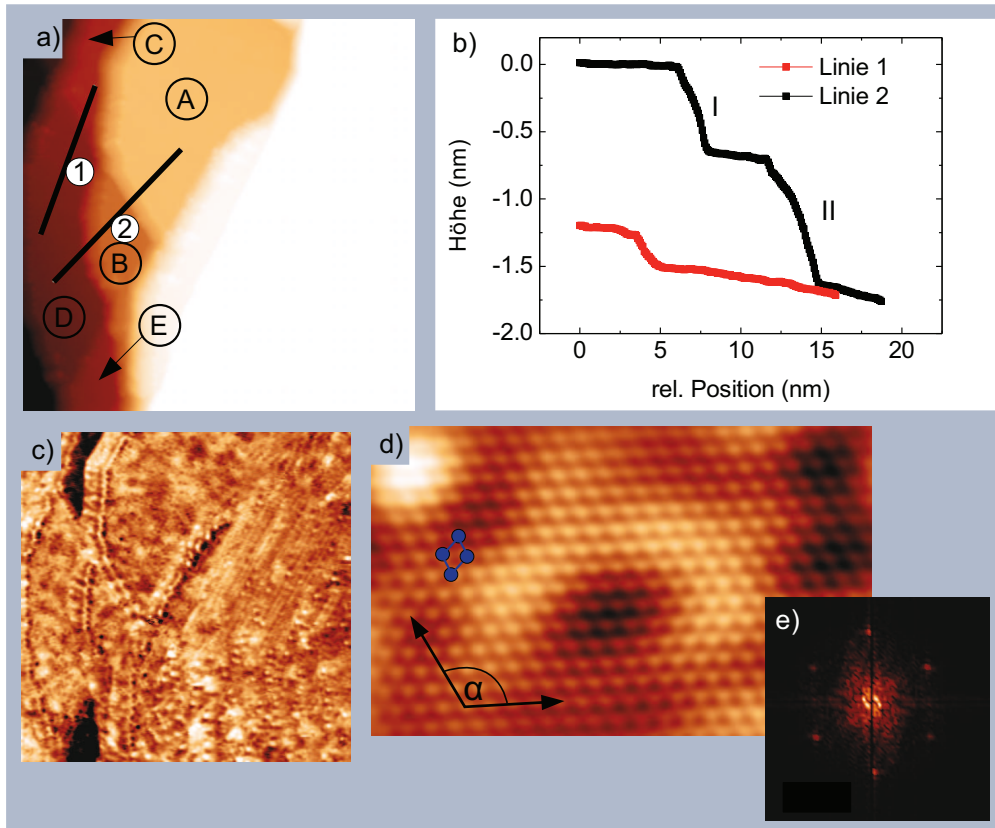


Abbildung 3.14: a) $(40 \times 40) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf der Bruchfläche einer getemperten Co_2TiSn Probe ($U = -0,5 \text{ V}$, $I = 2,5 \text{ nA}$). b) Höhenprofile entlang der in a) eingezeichneten Linien. c) Simultan mit (a) gemessene dI/dU -Karte. Die in (a) mit (C) und (E) bezeichneten Terrassen erscheinen dunkel. Die anderen Terrassen zeigen zueinander keine Unterschiede. d) Fouriergefilterte STM-Aufnahme auf Terasse (A) [$(10,31 \times 6,35) \text{ nm}^2$, $U = -0,08 \text{ V}$, $I = 12,7 \text{ nA}$]. Die Einheitszelle entspricht einer dicht gepackten fcc(111)-Oberfläche ($\alpha = (119 \pm 2)^\circ$). e) $(8,5 \times 8,5) \text{ nm}^{-1}$ Fouriertransformation zu d).

der Abstand von (111)-Lagen zu $d = 0,88 \text{ \AA}$ bestimmen. Die gemessenen Stufenhöhen sind bei dieser Probe etwas größer, was evtl. auf eine nicht korrekte z-Kalibration des Scanners zurückzuführen ist. Da die Abweichung zum berechneten Lagenabstand jedoch nur gering ist, können die Stufen mit einem Übergang zwischen zwei aufeinander liegenden (111)-Ebenen identifiziert werden.

Eine STM-Messung auf der Bruchfläche einer Co_2TiSn -Probe, die 8 Tage bei 1073 K getempert wurde, ist in Abbildung 3.14 a) gezeigt. Auch auf dieser Probe können atomar glatte Terrassen beobachtet werden. Allerdings sind die Stufen hier höher als bei der in Abbildung 3.13 gezeigten Messung. Die Höhe der Stufe in der Linie 1 beträgt $H_1 = (0,245 \pm 0,05) \text{ nm}$. Entlang der eingezeichneten Linie 2 beträgt die Höhe der Stufe I $H_I = (0,64 \pm 0,05) \text{ nm}$ und der Stufe

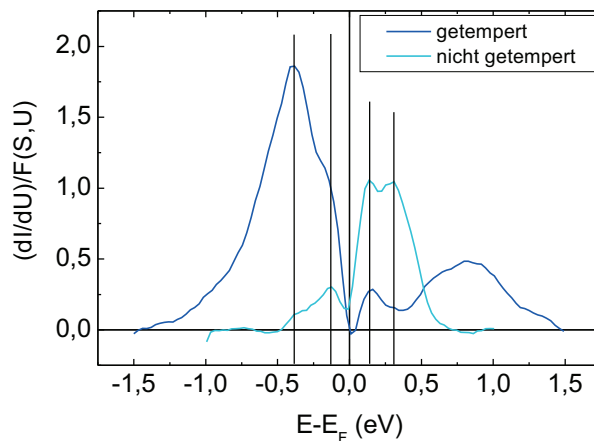


Abbildung 3.15: Spektren, gemessen sowohl auf der ungetemperten und der getemperten Probe. Stabilisierungsparameter: $U = -0,7$ eV, $I = 2,5$ nA

II $H_I I = (0,931 \pm 0,05)$ nm. Die differentielle dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarte (gemessen bei $U = -0,5$ V zeigt spektroskopische Unterschiede zwischen einigen Terrassen. Die mit (C) und (E) bezeichneten Terrassen erscheinen dunkler als die anderen Terrassen, was auf chemisch verschiedene Terrassen hinweist. Die Stufenhöhen von den Terrassen (C) und (E) zur Terrasse (D) betragen $H_{C,E} = 0,26 \pm 0,05$ nm und sind niedriger als die Stufen zwischen den anderen Terrassen ($H = (0,64 \pm 0,05)$ nm).

Ein atomar aufgelöstes $(10,31 \times 6,35)$ nm² STM-Bild auf der in Abbildung 3.14 a) mit (A) bezeichneten Terrasse ist in Abbildung 3.14 b) gezeigt. Der Öffnungswinkel α der eingezeichneten Einheitszelle beträgt $(119 \pm 2)^\circ$, was wie oben auf eine dicht gepackte fcc(111)-Oberfläche hinweist. Da wie oben beschrieben in der (111)-Oberfläche einer L2–1-geordneten Heuslerverbindung nur eine Atomsorte vorkommt, bedeutet dies im Zusammenhang mit den beobachteten dI/dU -Kontrast in Abbildung 3.14 c), dass die Terrassen (C) und (E) eine andere Lage im Gitter der L2₁-Struktur zeigen als die anderen Terrassen.

Sowohl auf in Abbildung 3.13 gezeigten ungetemperten Probe als auch auf der in Abbildung 3.14 gezeigten getemperten Probe wurden differentielle $dI/dU(U)$ Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen. Diese Spektren sind in Abbildung 3.14 c) gezeigt.

Das Spektrum der ungetemperten Probe zeigt Peaks bei $-0,39$ eV und $-0,13$ eV im Bereich besetzter Probenzustände und eine Doppelpeakstruktur mit Maxima bei $+0,14$ eV und $+0,3$ eV. Das Spektrum der getemperten Probe sieht auf den ersten Blick völlig anders aus. Allerdings zeigt dieses Spektrum Peaks bei den gleichen Energien wie im Spektrum der ungetemperten Probe. Eine zusätzliche breite Struktur liegt bei $+0,8$ eV.

Diese hier präsentierten Ergebnisse zeigen die Möglichkeit der Untersuchung

von in-situ gespaltenen metallischen Volumenproben. Durch Vergleiche mit Oberflächenzustandsrechnungen sollte es ferner möglich sein, die gemessenen $dI/dU(U)$ -Spektren den spezifischen (111)-Ebenen zuzuordnen. Die hier untersuchten Co_2TiSn Proben wiesen, wie in den atomar aufgelösten Aufnahmen gezeigt, eine sehr gute $L2_1$ -Ordnung auf. Allerdings muss dabei beachtet werden, dass mit dem STM nur sehr kleine Probenausschnitte untersucht werden können. Weiterhin bedarf es einiger Suche auf der Oberfläche, bis ein Areal gefunden werden kann, das Terrassen, wie sie in den Abbildungen 3.13 und 3.14 gezeigt sind, aufweist. Der größte Teil der Schnittflächen der Proben ist geprägt durch Verwerfungen. Möglicherweise handelt es sich bei den glatten Flächen um die Oberflächen einzelner Kristallite, die in einer amorphen Matrix, bestehend aus wechselnder Verbindungen von Co, Ti, Sn und evtl. Verunreinigungen, eingebettet sind. Dies würde bedeuten, dass die Proben großräumig inhomogen sind und nur lokal eine $L2_1$ geordnete Heuslerverbindung eingehen. Dennoch erscheint die Untersuchung von Heuslerproben mit einem Rastertunnelmikroskop eine vielversprechende Methode zu sein.

Kapitel 4

Wachstum und elektronische Struktur von bcc-Kobaltschichten

Die Präparation von Materialien in metastabilen Strukturen ist von besonderem wissenschaftlichen Interesse, da sich hierdurch interessante neue Materialeigenschaften, wie z.B. ein gegenüber Gleichgewichtsstrukturen geändertes magnetisches und elektronisches Verhalten, ergeben. Ein seit längerem diskutiertes Beispiel hierfür ist die Stabilisierung der metastabilen kubisch-raumzentrierten Phase von Kobalt (engl.: *body-centered cubic*, bcc). Bcc Co ist für die Herstellung von Spintronik-Bauteilen interessant, da für die Anwendung in Tunnelmagnetowiderstandselementen (engl.: *tunneling magnetoresistance*, TMR) Materialien mit einer hohen Spinpolarisation an der Fermikante notwendig sind [Pri85, Pri98]. Ergebnisse von TMR-Elementen mit bcc Co als ferromagnetische Elektroden zeigten bei Raumtemperatur einen TMR-Wert von $TMR := \frac{R_{AP} - R_{PP}}{R_{AP}} = 410\%$, wobei R_{AP} und R_{PP} die Widerstände bei antiparalleler bzw. paralleler Magnetisierung beider Elektroden bezeichnen [Yua06]. Dieser außerordentlich hohe Wert wird der hohen Spinpolarisation von bcc Co in Kombination mit einer außergewöhnlich hohen Curie-Temperatur zugeschrieben. Andererseits wird aufgrund von kohärentem Tunneln durch einkristallines Magnesiumoxid (MgO) als Tunnelbarriere der TMR-Effekt in dem Experiment von Yuasa et al. [Yua06] verstärkt.

Um zu klären, welche Effekte für den TMR-Effekt dominant sind, ist der Nachweis des Wachstums von unverzerrten bcc Co Filmen und die Untersuchung der elektronischen Eigenschaften dieser Filme im Vergleich mit theoretischen Rechnungen von besonderem wissenschaftlichen Interesse.

Die Idee hinter den meisten Experimenten zur Stabilisierung einer metastabilen Phase ist das pseudomorphe Wachstum einer Schicht auf einem geeigneten Substrat. Pseudomorphes Wachstum bedeutet, dass die Adsorbatatome die Gittersymmetrie des Substrates übernehmen und somit die Substratgitterstruktur in der aufgewachsenen Schicht fortgesetzt wird. Eine gute Voraussetzung für pseudomorphes Wachstum ist ein kleiner Unterschied der Gitterkonstanten des Substrates und der Adsorbatschicht, da eine größere Differenz sonst zu Versetzungen und Fehlorientierungen im Adsorbatfilm führen. Die Wahl eines geeig-

netes Substrates ist daher von elementarer Bedeutung für die Stabilisierung von Kobalt in der bcc Gitterordnung.

Über Ergebnisse zur Stabilisierung von dünnen bcc Co-Schichten auf verschiedenen Substraten und mit unterschiedlichen Orientierungen wurde in der Literatur bereits berichtet. Tetragonal verzerrte und (100)-orientierte bcc Co-Schichten wachsen auf Pt(100) [Val04], GaAs(100) [Wu98], Ge(100) [Rya04], Fe(100) [Yua06, Li89, Lib99, Wie03], FeAl(100) [Wan94], Pd(100) [Gio96, Eng91], W(100) [Wor96] [Wul01] sowie auf Au(100) [Spi04].

Auf einer Cr(100) Oberfläche wächst Co zunächst für wenige Monolagen in einer pseudomorphen bcc Phase, um dann für dickere Schichten in eine dicht gepackte hcp (engl.: *hexagonal-close-packed*, hcp) Ordnung überzugehen [Sch91, Met94]. Allipi et al. beschreiben die Kristallstruktur von Co(100) Schichten als eine metastabile tetragonal verzerrte Struktur (engl.: *body-centered-tetragonal*, bct) als Folge der epitaktischen Spannung in (100)-orientierten Filmen, da die bcc-Struktur eine instabile Phase für Kobalt darstellt [Ali97]. Tetragonale Verzerrungen einer (100) Dreifachschicht erlauben eine kontinuierliche Variation der Kristallstruktur von bcc über bct nach fcc entlang des Bain-Pfads [Bus09]. Der Bain-Pfad beschreibt den Übergang eines bcc geordneten Kristalles, der entlang $\langle 001 \rangle$ gestreckt wird, über bct bis zur fcc Struktur [Bai24]. Eine solche tetragonale Verzerrung ist aus Symmetriegründen in der (110) Orientierung nicht möglich. Daher ist eine Untersuchung des Wachstums von bcc Co bei erhaltener kubischer Symmetrie in der (110) Orientierung ideal.

Mit Hilfe von hochaufgelöster niederenergetischer Elektronenbeugung (engl.: *High-Resolution Low-Energy Electron Diffraction*, HR-LEED) wurde das pseudomorphe Wachstum von bcc Co mit einer (3×1) Überstruktur an der Oberfläche für bis zu 30 Monolagen dicke Schichten auf Cr(110) gezeigt [Föl98, Föl99].

Co Filme mit Schichtdicken von bis zu 35 nm auf GaAs(110) zeigen eine Magnetisierung, die leicht unter dem Wert des Volumens liegt [Pri85]. Eine neuere Arbeit von Monchesky et al. zeigt, dass Co und GaAs an der Grenzfläche eine Legierung bilden, auf der Co mit einer 6 at.% Ga Verunreinigung in der bcc Ordnung aufwächst [Mon06]. Die verbleibende Gitterspannung in dem Co Film kann durch die Verwendung von Antimon als Benetzungsmittel reduziert werden [Izq05].

Die mittels ab-initio Berechnungen bestimmte elektronische Struktur von bcc Kobalt [Bag83, Lez07, Izq00, Kla05] weist deutliche Unterschiede zu fcc-Co [Mor78] und hcp-Co [Par05] auf. Die bedeutsamsten Unterschiede sind die Energien scharfer Maxima in der Zustandsdichtefunktion (DOS) relativ zur Fermi-Energie. Maxima treten für Minoritätszustände bei +0,6 eV (bcc) bzw. +1,2 eV (fcc/hcp) und für Majoritätszustände bei -1,9 eV (bcc) bzw. -0,7 eV (fcc/hcp) auf.

Mittels des Heisenberg-Modells wurde aus den ab-initio errechneten Wechselwirkungskonstanten von Lezaic et al. für bcc geordnetes Kobalt eine Cu-

rietemperatur von $T_C(\text{bccCo}) = 1670$ K ermittelt [Lez07]. Allerdings weichen die mit dieser Methode bestimmten Curietemperaturen um etwa 10 % von experimentell bestimmten Curie-Temperaturen ab. So beträgt beispielsweise die experimentell bestimmte Curie-Temperatur für fcc geordnetes Kobalt $T_C(\text{fccCo}) = 1403$ K [Boz51], während Lezaic et al. eine Temperatur von $T_C(\text{fccCo}) = 1200$ K [Lez07] ermitteln. Für hcp-geordnetes Kobalt ergibt die Rechnung eine Curietemperatur von $T_C(\text{hcpCo}) = 1350$ K. Obwohl die so bestimmten absoluten Curietemperaturen nicht mit experimentellen Werten übereinstimmen, zeigen sie einen Trend auf. Von allen Phasen für Kobalt (fcc, hcp, bct und bcc) ist die Curie-Temperatur von bcc-geordnetem Kobalt die Höchste [Lez07].

Die in der Literatur berichteten strukturellen Untersuchungen an bcc Co wurden mittels Streuexperimenten durchgeführt, wodurch Punktdefekte ohne Translationssymmetrie verborgen bleiben. Experimentelle Daten zur elektronischen Struktur von bcc Co wurden bisher noch nicht veröffentlicht. Diese Situation stellt den Ausgangspunkt für die Untersuchung von ultradünnen bcc-Co Filmen mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie dar.

Im Rahmen dieser Dissertation wurde das Wachstum von Co auf Cr(110) und Fe(110) Oberflächen untersucht. Die Gitterkonstanten von Cr ($a_{Cr} = 2,91$ Å) und Fe ($a_{Fe} = 2,866$ Å) sind fast gleich und beide Materialien besitzen eine bcc Gitterstruktur. Ein pseudomorphes Wachstum, ohne große epitaktische Spannungen im Film, von Kobalt auf Chrom und Eisen ist zu erwarten, da die Nächste-Nachbar-Abstände von Chrom ($a_{nn}(Cr) = 2,498$ Å) und Eisen ($a_{nn}(Fe) = 2,485$ Å) fast identisch mit hcp geordnetem Kobalt ($a_{nn}(Co) = 2,506$ Å) sind.

Das Wachstum von Co auf Cr(110) wurde mit dem Raumtemperatur-STM (RT-STM) untersucht. Ebenso wurden die Morphologie und die elektronische Struktur von Co/Fe(110) mit dem RT-STM untersucht, wohingegen die atomare Struktur von Co/Fe(110) mit dem Tieftemperatur-STM untersucht wurde. Weiterhin wurde die Spinpolarisation der bcc-Co Schichten auf Fe(110) mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie untersucht.

4.1 Präparation der Fe und Cr Unterlagen

Eisen zeigt bei Temperaturen oberhalb von 1184 K einen Wechsel von der bcc Ordnung (α -Eisen) in die fcc-Ordnung (γ -Eisen). Aufgrund dieses strukturellen Phasenübergangs ist die Präparation von reinen Eisenkristalloberflächen unmöglich. Die Präparation von metallischen Einkristalloberflächen erfordert in der Regel einen Temper-Prozess bei hoher Temperatur. Durch den Phasenübergang würde ein Fe-Einkristall daher zerstört werden.

Im Folgenden wird daher zunächst die Möglichkeit der Präparation von definierten Cr(110) und Fe(110) Oberflächen auf den in Kap. 3.5.1 beschriebenen Mo(110)- und W(110)-Einkristallen diskutiert. Auf den so präparierten Cr(110) und Fe(110) Oberflächen wird in einem weiteren Schritt das Wachstum von Co untersucht.

4.1.1 Das Wachstum von Fe und Cr auf W(110)

Chrom und Eisen zeigen auf W(110) ein sehr ähnliches Wachstumsverhalten. Bei Raumtemperatur wachsen beide Metalle zunächst inselartig auf der Wolframoberfläche. Zusammenfassend kann das Wachstum von Chrom und Eisen in Abhängigkeit von der Schichtdicke in drei Abschnitte gegliedert werden, die jeweils unterschiedliche Eigenschaften bzw. Strukturen aufweisen:

- Aufgrund der hohen Oberflächenenthalpie von Wolfram bilden Eisen und Chrom auf der W(110)-Oberfläche bei einer erhöhten Substrattemperatur von 500 K (bzw. 600 K bei Fe) eine geschlossene pseudomorphe erste Monolage auf der Substratoberfläche [Prz89, Met07]. Mit zeitaufgelöster Rastertunnelmikroskopie konnten Jensen et al. zeigen, dass die Doppellage Fe/W(110) bis zu einer kritischen Ausdehnung der Doppellageninseln von 9 nm ebenfalls pseudomorph wächst [Jen96].
- Bei Bedeckungsgraden Θ von mehr als einer Monolage bilden sich bei erhöhter Substrattemperatur auf der geschlossenen pseudomorphen ersten Monolage Inseln mit höheren Schichtdicken (Stranski-Krastanov Wachstum) [Fri93, Rot05]. Aufgrund der Relaxierung der Schicht von der pseudomorphen Struktur zur materialspezifischen Struktur kommt es zu Versetzungen im Gitter. Das entstehende Versetzungsnetzwerk ist abhängig von der lokalen Schichtdicke.
- Bei ausreichender lokaler Schichtdicke ist die Oberfläche der Schicht nicht mehr durch das Substrat, sondern durch die natürliche Struktur von Chrom bzw. Eisen bestimmt.

Da das Wachstum von Chrom und Eisen nahezu gleich ist, wird im Folgenden lediglich das Wachstum von Chrom auf der W(110)-Oberfläche genauer diskutiert. Eine detaillierte Diskussion des Wachstums von Eisen auf W(110) findet sich in der Dissertation von J. Hauschild [Hau98].

Die Temperaturabhängigkeit des Wachstums mehrlageriger Schichten Cr/W(110) ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Die STM-Aufnahme in Abbildung 4.1 a) zeigt die unregelmäßige Oberfläche einer bei Raumtemperatur deponierten fünf Monolagen dicken Chromschicht. Wird die Cr-Schicht nach der Deponierung bei etwa 350 K getempert, beginnt die Oberfläche aufzureißen und es entstehen lang gestreckte, verästelte Strukturen mit lokal glatten Oberflächen, wie in Abbildung 4.1 b) gezeigt. Bei weiterer Erhöhung der Substrattemperatur nimmt

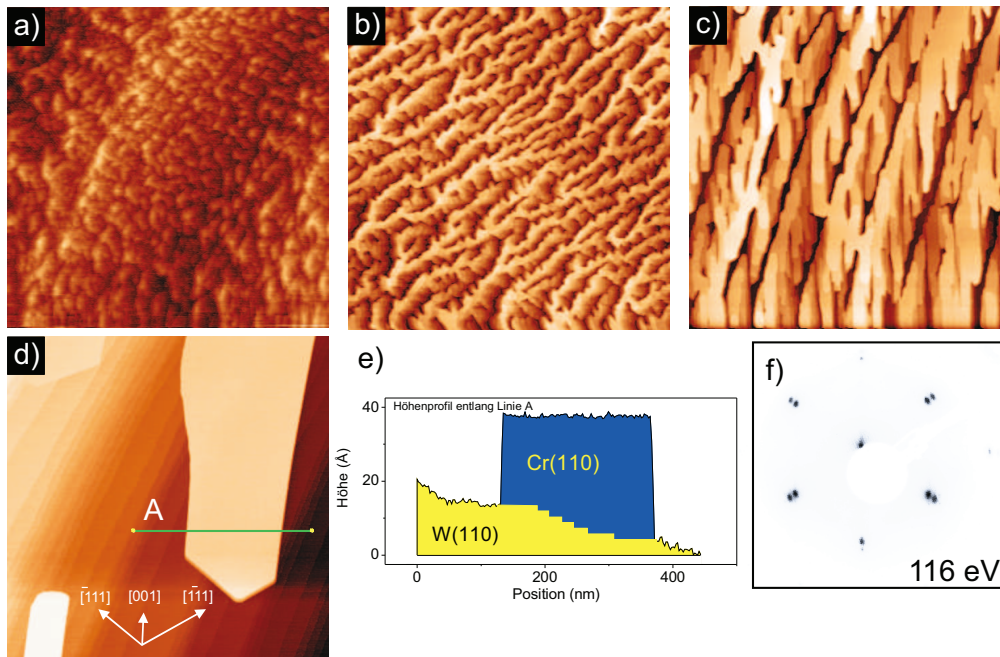


Abbildung 4.1: Übersicht über die Temperaturabhängigkeit der Morphologie von Cr/W(110) bei unterschiedlichen Wachstumsbedingungen. a) $(300 \times 300) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme von 5 ML Cr deponiert bei Raumtemperatur (300 K). b) $(300 \times 300) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme von $\Theta_{Cr} = 4,5$ ML deponiert bei 350 K Substrattemperatur. c) $(300 \times 300) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme von $\Theta_{Cr} = 9$ ML deponiert bei 430 K Substrattemperatur. d) $(800 \times 800) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme einer Probe mit 5 ML Cr deponiert bei Raumtemperatur auf und anschließend bei 500 K getempert. e) Höhenprofil entlang der in d) eingezeichneten Linie unterlegt mit einer schematischen Zeichnung der zugrundeliegenden Struktur. Die STM-Aufnahmen wurden mit einer Biasspannung von $U = 1 \text{ V}$ und einem Tunnelstrom von $I_T = 0,6 \text{ nA}$ gemessen. f) LEED-Messung der in d) gezeigten Probe. Es sind zwei ineinander liegende reziproke bcc Gitter erkennbar.

der Grad der Verästelung ab und die lokal glatten Flächen nehmen in der Größe zu. Abbildung 4.1 c) zeigt die Oberfläche einer bei $T = 430 \text{ K}$ getemperten Probe.

Wird die Chromschicht bei 500 K getempert, bilden sich getrennte Inseln mit einer glatten Oberfläche und einer lateralen Ausdehnung von mehreren 100 nm (siehe Abbildung 4.1 d)). Auf der Wolframoberfläche verbleibt eine komplett geschlossene pseudomorphe Monolage Chrom, so dass von einem Stranski-Krastanov Wachstum gesprochen werden kann [Fri93, Rot05]. Auch auf der W(100)-Oberfläche wurde ein Stranski-Krastanov Wachstum von Chrom beobachtet [Man06].

Die zugrunde liegende Stufenstruktur des Substrates ist auf der Oberfläche der Insel nicht sichtbar und die Form der Insel wird nicht durch die Stufenstruktur beeinflusst. Die Kanten der Inseln verlaufen entlang der $[111]$ (dicht gepackt)

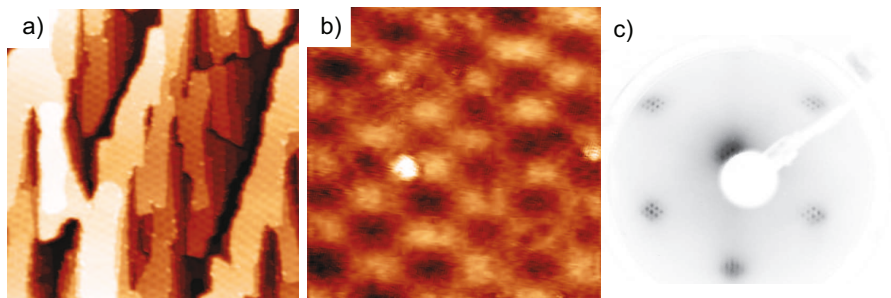


Abbildung 4.2: a) STM-Aufnahme des Versetzungsnetzwerk von Cr auf W(110) b) Das LEED-Bild (Aufgenommen bei 128,5 eV) zeigt eine P(13 × 13) Überstruktur. c) (15,78 × 15,78) nm² STM Aufnahme der Überstruktur. b) zugehöriges dI/dU -Bild aufgenommen bei ($U = 1$ V und $= 0,6$ nA). Zwischen den Tälern und Bergen der Überstruktur ist ein spektroskopischer Unterschied erkennbar.

und [001] Gitterrichtungen der bcc Struktur. Eine solche Form wird auch bei Fe/W(110) sowie Fe/Mo(110) beobachtet und ist durch eine Minimierung der Oberfläche, und somit der Oberflächenenergie, begründet [Bet95, Mal98, Osi99]. Rothenberg et al. konnten mittels LEEM (Niederenergetische Elektronenmikroskop, engl.: *Low Energy Electron Microscope*) dieses Wachstumsverhalten von Cr/W(100) ebenfalls beobachten [Rot05] .

Da die Ausdehnung der Inseln größer als die LEED-Transferlänge ist, kann die Oberfläche der Inseln mittels Beugung niederenergetischer Elektronen untersucht werden. Die LEED-Aufnahme der in Abbildung 4.1 d) abgebildeten Inseln in Abbildung 4.1 f) zeigt deutlich zwei ineinander liegende reziproke (1×1) bcc Gitter. Bei dem inneren Gitter handelt es sich um das reziproke Gitter der Monolage Cr/W(110), während die äußeren Spots dem reziproken Gitter der Oberflächen von den ausgedehnten Cr(110)-Inseln entsprechen. Das Verhältnis der Abstände der jeweiligen Spots ($1,085 \pm 0,005$) ist in guter Übereinstimmung mit dem Verhältnis der Gitterkonstanten von Wolfram und Chrom

$$R = \frac{a_W}{a_{Cr}} = \frac{3,16 \text{ \AA}}{2,91 \text{ \AA}} = 1,086.$$

In Übereinstimmung mit den Arbeiten von Fritzsche [Fri93] und Rothenberg et al. [Rot05] gibt es keine Indikationen für Abweichungen der Gitterkonstante entlang der Inseloberflächen. Die LEED-Spots der pseudomorphen Monolage und der Inseloberflächen sind von ähnlicher Schärfe, was eine gute Translations-symmetrie der Oberfläche der Chrominseln bestätigt. Eine geringe verbleibende epitaktische Spannung ($< 0,5$ %) kann innerhalb der Auflösung des LEEDs nicht ausgeschlossen werden. Die Oberflächen dieser Inseln repräsentieren also eine stufenfreie Cr(110) Oberfläche.

Bei einer genauen Betrachtung der in Abbildung 4.1 c) gezeigten Cr-Oberfläche ist eine Überstruktur erkennbar (Abbildung 4.2). Sie entsteht durch eine Moiré-artige Überlagerung der Gitterstruktur von der pseudomorphen Monolage, die durch das Substrat bestimmt wird, und der Oberfläche der Inseln, deren Gitterstruktur durch die Volumeneigenschaften von Chrom beeinflusst wird. Da die Gitterkonstante von Chrom ($a_{Cr} = 2,91 \text{ \AA}$) kleiner als die von Wolfram ($a_W = 3,16 \text{ \AA}$) ist, führt das pseudomorphe Wachstum zu einer relativ großen Gitterfehlانpassung in der ersten Monlage von $f_{Cr} = 8,9 \%$ für Cr/W(110) und $f_{Fe} = 9,5 \%$ für Fe/W(110) (vgl. Kapitel 3.5.3), woraus eine hohe epitaktische Spannung im Cr- bzw. Fe-Film resultiert.

In einer LEED-Aufnahme der Überstruktur (siehe Abbildung 4.2 c)) erscheinen in der Nähe der Spots des reziproken (1×1) bcc Gitters weitere Reflexe. Aus dem Verhältnis der Abstände kann auf eine $P(13 \times 13)$ Überstruktur geschlossen werden, d.h. auf zwölf Atome entlang der $\langle 111 \rangle$ -Richtung des pseudomorphen Gitters wird ein zusätzliches Cr-Atom in das Gitter der relaxierten Cr-Schicht eingebaut, um die Spannung in der Cr-Schicht abzubauen. Durch dieses zusätzliche Atom kommt die Cr-Schicht der natürlichen Cr-Gitterkonstante am Nächsten, d.h. die Gitterfehlانpassung wird minimal und beträgt

$$\frac{12 \times a_W - 13 \times a_{Cr}}{13 \times a_{Cr}} = 0,2 \%. \quad (4.1)$$

Durch den Einbau des zusätzlichen Atoms kommt es zu einer Höhenkorruption der Atomlagen, da die Atome der Cr-Schicht unterschiedliche Absorptionsplätze auf dem W-Gitter einnehmen. Cr-Atome die auf einem Gitterplatz der W-Struktur sitzen, liegen topographisch etwas höher als Cr-Atome, die zwischen Gitterplätzen der Wolframstruktur sitzen. Daraus resultiert eine wabenförmige Struktur auf der Oberfläche. Diese Überstruktur wurde zum ersten Mal mit LEED von G. Waller und U. Gradmann an Fe/W(110) beobachtet [Gra82]. Mit STM wurde dieser Spannungsabbau an Fe/W(110) Schichten erstmals von Jensen et. al. beobachtet [Jen96]. Eine schematische Skizze zur Entstehung der Überstruktur ist in Abbildung 4.3 gezeigt. Mit zunehmender Schichtdicke nimmt die Intensität der Überstruktur auf der Oberfläche ab und kann bei Schichtdicken von mehr als 2 nm ($\cong 7 \text{ ML}$) nicht mehr beobachtet werden.

Als geeignete Präparationsmethode für atomar glatte Cr- und Fe-Inseln auf W(110) erwies sich die Deposition von fünf bis sieben Monlagen Chrom bzw. Eisen bei Raumtemperatur und anschließendem Tempern bei $T = 500 \text{ K}$ (Chrom) bzw. $T = 600 \text{ K}$ (Eisen). Mittels niederenergetischer Elektronenbeugung kann sowohl für die Oberflächen der Cr-Inseln, als auch auf für die Fe-Inseln eine nahezu perfekte (110) Ordnung bestätigt werden. Es kann daher gefolgert werden, dass die Oberflächen der Inseln eine gute Approximation der Cr(110) und Fe(110) Oberflächen darstellen und für die Untersuchung des Wachstums von Kobalt auf Chrom und Eisen in der (110)-Orientierung geeignet sind.

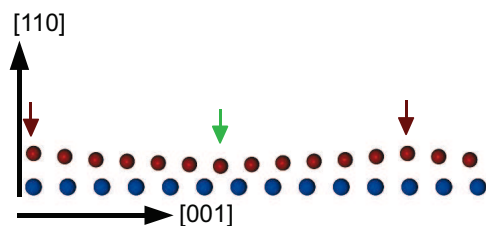


Abbildung 4.3: Schematische Skizze der Überstruktur Cr/W(110). In der relaxierten Cr-Lage (rote Kugeln) befinden sich 13 Atome auf 12 Atome der pseudomorphen Monolage Cr/W(110) (blaue Kugeln). Daraus ergibt sich, dass die beiden durch rote Pfeile markierten Atome Absorptionsplätze auf einem W-Atom einnehmen und ein Atom (grüner Pfeil) in der Mitte zwischen zwei pseudomorph platzierten Atomen sitzt. Man erhält also in [001] Richtung eine wellenförmige Höhenkorrektur, die auf zwei Dimensionen erweitert zu der beobachteten wabenförmigen Überstruktur führt.

4.1.2 Das Wachstum von Fe(110) auf Mo(110)

Das Wachstum von Eisen auf Mo(110) ist ähnlich dem oben beschriebenen Wachstum von Chrom und Eisen auf W(110), d.h. inselförmiges pseudomorphes Wachstum der Monolage bei Raumtemperatur und Ausbildung von Monolagenstreifen entlang der Substratstufenkanten („Step-flow-growth“) bei erhöhten Temperaturen ($T \approx 600$ K). Auch Fe/Mo(110) bildet eine pseudomorphe Monolage aus, wie mittels LEED bestätigt wurde.

Bedeckungen von mehr als einer Monolage bei erhöhter Substrattemperatur ($T = 600$ K) führen aufgrund der hohen Oberflächenenthalpie von Molybdän zu einer komplett geschlossenen ersten Monolage und der Bildung von Doppellagenstreifen entlang der Substratstufenkanten. Bei weiterer Erhöhung der Substrattemperatur zeigt Fe/Mo(110) ein Stranski-Krastanov-Wachstumsverhalten, so dass entlang [001] gestreckte Inseln mit atomar glatter Oberfläche entstehen. Dieses Wachstumsverhalten von Fe/Mo(110) wurde auch von Malzbender et al. [Mal98] und Murphy et al. [Mur02] beobachtet. Wie bei dem Wachstum von Chrom und Eisen auf Wolfram ist auch das Wachstum von Chrom und Eisen auf Mo(110) ähnlich zueinander, z.B. Beispiel zeigen Cazacu et al. ebenfalls ein Stranski-Krastanov Wachstum von Cr/Mo(110) [Caz06]. Das im Fall von Cr/W(110) und Fe/W(110) beobachtete Versetzungsnetzwerk wird erwartungsgemäß auch beim Wachstum von Fe/Mo(110) beobachtet [Mal98, Mur02].

Im Folgenden wird der Übergang von der pseudomorphen Monolage zum zwei-dimensionalen Versetzungsnetzwerk dicker Schichten in der dritten Lage beschrieben. In Abbildung 4.4 a) sind die Doppellage und die Tripellage auf der geschlossenen Monolage zu sehen. In der Doppellage können Versetzungslinien entlang [001] beobachtet werden. Die epitaktische Spannung in pseudomorphen Fe/Mo(110) Schichten zeigt eine Anisotropie, wobei die Spannung entlang [001] signifikant höher ist als entlang $[1\bar{1}0]$ [Cle93]. Obwohl die Spannung entlang [001]

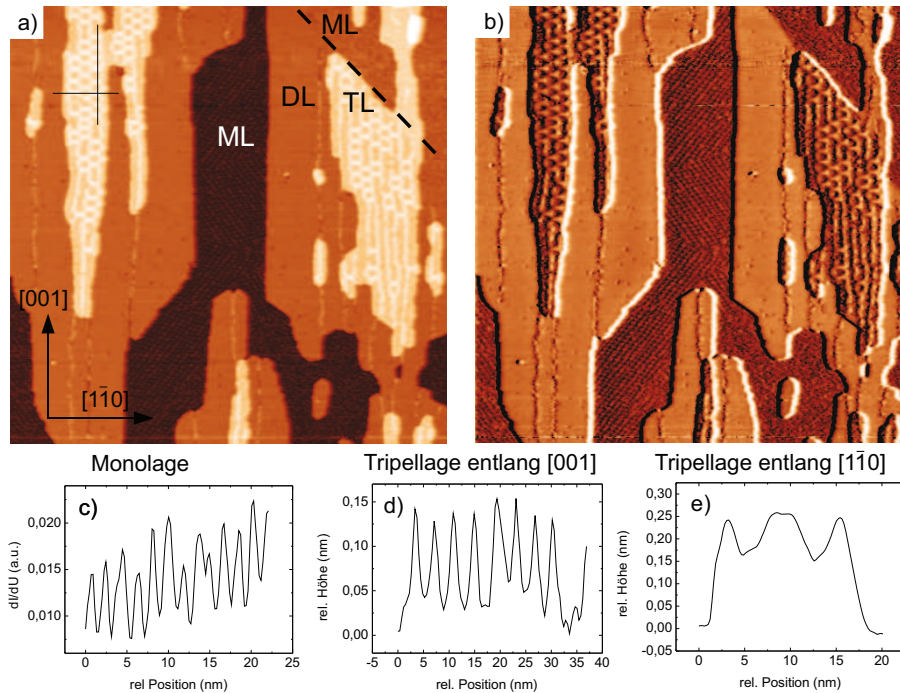


Abbildung 4.4: a) $(150 \times 150) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme von 1,5 ML Fe/Mo(110) gemessen bei $U = 0,3 \text{ eV}$, $I = 2,5 \text{ nA}$ und $T = 5 \text{ K}$ mit einer mit 6 ML Co/10 ML Au beschichteten W-Spitze. Die Monolage (ML), Doppellage (DL) und Inseln der dritten Lage (TL) sind entsprechend gekennzeichnet. b) Zugehörige dI/dU -Karte. In der Doppellage sind Versetzungslinien entlang [001] erkennbar. In der dritten Lage ist die Dichte der Versetzungslinien höher und teilweise ist ein wabenartiges Versetzungsnetzwerk zu erkennen. c) dI/dU -Profil entlang $\langle 111 \rangle$ in der Monolage. d) Höhenprofil entlang der eingezeichneten Linie parallel zu [001] auf der Tripellage. e) Höhenprofil über der Tripellage entlang [110].

höher ist, relaxiert der Film aufgrund der geringeren Elastizität der Eisenschicht zuerst entlang $[1\bar{1}0]$ [Cle93, Mur02]. Durch den Einbau zusätzlicher Atomreihen wird die epitaktische Spannung im Fe-Film entlang der $[1\bar{1}0]$ Richtung abgebaut, während die Schicht entlang [001] weiterhin pseudomorph bleibt [Mur02].

In der dritten Lage beginnt die Ausbildung eines zweidimensionalen Versetzungsnetzwerks. Der Abstand der in der Doppellage in unregelmäßigen Abständen auftretenden Versetzungslinien wird in der Trippellage geringer. Hinzu kommen Versetzungen entlang $[1\bar{1}0]$, wobei in dieser Richtung die Länge der Versetzungslinien auf den Zwischenraum zwei benachbarter Versetzungslinien entlang [001] begrenzt ist. Weiterhin sind die Positionen dieser Versetzungen in der [001] Richtung versetzt, so dass ein wabenförmiges Netzwerk aus Versetzungen entsteht (siehe Abbildung 4.4). Die Größe der Waben beträgt in der [001]-Richtung $d_{[001]} = (3,7 \pm 0,2) \text{ nm}$ und in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung $d_{[1\bar{1}0]} = (5,4 \pm 0,3) \text{ nm}$. Das entspricht der Platzierung von zwölf Eisenatomen auf elf Molybdänatomen

entlang $[001]$ und 13 Fe-Atome auf zwölf Mo-Atome entlang $[1\bar{1}0]$. Murphy et al. zeigen Werte für die Periodizität von 33 \AA entlang $[001]$ (11,5 Fe-Atomen auf jeweils 10,5 Mo-Atome) und 54 \AA entlang $[1\bar{1}0]$ (13 Fe-Atome auf zwölf Mo-Atome), die im Rahmen des Fehlers mit diesen Ergebnissen übereinstimmen [Mur02]. Der Höhenunterschied zwischen einer Versetzungslinie und dem Bereich innerhalb einer Wabe beträgt $\Delta h = (88 \pm 6) \text{ pm}$.

Weiterhin fällt auf, dass die Inseln der dritten Lage entlang $[001]$ gestreckt sind und ausschließlich auf den Versetzungslinien der zweiten Lage wachsen. Dies deutet auf eine Wachstumsanisotropie hin.

In der Monolage kann zwischen den beiden Doppellageninseln eine Linienstruktur entlang $\langle 111 \rangle$ mit einem Linienabstand von $d = (1,9 \pm 0,1) \text{ nm}$ identifiziert werden. Die Entstehung dieser Linien kann nicht eindeutig geklärt werden. Eine mögliche Erklärung ist die Ausbildung stehender Wellen. Hierzu müsste die Monolage Fe/Mo(110) bei dieser Energie einen Oberflächenzustand besitzen. Eine andere Möglichkeit der Erklärung dieser Linien bietet die Ausbildung von Versetzung in der Monolage Fe/Mo(110). Es ist vorstellbar, dass die Monolage Eisen unterhalb der Doppellage eine leichte Rekonstruktion, bedingt durch die Rekonstruktion der Doppellage, aufweist. Dadurch kann möglicherweise ein Druck auf das Gitter der unbedeckten Monolage ausgeübt werden, wodurch es hier zu Verwerfungen kommt, die als Versetzungslinien sichtbar werden. Eine Rekonstruktion der ansonsten pseudomorphen Monolage zwischen Inseln höherer lokaler Schichtdichte wurde auch von Murphy et al. beobachtet [Mur02]. Eine dritte mögliche Erklärung ist eine Verunreinigung des Substrates innerhalb dieses Bereichs, z.B. durch Kohlenstoff, durch die das Wachstum der Eisenschicht beeinflusst wird.

Abbildung 4.5 a) zeigt eine im Stranski-Krastanov-Modus gewachsene Fe-Oberfläche. Auf der Oberfläche der Insel ist das wabenförmige Versetzungsnetzwerk erkennbar. Unter der Insel verläuft eine Substratstufenkante, so dass die lokale Schichtdicke der Insel variiert. In der Vergrößerung der Inseloberfläche in Abbildung 4.5 b) verläuft die unter der Insel liegende Stufenkante von links unten nach rechts oben, wobei links der Stufenkante die Eisenschicht dicker ist als rechts. Aus einem Höhenprofil ergeben sich lokale Schichtdicken von 4 ML rechts der Substratstufenkante und 5 ML auf der linken Seite. In der dI/dU Aufnahme (Abbildung 4.5 c) ist ein deutlicher spektroskopischer Kontrast zwischen den beiden Bereichen unterschiedlicher Fe-Dicke erkennbar. Die Periodizitäten der Wabenstruktur betragen auf der vierten Lage $d_{[1\bar{1}0]} = 6,6 \pm 0,2 \text{ nm}$ und $d_{[001]} = 3,7 \pm 0,2 \text{ nm}$. Zur fünften Lage hin nimmt die Periodizität entlang $[1\bar{1}0]$ geringfügig auf $d_{[1\bar{1}0]} = 6,3 \pm 0,2 \text{ nm}$ ab und entlang $[001]$ auf $d_{[001]} = 3,9 \pm 0,2 \text{ nm}$ zu. Diese Werte sind leicht verschieden zu den auf der dritten Lage bestimmten Werten für die Wabengröße aus Abbildung 4.4.

Eine atomar aufgelöste STM-Aufnahme auf der fünften Lage ist in Abbildung 4.5 d) gezeigt. Diese $(10 \times 10) \text{ nm}^2$ Aufnahme wurde bei $U = 0,003 \text{ V}$ und

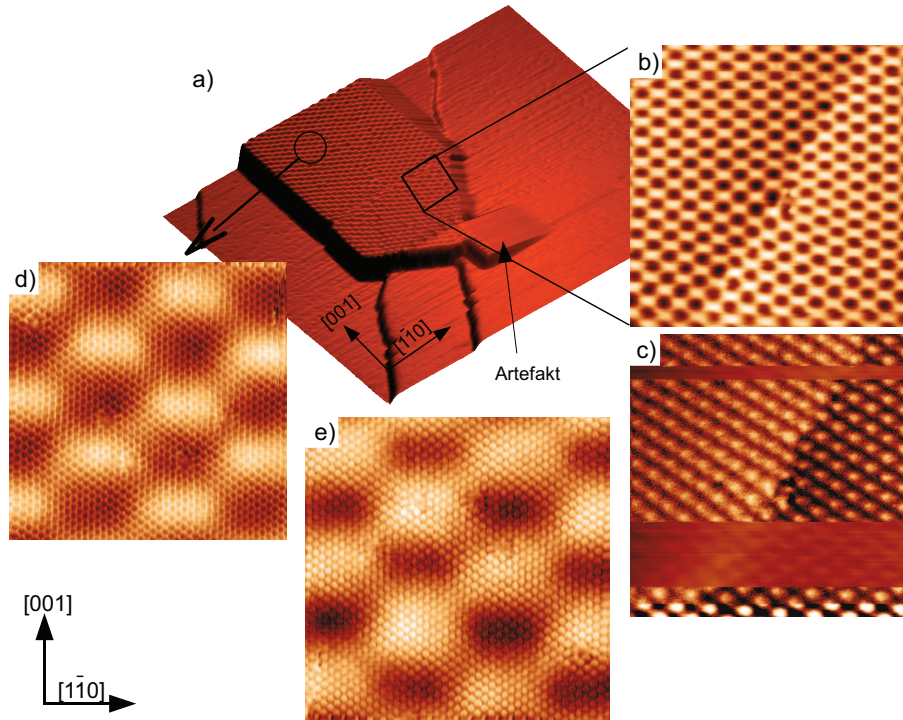


Abbildung 4.5: a) 3d-Darstellung einer STM-Aufnahme ($(235 \times 190) \text{ nm}^2$, $U = -0,5 \text{ V}$, $I = 2,1 \text{ nA}$, $T = 5 \text{ K}$) von $1,5 \text{ ML Fe/W}(110)$. Eisen wurde bei Raumtemperatur aufgedampft und anschließend bei 700 K getempert. b) $(55 \times 55) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme in dem in a) markierten Bereich auf der Fe-Insel ($U = -0,5 \text{ V}$, $I = 2,1 \text{ nA}$). c) Simultan gemessene dI/dU -Leitfähigkeitskarte ($U = -0,5 \text{ V}$, $I = 2,1 \text{ nA}$). d) Atomar aufgelöste STM-Aufnahme ($(10 \times 10) \text{ nm}^2$, $U = 0,003 \text{ V}$, $I = 31 \text{ nA}$). Die Atome erscheinen aufgrund der durch die elektronische Struktur an der Oberfläche bedingten Invertierung der Höhenkorrigatur als Löcher. e) Invertierte Darstellung der STM-Aufnahme, d.h. reale atomare Höhenkorrigatur. f) Invertierte Darstellung der STM-Aufnahme, d.h. reale atomare Höhenkorrigatur.

$I = 31 \text{ nA}$ gemessen. In dem Originalbild erscheinen die Atome dunkel, d.h. als Vertiefungen in der Oberfläche. Eine solche Umkehr der, mit dem STM gemessenen, Höhenkorrigatur auf $\text{bcc}(110)$ Oberflächen von Übergangsmetallen wird durch die elektronische Struktur an der Oberfläche hervorgerufen. Theoretische Rechnungen von Heinze et al. [Hei98] erklären diesen Effekt durch die Balance von resonanten Oberflächenzuständen mit d_{xz} und d_{z^2} Charakter sowie Oberflächenbandzuständen am \bar{S} Punkt der zweidimensionalen Brillouin-Zone. Der Theorie zufolge führen die resonanten Zustände zu einer direkten Darstellung der atomaren Topographie und die Oberflächenzustände zu einer invertierten Messung der Höhenkorrigatur. Der jeweilige Einfluss der resonanten Zustände bzw. der Oberflächenzustände ist energieabhängig, d.h. abhängig von der angelegten Biasspannung. Für magnetische Oberflächen, wie z.B. $\text{Fe}(110)$, wird dieser Effekt sowohl für Majoritäts- als auch für Minoritätselektronen separat

vorhergesagt, so dass bei spinpolarisierten STM-Messungen die Kontrastumkehr bei zwei verschiedenen Energien beobachtet werden kann. Für $U_{Bias} < 0,7$ V wird für Majoritätselektronen eine direkte Wiedergabe der atomaren Höhenkorrigatur und für Minoritätselektronen eine inverse Korrigatur vorhergesagt. Nach Heinze et al. [Hei98] sind nicht spinpolarisierte STM Aufnahmen durch die Zustände der Minoritätselektronen dominiert und eine inverse Korrigatur der Oberfläche wird für Biasspannung von $U < 0,4$ V vorhergesagt, womit der in Abbildung 4.5 d) sichtbare Kontrast erklärt werden kann.

In Abbildung 4.5 e) ist die Aufnahme invertiert dargestellt, so dass die reale Höhenkorrigatur sichtbar wird. Die gemessenen Abstände der Atome betragen entlang $[001]$ $d_{[001]} = (2,95 \pm 0,05)$ Å und entlang $[1\bar{1}0]$ $d_{[1\bar{1}0]} = (4,35 \pm 0,05)$ Å. Die Messung der atomaren Struktur auf einer Fe(110)-Oberfläche ergibt für die Atomabstände entlang $[001]$ $d_{[001]} = (2,96 \pm 0,05)$ Å und $d_{[1\bar{1}0]} = (4,43 \pm 0,05)$ Å entlang $[1\bar{1}0]$. Aus einer Korrektur dieser Abstände mit den in Kapitel 3.4.1 bestimmten Kalibrationsfaktoren ergeben sich in $[001]$ $a_{[001]} = (2,889 \pm 0,049)$ Å und $a_{[1\bar{1}0]} = (0,394 \pm 0,044)$ Å in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Innerhalb des Fehlers stimmen diese Werte gut mit der realen Gitterkonstante von Fe ($a_{Fe} = 2,866$ Å) überein. Zwischen zwei Erhebungen der Überstruktur entlang $[001]$ befinden sich zwölf Fe-Atome bei einem korrigierten Abstand der Erhebungen von $D_{[001]} = (3,58 \pm 0,15)$ nm. Mit der Gitterkonstante von Mo ($a_{Mo} = 3,147$ Å) ergibt sich daraus eine Überstruktur von zwölf Fe-Atomen auf $(11,1 \pm 0,5)$ Mo-Atomen entlang $[001]$. Entlang $[1\bar{1}0]$ können ebenfalls zwölf Fe-Atome zwischen zwei Erhebungen der Überstruktur gezählt werden. Bei einem korrigierten Abstand der Erhebungen von $D_{[1\bar{1}0]} = (4,73 \pm 0,15)$ nm ergeben sich daraus zwölf Fe-Atome auf $(10,6 \pm 0,3)$ Mo-Atome.

Aus Gleichung 3.8 kann die Anzahl der Mo-Atome N_{Mo} auf zwölf Fe-Atome berechnet werden, so dass die Gitterfehlpassung minimal, d.h. null, ist:

$$N_{Mo} = \frac{f + 12 \cdot a_{Fe}}{a_{Mo}} \quad (4.2)$$

$$f = 0 \Rightarrow N_{Mo} = 10,95. \quad (4.3)$$

Das bedeutet, die Gitterfehlpassung ist minimal für zwölf Fe-Atome auf 10,95 Mo-Atome. Für 13 Fe-Atome ergibt sich $N_{Mo} = 11,87$. Diese Werte stimmen sehr gut mit der Messung überein und bestätigen die experimentell ermittelte Überstruktur der Eisenschicht auf Mo(110).

In Abbildung 4.6 wird auf der Oberfläche der Fe-Insel beobachtet wie das Versetzungsnetzwerk mit zunehmender Schichtdicke ausheilt. Aus dem Höhenprofil der Insel ergibt sich eine Dicke von 4 ML auf der rechten Seite und 10 ML auf linken Seite. In der Vergrößerung der Insel in Abbildung 4.6 b) können die, unter der Insel verlaufenden, Substratstufenkanten gut identifiziert werden. Beginnend von der rechten Seite der Inseln wird das Versetzungsnetzwerk immer

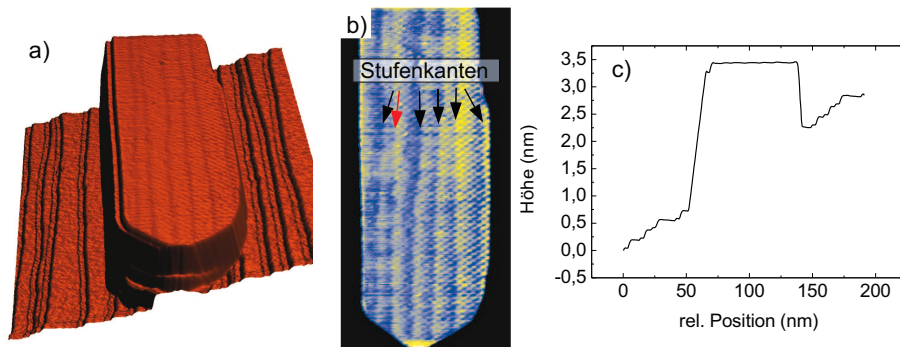


Abbildung 4.6: a) (190×190) nm² STM-Aufnahme von 3 ML Fe/Mo(110) deponiert bei RT und getempert bei 700 K und gemessen bei $T = 5$ K. b) (90×180) nm² Ausschnittsvergrößerung von a). Aus dem in c) gezeigten Höhenprofil ergibt sich eine Dicke von 4 ML am rechten Rand der Insel und 10 ML am linken Rand der Insel. Die unter der Insel verlaufenden Stufenkanten sind deutlich sichtbar. Vom rechten Rand aus gesehen wird das Versetzungsnetzwerk auf der Oberfläche der Insel mit zunehmender Schichtdicke schwächer. Ab der fünften sichtbaren Stufenkante (roter Pfeil) ist das Versetzungsnetzwerk nicht mehr erkennbar.

schwächer und kann ab der sichtbaren fünften Stufenkante (roter Pfeil im Bild) nicht mehr erkannt werden. Das bedeutet, dass ab der neunten Monolage das Versetzungsnetzwerk so gut wie ausgeheilt ist.

Aus dem diskutierten Wachstumsverhalten von Fe auf Mo(110) ergibt sich eine Präparationsmethode der Fe(110)-Oberflächen analog zur oben beschriebenen Präparation der Fe(110)-Oberflächen auf W(110). Zunächst wurden sieben Monolagen Eisen bei Raumtemperatur aufgedampft und anschließend bei 700 K getempert. Wie oben wächst Fe in Stranski-Krastanov Anordnung mit Inseln von etwa 4 – 7 nm Höhe (13 bis 24 Lagen) und einer lateralen Ausdehnung von mehreren hundert Nanometern entlang der [001]-Achse. LEED-Untersuchungen bestätigen innerhalb der Messgenauigkeit eine perfekte (110) Ordnung der Oberflächen, so dass diese Inseln eine ideale Approximation der natürlichen Fe(110) Oberfläche darstellen und als Substrat für die Untersuchung des Wachstums von Co auf der Fe(110) Oberfläche verwendet werden können.

4.2 Wachstum ultradünner bcc-Co Filme auf Cr(110)

Auf die wie in Abschnitt 4.1.1 beschrieben präparierten Proben mit Cr-Inseln wurde Co mit verschiedenen Bedeckungsgraden Θ_{Co} aufgedampft. Um Interdiffusionen an der Grenzfläche zu vermeiden, wurde Kobalt bei Raumtemperatur (300 K) deponiert. Im folgenden wird nun das Wachstumsverhalten der Co-Schichten auf den glatten Oberflächen der Cr(110) Inseln diskutiert.

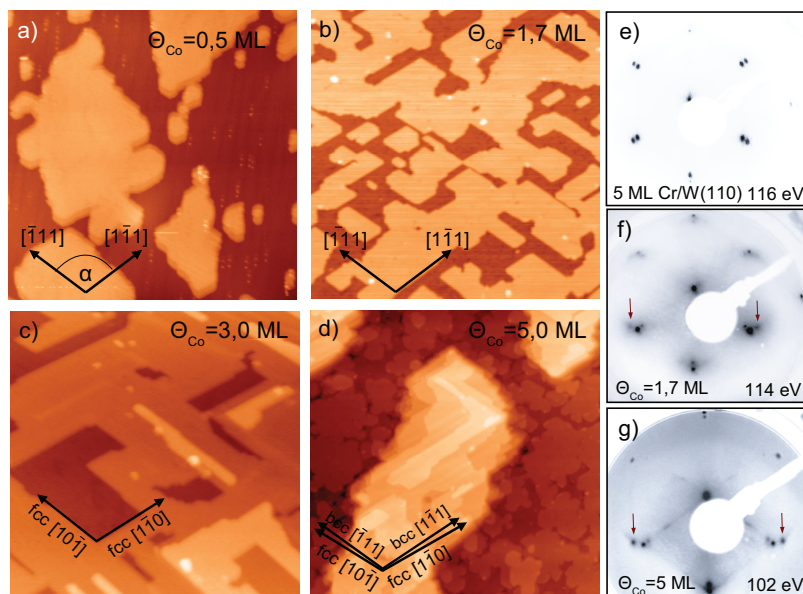


Abbildung 4.7: a) bis c) STM-Aufnahmen auf den Oberflächen der Cr(110) Inseln. Kobalt wurde bei RT deponiert. a) 0,5 ML Co (80×80) nm², $U = 0,37$ V, $I = 600$ pA), b) 1.7 ML Co ((80×80) nm², $U = 1.0$ V, $I = 600$ pA) c) 3.0 ML Co (60 nm \times 60 nm², $U = 0.18$ V, $I = 600$ pA), d) 5.0 ML Co (86 nm \times 86) nm², $U = 0.30$ V, $I = 600$ pA) Die kristallographischen Achsen ($bcc[\bar{1}11]$ und $bcc[1\bar{1}1]$) in a) und b) wurden anhand der geraden Inselkanten eingezeichnet. Der Öffnungswinkel α beträgt $104 \pm 5^\circ$. Die kristallographischen ($fcc[10\bar{1}]$ und $fcc[1\bar{1}0]$) Richtungen in c) und d) wurden anhand von Versetzungslinien und, wie in b), anhand der geraden Kanten der Inseln eingezeichnet. e) bis f) LEED Aufnahmen von verschiedenen Proben: e) Cr Inseln auf W(110) getempert bei 500 K, f) 1,7 ML Co und g) 5 ML Co auf den Cr/W(110) Inseln.

4.2.1 Morphologie und langreichweitige Ordnung

Abbildung 4.7 zeigt eine Übersicht der Morphologie der Kobaltfilme bei verschiedenen gemittelten Bedeckungen Θ_{Co} . Bei $\Theta_{Co} < 1$ ML bildet Co auf Cr(110) Monolageninseln unterschiedlicher Größe mit unregelmäßigen Kantenformen aus (Abbildung 4.7 a). LEED-Untersuchungen bestätigen ein pseudomorphes Wachstum für die Monolage Co/Cr(110) (siehe Abbildung 4.7 f). Im Unterschied zur Monolage zeigt die Doppellage eine völlig andere Morphologie. Wie in Abbildung 4.7 b) ersichtlich, bildet die Doppellage Co/Cr(110) Inseln mit geraden Kanten aus. Diese Kanten verlaufen aus energetischen Gründen entlang der dicht gepackten $\langle 111 \rangle$ -Richtungen, da hierdurch die freie Oberfläche und somit auch die Oberflächenenergie minimiert wird.

Die unregelmäßige Form der Monolageninseln ist energetisch ungünstig, da die Oberfläche hierdurch größer als im Falle langer gerader Inselkanten ist. Hierbei ist die auf den Seiten der Inseln zu beachten. Dass die energetisch günstigste Konfiguration, d.h. lange gerade Kanten entlang $\langle 111 \rangle$, nicht eingenommen

wird, deutet auf eine nicht ausreichende Mobilität der Adatome hin (vgl. Kapitel 3.5.3). Die Ausbildung der langen geraden Kanten in der Doppellage Co weist auf eine erhöhte Mobilität der Kobaltatome auf der Monolage Co gegenüber Kobaltatomen auf der Cr(110)-Oberfläche hin.

Während die ersten beiden Lagen einen Lagenwachstum aufweisen, zeigt die Kobaltschicht ab der dritten Lage ein Inselwachstum. Die nächste Lage beginnt zu wachsen, bevor die darunter liegende Lage abgeschlossen ist. Die Deposition von drei Monolagen Co führt zum Wachstum von zwei geschlossenen Lagen sowie einer nicht geschlossenen Trippellage und Inseln in der vierten Lage (Abbildung 4.7 c), d.h. es findet ein Übergang zum Stranski-Krastanov-Wachstum statt. Die Inseln weisen gerade Kanten auf. In der Trippellage sind schwach Versetzungslinien erkennbar, welche parallel zur den Kanten verlaufen. Für dickere Schichtdicken (Abbildung 4.7 d) wird die Morphologie des Kobaltfilms von lang gezogenen geraden Stufenkanten geprägt.

Die beobachtete Schichtdickenverteilung der Co-Schicht auf der Cr(110)-Insel ist konsistent mit der Existenz einer Schwöbelbarriere, welche die Kobaltatome daran hindert, die Terrasse, auf der sie anfangs adsorbiert wurden, zu verlassen. Der Grund dafür liegt in einer Asymmetrie am Rand der Stufe, die zu einer erhöhten Absorptionsenergie auf Gitterplätzen an Stufenkanten führt. Sie wurde 1966 erstmals von Ehrlich und Hudda [Ehr66] beobachtet und von R.L. Schwöbel theoretisch gedeutet [Sch66, Sch69, Sch71].

Das STM Bild in Abbildung 4.7 d) zeigt eine kleinere, mit Co bedeckte, Cr(110) Insel. Um die Insel herum sind Co Inseln auf der pseudomorphen Monolage Cr/W(110) zu sehen. Die Form der Co-Inseln auf der Cr-Monolage unterscheidet sich deutlich von der Form der Co-Inseln auf der Oberfläche der Cr(110) Insel. Dies ist ein eindeutiger Hinweis darauf, dass das Wachstum von Co von der Gitterkonstante des Substrates abhängt. Die bcc $[\bar{1}11]$ und $[1\bar{1}1]$ Richtungen sind in diesem Bild an die Kanten der Cr(110) Inseln angepasst, wohingegen die fcc $[10\bar{1}]$ und fcc $[1\bar{1}0]$ parallel zu den geraden Co Terrassenkanten der Lagen auf der zentralen Cr(110) Insel angepasst wurden.

Die LEED-Aufnahme in Abbildung 4.7 e) wurde auf einer Probe mit unbedeckten Cr(110) Inseln gemessen (vgl. Abbildung 4.1 f) und zeigt zwei ineinanderliegende reziproke bcc Gitter. Wie bereits in Abschnitt 4.1.1 diskutiert, stammen die inneren Reflexe von der, zum W-Substrat pseudomorphen, Monolage Cr und die äußeren Reflexe von der Oberfläche der Cr-Inseln. Die auf der in Abbildung 4.7 b) gezeigten Probe mit 1,7 ML Co Bedeckung aufgenommene LEED-Aufnahme zeigt ebenfalls die beiden reziproken bcc Gitter. Zusätzlich sind weitere schwache Reflexe in der Nähe der äußeren, von der Cr(110)-Oberfläche stammenden, Reflexe zu sehen (rote Pfeile im Bild). In der LEED-Aufnahme von 5 ML Co/Cr(110) sind diese Überstruktureffekte deutlicher erkennbar. Es ist zu vermuten, dass es sich hierbei um die Reflexe eines reziproken dicht-gepackten Gitters handelt.

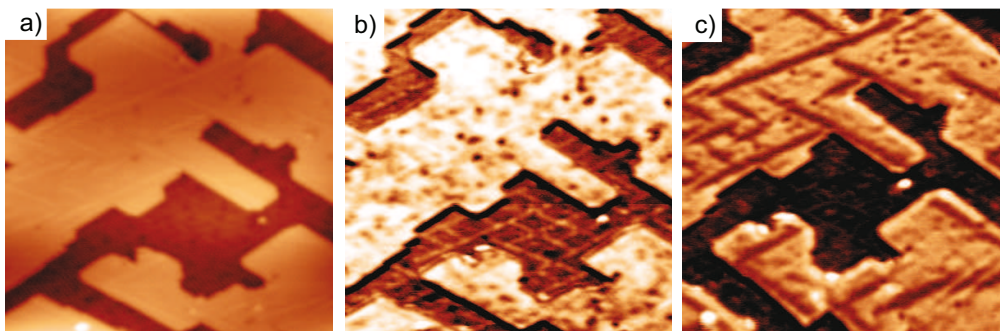


Abbildung 4.8: a) (36×36) nm² STM Bild von 1,7 ML Co deponiert auf 5 ML Cr/W(110) bei 300 K, gemessen auf einer ausgedehnten Cr(110) Insel mit $U = 0,3$ V und $I = 0,6$ nA. b) Simultan gemessene dI/dU Karte. Auf der Monolage sind Versetzungslinien (helle Linien), deren Richtung deutlich von der Richtung der dichtgepackten bcc Achsen abweicht und parallel zur den dicht gepackten fcc[10 $\bar{1}$] und fcc[1 $\bar{1}$ 0] Achsen sind. c) dI/dU Karte ($U = 0,5$ V und $I = 0,6$ nA) des gleichen Gebietes, gemessen direkt nach b). Bei dieser Spannung sind die Versetzungslinien in der Doppellage als dunkle Linien erkennbar. Auch diese Linien sind gegenüber den Kanten der Doppellage verdreht.

Die Oberflächen der ersten und zweiten Lage Kobalt unterscheiden sich voneinander durch das Auftreten von unterschiedlichen Versetzungslinien innerhalb dieser Lagen. Wie in Abbildung 4.8 b) zu sehen, sind in der Monolage Versetzungslinien in der dI/dU Karte bei +0,3 V Spannung als helle Linien sichtbar. Sie bilden ein Gitter aus zueinander parallelen Linien mit konstantem Abstand von $d = (2,34 \pm 0,1)$ nm aus. Die Versetzungslinien in der Doppellage können sehr deutlich bei +0,5 V Spannung beobachtet werden, wobei die Versetzungslinien als dunkle Linien erscheinen, während die Versetzungslinien in der Monolage bei dieser Energie nur schwach sichtbar sind (Abbildung 4.8 c). Die Versetzungslinien der Doppellage erscheinen breiter als die in der Monolage (Monolage: $b = (0,6 \pm 0,1)$ nm; Doppellage: $b = (1,3 \pm 0,1)$ nm). Ebenso ist der Abstand der Linien zueinander größer und weniger regelmäßig. Dies weist auf einen abnehmenden Einfluss der Substratstruktur und eine Tendenz der Kobaltschicht, eine dichtgepackte Struktur einzunehmen, hin. Die Versetzungslinien verlaufen nicht parallel zu den Kanten der Inseln, sondern in einem Winkel von 120 ° zueinander. Diese Ausrichtung der Versetzungslinien deutet auf eine dichtgepackte Ordnung innerhalb der Versetzungslinien hin.

4.2.2 Atomar aufgelöste STM-Aufnahmen

Atomar aufgelöste STM-Aufnahmen bestätigen die bisher angenommene Existenz einer bcc-Struktur in der Doppellage Co/Cr(110). Abbildung 4.9 zeigt einen Ausschnitt zwischen den Versetzungslinien auf der Doppellage. Der Öffnungswinkel α der dichtgepackten (111) Atomreihen beträgt 112°. Daher kann die ein-

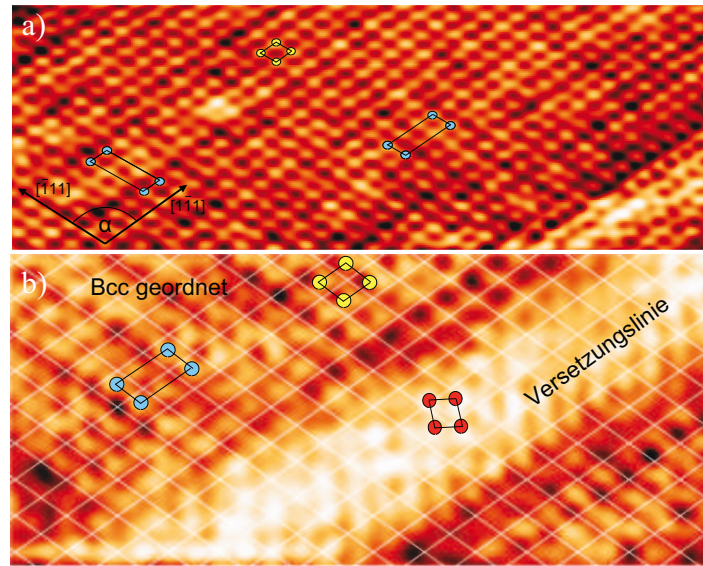


Abbildung 4.9: a) $(7.9 \text{ nm} \times 2.7 \text{ nm})^2$ atomar aufgelöste STM Aufnahme der Doppellage Co/Cr(110) ($I=50 \text{ nA}$ und $U=0.005 \text{ V}$). Der Öffnungswinkel der dichtgepackten $\langle 111 \rangle$ Atomreihen beträgt $\alpha = 112^\circ$, womit die eingezeichnete Einheitszelle (gelb) als bcc Einheitszelle identifiziert werden kann. Bei genauer Betrachtung können leichte (3×1) Überstrukturen erkannt werden (hellblaue Einheitszellen), die durch Verschiebungen der atomaren Reihen entlang der dicht gepackten $\langle 111 \rangle$ Achsen beschrieben werden (Pitsch-Transitions). b) ca. $(5.0 \text{ nm} \times 2.2 \text{ nm})^2$ STM Bild in einem zu a) versetzten Bereich auf der gleichen Terasse mit einer diagonal durch das Bild laufenden Versetzungslinie (heller Bereich) innerhalb der eine zur umgebenden bcc Struktur veränderte Ordnung sowie eine erhöhte laterale atomare Dichte vorliegt. Auch die Entstehung der Struktur dieser Versetzungen kann durch Pitsch-Transitions erklärt werden. Die gezeigten STM-Aufnahmen wurden mittels Bildbearbeitung leicht verschert, um die Verzerrung in der bcc(110) Oberflächenstruktur aufgrund der piezo-elektrischen Drift (*Piezo-Creep Effekt*) auszugleichen.

gezeichnete Einheitszelle als bcc Einheitszelle identifiziert werden. Bei genauer Betrachtung können leichte (3×1) und (2×1) Überstrukturen erkannt werden. Diese Überstrukturen können durch Verschiebungen der atomaren Reihen entlang der dicht gepackten $\langle 111 \rangle$ Achsen, wie in Abbildung 4.10 a) illustriert, beschrieben werden (Pitsch-Transitions [Pit59]). Eine Verschiebung benachbarter Reihen in entgegengesetzte Richtungen führt zu der (2×1) Überstruktur. Die (3×1) Überstruktur entsteht, wenn jede dritte Reihe an ihrer Ursprungsposition verbleibt, d.h. nicht verschoben ist.

Abbildung 4.9 b) zeigt einen zu Abbildung 4.9 a) verschobenen Ausschnitt auf der Doppellage Co. Hier ist eine diagonal durch das Bild verlaufende Versetzungslinie sichtbar. Die Versetzungslinie umfasst fünf bis sechs atomare Reihen und die atomare Struktur weicht deutlich von der umgebenden bcc(110) Struktur ab. Die laterale atomare Dichte in der Versetzungslinie ist ca. 10 % höher,

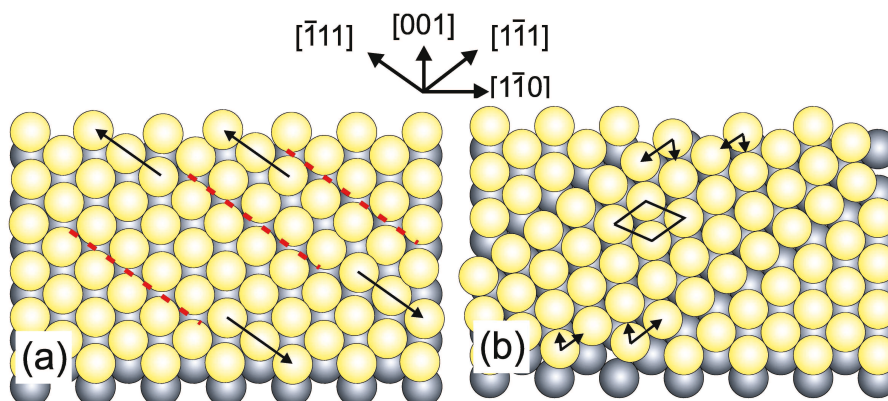


Abbildung 4.10: (a) Hartkugelmodell zur Visualisierung der (2×1) und (3×1) Rekonstruktionen der Doppellage bcc Co7Cr(110). (b) Strukturmodell für die in der Doppellage auftretenden Versetzungslinien.

verglichen mit der regulären bcc(110) Struktur, und entspricht demnach nahezu dem Wert einer dicht gepackten (111) Ebene von Volumen Kobalt ($0,184 \text{ \AA}^{-2}$). Die entsprechende (110) Ebene von Chrom weist eine Dichte von $0,167 \text{ \AA}^{-2}$ auf. Parallel zur Versetzungslinie verlaufende Atomreihen der bcc Struktur weisen direkt an der Versetzungslinie einen größeren Abstand zueinander auf, als in der regulären Struktur weiter von der Versetzungslinie entfernt, womit die erhöhte Atomdichte der Versetzungslinie kompensiert wird. Die Zunahme der lokalen Atomdichte ist wahrscheinlich die treibende Kraft für die Überstruktur und deutet den Beginn einer Rekonstruktion in die dicht gepackte Ordnung an.

Abbildung 4.10 b) zeigt ein einfaches Modell der Entstehung der beobachteten Versetzungslinien. Die Verschiebung einer dicht gepackten Atomreihe entlang der bcc $[\bar{1}\bar{1}1]$ Richtung in Kombination mit einer Kompression entlang der bcc $[001]$ Richtung führt zu einer dicht gepackten (111) Ebene. Die fcc $[\bar{1}10]$ Richtung der dicht-gepackten Lage ist parallel zur bcc $[\bar{1}\bar{1}1]$ Achse des Substrates. Diese spezielle Anordnung wird als *Kurdjumov-Sachs* Orientierung bezeichnet. Auch das Auftreten der Gräben an den Seiten der Versetzungslinien wird durch dieses Modell beschrieben.

Die Versetzungslinien entstehen offensichtlich aufgrund der epitaktischen Spannung im bcc geordneten Kobaltfilm und deuten wahrscheinlich den Beginn der Rekonstruktion dickerer Lagen von der bcc Ordnung in eine dicht gepackte Struktur an.

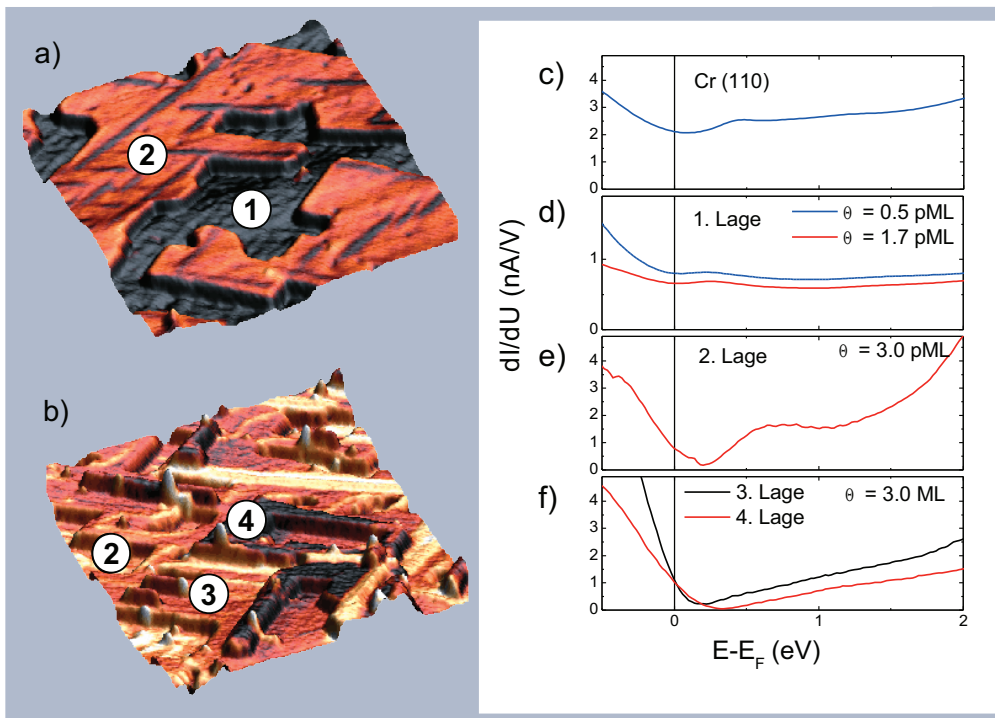


Abbildung 4.11: a) $(36 \times 36) \text{ nm}^2$ 3-dimensionale Darstellung einer STM Aufnahme mit der zugehörigen dI/dU -Leitfähigkeitskarte ($U = 0.5 \text{ V}$, $I = 0.6 \text{ nA}$) als Textur gemessen auf $\Theta_{Co} = 1,5 \text{ ML}$ auf Cr/W(110). b) $(70 \times 70) \text{ nm}^2$ 3d-Projektion einer STM Aufnahme mit der dI/dU -Leitfähigkeitskarte ($U = 0.18 \text{ V}$, $I = 0.6 \text{ nA}$) als Textur gemessen auf $\Theta_{Co} = 3 \text{ ML}$ auf Cr/W(110). c) Differentielle ($dI/dU(U)$) Leitfähigkeitsspektren gemessen auf der Oberfläche auf einer ausgedehnten Cr/W(110) Insel. d) $dI/dU(U)$ Spektrum aufgenommen auf der ersten Co Lage für Co Bedeckungen von $\Theta = 0,5 \text{ ML}$ (rot) und $\Theta = 1,7 \text{ ML}$ (blau). e) $dI/dU(U)$ Spektren aufgenommen auf der Co Doppellage f) $dI/dU(U)$ Spektren aufgenommen auf der dritten (schwarz) und vierten (rot) Co Lage für Co eine Bedeckung von $\Theta = 3,0 \text{ ML}$.

4.2.3 Spektroskopie

Auf den Kobaltfilmen wurden differentielle $dI/dU(U)$ Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen. Hierzu wurden auf den jeweiligen Lagen mehrere (>10) Spektren mittels Lock-In Technik gemessen und gemittelt. Als Stabilisierungsparameter wurden $U = +0,7 \text{ V}$ und $I = 0,6 \text{ nA}$ gewählt. Die Biasspannung wurde mit $U_{mod} = 50 \text{ mV}$ bei $\mu = 8,44 \text{ kHz}$ moduliert. Die auf den verschiedenen Co-Lagen gemessenen Spektren sind in Abbildung 4.11 abgebildet und zeigen in Abhängigkeit von der Schichtdicke signifikante Unterschiede.

Das auf der Chromoberfläche gemessene $dI/dU(U)$ -Spektrum zeigt einen Peak

bei +0,45 eV und eine schwache Schulter bei +1,3 eV. Da die Chrominseln mehrere Atomlagen dick sind, kann angenommen werden, dass dieses Spektrum repräsentativ für die (110) Oberfläche von Volumenchrom ist. Der von Strosio et al. [Str95] und Hänke et al. [Han05] beobachtete Peak bei 0 eV wurde hierbei nicht beobachtet. Hänke et al. interpretierten diesen Peak als Kondoresonanz [Han05]. Dass dieser Peak bei den hier durchgeführten Messungen nicht beobachtet wurde, kann an der zu den Arbeiten von Strosio et al. und Hänke et al. veränderten Oberflächensymmetrie liegen. Weiterhin ist eine Kondoresonanz bei Raumtemperatur unterdrückt. Die von Braun et al. [Bra00] bei einer Tieftemperaturstudie auf Cr(110) diskutierte Ladungsdichtewelle wurde hier ebenfalls nicht beobachtet. Dies mag daran liegen, dass auch die Ladungsdichtewelle bei Raumtemperatur unterdrückt und daher hier nicht beobachtbar ist. Bandstrukturrechnungen gemäß der Dichtefunktionaltheorie (*engl.: Density Functional Theory, DFT*) zeigen ein Maximum in der Zustandsdichte von Chrom sowohl im Volumen, als auch an der (110) Oberfläche bei +1,0 eV [Liu06]. Die berechnete Zustandsdichte nimmt bereits an der Fermikante zu, aber wahrscheinlich besitzt lediglich der Zustand bei 0,45 eV die zur Beobachtung mittels STS notwendige d_{z^2} -Symmetrie.

Die Co Monolage zeigt einen deutlichen Peak bei +0,3 eV und eine schwache Schulter bei +1,5 eV. Da die, auf zwei verschiedenen Proben mit $\Theta_{Co} = 0,5$ ML und $\Theta_{Co} = 1,7$ ML gemessenen, Spektren die Peaks bei gleichen Energien aufweisen, kann davon ausgegangen werden, dass die Struktur der Monolage unabhängig von der Menge des aufgedampften Kobalts ist. Auf der Doppellage Co ist der markante Peak von +0,3 eV zu +0,6 eV verschoben. Dieser Peak ist in guter Übereinstimmung mit theoretischen Rechnungen von Izquierdo und Demangeat für bcc Co/Cr(110) [Izq00]. Die Position dieses Peaks bei +0,3 eV in der Monolage kann durch den, in der Monolage größeren Einfluss, der Cr(110) Unterlage bedingt sein. Diese Spektren bestätigen also die bcc Ordnung in der Mono- und Doppellage Co/Cr(110).

Die gemessenen dI/dU -Spektren auf höheren Lagen besitzen die zuvor beobachteten Peaks nicht, was auf eine Änderung der atomaren Struktur hindeutet.

4.2.4 Rekonstruktion dickerer Schichten

Kobaltfilme mit Schichtdicken von mehr als vier Lagen weisen in dI/dU -Bildern bei +0,3 eV Bereiche mit unterschiedlichen Tunnelleitfähigkeiten auf. In Abbildung 4.12 b) ist eine gerade Grenze zwischen einem dunklen und einem hellen Bereich auf einer 5 ML dicken Ebene erkennbar. Die in diesen Bereichen gemessenen Tunnelleitfähigkeitsspektren sind in Abbildung 4.12 c) gezeigt und weisen deutliche Unterschiede auf. So ist im Spektrum für den hellen Bereich ein Peak bei +0,25 eV sichtbar, welcher im Spektrum des dunklen Bereiches nicht vorhanden ist. Daraus kann auf eine strukturelle Variation in diesen beiden Bereich

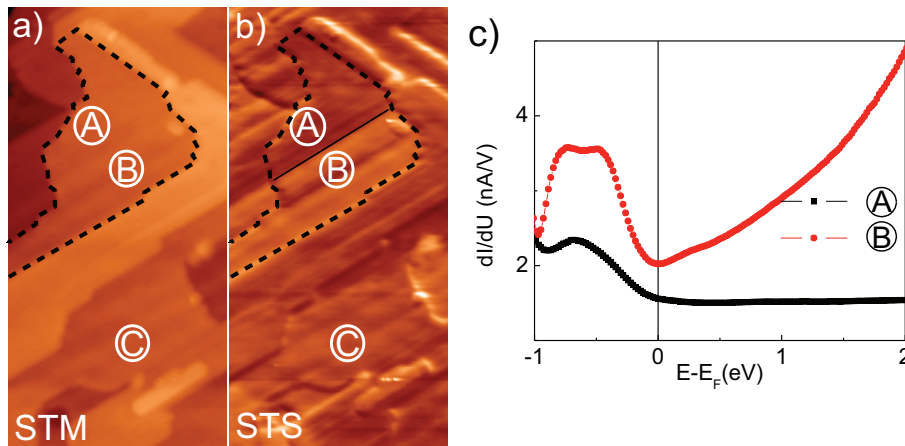


Abbildung 4.12: (a) STM Bild von 5.0 ML Co ($20 \text{ nm} \times 40 \text{ nm}$, $I=600 \text{ pA}$, $U=0.3 \text{ V}$) deponiert auf 5 ML Cr/W(110) bei 300 K. Das STM Bild zeigt einen Ausschnitt auf einer ausgedehnten Cr(110) Insel. Die kristallographischen ($\text{fcc}[10\bar{1}]$ und $\text{fcc}[1\bar{1}0]$) Richtungen wurden anhand der Versetzungslinien und, wie in (b), anhand der geraden Kanten der Inseln eingezeichnet. (b) Simultan gemessene differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarte. A und B markieren zwei, durch eine gerade Grenze entlang $\text{fcc}[10\bar{1}]$ getrennte, Gebiete mit unterschiedlichen Tunnelleitfähigkeiten auf der gleichen Terasse. Zur besseren Sichtbarkeit wurde die Terasse in (a) und (b) mit einer gestrichelten Linie umrandet und die Grenze innerhalb der Terasse in (b) mit einer Linie nachgezeichnet. In den beiden Gebieten wurden differentielle ($dI/dU(U)$) Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen, welche in (c) abgebildet sind. Im Spektrum für den hellen Bereich ist ein Peak bei $+0,25 \text{ eV}$ sichtbar, welcher im Spektrum des dunklen Bereichs nicht vorhanden ist. Eine naheliegende Erklärung ist eine Variation der Stapelfolge von dicht gepackten (111)-Ebenen, so dass getrennte hcp und fcc geordnete Bereiche entstehen. Vergleich mit ähnlichen Phasenseparation legen eine fcc-Ordnung in Bereich B und eine hcp-Stapelung in Bereich A nahe.

geschlossen werden, obwohl topographisch kein Unterschied vorhanden ist. Eine nahe liegende Erklärung ist eine Variation der Stapelfolge von dicht gepackten (111)-Ebenen, so dass separierte hcp und fcc geordnete Bereiche entstehen. Für eine bcc geordnete Struktur ist aus Symmetriegründen eine solche Stapelfolgenvariation nicht möglich, so dass eine bcc Ordnung für diese Co Schichtdicke ausgeschlossen werden kann.

Diese Unterscheidung von hcp und fcc geordneten Filmen durch Tunnelstromspektroskopie wurde auch schon für andere Systeme diskutiert [Hei99, dP00, Wie03, Wie04, Die03]. Für fcc-Co auf Cu(111) zeigen differentielle Tunnelleitfähigkeitsspektren ebenfalls einen Peak bei $+0,3 \text{ eV}$ und bei hcp-Co auf Cu(111) ist kein Peak oberhalb der Fermikante vorhanden [Die03]. De Parga et al. erklärt diesen Peak durch die Minoritätsbänder eines für fcc-Co am $\bar{\Gamma}$ -Punkt degenerierten $d_{xz} - d_{yz}$ Orbitals. Für hcp-Co entsteht aufgrund der geänderten Struktur eine Lücke am $\bar{\Lambda}$ -Punkt [dP00]. De Parga beobachtete den Peak für fcc-Co bei

+0,5 eV, wohingegen Diekhöner et al. [Die03] und Pratzner et al. [Pra04a] diesen Peak ebenfalls bei +0,3 eV fanden. Die Verschiebung des Peaks wird in [Pra04c] einer Vermischung von Co und Cu bei Raumtemperatur zugerechnet, welche von Diekhöner [Die03] vermieden werden konnte. Aufgrund dieser Ähnlichkeiten in der Spektroskopie kann dem in Abbildung 4.12 b) hell erscheinenden Bereich B die fcc-Stapelfolge zugeordnet werden und dementsprechend dem dunkel erscheinenden Bereich A die hcp-Stapelfolge.

Die Ausbildung der beiden verschiedenen Stapelfolgen für fcc und hcp benötigt mindestens drei Atomlagen (fcc: ABC oder ACB, hcp: ABA oder ACA). Aus der Tatsache, dass die beschriebene Separation erst ab der fünften Lage sichtbar wird, kann gefolgert werden, dass der Übergang von der bcc Ordnung zur dicht gepackten Ordnung von der zweiten zur dritten Lage Kobalt auf Chrom(110) stattfindet.

4.3 Wachstum ultradünner bcc-Co Filme auf Fe(110)

Das Auftreten der Versetzungslinien in den bcc Co Filmen auf Cr(110) deutet Spannungen im epitaktischen Film und somit ein nicht perfektes Wachstum von bcc Co auf der Cr(110) Oberfläche an. Ein Grund dafür ist wahrscheinlich die Fehlanpassung der Gitterkonstanten von Kobalt auf Chrom. Um den Einfluss einer geringfügigen Veränderung der Substratgitterkonstante auf das Wachstum von bcc Co zu untersuchen, wurde in einer zweiten Messreihe das Wachstum von Co auf Fe(110) untersucht. Die Gitterkonstante von Fe ($a_{Fe} = 2,86 \text{ \AA}$) ist etwas kleiner als die von Chrom ($a_{Cr} = 2,91 \text{ \AA}$) und der nächste-Nachbar-Abstand beträgt bei Eisen $a_{nn}(Fe) = 2,485 \text{ \AA}$. Die Differenz zwischen den nächste-Nachbar-Abständen von Eisen und Kobalt ($D = a_{nn}(hcp - Co) - a_{nn}(Fe) = 2,506 \text{ \AA} - 2,485 \text{ \AA} = 0,023 \text{ \AA}$) ist etwas größer als bei Kobalt und Chrom ($D = 0,01 \text{ \AA}$), was zunächst eine größere epitaktische Spannung innerhalb der Kobaltschicht auf Fe(110) erwarten lässt.

Wie bereits zu Beginn dieses Kapitels erwähnt, wurden die Morphologie und die elektronische Struktur der Co/Fe(110) mit dem RT-STM und die atomare Struktur mit dem LT-STM untersucht. Weiterhin wurden mit dem LT-STM spinpolarisierte Messungen, unter anderem auch in Abhängigkeit vom Probe-Spitze-Abstand, durchgeführt. Bei den Messungen mit dem RT-STM wurde, wie bei Co/Cr(110), der W(110)-Einkristall als Substrat verwendet und in der LT-STM Anlage diente der Mo(110)-Einkristall (vgl. Abschnitt 3.5.1) als Substrat.

Die Proben wurden auf die gleiche Weise wie zuvor präpariert, d.h. Deposition von 5 – 7 ML Fe bei RT und anschließendem Tempern bei 600 K (RT-Kammer mit W(110)-Substrat) bzw. 700 K (LT-Kammer mit Mo(110)-Substrat). Kobalt wurde zur Vermeidung von Interdiffusionen wieder bei RT deponiert.

4.3.1 Morphologie und langreichweitige Ordnung

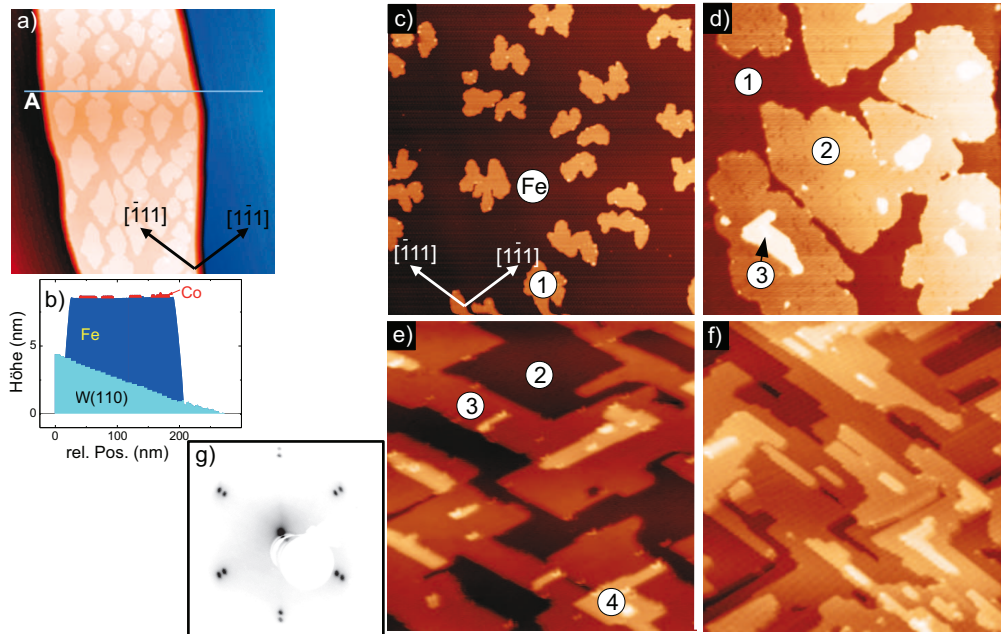


Abbildung 4.13: a) STM Bild (300×300) nm² auf 0,6 ML Co deponiert auf 7 ML Fe/W(110) Inseln bei Raumtemperatur. Fe wurde bei Raumtemperatur aufgedampft und bei 600 K getempert ($U = 0,2$ V, $I = 0,6$ nA). b) Höhenprofil entlang der in a) eingezeichneten Linie. Die nicht sichtbare Stufenstruktur des W(110) Substrats unter der Fe Insel ist skizzenhaft eingezeichnet. Die STM Bilder c) bis f) wurden auf einer ausgedehnten Fe(110) Insel aufgenommen. c) STM Aufnahme (142×142) nm² von 0,15 ML Co auf Fe gemessen bei $U = 0,29$ V und $I = 0,6$ nA. Die hellen Gebiete sind Kobaltmonolageninseln. d) STM Aufnahme (80×80) nm² von 1,8 ML Co ($U = 0,5$ V und $I = 0,6$ nA). Die komplett geschlossenen Monolage (1), die Doppellage (2) und die Trippellage (3) sind zur besseren Lesbarkeit gekennzeichnet. e) In der (80×80) nm² STM Aufnahme von 3 ML Co auf Fe gemessen bei $U = 1,0$ V und $I = 0,6$ nA sind die komplett geschlossene Doppellage sowie die Trippellage erkennbar. Weiterhin sind einige paar Inseln der vierten Lage vorhanden. f) STM Bild (80×80) nm² von 4,7 ML Co ($U = 0,2$ V und $I = 0,6$ nA). g) Die LEED Aufnahme (129 eV Elektronenenergie) der in d) gezeigten Probe mit 1,8 ML Co zeigt zwei ineinanderliegende reziproke (1×1) bcc Gitter. Es sind keine Überstrukturspots sichtbar, was auf ein perfektes pseudomorphes Wachstum der Co-Schicht auf der Eisenschicht schließen lässt.

In Abbildung 4.13 a) ist eine ausgedehnte Eiseninsel auf dem W(110) Substrat gezeigt. Auf der Oberfläche dieser Insel sind Co-Monolageninseln erkennbar. In dem eingefärbten Höhenprofil über diese Insel, gezeigt in Abbildung 4.13 b), sind die Co-Inseln rot eingefärbt. Die Morphologie der verschiedenen Co-Lagen ist in den Abbildungen 4.13 c) bis d) gezeigt. Wie schon bei dem Wachstum von Kobalt auf Chrom beobachtet, lässt sich die Morphologie in zwei Typen einteilen. Die Monolage und die Doppellage Kobalt auf Eisen bilden Inseln mit un-

regelmäßigen Rändern (vgl. Abbildung 4.13 c) und d)), während weitere Lagen gerade Inselkanten entlang der dicht gepackten $\langle 111 \rangle$ Richtungen ausbilden (Abbildung 4.13 c) und d)). Dieses Verhalten ist ähnlich dem Wachstum von Co auf Cr(110) mit dem Unterschied, dass in diesem Fall die zweite Lage ebenfalls unregelmäßige Inselformen aufweist, wohingegen die Doppellage Co/Cr(110) lange gerade Kanten ausbildet.

Eine mögliche Erklärung für diesen Unterschied in der Morphologie kann eine reduzierte Beweglichkeit der Co-Adatome auf der Monolage Co/Fe(110) gegenüber Co/Cr(110) sein. Sofern eine ausreichende Mobilität der Adatome gegeben ist, ist die Formierung langer gerader Kanten entlang der dicht gepackten $\langle 111 \rangle$ Richtungen energetisch günstig aufgrund der, damit einhergehenden, Reduzierung der freien Oberflächenenergie. Im Fall von Co/Fe(110) ist die Mobilität der Co-Adatome auf der ersten Monolage bei Raumtemperatur offensichtlich zu gering, um solche geraden Kanten zu bilden. Erst ab der dritten Lage ist dies, wahrscheinlich aufgrund des dann reduzierten Einflusses des Substrats auf die Co-Adatome der Trippellage, möglich. Dieser Unterschied zu Co/Cr(110), wo die Mobilität der Adatome bereits in der Doppellage ausreicht, kann an dem Unterschied in der Wechselwirkung des Eisen- (Chrom)-Substrats auf die Co-Adatome liegen. Alternativ kann hierfür auch eine Variation der Wechselwirkung zwischen den Co-Adatomen und den Atomen der Co-Inseln aufgrund des geringfügigen Unterschiedes in der Gitterkonstante der Kobaltfilme auf Eisen bzw. Chrom verantwortlich sein. Zukünftige theoretische Rechnungen können auf diese Frage sicherlich eine genaue Antwort liefern.

Das LEED-Bild in Abbildung 4.13 g), aufgenommen auf der Probe mit 1,8 ML Kobaltbedeckung (Abbildung 4.13 d), zeigt ein pseudomorphes Wachstum der zweiten Lage Co/Fe(110) ohne Überstruktur an. Das Verhältnis der Abstände der Spots ($1,102 \pm 0,005$) ist in guter Übereinstimmung mit dem Verhältniss der Gitterkonstanten von Eisen und Molybdän

$$R = \frac{a_{Mo}}{a_{Fe}} = \frac{3,147 \text{ nm}}{2,866 \text{ nm}} = 1,098 \quad (4.4)$$

und bestätigt ein pseudomorphes Wachstum der ersten beiden Lagen Co/Fe(110). In der zugehörigen STM-Aufnahme (Abbildung 4.13 d) sind im Unterschied zu den ersten beiden Lagen Co/Cr(110) (vgl. Abschnitt 4.2.1) keine Versetzungslinien sichtbar. Dies deutet auf eine, im Vergleich zur Co/Cr(110), geringere epitaktische Spannung des Kobaltfilms auf Fe(110), und somit ein verbessertes Wachstum von bcc Co, hin.

4.3.2 Atomar aufgelöste STM-Aufnahmen

Die genaue atomare Struktur der Co-Film auf Fe(110) wurde mit dem in Kapitel 3.4 beschriebenen Tieftemperatur Rastertunnelmikroskops (LT-STM) bei

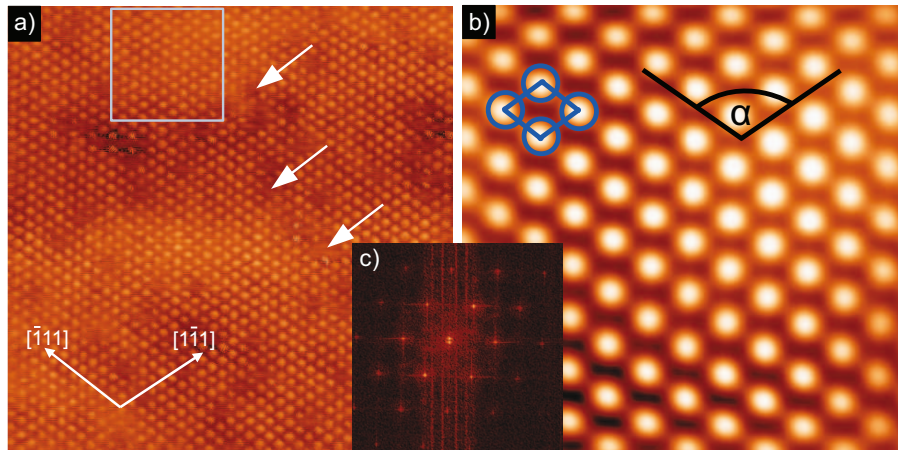


Abbildung 4.14: a) STM-Aufnahme (10×10) nm^2 der zweiten Lage Co/Fe(110) ($U = 0,004$ V, $I = 520$ nA). Einige Defektstellen sind exemplarisch mit Pfeilen markiert. b) Fourier-gefilterte Vergrößerung des in a) markierten Bereiches ($2,6 \times 2,6$) nm^2 . Durch die Filterung sind störende hochfrequente Einflüsse herausgefiltert. Die eingezeichnete Einheitszelle kann als eine bcc(110) Einheitszelle mit Öffnungswinkel $\alpha = (110 \pm 1)^\circ$ identifiziert werden. c) Die Fouriertransformation ((20×20) $1/\text{nm}^2$) der STM-Aufnahme aus a) entspricht einem reziproken Gitter einer bcc(110) Oberfläche.

einer Proben temperatur von $T = 5$ K untersucht.

In Abbildung 4.14 a) ist ein atomar aufgelöstes STM-Bild, aufgenommen auf der Doppellage Co/Fe(110), gezeigt. Bis auf ein paar Fehlstellen ist die Ordnung der Oberfläche perfekt, wie auch durch eine Fouriertransformation (gezeigt in Abbildung 4.14 c) bestätigt wird. Die Defektstellen, zum Teil beispielhaft durch Pfeile im Bild markiert, können unter anderem durch die Adsorption einzelner Atome aus dem Restgas hervorgerufen sein.

Das LT-STM bietet aufgrund der tiefen Temperatur eine sehr hohe Stabilität und eine sehr gute Unterdrückung des Piezo-creep Effektes. Dies ermöglicht eine quantitative Analyse der lokalen Oberflächensymmetrie. Geringe Einflüsse durch den Piezo-creep Effekt können dennoch nicht vollständig ausgeschlossen werden. Da sich der Scanner jedoch mit fortlaufendem Scannen nach und nach stabilisiert, kann davon ausgegangen werden, dass das gezeigte Bild im oberen Teil keine, oder nur noch sehr geringe und damit vernachlässigbare, Verzerrungen aufweist. Daher wurde, um durch Verzerrungen bedingte Analysefehler zu vermeiden, nur der obere Teil von Abbildung 4.14 a) für die weitere Analyse verwendet. In der Fourier-gefilterten Vergrößerung des in Abbildung 4.14 a) gekennzeichneten Bereiches (Abbildung 4.14 b) kann die atomare Struktur mittels einer rhomboedrischen Einheitszelle mit Einheitsvektoren, die einen Öffnungswinkel von $\alpha = (110 \pm 1)^\circ$ einschließen, beschrieben werden. Dies entspricht dem erwarteten Winkel der bcc(110) Einheitszelle von $109,5^\circ$. Wie bereits aufgrund der durchgeführten LEED-Messung (vgl. Abbildung 4.13 g)) zu erwarten, sind

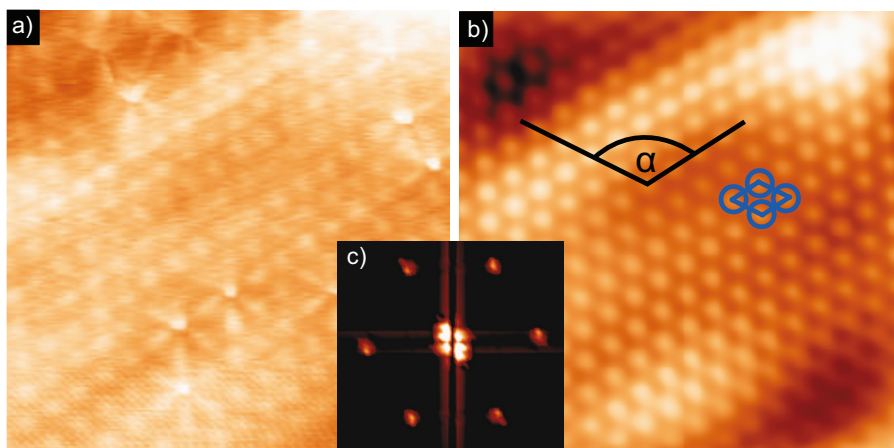


Abbildung 4.15: a) STM-Aufnahme ($(4 \times 4) \text{ nm}^2$) gemessen auf der dritten Lage Co ($U = 0,004 \text{ V}, I = 52 \text{ nA}$). b) Fourier gefilterte Darstellung von a) mit eingezeichneter Einheitszelle. Der eingezeichnete Öffnungswinkel $\alpha = (119 \pm 2)^\circ$ und die Fouriertransformation in c) ($(11 \times 11) \text{ 1/nm}^2$) lassen auf eine fcc(111) oder hcp(0001) Oberfläche schließen.

die Abstände zwischen den Atomreihen regelmäßig. Die bei Co/Cr(110) beobachtete (3×1) -Überstruktur sowie die Versetzungslinien sind hier nicht beobachtbar. Aus den LEED-Aufnahmen (s.o.) kann weiterhin gefolgert werden, dass die Gitterstruktur der Doppellage bcc Co der Gitterstruktur der Fe(110) Unterlage entspricht.

Eine atomar aufgelöste STM-Aufnahme der dritten Lage zeigt einen Wechsel in der atomaren Struktur (siehe Abbildung 4.15). Eine ähnliche Evaluierung wie in Abbildung 4.14 b) resultiert in einem Winkel der rhomboedrischen Einheitszelle von $\alpha = (119 \pm 2)^\circ$, d.h. einer 6-fachen Symmetrie. Dies entspricht einer dicht gepackten fcc(111) oder hcp(0001) Oberfläche ($\alpha = 120^\circ$). Die dicht gepackte Struktur wird durch die Fouriertransformation in Abbildung 4.15 c), die eine 6-fache Symmetrie zeigt, bestätigt. Dieser abrupte Wechsel von der bcc Struktur der Doppellage in eine dicht gepackte Struktur in der Tripellage ist identisch mit dem zuvor beobachteten Wachstumsverhalten von Co/Cr(110).

4.3.3 Spektroskopie

Wie schon zuvor bei den Untersuchung an Co/Cr(110) wurden auf den verschiedenen Co-Lagen differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen. Die Spektren wurden mit dem Raumtemperatur-STM und mit den gleichen Stabilisierungsparametern wie bei der Untersuchung von Co/Cr(110), d.h. $U = +0,7 \text{ V}$, $I = 0,6 \text{ nA}$, $U_{mod} = 50 \text{ mV}$, $\mu = 8,44 \text{ kHz}$, gemessen. Die gemessenen Spektren zeigen in Abhängigkeit von der Schichtdicke, wie erwartet, wieder signifikante

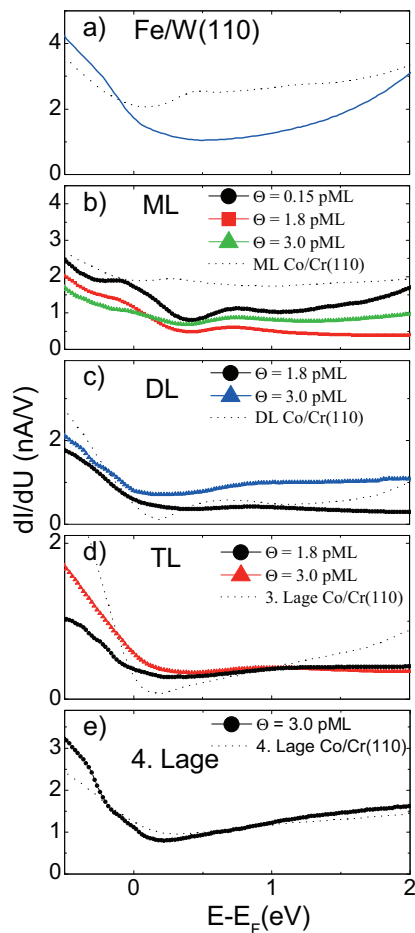


Abbildung 4.16: Differentielle Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen auf den jeweiligen Kobaltlagen. Zum Vergleich sind die entsprechenden Spektren der Kobaltlagen auf Cr(110) als gestrichelte Linie ebenfalls dargestellt (zur besseren Sichtbarkeit entlang der Y-Schse verschoben). Teilweise wurden die Spektren mit den eingetragenen Faktoren multipliziert um die vorhandenen Peaks hervorzuheben. Das prinzipielle Verhalten der Spektren beider Systeme ist gleich, was auf ein ähnliches strukturelles Verhalten der Kobaltschichten auf Cr(110) und Fe(110) schließen lässt.

Unterschiede in Abhängigkeit von der Co-Schichtdicke. In Abbildung 4.16 sind die gemessenen Spektren gezeigt. Zum Vergleich sind die jeweiligen Spektren von Co/Cr(110) mit eingezeichnet.

Das $dI/dU(U)$ Spektrum der Fe(110) Oberfläche zeigt im Gegensatz zur Cr(110) Oberfläche keine signifikanten Peaks (siehe Abbildung 4.16 a).

Die Spektren der Monolage Co/Fe(110) (Abbildung 4.16 b) wurden auf Proben mit unterschiedlichen Co-Bedeckungsgraden ($\Theta_{Co} = 0,15$ ML, $\Theta_{Co} = 1,8$ ML und $\Theta_{Co} = 3,0$ ML) gemessen. Trotz dieser Variation in der Probenpräparation sind die gemessenen Spektren zueinander ähnlich. Alle drei Spektren zeigen

einen dominierenden Peak bei $+0,7$ eV und einen Peak bei $-0,1$ eV. Dies stellt einen deutlichen Unterschied zu Co/Cr(110) dar, wo nur ein einzelner Peak bei $+0,3$ eV beobachtet wurde. Diese Abweichung ist groß, wenn nur der geringe Unterschied der Gitterkonstanten von Eisen und Chrom in Betracht gezogen wird. Offensichtlich wird die elektronische Struktur der ersten Lage Co stark durch eine elektronische Wechselwirkung mit dem Substrat beeinflusst. Das Spektrum der Cr(110) Oberfläche zeigt bei $+0,45$ eV einen Peak wohingegen das Spektrum der Fe(110) Oberfläche keinen Peak in der Umgebung dieser Energie aufweist. Möglicherweise beeinflusst dieser Zustand der Chromoberfläche den Zustand von bcc Co bei $+0,7$ eV und verschiebt diesen zu einer geringeren Energie.

Die Spektren der Doppellage Co (Abbildung 4.16 c) zeigen ebenfalls um $+0,7$ eV einen schwachen und breiten Peak. Die Position dieses Peaks ist unabhängig von der Menge deponierten Co auf der Probe (gemessen auf Proben mit $\Theta_{Co} = 1,8$ ML und $\Theta_{Co} = 3,0$ ML Co) und wird sowohl auf der Monolage und der Doppellage Co beobachtet. Wie bei Co/Cr(110) ist die Position dieses Peaks in guter Übereinstimmung mit dem vorhergesagten LDOS-Peak bei $+0,6$ eV von Izquierdo und Demangeat [Izq05] bzw. $+0,5$ eV von Klautau et al. [Kla05]. Hervorgerufen wird dieser Peak durch ein Maximum der lokalen Zustandsdichte für die Minoritätsladungsträger und ist grundsätzlich verschieden für den Fall von dicht gepacktem fcc/hcp Co, wo das Maximum bei $+1,2$ eV zu erwarten ist [Izq00]. Eine von Klautau et al. durchgeführte Lagen-aufgelöste Rechnung der bcc Co(001) Oberfläche weist ein Maximum der Zustandsdichte bei der gleichen Energie ($+0,5$ eV) wie im Volumen auf [Kla05]. Trotz unterschiedlicher Oberflächenorientierungen zwischen den hier präsentierten experimentellen Ergebnissen und der theoretischen Rechnung, ist dies ein Hinweis darauf, dass das oberflächensensitive STS-Signal die theoretisch berechnete lokale Zustandsdichte von Volumen bcc Co reproduziert. Der Unterschied der gemessenen Peakpositionen zwischen Co/Fe(110) und Co/Cr(110) ($+0,7$ eV bzw. $+0,6$ eV) kann sowohl durch die unterschiedlich starke epitaktische Spannungen als auch durch den, in der Doppellage geringer als in der Monolage ausfallenden, verbleibenden Einfluss der Substrat-Zustandsdichte bedingt sein. Weitere Bandstrukturrechnungen sollten in diesem Punkt Klarheit bringen.

Das Spektrum der dritten Lage (Abbildung 4.16 d) zeigt ein schwaches und breites Maximum bei $+1,1$ eV und in der vierten Lage kann eine sehr schwache und breite Schulter mit einem Maximum bei $+1,3$ eV identifiziert werden. Weiterhin sind im Spektrum der vierten Lage zwei schwache Peaks bei $-0,7$ eV und $-0,1$ eV sichtbar. Diese gemessenen Spektren der dritten und vierten Lage Co/Fe(110) stimmen gut mit der von Klautau et al. [Kla05] berechneten elektronischen Struktur für fcc/hcp Co mit einem Maximum bei $+1,2$ eV überein und bestätigen somit den bereits anhand von STM-Aufnahmen (vgl. Abschnitt 4.3.2) festgestellten Wechsel der Gitterstruktur in eine dicht gepackte Struktur.

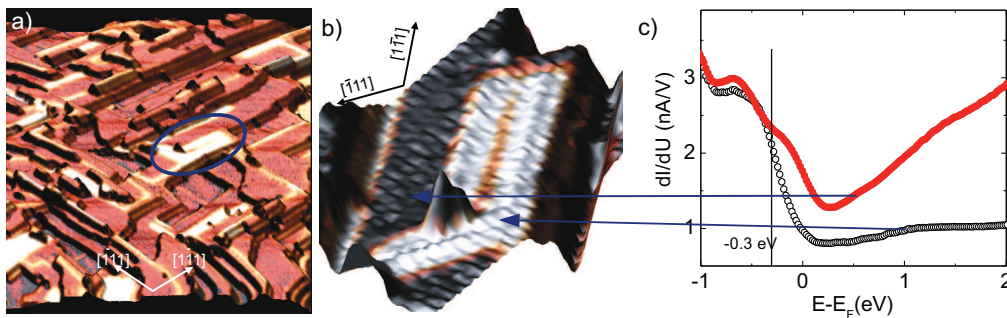


Abbildung 4.17: a) 3-dimensionale Darstellung eines (96×96) nm² großen STM-Scans texturiert mit der zugehörigen dI/dU -Karte gemessen bei $U = -0,3$ eV und $I = 0,6$ eV auf 4,7 ML Co/Fe(110). Die Ellipse markiert einen Bereich auf der vierten Lage mit einer Variation der differentiellen Tunnelleitfähigkeit. Diese Variation ist durch unterschiedliche Stapelfolgen von dicht gepackten (111) Lagen (fcc/hcp-Stapelfolge) erklärbar. b) Zoom mittels Bildbearbeitung in den in a) markierten Bereich $(28,8 \times 15,5)$ nm². Der helle Bereich ist mit einem flachen Wall umgeben, der durch die Versetzungslinie, die die beiden Bereiche (fcc und hcp) voneinander trennt. c) Differentielle Tunnelleitfähigkeitsspektren gemessen in den beiden Bereichen (Stabilisierungsparameter: $U = +0,7$ eV und $I = 0,6$ nA). Die Biasspannung des STS-Scans a) ist durch eine vertikale Linie gekennzeichnet.

4.3.4 Rekonstruktion verborgener Lagen

Das in Abbildung 4.17 a) gezeigte 3-dimensionale STM/STS Bild, aufgenommen bei $U = -0,3$ V auf einer Probe mit $\Theta_{Co} = 4,7$ ML Co/Fe(110), zeigt Bereiche auf der vierten Lage Co, welche Unterschiede in der differentiellen Tunnelleitfähigkeit aufweisen. Wie schon zuvor bei Co/Cr(110) deutet dies verschiedene Stapelfolgen dicht gepackter Lagen an. Eine Vergrößerung des markierten Bereichs (Abbildung 4.17 b) zeigt einen $0,1$ Å hohen Wall um den hellen Bereich mit der höheren Tunnelleitfähigkeit, bei dem es sich um eine Versetzungslinie handelt, welche die beiden Bereiche unterschiedlicher Stapelfolgen voneinander trennt. Solche Versetzungslinien zwischen fcc und hcp geordnetem Kobalt wurden auch in der Tripellage Co/W(110) beobachtet [Pra05b].

Die in Abbildung 4.17 c) gezeigten differentiellen $dI/dU(U)$ Tunnelleitfähigkeitsspektren sind auf den beiden Bereichen unterschiedlicher Tunnelleitfähigkeit gemessen worden. Beide Spektren zeigen einen Peak bei $-0,7$ eV. Das Spektrum für den hellen Bereich zeigt eine schwache breite Schulter bei $+1,1$ eV und das Spektrum für den dunklen Bereich hat einen Peak bei $+1,3$ eV. Das Spektrum für den dunklen Bereich zeigt einen zusätzlichen Peak bei $-0,1$ eV.

Auf den ersten Blick erscheint der sichtbare Kontrast in Abbildung 4.17 überraschend, da bei der Energie von $-0,3$ eV, bei der das STM/STS-Bild aufgenommen wurde, der absolute dI/dU -Wert des $dI/dU(U)$ -Spektrums für den dunklen Bereich höher ist als für den hellen Bereich, so dass ein zu Abbildung 4.17 b)

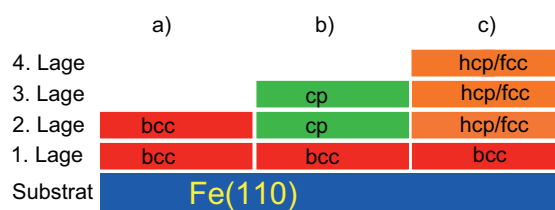


Abbildung 4.18: Schematische Darstellung der Rekonstruktion der zweiten Lage Co/Fe(110). a) Beträgt die Bedeckung 2 ML Co, sind beide Lagen bcc geordnet. b) Durch die Bedeckung mit der dritten Lage rekonstruiert die zweite Lage in eine dicht gepackte Lage. c) Die Stapelfolge eines vier Lagen dicken Films kann als 1 ML bcc + 3 ML fcc oder als 1 ML bcc + 3 ML hcp Konfiguration angenommen werden.

invertierter Kontrast zu erwarten wäre. Zum Verständnis des beobachteten Kontrastes muss beachtet werden, dass die dI/dU -Karte von Abbildung 4.17 a) und die Spektren in Abbildung 4.17 c) unter verschiedenen Bedingungen gemessen wurden. Differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeits-Karten werden im sogenannten Konstantstrommodus (vgl. Abschnitt 2.1.1) aufgenommen, d.h. die Spitze wird dynamisch bei spezifischen Werten für Gap-Spannung und Tunnelstrom stabilisiert (hier: $U = -0,3$ eV und $I = 0,6$ nA). Für die Messung der gezeigten $dI/dU(U)$ Spektren wurde die Spitze bei $U = +0,7$ eV und $I = 0,6$ nA stabilisiert, bevor die Regelschleife während der Aufnahme des $dI/dU(U)$ -Signales ausgeschaltet wurde. Diese individuellen Stabilisierungsparameter führen zu verschiedenen Spitze-Probe-Abständen während des Scans der dI/dU -Karte und der Messung der $dI/dU(U)$ Spektren. Die absolute Höhe eines Peaks in einem Tunnelspektrum bei einer spezifischen Energie hängt linear von diesem Abstand ab. Allerdings ist die Steigung dieses linearen Zusammenhangs energieabhängig und nicht für alle Peaks innerhalb eines Spektrums gleich [Bod02a]. Dieser Effekt führt zu Variationen der relativen Peakhöhen innerhalb eines Spektrum bei Variation der Stabilisierungsparameter und erklärt somit den beobachteten Kontrast in Abbildung 4.17 a) und b) in Zusammenhang mit den zugehörigen gemessenen $dI/dU(U)$ -Spektren.

In Analogie mit früheren Ergebnissen zu Variationen der Stapelfolge in fcc/hcp Co [Pra05a, Wie04, Pra04b] und Kapitel 4.2.4 wird eine fcc-Ordnung im hellen Bereich und eine hcp-Ordnung im dunklen Bereich angenommen.

Die fcc/hcp Variation der Stapelfolge wird hier bereits in der vierten Lagen Co/Fe(110) beobachtet. Da für die Formierung der individuellen fcc und hcp Stapelfolgen mindestens drei Lagen erforderlich sind, muss die zunächst bcc geordnete Doppellage durch den Einfluss weiterer Lagen in eine dicht gepackte Struktur umgeordnet worden sein. Es ist anzunehmen, dass diese Rekonstruktion bereits mit der Ausbildung der dritten Lage stattfindet, da die Wechselwirkung zwischen der dritten und der zweiten Lage stärker ist als die Wechselwirkung zwischen der vierten und der zweiten Lage. Diese Annahme ist in Abbildung 4.18 illustriert.

4.4 Wachstum von Co/Fe(110) bei erhöhter Temperatur

Wie in den beiden vorhergehenden Abschnitten diskutiert wurde, kann Kobalt sowohl auf der Cr(110) Oberfläche als auch auf der Fe(110) Oberfläche bei Raumtemperatur nur bis zur zweiten Lage in der bcc Ordnung stabilisiert werden. In der Literatur wird jedoch auch von Beispielen berichtet, in denen dickere Kobaltschichten in der bcc-Ordnung gewachsen sind. Zum Beispiel berichten Fölsch et al. von bis zu 30 Lagen bcc geordnetem Kobalt auf Cr(110), wobei Co bei einer Substrattemperatur von 500 K auf einem Cr(110)-Einkristall deponiert wurde [Föl98, Föl99].

Im Rahmen der hier präsentierten STM-Untersuchungen wurde Co bei RT deponiert, um eine Interdiffusion an der der Co-Cr bzw. Co-Fe Grenzfläche zu vermeiden. Im folgenden wird gezeigt, wie das Wachstum von Kobalt auf der Fe(110)-Oberfläche durch eine erhöhte Substrattemperatur beeinflusst wird. Hierzu wurde Kobalt bei Raumtemperatur auf den Fe(110) Inseln deponiert und anschließend getempert.

In Abbildung 4.19 a) ist eine STM Aufnahme mit 0,45 ML Co auf einer Fe(110) Insel gezeigt. Co wurde bei Raumtemperatur deponiert und die Probe anschließend bei 530 K getempert. Die Messung wurde mit einer geflashten W-Spitze durchgeführt. Wie dem Höhenprofil in Abbildung 4.19 b) entnommen werden kann, beträgt die Dicke dieser Insel am rechten Rand 1 nm und 1,7 nm am linken Rand. Durch das Tempern wurden die Kanten der Co Monolageninseln geglättet (vgl. Kapitel 4.3.1). Die dI/dU -Aufnahmen in den Abbildungen 4.19 c) und d) zeigen in der Montage Kobalt Bereiche mit zwei zueinander verschiedenen differentiellen Tunnelleitfähigkeiten. Diese Gebiete werden im folgenden mit A (hell erscheinend in Abbildung 4.19 e) und B (dunkel erscheinend in Abbildung 4.19 e) bezeichnet. Die zugehörigen $dI/dU(U)$ -Spektren sind in Abbildung 4.19 f) gezeigt. Das $dI/dU(U)$ -Spektrum der Fe-Oberfläche ist ebenfalls mit aufgetragen und zum Vergleich ist ein $dI/dU(U)$ -Spektrum einer bei Raumtemperatur präparierten ungetemperten Monolage bcc Kobalt (vgl. Abschnitt 4.5.2) eingezeichnet. Alle Spektren zeigen einen breiten Peak im Bereich der besetzten Probenzustände, wobei die Peaks im Fe-Spektrum und im Spektrum von Bereich B fast aufeinander liegen. Im Fe-Spektrum liegt das Maximum des Peaks $-0,25$ eV und im Bereich B bei $-0,28$ eV. Im Spektrum von Bereich A liegt das Maximum des Peaks bei $-0,17$ eV und eine Schulter kann bei $-0,34$ eV beobachtet werden. In der ungetemperten Monolage bcc Co liegt das Maximum des Peaks bei $-0,1$ eV.

Die Abweichung der Position des hervorstehenden Peaks im Bereich besetzter Zustände in den Spektren der getemperten Monolage Co auf Fe(110) kann durch eine Interdiffusion von Co und Fe, d.h. der Bildung einer $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Legierung erklärt werden, wobei x in den Bereichen A und B verschieden ist. Aufgrund der

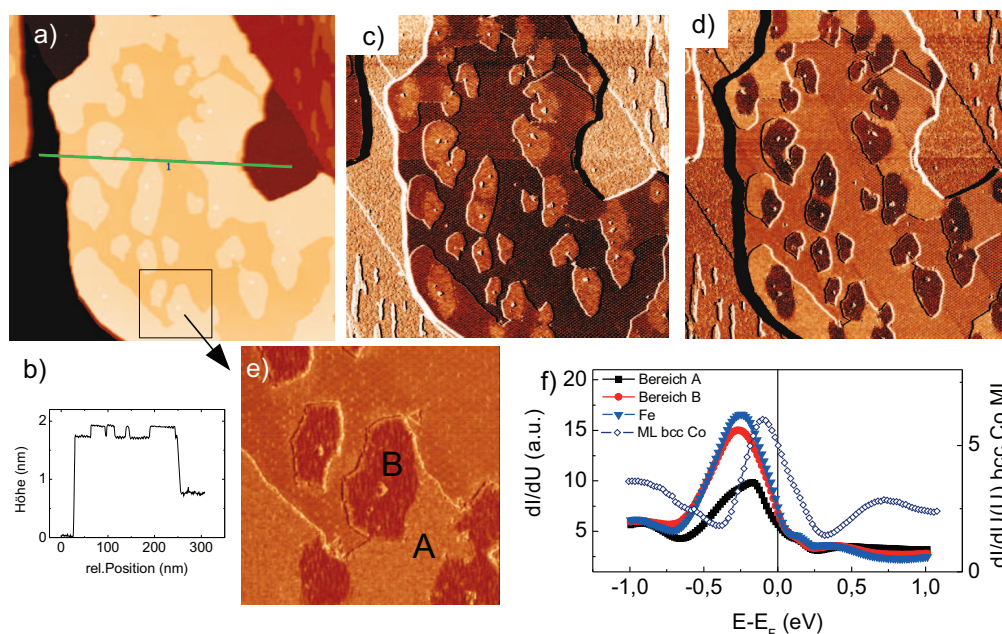


Abbildung 4.19: a) $(400 \times 400) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme von $\Theta_{Co} = 0,45 \text{ ML}$ Co auf einer Fe(110) Insel. a) Höhenprofil der Insel entlang der in a) eingezeichneten Linie. Simultan zur Topographie wurden 2 differentielle dI/dU Leitfähigkeitskarten gemessen. c) Zeigt eine dI/dU Aufnahme gemessen bei $U = -0,7 \text{ V}$ und d) zeigt eine dI/dU Aufnahme gemessen bei $U = 0,3 \text{ V}$. Der Tunnelstrom beträgt $I = 2,5 \text{ nA}$. e) $100 \times 100 \text{ nm}^2$ STS Aufnahme bei $0,3 \text{ eV}$ in dem in a) markierten Bereich. f) $dI/dU(U)$ Spektren (gemessen als I-grid bei $U = 0,7 \text{ eV}$, $I = 2,5 \text{ nA}$ und $T = 5 \text{ K}$) der Eisenunterlage und der mit A und B bezeichneten Bereiche der erkennbaren Monolage auf der Inseloberfläche. Zum Vergleich ist zusätzlich das $dI/dU(U)$ Spektrum der ungetemperten Monolage bcc Co dargestellt.

beinahe Übereinstimmung der Peakpositionen in Spektren der Eisenunterlage und von Gebiet B kann von einem höheren Eisenanteil in Gebiet B ausgegangen werden. Im Spektrum von Bereich A liegt das Maximum näher am Peak der ungetemperten bcc Co Monolage, was die Annahme eines geringeren Eisenanteils in Bereich A bekräftigt.

Weiterhin kann in den Spektren der Fe-Oberfläche und der Co Monolage bei $+0,15 \text{ eV}$ ein kleiner Peak und eine schwache Struktur bei etwa $+0,4 \text{ eV}$ beobachtet werden. In den Spektren der Fe-Oberfläche liegt das Maximum der schwachen Struktur bei $+0,37 \text{ eV}$ und in den Spektren von A und B zw. $+0,42 \text{ eV}$. Im Bereich A und auf der Eisenoberfläche fällt der Peak bis $+0,6 \text{ eV}$ wieder ab, wohingegen im Spektrum von Bereich B der Peak breiter ist und bis $+1,0 \text{ eV}$ kaum merklich abfällt. Die ungetemperte Monolage Co hingegen zeigt einen einzelnen breiten Peak um $+0,7 \text{ eV}$, der als ein charakteristischer Peak für bcc geordnetes Kobalt angesehen werden kann, da er in nahezu allen Lagen unge-

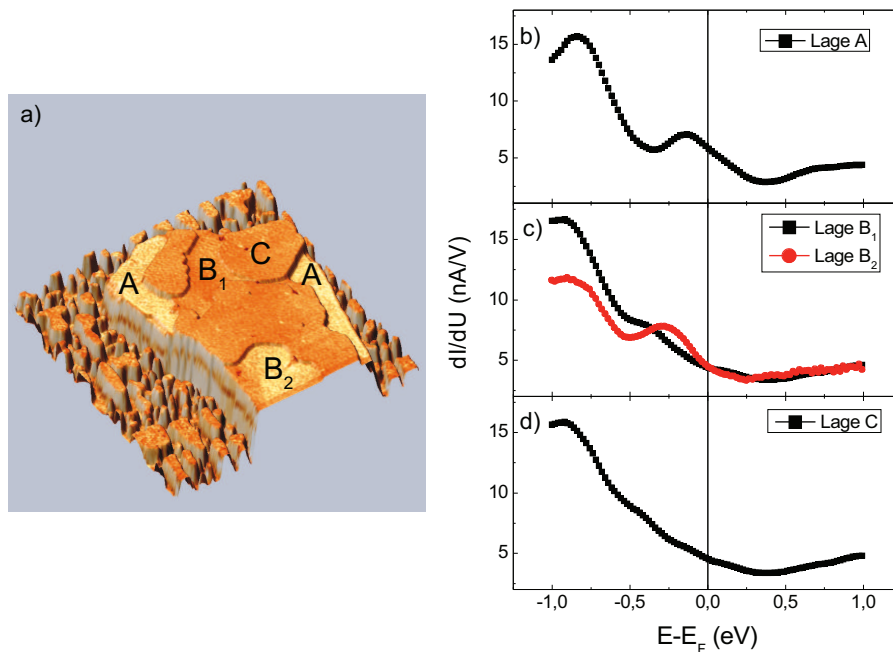


Abbildung 4.20: a) 3-dimensionale Darstellung einer (250×250) nm² STM Aufnahme einer mit 2,7 ML Kobalt bedeckten Fe(110)-Insel. Als Textur ist eine bei $-0,18$ eV aus dem simultan gemessenen orts aufgelösten $I(U)$ -Datensatz extrahierte dI/dU -Karte dargestellt. Der Tunnelstrom betrug bei der Messung 2,5 nA und die Spitze wurde zu Messung der Spektren bei $-0,7$ stabilisiert. Die auf der Insel sichtbaren Lagen sind mit A, B und C bezeichnet. Die Lage B zeigt zwei Bereiche mit zueinander unterschiedlichen differentiellen Tunnelleitfähigkeiten. Die Spektren der einzelnen Lagen sind in b) bis d) gezeigt.

tempertem bcc Co zu beobachten ist (vgl. Abschnitte 4.2.3 und 4.3.3) und mit Bandstrukturechnungen [Izq00, Kla05] gut übereinstimmt.

In Abbildung 4.20 a) ist eine Fe(110)-Insel mit einer Co-Bedeckung von $\Theta_{Co} = 2,7$ ML in einer 3d-Darstellung gezeigt. Co wurde bei RT deponiert und die Probe wurde anschließend bei 510 K getempert. Simultan zur Messung der Topographie wurden auf einem 1×1 -Raster, d.h. in jedem Bildpunkt, $I(U)$ Spektren gemessen. Als Textur der 3d-Darstellung dient eine bei $-0,18$ eV extrahierte dI/dU -Karte. Auf der Oberfläche der Insel können drei Bereiche mit unterschiedlicher lokaler Schichtdicke identifiziert werden, die als Lage A, Lage B und Lage C bezeichnet sind. Die jeweiligen Spektren sind in Abbildung 4.20 d) bis d) gezeigt. Die Spektren der Lage A und B besitzen einen ausgeprägten Peak im Bereich besetzter Probenzustände und das Spektrum der Lage C zeigt keine auffälligen Peaks. Dies lässt auf eine signifikante Änderung bei Übergang von Lage B auf Lage C schließen. Das Maximum des ausgeprägten Peaks liegt in Lage A bei $-0,16$ eV. Ein weiterer Peak liegt bei $-0,84$ eV und ein schwacher breiter Peak kann bei $+0,7$ eV beobachtet werden. In der Lage B werden zwei

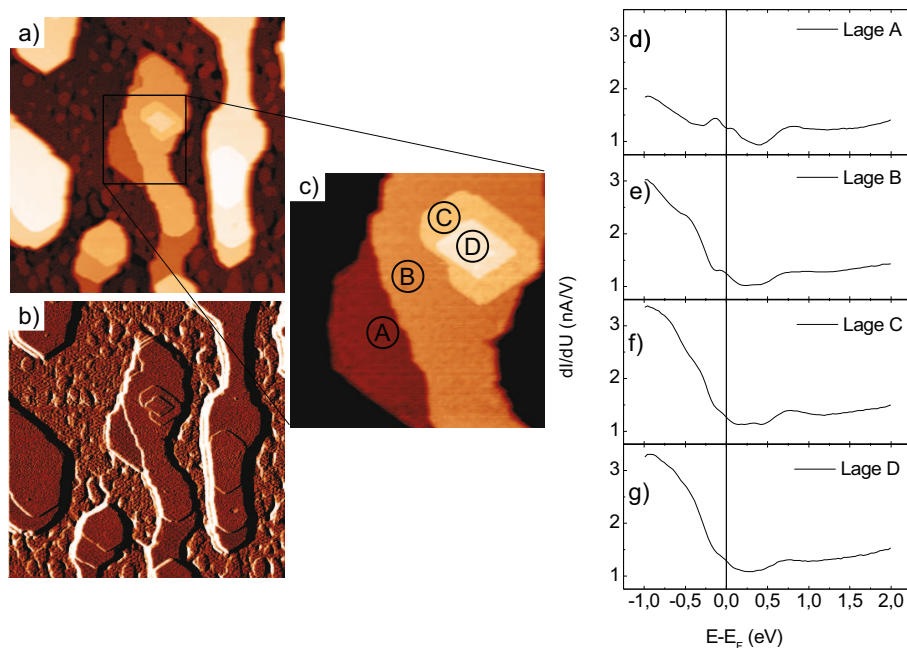


Abbildung 4.21: a) $(200 \times 200) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme einer Probe mit 4 ML Co auf Fe(110) deponiert bei RT und anschliessend getempert bei 510 K. b) Simultan gemessene dI/dU STS-Aufnahme bei $U = 0,2 \text{ eV}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$. Es ist kein dI/dU -Kontrast innerhalb der einzelnen Lagen erkennbar. c) $(65 \times 65) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme auf der zentralen Insel in a). Die vier erkennbaren Lagen sind mit A, B, C und D gekennzeichnet. Die jeweiligen dI/dU -Spektren sind in d) bis g) dargestellt. Auf allen Lagen kann der charakteristische bcc Co Peak bei $+0,7 \text{ eV}$ beobachtet werden, was die Vermutung einer bcc Ordnung für alle Lagen nahelegt.

verschiedene Spektren in zwei getrennten Bereichen, die als B_1 und B_2 bezeichnet sind, beobachtet. Das Maximum des ausgeprägten Peaks liegt in Lage B_1 bei $-0,4 \text{ eV}$ und in Lage B_2 bei $-0,27 \text{ eV}$. Aus der Menge deponierten Kobalts liegt die Vermutung nahe, dass es sich bei der Lage A um die Monolage Co, welche mit Fe vermischt ist, handelt. Allerdings wurde das Maximum des Peaks in den Spektren der Monolage bei der in Abbildung 4.19 gezeigten Messung bei tieferen Energien beobachtet. Allerdings wurden die beiden Proben bei unterschiedlichen Temperaturen getempert. Da die Substrattemperatur der in Abbildung 4.20 gezeigten Probe etwas niedriger war, kann von einer geringen Vermischung von Eisen und Kobalt an der Grenzfläche ausgegangen werden. Dies erklärt die verschobene Position des prominenten Peaks. Die Tatsache, dass die Position des Peaks näher an die Peakposition der untergetemperten Monolage bcc Co herangewandert ist, bekräftigt diese Vermutung. Der spektroskopische Unterschied in Lage B deutet ebenfalls auf eine Vermischung von Kobalt und Fe hin. In den Spektren von Lage B wird der Peak bei $+0,7 \text{ eV}$ nicht beobachtet.

In Abbildung 4.21 ist eine 3-dimensionale Darstellung einer Probe mit $\Theta_{Co} =$

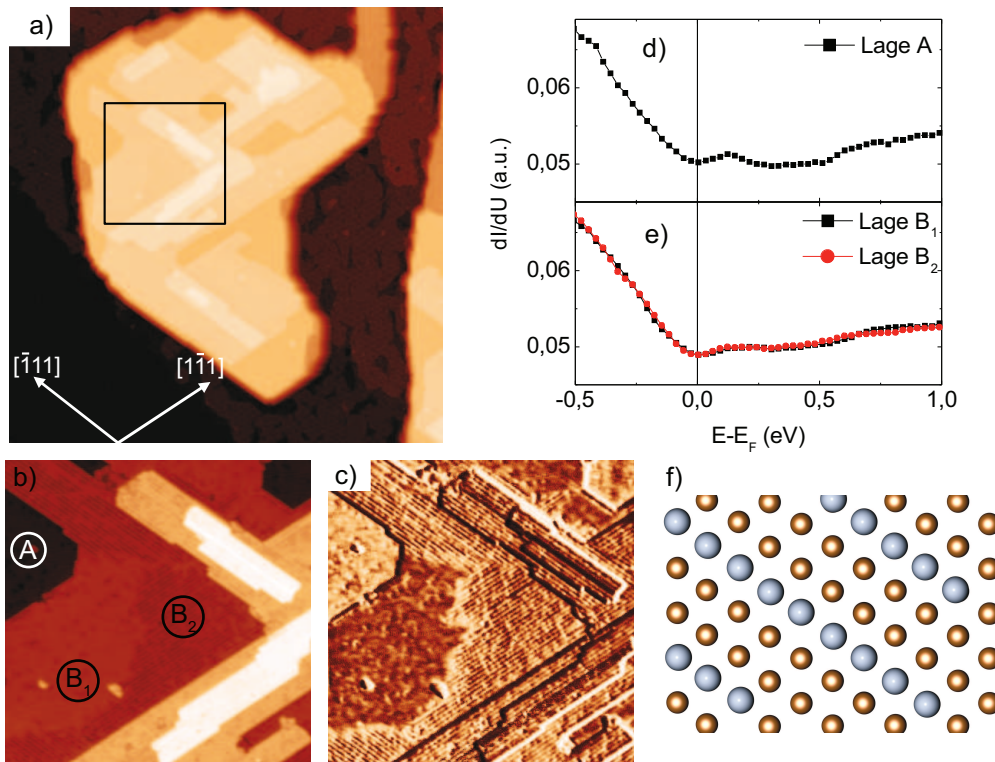


Abbildung 4.22: a) $(175 \times 175) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme einer Fe(110)-Insel bedeckt mit $\Theta_{Co} = 5 \text{ ML}$ bei RT und getempert bei 490 K. b) $(50 \times 50) \text{ nm}^2$ STM in dem in a) markierten Bereich c) dI/dU -Aufnahme simultan mit b) gemessen bei $U = 0,3 \text{ V}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$. Die Linien stehen in einem Winkel von 110° zueinander. d) $dI/dU(U)$ -Spektren gemessen auf Lage A. e) $dI/dU(U)$ -Spektren gemessenen auf Lage B, wobei Lage B in zwei Bereiche, einmal ohne Linien (B_1) und einmal mit Versetzungslinien (B_2), aufgeteilt ist. f) Modellhafte Skizze der Entstehung der Linien entlang $[111]$ aufgrund der Bildung einer geordneten $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung. Jeweils zwei Reihen Kobaltatome (bronzefarben) und eine Reihe Eisenatome (grau) verlaufen nebeneinander.

4 ML Bedeckung gezeigt. Auch hier wurde Co wieder bei RT deponiert und die Probe anschließend bei 510 k getempert. In der dI/dU Karte, aufgenommen bei $U = 0,3 \text{ V}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$, in Abbildung 4.21 b) ist kein spektroskopischer Kontrast zwischen und innerhalb den einzelnen Lagen erkennbar. Die Zentrale Fe-Insel ist in Abbildung 4.21 c) vergrößert dargestellt und die auf den einzelnen Lagen gemessenen $dI/dU(U)$ -Spektren sind in Abbildung 4.21 d) bis g) gezeigt. Das Spektrum der Lage A zeigt bei $-0,15 \text{ eV}$ einen Peak und einen weiteren kleinen Peak bei $+0,08 \text{ eV}$. Ein deutlicher Peak ist bei $+0,7 \text{ eV}$ erkennbar, welcher auch in den Spektren der anderen Lagen deutlich vorhanden ist. Der Peak $+0,08 \text{ eV}$ ist in den Spektren der höheren Lagen nicht mehr beobachtbar. Aufgrund der Menge deponierten Kobalts, kann angenommen werden, dass es sich bei der Lage A um die dritte Lage Co handelt. Dass der charakteristische Peak

somit bis zur sechsten Lage beobachtet wird und keine spektroskopischen Variation innerhalb der Lagen erkennbar sind, führt zur Vermutung, dass bei dieser Probe vier Lagen bcc-Co auf einer Schicht $Co_{1-x}Fe_x$ -Grenzflächenlegierung vorliegen.

Eine Probe mit $\Theta_{Co} = 5$ ML deponiert bei RT auf Fe(110) und getempert bei 490 K ist in Abbildung 4.22 gezeigt. Die Morphologie der Co-Schicht zeigt lang gestreckte Kanten, die vermutlich entlang der dichtgepackten $\langle 111 \rangle$ Achsen verlaufen. Dies ist ähnlich der Morphologie der ungetemperten dritten Lage Co/Fe(110) (vgl. Kapitel 4.3.1). Die Spektren der Lage A und Lage B zeigen einen Peak bei +0,1 eV.

In der Vergrößerung des in Abbildung 4.22 a) markierten Bereiches zeigt in der mit B bezeichneten Lage das teilweise Auftreten von parallel zur den Terrassenkanten verlaufenden Linien (Abbildung 4.22 b) und c). Der Abstand zweier benachbarter Linien beträgt $0,75 \pm 0,3$ nm. Spektroskopisch unterscheiden sich die Bereiche mit und ohne Linien nicht voneinander, wie in den in Abbildung 4.22 e) gezeigten $dI/dU(U)$ -Spektren zu sehen ist. Eine mögliche Erklärung ist die stellenweise Bildung einer geordneten $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung. Spektroskopisch sind eine ungeordnete und eine geordnete $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung bei gleichem x nicht voneinander unterscheidbar. Der in Abbildung 4.22 c) erscheinende Kontrast rührt von der Höhenkorruption der Linien und stellt keinen echten spektroskopischen Unterschied dar.

In Abbildung 4.22 f) ist ein Strukturmodell für die Fe-Co-Legierung skizziert. Bei diesem Modell laufen entlang $[\bar{1}11]$ nebeneinander jeweils zwei Reihen Kobaltatome und eine Reihe Fe-Atome. Der Abstand zweier benachbarter Fe-Reihen würde, wenn man die Gitterkonstante von Fe für die Schicht voraussetzt, $0,72$ nm betragen. Dieser Abstand passt recht gut mit dem gemessenen Linienabstand von $0,75 \pm 0,3$ nm überein, so dass dieses Modell wahrscheinlich die Ordnung der geordneten $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung beschreibt.

Die hier präsentierten Ergebnisse zum Wachstum von kubisch-raumzentrierten Kobalt auf Fe(110) bei erhöhter Temperatur sind keinesfalls abschließend. Sie zeigen allerdings, dass eine mögliche Stabilisierung von mehr als zwei Lagen bcc Kobalt durch eine Erhöhung der Substrattemperatur nur durch die Bildung einer Grenzflächenlegierung möglich ist. Sogar bei der Deposition von fünf Monolagen Kobalt kommt es bei dieser Methode an der Oberfläche zur Bildung einer $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung. Daher muss bei allen hier gezeigten Ergebnissen zum Wachstum von bcc-Co bei erhöhter Substrattemperatur von einer Legierungsbildung ausgegangen werden. Die Bildung einer Schicht reinem bcc geordneten Kobalt kann daher nicht explizit nachgewiesen werden. Der in den Spektren beobachtete Peak bei +0,7 eV kann zwar als Indiz für die Bildung einer bcc Co-Schicht gewertet werden, aber wie in den in Abbildung 4.22 gezeigten Spektren ist dieser Peak erkennbar, obwohl es sich an der Oberfläche um eine $Co_{1-x}Fe_x$ -Legierung handelt. Im Unterschied zu den hier diskutierten Messungen führten

Fölsch et al. ihre Untersuchungen unter Verwendung eines Chromkristalls als Substrat durch. Aber auch bei diesem System ist die Bildung einer Grenzflächenlegierung bei der verwendeten Temperatur von 500 K zu erwarten. Da Fölsch et al. das Wachstum der Kobaltschicht mittels Elektronenbeugung untersucht haben, blieb die Bildung einer solchen Legierung verborgen [Föl98, Föl99]. Die von Fölsch et al. präsentierten Ergebnisse des Wachstums von bis zu 30 nm bcc geordnetem Kobalt lassen vermuten, dass eine solche Grenzflächenlegierung ein sehr gutes Substrat darstellt, um Kobalt in mehreren Lagen bcc geordnet zu stabilisieren. Ein Grund hierfür könnten eine sehr geringe Gitterfehlpassung sein, da die Gitterkonstante der Legierung wahrscheinlich etwas größer als die von reinem Eisen bzw. Chrom ist. Ein Indiz für eine derartige Vergrößerung der Gitterkonstante könnte der beobachtete Abstand der Linien in der geordneten Fe-Co-Legierung sein, der eher etwas größer ist, als aufgrund der Annahme der Gitterkonstante von Eisen zu erwarten wäre (gemessen: $0,75 \pm 0,3$ nm; zu erwarten: 0,72 nm).

Die weitere Untersuchung des Wachstums von Kobalt auf einer solchen Legierung als Substrat könnte in diesem Punkt Klarheit bringen. Um dies zu untersuchen, wäre es zunächst sinnvoll festzustellen, bis zu welchen Schichtdicken sich die $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Legierung bei verschiedenen Temperaturen ausdehnt. Da eine solche Untersuchung nicht im primären Fokus lag, wurde eine solche umfangreiche Messreihe im Rahmen dieser Dissertation nicht durchgeführt.

Im folgenden Abschnitt werden spinpolarisierte STM/STS-Messungen an bcc-Co Schichten, die bei Raumtemperatur präpariert wurden, diskutiert, da nur bei diesen Proben von einer gesicherten bcc-Ordnung der Mono- und Doppellage Co ausgegangen werden kann.

4.5 spinpolarisierte STS-Untersuchungen auf Co/Fe(110)

Zur Abbildung der magnetischen Struktur von bcc Co/Fe(110) wurden spinpolarisierte STS-Messungen durchgeführt. Aufgrund der Dicke der Fe(110) Inseln von nominell 2 nm ist eine Magnetisierung in der Schichtebene entlang der [001] Achse zu erwarten [Pro06, Uso04, Fru99]. Da die auf diesen Inseln liegende Co-Schicht im Vergleich zur Fe-Unterlage sehr dünn ist, kann davon ausgegangen werden, dass die Ausrichtung der Magnetisierung in der Co-Schicht durch die Magnetisierung der Fe-Insel bestimmt wird, so dass die Kobaltschicht ebenfalls entlang der [001] Achse magnetisiert ist.

Für die Messungen wurden sowohl Wolfram-Spitzen mit 5 ML Fe Beschichtung als auch Wolfram-Spitzen mit einer Beschichtung aus 16 ML Co/10 ML Au verwendet. Wie in Kapitel 3.6 beschrieben, besitzen diese Spitzen eine leichte Achse in der Ebene des Spitzenapex und sind somit sensitiv auf eine Magnetisierung

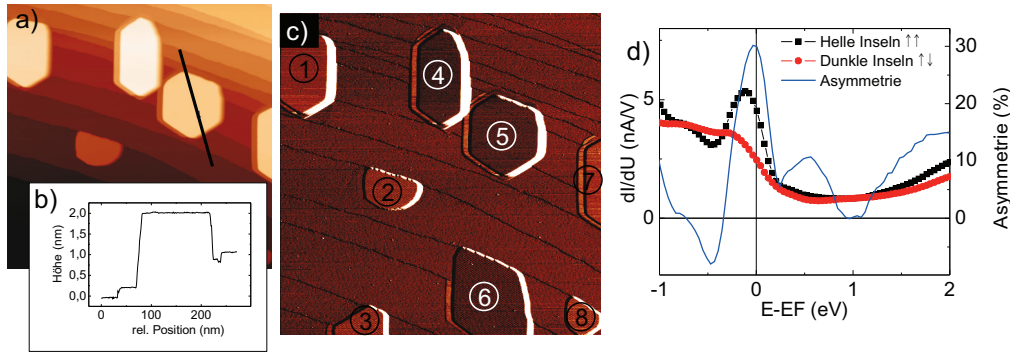


Abbildung 4.23: a) $(600 \times 600) \text{ nm}^2$ STM Bild von 5 ML Fe deponiert bei RT und getempert bei 650 K. b) Höhenprofil einer Fe-Insel entlang der in a) eingezeichneten Linie. c) Die simultan mit a) gemessene differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarte ($U = -0,71 \text{ eV}$ und $I = 2,1 \text{ nA}$) zeigt einen magnetischen Kontrast zwischen den Fe-Inseln 1, 2, 3, 7, 8 und 4, 5, 6. d) In den gemessenen Spektren ist eine signifikante Asymmetrie der differentielle Tunnelleitfähigkeiten für parallele und antiparallele Magnetisierung bei $-0,1 \text{ eV}$ beobachtbar. Das Maximum der Asymmetrie liegt an der Fermikante und beträgt 30 %.

in der Probenebene. Die in diesem Abschnitt gezeigten Ergebnisse wurden bei einer Probentemperatur von 5 K gemessen.

4.5.1 Magnetischer Kontrast unbedeckter Fe(110)-Inseln

In Abbildung 4.23 a) ist ein STM-Bild einer Probe mit unbedeckten Fe(110)-Inseln gezeigt. Für die Messung wurde eine mit 5 ML Eisen bedeckte W-Spitze verwendet. Wie dem Höhenprofil in Abbildung 4.23 b) entnommen werden kann, sind die Inseln etwa 1,5 bis 2,5 nm dick (entspricht etwa 7 bis 13 atomare Schichten). Auf den Oberflächen der Inseln ist das Versetzungsnetzwerk (vgl. Kapitel 4.1.2) noch schwach erkennbar. Ein Einfluss des Versetzungsnetzwerkes auf die Magnetisierung der Inseln ist allerdings nicht zu erwarten. Die zugehörige differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarte in Abbildung 4.23 c) zeigt einen deutlichen Hell-Dunkel-Kontrast zwischen den Inseln 4, 5 und 6 sowie den Inseln 1, 2, 3, 7 und 8. Dieser Kontrast ist auf eine unterschiedliche Orientierung der Magnetisierung der Inseln zurückzuführen und wird somit als magnetischer Kontrast bezeichnet.

Die in Abbildung 4.23 d) gezeigten $dI/dU(U)$ -Spektren zeigen einen deutlichen Unterschied in den differentiellen Tunnelleitfähigkeiten beider magnetischer Ausrichtungen bei $-0,1 \text{ eV}$. Das Vorzeichen der Polarisation lässt sich in durchgeführten Experimenten nicht absolut bestimmen, da kein äußeres Magnetfeld angelegt werden kann. Allerdings wurden bei dem in Abbildung 4.23 gezeigten Experiment sowohl auf der Spitze als auch auf der Probe eine dicke

Fe(110)-Schicht benutzt. Für gleiche Tunnelelektroden erwartet man den größten dI/dU -Wert bei einer parallelen Ausrichtung der Magnetisierungen bei der Elektroden. Dies führt zu der in Abbildung 4.23 d) angegebenen Bezeichnung. Das bedeutet, die in Abbildung 4.23 c) hell erscheinenden Inseln (1,2,3,7 und 8) sind parallel und die dunklen Inseln (4,5 und 6) entsprechend antiparallel zur Spitze magnetisiert. Allerdings sind die Zustandsdichten für Probe und Spitze offensichtlich nicht gleich, sonst würde

$$\frac{dI}{dU}(-U) = \frac{dI}{dU}(U) \quad (4.5)$$

gelten.

Prokop et al. beobachten in den Spektren von 4 – 6 ML dicken Fe Inseln auf Mo(110) einen ähnlich signifikanten Unterschied in Abhängigkeit von der Magnetisierungsrichtung der Fe-Inseln [Pro06]. Allerdings beobachteten Prokop et al. das Maximum des Peaks für eine antiparallele Magnetisierung ($\uparrow\downarrow$) bei $-0,2$ eV. Die hier untersuchten Inseln weisen im Vergleich zu den von Prokop et al. untersuchten Inseln eine größere laterale Ausdehnung auf und sind nominell dicker, was den Unterschied der hier gemessenen Spektren zu den von Prokop et al. gemessenen Spektren erklären kann. Kim et al. zeigen mittels Photoemissionsspektroskopie eine ähnliche spinabhängige Asymmetrie bei $-0,25$ eV [Kim01]. Anhand von ab-initio slab Rechnungen führen Kim et al. diese Asymmetrie auf einen scharfen resonanten Minoritäts-Oberflächenzustand bei $-0,25$ eV und einen breiten Majoritäts-Oberflächenzustand bei der gleichen Energie zurück [Kim01]. In der gemittelten Zustandsdichte von Fe dominieren an der Fermikante die Majoritätsladungsträger, so dass die gemittelte Spinpolarisation positiv ist [Gre07].

In den gemessenen Spektren der hellen Inseln ist der Peak bei $-0,1$ eV scharf und stark ausgeprägt, wohingegen der entsprechende Peak im Spektrum der dunklen Inseln eher breit und flach erscheint. Dies passt zu der von Kim et al. berechneten elektronischen Struktur knapp unterhalb der Fermikante [Kim01], so dass den in Abbildung 4.23 c) hell erscheinenden Inseln Minoritätseigenschaften, d.h. ein spin-down Charakter (\downarrow), und den dunklen Inseln entsprechend ein spin-up Charakter (\uparrow) zugeordnet wird. Somit ist die gemessene Spinpolarisation der Fe(110)-Oberfläche negativ. Da auch die Spinpolarisation der Spitze negativ ist, ergibt sich insgesamt eine positive Asymmetrie an der Fermikante, da gemäß den Gleichungen 2.35 und 2.36 gilt:

$$A = P_{eff} = \propto P_p \cdot P_s, \quad (4.6)$$

wobei P_p die Polarisation der Probe bedeutet und P_s entsprechend die Polarisation der Spitze. Genau genommen skaliert die Asymmetrie noch mit dem $\cos \varphi$, mit dem Azimuthalwinkel φ zwischen den Magnetisierungen von Probe und Spitze (vgl. Gleichung 2.36). Da dieser Winkel bei den hier durchgeführ-

ten Experimenten jedoch nicht bekannt ist, wird dieser Faktor in der weiteren Diskussion zunächst vernachlässigt.

Für eine quantitative Bestimmung der Spinpolarisation der Probenoberfläche muss der Abstand zwischen Spitze und Probe sowohl für parallele als auch für antiparallele Magnetisierung von Spitze und Probe gleich sein, damit Einflüsse aufgrund eines geänderten Abstandes ausgeschlossen werden können. Da der Abstand durch die Wahl der Bias-Spannung und des Tunnelstroms indirekt bestimmt wird und der Tunnelstrom nach Gleichung 2.32 einen magnetisierungsabhängigen Anteil beinhaltet, kann es zu Variationen des Abstandes kommen, wenn sich die Ausrichtung der Probenmagnetisierung relativ zur Spitzenmagnetisierung verändert. Wird jedoch die Bias-Spannung so gewählt, dass der Tunnelstrom für beide Spinkanäle identisch ist, bleibt der Abstand auch bei einer Änderung der relativen Ausrichtung der Probenmagnetisierung konstant. Die in Abbildung 4.23 gezeigten spinpolarisierten $dI/dU(U)$ -Spektren wurden bei $-0,7$ V Bias-Spannung gemessen. Bei dieser Spannung ist die Bedingung für den Abstand bei paralleler und antiparalleler Magnetisierungsausrichtung nahezu erfüllt, da die Asymmetrie dI/dU -Werte bei dieser Energie nur etwa $0,2$ % beträgt. Der sichtbare magnetische Kontrast in Abbildung 4.23 c) suggeriert zwar eine größere Asymmetrie, allerdings ist der Farbkontrast in der Darstellung stark gespreizt, um den tatsächlich nur sehr schwachen magnetischen Kontrast sichtbar zu machen.

Das Maximum der Asymmetrie liegt knapp unterhalb der Fermikante bei $-0,03$ eV und beträgt 30 % und wird im folgenden als die Asymmetrie an der Fermikante behandelt. Da die Spitze ebenfalls mit Eisen bedeckt ist, kann angenommen werden, dass die Polarisierungen von Spitze und Probe gleich sind, d.h. $P_t = P_s = P$, so dass aus Gleichung 4.6 folgt:

$$A = P^2 \Rightarrow P = \sqrt{A}. \quad (4.7)$$

Somit ergibt sich eine Spinpolarisation der Eisenoberfläche von

$$|P_{Fe}| = \sqrt{0,30} = 0,55. \quad (4.8)$$

Nach Tedrow und Meservey beträgt die durch Messungen an planaren Tunnelkontakten bestimmte Spinpolarisation von Fe an der Fermikante 44 % und durch Photoemissionsmessungen 54 %. [Ted73] Der hier ermittelte Wert für die Spinpolarisation der Fe(110)-Oberfläche steht somit nicht im Widerspruch zu diesen Werten. Weiterhin kann aufgrund des hohen Wertes der Asymmetrie vermutet werden, dass bei der in Abbildung 4.23 gezeigten Messung der azimuthale Winkel φ klein ist.

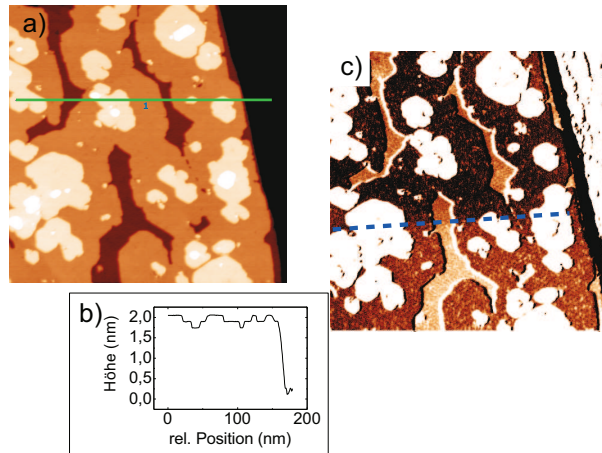


Abbildung 4.24: a) (200×200) nm² STM Aufnahme auf einer Fe(110)-Insel, bedeckt mit 1,5 ML Co, gemessen bei $U = -0,3$ eV, $I = 2,5$ nA und $T = 5$ K und einer mit 5 ML Fe beschichteten Spitze. b) Höhenprofil entlang der in a) eingezeichneten Linie, aus dem sich eine Höhe der Insel von $1,6 \pm 0,1$ nm (etwa 8 ML) ergibt. c) Die simultan gemessene spinpolarisierte STS-Aufnahme zeigt einen magnetischen Kontrast in der Monolage Co und einen schwachen Kontrast in der Fe Unterlage, wobei die Fe-Insel und die Co Monolage eine gemeinsame Domänenwand (gekennzeichnet durch eine gestrichelte blaue Linie) besitzen.

4.5.2 Magnetischer Kontrast von bcc Co/Fe(110)

Eine spinpolarisierte STS-Messung auf einer Probe mit $\Theta_{Co} = 1,5$ ML auf Fe(110) zeigt bei $-0,3$ eV einen magnetischen Kontrast in der bcc Co Monolage (siehe Abbildung 4.24 c), während in der Co Doppellage kein magnetischer Kontrast beobachtet werden kann. In der Fe Unterlage ist ebenfalls ein schwacher magnetischer Kontrast beobachtbar. Für diese Messung wurde eine mit 5 ML Eisen beschichtete Spitze verwendet. In der Co Monolage verläuft entlang $[1\bar{1}0]$ eine Domänenwand, die in der Fe-Unterlage fortgesetzt wird. Die Breite der Domänenwand in der Monolage Co beträgt (37 ± 2) nm und in der Fe-Unterlage 26 ± 2 nm. Diese Domänenwand bestätigt die Vermutung, dass die Magnetisierung der Fe-Insel die Magnetisierung des Co-Films vorgibt, da sie durchgehend in der Fe-Unterlage und in der Monolage Co beobachtbar ist.

In Abbildung 4.25 ist eine spinpolarisierte STM Messung auf einer weiteren Probe mit $\Theta_{Co} = 1,5$ ML auf Fe/Mo(110) gezeigt. Im Unterschied zur in Abbildung 4.24 gezeigten Messung wurde hier eine mit 16 ML Co/10 ML Au beschichtete W-Spitze verwendet. In der Topographie (Abbildung 4.25 b) sind zur besseren Lesbarkeit die Mon- und Doppellage Co sowie das Fe-Substrat gekennzeichnet.

Die spinpolarisierte dI/dU Aufnahme in Abbildung 4.25 b) zeigt einen deutlichen magnetischen Kontrast in der Doppellage Co. Der Kontrast ist zwischen

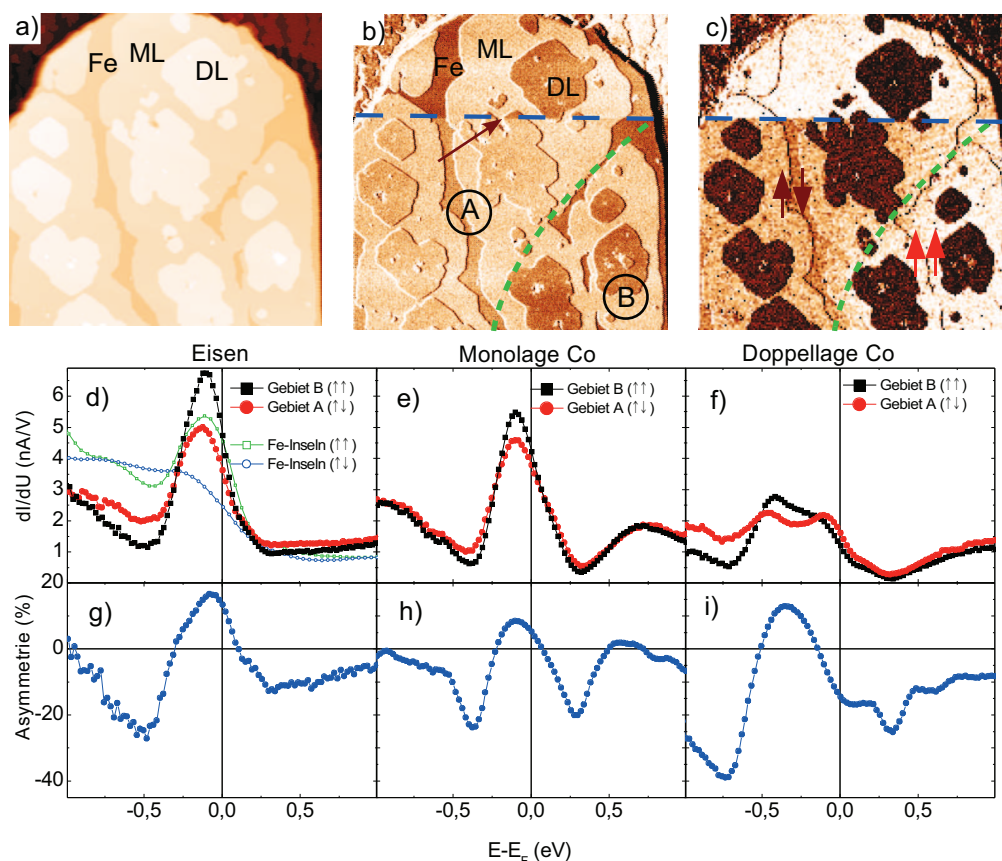


Abbildung 4.25: a) $(200 \times 200) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf einer Fe(110)-Insel mit 1,5 ML Co Bedeckung. b) Simultan gemessene differentielle dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarte bei $U = -0,7 \text{ eV}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$. Deutlich sind zwei verschiedene Tunnelleitfähigkeiten auf den Co Doppellageninseln erkennbar. c) dI/dU Karte bei $-0,1 \text{ eV}$ extrahiert aus $I(U)$ -Datensatz. Zwischen den hellen und dunklen DL-Inseln in (b) verläuft in (c) eine Domänenwand durch die Fe-Inseln (gestrichelte grüne Linie). Die beiden durch diese Domänenwand getrennten Domänen werden mit A und B bezeichnet. Im oberen Drittel des Bildes hat sich die magnetische Ausrichtung der Spitze umgekehrt (Scanlinie blau markiert), wodurch es zu einem Kontrastwechsel kommt. Die zuerst helle zentrale Doppellageninsel erscheint nun dunkel. d) Spinaufgelöste differentielle $dI/dU(U)$ Tunnelleitfähigkeitsspektren der zugrunde liegenden Eisenoberfläche. Zum Vergleich sind die Spektren der unbedeckten Eiseninseln aus Abbildung 4.23 ebenfalls aufgetragen. Durch diesen Vergleich kann der Domäne B (A) eine parallele (antiparallele) Magnetisierung zur Spitze zugeordnet werden. e) Spektren der Monolage Kobalt. f) Spektren der Doppellage Kobalt. Die zugehörigen Asymmetrien sind in g) und h) und i) dargestellt. Die Spitze wurde zur Messung der Spektren bei $U = -0,7 \text{ eV}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$ stabilisiert.

den drei Doppellageninseln in der rechten unteren Ecke und den vier Doppellageninseln auf der linken Seite erkennbar. Im oberen Drittel des Bildes hat sich die

magnetische Ausrichtung der Spitze umgekehrt (spin-Flip), wodurch es zu einer Invertierung des magnetischen Kontrastes kommt. Die zunächst helle zentrale Doppellageninsel erscheint ab dieser Scanlinie dunkel (im Bild mit einem Pfeil markiert). Simultan zur Messung der Topographie und der differentiellen dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarte wurden, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, auf einem 3×3 -Raster, d.h. in jedem dritten Bildpunkt in jeder dritten Scanlinie, $I(U)$ Tunnelstromspektren gemessen. Daraus resultiert ein ortsaufgelöster Datensatz mit knapp 28 000 $I(U)$ -Spektren. In Abbildung 4.25 c) ist eine aus diesem Datensatz bei $E - E_F = -0,1$ eV extrahierte dI/dU Karte gezeigt. Bei dieser Energie kann in der Monolage ein magnetischer Kontrast beobachtet werden, während in der Doppellage der Kontrast nur sehr schwach sichtbar ist. Interessanterweise ist der Kontrast in der Doppellage umgekehrt zum Kontrast der Monolage Co, d.h. im Bereich der dunkel erscheinenden Monolage ist die Doppellage hell und umgekehrt. Oberhalb der Scanlinie, in der sich die Magnetisierung der STM-Spitze umdreht, erscheint die Monolage Co hell. Zwischen den zueinander antiparallel magnetisierten DL-Inseln auf der Fe(110)-Insel verläuft in der Monolage Co eine Domänenwand. Sie ist durch eine gestrichelte Linie in den Abbildungen 4.25 c) und d) gekennzeichnet und dehnt sich über eine Breite von $w = (23 \pm 10)$ nm aus.

Die spinaufgelösten differentiellen $dI/dU(U)$ -Spektren der Eisenoberfläche sind in Abbildung 4.25 d) gezeigt. Die Spektren der unbedeckten Eiseninseln aus Abbildung 4.23 sind zum Vergleich ebenfalls dargestellt. Wie zuvor zeigen die Spektren den Peak bei $-0,1$ eV. Allerdings taucht der Peak hier in den Spektren beider Magnetisierungsrichtungen auf und die Asymmetrie dieses Peaks ist deutlich geringer (15 %) als in der in Abbildung 4.23 gezeigten Messung. Eine naheliegende Erklärung dafür ist ein im Vergleich zu Abbildung 4.23 größerer Azimutalwinkel φ zwischen den Magnetisierungen von Probe und Spitze, so dass die gemessenen Spektren eine Überlagerung der Majoritäts- und Minoritätszuständen der Probe darstellen und somit der nach Kim et al. scharfe resonante Minoritäts-Oberflächenzustand [Kim01] mit unterschiedlicher Ausprägung in beiden Spektren sichtbar ist. Eine mögliche Erklärung ist auch eine geringere Spinpolarisation der mit Kobalt beschichteten Spitze im Vergleich zur mit Eisen beschichteten Spitze. An der Fermikante ist der dI/dU -Wert des Spektrums der mit B bezeichneten Domäne höher als von Domäne A. Daher wird, wie in Abbildung 4.23, der Domäne B eine zur Magnetisierung der Spitze parallele Magnetisierung zugeordnet.

Die $dI/dU(U)$ Spektren der Monolage und Doppellage Kobalt sind in den Abbildungen 4.25 e) und f) dargestellt. Die Spektren der Monolage Co sehen den Spektren der Eisenoberfläche sehr ähnlich und zeigen einen scharfen Peak um $-0,1$ eV. Weiterhin besitzen sie den charakteristischen bcc Co Peak bei $+0,7$ eV. Die Energieabhängigkeit der Asymmetrie in der Monolage gemäß Gleichung 2.34 ist in Abbildung 4.25 h) gezeigt. Minima befinden sich bei $-0,37$ eV ($A = -24$ %) und $+0,27$ eV ($A = -20$ %). Knapp unterhalb der Fermi-Energie

bei $-0,1$ eV befindet sich ein Maximum von $A = 8,3$ % und an der Fermikante beträgt die Asymmetrie $5,2$ %. Das Maximum der Asymmetrie ist im Vergleich zur Eisenoberfläche etwas weiter von der Fermikante verschoben.

Die $dI/dU(U)$ -Spektren der Doppellage Co in Abbildung 4.25 f) weisen einen anderen Verlauf als die Spektren der Eisenoberfläche und der Monolage Kobalt auf. Das Spektrum der in Abbildung 4.25 b) hellen Inseln (Gebiet A) zeigt im Bereich besetzter Probenzustände eine Doppelpeakstruktur mit lokalen Maxima bei $-0,1$ eV und $-0,45$ eV mit annähernd gleicher Höhe. Im Spektrum der dunklen Inseln (Gebiet B) ist die Doppelpeakstruktur ebenfalls zu beobachten, allerdings sind die Höhen der beiden Maxima unterschiedlich. Das größere Maximum befindet sich bei $-0,41$ eV und das zweite, kleinere, Maximum ist bei $-0,1$ eV erkennbar. Beide Spektren haben bei $-0,7$ eV ein lokales Minimum. Im Bereich unbesetzter Probenzustände sind beide Spektren ähnlich dem spin-gemittelten Spektrum der Doppellage Co/Fe(110) (vgl. Kap. 4.3.3) und zeigen den charakteristischen Peak bei $+0,7$ eV.

Die Asymmetrie der Doppellage bcc-Co ist in Abbildung 4.25 i) dargestellt. Das Minimum der Asymmetrie beträgt $A = -38$ % bei $-0,7$ eV. Bei $-0,33$ eV befindet sich ein Maximum von $A = 13$ %. Zur Fermi-Kante hin kehrt sich die Asymmetrie ins negative um und beträgt an der Fermikante $A = -17$ %. Im Bereich unbesetzter Zustände bleibt die Asymmetrie negativ und zeigt bei $+0,3$ eV ein weiteres lokales Minimum von $A = -24$ %.

Ein Vergleich mit der Theorie [Izq00] in Abbildung 4.25 e) zeigt eine prinzipielle Übereinstimmung der gemessenen $dI/dU(U)$ -Spektren der Doppellage Kobalt mit der berechneten Zustandsdichte von bcc geordnetem Kobalt. Der Peak bei $-0,45$ eV stimmt in Theorie und Experiment überein, wohingegen der gemessene Peak bei $-0,1$ eV in der Rechnung bei $-0,22$ eV auftaucht. Diese Unterschiede mögen der Tatsache zugeschrieben werden, dass die Rechnung für bcc-Co auf der Cr(110)-Oberfläche durchgeführt wurde.

Aus der Messung der unbedeckten Fe(110)-Inseln ergab sich eine Spinpolarisation der unbedeckten Eisenoberfläche von 55 % (vgl. Abschnitt 4.5.1). Unter der Annahme, dass die Polarisation der Eiseninsel durch die Bedeckung mit Kobalt nicht verändert wurde, kann dieser Wert herangezogen werden, um aus den gemessenen Asymmetrien in der Monolage und Doppellage Kobalt einen Wert für die Spinpolarisation von bcc-Co abzuschätzen.

Aus der Asymmetrie der Fe(110)-Oberfläche in Abbildung 4.25 g) ergibt sich an der Fermikante eine effektive Spinpolarisation von

$$P_{eff} = A(E_F) = P_{Probe} \cdot P_{Spitze} = 15 \%. \quad (4.9)$$

Unter der Annahme von

$$P_{Probe} = P_{Fe} = 55 \% \quad (4.10)$$

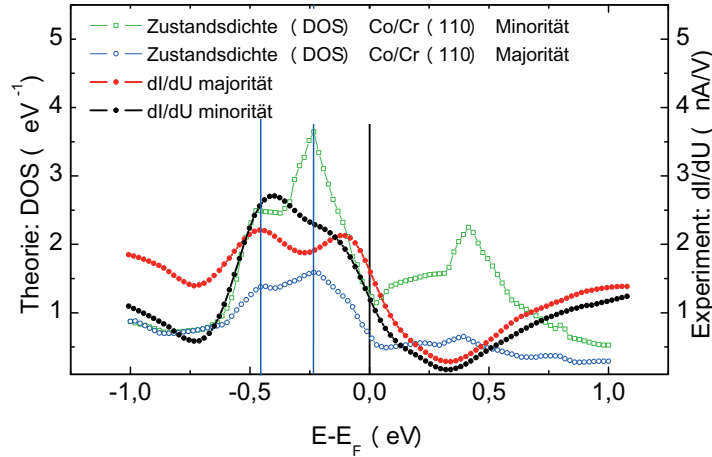


Abbildung 4.26: Vergleich der gemessenen $dI/dU(U)$ -Spektren der Doppellage Co/Fe(110) aus Abbildung 4.25 mit der berechneten spinaufgelösten Zustandsdichte von bcc Co/Cr(110) [Izq00]. Im Bereich besetzter Zustände stimmen die gemessenen Spektren recht gut mit der Zustandsdichterechnungen überein. Im Bereich unbesetzter Zustände tauchen die Maxima bei zueinander verschobenen Energien auf. Diese Unterschiede können durch das für die Rechnung zugrundeliegende Cr(110)-Substrat begründet sein. Eine Zustandsdichterechnung von Klautau und Eriksson für Co/Fe(100) zeigen in besserer Übereinstimmung mit der Messung das Maximum in der Zustandsdichte im Bereich unbesetzter Zustände bei einer höheren Energie [Kla05].

folgt

$$P_{Spitze} = \frac{0,15}{0,55} = 0,27. \quad (4.11)$$

Mit Gleichung 4.9 ergibt sich somit für die Spinpolarisation der bcc-geordneten Kobaltschicht an der Fermikante

$$P_{Probe}(E_F) = \frac{A(E_F)}{0,27} = A(E_F) \cdot 3,67. \quad (4.12)$$

Es muss jedoch beachtet werden, dass diese Methode zur Bestimmung der Spinpolarisation nur verwertbare Ergebnisse in der direkten Umgebung der Fermikante, d.h für $E \approx E_F \pm 0,2$ eV, liefert, da die Spinpolarisation der Spitze für Energien, weiter von der Fermikante entfernt, nicht explizit bekannt ist.

Die Asymmetrie der Monolage bcc-Co hat an der Fermikante das gleiche Vorzeichen wie die Asymmetrie der Eisenoberfläche, so dass auch die Spinpolarisation der Monolage bcc-Co das gleiche Vorzeichen hat wie die Spinpolarisation der Eisenoberfläche. In der Doppellage kehrt sich das Vorzeichen der Asymmetrie und somit auch der Spinpolarisation an der Fermikante um.

Da in den spinpolarisierten $dI/dU(U)$ -Spektren der Fe(110)-Oberfläche an der Fermikante ein resonanter Minoritätsoberflächenzustand dominiert, ist die Annahme einer negativen Spinpolarisation naheliegend. Somit ergibt sich mit Glei-

chung 4.12 für die Monolage Co/Fe(110) an der Fermikante eine negative Spinpolarisation von $P_{ML\ bcc\ Co} = -19\%$ und für die Doppellage eine positive Spinpolarisation von $P_{DL\ bcc\ Co} = +62\%$. Die mittels Andreev-Reflexionen ermittelte Spinpolarisation von hcp/fcc-Co beträgt $P = 45\%$ [Str01].

Bandstrukturrechnungen von bcc geordnetem Kobalt zeigen eine negative Spinpolarisation [Bag83, Izq00, Kla05, Lez07]. Allerdings muss beachtet werden, dass bei der Messung mittels STS nicht die vollständige Zustandsdichte reproduziert wird. Vielmehr tragen nur Zustände am Γ -Punkt, d.h. Zustände die einen zur Oberfläche senkrechten Impuls besitzen, bei. Zusätzlich ist das Tunnelmatrixelement für Zustände mit einer d_z -Symmetrie am größten, so dass hierdurch eine Auswahl der in $dI/dU(U)$ -Spektren repräsentierten Zuständen stattfindet. Auch im Fall von Fe(110) wird mittels spinpolarisierter Rastertunnelspektroskopie, aufgrund resonanter Oberflächenzustände, ein anderes Vorzeichen (negativ, d.h. minoritätsdomiert) der Spinpolarisation gemessen [Kim01], als aus der gemittelten Zustandsdichte [Gre07] (positiv, d.h. majoritätsdomiert) folgt. Ein solcher Effekt kann die gemessene positive Spinpolarisation der bcc-Co Doppellage auf Fe(110) erklären.

Als Ergebnis dieses Abschnitts kann die im Vergleich zur Spinpolarisation von hcp/fcc geordnetem Kobalt deutlich erhöhte Spinpolarisation der Doppellage bcc-Co angesehen werden. Dieser hohe Wert der Spinpolarisation von kubisch raumzentriertem Kobalt ist ein Beitrag zum Verständnis des von Yuasa et al. [Yua06] beobachteten hohen TMR-Wertes.

4.5.3 Abstandsabhängige spinpolarisierte Tunnelstromspektroskopie

Um die Abhängigkeit der Asymmetrie vom Abstand zwischen Probe und Spitze zu untersuchen, wurden spinpolarisierte Tunnelstromspektren in Abhängigkeit vom Tunnelstrom gemessen. Da der Tunnelstrom als sogenannter Setpoint den Abstand zwischen Probe und Spitze regelt, erfolgt hierdurch eine Variation des Abstandes. Für die Messung wurden zwei benachbarte Fe Inseln mit $\Theta_{Co} = 1,5$ ML Co Bedeckung, die eine zueinander antiparallele Magnetisierung besitzen (siehe Abbildung 4.27), ausgewählt. Auf diesen beiden Inseln wurden $I(U)$ Spektren auf einem 5×5 Raster (10.000 Einzelspektren je Bild) gemessen.

Aus Gleichung 2.10 ergibt sich für den Probe-Spitze-Abstand z bei gegebenen Tunnelstrom

$$z = -\frac{\ln(\frac{I}{K \cdot U})}{\kappa}. \quad (4.13)$$

Da die Spitze und die Probe mit Kobalt als oberste Schicht bedeckt sind, wird für beide eine Austrittsarbeit von $\Phi = 5$ eV angesetzt. Mit $m_e = 0,511$ MeV/c²

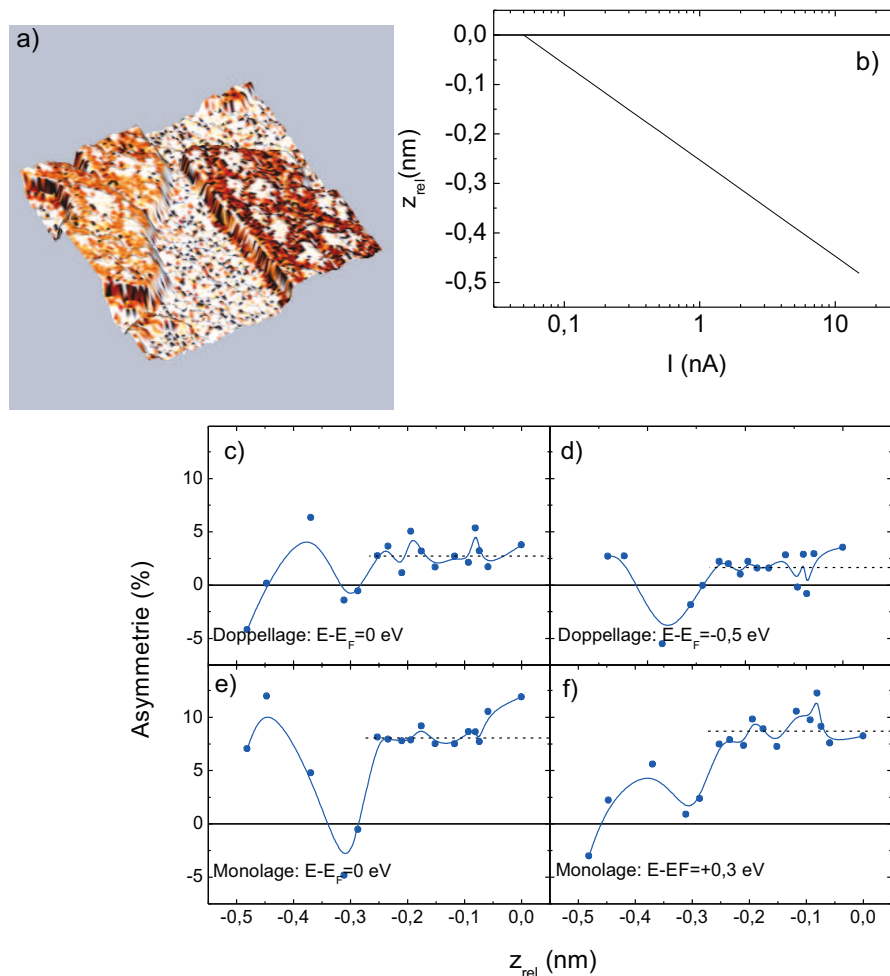


Abbildung 4.27: a) (400×400) nm² STM Aufnahme gemessen bei $U = 0,7$ V und $I = 2,5$ nA von $\Theta_{Co} = 1,5$ ML Co auf Fe(110)-Inseln. Die Spitze ist mit 16 ML Co auf 10 ML Au bedeckt, d.h. die Spitze ist sensitiv auf eine Magnetisierung in der Schichtebene. b) Tunnelleitfähigkeitsbild extrahiert aus dem spektroskopischen $I(U)$ Datensatz bei $U = 0,2$ V. Zwischen den beiden Fe-Inseln ist ein magnetischer Kontrast erkennbar. Auf diesen beiden Inseln wurde einen $I(U)$ -Spektren bei einer Variation des Probe-Spitze-Abstandes durchgeführt. b) Kalibration des Abstandes gegen den Tunnelstrom (logarithmische Auftragung). Für die Austrittsarbeit von Spitze und Probe wurden 5 eV angesetzt, was dem Wert der Austrittsarbeit von Co entspricht (vgl. Tabelle ??). c) Asymmetrie der Doppellage Co an der Fermikante. d) Asymmetrie der Doppellage Co 0,5 eV unterhalb der Fermikante e) und f) Asymmetrie der Monolage Co 0,0 eV bzw. 0,3 eV oberhalb der Fermi-Energie. Die gestrichelten Linien markieren den Mittelwert der Asymmetrie bei $|z_{rel}| < 0,25$ nm.

ergibt sich somit für die Zerfallskonstante κ nach Gleichung 2.4 ein Wert von

$$\kappa = 11,85 \text{ nm}^{-1}. \quad (4.14)$$

Da die Konstante K nicht explizit bekannt ist, kann der Abstand z nicht absolut bestimmt werden. Jedoch kann eine relative Änderung des Abstandes z_{rel} in Abhängigkeit vom Tunnelstrom ermittelt werden. Eine Kalibrationskurve für die Abstandsänderung zwischen Spitze und Probe in Abhängigkeit vom Tunnelstrom bei einer Gapspannung von $U = 0,7$ V ist in Abbildung 4.27 b) gezeigt. Der Tunnelstrom wurde zwischen $I = 0,05$ nA und $I = 15$ nA variiert. Aus Gleichung 4.13 ergibt sich daraus eine Variation des Abstandes von $\Delta z_{rel} = (0,480 \pm 0,005)$ nm.

Betrachtet man die Asymmetrie als Funktion des Abstandes (Abbildung 4.27 c) bis f)), fällt ein interessanter Effekt auf. In der Doppellage Co ist die Asymmetrie an der Fermikante ($E - E_F = 0$) bis zu einer Verringerung des Abstands um $z_{rel} = (-0,252 \pm 0,005)$ nm nahezu konstant bei $A = 3,0_{-1,9}^{+2,3}$ %. Bei weiterer Verringerung des Abstandes zeigt die Asymmetrie eine deutliche Variation mit zunehmenden $|z_{rel}|$. Bei $z_{rel} = (-0,31 \pm 0,005)$ nm weist die Asymmetrie ein lokales Minimum auf und beträgt $A = -1,5$ % und bei $z_{rel} = (-0,372 \pm 0,005)$ nm ein Maximum von $A = 6,4$ %. Bis $z_{rel} = -4,8$ nm kehrt sich die Asymmetrie wieder ins negative um.

In der Monolage sieht der Verlauf der Asymmetrie an der Fermikante ähnlich aus. Allerdings ist die Asymmetrie bei $z_{rel} = -4,8$ nm nicht negativ, sondern beträgt $A = 7,0$ %. Das Maximum liegt bei $z_{rel} = (-0,447 \pm 0,005)$ nm und beträgt $A = 11,9$ %. Bis $z_{rel} = (-0,311 \pm 0,0057)$ nm kehrt sich das Vorzeichen ins Negative um und die Asymmetrie zeigt wie in der Doppellage ein Minimum von $A = -4,8$ %. Ebenfalls wie in der Doppellage kehrt sich das Vorzeichen bis $z_{rel} = (-0,252 \pm 0,005)$ nm wieder ins Positive um und die Asymmetrie bleibt bis $z_{rel} = (-0,073 \pm 0,005)$ nm nahezu konstant bei $A = 8,1_{-0,6}^{+1,1}$ %. Bei einer weiteren Vergrößerung des Abstandes steigt die Asymmetrie auf $A = 11,9$ % bei $z_{rel} = 0 \pm 0,005$ nm.

Auch in der näheren Umgebung der Fermi-Energie zeigt die Asymmetrie bei einer Änderung des Abstandes von mehr als $z_{rel} = (-0,252 \pm 0,005)$ nm sowohl in der Doppellage (Abbildung 4.27 d) und in der Monolage (Abbildung 4.27 f) eine deutliche Schwankung.

Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten kann durch eine begrenzte Reichweite der beitragenden elektronischen Zustände der Spitze und der Probe gegeben sein. Wenn mindestens zwei Zustände mit zueinander unterschiedlichen Spinpolarisationen und Vakuumreichweiten zum Tunnelstrom beitragen, kann es zu einer alternierenden Vakuumspinpolarisation kommen und somit die beobachtete Variation der Asymmetrie erzeugen. Das bedeutet für die Anwendung, dass der messbare Widerstandseffekt bei einer Ummagnetisierung einer Elektrode (TMR) sehr stark vom Abstand der Tunnelelektroden zueinander abhängt.

Kapitel 5

Temperaturabhängiger SRT-Prozess von Fe/Mo(110)

Experimentell entdeckt wurde der Spinreorientierungsprozess (engl.: *Spin Reorientation Transition*, SRT) 1968 von Gradmann et al. an NiFe Schichten auf Cu(111) [Gra68]. Seit einiger Zeit ist der SRT erneut in den wissenschaftlichen Fokus gerückt [San99, Far98, San04, Jen06, vB06, Kuk07], da das Verständnis des SRTs Grundlage für die Entwicklung von Schichtsystemen mit senkrechter leichter Achse ist, welche von großer Bedeutung, u.a. für Sensoranwendungen sowie für die magnetische Speicherung von Daten, sind. So kann zum Beispiel die Speicherdichte einer Festplatte durch eine senkrechte Magnetisierung der Bits aufgrund der damit einhergehenden Reduzierung der Fläche je Bit im Vergleich zu Festplatten mit paralleler Magnetisierung erhöht werden (*perpendicular recording*).

Der SRT kann in dünnen magnetischen Filmen unter anderem durch eine Variation der Schichtdicke hervorgerufen werden (schichtdickenabhängiger SRT) [San99, Far98, Don99, All92]. Weiterhin kann durch eine Dotierung des magnetischen Materials mit Fremdatomen [Bae03], epitaktische Spannung im Film [San99, Far98], Variation Materialzusammensetzung [Dit98] sowie durch die Temperatur [All92, vB06, Pap90, Sel01, Kuk07] eine Reorientierung der leichten Achse ausgelöst werden. Kukunin et al. [Kuk07] beobachteten an Schichten aus 1,5 ML Fe auf Mo(110) einen SRT in der Doppellage Fe mit einem kontinuierlichen Rückgang der Asymmetrie von $T = 5$ K bis zum SRT bei einer Übergangstemperatur von $T_{SRT} \approx 13$ K. Experimente auf der Doppellage Fe/W(110) haben eine Abhängigkeit der SRT-Temperatur T_{SRT} von der Größe der Fe-Doppellagenstruktur gezeigt [vB06].

Im Folgenden wird, ausgehend von Vorarbeiten von A. Kukunin et al. [Kuk07], der temperaturabhängige SRT der Doppellage und der Monolage Fe/Mo(110), untersucht. Nach Kukunin et al. dreht die bei $T = 5$ K senkrechte (d.h. entlang [110]) leichte magnetische Achse der Doppellage Fe/Mo(110) bei Erhöhung der Temperatur bis 20 K in die [001]-Achse parallel zur Oberfläche. Dies ist in Abbildung 5.1 schematisch skizziert. Zur Untersuchung des temperaturabhängigen SRT in der Doppellage Fe/Mo(110) wurden mit dem Tieftemperatur-

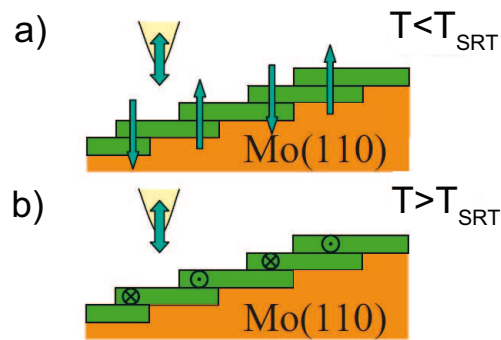


Abbildung 5.1: Schematische Skizze zur Illustration der relativen Ausrichtung der Magnetisierungen in den Fe Doppellagenstreifen und der Spitzsensitivität für verschiedene Temperaturen. a) senkrechte Magnetisierung der Probe bei $T < T_{SRT}$ b) ebene Magnetisierung der Probe bei $T > T_{SRT}$.

Rastertunnelmikroskop STM/STS-Messungen bei systematischer Variation der Proben­temperatur durchgeführt.

Für die Proben wurden 1,5 ML Fe auf dem Mo(110)-Einkristall bei Raumtemperatur deponiert und anschließend bei 480 K bis 600 K getempert. Auf diese Weise entstehen eine geschlossene Monolage, sowie eine temperaturabhängige Doppellagenstruktur. Die Doppellage zeigt dabei, wie bereits in Kapitel 4.1.2 diskutiert, Versetzungslinien entlang der (001)-Richtung. Zusätzlich bilden sich Inseln der dritten Lage mit dem ebenfalls bekannten Versetzungsnetzwerk (vgl. Kapitel 4.1.2) auf den Versetzungslinien der Doppellage aus.

Die Wolframspitzen wurden mit 6 ML Co/10 ML Au/W beschichtet und sind, wie in Kap. 3.6.1 beschrieben, sensitiv auf die senkrechte [110]-Komponente der Probenmagnetisierung \vec{M} .

5.1 Temperaturabhängige STS-Messungen

Bei der Durchführung der Experimente hat es sich als praktikabel erwiesen, die Messungen bei tiefen Temperaturen ($T = 5$ K) zu beginnen und die Temperatur in Schritten von ca. einem Kelvin zu erhöhen. Hierzu wurde die Temperatur der Probenaufnahme des STMs, und somit die Temperatur der Probe, mittels der Heizkeramik mit einer Genauigkeit von $\Delta T = \pm 0,1$ K variiert. Während der Aufnahme eines STM/STS-Bildes wurde die Temperatur konstant gehalten. Auf diese Weise ist es möglich, temperaturabhängige Serienmessungen von $T = 5$ K bis $T = 20$ K Proben­temperatur ohne eine Unterbrechung des Tunnelkontaktes durchzuführen, so dass der Übergang der Magnetisierung aus der senkrechten [110] in die ebene [001] Richtung beobachtet werden kann. Zu-

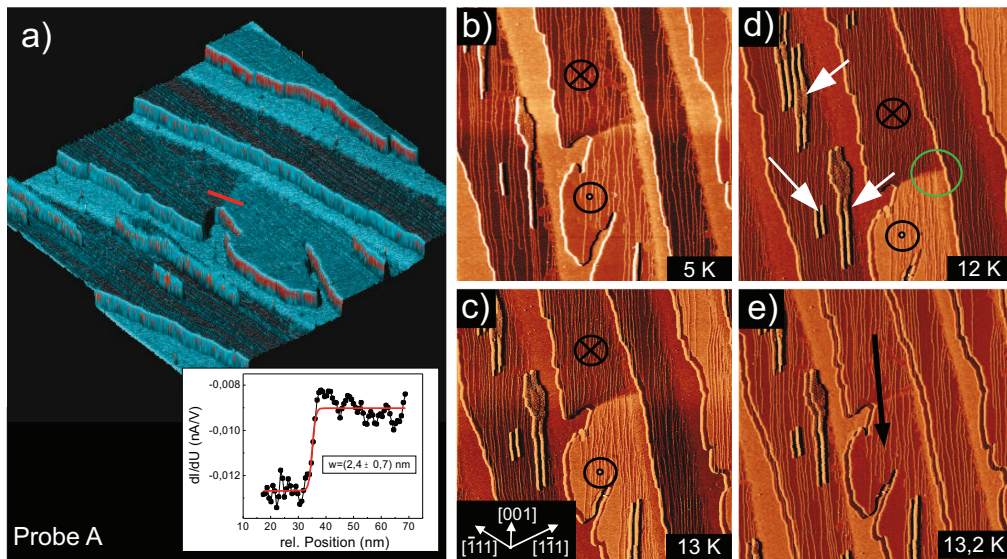


Abbildung 5.2: a) 3-dimensionale Darstellung eines $(600 \times 600) \text{ nm}^2$ STM-Scans mit der spinpolarisierten differentiellen dI/dU -Leitfähigkeitskarte als Textur. Die Probe ist mit 1,5 ML Fe bei Raumtemperatur bedampft und anschliessend bei 600 K getempert. Gemessen wurde bei $U = -0,7 \text{ V}$, $I = 2,5 \text{ nA}$ und $T = 5 \text{ K}$ Probenstemperatur. Die Fe-Doppellagenstreifen zeigen einen deutlichen magnetischen Kontrast sowie Versetzungslinien. Eine Domänenwand ist gut erkennbar. Aus dem dI/dU Profil entlang der roten Linie folgt eine Domänenwandbreite von $w = 2,4 \pm 0,7 \text{ nm}$. Abbildungen b-e) zeigen eine Sequenz von dI/dU -Bildern auf der gleichen Probenstelle wie a) aufgenommen bei schrittweiser Erhöhung der Probenstemperatur. Der magnetische Kontrast bleibt bis zu einer Temperatur von 13 K deutlich sichtbar und verschwindet bei 13,2 K. In den Bildern d) - e) sind Doppelspitzenartefakte zu erkennen (markiert durch weiße Pfeile in d)). In den Bildern c) und d) ist auch in der Monolage ein magnetischer Kontrast sowie eine Domänenwand erkennbar (markiert mit einem grünen Kreis in d)). Bei $T = 12 \text{ K}$ beträgt die Breite dieser Domänenwand in der Monolage $w_{ML} = (1,0 \pm 0,5) \text{ nm}$.

sätzlich zur Messung der Topographie und der spinpolarisierten differentiellen dI/dU Tunnelleitfähigkeitskarten wurden zur Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der spinpolarisierten elektronischen Struktur differentielle $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeitsspektren ermittelt.

In Abbildung 5.2 a) ist eine 3-dimensionale Darstellung einer STM Aufnahme mit der spinpolarisierten (sp)- dI/dU -Karte, gemessen bei $U = -0,7 \text{ V}$, als Textur gezeigt. Die geschlossene erste Monolage und die Doppellagenstreifen sind gut erkennbar. In der Doppellage (DL) ist ein deutlicher magnetischer Kontrast zu sehen. In der Monolage (ML) tritt, wie in Abbildung 5.2 c) und d) zu sehen, ebenfalls ein magnetischer Kontrast auf. In dem zentralen Doppellagenstreifen ist deutlich eine scharfe Domänenwand entlang $[1\bar{1}1]$ zu sehen. Im Folgenden wird diese Probe als *Probe A* bezeichnet.

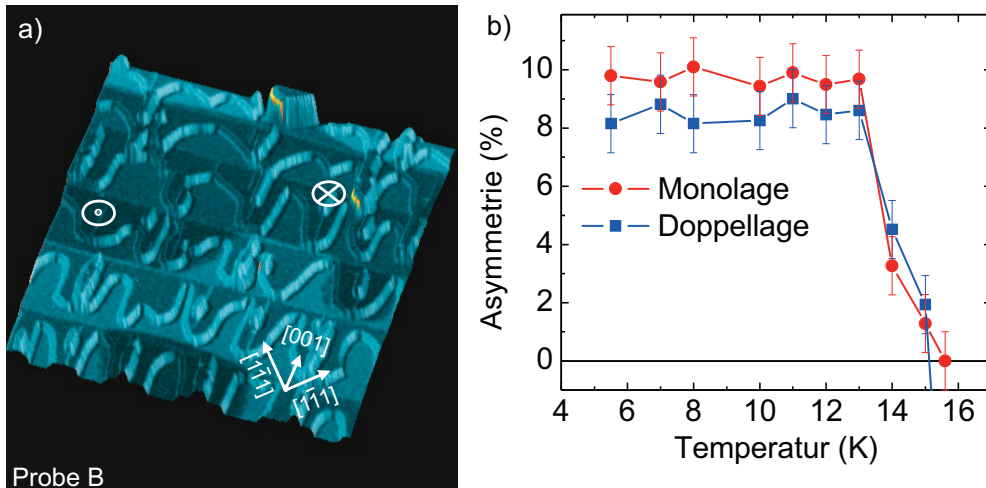


Abbildung 5.3: a) 3-dimensionale Darstellung einer $350 \times 350 \text{ nm}^2$ STM Aufnahme für $\Theta = 1,5$ ML Fe, deponiert bei RT und getempert bei 480 K ($U = -0,3$ V, $I = 2,5$ nA, $T = 5,5$ K). Das Eisen hat eine geschlossene erste Monolage sowie Doppellagenstrukturen an den Stufenkanten des Substrat gebildet. In der Doppellage sind einige Versetzungslinien entlang [001] erkennbar. Auf diesen Versetzungslinien haben sich teilweise Inseln der dritten Lage gebildet und zeigen das bereits bekannte Versetzungsnetzwerk. Die dI/dU -Aufnahme, dargestellt als Textur, zeigt deutliche magnetische Kontraste in der ersten und zweiten Monolage. Bei genauem Hinsehen ist auch ein schwacher magnetischer Kontrast in der dritten Lage erkennbar. c) Temperaturabhängiger Verlauf der Asymmetrie, sowohl in der DL als in der ML Fe. In beiden Lagen bleibt die Asymmetrie bis $T = 13$ K konstant und fällt bis $T = 15$ K auf nahezu Null.

Die bei verschiedenen Temperaturen in diesen Probenausschnitt aufgenommenen sp - dI/dU -Bilder ($T = 5$ K, $T = 12$ K, $T = 13$ K und $T = 13,2$ K) sind in den Abbildungen 5.2 b-e) gezeigt. Bis $T = 13$ K (Abbildung 5.2 d) bleibt der magnetische Kontrast deutlich sichtbar und ist bei $T = 13,2$ K (Abbildung 5.2 e) verschwunden. In Übereinstimmung mit Kukunin et al. [Kuk07] wird dieses Verschwinden des magnetischen Kontrasts durch die Reorientierung der Magnetisierung \vec{M} aus der senkrechten [110]-Richtung in die Schichtebene ([001]) erklärt. Die Position der Domänenwand in der Doppellage wird während des Erwärmens durch die Einbuchtung an der Außenkante des Doppellagenstreifens fixiert.

In Abbildung 5.3 a) ist eine weitere Probe (im Folgenden bezeichnet als *Probe B*) mit einer Bedeckung von $\Theta = 1,5$ ML Fe gezeigt. Im Unterschied zu der in Abbildung 5.2 gezeigten Probe wurde diese bei einer niedrigeren Temperatur von $T = 480$ K statt $T = 600$ K getempert. Die Doppellage Fe bildet bei dieser Temperatur keine glatten Streifen entlang der Substratstufenkanten aus, sondern zeigt eine inselartige Struktur an den Stufenkanten. Auf den Versetzungslinien der DL sind wie zuvor Inseln der dritten Lage zu sehen.

5.1.1 Temperaturverlauf der Asymmetrie

Die Temperaturabhängigkeit der Asymmetrie der Doppellage und der Monolage von Probe B ist in Abbildung 5.3 b) gezeigt. In beiden Lagen ist die Asymmetrie bis ca. 13 K Proben­temperatur konstant und fällt oberhalb von $T = 13$ K bis $T = 15$ K auf nahezu null ab.

Die Temperaturabhängigkeit der differentiellen dI/dU Tunnelleitfähigkeiten von Probe A ist in Abbildung 5.4 a) dargestellt. Von 5 K bis 8 K bleiben die differentiellen Tunnelleitfähigkeiten konstant bei 0,22 nA/V ($\uparrow\uparrow$, rote Kurve) (bzw. 0,07 nA/V ($\uparrow\downarrow$, schwarze Kurve)) und steigen oberhalb von 8 K mit zunehmender Temperatur auf 0,71 nA/V $\uparrow\uparrow$ bzw. 0,57 nA/V $\uparrow\downarrow$ ($T = 12$ K) an. Spingemittelt bedeutet dies einen Anstieg um das dreifache. Die spingemittelte differentielle Tunnelleitfähigkeit entspricht einer Messung mit einer unmagnetischen Tunnel­spitze, wie zum Beispiel mit einer unbeschichteten Wolframspitze. Auffällig ist das Maximum der gemessenen differentiellen Leitfähigkeit von $dI/dU = (0,029 \pm 0,002)$ nA/V bei $T = 13,8$ K, nachdem diese zunächst bei $T = 13,6$ K minimal war. Der dI/dU -Wert bei 13,8 K ist ca. 50 % höher als unterhalb von T_{SRT} ($dI/dU \approx (0,019 \pm 0,002)$ nA/V (siehe Abbildung 5.4 a)).

Aufgrund des Anstiegs der dI/dU -Werte zwischen $T = 8$ K und $T = 12$ K fällt in diesem Temperaturbereich die Asymmetrie, da diese auf die Summe der differentiellen Tunnelleitfähigkeiten für jeweils ($\uparrow\uparrow$) und ($\uparrow\downarrow$) normiert wird. Bei der Berechnung der Asymmetrie gemäß Gleichung 2.34 wird jedoch angenommen, dass die spingemittelte differentielle Tunnelleitfähigkeit konstant ist und sich lediglich die Differenz zwischen den differentiellen Tunnelleitfähigkeiten von ($\uparrow\uparrow$) und ($\uparrow\downarrow$) verändert. Wie in Abbildung 5.4 b) ersichtlich, bleibt diese Differenz (rote Kurve) auch während des Anstiegs des dI/dU -Wertes von $T = 5$ K bis $T = 13,2$ K konstant und fällt erst oberhalb von $T = 13,2$ K abrupt auf null. Dieses Verhalten der Differenz entspricht dem Verhalten der Asymmetrie von Probe B, wohingegen die Asymmetrie ab $T = 8$ K kontinuierlich fällt.

Aus dem Vergleich beider Ergebnisse kann man schließen, dass nicht die Asymmetrie proportional zur senkrechten Magnetisierungskomponente ist, sondern eher die Differenz der differentiellen Tunnelleitfähigkeiten.

Eine mögliche Erklärung für den beobachteten Anstieg der Tunnelleitfähigkeit ist ein Wechsel der leichten Achse aus der senkrechten [110] Richtung in die Ebene bei unveränderter Magnetisierungsrichtung \vec{M} . Das bedeutet, im Temperaturbereich von $T = 5$ K bis $T = (9 \pm 1)$ K sind sowohl die leichte Achse als auch die Magnetisierung senkrecht zur Probenoberfläche und oberhalb von $T = (9 \pm 1)$ K dreht sich die leichte Achse in die Ebene, während die Magnetisierung in der nun harten Achse senkrecht zur Oberfläche stehen bleibt. Erst bei weiterer Erhöhung der Temperatur findet der SRT statt und die Magnetisierung wird aus diesem metastabilen Zustand herausgedreht und folgt der neuen leichten Achse entlang [001].

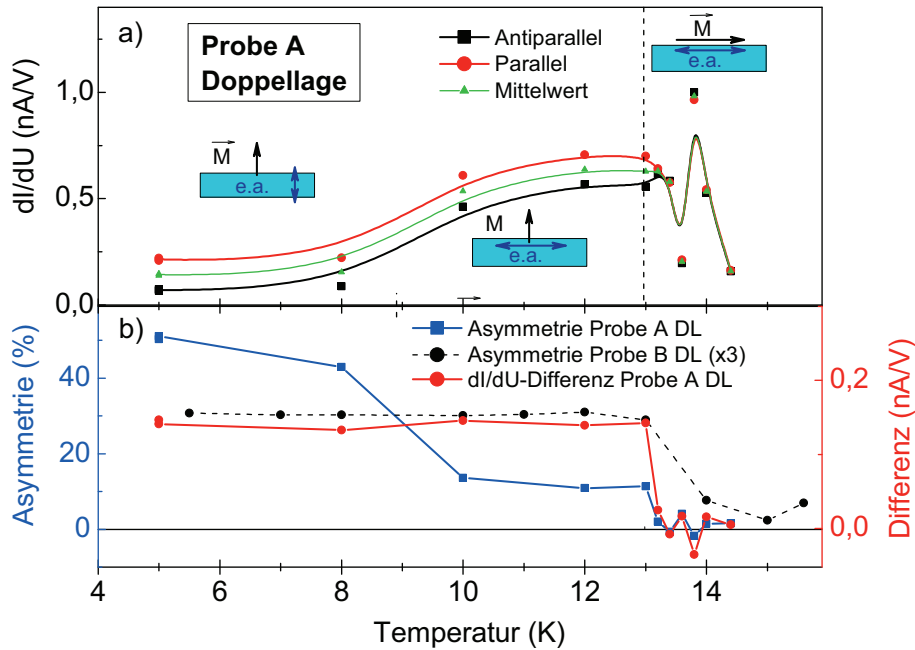


Abbildung 5.4: Differentielle Tunnelleitfähigkeiten von Probe A, gemessen bei $U = -0,7$ eV der parallel (rot) und antiparallel (schwarz) zur Spitze ausgerichteten magnetischen Domänen sowie die spingemittelte Tunnelleitfähigkeit (grün). Die Tunnelleitfähigkeit steigt von 8 K nach 10 K um das ca. dreifache an und bleibt bis 13,2 K konstant. In diesem Temperaturbereich fällt die Asymmetrie aufgrund dieses Anstiegs ab und deutet somit eine Abnahme des magnetischen Kontrastes an. Allerdings bleibt die Differenz der Tunnelleitfähigkeiten während des Anstiegs des dI/dU -Wertes konstant und fällt erst oberhalb von $T = 13,2$ K auf Null. Der Verlauf der Differenz entspricht dem Verhalten der Asymmetrie von Probe B. Der Anstieg der Tunnelleitfähigkeit wird auf einen Wechsel der leichten Achse (engl.: *easy axis*, e.a.) in die Schichtebene zurückgeführt. Die Magnetisierung der Probe bleibt währenddessen in der Schichtnormalen stehen und dreht erst bei 13,2 K in die Ebene, wobei auch die Differenz der Tunnelleitfähigkeiten (rot) auf Null geht. Auffällig ist das Maximum der differentiellen Leitfähigkeit bei 13,8 K, nachdem diese zunächst bei 13,6 K minimal war.

Einen ähnlichen Effekt der Veränderung der differentiellen Tunnelleitfähigkeit, wenn die Magnetisierung in einer harten Achse steht, wurde von M. Bode et al. [Bod02b] auf der Doppellage Fe/W(110) beobachtet. Bode et al. beobachteten eine leichte Absenkung der Tunnelleitfähigkeit bei 0,09 eV oberhalb der Fermikante innerhalb einer, entlang einer magnetisch schweren Achse magnetisierten, Domänenwand. Erklärt wird dieser Effekt von Bode et al. anhand einer DFT-Bandstrukturechnung, wobei die Bahn-Kopplung mittels der lokalen Dichtenäherung (.: emphLocal Density Approximation, LDA) berücksichtigt wurde. In der Nähe des Γ -Punktes kreuzen sich an der Fermikante drei Minoritätsbänder (d_{xy} , d_{xz} und d_{z^2}) und aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung kommt es an diesem Punkt zur einer Mischung dieser drei Orbitale, was zu einer Hy-

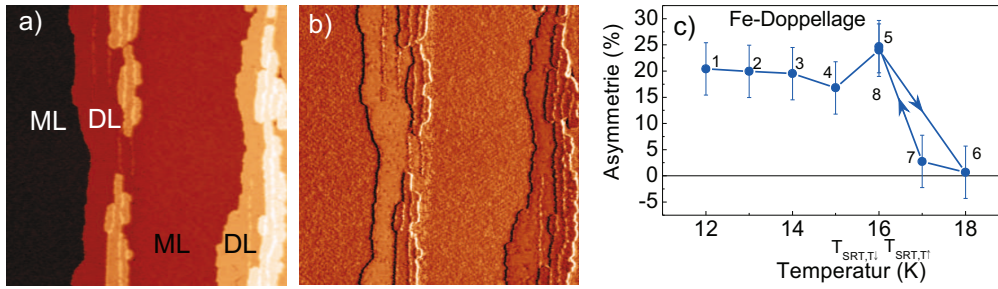


Abbildung 5.5: a) $(100 \times 100) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf 1,5 ML Fe/Mo(110). Die geschlossene erste Monolage sowie zwei Doppellagenstreifen sind erkennbar und als ML bzw. DL gekennzeichnet. Auf den DL-Streifen ist auch die dritte Lage erkennbar. b) dI/dU -Karte gemessen mit $U = -0,1 \text{ V}$ und $I = 2,5 \text{ nA}$ bei $T = 10 \text{ K}$ Proben-temperatur. Zwischen den beiden DL-Streifen ist deutlich ein magnetischer Kontrast erkennbar, während in der Monolage kein signifikanter Kontrast zu beobachten ist. c) Temperaturverlauf der Asymmetrie in der Doppellage. Das Umschwenken der Magnetisierung aus der Senkrechten in die Ebene bei einer Reorientierungstemperatur $T_{SRT, T \uparrow}$ oberhalb von 16 K Proben-temperatur statt (von Punkt 5 nach Punkt 6). Das Zurückdrehen der Magnetisierung in die Senkrechte findet von Punkt 7 nach Punkt 8 statt, nachdem die Asymmetrie unter Verringerung der Temperatur (von Punkt 6 nach 7) zunächst nahezu konstant blieb.

bridisationslücke zwischen dem d_{z^2} und d_{xy} bzw. d_{xz} Orbital führt. Allerdings tritt diese Hybridisierung der Zustände nur im Fall einer Magnetisierung entlang einer harten Achse auf. Das Auftreten dieser Lücke beeinflusst die Gruppengeschwindigkeit des d_{z^2} Zustandes und, da der Beitrag eines Zustandes zur Vakuump LDOS (und somit zur differentiellen Tunnelleitfähigkeit) unter anderem mit der inversen Gruppengeschwindigkeit gewichtet wird, ist der Beitrag dieses Zustands zur Vakuump LDOS abhängig von der relativen Ausrichtung der Magnetisierung zur leichten Achse. Dies führt zu dem beobachteten Effekt bei Fe/W(110) [Bod02b]. Die hier beobachtete Erhöhung der differentiellen Tunnelleitfähigkeit wird wahrscheinlich ebenfalls durch eine solche, von der relativen Ausrichtung der Magnetisierung zur magnetisch leichten Achse, Veränderung der Vakuump LDOS hervorgerufen.

Eine weitere Probe mit 1,5 ML Fe/Mo(110) weist eine Spinreorientierung oberhalb von $T = 13,2 \text{ K}$ auf. Bei dieser in Abbildung 5.5 gezeigten Probe verschwindet der magnetische Kontrast in der Doppellage erst oberhalb einer Proben-temperatur von $T = 16 \text{ K}$. Diese hohe Reorientierungstemperatur kann durch Einflüsse, wie zum Beispiel eine geringe Kohlenstoffverunreinigung der Mo-Oberfläche, welche im Rahmen des Auflösungsvermögens des LEED nicht ausgeschlossen werden kann, begründet sein. Interessant an dieser Messreihe ist allerdings die beobachtete Hysterese des SRT-Prozesses. Wie der Temperaturverlauf der Asymmetrie (Abbildung 5.5 c) zeigt, findet das Umschwenken der Magnetisierung aus der Senkrechten in die Ebene bei einer Reorientierungstem-

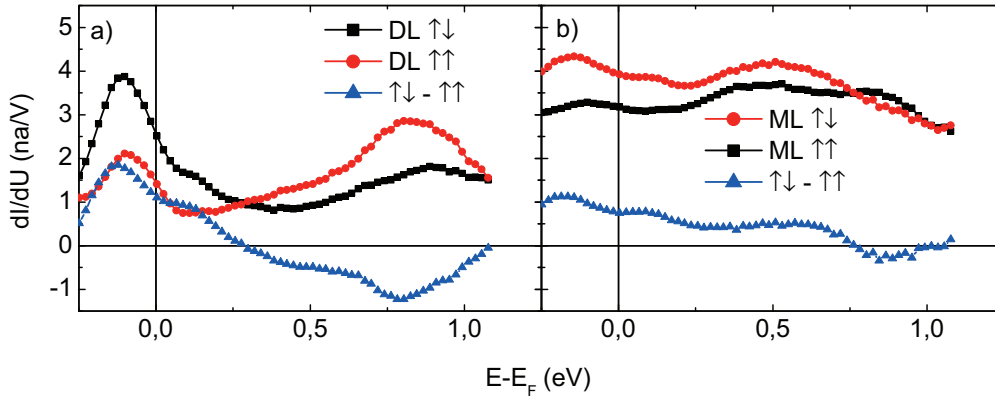


Abbildung 5.6: $dI/dU(U)$ -Spektren der Doppellage (a) und Monolage (b) Fe/Mo(110). Die Spektren wurden mittels $I(U)$ -Grid-Spektroskopie bei $T = 7$ K Proben­temperatur gemessen und anschließend differenziert und gemittelt (Stabilisie­rungsparameter: $U = -0,7$ V und $I = 2,5$ nA).

peratur $T_{SRT, T\uparrow}$ oberhalb von 16 K Proben­temperatur statt. Bei einer anschlies­senden Verringerung der Proben­temperatur bleibt die Asymmetrie zunächst bis $T = 17$ K nahezu null und steigt erst bei weiterer Verringerung der Temperatur wieder an und erreicht den gleichen Wert wie vor der ersten Spinreorien­tierung.

5.1.2 Spektroskopie

Parallel zur Messung der Tunnelleitfähigkeitskarten auf Probe B wurden auf einem 4×4 -Raster $I(U)$ Tunnelstromspektren gemessen. Diese Spektren wurden nach der Messung innerhalb der Domänen gemittelt und differenziert. Die bei 7 K Proben­temperatur gemessenen Spektren der Doppellage und der Monolage Fe/Mo(110) sind in Abbildung 5.6 gezeigt. Gemessen wurden die Spektren im Intervall $-1 \text{ V} < (E - E_F) < +1 \text{ V}$. Da im Bereich negativer Energien die Spektren durch unbesetzte Spitzenzustände beeinflusst sind, wird die Diskussion der Spektren im Folgenden auf den positiven Energiebereich (d.h. unbesetzte Proben­zustände, $-0,25 \text{ V} < (E - E_F) < +1 \text{ V}$) begrenzt. Die Zuordnung zu paralleler ($\uparrow\uparrow$) und antiparalleler ($\uparrow\downarrow$) Magnetisierung zwischen Probe und Spitze erfolgt anhand der Doppellage-Spektren in Analogie zu den von Prokop et al. gemessenen Spektren der DL Fe/Mo(110) [Pro06].

Sowohl in der Doppellage (Abbildung 5.6 a)) als in in der Monolage (Abbil­dung 5.6 b)) sind deutliche Unterschiede zwischen den Spektren für parallele (rote Linie) und antiparallele (schwarze Linie) relative Ausrichtung der Ma­gnetisierungen von Probe und Spitze erkennbar. In beiden Lagen ist ein spin­aufgespaltener Peak bei ca. $-0,1$ eV mit unterschiedlicher Höhe für beide Aus­richtungen sichtbar, der von Prokop et al. als ein besetzter Zustand der Probe

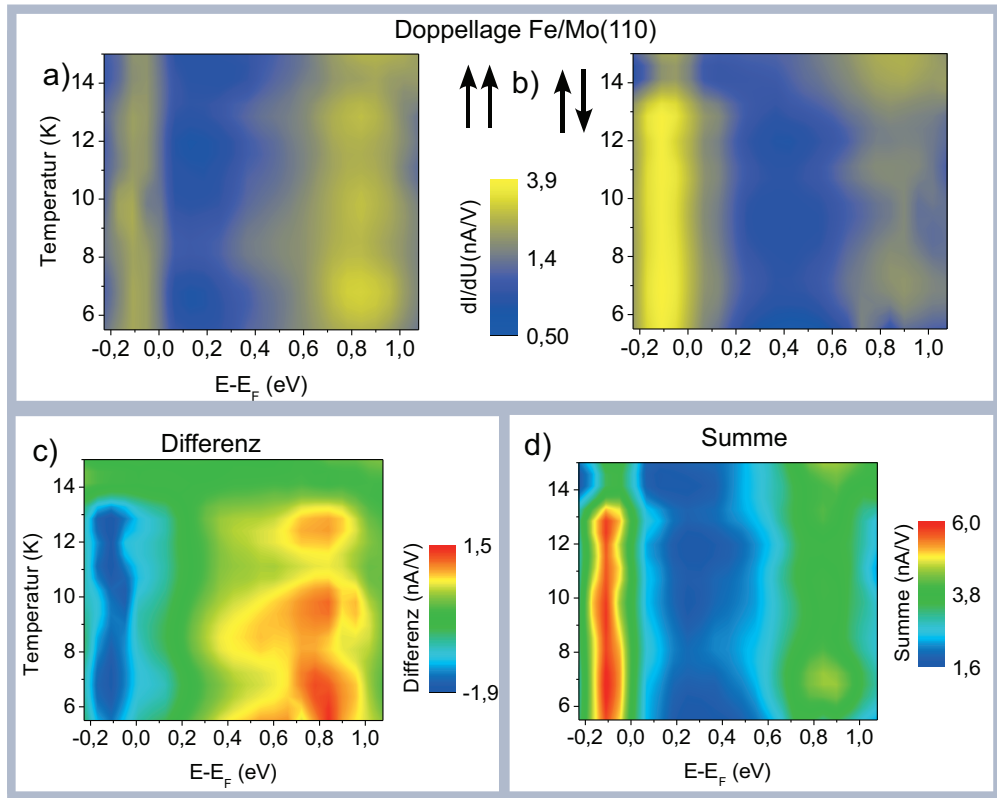


Abbildung 5.7: a) Farbwertkarte der auf der parallel zur Spitze magnetisierten Doppellage Fe/Mo(110) gemessenen Spektren. Die Stabilisierungsparameter zur Messung der Spektren sind $U_{Gap} = -0,7$ V und $I_T = 2,5$ nA. b) Farbwertkarte der auf der antiparallel zur Spitze magnetisierten Doppellage Fe/Mo(110) gemessenen Spektren. c) Die Differenz der Doppellagenspektren ($\uparrow\uparrow - \uparrow\downarrow$) zeigt bei für die beiden Peaks $-0,15$ eV und $+0,8$ eV einen Unterschied der dI/dU -Werte und zeigt somit eine unterschiedliche senkrechte Magnetisierung der beiden Domänen bis 13 K auf. Oberhalb von 13 K ist zwischen den Spektren der beiden Domänen kein Unterschied mehr erkennbar. d) In der Summe der Spektren ist nur für den Peak bei $-0,15$ eV eine signifikante Abnahme bei 13 K zu beobachten.

identifiziert wurde [Pro06]. Die Spinaufspaltung dieses Peaks beträgt in der Monolage $0,04$ eV und in der Doppellage $0,01$ eV.

Der Peak bei $+0,82$ eV in der parallel magnetisierten ($\uparrow\uparrow$) Doppellage ist für eine antiparallele Ausrichtung um $(0,06 \pm 0,01)$ eV, bei gleichzeitiger starker Abnahme der Peakhöhe, zu höheren Energien verschoben. Weiterhin kann im Spektrum für die antiparallele Ausrichtung ein Peak bei $+0,13$ eV identifiziert werden, welcher bei paralleler Magnetisierung unterdrückt ist. In der Monolage ist dieser Peak bei antiparalleler Ausrichtung ebenfalls sichtbar. Weiterhin zeigt die Monolage für beide Magnetisierungsausrichtungen einen breiten Peak um $+0,5$ eV, wobei der dI/dU -Wert für die antiparallele Ausrichtung höher ist. Bei

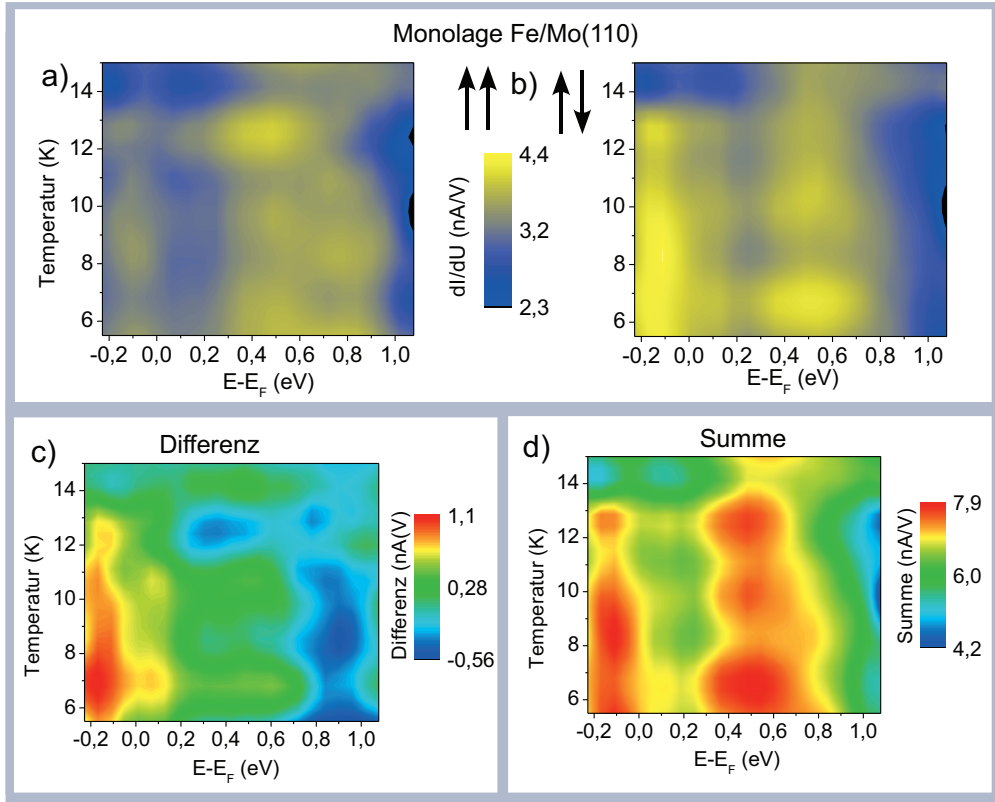


Abbildung 5.8: a) Farbwertkarte der auf der parallel zur Spitze magnetisierten Monolage Fe/Mo(110) gemessenen Spektren. Die Stabilisierungsparameter zur Messung der Spektren sind $U_{Gap} = -0,7$ V und $I_T = 2,5$ nA. b) Farbwertkarte der auf der antiparallel zur Spitze magnetisierten Monolage Fe/Mo(110) gemessenen Spektren. c) Die Differenz der Peakhöhen ($\uparrow\uparrow - \uparrow\downarrow$) zeigt wie auch in der Doppellage eine Abnahme oberhalb von 12 K. d) Interessanterweise zeigt die Summe der Peakhöhen ebenfalls eine Veränderung der Peakhöhen oberhalb von 13 K.

paralleler Ausrichtung zeigt das ML-Spektrum, ähnlich wie in der Doppellage, einen Peak bei $+0,8$ eV, welcher bei antiparalleler Ausrichtung unterdrückt ist. Die Differenz zwischen den Spektren ist für beide Lagen als blaue Linie geplottet. Das Maximum der Differenz liegt in der Doppellage bei $-0,13$ eV und beträgt $1,86$ nA/V, was einer Asymmetrie von etwa 32 % entspricht.

Der temperaturabhängige Verlauf der in der Doppellage gemessenen Spektren ist in Abbildung 5.7 a) ($\uparrow\uparrow$) und b) ($\uparrow\downarrow$) gezeigt, wobei die dI/dU -Werte der Spektren in Farbwerte übersetzt sind. Der Peak um $-0,1$ eV ist über den gesamten Temperaturbereich sichtbar, wobei die Peakhöhe für die antiparallele Ausrichtung bei etwa $T = 14$ K abnimmt. Der Peak bei $+0,8$ eV ist im Falle der parallelen Magnetisierung nahezu konstant, während bei der antiparallelen Magnetisierung die Höhe dieses Peaks oberhalb von $T = 13$ K leicht zunimmt. Die

Peakhöhendifferenz der Spektren ist in Abbildung 5.7 c) gezeigt. Für beide Peaks ist die Abnahme der Differenz oberhalb von 13 K Proben temperatur deutlich ersichtlich. Diese Abnahme der Differenz findet synchron mit dem Verschwinden des magnetischen Kontrastes, wie in Abschnitt 5.1.1 beobachtet, statt. Die Summe der Spektren beider Magnetisierungsrichtungen entspricht der spingemittelten differentiellen Tunnelleitfähigkeit. Für das gemittelte Signal erwartet man keine Abhängigkeit von der Magnetisierungsrichtung, da der Einfluss entsprechend Gleichung 2.32 herausfällt. Bode et al. konnten eine lineare Abhängigkeit der Peakhöhen vom Abstand der Tunnelspitze zur Probe zeigen [Bod02a], so dass auch die etwas unterschiedlichen Stabilisierungsbedingungen vor Aufnahme der Spektren in den beiden Domänen durch die Mittelung herausfallen sollten. Der Peak bei $-0,1$ eV nimmt mit der Reorientierung ab und ist bei Temperaturen oberhalb der Reorientierungstemperatur nicht mehr sichtbar. Der Höhe des Peaks bei $+0,8$ eV bleibt über den gesamten gemessenen Temperaturbereich konstant. Weiterhin werden die Ab- bzw. Zunahmen der Peakhöhen nur für die antiparallele Magnetisierung beobachtet, während im Fall der parallelen Magnetisierung die dI/dU -Werte nahezu konstant sind. Trotzdem kann in der Summe (Abbildung 5.7 d) eine Veränderung der elektronischen Struktur beobachtet werden.

In der Monolage Fe verhalten sich die Spektren ungefähr ähnlich wie diejenigen der Doppellage. Abbildung 5.8 zeigt die Temperaturabhängigkeit der Peakhöhen und ihre Differenz in der Monolage. Die Differenz der Peakhöhen ($\uparrow\uparrow - \uparrow\downarrow$) zeigt, wie auch in der Doppellage, eine Abnahme der Differenz oberhalb von 12 K. Im Unterschied zu den Spektren der Doppellage weist der Peak bei $-0,15$ eV in der Monolage für beide Magnetisierungsrichtungen eine Abnahme des dI/dU -Wertes oberhalb von 13 K auf. In der Summe der Spektren ist für den Peak bei $+0,5$ eV oberhalb von 13 K eine Zunahme der dI/dU -Werte zu beobachten. Analog zur Diskussion des beobachteten Anstiegs der spingemittelten differentiellen Tunnelleitfähigkeit der Doppellage von Probe A, deutet dies eine Ausrichtung der Magnetisierung der Monolage entlang einer harten Achse an.

5.1.3 Domänenwandbreiten

Die Breite w einer Domänenwand kann gemäß der mikromagnetischen Theorie durch einen Fit mit der Gleichung

$$y(x) = y_0 + y_{sp} \tanh[2(x - x_0)/w] \quad (5.1)$$

an das dI/dU -Profil der Domänenwand bestimmt werden [Bod03, Pro05]. Dabei ist $y(x)$ das dI/dU Signal an der Position x und x_0 die Position der Domänenwand. Die Parameter y_0 und y_{sp} beschreiben die spingemittelte bzw. spinpolarierte differentielle Tunnelleitfähigkeit.

Abbildung 5.9 a) zeigt eine differentielle Tunnelleitfähigkeitskarte von Probe A

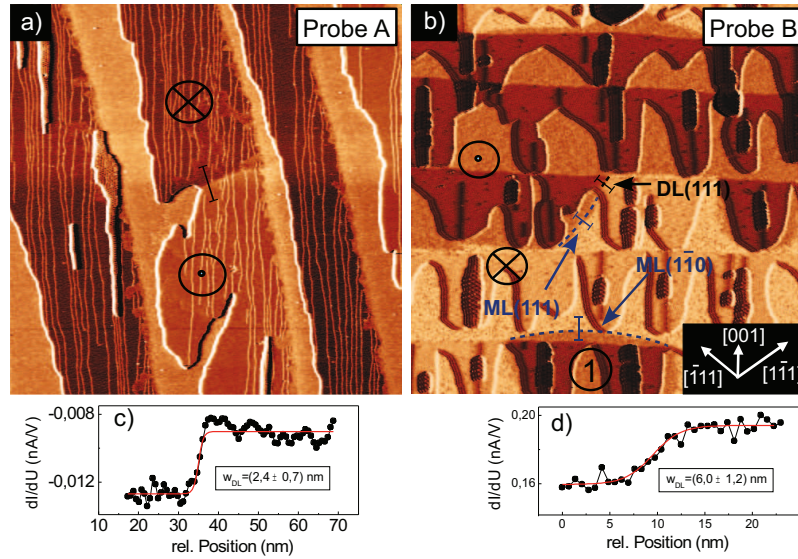


Abbildung 5.9: a) dI/dU -Karte von Probe A ($(600 \times 600) \text{ nm}^2$, $U = -0,7 \text{ V}$, $I = 2,5 \text{ nA}$, $T = 5 \text{ K}$) mit einer Domänenwand in der Doppellage entlang $[1\bar{1}0]$. b) dI/dU -Karte von Probe B ($350 \times 350) \text{ nm}^2$, $U = -0,3 \text{ V}$, $I_T = 2,5 \text{ nA}$, $T = 5,5 \text{ K}$). In diesem Probenausschnitt können drei verschiedene Domänenwände identifiziert werden. Zum einen eine Domänenwand in der Doppellage entlang der $[1\bar{1}1]$ -Richtung (grüne Markierung) sowie eine gekrümmte Wand in der Monolage in der gleichen Richtung (schwarz). Weiterhin ist eine Domänenwand in der Monolage, welche leicht gekrümmt entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung verläuft (blaue Markierung). c) dI/dU -Profil der Domänenwand in der Doppellage aus Probe A entlang der eingezeichneten Linie mit eingezeichnetem Fit von Gleichung 5.1 (rot). d) dI/dU -Profil der Domänenwand in der Doppellage von Probe B.

mit einer Domänenwand in der Doppellage, gemessen bei $T = 5 \text{ K}$ Proben-temperatur und $U = -0,7 \text{ V}$ Bias-Spannung. Eine dI/dU -Karte der Probe B ist in Abbildung 5.9 b) gezeigt. In diesem Probenausschnitt können drei verschiedene Domänenwände identifiziert werden. Zum einen eine Domänenwand in der Doppellage entlang der $[1\bar{1}1]$ -Richtung, die sich in der Monolage in der gleichen Richtung fortsetzt. Weiterhin ist eine Domänenwand in der Monolage, welche leicht gekrümmt entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung verläuft, zu erkennen.

Da das Heizelement bei Erhöhung der Temperatur die gesamte Probenaufnahme des STMs erwärmt, wird auch der Scanner wärmer. Durch die Erwärmung erhöht sich der Piezoeffizient des Scanners, so dass die Auslenkung des Scanners in Abhängigkeit von der angelegten Spannung zunimmt. Die Kalibration des Scanners gilt jedoch nur für eine Temperatur von 5 K , so dass es bei den, bei erhöhter Temperatur aufgenommenen, STM/STS-Aufnahmen zu Fehlern in den Längenangaben kommt. Daher müssen diese Bilder, bevor die Domänenwandbreiten ausgemessen werden können, zunächst anhand den Abständen markanter Punkte bei $T = 5 \text{ K}$ korrigiert werden. Alle im Folgenden gezeig-

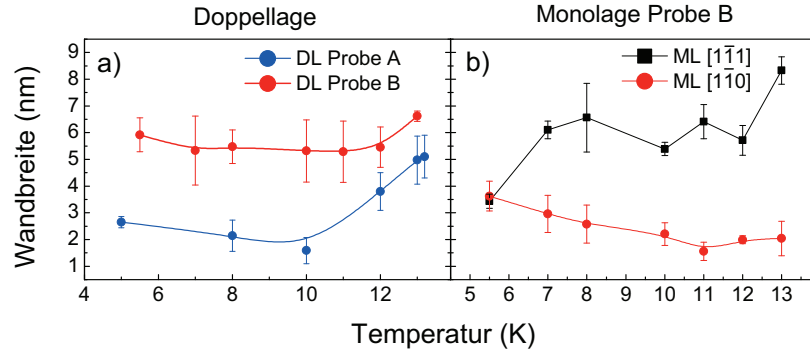


Abbildung 5.10: a) Temperaturabhängiger Verlauf der Domänenwandbreiten in der Doppellage von Probe A und B. Die Breiten der Wände in $[111]$ bleiben über einen weiten Temperaturbereich konstant und nehmen bei $T = 10$ K (Probe A) bzw. $T = 12$ K (Probe B) zu. b) Verlauf der Wandbreiten in der Monolage von Probe B. Die Breite der Wand in der $[111]$ Richtung verhält sich ähnlich wie in der Doppellage. Die Breite der Domänenwand in der $[110]$ Richtung nimmt mit steigender Temperatur ab.

ten STM/STS-Bilder und die daraus ermittelten Domänenwandbreiten wurden dementsprechend korrigiert.

In den Abbildungen 5.9 c) und d) sind exemplarisch dI/dU -Profile über die Domänenwände der Doppellagen bei $T = 5,5$ K (Probe A) bzw. $T = 5$ K (Probe B) gezeigt. Das Ergebnis der Fits gemäß Gleichung 5.1 ist als rote Linie in das Profil eingezeichnet. Zur Untersuchung des temperaturabhängigen Verhaltens der Domänenwandbreiten wurden mehrere solcher dI/dU -Profile extrahiert, gefittet und anschließend die Wandbreiten w gemittelt.

Die gemittelte Breite der Domänenwand in der Doppellage beträgt bei Probe A $w_{DL,A} = (2,4 \pm 0,7)$ nm und bei Probe B $w_{DL,B} = (5,9 \pm 0,6)$ nm. Prokop et al. bestimmten bei $T = 5$ K Proben temperatur die Breite einer Domänenwand in der DL Fe/Mo(110) zu $w_{DL} = (4,2 \pm 0,5)$ nm [Pro05], was sehr gut mit dem Mittelwert von Probe A und B ($w = (4,3 \pm 0,4)$ nm) übereinstimmt.

In der Monolage beträgt die Breite der Domänenwand in Probe B entlang $[111]$ bei 5,5 K Proben temperatur $w_{ML,B} = (3,4 \pm 0,3)$ nm und bei $T = 12$ K in Probe A $w_{ML,A} = (1,0 \pm 0,5)$ nm. Die Wandbreite in der Monolage von Probe a stimmt sehr gut mit mit der von Prokop et al. gemessenen Wandbreite von $w_{ML} = (1,2 \pm 0,2)$ nm [Pro05] überein, während die Domänenwandbreite in Probe B hier größer ist.

Die Unterschiede in den gemessenen Domänenwandbreiten von Probe A und B können durch die verschiedenen Proben topologien der beiden Proben begründet sein. Die in Probe A beobachtete, quer zum Streifen verlaufende Domänenwand, ist sehr viel länger ($l = (94 \pm 2)$ nm) als die Domänenwand in der eher inselförmigen Doppellage von Probe B ($l = (13,1 \pm 0,5)$ nm). Dies führt möglicherweise zum beobachteten Unterschied in der Wandbreite, da Einflüsse durch die Kanten der

Doppellagenstruktur in Probe A geringer sind als in Probe B.

Auch die im Vergleich zu Probe A und Prokop et al. breiteren Domänenwände in der Monolage Probe B können durch unterschiedliche Domänenwandtopologien begründet sein. Prokop et al. bestimmten die Wandbreite in der Monolage an einer Probe mit einer Bedeckung von $\Theta_{Fe} = 1,0$ ML [Pro05]. Als Indiz für die Abhängigkeit der Domänenwandbreite von der Bedeckung können die von Prokop et al. [Pro06] gemessenen Unterschiede in den spinpolarisierten $dI/dU(U)$ Spektren für Proben mit Bedeckungen von 1,5 ML bzw. 0,5 ML gewertet werden.

Eine weitere Erklärung für die unterschiedlichen Wandbreiten in der Monolage kann der Einfluss von Streufeldern der Doppellageninseln sein. Ein Hinweis hierfür ist die Tatsache, dass die Domänenwände in der Monolage von Probe B fast ausschließlich im Umfeld von Doppellageninseln zu beobachten sind.

Die Temperaturabhängigkeit der Domänenwandbreiten für beide Proben ist in Abbildung 5.9 gezeigt. In der Doppellage (Abbildung 5.9 a)) bleiben bei beiden Proben die Wandbreiten bei steigender Temperatur zunächst konstant. Die Wandbreite in Probe A nimmt oberhalb von $T = 10$ K bis $T = 13,2$ K auf $w_{DL,A} = (5,1 \pm 0,8)$ nm zu. Probe B zeigt ein ähnliches Verhalten, wobei die Domänenwandbreite allerdings bis $T = 12$ K konstant bleibt und dann auf $w_{DL,B} = (6,6 \pm 0,2)$ nm zunimmt. Im Rahmen des Fehlers kann eine Zunahme der Wandbreite ab $T = 10$ K nicht ausgeschlossen werden, so dass das Verhalten der Domänenwände in beiden Proben ähnlich ist.

In der Monolage von Probe B (Abbildung 5.10 b)) beträgt die Breite der DW entlang $[1\bar{1}1]$ bei 5,5 K Proben temperatur $w_{ML[1\bar{1}1]}(5,5 \text{ K}) = (3,4 \pm 0,3)$ nm. Bei zunehmender Temperatur steigt die Breite bis 7 K Proben temperatur auf $w_{ML[1\bar{1}1]}(7 \text{ K}) = (5,9 \pm 0,4)$ nm und bleibt im Temperaturbereich von 7 K bis 12 K nahezu konstant. Oberhalb von 12 K nimmt die Wandbreite bis 13 K auf $(w_{ML[1\bar{1}1]}(13 \text{ K}) = (8,3 \pm 0,5)$ nm) zu.

Die Domänenwand in der Monolage von Probe B entlang $[1\bar{1}0]$ zeigt ein völlig anderes Verhalten. Mit steigender Temperatur nimmt die Breite der Wand von anfänglich $W_{ML[1\bar{1}0]}(5,5 \text{ K}) = (3,6 \pm 0,6)$ nm bis 13 K Proben temperatur auf $W_{ML[1\bar{1}0]}(13 \text{ K}) = (2,0 \pm 0,6)$ nm ab. Dieser Unterschied ist sehr wahrscheinlich durch die unterschiedliche Ausrichtung der beiden Domänenwände entlang $[1\bar{1}1]$ und $[1\bar{1}0]$ begründet. Die leichte Achse schwenkt bei erhöhter Temperatur in die $[001]$ -Richtung, so dass die Domänenwand entlang $[1\bar{1}0]$ oberhalb von T_{SRT} senkrecht zur Magnetisierung steht. An dieser Domänenwand stehen die Spins der beiden Domänen in einem 180° -Winkel zueinander. Eine solche Domänenwand wird auch als *head-to-head-Domänenwand* bezeichnet und ist energetisch ungünstig. Die Domänenwände entlang $[1\bar{1}1]$ stehen bei Temperaturen oberhalb von T_{SRT} in einem nahezu 45° Winkel zur Magnetisierung, was eine kleinere Energie erfordert, da die Magnetisierungskomponente senkrecht zur Domänenwand stetig verläuft und kein Streufeld entsteht. Offensichtlich wird *head-to-*

| | Anisotropiekonstante $ K_{\text{eff}} $ (10^6 J/m ³) | | | | | |
|----------------|---|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|
| | Monolage $[1\bar{1}0]$ | | Monolage $[1\bar{1}1]$ | | Doppellage | |
| | 5 K | 13 K | 5 K | 13 K | 5 K | 13 K |
| Probe A | - | - | - | - | $2,05_{-0,81}^{+1,26}$ | $0,58_{-0,3}^{+0,35}$ |
| Probe B | $1,10_{-0,46}^{+0,69}$ | $3,46_{-1,74}^{+2,38}$ | $1,22_{-0,48}^{+0,75}$ | $0,21_{+0,08}^{+0,12}$ | $0,41_{-0,16}^{+0,25}$ | $0,32_{0,13}^{+0,20}$ |

Tabelle 5.1: Übersicht über die Effektive Anisotropiekonstante K_{eff} der Doppellage und Monolage Fe/Mo(110) bestimmt auf Probe A und B jeweils unterhalb und oberhalb von T_{SRT} .

head-Domänenwand entlang $[1\bar{1}0]$ durch das Streufeld der mit (1) markierten Domäne bedingt. Die temperaturabhängige Abnahme der Breite ist wahrscheinlich nicht durch einen SRT in der Monolage bedingt, so dass diese Domänenwand für die Untersuchung des SRTs nicht weiter beachtet wird.

Die Temperaturabhängigkeit der Domänenwand in der Monolage von Probe A wird ebenfalls nicht weiter ausgewertet, da diese Domänenwand nicht über den gesamten Temperaturbereich sichtbar ist.

Für den Fall einer Bloch-Wand kann die Domänenwandbreite w durch eine Minimierung des Energiefunktionals [Hub98]

$$\int \left[A \left(\frac{\delta\Phi(x)}{\delta x} \right)^2 + |K_{\text{eff}}| \sin^2 \Phi(x) \right] dx \quad (5.2)$$

zu

$$w = 2\sqrt{\frac{A}{|K|}} \quad (5.3)$$

bestimmt werden. Die Breite einer Domänenwand wird demnach durch die Austauschsteifigkeit A , die ein Maß für die Kopplung der Spins untereinander darstellt, und durch den Betrag der Anisotropiekonstanten K bestimmt. Aus den gemessenen Breiten der Domänenwände kann also mit Kenntniss der Austauschsteifigkeit A die Anisotropiekonstante K bestimmt werden. Der in Abschnitt 2.4 diskutierte Zerlegung der Anisotropiekonstante K in Konstanten zweiter und vierter Ordnung (\varkappa_2 und \varkappa_4) kann im Rahmen der experimentellen Ortsauflösung der Domänenwände nicht Rechnung getragen werden. Daher wird im Folgenden eine effektive Anisotropiekonstante diskutiert, d.h. $K = K_{\text{eff}}$, die als eine Summe von \varkappa_2 und \varkappa_4 verstanden werden kann.

Für Fe/W(110) wurde experimentell eine Austauschkonstante von $A = 3,6_{-1,4}^{+2,2} \times 10^{-12}$ J/m bestimmt, und es kann angenommen werden, dass A unabhängig von der Temperatur ist [Pra01, Pra03]. Da weiterhin die Eigenschaften von Mo und W sehr ähnlich sind, wird dieser Wert der Austauschkonstanten A zur Berech-

nung der effektiven Anisotropiekonstante K_{eff} für Fe/Mo(110) herangezogen.

Für die Berechnung von K_{eff} folgt aus Gleichung 5.3

$$|K_{\text{eff}}(w)| = \frac{4 \cdot A}{w^2}. \quad (5.4)$$

Für den Fehler von K_{eff} gilt

$$\Delta|K_{\text{eff}}(w, \Delta w)| = \sqrt{\left(\frac{\partial K}{\partial A} \cdot \Delta A\right)^2 + \left(\frac{\partial K}{\partial w} \cdot \Delta w\right)^2}. \quad (5.5)$$

Bei 5 K Proben temperatur beträgt K_{eff} auf der Doppellage in Probe A $K_{\text{DL,A}} = 2,05_{-0,81}^{+1,26} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ und in Probe B $K_{\text{DL,B}} = 0,41_{-0,16}^{+0,25} \times 10^6 \text{ J/m}^3$. Diese Werte sind eine Größenordnung (Probe A) bzw. zwei Größenordnungen (Probe B) kleiner als für Fe/W(110) ($K_{\text{Fe/W(110)}} = 40,6_{-15}^{+26} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ [Pra03]). Da die Breite der Domänenwände mit steigender Temperatur oberhalb von $T = 10 \text{ K}$ zunimmt, fällt entsprechend die Anisotropiekonstante. Bei 13 K Proben temperatur beträgt die Anisotropiekonstante für Probe A $K_{\text{DL,A}}(13 \text{ K}) = 0,58_{-0,30}^{+0,35} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ und für Probe B $K_{\text{DL,B}}(13 \text{ K}) = 0,32_{-0,13}^{+0,20} \times 10^6 \text{ J/m}^3$. In der Monolage ergeben sich aus den beiden Domänenwänden entlang $[1\bar{1}1]$ und $[1\bar{1}0]$ bei 5 K Proben temperatur zueinander ähnliche Werte für die Anisotropiekonstante mit $K_{\text{ML},[1\bar{1}1]}(5 \text{ K}) = 1,22_{-0,48}^{+0,75} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ und $K_{\text{ML},[1\bar{1}0]}(5 \text{ K}) = 1,10_{-0,46}^{+0,69} \times 10^6 \text{ J/m}^3$. Da sich die beiden Domänenwände während der Temperaturerhöhung unterschiedlich verhalten, ergeben sich bei $T = 13 \text{ K}$ stark verschiedene Werte für die effektive Anisotropiekonstante. Entlang $[1\bar{1}1]$ beträgt $K_{\text{ML},[1\bar{1}1]}(13 \text{ K}) = 0,21_{-0,08}^{+0,12} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ und $K_{\text{ML},[1\bar{1}0]}(13 \text{ K}) = 3,46_{-1,74}^{+2,38} \times 10^6 \text{ J/m}^3$ entlang $[1\bar{1}0]$. Aufgrund des Verschwindens des magnetischen Kontrastes ist die Anisotropiekonstante für Temperaturen oberhalb von T_{SRT} nicht bestimmbar.

Eine Übersicht über die berechneten effektiven Anisotropiekonstanten der Doppellage und der Monolage bei $T = 5 \text{ K}$ und $T = 13 \text{ K}$, d.h. bei senkrechter Magnetisierung und leichter Achse, sowie knapp unterhalb der Reorientierungstemperatur, ist in Tabelle 5.1 gezeigt.

5.2 Diskussion

Aus dem Verschwinden des magnetischen Kontrastes in den differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeitskarten kann, in Analogie mit vorhergehenden Ergebnissen von Kukunin et al. [Kuk07], geschlossen werden, dass bei 13,2 K ein Spinreorientierungsübergang aus der senkrechten $[110]$ Richtung in die Schichtebene stattfindet. Für den Wert der Anisotropiekonstante \varkappa_2 aus Gleichung 2.44 bedeutet dies eine Zunahme bei steigender Temperatur.

Aufgrund der sprunghaften Abnahme des magnetischen Kontrastes bei $T = (13, 2 \pm 0, 2)$ K kann ein kontinuierlicher SRT, d.h. $\varkappa_4 < 0$, ausgeschlossen werden. Kukunin et al. schlossen aufgrund der kontinuierlichen Abnahme der Asymmetrie auf einen kontinuierlichen SRT-Prozess [Kuk07]. Allerdings kann diese Abnahme der Asymmetrie auch auf spektroskopische Veränderungen zurückgeführt werden. Wie in Abschnitt 5.1.1 dargestellt, gibt es einen Anstieg der differentiellen Tunnelleitfähigkeit ab (9 ± 1) K Proben temperatur, die zu einer Abnahme der Asymmetrie führt. Aus diesem Grund ist eine Diskussion des SRTs allein auf der Grundlage der Asymmetrie nicht ausreichend. Eine Definition des magnetischen Kontrastes und eine Diskussion des SRTs anhand der Differenz der dI/dU -Werte für $(\uparrow\uparrow)$ und $(\uparrow\downarrow)$ erscheint sinnvoller.

Erklärt werden kann der Anstieg der spingemittelten differentiellen Tunnelleitfähigkeit durch eine Neuausrichtung der leichten magnetischen Achse (von $\vartheta = 0$ nach $\vartheta = \pm\pi/2$) bei gleichbleibender Magnetisierungsrichtung. Aus der Tatsache, dass die Magnetisierung trotz dieser Neuausrichtung der leichten Achse in der senkrechten Achse stehen bleibt, kann auf ein weiteres lokales Minimum der freien Energie $f(\vartheta)$ bei $\vartheta = 0$ geschlossen werden. Eine gleichzeitige Existenz lokaler Minima bei $\vartheta = 0$ und $\vartheta = \pm\pi/2$ ist, wie in Abschnitt 2.4 diskutiert, nur für den Fall eines diskontinuierlichen SRTs möglich, so dass diese Beobachtung eindeutig auf einen diskontinuierlichen SRT, d.h. $\varkappa_4 > 0$, hinweist. Fritzsche et al. ermittelten mittels Torsions-Oszillations-Magnetometrie (TOM) für Fe auf Cr(110) negative Werte für die Anisotropiekonstanten $K_{s,4} = (-0, 09 \pm 0, 05)$ mJ/m² und $K_{v,4} = (-16, 2 \pm 9) \times 10^4$ J/m³ der vierten Ordnung [Fri94]. Da \varkappa_4 als die Summe von $K_{v,4}$ und $K_{s,4}$ definiert ist (vgl. Gleichung 2.43), bedeutet dies einen negativen Wert von \varkappa_4 und somit einen kontinuierlichen SRT bei Fe/Cr(110), wie er auch von Fritzsche et al. [Fri94] beobachtet wurde. Da die Gitterkonstante von Cr nahezu identisch mit der Gitterkonstante von Fe ist, können die von Fritzsche et al. ermittelten Werte als Eigenschaften von Volumeneisen verstanden werden. Bei pseudomorphen Eisenschichten auf Mo(110) wird jedoch die Gitterkonstante von Fe um etwa 10 % gestreckt. Aufgrund dieser Dehnung entsteht eine epitaktische Spannung in der Eisenschicht, welche ursächlich für einen Vorzeichenwechsel der Anisotropiekonstante \varkappa_4 sein kann. Bekräftigt wird diese Annahme die durch Tatsache, dass eine Spinreorientierung auch durch epitaktische Spannungen in einer magnetischen Schicht hervorgerufen werden kann [San99, Far98].

Auch die beobachtete Hysterese des SRTs, d.h. ein Zurückschwenken der Magnetisierung aus der Ebene in die Senkrechte bei einer niedrigeren Temperatur als der Reorientierung aus der Senkrechten in die Ebene, kann durch ein positives \varkappa_4 erklärt werden. Die Magnetisierung bleibt hierbei in dem lokalen Minimum der freien Energie stabil, obwohl das absolute Minimum der freien Energie bereits von $\vartheta = \pi/2$ nach $\vartheta = 0$ gewechselt ist, d.h. ein Nulldurchgang von \varkappa_2 stattgefunden hat. Zur Erklärung der Hysterese ist in Abbildung 5.11 die freie Energie $F(\vartheta)$ für $\varkappa_4 > 0$ und verschiedene \varkappa_2 skizziert. Bei tiefen Temperatu-

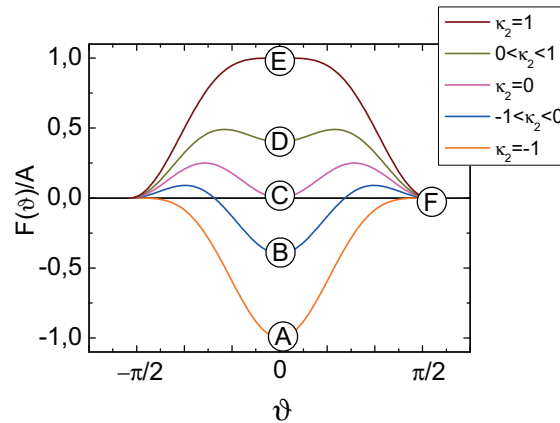


Abbildung 5.11: Verlauf der freien Energie $F(\vartheta)$ für $\kappa_4 > 0$, d.h. diskontinuierlicher SRT, in willkürlichen Einheiten. Durch die Koexistenz zweier lokaler Minima entsteht für den SRT eine temperaturabhängige Hysterese. Bei steigender Temperatur durchläuft die Magnetisierung die Zustände $A \Rightarrow B \Rightarrow C \Rightarrow (D \text{ oder } F) \Rightarrow F$. Wird die Temperatur anschließend reduziert werden die Zustände in der Reihenfolge $F \Rightarrow B \Rightarrow A$ durchlaufen, d.h. κ_2 ist bei Wechsel der Magnetisierung in die Senkrechte geringer als beim Wechsel der Magnetisierung aus der Senkrechten in die Ebene.

ren ist κ_2 negativ und das Minimum der freien Energie ist durch (A) markiert. Unter Erhöhung der Temperatur steigt der Wert von κ_2 und es bildet sich ein weiteres lokales Minimum der freien Energie bei $\vartheta = \pi/2$ (F). Das absolute Minimum liegt jedoch weiter bei $\vartheta = 0$ (Punkt B) und die Magnetisierung steht demnach senkrecht zur Probenoberfläche. Für $\kappa_2 = 0$ sind beide lokale Minima in F gleichwertig. Eine Reorientierung der Magnetisierung benötigt jedoch zusätzliche Energie um von Punkt C nach F zu wechseln. Bei weiterer Erhöhung der Temperatur wird aus dem anfangs absoluten Minimum bei $\vartheta = 0$ ein lokales Minimum (Punkt D). Das neue absolute Minimum liegt nun bei $\vartheta = \pi/2$ (Punkt F) und die Wahrscheinlichkeit für eine Spinreorientierung steigt. Wird die Temperatur weiter erhöht, ist das lokale Minimum bei $\vartheta = 0$ verschwunden und als einziger stabiler Zustand existiert eine Magnetisierung in der Ebene. Bei einer Absenkung der Temperatur bleibt die Magnetisierung wahrscheinlich in der Ebene stabil bis $\kappa_2 < 0$ (blaue Kurve) und dreht daher erst bei einer Temperatur zurück in die Senkrechte, die niedriger ist als die Temperatur, bei der die Reorientierung aus der Senkrechten in die Ebene ($\kappa_2 > 0$) stattgefunden hat, d.h. $\kappa_{2,\uparrow\rightarrow} > \kappa_{2,\rightarrow\uparrow}$.

Der Nulldurchgang von κ_2 findet bei $T = 9 \pm 1$ K statt, wie aus dem Anstieg der differentiellen Tunnelleitfähigkeit (vgl. Abbildung 5.4) geschlossen werden kann, da bei dieser Temperatur offensichtlich die Neuausrichtung der leichten magnetischen Achse stattfindet. Daraus folgt, dass κ_2 bei Temperaturen unterhalb von (9 ± 1) K negativ ist und oberhalb von (9 ± 1) K positive Werte annimmt. Dieser Anstieg wird bei der Untersuchung von Probe B nicht beobachtet, was

darauf zurückzuführen ist, dass die freie Energie in diesem Temperaturbereich zwei lokale Minima aufweist und die leichte Achse in Probe B nicht von einem lokalen Minimum ins andere, d.h. von $\vartheta = 0$ nach $\vartheta = \pi/2$, wechselt und daher die Magnetisierung weiterhin entlang der leichten Achse steht.

Die Abnahme der spingemittelten differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeit der Doppellage Fe bei $E - E_F = -0,1$ eV mit der Reorientierung (vgl. Abbildung 5.7 d) zeigt eine Veränderung der elektronischen Struktur an. Das bedeutet, dass die elektronische Struktur von Fe/Mo(110) offensichtlich abhängig von der relativen Ausrichtung der Magnetisierung im Kristallgitter ist.

Die spingemittelte differentielle Tunnelleitfähigkeit der Monolage Fe zeigt oberhalb der Spinreorientierungstemperatur $T_{SRT}(ML)$ einen erneuten Anstieg, nachdem sie bei $T = 14$ K ein Minimum durchlaufen ist. Dieser Anstieg kann wie zuvor auf eine Magnetisierung entlang einer magnetisch harten Achse zurückgeführt werden. Bei den Messungen zeigen die Doppellage und die Monolage eine Reorientierung der Magnetisierung bei der gleichen Temperatur. Eine gleiche SRT-Temperatur für Doppellage und Monolage ist jedoch nicht zu erwarten, da der Einfluss des Substrates auf die Monolage stärker als auf die Doppellage ist, und somit auch die Anisotropiekonstanten für Doppellage und Monolage unterschiedlich sein sollten. Die im Experiment beobachtete Spinreorientierung in der Monolage ist wahrscheinlich auf den Einfluss der Magnetisierung der Doppellage zurückzuführen. Das bedeutet, dass die Magnetisierung der Monolage bei der Spinreorientierung der Doppellage ebenfalls in die Ebene gedreht wird und nach dieser Drehung entlang einer magnetisch harten Achse verläuft. Dies führt zu einem Anstieg der differentiellen Tunnelleitfähigkeit der Monolage bei Temperaturen oberhalb der Reorientierungstemperatur der Doppellage. Auf einen Einfluss der Doppellage auf die Magnetisierung der Monolage kann anhand der spinpolarisierten dI/dU -Aufnahmen leicht geschlossen werden, da die Domänen der Monolage immer analog zu den benachbarten Doppellagenstrukturen magnetisiert sind. Aufgrund dessen kann auf eine Reorientierungstemperatur der Monolage Fe/Mo(110) oberhalb der Reorientierungstemperatur der Doppellage von $T_{SRT}(DL) = 13,2$ K geschlossen werden.

Aus den ermittelten Werten der effektiven Anisotropiekonstanten K_{eff} kann über

$$\epsilon_K = \frac{K_{eff} \cdot a_{Mo}^3}{2} \quad (5.6)$$

die Anisotropieenergie pro Atom ϵ_K ermittelt werden. Aus dem Wert von K_{eff} der Doppellage von Probe A ergibt sich somit bei $T = 5,5$ K für die Doppellage Fe/Mo(110)

$$\epsilon_K = 0,2 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}. \quad (5.7)$$

Bei $T = 13\text{ K}$ nimmt ϵ_K auf

$$\epsilon_K = 0,06 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}} \quad (5.8)$$

ab. In der Monolage von Probe B ergeben sich Werte von ϵ_K von

$$\epsilon_K(T = 5\text{ K}) = 0,12 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}} \quad \text{und} \quad \epsilon_K(T = 13\text{ K}) = 0,02 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}. \quad (5.9)$$

Volumeneisen besitzt eine Anisotropiekonstante von etwa $K \approx 2 \times 10^4\text{ J/m}^3$, woraus sich eine Anisotropieenergie von $\epsilon_K \approx 0,001 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}$ ergibt. Das bedeutet, dass ultradünne Filme auf der Mo(110)-Oberfläche eine deutlich höhere Anisotropie aufweisen. Für Fe/W(110) kann durch Extrapolation von dicken Fe-Schichten auf einen Wert von $\epsilon_K = 0,6\text{ meV}$ für Fe-Monolagenstreifen geschlossen werden [Elm98]. Aus der Untersuchung von Domänenwänden in der Monolage Fe/W(110) kann eine Anisotropieenergie für Fe/W(110) von $\epsilon_K = 4 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}$ ermittelt werden [Pra01, Pra03, Pra04c]. Die im Vergleich zu diesen Werten geringere Anisotropie von Fe/Mo(110) kann auf die, aufgrund der geringeren Kernladung von Mo, schwächere Spin-Bahn-Wechselwirkung von Mo im Vergleich zu Wolfram zurückgeführt werden. Ein ähnlich signifikanter Unterschied der Anisotropien wurde auch bei Co/Mo(110) bzw. Co/W(110) beobachtet [Pro04].

Zentrales Ergebnis der Untersuchung des temperaturabhängigen SRT in der Doppellage Fe/Mo(110) ist ein diskontinuierlicher SRT bei der Temperatur $T_{SRT}(DL) = 13,2 \pm 0,5\text{ K}$ von einer Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Ebene unterhalb nach einer Magnetisierung in der Ebene oberhalb dieser Temperatur. Die elektronische Struktur hängt sowohl von der relativen Ausrichtung der Magnetisierung im Kristallgitter als auch von der relativen Ausrichtung zwischen der magnetisch leichten Achse und der Magnetisierung ab.

Kapitel 6

Spinabhängiger Ladungstransport durch Kupfer-Pc/Fe(110)

Bei organischen Halbleitern (engl.: *Organic Semiconductor*, OSC) handelt es sich um eine Gruppe zur Klasse der π -konjugierten Molekülen gehörenden Materialien. Unter π -Konjugation versteht man eine Überlappung eines π -Orbitals mit einem p-Orbital eines sp^2 -hybridisierten C-Atoms. OSCs ermöglichen die Entwicklung von sehr günstigen und zuverlässigen elektronischen Anwendungen [For04]. Organische lichtemittierende Dioden (engl.: *Organic Light Emitting Diode*, OLED) und Photovoltaikzellen sind Beispiele für bereits realisierte kommerzielle Anwendungen. Im primären Fokus der Forschung lag bisher der Ladungstransport. Neuere Experimente haben jedoch gezeigt, dass OSCs auch ein viel versprechendes Material für Spintronik-Anwendungen sind, d.h. spinpolarisierter Ladungstransport, da ihre meist leichten Elemente nur eine geringe Spin-Bahn-Wechselwirkung aufweisen [Ded02, Wol01, Pra07]. Spintronik-Anwendungen, wie zum Beispiel GMR- oder TMR-Elemente, basieren sowohl auf der Produktion und Detektion von Spinpolarisation, als auch auf der Injektion und dem Transport von Spin. Für Injektion und Transport müssen Spinübergänge aufgrund von Streuungen, sowohl an den Grenzflächen als auch innerhalb des Materials, vermieden werden. Die Untersuchung von Spintransporteigenschaften anhand von Magnetowiderständen, z.B. TMR-Messungen, werden immer durch die Eigenschaften der Elektroden beeinflusst und integrieren zusätzlich über große Flächen, wodurch eine Unterscheidung von intrinsischen und extrinsischen Beiträgen zur Streuung erschwert wird.

Metallbasierte Phthalocyanin-Moleküle als Beispiel für OSCs sind ein in der Literatur häufig diskutiertes Thema. Die Struktur dieser Moleküle ist schematisch in Abb. 6.3 c) gezeigt. Phthalocyanin ist ein großes, planares polyaromatisches Molekül mit einer lateralen Größe von $(1,4 \times 1,4) \text{ nm}^2$. Das Zentrum des Moleküls kann durch verschiedene Atome der 3d-Übergangselemente gebildet werden, daher der Name Metallbasiertes-Phthalocyanin (engl.: *Metallbased Phthalocyanine*, MPc). Anwendung finden MPcs unter anderem als Pigmente bzw. Farbstoffe in optoelektronischen Elementen [Fly77, For97, Xue05] und Solarzellen [Gho74]. Als Prototyp für molekulare Halbleiter wurde Phthalocyanin auch zur Herstellung von Feldeffekttransistoren (FET) verwendet [Mad88,

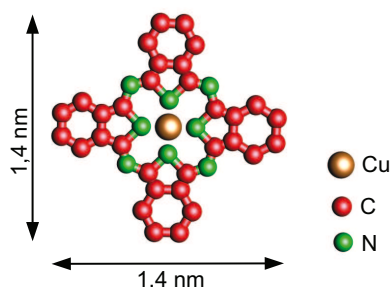


Abbildung 6.1: Darstellung der Struktur des CuPc Moleküls, erstellt mit dem Softwarepaket *UCSF Chimera* [Pet04].

Mai87]. Aber auch als aktive Elemente in chemischen Sensoren, z.B. zur Detektion von NO_2 [Col88], finden MPCs Anwendung.

Für die Untersuchung der Spininjektion in, oder durch, ein Phthalocyanin-Molekül bietet sich das nichtmagnetische Kupfer-Phthalocyanin-Molekül (CuPc) an. Eine Spinabhängigkeit des Ladungstransports durch dieses Molekül hindurch ist zunächst nicht zu erwarten. Wird CuPc jedoch auf einer ferromagnetischen Unterlage deponiert, kann unter Umständen eine Magnetisierung des Moleküls, d.h. eine Spininjektion, aufgrund der Wechselwirkung mit der ferromagnetischen Unterlage erwartet werden. Mittels Zwei-Photonen Photoemission wurde die Spininjektion an der Co-CuPc Grenzfläche untersucht und es wurde eine Effizienz von 90 % bei der Injektion in unbesetzte Molekülorbitale bei +2.7 eV ermittelt [Cin09]. Durch die Ausnutzung eines hybridisierten Grenzflächenzustandes (engl.: *Hybrid Interface State*, HIS), der als Spinfilter wirkt, konnte von Cinchetti et al. eine Spininjektionseffizienz an der Co-CuPc Grenzfläche von mehr als 100 % gemessen werden [Cin10b]. Weiterhin wurde von Zhan et al. ein HIS an der Fermikante der Grenzfläche zwischen dem organischen Halbleiter Alq_3 (Tris(8-hydroxyquinolato)aluminium) und Eisen beobachtet [Zha10]. Aus der Beobachtung einer Austauschwechselwirkung zwischen Alq_3 und Fe wird für den HIS eine Spinpolarisation parallel zum ferromagnetischen Substrat angenommen.

Spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie stellen eine sehr gute Methode zur Untersuchung der Spintransporteigenschaften an der Fermikante dar. Die Untersuchung des nicht spinpolarisierten Transports von Elektronen durch CoPC auf Cu(111) mittels STM wurde vor Kurzem von Takacs et al. [Tak08] publiziert. Weiterhin kann mit dem STM der Ladungstransport auf einer submolekularen Skala durch die Moleküle hindurch beobachtet werden und somit zwischen den organischen Liganden und dem metallischem Zentrum des Moleküls unterschieden werden. Spinpolarisierte STM/STS Untersuchungen an CoPc auf Fe/W(110) zeigen eine Spinabhängigkeit des Ladungstransports durch das CoPc-Molekül [Bre10, Ato10].

Im Rahmen dieser Dissertation wurde der Spintransport durch das nichtmagnetische CuPC-Molekül auf der Fe(110)-Oberfläche untersucht. Die Messungen wurden mit dem Tieftemperatur STM durchgeführt.

6.1 Probenpräparation

Zur Präparation der Proben wurde an die -Apparatur des Tieftemperatur-STMs anstelle der Schleusenkammer, eine kleine Kammer, in der sich eine Knudson-Zelle zum Verdampfen der CuPc-Moleküle befindet, montiert. Diese Kammer (im Folgenden bezeichnet als *Molekülkammer*) wird mit einer Turbomolekularpumpe gepumpt und kann durch ein Ventil von der Hauptkammer getrennt werden. Mit einem Transfersystem kann die Probe aus dem Transferstab der Hauptkammer in die Molekülkammer transferiert werden. Problematisch an der Molekülkammer ist der relativ hohe erreichbare Basisdruck von lediglich $P_{Basis} \leq 1 \cdot 10^{-9}$ mbar. Während des Aufdampfvorganges beträgt der Druck in der Kammer nur $P_{Aufdampf} \approx 2 \cdot 10^{-8}$ mbar. Bei diesem relativ hohen Druck kommt es sehr schnell zu Verunreinigungen, so dass die ferromagnetische Kopplung der Fe-Schicht gestört werden kann. Zur Minimierung der Verunreinigung, wurde die Verweildauer der Probe in der Molekülkammer so kurz wie möglich gehalten. Die Aufdampfzeit betrug ca. 10 – 15 s, wodurch sich eine Verweildauer der Probe in der Molekülkammer (inkl. Transfer aus der Hauptkammer und zurück) von ca. 1 min ergab. Die Erfolgsquote für Proben, die einen magnetischen Kontrast zeigen, beträgt etwa 10 %.

Die Messungen zum spinabhängigen Ladungstransport durch das CuPc-Molekül wurden auf der Doppellage Fe/Mo(110) durchgeführt. Hierzu wurden etwa 1,5 ML Fe bei Raumtemperatur aufgedampft und anschließend bei $T = 600$ K getempert. Da die Doppellage Fe/Mo(110) eine senkrechte magnetische leichte Achse besitzt (vgl. Kap. 5), wurden für die SP-STs Messungen STM-Spitzen mit einer 5 ML Co/10 ML Au-Beschichtung, d.h. mit senkrechter magnetischer Sensitivität, verwendet. CuPc wurde bei Raumtemperatur aufgedampft und die Menge deponierten CuPcs wurde während der Versuchsreihe unterhalb einer Monolage gehalten.

6.2 Morphologie

In Abbildung 6.2 a) ist eine STM-Aufnahme von 0,2 ML CuPc auf Fe(110) gezeigt. Das Eisen wurde analog zur Präparation von Fe-Inseln in Kapitel 4.1.2 bei Raumtemperatur deponiert ($\approx 6,5$ ML Fe) und anschließend bei 600 K getempert. Aus dem Höhenprofil in Abbildung 6.2 b) ergibt sich eine Höhe der Fe-Insel von 4,5 nm (Stranski-Krastanov-Wachstum). Die Struktur der Oberfläche dieser Insel kann daher als Fe(110) Oberfläche angesehen werden (vgl.

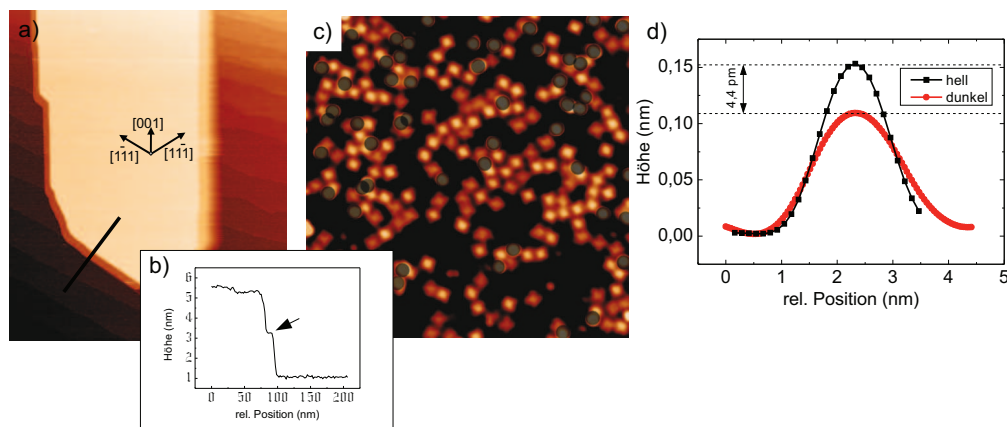


Abbildung 6.2: a) $(520 \times 620) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme ($U_{Bias} = 0,7 \text{ V}$ und $I_T = 0,1 \text{ nA}$)
 b) Höhenprofil entlang der eingezeichneten Linie in a). Die Höhe der Insel beträgt ca. $4,5 \text{ nm}$, so dass bei Oberfläche der Insel von einer Fe(110) Oberfläche ausgegangen werden kann. Bei der Stufe (Pfeil) handelt es sich um ein Doppelspitzenartefakt. c) $(35 \times 35) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme ($U_{Bias} = 0,7 \text{ V}$ und $I_T = 0,1 \text{ nA}$) auf der Fe(110) Oberfläche. CuPC liegt zum Teil als einzelne Moleküle auf der Oberfläche. Viele Moleküle haben sich zu Ketten zusammengeschlossen. d) Es können zwei verschiedene Höhenkorugationen für die Molekülzentren, mit einem Unterschied von $4,4 \pm 0,2 \text{ pm}$, identifiziert werden. Dies weist auf unterschiedliche integrierte Zustandsdichten der Molekülzentren hin.

Kapitel 4.1.2). Abbildung 6.2 c) zeigt eine $(35 \times 35) \text{ nm}^2$ STM-Aufnahme auf der Eiseninsel. Die Moleküle liegen teilweise einzeln auf dem Eisen. Die meisten Moleküle haben sich zu Ketten zusammengeschlossen. Auffällig ist, dass die Zentren der Moleküle unterschiedlich hell, d.h. unterschiedlich hoch, erscheinen. Die Helligkeiten der Molekülzentren können in zwei Gruppen eingeteilt werden, innerhalb derer die Helligkeiten gleich sind. In Abbildung 6.2 d) sind die Höhenprofile gemittelt innerhalb dieser beiden Gruppen gezeigt. Der daraus ermittelte Höhenunterschied beträgt $\Delta h \approx 4,4 \text{ pm}$.

In der in Abbildung 6.3 a) gezeigten $(15 \times 15) \text{ nm}^2$ STM Aufnahme sind die Moleküle in einer stärkeren Vergrößerung auf der Monolage Fe/Mo(110) gezeigt. Die Moleküle liegen flach auf der Oberfläche und die vierzählige, kleeblattartige, Struktur der Moleküle ist gut erkennbar. Die Zentren der Moleküle erscheinen auch in dieser Aufnahme unterschiedlich hoch. Gleichzeitig können zwei verschiedene Orientierungen der Moleküle identifiziert werden. Bei einem Teil der Moleküle ist das durch die Liganden gebildete Kreuz um $\pm 35^\circ$ gegenüber der $[100]$ Achse des Substrats verdreht, wobei das Zentrum dieser Moleküle hell erscheint. Bei den anderen Molekülen ist das Ligandenkreuz parallel zur $[100]$ und $[1\bar{1}0]$ Achse ausgerichtet und das Zentrum ist gegenüber den Liganden nicht hervorgehoben. Allerdings muss beachtet werden, dass es sich bei der mit dem STM gemessenen Höhenkorugation um eine Kombination aus tatsächlicher topographischer Höhe und Unterschieden in der integrierten lokalen Zustandsdichte han-

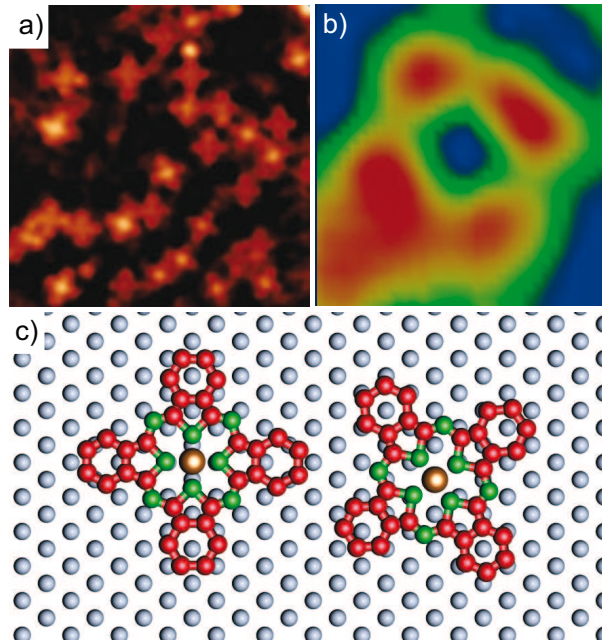


Abbildung 6.3: a) STM Bild auf der Fe Monolage $[(15 \times 15) \text{ nm}^2]$, $U_G = 0,2 \text{ V}$ und $I_T = 1,0 \text{ nA}$. Die kreuzartige Form der CuPc Moleküle ist gut erkennbar und die Ausrichtung der Moleküle kann in zwei Orientierungen eingeteilt werden, was auf unterschiedliche Adsorptionsplätze der Moleküle auf der Unterlage hinweist. Die Helligkeit, d.h. die Höhe, des zentralen Cu-Atoms hängt von der Ausrichtung des CuPc-Moleküls ab. b) $(2,8 \times 2,8) \text{ nm}^2$ dI/dU -Karte eines einzelnen CuPc-Moleküls auf der Fe/Mo(110) Monolage ($U_G = -0,8 \text{ V}$ und $I_T = 1,0 \text{ nA}$). c) Modell der beiden Orientierungen und entsprechende Adsorptionsplätze der CuPc Moleküle auf der Fe/Mo(110) Oberfläche. Da die Fe/Mo(110) Monolage pseudomorph aufwächst, beträgt die Gitterkonstante der Fe-Unterlage $a_{Fe/Mo(110)} = 3,147 \text{ \AA}$.

delt. Das bedeutet, dass die gemessene unterschiedliche Höhenkorrigation nicht allein auf eine unterschiedliche reale Höhe zurückzuführen ist. In diesem Fall kann dieser Unterschied auf unterschiedliche lokale Zustandsdichten, die durch die beiden verschiedenen Adsorptionspositionen entstehen, erklärt werden.

In Abbildung 6.3 c) ist ein Modell für zwei mögliche Adsorptionsplätze von CuPc auf der Fe/Mo(110) Oberfläche gezeigt. Das linke Molekül ist parallel zur $[100]$ Achse ausgerichtet und das zentrale Cu-Atom ist zwischen vier Fe-Atomen der Unterlage platziert. Bei der gedrehten Ausrichtung (rechtes Molekül) befindet sich das Cu-Atom direkt auf einem Fe-Atom. Bei der gedrehten Ausrichtung befindet sich in jedem C-Ring ein Fe-Atom, wobei die genaue Position nur für jeweils gegenüber liegende Liganden gleich ist. Bei den Liganden links oben und rechts unten befindet sich das Fe-Atom im Zentrum des C-Ringes und bei den beiden anderen Liganden am äußeren Rand des C-Ringes. Bei der nicht gedrehten Orientierung ist die Situation ähnlich, wobei das Fe-Atom einmal näher

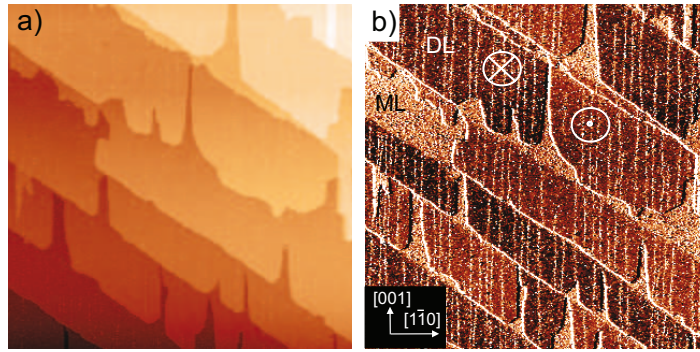


Abbildung 6.4: a) (450×450) nm² STM Aufnahme einer Probe mit 1,7 ML Fe, deponiert bei 600 K, und anschließend bei RT deponierten CuPc-Molekülen. ($U_G = -0,7$ V and $I_T = 2,5$ nA). Die zugehörige dI/dU Leitfähigkeitskarte in b) zeigt einen magnetischen Kontrast in der Fe Doppellage.

am äußeren Rand liegt und einmal am inneren Rand der C-Ringe. Diese unterschiedlichen Positionen der Liganden im Verhältnis zur Unterlage reduzieren die vierfache Symmetrie des freien CuPc-Moleküls zu einer zweifachen Symmetrie auf Fe/Mo(110). Bei einer genauen Betrachtung der gemessenen $I(U)$ Leitfähigkeitskarte in Abbildung 6.3 b) erscheinen die beiden Liganden oben rechts und unten links gleich (elliptisch) und die beiden anderen Liganden eher kreisförmig. Eine ähnliche Reduzierung der Symmetrie, in Verbindung mit verschiedenen Adsorptionsplätzen, wurde von Karacuban et al. bei CuPc auf der Cu(111) Oberfläche beobachtet [Kar09].

6.3 Spinabhängiger Ladungstransport

In Abbildung 6.4 a) ist eine STM Aufnahme von 1,7 ML Fe/Mo(110) mit einer Submonolage CuPc auf der Eisenoberfläche gezeigt. Die differentielle dI/dU Leitfähigkeitskarte in Abbildung 6.4 b) zeigt einen magnetischen Kontrast in der Doppellage Fe. Bei den Linien entlang [001] in der Doppellage handelt es sich um die bereits bekannten Versetzungslinien (vgl. Abschnitt 4.1.2).

Zur Untersuchung der Energieabhängigkeit der magnetischen Asymmetrie wurden differentielle $dI/dU(U)$ Leitfähigkeitsspektren auf einem 2×2 Raster gemessen, d.h. in jedem zweiten Bildpunkt des STM-Bildes wurde ein vollständiges Spektrum im Bereich von $-1,5$ eV bis $+1,5$ eV aufgenommen. Da die Auflösung der STM-Bilder 500×500 Pixel beträgt, resultiert dies in einem orts aufgelösten Datensatz mit $250 \times 250 = 62500$ $dI/dU(U)$ -Spektren. Die Spektren wurden nach der Messung an verschiedenen Positionen, d.h. im Zentrum des Moleküls, auf den Liganden und auf der freien Fe(110) Oberfläche, jeweils für beide relative magnetische Ausrichtungen aus dem Datensatz extrahiert und gemittelt. Für die Analyse wurden nur auf der Doppellage gemessene Daten verwendet, da

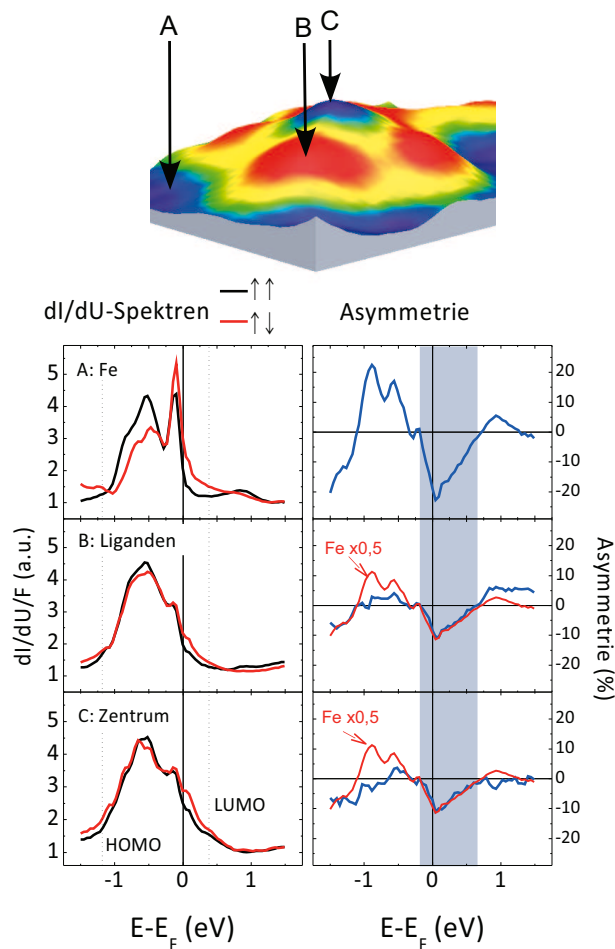


Abbildung 6.5: $dI/dU(U)$ -Spektren (a-c) und magnetische Asymmetrien (d-f) gemessen und gemittelt an den markierten Bereichen auf den CuPc-Molekülen und der freien Fe/Mo(110) DL-Oberfläche. Zum Vergleich ist die Asymmetrie der Fe-DL bei den Asymmetrien der Liganden und des Zentrums als rote Linie mit eingezeichnet (Skaliert mit dem Faktor 0,5). Im Energiebereich $-0,3$ bis $+0,65$ eV stimmen die Asymmetrien bis auf diesen Faktor 0,5 sehr gut überein, was bedeutet, dass die Energieabhängigkeit der Asymmetrie der reinen Fe-DL Oberfläche beim Transport durch das Molekül hindurch reproduziert wird.

die Daten der unbedeckten Fe-Doppellage weniger kontaminationsanfällig, und damit besser reproduzierbar, sind als die der Monolage. Weiterhin wurde nicht zwischen den beiden in Abschnitt 6.2 diskutierten Absorptionsplätzen unterschieden, da die Spektren im Rahmen der experimentellen Streuung keine Unterschiede zeigen. Die gemessenen Spektren wurden mittels der Tunneltransmissionsfunktion $F(S,U)$ normiert (vgl. Kapitel 2.2.1) und sind in Abbildung 6.5 a-c) gezeigt. Die Identifikation von paralleler ($\uparrow\uparrow$) und antiparalleler ($\uparrow\downarrow$) magneti-

scher Ausrichtung von Spitze und Probe erfolgte in Analogie zu den von Prokop et al. gemessenen Spektren auf der reinen Doppellage Fe/Mo(110) [Pro06]. Im Bereich der unbesetzten Zustände zeigt die magnetische Asymmetrie der Fe-Oberfläche ein Minimum von -22% bei $+0,1$ eV (siehe Abbildung 6.5 d).

Die spinaufgelösten $dI/dU(U)$ Spektren auf der reinen Fe Doppellage weisen herausragende Peaks bei $-0,1$ eV und $-0,5$ eV auf. Kleinere Peaks tauchen bei $+0,1$ eV und $+0,8$ eV auf. Ähnliche Eigenschaften wurden zuvor bereits von Prokop et al. beobachtet [Pro06]. Auch die Doppellage Fe/W(110) zeigt ähnliche spektroskopische Eigenschaften [Bod02c]. Der Peak bei $+0,8$ eV nimmt bei einem Wechsel von parallel zu antiparalleler Magnetisierung ab, was zu einem doppelten Vorzeichenwechsel der Asymmetrie im Bereich dieser Energie führt. Das gegenteilige Verhalten ist bei $-0,1$ eV zu beobachten.

In Analogie zum System Fe/W(110) werden den Peaks bei $+0,8$ eV und $-0,1$ eV charakteristische d_{z^2} Minoritätszustände zugeordnet [Bod02b]. Wie es scheint, haben diese beiden Peaks einen entgegengesetzten Spincharakter. Allerdings muss beachtet werden, dass das Vorzeichen der Asymmetrie von der im einzelnen verwendeten STM-Spitze abhängt [Bod02c], was zu einem unterschiedlichen Verhalten der Asymmetrie bei nominell gleich präparierten Spitzen führen kann. Im Rahmen der hier präsentierten Messungen wurde auf der reinen Fe Doppellagenoberfläche ausschließlich eine negative Asymmetrie bei $-0,1$ eV und eine positive Asymmetrie bei $+0,8$ eV beobachtet. Der ausgeprägte Peak bei $-0,5$ eV ist in der Literatur bisher nicht diskutiert worden und könnte dem austauschungsgepaltenen d_{z^2} Majoritätszustand entsprechen.

Auf den Molekülen werden die ausgeprägten Peaks der DL Fe bei $+0,14$ eV und $-0,8$ eV stark unterdrückt. Im Bereich unbesetzter Zustände erscheint bei $+0,4$ eV sowohl im Spektrum des Molekülzentrums als auch auf den Liganden eine Schulter. Da es sich hierbei um das einzige neue Merkmal im Vergleich zu den Spektren der Fe-DL handelt, wird dieser Schulter der LUMO (niedrigster unbesetzter molekularer Orbitalzustand, engl.: *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) zugeordnet. Der (höchster besetzter molekularer Orbitalzustand, engl.: *Highest Occupied Molecular Orbital*) kann bei $-1,1$ eV identifiziert werden. Die HOMO-LUMO Energielücke beträgt in guter Übereinstimmung mit theoretischen Rechnungen [Cin09] $\Delta = 1,5$ eV. Das Zentrum der Energielücke ist zu niedrigeren Energien hin verschoben, was für auf der Oberfläche von Übergangsmetallen absorbierten Moleküle nicht ungewöhnlich ist. Die den Molekülen zugeschriebenen Eigenschaften der Spektren erscheinen in den gemessenen Spektren nur schwach, da die in das Vakuum hineinreichende Zustandsdichte der in der Ebene orientierten HOMO und LUMO Zustände nur sehr klein ist.

Obwohl die auf den Molekülen gemessenen Spektren von den Spektren der reinen Doppellage Fe abweichen, wird die Asymmetrie der Fe Oberfläche in der Umgebung der Fermi-Energie auf den Molekülen bis auf einen konstanten Faktor sehr gut reproduziert. Die auf der DL Fe beobachtete deutliche Abnahme der Asym-

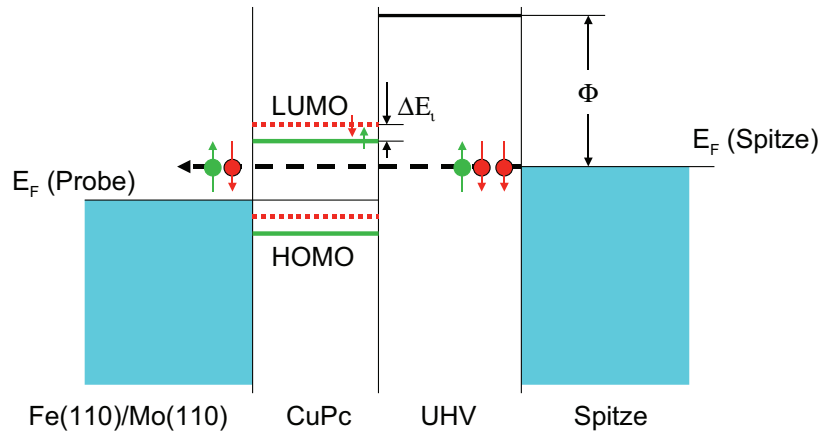


Abbildung 6.6: Energieschema für die Spinaufspaltung der HOMO- und LUMO-Bänder von CuPc auf Fe/Mo(110). Daraus ergeben sich unterschiedliche effektive Barrierehöhen für Minoritäts- und Majoritätselektronen.

metrie oberhalb von $-0,2$ eV zu einem Minimum knapp oberhalb der Fermi-Energie kann auch bei dem Transfer von spinpolarisierten Elektronen sowohl durch das Molekülzentrum als auch durch die Liganden hindurch beobachtet werden. Dies weist einen energieunabhängigen Streuprozess für den Elektronentransfer durch das Molekül in diesem Energiebereich hin. Der absolute Wert der Asymmetrie wird dabei auf die Hälfte reduziert, d.h. die Spininjektionseffizienz beträgt 50 %.

Ausgeprägte Änderungen der Asymmetrie im Vergleich zur reinen Fe-Oberflächen treten bei Energien unterhalb von $-0,4$ eV und oberhalb von $+0,7$ eV auf. Diese Abweichungen können sowohl im Molekülzentrum als auch auf den Liganden beobachtet werden. Während die Asymmetrie auf den Liganden den Vorzeichenwechsel der Fe-Oberfläche bei $+0,6$ eV und $-0,1$ eV reproduziert, kann im Molekülzentrum eine durchgehend positive Asymmetrie im Bereich unbesetzter Zustände beobachtet werden, was auf eine stärkere Streuung am Zentralatom im Vergleich zu den Liganden hinweist.

Spinpolarisierte Photoemissionsspektroskopie (engl.: *Spin Polarized Ultraviolet Photoemission Spectroscopy*, SP-UPS) zeigt ausser einem spinpolarisierten HIS mit einer positiven Asymmetrie bei $-0,5$ eV keine weiteren Zustände innerhalb der Energielücke der CuPc Moleküle [Cin10a].

6.4 Diskussion

Zur Erklärung der Reduzierung der magnetischen Asymmetrie beim Tunneln durch das CuPc-Molekül sind zunächst zwei verschiedene Ansätze vorstellbar.

Der erste Ansatz stellt eine spinabhängige effektive Barrierenhöhe aufgrund einer Spinaufspaltung des LUMOs, wie in Abbildung 6.6 skizziert, dar. Diese Erklärung setzt voraus, dass innerhalb der HOMO-LUMO-Energielücke keine Zustände existieren. Der zweite Erklärungsansatz geht im Gegensatz hierzu von der Existenz von Grenzflächenzuständen innerhalb dieser Energielücke aus. Im Folgenden werden nun beide Ansätze diskutiert.

Davon ausgehend, dass zwischen den beiden HOMO und LUMO Zuständen des freien Moleküls keine Zustände entstehen, wenn das Molekül auf der Eisenoberfläche adsorbiert wird, definiert die Energie des LUMO-Zustands eine zusätzliche Tunnelbarriere in „Reihenschaltung“ zur Vakuumbarriere. Beim Tunneln innerhalb der HOMO-LUMO-Energielücke der adsorbierten Moleküle müssen die spinpolarisierten Elektronen diese zusätzliche Energiebarriere durchqueren. Dabei kann die, durch die Differenz zwischen der Fermi-Energie der Eisenoberfläche, bzw. je nach Tunnelrichtung der Spitze, und der unteren Grenze des LUMO-Bands der CuPc-Moleküle gegebene Tunnelbarriere, als eine effektive Injektionsbarriere verstanden werden. Die relative Position der HOMO- und LUMO-Bänder zur Fermi-Energie der Eisenoberfläche wird durch die Hybridisierung dieser Bänder mit den Zuständen der Eisenoberfläche festgelegt. Da die Zustände der Eisenoberfläche eine Spinaufspaltung besitzen, werden die Bänder der Moleküle für spin up (Majoritätszustände) und spin down (Minoritätszustände) gegeneinander verschoben, d.h. das Minoritätsband liegt energetisch etwas höher als das Majoritätsband. Ein ähnlicher Effekt kann auch bei Bildpotentialzuständen beobachtet werden [Don94]. Aus dieser spinabhängigen Anpassung der HOMO- und LUMO-Zustände ergibt sich eine spinabhängige effektive Injektionsbarriere in das CuPc-Molekül. Elektronen mit einem *spin-down* (\downarrow) erfahren demnach eine effektiv höhere Tunnelbarriere als Elektronen mit einem *spin-up* (\uparrow), woraus eine höhere Tunnelwahrscheinlichkeit für Elektronen mit *spin-up* resultiert. An der Fermikante ist die Spinpolarisation der tunnelnden Elektronen negativ (vgl. Abbildung 6.5 d). Die höhere Injektionsbarriere für Minoritätselektronen führt daher zu einer Reduzierung der magnetischen Asymmetrie im Vergleich zur unbedeckten Eisenoberfläche. Nach diesem Modell würde die spinabhängige HOMO-LUMO-Aufspaltung zu einem Spinfilter führen. Allerdings resultiert daraus ein additiver Beitrag zur Asymmetrie. Dies lässt sich folgendermaßen verstehen:

Eine spinpolarisierte Tunnelleitfähigkeit kann durch $g = \bar{g}(1 \pm \varepsilon)$ beschrieben werden, wobei \bar{g} die spingemittelte Tunnelleitfähigkeit und ε die Veränderung der Tunnelleitfähigkeit aufgrund der Spinpolarisation (d.h. die Asymmetrie) darstellt. Für zwei aufeinander folgende spinselektive Tunnelprozesse, wobei ε den Einfluss der ersten spinselektiven Barriere und η die auch ohne Molekül vorhandene Asymmetrie aufgrund der Zustandsdichte beschreibt, gilt für die gesamte Tunnelleitfähigkeit

$$g = \bar{g}(1 \pm \varepsilon)(1 \pm \eta). \quad (6.1)$$

Für die magnetische Asymmetrie nach Gleichung 2.34 ergibt sich daraus

$$A = \frac{(1 + \varepsilon)(1 + \eta) - (1 - \varepsilon)(1 - \eta)}{(1 + \varepsilon)(1 + \eta) + (1 - \varepsilon)(1 - \eta)} = \frac{\varepsilon + \eta}{1 + \varepsilon\eta} \approx \varepsilon + \eta, \quad (6.2)$$

d.h. die Asymmetrien beider Tunnelbarrieren werden addiert.

Ein solcher additiver Beitrag des Moleküls zur Asymmetrie steht jedoch teilweise im Widerspruch zum experimentellen Ergebnis, da im Energiebereich zwischen $-0,4$ eV und $+0,7$ eV ein rein multiplikativer Beitrag zu beobachten ist. Daher kann eine spinaufgespaltene Anpassung der LUMO-Zustände nicht allein für die beobachtete Reduzierung der Asymmetrie beim Tunneln innerhalb der HOMO-LUMO-Energielücke¹ durch das CuPc-Molekül verantwortlich sein.

Mit Hilfe des zweiten Erklärungsansatzes kann ein multiplikativer Beitrag zur magnetischen Asymmetrie des Tunnelstroms erklärt werden. Ein solcher multiplikativer Beitrag kann durch einen zusätzlichen, nicht spinpolarisierten, Tunnelstrom I_{add} erzeugt werden. Beschreibt man einen spinpolarisierten Tunnelstrom, der einen nicht polarisierten Anteil enthält, mit

$$I_{sp} = \bar{I}(1 \pm \varepsilon) + I_{add} = \bar{I} \left((1 \pm \varepsilon) + \underbrace{\frac{I_{add}}{\bar{I}}}_{=\alpha} \right), \quad (6.3)$$

ergibt sich daraus für die Asymmetrie

$$A = \frac{(1 + \varepsilon + \alpha) - (1 - \varepsilon + \alpha)}{(1 + \varepsilon + \alpha) + (1 - \varepsilon + \alpha)} = \frac{\varepsilon}{1 + \alpha}. \quad (6.4)$$

Für $\alpha = 1$ ergibt sich die beobachtete Reduzierung der Asymmetrie ε beim Durchqueren des Moleküls um den Faktor zwei. Hervorgerufen werden kann ein solcher Strom durch die Existenz von Zuständen innerhalb der HOMO-LUMO-Energielücke, an denen die, von der Eisenoberfläche bzw. Spitze ausgehenden, spinpolarisierten Elektronen gestreut werden und dabei ihre „Spininformation“ verlieren. Rechnungen von N. Atodiresei et al. zeigen die Existenz von Zuständen innerhalb dieser Lücke aufgrund der Wechselwirkung zwischen OSCs und der Fe/W(110) Oberfläche [Ato10, Bre10]. Diese Zustände wurden, bis auf einen spinpolarisierten Zustand bei $-0,5$ eV, von Cinchetti mittels SP-UPS et al. [Cin10a] nicht beobachtet. Möglicherweise sind diese Zustände stark delokalisiert und daher in UPS-Spektren nicht sichtbar. In den hier gemessenen STS-Spektren sind innerhalb der HOMO-LUMO-Lücke Abweichungen zwischen

¹Obwohl diese Lücke im Fall, der auf der Eisenoberfläche adsorbierten Moleküle, keine echte Lücke mehr darstellt, da diese mit hybridisierten Grenzflächenzuständen ganz oder teilweise gefüllt ist, wird im Folgenden der Einfachheit halber weiterhin von einer Energielücke gesprochen. Gemeint ist damit der Energiebereich zwischen den HOMO- und LUMO-Zuständen des freien Moleküls, d.h. der Bereich zwischen $-1,1$ eV und $+0,4$ eV

den, auf den Liganden sowie im Zentrum des Moleküls gemessenen, Spektren (Abbildung 6.5 b) und c) und dem Spektrum der reinen Eisenoberfläche (Abbildung 6.5 a) beobachtbar. Dies kann als Hinweis auf die Existenz von nicht spinpolarisierten Zuständen innerhalb der HOMO-LUMO-Lücke im Molekül verstanden werden.

Im Energiebereich zwischen $-0,4$ eV und $-1,2$ eV wird eine deutliche Abweichung des Energieverlaufs der Asymmetrie auf den Molekülen von der Asymmetrie der Eisenoberfläche beobachtet. Diese Abweichung zeigt einen zusätzlichen additiven Beitrag zur Asymmetrie auf und kann als Hinweis auf einen Spinfilter interpretiert werden. Ursache hierfür sind wahrscheinlich zwei spinpolarisierte hybridisierte Grenzflächenzustände bei $-0,5$ eV und -1 eV innerhalb der HOMO-LUMO-Energielücke des CuPC-Moleküls. Der Zustand bei $-0,5$ eV wurde auch von Cinchetti et al. [Cin10a] beobachtet.

Diese beiden sp-HIS reduzieren die bei dieser Energie positive Asymmetrie der Eisenoberfläche, woraus eine negative Spinpolarisation für diese Zustände abgeleitet werden kann. Im Falle einer negativen Spinpolarisation der ferromagnetischen Oberfläche bei dieser Energie könnten daher diese Zustände möglicherweise zu einer Erhöhung der magnetischen Asymmetrie beim Tunneln durch das Molekül führen. Bei $+0,9$ eV kann auf den Liganden eine weitere Abweichung des Verlaufs der Asymmetrie vom Verlauf der Asymmetrie der Eisenoberfläche beobachtet werden (vgl. Abbildung 6.5 e). Die Asymmetrie der Eisenoberfläche besitzt bei $-0,9$ eV ein Maximum ($A_{Fe} = 5,5\%$) und kehrt mit zunehmender Energie ins Negative um. Die Asymmetrie auf den Liganden folgt dem Verlauf der, um den Faktor zwei reduzierten, Asymmetrie der Eisenoberfläche und zeigt ab $0,7$ eV einen stärkeren Anstieg bis $+0,85$ eV. Mit zunehmender Energie bleibt die Asymmetrie nahezu konstant bei $A_{Mol} = 5,8\%$. Auch im Zentrum des Moleküls kann bei dieser Energie eine Abweichung des Energieverlaufs der Asymmetrie beobachtet werden. Sie entspricht einer absoluten Erhöhung der Asymmetrie durch das Molekül. Diese Beobachtung weist auf einen weiteren spinpolarisierten HIS hin. Im Unterschied zu den beiden Zuständen bei $-0,5$ eV und -1 eV ist die Polarität dieses Zustandes in den Liganden positiv und im Molekülzentrum negativ. In Analogie hiermit zeigen spinpolarisierte STM-Messungen auf CoPc/Fe/W(110) bei $+0,05$ eV unterschiedliche Spinpolarisationen auf den Liganden und dem Molekülzentrum [Bre10].

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich das „unmagnetische“ Kupferphthalocyanin-Molekül bei einem spinpolarisierten Ladungstransport auf die effektive Spinpolarisation auswirkt. Ursächlich hierfür sind offensichtlich in erster Linie hybridisierte Grenzflächenzustände. Ein Einfluss aufgrund einer spinselektiven HOMO- LUMO-Anpassung kann als gering, jedoch nicht ausgeschlossen, angesehen werden.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Messungen magnetischer und elektronischer Eigenschaften nanoskopischer Objekte vorgestellt. Als zentrale Messmethode dient dabei die Rastertunnelmikroskopie (STM) und die Rastertunnelspektroskopie (STS). Durch eine in-situ Beschichtung der STM-Spitze mit einer ferromagnetischen Schicht wird eine Spinauflösung der Probenoberflächen erreicht. Die magnetische Sensitivitätsrichtung der Spitze kann durch die Wahl der Materialien und der jeweiligen Schichtdicke definiert werden.

Als erstes Beispiel werden die elektronischen und magnetischen Eigenschaften der metastabilen kubisch raumzentrierten (bcc) Phase von Kobalt vorgestellt. Rastertunnelmikroskopie dient dazu, mit Hilfe atomarer Auflösung eindeutig Bereiche dieser bcc Phase zu identifizieren. Es zeigt sich, dass im Unterschied zu früheren Berichten nur zwei atomare Monolagen bcc-Kobalt als reine Phase vorliegen, während dickere Schichten in eine dicht gepackte Phase rekonstruieren. Mit Hilfe spinaufgelöster Rastertunnelspektroskopie konnte eine hohe Spinpolarisation in bcc-Kobalt nachgewiesen werden.

In dieser Arbeit wurde bcc-Kobalt durch selbstorganisiertes pseudomorphes Wachstum von Kobalt auf den (110)-Flächen der kubisch raumzentrierten Metalle Chrom und Eisen präpariert. Ideal glatte Cr(110) und Fe(110) Oberflächen ließen sich durch Deposition auf W(110)- und Mo(110)-oberflächen herstellen, wodurch die aufwendige Präparation von Fe- bzw. Cr-Einkristalloberflächen vermieden werden konnte. Beide Metalle zeigen ein zueinander sehr ähnliches Wachstumsverhalten und wachsen bei erhöhter Temperatur auf beiden Substraten in der Stranski-Krastanov-Anordnung. Aufgrund der relativ großen Fehlanpassung von knapp zehn Prozent zeigen sowohl Chrom, als auch Eisen bereits ab der zweiten Monolage eine Versetzungsstruktur, mit der die, durch die Fehlanpassung hervorgerufene, Spannung in den epitaktischen Filmen abgebaut wird. Die bcc-Ordnung der Kobaltschichten wurde anhand von atomar aufgelösten STM-Aufnahmen gezeigt. Auf der Cr(110)-Oberfläche weisen die bcc geordneten Kobaltschichten Versetzungen auf, die ebenfalls auf epitaktische Spannungen zurückzuführen sind und deren Struktur durch so genannte Pitsch-Verschiebungen erklärt werden können. Auf Fe(110) konnten derartige Versetzungen nicht beobachtet werden. Daher erscheint Fe(110) sehr gut als

Substrat für das Wachstum unverzerrter bcc-Co Schichten geeignet zu sein. Die gemessenen differentiellen $dI/dU(U)$ -Tunnelleitfähigkeitsspektren sind in guter Übereinstimmung mit Bandstrukturechnungen. Anhand der Beobachtung von Bereichen mit unterschiedlichen differentiellen Tunnelleitfähigkeiten innerhalb der Kobaltlagen kann ab der dritten Monolage auf eine Rekonstruktion in eine dicht gepackte Struktur geschlossen werden. Die unterschiedlichen Tunnelleitfähigkeiten können durch unterschiedliche Stapelfolgen (fcc: ABC oder ACB bzw. hcp: ABA oder ACA) innerhalb dieser Bereiche erklärt werden. Auf der Fe(110)-Oberfläche wird durch das Wachstum der dritten Lage die zunächst bcc geordnete Doppellage ebenfalls in eine dicht gepackte Struktur rekonstruiert. Die bei erhöhten Temperaturen präparierten Kobaltschichten auf Fe(110) zeigten die Bildung einer Grenzflächenlegierung. Eine Verbesserung der bcc Ordnung konnte hierbei nicht explizit beobachtet werden. Die spinpolarisierten Messungen zeigen eine signifikante Erhöhung der Spinpolarisation von bcc Kobalt im Vergleich zu hcp/fcc geordnetem Kobalt ($P_{hcpCo} = 45\%$). Für die Doppellage Co ergibt sich eine Spinpolarisation von $P = +62\%$ und für die Monolage von $P = -19\%$. Interessant ist die Tatsache, dass die Spinpolarisationen der Monolage und der Doppellage ein zueinander unterschiedliches Vorzeichen besitzen. Die Messung der magnetischen Asymmetrien bei Variation des Spitze-Probe-Abstandes zeigte eine Alternierung des Vorzeichens der Asymmetrie unterhalb eines kritischen Abstandes. Dies kann durch die Überlagerung zweier oder mehrerer Oberflächenzustände mit unterschiedlicher räumlicher Reichweite im Vakuum und unterschiedlichen Spinpolarisationen erklärt werden. Für die Anwendung in Tunnelkontakten bedeutet dies, dass die effektive Breite der Tunnelbarriere einen signifikanten Einfluss auf den beobachtbaren Widerstandseffekt (z.B. TMR-Effekt) besitzt. Die Barrieredicken in TMR-Elementen müssen daher dementsprechend optimiert werden, um eine Maximierung des TMR-Effekts zu erreichen.

Die Untersuchung der temperaturabhängigen Spinreorientierung in der Doppellage Fe/Mo(110) zeigt bei steigender Temperatur eine Neuausrichtung der Magnetisierung aus der Senkrechten in die Probenebene bei $T = (13,2 \pm 0,5)$ K. Die elektronische Struktur von Fe/Mo(110) ist abhängig von der Ausrichtung der Magnetisierung relativ zur magnetisch leichten Achse. Eine Magnetisierung entlang einer magnetisch schweren Achse führt zu einem deutlichen Anstieg der spingemittelten differentiellen Tunnelleitfähigkeit bei $E - E_F = -0,7$ eV.

Für diese Experimente wurden Proben mit 1,5 ML Fe auf Mo(110) temperaturabhängig, beginnend bei $T = 5$ K und schrittweiser Erhöhung der Temperatur, mittels spinaufgelöster Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie untersucht. Die STM-Spitzen wurden mit 6 ML Co/10 ML AU beschichtet und waren somit sensitiv auf die senkrechte Komponente der Probenmagnetisierung. Bei den Messungen zeigte sich ein abruptes Verschwinden des magnetischen Kontrastes bei $T_{SRT}(DL) = (13,2 \pm 0,5)$ K. In Analogie zu Ergebnissen von Fe/Mo(110) von Kukunin et al. [Kuk07] kann daraus auf einen Spinreorientierungsübergang

aus der senkrechten [110] Achse in die Probenebene geschlossen werden. Daraus kann für die Anisotropiekonstante der zweiten Ordnung \varkappa_2 eine Zunahme mit steigender Temperatur gefolgert werden. Bereits bei einer Temperatur von 8 K war ein deutlicher Anstieg der differentiellen dI/dU -Tunnelleitfähigkeit bei $E - E_F = -0,7$ eV unterhalb der Fermi-Energie feststellbar. Dieser Anstieg kann mit einer Magnetisierung entlang einer magnetisch harten Achse erklärt werden, woraus folgt, dass die magnetisch leichte Achse bereits bei dieser Temperatur aus der Senkrechten in die Probenebene umschwenkt, während die Magnetisierung in der Senkrechten stehen bleibt. Da dies nur für den Fall einer negativen Anisotropiekonstante der vierten Ordnung, d.h. $\varkappa_4 < 0$, möglich ist, muss es sich hierbei um einen diskontinuierlichen SRT handeln. Weiterhin kann eine Abhängigkeit der elektronischen Struktur von der relativen Ausrichtung der Magnetisierung zum Kristallgitter festgestellt werden. Im Fall der Magnetisierung in der Schichtebene ist die differentielle Tunnelleitfähigkeit der Doppellage bei $E - E_F = -0,1$ eV niedriger als bei einer Magnetisierung senkrecht zur Probenebene. Für die Monolage Fe/Mo(110) kann aufgrund eines Anstiegs der differentiellen Tunnelleitfähigkeit nach der Neuausrichtung der Magnetisierung auf eine Reorientierungstemperatur von $T_{SRT}(ML) > T_{SRT}(DL) > (13,2 \pm 0,5)$ K geschlossen werden. Aus den gemessenen Breiten der Domänenwände wurden effektive Anisotropiekonstanten ermittelt. In der Doppellage ergibt sich daraus bei $T = 5$ K eine Anisotropieenergie von $\epsilon_K = 0,2 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}$ und eine Zunahme auf $\epsilon_K = 0,06 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}$ bei $T = 13$ K. Diese Werte sind deutlich höher als für Volumeneisen und zeigen eine hohe Anisotropie ultradünner Eisenfilme auf der Mo(110)-Oberfläche an. Im Vergleich zu ultradünnen Eisenschichten auf W(110) ist ϵ_K für Fe/Mo(110) geringer, was in der geringeren Spin-Bahn-Kopplung von Molybdän im Vergleich zu Wolfram begründet ist.

Die Experimente zum spinpolarisierten Ladungstransport durch Kupfer-Phthalocyanin-Moleküle (CuPc) auf der Fe/Mo(110) Oberfläche liefern einen wesentlichen Beitrag zum Verständnis der Spintransports an einer Metall/Molekül-Grenzfläche. Durch spinpolarisierte hybridisierte Grenzflächenzustände, die als Spinfilter wirken, wird die effektive Spinpolarisation des Tunnelstroms signifikant beeinflusst.

Die Moleküle liegen auf der Fe/Mo(110)-Oberfläche flach auf und können zwei verschiedene Positionen auf dem Fe(110)-Gitter einnehmen. Eine Möglichkeit stellt die Platzierung des zentralen Kupferatoms zwischen vier Eisenatomen dar, wobei die Liganden parallel bzw. senkrecht zur (100)-Achse des Eisengitters ausgerichtet sind. Bei der anderen Möglichkeit ist das zentrale Kupferatom direkt über einem Eisenatom positioniert. Die Liganden sind in diesem Fall um $\pm 35^\circ$ zur [001]-Achse gedreht. Die beiden Adsorptionsplätze unterscheiden sich weiterhin in der messbaren Höhe des zentralen Kupferatoms, wobei im Falle der gedrehten Moleküle das Zentrum höher erscheint. Dies kann auf unterschiedliche integrierte Zustandsdichten aufgrund der beiden verschiedenen Adsorptionsplätze und der damit verbundenen verschiedenen Hybridisierung der Zustände

von Molekül und Eisenoberfläche zurückgeführt werden. Der LUMO kann bei +0,4 eV identifiziert werden, während der HOMO sich bei -1,1 eV befindet. In der näheren Umgebung der Fermi-Energie wird die magnetische Asymmetrie der Eisenoberfläche beim Transfer durch das Molekül durch Streuprozesse an unpolarisierten Zuständen, die durch eine Hybridisierung der Molekülzustände mit den Zuständen der Eisenoberfläche innerhalb der HOMO-LUMO Energielücke entstanden sind (hybridisierte Grenzflächenzustände (HIS)), bis auf einen Faktor zwei reproduziert. Bei -0,5 eV und -1 eV können innerhalb der Energielücke zwei spinpolarisierte hybridisierte Grenzflächenzustände identifiziert werden. Diese Zustände wirken als Spinfilter und führen zu einem additiven Beitrag zur effektiven Spinpolarisation, wobei die Spinpolarisation im Vergleich zur Eisenoberfläche reduziert wird. Da die Spinpolarisation der Eisenoberfläche bei dieser Energie positiv ist, lässt dies auf eine negative Polarisation dieser Zustände schließen. Bei +0,9 eV kann auf den Liganden ein weiterer spinpolarisierter HIS identifiziert werden, der zu einer Erhöhung der positiven effektiven Spinpolarisation führt. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, einen spinpolarisierten Tunnelstrom, z.B. in TMR-Elementen, durch eine zusätzliche Schicht aus CuPc, oder evtl. anderen π -konjugierten organischen Halbleitern, zu beeinflussen. In dem hier durchgeführten Experiment führte der Tunnelprozess durch das CuPC-Molekül innerhalb der HOMO-LUMO Energielücke an der Fermi-Kante der Eisenoberfläche zwar zu einer Reduzierung der effektiven Spinpolarisation des Tunnelstroms, aber es ist vorstellbar, dass, durch die Wirkung des Moleküls als Spinfilter, auch eine Erhöhung der effektiven Spinpolarisation möglich ist und somit der Magnetowiderstandseffekt in TMR-Bauteilen erhöht werden kann. Für die weitere Forschung auf diesem Gebiet des spinpolarisierten Ladungstransports sollten nicht nur die magnetischen Eigenschaften von organischen Halbleitern, sondern auch die Untersuchung, bzw. die gezielte Beeinflussung von spinpolarisierten hybridisierten Grenzflächenzuständen im Fokus stehen, da hiervon wesentliche Fortschritte zu erwarten sind.

Literaturverzeichnis

- [Ali97] Alippi, P., Marcus, P.M., und Scheffler, M.: *Strained Tetragonal States and Bain Paths in Metals*. In: *Physical Review Letters*, **78**, (1997) 3892–3895.
- [All87] Allenspach, R., Salemink, H., Bischof, A., und Weibel, E.: *Tunneling Experiments Involving Magnetic Tip and Magnetic Sample*. In: *Zeitschrift für Physik B - condensed Matter*, **67**, (1987) 125–128.
- [All90] Allenspach, R., Stampanoni, M., und Bischof, A.: *Magnetic Domains In Thin Epitaxial Co/Au(111) Films*. In: *Physical Review Letters*, **65**, (1990) 3344–3347.
- [All92] Allenspach, R. und Bischof, A.: *Magnetization Direction Switching in Fe/Cu(100) Epitaxial-films - Temperature and Thickness Dependence*. In: *Physical Review Letters*, **69**, (1992) 3385–3388.
- [Ato10] Atodiressei, N., Brede, J., Lazic, P., Caciuc, V., Hoffmann, G., Wiesendanger, R., und Blugel, S.: *Design of the Local Spin Polarization at the Organic-Ferromagnetic Interface*. In: *Physical Review Letters*, **105**, (2010) 066601.
- [Bae03] Baek, I.G., Lee, H.G., Kim, H.J., und Vescovo, E.: *Spin reorientation transition in Fe(110) thin films: The role of surface anisotropy*. In: *Physical Review B*, **67**, (2003) 075401.
- [Bag83] Bagayoko, D., Ziegler, A., und Callaway, J.: *Band-structure of bcc cobalt*. In: *Physical Review B*, **27**, (1983) 7046–7049.
- [Bai24] Bain, E.C.: *The Nature of Martensite Transformation*. In: *Transactions of the American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers*, **70**, (1924) 25–35.
- [Bal06] Balke, B., Fecher, G.H., Kandpal, H.C., Felser, C., Kobayashi, K., Ikenaga, E., Kim, J.J., und Ueda, S.: *Properties of the quaternary half-metal-type Heusler alloy $\text{Co}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$* . In: *Physical Review B*, **74**, (2006) 104405.
- [Ban88] Bander, M. und Mills, D.L.: *Ferromagnetism of ultrathin films*. In: *Physical Review B*, **38**, (1988) 12015–12018.

- [Bar61] Bardeen, J.: *Tunnelling from a Many-Particle Point of View*. In: *Physical Review Letters*, **6**, (1961) 57.
- [Bau58] Bauer, E.: *Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen*. In: *Zeitschrift für Kristallographie*, **110**, (1958) 372.
- [Bau82] Bauer, E.: *Epitaxy of Metals on Metals*. In: *Applied Surface Science*, **11-2**, (1982) 479–494.
- [Ber05] Bergmann, L. und Schaefer, C.: *Lehrbuch der Experimentalphysik: Festkörper*, Band 6 (Walter de Gruyter, 2005), 2 Auflage.
- [Bet95] Bethge, H., Heuer, D., Jensen, C., Reshott, K., und Kohler, U.: *Misfit-related effects in the epitaxial-growth of iron on W(110)*. In: *Surface Science*, **333**, (1995) 878–884.
- [Bin82a] Binning, G., Rohrer, H., Gerber, C., und Weibel, E.: *Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy*. In: *Physical Review Letters*, **49**, (1982) 57–61.
- [Bin82b] Binning, G., Rohrer, H., Gerber, C., und Weibel, E.: *Tunneling through a controllable vacuum gap*. In: *Applied Physics Letters*, **40**, (1982) 178–180.
- [Bin87] Binning, G. und Rohrer, H.: *Scanning tunneling microscopy - from birth to adolescence*. In: *Reviews of Modern Physics*, **59**.
- [Bin89] Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., und Zinn, W.: *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic-structures with antiferromagnetic interlayer exchange*. In: *Physical Review B*, **39**, (1989) 4828–4830.
- [Bod97] Bode, M., Pascal, R., und Wiesendanger, R.: *Scanning tunneling spectroscopy of Fe/W(110) using iron covered probe tips*. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A-vacuum Surfaces and Films*, **15**, (1997) 1285–1290.
- [Bod02a] Bode, M., Heinze, S., Kubetzka, A., Pietzsch, O., Hennefarth, M., Getzlaff, M., Wiesendanger, R., Nie, X., Bihlmayer, G., und Blugel, S.: *Structural, electronic, and magnetic properties of a Mn monolayer on W(110)*. In: *Physical Review B*, **66**, (2002) 014425.
- [Bod02b] Bode, M., Heinze, S., Kubetzka, A., Pietzsch, O., Nie, X., Bihlmayer, G., Blugel, S., und Wiesendanger, R.: *Magnetization-Direction-Dependent Local Electronic Structure Probed by Scanning Tunneling Spectroscopy*. In: *Physical Review Letters*, **89**, (2002) 237205.
- [Bod02c] Bode, M., Kubetzka, A., Pletzsch, O., und Wiesendanger, R.: *Spin-resolved spectro-microscopy of magnetic nanowire arrays*. In: *Surface Science*, **514**, (2002) 135–144.

- [Bod03] Bode, M.: *Spin-polarized scanning tunnelling microscopy*. In: *Reports On Progress In Physics*, **66**, (2003) 523–582.
- [Boz51] Bozorth, R.: *Ferromagnetism* (Van Nostrand, New York, 1951).
- [Bra00] Braun, K.F., Folsch, S., Meyer, G., und Rieder, K.H.: *Observation of Charge-Density Wave Domains on the Cr(110) Surface by Low-Temperature Scanning Tunneling Microscopy*. In: *Physical Review Letters*, **85**, (2000) 3500–3503.
- [Bre10] Brede, J., Atodiresi, N., Kuck, S., Lazic, P., Caciuc, V., Morikawa, Y., Hoffmann, G., Blugel, S., und Wiesendanger, R.: *Spin- and Energy-Dependent Tunneling through a Single Molecule with Intramolecular Spatial Resolution*. In: *Physical Review Letters*, **105**, (2010) 047204.
- [Bus09] Buschbeck, J., Opahle, I., Richter, M., Rossler, U.K., Klaer, P., Kallmayer, M., Elmers, H.J., Jakob, G., Schultz, L., und Fahler, S.: *Full Tunability of Strain along the fcc-bcc Bain Path in Epitaxial Films and Consequences for Magnetic Properties*. In: *Physical Review Letters*, **103**, (2009) 216101.
- [Caz06] Cazacu, A., Murphy, S., und Shvets, I.V.: *Epitaxial growth of ultrathin Cr films on Mo(110) at elevated temperature*. In: *Physical Review B*, **73**, (2006) 045413.
- [Che90] Chen, C.J.: *Tunneling matrix-elements in three-dimensional space - the derivative rule and the sum-rule*. In: *Physical Review B*, **42**, (1990) 8841–8857.
- [Cin09] Cinchetti, M., Heimer, K., Wustenberg, J.P., Andreyev, O., Bauer, M., Lach, S., Ziegler, C., Gao, Y.L., und Aeschlimann, M.: *Determination of spin injection and transport in a ferromagnet/organic semiconductor heterojunction by two-photon photoemission*. In: *Nature Materials*, **8**, (2009) 115–119.
- [Cin10a] Cinchetti, M., Neuschwander, S., und Aeschlimann, M.: *private Kommunikation*, 2010.
- [Cin10b] Cinchetti, M., Neuschwander, S., Fischer, A., Ruffing, A., Mathias, S., Wustenberg, J.P., und Aeschlimann, M.: *Tailoring the Spin Functionality of a Hybrid Metal-Organic Interface by Means of Alkali-Metal Doping*. In: *Physical Review Letters*, **104**, (2010) 217602.
- [Cle93] Clemens, B.M., Osgood, R., Payne, A.P., Lairson, B.M., Brennann, S., White, R.L., und Nix, W.D.: *In-situ observation of anisotropic atrain relaxation in epitaxial Fe (110) films on Mo (110)*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **121**, (1993) 37–41.

- [Col88] Collins, R.A. und Mohammed, K.A.: *Gas sensitivity of some metal phthalocyanines*. In: *Journal of Physics D: Applied Physics*, **21**, (1988) 154.
- [Ded02] Dediu, V., Murgia, M., Maticotta, F.C., Taliani, C., und Barbanera, S.: *Room temperature spin polarized injection in organic semiconductor*. In: *Solid State Communications*, **122**, (2002) 181–184.
- [Die03] Diekhöner, L., Schneider, M.A., Baranov, A.N., Stepanyuk, V.S., Bruno, P., und Kern, K.: *Surface States of Cobalt Nanoislands on Cu(111)*. In: *Physical Review Letters*, **90**, (2003) 236801.
- [Dit98] Dittschar, A., Zharnikov, M., Kuch, W., Lin, M.T., Schneider, C.M., und Kirschner, J.: *Composition-driven spin-reorientation transition in ferromagnetic alloy films*. In: *Physical Review B*, **57**, (1998) R3209–R3212.
- [Don94] Donath, M.: *Spin-dependent electronic-structure At magnetic-surfaces: the low-Miller-index surfaces of nickel*. In: *Surface Science Reports*, **20**, (1994) 251–316.
- [Don99] Donath, M.: *Magnetic order and electronic structure in thin films*. In: *Journal of Physics-condensed Matter*, **11**, (1999) 9421–9436.
- [dP00] de Parga, A.L., Garcia-Vidal, F.J., und Miranda, R.: *Detecting Electronic States at Stacking Faults in Magnetic Thin Films by Tunneling Spectroscopy*. In: *Physical Review Letters*, **85**, (2000) 4365–4368.
- [Ebe05] Ebert, P.: *Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy*. In: *Magnetism goes Nano, 36. IFF Spring School (IFF Jülich, 2005)*.
- [Ehr66] Ehrlich, G. und Hudda, F.G.: *Atomic View of Surface Self-diffusion - Tungsten On Tungsten*. In: *Journal of Chemical Physics*, **44**, (1966) 1039–&.
- [Elm98] Elmers, H.J., Hauschild, J., und Gradmann, U.: *Magnetism of nano-wires of Fe(110) on W(110)*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **177**, (1998) 827–828.
- [Elm99] Elmers, H.: *Magnetismus dünner Filme*. In: *Magnetische Schichtsysteme, 30. Ferienkurs des Instituts für Festkörperforschung (IFF Jülich, 1999)*.
- [Eng91] Engel, B.N., England, C.D., Vanleeuwen, R.A., Wiedmann, M.H., und Falco, C.M.: *Interface Magnetic-anisotropy In Epitaxial Superlattices*. In: *Physical Review Letters*, **67**, (1991) 1910–1913.
- [Far98] Farle, M.: *Ferromagnetic resonance of ultrathin metallic layers*. In: *Reports On Progress In Physics*, **61**, (1998) 755–826.

- [Fee87] Feenstra, R.M. und Stroscio, J.A.: *Tunneling Spectroscopy of the Gaas(110) Surface*. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **5**, (1987) 923–929.
- [Fee90] Feenstra, R.M. und Lutz, M.A.: *Formation of the 5x5 reconstruction on cleaved Si(111) surfaces studied by scanning tunneling microscopy*. In: *Physical Review B*, **42**, (1990) 5391–5394.
- [Fee91] Feenstra, R.M. und Lutz, M.A.: *Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of the Si(111) 5 × 5 surface*. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **9**, (1991) 716–720.
- [Fel07] Felser, C., Fecher, G.H., und Balke, B.: *Spintronics: A Challenge for Materials Science and Solid-State Chemistry*. In: *Angewandte Chemie-international Edition*, **46**, (2007) 668–699.
- [Föl98] Fölsch, S., Helms, A., Steidinger, A., und Rieder, K.H.: *Reconstructed pseudomorphic Co films on the Cr(110) surface*. In: *Physical Review B*, **57**, (1998) R4293–R4296.
- [Föl99] Fölsch, S., Helms, A., Steidinger, A., und Rieder, K.H.: *Pseudomorphic Co/Cr(110) films investigated by magnetic dichroism in photoemission and MOKE*. In: *Journal Of Magnetism And Magnetic Materials*, **191**, (1999) 38–44.
- [Fly77] Flynn, B.W., Owen, A.E., und Mavor, J.: *Dye-sensitization of photoconductivity of SiO₂-films in M-dye-SiO₂-M structures*. In: *Journal of Physics C-Solid State Physics*, **10**, (1977) 4051–4059.
- [For97] Forrest, S.R.: *Ultrathin Organic Films Grown by Organic Molecular Beam Deposition and Related Techniques*. In: *Chemical Reviews*, **97**, (1997) 1793–1896.
- [For04] Forrest, S.R.: *The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic*. In: *Nature*, **428**, (2004) 911–918.
- [Fri93] Fritzsche, H. und Gradmann, U.: *Kinetic roughening in epitaxial growth of bcc (110) Films*. In: *Common Themes and Mechanisms of Epitaxial Growth*, **312**, (1993) 321–326.
- [Fri94] Fritzsche, H., Kohlhepp, J., Elmers, H.J., und Gradmann, U.: *Angular-dependence of perpendicular magnetic surface anisotropy and the spin-reorientation transition*. In: *Physical Review B*, **49**, (1994) 15665–15668.
- [Fru99] Fruchart, O., Nozieres, J.P., und Givord, D.: *Growth and interface magnetic anisotropy of epitaxial Mo/Fe/Mo(110) and W/Fe/W(110) ultrathin films*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **207**, (1999) 158–167.

- [Gal05] Galanakis, I. und Dederichs, P.: *Half-metallic Alloys* (Springer, 2005).
- [Gho74] Ghosch, A.H., Morel, D., Feng, T., und Shaw, R.F. and Rowe, C.: *Photovoltaic and rectification properties of Al/Mg-phthalocyanine/Ag Schottky-barrier cells*. In: *Journal of Applied Physics*, **1**, (1974) 22–33.
- [Gio96] Giordano, H., Atrei, A., Torrini, M., Bardi, U., Gleeson, M., und Barnes, C.: *Evidence for a strain-stabilized bct phase of cobalt deposited on Pd(100): An x-ray photoelectron diffraction study*. In: *Physical Review B*, **54**, (1996) 11762–11768.
- [Gra68] Gradmann, U. und Müller, J.: *Flat ferromagnetic epitaxial Ni₄₈/Fe₅₂(111) films of few atomic layers*. In: *Physica Status Solidi*, **27**, (1968) 313–&.
- [Gra82] Gradmann, U. und Waller, G.: *Periodic lattice-distortions in epitaxial-films of Fe(110) on W(110)*. In: *Surface Science*, **116**, (1982) 539–548.
- [Gre07] Grechnev, A., Di Marco, I., Katsnelson, M.I., Lichtenstein, A.I., Wills, J., und Eriksson, O.: *Theory of bulk and surface quasiparticle spectra for Fe, Co, and Ni*. In: *Physical Review B*, **76**, (2007) 035107.
- [Han58] Hansen, M. und Anderko, K.: *Constitution of binary Alloys* (McGraw-Hill Book Company, Inc., 1958).
- [Han05] Hanke, T., Bode, M., Krause, S., Berbil-Bautista, L., und Wiesendanger, R.: *Temperature-dependent scanning tunneling spectroscopy of Cr(001): Orbital Kondo resonance versus surface state*. In: *Physical Review B*, **72**, (2005) 085453.
- [Hau98] Hauschild, J.: *Morphologie und Magnetismus ultradünner Eisenfilme auf vizinalem Wolfram(110)*. Dissertation, TU Clausthal, 1998.
- [Hei98] Heinze, S., Blugel, S., Pascal, R., Bode, M., und Wiesendanger, R.: *Prediction of bias-voltage-dependent corrugation reversal for STM images of bcc (110) surfaces: W(110), Ta(110), and Fe(110)*. In: *Physical Review B*, **58**, (1998) 16432–16445.
- [Hei99] Heinz, K., Muller, S., und Hammer, L.: *Crystallography of ultrathin iron, cobalt and nickel films grown epitaxially on copper*. In: *Journal of Physics-condensed Matter*, **11**, (1999) 9437–9454.
- [Heu03] Heusler, F.: *Über magnetische Manganlegierungen*. In: *Verhandlungen der deutschen physikalischen Gesellschaft*, **5**, (1903) 219.
- [Hub98] Hubert, A. und Schäfer, R.: *Magnetic Domains* (Springer, Berlin, 1998).
- [Iba08] Ibach, H. und Lüth, H.: *Festkörperphysik* (2008).

- [Izq00] Izquierdo, J. und Demangeat, C.: *Magnetic configurations of a Co monolayer on Cr substrates*. In: *Physical Review B*, **62**, (2000) 12287–12293.
- [Izq05] Izquierdo, M., Davila, M.E., Avila, J., Ascolani, H., Teodorescu, C.M., Martin, M.G., Franco, N., Chrost, J., Arranz, A., und Asensio, M.C.: *Epitaxy and Magnetic Properties of Surfactant-Mediated Growth of bcc Cobalt*. In: *Physical Review Letters*, **94**, (2005) 187601.
- [Jen96] Jensen, C., Reshoft, K., und Kohler, U.: *Direct observation of strain relaxation in iron layers on W(110) by time-resolved STM*. In: *Applied Physics A-materials Science & Processing*, **62**, (1996) 217–221.
- [Jen06] Jensen, P.J. und Bennemann, K.H.: *Magnetic structure of films: Dependence on anisotropy and atomic morphology*. In: *Surface Science Reports*, **61**, (2006) 129–199.
- [Jul75] Julliere, M.: *Tunneling between ferromagnetic-films*. In: *Physics Letters A*, **54**, (1975) 225–226.
- [Kal06] Kallmayer, M., Schneider, H., Jakob, G., Elmers, H.J., Kroth, K., Kandpal, H.C., Stumm, U., und Cramm, S.: *Reduction of surface magnetism of $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ Heusler alloy films*. In: *Applied Physics Letters*, **88**.
- [Kan06] Kandpal, H.C., Felser, C., und Seshadri, R.: *Covalent bonding and the nature of band gaps in some half-Heusler compounds*. In: *Journal of Physics D-applied Physics*, **39**, (2006) 776–785.
- [Kan07a] Kandpal, H.C., Fecher, G.H., und Felser, C.: *Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds*. In: *Journal of Physics D-applied Physics*, **40**, (2007) 1507–1523.
- [Kan07b] Kandpal, H.C., Ksenofontov, V., Wojcik, M., Seshadri, R., und Felser, C.: *Electronic structure, magnetism and disorder in the Heusler compound Co_2TiSn* . In: *Journal Of Physics D-Applied Physics*, **40**, (2007) 1587–1592.
- [Kar09] Karacuban, H., Lange, M., Schaffert, J., Weingart, O., Wagner, T., und Möller, R.: *Substrate-induced symmetry reduction of CuPc on Cu(111): An LT-STM study*. In: *Surface Science*, **603**, (2009) L39–L43.
- [Küb83] Kübler, J., Williams, A.R., und Sommers, C.B.: *Formation and coupling of magnetic moments In Heusler alloys*. In: *Physical Review B*, **28**, (1983) 1745–1755.

- [Kim01] Kim, H.J., Vescovo, E., Heinze, S., und Blugel, S.: *Surface electronic structure of Fe(110): the importance of surface resonances*. In: *Surface Science*, **478**, (2001) 193–202.
- [Kla05] Klautau, A.B. und Eriksson, O.: *Ab initio calculation of the magneto-crystalline anisotropy and spin and orbital moments of a bcc Co(001) surface*. In: *Physical Review B*, **72**, (2005) 014459.
- [Kla08] Klaer, P.: *Röntgenzirkulardichroismus an Heusler-Volumenproben*. Diplomarbeit, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, 2008.
- [Kub03] Kubetzka, A., Pietzsch, O., Bode, M., Ravlic, R., und Wiesendanger, R.: *Spin-Polarized STM investigation of Magnetic Domain Walls*. In: *Acta Physica Polonica A*, **104**, (2003) 259–268.
- [Kuk07] Kukunin, A., Prokop, J., und Elmers, H.J.: *Temperature-driven spin reorientation transition in Fe/Mo(110) nanostructures*. In: *Physical Review B*, **76**, (2007) 134414.
- [Lez07] Lezaic, M., Mavropoulos, P., und Blugel, S.: *First-principles prediction of high Curie temperature for ferromagnetic bcc-Co and bcc-FeCo alloys and its relevance to tunneling magnetoresistance*. In: *Applied Physics Letters*, **90**, (2007) 082504.
- [Li89] Li, H. und Tonner, B.P.: *Direct experimental identification of the structure of ultrathin films of bcc iron and metastable bcc and fcc cobalt*. In: *Physical Review B*, **40**, (1989) 10241–10248.
- [Lib99] Liberati, M., Panaccione, G., Sirotti, F., Prieto, P., und Rossi, G.: *Surface magnetometry with photoemission dichroism: Ultrathin epitaxial Fe-Co bcc alloys on Fe(100)*. In: *Physical Review B*, **59**, (1999) 4201–4206.
- [Liu06] Liu, W., Li, J.C., Zheng, W.T., und Jiang, Q.: *NiAl(110)/Cr(110) interface: A density functional theory study*. In: *Physical Review B*, **73**, (2006) 205421.
- [Lut95] Lutz, M.A., Feenstra, R.M., und Chu, J.O.: *Scanning tunneling microscopy of in-situ cleaved and hydrogen passivated Si(110) cross-sectional surfaces*. In: *Surface Science*, **328**, (1995) 215–226.
- [Mad88] Madru, R., Guillaud, G., Alsadoun, M., Maitrot, M., Andre, J.J., Simon, J., und Even, R.: *A well-behaved field-effect transistor based on an intrinsic molecular semiconductor*. In: *Chemical Physics Letters*, **145**, (1988) 343–346.

- [Mai87] Maitrot, M., Guillaud, G., Boudjemba, B., Andre, J.J., Strzelecka, H., Simon, J., und Even, R.: *Lutetium bisphthalocyanine - the 1st molecular semiconductor - conduction properties of thin-films of P-doped and N-doped materials*. In: *Chemical Physics Letters*, **133**, (1987) 59–62.
- [Mai06] Maier, M.: *The LT-STM: Ultimate Performance STM and STS at Low Temperatures Technical Details and Exciting Applications*. Omicron Nanotechnology GmbH, Taunusstein, 2006.
- [Mal98] Malzbender, J., Przybylski, M., Giergiel, J., und Kirschner, J.: *Epitaxial growth of Fe on Mo(110) studied by scanning tunneling microscopy*. In: *Surface Science*, **414**, (1998) 187–196.
- [Man06] Man, K.L., Guo, Q., und Altman, M.S.: *Growth and oxidation of Cr films on the W(100) surface*. In: *Surface Science*, **600**, (2006) 1060–1070.
- [Mar76] Markov, I.: *Saturation nucleus density in electrodeposition of metals onto inert electrodes 1. theory*. In: *Thin Solid Films*, **35**, (1976) 11–20.
- [May10] Mayer, M.A., Ruppalt, L.B., Hebert, D., Lyding, J., und Rockett, A.A.: *Scanning tunneling microscopic analysis of Cu(In,Ga)Se₂ epitaxial layers*. In: *Journal of Applied Physics*, **107**, (2010) 034906.
- [Mer66] Mermin, N.D. und Wagner, H.: *Absence of ferromagnetism or anti-ferromagnetism in one- or 2-dimensional isotropic heisenberg models*. In: *Physical Review Letters*, **17**, (1966) 1133–1136.
- [Met94] Metoki, N., Donner, W., und Zabel, H.: *Grazing-incidence x-ray-scattering study of (001)-oriented high-quality epitaxial Co/Cr superlattices*. In: *Physical Review B*, **49**, (1994) 17351–17359.
- [Met07] Methfessel, T., Pratzer, M., und Elmers, H.J.: *Structural, electronic, and magnetic properties of pseudomorphic CrFe nanostripes on W(110)*. In: *Physical Review B*, **75**, (2007) 184419.
- [Mez82a] Mezey, L.Z. und Giber, J.: *calculation of surface free-energies and characteristics of surface segregation of solids*. In: *Surface Science*, **117**, (1982) 220–231.
- [Mez82b] Mezey, L.Z. und Giber, J.: *The surface free-energies of solid chemical-elements - calculation from internal free enthalpies of atomization*. In: *Japanese Journal Of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers*, **21**, (1982) 1569–1571.
- [Miy95] Miyazaki, T. und Tezuka, N.: *Spin polarized tunneling in ferromagnet/insulator/ferromagnet junctions*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **151**, (1995) 403–410.

- [Mon06] Monchesky, T.L. und Unguris, J.: *Magnetic properties of Co/GaAs(110)*. In: *Physical Review B*, **74**, (2006) 241301.
- [Mor78] Moruzzi, V.L., Janak, J.F., und Williams, A.R.: *Calculated Electronic properties of metals* (Pergamon Press, New York, 1978).
- [Mur02] Murphy, S., Mathuna, D.M., Mariotto, G., und Shvets, I.V.: *Morphology and strain-induced defect structure of ultrathin epitaxial Fe films on Mo(110)*. In: *Physical Review B*, **66**, (2002) 195417.
- [Omi94] Omicron Nanotechnology GmbH: *The STM Control Unit Technical Reference Manual*, 1994.
- [Omi96] Omicron Nanotechnology GmbH: *The SPM SO V2.1 Software Manual*, 1996.
- [Omi06] Omicron Nanotechnology GmnH, Limburger Strasse 75: *The Low Temperature STM User's Guide*, special version Auflage, 2006.
- [Osi99] Osing, J. und Shvets, I.V.: *A scanning tunneling microscopy study on the growth of iron on a vicinal Mo(110) surface*. In: *Surface Science*, **435**, (1999) 440–444.
- [Pap90] Pappas, D.P., Kamper, K.P., und Hopster, H.: *Reversible Transition between Perpendicular and In-Plane Magnetization in Ultrathin Films*. In: *Physical Review Letters*, **64**, (1990) 3179–3182.
- [Par05] Park, C.H., Lee, B.C., und Lee, J.I.: *Spin-asymmetry of the density of states for bulk and surface Fe, Co, and Ni*. In: *Journal Of The Korean Physical Society*, **47**, (2005) 655–665.
- [Per29] Persson, E.: *Über den Bau der Heuslerschen Legierungen*. In: *Zeitschrift für Physik A*, **57**, (1929) 115–133.
- [Pet04] Pettersen, E.F., Goddard, T.D., Huang, C.C., Couch, G.S., Greenblatt, D.M., Meng, E.C., und Ferrin, T.E.: *UCSF chimera - A Visualization System for Exploratory Research and Analysis*. In: *Journal of Computational Chemistry*, **25**, (2004) 1605–1612.
- [Pie88] Pierce, D.T.: *Spin-Polarized Electron-microscopy*. In: *Physica Scripta*, **38**, (1988) 291–296.
- [Pit59] Pitsch, W.: *The Martensite Transformation in Thin Foils of Iron-Nitrogen Alloys*. In: *Philosophical Magazine*, **4**, (1959) 577–584.
- [Pot29] Potter, H.: *The X-ray structure and magnetic properties of single crystals of Heusler alloy*. In: *Proceedings of the Physical Society*, **41**, (1929) 135.

- [Pra00] Pratzer, M.: *Magnetische und strukturelle Eigenschaften von ultradünnen Schichten aus Fe_xCo_{1-x} -Legierungen auf Wolfram(110)*. Diplomarbeit, Universität Mainz, 2000.
- [Pra01] Pratzer, M., Elmers, H.J., Bode, M., Pietzsch, O., Kubetzka, A., und Wiesendanger, R.: *Atomic-Scale Magnetic Domain Walls in Quasi-One-Dimensional Fe Nanostripes*. In: *Physical Review Letters*, **87**.
- [Pra03] Pratzer, M. und Elmers, H.J.: *Domain wall energy in quasi-one-dimensional Fe/W(110) nanostripes*. In: *Physical Review B*, **67**.
- [Pra04a] Pratzer, M. und Elmers, H.J.: *Structure and electronic properties of ultrathin Co films on W(110)*. In: *Surf. Sci.*, **550**, (2004) 223–232.
- [Pra04b] Pratzer, M. und Elmers, H.J.: *Structure and electronic properties of ultrathin Co films on W(110)*. In: *Surface Science*, **550**, (2004) 223–232.
- [Pra04c] Pratzer, M.: *Untersuchung magnetischer Nanostrukturen mittels Rastertunnelspektroskopie und Kerr-Magnetometrie am Beispiel von Fe, Co, Co-Fe und Fe-Mn Nanostrukturen*. Dissertation, Universität Mainz, 2004.
- [Pra05a] Pratzer, M. und Elmers, H.J.: *Heteroepitaxial growth of $Co_{1-x}Fe_x$ alloy monolayers on W(110)*. In: *Journal of Crystal Growth*, **275**, (2005) 150–156.
- [Pra05b] Pratzer, M. und Elmers, H.J.: *Scanning tunneling spectroscopy of dislocations in ultrathin fcc and hcp Co films*. In: *Physical Review B*, **72**, (2005) 035460.
- [Pra07] Pramanik, S., Stefanita, C.G., Patibandla, S., Bandyopadhyay, S., Garre, K., Harth, N., und Cahay, M.: *Observation of extremely long spin relaxation times in an organic nanowire spin valve*. In: *Nature Nanotechnology*, **2**, (2007) 216–219.
- [Pri85] Prinz, G.A.: *Stabilization of bcc Co via Epitaxial Growth on GaAs*. In: *Physical Review Letters*, **54**, (1985) 1051–1054.
- [Pri98] Prinz, G.A.: *Magnetoelectronics*. In: *Science*, **282**, (1998) 1660–1663.
- [Pro04] Prokop, J., Valdaitsev, D.A., Kukunin, A., Pratzer, M., Schonhense, G., und Elmers, H.J.: *Strain-induced magnetic anisotropies in Co films on Mo(110)*. In: *Physical Review B*, **70**.
- [Pro05] Prokop, J., Kukunin, A., und Elmers, H.J.: *Magnetic anisotropies and coupling mechanisms in Fe/Mo(110) nanostripes*. In: *Physical Review Letters*, **95**.

- [Pro06] Prokop, J., Kukunin, A., und Elmers, H.J.: *Spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy of ultrathin Fe/Mo(110) films using W/Au/Co tips*. In: *Physical Review B*, **73**, (2006) 014428.
- [Prz89] Przybylski, M., Kaufmann, I., und Gradmann, U.: *Mössbauer analysis of ultrathin ferromagnetic Fe(110) films on W(110) coated by Ag*. In: *Physical Review B*, **40**, (1989) 8631–8640.
- [Püt01] Pütter, S., Ding, H.F., Millev, Y.T., Oepen, H.P., und Kirschner, J.: *Magnetic susceptibility: An easy approach to the spin-reorientation transition*. In: *Physical Review B*, **64**, (2001) 092409.
- [Rot05] Rotenberg, E., Freelon, B.K., Koh, H., Bostwick, A., Rossmagel, K., Schmid, A., und Kevan, S.D.: *Electron states and the spin density wave phase diagram in Cr(110) films*. In: *New Journal of Physics*, **7**, (2005) 114.
- [Roy28] Royer, L.: *Sur l'accolement régulier des cristaux d'espèces différentes*. In: *Bull. Soc. franç. Miner.*, **51**, (1928) 7.
- [Rya04] Ryan, P., Winarski, R.P., Keavney, D.J., Freeland, J.W., Rosenberg, R.A., Park, S., und Falco, C.M.: *Enhanced magnetic orbital moment of ultrathin Co films on Ge(100)*. In: *Physical Review B*, **69**, (2004) 054416.
- [Sal92] Salemink, H.W.M., Albrechtsen, O., und Koenraad, P.: *Tunneling spectroscopy across GaAs/Al_xGa_{1-x}As interfaces at nanometer resolution*. In: *Physical Review B*, **45**, (1992) 6946–6949.
- [San99] Sander, D.: *The correlation between mechanical stress and magnetic anisotropy in ultrathin films*. In: *Reports On Progress In Physics*, **62**, (1999) 809–858.
- [San04] Sander, D.: *The magnetic anisotropy and spin reorientation of nanostructures and nanoscale films*. In: *Journal of Physics-condensed Matter*, **16**, (2004) R603–R636.
- [Sch66] Schwoebel, R. und Shipsey, E.J.: *Step Motion on Crystal Surfaces*. In: *Journal of Applied Physics*, **37**, (1966) 3682–&.
- [Sch69] Schwoebel, R.: *Step Motion on Crystal Surfaces .2*. In: *Journal of Applied Physics*, **40**, (1969) 614–&.
- [Sch71] Schwoebel, R.: *Step Motion on Crystal Surfaces*. In: *Journal of the Electrochemical Society*, **118**, (1971) C216–&.
- [Sch91] Scheurer, F., Carriere, B., Deville, J.P., und Beaurepaire, E.: *Evidence of epitaxial growth of bcc Co on Cr(100)*. In: *Surface Science*, **245**, (1991) L175–L178.

- [Sea09] Seagate Technology LLC: *Product Manual - Barracuda LP Series SATA*, e Auflage, 2009.
- [Sel85] Selloni, A., Carnevali, P., Tosatti, E., und Chen, C.D.: *Voltage-dependent scanning-tunneling microscopy of a crystal surface: Graphite*. In: *Physical Review B*, **31**, (1985) 2602–2605.
- [Sel01] Sellmann, R., Fritzsche, H., Maletta, H., Leiner, V., und Siebrecht, R.: *Spin-reorientation transition and magnetic phase diagrams of thin epitaxial Au(111)/Co films with W and Au overlays*. In: *Physical Review B*, **64**, (2001) 054418.
- [Shv92] Shvets, I.V., Wiesendanger, R., Burgler, D., Tarrach, G., Guntherodt, H.J., und Coey, J.M.D.: *Progress towards spin-polarized scanning tunneling microscopy*. In: *Journal of Applied Physics*, **71**, (1992) 5489–5499.
- [Slo89] Slonczewski, J.C.: *Conductance and exchange coupling of two ferromagnets separated by a tunneling barrier*. In: *Physical Review B*, **39**, (1989) 6995–7002.
- [Spi04] Spiridis, N., Slezak, T., Zajac, M., und Korecki, J.: *Ultrathin epitaxial bcc-Co films stabilized on Au(001)-hex*. In: *Surface Science*, **566**, (2004) 272–277.
- [Str95] Stroscio, J.A., Pierce, D.T., Davies, A., Celotta, R.J., und Weinert, M.: *Tunneling Spectroscopy of bcc(001) Surface States*. In: *Physical Review Letters*, **75**, (1995) 2960–2963.
- [Str01] Strijkers, G.J., Ji, Y., Yang, F.Y., Chien, C.L., und Byers, J.M.: *Andreev reflections at metal/superconductor point contacts: Measurement and analysis*. In: *Physical Review B*, **63**, (2001) 104510.
- [Tak08] Takacs, A.F., Witt, F., Schmaus, S., Balashov, T., Bowen, M., Beaupaire, E., und Wulfhekel, W.: *Electron transport through single phthalocyanine molecules studied using scanning tunneling microscopy*. In: *Physical Review B*, **78**, (2008) 233404.
- [Tar91] Tarrach, G., Wiesendanger, R., Bürgler, D., Scandella, L., und Güntherodt, H.J.: *Laser and thermal annealed Si(111) and Si(001) surfaces studied by scanning tunneling microscopy*. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **9**, (1991) 677–680.
- [Ted73] Tedrow, P.M. und Meservey, R.: *Spin Polarization of Electrons Tunneling From Films of Fe, Co, Ni, and Gd*. In: *Physical Review B*, **7**, (1973) 318–326.

- [Ter83] Tersoff, J. und Hamann, D.R.: *Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope*. In: *Physical Review Letters*, **50**, (1983) 1998–2001.
- [Ter85] Tersoff, J. und Hamann, D.R.: *Theory of the scanning tunneling microscope*. In: *Physical Review B*, **31**, (1985) 805–813.
- [Tok91] Tokumoto, H., Wakiyama, S., Miki, K., Murakami, H., Okayama, S., und Kajimura, K.: *Scanning tunneling microscopy of microstructures on cleaved Si(111) surface*. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **9**, (1991) 695–698.
- [Ukr96] Ukraintsev, V.A.: *Data evaluation technique for electron-tunneling spectroscopy*. In: *Physical Review B*, **53**, (1996) 11176–11185.
- [Uso04] Usov, V., Murphy, S., und Shvets, I.: *In situ study of in-plane magnetic anisotropy of ultrathin Fe films on Mo(110)*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **283**, (2004) 357–363.
- [Val04] Valvidares, S.M., Schroeder, T., Robach, O., Quiros, C., Lee, T.L., und Ferrer, S.: *Structural and magnetic properties of bcc Co films on Pt(001) studied by magnetic resonant surface x-ray diffraction, STM, and magneto-optical Kerr effect*. In: *Physical Review B*, **70**, (2004) 224413.
- [vB06] von Bergmann, K., Bode, M., und Wiesendanger, R.: *Coverage-dependent spin reorientation transition temperature of the Fe double-layer on W(110) observed by scanning tunneling microscopy*. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **305**, (2006) 279–283.
- [Wan94] Wang, C.P., Wu, S.C., Jona, F., und Marcus, P.M.: *Epitaxy of Co on FeAl(001) .1. 1×1 films*. In: *Physical Review B*, **49**, (1994) 17385–17390.
- [Web71] Webster, P.J.: *Magnetic and chemical order in heusler alloys containing cobalt and manganese*. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **32**, (1971) 1221–&.
- [Wie90] Wiesendanger, R., Gunterodt, H.J., Güntherodt, G., Gambino, R.J., und Ruf, R.: *Observation of Vacuum Tunneling of Spin-polarized Electrons with the Scanning Tunneling Microscope*. In: *Physical Review Letters*, **65**, (1990) 247–250.
- [Wie91] Wiesendanger, R., Burgler, D., Tarrach, G., Schaub, T., Hartmann, U., Güntherodt, H.J., Shvets, I.V., und Coey, J.M.D.: *Recent Advances in Scanning Tunneling Microscopy Involving Magnetic Probes and Samples*. In: *Applied Physics A-materials Science & Processing*, **53**, (1991) 349–355.

- [Wie03] Wieldraaijer, H., Kohlhepp, J.T., LeClair, P., Ha, K., und de Jonge, W.J.M.: *Growth of epitaxial bcc Co(001) electrodes for magnetoresistive devices*. In: *Physical Review B*, **67**, (2003) 224430.
- [Wie04] Wiebe, J., Sacharow, L., Wachowiak, A., Bihlmayer, G., Heinze, S., Blügel, S., Morgenstern, M., und Wiesendanger, R.: *Scanning tunneling spectroscopy on Co(0001): Spectroscopic signature of stacking faults and dislocation lines*. In: *Physical Review B*, **70**, (2004) 035404.
- [Win10] Winter, M.: *WebElements: the periodic table on the web*, 2010. Zugriff am 9.Juni 2010.
- [Wol01] Wolf, S.A., Awschalom, D.D., Buhrman, R.A., Daughton, J.M., von Molnar, S., Roukes, M.L., Chtchelkanova, A.Y., und Treger, D.M.: *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*. In: *Science*, **294**, (2001) 1488–1495.
- [Wor96] Wormeester, H., Huger, E., und Bauer, E.: *Growth and electronic structure of thin epitaxial Pd and Co films on W(100)*. In: *Physical Review B*, **54**, (1996) 17108–17117.
- [Wor01] Wortmann, D., Heinze, S., Kurz, P., Bihlmayer, G., und Blügel, S.: *Resolving Complex Atomic-Scale Spin Structures by Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy*. In: *Physical Review Letters*, **86**, (2001) 4132–4135.
- [Wu98] Wu, Y.Z., Ding, H.F., Jing, C., Wu, D., Liu, G.L., Gordon, V., Dong, G.S., Jin, X.F., Zhu, S., und Sun, K.: *In-plane magnetic anisotropy of bcc Co on GaAs(001)*. In: *Physical Review B*, **57**, (1998) 11935–11938.
- [Wul01] Wulfhekel, W., Gutjahr-Löser, T., Zavaliche, F., Sander, D., und Kirschner, J.: *Relation between structure, stress, and magnetism in Co/W(001)*. In: *Physical Review B*, **64**, (2001) 144422.
- [Xue05] Xue, J.G., Rand, B.P., Uchida, S., und Forrest, S.R.: *A Hybrid Planar-Mixed Molecular Heterojunction Photovoltaic Cell*. In: *Advanced Materials*, **17**, (2005) 66–+.
- [Yu92] Yu, E.T., Johnson, M.B., und Halbout, J.M.: *Electrical profiling of Si(001) p-n-junctions by scanning tunneling microscopy*. In: *Applied Physics Letters*, **61**, (1992) 201–203.
- [Yua06] Yuasa, S., Fukushima, A., Kubota, H., Suzuki, Y., und Ando, K.: *Giant tunneling magnetoresistance up to 410% at room temperature in fully epitaxial Co/MgO/Co magnetic tunnel junctions with bcc Co(001) electrodes*. In: *Applied Physics Letters*, **89**, (2006) 042505.

- [Zha10] Zhan, Y.Q., Holmstrom, E., Lizarraga, R., Eriksson, O., Liu, X.J., Li, F.H., Carlegrim, E., Stafstrom, S., und Fahlman, M.: *Efficient Spin Injection Through Exchange Coupling at Organic Semiconductor/Ferromagnet Heterojunctions*. In: *Advanced Materials*, **22**, (2010) 1626–+.

Abkürzungsverzeichnis

| | |
|---------|---|
| bcc | kubisch-raumzentriert (engl.: <i>body centered cubic</i>) |
| bct | tetragonal verzerrt raumzentriert (engl.: <i>body centered tetragonal</i>) |
| CCM | Konstantstrommodus (engl.: <i>Constant-Current-Mode</i>) |
| CHM | Konstanthöhenmodus (engl.: <i>Constant-Height-Mode</i>) |
| cp | dicht gepackt (engl.: <i>closed packed</i>) |
| CuPc | Kupfer-Phthalocyanin |
| DFT | Dichtefunktionaltheorie (engl.: <i>Density Functional Theory</i>) |
| DL | <u>D</u> oppellage |
| fcc | kubisch flächenzentriert (engl.: <i>face centered cubic</i>) |
| GMR | Riesenmagnetowiderstand (engl.: <i>Giant Magnetoresistance</i>) |
| hcp | hexagonal dichtgepackt (engl.: <i>hexagonal closed packed</i>) |
| HIS | hybridisierter Grenzflächenzustand (engl.: <i>Hybrid Interface State</i>) |
| HOMO | höchster besetzter Molekularer Orbitalzustand (engl.: <i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>) |
| HR-LEED | hochaufgelöste niederenergetische Elektronenbeugung (engl.: <i>High-Resolution Low Energy Electron Diffraction</i>) |
| LDA | Lokale Dichteannäherung (engl.: <i>Local Density Approximation</i>) |
| LDOS | lokale Zustandsdichte (engl.: <i>Local Density of States</i>) |
| LEED | niederenergetische Elektronenbeugung (engl.: <i>Low Energy Electron Diffraction</i>) |
| LEEM | Niederenergetisches Elektronenmikroskop (engl.: <i>Low Energy Electron Microscope</i>) |

| | |
|--------|--|
| LUMO | niedrigster unbesetzter Molekularer Orbitalzustand (engl.: <i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>) |
| MBE | Molekularstrahlepitaxie (engl.: <i>molecular beam epitaxy</i>) |
| ML | <u>Monol</u> age |
| MPc | Metallbasiertes-Phthalocyanin (engl.: <i>Metallbased Phthalocyanine</i>) |
| MRAM | Magnetischer Speicher (engl.: <i>Magneto</i> resistive- <i>Random Access Memory</i>) |
| OLED | Organische lichtemittierende Diode (engl.: <i>Organic Light Emitting Diode</i>) |
| OSC | Organischer Halbleiter (engl.: <i>Organic Semiconductor</i>) |
| RT | <u>Raum</u> temperatur |
| SEM | Rasterelektronenmikroskop (engl.: <i>Scanning Elektron Microscope</i>) |
| sp-STs | spinpolarisierte Rastertunnelspektroskopie (engl.: <i>spin-polarized scanning tunnelling spectroscopy</i>) |
| sp-UPS | spinpolarisierte Photoemissionsspektroskopie (engl.: <i>Spin Polarized Ultraviolet Photoemission Spectroscopy</i>) |
| STM | Rastertunnelmikroskop (engl.: <i>Scanning Tunneling-Microscope</i>) |
| STS | Rastertunnelspektroskopie (engl.: <i>Scanning Tunneling Spectroscopy</i>) |
| TMR | magnetischer Tunnelwiderstand (engl.: <i>Tunneling Magneto</i> resistance) |
| UHV | <u>Ultra Hoch Vakuu</u> m |