

---

**Untersuchung magnetischer Nanostrukturen  
mittels Rastertunnelspektroskopie und  
Kerr-Magnetometrie am Beispiel von Fe, Co,  
Co-Fe und Fe-Mn Nanostrukturen**

---

Dissertation  
zur Erlangung des Grades  
„Doktor der Naturwissenschaften“  
am Fachbereich Physik  
der Johannes Gutenberg-Universität  
in Mainz

vorgelegt von  
**Marco Prutzer**  
geb. in Mainz

Mainz, den 15.10.2004

Tag der mündlichen Prüfung: 14.2.2005

D77 Mainzer Dissertation

*Der Magnet ist ein Urphänomen, das man nur aussprechen darf, um es erklärt zu haben; dadurch wird es denn auch ein Symbol für alles Übrige, wofür wir keine Worte noch Namen zu suchen brauchen.*

Johann Wolfgang von Goethe, Maxime und Reflexionen

## Inhaltsangabe

Nach einer kurzen Einführung in die Entwicklung der magnetischen Anwendungen, werden in Kapitel 2 und 3 die physikalischen Grundlagen der Messmethoden, insbesondere die Rastertunnelspektroskopie und Kerr-Magnetometrie, sowie der experimentelle Aufbau erläutert.

Kapitel 4 beschäftigt sich mit den magnetischen Eigenschaften von quasi ein-dimensionalen ferromagnetischen Nanostreifen und Monolagen, die durch Selbstorganisation auf einem Wolfram(110)-Einkristall mit vizinaler und glatter Oberfläche präpariert werden. Hierbei wird die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Größen, wie Remanenz, Sättigungsmagnetisierung und Suszeptibilität, sowie die Auswirkung einer Abdeckung des Systems auf die Domänenwandenergie und Anisotropie untersucht. Zusätzlich wird die Kopplung von parallelen Nanostreifen in Abhängigkeit des Streifenabstandes betrachtet.

In Kapitel 5 werden das Wachstum und die Morphologie von Co-Monolagen auf W(110) untersucht. Der Übergang von pseudomorphem zu dicht gepacktem Wachstum in der Monolage wird mit Hilfe der Rastertunnelspektroskopie sichtbar gemacht, ebenso wie unterschiedliche Stapelfolgen in Tripellagen Co-Systemen. Atomar aufgelöste Rastertunnelmikroskopie erlaubt die genauen Atompositionen der Oberfläche zu bestimmen und mit theoretischen Wachstumsmodellen zu vergleichen.

Auf die Untersuchung zwei-dimensionaler binärer Co-Fe und Fe-Mn Legierungen auf W(110) wird in Kapitel 6 eingegangen. Mit einer Präparationstemperatur von  $T=520$  K ist es möglich, atomar geordnete Co-Fe Legierungsmonolagen wachsen zu lassen. Ein direkter Zusammenhang zwischen der Magnetisierung und der lokalen Zustandsdichte in Abhängigkeit der Legierungszusammensetzung wird gezeigt.

## Abstract

After a short introduction into the development of the magnetic applications, the physical background of the experiments, especially Kerr-magnetometry and scanning tunneling spectroscopy, will be described in chapter 2 and 3.

Chapter 4 deals with the magnetic properties of quasi one-dimensional ferromagnetic nanostripes and monolayers. All samples are grown on a tungsten(110) single-crystal with a flat and a vicinal surface. The temperature dependence of the remanence, saturation magnetization and susceptibility is investigated as well as the influence of a coverage on the domain wall energy and anisotropy. Additionally, the magnetic coupling of a nanostripe-array depending on the stripe distance will be discussed.

In chapter 5 the growth and morphology of Co/W(110)-monolayers will be investigated. The transition from pseudomorphic to close packed growth in the monolayer and different stacking sequences in triple layers are visualized by scanning tunnelling spectroscopy. The exact atomic positions, determined by atomically resolved images, are compared to theoretical growth models.

The investigation of two-dimensional binary Co-Fe and Fe-Mn alloys on W(110) will be described in chapter 6. It is possible to grow atomically ordered Co-Fe alloy monolayers using an annealing temperature of  $T=520$  K. A correlation between the magnetization and the local density of states depending on the alloy composition will be shown.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen der Messmethoden</b>	<b>8</b>
2.1	Rastertunnelmikroskopie/-spektroskopie . . . . .	8
2.1.1	Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie . . . . .	8
2.1.2	Auflösung des STMs . . . . .	10
2.1.3	Atomare Auflösung . . . . .	11
2.1.4	Grundlagen der Tunnelstromspektroskopie . . . . .	11
2.1.5	Theoretische Beschreibung der Tunnelprozesse . . . . .	12
2.1.6	Experimentelle Bestimmung der LDOS . . . . .	13
2.2	Der magnetooptische Kerr-Effekt . . . . .	15
2.2.1	Klassische Beschreibung des Kerr-Effekts . . . . .	15
2.2.2	Quantenmechanische Betrachtung des Kerr-Effekts . . . . .	22
2.3	Kerr-Magnetometrie . . . . .	24
2.3.1	Messung der Kerr-Drehung . . . . .	24
2.3.2	Messung der Kerr-Elliptizität . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Experimentelles</b>	<b>28</b>
3.1	Die UHV-Apparatur . . . . .	28
3.1.1	Bestimmung der Proben temperatur . . . . .	29
3.2	Das Rastertunnelmikroskop . . . . .	31
3.2.1	Spitzenpräparation . . . . .	33

3.2.2	Kalibrierung des STMs . . . . .	34
3.3	Das Kerr-Magnetometer . . . . .	36
3.3.1	Messprogramme . . . . .	38
3.4	LEED und AES . . . . .	38
3.5	Probenpräparation . . . . .	40
3.5.1	Reinigung des W-Kristalls . . . . .	40
3.5.2	Präparation von Legierungen . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Quasi eindimensionale Fe-Nanostreifen</b>	<b>44</b>
4.1	Magnetische Eigenschaften von 1D- und 2D-X/Fe/W(110)-Systemen . .	46
4.1.1	Magnetische Eigenschaften . . . . .	46
4.1.2	Domänenwandenergie und Anisotropie . . . . .	51
4.2	Direkte Bestimmung der Anisotropie- und Kopplungskonstante . . . . .	56
4.3	Laterale indirekte Austauschkopplung . . . . .	62
4.3.1	Bestimmung der Kopplungsfeldstärke . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Ultradünne Co-Filme auf W(110)</b>	<b>70</b>
5.1	Die Co-Monolage auf W(110) . . . . .	70
5.1.1	Wachstum und Morphologie . . . . .	71
5.1.2	Spektroskopische Untersuchung . . . . .	73
5.1.3	Atomare Struktur der dicht gepackten Co-Monolage . . . . .	75
5.2	Die Doppellage Co . . . . .	81
5.3	Die Tripellage Co . . . . .	84
5.4	Zusammenfassende Diskussion der Spektren . . . . .	87
5.5	Atomare Stapelfolgen und Versetzungen in der Doppel- und Tripellage Co	89
<b>6</b>	<b>2D binäre ferromagnetische Legierungen</b>	<b>101</b>
6.1	Ultradünne Co-Fe Legierungsfilme . . . . .	101
6.1.1	Wachstum und atomare Ordnung . . . . .	102
6.1.2	Magnetische Eigenschaften . . . . .	104
6.1.3	Theoretische Erklärung . . . . .	108



---

6.2	Mn-Fe Legierungsmonolagen . . . . .	110
6.2.1	Strukturelle Eigenschaften . . . . .	110
6.2.2	Magnetische Eigenschaften . . . . .	111
6.3	Elektronische Eigenschaften der 2D Co-Fe und Fe-Mn Legierungen . . .	114
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>121</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>
	<b>Abkürzungen</b>	<b>133</b>
	<b>Veröffentlichungen</b>	<b>136</b>
	<b>Präsentationen</b>	<b>137</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Entdeckung des Magnetismus geht bis in das Jahr 650 v. Chr. zurück, als in der Provinz Magnesia (in der heutigen Türkei gelegen) ein schwarzes Gestein entdeckt wurde, das Gegenstände aus Eisen anzog. Hypokrates schrieb dem geheimnisvollen Gestein sogar Fähigkeiten zur Heilung von Krankheiten zu. Erst im Jahre 1269 gelang es dem Franzosen Pierre Pélerin de Maricourt (bekannt als Petrus Peregrinus), das Geheimnis der magnetischen Kraft zu enträtseln [N2403]. Die erste technische Anwendung des Magnetismus war wohl der Kompass zur Navigation auf See.

Eine dramatische Zunahme der Anwendungen begann allerdings erst im letzten Jahrhundert, insbesondere durch die Entwicklung von Massenspeichern für die Computertechnik. Angefangen bei den ersten Trommelspeichern (1947) und den Ferritkernspeichern (1952) bis zu den Magnetbändern und Festspeicherplatten. Die erste Magnetplatte wurde 1956 von IBM entwickelt und hatte eine Speicherkapazität von 5 Mbyte, verteilt auf 50 Platten mit einem Durchmesser von 61 cm [Pla04] [Alb03]. Bis heute hat die Speicherdichte der Magnetplatten um mehr als das 30-millionenfache zugenommen, wobei seit 1990 ein exponentieller Anstieg der Speicherdichte zu verzeichnen ist. Eine weitere interessante Entwicklung sind die magnetischen RAM-Speicher (kurz MRAM), bei denen die Informationen in einem Feld von Riesenmagnetowiderstands- (kurz GMR) oder Tunnelmagnetowiderstandselementen (kurz TMR-Elemente) gespeichert werden. Durch ein entsprechendes Magnetfeld können die beiden ferromagnetischen Lagen der GMR-/TMR-Elemente entweder parallel oder antiparallel ausgerichtet werden, was einer logischen Eins oder Null entspricht. Über die Widerstandsänderung der Elemente kann die gespeicherte Information wieder ausgelesen werden. Ein wesentlicher Vorteil gegenüber konventionellen Arbeitsspeichern ist, dass die gespeicherte Information auch nach dem Abschalten der Versorgungsspannung erhalten bleibt. Die Speicherdichte ist aber noch nicht mit modernen Festplatten zu vergleichen, die momentan bei etwa 130 GBit/inch<sup>2</sup> liegt. Die höchste Speicherdichte überhaupt wird heute durch ein nicht-magnetisches Speicherprinzip erreicht, das der Lochkarte (bereits 1891 von Hollerith bei der Volkszäh-



Abbildung 1.1: Schon die alten Griechen kannten die Wirkung magnetischer Steine. Höchstwahrscheinlich handelte es sich dabei um Magnetit (Foto: <http://www.mineraly.host.sk>).

lung verwendet) ähnlich ist. Das Forschungsprojekt *Millipede* von IBM beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Speichersystems, bei dem mit Hilfe von 10 nm feinen Spitzen kleine Vertiefungen in einen Polymerfilm gedrückt werden [Vet00]. Dabei wird die Spitze für den Schreibvorgang auf 500-700° C erhitzt. Die Information kann anschließend mit der gleichen Spitze bei 350° C mechanisch abgetastet und ausgelesen werden. Mit dieser Technik konnte bereits eine Speicherdichte von 1 Tbit/inch<sup>2</sup> erreicht werden [Vet02]. Sie hat allerdings den Nachteil, dass das Schreiben und Lesen von Daten im Vergleich zu Magnetplattensystemen sehr langsam stattfindet. Anhand dieser Beispiele kann man sehen, dass die „Nanoturisierung“ eine wesentliche Rolle für die technische Entwicklung der Speichermedien darstellt und die Untersuchung von magnetischen Nanostrukturen einen wesentlichen Beitrag für neue Anwendungen liefern kann. Eine physikalische Grenze der Bitgröße (Domänengröße) für magnetische Speichersysteme ist durch das Verhältnis von thermischer Energie zur magnetischen Anisotropieenergie gegeben [Whi00]. Kommt die thermische Energie in die Größenordnung der Anisotropieenergie, so beginnen die magnetischen Bits (Domänen) zu fluktuieren und verlieren ihre gespeicherte Information. Magnetische Nanostrukturen mit hoher Anisotropie sind daher für die Forschung besonders interessant.

Die Herstellung von Nanostrukturen kann grundsätzlich auf zwei verschiedene Arten erfolgen. Zum einen durch künstliche Verfahren [Ye95] [Cho95], wie z. B. lithographische Methoden, oder durch Selbstorganisation [Elm94] [Fac99]. In dieser Arbeit werden die Nanostrukturen mit Hilfe der Selbstorganisation auf einem Wolfram(110)-Einkristall hergestellt. Durch entsprechendes Anschleifen des W-Kristalls ist es möglich, die atomare Stufendichte der Oberfläche zu beeinflussen. Die hohe freie Oberflächenenergie von Wolfram ist für das lagenweise Wachstum der Übergangsmetalle verantwortlich. Durch die richtige Wahl der Präparationstemperatur kann man erreichen, dass sich die Adsorbat-

atome an die Stufenkanten des vizinalen Substrats anlagern und parallele Nanostreifen ausbilden oder große zusammenhängende Inseln auf der glatt polierten W-Oberfläche bilden.

In der vorliegenden Arbeit werden magnetische Nanostrukturen, insbesondere ein- und zweidimensionale magnetische Systeme, näher untersucht. Nach einer Einführung in die physikalischen und experimentellen Grundlagen der angewandten Untersuchungsmethoden, schließt sich der experimentelle Teil an, der sich in drei Abschnitte gliedert. Der erste Abschnitt beschäftigt sich mit der Erforschung von magnetischen Nanostreifen, die ein eindimensionales, magnetisches System darstellen. Die Abhängigkeit der magnetischen Größen von der Streifenbreite und der Temperatur spielen dabei eine wesentliche Rolle. Für die technische Anwendung ist es ebenso notwendig, die magnetischen Nanostrukturen mit einer Oxidationsschutzschicht abzudecken. Bei niederdimensionalen Systemen kann sich die Abdeckung sehr stark auf die elektronische Struktur der Probe auswirken und damit auch die magnetischen Eigenschaften verändern. Daher werden Anisotropie-, sowie Domänenwandenergien für verschiedene Abdeckungen bestimmt. Die magnetischen Untersuchungen werden im Ultrahochvakuum mit Hilfe von Kerr-Magnetometrie durchgeführt. Dabei wird ein linear polarisierter Laserstrahl an der Probe reflektiert und die Drehung der Polarisationssebene ausgewertet. Die magnetische Auflösung beträgt etwa 5 % einer Monolage Fe/W(110). Mit einer Kompensationselektronik ist es möglich absolute Kerr-Winkel zu bestimmen und Proben direkt miteinander zu vergleichen. Die Ortsauflösung wird durch die Fokussierbarkeit des Laserstrahls auf der Probe beschränkt.

Ein weiterer Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Erforschung des Wachstums und der elektronischen Eigenschaften von Co-Monolagen auf W(110). Hierbei wird der Übergang an der Grenzfläche eines bcc-Metalls zu einem dicht gepackten Metall (hcp/fcc) untersucht. Eine Fragestellung, die sich zwangsläufig bei der Herstellung von metallischen Multilagensystemen ergibt, wie sie z. B. bei Riesenmagnetowiderstandselementen (GMR-Elemente) [Grü86] [Bai88] [Bin89] Verwendung finden. Hierfür sind elektronische Grenzflächenzustände von großer Wichtigkeit [Gra93]. Ein Verfahren zur Untersuchung der lokalen Zustandsdichten an Oberflächen mit höchster Ortsauflösung stellt die Tunnelstromspektroskopie dar, bei der der Tunnelstrom spannungsabhängig analysiert wird und man direkt die lokale Zustandsdichte bestimmen kann. Man erhält daraus z. B. eine Information über das atomare Wachstum (pseudomorph/dicht gepackt) oder die Stapelfolge (fcc/hcp) eines Metalls. Strukturelle Untersuchungen werden mit Hilfe von atomar aufgelöster Rastertunnelmikroskopie und der Beugung niederenergetischer Elektronen durchgeführt. Eine detaillierte Beschreibung der Untersuchungsmethoden und der physikalischen Grundlagen findet man in den Kapiteln 2 und 3.

Im letzten Abschnitt der Arbeit werden zweidimensionale Co-Fe und Fe-Mn Legierungen hinsichtlich ihrer strukturellen, magnetischen und elektronischen Eigenschaften untersucht. Häufig zeigen zweidimensionale ultradünne Legierungsfilme überraschend neue magnetische Eigenschaften, die stark von der entsprechenden Volumenlegierung abweichen.

chen können [Elm95a] [Bad02]. Ferner kann ein geeignetes Substrat die Struktur einer zweidimensionalen Legierung durch pseudomorphes Wachstum vorgeben [Sch97] [Dit00] [Mat02], während bei Volumenlegierungen die effektive  $d$ -Band Besetzung von strukturellen Änderungen abhängig ist, die sich mit einer Änderung der Legierungszusammensetzung ergeben können. Mit Hilfe von hochaufgelöster Tunnelmikroskopie gelingt es, das Wachstum der Legierungen auf atomarer Ebene abzubilden. Mit einer Kombination von Kerr-Magnetometrie und Tunnelstromspektroskopie wird ein direkter Zusammenhang zwischen der elektronischen Struktur der Legierung und den magnetischen Eigenschaften aufgezeigt.

# Kapitel 2

## Physikalische Grundlagen der Messmethoden

### 2.1 Rastertunnelmikroskopie/-spektroskopie

#### 2.1.1 Grundlagen der Rastertunnelmikroskopie

In einem Rastertunnelmikroskop (engl.: *scanning tunneling microscope*, kurz STM) wird eine möglichst scharfe Spitze der Probenoberfläche auf nur wenige 100 pm angenähert, bis ein Tunnelstrom über die Vakuumbarriere fließen kann. Wir beschreiben die Elektronen von Spitze und Probe mit Hilfe der als bekannt vorausgesetzten Wellenfunktionen  $\Psi_s$  und  $\Psi_p$ . Alle elektronischen Zustände sind bis zur Fermi-Energie besetzt. Die Höhe der Potentialbarriere wird im Wesentlichen durch die Austrittsarbeit der Spitze  $\phi_s$  und der Probe  $\phi_p$  bestimmt. Legt man eine kleine Spannung zwischen Spitze und Probe an, verschieben sich die Fermi-Niveaus von Spitze und Probe um  $eU$  und die Elektronen tunneln je nach Polarität von der Spitze zur Probe oder umgekehrt. Der Tunnelstrom kann mit Hilfe der Formel von J. Tersoff und D. R. Hamann [Ter83] [Ter85] für kleine Proben-  
spannungen ( $eU \ll \phi$ ) und tiefe Temperaturen mit:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{s,p} |M_{s,p}|^2 \delta(E_s - E_p) [f(E_s - eU) - f(E_p)] \quad (2.1)$$

beschrieben werden, wobei  $U$  die Probenspannung,  $E_F$  die Fermi-Energie,  $f(E)$  die Fermi-Dirac Verteilung und  $M_{s,p}$  das Tunnelmatrixelement darstellt. Die Indices  $s$  und  $p$  zählen die Zustände von Spitze und Probe durch. Die  $\delta$ -Funktion garantiert elastisches Tunneln, d.h. die Energie eines tunnelnden Elektrons bleibt erhalten. Zur Berechnung

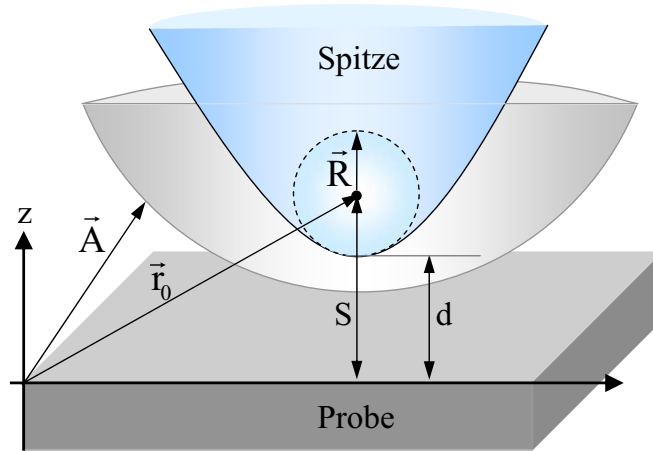


Abbildung 2.1: Modell der STM-Spitze nach Tersoff und Hamann [Ter85]. Es wird angenommen, dass die Spitze am Ende sphärisch mit dem Radius  $R$  ist. Der kleinste Abstand von Spitze und Probe ist durch  $d$  gegeben. Zur Berechnung des Tunnelstroms wird eine sphärische  $s$ -Wellenfunktion für die Spitze angenommen.

des Tunnelmatrixelements  $M_{s,p}$  müssen die Wellenfunktionen  $\psi_s$  und  $\psi_p$  bekannt sein.  $M_{s,p}$  lässt sich mit Hilfe der Methode von Bardeen [Bar61] berechnen:

$$M_{s,p} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int (\psi_s^* \vec{\nabla} \psi_p - \psi_p \vec{\nabla} \psi_s^*) d\vec{A}, \quad (2.2)$$

wobei das Integral über eine Fläche  $\vec{A}$  innerhalb der Barriere ausgeführt werden muss (siehe Abbildung 2.1). Ein Problem ist die Berechnung der Wellenfunktion der Spitze  $\psi_s$ , die eine genaue Kenntnis der atomaren Struktur voraussetzt. Es ist nahezu unmöglich die genaue atomare Struktur der Spitze zu bestimmen, da auch eine spontane Umordnung von Atomen nicht ausgeschlossen werden kann. Im Modell von J. Tersoff und D. R. Hamann wird eine sphärische  $s$ -Wellenfunktion für die Spitze angenommen und winkelabhängige Wellenfunktionen ( $p$ -,  $d$ -Wellen) vernachlässigt. Damit ergibt sich für den Tunnelstrom:

$$\begin{aligned} I &\propto U \rho_s(E_F) e^{2\kappa R} \sum_p |\psi(\vec{r}_0)_p|^2 \delta(E_p - E_F) \\ &= U e^{2\kappa R} \rho_s(E_F) \rho_p(\vec{r}_0, E_F). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Die Summe stellt die lokale Zustandsdichte der Probe  $\rho_p(\vec{r}_0, E_F)$  bei der Fermi-Energie dar, während  $\rho_s(E_F)$  die konstante Zustandsdichte der Spitze bei der Fermi-Energie beschreibt. Die Zerfallskonstante  $\kappa$  ist gegeben durch:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_e\phi_{eff}}{\hbar^2}}, \quad (2.4)$$

mit der Elektronenmasse  $m_e$  und der effektiven Austrittsarbeit von Spitze und Probe, die nur in erster Näherung durch  $\phi_{eff} = (\phi_s + \phi_p)/2$  gegeben ist. Spiegelladungseffekte runden das Kastenpotential ab und die maximale Höhe der Potentialbarriere ist somit eine Funktion des Abstandes von Spitze und Probe.

### 2.1.2 Auflösung des STMs

Die hohe vertikale Auflösung eines STMs begründet sich in der exponentiellen Abhängigkeit des Tunnelstroms vom Abstand der Spitze zur Probenoberfläche. Die Wellenfunktion der Elektronen innerhalb der Vakuumbarriere zerfällt exponentiell:

$$\psi(z) = \psi(0)e^{-\kappa z}. \quad (2.5)$$

Damit ist die Wahrscheinlichkeit ein Elektron am Ort  $z = S$  anzutreffen, also auf der anderen Seite der Vakuumbarriere, gegeben durch:

$$|\psi(S)|^2 = |\psi(0)|^2 e^{-2\kappa S}, \quad S = R + d. \quad (2.6)$$

Die Abstände  $S$ ,  $R$  und  $d$  sind in der Abbildung 2.1 definiert. Mit einem typischen Wert für die effektive Austrittsarbeit von Metallen  $\phi = 4$  eV ergibt sich eine Zerfallskonstante von  $\kappa = 0,1 \text{ nm}^{-1}$ , d. h. vergrößert sich der Abstand Spitze-Probe um nur 100 pm, so reduziert sich der Tunnelstrom um einen Faktor von  $1/e^2 \approx 0,14$ . Begrenzt wird die Auflösung des STMs durch Schwingungen, die sich auf die Spitze übertragen und den Abstand Spitze-Probe leicht variieren können. Das verwendete Omicron Mikro-STM erreicht eine Höhenauflösung von 1 bis 2 pm.

Man kann zeigen, dass sowohl die laterale Auflösung, als auch die vertikale Auflösung des STMs mit Hilfe einer effektiven Länge  $L$  bestimmt werden kann. Diese kann mit dem Modell von Tersoff und Hamann [Ter83] [Gar83] [Ter85] für einen Abstand Spitze-Probe  $d$  und einem Spitzenradius  $R$  wie folgt berechnet werden:

$$L = \sqrt{\frac{R + d}{\kappa}}. \quad (2.7)$$



Nimmt man einen Spitzenradius von 200 nm an (siehe Abbildung 3.5) und einen kleinstmöglichen Abstand von 0,5 nm, so ergibt sich eine Auflösung von  $L = 45$  nm, was nicht der Realität entspricht. Aufgrund der exponentiellen Abstandsabhängigkeit des Tunnelstroms kann man davon ausgehen, dass der effektive Spitzenradius noch wesentlich kleiner ist, d. h. der größte Anteil des Stroms fließt über eine Region mit einem kleineren Radius. Für den Idealfall einer atomar scharfen Spitze ( $R \approx 0,15$  nm) ergibt sich eine effektive Länge von  $L = 2,5$  nm, d. h. selbst damit ließe sich, hingegen der experimentellen Erfahrung, keine atomare Auflösung mit dem STM erzielen.

### 2.1.3 Atomare Auflösung

Es hat sich gezeigt, dass das Modell von Tersoff und Hamann die  $z$ -Korruptionen nicht immer richtig beschreibt, da  $\Psi_s$  vereinfacht mit einer  $s$ -Wellenfunktion approximiert wird. Nach diesem Modell wäre es z. B. nicht möglich, eine Gold-Oberfläche atomar aufzulösen. Für das Tunneln spielen aber zusätzlich lokalisierte Spitzenorbitale mit einer  $d_{z^2}$ -Symmetrie eine wichtige Rolle [Che90]. Um atomare Auflösung einer Probenoberfläche zu erhalten, ist es wichtig, einen kleinen Abstand von Spitze und Probe einzustellen, d. h. eine kleine Probenspannung und große Tunnelströme. Man kann im atomar aufgelösten STM-Modus (Spitze sehr dicht an der Oberfläche) hin und wieder eine Änderung des Höhenkontrastes beobachten, was nach dem Verständnis von C. J. Chen ein „Umschalten“ von einem  $s$ -Orbital zu einem  $d$ -Orbital, über das der Tunnelstrom fließt, darstellt. Das Tunneln über ein  $d$ -Orbital eines Spitzenatoms kann die Auflösung nochmals drastisch erhöhen, da die  $d$ -Orbitale weit in das Vakuum hineinreichen und sehr richtungsabhängig sind.

### 2.1.4 Grundlagen der Tunnelstromspektroskopie

Mit Hilfe der Tunnelstromspektroskopie läßt sich die elektronische Struktur von Oberflächen mit höchster Ortsauflösung bestimmen. Hierbei macht man sich zunutze, dass in der differentiellen Tunnelleitfähigkeit die Information über die Zustandsdichte der Probenoberfläche am Ort der Spitze enthalten ist. Abbildung 2.2 veranschaulicht die energetische Situation der Elektronen von Spitze und Probe. Die Vakuumbarriere wird aufgrund der Tunnelwahrscheinlichkeit überwiegend von Elektronen mit der Fermi-Energie ( $E_F$ ) durchtunnelt. Können die Elektronen bei einer bestimmten Probenspannung in einen Zustand mit hoher Zustandsdichte tunneln, so beobachtet man einen Sprung im Tunnelstrom, bzw. einen Peak in der differentiellen Leitfähigkeit. Dies kann in einen Helligkeitskontrast umgesetzt werden. Die technische Realisation des Messverfahrens wird in Kapitel 3.2 näher beschrieben. Zu beachten ist auch, dass man bei positiver Probenspannung auf die unbesetzten Probenzustände, sowie auf besetzte Spitzenzustände sensitiv ist.

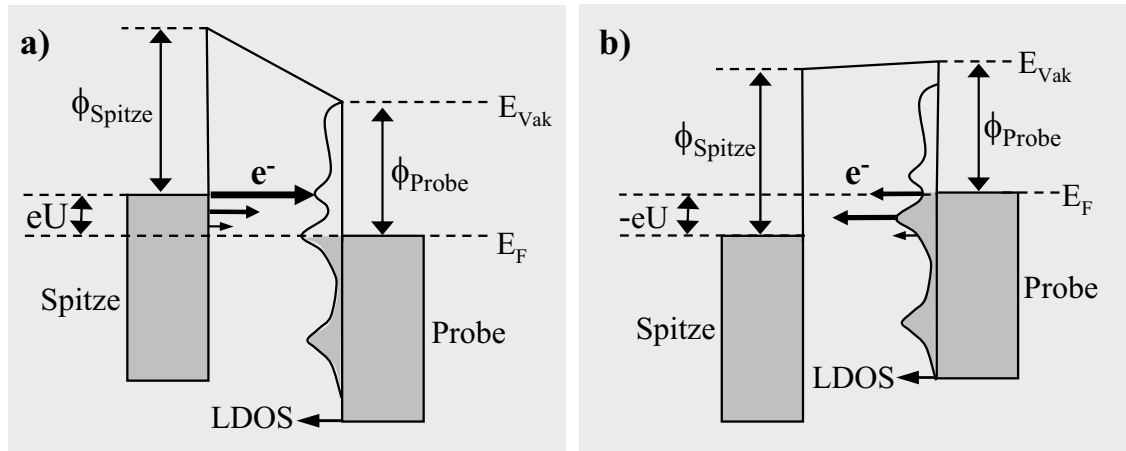


Abbildung 2.2: Prinzip des Tunnelprozesses im STM für positive a) und negative b) Probenspannung. Die Elektronen durchtunneln die VakuumbARRIERE vorwiegend bei der Fermi-Energie der Spitze ( $U > 0$ ) oder Probe ( $U < 0$ ). Bei positiver Probenspannung ist man sensitiv auf unbesetzte Probenzustände, während bei negativer Spannung die besetzten Zustände der Probe einen Beitrag zum Tunnelstrom liefern. In der Abbildung ist die Zustandsdichte der Spitze idealerweise als konstant angenommen. Im Experiment können auch Spitzenzustände eine Rolle spielen.

### 2.1.5 Theoretische Beschreibung der Tunnelprozesse

Die folgende Herleitung zur Beschreibung der differentiellen Leitfähigkeit findet sich detailliert bei V. A. Ukraintsev [Ukr96]:

Die Tunnelstromdichte zweier planarer Tunnelkontakte lässt sich mit Hilfe der halbklassischen WKB-Näherung schreiben als [App69] [Ter85] [Feu83]:

$$J(S,U) \cong \frac{2\pi e}{\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} T(S,U,E) [f(E - eU) - f(E)] \rho_p(E) \rho_s(E - eU) dE, \quad (2.8)$$

wobei  $T(S,U,E)$  die Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit und  $\rho_p$  bzw.  $\rho_s$  die elektronische Zustandsdichte von Spitze und Probe darstellt. Die Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit für eine trapezförmige Tunnelbarriere (Abb. 2.2) bei tiefen Temperaturen ( $k_B T \ll eU$ ) kann mit Hilfe der WKB-Näherung wie folgt abgeschätzt werden:

$$T(S,U,E) \cong \exp \left\{ -2S \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} \left( \phi_{eff} + \frac{eU}{2} - E \right)} \right\}, \quad (2.9)$$

mit der effektiven Austrittsarbeit  $\phi_{eff} = (\phi_p + \phi_s)/2$ . Die Formel 2.8 lässt sich ein wenig vereinfachen, wenn man anstatt der Fermi-Dirac-Verteilung eine Stufenfunktion annimmt:

$$J(S,U) \cong \frac{2\pi e}{\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^2 \int_0^{eU} T(S,U,E) \rho_p(E) \rho_s(E - eU) dE. \quad (2.10)$$

### 2.1.6 Experimentelle Bestimmung der LDOS

Um aus den experimentell bestimmten  $dI/dU$ -Spektren die lokale Zustandsdichte (kurz LDOS) der Oberfläche zu bestimmen, betrachten wir die differentielle Leitfähigkeit. Nach Ukraintsev [Ukr96] ergibt sich hierfür:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dU} \cong & A \left[ eT(S,U,E) \rho_p(E) \rho_s(E - eU) \Big|_{E=eU} \right. \\ & + \int_0^{eU} T(S,U,E) \rho_p(E) \frac{d\rho_s(E - eU)}{dU} dE \\ & \left. + \int_0^{eU} \frac{dT(S,U,E)}{dU} \rho_p(E) \rho_s(E - eU) \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

wobei der Proportionalitätsfaktor  $A$  verbunden ist mit der effektiven Kontaktfläche von Spitze und Probe. Der zweite und dritte Term der Gleichung werden in der Regel mit der Annahme einer konstanten Spitzenzustandsdichte und nur geringen Änderungen von  $T(S,U,E)$  bei kleinen Probenspannungen vernachlässigt [Sel85]. Nach V. A. Ukraintsev kann diese Vereinfachung aber zu einem falschen Ergebnis führen. Eine Symmetrisierung der differentielle Leitfähigkeit bezüglich der Proben- und Spitzenzustandsdichte lässt sich durch die Substitution von  $\mathcal{E} = E - eU/2$  in den Gleichungen 2.8 und 2.9 realisieren:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dU} \cong & \frac{eA}{2} \left[ \tilde{T}(S,\mathcal{E}) \rho_p(\mathcal{E} + eU/2) \rho_s(\mathcal{E} - eU/2) \Big|_{\mathcal{E}=eU/2} \right. \\ & + \tilde{T}(S,\mathcal{E}) \rho_p(\mathcal{E} + eU/2) \rho_s(\mathcal{E} - eU/2) \Big|_{\mathcal{E}=-eU/2} \\ & + \int_{eU/2}^{eU} \tilde{T}(S,\mathcal{E}) \frac{d\rho_p(\mathcal{E} + eU/2)}{d\mathcal{E}} \rho_s(\mathcal{E} - eU/2) d\mathcal{E} \\ & \left. - \int_{-eU/2}^{eU/2} \tilde{T}(S,\mathcal{E}) \rho_p(\mathcal{E} + eU/2) \frac{d\rho_s(\mathcal{E} - eU/2)}{d\mathcal{E}} d\mathcal{E} \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Mit der Definition  $\tilde{T}(S, \mathcal{E}) := T(S, U, E)$ :

$$\tilde{T}(S, \mathcal{E}) = \exp \left\{ -2S \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (\phi_{eff} - \mathcal{E})} \right\}. \quad (2.13)$$

Die Gleichung 2.12 ist bezüglich der Zustandsdichten von Spitze und Probe symmetrisch.  $\tilde{T}(S, eU/2)$  stellt die Tunnelwahrscheinlichkeit für die Elektronen, die von der Fermi-Energie oder zur Fermi-Energie der Spitze tunneln, dar.  $\tilde{T}(S, -eU/2)$  ist entsprechend die Tunnelwahrscheinlichkeit der Elektronen, die von oder zur Fermi-Energie der Probe tunneln. Für positive Probenspannungen gilt  $\tilde{T}(S, eU/2) \gg \tilde{T}(S, -eU/2)$  und man kann die differentielle Leitfähigkeit abschätzen mit:

$$\frac{dI}{dU} \cong \frac{eA}{2} \tilde{T}(S, eU/2) [\rho_p(eU)\rho_s(0) + \Delta\rho_p(eU)\rho_s(0) - \rho_p(eU)\Delta\rho_s(0)], \quad (2.14)$$

wobei  $\Delta\rho_p(eU)$  und  $\Delta\rho_s(0)$  die effektiven Änderungen der LDOS von Probe und Spitze in der Nähe von  $\mathcal{E} = eU/2$  darstellen. Für negative Probenspannungen gilt  $\tilde{T}(S, eU/2) \ll \tilde{T}(S, -eU/2)$  und die differentielle Leitfähigkeit kann entsprechend abgeschätzt werden:

$$\frac{dI}{dU} \cong \frac{eA}{2} \tilde{T}(S, -eU/2) [\rho_p(0)\rho_s(-eU) + \Delta\rho_p(0)\rho_s(-eU) - \rho_p(0)\Delta\rho_s(-eU)]. \quad (2.15)$$

Die Gleichung 2.15 zeigt, dass für negative Probenspannungen die differentielle Leitfähigkeit viel stärker proportional zu unbesetzten Spitzenzuständen als zu besetzten Probenzuständen ist. Für positive Probenspannungen ist das  $dI/dU$ -Signal zur unbesetzten Probenzustandsdichte proportional (siehe Gleichung 2.14). Um letztlich die lokalen Zustandsdichten von Probe und Spitze aus den gemessenen  $dI/dU$ -Spektren zu ermitteln ist es notwendig, die Spektren mittels der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S, U)$  zu normalisieren. Diese erhält man, in dem man die Gleichungen 2.14 und 2.15 addiert und eine konstante Zustandsdichte von Probe und Spitze annimmt, d. h. wir setzen  $\rho_p(\mathcal{E}) = \rho_s(\mathcal{E}) = 1$ . Damit ergibt sich:

$$F(S, U) = \frac{dI_{konst}}{dU} = \frac{eA}{2} [\tilde{T}(S, eU/2) + \tilde{T}(S, -eU/2)]. \quad (2.16)$$

Die symmetrische Tunneltransmissionsfunktion  $F(S, U)$  wird mittels einer Anpassung an das gemessene  $dI/dU$ -Spektrum bestimmt und das Spektrum anschließend damit normalisiert. Kürzlich durchgeführte Messungen auf Mn(001) Oberflächen bestätigen die Anwendbarkeit des Normalisierungsverfahrens [Yam03]. Abbildung 2.3 zeigt das praktische

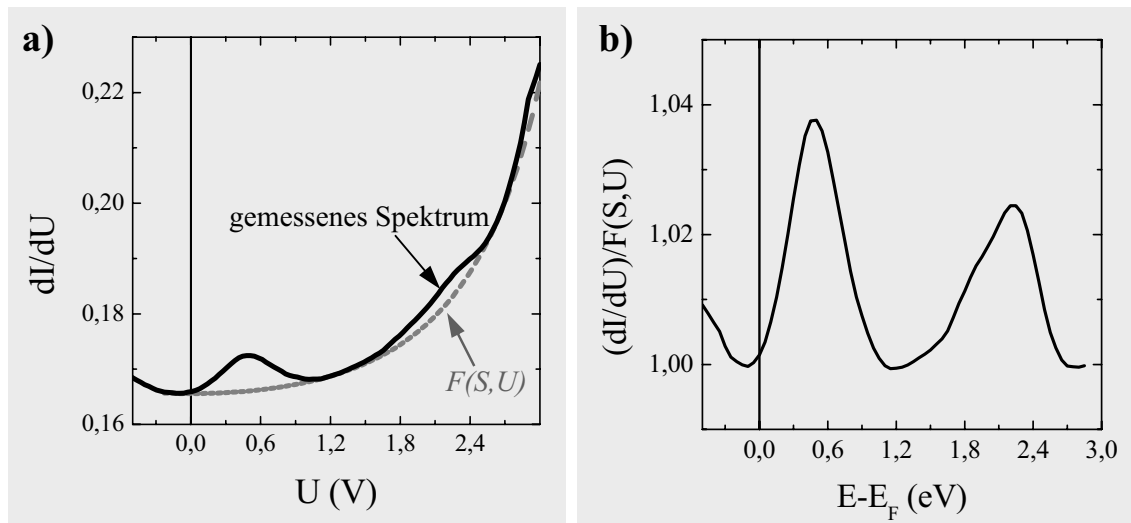


Abbildung 2.3: a) Bestimmung der lokalen Zustandsdichte aus einem  $dI/dU$ -Spektrum durch Anpassung der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S,U)$  an das Spektrum. b) Die Normalisierung des  $dI/dU$ -Spektrums mit  $F(S,U)$  liefert die lokale Zustandsdichte von Probe und Spitze.

Vorgehen anhand eines Beispielspektrums. Bei der Anpassung ist zu berücksichtigen, dass die Werte der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S,U)$  immer kleiner oder gleich der Werte des gemessenen Spektrums sind.

## 2.2 Der magnetooptische Kerr-Effekt

John Kerr entdeckte 1876 [Ker71] den nach ihm benannten magnetooptischen Kerr-Effekt. Er stellte fest, dass linear polarisiertes Licht, welches an den Polschuhen eines Magneten reflektiert wird, eine Drehung der Polarisations Ebene erfährt. Zuvor hatte Faraday 1845 entdeckt, dass polarisiertes Licht beim Durchgang durch ein ferromagnetische Medium ebenso seinen Polarisationszustand ändert. Dies bezeichnet man heute als Faraday-Effekt.

### 2.2.1 Klassische Beschreibung des Kerr-Effekts

Eine einfache, klassische Betrachtungsweise des Kerr-Effektes ist durch die Lorentzkraft möglich. Die Elektronen der Probe werden durch das linear polarisierte Licht zu Schwingungen in Richtung des elektrischen Feldvektors  $\vec{E}$  angeregt. Die durch die Magnetisie-

rung der Probe hervorgerufene Lorentzkraft lenkt die Elektronen etwas von ihrer Schwingungsrichtung ab. Man erhält somit eine neue Schwingungskomponente  $\vec{E}_K$  zur normalreflektierten Komponente  $\vec{E}_N$ . Addiert man beide Komponenten vektoriell, so erhält man die neue, gedrehte Polarisationsrichtung. Damit ist die Größe der Kerr-Drehung stark abhängig von dem Verhältnis der Beträge  $E_K/E_N$ . In der technischen Anwendung (z. B. MO-Speichermedien) versucht man mit Hilfe von Antireflexionsschichten auf der Probe eine Verringerung von  $E_N$  durch destruktive Interferenz zu erreichen, um somit größere Kerr-Drehungen zu realisieren. Für Antireflexschichten eignen sich Materialien mit einem großen  $\varepsilon$ , wie z. B. ZnS, damit ein möglichst großer Anteil der Normalkomponente des Lichtes an der Antireflexschicht reflektiert wird und mit der an der magnetischen Schicht reflektierten Normalkomponente interferieren kann. In der Regel ist die Überlagerung der Normalkomponente  $E_N$  mit der Kerr-Komponente  $E_K$  phasenverschoben, so dass der ausfallende Lichtstrahl eine elliptische Polarisation aufweist. Der Kerr- bzw. Faraday-Effekt lässt sich mit dem dielektrische Gesetz beschreiben [Hub93] [Hei96]:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{\varepsilon}^{K,F} \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon \cdot \begin{pmatrix} 1 & iQM_3 & -iQM_2 \\ -iQM_3 & 1 & iQM_1 \\ iQM_2 & -iQM_1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E} - i\varepsilon_0 \varepsilon Q \vec{M} \times \vec{E}, \quad (2.17)$$

wobei  $\vec{\varepsilon}^{K,F}$  den dielektrischen Tensor,  $\varepsilon$  die komplexe Dielektrizitätskonstante,  $\vec{D}$  die dielektrische Verschiebung und  $\vec{E}$  bzw.  $\vec{M}$  den elektrischen Feldstärkevektor, sowie den Magnetisierungsvektor darstellt. Die Tatsache, dass der Kerr-Effekt aufgrund der elektronischen Struktur des Materials auch von der Frequenz des Lichtes und dem Material selbst abhängt, wird durch die komplexe Materialkonstante  $Q = Q(\nu)$  (Voigt-Konstante) berücksichtigt. Besitzt die Probe kein magnetisches Moment, so verschwinden die Nebendiagonalelemente des dielektrischen Tensors und eine Drehung der Polarisationsebene tritt nicht auf. Bei magnetischen Proben existieren zumindest zwei Nebendiagonalelemente und damit eine optische Anisotropie. In erster Näherung ist daher die Kerr/Faraday-Drehung proportional zur Magnetisierungskomponente entlang der vorgegebenen Richtung. Für anisotrope Medien, bei denen die Anisotropie nicht von der Magnetisierung abhängt, muss die Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon$  ebenfalls durch einen Tensor ersetzt werden. Da es sich bei  $Q(\nu)$  und  $\varepsilon$  bei Metallen um komplexe Größen handelt, wird das linear polarisierte Licht nach der Reflexion/Transmission elliptisch polarisiert.

Man unterscheidet drei Arten des MOKE-Effekts, je nach geometrischer Anordnung der Magnetisierung und der Reflexionsebene des Lichtes (siehe auch Abbildung 2.4):

1. Der polare Kerr-Effekt: Dieser Effekt liefert die größten Kerr-Drehungen. Die Magnetisierung steht senkrecht auf der Probenoberfläche. Für die Abhängigkeit der Kerr-Drehung vom Einfallswinkel  $\alpha$  gilt:  $\theta \propto \cos(\alpha)$ , d. h. für  $\alpha = 0^\circ$  bekommt man die maximale Drehung, da  $\vec{E}$  senkrecht auf der Magnetisierung  $\vec{M}$  steht.

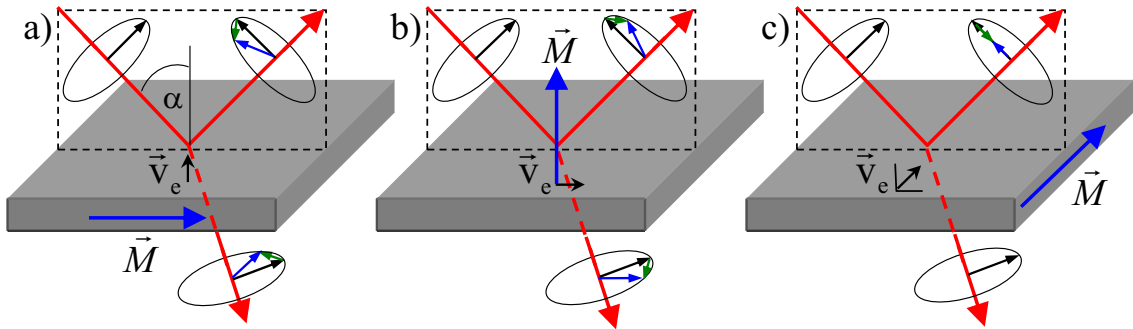


Abbildung 2.4: Darstellung der verschiedenen Kerr-/Faraday-Effekte für p-polarisiertes Licht. Geometrie des a) longitudinalen, b) polaren und c) transversalen Effektes. Klassisch ergibt sich die neue  $\vec{E}$ -Feldrichtung (blau) aus der Addition der normalreflektierten/transmittierten Komponente (schwarz) und der durch die Lorentzkraft gedrehten Komponente (grün).

2. Der longitudinale Kerr-Effekt: Dieser Effekt ist etwas schwächer als der polare Kerr-Effekt. Die Magnetisierung der Probe ist hierbei parallel zur Reflexionsebene des Lichtes und in der Probenebene. Die Abhängigkeit der Drehung vom Einfallswinkel ist durch  $\theta \propto \sin(\alpha)$  gegeben. Ideal wäre hierfür ein streifender Einfall des Lichtstrahls.
3. Der transversale Kerr-Effekt: Die Magnetisierung der Probe steht senkrecht auf der Reflexionsebene des Lichtes und in der Probenebene. Für p-polarisiertes Licht (parallel zur Reflexionsebene) liefert der transversale Kerr-Effekt eine kleine Intensitätsänderung, während es für s-polarisiertes Licht so gut wie keinen Effekt gibt. Für  $\alpha = 0^\circ$  tritt auch für p-Polarisation so gut wie kein Effekt auf.

Den Zusammenhang zwischen der Magnetisierung  $\vec{M}$  und dem Polarisationszustand des ausfallenden Lichtes beschreibt man mit dem komplexen Kerr-Winkel, der sich aus der Kerr-Drehung  $\theta_K$  und der Kerr-Elliptizität  $\varepsilon_K$  zusammensetzt:

$$\Psi_K = \theta_K + i\varepsilon_K. \quad (2.18)$$

Die beiden Größen sind messtechnisch leicht zu erfassen. Die Beschreibung der Reflexion bzw. Transmission eines Lichtstrahls an einer Probe erfolgt mit einer Reflexionsmatrix  $R$  und einer Transmissionsmatrix  $T$ , die die Fresnelschen Reflexionskoeffizienten bzw. Transmissionskoeffizienten beinhalten:

$$R = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{ps} \\ r_{sp} & r_{ss} \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} t_{pp} & t_{ps} \\ t_{sp} & t_{ss} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Das verwendete Koordinatensystem besitzt eine p-Achse (parallel zur Reflexionsebene) und eine s-Achse (senkrecht zur Reflexionsebene). Die Ausbreitungsrichtung der Lichtwelle sei senkrecht dazu (z-Richtung). Die Diagonalelemente  $r_{pp}$  und  $r_{ss}$  sind durch die Fresnelschen Formeln gegeben:

$$r_{pp} = \frac{n^2 \cos \alpha - \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}{n^2 \cos \alpha + \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}, \quad r_{ss} = -\frac{\left(\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} - \cos \alpha\right)^2}{n^2 - 1}, \quad (2.20)$$

mit dem Brechungsindex  $n$  und dem Einfallswinkel  $\alpha$ . Die Nebendiagonalelemente sind für den Kerr-Effekt verantwortlich. Bei dünnen Filmen (in der Größenordnung der Lichtwellenlänge) spielt ebenso die Reflexion und Transmission an der Substratoberfläche eine Rolle. Am Beispiel einer ferromagnetischen Dünnschicht-Probe mit dem Brechungsindex  $n_1$  auf einem Substrat mit dem Brechungsindex  $n_2$  im Vakuum ( $n_0$ ) soll dies explizit gezeigt werden (siehe Abbildung 2.5). Für den Übergang von einem optischen Medium  $i$  zu einem weiteren Medium  $j$  lauten die Fresnelschen Reflexions-/Transmissionskoeffizienten [Hub93]:

$$r_{pp}^{ij} = \frac{n_i \cos \alpha_j - n_j \cos \alpha_i}{n_i \cos \alpha_j + n_j \cos \alpha_i}, \quad r_{ss}^{ij} = \frac{n_i \cos \alpha_i - n_j \cos \alpha_j}{n_i \cos \alpha_i + n_j \cos \alpha_j}, \quad (2.21)$$

$$t_{pp}^{ij} = \frac{2n_i \cos \alpha_i}{n_i \cos \alpha_j + n_j \cos \alpha_j}, \quad t_{ss}^{ij} = \frac{2n_i \cos \alpha_i}{n_i \cos \alpha_i + n_j \cos \alpha_j}. \quad (2.22)$$

Die Nebendiagonalelemente sind nach A. Huber [Hub93] im Falle des longitudinalen bzw. polaren Kerr-Effekts wie folgt mit der Magnetisierung der Probe verknüpft:

$$r_{sp}^{long} = Q\pi n_1 \tan \alpha_1 \frac{f(D)(1 + r_{ss}^{12})(1 - r_{pp}^{12})t_{ss}^{01}t_{pp}^{10}M_2\Delta D}{\lambda_0(1 - r_{pp}^{10}r_{pp}^{12}f(D))(1 - r_{ss}^{10}r_{ss}^{12}f(D))}, \quad (2.23)$$

$$r_{sp}^{pol} = Q\pi n_1 \frac{f(D)(1 + r_{ss}^{12})(1 - r_{pp}^{12})t_{ss}^{01}t_{pp}^{10}M_3\Delta D}{\lambda_0(1 - r_{pp}^{10}r_{pp}^{12}f(D))(1 - r_{ss}^{10}r_{ss}^{12}f(D))}. \quad (2.24)$$

mit

$$f(D) = \exp \left\{ -\frac{4\pi i \cos \alpha_1 n_1}{\lambda_0} D \right\},$$



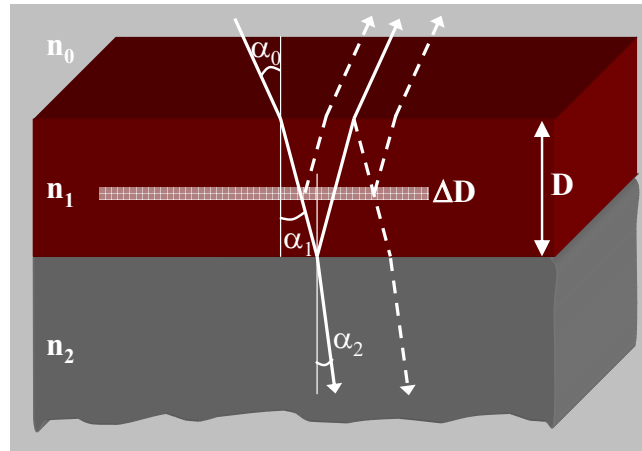


Abbildung 2.5: Die Reflexion eines Laserstrahls an einer magnetischen Dünnschichtprobe (Brechungsindex  $n_1$ ) mit der Dicke  $D$ , die sich auf einem Substrat mit dem Brechungsindex  $n_2$  befindet. Die Lichtstrahlen, die in dem magnetischen Medium an einer schmalen Schicht mit der Dicke  $\Delta D$  reflektiert werden, liefern einen Beitrag zum Kerr-Effekt. Es sind nur einige wenige Strahlengänge eingezeichnet.

wobei  $Q$  die Voigtkonstante,  $D$  die Schichtdicke und  $\alpha_1$  den Brechungswinkel der ferromagnetischen Probe darstellt.

Verwendet man p-polarisiertes Licht  $\vec{E}_P$ , so ergibt sich nach der Reflexion an der Probe folgendes  $\vec{E}'$ -Feld:

$$\vec{E}' = R\vec{E}_s = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{ps} \\ r_{sp} & r_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} r_{pp} \\ r_{sp} \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Mit Hilfe des Jones-Matrixformalismus kann man einfach den Einfluß optischer Elemente auf eine monochromatische ebene Welle beschreiben. Dabei werden die optischen Bauteile durch Matrizen repräsentiert, die miteinander multipliziert werden. Für eine allgemein polarisierte Lichtwelle gilt:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_p \\ E_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_p^0 e^{i(kz - \omega t + \varphi_p)} \\ E_s^0 e^{i(kz - \omega t + \varphi_s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_p^0 e^{i\varphi_p} \\ E_s^0 e^{i\varphi_s} \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega t)}. \quad (2.26)$$

Der Faktor  $e^{i(kz - \omega t)}$  kann bei der Betrachtung von monochromatischem Licht weggelassen werden, ebenso ist nur die Phasendifferenz  $\Delta\varphi$  der p- und s-Komponente für die weitere Betrachtung interessant und nicht die absoluten Phasen  $\varphi_s$  und  $\varphi_p$ . Man kann Gleichung 2.26 ein wenig umformen, so dass man die gebräuchlichen Größen  $\Psi$  und  $\Delta\varphi$  der Ellipsometrie erhält (siehe Abbildung 2.6 a)):

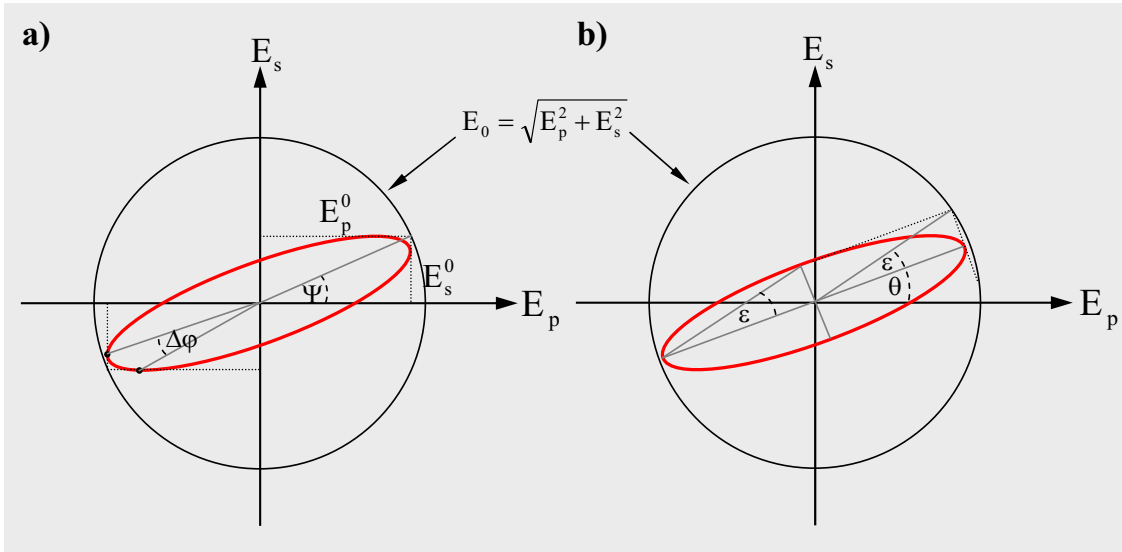


Abbildung 2.6: Zwei äquivalente Beschreibungen eines gedrehten, elliptischen Polarisationszustandes. a) Beschreibung mit den üblichen ellipsometrischen Winkeln  $\Psi$  mit  $E_p^0 = E_0 \cos \Psi$ ,  $E_s^0 = E_0 \sin \Psi$  und der Phasendifferenz von s- und p-Komponente  $\Delta\varphi$ . b) Beschreibung mit Hilfe des Drehwinkels  $\theta$  und der Elliptizität  $\varepsilon$ .

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_p^0 e^{i\varphi_p} \\ E_s^0 e^{i\varphi_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_p^0 e^{i(\varphi_p - \varphi_s + \varphi_s)} \\ E_s^0 e^{i\varphi_s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_p^0 e^{i\Delta\varphi} \\ E_s^0 \end{pmatrix} e^{i\varphi_s} = E_0 \begin{pmatrix} \cos \Psi e^{i\Delta\varphi} \\ \sin \Psi \end{pmatrix} e^{i\varphi_s}. \quad (2.27)$$

Da für das Experiment die Kerr-Drehung und die Kerr-Elliptizität von Interesse ist, ist eine Beschreibung des elliptischen Polarisationszustands mit  $\theta$  und  $\varepsilon$  sinnvoller. Der sich ergebende Polarisationszustand hat eine Elliptizität  $\varepsilon$  und ist um den Winkel  $\theta$  gedreht. Generell beschreibt man einen elliptischen Polarisationszustand mit:

$$\vec{E}_{ellip} = E_0 \begin{pmatrix} \cos \varepsilon \\ i \cdot \sin \varepsilon \end{pmatrix} e^{i\varphi}. \quad (2.28)$$

Um die Drehung der Ellipse um den Winkel  $\theta$  zu realisieren, multipliziert man eine Drehmatrix und erhält eine äquivalente Beschreibung zur Gleichung 2.27 mit den Parametern  $\theta$  und  $\varepsilon$  (siehe auch Abbildung 2.6 b)):

$$\vec{E}' = E_0 \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varepsilon \\ i \cdot \sin \varepsilon \end{pmatrix} e^{i\varphi}. \quad (2.29)$$

Die Phase  $\varphi$  kann vernachlässigt werden. Teilt man nun  $\vec{E}'$  aus Gleichung 2.25 durch  $r_{pp}E_0$  und setzt man dies mit Gleichung 2.29 gleich, so erhält man den normierten  $\vec{E}'$ -Vektor, da  $r_{sp} \ll r_{pp}$  (Näherung für kleine Winkel  $\theta_K, \varepsilon_K$ ):

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r_{pp}E_0}\vec{E}' &= \begin{pmatrix} 1 \\ r_{sp}/r_{pp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{K,p} & -\sin \theta_{K,p} \\ \sin \theta_{K,p} & \cos \theta_{K,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varepsilon_{K,p} \\ i \cdot \sin \varepsilon_{K,p} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos \theta_{K,p} \cdot \cos \varepsilon_{K,p} - i \cdot \sin \theta_{K,p} \cdot \sin \varepsilon_{K,p} \\ \sin \theta_{K,p} \cdot \cos \varepsilon_{K,p} + i \cdot \cos \theta_{K,p} \cdot \sin \varepsilon_{K,p} \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} 1 \\ \theta_{K,p} + i\varepsilon_{K,p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \Psi_{K,p} \end{pmatrix} \\
\Leftrightarrow \Psi_{K,p} &= \frac{r_{sp}}{r_{pp}}. \tag{2.30}
\end{aligned}$$

Für s-polarisiertes Licht kann die Gleichung analog aufgestellt werden und man erhält:

$$\vec{E}' = R\vec{E}_s = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{ps} \\ r_{sp} & r_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ E_0 \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} r_{ps} \\ r_{ss} \end{pmatrix}. \tag{2.31}$$

Dieses Mal wird der  $\vec{E}'$ -Vektor durch  $r_{ss}E_0$  geteilt und normiert (da  $r_{ps} \ll r_{ss}$ ). Ferner wird die Drehung bezüglich der s-Achse betrachtet, was durch den Summand  $\pi/2$  in der Rotationsmatrix berücksichtigt wird:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r_{ss}E_0}\vec{E}' &= \begin{pmatrix} r_{ps}/r_{ss} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) & -\sin(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \\ \sin(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) & \cos(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varepsilon_{K,s} \\ i \cdot \sin \varepsilon_{K,s} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \cdot \cos \varepsilon_{K,s} - i \cdot \sin(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \cdot \sin \varepsilon_{K,s} \\ \sin(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \cdot \cos \varepsilon_{K,s} + i \cdot \cos(\theta_{K,s} + \frac{\pi}{2}) \cdot \sin \varepsilon_{K,s} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -\sin \theta_{K,s} \cdot \cos \varepsilon_{K,s} - i \cdot \cos \theta_{K,s} \cdot \sin \varepsilon_{K,s} \\ \cos \theta_{K,s} \cdot \cos \varepsilon_{K,s} - i \cdot \sin \theta_{K,s} \cdot \sin \varepsilon_{K,s} \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} -(\theta_{K,s} + i\varepsilon_{K,s}) \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Psi_{K,p} \\ 1 \end{pmatrix} \\
\Leftrightarrow \Psi_{K,s} &= -\frac{r_{ps}}{r_{ss}}. \tag{2.32}
\end{aligned}$$

Da für die späteren Messungen die Intensitäten keine Rolle spielen, wird im Folgenden  $E_0 = 1$  gesetzt. Man kann nun einen Zusammenhang zwischen der Reflexionsmatrix  $R$  und dem komplexen Kerr-Winkeln  $\Psi_{K,p}$  und  $\Psi_{K,s}$  herstellen. Dazu müssen vier verschiedene Fälle betrachtet werden (polar-s/p-polarisiert und longitudinal-s/p-polarisiert). Für die vier Fälle gilt:

1. Polar und p-Polarisation:  $r_{ps} = r_{sp}$ ,
2. Polar und s-Polarisation:  $r_{sp} = r_{ps}$ ,
3. Longitudinal und p-Polarisation:  $r_{sp} = -r_{ps}$ ,
4. Longitudinal und s-Polarisation:  $r_{ps} = -r_{sp}$ .

Dies wird in  $R$  eingesetzt und für p-Polarisation durch  $r_{pp}$ , bzw. für s-Polarisation durch  $r_{ss}$  geteilt, sowie die so entstandenen Quotienten durch  $\Psi_{K,p}$  und  $\Psi_{K,s}$  ersetzt. Damit erhält man vier unterschiedliche Reflexionsmatrizen für die entsprechenden Kerr-Effekte:

1. Polar und p-Polarisation:  $R_p^P = \begin{pmatrix} 1 & \Psi_{K,p} \\ \Psi_{K,p} & r_{ss}/r_{pp} \end{pmatrix}$ ,
2. Polar und s-Polarisation:  $R_s^P = \begin{pmatrix} r_{pp}/r_{ss} & -\Psi_{K,s} \\ -\Psi_{K,s} & 1 \end{pmatrix}$ ,
3. Longitudinal und p-Polarisation:  $R_p^L = \begin{pmatrix} 1 & -\Psi_{K,p} \\ \Psi_{K,p} & r_{ss}/r_{pp} \end{pmatrix}$ ,
4. Longitudinal und s-Polarisation:  $R_s^L = \begin{pmatrix} r_{pp}/r_{ss} & -\Psi_{K,s} \\ \Psi_{K,s} & 1 \end{pmatrix}$ .

### 2.2.2 Quantenmechanische Betrachtung des Kerr-Effekts

Der Kerr-Effekt bzw. Faraday-Effekt kann mit Hilfe des magnetischen Zirkulardichroismus (MCD) beschrieben werden. Im Allgemeinen bezeichnet man als Dichroismus ein optisches Phänomen, das in vielen anisotropen Medien auftritt und das zu unterschiedlich starker Absorption für unterschiedliche Polarisationsorientierungen führt [Kle86]. Der Absorptionskoeffizient des Mediums hängt also von der Polarisation des einfallenden Lichtes ab und kann im Extremfall Null werden. Das Material ist dann vollständig transparent und der Brechungsindex besitzt nur noch einen Realteil. Der magnetooptische Kerr-Effekt kommt nun durch die Anregung von Valenzelektronen knapp unterhalb der Fermi-Energie in unbesetzte kurzlebige Zustände der Probe zustande. Bei magnetischen Materialien spalten die Bänder aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung auf, so dass die Übergangsenergien für verschiedene Spin-Richtungen unterschiedlich sind. Das einfallende, linear polarisierte Licht kann in zwei Anteile zerlegt werden. Einen rechts-zirkular-polarisierten und einen links-zirkular-polarisierten Anteil. Aufgrund der Auswahlregeln können nur bestimmte Übergänge mit Photonen der Helizität +1 bzw. -1 stattfinden.

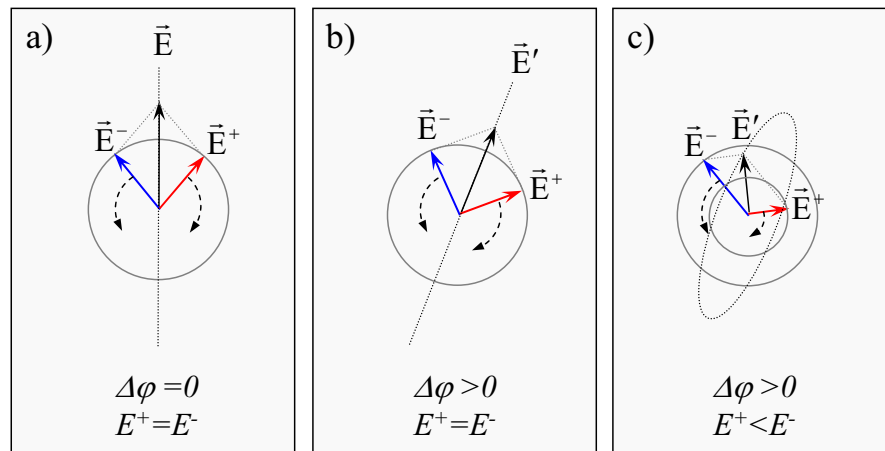


Abbildung 2.7: Erklärung des Kerr/Faraday-Effekts mit Hilfe des magnetischen Zirkulardichroismus (MCD). a) Linear polarisiertes Licht mit Feldvektor  $\vec{E}$  kann in zwei phasengleiche zirkular polarisierte Komponenten  $\vec{E}^+$  und  $\vec{E}^-$  zerlegt werden. b) In einem transparenten, magnetischen Medium ergibt sich eine Phasenverschiebung  $\Delta\varphi$  der Komponenten  $\vec{E}^+$  und  $\vec{E}^-$  aufgrund der Aufspaltung der elektronischen Bänder und somit eine Drehung der Polarisationsrichtung des ausfallenden Lichtes. c) Bei einem nicht-transparenten Medium (z. B. Metall) kommt es zusätzlich zur Phasenverschiebung zu einer unterschiedlichen Absorption der Komponenten  $\vec{E}^+$ ,  $\vec{E}^-$ . Das Resultat ist ein elliptischer Polarisationszustand mit der Elliptizität  $\epsilon$ , der um den Winkel  $\theta$  gedreht ist.

Die unterschiedliche Lebensdauer der angeregten Zustände ergibt eine Phasenverschiebung zwischen der links- und rechts-zirkular-polarisierten Komponente. Findet keine Absorption statt (durchsichtiges Medium, Isolator) und addiert man nun die beiden links- und rechts- zirkular-polarisierten Komponenten, so ergibt sich wiederum linear polarisiertes Licht, das um einen Winkel  $\theta$  zum einfallenden Licht gedreht ist (siehe Abbildung 2.7 b)). Bei Metallen findet aufgrund der Bandstruktur immer auch eine Absorption des Lichtes statt, d. h. ein Photon wird absorbiert und die Energie z. B. in eine Gitterschwingung transformiert. Auch die Absorption ist von der Energie des Lichtes und der Helizität abhängig. Damit wird der elektrische Feldvektor  $\vec{E}$  der entsprechenden zirkular-polarisierten Komponente kleiner. Nach dem Zusammensetzen der beiden zirkular-polarisierten Komponenten ergibt sich nun ein elliptischer Polarisationszustand, der um einen Winkel  $\theta$  gedreht ist und eine Elliptizität  $\epsilon$  besitzt (Abbildung 2.7 c)). Die Aufspaltung der Bänder führt zum Kerr-Effekt, daher ist die Spin-Bahn-Kopplung entscheidend für die Größe der Kerr-Drehung. Die Abhängigkeit von der Richtung kommt auf Grund der Symmetrieregeln zustande, wie schon zuvor in dem phänomenologischen Modell erklärt wurde.

## 2.3 Kerr-Magnetometrie

Bei der Kerr-Magnetometrie bestimmt man je nach Versuchsaufbau die Kerr-Drehung oder die Kerr-Elliptizität, um damit eine indirekte Aussage über die Magnetisierung der Probe zu treffen. Ein Vorteil dieses Verfahrens ist die hohe Empfindlichkeit und der einfache experimentelle Aufbau. So kann man eine magnetische Auflösung von etwa 25 % einer Monolage Fe/W(110) erreichen und Messungen im Ultrahochvakuum problemlos durchführen. Ein Nachteil der Methode ist es allerdings, keine absoluten magnetischen Momente bestimmen zu können. Eine Änderung der Drehung oder Elliptizität des Lichtes kann auch alleine durch unterschiedliche optische Konstanten zustande (Materialänderung) kommen, ganz ohne eine Änderung der magnetischen Eigenschaften der Probe. Ein Vergleich der Magnetisierung verschiedener Proben ist daher nur eingeschränkt möglich.

### 2.3.1 Messung der Kerr-Drehung

Der Aufbau des Kerr-Magnetometers wird ausführlich in Kapitel 3.3 beschrieben. An dieser Stelle soll lediglich die Theorie der Messung mit Hilfe des Jones-Matrix-Formalismus gezeigt werden. Hierbei wird jedes optische Element durch eine Matrix beschrieben. Am Beispiel des longitudinalen Kerr-Effekt mit s-polarisiertem Licht soll das Vorgehen erläutert werden. Der Laserstrahl durchläuft nacheinander einen Polarisationsfilter, die magnetische Probe, einen Faraday-Modulator, der die Polarisationsrichtung mit einem Sinus-Signal moduliert und die Drehung der Probe kompensiert, und zuletzt einen weiteren Polarisationsfilter, der zum ersten um  $90^\circ$  gedreht ist (Analytator). Danach trifft der Laserstrahl auf eine Photodiode zur Lichtintensitätsmessung. Mit Hilfe des Jones-Matrix-Formalismus kann der  $\vec{E}$ -Vektor des Lichtes nach Durchlaufen der Anordnung durch Multiplikation der Matrizen des Analysators  $P_p$ , des Faradaymodulators  $R_{fara}$ , der Probe  $R_s^L$  und einer s-polarisierten Lichtwelle  $\vec{E}_s$  berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 \vec{E} &= P_p \cdot R_{fara} \cdot R_s^L \cdot \vec{E}_s \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\xi \\ \xi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{pp}/r_{ss} & -\Psi_{K,s} \\ \Psi_{K,s} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\xi \\ \xi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} - \xi \\ -\xi\Psi_{K,s} + 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} - \xi \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\theta_{K,s} - i\varepsilon_{K,s} - \xi \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.33}
 \end{aligned}$$

$\xi$  beschreibt den Kompensationswinkel, der die Kerr-Drehung der Probe durch das Anlegen einer Spannung an den Faradaymodulator rückgängig macht. Damit ergibt sich nun eine resultierende Lichtintensität, die auf die Photodiode trifft, von:

$$\begin{aligned}
 I \propto |\vec{E}|^2 &= |-\theta_{K,s} - i\varepsilon_{K,s} - \xi|^2 \\
 &= |\theta_{K,s}^2 + 2i\theta_{K,s}\varepsilon_{K,s} + 2\xi\theta_{K,s} + \varepsilon_{K,s}^2 + 2i\varepsilon_{K,s}\xi + \xi^2| \\
 &= |(\theta_{K,s} + \xi)^2 + 2i(\theta_{K,s}\varepsilon_{K,s} + \varepsilon_{K,s}\xi) + \varepsilon_{K,s}^2| \\
 &= (\theta_{K,s} + \xi)^2 + \varepsilon_{K,s}^2,
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

wobei die Intensität für  $\xi = -\theta_{K,s}$  minimal wird. Im Experiment wird der Kompensationswinkel  $\xi$  gemessen.

### 2.3.2 Messung der Kerr-Elliptizität

Um die Kerr-Elliptizität messen zu können, muss hinter der Probe ein  $\lambda/4$ -Plättchen eingebaut werden. Ein  $\lambda/4$ -Plättchen besteht aus einem doppelbrechenden Material, d. h. es besitzt für p- bzw. s-polarisiertes Licht unterschiedliche Brechungsindices. Die Dicke des Plättchens wird gerade so gewählt, dass sich eine Phasenverschiebung der beiden Komponenten von  $\lambda/4$  ( $\pi/2$ ) ergibt. Liegt nach der Reflexion an der Probe ein elliptischer Polarisationszustand vor, so erhält man nach dem Durchstrahlen eines  $\lambda/4$ -Plättchen wiederum einen elliptischen Polarisationszustand, bei dem in erster Näherung die Kerr-Drehung mit der Kerr-Elliptizität vertauscht ist. Eine Anschauliche Darstellung der Wirkungsweise findet sich in Abbildung 2.8. In a) ist der elliptischen Polarisationszustand vor dem  $\lambda/4$ -Plättchen dargestellt. Die lange Halbachse  $a$  der Ellipse ist um  $\pi$  phasenverschoben zur kurzen Halbachse  $b$ . b) zeigt den neuen elliptischen Polarisationszustand nach dem  $\lambda/4$ -Plättchen, das so orientiert ist, dass nur die s-polarisierte Komponente eine Phasenverschiebung um  $\pi/2$  erfährt. Daher bleiben die p-Komponenten der Halbachsen erhalten, nur die s-Komponente der langen Halbachse  $a$  wird um  $\Delta\varphi = \pi/2 + \pi/2 = \pi$  (d.h.  $\cdot(-1)$ ) phasenverschoben und zur s-Komponente der neuen kleinen Halbachse  $\tilde{a}$ . Die s-Komponente der kurzen Halbachse  $b$  wird zur s-Komponente der neuen langen Halbachse  $\tilde{b}$  mit der Phasenverschiebung  $\Delta\varphi = \pi/2 - \pi/2 = 0$ . Da die neuen Halbachsen nicht mehr genau senkrecht aufeinander stehen, sondern einen Winkel von  $\pi/2 + 2\theta$  aufspannen, ist die Betrachtung nur für kleine  $\varepsilon$  korrekt.

Analog zur Darstellung 2.34 lässt sich die Photodiodenintensität auch hier durch die Jones-Matrizen darstellen mit dem Einfügen der Matrix  $L$  für das  $\lambda/4$ -Plättchen erhält man:

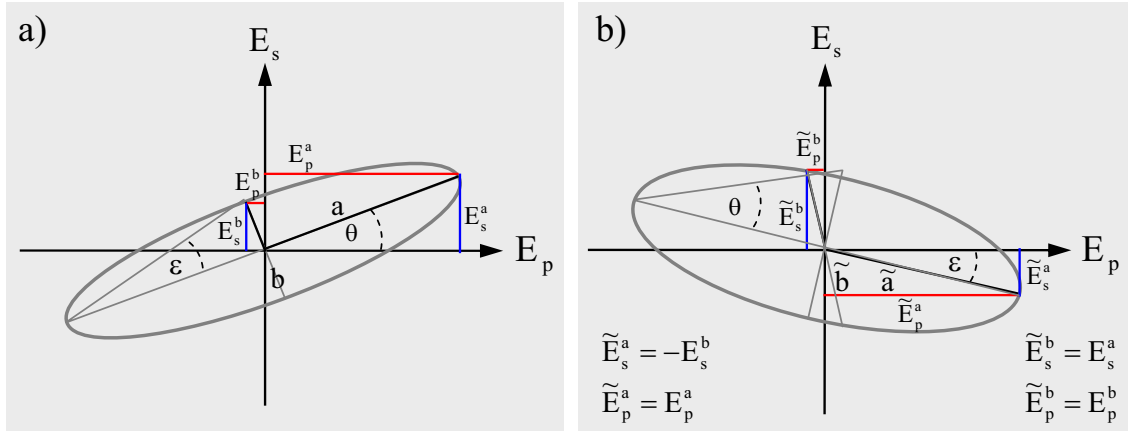


Abbildung 2.8: Anschauliche Darstellung der Wirkungsweise eines  $\lambda/4$ -Plättchens auf einen elliptischen Polarisationszustand. a) zeigt den elliptischen Polarisationszustand vor dem  $\lambda/4$ -Plättchen. Die lange Halbachse  $a$  der Ellipse ist um  $\pi$  phasenverschoben zur kurzen Halbachse  $b$ . b) zeigt den neuen elliptischen Polarisationszustand nach Durchtritt durch das  $\lambda/4$ -Plättchen. Das  $\lambda/4$ -Plättchen ist so orientiert, dass nur die s-polarisierte Komponente eine Phasenverschiebung um  $\pi/2$  erfährt. Daher bleiben die p-Komponenten der Halbachsen erhalten, nur die s-Komponente der langen Halbachse  $a$  wird um  $\pi/2 + \pi/2$  (d.h.  $\cdot(-1)$ ) phasenverschoben und zur s-Komponente der neuen kleinen Halbachse  $\tilde{a}$ . Die s-Komponente der kurzen Halbachse  $b$  wird zur s-Komponente der neuen langen Halbachse  $\tilde{b}$ . Da die neuen Halbachsen nicht mehr genau senkrecht aufeinander stehen ( $\pi/2 + 2\theta$ ) ist die Betrachtung eine Näherung für kleine  $\varepsilon$ . Durch das  $\lambda/4$ -Plättchen wird  $\theta$  und  $\varepsilon$  gerade vertauscht.

$$\begin{aligned}
\vec{E} &= P_p \cdot R_{fara} \cdot L \cdot R_s^L \cdot \vec{E}_s \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\xi \\ \xi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{pp}/r_{ss} & -\Psi_{K,s} \\ \Psi_{K,s} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\xi \\ \xi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\xi \\ \xi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} \\ -i \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} + i\xi \\ -\xi\Psi_{K,s} - i \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -\Psi_{K,s} + i\xi \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\theta_{K,s} - i\varepsilon_{K,s} + i\xi \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.35}
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich eine Intensität an der Photodiode von:



$$\begin{aligned}
I \propto |\vec{E}|^2 &= |-\theta_{K,s} - i\varepsilon_{K,s} + i\xi|^2 \\
&= |\theta_{K,s}^2 + 2i\theta_{K,s}\varepsilon_{K,s} - 2i\xi\theta_{K,s} - \varepsilon_{K,s}^2 + 2\varepsilon_{K,s}\xi - \xi^2| \\
&= |-(\varepsilon_{K,s} - \xi)^2 + 2i(\theta_{K,s}\varepsilon_{K,s} - \theta_{K,s}\xi) + \theta_{K,s}^2| \\
&= (\varepsilon_{K,s} - \xi)^2 + \theta_{K,s}^2,
\end{aligned} \tag{2.36}$$

wobei nun für  $\xi = \varepsilon_{K,s}$  die Kerr-Elliptizität kompensiert wird.

# Kapitel 3

## Experimentelles

### 3.1 Die UHV-Apparatur

Sämtliche Untersuchungen und Präparationen wurden in einer Ultrahochvakuum- (kurz UHV) Apparatur mit einem Basisdruck von  $6 \cdot 10^{-11}$  mbar durchgeführt. Zur Verhinderung von Schwingungen befindet sich die Apparatur auf einer Luftkissenfederung und wird während der Messungen nur mit einer Ionengetterpumpe betrieben. Die Apparatur bietet eine Vielzahl von Präparations- und Probencharakterisierungsmöglichkeiten:

1. Propenpräparation mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (MBE). Hierbei ist es möglich vier verschiedene Materialien bei regelbarer Probentemperatur aufzudampfen,
2. Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED),
3. Chemische Analyse mittels Augerspektroskopie (AES),
4. In-situ Kerr-Magnetometrie (UHV-MOKE),
5. Rastertunnelmikroskopie/-spektroskopie (STM/STS),
6. Massenspektrometrie zur Analyse des Restgases in der Apparatur.

Abbildung 3.1 zeigt ein Foto des UHV-Systems, bestehend aus der Hauptkammer, in der die Probenpräparation, sowie alle weiteren Untersuchungen zur Probencharakterisierung durchgeführt werden können, und der kleineren STM-Kammer, in der sich das Rastertunnelmikroskop befindet. Die Proben können mittels eines Transfermechanismus von der Präparationskammer in das STM gebracht werden. Nähere Einzelheiten zu der Apparatur finden sich in den Referenzen [Wal86] und [Hau98a].

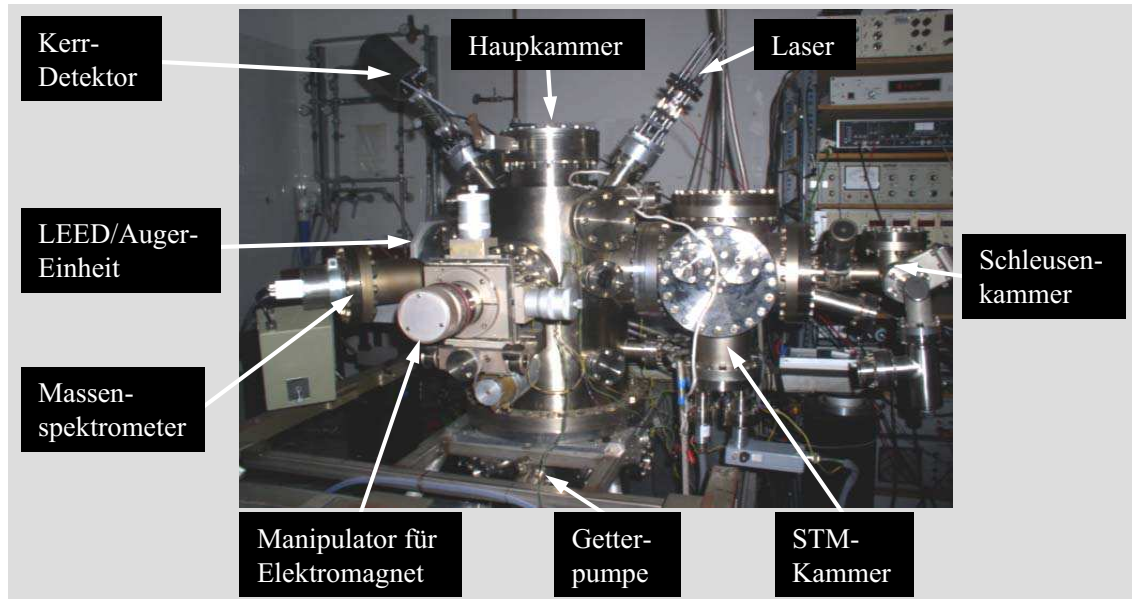


Abbildung 3.1: Foto der UHV-Apparatur, die im Wesentlichen aus einer Hauptkammer, sowie der kleineren STM-Kammer besteht. Die Proben können mittels einer Transfereinrichtung bewegt werden.

Das Substrat wird auf einem speziell entwickelten Molybdän-Proben-träger mit kleinen Tantal-Bleichen fixiert (siehe Abbildung 3.2). Bei der Präparation und den Kerr-Messungen befindet sich der Proben-träger mit dem Substrat in einem Manipulator, mit dessen Hilfe man die x-, y-, z-Position einstellen kann. Unterhalb der Probe ist ein Heiz-filament angebracht, dass zur Probenheizung dient. Ebenso ist es möglich, eine positive Hochspannung (800 V) an die Probe anzulegen. Die von dem Heizfilament emittierten Elektronen werden auf die Probe beschleunigt und erhitzen diese bei einer Leistung  $P = 120 \text{ W}$  auf ca. 2000 K. Dieses sogenannte „flashen“ dient zur Reinigung des Substrats. Ferner besteht die Möglichkeit die Proben mit Hilfe einer Durchflusskühlung mit flüssigem Stickstoff unter 100 K abzukühlen. Abbildung 3.2 a) zeigt den prinzipiellen Aufbau des Probenhalters und ein Foto des Proben-trägers aus Molybdän (Abbildung 3.2 b)).

### 3.1.1 Bestimmung der Proben-temperatur

Für die Präparation von Proben bei erhöhter Temperatur bzw. für temperaturabhängige Kerr-Messungen ist es wichtig, die genaue Proben-temperatur zu kennen. Da das Substrat zur Reinigung auf etwa 2000 K erhitzt werden muss, ist es nicht möglich, her-

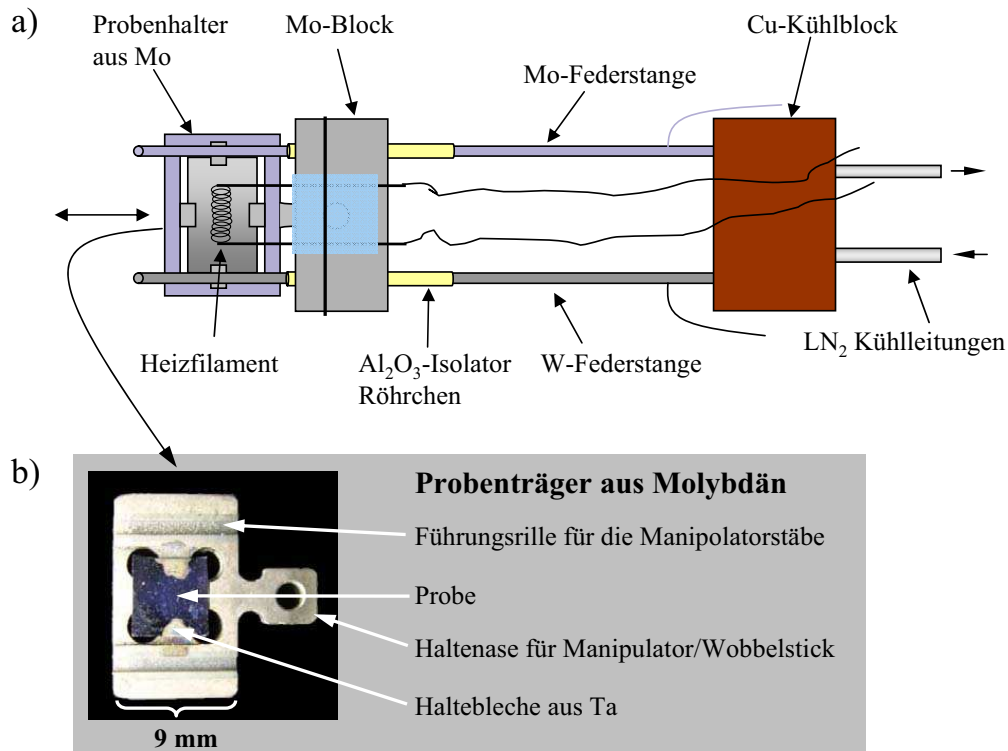


Abbildung 3.2: a) Schematische Darstellung des Probenhalters. b) Foto des verwendeten Proben-trägers aus Molybdän.

kömmliche Thermoelemente zu verwenden, da diese schmelzen würden. Die Temperaturmessung erfolgt direkt über die beiden Probenfedern, die den Proben-träger in seiner Position halten. Eine Feder besteht aus Wolfram, die andere aus Molybdän, was ein W-Mo-Thermoelement darstellt (siehe auch Abbildung 3.2). Dabei wird die Temperatur am Übergang von der W-Feder zum Mo-Probenhalter gemessen. Da es sich hierbei um kein Standard-Thermoelement handelt, muss zunächst eine Kalibration durchgeführt werden. Diese erfolgte mit einem Typ-E Thermoelement, das für die Kalibration von oben auf das Wolfram-Substrat gedrückt wurde. Die Temperaturabhängigkeit der Thermospannung des W-Mo-Thermoelements ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Der Zusammenhang zwischen der mittleren Temperatur der Probe und des Stroms durch das Heizfilament  $I_{Fil}$  ist in Tabelle 3.1 aufgeführt.

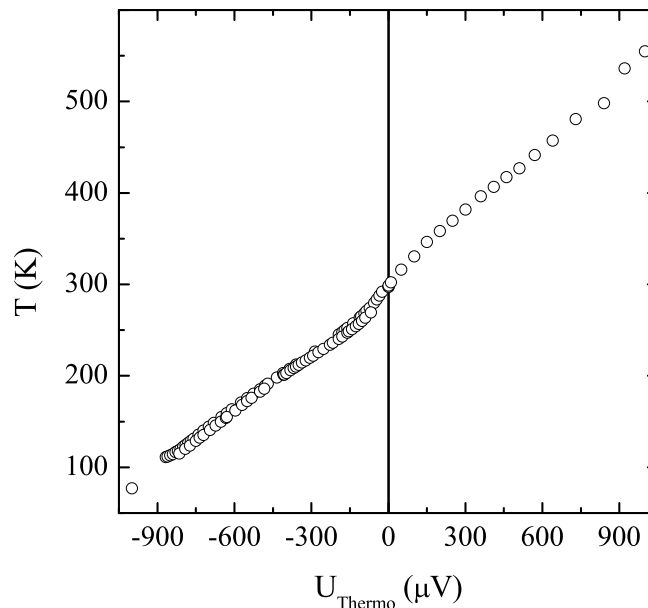


Abbildung 3.3: Das Diagramm zeigt den Zusammenhang von Thermospannung und Temperatur des W-Mo-Thermoelements.

$I_{\text{Fil}}$ (A):	2	2,5	3	3,5	4	4,5
$T$ (K):	360	420	520	640	780	950

Tabelle 3.1: Probestemperaturen für verschiedene Heizfilamentströme nach einer Wartezeit von 10 Minuten.

## 3.2 Das Rastertunnelmikroskop

Der Aufbau eines Rastertunnelmikroskops besteht im Wesentlichen aus einer Scanner-einheit, an der eine möglichst feine Spitze befestigt ist und einer Computersteuerung. Das verwendete Omicron Micro-STM besitzt einen sogenannten Röhren-Scanner. Dabei sind auf einem Röhren aus einem Piezo-Kristall vier Elektroden aufgebracht. Durch das Anlegen einer entsprechenden Spannung verbiegt sich das Röhren und man kann eine x- bzw. y-Bewegung realisieren. Für die z-Bewegung ist ein weiterer Piezokristall auf dem Röhren befestigt. Die Größe des maximalen Gesichtsfeldes ist durch die Länge des Röhrens festgelegt und beträgt in unserem Fall  $2 \mu\text{m}$ . Der Scanner ist mit einer Magnethalterung versehen und kann im UHV gewechselt werden.

Prinzipiell unterscheidet man zwei verschiedene Betriebsarten des STMs:

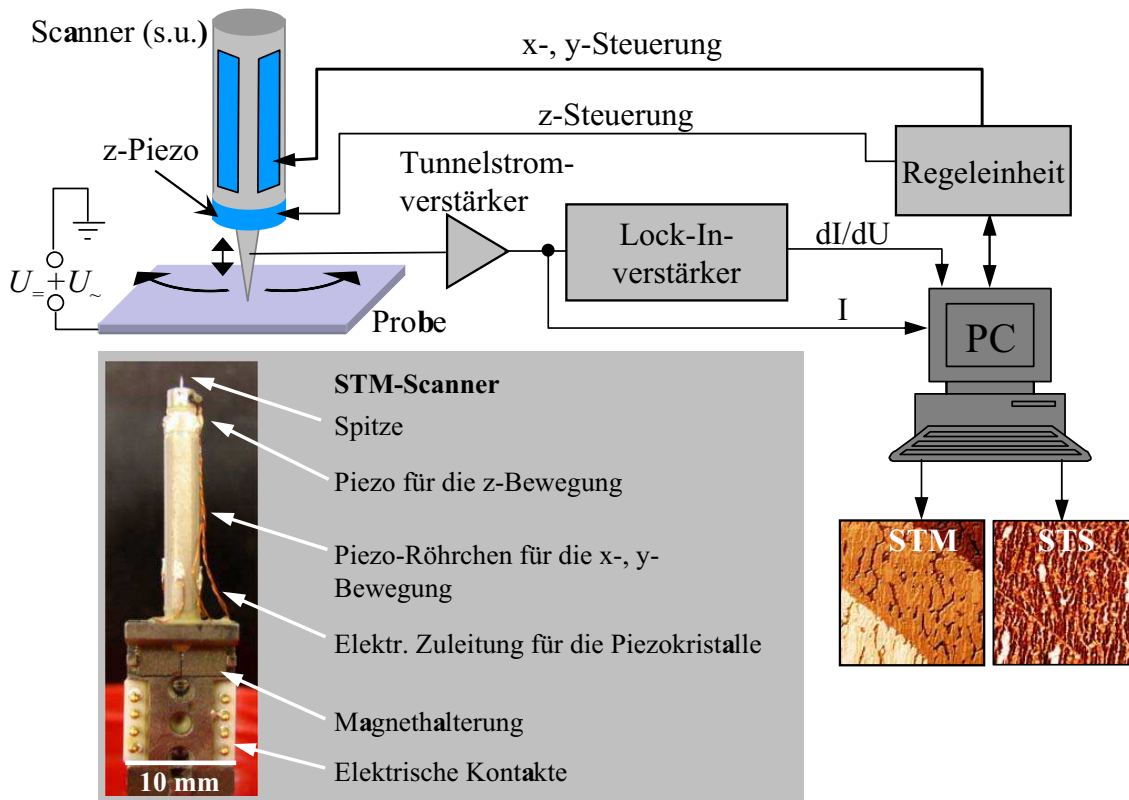


Abbildung 3.4: Prinzipieller Aufbau eines Rastertunnelmikroskops mit der Möglichkeit  $dI/dU$ -Spektroskopie zu betreiben. Das Foto zeigt die STM-Scannereinheit eines Omicron Mikro-STMs. Die Länge des Piezo-Röhrchens bestimmt das maximale Gesichtsfeld des Mikroskops.

1. Im Konstantstrommodus wird der Tunnelstroms mittels einer elektronischen Regelung konstant gehalten, wobei der Abstand Spitze-Probe variiert wird. Das Höhen-signal wird am Bildschirm in Helligkeitsstufen dargestellt.
2. Der Konstanthöhenmodus eignet sich nur für atomar flache Proben, da ansonsten ein Kontakt der Spitze mit der Oberfläche sehr wahrscheinlich wird. Bei diesem Modus wird der Tunnelstrom als Helligkeitskontrast am PC dargestellt. Der Vorteil besteht in der höheren Scangeschwindigkeit, da keine Zeit für die Regelung benötigt wird.

Sämtliche STM-Aufnahmen dieser Arbeit wurden im Konstantstrommodus durchgeführt. Für die Aufnahme von  $dI/dU$ -Spektroskopiebildern ist die Lock-In Messtechnik notwendig, da die Änderungen des Tunnelstroms, die durch unterschiedliche lokale Zustandsdichten (kurz LDOS) hervorgerufen werden, äußerst gering sind. Daher muss die Proben-spannung zusätzlich mit einer kleiner Wechselspannung (ca. 50 mV) moduliert werden.

Die Frequenz der Wechselspannung sollte möglichst groß sein, damit die Regelung die Strommodulation nicht herausregeln kann. Eine Obergrenze der Frequenz der Modulationsspannung stellt die Resonanzfrequenz des Scanners dar, die bei dem verwendeten Modell bei ca. 11 kHz liegt. Das modulierte Stromsignal wird mit einem Lock-In Verstärker verarbeitet und man erhält am Ausgang das  $dI/dU$ -Signal für die eingestellte Probenspannung. Den größten Beitrag des Stroms liefert das kapazitive Übersprechen, da das System Spitze-Vakuum-Probe wie ein Kondensator wirkt. Da aber dieses Signal um  $90^\circ$  phasenverschoben zum Tunnelstrom ist, kann man den Tunnelstrom durch die richtige Wahl der Phase am Lock-In-Verstärker herausfiltern und in anschließend in einen Computer einlesen. Die Bestimmung der Phasenverschiebung kann durch die Minimierung des Untergrundsignals der  $dI/dU$ -Spektren oder anhand der relativen Peakhöhen erfolgen. Dazu wird die relative Peakhöhe anhand eines bekannten Spektrums, das einen ausgeprägten Peak zeigt, in Abhängigkeit der am Lock-In-Verstärker eingestellten Phase bestimmt. Verschwindet der Peak bei einer Phase vollständig, so erreicht man die maximale Sensitivität durch eine Phasenverschiebung um  $90^\circ$ . Die ermittelte Phase beträgt für alle aufgenommenen Spektren, sowie für die spektroskopischen Bilder  $-58^\circ$ . Für die Sensitivität des Lock-In-Verstärker wird für die  $dI/dU$ -Spektren 300 mV mit einer Zeitkonstanten von 300 ms gewählt. Zur Aufnahme von Tunnelspektren wird die Spitze an die gewünschte Stelle auf der Probe gebracht und die Abstandsregelung abgeschaltet. Danach wird die Spannung durchgeföhren und das entsprechende  $dI/dU$ -Signal aufgezeichnet. Über die Spannung und den Strom, der vor der Abschaltung der Regelung anlag, wird in diesem Modus der Abstand Spitze-Probe definiert. Eine gleichzeitig Darstellung der Topographie, sowie eines Spektroskopiebildes ist möglich, in dem das Ausgangssignal des Lock-In-Verstärkers mit dem Analogeingang der STM-Elektronik eingelesen und auf dem Bildschirm graphisch dargestellt wird. Hierfür wurden kleinere Zeitkonstanten am Lock-In eingestellt.

### 3.2.1 Spitzenpräparation

Um hochauflösende Bilder mit dem STM zu bekommen, ist es notwendig, eine Spitze mit einem möglichst kleinen Radius zu verwenden (siehe Gleichung 2.7). Im Idealfall sollte der gesamte Tunnelstrom nur über ein einziges Atom der Spitze zur Probe fließen. Adsorbate auf der Spitze sind insbesondere für die Tunnelspektroskopie störend, da sie die Zustandsdichte der Spitze bei der Fermi-Energie verändern können. Das am häufigsten verwendete Spitzenmaterial ist Wolfram oder eine  $Pt_{0,8}Ir_{0,2}$ -Legierung. Die Präparation von Wolframspitzen erfolgt durch elektrochemisches Ätzen in einer NaOH-Lösung, während die Präparation einer Pt-Ir-Spitze durch einfaches Anquetschen und Abreißen des Drahtendes erfolgen kann. Die Qualität der STM-Bilder ist bei Proben mit einer geringen Höhenkorrugation für beide Spitzentypen erstaunlicherweise gleich gut. Eine Erklärung dafür können aufgenommenen Rasterelektronenmikroskopie (engl.: *scanning elec-*

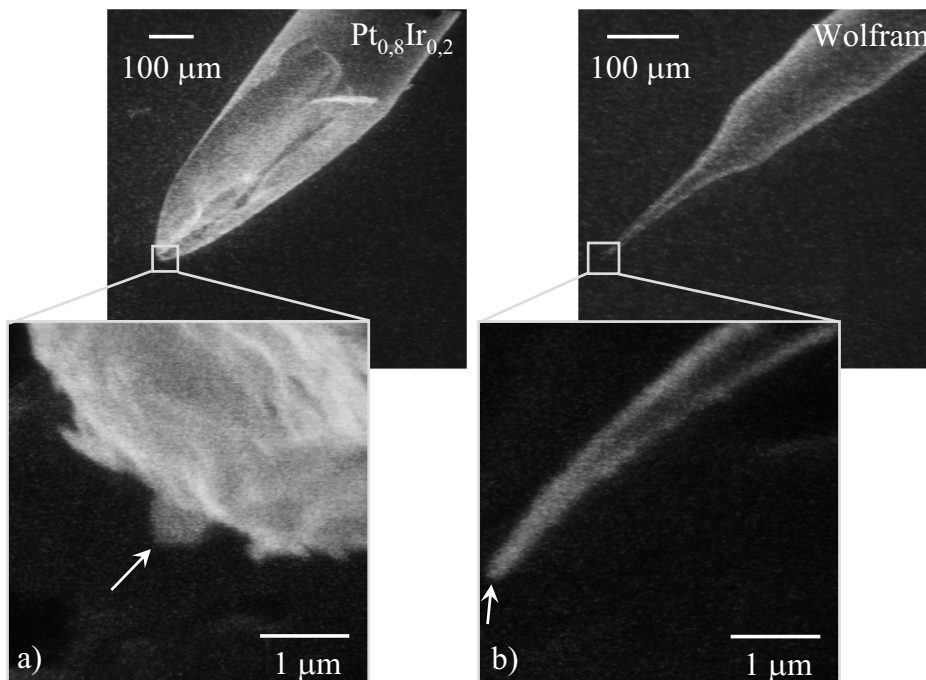


Abbildung 3.5: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer aus Pt<sub>0,8</sub>Ir<sub>0,2</sub>-Draht abgeschnittener STM-Spitze a), sowie einer geätzten Wolframspitze b). Die Pfeile kennzeichnen jeweils die Stellen über die der Tunnelstrom zur Probe fließt.

tron microscope, kurz SEM)-Bilder liefern (siehe Abbildung 3.5). Die geätzte Wolframspitze hat einen Spitzenradius von weniger als 200 nm. Dies reicht aus, dass ein Großteil des Tunnelstroms über ein der Probe nächstes Atom fließen kann. Bei dem abgeschnittenen Pt-Ir-Draht findet man kleine Partikel an der Schnittkante mit vergleichbar geringem Radius. Diese Partikel können aber nicht in tiefe Gräben einer Probe hinein gelangen und liefern daher nur bei sehr flachen Proben scharfe Bilder. Präpariert man den W-Draht auch durch Abreißen eines Endes, so erhält man sehr glatte Bruchflächen, die einem sehr großen Spitzenradius entsprechen. Dies macht daher den Ätzprozeß für Wolfram unabdingbar. Eine Nachbearbeitung der Spitze kann im UHV durch Anlegen von elektrischen Feldpulsen erfolgen. Dabei wird bei abgeschalteter Abstandsregelung die Probenspannung kurzzeitig um einen Faktor zehn erhöht. Die hohen elektrischen Feldstärken können die Spitze von Restgasadsorbaten befreien und eine Formgebung ermöglichen.

### 3.2.2 Kalibrierung des STMs

Um die x- bzw. y-Richtung des STM-Scanners zu kalibrieren verwendet man Proben mit regelmäßigen Strukturen, deren Größe bekannt ist, wie z. B. mit Hilfe von Litho-



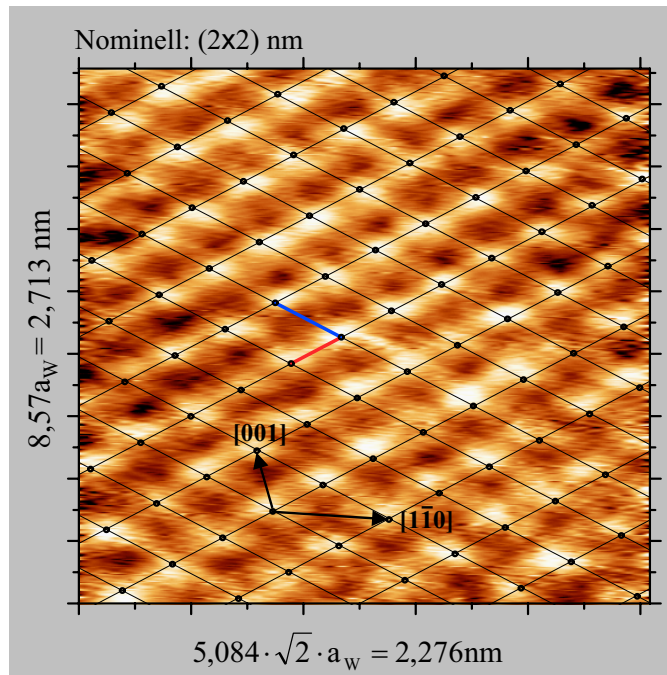


Abbildung 3.6: x-,y-Kalibration des STMs anhand von pseudomorph gewachsenen Mn-Atomen auf der W(110)-Oberfläche. Die Drift des Scanners in  $-[1\bar{1}0]$ -Richtung kann leicht korrigiert werden. Mit Hilfe der W-Gitterkonstanten  $a_W = 0,3165 \text{ nm}$  kann man zwei Korrekturfaktoren bestimmen:  $k_{[001]} = 1,36$ ,  $k_{[1\bar{1}0]} = 1,14$ .

graphie hergestellte regelmäßig angeordnete Quadrate. Bei dieser Methode können aufgrund der Größe der Strukturen bei atomarer Auflösung Kalibrationsfehler auftreten. Eine Möglichkeit die Fehler zu korrigieren besteht darin, eine atomar aufgelöste Probe mit bekannter Gitterkonstanten zur Kalibration zu verwenden. Dazu wurden auf W(110) pseudomorph gewachsene Mn-Atome verwendet. Die Mn-Atome sind auf W(110) mit einem hohen Kontrast relativ einfach abzubilden. Mit der Wolframgitterkonstanten von  $a_W = 0,3165 \text{ nm}$  kann man zwei Korrekturfaktoren für die  $[001]$ - bzw. die  $[1\bar{1}0]$ -Richtung angeben. Abbildung 3.6 zeigt einen nominell  $(2 \times 2) \text{ nm}^2$  großen Bildausschnitt der verwendeten Kalibrationsprobe. Man erkennt eine leichte Drift des Scanner in  $-[1\bar{1}0]$ -Richtung (der Bildaufbau findet von unten nach oben statt), da der Winkel zwischen der  $[001]$ - und der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung etwas größer als  $90^\circ$  ist, was sich aber leicht durch eine Verscherung des Bildes korrigieren läßt. Eine Stauchung oder Dehnung der Aufnahme in  $[001]$ -Richtung läßt sich nicht nachträglich korrigieren, sollte aber aufgrund der hohen Scangeschwindigkeit (5 s pro Bild) relativ gering sein. Die gute Übereinstimmung des regelmäßigen Gitters mit den Mn-Atompositionen spricht gegen eine nichtlineare Drift. Aus der Abbildung 3.6 kann man folgende Korrekturfaktoren bestimmen, mit denen

man die Größenangabe aller folgenden STM-Bilder multiplizieren muss:  $k_{[001]} = 1,36$ ,  $k_{[1\bar{1}0]} = 1,14$ .

### 3.3 Das Kerr-Magnetometer

Eine schematische Darstellung des Kerr-Magnetometers ist in Abbildung 3.7 gezeigt. Das von einer Laserdiode ( $\lambda = 670 \text{ nm}$ ,  $P = 40 \text{ mW}$ ) erzeugte monochromatische Licht durchläuft einen Polarisator und wird an der Probe, die sich zwischen den Polschuhen eines Elektromagneten befindet, reflektiert. Im einfachsten Fall reicht ein weiterer Polarisationsfilter, der um fast  $90^\circ$  zu dem ersten gedreht ist (Analysator) aus, um eine Messung durchzuführen. Die Lichtintensität hinter dem Analysator ist in erster Näherung proportional zur Kerr-Drehung. Da aber die Kerr-Drehungen bei den untersuchten Nanostrukturen sehr klein sind (einige  $\mu\text{rad}$ ), ist es notwendig sich eines Lock-In Verstärkers zu bedienen, der ein kleines Signal auf einem großen Untergrund filtern und verstärken kann. Da ein Lock-In Verstärker nur mit Wechselspannungssignalen arbeiten kann, muss das Messsignal mit einer Frequenz  $\omega$  moduliert werden. Dies geschieht über einen Faradaymodulator, der vor dem Analysator eingebaut wird und der proportional zur angelegten Spannung  $U_{\sim}$  die Polarisationsebene des Lasers dreht. Die Intensität im Photodetektor ist mit Hilfe der Gleichung 2.34 zu bestimmen:

$$\begin{aligned}
 I &\propto |(\theta_{K,s} + \theta_{\sim} \sin(\omega t))^2 + \varepsilon_{K,s}^2| \\
 &= |\theta_{K,s}^2 + 2\theta_{K,s}\theta_{\sim} \sin(\omega t) + \frac{1}{2}\theta_{\sim}^2(1 - \cos(2\omega t)) + \varepsilon_{K,s}^2| \\
 &= |\theta_{K,s}^2 + \frac{1}{2}\theta_{\sim}^2 + \varepsilon_{K,s}^2 + 2\theta_{K,s}\theta_{\sim} \sin(\omega t) - \frac{1}{2}\theta_{\sim}^2 \cos(2\omega t)|, \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

wobei  $\theta_{\sim}$  die Amplitude der Modulationsspannung darstellt. Liegt keine Kerr-Drehung durch die Probe vor ( $\theta_{K,s} = 0$ ), so besitzt die gemessene Intensität im Photodetektor gerade die doppelte Modulationsfrequenz:

$$I \propto |\frac{1}{2}\theta_{\sim}^2 + \varepsilon_{K,s}^2 - \frac{1}{2}\theta_{\sim}^2 \cos(2\omega t)|. \quad (3.2)$$

Da dies ein geradzahliges Vielfaches der Referenzfrequenz  $\omega$  ist, gibt der Lock-In Verstärker den Wert Null aus. Liegt eine Kerr-Drehung durch die Probe vor, so befinden sich im Frequenzspektrum des Intensitätssignal Anteile von  $\omega$  und  $2\omega$ . Das Ausgangssignal des Lock-In-Verstärkers ist nun ungleich Null und proportional zur Kerr-Drehung und zur

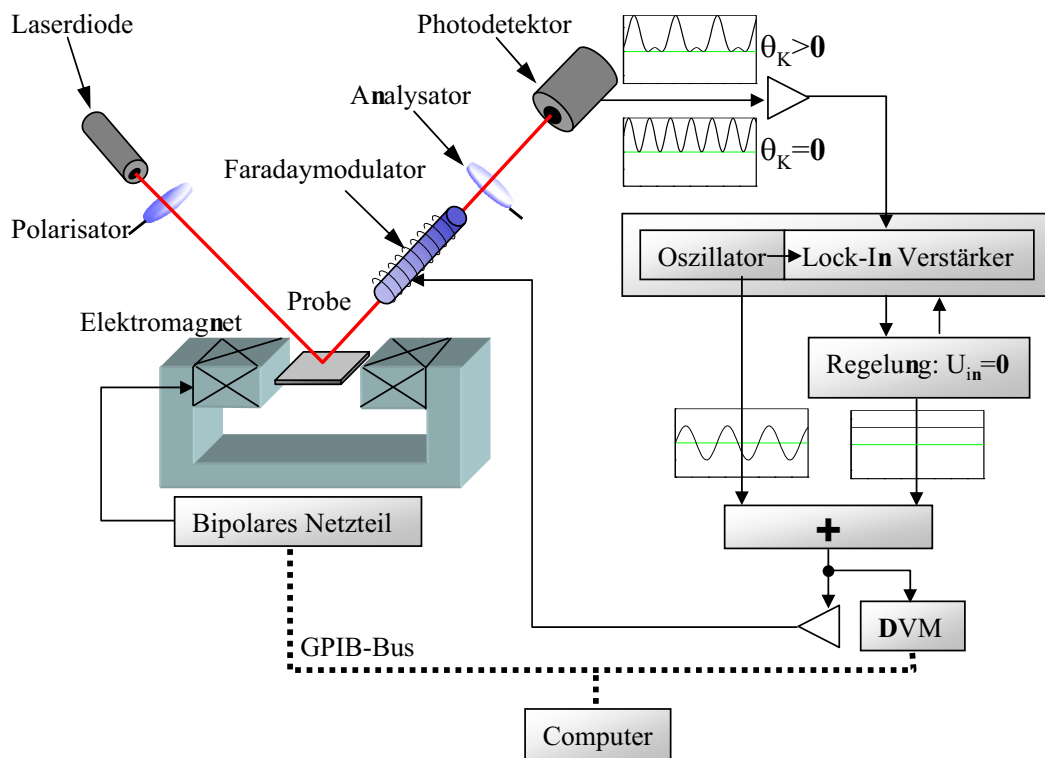


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung des verwendeten Magnetometers zur Messung der Kerr-Drehung  $\theta_K$ . Die Regeleinheit regelt das Ausgangssignal des Lock-In Verstärker auf Null, in dem die Kerr-Drehung durch Anlegen einer Gleichspannung an den Faradaymodulator kompensiert wird. Dieses Gleichspannungssignal ist proportional zu  $\theta_K$  und wird in den PC eingelesen.

einfallenden Lichtintensität. Um absolute Kerr-Drehungen bestimmen zu können, ist die Elektronik mit einer Kompensationsregelung ausgestattet, die zusätzlich zu der Wechselspannung  $U_{\sim}$  eine Gleichspannung  $U_{=}$  an den Faradaymodulator anlegt.  $U_{=}$  wird solange variiert, bis der Lock-In Verstärker wieder Null ausgibt, also die Kerr-Drehung komplett wieder rückgängig gemacht wurde.  $U_{=}$  ist somit nur noch zur Kerr-Drehung proportional und nicht mehr zur Lichtintensität und wird über einen GPIB-Bus von einem Voltmeter direkt zum PC übertragen. Der PC übernimmt auch die Steuerung eines bipolaren Netzteil, das den Elektromagneten ansteuert. Die technischen Details des Elektromagneten finden sich in Referenz [Hau98a].

Der Zusammenhang zwischen der gemessenen Kompensationsspannung und der Kerr-Drehung hängt von der Art des Faradaymodulators ab. Dieser besteht im Wesentlichen aus einem Flintglasstab mit einer Spule. Für die Drehung der Polarisationssebene gilt folgender Zusammenhang:

$$\theta_{Farad} \propto l \cdot H = l \cdot \frac{nI}{l} = nI. \quad (3.3)$$

Die Drehung hängt nur von der Windungszahl  $n$ , der angelegten Stromstärke  $I$  und einer Materialkonstanten ab. Für den im Experiment verwendeten Faradaymodulator gilt:  $1 \text{ mV} = (2,56 \pm 0,03) \mu\text{rad}$ .

### 3.3.1 Messprogramme

Für die Ansteuerung des Kerr-Magnetometers bzw. zur Messdatenerfassung und Auswertung wurden zwei Programme mit der graphischen Programmierumgebung LabVIEW erstellt. Die Steuerung des bipolaren Netzteils, sowie die des digitalen Voltmeters wird über einen GPIB-Bus (IEEE 488.2) realisiert. Das  $\mu$ -Voltmeter zur Bestimmung der Proben temperatur wird über eine serielle Schnittstelle in den PC eingelesen. Das Programm „MOKE-Komplett“ nimmt vollständige Magnetisierungskurven auf. Bei paramagnetischen Magnetisierungskurven wird automatisch eine  $\tanh$ -Funktion angepasst und die Suszeptibilität, die remanente Magnetisierung, die Sättigungsmagnetisierung und das Sättigungsfeld bestimmt und mit der zugehörigen Proben temperatur abgespeichert. Es können beliebig viele Kurve gemittelt und mit einer vorgegebenen Anzahl von Messpunkten aufgenommen werden. Für temperaturabhängige Messungen werden solange Magnetisierungskurven aufgenommen und mit der jeweiligen Temperatur gespeichert, bis eine eingestellte Endtemperatur erreicht wird. Die Auflösung des Kerr-Magnetometers wird im Wesentlichen durch Vibrationen der Probe auf minimal  $2 \mu\text{rad}$  beschränkt. Die Elektronik dagegen erlaubt eine Bestimmung der Kerr-Drehung mit bis zu  $0,3 \mu\text{rad}$  Genauigkeit. Eine lineare Drift, die z.B. beim Erwärmen der Probe auftreten kann, wird durch das Programm automatisch korrigiert.

Ein weiteres Programm dient zur Aufnahme reduzierter Magnetisierungskurven. Dabei werden nur jeweils 4 Punkte bei maximaler bzw. minimaler Stromstärke durch den Elektromagneten, sowie zweimal bei  $I = 0 \text{ A}$  aufgenommen, wodurch man eine hohe Messpunktdichte bei temperaturabhängigen Messungen der Remanenz und der Sättigungsmagnetisierung erreichen kann.

## 3.4 LEED und AES

Eine Möglichkeit für die Bestimmung von Kristallstrukturen bietet die Beugung niederenergetischer Elektronen (engl.: *low energy electron diffraction*, kurz LEED). Hierbei wird die zu untersuchende Oberfläche mit niederenergetische Elektronen (20-500 eV)

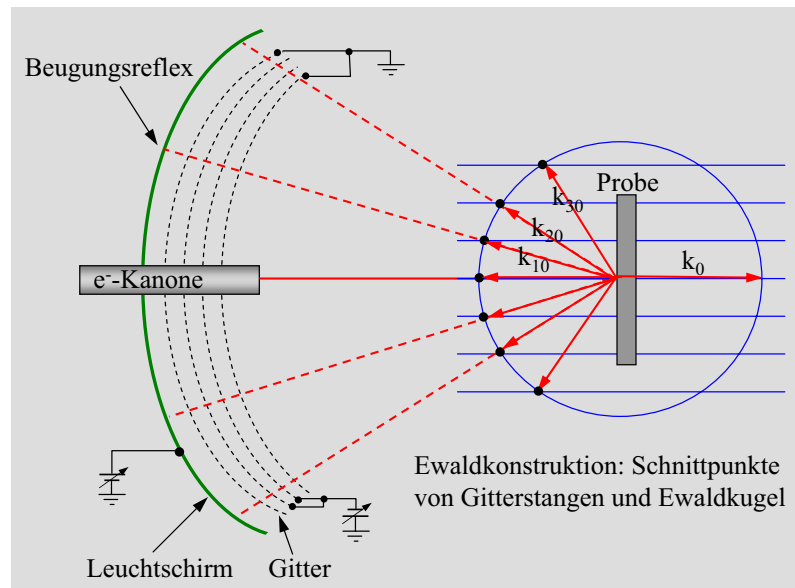


Abbildung 3.8: Schematische Aufbau einer Apparatur zur Beugung niederenergetischer Elektronen. Mit Hilfe der Ewaldkonstruktion lassen sich die Streuvektoren bestimmen.

bestrahlt und das Beugungsbild mit Hilfe eines Leuchtschirms sichtbar gemacht. Die Elektronen besitzen Wellenlängen in der Größenordnung der interatomaren Abstände (de Broglie-Wellenlänge:  $\lambda = h/p$ ). Dadurch können sie von den Oberflächenatomen der Probe elastisch gestreut werden. LEED stellt eine sehr oberflächensensitive Methode dar, da der Streuquerschnitt für niederenergetische Elektronen sehr groß ist und damit die Eindringtiefe nur wenige Atomlagen beträgt. Die gebeugten Elektronen fliegen radial von der Probe zu dem Leuchtschirm. Dabei passieren sie vier Gitter, die zur Beschleunigung bzw. Fokussierung der Elektronenstrahlen dienen. Auf dem Leuchtschirm werden sie als fluoreszierende Punkte sichtbar gemacht. Das sich ergebende Beugungsmuster ist ein Abbild des reziproken Gitters der Festkörperoberfläche. Abbildung 3.8 veranschaulicht die Funktionsweise der Elektronenbeugung. In der Vakuumapparatur befindet sich ein 4-Gitter LEED-Auger-System der Firma Omicron.

Durch Anlegen eines Gegenfeldes an ein Gitter kann die LEED-Einheit auch für Augerspektroskopie verwendet werden (engl.: *Auger electron spectroscopy*, kurz AES). Auger-Elektronen-Spektroskopie ist ein elementsensitives und sehr Oberflächenempfindliches Messverfahren. Die Elektronen werden dabei mit einer Energie von 1-3 keV auf die Probe beschleunigt und regen die Atome der Probenoberfläche energetisch an. Der Abregungsprozess kann unter anderem durch eine Energieübertragung auf ein äußeres Hüllenelektron stattfinden, das dann emittiert wird. Diese Auger-Elektronen besitzen eine für das emittierende Atom spezifische Energie. Da die Auger-Intensitäten nur sehr klein sind,

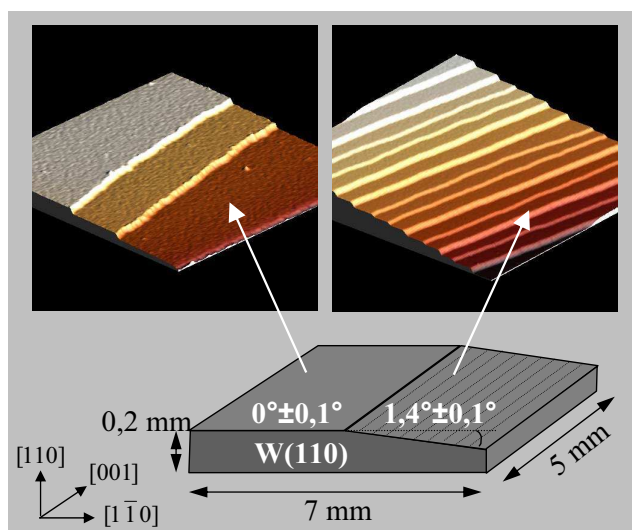


Abbildung 3.9: Darstellung des Wolfram(110)-Substrats. Die  $(200 \times 200) \text{ nm}^2$  STM-Bilder zeigen atomare Stufen auf dem glatt polierten Teil und dem um  $1,4^\circ$  angeschliffenen Substratteil.

bedient man sich wieder eines Lock-In-Verstärkers, wobei die Gegenfeldspannung moduliert wird. Die Gegenfeldspannung definiert die maximale Energie der Elektronen, die zur Anode (Leuchtschirm) gelangen können. Man erhält zunächst ein integrales Spektrum, das durch Messung der  $2\omega$ -Komponente im Lock-In-Verstärker zweimal differenziert in einen PC mit den entsprechenden Spannungswerten eingelesen wird. Zur graphischen Darstellung der Spektren dient ein eigens für diesen Zweck entwickeltes LabVIEW-Programm.

## 3.5 Probenpräparation

### 3.5.1 Reinigung des W-Kristalls

Für sämtliche Messungen wurde ein Wolfram(110)-Einkristall mit Abmessungen von  $(7 \times 5 \times 0,2) \text{ mm}$  als Substrat verwendet. Die Gitterkonstante von Wolfram beträgt  $a_W = 0,3165 \text{ nm}$ . Wolfram eignet sich aufgrund der hohen freien Oberflächenenthalpie hervorragend für die Präparation von großen, zusammenhängenden Übergangsmetalllagen. Ein Teil des W(110)-Kristalls wurde optimal orientiert, der andere unter einem Winkel von  $(1,4 \pm 0,1)^\circ$ . Damit ergeben sich im Mittel  $9,1 \text{ nm}$  breite Terrassen mit Stufenkanten in  $[001]$ -Richtung. Auf dem glatt polierten Teil findet man eine große Verteilung der Terrassenbreiten von wenigen nm bis hin zu  $500 \text{ nm}$ . Die Substratgeometrie wird durch Abbildung 3.9 veranschaulicht. Da Wolfram sehr hochschmelzend ist

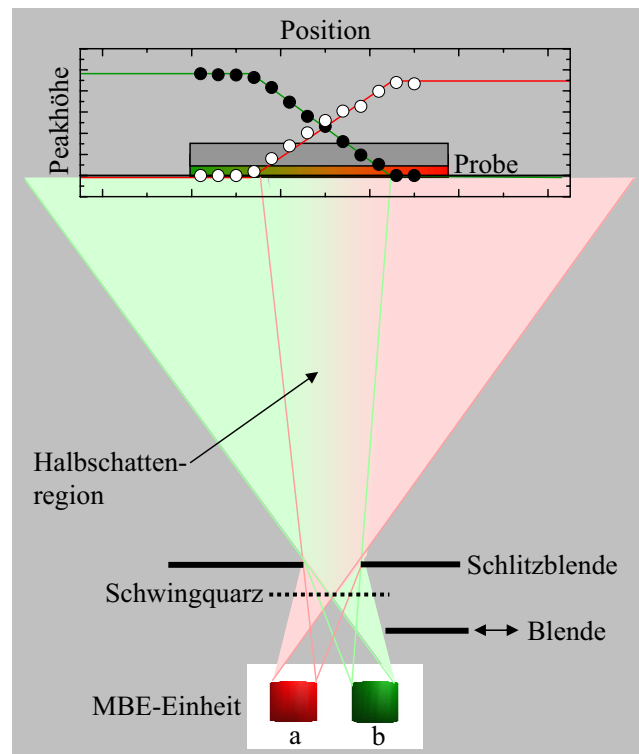


Abbildung 3.10: Geometrie zur Präparation von binären Legierungen mit kontinuierlicher Änderung der Legierungszusammensetzung. Die Verdampferraten müssen entsprechend angepasst werden, damit die Bedeckung für alle Probenpositionen konstant bleibt. Sie können mit Hilfe eines Schwingquarzes und einer Blende, die einen Verdampfer abdecken kann, bestimmt werden. Die Positionierung der Legierungskeile auf der Probe erfolgt mittels Augerspektroskopie und der Analyse der Peakhöhen. Dargestellt sind die Messpunkte der Legierungskeile einer 5 ML dicken Fe-Co-Legierung.

( $T_{Schmelz} = 3695 \text{ K}$ ), kann das Substrat durch Erhitzen auf mindestens 1800 K („flashen“) von jeglichen Adsorbaten gereinigt werden und für weitere Präparationen immer wieder verwendet werden. Befindet sich Kohlenstoff auf der W-Kristalloberfläche, so kommt es bei erhöhter Temperatur zu einer chemischen Reaktion und es bildet sich Wolframcarbid (WC), das durch einfaches Erhitzen nicht mehr entfernt werden kann. Man kann jedoch durch Einleiten von Sauerstoff mit einem Druck von  $p = 4 \cdot 10^{-8} \text{ mbar}$  den Kristall bei einer Temperatur von ca. 1000 K glühen. Das WC wird dadurch in CO umgewandelt, das man durch einfaches „Flashen“ wieder von der Oberfläche entfernen kann. Ein „Flashen“ alle 10 Minuten während des Glühvorgangs hat sich als sehr wirkungsvoll erwiesen. Nach ca. einer Stunde sollte man im Augerspektrum keinen Kohlenstoffpeak mehr finden. Je nach Kohlenstoffgehalt des W-Kristalls kann ein erneutes Glühen nach einigen

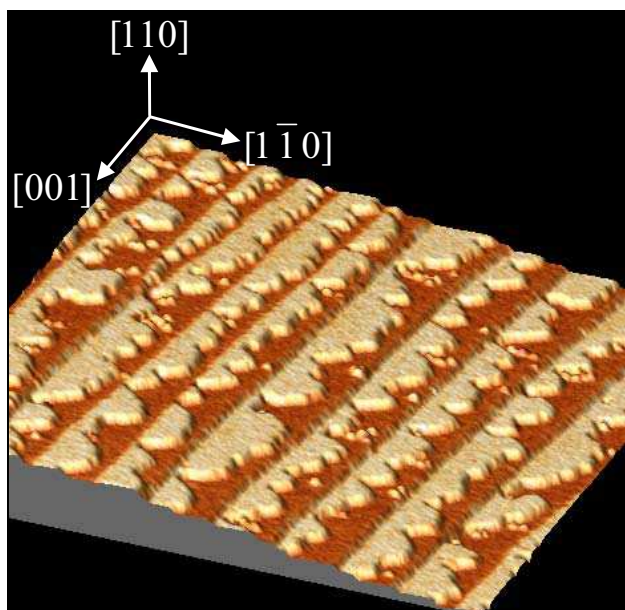


Abbildung 3.11: Rastertunnelmikroskopische Aufnahme einer CoFe-Legierung ( $\theta = 0,6$ ) auf einer vizinalen W(110)-Oberfläche. Die Probe wurde zuvor bei  $T_T = 520$  K getempert. Die Farbgebung ist durch das  $dI/dU$ -Signal bei  $U = 0,25$  V gegeben, wobei das Substrat dunkel erscheint. Man erkennt, dass sich die CoFe-Legierungsinseln an die Substratstufenkanten anlagern.

Präparationen wieder notwendig werden.

### 3.5.2 Präparation von Legierungen

Die Probenpräparation erfolgt mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (engl.: *molecular beam epitaxy*, kurz MBE), wobei das Material in einem kleinen BeO-Tiegel erhitzt und bei einem Druck von  $p < 2 \cdot 10^{-10}$  mbar verdampft wird. Der Metaldampf kondensiert auf der Probenoberfläche. Die Menge kann aus der Frequenzänderung eines Schwingquarzes, der gleichzeitig mit bedampft wird, bestimmt werden. Zur Kalibrierung wurde die Bedeckung anhand von STM-Bildern bestimmt.

Um eine homogene Legierung zu präparieren, müssen mehrere Verdampfer gleichzeitig betrieben werden. Das Legierungsverhältnis läßt sich durch die entsprechenden Verdampferaten einstellen, die über die elektrische Leistung der Tiegelheizung variiert werden kann. Möchte man eine kontinuierliche Legierungszusammensetzung präparieren, so bietet sich die Ausnutzung von Halbschatteneffekten an. Abbildung 3.10 zeigt ein Verfahren zur Präparation einer binären Legierung mit kontinuierlicher Legierungszusammensetzung. Hierbei befindet sich eine Schlitzblende zwischen der Probe und den Verdampfern.



Man muss nun eine Position finden, bei der sich die beiden Halbschatten der Atomstrahlen überlagern. Die Positionierung der Probe erfolgt mit Hilfe einer Auger-Analyse der Peakhöhen der jeweiligen Materialien an verschiedenen Probenpositionen. Um ein gutes Signal-Rauschverhältnis der Augerspektren zu bekommen, wurden für die Positionskalibrierung bis zu 6 ML der Legierung aufgedampft. Mit Hilfe einer Blende zwischen Verdampfer und Schwingquarz können die Raten für jedes Material getrennt voneinander bestimmt werden.

Magnetische Nanostreifen werden durch Selbstorganisation auf dem gestuften Teil des Wolframkristalls bei erhöhten Temperaturen präpariert. Dabei lagern sich atomar hohe Inseln an den Substratstufenkanten an und bilden bei einer Präparationstemperatur von etwa  $T_T = 780$  K zusammenhängende Streifen. Abbildung 3.11 zeigt eine dreidimensionale Darstellung einer CoFe-Legierung auf dem vizinalen W(110)-Substrat, die bei einer Temperatur von  $T_T = 520$  K getempert wurde. Auf der kombinierten topographischen und spektroskopischen Aufnahme ist der chemische Kontrast zwischen W und CoFe in der Farbgebung der Oberfläche enthalten. Die Legierunginseln haben sich bereits an die Stufenkanten angelagert. Eine Erhöhung der Temperatur führt zu glatteren Inselrändern und damit parallelen Nanostreifen.

## Kapitel 4

# Quasi eindimensionale Fe-Nanostreifen

Die magnetischen Eigenschaften niederdimensionaler ferromagnetischer Proben stellen ein interessantes Forschungsgebiet dar [She02]. Aus Sicht der Anwendung, wie z. B. Magnetspeicherplatten mit hoher Speicherdichte, werden Nanosysteme zunehmend interessanter [Whi00]. Die magnetischen Eigenschaften erfahren eine Änderung vom Volumenverhalten einer 3D-Probe hin zu 2D-Systemen [Elm95a] [Gra93] [Grü86]. Zusätzlich werden die physikalischen Eigenschaften von den Grenzflächen-Eigenschaften beeinflusst, und hier insbesondere von der Grenzflächen-Anisotropie [Gra93]. Die räumliche Begrenzung in einer Dimension führt zu neuen physikalischen Phänomenen, wie das der indirekten Austauschkopplung [Grü86] [Bai88] [Par90]. Ein besseres Verständnis von Systemen, die in zwei Dimensionen begrenzt sind (quasi 1D-System) ist für zukünftige Anwendung im Elektronikbereich, die auf einer Nanometerskala arbeiten, wesentlich. Für die Präparation quasi eindimensionaler Systeme hat sich die Deposition paralleler Streifen auf gestuften Einkristallen unter Ausnutzung der Selbstorganisation als sehr erfolgversprechend erwiesen [Him98]. Diese Methode wurde bereits verwendet, um Fe-Nanostreifen auf Cu(111) [She97] und auf W(110) zu präparieren [Elm95a] [Sue97]. Kontinuierliche magnetische Fe/W(110)-Nanostreifen zeigen eine starke antiferromagnetische dipolare Kopplung für eine Magnetisierung senkrecht zur Oberfläche [Hau98c] [Elm99], sowie eine ferromagnetische dipolare Kopplung, wenn die Magnetisierung in der Ebene liegt [Hau98b]. Ebenso konnten bereits monoatomare Co-Ketten auf einem vicinalen Pt(111)-Substrat präpariert werden [Dal00] [Dal02], welche bisher die besten Vertreter eines eindimensionalen Systems sind, obwohl sie ohne Unterbrechung nur wenige Atome lang sind. Aufgrund der großen Anisotropie [Gra86] liegt die leichte magnetische Achse von pseudomorphen Fe/W(110) in der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Die extrem große uniaxiale Anisotropie in der Probenebene ist für den 2D-Ising ähnlichen Phasenübergang der ausgedehnten Monolage verantwortlich [Elm96]. Ausschlaggebend für die ferromagnetische Ordnung in dem Streifensystem ist die dipolare Kopplung, die durch die Anisotropie verursacht wird, während bei der geschlossenen Monolage die direkte Austauschkopplung

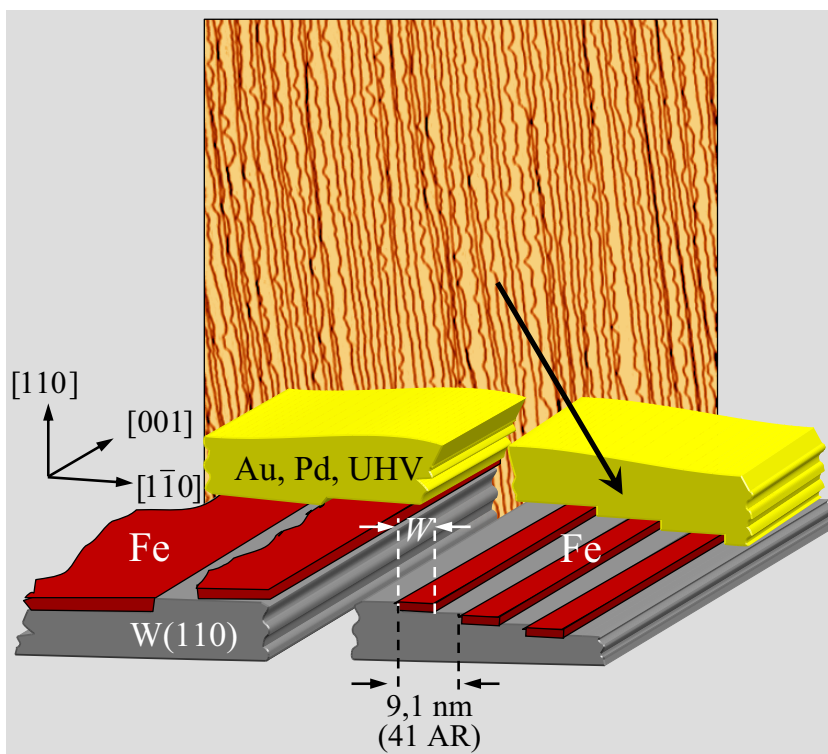


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Probengeometrie auf dem glatten W(110)-Substrat (links) und auf dem vizinalen Teil (rechts). Die leichte magnetische Achse verläuft in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Das im Hintergrund dargestellte STM-Bild mit einer Größe von  $(500 \times 500) \text{ nm}^2$  zeigt Fe-Nanostreifen mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,4$  auf dem vizinalen Substratteil. Die Regelmäßigkeit der Streifen ist gut zu erkennen. Nach der Präparation wurden die Proben mit 6 ML Au, bzw. Pd abgedeckt.

den wesentlichen Beitrag liefert. Innerhalb eines Nanostreifens bilden sich bei Temperaturen nahe des Phasenübergangs über die gesamte Streifenbreite homogen magnetisierte Spinblöcke aufgrund der Austauschwechselwirkung aus. Über der Curietemperatur  $T_C$  des Nanostreifensystem kann die Wechselwirkung zwischen den Streifen vernachlässigt werden und ein quasi eindimensionales Verhalten, das durch die Theorie vorausgesagt wird [Alb89], beobachtet werden.

## 4.1 Magnetische Eigenschaften von ein- und zweidimensionalen X/Fe/W(110)-Systemen

Im Folgenden werden Submonolagen Eisen (0,7 ps-ML) auf dem W(110)-Substrat hinsichtlich ihrer magnetischen Eigenschaften untersucht, wobei zum einen Nanostreifen-systeme auf dem vizinalen Substratteil, sowie große zusammenhängende Inseln auf dem glatten Teil gleichzeitig unter denselben Bedingungen präpariert werden. Nach der Präparation werden die Proben auf  $T_T = 780$  K erhitzt und anschließend bei Raumtemperatur mit 6 ML Gold oder Palladium abgedeckt. Abbildung 4.1 zeigt die Probengeometrie für beide Substratteile. Die Abhängigkeit der magnetischen Anisotropie, sowie der Domänenwandenergie von unterschiedlichen Abdeckungen (UHV, Au, Pd) soll näher untersucht werden.

### 4.1.1 Magnetische Eigenschaften

Die Bestimmung der magnetischen Eigenschaften der Nanostreifen erfolgt mit Hilfe von longitudinaler Kerr-Magnetometrie, wobei das äußere Feld in der leichten magnetischen Richtung ( $[1\bar{1}0]$ -Richtung), also senkrecht zu den Nanostreifen, angelegt wird. Abbildung 4.2 zeigt beispielhaft temperaturabhängige Magnetisierungskurven eines Au/Fe/W(110)-Streifensystems mit einem mittleren Streifenabstand von  $W = 28$  atomaren Reihen ( $\theta = 0,7$ ). Man kann drei Temperaturbereiche unterscheiden:

1.  $T < T_C$ : Die Nanostreifen sind aufgrund der leichten magnetischen Richtung senkrecht zu den Streifen ferromagnetisch gekoppelt. Man beobachtet eine Hysteresekurve.
2.  $T_C < T < T_s$ : Das Streifensystem zeigt keine spontane magnetische Ordnung. Es bilden sich fluktuierende Spinblöcke aus, d. h. die Kopplung einzelner magnetischer Momente bleibt erhalten. Man kann aber durch Anlegen eines äußeren Feldes die Spinblöcke ausrichten. Das System verhält sich superparamagnetisch.
3.  $T_s < T < T_C(\infty)$ : Das angelegte externe Magnetfeld  $H$  reicht nicht mehr aus, um die Spinblöcke zu stabilisieren. Daher ist es nicht mehr möglich eine Magnetisierungskurve zu beobachten. Mit erheblich größeren externen Feldern wäre es möglich, ein magnetisches Signal zu bekommen.
4.  $T > T_C(\infty)$ : Es existiert keine innere magnetische Ordnung mehr (paramagnetische Phase).

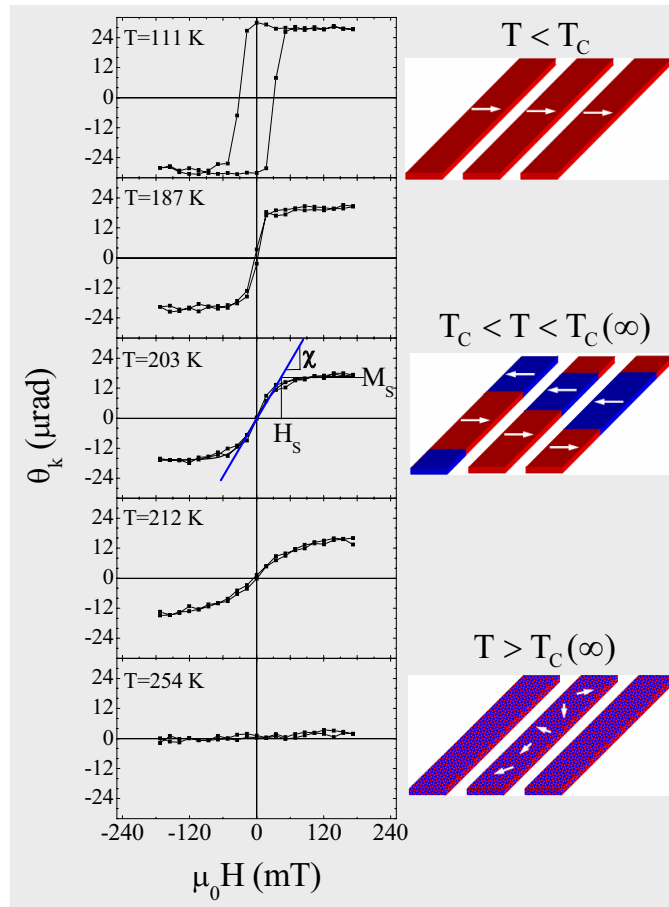


Abbildung 4.2: Magnetisierungskurven eines Au/Fe/W(110)-Nanostreifensystems mit einer mittleren Streifenbreite von  $W = 28$  für verschiedene Temperaturen. Während bei  $T < 187$  K die Streifen ferromagnetisch gekoppelt sind, bilden sich im Temperaturbereich  $T_C < T < T_C(\infty)$  in den Nanostreifen fluktuierende Spinblöcke aus. Über einen Fit an die paramagnetischen Magnetisierungskurven erhält man  $H_s$  und  $M_s$ , bzw.  $\chi$ . Für  $T > T_C(\infty)$  ist keine Kerr-Drehung mehr messbar.

Die Temperatur, bei der die Remanenz verschwindet, wird mit  $T_C$  bezeichnet, während die Temperatur, bei der die Sättigungsmagnetisierung Null wird, mit  $T_s$  bezeichnet wird.  $T_s$  ist von der Bedeckung der Probe abhängig und geht für  $\theta \rightarrow 1$  gegen die Curie-Temperatur der unendlich ausgedehnten zweidimensionalen Monolage  $T_C(\infty)$ . Zu beachten ist, dass die Auswertung nur für den Temperaturbereich von  $T_C < T < T_s$  durchführbar ist, d. h. in der superparamagnetischen Phase der Probe. Die Suszeptibilität  $\chi$  und die Sättigungsfeldstärke  $H_s$  können aus einem Fit an die Messpunkte mit Hilfe der folgenden Funktion bestimmt werden:

$$\theta_K = \theta_{K,s} \cdot \tanh\left(\frac{H}{H_s}\right), \quad \chi = \frac{\theta_{K,s}}{H_s}. \quad (4.1)$$

Das LabVIEW-Messprogramm nimmt permanent Magnetisierungskurven auf, passt die Funktion 4.1 an die Datenpunkte an, ermittelt  $\chi$  und  $H_s$  und speichert die Daten mit der jeweiligen Proben temperatur ab (siehe auch Kapitel 3.3.1). Da die Kerr-Drehungen  $\theta_K$  sehr klein sind, werden mehrere Magnetisierungskurven gemittelt.

Die magnetischen Eigenschaften der X/Fe/W(110)-Systeme sind in Abbildung 4.3 zusammengefasst. Die Temperaturabhängigkeit der remanenten Magnetisierung  $M_r$  und der Sättigungsmagnetisierung  $M_s$  ist für Proben auf dem glatten Substratteil, sowie für den vizinalen Substratteil dargestellt. Vergleichend sind auch die Daten für die unbedeckten Systeme aufgeführt. Die unbedeckte Monolage auf dem glatten Substratteil zeigt einen zweidimensionalen (2D) Ising-artigen Phasenübergang mit einem scharfen Abfall der remanenten Kerr-Drehung bei der kritischen Temperatur  $T_C$ . Oberhalb von  $T_C$  ist nur noch in einem kleinen Temperaturbereich von wenigen Kelvin eine Kerr-Drehung zu messen. Dagegen zeigt die bedeckte Monolage einen Sättigungswert noch bis zu 50 K oberhalb von  $T_C$ . Das Temperaturintervall  $T_s - T_C$  ist für Proben auf dem gestuften Substratteil deutlich größer und sogar schon bei den unbedeckten Streifen zu erkennen. Im Fall der unbedeckten Streifen wurde dieses Verhalten mit Hilfe eines dipolar induzierten Phasenübergangs erklärt [Hau98b]. Diese Art des Phasenübergangs ist mit einer Verschmierung von nur  $\Delta T = 2$  K sehr scharf. In ungekoppelten Streifen ist die Verteilung der Streifenbreite verantwortlich für eine Gaussverteilung der kritischen Temperatur. Aus einer Breitenverteilung von  $\Delta W/W = 0,3$  (STM-Aufnahmen) ergibt sich  $\Delta T_C = 15$  K. Die Faltung dieser Verteilung mit der Temperaturabhängigkeit der Remanenz, die einem Potenzgesetz folgt, würde eine Ausschmierung des Phasenübergangs von 40 %, d. h. über 70 K bedeuten. Das Temperaturintervall, in dem die Remanenz von der Sättigungsmagnetisierung abweicht, ist kleiner für die hier untersuchten Systeme, daher gehen wir davon aus, dass der Phasenübergang vom dipolar induzierten Typ ist. Für den Fall der unbedeckten und Au-bedeckten Streifen kann eine Relaxation der Remanenz ausgeschlossen werden, da das remanente Signal zu verschiedenen Zeiten nach dem Ausschalten des äußeren Feldes gemessen wurde. Au bedeckte Fe-Monolagen auf W(110) wurden bereits mit Mössbauer-Spektroskopie untersucht [Gra90] und eine Curie-Temperatur nahe der Raumtemperatur gemessen, in Übereinstimmung mit unseren Daten. Die Werte des auf die Kerr-Drehung normalisierten Hyperfeinfeldes  $B_{HF}(T)$  (Dreiecke in Abbildung 4.3 c)) sind zum Vergleich dargestellt. Das Temperaturverhalten von  $B_{HF}(T)$  folgt in etwa dem Sättigungssignal  $\theta_{K,s}$ . Im Gegensatz zur Kerr-Magnetometrie ist die Mössbauerspektroskopie nicht sensitiv auf die Magnetisierungsrichtung, sondern zur Magnetisierungsachse und zum Betrag. Die Übergangszeit beträgt etwa  $0,1 \mu\text{s}$ , d. h. ändert sich die Magnetisierung während der Übergangszeit nicht, sondern ist zufällig parallel oder an-

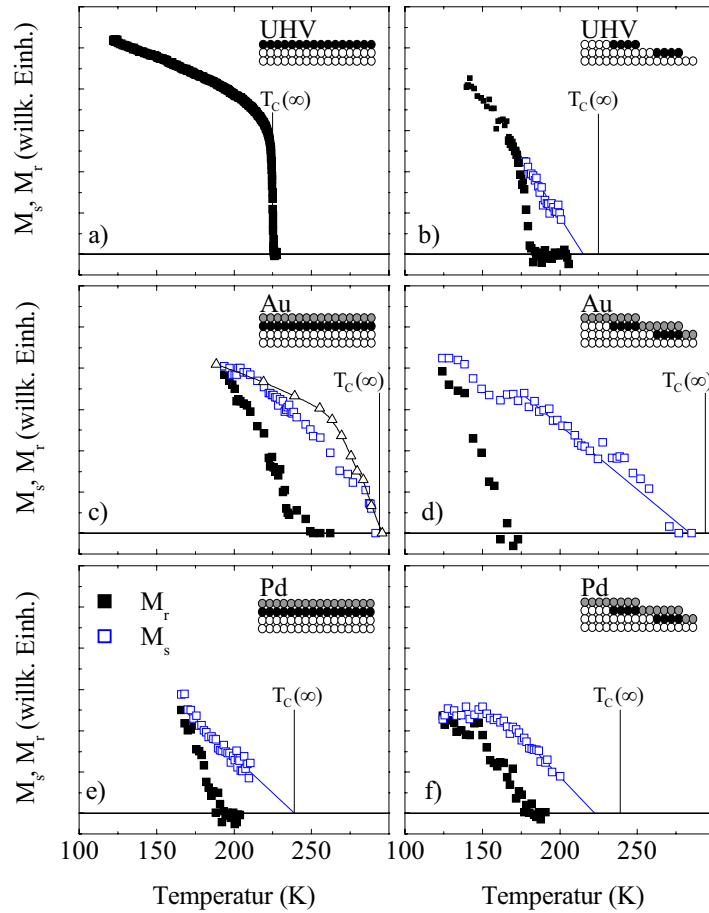


Abbildung 4.3:  $M_s$  (offene Symbole) und  $M_r$  (volle Symbole) in Abhängigkeit der Temperatur für Fe/W(110) ML-Streifen (linke Spalte) und die ausgedehnte ML (rechte Spalte). Die Proben sind entweder unbedeckt oder mit Au, bzw. Pd bedeckt. a) Daten für  $M_s$ ,  $M_r$  aus Kerr-Elliptizitätsmessung von J. Hauschild [Hau98a]. Die lineare Extrapolation von  $M_s$  gibt die kritische Temperatur  $T_s$  an, bei der die Sättigungsmagnetisierung verschwindet. b)  $M_r$  gemessen mit Hilfe von spinpolarisierten Elektronen [Elm94]. c)-f)  $M_s$ ,  $M_r$  bestimmt aus der Kerr-Drehung. Weitere Daten für das magnetische Hyperfeinfeld  $B_{HF}(T)$  sind durch Dreiecke gekennzeichnet und auf die Daten der Kerr-Drehung normalisiert. Die Temperatur  $T_C(\infty) = T_s(\theta \rightarrow 1)$  einer unendlich ausgedehnten Fe/W(110)-ML ist zu Vergleichszwecken aufgeführt.

tiparallel zur leichten Richtung eingestellt, so ist das gemessene Hyperfeinfeld das gleiche, wie bei einer homogen magnetisierten Probe. Nur die Mössbauer-Übergänge, bei denen die Magnetisierung innerhalb der Übergangszeit umklappt, erzeugen eine paramagnetische Komponente mit  $B_{HF}(T) = 0$  T. Tatsächlich wurde eine zusätzliche paramagnetische Komponente in den Mössbauer-Experimenten für  $T > 200$  K gefunden. Die

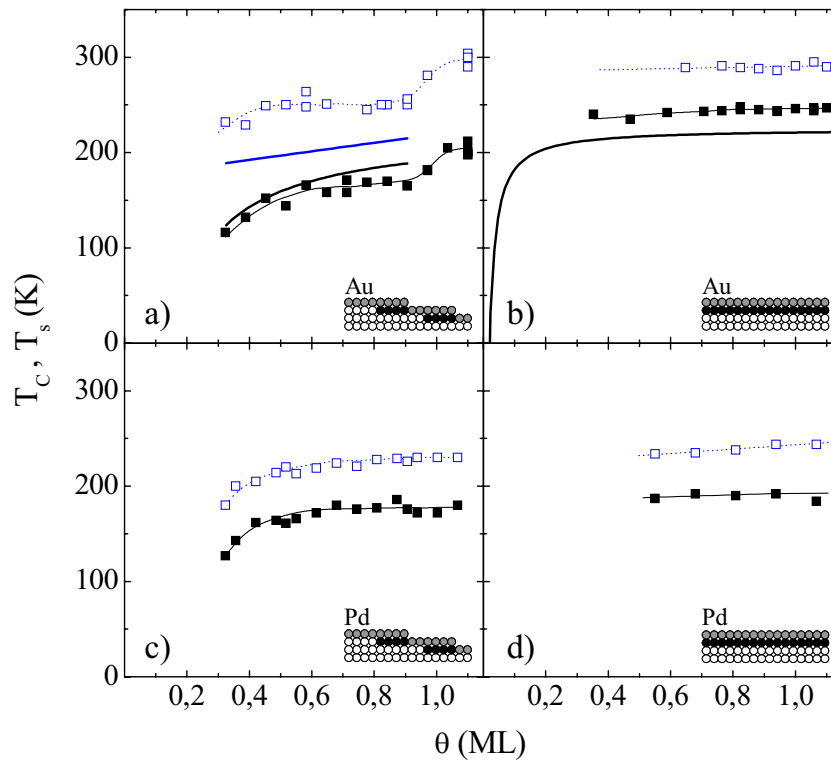


Abbildung 4.4: Die kritischen Temperaturen  $T_C$  (volle Symbole) und  $T_s$  (offene, blaue Symbole) als Funktion der Bedeckung  $\theta$ , präpariert auf dem glatten (b) und dem gestuften Substratteil (a) und c)) und mit 6 ML Au oder Pd abgedeckt. Die Linien durch die Messpunkte sollen den Verlauf der Daten unterstreichen, während die dicken Linien Daten der unbedeckten Proben zeigen. Die Daten der unbedeckten Fe-Nanostreifen stammen aus Referenz [Hau98b] [Hau98a], die der unbedeckten Monolagenfilme aus Referenz [Elm94].

Curie-Temperatur wurde in der Mössbauerarbeit allerdings aus dem Verschwinden der  $B_{HF}(T)$ -Komponente ermittelt und damit zu hoch bestimmt. Fluktuierende Spinblöcke mit vergleichsweise langen Zeiten zwischen den Umklappvorgängen können die widersprüchlichen Aussagen für die Curie-Temperatur der Fe/W(110) Monolage erklären.

Aus den beobachteten kleinen Sättigungsfeldstärken oberhalb von  $T_C$  im Vergleich zu paramagnetischen Systemen kann man darauf schließen, dass sich die Spinblöcke wie ein einziger großer Spin verhalten. Im Gegensatz zu einem superparamagnetischen System ist dieses eine Moment des Spinblocks temperaturabhängig aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Spinblocklänge. Ist das System bei kleinen Feldstärken gesättigt ( $< 0,2$  T), so sind alle Spinblöcke in die gleiche Richtung magnetisiert und das gemessene Sättigungssignal entspricht der mittleren Magnetisierung eines Spinblocks. Die Magnetisierung eines Spinblocks ist kleiner als die Grundzustandsmagnetisierung aufgrund von Fluktua-



tionen einzelner Spins innerhalb des Blocks (vorzugsweise an den Rändern), die nur mit wesentlich größeren Feldern ausgerichtet werden können. Die Magnetisierung eines Spinblocks verschwindet, falls die thermische Energie den Wert der Austauschenergie erreicht. Dies ist bei der Curie-Temperatur der unendlich ausgedehnten Monolage  $T_C(\infty)$  der Fall. Daher wurde  $M_s$  mit einem linearen Fit mit  $M_s(T_s) = 0$  angenähert. Durch die Extrapolation wird die kritische Temperatur  $T_s$  definiert, die für schmale Streifen kleiner ist als  $T_C(\infty)$  und für breite Streifen auf dem glatten Substratteil den Wert von  $T_C(\infty)$  erreicht.

In Abbildung 4.4 sind die Werte von  $T_C$  und  $T_s$  als Funktion der Fe-Bedeckung mit einer Au- und Pd-Abdeckung dargestellt. Generell kann man feststellen, dass  $T_C$  und  $T_s$  für Fe-Filme, die auf dem glatten Substratteil gewachsen sind, größer ist. Mit steigender Fe-Bedeckung  $\theta$  wächst auch  $T_C$  und  $T_s$  an. Der stufenähnliche Anstieg von  $T_C$  und  $T_s$ , den man nur bei dem Au-bedeckten System beobachten kann, ist ein Zeichen für das Auftreten der antiferromagnetischen indirekten Austauschkopplung, die in Kapitel 4.3 näher untersucht wird.  $T_s$  der Submonolage Fe, die auf dem glatten Substratteil präpariert wurde, erreicht fast die Curie-Temperatur der ausgedehnten Monolage, daher nehmen wir im folgenden  $T_s = T_C(\infty)$  an. Der Übergang von der Spinblockphase ( $T_C < T < T_s$ ) zur paramagnetischen Phase ist ein gradueller Übergang.  $T_s$  kennzeichnet keinen kritischen Phasenübergang. Könnte man unendlich große äußere Felder anlegen, so würde  $H_s$  auch oberhalb von  $T_s$  weiter ansteigen. Die Festlegung von  $T_s$  ist mit vergleichsweise kleinen, experimentell bedingten äußeren Feldern verbunden. Die Annahme  $T_s(\theta \rightarrow 1) = T_C(\infty)$  wird durch die UHV/Fe/W(110)-Monolage auf der glatten Oberfläche bestätigt, da der magnetische Phasenübergang einem 2D-Isingmodell sehr ähnlich ist [Elm96] und  $T_C$  nahezu gleich  $T_s$  ist. Ebenso bestätigt sich die Annahme für das Au-bedeckte System, da mit Hilfe von Mössbauerspektroskopie eine Curie-Temperatur bestimmt wurde, die dem hier gemessenen Wert von  $T_s(\theta \rightarrow 1)$  entspricht.

### 4.1.2 Domänenwandenergie und Anisotropie

Die leichte magnetische Achse des unbedeckten Fe-Nanostreifensystems liegt in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung, also senkrecht zu den Streifen [Hau98b]. Das gleiche gilt für die Au-bedeckten Streifen [Gra90]. Dadurch ergibt sich eine magnetische Dipol-Kopplung der Streifen untereinander. Diese Dipol-Kopplung sorgt für eine langreichweitige magnetische Ordnung in dem Streifensystem [Hau98b]. Die Bestimmung der Domänenwandenergie erfolgt durch eine temperaturabhängige Analyse der magnetischen Suszeptibilität beim Phasenübergang. Für einen einzelnen Streifen ohne eine Kopplung zu benachbarten Streifen wird die interne Spindynamik durch Austauschfelder mit Feldstärken in der Größenordnung von 10-100 T bestimmt. In diesem Fall können zusätzliche Kopplungsfelder, z. B. interne Dipolkopplungsfelder, die unter 0,1 T liegen, vernachlässigt werden. Wegen der starken uniaxialen Anisotropie in der Probenebene kann die Spindynamik eines einzelnen Streifens, bestehend aus  $W$  parallelen Spinreihen, mit dem eindimensionalen (1D)

Ising-Modell beschrieben werden:

$$\chi \propto \frac{1}{T} e^{2J/k_B T}, \quad (4.2)$$

wobei die Austauschkopplungskonstante  $J$  durch  $WJ$  ersetzt werden muss. Bei einer endlichen Streifenbreite wird sich keine spontane Ordnung der magnetischen Momente einstellen (1D-Ising-Modell). Bei  $T_C < T < T_C(\infty)$  zerfällt die Magnetisierung in fluktuierende Spinblöcke über die gesamte Streifenbreite mit einer Länge  $L$ , die mit steigender Temperatur kleiner wird [Sen97]. Dieses Spinblock-Verhalten ist analog zu den Momenten einer Ising-Kette. Die Magnetisierung nimmt exponentiell für jede endliche Temperatur ab. Das eindimensionale Verhalten zeigt sich im exponentiellen Abfall der Suszeptibilität mit der Temperatur  $T$  [Alb89]:

$$\chi_0 = C \frac{|\epsilon|^{2\beta}}{k_B T} e^{k_B T_A / k_B T}, \quad \epsilon = \frac{T - T_C(\infty)}{T} \quad (4.3)$$

$$\Leftrightarrow \ln \left( \frac{T\chi}{|\epsilon|^{2\beta}} \right) = C \frac{T_A}{T}, \quad (4.4)$$

wobei  $k_B T_A$  die Energie repräsentiert, die nötig ist, um einen Spinblock zu bilden. Für die Ising-Kette ist dies gerade  $2J$ .  $\beta = 1/8$  ist der kritische Exponent des 2D-Ising-Modells. Der Vorfaktor hängt schwach von der Temperatur ab, da einzelne fluktuierende Spins das mittlere magnetische Moment eines Spinblocks etwas verringern. Mit Hilfe eines Arrheniusplots lässt sich  $k_B T_A$  aus einem Geradenfit an die Messpunkte bestimmen. Die spezifische Domänenwandenergie  $\epsilon_W$  ist dann durch die Spinblockaktivierungsenergie  $k_B T_A$  gegeben:

$$k_B T_A = \epsilon_W W. \quad (4.5)$$

Die magnetische Anisotropiekonstante  $K$  und die Austauschsteifigkeit  $A$ , die ein Maß für die Kopplung der Spins untereinander darstellt, kann nach dem Kontinuumsmodell aus der Domänenwandenergie  $\sigma_W$  und der Domänenwandbreite  $w$  durch Minimierung des folgenden Energiefunktional bestimmt werden [Hub98]:

$$\int A \left( \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^2 + K \sin^2 \phi(x) dx.$$

Damit ergibt sich für die Domänenwandenergie bzw. die Domänenwandbreite für den einfachsten Fall einer Bloch-Wand:

$$\begin{aligned}\sigma_W &= 4\sqrt{AK} \quad , \quad w = 2\sqrt{\frac{A}{K}} \\ \rightarrow K &= \frac{\sigma_W}{2w} \quad , \quad A = \frac{w\sigma_W}{8}.\end{aligned}\quad (4.6)$$

Die spezifische Domänenwandenergie  $\epsilon_W$  lässt sich aus der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität (Steigung der Arrheniusplots) mit Hilfe von Gleichung 4.3 bestimmen:

$$\begin{aligned}k_B T_A &= \epsilon_W W, \quad \sigma_W = \frac{\epsilon_W W}{S_{DW}}, \quad S_{DW} = W \left[ \frac{a_W}{\sqrt{2}} \right]^2 \\ \rightarrow \sigma_W &= \frac{2\epsilon_W}{a_W^2},\end{aligned}\quad (4.7)$$

wobei  $S_{DW}$  die Domänenwandfläche in der pseudomorph gewachsenen Fe-ML beschreibt ( $a_W = 0,3165$  nm). Im Fall einer Néel-Wand muss  $K$  durch  $K + J_s^2/2\mu_0$  ersetzt werden, was einer Korrektur von 0,36 meV/Atom entspricht. Um einen besseren Vergleich mit der Theorie durchzuführen, kann man  $A$  und  $K$  durch die üblicheren Größen des Austauschintegrals  $J$  und der Anisotropie pro Atom  $e_K$  ausdrücken. Beginnen wir zunächst mit den lokalisierten Momenten auf den Gitterplätzen der Fe-Atome. Die Hamiltonfunktion für das anisotrope Heisenberg-Modell lautet:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - e_K \sum_i \cos^2 \varphi_i, \quad (4.8)$$

mit dem Spinoperator  $s_i$  und dem Winkel  $\varphi_i$  zwischen  $s_i$  und der leichten Richtung  $\varphi_i$ . Im folgenden wird  $|s_i| = 1$  gesetzt, d. h. in dem Wert von  $J$  ist die Spinquantenzahl  $S^2$  enthalten. Ebenso wird nur die nächste Nachbar-Wechselwirkung betrachtet (Summation über  $\langle i,j \rangle$ ). Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass  $s_i s_j$  ein Skalarprodukt klassischer Vektoren sei. Mit der Wolfram-Gitterkonstanten  $a_W = 0,3165$  nm erhält man dann [Chi97]:

$$e_K = \frac{K a_W^3}{2} \quad , \quad J = \frac{2A a_W}{c}. \quad (4.9)$$

Die strukturabhängige Konstante  $c$  ist für ein einfach kubisches Gitter  $c = 1$ , das aufgrund der ähnlichen Gitterstruktur der bcc(110)-Oberfläche auch für die Fe(110)-Monolage angenommen wird.

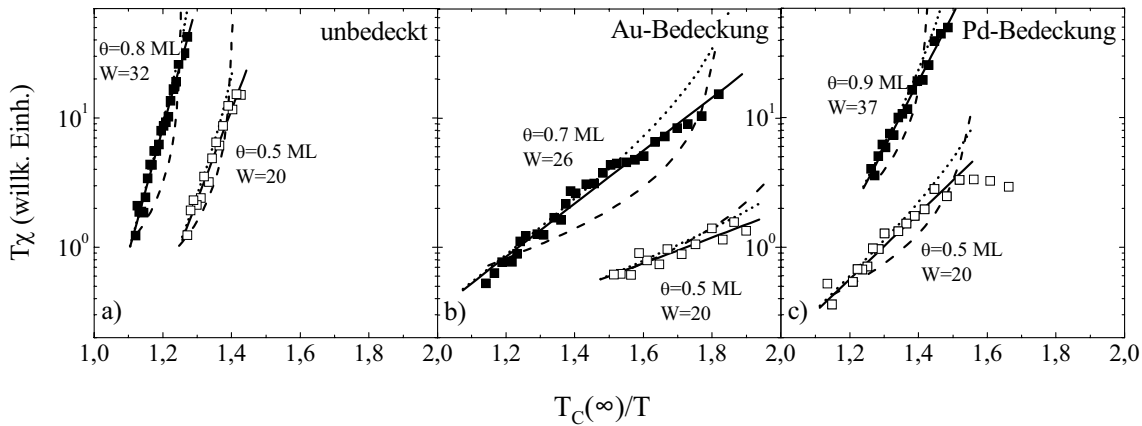


Abbildung 4.5: Arrheniusplots für die Temperaturabhängigkeit der normalisierten magnetischen Suszeptibilität  $T\chi$  als Funktion der reziproken Temperatur  $T_C(\infty)/T$  für das X/Fe/W(110)-Nanostreifensystem. a) X=UHV, b) X=Au, c) X=Pd. Das lineare Verhalten (schwarze Linie) spiegelt den exponentiellen Abfall von  $\chi$  mit der Temperatur wider (1D-Isingsystem). Aus der Geradensteigung kann die Spinblock-Aktivierungstemperatur  $T_A$  abgelesen werden, die für das unbedeckte Streifensystem deutlich größer ist. Zum Vergleich wurde versucht, das Curie-Weiss Gesetz (gestrichelte Linie), sowie einen Kurvenverlauf für ein dipolar gekoppeltes Streifensystem (Gleichung 4.17 aus dem Molekularfeldansatz; gepunktete Linie) mit dem entsprechenden  $T_C$  an die Datenpunkte anzupassen.

Die Daten der Suszeptibilität für verschiedene Abdeckungen (UHV, Au, Pd) sind in den Arrheniusplots 4.5 dargestellt. In allen drei Fällen beobachtet man ein lineares Verhalten. Die Kurven weichen signifikant vom Curie-Weiss-Gesetz ab. Offensichtlich können die Daten auch nicht durch ein Potenzgesetz beschrieben werden, im Gegensatz zu 2D- bzw. 3D-Systemen. Das lineare Verhalten kann mit dem 1D-Verhalten der Nanostreifen in Übereinstimmung mit Gleichung 4.3 beschrieben werden, wobei oberhalb von  $T_C$  die dipolare Kopplung der Streifen vernachlässigt werden kann. Nahe  $T_C$  würde eine Kopplung die Werte für  $\chi$  leicht erhöhen. Auf der anderen Seite verursacht aber die endliche Länge der Streifen ein Absinken von  $\chi$ , so dass man ein lineares Verhalten bis zur Curie-Temperatur beobachten kann. Im Fall der Pd-Bedeckung ist der auswertbare Temperaturbereich ( $T_s - T_C \approx 50$  K) relativ klein im Vergleich zur Au-Bedeckung ( $T_s - T_C \approx 90$  K). Daher fallen die Fehler entsprechend größer aus. Abbildung 4.6 zeigt die bestimmten Werte für  $k_B T_A$  für Bedeckungen zwischen 0-1,1 ML (entsprechend einer Streifenbreite von 0 bis 45 Atomreihen). Unterhalb einer Streifenbreite von 35 Atomreihen beobachtet man einen linearen Anstieg von  $k_B T_A$  mit der Streifenbreite. Die Daten werden mit der folgenden linearen Beziehung angepasst:

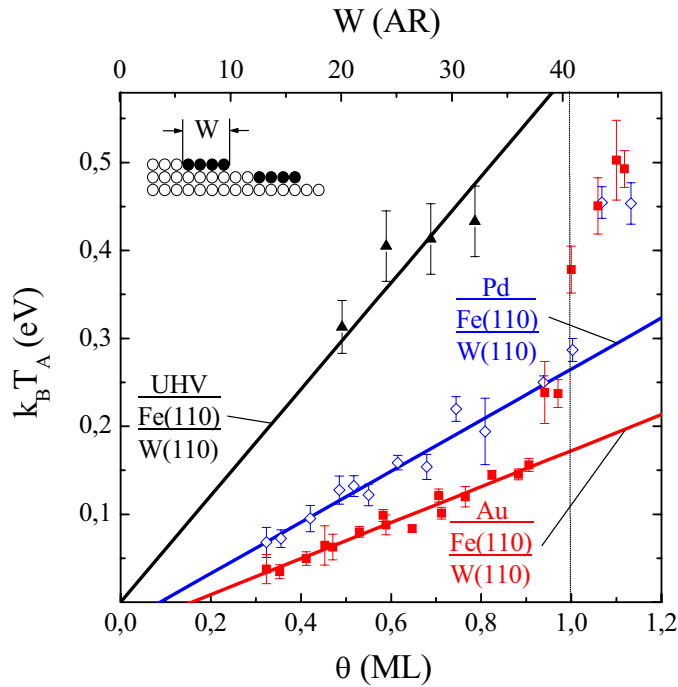


Abbildung 4.6: Aus den Arrheniusplots bestimmte Grenzflächenenergie  $k_B T_A$  in Abhängigkeit von der Streifenbreite  $W = 41$ . Die Daten für die bedeckten Proben stammen aus Fe-Keilpräparationen, während die Daten der unbedeckten Nanostreifen aus homogenen Einzelpräparationen stammen.

$$k_B T_A = \epsilon_W W - e_b. \quad (4.10)$$

Bei Streifenbreiten  $W > 35$  stellt man eine Abweichung von dem linearen Verhalten fest. Bei nahezu vollständiger Bedeckung der Terrassen können manche Streifenstellen bereits überlappen und es findet ein Übergang von einem quasi 1D-System zu der 2D-Monolage statt. In diesem Fall weicht die Suszeptibilität von dem Arrheniusgesetz ab und man kann die Werte von  $T_A$  nicht mehr mit der Domänenwandenergie in Verbindung bringen. Im Falle der Au- bzw. Pd-Bedeckung beobachtet man zusätzlich eine Verschiebung der Geraden um  $e_b \approx 30$  meV, was man als eine Art Randkorrektur für die Streifenkanten interpretieren kann.

Da  $T_A$  in dem Temperaturintervall  $T_C < T < T_s$  bestimmt wurde, also oberhalb des magnetischen Phasenübergangs, können die Ergebnisse mit Monte Carlo (MC) Simulationen des Ising-Modells für die Monolagenstreifen verglichen werden. In den Simulationen folgt die Relaxationszeit der Magnetisierung  $\tau$  folgender Temperaturabhängigkeit [Sen97]:

X/Fe/W(110)	X=UHV	X=Au	X=Pd
$T_C(\infty)$ (K)	$255 \pm 10$	$294 \pm 5$	$244 \pm 10$
$\epsilon_W$ (meV)	$15,2 \pm 1,5$	$5,0 \pm 0,3$	$7,2 \pm 0,6$
$e_b$ (meV)		$32 \pm 7$	$27 \pm 14$
$J$ (meV)	$8,6 \pm 0,3$	$11,2 \pm 0,2$	$9,3 \pm 0,4$
$e_K$ (meV)	$6,7 \pm 1,6$	$0,6 \pm 0,1$	$1,4 \pm 0,3$

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der experimentell ermittelten Werte für die Curie-Temperatur der unendlich ausgedehnten Monolage, der spezifischen Domänenwandenergie  $\epsilon_W$  pro Atomreihe und der Randkorrektur  $e_B$  aus dem Achsenabschnitt des linearen Verhaltens von  $T_A$  mit  $W$  bestimmt. Die Werte für das Austauschintegrals  $J$  wurden mit Hilfe der 2D-Isingrelation  $k_B T_C(\infty) = 2,26J$  berechnet. Die Anisotropieenergie  $e_K$  resultiert aus dem mikromagnetischen Modell für eine Blochwand  $\epsilon_W = 2\sqrt{J e_K}$ .

$$\tau \propto \exp \left\{ \frac{T_A(W)}{T} \right\}. \quad (4.11)$$

Ein linearer Anstieg von  $T_A(W)/T_C(\infty) = pW - q$  konnte mit den Konstanten  $p = 3,13$  und  $q = 3,31$  beobachtet werden.  $q$  stellt eine Randkorrektur dar [Hau98b]. Eine analoge Randkorrektur kann man für die Korrelationslänge und die magnetische Suszeptibilität annehmen, allerdings mit anderen Konstanten  $p$  und  $q$ . Für ein Isingsystem wurde  $p = 0,884$  in Übereinstimmung mit  $k_B T_A(W) = 2JW$  bestimmt [Sen97] [Alb89], wobei  $J = 0,884 k_B T_C(\infty)/2$  das Austauschintegral darstellt. Eine Randkorrektur  $q$  wurde mit Hilfe der MC-Simulation nicht angegeben. Unsere experimentellen Ergebnisse führen zu einer Randkorrektur von  $q = e_b/k_B T_C(\infty) \approx 1$ , die unabhängig von der spezifischen Domänenwandkonstanten  $p$  ist und von den Ising-Werten aufgrund der endlichen Anisotropie abweichen kann. Die ermittelten Daten für die Anisotropieenergie bzw. das Austauschintegral sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Die Werte für das Austauschintegrals  $J$  wurden mit Hilfe der 2D-Isingrelation  $k_B T_C(\infty) = 2,26J$  [Ons44] berechnet.

## 4.2 Direkte Bestimmung der Anisotropie- und Kopplungskonstanten für unbedeckte Fe-Nanostreifen

Um die magnetische Anisotropie direkt aus dem Experiment zu bestimmen, ist es notwendig nicht nur die Domänenwandenergie  $\sigma_W$ , sondern auch die Domänenwandbreite  $w$  zu kennen, so dass man die aus Monte-Carlo-Simulationen bestimmte Relation

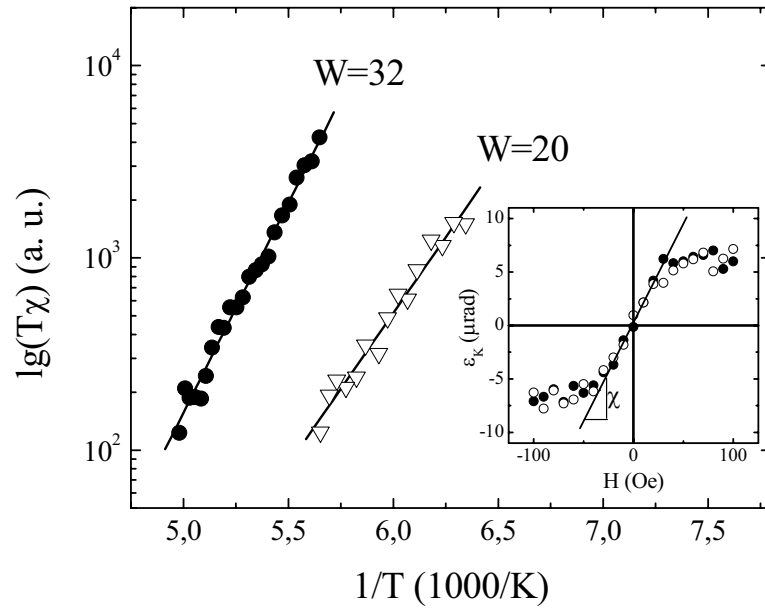


Abbildung 4.7: Temperaturabhängigkeit der normalisierten Suszeptibilität  $T\chi$  für zwei verschiedene Streifenbreiten ( $W = 20$ ,  $W = 32$  Atomreihen). Auch für das unbedeckte Fe-Nanostreifensystem zeigt sich ein Verhalten nach dem 1D-Isingmodell. Zusätzlich ist eine Beispielmagnetisierungskurve für  $T = 195,3$  K und  $W = 32$  dargestellt.

$k_B T_C(\infty) = 2,26J$  nicht verwenden muss. Mit Hilfe der Formeln 4.6 und 4.9 kann die Austauschsteifigkeit  $A$  bzw. das Austauschintegral  $J$ , sowie die Anisotropiekonstante  $K$  und die Anisotropieenergie  $e_K$  bestimmt werden. Für die Messung eignet sich eine Kombination von spinpolarisierter Rastertunnelspektroskopie (SP-STM) und der Analyse des Temperaturverhaltens der Suszeptibilität mit Hilfe der Kerr-Magnetometrie (wie in Kapitel 4.1.2 beschrieben). Aufgrund der Oberflächenempfindlichkeit des STMs ist dieses Verfahren bisher nur für unbedeckte Nanostreifensysteme anwendbar. Abbildung 4.7 zeigt zwei Arrheniusplots für  $T\chi$  und zwei verschiedene Streifenbreiten  $W$ . Die experimentell bestimmten Werte für die spezifische Domänenwandenergie sind nochmals in Tabelle 4.2 aufgeführt und in Abbildung 4.6 im vorigen Kapitel graphisch dargestellt. Die Curie-Temperatur der unbedeckten, ausgedehnten ML-Fe auf W(110) beträgt  $T_C(\infty) = 225$  K [Elm94]. Auch für die unbedeckten Fe-Nanostreifen ist die spezifische Domänenwandenergie  $\epsilon_W$  für verschiedene Streifenbreiten konstant.

Magnetische Domänen in Nanostrukturen lassen sich mit einem SP-STM mit atomarer Auflösung sichtbar machen [Pie00a] [Hei00]. Die Messungen fanden im Rahmen einer Kooperation mit der Arbeitsgruppe von M. Bode und R. Wiesendanger der Universität Hamburg statt. Die SP-STM-Aufnahmen erfolgten im UHV bei einer Temperatur von  $T = (14 \pm 1)$  K. Weitere Details des experimentellen Aufbaus kann man in Referenz

$W$	$T_C$ (K)	$\epsilon_W W$ (meV)	$\epsilon_W$ (meV)
20	159,6	313	15,7
24	169,1	405	16,9
28	175,1	413	14,8
32	179,2	433	13,5

Tabelle 4.2: Werte der spezifischen Domänenwandenergie  $\epsilon_W$  für verschiedene Streifenbreiten  $W$  aus der Steigung der Arrheniusplots bestimmt. Es fällt auf, dass  $\epsilon_W$  für verschiedene Streifenbreiten nahezu konstant ist. Der Mittelwert beträgt  $\bar{\epsilon}_W=15,2$  meV.

[Pie00b] finden. Das untersuchte Nanostreifensystem ( $\theta = 1,25$ ) besteht abwechselnd aus Monolagen- (ML) und Doppellagen- (DL) Streifen. Da die Magnetisierung der Fe-ML-Streifen in der Probenebene liegt, ist es notwendig, eine auf diese Magnetisierungsrichtung sensitive STM-Spitze zu verwenden. Dafür eignet sich eine mit 5-10 ML Fe bedampfte W-Spitze [Bod01a] [Bod01b]. Hierbei ist die magnetische Ausrichtung der Spitzenspins parallel zur Probenoberfläche und man ist somit sensitiv auf die Spinkomponente in der Probenebene. In der DL kann man keinen Domänenkontrast erwarten, da hier die magnetische Vorzugsrichtung senkrecht auf der Probenoberfläche steht. Nur in der Domänenwand zeigt die Magnetisierung lokal parallel zur Probenoberfläche und kann daher mit der Fe-bedeckten Wolframspitze sichtbar gemacht werden. Abbildung 4.8 zeigt die Topographie a), sowie das magnetisch aufgelöste  $dI/dU$ -Bild eines 1,25 ML Fe-Nanostreifensystems b), das bei  $T_P = 500$  K präpariert wurde. Die Probe besteht aus abwechselnden ML- und DL-Streifen. Die senkrecht zur Oberfläche magnetisierten DL-Streifen stabilisieren die Domänenstruktur in der Monolage. Für Bedeckungen unter 1 ML konnten aufgrund der homogenen Magnetisierung keine Domänenwände beobachtet werden. Da die Domänenwände lokal sehr begrenzt sind, ist es wahrscheinlich, dass die DL-Streifen die Domänenwandbreite der ML-Streifen nicht stark beeinflussen. In Abbildung 4.8 b) kann man etliche Domänenwände zwischen den hellen und dunklen Domänen der ML-Streifen beobachten. Aufgrund der unterschiedlichen elektronischen Struktur erscheint die DL-Fe bei  $U = 130$  mV dunkel [Pie00a]. Die hellen Bereiche werden durch Domänenwände in der DL hervorgerufen, da hier die Magnetisierung in der magnetisch sensitiven Richtung der Fe/W-Spitze steht. Es ist offensichtlich, dass die Domänenwände der ML wesentlich schmaler sind als die der DL. Um eine genaue quantitative Aussage über die Domänenwandbreite  $w$  treffen zu können, wurde das gemessene Domänenwandprofil mit einer tanh-Funktion für ein  $180^\circ$ -Wandprofil angefitet [Hub98]. Für einen willkürlichen Winkel  $\phi$  zwischen der Magnetisierung von Spitze und Probe gilt:



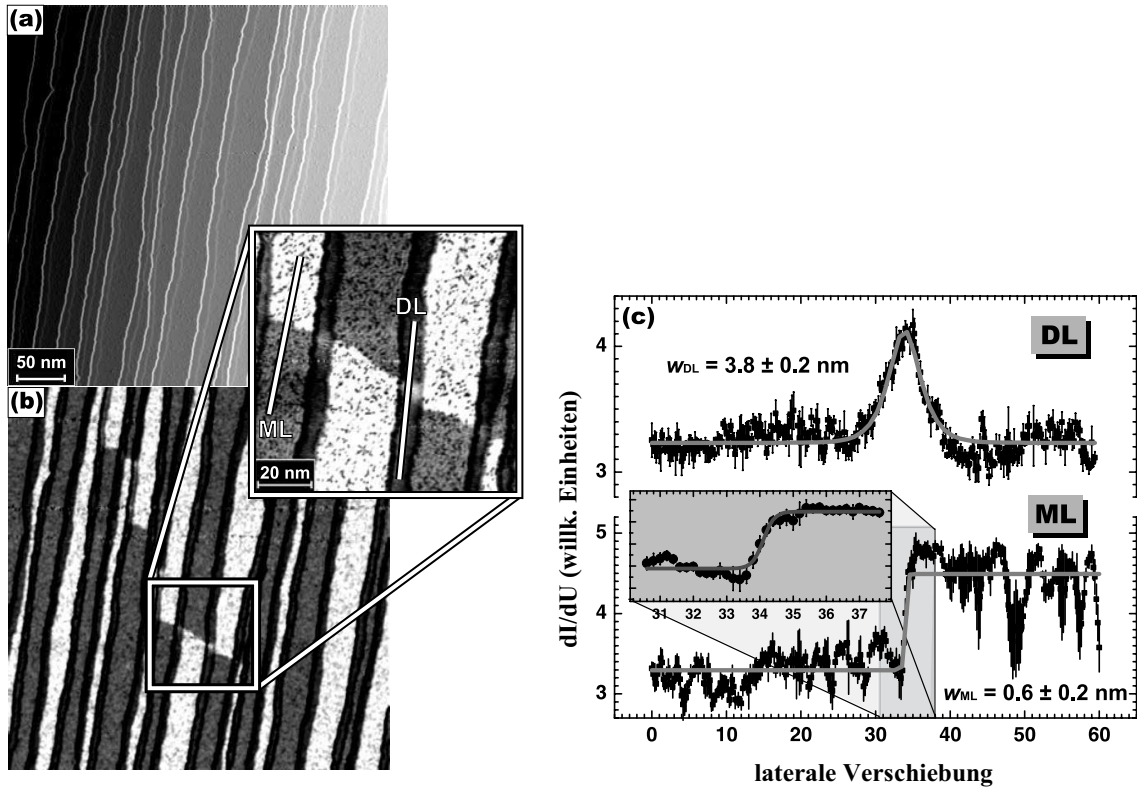


Abbildung 4.8: Topographie a) und spinaufgelöstes  $dI/dU$ -Bild b) von 1,25 ML Fe/W(110) ( $U = 130$  mV,  $I = 0,8$  nA). Das Nanostreifensystem besteht abwechselnd aus ML- und DL-Streifen. In der vergrößerten Darstellung kann man magnetische Domänenwände in der ML- und der DL-Fe erkennen. c) Linienprofile durch die Domänenwände der ML und DL. Die Domänenwandbreite beträgt für die ML nur wenige Atome  $w_{ML} = (0,6 \pm 0,2)$  nm. Die Messungen wurden von M. Bode an der Universität Hamburg durchgeführt.

$$\frac{dI}{dU} = \left[ \frac{dI}{dU} \right]_0 + \left[ \frac{dI}{dU} \right]_{sp} \cos \left( \arccos \left[ \tanh \left( \frac{x - x_0}{w/2} \right) \right] + \phi \right), \quad (4.12)$$

wobei  $\left[ \frac{dI}{dU} \right]_0$  und  $\left[ \frac{dI}{dU} \right]_{sp}$  das spingemittelte bzw. das spinpolarisierte  $dI/dU$ -Signal darstellt.  $x_0$  kennzeichnet die Domänenwandposition. Für die magnetische STM-Spitze nimmt man einen Winkel von  $\phi_{DL} = \pi/2$  und  $\phi_{ML} = 0$  an. Aus dem Fit an die Linienprofile (Abbildung 4.8 c)) ergibt sich eine Domänenwandbreite in den Doppellagenstreifen von  $w_{DL} = (3,8 \pm 0,2)$  nm. Die Monolage dagegen zeigt eine wesentlich kleiner Wandbreite von  $w_{ML} = (0,6 \pm 0,2)$  nm. Erweitert man den Fit auf alle Datenpunkte des Linienprofils und betrachtet man nicht nur den Übergangsbereich (im Diagramm 4.8 c))

vergrößert dargestellt), erhält man sogar nur  $w_{ML} = (0,5 \pm 0,26)$  nm, d. h. die Domänenwände in den Fe-ML-Streifen sind atomar scharf. Natürlich sollte man sich darüber im Klaren sein, dass auf dieser Längenskala auch die laterale Auflösung des Mikroskops eine Rolle spielt. Diese ist gegeben durch  $\sqrt{0,2 \text{ nm}(R + d)}$ , wobei R den Spitzenradius und d den Abstand Spitze-Probe darstellt [Ter85]. Auch für die Annahme einer atomar scharfen Spitze und einem Abstand  $d=1$  nm ist die laterale Auflösung nur etwa 0,5 nm, d. h. die bestimmte Domänenwandbreite von  $w_{ML} = (0,66 \pm 0,2)$  nm stellt nur eine obere Grenze dar. Zum anderen widerspricht die Tatsache, dass sich die Magnetisierung über eine Länge von nur wenigen Gitterkonstanten um  $180^\circ$  dreht einer grundlegenden Annahme des mikromagnetischen Modells, nämlich dem eines kleinen Winkelunterschieds zwischen benachbarten Heisenberg-Spins. Es bleibt also zu prüfen, in wie weit die itinerante Struktur der Fe  $3d$ -Elektronen eine Behandlung nach dem Kontinuumsmodell des Mikromagnetismus erlaubt. Daher wäre es sicherlich interessant Domänenwandprofile magnetischen Materialien mit lokalisierten Momenten, wie z. B. Seltenerdmetalle zu untersuchen. Neuere Rechnung, basierend auf Spindichtenäherungen (LSDA), kommen auf eine Domänenwandbreite der ML Fe/W(110) von 0,8 nm [Fre04] und damit auf eine qualitative Übereinstimmung mit unseren Messungen. Aus den Rechnungen geht hervor, dass sich die Energieniveaus der Zustandsdichte im Bereich der Domänenwand zu niedrigeren Energien (ca. 10 meV) verschieben, während diese Verschiebung auf beiden Seiten der Domänenwand nicht beobachtet werden kann. Durch das Ausbilden einer Domänenwand erhöht sich somit die Gesamtenergie des Systems, wodurch eine schmalere Wand energetisch bevorzugt wird.

Mit der Kenntnis der Domänenwandbreite  $w_{ML}$  aus den SP-STM Aufnahmen und der Domänenwandenergie  $\sigma_W$  aus der Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität lassen sich nun folgende Werte für die Anisotropiekonstante  $K$  und die Austauschsteifigkeit  $A$  mit Hilfe der Gleichung 4.6 aus dem mikromagnetischen Modell bestimmen:

$$K = \frac{\sigma_W w}{8} = 40,6_{-14,8}^{+26,0} \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3}, \quad (4.13)$$

$$A = \frac{\sigma_W}{2w} = 3,6_{-1,4}^{+2,2} \cdot 10^{-12} \frac{\text{J}}{\text{m}}. \quad (4.14)$$

Mit Hilfe der Gleichung 4.9 kann man die Werte der Anisotropieenergie  $e_K$  und des Austauschintegrals  $J$  ermitteln:

$$e_K = 4 \frac{\text{meV}}{\text{Atom}}, \quad J = 14 \text{ meV}.$$

Es fällt auf, dass der Wert der Anisotropieenergie extrem groß ist. Daher konnte  $e_K$  bzw.  $K$  bisher nicht mit konventioneller Magnetometrie bestimmt werden. Man kann aber durch eine Extrapolation von dickeren Fe-Filmen auf einen Wert von  $e_K = 0,6$  meV [Elm98] für die Nanostreifen schließen, der aber offensichtlich zu klein ist. Die Austauschsteifigkeit  $A$  ist im Vergleich zu Volumenproben etwa eine Größenordnung kleiner für das Fe-Nanostreifensystem. Für Volumen-Fe hat man  $0,8 \cdot 10^{-11}$  J/m  $< A_{Vol} < 2 \cdot 10^{-11}$  J/m anhand der Domänenwandbreite bzw. durch Spinwellenanregung bei tiefen Temperaturen gefunden [Hub98]. Eine Auswertung der experimentellen Daten mit Hilfe des Modells lokalisierter Momente kommt zu einem Wert für die Anisotropieenergie von  $e_K = 3,6$  meV [Lip03]. Aus *ab initio*-Rechnungen folgt ein Wert von  $e_K = 2,3$  meV für eine Magnetisierungsdrehung von der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung in die  $[001]$ -Richtung [Nie03].

Die nichtlineare Winkelabhängigkeit der in einem Spinpaar gespeicherten Energie ist der Hauptgrund für das Auftreten von ausgedehnten, magnetischen Domänenwänden, in denen sich der Spin von der einen zur anderen Richtung dreht. In der Regel sind solche Domänenwände über viele Gitterkonstanten ausgedehnt. Das Nanostreifensystem ist daher ein guter Test für die Gültigkeit des mikromagnetischen Modells für Systeme mit lateralen Dimensionen von wenigen Atomen. Das Austauschintegral  $J$  kann für  $T_C(\infty) = 225$  K (unendlich ausgedehnte, unbedeckte Fe-ML/W(110)) abgeschätzt werden, da der magnetische Phasenübergang gut mit Hilfe des 2D-Isingmodells beschrieben werden kann [Elm96]. Hierbei ist die Curie-Temperatur über die Beziehung  $k_B T_C = 2,26J$  [Ons44] mit dem Austauschintegral verbunden und man erhält einen Wert von  $J = 8,6$  meV in einigermaßen guter Übereinstimmung mit dem Messwert von  $J = 14$  meV. Das bedeutet, dass trotz atomar scharfer Domänenwände, das mikromagnetische Modell auch für Nanosysteme Gültigkeit hat.

Zusammenfassend ist herauszustellen, dass die Fe-Nanostreifen auf W(110) eine extrem große Anisotropie aufweisen, und damit verbunden atomar scharfe Domänenwände zeigen. Systeme mit großer Anisotropie sind für die Anwendung hochinteressant, da man mit ihnen eine Verkleinerung der magnetischen Bits, z. B. bei Festspeicherplatten erreichen kann. Hierbei muss die Anisotropieenergie mit der thermischen Energie verglichen werden. Ist die thermische Energie größer als die Anisotropieenergie können magnetische Domänen (Bits) fluktuieren, was einen Datenverlust zur Folge hätte. Man betrachtet die Zeit  $t$ , in der ein magnetisches Partikel mit dem Volumen  $V$  und der magnetischen Anisotropiekonstante  $K$  von der einen in die andere Magnetisierungsrichtung im Mittel umklappt. Hierfür kann man folgende Beziehung angeben [Whi00]:

$$t = t_0 \exp \left\{ \frac{KV}{k_B T} \right\}, \quad t_0 \approx 10^{-9} \text{ s.} \quad (4.15)$$

Setzt man eine Zeit von 10 Jahren an, so erhält man mit der zuvor bestimmten Anisotropiekonstante (Gleichung 4.13) für das System Fe/W(110) bei  $T = 77$  K eine mi-

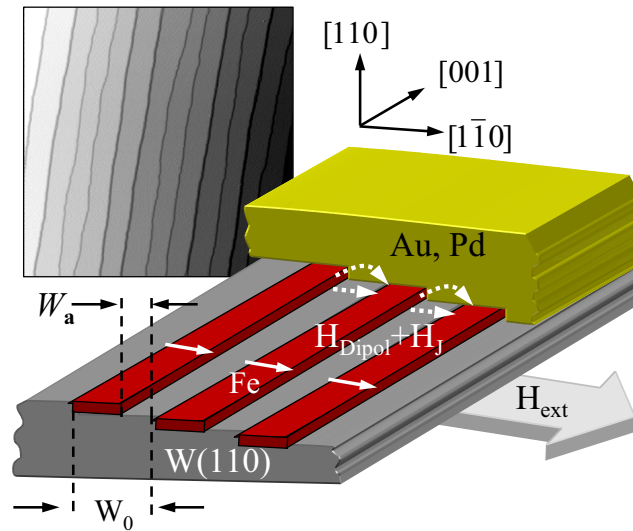


Abbildung 4.9: Modell des Fe-Nanostreifensystems auf einem vizinalen W(110)-Kristall mit 6 ML Gold bzw. Pd abgedeckt. Die leichte magnetische Achse verläuft in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Die Nanostreifen sind ferromagnetisch über das Dipolfeld  $H_{Dipol}$  gekoppelt. Ein weiteres Kopplungsfeld  $H_J$  kann durch eine laterale indirekte Austauschkopplung zustande kommen. Das STM-Bild  $(200 \times 200) \text{ nm}^2$  zeigt die Fe-Nanostreifen nach einer thermischen Behandlung bei  $T_T = 780 \text{ K}$ .

nimale Bitgröße von ca.  $(2,3 \times 2,3) \text{ nm}^2$ . Heutige Festplatten haben eine Bitgröße von ca.  $(200 \times 100) \text{ nm}^2$ , d.h. die Speicherdichte könnte mit einer unbedeckten Fe/W(110)-Monolage bei 77 K um einen Faktor 3000-4000 erhöht werden!

### 4.3 Laterale indirekte Austauschkopplung

Auf dem Gebiet der indirekten Austauschkopplung von magnetischen Multilagensystemen wurde seit den ersten Experimenten [Grü86] [Bai88] [Par90] eine Menge Forschungsaufwand betrieben. Die Trennung zweier ferromagnetischer Lagen durch eine nicht ferromagnetische Lage findet aufgrund der Widerstandsabhängigkeit von der relativen Magnetisierungsrichtung beider Lagen (GMR-Effekt) eine Breite Anwendung in der Festspeichertechnik (z. B. Festplattenleseköpfe). Für eine Vielzahl von metallischen Zwischenschichten findet man eine oszillatorische Kopplung mit der Zwischenschichtdicke. Der Ursprung der indirekten Austauschkopplung ist stark mit dem Auftreten von Zuständen nahe der Fermi-Energie in der Zwischenschicht verbunden, deren Energie von der Zwischenschichtdicke abhängig ist [Sti93] [Bru95]. Der Kopplungsmechanismus steht im direkten Zusammenhang zur Fermifläche der Zwischenschicht. In zweidimensionalen Nanostrukturen sollte man einen ähnlichen Kopplungsmechanismus beobachten können.

Eine mögliche Probengeometrie kann durch atomar hohe, parallele, magnetische Nanostreifen gegeben sein, die voneinander durch ein nichtmagnetisches Material getrennt sind (siehe Abbildung 4.9). Dieses System stellt das zweidimensionale Analogon zu einem dreidimensionalen Multilagensystem mit alternierenden ferromagnetischen und nicht ferromagnetischen Lagen dar. Die Eigenschaften der nicht magnetischen Zwischenstreifen (Wolfram) des Nanostreifensystems können durch eine zusätzliche Abdeckung mit einem weiteren nicht ferromagnetischen Material beeinflusst werden. Es sollte daher möglich sein, eine indirekte Austauschkopplung zwischen den Streifen in Abhängigkeit des Streifenabstands beobachten zu können. Dazu muss zunächst das Kopplungsfeld der Nanostreifen bestimmt werden.

### 4.3.1 Bestimmung der Kopplungsfeldstärke

Da die Kopplung aufgrund der Streufeldwechselwirkung ferromagnetisch ist, ist es unmöglich, die Kopplungsstärke, wie üblich, direkt aus den Hysteresekurven der leichten Magnetisierungsrichtung zu bestimmen. Statt dessen nutzen wir die Tatsache aus, dass die laterale Kopplung zwischen den Streifen durch eine langreichweitige Wechselwirkung gegeben ist. Da die leichte magnetische Richtung senkrecht zur Streifenrichtung verläuft, ist der größte Beitrag zur Kopplung durch die Dipol-Wechselwirkung gegeben. Zusätzlich kann ein schwächerer Beitrag von einer weiteren Kopplungsart, wie der lateralen indirekten Austauschkopplung stammen, dem Analogon zu der Zwischenschichtaustauschkopplung in 3D-Multilagensystemen. Die langreichweitige Kopplung der Streifen ( $\propto 1/r^2$ , anstatt ein exponentieller Abfall mit dem Abstand) rechtfertigt einen Ansatz für die Magnetisierung  $M$  nach dem Molekularfeld-Modell, wobei die magnetische Wechselwirkung mit Hilfe eines Austauschfeldes  $H_\lambda$  beschrieben wird:

$$M = \chi_0(H + H_\lambda) \quad , \quad H_\lambda = \lambda M. \quad (4.16)$$

Damit erhält man eine reziproke Suszeptibilität von:

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\chi} = \frac{H}{M} + \lambda = \frac{1}{\chi_0} + \lambda. \quad (4.17)$$

$\chi_0$  ist die Suszeptibilität der Streifen ohne Kopplung und kann durch das eindimensionale Isingmodell beschrieben werden (Gleichung 4.3):

$$\frac{1}{\chi} = \frac{1}{\chi_0} - \lambda = \frac{T}{C} e^{-T_A/T} - \lambda. \quad (4.18)$$

Die Normierungskonstante  $C$  kann für das gekoppelte Streifensystem bei  $T = T_C$  bestimmt werden. Mit  $\chi_0(T_C) = 1/\lambda$  erhält man somit:

$$C = T_C \chi_0(T_C) e^{-T_A/T_C} = T_C \frac{1}{\lambda} e^{-T_A/T_C}. \quad (4.19)$$

Setzt man  $C$  in Gleichung 4.18 ein, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\chi} &= \lambda \frac{T}{T_C} \frac{e^{-T_A/T}}{e^{-T_A/T_C}} - \lambda \\ &= \lambda \left[ \frac{T}{T_C} e^{T_A/T_C - T_A/T} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die Sättigungsfeldstärke  $H_s$  kann mit Hilfe der Sättigungsmagnetisierung  $M_s$  und der Suszeptibilität berechnet werden. Hierbei ist zu beachten, dass  $M_s$  nur unterhalb von  $T_C$  konstant ist. Für Temperaturen oberhalb von  $T_C$  fällt die Sättigungsmagnetisierung linear ab, wie aus Abbildung 4.3 ersichtlich. Daher gilt  $M_s = M_s(T)$ :

$$H_s(T) = \frac{M_s(T)}{\chi(T)} = \frac{M_s^0}{\chi(T)} \cdot F_s(T). \quad (4.21)$$

$F_s(T)$  ist eine Korrekturfunktion, die den temperaturabhängigen Anteil von  $M_s$  beschreibt. Die experimentell beobachtete Temperaturabhängigkeit lässt sich näherungsweise beschreiben mit:

$$F_s(T) = \begin{cases} 1 & T < T_C \\ \frac{T_s - T}{T_s - T_C} & T_C < T < T_s \\ 0 & T > T_s \end{cases}. \quad (4.22)$$

Setzt man dies für das Temperaturintervall  $T_C < T < T_s$  zusammen mit Gleichung 4.20 in Gleichung 4.21 ein, so erhält man die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsmagnetisierung:

$$H_s(T) = \lambda M_s^0 \frac{T_s - T}{T_s - T_C} \left[ \frac{T}{T_C} e^{T_A/T_C - T_A/T} - 1 \right]. \quad (4.23)$$

Zuletzt kann die Beziehung für die Kopplungsfeldstärke  $\lambda M_s^0 = H_\lambda$  in die Gleichung eingesetzt werden und man erhält schließlich eine Beziehung zwischen der Sättigungsfeldstärke und der Kopplungsfeldstärke:

$$H_s(T) = H_\lambda \frac{T_s - T}{T_s - T_C} \left[ \frac{T}{T_C} e^{T_A/T_C - T_A/T} - 1 \right] + L, \quad (4.24)$$

wobei die zusätzliche Konstante  $L$  der Tatsache Rechnung trägt, dass die Nanostreifen nicht, wie im Modell angenommen, unendlich lang sind, sondern eine mittlere endliche Länge haben, die auch von der Streifenbreite abhängt. So können auch morphologische Unterbrechungen der Streifen die effektive Korrelationslänge verkürzen [Mül93]. Für solche begrenzten Nanostreifen ist die Divergenz der Suszeptibilität unterdrückt, was letztlich zu einem schwach temperaturabhängigen Untergrund für  $1/\chi$ , bzw.  $H_s$  führt. Die Konstante  $L$  ist proportional zur mittleren Atom-Kettenlänge. Da die Werte von  $T_C$ ,  $T_A$  und  $T_s$  bereits bekannt sind, können die Messdaten mit der Funktion 4.24 angepasst werden, wobei nur noch  $H_\lambda$  als Fitparameter übrig bleibt. Abbildung 4.10 b) zeigt eine Auswahl von Messdaten für ein mit 6 ML Au abgedecktes Nanostreifensystem. Gleichung 4.24 beschreibt die Messdaten für Bedeckungen  $\theta < 1$  erstaunlich gut. Für Bedeckungen  $\theta \geq 1$  beobachtet man eine Abweichung von dem exponentiellen Verhalten, da sich die Nanostreifen überlappen können und somit die viel stärkere direkte Austauschkopplung dominiert. Die Werte von  $T_A$  wurden mit Hilfe der Arrheniusplots (Abbildung 4.10 a)) aus den Geradensteigungen ermittelt.  $T_C$  und  $T_s$  kann man in Abbildung 4.4 ablesen. Die gute Übereinstimmung der Gleichung 4.24 mit den gemessenen Werten von  $H_s$  ist eine Bestätigung des Molekularfeldansatzes, mit Ausnahme des mit der Streifenbreite geringer werdenden Untergrundes für  $T = T_C$ , der durch die Konstante  $L$  berücksichtigt wird. Die Zahl der morphologischen Unterbrechungen in den Streifen und somit die Größe des Untergrundes verringert sich mit ansteigender Streifenbreite, wie in Abbildung 4.10 b) recht schön zu sehen ist.

Ohne weitere Wechselwirkungen ist das Kopplungsfeld  $H_\lambda$  identisch mit dem magnetischen Dipolfeld. Um eine eventuelle laterale indirekte Austauschkopplung sichtbar zu machen, muss die dominierende Dipolkopplung der Streifen abgezogen werden:

$$H_J = H_\lambda - H_{Dipol}. \quad (4.25)$$

Die Bestimmung der Dipolfeldstärke  $H_{Dipol}$  erfolgt mit Hilfe eines Modells für magnetische Momente  $\mu_{Fe}$ , die am Ort der Fe-Atome lokalisiert sind. Man nimmt an, dass die Momente  $\mu_{Fe}$  senkrecht zu den Streifen ausgerichtet sind und in der Probenebene liegen. Das Dipolfeld von einer unendlich langen Atomreihe  $H_{Dipol}^{AR}$  im Abstand  $r$  ist gegeben durch:

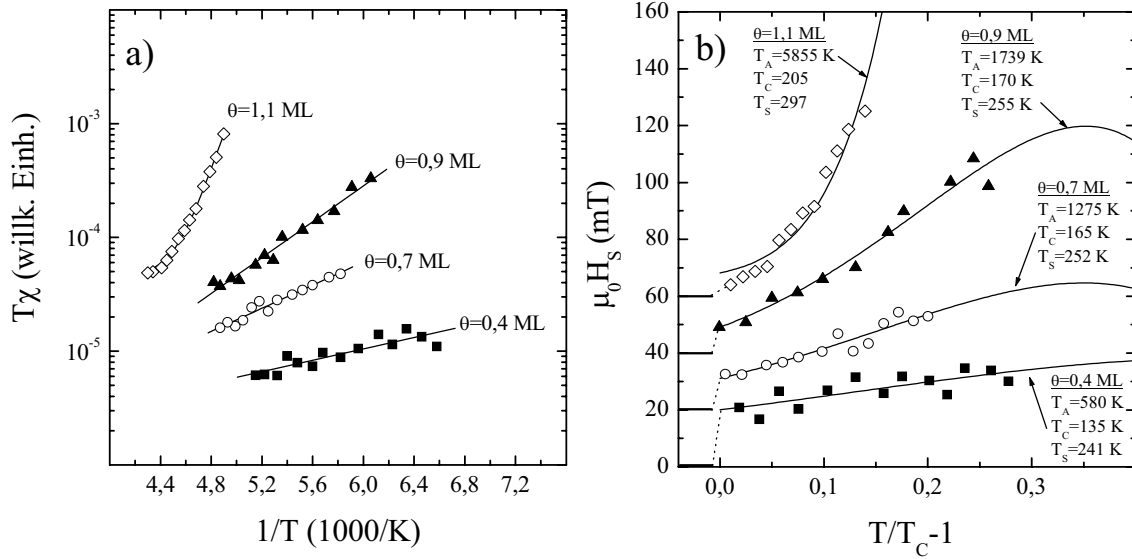


Abbildung 4.10: a) Temperaturabhängigkeit der normalisierten magnetischen Suszeptibilität  $T\chi/C^*$  für verschiedene Bedeckungen, bzw. Streifenbreiten  $W$ . Der Arrheniusplot bestätigt die exponentielle Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität  $\chi$  für Bedeckungen  $< 1$ . b) Die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsfeldstärke  $H_s$  im Temperaturbereich  $T_C < T < T_C(\infty)$ .  $T_C$  steigt mit steigender Fe-Bedeckung von 160 K auf 200 K an.

$$\mu_0 H_{Dipol}^{AR} = \mu / (2\pi a_W r^2), \quad (4.26)$$

wobei  $a_W = 0,3165$  nm die Gitterkonstante des Wolframs ist. Um das gesamte Dipolfeld des Streifensystems zu berechnen, müssen die Felder von  $W$ -Atomreihen benachbarter Streifen addiert (Summe mit Index  $i$ ) und das resultierende Feld gemittelt werden (Summe mit Index  $j$ ). Zuletzt wird noch über die Anzahl aller Streifen aufsummiert (Summe mit Index  $n$ ):

$$\mu_0 H_{Dipol}(W) = \frac{\mu}{\pi a_W^3} \frac{1}{W} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^W \sum_{j=1}^W \frac{1}{(nW_0 + j - i)^2}. \quad (4.27)$$

Abbildung 4.11 zeigt die an einer Au-bedeckten Fe-Keilprobe gemessenen Kopplungsfeldstärken in Abhängigkeit des Streifenabstandes  $W_a = W_0(1 - \theta)$ . Man beobachtet zunächst einen raschen Abfall des Kopplungsfeldes bei einer Bedeckung von  $\theta = 1$ , was den Übergang sich überschneidenden Streifen ( $W_A < 0$ ) hin zu getrennten Streifen



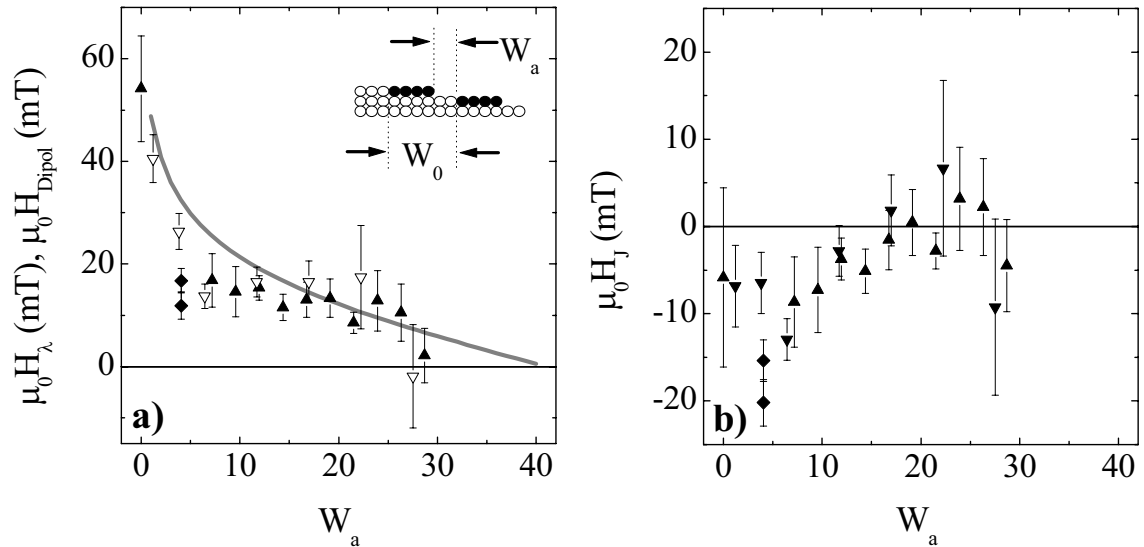


Abbildung 4.11: Laterale Kopplung des Nanostreifensystems mit Au-Bedeckung. a) Gesamtes Kopplungsfeld  $H_\lambda$  als Funktion des Streifenabstands  $W_a$  in Atomreihen. Dreiecke kennzeichnen Daten aus Keilproben, während Quadrate die Messdaten aus homogenen Einzelpräparationen darstellen. Die durchgezogene Linie zeigt das nach Gleichung 4.27 berechnete Dipolfeld. b) Laterale indirekte Austauschkopplung  $H_J = H_\lambda - H_{Dipol}$  in Abhängigkeit des Streifenabstandes.

( $W_A > 0$ ) anzeigt. Benutzt man  $\mu = \mu_{Fe} = 2,2 \mu_B$  als atomares Sättigungsmoment für die ML Fe/W(110) bei  $T = 150$  K [Elm89], kann man die in Abbildung 4.11 a) dargestellten Dipolfeldstärken finden (durchgezogene Linie). Für große Streifenabstände ist das Verhalten des Dipolfeldes fast linear mit der Beziehung  $\mu_0 H_{Dipol} = 21,6 \text{ mT} \cdot W/W_0$ , wie von J. Hauschild bereits [Hau98b] beschrieben, während sich bei kleineren Abständen ein stärkerer Anstieg bemerkbar macht. Im Bereich eines Streifenabstandes von 4 bis 10 Atomreihen ist  $H_\lambda$  kleiner als das berechnete Dipolfeld. Dies deutet auf eine zusätzliche antiferromagnetische Kopplung hin. Eine naheliegende Erklärung ist das Auftreten einer lateralen indirekten Austauschkopplung (LIEC), wie sie in Multilagensystem beobachtet wurde. In Abbildung 4.11 b) ist das zusätzliche Kopplungsfeld  $H_J = H_\lambda - H_{Dipol}$  über dem Streifenabstand aufgetragen. Das antiferromagnetische Maximum von  $H_J = -15$  mT liegt bei einem Streifenabstand von  $W_a = 5$  Atomreihen. Für größere Abstände läuft  $H_J$  sehr schnell gegen Null. Es konnte keine, für die indirekte Austauschkopplung typische Oszillation, beobachtet werden. Da aber die Oszillationen auch in Systemen mit inhomogener Zwischenschichtdicke sehr stark gedämpft sind [Wo193], ist es bei einer Streifenbreitenverteilung von ca. 30 % nicht verwunderlich, dass man nur das erste antiferromagnetische Minimum beobachten kann. Bei einer vergleichbaren Zwischenschichtdickenverteilung eines Fe/Cr/Fe Multilagensystems sind die Oszillationen entsprechend unterdrückt [Elm97]. Der maximale Wert der antiferromagnetischen Kopplung entspricht

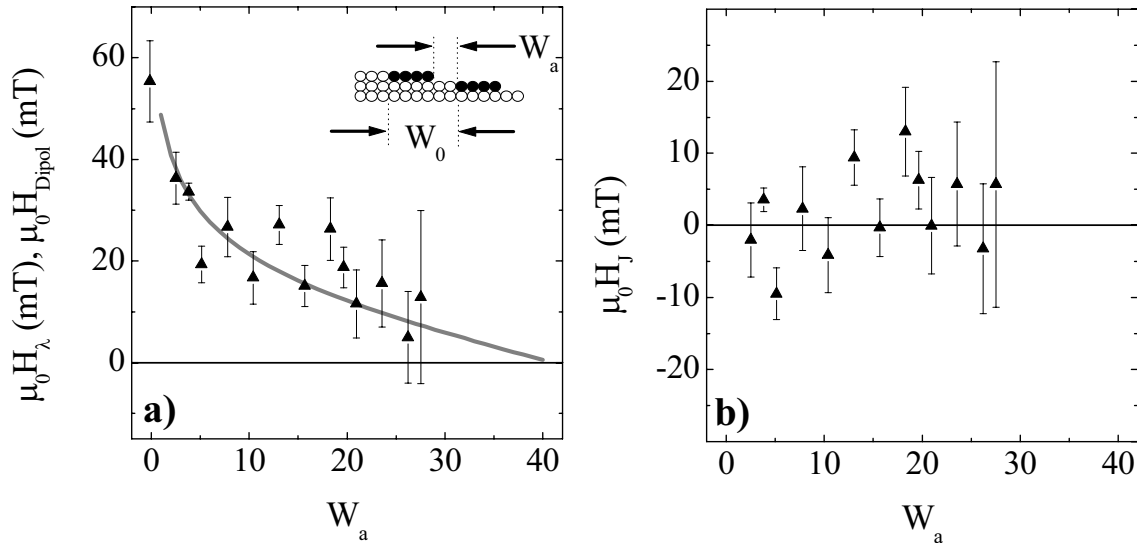


Abbildung 4.12: Laterale Kopplung des Nanostreifensystems mit Pd-Bedeckung. a) Gesamtes Kopplungsfeld  $H_\lambda$  als Funktion des Streifenabstands  $W_a$  in Atomreihen im Vergleich zum berechnete Dipolfeld (durchgezogene Linie; Gleichung 4.27). b) Differenz von Kopplungsfeld  $H_\lambda$  und  $H_{Dipol}$  in Abhängigkeit des Streifenabstandes. Im Gegensatz zu dem Au-bedeckten Nanostreifensystem lässt sich das Kopplungsfeld  $H_\lambda$  allein mit der dipolaren Kopplung erklären. Das leicht polarisierbare Pd scheint den antiferromagnetischen Kopplungsanteil des Substrates komplett zu kompensieren.

einer Streifenkopplungsenergie von:

$$J_1 = \frac{\mu_0}{2} H_J M W \frac{a_W}{\sqrt{2}} = -1,4 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2},$$

was im Vergleich zu Multilagensystemen recht klein ist. Aus dem Verständnis der konventionellen indirekten Austauschkopplung würde man erwarten, dass die Oszillationsperiode, sowie die Amplitude der LIEC von der Fermifläche der nichtmagnetischen Zwischenstreifen abhängig ist, wobei das Wolframsubstrat und die Goldbedeckung einen Beitrag zu der Kopplung beisteuern. Eine Kompensation von ferromagnetischer und antiferromagnetischer Kopplung kann eine Erklärung für den geringen Wert von  $J_1$  sein. Durch das Ersetzen der Au-Bedeckung durch das leicht polarisierbare Palladium ist es möglich den antiferromagnetischen Anteil der Kopplung komplett zu kompensieren. Abbildung 4.12 zeigt in Analogie zu Abbildung 4.11 das Kopplungsfeld  $H_\lambda$ , sowie das resultierende Feld  $H_J$  nach Abzug der Dipolfeldstärke für das Pd-bedeckte Nanostreifensystem. Es ist zu beachten, dass im Fall der Pd-Bedeckung der Temperaturbereich der superparamagnetischen Phase nur noch maximal  $\Delta T = 50$  K beträgt und somit die Fehler deutlich

größer werden als bei dem Au-bedeckten System (siehe auch Kapite 4.1.1), da weniger Messpunkte für die Geradenanpassung zur Verfügung stehen. Im Rahmen des Messfehlers stimmen die Datenpunkte mit der dipolaren Kopplung überein.

# Kapitel 5

## Ultradünne Co-Filme auf W(110)

Das Wachstum von Metallen auf Metallen wird seit langem intensiv untersucht [Bau58] [Koz90] [Bau99]. Die Möglichkeit ferromagnetische, dünne Filme epitaktisch wachsen zu lassen [Gra93] hat die Erforschung von Magnetowiderstandseffekten [Grü86] mit einer breiten Palette der technischen Anwendung [Pri95] enorm vorangetrieben. Für Multilagensysteme ist eine interessante Fragestellung das hetero-epitaktische Wachstum von fcc/hcp geordneten Metallen auf der dicht gepackten (110)-Oberfläche eines bcc-Metalls. Für diesen Fall wurden zwei fundamentale Möglichkeiten für die epitaktische Orientierung beobachtet: Die Kurdjumov-Sachs Orientierung ( $\text{fcc}[1\bar{1}0] \parallel \text{bcc}[11\bar{1}]$ ) und die Nishiyama-Wassermann Orientierung ( $\text{fcc}[1\bar{1}0] \parallel \text{bcc}[001]$ ) [vdM82]. Das Auftreten der jeweiligen Wachstumsart wird durch das Verhältnis der Gitterkonstanten bestimmt. Obwohl die Morphologie einer Reihe von Schichtsystemen bereits durch Beugungsexperimente (reziproker Raum) untersucht wurde, gab es bislang keine experimentellen Auskünfte über die genaue atomare Anordnung der Überstruktureinheit an der Grenzfläche.

### 5.1 Die Co-Monolage auf W(110)

Zur Untersuchung des strukturellen Übergangs von einem bcc-Metall zu einem dicht gepackt wachsenden hcp/fcc-Metall haben wir das System Co/W(110) näher untersucht. Zum einen garantiert die hohe freie Oberflächenenthalpie von W(110) ein Lagenwachstum des Co, zum anderen ist dieses System auch von technologischem Interesse [Get93] [Cla99]. Frühere Untersuchungen des Systems Co/W(110) zeigten zunächst das Wachstum von ausgedehnten Monolageninseln mit einer  $(1 \times 1)$ -Struktur im LEED-Bild, die bei steigender Bedeckung in eine  $(8 \times 1)$ -Struktur überging [Joh90] [Oci90] [Kno93] [Get96] [Fri95b] [Dud01]. Die  $(1 \times 1)$ -Struktur ist ein Zeichen für pseudomorphes Wachstum

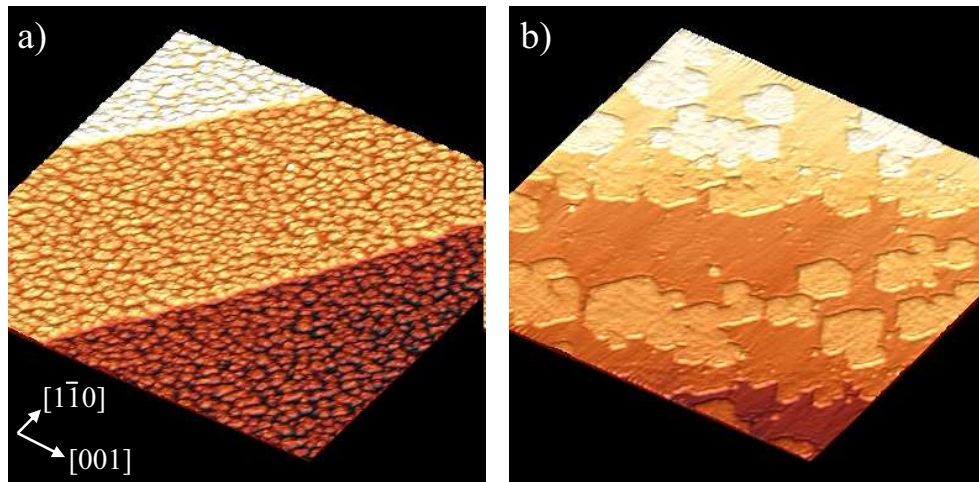


Abbildung 5.1: 3D-Darstellung von STM-Aufnahmen ( $100 \times 100$ ) nm<sup>2</sup> einer Submonolage Co (Bedeckung  $\theta = 0,5$ ), die bei Raumtemperatur präpariert und anschließend bei  $T_T = 520$  K getempert wurde a) im Vergleich zur direkt bei  $T_P = 520$  K präparierten Submonolage b). Die Inseldurchmesser sind in b) um etwa eine Größenordnung größer. Hier findet man bevorzugt hexagonale Inselformen, vorgegeben durch das W(110)-Substrat.

der Monolage, während die  $(8 \times 1)$ -Überstruktur ein dicht gepacktes (engl.: *close packed*, kurz cp) Wachstum in Nishiyama-Wassermann Orientierung anzeigt. Die Atome der dicht gepackten Monolage stimmen in  $\text{bcc}[1\bar{1}0]$ -Richtung mit den Positionen der W-Atome überein. In der  $\text{bcc}[001]$ -Richtung relaxieren sie aufgrund der großen Gitterfehlانpassung, so dass fünf Co-Atome auf vier Substratome verteilt werden. Hocho aufgelöste LEED-Aufnahmen haben gezeigt, dass bis zu einer Schichtdicke von 1,3 ML die  $(8 \times 1)$ -Überstruktur auftritt, die dann im Bedeckungsbereich von 2-10 ML in eine  $(7,2 \times 1)$ -Überstruktur übergeht [Fri95b]. Vergleichbares Wachstum in Nishiyama-Wassermann-Orientierung wurde auch für die Systeme Co/Mo(110) [Cla99] [Tik90], Ni/Mo(110) [Tik90] [He93] [Fed94] [Tsu99] und Ni/W(110) [Kol84] [San98] gefunden. Im Falle von Ni/W(110) zeigten rastertunnelmikroskopische Aufnahmen parallele Versetzungslinien entlang der  $\text{bcc}[1\bar{1}0]$ -Richtung [San98], wie man im einfachsten Hartkugelmodell erwarten würde. Ein atomistisches Modell über äquivalente Fälle findet man in den Referenzen [vdM94a] [vdM94b].

### 5.1.1 Wachstum und Morphologie

Die Proben wurden mit Hilfe von MBE im UHV bei einem Druck  $p < 2 \cdot 10^{-10}$  Torr präpariert, wobei die Präparationstemperatur  $T_P$ , sowie eine thermische Behandlung nach der Präparation bei  $T_T$  durchgeführt wurde. Anders als bei reinem Fe, ergibt sich ein

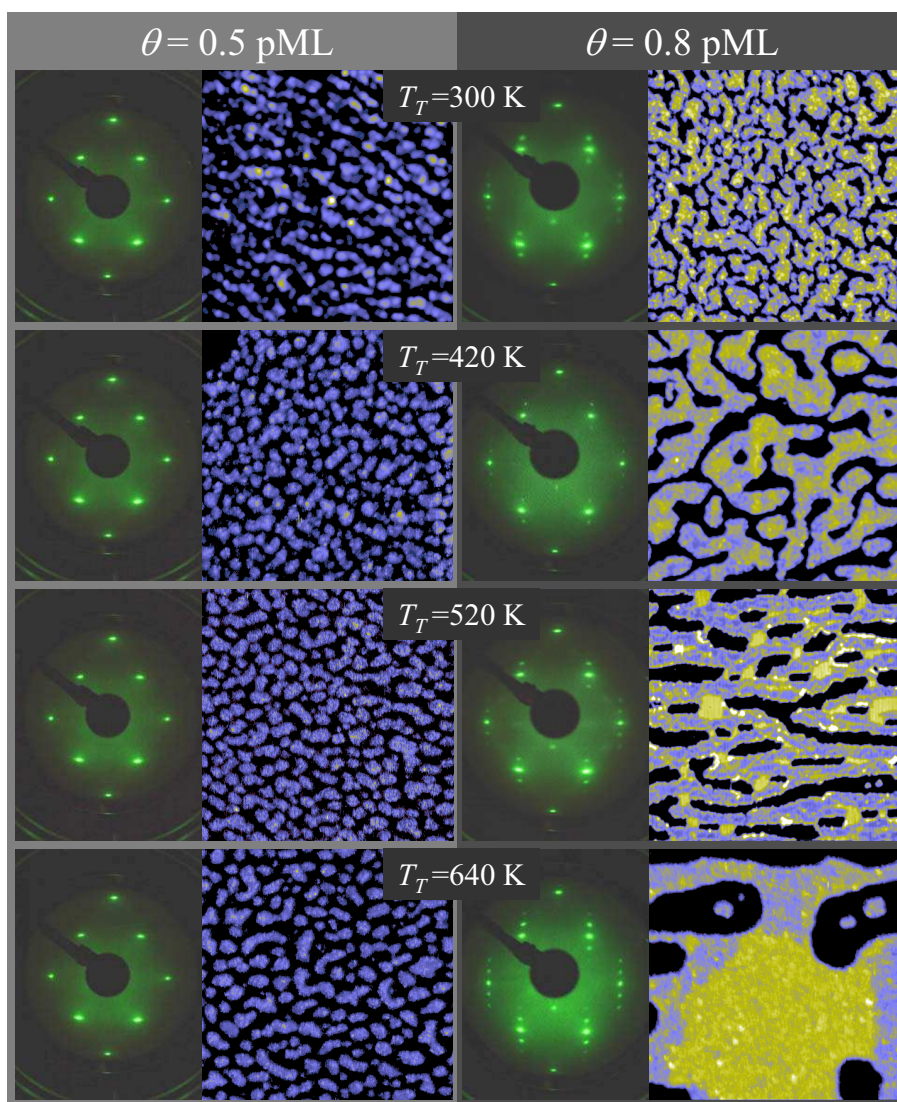


Abbildung 5.2: LEED und  $(50 \times 50) \text{ nm}^2$  STM-Bilder für zwei verschiedenen Co-Bedeckungen. Nach der Präparation bei  $T = 300 \text{ K}$  wurde die Probe bei der angegebenen Temperatur getempert. Die gelb eingefärbten Bereiche der Co-Inseln sind etwa  $50 \text{ pm}$  höher als die blauen Inselteile und zeigen Bereiche, in denen das Co dichtgepackt wächst.

großer Unterschied in der Probenmorphologie für getemperte Proben bzw. für Proben, die direkt bei höheren Temperaturen aufgedampft wurden. In Abbildung 5.1 werden zwei Präparationsarten einer Submonolage Co miteinander verglichen. Zum einen eine Präparation bei Raumtemperatur gefolgt von einer thermischen Behandlung bei  $T_T = 520 \text{ K}$ , zum anderen eine Präparation direkt bei  $T_P = 520 \text{ K}$ . Die Präparation bei Raumtempe-

ratur liefert bei geringen Bedeckungen viele kleine Co-Inseln (ca. 3 nm Durchmesser), die sich beim Tempern nicht weiter vergrößern. Bei einer Bedeckung von  $\theta \leq 0,5$  ergibt sich zum Beispiel eine Inseldichte von ca.  $6 \cdot 10^4$  Inseln/ $\mu\text{m}^2$ . Die Präparation bei  $T_P = 520$  K hingegen ergibt Co-Inseln mit einem Durchmesser von etwa 30 nm, deren Grenzen bevorzugt entlang der bcc[1 $\bar{1}$ 1], bcc[ $\bar{1}$ 11] und der bcc[001]-Richtung wachsen. Somit haben einige Co-Inseln eine hexagonale Form (siehe Abbildung 5.1 b)). Um das Wachstum der Co-Inseln näher zu untersuchen, wurden Proben mit zwei verschiedenen Bedeckungen ( $\theta = 0,5$  und  $\theta = 0,8$ ) hergestellt und bei unterschiedlichen Temperaturen getempert. Abbildung 5.2 fasst die Ergebnisse der STM- und LEED-Untersuchungen zusammen. Vergleicht man zunächst die Präparation mit unterschiedlicher Bedeckung bei Raumtemperatur, so findet man, wie erwartet, für die geringere Bedeckung von 0,5 pseudomorphen Monolagen (ps-ML) kleine, unzusammenhängende Co-Inseln, während die höhere Bedeckung ( $\theta = 0,8$ ) größere Inseln zeigt, die bereits miteinander verbunden sind. Wird diese Probe getempert, so bilden sich schon bei  $T_T = 420$  K große zusammenhängende Co-Inseln, während bei der Probe mit der geringeren Bedeckung die thermische Behandlung so gut wie keine Veränderung verursacht. Eine Erklärung für diesen Sachverhalt ist die erhöhte Mobilität der Co-Atome am Rand der Monolageninseln. Sind die Inseln bereits miteinander verbunden, können die Co-Atome lange Wege entlang der Inselränder zurücklegen und somit große Inselstrukturen ausbilden. Im Gegensatz dazu können aber die Atome in kleinen, separierten Inseln die Inselränder nicht verlassen und die Inseln können sich auch nicht insgesamt bewegen. Die Folge ist, dass sich die Inselgröße bei geringen Bedeckungen ( $\theta \leq 0,5$ ) nicht durch nachträgliche Erwärmung vergrößern lässt. Im Zentrum der großflächigen Inseln beobachtet man kompakte Bereiche, die im topographischen STM-Bild etwa 50-60 pm höher erscheinen (in Abbildung 5.2 gelb dargestellt). Das Auftreten der erhöhten Co-Inselbereiche geht mit der im LEED beobachteten ( $8 \times 1$ )-Überstruktur einher. Es ist daher zu vermuten, dass das Co an diesen Stellen bereits dicht gepackt aufwächst.

### 5.1.2 Spektroskopische Untersuchung

Eine Möglichkeit, Aufschluss über die elektronische Struktur einer Oberfläche zu bekommen, ist die Rastertunnelspektroskopie (STS). Dazu wurden Spektren der differentiellen Leitfähigkeit ( $dI/dU$ ) auf den Inseln aus Abbildung 5.2 für Bedeckungen von 0,5 ps-ML und 0,8 ps-ML bestimmt und mit LEED die Struktur überprüft. Das  $dI/dU$ -Spektrum für pseudomorphes Co (ps-Co) weist einen dominanten Peak bei  $U = 0,62$  V auf, während dicht gepacktes Co (cp-Co) einen etwas kleineren Peak bei  $U = 0,29$  V (siehe auch Abbildung 5.3) zeigt. Aufgrund der unterschiedlichen elektronischen Zustände von ps-Co und cp-Co lassen sich die Bereiche sehr einfach im Spektroskopiebild unterscheiden. Abbildung 5.3 zeigt ein Topographiebild a) und ein Spektroskopiebild b) ( $U = 0,2$  V,  $I = 350$  pA,  $\theta = 0,7$ ) von Co/W(110). Die Submonolage wurde bei  $T_T = 520$  K getem-

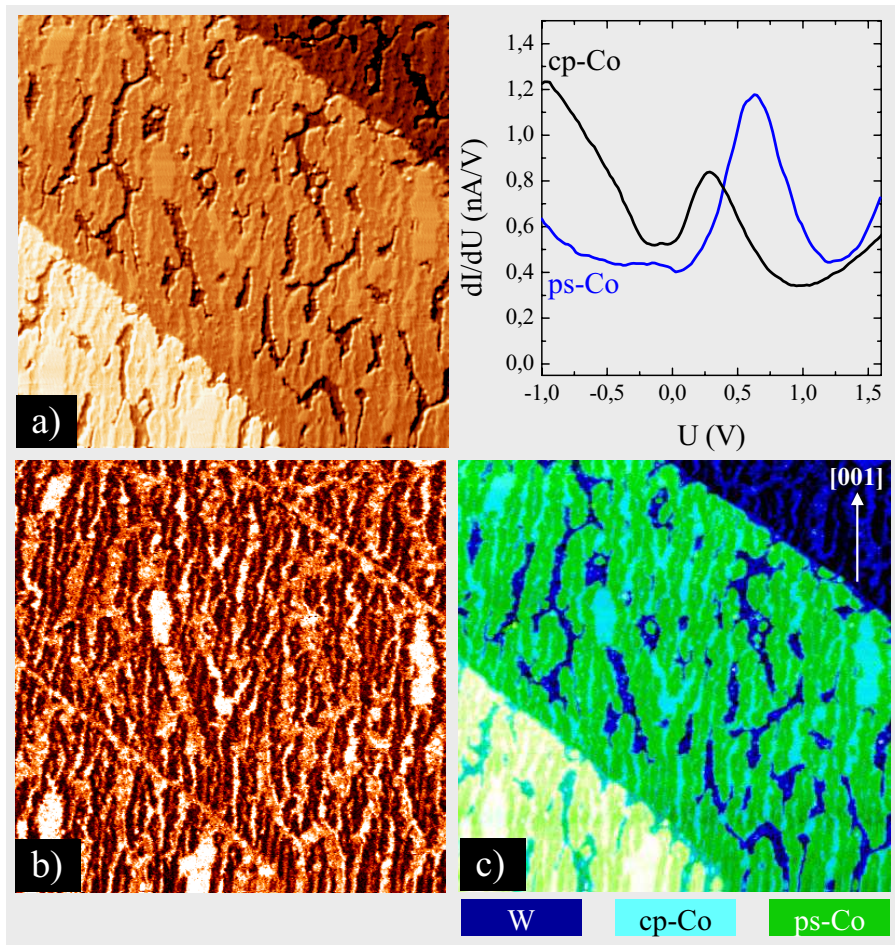


Abbildung 5.3: a)  $(100 \times 100) \text{ nm}^2$  STM-Bild einer Co-Submonolage mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$ , die bei  $T_T = 520 \text{ K}$  getempert wurde. b) STS-Aufnahme des gleichen Bildausschnitts bei  $U=0,2 \text{ V}$ . c) Eingefärbte Addition von STM- und STS-Bild zur besseren Unterscheidung der verschiedenen Bereiche. Ebenso sind die  $dI/dU$ -Spektren für ps-Co und cp-Co oben rechts dargestellt.

pert. Die STM-Bilder illustrieren den Übergang von pseudomorphen zu dicht gepacktem Wachstum. Zur besseren Unterscheidung von ps-Co, cp-Co und W wurde das STM- und das STS-Bild addiert und passend eingefärbt. In Abbildung 5.3 c) erscheinen die cp-Co Bereiche als hellblaue Inseln und die ps-Co Bereiche als grüne Flächen. Man beobachtet neben größeren, kompakten cp-Co Inseln auch schmale, linienförmige cp-Co Bereiche mit einer Vorzugsrichtung entlang der  $\text{bcc}[001]$ -Richtung, d. h. der Richtung, in der die größte Spannung in der ps-Monolage auftritt. Ebenso findet man Bereiche, in denen man das W-Substrat erkennt (in Abbildung 5.3 c) dunkelblau dargestellt). Es fällt auf,



dass die W-Bereiche von hellblauen Bereichen umgeben sind, d.h. die Ausbildung von cp-Co findet bevorzugt an atomaren Stufenkanten statt. Man kann aber nicht vollständig ausschließen, dass es sich dabei um ein Artefakt der  $dI/DU$ -Messung handelt, weil die spektroskopische Messungen durch Stufenkanten beeinflusst werden. Die cp-Co Bereiche treten also schon auf, bevor die komplette Monolage geschlossen ist. Dies steht im Widerspruch zu den Untersuchungen von H. Knoppe [Kno93], der eine vollständig geschlossene Co-Monolage beobachtete, bevor der Übergang zur dicht gepackten Struktur einsetzte. Ein Grund dafür können die etwas besseren Vakuumbedingungen ( $p < 6 \cdot 10^{-11}$  mbar) sein, da Adsorbate auf der W-Oberfläche (vorwiegend CO-Moleküle) als Nukleationskeime für die Bildung der cp-Co Bereiche eine wichtige Rolle spielen. Für Bedeckungen  $\theta > 1$  wächst die gesamte Monolage dicht gepackt.

### 5.1.3 Atomare Struktur der dicht gepackten Co-Monolage

Es ist unmöglich, aufgrund einer Positionsanalyse der Beugungsreflexe die genauen Positionen der Co-Atome in der Monolage Co/W(110) zu bestimmen. Daher mußte bisher die atomare Struktur aus theoretischen Rechnungen geschlussfolgert werden. In Abbildung 5.4 a) ist die Einheitszelle eines bcc[110]-Substrates und die eines cp[111]-Adsorbates in Nishiyama-Wassermann-Orientierung dargestellt. Die Gitterfehlpassung  $f_i$  in Volumengitterkonstanten  $a_i$  (Substrat) und  $b_i$  (Adsorbat) ist gegeben durch:

$$f_i = (b_i - a_i)/a_i, \quad (5.1)$$

wobei  $i = [1\bar{1}0], [001]$  und  $a_i, b_i$  die entsprechenden Diagonalen der Einheitszelle darstellen. Im Allgemeinen ist die Gitterfehlpassung gegeben durch die Versetzungsdichte  $\bar{f}_i$  und die Fehlanpassungsdehnung bzw. Verzerrung  $\bar{e}_i$ :

$$\bar{f}_i = (\bar{b}_i - a_i)/a_i, \quad (5.2)$$

$$\bar{e}_i = (\bar{b}_i - b_i)/b_i. \quad (5.3)$$

Hierbei ist  $\bar{b}_i$  die mittlere gedehnte Gitterkonstante. Weil für Co/W(110) die Fehlanpassung in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung  $f_{[1\bar{1}0]}$  nur klein ist, rastet das Adsorbatgitter auf das Substratgitter ein. Daher ist dann die Versetzungsdichte  $\bar{f}_{[1\bar{1}0]} = 0$  und es ergibt sich eine mittlere Dehnung von  $\bar{e}_{[1\bar{1}0]} = 0,03$ , sowohl für die cp-Co ML, als auch für die ps-Co ML. In der pseudomorphen Monolage ist die Spannung in  $[001]$ -Richtung sehr groß und kann durch die Relaxation der Atome in  $[001]$ -Richtung abgebaut werden. Die Übereinstimmung von 8 Substratomreihen mit 10 Co-Atomreihen liefert einen Wert von  $f_{[001]} = 0,2$  und  $\bar{e}_{[001]} = 0,01$ . Einen Überblick über die Werte für Co/W(110) ist in Tabelle 5.1 gegeben.

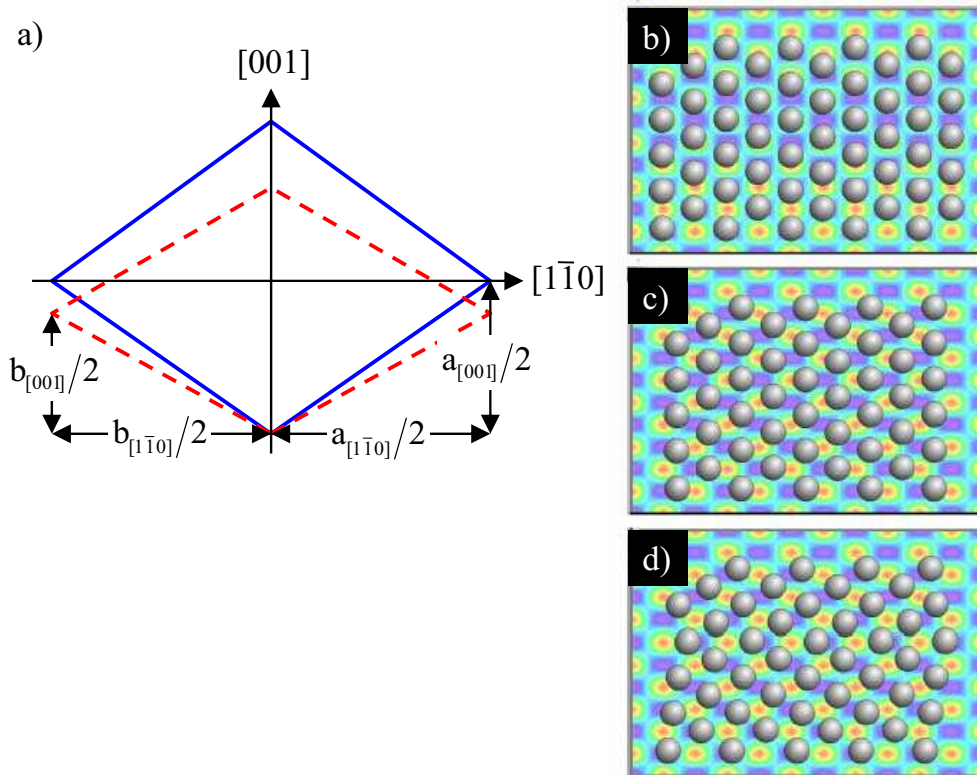


Abbildung 5.4: a) Das Diagramm zeigt die Co-Atome einer dicht gepackten Volumeneinheit (rot) mit den Diagonalen  $b_{[1\bar{1}0]}$ ,  $b_{[001]}$  und die Potentialminima des Substrats, die in den Ecken der bcc(110) Einheitszelle lokalisiert sind (Länge der Diagonalen  $a_{[1\bar{1}0]}$ ,  $a_{[001]}$ ). Rechts dargestellt sind Strukturmodelle der Co-Atome in einer dicht gepackten Struktur auf den Substratpotentialen der bcc(110)-Oberfläche. Die Modelle veranschaulichen die atomare Anordnung bei der vollständigen Versetzung b), der unvollständigen Versetzung c), sowie einer weiteren Relaxation der unvollständigen Versetzung d).

J. H. van der Merwe [vdM94a] [vdM94b] stellte zwei Modelle zur Bestimmung der relativen Atompositionen in der cp-ML und dem Substrat vor. Er beschreibt zwei verschiedene Arten der atomaren Anordnung, die vollständige und die unvollständige Versetzung. Es müssen zwei konkurrierende Wechselwirkungen bei der Berechnung in Betracht gezogen werden. Zum einen die Wechselwirkung zwischen den Adsorbatatomen innerhalb der cp-ML und zum anderen die Wechselwirkung zwischen Adsorbat und Substratatom. Dies führt zu einer Relaxation der Monolage in eine gedehnte Struktur, bei der die Atome individuell von ihren ursprünglichen Positionen verschoben werden. Im Fall der vollständigen Versetzung werden die Co[001]-Reihen auf den Substratatomreihen platziert (Abbildung 5.4 b)). Somit können einige Atome in Potentialminima liegen, während

	$f_{[1\bar{1}0]}$	$f_{[001]}$	$\bar{f}_{[1\bar{1}0]}$	$\bar{f}_{[001]}$	$\bar{e}_{[1\bar{1}0]}$	$\bar{e}_{[001]}$
Volumen	-0,032	-0,210				
ps-ML			0	0	0,033	0,266
cp-ML			0	-0,2	0,033	0,012

Tabelle 5.1: Gitterfehlpassungen  $f_i$ , Versetzungsdichte  $\bar{f}_i$  und Fehlanpassungsdehnung  $\bar{e}_i$  ( $i = [1\bar{1}0], [001]$ ), berechnet mit Hilfe der nächsten Nachbarabstände  $a = \sqrt{3}/2 \cdot a_W = 0,274$  nm (W) und  $b = \sqrt{3}/2 \cdot a_{Co} = 0,250$  nm (Co).

andere aber energetisch ungünstige Positionen auf Potentialmaxima belegen müssen. Eine weitere Relaxation zur Minimierung der freien Energie führt nur zu einer Verschiebung in [001]-Richtung aufgrund der Spiegelsymmetrie zur  $(1\bar{1}0)$ -Ebene. Im Fall der unvollständigen Versetzung wird die cp-Co Lage komplett um  $a_{[1\bar{1}0]}/4$  entlang der  $[1\bar{1}0]$ -Richtung verschoben (Abbildung 5.4 c)). Somit sitzt kein Co-Atome mehr auf einem Potential-Maximum bzw. Minimum, sondern nur noch auf mittleren Potentialwerten. Eine weitere Relaxation zieht eine Versetzung in  $[1\bar{1}0]$  und [001]-Richtung mit sich (Abbildung 5.4 d)). Es ergibt sich eine sinusförmige Modulation der Atome in beiden Richtungen. Nach J. H. van der Merwe [vdM94b] gilt für die Verschiebung  $u$ :

$$u_{[1\bar{1}0]} = \frac{a_{[1\bar{1}0]}}{2} \left[ -\frac{1}{2} + a_1 \sin\left(\frac{2\pi k}{J}\right) \right], \quad (5.4)$$

$$u_{[001]} = \frac{a_{[001]}}{2} \left[ -\frac{1}{2} - \frac{2k}{J} + b_1 \sin\left(\frac{2\pi k}{J}\right) \right], \quad (5.5)$$

wobei sich die Struktur nach  $J = 10$  Atomreihen wiederholt. Der Laufparameter  $k$  zählt die Zahl der Atomreihen in [001]-Richtung durch. Der Term  $-1/2$  in Gleichung 5.4 spiegelt die starre Verschiebung wider, während der Term  $-1/2$  in Gleichung 5.5 von der Definition der unvollständigen Versetzung stammt. Der Term  $-2k/J$  stellt die Vernier-Charakteristik vor der Relaxation dar. Terme höherer Ordnung, ursprünglich von J. H. van der Merwe berücksichtigt, werden hier vernachlässigt, weil sie experimentell nicht bestimmt werden können. Ob unvollständige oder vollständige Versetzungen gebildet werden, wird durch Fourier-Komponenten höherer Ordnung des Substratpotentials entschieden. J. H. van der Merwe benutzte zur Vorhersage die *embedded-atom* Methode, die heute als problematisch angesehen wird.

Um die atomaren Positionen der Monolage Co/W(110) zu bestimmen, wurde atomar aufgelöste Rastertunnelmikroskopie verwendet. Dafür wurde zunächst ein Übersichtsbild von einer Co-Insel aufgenommen. Abbildung 5.5 a) zeigt ein STM-Bild einer Co-Monolage mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$  nach einer thermischen Behandlung von

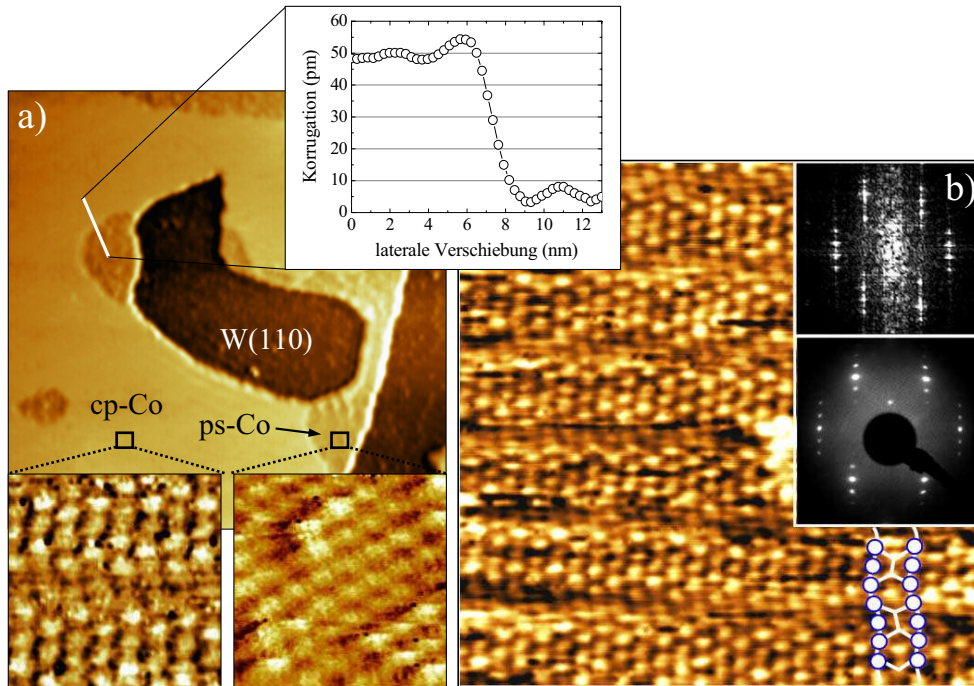


Abbildung 5.5: a) STM-Aufnahme einer Co-Monolageninsel, die bei 640 K getempert wurde ( $I = 645 \text{ pA}$ ,  $U = 877 \text{ mV}$ ). Die atomar aufgelösten Vergrößerungen zeigen dicht gepackt und pseudomorph gewachsenes Co. Die Höhendifferenz beider Bereich kann aus dem Linienprofil bestimmt werden und beträgt ca. 50 pm. b) Atomare Auflösung von dicht gepacktem Co auf W(110) ( $I = 25 \text{ nA}$ ,  $U = 5 \text{ mV}$ ). Zum Vergleich ist eine Fouriertransformation des STM-Bildes, sowie eine LEED-Aufnahme der Probe dargestellt.

$T_T = 640 \text{ K}$ . Die atomar vergrößerten Ausschnitte zeigen Bereiche mit pseudomorphen, sowie dicht gepackten Wachstum der Co-Monolageninsel. Die Höhendifferenz zwischen beiden Bereichen beträgt etwa 50 pm. Nach *ab initio* Rechnungen von D. Spišák [Spi04] würde man einen Unterschied von nur 20 pm erwarten. Man sollte aber beim Vergleich der STM-Bilder mit gerechneten Höhenkorruptionen daran denken, dass es nicht möglich ist eine reine Probenotopographie mit dem STM zu bestimmen, da Änderungen der elektronischen Struktur ebenso ein Grund für unterschiedliche z-Korruptionen sein können. Ferner fällt auf, dass die cp-Bereiche in Abbildung 5.5 a) eine geringere Rauigkeit als die pseudomorph gewachsenen Bereiche aufweisen. In Abbildung 5.5 b) ist ein  $26 \times 48$  Atomreihen großer Bereich der cp-ML dargestellt. Die Fourier-Transformation des STM-Bildes bestätigt die periodische Struktur und zeigt die gleichen Intensitätsmaxima wie das zugehörige LEED-Bild. Aus dem LEED-Bild kann man eine Versetzungsdichte in [001]-Richtung von  $\bar{f}_{[001]} = -0,19 \pm 0,01$  in guter Übereinstimmung mit der früher gefundenen  $(8 \times 1)$ -Überstruktur ( $\bar{f}_{[001]} = -0,2$ ) bestimmen. Es ist offensichtlich,

dass die Atome in [001]-Richtung nicht auf einer Geraden liegen, sondern eine wellenförmige Abweichung mit einer Periodenlänge von  $10 \cdot \bar{b}_{[001]}$  zeigen. Das Modell aus Abbildung 5.4 d) für die relaxierte, unvollständige Versetzung beschreibt diese Anordnung am besten. Somit kann die theoretische Voraussage von J. H. van der Merwe durch die STM-Untersuchung bestätigt werden. Aus dem atomar aufgelösten STM-Bild lässt sich die Amplitude in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung zu  $(29 \pm 6)$  pm und in [001] zu  $(35 \pm 11)$  pm bestimmen. Die Rechnungen von D. Spišák [Spi04] haben Amplituden von 31 pm in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung und 3 pm in [001] ergeben. Mit Hilfe der Formeln 5.4 und 5.5 kann man die Faktoren  $a_1$  und  $b_1$  zu  $a_1 = 0,13 \pm 0,02$  und  $b_1 = 0,22 \pm 0,09$  bestimmen. Werte der selben Größenordnung wurden auch für Ni/Mo(110) von J. H. van der Merwe vorausgesagt ( $a_1 = 0,12$ ,  $b_1 = 0,03$ ) [vdM94a] [vdM94b]. Zusätzlich beobachtet man auch eine Höhenmodulation von  $(6 \pm 2)$  pm in der [001]-Richtung. Dieser kleine Höhenunterschied kann nur im atomaren STM-Modus (Spitze sehr dicht an der Oberfläche,  $I = 25$  nA,  $U = 5$  mV) beobachtet werden. Die theoretisch berechnete Höhenkorrigatur für die cp-ML Co ist mit 12 pm doppelt so groß [Spi04]. Allerdings sollte man wiederum beachten, dass die absoluten Werte der Höhenmodulation extrem klein sind, und die mit dem STM beobachteten Höhendifferenzen auch durch eine periodische Änderung der elektronischen Struktur zustande kommen kann und nicht rein topographischer Natur sein muss. Im Gegensatz zu dem System Ni/W(110) [San98], bei dem die Versetzungslinien entlang der bcc $[1\bar{1}0]$ -Richtung im STM-Bild deutlich zu erkennen sind, ist der Höhenunterschied bei Co/W(110) nahe an der Auflösungsgrenze des Mikroskops. Bei einer Spannung von  $U = 0,3$  V können die Versetzungslinien besonders gut sichtbar gemacht werden. In Abbildung 5.6 a) sieht man, abgesehen von der leichten Drift des Scanners, parallele, helle Linien entlang der bcc $[1\bar{1}0]$ -Richtung und man kann zwei verschiedene Strukturen unterscheiden. In der oberen Bildhälfte haben die Versetzungslinien im Vergleich zur unteren Bildhälfte den doppelten Abstand. Die mit dem Pfeil gekennzeichnete Linie in der Mitte verschwindet von links nach rechts, d. h. der Übergang von der einen zur anderen Struktur findet kontinuierlich statt. Im zugehörigen STS-Bild 5.6 erscheinen die Versetzungslinien bei  $U = 0,3$  V dunkel. Der schwache Kontrast macht nur etwa 2,5 % des  $dI/dU$ -Signals aus und ist ein Zeichen für die lokale Änderung der elektronischen Struktur. Im Beugungsbild können diese beiden Strukturen nicht unterschieden werden. Um den Ursachen der unterschiedlichen cp-Co Bereiche auf den Grund zu gehen, wurde die geschlossene Monolage mit atomar aufgelöste Rastertunnelmikroskopie untersucht. Auch hier findet man zwei verschiedene atomare Anordnungen (Abbildung 5.7 a) und b)). Zusätzlich zur beschriebenen Anordnung der relaxierten, unvollständigen Versetzung, bei der die Co-Atome sinusförmig von der bcc[001]-Richtung abweichen, existieren Bereiche, in denen die Atome auf einer geraden Linie entlang der bcc[001]-Richtung liegen. Die Co-Atome relaxieren dabei nur in [001]-Richtung und man kann in diesem Fall von einer vollständigen Versetzung sprechen. Beide Strukturen wurden für die cp-Monolage auf einer bcc(110) Oberfläche mit Versetzungslinien parallel zu  $[1\bar{1}0]$  (Nishiyama-Wassermann Orientierung) von J. H. van der Merwe [vdM94a] [vdM94b]

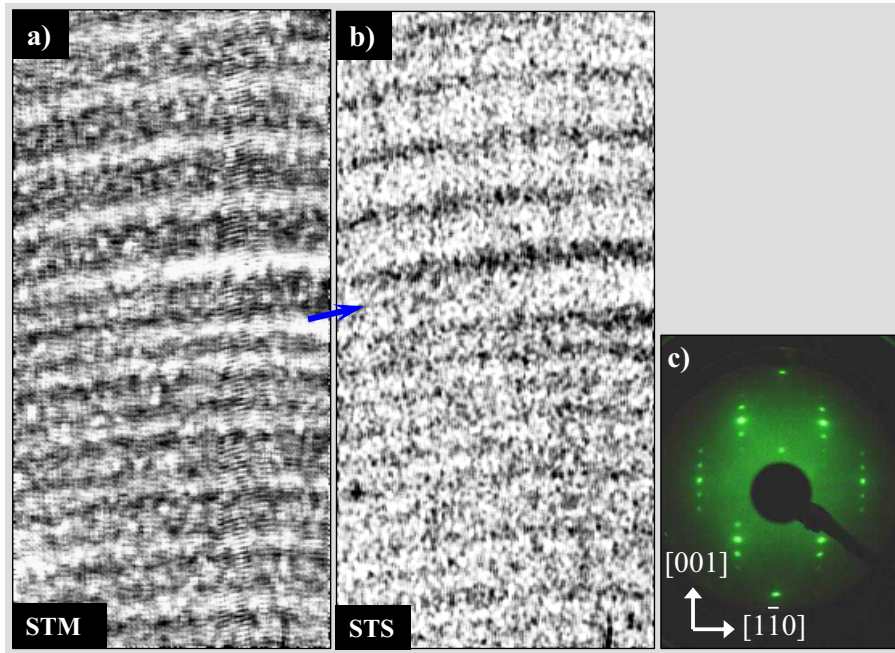


Abbildung 5.6: a) STM-Aufnahme ( $18 \times 9$ ) nm<sup>2</sup> einer cp-Co Monolage ( $U = 0,3$  V,  $I = 500$  pA). Die Versetzungslinien sind aufgrund einer Drift des Scanners leicht gebogen. b) Ein gleichzeitig gemessenes STS-Bild zeigt die lokale Änderung der elektronischen Struktur der Oberfläche. c) Das Elektronen-Beugungsbild der Probe zeigt eine ( $8 \times 1$ )-Überstruktur (Nishiyama-Wassermann-Orientierung).

vorausgesagt. Da beide Strukturen in der cp-ML Co parallel auftreten können, kann man davon ausgehen, dass beide Strukturen energetisch ähnlich sind. Die bevorzugte Beobachtung der unvollständigen Versetzung ist im Einklang mit Rechnungen von D. Spišák [Spi04], die eine Energiedifferenz der vollständigen zur unvollständigen Versetzung von 172 meV zeigen. In Abbildung 5.7 sind gemittelte Höhenprofile für beide Bereiche längst der [001]-Richtung dargestellt. Während die Struktur a) eine Korrugationsperiode von  $4 \cdot (a_W/2) = 5 \cdot (a_{Co}/2)$  zeigt, findet man die doppelte Periodenlänge  $8 \cdot (a_W/2)$  mit einer größeren Amplitude bei Struktur b). Man kann somit die Struktur 5.7 a) den Bereichen mit der einfachen Periodenlänge zuordnen. Zu beachten ist allerdings, dass die Höhenkorrugationen bei Abbildung 5.7 b) und Abbildung 5.6 ein inverses Verhalten zeigen. Das Strukturmodell der vollständigen Versetzung (Abbildung 5.7 a)) erklärt eine Höhenkorrugation mit einer Periode von  $4 \cdot (a_W/2)$  direkt. Die dunkel hinterlegten Streifen entlang der [001]-Richtung stellen die Versetzungslinien dar, die aufgrund des vergrößerten Abstands der Atome zustande kommen. Für die Bereiche mit unvollständiger Versetzung würde man eine geringere Höhenkorrugation erwarten, die im Gegensatz zur Beobachtung die gleiche Periode aufweisen sollte. Die Strukturmodelle sind sehr vereinfachte Modelle,

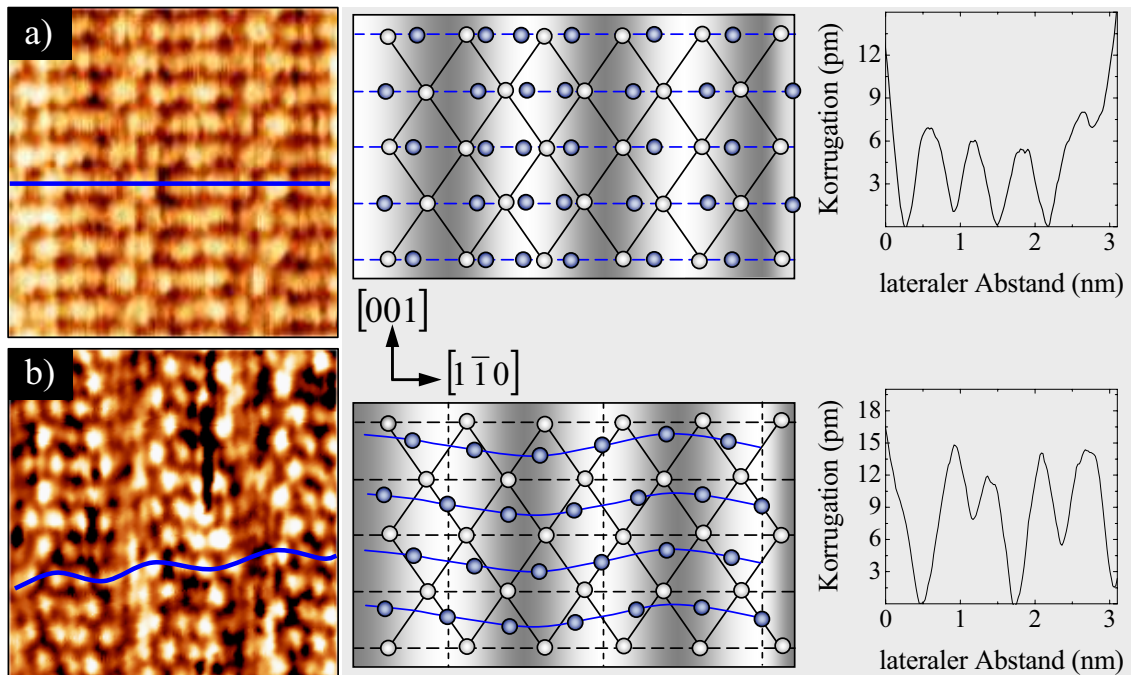


Abbildung 5.7: Vergleich beider Wachstumsarten der cp-ML Co/W(110) (Probe bei  $T_T = 520$  K getempert). Die atomar aufgelösten STM-Bilder ( $U = 5$  mV,  $I = 25$  nA) zeigen Co-Wachstum mit vollständiger Versetzung a) und relaxierter, unvollständiger Versetzung b). Die entsprechenden Strukturmodelle stellen eine mögliche Anordnung der Co- und Substratome dar. Die dunkel hinterlegten Flächen geben Bereiche mit dem größten Abstand der Atome (bei Struktur a)), bzw. Bereiche in denen die Atome möglichst nahe an den Potentialminima liegen (bei Struktur b)) an. Die gemittelten Linienprofile zeigen, dass man eine Unterscheidung der Strukturen anhand der Versetzungsliniendichte vornehmen kann.

da sie keine Verschiebung von Substratomen berücksichtigen, die natürlich für die atomare Struktur eine wichtige Rolle spielen, aber nicht mit dem STM beobachtet werden können. Eine Verschiebung von Substratomen wurde bereits mit Hilfe von resonanter Röntgenbeugung von H. L. Meyerheim [Mey03] beobachtet.

## 5.2 Die Doppellage Co

Zur Untersuchung der Co-Doppellageninseln wurde 1,4 ML Co bei leicht erhöhter Temperatur  $T_P = 350$  K präpariert. In Abbildung 5.8 a) ist eine 3D-Ansicht der Topographie dargestellt. Die Doppel- (DL) und Tripellageninseln (TL) beginnen an der Wolframstufenkante zu wachsen. Die TL-Inseln entstehen durch Überwachsen der DL über die Substrat-

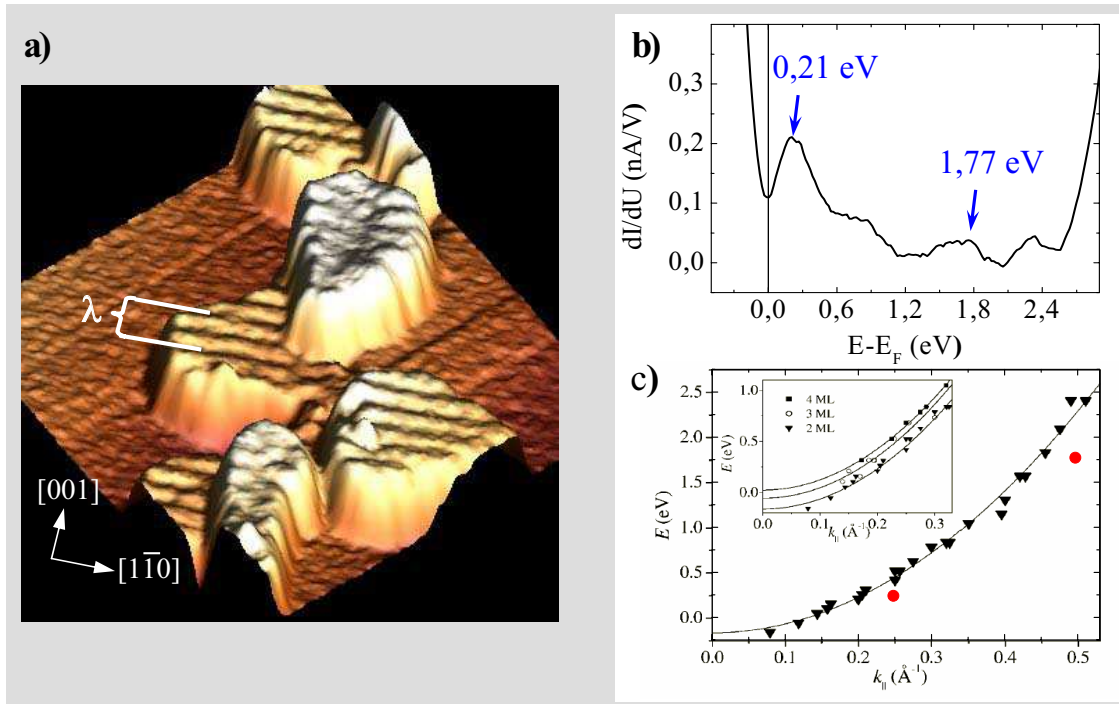


Abbildung 5.8: a) 3D-Darstellung ( $20 \times 20$ )  $\text{nm}^2$  von Co-DL und Co-TL-Inseln (1,4 ML bei  $T_P = 350 \text{ K}$  präpariert;  $U = 0,3 \text{ V}$ ,  $I = 0,5 \text{ nA}$ ). Die DL-Inseln zeigen eine ausgeprägte Höhenmodulation, die mit einer stehenden Elektronenoberflächenwelle in Verbindung gebracht werden kann. b) Das  $dI/dU$ -Spektrum der Co-DL zeigt Peaks bei  $E - E_F = 0,24 \text{ eV}$ , sowie bei  $E - E_F = 1,77 \text{ eV}$ , die durch Zustände der stehenden Elektronenwellen mit  $\lambda = 2,53 \text{ nm}$  und  $\lambda = 1,27 \text{ nm}$  hervorgerufen werden können. c) Dispersionsrelation für 2 ML Co/Cu(111) [Die03]. Die roten Punkte stellen Daten für 2 ML Co/W(110) dar.

stufenkante. Bei  $U = 0,3 \text{ V}$  beobachtet man eine Höhenmodulation von  $10 \text{ pm}$  auf den DL-Inseln. Die parallelen Linien verlaufen alle in  $\text{bcc}[1\bar{1}0]$ -Richtung. Noch besser kann diese Struktur im entsprechenden STS-Bild beobachtet werden (siehe Abbildung 5.10 b)). Die Linien, hervorgehoben durch die Selbstkorrelation der entsprechenden Bereiche, weisen genau den doppelten Abstand des engen Versetzungsliniennusters in der cp-ML auf. Im DL-Spektrum beobachtet man u. a. einen Peak bei  $E - E_F = (210 \pm 50) \text{ meV}$ , der auch für das System 2 ML Co/Cu(111) von L. Diekhöner [Die03] bereits beobachtet wurde und als *sp*-Majoritäts-Oberflächenzustand identifiziert wurde. Dieser unbesetzte Zustand zeigte eine freie Dispersion, entsprechend des freien Elektronengas mit einer effektiven Masse von  $m_{eff}/m_e = (0,38 \pm 0,01)$  [Die03], die aus dem Quanteninterferenzmuster, d. h. einer stehenden Elektronenoberflächenwelle abgeleitet wurde. In unserem Raumtemperatur-Experiment erwartet man eine starke Dämpfung der stehenden Elektro-



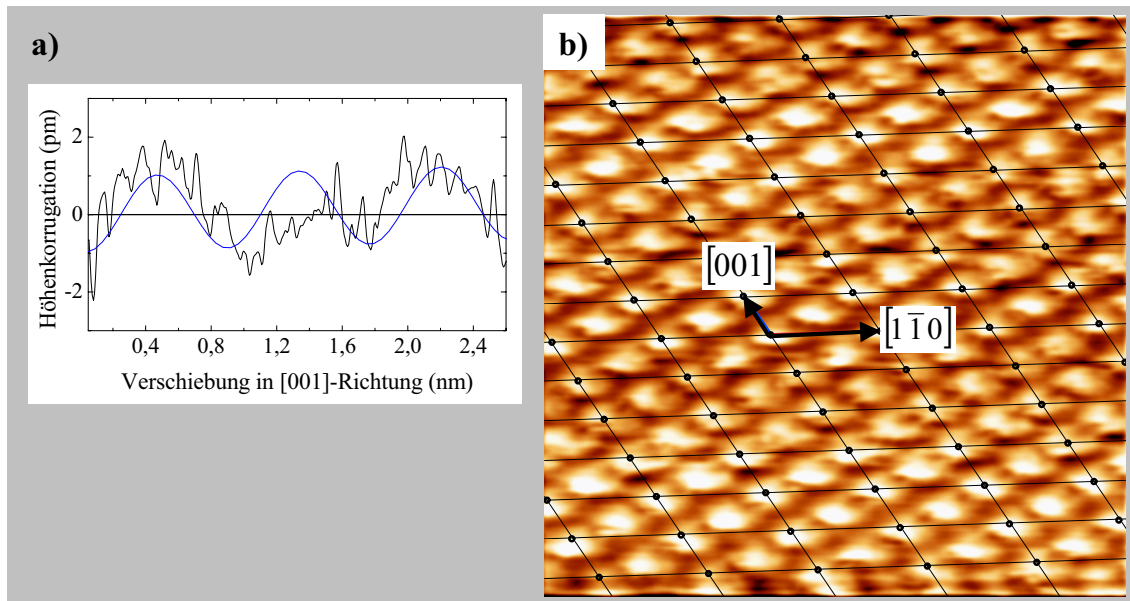


Abbildung 5.9: Atomar aufgelöstes STM-Bild einer Co-DL Insel ( $U = -60$  mV,  $I = 0,78$  nA). Alle Atome liegen im Gegensatz zur cp-ML auf einer Geraden entlang der [001]-Richtung. Man beobachtet keine Modulation der atomaren Abstände. Die Verscherung des Bildes in  $-[1\bar{1}0]$ -Richtung kommt durch eine Drift des Scanners zustande (der Bildaufbau findet von unten nach oben statt). Das über die gesamte Bildbreite gemittelte und mit einem Sinus-Fit versehene Höhenprofil zeigt eine Korngung von nur 2 pm.

nenwellen. Auf der anderen Seite kann die  $(8 \times 1)$ -Überstruktur von Co/W(110) eine stehende Welle mit einer Wellenlänge von  $2 \cdot \lambda = 2 \cdot (8 \cdot a_W / 2) = 2,53$  nm induzieren. Trägt man für diese Wellenlänge die gemessene Energie des Zustands für Co/W(110) in die Dispersionsrelation von L. Diekhöner für das System 2 ML Co/Cu(111) ein, so stellt man eine gute Übereinstimmung fest (siehe Abbildung 5.8 c)). Ferner sollte es auch möglich sein, höhere Schwingungsmoden in der  $(8 \times 1)$ -Überstruktur anzuregen, z. B. mit der halben Wellenlänge  $\lambda = 1,27$  nm. Auch hier findet man im Spektrum einen entsprechenden Peak bei  $E - E_F = (177 \pm 50)$  meV. Allerdings konnte bei der Spannung von  $U = 1,77$  V keine entsprechende Struktur auf den DL Co-Inseln beobachtet werden. Das kann aber auch durch eine zu kleine Amplitude der stehenden Welle erklärt werden. Abbildung 5.9 zeigt ein atomar aufgelöstes STM-Bild. Bei einer Spannung von  $U = -60$  mV beobachtet man nur noch eine sehr geringe Höhenmodulation von ca. 2 pm. Dies ist ein weiterer Hinweis dafür, dass es sich bei der beobachteten Überstruktur nicht um einen rein topographischen Effekt handeln kann. Im Gegensatz zur Co-ML tritt weder eine Modulation der Atompositionen in [001]-Richtung, noch in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung auf. Zur Verdeutlichung ist über das STM-Bild ein Gitternetz in den entsprechenden Kristallrichtungen gelegt.

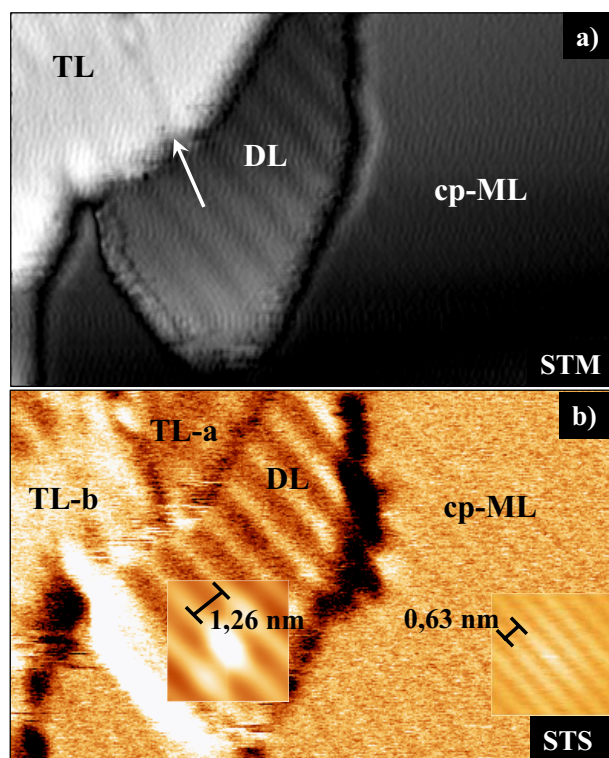


Abbildung 5.10: STM/STS-Aufnahme ( $15 \times 10$ )  $\text{nm}^2$  eines 1,4 ML dicken Co-Films auf W(110), präpariert bei  $T_P = 350$  K. a) Die Topographie der Probe ( $U = 0,3$  V,  $I = 0,5$  nA) zeigt ML-, DL- und TL-Bereiche. b) Entsprechendes STS-Bild der Probe. Eingefügt ist eine Selbstkorrelation für einen Bereich der ML, bzw. DL-Insel zur Veranschaulichung der periodischen Überstruktur. Der Abstand der Versetzungslinien ist auf der DL-Insel im Vergleich zu dem ML-Bereich genau doppelt so groß. Ferner gibt es zwei verschiedene TL-Bereiche, die sich bei  $U = 0,3$  V im Kontrast unterscheiden.

Die Drift des Scanners in  $-[1\bar{1}0]$ -Richtung ist ein Artefakt der Messung und kann durch Verscherung des Bildes korrigiert werden. Die Atompositionen stimmen sehr gut mit den Gitterpunkten überein.

### 5.3 Die Tripellage Co

Für die Tripellagen-Inseln Co/W(110) findet man zwei verschiedene  $dI/dU$ -Spektren, die sich im Wesentlichen nur in den Peaks bei  $U = -0,4$  V und  $U = 0,3$  V unterscheiden. Die beiden Spektren sind in Abbildung 5.11 a) dargestellt und mit TL-a und TL-b bezeichnet. Der relative Unterschied ist gegeben durch  $I_{rel} = c \cdot (dI/dU)_{TL-a} / (dI/dU)_{TL-b} - 1$ , wo-

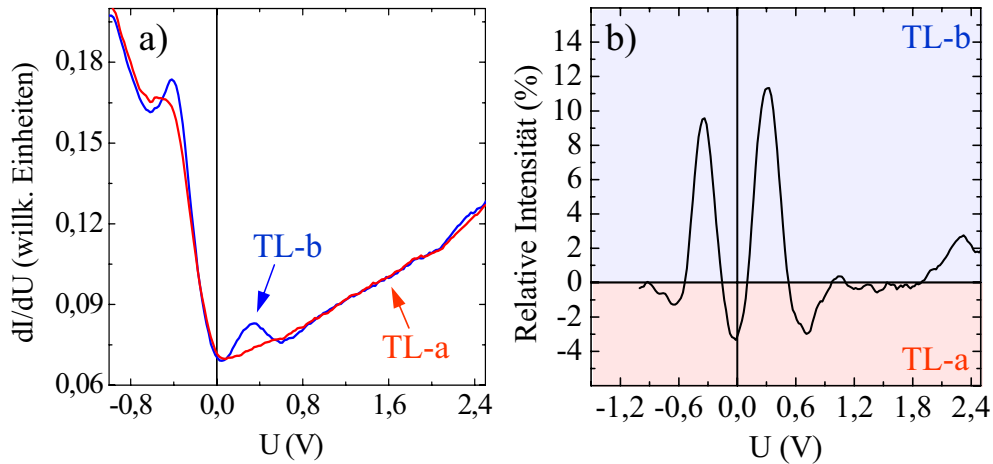


Abbildung 5.11: a) Spektrum der differentiellen Leitfähigkeit für Tripellagen-Inseln TL-a (hcp) und TL-b (fcc). Abbildung b) zeigt den relativen Unterschied beider Spektren. Höchste Kontraste zwischen TL-a und TL-b sollten sich bei  $U = -0,4$  V und  $U = 0,3$  V im Spektroskopiebild ergeben.

bei  $c = 1,03$  ein Normalisierungsfaktor ist, der so gewählt wird, dass sich für  $U = \pm 1$  V  $I_{rel} = 0$  ergibt. Bei einer Spannung von  $U = 0,3$  V liegt der Kontrast zwischen TL-a und TL-b bei  $I_{rel} = 11$  % und sollte damit für STS-Bilder zur Unterscheidung beider Bereiche am geeignetsten sein. In Abbildung 5.10 b) ist oben links eine Co-TL dargestellt, die zwei unterschiedliche Helligkeiten aufweist. Im zugehörigen Topographiebild a) erkennt man einen kleinen Graben zwischen beiden TL-Teilen (siehe Pfeil), der eine Versetzungslinie zwischen zwei verschiedenen Wachstumsarten des Co darstellt. Die naheliegendste Erklärung sind unterschiedliche atomare Stapelfolgen, wie hcp und fcc. Gleichzeitiges Auftreten von fcc- und hcp-Stapelfolgen für das Wachstum einer cp(111) Lage wurde bereits für andere Systeme diskutiert [dP00] und auch für dickere Co-Filme auf W(110) beobachtet [Wie03] [Wie04]. A. L. Vasquez de Parga [dP00] zeigte für Co/Cu(111) das parallele Auftreten von hellen und dunklen Co-Inseln, obwohl in den Tunnelspektren der Co-TL Inseln kein Peak unterhalb von 0,5 eV auftrat. Dickere Co/Cu(111)-Filme dagegen zeigten einen großen Unterschied in der Tunnelleitfähigkeit. Während bei fcc-gewachsenen Inseln ein scharfer Peak bei 0,5 eV auftrat, wird dieser Peak bei hcp-Inseln klein und breit. Diese Beobachtung wurde in Referenz [dP00] durch die Minoritätsbänder eines  $d_{xz} - d_{yz}$ -Orbitals, das für fcc-Co bei  $\bar{\Gamma}$  degeneriert ist, erklärt. Nach den Bandstrukturechnungen entsteht bei hcp-Co durch die unterschiedliche Überlappung der Orbitale eine Lücke am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt. Bei kleinen Bedeckungen Co/Cu(111) ( $< 5$  ML) tritt überwiegend die fcc-Stapelfolge auf [Hei99]. Eine Vermischung von Co und Cu findet schon bei Raumtemperatur statt [Rab94], was möglicherweise die Abweichungen zu den hier gemessenen Spektren erklären könnte. L. Diekhöner [Die03] legte verstärkten Wert auf die

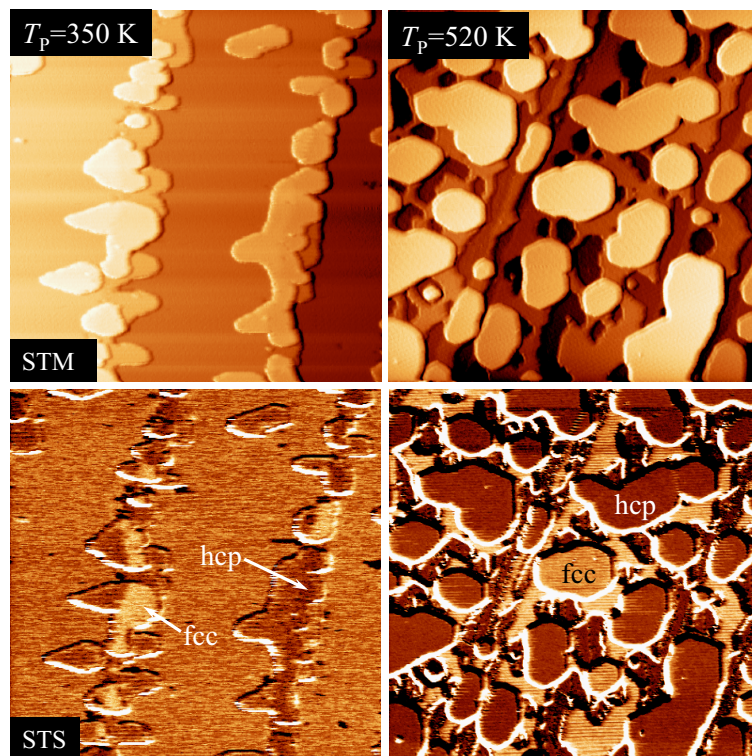


Abbildung 5.12: STM/STS-Aufnahmen von 1,4 ML bzw. 1,6 ML Co/W(110) bei  $T_P = 350\text{ K}$  ( $50 \times 50$ )  $\text{nm}^2$  und  $T_P = 520\text{ K}$  ( $100 \times 100$ )  $\text{nm}^2$  präpariert. Die Bilder sind bei  $U = 0,3\text{ V}$ ,  $I = 0,5\text{ nA}$  und  $U_{mod} = 50\text{ mV}$  aufgenommen.

Vermeidung von Vermischungen. So wurde die Probe nach der Präparation bei Raumtemperatur sofort auf  $6\text{ K}$  abgekühlt. In diesem Fall ist das Tunnelspektrum von L. Diekhöner unserem Tunnelspektrum für die DL Co/W(110), bzw. TL-b Co/W(110) ähnlich. Eine weitere Untersuchung dicker ( $8\text{ nm}$ ) hcp-Co(0001)-Filme auf Au(111) und SrTiO<sub>3</sub>(111) [Oku02] zeigte einen Peak unterhalb der Fermi-Energie bei  $-0,43\text{ eV}$  für verschiedene Spitzenmaterialien, aber keinen bei positiven Spannungen, in Übereinstimmung zu dem Spektrum der TL-a Co-Iseln. Obwohl man zwei verschiedene Erklärungen des Peaks bei  $0,3\text{ eV}$  ( $d_{xz} - d_{yz}$  Minoritätszustand [dP00] oder  $sp$ -Majoritätszustand [Die03]) findet, gibt es experimentelle Hinweise für das Auftreten des Peaks bei der fcc-Stapelfolge. Dies bedeutet, dass die TL-a mit der hcp-Stapelfolge identifiziert werden kann.

Aus großflächigen STS-Aufnahmen (Abbildung 5.12) kann ein Verhältnis der Flächenanteile einer Präparation bei Raumtemperatur für fcc- und hcp-Co von  $1:3$  abgeschätzt werden. Erhöht man die Präparationstemperatur auf  $T_P = 520\text{ K}$  ist das Vorkommen von fcc-Iseln äußerst selten (Abbildung 5.12). Diese Bevorzugung des hcp-Wachstums von Co/W(110) ist in Übereinstimmung mit früheren strukturellen Untersuchungen [Kno93]

und mit einer Untersuchung der magnetischen Anisotropie, die einen Volumenbeitrag nahe dem Volumenwert von hcp-Co ergeben hat [Fri95b]. Zu erwarten ist, dass Co im thermodynamischen Gleichgewicht die Volumen-hcp-Phase annimmt. Die Tatsache, dass mit zunehmender Präparationstemperatur der hcp-Anteil der Inseln ansteigt, bestätigt also unsere Zuordnung der zwei Klassen von Spektren zu den entsprechenden Stapelfolgen. Neuere Rechnungen zeigen, dass die Energie für fcc-Co 11 meV/Atom höher liegt als für die hcp-Stapelfolge [Wie04].

## 5.4 Zusammenfassende Diskussion der Spektren

Die Aufnahme der Spektren erfolgte für alle Strukturen bei Stabilisationsparametern von  $U = 1 \text{ V}$ ,  $I = 0,5 \text{ nA}$  und einer Modulationsamplitude von  $U_{mod} = 50 \text{ mV}$  mit  $\nu = 8 \text{ kHz}$ . Dabei wurden jeweils zehn  $dI/dU$ -Spektren gemittelt, um das Rauschen zu reduzieren. Eine Zusammenfassung der Spektren für 1-3 ML Co ist in Abbildung 5.13 zu sehen. Die Spektren zeigen für verschiedene Strukturen signifikante Unterschiede. Während die Spektren für Spannungen zwischen  $U = -1 \text{ V}$  und  $U = 3 \text{ V}$  reproduzierbar sind, ergeben sich für Spannungen  $U < -1 \text{ V}$  Strukturen die stark durch Spitzenzustände induziert werden. Je nach Präparation der Pt-Ir-Spitze mit Spannungspulsen können auch bei  $U = -1,5 \text{ V}$  und  $U = -2,5 \text{ V}$  Peaks auftreten, die aber nicht von der Probenstruktur abhängen. Da in erster Näherung die differentielle Tunnelleitfähigkeit proportional zur lokalen Zustandsdichte (LDOS) der Probe am Ort der Spitze und zur Tunnelwahrscheinlichkeit (siehe auch Kapitel 2) ist, stellen die beobachteten Peaks Oberflächenzustände oder resonante Zustände, die außerhalb der Probenoberfläche auftreten, dar. Die Peakhöhe hängt stark von dem Abstand Spitze-Probe ab. Vergleichbare Spektren kann man mit Hilfe einer Normalisierung mit der Leitfähigkeit  $I/U$  erhalten [Oku02]. Die Spektren in Abbildung 5.13 sind nicht normalisiert, allerdings wurde der Abstand Spitze-Probe für alle Spektren konstant gewählt. Da eine unmagnetische Spitze verwendet wurde, tragen Majoritäts- und Minoritäts-Spinzustände gleichwertig zu den Spektren bei. Obwohl die Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt wurden, sollte die Austauschspaltung auch für  $T > T_C$  aufgrund von lokalen Spinwechselwirkungen weiterhin existieren [Kis85] [Get98]. Daher sollte man die gemessenen  $dI/dU$ -Spektren mit Grundzustandsbandstrukturrechnungen unter Berücksichtigung der Austauschspaltung vergleichen können.

In allen Spektren tritt eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Schulter bei  $E - E_F = 2,3 \text{ eV}$  auf (in Abbildung 5.13 mit (a) gekennzeichnet). Eine solche Struktur bei ähnlicher Energie konnte auch bei der ps-ML Fe/W(110) und Mn/W(110) beobachtet werden (siehe auch Kapitel 6). Es könnte sich daher um einen Oberflächenzustand handeln, der nur schwach von der elektronischen Struktur der Probe beeinflusst wird. Im Spektrum der ps-ML Co beobachtet man zusätzlich einen ausgeprägten Peak bei  $(620 \pm 50) \text{ meV}$  und einen

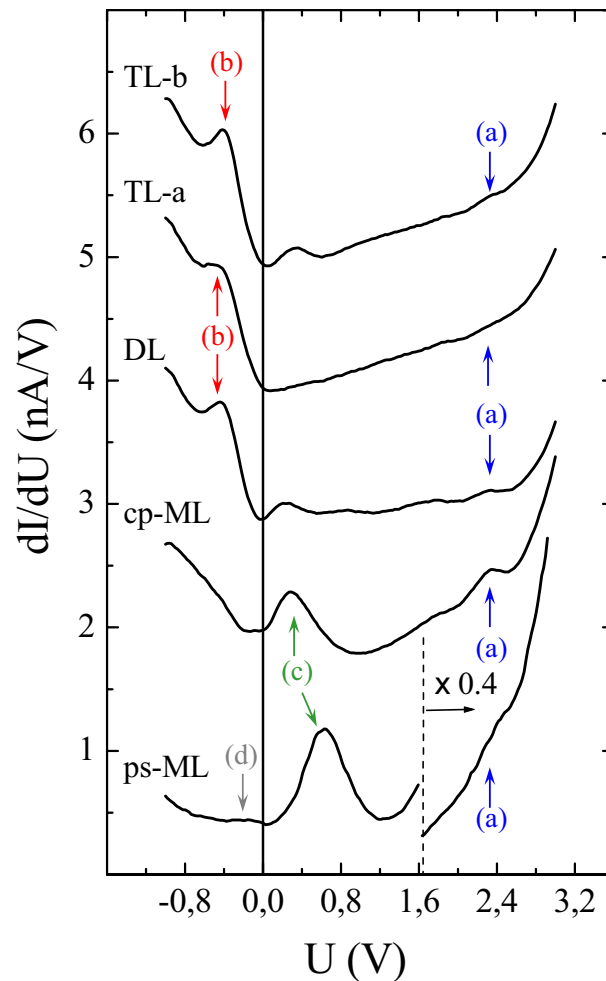


Abbildung 5.13: Zusammenfassung aller gemessenen differentiellen Leitfähigkeitsspektren für das System Co/W(110). Der Abstand Spitze-Probe ist für alle Spektren konstant (Stabilisierungsparameter  $U = 1$  V,  $I = 0,5$  nA). Es wurden jeweils 10 Spektren gemittelt.

schwachen Peak bei  $-(180 \pm 50)$  meV (Peak (d)). Letzterer wurde bereits mit Hilfe von Photoemission gemessen und mit einem Minoritäts- $d_{yz}$ -Zustand in Verbindung gebracht [Kno93]. Für die dicht gepackte Monolage existieren Bandstrukturrechnungen nur für eine freitragende Co-Monolage. Ein degenerierter Zustand bei  $\bar{\Gamma}$  mit  $d_{xz} - d_{yz}$ -Charakter bei 0,3 eV könnte mit dem beobachteten Peak bei  $(290 \pm 50)$  meV in Verbindung gebracht werden. Eine quantitative Übereinstimmung wäre sehr überraschend, da Co sehr stark mit dem Wolfram-Substrat wechselwirkt. Andererseits dominiert die laterale Wechselwirkung die zweidimensionalen Bänder wegen der hohen Koordinationszahl.

Die Spektren der DL und TL weisen einen Peak bei  $E - E_F = -(430 \pm 50)$  meV

bzw.  $-(390 \pm 50)$  meV auf (Peak (b)). Da diese Struktur nicht für die Co-Monolage oder das reine Wolframsubstrat beobachtet werden kann, ist ein spitzeninduzierter Zustand auszuschließen. Mit Hilfe von Zustandsdichterechnungen für 12 ML Co/W(110) konnte bei  $-0,3$  eV eine  $d_{3z^2-r^2}$ -artige Oberflächenresonanz mit einem Minoritätsspincharakter gefunden werden [Wie04]. Prinzipiell sollte man die Spektren dickerer Co-Lagen auch mit Spektren von Co/Cu(111) vergleichen. Eine ähnliche Struktur wurde für 2-4 ML Co/Cu(111) von L. Diekhöner gefunden [Die03]. Mit Hilfe von Berechnungen der LDOS wurde dieser Peak unterhalb  $E_F$  allerdings einem Minoritäts- $d_{3z^2-r^2}$ -Oberflächenzustand mit einem Beitrag von einem  $sp$ -Minoritätszustand zugeordnet. Der Minoritätscharakter wurde mit Hilfe von spinpolarisierten Messungen mit einer magnetischen Spitze bestimmt [Oku02]. Der Peak, den man bei  $(210 \pm 50)$  meV beobachtet, ist vergleichbar mit dem der DL-Co Inseln auf Cu(111) [Die03]. Dieser Peak wurde einem  $sp$ -Majoritäts-Oberflächenzustand zugeordnet. Nur bei der fcc-gewachsenen TL-Co findet man einen Peak bei ein wenig höherer Energie von  $(330 \pm 50)$  meV. In Referenz [dP00] wird er einem  $d_{xz} - d_{yz}$  Minoritätszustand zugeordnet, während L. Diekhöner [Die03] von einem  $sp$ -Majoritätszustand spricht.

## 5.5 Atomare Stapelfolgen und Versetzungen in der Doppel- und Tripellage Co

In einem dicht gepackten Atomgitter kann eine fcc- oder hcp-Stapelfolge auftreten. Bezeichnet man die Position der Atome der untersten Lage mit A, so können die Atome der zweiten Lage zwei mögliche Positionen in den sich ergebenden Zwickeln der ersten Lage einnehmen (Position B und C). Geht man davon aus, dass die erste Monolage Co komplett geschlossen auf einer W-Terrasse aufwächst, so ergeben sich folgende Kombinationen der atomaren Anordnung:

1. Für fcc-Wachstum: ABC und ACB.
2. Für hcp-Wachstum: ABA und ACA.

Das Wachstum der fcc- und der hcp-Bereiche kann aufgrund der unterschiedlichen elektronischen Struktur mit der Rastertunnelspektroskopie unterschieden werden (siehe Kapitel 5.3). Die Stapelfolgen AB und AC in der Doppellage sind von der elektronischen Struktur völlig äquivalent zueinander und können daher nicht mit Hilfe der Spektroskopie zugeordnet werden. Es entsteht aber an der Grenze zwischen einem AB- und einem AC-Bereich eine Versetzungslinie, bei der die elektronische Struktur lokal geändert ist. Eine anschauliche Erklärung liefert ein einfaches Hartkugelmodell für die dichteste Kugelpackung. In Abbildung 5.14 sind DL- und TL-Inseln mit den möglichen Stapelfolgen

dargestellt. Die Co-Inselkanten verlaufen bevorzugt entlang der hcp[10 $\bar{1}$ 0], [0 $\bar{1}$ 10], sowie der [ $\bar{1}$ 100]-Richtung. Somit ergeben sich für eine DL-Co Insel zwei verschiedene Stufenarten an den Inselrändern, die sich in der relativen Anordnung der Atome unterscheiden (siehe Abbildung 5.14) und für die weitere Betrachtung mit  $A$  und  $B$  bezeichnet werden. Das Ausbilden der beiden Stufenkanten an den Inselrändern ist für Co energetisch ähnlich, was sich in einer hexagonalen Inselform zeigen kann. Eine größere Energiedifferenz zwischen den beiden Stufenarten würde zu einer dreieckigen Inselform führen, wie z. B. bei dem Wachstum von dicht gepackten Ir/Ir(111) beobachtet wurde [Bus03b]. Bei der hexagonalen Inselform treten die  $A$ - und  $B$ -Stufen immer abwechselnd auf, d. h. gegenüberliegende Rändern sind mit der jeweils komplementären Stufenart versehen. Wachsen nun bei der Präparation zwei DL-Inseln zusammen, so bildet sich beim Aufeinandertreffen zweier gleichnamiger Stufenarten eine Versetzungslinie. Dabei treten zwei verschiedene Arten von Versetzungslinien auf, die mit  $A$ - $A$ - oder  $B$ - $B$ -Versetzung bezeichnet werden und die zwei verschieden breite Gräben aufweisen:

$$d_{A-A} = 4 \cdot \frac{a_{Co}}{2\sqrt{3}} \approx 0,289 \text{ nm} \quad , \quad d_{B-B} = 5 \cdot \frac{a_{Co}}{2\sqrt{3}} \approx 0,362 \text{ nm}. \quad (5.6)$$

Bei einer TL-Co Insel tritt eine Doppelstufe auf, die entsprechend mit zwei kursiven Buchstaben bezeichnet werden. Dabei ergeben sich vier verschiedene Stufenarten vom Typ  $AA$ ,  $BB$ ,  $AB$  und  $BA$ , wovon bei einer TL-Insel immer nur zwei komplementäre Stufenarten auftreten und sich bei einer hexagonalen Inselform abwechseln. Wachsen zwei TL-Inseln zusammen, so können 16 verschiedene Typen des Übergangs durch die Kombination der vier Stufenarten auftreten. Bei vier Übergängen ergibt sich allerdings keine Versetzung (Übergänge:  $AB$ - $BA$ ,  $AA$ - $BB$ ,  $BA$ - $AB$ ,  $BB$ - $AA$ ), da hier zwei Inseln mit der gleichen Stapelfolge aufeinandertreffen. Bei den restlichen 12 Übergängen liegt eine Versetzung vor. In Abbildung 5.15 sind alle möglichen 12 Übergänge dargestellt, wobei komplementäre Versetzungsarten untereinander aufgeführt sind. Manche Versetzungen sind in ihrer elektronischen Struktur völlig äquivalent zueinander, da die atomare Anordnung im Bereich der Versetzung spiegelsymmetrisch auftritt. Somit lässt sich die Zahl unterschiedlicher Übergänge auf 8 reduzieren:

1. fcc  $\leftrightarrow$  hcp:  $AB$ - $AA$   $\Leftrightarrow$   $AA$ - $AB$
2. fcc  $\leftrightarrow$  hcp:  $BA$ - $BB$   $\Leftrightarrow$   $BB$ - $BA$
3. fcc  $\leftrightarrow$  hcp:  $AA$ - $BA$   $\Leftrightarrow$   $BA$ - $AA$
4. fcc  $\leftrightarrow$  hcp:  $AB$ - $BB$   $\Leftrightarrow$   $BB$ - $AB$
5. fcc  $\rightarrow$  fcc:  $AA$ - $AA$



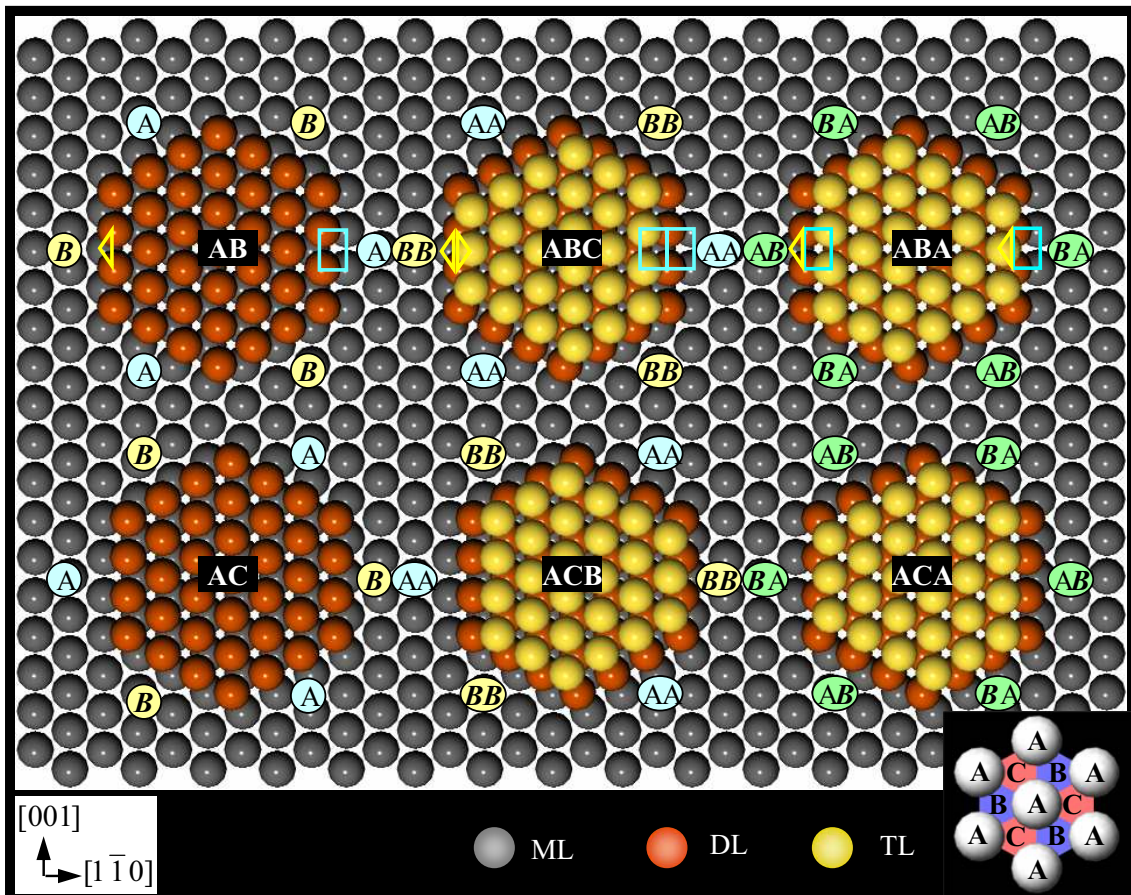


Abbildung 5.14: Hartkugelmodell von dicht gepackten DL- und TL-Inseln für die möglichen Stapelfolgen bei konstanter Monolagenposition A. Die möglichen Stufenarten sind mit kursiven Buchstaben bezeichnet. Bei einer hexagonalen Inselform treten immer zwei komplementäre Stufenarten abwechselnd auf.

6. fcc  $\leftarrow$  fcc: *BB-BB*
7. hcp  $\rightarrow$  hcp: *AB-AB*
8. hcp  $\leftarrow$  hcp: *BA-BA*

Ein qualitatives Maß für die Dichte der Atome in der Versetzungslinie lässt sich durch die Bestimmung der atomaren Abstände in der DL und TL ermitteln. Die Werte sind in der Abbildung 5.15 in Einheiten von  $a_{Co}/(2\sqrt{3})$  angegeben. Weitere Übergänge sind aufgrund von gleichen gemittelten Abständen der DL und TL im Bereich der Versetzung ähnlich zueinander. Zur Vereinfachung werden im Folgenden die sich ergebenden vier

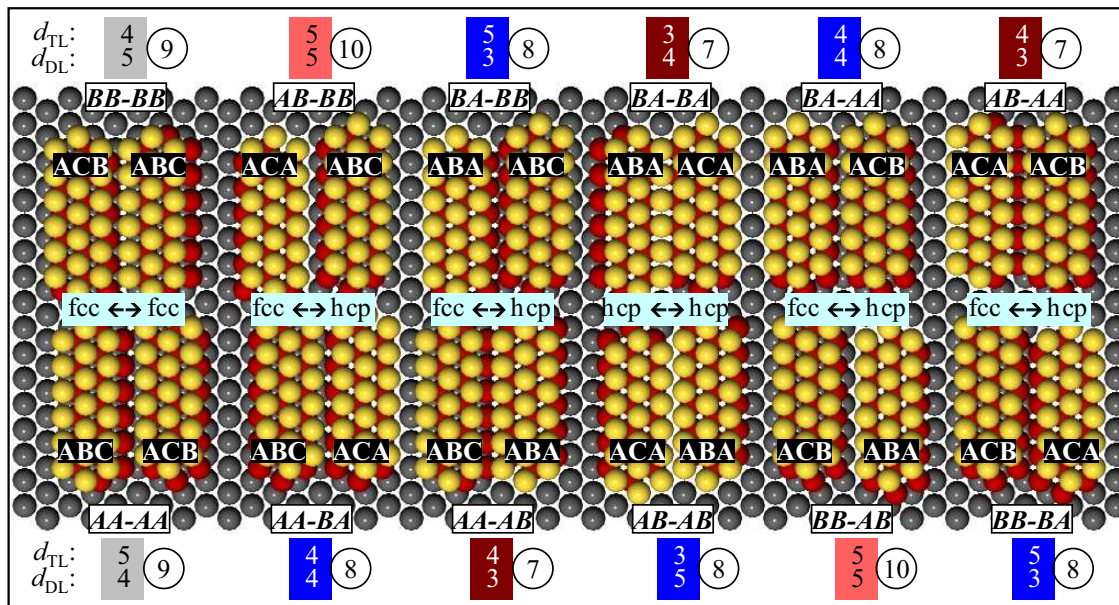


Abbildung 5.15: Hartkugelmodell aller möglichen Versetzungen eines dicht gepackten TL-Systems. Übereinander sind jeweils komplementäre Versetzungstypen aufgeführt. Aufgrund des gleichen mittleren Abstands der Atome von DL und TL im Bereich der Versetzung sind einige Übergänge zueinander ähnlich und mit Typ-7 bis -10 bezeichnet, wobei die Nummer des Typs die Addition der Abstände in der DL und TL in Einheiten von  $a_{Co}/(2\sqrt{3})$  darstellt.

Versetzungstypen mit einer Nummer von 7 bis 10 bezeichnet, die der Addition der Abstände von DL und TL in Einheiten von  $a_{Co}/(2\sqrt{3})$  entspricht:

1. Typ-7 Versetzung:  $AB-AA \Leftrightarrow BA-BA \Leftrightarrow AA-AB$ ,
2. Typ-8 Versetzung:  $BA-AA \Leftrightarrow AB-AB \Leftrightarrow BA-BB$ ,
3. Typ-9 Versetzung:  $AA-AA \Leftrightarrow BB-BB$ ,
4. Typ-10 Versetzung:  $AB-BB \Leftrightarrow BB-AB$ .

Prinzipiell sollten die Übergänge von der einen zur anderen Stapelfolge mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie topographisch sichtbar gemacht werden können (siehe Referenz [Bus03a]). Im Co/W(110)-System ist die durch die Versetzungslinie hervorgerufene Änderung in der Topographie nur sehr klein (siehe Abbildung 5.10). Aufgrund der unterschiedlichen Atomabstände im Bereich der Versetzung und der damit einhergehenden geänderten elektronischen Struktur kann diese aber sehr gut mit Hilfe der Rastertunnelspektroskopie sichtbar gemacht werden. Dazu wurde zunächst eine Serie von STS-Aufnahmen

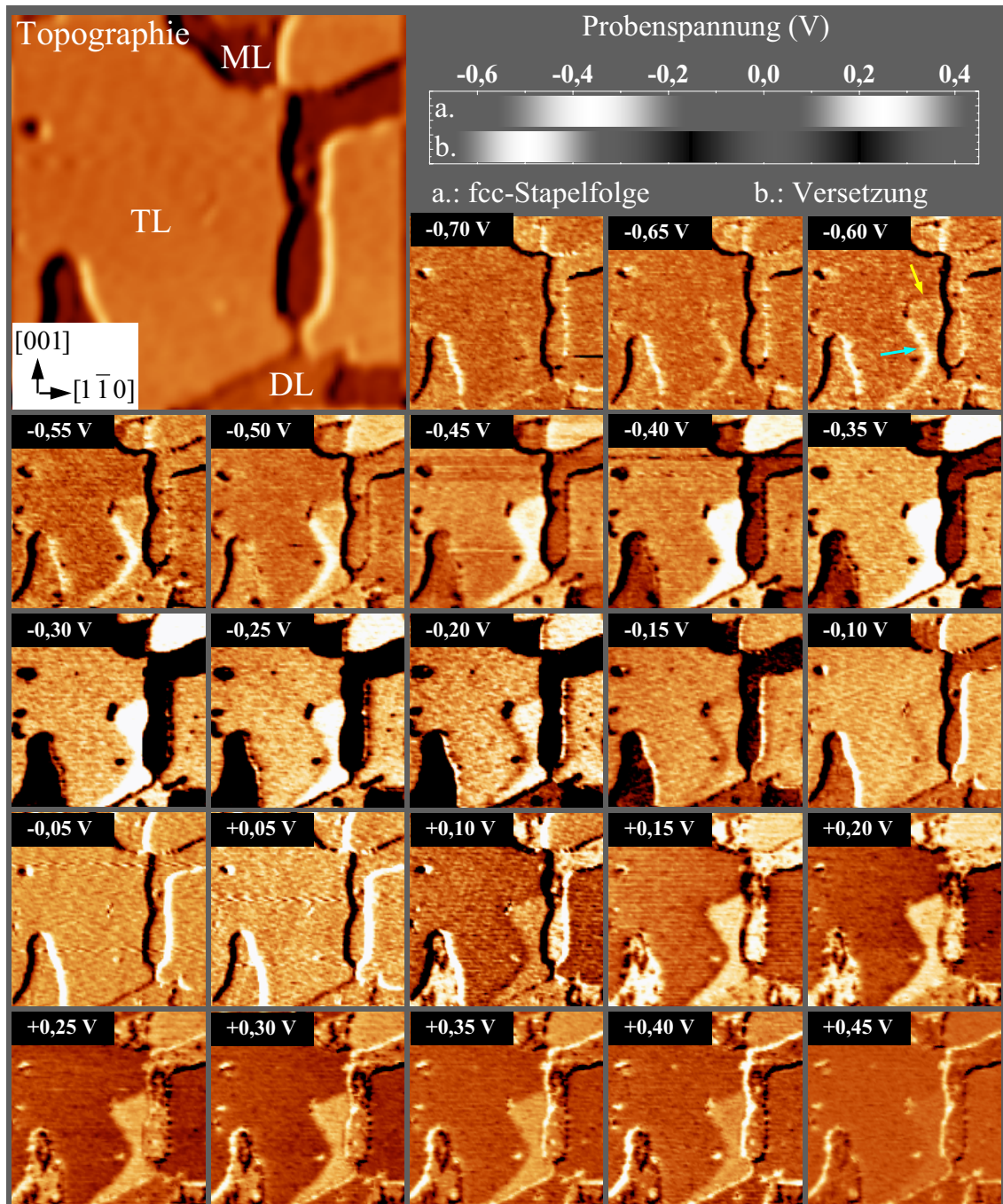


Abbildung 5.16:  $(50 \times 50) \text{ nm}^2$  STS-Aufnahmen ( $I = 0,6 \text{ nA}$ ) einer TL-Co Insel, bestehend aus einem hcp und einem fcc gewachsenen Bereich für verschiedene Probenspannungen. Das Intensitätsdiagramm gibt qualitativ den Kontrast für die fcc-Bereiche (a.) und die Versetzungslinie (b.) an der Grenze zweier unterschiedlicher Stapelfolgen in Abhängigkeit der angelegten Probenspannung an. Bei  $U = -0,6 \text{ V}$  ist bereits eine richtungsabhängige Intensität der Versetzungslinie zu erkennen (mit Pfeilen gekennzeichnet).

mit variabler Probenspannung aufgenommen, wobei eine TL-Co Insel ausgewählt wurde, die sowohl einen hcp- als auch einen fcc-Bereich aufwies (siehe Abbildung 5.16). Die Probenspannung wurde in einem Bereich von  $-0,7$  V bis  $+0,45$  V variiert und  $dI/dU$ -Bilder aufgenommen. Wie bereits erwartet erscheinen die fcc-Bereiche im Vergleich zu den hcp-Bereichen bei  $-0,4$  V und  $+0,3$  V als helle Flächen. In einem Spannungsbereich von  $-0,65$  V bis  $-0,35$  V erkennt man außerdem eine helle Grenzlinie zwischen dem hcp/fcc-Übergang, die die atomare Versetzung anzeigt. Zwischen  $-0,25$  V bis  $-0,1$  V kehrt sich der Kontrast der Grenzlinie um und sie erscheint dunkel, ebenso wie bei positiven Probenspannungen zwischen  $+0,1$  V und  $+0,2$  V mit etwas geringerem Kontrast. Den höchsten Kontrast zur Auflösung der Versetzungslinie erreicht man aber in einem Spannungsbereich zwischen  $-0,45$  V und  $-0,4$  V, in dem auch alle nachfolgenden Bilder aufgenommen wurden. Eine Richtungsabhängigkeit des Kontrastes fällt bereits bei der  $dI/dU$ -Aufnahme bei  $-0,6$  V auf. Die obere Grenze des fcc-Bereichs zeigt keinen Kontrast (gelber Pfeil), während die Grenzlinie auf der linken Seite der Insel, die einen kleineren Winkel zur  $[001]$ -Richtung bildet, hell erscheint.

Noch besser kann man diesen Unterschied in Abbildung 5.17 b) erkennen. Hier ist eine spektroskopische Aufnahme einer TL-Co Inseln zu sehen, die aus einem hcp-Bereich besteht, der von fcc-Bereichen umgeben wird. Nominell wurden 3 ps-ML bei  $T_P = 420$  K präpariert. Es fällt auf, dass zwei verschiedene fcc/hcp-Übergänge an gegenüberliegenden Rändern des hcp-Bereichs existieren. Der eine weist die helle Grenzlinie auf, der andere zeigt keinen spektroskopischen Kontrast bei der angelegten Probenspannung von  $U = -0,4$  V. Wie durch das Hartkugelmodell motiviert (Abbildung 5.15), sollten hier zwei komplementäre Arten des Übergangs vorliegen. Auffällig ist auch, dass der Übergang scheinbar nicht von der kristallographischen Richtung abhängig ist, sondern auf der ganzen Länge der Versetzung entweder komplett hell oder dunkel erscheint. Dieser scheinbare Widerspruch zu dem Hartkugelmodell lässt sich leicht erklären. Aufgrund der Gitterfehlpassung der Co-Atome in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung von  $f_{[1\bar{1}0]} = -0,032$  im Vergleich zur Volumengitterkonstanten werden beim Wachstum der Co-Inseln bevorzugt Kanten entlang der  $[001]$ -Richtung ausgebildet, um Inselränder mit möglichst kleinem Atomabstand auszubilden. Daher ist die bevorzugte Richtung der Versetzungslinie ebenfalls entlang der  $[001]$ -Richtung. Abweichungen der Versetzungslinie von dieser Richtung werden durch die Ausbildung kleinerer Teilstücke mit energetisch ungünstigeren Richtungen und der komplementären Übergangsart auf atomarer Ebene kompensiert. Durch Überlagerung der lokalen elektronischen Strukturen erscheint dann die gesamte Versetzungslinie auch bei kleinen Richtungsänderung immer hell oder dunkel. Bei genauerer Betrachtung weiterer Spektroskopiebilder findet man qualitativ eine Abnahme der Breite bzw. Intensität der Versetzungslinie mit der Größe der Abweichung von der  $[001]$ -Richtung. Abbildung 5.17 c) zeigt das Linienprofil durch eine helle Grenzlinie. Der Gaussfit liefert eine Halbwertsbreite der elektronischen Störung von  $1,85$  nm, d. h. die elektronische Struktur wird noch weit über die topographische Versetzung hinaus beeinflusst. Ebenso ist nicht auszuschlie-

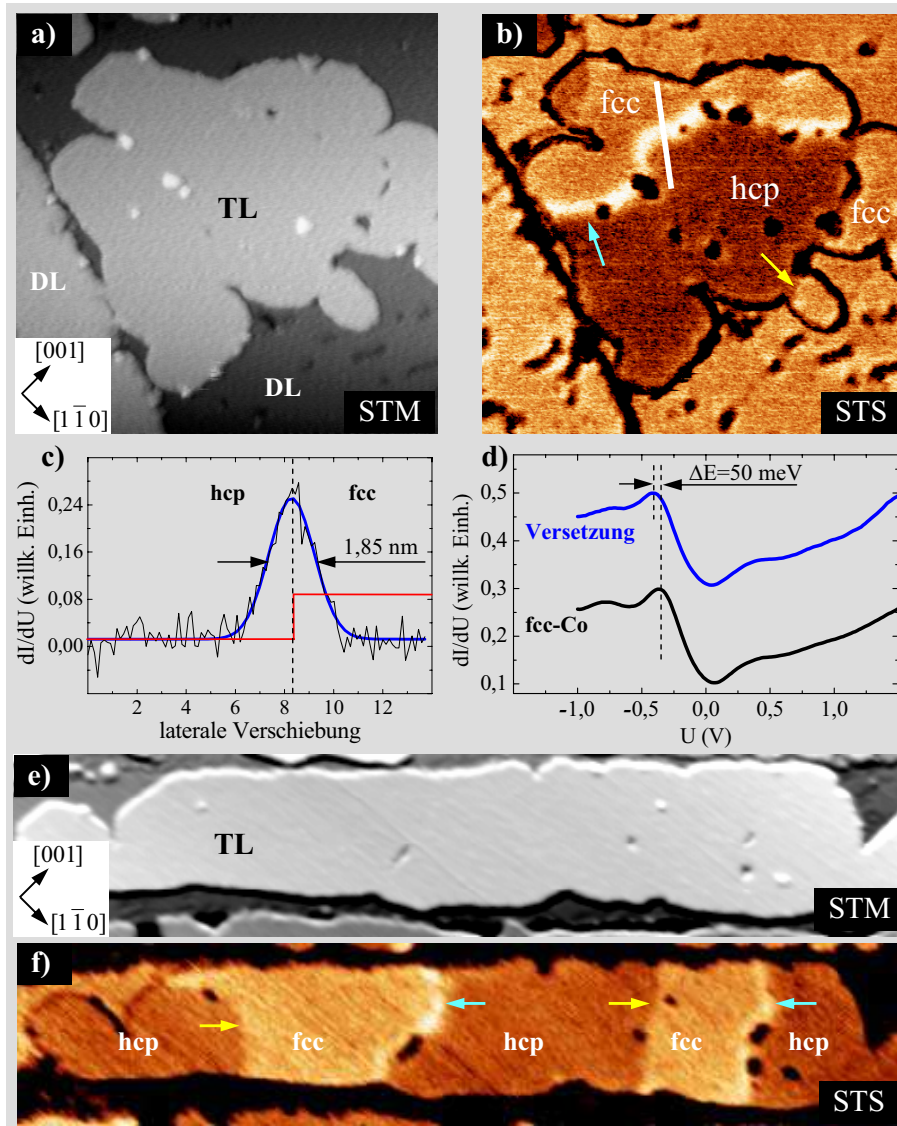


Abbildung 5.17: ( $50 \times 50$ ) nm<sup>2</sup> STM- a) und STS-Aufnahme b) einer TL-Co Insel ( $U = -0,4$  V,  $I = 0,55$  nA), die aus einem hcp-geordneten Bereich besteht, der von fcc-Bereichen umgeben ist. Man findet zwei Arten von Versetzungslinien, mit und ohne helle Linie an der Grenze. c)  $dI/dU$ -Profil durch eine hcp/fcc-Grenze entlang der weissen Linie in Abbildung b). Der Gaussfit an das Linienprofil wurde nach dem Abzug einer Stufenfunktion (rot dargestellt) durchgeführt und liefert eine Halbwertsbreite der elektronischen Störung von 1,85 nm. d)  $dI/dU$ -Spektrum von fcc-Co und im Bereich der Versetzung. Der Peak bei -0,4 eV im Spektrum der Versetzungslinie ist gegenüber dem fcc-Co-Spektrum um etwa 50 meV zu negativeren Energien verschoben. e) ( $130 \times 30$ ) nm<sup>2</sup> STM-Aufnahme eines TL-Co Streifens ( $U = -0,4$  V,  $I = 0,7$  nA,  $T_P = 420$  K) mit dem entsprechenden STS-Bild f). Die Bereiche von hcp- und fcc-Wachstum treten mit abwechselnden hellen und dunklen Versetzungen auf.

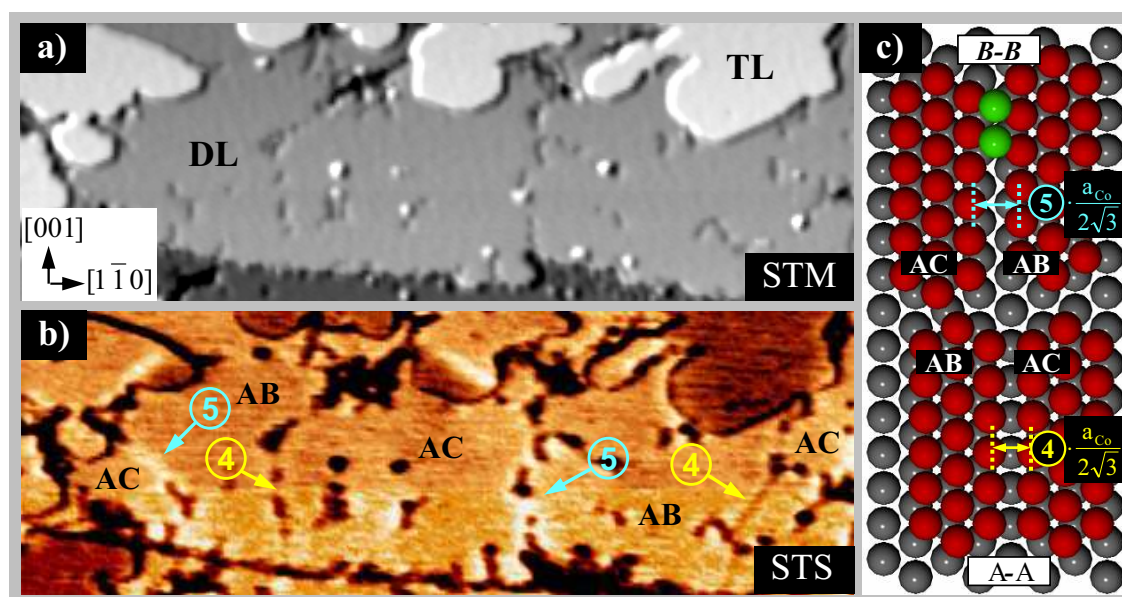


Abbildung 5.18: Topographische a) und spektroskopische ( $90 \times 30$ ) nm<sup>2</sup> Aufnahme b) einer DL-Co ( $U = -0,45$  V,  $I = 0,6$  nA). Auch hier beobachtet man zwei verschiedene Arten des Übergangs bei der Änderung der Stapelfolge. Entsprechend der Grabenbreite im Hartkugelmodell c) sind die Übergänge in Einheiten von  $a_{Co}/(2\sqrt{3})$  mit 4 und 5 bezeichnet.

ßen, dass auch weitere Atome in der Nähe einer Versetzungslinie von ihren Gitterplätzen abweichen, und somit die Änderung der elektronischen Struktur hervorrufen. Für höhere Co-Bedeckungen gelang es bereits, eine hcp/fcc-Versetzung atomar aufzulösen, wobei sich am Übergang ein Vernetzungsnetzwerk mit einer Breite von mehr als 3 nm ausbildete [Wie03]. Der Unterschied zwischen der hellen Versetzungslinie und einem fcc-Bereich äußert sich im  $dI/dU$ -Spektrum durch eine Verschiebung des Peaks bei  $-0,4$  V um etwa  $(50 \pm 20)$  mV zu negativeren Energien (siehe Abbildung 5.17 d)). Das abwechselnde Auftreten von hellen und dunklen hcp/fcc-Übergängen ist in Abbildung 5.17 e) und f) dargestellt. Der TL-Co Streifen weist abwechselnde hcp- und fcc-Bereiche auf, wobei sich die Stapelfolge nur in der obersten Atomlage verändert. Die Versetzungslinien verlaufen wiederum bevorzugt in [001]-Richtung. Dabei erscheint immer der hcp/fcc-Übergang dunkel und der fcc/hcp-Übergang hell, wobei man kleinere Helligkeitsschwankungen in Abhängigkeit der Grenzlinienrichtung beobachten kann.

Um eine Zuordnung des Versetzungstyps anhand des zuvor beschriebenen Hartkugelmodells vorzunehmen, betrachten wir zunächst die Doppellage Co. Hier können nur zwei verschiedene Arten des Übergangs auftreten, der A-A-Übergang ( $AB \rightarrow AC$ ) und der B-B-Übergang ( $AC \rightarrow AB$ ). Entsprechend der Grabenbreite bezeichnen wir diese Übergänge wiederum in Einheiten von  $a_{Co}/(2\sqrt{3})$  als einen Typ-4 (A-A) bzw. Typ-5 (B-B)-Übergang.

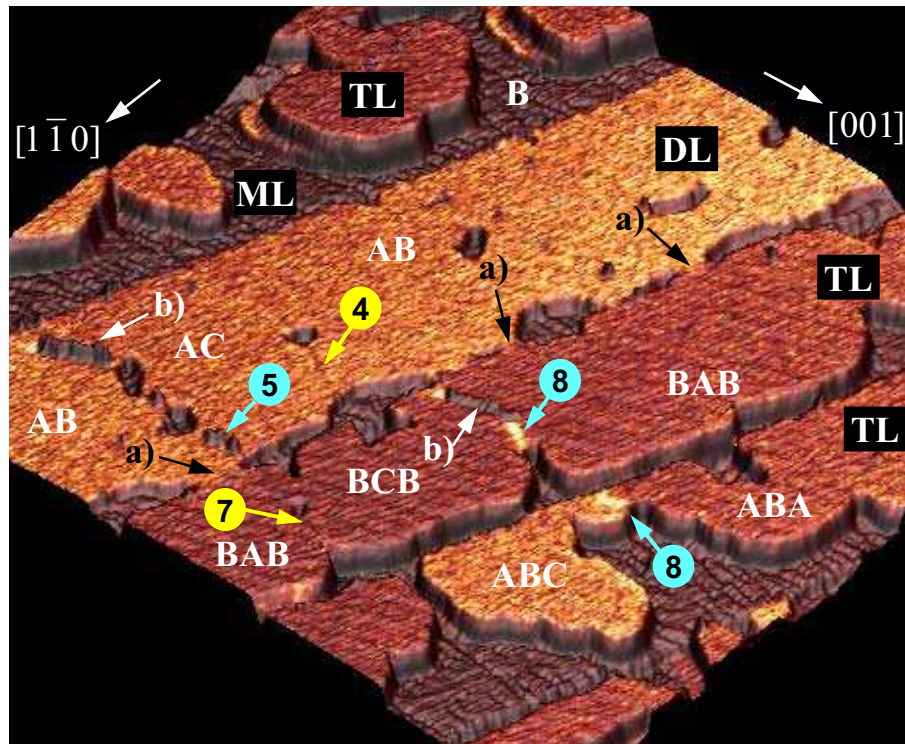


Abbildung 5.19: 3D-STM/STS-Darstellung von vier Wolfram-Substratterrassen ( $(200 \times 200) \text{ nm}^2$ ), die mit nominell 3 ps-ML Co bedeckt ( $T_P = 420 \text{ K}$ ) sind. Die Farbgebung der Oberfläche spiegelt die spektroskopische Information bei  $U = -0,45 \text{ V}$  und  $I = 0,6 \text{ nA}$  wider. Mit a) sind die Stellen gekennzeichnet, an denen die beiden obersten Lagen über die Substratstufenkante gewachsen sind. Definiert man die Position der untersten Atomlage der DL als A, so ergeben sich alle weiteren Stapelfolgen und Übergänge automatisch. Adsorbatatome scheinen sich bevorzugt bei den Typ-5 (DL) und Typ-8 (TL) Versetzungen anzulagern (mit b) gekennzeichnet).

In Abbildung 5.18 b) ist ein spektroskopisches Bild, aufgenommen bei  $U = -0,45 \text{ V}$ , dargestellt. Man erkennt abwechselnd helle und dunkle Linien, die bevorzugt entlang der  $[001]$ -Richtung verlaufen und Bereiche unterschiedlicher Stapelfolge der DL begrenzen. Aus einer Analyse weiterer STS-Aufnahmen geht hervor, dass sich Adsorbatatome bevorzugt auf der Versetzung anlagern, bei der man die helle Grenzlinie in der Spektroskopie bei  $U = -0,45 \text{ V}$  findet. Diese Grenze besitzt im Spektroskopiebild 5.18 b) etwa die doppelte Breite der dunklen Grenzlinie. Daher liegt die Vermutung nahe, dass es sich bei dem hellen Übergang um eine Versetzung vom Typ-5 (große Grabenbreite) handelt. Zur endgültigen Bestätigung dieser Vermutung müsste eine Versetzungslinie mit einer bekannten elektronischen Struktur atomar aufgelöst werden. Ausgehend von dieser Annahme, lassen sich nun auch die Übergänge der TL-Co anhand von STM/STS-Aufnahmen bestimmen.

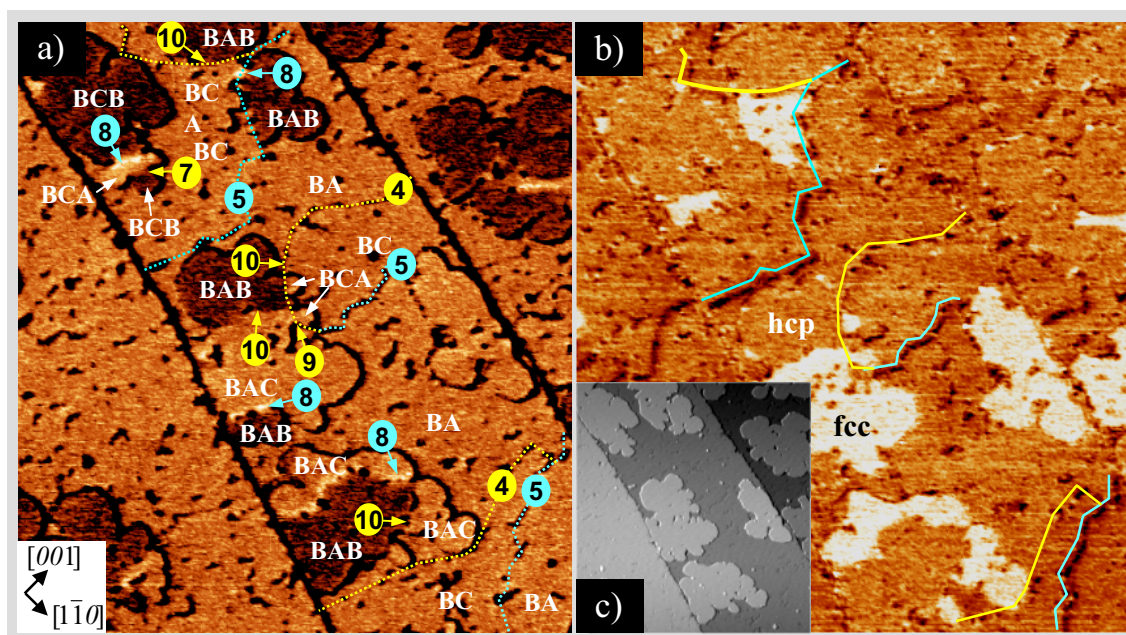


Abbildung 5.20:  $(145 \times 160) \text{ nm}^2$  STS-Aufnahmen bei  $U = -0,4 \text{ V}$  a) und  $U = 0,3 \text{ V}$  b) von TL-Co Inseln auf einer Co-Doppellage. In b) kann man Versetzungslinien in der DL aufgrund der angelagerten Restgasatome als dunkle Linie erkennen. Auffällig ist, dass sich die Adsorbata-tome bevorzugt an der Typ-5 Versetzung anlagern (blaue Linie). In a) sind die sich ergebenden Stapelfolgen und Übergänge eingetragen. c) Topographie der Probe.

Abbildung 5.19 zeigt eine kombinierte dreidimensionale topographische und spektroskopische Darstellung von vier W-Substratterrassen, die entweder mit zwei oder drei Monolagen Co bedeckt sind. Die Farbgebung der Oberfläche wird durch das  $dI/dU$ -Signal bei einer Spannung von  $U = -0,45 \text{ V}$  bestimmt. Definiert man die atomare Position der untersten Lage auf der DL-Terrasse als A und berücksichtigt man das Überwachen der Atome über die Stufenkanten sind alle weiteren Stapelfolgen und Übergänge bestimmt. Auf der TL findet man Versetzungen vom Typ-7, die keinen spektroskopischen Kontrast zeigt, bzw. die Typ-8 Versetzung, die auch als helle Grenzlinie zwischen den beiden hcp-Bereichen unterschiedlicher Stapelfolge zu erkennen ist. Es fällt auf, dass sich wiederum Adsorbata-tome bevorzugt auf der hell erscheinenden Versetzungslinie anlagern. Der Typ-8 Übergang weist im Vergleich zum Typ-7 Übergang auch eine geringere Dichte der Atome auf, in Analogie zu der Typ-5 Versetzung in der DL. Weitere Versetzungsarten kann man in Abbildung 5.20 finden. Bei einer Spannung von  $U = 0,3 \text{ V}$  ist man neben dem Kontrast zwischen hcp- und fcc-Bereichen auch auf Restgasadsorbate sensitiv. Diese lagern sich bevorzugt auf den Versetzungen an. In Abbildung 5.20 b) kann man diese als kräftige dunkle Linien erkennen (blau gekennzeichnet), da es sich bei den Adsorbaten zum Groß-



teil um CO-Moleküle handelt, die aufgrund des Sauerstoffs eine geringe Zustandsdichte besitzen. Hier sind besonders gut Versetzungslinien vom Typ-5 zu erkennen. Versetzungen vom Typ-4 können bei 0,3 V nicht sichtbar gemacht werden. Man erkennt allerdings in Abbildung 5.20 a) bei  $U = -0,45$  V schwache dunkle Linien in der DL (gelb gekennzeichnet), in Analogie zu Abbildung 5.18. Mit Hilfe dieser Information bzw. der, dass bei  $U = -0,45$  V Typ-7 Übergänge dunkel und Typ-8 Übergänge hell erscheinen, können nun die sich ergebenden Stapelfolgen und Übergänge auch in der TL bestimmt werden. Konsistent zur Abbildung 5.19 erscheinen auch hier alle Typ-8 Versetzungen hell. Zusätzlich findet man aber noch Übergänge vom Typ-9 (fcc/fcc-Übergang) und vom Typ-10 (Änderung der Stapelfolge in der zweiten und dritten Atomlage), die beide keine auffällige Grenzlinie im Spektroskopiebild zeigen.

Wie aus den STS-Ergebnissen eindeutig nachweisbar ist, gibt es zwei verschiedene Arten von Versetzungslinien, die sich bei  $U = -0,45$  V in ihrer elektronischen Struktur unterscheiden. Aus dem einfachen Hartkugelmodell der dichtesten Kugelpackung sollten 8 verschiedene Fälle auftreten, die sich aufgrund der Anordnung der Atome im Bereich der Versetzung unterscheiden. Abweichend vom Hartkugelmodell werden die tatsächlichen Atompositionen von ihren Gitterplätzen durch elastische Verformung abweichen. In jedem Fall wird die mittlere Atomdichte im Bereich der Versetzung sich unterscheiden von der Volumendichte im übrigen Bereich. Ein Maß für die Atomdichte im Bereich der Versetzung sind die mittleren Abstände der Atome von DL und TL im Hartkugelmodell. Mit dieser Vereinfachung erhält man nur noch vier ähnliche Fälle des Übergangs bei der Änderung der Stapelfolge. Geht man davon aus, dass sich Adsorbatatom vorwiegend auf Versetzungslinien mit großer Grabenbreite anlagern, sollten Typ-5 (DL) und Typ-8 (TL) Versetzungen hell erscheinen. Aus dem Experiment geht hervor, dass alle weiteren Übergangsarten in der TL (Typ-7,-9,-10) keine Grenzlinie aufweisen bzw. nur eine schwache dunkle Linie in der DL (Typ-4). Der spektroskopische Kontrast kommt im Co-Spektrum durch eine Verschiebung des Peaks bei -0,4 V um etwa 50 meV zu negativeren Energiezustände. Aufgrund der geringen Dichte der Atome bei einer Typ-9 oder Typ-10 Versetzung würde man allerdings erwarten, dass die elektronische Struktur entsprechend der Typ-8 Versetzung geändert wird und auch diese Übergänge als helle Linie bei -0,4 V erscheinen. Es ist aber durchaus möglich, dass eine weitere Atomreihe in der Versetzung eingebaut wird, in dem benachbarte Atome ein wenig verschoben werden. Damit würde sich qualitativ eine ähnliche Atomdichte ergeben wie bei der Typ-7 Versetzung, die keinen Kontrast im Spektroskopiebild zeigt.

Wie aus einer Reihe untersuchter STS-Aufnahmen hervorgeht, treten am häufigsten Änderungen in der Stapelfolge in der obersten Atomlage auf, während die hcp/hcp- bzw. fcc/fcc-Übergänge im Experiment sehr selten beobachtet werden. Dies kann mit der Wachstumsmorphologie der Co-Inseln während der Präparation bei erhöhter Temperatur in Einklang gebracht werden. Dabei wächst zunächst die Monolage komplett geschlossen mit einer konstanter Atomposition, z. B. A, auf. Bei der weiteren Deposition von Co

bilden sich DL-Inseln aus, die zufällig die eine oder andere Stapelfolge aufweisen können (AB oder AC). Diese Inseln wachsen zusammen und bilden eine Versetzung, wobei bereits die dritte Atomlage zu wachsen beginnt. Die Wahrscheinlichkeit für ein Aufeinandertreffen einer Versetzung in der zweiten und dritten Atomlage ist demnach weniger hoch, als ein Zusammenwachsen zweier TL-Inseln, deren Stapelfolge nur in der obersten Atomlage unterschiedlich ist.

# Kapitel 6

## Zweidimensionale binäre ferromagnetische Legierungen

Die Abhängigkeit der magnetischen und elektronischen Eigenschaften von binären Legierungen ist für Volumenlegierungen schon seit langem Gegenstand der Forschung. Eine wesentliche Größe ist die Magnetisierung, die sich mit der mittleren Zahl der Elektronen  $N$  pro Atom ändert (Slater-Pauling-Kurve) [Chi97]. Ferromagnetismus tritt für  $24 \leq N \leq 28,6$  auf mit einem Maximum bei  $N = 26,3$ . Ein einfaches Modell zur Beschreibung der magnetischen Eigenschaften ist das sog. *rigid band*-Modell. Bei diesem Modell geht man davon aus, dass die Bandstruktur unabhängig von der Legierungszusammensetzung ist und sich nur die Fermi-Energie  $E_F$  mit  $N$  erhöht. Das *rigid band*-Modell wird durch die elektronische Struktur der  $3d$ -Übergangsmetalle motiviert, die man mit Hilfe der itineranten Elektronenzuständen beschreibt, d. h. die lokalen atomaren Eigenschaften ungeordneter Legierungen spielen eine eher untergeordnete Rolle im Vergleich zu den mittleren Potentialen.

### 6.1 Ultradünne Co-Fe Legierungsfilme

Die Untersuchung von  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Legierungsmonolagen ist besonders interessant, da die Volumenlegierung  $\text{Co}_{0,3}\text{Fe}_{0,7}$  die größte Magnetisierung aller binären Legierungen aufweist (für  $x = 0,3$ ) [Boz51]. Bei Volumenlegierungen ist die effektive  $d$ -Band Besetzung von strukturellen Änderungen [Jam99] abhängig. Bei ultradünnen Legierungsfilmen dagegen kann ein geeignetes Substrat die atomare Ordnung unabhängig von der Legierungszusammensetzung vorgeben [Sch97] [Dit00] [Mat02].

Die Präparation der Legierungsmonolagen erfolgte wiederum mittels MBE im UHV bei  $p < 2 \cdot 10^{-10}$  mbar, wobei Proben mit einer variierenden Legierungszusammensetzung

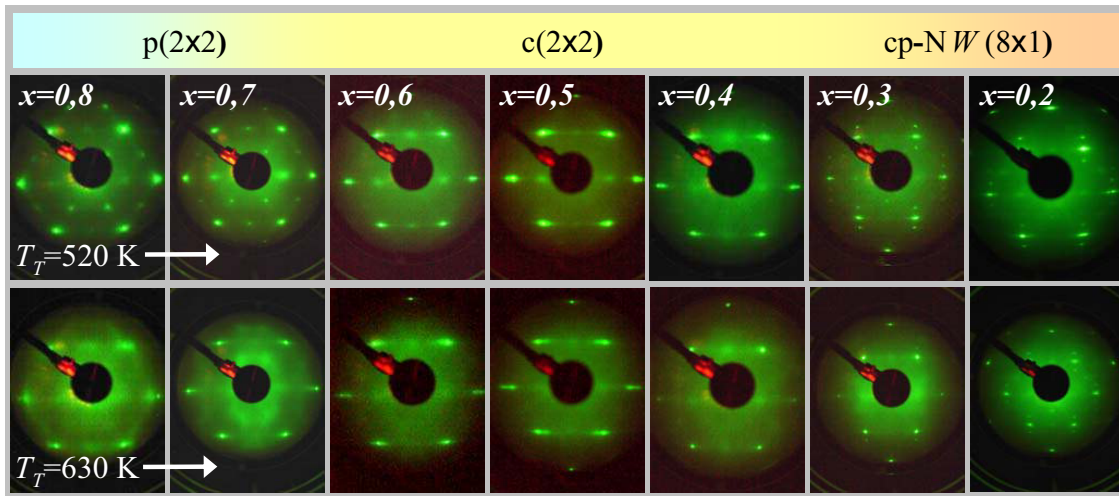


Abbildung 6.1: LEED-Aufnahmen von  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Legierungsmonolagen nach unterschiedlich thermischer Behandlung. Bei  $T_T = 520 \text{ K}$  ist es möglich geordnete Bereiche der 2D-Legierung zu präparieren. Für Fe-Konzentrationen  $x < 0,4$  findet man eine schwache  $(8 \times 1)$ -Überstruktur, die ein Zeichen für Nishiyama-Wassermann-Wachstum der Legierung ist.

mit Hilfe der in Kapitel 3.5 beschriebenen Schattenmaskentechnik präpariert wurden. Zusätzlich wurden auch Einzelproben mit einer homogenen Legierungszusammensetzung hergestellt. Für alle Präparationen betrug die Bedeckung  $\theta = 0,7$ .

### 6.1.1 Wachstum und atomare Ordnung

Bei Raumtemperatur bilden die  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Submonolagen zunächst Inseln, die beim Tempern bei  $T_T = 780 \text{ K}$  zusammenlaufen und in parallelen Streifen entlang der Substratstufenkanten wachsen (step-flow-Wachstum), ähnlich wie bei reinen Fe Filmen [Elm95a]. LEED-Untersuchungen (Abbildung 6.1) der Co-Fe-Legierungen zeigen zusätzlich zu den  $p(1 \times 1)$  Reflexen, die man für die reine Fe-Monolage beobachtet, schwache Überstrukturreflexe, die bei einer Temperatur  $T_T = 520 \text{ K}$  am stärksten hervortreten, d.h. diese Temperatur ist am besten geeignet, um atomar geordnete Legierungen wachsen zu lassen. Da die Überstrukturreflexe nur sehr schwach ausgeprägt sind, kann man davon ausgehen, dass nur kleine Bereiche mit atomar geordneter Struktur vorliegen, wobei der größte Teil der Oberfläche ungeordnet bleibt. Für  $x < 0,4$  kann man eine schwache  $(8 \times 1)$ -Überstruktur erkennen, die auf ein Wachstum von Bereichen der Monolage in Nishiyama-Wassermann-Orientierung schließen lässt.

Auf den STM-Aufnahmen (Abbildung 6.2) läßt sich erkennen, dass für  $x > 0,4$  eine homogen erscheinende Legierungsmonolage gebildet wird. Es sind keine Anzeichen

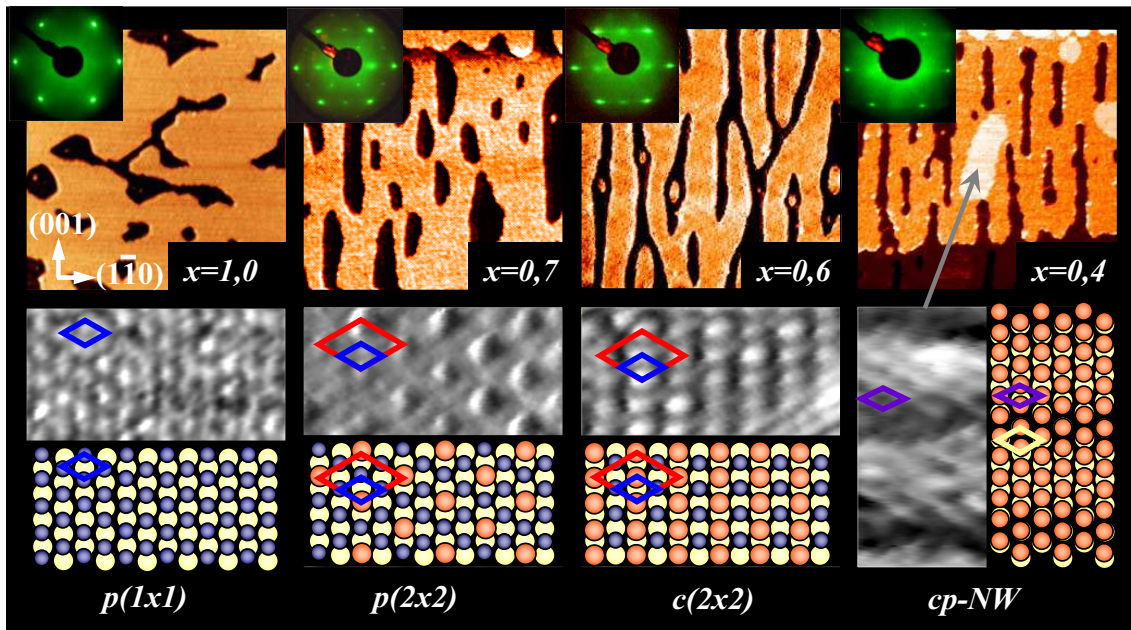


Abbildung 6.2: STM Bilder ( $100 \times 100$ ) nm<sup>2</sup> von  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$ . Helle Bereiche kennzeichnen die Legierungsmonolage, während die dunklen Stellen das W(110)-Substrat zeigen. Die mit dem Pfeil gekennzeichnete Insel stellt eine dicht gepackte Co-reiche Segregation dar, die nur für Co-Konzentrationen  $1 - x \geq 0,6$  auftreten. Die atomar aufgelösten STM-Bilder wurden für  $x = 1,0$ ,  $x = 0,4$ ,  $x = 0,6$  bzw.  $x = 0,7$  aufgenommen. In den entsprechenden Strukturmodellen sind die Positionen der Substratome (gelb), der Co-Atome (rot) und der Fe-Atome (blau) dargestellt.

für eine Entmischung zu erkennen, wie für sequenzielles Aufdampfen beobachtet wurde [Pra04]. Für  $x \leq 0,4$  tritt eine Phase-separation auf. Diese im STM-Bild als helle Flecken zu erkennenden Inseln wachsen bereits dicht gepackt in Nishiyam-Wassermann-Orientierung, wie das atomar aufgelöste STM-Bild zeigt. Das Wachstum ist ähnlich zum Wachstum der reinen Co-Monolage (siehe Kapitel 5.1.3, vollständige Versetzung). Es liegt daher die Vermutung nahe, dass es sich bei den Phase-separationen um Co-reiche Bereiche handelt, die bereits dicht gepackt wachsen. Mit Hilfe der atomar aufgelösten Rastertunnelmikroskopie, ebenso wie mit LEED, konnte eine  $\text{CoFe}_3$ - $p(2 \times 2)$ -Überstruktur für  $0,6 < x \leq 0,8$ , sowie eine  $\text{CoFe}$ - $c(2 \times 2)$ -Überstruktur für  $0,4 < x \leq 0,6$  beobachtet werden. Diese atomar aufgelösten Überstrukturen erklären die beobachteten Beugungsbilder ( $p(2 \times 2)$  und  $c(2 \times 2)$ ). Allerdings würde man aufgrund der fast gleichen Elektronenzahl von Co und Fe keinen oder nur eine sehr kleine Intensität der LEED Überstrukturreflexe erwarten. Es kann allerdings sein, dass das Co-Atom topographisch etwas höher liegt, was auch das STM-Bild nahelegt. Die Tatsache, dass Überstrukturen

überhaupt auftreten, bedeutet, dass es energetisch günstiger ist, wenn Co-Atome von Fe-Atomen umgeben werden und umgekehrt. Das wiederum bedeutet, dass es keine Tendenz zur Phasenseparation der pseudomorphen Bereiche gibt.

### 6.1.2 Magnetische Eigenschaften

Abbildung 6.3 zeigt die magnetischen Eigenschaften eines  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Konzentrationskeils mit einer konstanten Bedeckung von  $\theta = 0,7$ . Die  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Submonolage wurde auf  $T_T = 780$  K erhitzt und anschließend mit 5 ML Au bei Raumtemperatur abgedeckt. Zum einen kann damit einer Veränderung der magnetischen Eigenschaften durch Restgasadsorption während der Messung vermieden werden, zum anderen wird die Curie-Temperatur  $T_C(\infty)$  durch die Au-Bedeckung erhöht [Gra90]. Die magnetischen Eigenschaften wurden während des Aufwärmvorganges der Probe mit Hilfe von longitudinaler Kerr-Magnetometrie bestimmt. Das äußere Magnetfeld wurde dabei entlang der leichten magnetischen Richtung ( $[1\bar{1}0]$ -Richtung) angelegt. Die Probe wurde zunächst mit flüssigem Stickstoff auf 93 K abgekühlt und anschließend mit einer mittleren Aufwärmrate von 5 K/min erwärmt. Die Temperrauflösung ist somit durch die Messzeit einer Magnetisierungskurve gegeben. Bei einer Mittelung von 5 Kurven ergibt eine Messzeit von ca. 120 s. Man erreicht damit eine Temperrauflösung von 2-10 K im Temperaturbereich von 100-200 K.

Die Curie-Temperatur  $T_C$  ist definiert als die Temperatur, bei der die remanente Magnetisierung verschwindet.  $T_C$  verringert sich mit dem Anstieg der Co-Konzentration, sowohl bei der ausgedehnten Monolage auf dem glatten Substratteil gewachsen, als auch bei den Legierungsnanodrähten auf dem vizinalen Substratteil. Die Nanodrähte weisen eine etwas geringere Curie-Temperatur im Vergleich zur ausgedehnten Monolage auf, wie schon bei reinen Fe-Nanostreifen auf W(110) beobachtet [Hau98b]. Die geringere Curie-Temperatur hängt mit der reduzierten Dimensionalität der quasi eindimensionalen Nanostreifen zusammen. Die remanente Kerr-Drehung  $\theta_{K,r}$ , gemessen bei 93 K, verringert sich ebenso mit Zunahme der Co-Konzentration und verschwindet schließlich bei  $1-x = 0,5$ . Das Sättigungssignal  $\theta_{K,s}$  kann mit einem externen Feld von  $\mu_0 \cdot H_{ext} = 110$  mT bis  $1-x = 0,6$  beobachtet werden. Die Ergebnisse für die mit Au bedeckten Nanostreifen sind in guter Übereinstimmung mit den Messungen von J. P. Pierce für unbedeckte Fe-Nanostreifen [Pie02]. Da sich  $T_C$  für die Nanostreifen, sowie für die ausgedehnte Monolage verringert, kann man davon ausgehen, dass es sich hierbei um eine intrinsische Eigenschaft des  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$ -Systems handelt und das Verhalten nicht durch die Morphologie der Probe bestimmt wird. Ebenso wird es nicht durch eine Phasenseparation von Fe und Co hervorgerufen, wie die STM-Untersuchungen gezeigt haben.

Um ausschließen zu können, dass eine starke Erhöhung der Koerzitivfeldstärke bzw. ein Spinreorientierungsübergang dafür verantwortlich sein könnte [Elm95b] [San96], wurden

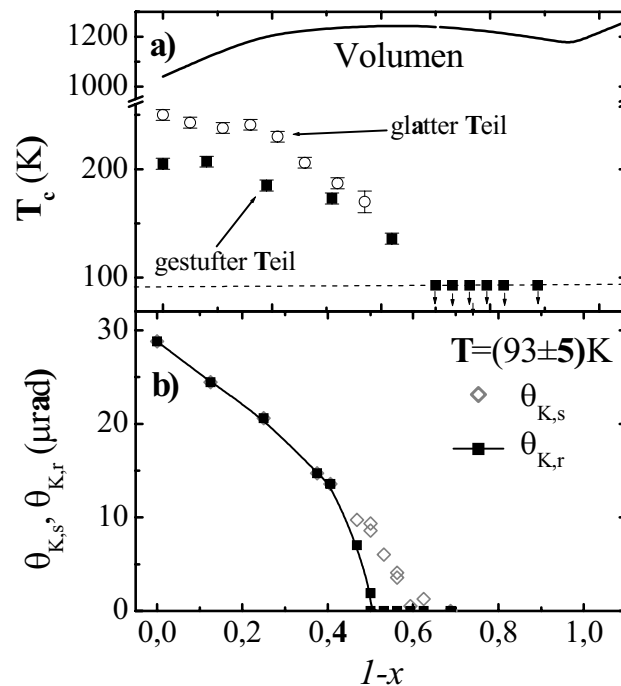


Abbildung 6.3: a)  $T_C$  in Abhängigkeit von der Co-Konzentration der  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Submonolage ( $\theta = 0,7$ ) für den gestuften, sowie den glatten Substratteil, abgedeckt mit 5 ML Au. Zum Vergleich sind auch die Werte der Volumenlegierungen im Diagramm eingetragen (durchgezogene Linie). b) Abhängigkeit des remaneten Kerr-Signals  $\theta_{K,r}$ , sowie des Sättigungs-Kerr-Signals  $\theta_{K,s}$  von der Legierungszusammensetzung.

dickere Legierungsfilme mit 1,8 ML bis 7 ML präpariert. Die Filme wurden bei Raumtemperatur aufgedampft und nicht weiter thermisch behandelt, um somit ein besseres Lagenwachstum für diesen Dickenbereich zu erzielen. Bei reinen Fe-Filmen auf W(110) wächst die erste Monolage pseudomorph, während weitere Lagen dann in (110)-Orientierung mit nahezu Volumengitterstruktur wachsen [Prz89]. Dieser Wachstumsmodus kann auch für die  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Filme angenommen werden. Die Probe entspricht dabei einer Monolage  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  mit einer ferromagnetischen Bedeckung und einer Curie-Temperatur nahe dem Volumenwert. Die leichte magnetische Achse liegt in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Wegen der starken ferromagnetischen Austauschkopplung werden die ferromagnetischen Anteile der pseudomorphen ML in der Magnetisierungsrichtung polarisiert. Es wurden Magnetisierungskurven bei 300 K mit einem äußeren Feld in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung gemessen. In Abbildung 6.4 ist die remanente Kerr-Drehung  $\theta_{K,r}$  über die Co-Konzentration  $1-x$  aufgetragen. Die Diagramme zeigen den Übergang vom magnetischen Volumenverhalten zur Monolage. Bei 5 und 6 ML kann man ein Maximum der remanenten Kerr-Drehung bei  $x = 0,5$  auf dem glatten Substratteil beobachten (Abbildung 6.4). Der 4 ML dicke

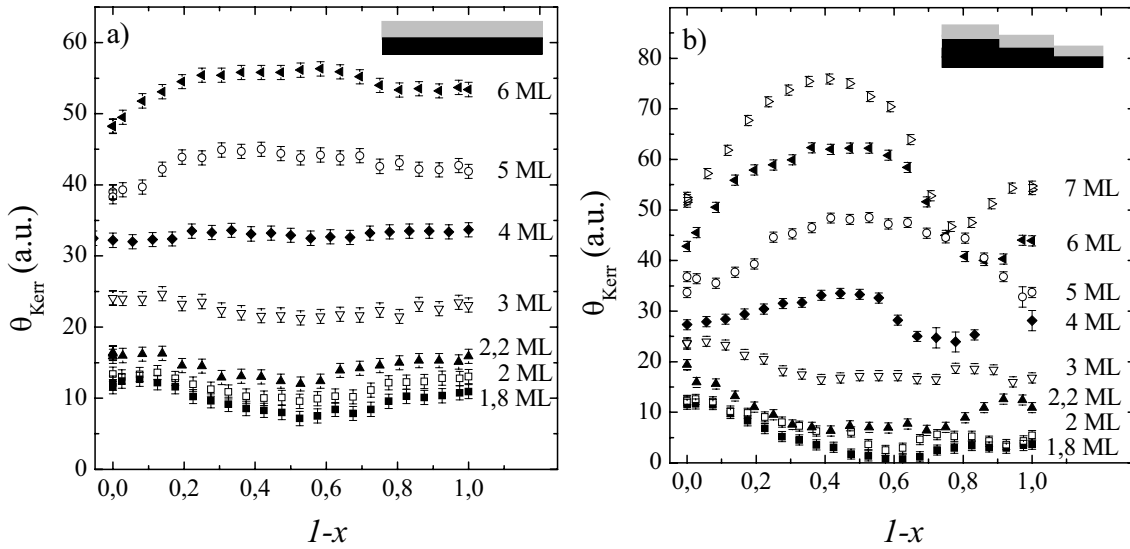


Abbildung 6.4: Remanente Kerr-Drehung in Abhängigkeit der Co-Konzentration ( $1 - x$ ) und der Filmdicke auf dem glatten a) und dem gestuften b) Substratteil.

Film weist kein Maximum im remanente Kerr-Signal auf, sondern nur noch einen linearen Anstieg mit der Co-Konzentration. Dünnere Filme zeigen ein inverses Verhalten mit einem Minimum bei  $x = 0,5$ . Interessanterweise wird  $\theta_{K,r}$  auf dem gestuften Teil für den 1,8 ML dicken Film bei  $0,5 < 1 - x < 0,6$  nahezu Null. Der Grund dafür kann in der Proben-Morphologie (z. B. der Inselgröße) liegen, die durch unterschiedliche Terrassenbreiten hervorgerufen wird. Zusätzlich beobachtet man für dickere Filme ein Minimum bei  $1 - x = 0,8$ , welches am stärksten auf dem vizinalen Teil des Substrates ausgeprägt ist und durch den Übergang im Kristallwachstum von der bcc- zur hcp-Ordnung erklärt werden kann. Die remanente Kerr-Drehung steigt linear mit der Schichtdicke  $D$  an, ähnlich wie bei den reinen Fe-Filmen [Wag97]. Das Verhalten kann wie folgt beschrieben werden:

$$\theta_{K,r}(x,D) = \theta_{K,r}(x,1)[D + D_0(x)]. \quad (6.1)$$

Während die spezifische Kerr-Drehung pro Monolage  $\theta_{K,r}(x,1)$  Volumenverhalten zeigt (Abbildung 6.5) [Pri81], wird der Grenzflächenbeitrag  $D_0(x)$  kontinuierlich kleiner mit  $1 - x$  für kleine Co-Konzentration und erreicht schließlich ein Minimum bei  $D_0(0,5) = -1,05$  ML.  $\theta_{K,r}(x,1)$  ist unter 300 K weitgehend temperaturunabhängig, da die Volumensmagnetisierung nur eine geringe Änderung von wenigen Prozent zwischen 300 K und 0 K aufweist.  $D_0(x)$  setzt sich aus dem Grundzustandsbeitrag (*surface*-Effekt) und einem temperaturabhängigen Anteil, der bei  $T = 0$  K verschwindet (*size*-Effekt)  $D_{size}(T)$  [Wag97] zusammen:



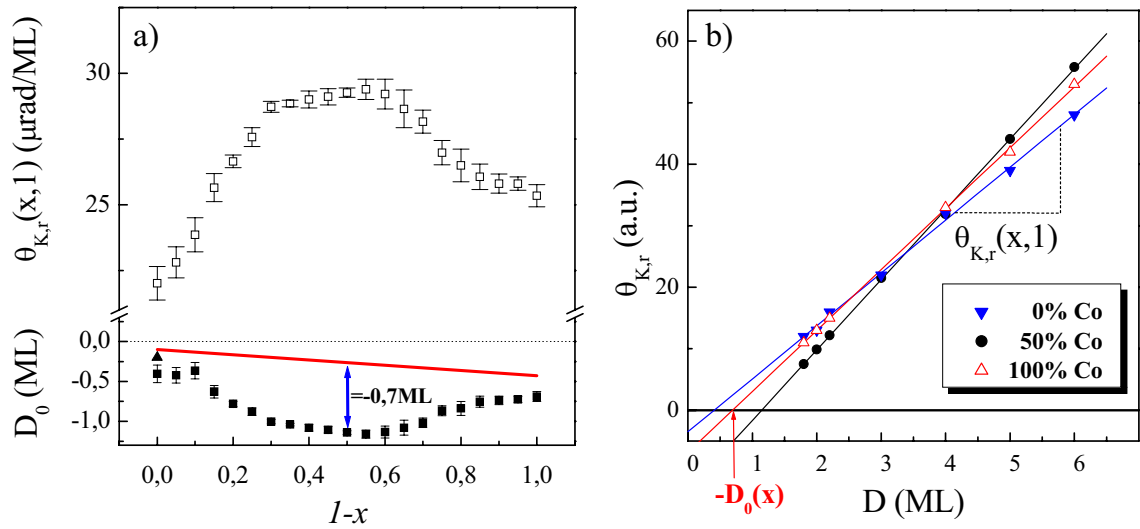


Abbildung 6.5: a) Spezifische Kerr-Drehung pro Monolage  $\theta_{K,r}(x,1)$  und Grenzflächenbeitrag  $D_0$  in Abhängigkeit der Co-Konzentration. b) Linearer Anstieg der remanenten Kerr-Drehung mit der Filmdicke für drei verschiedene Legierungszusammensetzungen.

$$D_0(x) = D_{surf}^{CoFe/W} + D_{surf}^{CoFe/UHV} + D_{size}(T). \quad (6.2)$$

Der *size*-Effekt wurde für dünne Filme Fe/W(110) und Co/W(110) zu  $D_{size}(300K) = -0,5$  ML bestimmt [Fri95a] [Wag97] und wird sich für die Legierungen nicht wesentlich ändern. Der *surface*-Effekt für freitragende Fe bzw. Co-Filme ist positiv, d.h. die Magnetisierung an der freien Oberfläche ist gegenüber dem Volumenwert erhöht. Für Fe/UHV wurde  $D_{surf}^{Fe/UHV} = 0,4$  ML gemessen [Wag97] und für Co(0001)/UHV theoretisch  $D_{surf}^{Co/UHV} = 0,07$  berechnet [Li91]. Auch für die Legierung erwartet man keine signifikante Abweichung von diesen Werten. Daraus kann man schließen, dass sich der *surface*-Effekt der freien Oberfläche teilweise mit dem *size*-Effekt kompensiert und somit der *surface*-Effekt an der Grenzfläche zum Wolframsubstrat den größten Beitrag zu dem stark negativen Wert von  $D_0(x = 0,5)$  liefert. Wenn man nun eine lineare Interpolation zwischen Fe und Co für den *size*- bzw. *surface*-Effekt der freien Oberfläche annimmt, so ergibt sich  $D_{surf}^{CoFe/W} = -0,7 \pm 0,1$  ML. Diesen Wert würde man gerade für den Fall einer paramagnetischen  $\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$  ML an der Grenzfläche erwarten. In der vorigen Messung wurde ebenfalls gefunden, dass die pseudomorphe  $\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$  ML paramagnetisch wird, allerdings in dem Fall mit einer Au-Bedeckung. Es liegt also nahe, anzunehmen, dass aufgrund der Wechselwirkung mit dem Wolframsubstrat die ps-ML  $\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$  paramagnetisch wird, d. h. selbst für eine ferromagnetische Bedeckung (siehe Abbildung 6.3). Die Co-reichen Phasen können an der Wolframgrenzfläche leicht polarisiert werden,

was den Anstieg von  $D_0$  für eine weitere Erhöhung der Co-Konzentration ( $1 - x > 0,6$ ) erklärt.

Obwohl die Magnetisierung nicht proportional zur Kerr-Drehung sein muß, ändert sich die spezifische Kerr-Drehung nur wenig mit  $x$ . Daher kann man die Kerr-Drehung als grobes Maß für die Magnetisierung betrachten. Der Abfall der Magnetisierung der ML  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  (bei konstant niedrigen Temperaturen) mit der Zunahme von Co kann mit dem Füllen von  $d$ -Band Löcher, ähnlich wie das Verhalten der binären Legierungen im rechten Zweig der Slater-Pauling Kurve, erklärt werden. Die anfängliche Reduktion der Kerr-Drehung mit der Zunahme von  $1 - x$  (Abbildung 6.3 b)) entspricht einer Abnahme des magnetischen Moments von  $\Delta\mu = 2,9 \mu_B$  pro  $d$ -Elektron unter der Annahme eines Grundzustandsmoments von  $\Delta\mu_{Fe}^{ML} = 2,5 \mu_B$  für die ML  $\text{Fe}/\text{W}(110)$  [Elm89]. Der Abfall fällt aber quantitativ viel stärker aus als das Slater-Pauling Verhalten, bei dem man nur eine Abnahme von  $\Delta\mu = 1 \mu_B$  pro Elektron erwarten würde. Das Ausbilden von geordneten Strukturen der binären Co-Fe-Legierungen führt prinzipiell zu einem Absinken des magnetischen Moments der Legierung. Allerdings beträgt nach *ab initio*-Rechnungen der Abfall bis zu einer Co-Konzentration von  $1 - x = 0,5$  nur etwa  $\Delta\mu = 0,9 \mu_B/\text{Atom}$  [Spi04], während für höhere Co-Konzentrationen der Abfall wesentlich stärker ausfällt ( $\Delta\mu = 3,9 \mu_B/\text{Atom}$ ), da  $\text{Co}_3\text{Fe}$  die Tendenz zu einer antiferromagnetischen Co-Co-Wechselwirkung zeigt, was somit zur Bildung eines ferrimagnetischen Grundzustands mit einem geringen Gesamtmoment führt. Die reine Co-ML auf W(110) ist nach D. Spišák praktisch unmagnetisch mit einer leichten Tendenz zu Antiferromagnetismus. Für einen quantitativen Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen muss allerdings beachtet werden, dass die Rechnungen für eine komplett geordnete Legierungsmonolage durchgeführt wurden. Wie aber aus den STM-Untersuchungen hervorgeht liegt eine atomare Ordnung nur in einzelnen Bereichen der Monolage vor.

### 6.1.3 Theoretische Erklärung

Um der Frage nachzugehen, warum die Magnetisierung mit der Co-Konzentration im Gegensatz zu den entsprechenden Volumenlegierungen so rasch abnimmt, betrachten wir das Stoner-Modell. Das Auftreten von ferromagnetischer Ordnung wird in diesem Modell durch das Stoner-Kriteriums bestimmt [Chi97]:

$$I \cdot N(E_F) > 1, \quad (6.3)$$

wobei  $N(E_F)$  die Zustandsdichte (DOS) bei der Fermi-Energie  $E_F$  und  $I$  der Stoner-Parameter ist, der nur wenig von der atomaren Umgebung abhängt [Jam99]. Das Stoner-Kriterium besagt, dass nur dann Ferromagnetismus auftritt, wenn der Gewinn an Austauschenergie größer wird als der Verlust an kinetischer Energie. *Ab initio* Bandstrukturechnungen haben gezeigt, dass im Volumen-Fe (bcc) die Elektronenzustände in der

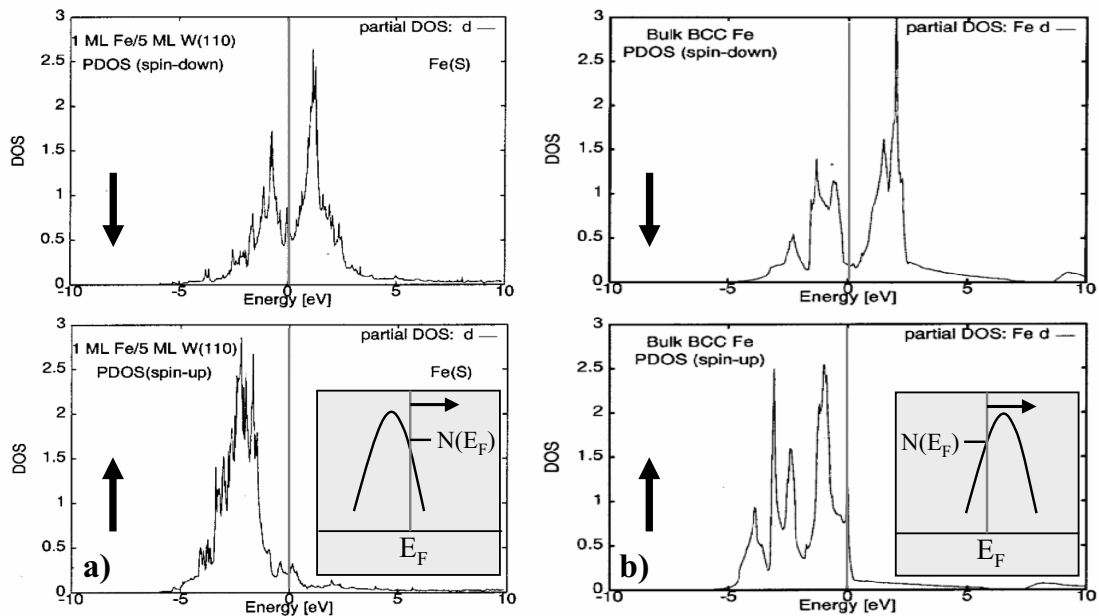


Abbildung 6.6: Spinaufgelöste *ab initio* DOS-Rechnungen [Qia99] für die ferromagnetische Monolage Fe/W(110) (a) und Volumen-Fe (b). Grau unterlegt ist schematisch die Situation für die paramagnetische Phase dargestellt [Jam99]. Durch Erhöhung der mittleren Elektronenzahl durch Beimischung von Co wird die Zustandsdichte bei  $E_F$  der ML Fe/W(110) erniedrigt bzw. für Volumen-Fe erhöht.

paramagnetischen Phase zuerst aufgefüllt werden, bevor das Maximum in der Zustandsdichte erreicht wird [Jam99]. Durch Beimischung von Co wird die mittlere Anzahl der Elektronen des Systems erhöht und somit weitere *d*-Band Zustände aufgefüllt. Für geringe Co-Konzentrationen ändert sich die Bandstruktur nicht (*rigid band* Modell), sodass sich für das Volumen-Fe die Zustandsdichte bei  $E_F$  erhöht, womit man den Anstieg von  $T_C$  und  $\theta_K$  zumindest qualitativ erklären kann. Spinaufgelöste Rechnungen von X. Qian [Qia99] für Volumen-Fe zeigen scharfe Maxima bei  $E_{\uparrow}$  unterhalb der Fermi-Energie für die Majoritätselektronen, sowie bei  $E_{\downarrow}$  oberhalb der Fermi-Energie für die Minoritätselektronen. Die Energiedifferenz  $E_F - E_{\uparrow}$  ist kleiner als  $E_{\downarrow} - E_F$ . Daher liegt der Mittelwert  $(E_{\downarrow} + E_{\uparrow})/2$  oberhalb von  $E_F$ , wie auch schon von [Jam99] für die paramagnetische Phase berechnet. Eine gleiche Betrachtung der Rechnung für die ps-ML Fe/W(110) [Qia99] [Qia03] liefert  $(E_{\downarrow} + E_{\uparrow})/2 < E_F$ , d.h. das Maximum der paramagnetischen Phase liegt unterhalb von  $E_F$ . Dies bestätigen spinaufgelöste Rechnungen von D. Spišák auch für die ps-ML Co/W(110), wobei analog zu obiger Betrachtung das Maximum der paramagnetischen Phase ebenfalls unterhalb von  $E_F$  liegt. Somit wird durch die Erhöhung der mittleren Elektronenzahl die Fermi-Energie zu höheren Energien verschoben und damit

verringert sich die Zustandsdichte bei  $E_F$ . Dies führt zu der beobachteten Abnahme von  $T_C$  und  $\theta_K$  (Abbildung 6.6).

## 6.2 Mn-Fe Legierungsmonolagen

Um eine 2D binäre Legierung herzustellen, dessen magnetisches Moment größer ist als das der ML Fe/W(110) ist es nach voriger theoretischer Überlegung (Kapitel 6.1.3) notwendig, die mittlere Elektronenzahl der Fe-Monolage zu reduzieren, um  $E_F$  auf das Maximum der Zustandsdichte einzustellen. Einen naheliegender Legierungskandidat für das Eisen könnte Mangan darstellen. Mn besitzt ein  $d$ -Elektronen weniger als Fe und sollte in der Lage sein die mittlere Elektronenzahl der Legierung herabzusetzen. Wir haben daher unter gleichen Bedingungen wie zuvor beschrieben  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  Monolagen mittels Co-Deposition im UHV präpariert und die Proben anschließend bei  $T_T = 780$  K getempert. In diesem Fall wurden nur Einzelpräparationen mit homogener Legierungszusammensetzung untersucht und auf eine Au-Abdeckung verzichtet.

### 6.2.1 Strukturelle Eigenschaften

Abbildung 6.7 zeigt die Morphologie einer Submonolage Mn/W(110) im Vergleich zu  $\text{Fe}_{0,6}\text{Mn}_{0,4}$ /W(110)-Legierung auf einer relativ großen Terrasse des W-Substrats. Daher sind keine atomaren Stufen in dem STM-Bild zu erkennen. Die aufgedampfte Submonolage bildet eine kompakte Fläche. Wegen der hohen freien Oberflächenenthalpie von Wolfram sind die Monolagen thermodynamisch stabil. Das ist auch der Grund dafür, dass Doppellageninseln auch bei höheren Präparationstemperaturen nicht auftreten. LEED Untersuchungen zeigen für alle Legierungsmonolagen eine  $p(1 \times 1)$ -Struktur, wie die reine Wolfram  $\text{bcc}(110)$  Oberfläche. Daraus kann man schließen, dass die Fe- und Mn-Atome nur die Wolframgitterplätze besetzen (pseudomorphes Wachstum). Auch bei vollständig mischbaren Legierungen kann es zu einer Phasenseparation kommen [Aba98] [Kri97] [Kah98]. Um eine Phasenseparation der  $\text{Fe}_{0,6}\text{Mn}_{0,4}$  Monolage auszuschließen wurde ein hochaufgelöstes STM-Bild aufgenommen (Abbildung 6.7 b) unten). Der vergrößerte Ausschnitt der Legierungsinsel zeigt eine körnige Struktur mit einer Höhenkorugation von 40 pm und einem mittleren Durchmesser von 0,5 nm, was nur wenigen Einheitszellen entspricht. Diese Struktur kann durch eine unterschiedliche Verteilung von Fe bzw. Mn Atomen zustande kommen, die wiederum die elektronische Struktur der Oberfläche beeinflusst und zu einem Kontrast im STM-Bild führt. Während man bei der reinen Mn-Insel relativ leicht die pseudomorphen Mn-Atome auflösen kann, gelingt dies bei der Legierungsmonolage aufgrund der Höhenkorugation der Oberfläche nicht. Im Gegensatz zu den 2D  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Legierungen kann man auch nach thermischer Behandlung keine geordnete Legierungsmonolage beobachten, weder mit LEED noch mit STM.

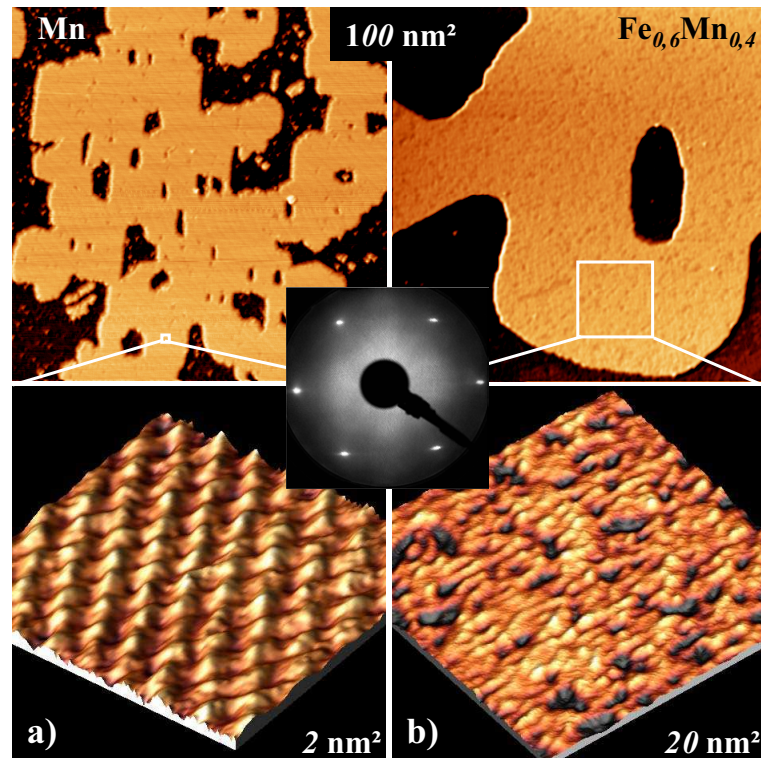


Abbildung 6.7: STM-Aufnahmen einer Submonolage Mn/W(110) und einer Fe<sub>0,6</sub>Mn<sub>0,4</sub>/W(110)-Legierung bei  $I = 500$  pA und  $U = 1$  V. Die Monolageninseln erscheinen hell, während das Substrat dunkel dargestellt ist. Die vergrößerten 3D-Ansichten der Probenoberfläche (unten) zeigen die pseudomorph gewachsenen Mn-Atome a), sowie die körnige Struktur der Fe-Mn ML b).

## 6.2.2 Magnetische Eigenschaften

Abbildung 6.8 a) zeigt die mit longitudinaler Kerr-Magnetometrie aufgenommenen Magnetisierungskurven einer Fe<sub>0,9</sub>Mn<sub>0,1</sub>/W(110) Submonolage ( $\theta = 0,7$ ) für verschiedene Temperaturen. Bei  $T = 144$  K beobachtet man eine Hysteresekurve, deren Remanenz dem Sättigungswert entspricht. Der Ummagnetisierungsvorgang erfolgt in einem Feldbereich von etwa 40 mT mit einem Koerzitivfeld von  $\mu_0 H_c = 20$  mT. Die leichte magnetische Achse des Systems liegt wie bei Fe/W(110) und der Co<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>-Legierung in  $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Erhöht sich die Temperatur auf  $T > 160$  K geht das remanente Verhalten in ein paramagnetisches Verhalten über. Mit der in Kapitel 3.3.1 beschriebenen 4-Punkt-MOKE-Messung ist es möglich, eine höhere Temperaturauflösung zu erreichen. Die Temperaturabhängigkeit der Fe<sub>0,9</sub>Mn<sub>0,1</sub>/W(110) Submonolage ist in Abbildung 6.8 b) für Remanenz und Sättigung wiedergegeben. Das remanente Signal verschwindet bei  $T_C = 180$  K, während das Sättigungssignal, bei  $\mu_0 H = 100$  mT gemessen, bis  $T_s = 200$  K

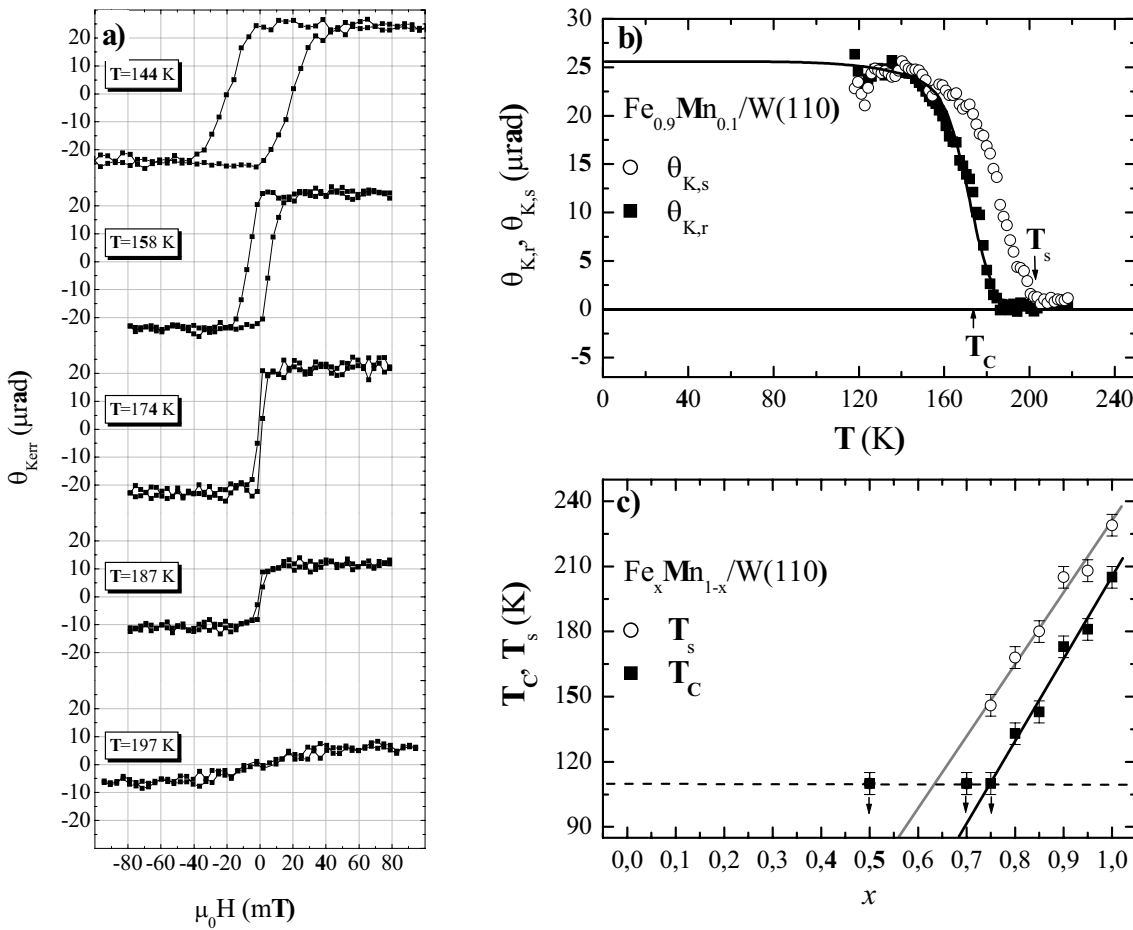


Abbildung 6.8: Magnetische Eigenschaften einer  $\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}/\text{W}(110)$  Submonolage mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$ . a) Einige Magnetisierungskurven für verschiedene Temperaturen. b) Die Abhängigkeit der remanenten  $\theta_{K,r}$ , sowie der Kerr-Drehung in Sättigung  $\theta_{K,s}$  von der Temperatur. Die durchgezogene Linie stellt einen Fit an die Datenpunkte von  $\theta_{K,r}$  mit der 2D-Isingfunktion und einer Gauss-Verteilung von  $T_C$  dar. c) Die Abhängigkeit der Curie-Temperatur  $T_C$  und  $T_s$  (Sättigungsmagnetisierung gleich Null) von der Legierungszusammensetzung. Die Pfeile kennzeichnen Konzentrationswerte, bei denen kein magnetisches Signal gefunden wurde und man vermutet, dass  $T_C$  bzw.  $T_s$  unterhalb der niedrigst möglichen Messtemperatur liegt.

beobachtet werden kann. Ein Fit an  $\theta_{K,r}$  mit einem Potenzgesetz ist nicht möglich, da  $\theta_{K,r}$  unterhalb von  $T = 160$  K nahezu konstant ist. Die Temperaturabhängigkeit kann viel besser mit Hilfe der analytischen Lösung der 2D-Isingfunktion beschrieben werden [Ons44] [Yan52]:

$$M(T) = M(0) \left[ 1 - \sinh^{-4} \left( \frac{2J}{k_B T} \right) \right]^{\frac{1}{8}}, \quad J = \frac{k_B T_C}{2,25}. \quad (6.4)$$

Wenn man zusätzlich eine Gauss-Verteilung der Curie-Temperatur annimmt, können die Messdaten gut beschrieben werden [Elm96] [Bir77] [Ste92] (durchgezogene Linie in Abbildung 6.8 b)). Die Verteilung von  $T_C$  (aus dem Fit wurde  $0,1 \cdot T_C$  ermittelt) geht mit der Verteilung der Terrassenbreiten des verwendeten Wolframsubstrates einher. Abbildung 6.8 c) zeigt die so ermittelten Curie-Temperaturen verschiedener Zusammensetzungen, sowie die Temperatur  $T_s$ , bei der die Sättigungskerrdrehung Null wird (bei einem äußeren Feld von  $\mu_0 H = 100$  mT).  $T_C$  fällt fast linear mit der Mn-Konzentration ab. Die kritische Temperatur  $T_s$  liegt etwa 20 K darüber, wobei sich der Unterschied mit der Mn-Konzentration leicht erhöht. Für eine Mn-Konzentration  $> 25\%$  ( $x < 0,75$ ) verschwindet das magnetische Signal bei der tiefsten zu erreichenden Messtemperatur. Dies kann zum einen mit dem Übergang des Systems in die paramagnetische Phase erklärt werden, zum anderen kann auch eine antiferromagnetische Ordnung des Systems (wie bei der entsprechenden Volumenlegierung) nicht ausgeschlossen werden. Mit der Kerr-Magnetometrie kann das nicht voneinander unterschieden werden. Das Verhältnis  $T_C(\text{Fe}_{ML})/T_C(\text{Fe}_{Vol})$  ist 0,3. Nimmt man für das Verhältnis der Néel-Temperaturen von FeMn-Volumen und Monolage den gleichen Wert an ( $T_C(\text{FeMn}_{ML})/T_C(\text{FeMn}_{Vol}) = 0,3$ ), erwartet man eine Néel-Temperatur von  $T_N = 100$  K für die FeMn-Monolage, was bereits unterhalb der Messtemperatur liegt. Mit steigender Fe-Konzentration wird  $T_N$  sogar noch kleiner. Der beobachtete Abfall von  $T_C$  mit der Fe-Konzentration  $x$  ist in Übereinstimmung mit den Eigenschaften der Volumen Fe-Mn Legierungen.  $T_C$  für Volumen bcc-Fe fällt mit einer Rate von 15 K/% mit der Mn-Konzentration ab [Nis86]. Die Monolage zeigt einen Abfall von 4 K/%. Da die Curie-Temperatur der Monolage ( $T_C(\text{Fe}_{ML}) = 225$  K) wesentlich kleiner ist als die der Volumenlegierung ( $T_C(\text{Fe}_{Vol}) = 1043$  K), ist es sinnvoll die auf  $T_C$  normalisierten Werte zu vergleichen. Für die Volumenlegierung ergibt sich somit  $[dT_C(x)/dx]/T_C(\text{Fe}) = -1,4 \cdot 10^{-2} \%$  und für die Monolage ein etwas größerer Wert von  $[dT_C(x)/dx]/T_C(\text{Fe}_{ML}) = -1,8 \pm 0,2 \cdot 10^{-2} \%$ . Die relativen Werte stimmen also fast überein. Zu beachten ist allerdings, dass die Volumenwerte der Fe-Mn Legierung nur für große Fe-Konzentrationen ( $x > 0,97$ ) bestimmt werden können, da bei größeren Mn-Konzentrationen eine metastabile martensitische Phase auftritt und ein Übergang in eine stabile, zufällig geordnete fcc-Legierungs-Phase für  $x < 0,7$  stattfindet. Die Abnahme des magnetischen Moments kann im Fall von Co-Fe aus dem Abfall der Kerr-Drehung indirekt geschlossen werden. Legt man das magnetische Grundzustandsmoment der Monolage Fe/W(110) von  $2,5\mu_B$  zugrunde, so ergibt sich eine Abnahme des magnetischen Moments mit der Mn-Konzentration von  $\Delta\mu = -(8 \pm 2) \mu_B$ . Im Vergleich zu Fe-Mn Volumenlegierungen ist diese Abnahme um einen Faktor vier größer ( $\Delta\mu = -2 \mu_B$ ) [LB86].

### 6.3 Elektronische Eigenschaften der 2D Co-Fe und Fe-Mn Legierungen

Die elektronischen Eigenschaften der untersuchten Legierungsmonolagen wurden mit Hilfe der Rastertunnelspektroskopie (STS) bestimmt. Für die spektroskopischen Messungen wurden  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  und  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Submonolagen mit einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$  präpariert und bei  $T_T = 780$  K getempert, um große zusammenhängende Inselstrukturen zu erhalten. Die  $dI/dU$ -Spektren wurden auf der pseudomorphen Monolage an 10 verschiedenen Punkten aufgenommen und anschließend gemittelt, um ein besseres Signal-Rauschverhältnis zu erzielen. Die Stabilisierungsparameter der Spitze ( $U = 1$  V,  $I = 500$  pA) wurden vor der Abschaltung der Abstandsregelung des STMs angelegt. Somit ist für alle Messungen ein konstanter Abstand Spitze-Probe gegeben. Der Abstand beeinflusst sehr stark die relative Peak-Höhe [Bod02]. Bei der Messung der Spektren wurde die Probenspannung von  $-1$  V bis  $+3$  V durchgeföhren. Ein Vergleich der Daten mit Spektren, die von  $+3$  V nach  $-1$  V gemessen wurden, zeigten eine geringfügige Verschiebung der Peaks um  $\Delta U = 0,025$  V. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.9 gezeigt. Hierbei konzentrieren sich die Spektren auf den Bereich von positiven Probenspannungen, d. h. die Elektronen tunneln von der Spitze in unbesetzte Probenzustände. Dieser Bereich wird weniger stark von Spitzenzuständen beeinflusst. Die Spektren zeigen signifikante Peaks, die sich mit der Legierungszusammensetzung verändern. So tritt bei den  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$ -Legierungsmonolagen eine Schulter auf, die sich mit zunehmender Mn-Konzentration von  $\Delta E = E - E_F = 2,3$  eV für reines Fe nach  $\Delta E = 1,7$  eV für reines Mn verschiebt. Für  $x = 1$  tritt ein Peak bei  $\Delta E = 0,3$  eV auf, der mit steigender Mn-Konzentration rasch verschwindet und bei  $x = 0,2$  und  $x = 0,3$  bei etwas geringerer Energie wieder auftaucht. Die Spektren der reinen Elemente können direkt mit den Spektren, die bereits von M. Bode [Bod02] und O. Pietzsch [Pie00a] gemessen wurden, verglichen werden. Bei der Messung der  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  Monolagen wurde darauf geachtet, dass auch für  $x < 0,5$  Spektren nur auf pseudomorphen Bereichen der Monolage aufgenommen wurden, insofern Bereiche mit dicht gepackten Wachstum überhaupt vorlagen. Die Schulter bei  $\Delta E = 2,3$  eV für  $x = 1$  verschwindet mit Zunahme von Co in der Legierung zunächst, um dann für  $x < 0,5$  wieder zu erscheinen. Der schwache Peak bei  $\Delta E = 0,3$  eV für reines Fe entwickelt sich zu einem ausgeprägten Peak beim reinen Co. Aus den Spektren kann nun direkt die lokale Zustandsdichte (LDOS) durch Normalisierung mit der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S,U)$  (Formel 2.16) bestimmt werden. Eine kleine Auswahl an normalisierten Spektren ist in Abbildung 6.10 zu sehen. Man kann die Spektren unterschiedlicher Legierungszusammensetzung leicht voneinander unterscheiden. Es ist nicht möglich diese durch eine gewichtete Mittelung von Spektren der reinen Elemente zu erhalten. Das zeigt, dass die elektronische Struktur des Systems bei der Fermi-Energie vielmehr eine Eigenschaft der binären Legierungsmonolage ist als die Summe der lokalen elektronischen Struktur der verschiedenen adsorbierten Atome.



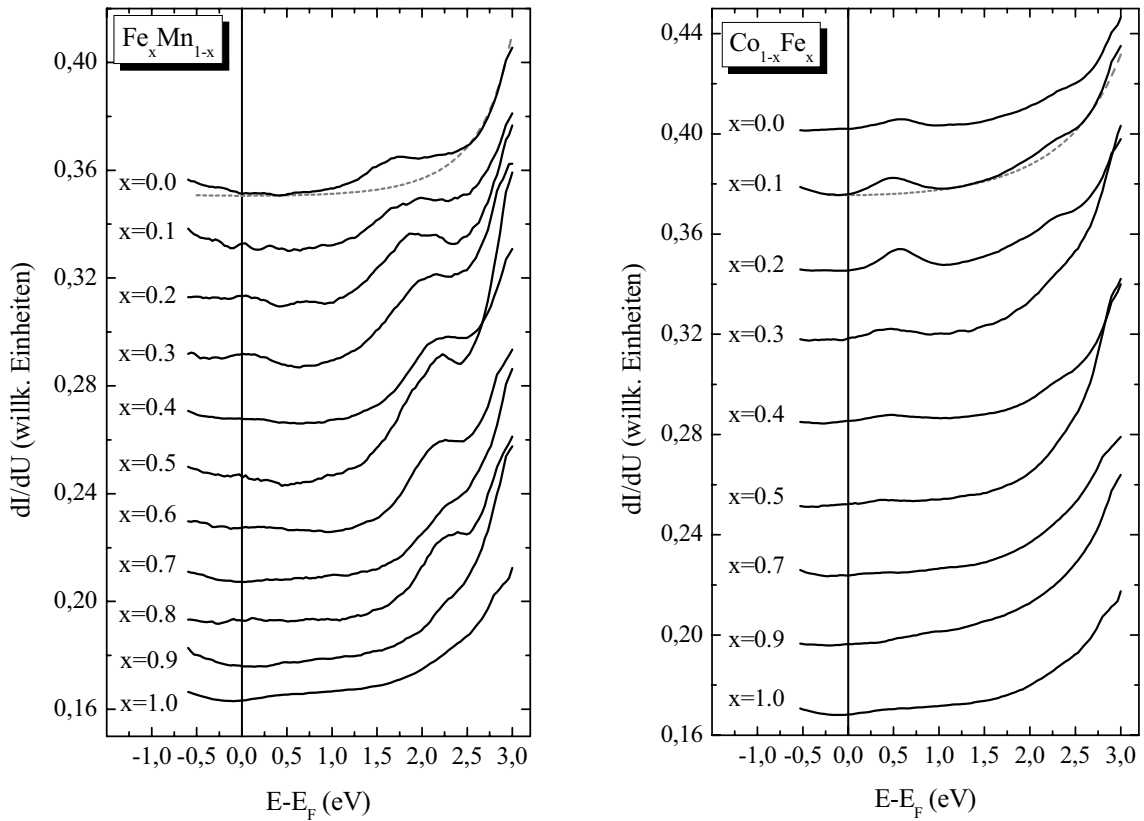


Abbildung 6.9: Differentielle Leitfähigkeitsspektren auf den pseudomorphen  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  und  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Legierungssubmonolagen. Jedes Spektrum wurde zehn Mal gemittelt. Es wurden Stabilisierungsparameter von  $U = 1$  V und  $I = 500$  pA, sowie eine Modulationsspannung von  $U_{mod} = 50$  mV verwendet. Die gepunkteten Linien zeigen einen Fit mit der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S, U)$ .

Die Fe/W(110) Monolage zeigt eine Struktur mit einem Maximum bei  $E - E_F = 0,5$  eV (siehe auch [Pie00a]), die durch zwei Gauss-Peaks mit Maxima bei  $E_a = 0,5$  eV und  $E_b = 1,1$  eV angefitet werden kann. Mit Hilfe der beiden Gauss-Peaks (a und b) lassen sich alle  $(dI/dU)/F$ -Spektren sehr gut beschreiben. Für  $\text{Co}_{0,8}\text{Fe}_{0,2}$  laufen die beiden Peaks zusammen und bilden für  $x \leq 0,2$  schließlich nur noch einen ausgeprägten Peak. Interessanterweise verschwindet bei dieser Legierungszusammensetzung die remanente Kerr-Drehung, die mittels Geraden-Fit auf  $T=0$  K extrapoliert wurde (siehe Abbildung 6.10 b)). Dies könnte ein Hinweis darauf sein, dass es sich bei der Doppelpeakstruktur um einen austauschgespaltenen Oberflächenzustand handelt. Obwohl die spektroskopischen Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt wurden, d. h. oberhalb der Curie-Temperatur des Systems, sollte trotzdem eine Austauschspaltung erhalten sein

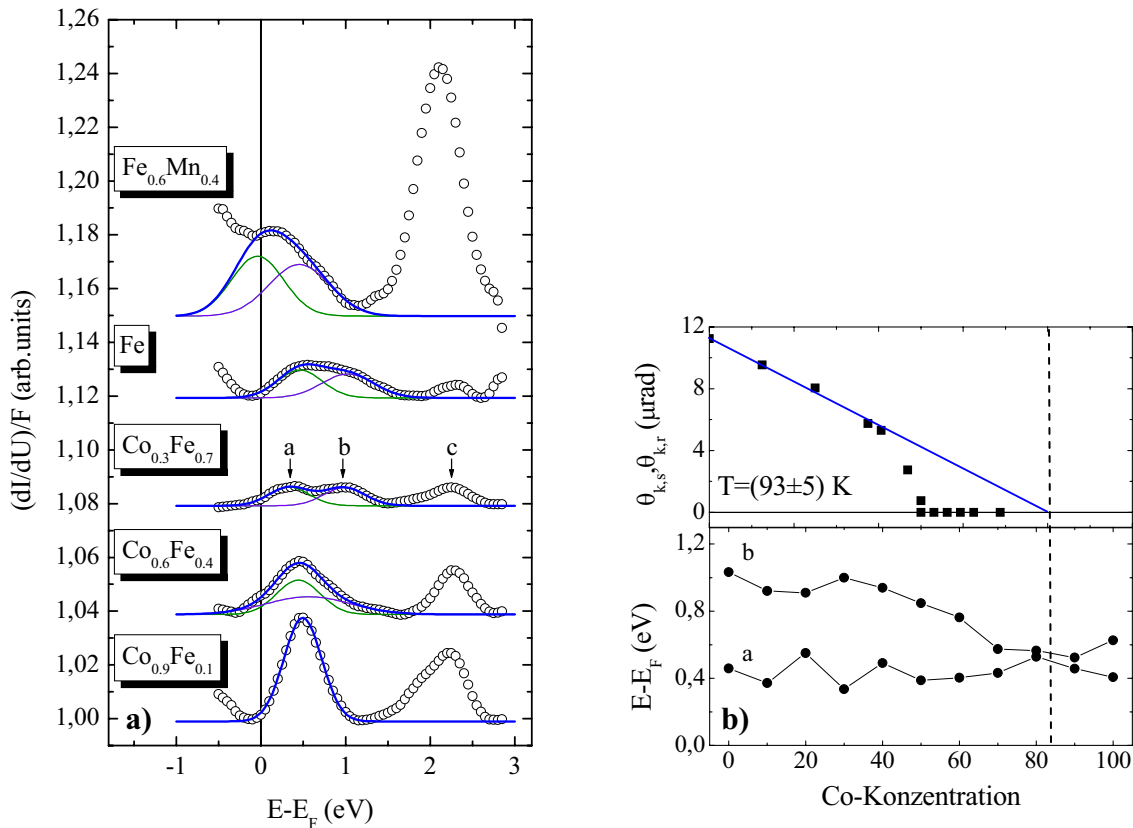


Abbildung 6.10: a) Differentielle Leitfähigkeitsspektren von  $Fe_xMn_{1-x}$  und  $Co_{1-x}Fe_x$  Legierungssubmonolagen, normalisiert mit der symmetrischen Tunneltransmissionsfunktion  $F(S,U)$ . An die  $(dI/dU)/F$  Kurven wurden zwei Gauss-Peaks angefitet. b) Peakpositionen der durch einen Gauss-Fit bestimmten Peaks a und b in Abhängigkeit von der Co-Konzentration. Die beiden Peaks vereinigen sich bei 80 % Co-Konzentration. Für diese Legierungszusammensetzung beobachtet man auch das Verschwinden der ferromagnetischen Ordnung bei  $T=0$  K (bestimmt aus Geradenfit an  $\theta_{K,r}$ ).

[Kis85] [Get98]. Rechnungen für  $Fe/W(110)$  [Qia99] [Qia03] und  $Mn/W(110)$  [Rho99] zeigten allerdings eine Doppelpeakstruktur in der LDOS bei ein wenig höherer Energie ( $0,8 \text{ eV} < \Delta E < 1,4 \text{ eV}$ ), die unbesetzten Oberflächenzuständen zugeordnet werden konnte (siehe Tabelle 6.1).

In Abbildung 6.11 sind die experimentellen Ergebnisse der normalisierten differentiellen Leitfähigkeitsspektren aller  $Fe_xMn_{1-x}$  und  $Co_{1-x}Fe_x$  Legierungsmonolagen auf  $W(110)$  in einem Intensitätsdiagramm zusammengefasst. In erster Näherung kann man hier direkt die lokale Zustandsdichte der unbesetzten Probenzustände in Abhängigkeit der Legierungszusammensetzung sehen. Dabei stellt die  $x$ -Achse die Gesamtzahl der Elektronen

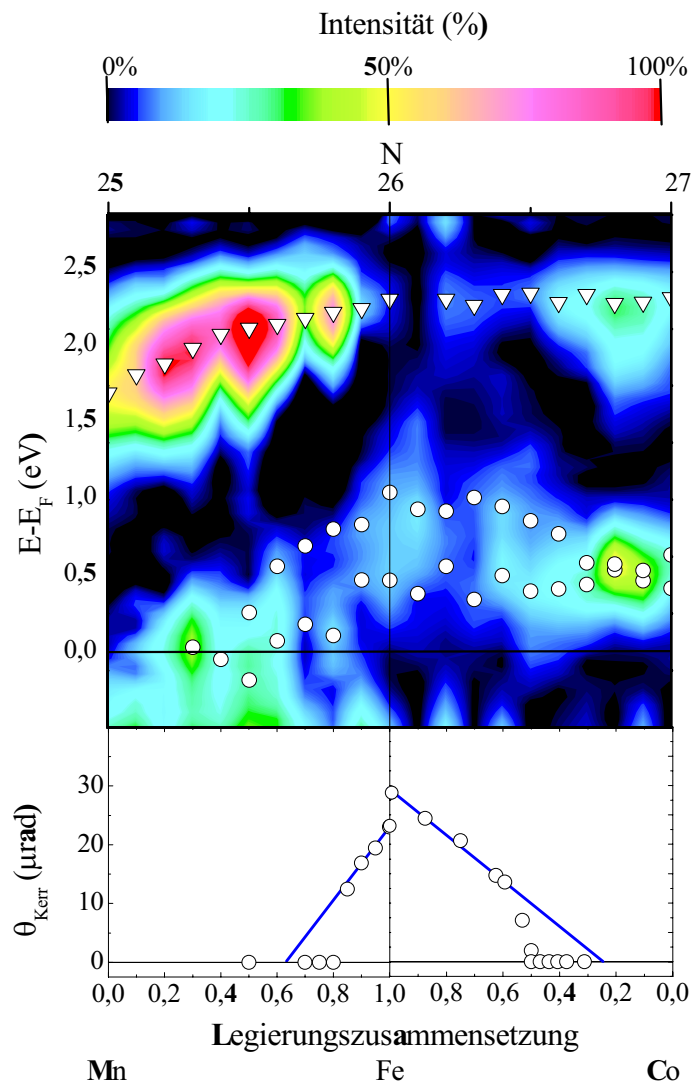


Abbildung 6.11: Intensitätsdiagramm der normalisierten differentiellen Leitfähigkeitsspektren  $(dI/dU)/F$  für pseudomorphe  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  und  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Legierungsmonolagen auf  $\text{W}(110)$ . Die Maxima des Gauss-Fits sind für die Doppelppeakstruktur a und b mit offenen Kreisen gekennzeichnet. Die offenen Dreiecke geben die Position von Peak c an. Der Vergleich mit dem permanenten Kerr-Signal zeigt eindrucksvoll den Zusammenhang von elektronischer Struktur und magnetischen Eigenschaften.

des Systems von  $N = 25$  (Mn) bis  $N = 27$  (Co) dar. Die größte Intensität findet man bei der  $\text{Fe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}/\text{W}(110)$  Monolage bei einer Energie von 2,1 eV (Peak c). Das Intensitätsmaximum verschiebt sich von  $E_c = 1,7$  eV bei reinem Mn ( $N = 25$ ) zu  $E_c = 2,1$  eV bei  $N = 25,4$  und schließlich weiter zu  $E_c = 2,3$  eV beim reinen Fe, wobei bei  $N = 25,4$  ein

	experimentell bestimmter Peak	theoretisch berechneter Peak	Art des Zustands	Ref.
<b>Mn</b>	-0,4 eV	-0,4 eV	besetzter Oberflächenzustand	[Bod02]
	1,68 eV	1,7 eV	flacher $d$ -Zustand	[Bod02]
<b>Fe</b>	$0,4 \text{ eV} < \Delta E < 1 \text{ eV}$	$0,8 \text{ eV} < \Delta E < 1,4 \text{ eV}$	unbesetzte Minoritätsoberflächen-zustände	[Qia99]
	$2,28 \text{ eV} < \Delta E < 1 \text{ eV}$	2,2 eV	flache $d$ -Band Struktur für Majoritäts- und Minoritätselektronen	[Qia99]
<b>Co</b>	2,3 eV	2,5 eV	flacher $d$ -Band Komplex für Majoritäts- und Minoritätszustände bei $\bar{\Gamma}$	[Wei93]

Tabelle 6.1: Zusammenfassung der Peak-Positionen für reines Mn, Fe und Co, sowie Vergleich mit theoretisch berechneten Peaks.

Knick in der Kurve auffällt. Für große Fe-Konzentration ist Peak c nur noch sehr schwach ausgeprägt. Auf der Co-Seite gewinnt der Peak für  $x < 0,5$  ( $N > 26,5$ ) wieder an Intensität, verbleibt aber bei einer Energie von 2,3 eV. Um die elektronische Struktur der Legierungen besser zu verstehen, ist es sinnvoll, einen Blick auf theoretische Rechnungen für die reinen Elemente zu werfen. Für Fe/W(110) wurden bereits Bandstrukturechnungen durchgeführt [Bod02] und Peaks bei  $E - E_F = -0,4 \text{ eV}$ , sowie bei  $E - E_F = 1,7 \text{ eV}$ , in guter Übereinstimmung mit der Messung, vorausgesagt. Peak c kann mit dem von X. Qian [Qia03] berechneten flachen  $d$ -Zustand bei 2,2 eV in Verbindung gebracht werden. Einen Vergleich der theoretisch berechneten und der experimentell bestimmten Peaks befindet sich in Tabelle 6.1.

Für die Erklärung der Messergebnisse ist offensichtlich die Annahme eines *rigid band*-Modells zu einfach. Trotzdem würde man für die  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Monolagen mit zunehmender Co-Konzentration eine Verschiebung der Bänder in Richtung Fermi-Energie erwarten, wie auch im Experiment beobachtet. Für die  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  Monolage würde man nach dem einfachen Modell eine Verschiebung der Peaks zu höheren Energien erwarten, da die Mn-Atome im Vergleich zu Fe ein  $d$ -Elektron weniger besitzen. Wie aber bereits von J. Friedel [Fri62] für Volumenlegierungen behauptet, können die energetischen Zustände des Mangans wegen der negativen Kernladungszahl im Vergleich zu Fe ( $\Delta Z = -1$ ) stark gestört werden. Dies hat zur Folge, dass Zustände durch die Fermi-Energie wandern und somit ihre Elektronen (schwach gebundene  $s$ -Elektronen) an unbesetzte  $3d$ -Minoritätszustände abgeben. Durch diesen Elektronentransfer erreicht man eine ähnliche Situation wie beim Co, nämlich den Überschuss an einem  $d$ -Elektron. Somit erhöht sich auch die mittlere

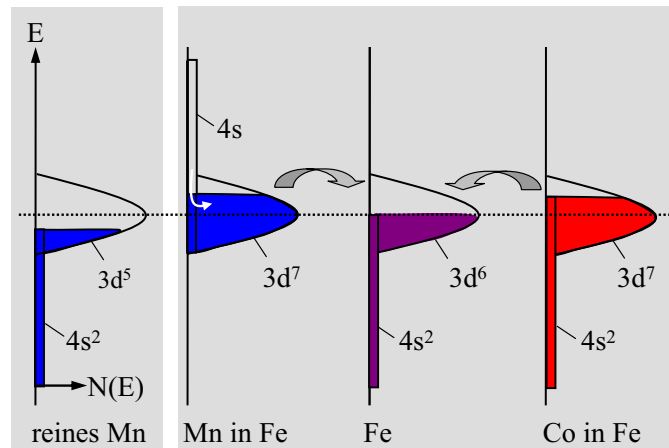


Abbildung 6.12: Schematische Darstellung der  $e^-$ -Situation von Mn bzw. Co in der Fe-Legierung. Die Anzahl der  $3d$ - und  $4s$ -Elektronen pro Mn/Fe/Co-Atom sind in dem Diagramm angegeben. Durch die geringere Kernladungszahl von Mn sind die  $4s$ -Elektronen nur schwach gebunden und können in der Legierung mit Fe unbesetzte  $3d$ -Zustände auffüllen. Damit erhöht sich, ebenso wie durch die Beimischung von Co, die mittlere  $d$ -Elektronenzahl der Legierung, womit eine Verringerung von  $N(E_F)$  und der Magnetisierung einher geht.

Elektronenzahl für die Beimischung von Mn zum Fe und die durch die  $d$ -Zustände hervorgerufenen Strukturen der LDOS wandern zur Fermi-Energie. Veranschaulicht dargestellt ist die energetische Situation für die Legierungen in der Abbildung 6.12. In der Legierung mit Fe verhalten sich Mn und Co ähnlich, sie tragen beide mit einem  $d$ -Elektron zur Legierung bei. Die Verschiebung der elektronischen Zustände zur Fermi-Energie kann nun direkt mit der Abnahme des magnetischen Momentes in Verbindung gebracht werden. Um die elektronischen mit den magnetischen Eigenschaften besser vergleichen zu können, wurde in Abbildung 6.11 zusätzlich die remanente Kerr-Drehung als Funktion von  $N$  aufgetragen. Dabei wurde die Kerr-Drehung für unbedeckte  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  Monolagen bei einer konstanten relativen Temperatur  $T/T_C = 0,9$  bestimmt, die in etwa proportional zum Grundzustandswert sein sollte. Für das System  $\text{Au}/\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  wurden die zuvor bestimmten Werte verwendet (siehe Abbildung 6.3). Die remanente Kerr-Drehung mit und ohne Au-Bedeckung der  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  Monolage ist nahezu gleich (siehe [Pie02]). Trotzdem sollte man sich darüber im Klaren sein, dass eine Au-Bedeckung die elektronischen Eigenschaften der Probe ändern kann.

Anhand der Daten für die dickenabhängige Kerr-Drehung der  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Legierungen (Abbildung 6.5) kann man schlussfolgern, dass sich die spezifische Kerr-Drehung nur wenig mit  $x$  ändert, in grober Übereinstimmung der Legierungszusammensetzungsabhängigkeit bei Volumenlegierungen. Die Änderung der Magnetisierung und der Kerr-Drehung beträgt nur etwa 10 %. Daher kann man annehmen, dass die Kerr-Drehung der Monolagen

eine grobes Maß für die Magnetisierung darstellt. Wie bereits erwähnt, kann die Abnahme der Magnetisierung des  $\text{Au}/\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x/\text{W}(110)$  Systems mit zunehmenden  $N$  bei niedrigen Temperaturen in Verbindung mit dem Auffüllen von  $d$ -Löchern gebracht werden. Für die  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  Monolage erwartet man nach dem Modell von Friedel [Fri62] eine Reduktion des magnetischen Momentes mit der Mn-Konzentration von  $\Delta\mu/\Delta x = -(\Delta Z + 10) = -9 \mu_B/\text{Atom}$ , bestimmt haben wir einen Wert von  $\Delta\mu/\Delta x = (-8 \pm 2) \mu_B/\text{Atom}$ . Man kann somit die gleiche Erklärung mit Hilfe des Stoner-Modells für die Reduktion des magnetischen Moments mit der Zunahme von Mn zu Rate ziehen, indem man berücksichtigt, dass das Ersetzen von Fe Atome durch Mn Atome die elektronischen Zustände auch zu geringeren Energien verschiebt und damit sich die Zustandsdichte bei  $E_F$  verringert. Die reine Fe-Monolage weist also das größte magnetische Moment aller untersuchten 2D-Legierungen auf.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Als Ziel dieser Arbeit hatten wir uns gesetzt, magnetische Nanostrukturen hoher Qualität herzustellen, und deren strukturellen, magnetischen und elektronischen Eigenschaften zu korrelieren. Die Erwartung war, dass die Eigenschaften deutlich von Volumenwerten abweichen und eine gezielte Beeinflussung durch die Präparation möglich wird. Dazu musste eine Untersuchungsmethode entwickelt werden, die die Bestimmung der elektronischen Eigenschaften mit hoher Ortsauflösung ermöglicht. Die wesentlichen Ergebnisse werden im Folgenden zusammengefasst und bewertet. Die magnetischen Nanostrukturen wurden durch Molekularstrahlepitaxie im Ultrahochvakuum hergestellt und in-situ untersucht. Als Substrat für alle Messungen diente ein Wolfram(110)-Einkristall mit einer glatten und einer vizinalen Oberfläche. Als Untersuchungsmethoden wurde zur Bestimmung der magnetischen Eigenschaften longitudinale Kerr-Magnetometrie verwendet. Die strukturellen Untersuchungen wurden mit niederenergetischer Elektronenbeugung, sowie Rastertunnelmikroskopie durchgeführt. Mit Hilfe der Tunnelstromspektroskopie ist es möglich, die elektronische Struktur von Oberflächen mit höchster Ortsauflösung zu bestimmen.

In Kapitel 4 sind Ergebnisse zu Fe-Nanostreifen und Fe-Submonolageninseln zusammengefasst. Hierbei wurden die magnetischen Eigenschaften, wie die Curie-Temperatur, Sättigungsfeldstärke und Suszeptibilität in Abhängigkeit der Temperatur und der Bedeckung untersucht. Für die unbedeckten Nanostreifen konnte man mit einer Kombination aus spinpolarisierter Rastertunnelspektroskopie und einer Analyse der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität die magnetische Anisotropiekonstante und die Austauschsteifigkeit unabhängig voneinander bestimmen. Dabei zeigte das Fe/W(110)-Nanostreifensystem eine extrem große Anisotropie von  $K = 40,6 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3$  ( $e_K = 4 \text{ meV/Atom}$ ) und fast atomar scharfe Domänenwände. Für die Anwendung würde das eine mögliche Speicherdichte von mehreren hundert Tbit/inch<sup>2</sup> bedeuten, was einer Erhöhung der Speicherdichte gegenüber dem heutigen Stand um einen Faktor 3000-4000 entspricht. Das System müsste allerdings mit Hilfe von flüssigem Stickstoff gekühlt wer-

den, was die technische Realisation etwas erschwert. Die untersuchten Au- bzw. Pd-Abdeckungen (als Oxidationsschutz) reduzierten die Anisotropie um fast eine Größenordnung und sind daher aus anwendungstechnischer Sicht nicht ideal. Weiterführende Untersuchungen mit anderen Materialien für die Abdeckung, die die Anisotropie weniger stark senken, scheinen erfolgversprechend.

Das mit Au abgedeckte System aus parallelen Fe-Nanostreifen zeigte eine weitere Besonderheit. Es konnte eine antiferromagnetische Kopplung der Streifen für einen mittleren Streifenabstand von  $W_a = 5$  Atomreihen beobachtet werden, was durch eine laterale indirekte Austauschkopplung, dem zweidimensionalen Analogon der indirekten Austauschkopplung bei dreidimensionalen Multilagensystemen, erklärt werden konnte. Weitere antiferromagnetische Maxima für größere Streifenabstände konnten allerdings aufgrund der großen Streuung der Terrassenbreiten nicht beobachtet werden. Eine technische Anwendung dieses Systems im Sinne eines lateralen Riesenmagnetowiderstandselements wäre nur durch ein nichtleitendes Substrat realisierbar. Ein Wachstum von atomar hohen Nanostreifen mittels Selbstorganisation ist damit aber nicht möglich, da die freie Oberflächenenergie von Isolatoren wesentlich kleiner ist als die der Übergangsmetalle und somit kein Lagenwachstum möglich ist. Auch hier bestehen sicherlich Ansatzpunkte für die weitere Forschung.

In Kapitel 5 wurden Ergebnisse zu dem Wachstum und den elektronischen Eigenschaften von Co-Monolagen auf W(110) dargestellt. In der Co-Monolage konnte der Übergang vom pseudomorphen zu dicht gepacktem Wachstum mit Hilfe der Rastertunnelspektroskopie sichtbar gemacht werden. Es bildeten sich ab einer Bedeckung von  $\theta = 0,7$  zunächst einzelne Bereiche in der Monolage, die dicht gepackt in Nishiyama-Wassermann-Orientierung aufwuchsen. Die niederenergetische Elektronenbeugung zeigte eine  $(8 \times 1)$ -Überstruktur. Das Wachstum der dicht gepackten Lage konnte mit Hilfe von atomar aufgelösten Rastertunnelmikroskopie direkt sichtbar gemacht werden und bestätigte zum ersten Mal experimentell die 1994 von J. H. van der Merwe aufgestellte Theorie zum Wachstum von dicht gepackten Metallmonolagen auf einem bcc-Substrat [vdM94a]. In der vollständig geschlossenen, dicht gepackten Monolage konnten zwei Wachstumsarten parallel beobachtet werden, die vollständige und die unvollständige Versetzung der Co-Atome. Bei der vollständigen Versetzung liegen alle Co-Atome entlang der [001]-Richtung, wobei die Atomabstände periodisch variiert werden, um somit energetisch ungünstige Plätze auf den Potentialmaxima der Substratome zu verhindern. In den Bereichen mit unvollständiger Versetzung weichen die Co-Atome sinusförmig von der [001]-Richtung ab. Die beiden Bereiche konnten anhand von Versetzungslinien mit einer  $(4 \times 1)$ - und einer  $(8 \times 1)$ -Überstruktur auch im nicht atomar aufgelösten STM-Bild bei  $U = 0,3$  V unterschieden werden. Auf den Co-Doppellageninseln konnte bei einer Energie von 0,24 eV eine stehende Elektronenwelle angeregt werden, die durch die  $(8 \times 1)$ -Überstruktur induziert wurde. Bei drei Atomlagen hohen Co-Inseln konnten zwei verschiedene Tunnelstromspektren beobachtet werden, die sich im Wesentlichen nur bei



-0,4 V und 0,3 V unterschieden haben und durch eine unterschiedlichen Stapelfolge (fcc/hcp) der Co-Atome erklärt werden konnten. Bei einer Präparation bei Raumtemperatur beobachtete man ein Verhältnis der fcc/hcp Inseln von etwa 1:3. Durch eine thermische Behandlung der Probe wurde der Anteil der fcc-Bereiche verringert und ein Großteil der Oberfläche wuchs mit der hcp-Volumenstapelfolge.

Mit Hilfe von  $dI/dU$ -Aufnahmen gelang es zwei verschiedene Kontraste beim Übergang von der einen zur anderen Stapelfolge zu beobachten. Auf der Doppellage Co konnten Bereiche unterschiedlicher Stapelfolge gefunden werden, die bei -0,4 V abwechselnd von hellen und dunklen Versetzungslinien begrenzt wurden. Auch in der Tripellage Co beobachtete man eine spektroskopisch helle Versetzung, die aufgrund einer geringfügigen Verschiebung des Peaks bei -0,4 V im fcc-Co Spektrum zu negativeren Energien zustande kam. Andere Übergänge in der TL zeigten dagegen keinen Kontrast. Mit Hilfe eines einfachen Hartkugelmodells konnten vier verschiedene Übergänge gefunden werden, die sich aufgrund der Anordnung und der Dichte der Atome im Bereich der Versetzung unterscheiden. Damit war es möglich, die atomaren Stapelfolgen und Versetzungstypen für alle untersuchten Spektroskopieaufnahmen konsistent zu zuordnen. Für die zukünftige Forschung wäre es sicherlich interessant den Zusammenhang zwischen der atomaren Stapelfolge und der Magnetisierungsrichtung mit Hilfe von spin-polarisierter Rastertunnel-spektroskopie zu untersuchen.

Kapitel 6 fasst Ergebnisse zu zweidimensionalen Co-Fe und Fe-Mn Legierungen hinsichtlich ihrer strukturellen, magnetischen und elektronischen Eigenschaften zusammen. Mit Hilfe von atomar aufgelöster Rastertunnelmikroskopie und niederenergetischer Elektronenbeugung konnte eine zum Teil atomar geordnete Co-Fe Legierungsmontage mit einer  $\text{CoFe}_3\text{-p}(2 \times 2)$ -Überstruktur für eine Fe-Konzentration von  $0,6 < x \leq 0,8$ , sowie einer  $\text{CoFe-c}(2 \times 2)$ -Überstruktur für  $0,4 < x \leq 0,6$  beobachtet werden. Bei den Fe-Mn Legierungen wurden keine geordneten Bereiche gefunden. Mit der Tunnelstromspektroskopie und Kerr-Magnetometrie konnte die Abhängigkeit der lokalen Zustandsdichte von der Legierungszusammensetzung bestimmt und ein direkter Zusammenhang mit der Magnetisierung gezeigt werden. Die Co-Fe Legierungen ließen sich mit Hilfe des *rigid band* Modells beschreiben, während diese Betrachtung für die Fe-Mn Legierungen nicht mehr möglich war, da die Bandstruktur durch die geringere Kernladungszahl von Mn im Vergleich zu Fe und Co stark gestört wurde. Dabei kann man sich vorstellen, dass die 4s-Elektronen des Mangans die 3d-Zustände auffüllen und das Mangan sich in der Legierung so ähnlich verhält wie das Kobalt, d. h. es trägt auch zwei Elektronen pro Atom bei. Die reine Fe-Montage besaß daher das größte magnetische Moment der untersuchten binären Legierungen.

Eine mögliche zweidimensionale Legierung mit einer höheren Magnetisierung könnten Fe-Cr-Legierungen darstellen, da Cr nur ein 4s-Elektron besitzt, das in der Legierung höchstwahrscheinlich auch an einen 3d-Zustand abgegeben wird, insgesamt fehlt aber dann ein 3d-Elektron im Vergleich zum Fe. D. h. das Chrom könnte die mittlere Elek-

tronenzahl der Legierung verringern, was notwendig ist, um die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie zu erhöhen. Diese Überlegung gilt natürlich nur für den Fall, das sich die Bandstruktur nicht wesentlich mit der Legierungszusammensetzung ändert.

In dieser Arbeit ist es also gelungen, neue Informationen über magnetische Nanostrukturen durch Kombination von Kerr-Magnetometrie und Rastertunnelspektroskopie zu gewinnen. Die Ergebnisse sind aber teilweise nur mit einfachen, qualitativen Modellen verstanden. Am wichtigsten für das physikalische Verständnis sind Modellrechnungen, die im Zusammenhang mit den Ergebnissen diskutiert werden müssen. Auch experimentell gibt es eine Vielzahl von weiteren Aufgaben. Besonders interessant erscheint die spinpolarisierte Rastertunnelspektroskopie, um spinaufgelöste Bandstruktureffekte bestimmen zu können.

# Literaturverzeichnis

- [Aba98] G. Abadias, A. Marty und B. Gilles. *Acta Mater.* **46** (1998), 6403.
- [Alb89] E. V. Albano, K. Binder, D. W. Heermann und W. Paul. *Z. Phys. B* **77** (1989), 445.
- [Alb03] M. Albrecht, J.-U. Thiele und A. Moser. *Physik Journal* **2 (10)** (2003), 25.
- [App69] J. A. Appelbaum und W. F. Brinkmann. *Phys. Rev.* **186** (1969), 464.
- [Bad02] S. D. Bader. *Surf. Sci.* **500** (2002), 172.
- [Bai88] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert und F. N. V. Dau. *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988), 2472.
- [Bar61] J. Bardeen. *Phys. Rev. Lett.* **6** (1961), 57.
- [Bau58] E. Bauer. *Z. Kristallogr.* **110** (1958), 372.
- [Bau99] E. Bauer. *J. Phys.: Condens. Matter* **11** (1999), 9365.
- [Bin89] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach und W. Zinn. *Phys. Rev. B* **39** (1989), 4828.
- [Bir77] R. J. Birgeneau, J. Als-Nielsen und G. Shirane. *Phys. Rev. B* **16** (1977), 280.
- [Bod01a] M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, S. Heinze und R. Wiesendanger. *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), 2142.
- [Bod01b] M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka und R. Wiesendanger. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114-116** (2001), 1055.
- [Bod02] M. Bode, S. Heinze, A. Kubetzka, O. Pietzsch, M. Hennefarth, M. Getzlaff, R. Wiesendanger, X. Ni, G. Bihlmayer und S. Blügel. *Phys. Rev. B* **66** (2002), 014425.

- [Boz51] R. M. Bozorth. *Ferromagnetism*. Van Nostrand, New York (1951).
- [Bru95] P. Bruno. *Phys. Rev. B* **52** (1995), 411.
- [Bus03a] C. Busse, S. Baud, G. Bihlmayer, C. Polop, T. Michely und S. Blügel. *Phys. Rev. B* **68** (2003), R201401.
- [Bus03b] C. Busse, C. Polop, M. Müller, K. Albe, U. Linke und T. Michely. *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), 056103.
- [Che90] C. J. Chen. *Phys. Rev. B* **42** (1990), 8841.
- [Chi97] S. Chikazumi. *Physics of Ferromagnetism*. Oxford Science, Oxford (1997).
- [Cho95] S. Y. Chou, P. R. Krauss und P. J. Renstrom. *Appl. Phys. Lett* **67** (1995), 3114.
- [Cla99] P. G. Clark und C. M. Friend. *J. Chem. Phys.* **111** (1999), 6991.
- [Dal00] A. Dallmeyer, C. Carbone, W. Eberhardt, C. Pampuch, O. Rader, W. Gudat, P. Gambardella und K. Kern. *Phys. Rev. B* **61** (2000), R5133.
- [Dal02] P. G. A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern und C. Carbone. *Nature (London)* **416** (2002), 301.
- [Die03] L. Diekhöner, M. A. Schneider, A. N. Baranov, V. S. Stepanyuk, P. Bruno und K. Kern. *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), 236801.
- [Dit00] A. Dittschar, W. Kuch, M. Zharnikov und C. M. Schneider. *J. Magn. Magn. Mater.* **212** (2000), 307.
- [dP00] A. L. V. de Parga, F. J. Garcia-Vidal und R. Miranda. *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), 4365.
- [Dud01] T. Duden, R. Zdyb, M. S. Altman und E. Bauer. *Surf. Sci.* **480** (2001), 145.
- [Elm89] H. J. Elmers, G. Liu und U. Gradmann. *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989), 566.
- [Elm94] H. J. Elmers, J. Hauschild, H. Höche, U. Gradmann, H. Bethge, D. Heuer und U. Köhler. *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), 898.
- [Elm95a] H. J. Elmers. *Int. J. Mod. Phys. B* **9** (1995), 3115.
- [Elm95b] H. J. Elmers, J. Hauschild, H. Fritzsche, G. Liu, U. Gradmann und U. Köhler. *Phys. Rev. Lett.* **95** (1995), 2031.
- [Elm96] H. J. Elmers, J. Hauschild und U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **54** (1996), 15224.

- [Elm97] H. J. Elmers, J. Schwabenhausen und T. Dürkop. In *Magnetic Ultrathin Films and Surfaces* (editiert von J. Tobin, D. Chambliss, D. Kubinski, K. Barmak, P. Dederichs, W. de Jonge, T. Katayama und A. Schuhl), Vol. 475. MRS Symposia Proceedings, Material Research Society, Pittsburgh (1997). S. 605.
- [Elm98] H. J. Elmers. *J. Magn. Magn. Mater.* **185** (1998), 274.
- [Elm99] H. J. Elmers, J. Hauschild und U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **59** (1999), 3688.
- [Fac99] S. Facsko, T. Dekorsky, C. Koerdts, C. Trappe, H. Kurz, A. Vogt und H. Hartnagel. *Science* **285** (1999), 1551.
- [Fed94] A. G. Fedorus, A. A. Gributa und I. A. Kotlyarova. *Surf. Sci.* **317** (1994), 170.
- [Feu83] T. E. Feuchtwang, P. H. Cutler und N. M. Miskovsky. *Phys. Rev. Lett.* **99A** (1983), 167.
- [Fre04] A. J. Freeman. *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), 057202.
- [Fri62] J. Friedel. *J. Phys. Radium* **23** (1962), 501.
- [Fri95a] H. Fritzsche. *Struktur und Magnetismus ultradünner Eisen- und Kobalt-Epitaxialschichten*. Dissertation, Technische Universität Clausthal (1995).
- [Fri95b] H. Fritzsche, J. Kohlhepp und U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **51** (1995), 15933.
- [Gar83] N. García, C. Ocal und F. Flores. *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983), 2002.
- [Get93] M. Getzlaff, J. Bansmann und G. Schönhense. *Solid State Commun.* **87** (1993), 467.
- [Get96] M. Getzlaff, J. Bansmann, J. Braun und G. Schönhense. *J. Magn. Magn. Mater.* **161** (1996), 70.
- [Get98] M. Getzlaff, M. Bode, S. Heinze, R. Pascal und R. Wiesendanger. *J. Magn. Magn. Mater.* **184** (1998), 155.
- [Grü86] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky und H. Sowers. *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986), 2442.
- [Gra86] U. Gradmann, J. Korecki und G. Waller. *Appl. Phys. A : Mater. Sci. Process.* **39** (1986), 101.
- [Gra90] U. Gradmann, G. Liu, H. J. Elmers und M. Przybylski. *Hyperfine Interact.* **57** (1990), 1845.

- [Gra93] U. Gradmann. *Handbook of Magnetic Materials*, Vol. 7. editiert von K. H. J. Buschow, Elsevier, Amsterdam (1993).
- [Hau98a] J. Hauschild. *Morphologie und Magnetismus ultradünner Eisenfilme auf vizi-nalem Wolfram(110)*. Dissertation, TU Clausthal (1998).
- [Hau98b] J. Hauschild, H. J. Elmers und U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **57** (1998), R677.
- [Hau98c] J. Hauschild, U. Gradmann und H. J. Elmers. *Appl. Phys. Lett.* **72** (1998), 3211.
- [He93] J.-W. He, W. K. Kuhn und D. W. Goodman. *Surf. Sci.* **292** (1993), 248.
- [Hei96] K. R. Heim und M. R. Scheinfein. *J. Magn. Magn. Mater.* **154** (1996), 141.
- [Hei99] K. Heinz, S. Müller und L. Hammer. *J. Phys.: Condens. Matter* **11** (1999), 9437.
- [Hei00] S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel und R. Wiesendanger. *Science* **288** (2000), 1805.
- [Him98] F. J. Himbsel, J. E. Ortega, G. K. Mankey und R. F. Willis. *Adv. Phys.* **47** (1998), 511.
- [Hub93] A. Huber und G. Traeger. *J. Magn. Magn. Mater.* **124** (1993), 185.
- [Hub98] A. Hubert und R. Schäfer. *Magnetic Domains*. Springer, Berlin (1998).
- [Jam99] P. James, O. Eriksson, B. Johansson und I. A. Abrikosov. *Phys. Rev. B* **59** (1999), 419.
- [Joh90] B. G. Johnson, P. J. Berlowitz, D. W. Goodman und C. H. Bartholomew. *Surf. Sci.* **217** (1990), 281.
- [Kah98] S.-J. Kahng, Y. J. Choi, J.-Y. Park und Y. Kuk. *Appl. Phys. Lett.* **74** (1998), 1087.
- [Ker71] J. Kerr. *Phil. Mag. (5)* (1871), 321.
- [Kis85] E. Kisker, K. Schröder, W. Gudat und M. Campagna. *Phys. Rev. B* **31** (1985), 329.
- [Kle86] M. V. Klein und T. E. Furtak. *Optik*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo (1986) .
- [Kno93] H. Knoppe und E. Bauer. *Phys. Rev. B* **48** (1993), 1794.

- [Kol84] K. Kolaczkiwicz und E. Bauer. *Surf. Sci.* **144** (1984), 495.
- [Koz90] C. Kozio, G. Lilienkamp und E. Bauer. *Phys. Rev. B* **41** (1990), 3364.
- [Kri97] S. Krimmel, W. Donner, B. Nickel, H. Dosch, C. Sutter und G. Grubel. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 3880.
- [LB86] Landolt-Börnstein. *3d, 4d and 5d Elements, Alloys and Compounds*, Vol. 19a. Springer, Heidelberg (1986).
- [Li91] C. Li, Freeman, A. J. Freeman und C. L. Fu. *J. Magn. Magn. Mater.* **94** (1991), 134.
- [Lip03] M. Lippert, H. J. Elmers und P. van Dongen (2003). Persönliche Mitteilung.
- [Mat02] F. Matthes, M. Seider und C. M. Schneider. *J. Appl. Phys.* **91** (2002), 8144.
- [Mey03] H. L. Meyerheim, D. Sander, R. Popescu, J. Kirschner, O. Robach, S. Ferrer und P. Steadman. *Phys. Rev. B* **67** (2003), 155422.
- [Mül93] M. Müller und W. Paul. *J. Stat. Phys.* **73** (1993), 209.
- [N2403] N24. <http://www.n24.de/index.php?a2003022516513429574> (2003).
- [Nie03] X. Nie, G. Bihlmayer und S. Blügel (2003). Persönliche Mitteilung.
- [Nis86] T. Nishizawa und K. Ishida. *Binary Alloy Phase Diagrams*. ASM, Materials Park, OH (1986).
- [Oci90] J. G. Ociepa, P. J. Schultz, K. Griffiths und P. R. Norton. *Surf. Sci.* **225** (1990), 281.
- [Oku02] S. N. Okuno, T. Kishi und K. Tanaka. *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), 066803.
- [Ons44] L. Onsager. *Phys. Rev.* **65** (1944), 117.
- [Par90] S. S. P. Parkin, N. More und K. P. Roche. *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990), 2304.
- [Pie00a] O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode und R. Wiesendanger. *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), 5212.
- [Pie00b] O. Pietzsch, A. Kubetzka, D. Haude, M. Bode und R. Wiesendanger. *Rev. Sci. Instrum.* **71** (2000), 424.
- [Pie02] J. P. Pierce, E. W. Plummer und J. Shen. *Appl. Phys. Lett.* **81** (2002), 1890.

- [Pla04] J. Plate. <http://computermuseum-muenchen.de/dictionary/storage.html> (2004).
- [Pra04] M. Pratzner und H. J. Elmers. *J. Cryst. Growth* (2004), akzeptiert.
- [Pri81] G. A. Prinz, W. G. Maisch, P. Lubitz, D. W. Forrester und J. J. Krebs. *IEEE Trans. Magn.* **17** (1981), 3232.
- [Pri95] G. A. Prinz und K. Hathaway. *Phys. Today* **48** (1995), 24.
- [Prz89] M. Przybylski, I. Kaufmann und U. Gradmann. *Phys. Rev. B* **40** (1989), 8631.
- [Qia99] X. Qian und W. Hübner. *Phys. Rev. B* **60** (1999), 16192.
- [Qia03] X. Qian und W. Hübner. *Phys. Rev. B* **67** (2003), 184414.
- [Rab94] A. Rabe, N. Memmel, A. Steltenpohl und T. Fauster. *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), 2728.
- [Rho99] T.-H. Rho, G.-B. Cha, Y. Kwon, C. Lee und S.-C. Hong. *J. Korean Phys. Soc.* **35** (1999), 564.
- [San96] D. Sander, R. Skomski, C. Schmidhals, A. Enders und J. Kirschner. *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), 2566.
- [San98] D. Sander, C. Schmidhals, A. Enders und J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **57** (1998), 1406.
- [Sch97] F. O. Schumann, R. F. Willis, K. G. Goodman und J. G. Tobin. *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), 5166.
- [Sel85] A. Selloni, P. Carnevali, E. Tosatti und C. D. Chen. *Phys. Rev. B* **31** (1985), 2602.
- [Sen97] P. Sen, D. Stauffer und U. Gradmann. *Physica A* **245** (1997), 361.
- [She97] J. Shen, R. Skomski, M. Klaua, H. Jenniches, S. S. Manoharan und J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **56** (1997), 2340.
- [She02] J. Shen und J. Kirschner. *Surf. Science* **500** (2002), 300.
- [Spi04] D. Spišák und J. Hafner. *Phys. Rev. B* **70** (2004), 014430.
- [Ste92] U. Stetter, M. Farle, K. Baberschke und W. G. Clark. *Phys. Rev. B* **45** (1992), 503.
- [Sti93] M. D. Stiles. *Phys. Rev. B* **48** (1993), 7238.



- [Sue97] J.-S. Suen und J. L. Erskine. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 3567.
- [Ter83] J. Tersoff und D. R. Hamann. *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983), 1998.
- [Ter85] J. Tersoff und D. R. Hamann. *Phys. Rev. B* **31** (1985), 805.
- [Tik90] M. Tikhov und E. Bauer. *Surf. Sci.* **232** (1990), 73.
- [Tsu99] H. Tsunematsu und Y. Gotoh. *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999), 2899.
- [Ukr96] V. Ukraintsev. *Phys. Rev. B* **53** (1996), 11176.
- [vdM82] J. H. van der Merwe. *Philos. Mag. A* **45** (1982), 145.
- [vdM94a] J. H. van der Merwe, E. Bauer, D. L. Tönsing und P. M. Stoop. *Phys. Rev. B* **49** (1994), 2127.
- [vdM94b] J. H. van der Merwe, E. Bauer, D. L. Tönsing und P. M. Stoop. *Phys. Rev. B* **49** (1994), 2137.
- [Vet00] P. Vettiger, M. Despont, U. Drechsler, U. Dürig, W. Häberle, M. I. Lutwyche, H. E. Rothuizen, R. Stutz, R. Widmer und G. K. Binnig. *IBM J. Res. Develop.* **44** (2000), 3.
- [Vet02] P. Vettiger, G. Cross, M. Despont, U. Drechsler, U. Duerig, B. Gotsmann, W. Haeberle, M. A. Lantzand, H. E. Rothuizen, R. Stutz und G. K. Binnig. *IEEE Trans. Nanotechnol.* **1** (2002), 39.
- [Wag97] K. Wagner, N. Weber, H. J. Elmers und U. Gradmann. *J. Magn. Magn. Mater.* **167** (1997), 21.
- [Wal86] G. Waller. *Untersuchung des Oberflächen-Magnetismus epitaktischer Fe(110)-Schichten mit elastischer Streuung spinpolarisierter Elektronen*. Dissertation, TU Clausthal (1986).
- [Wei93] B. Weimert, J. Noffke und L. Fritsche. *Surf. Sci.* **289** (1993), 397.
- [Whi00] R. L. White. *J. Magn. Magn. Mater.* **209** (2000), 1.
- [Wie03] J. Wiebe. *Aufbau einer 300mK-Ultrahochvakuum-Rastertunnelmikroskopie-Anlage mit 14T-Magnet und Untersuchung eines stark ungeordneten zweidimensionalen Elektronensystems*. Dissertation, Universität Hamburg (2003).
- [Wie04] J. Wiebe, L. Sacharow, A. Wachowiak, G. Bihlmayer, S. Heinze, S. Blügel, M. Morgenstern und R. Wiesendanger. *Phys. Rev. B* **70** (2004), 035404.

- [Wol93] J. A. Wolf, Q. Leng, R. Schreiber, P. A. Grünberg und W. Zinn. *J. Magn. Magn. Mater.* **121** (1993), 253.
- [Yam03] T. K. Yamada, M. M. J. Bischoff, G. M. M. Heijnen, T. Mizoguchi und H. van Kempen. *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), 056803.
- [Yan52] C. N. Yang. *Phys. Rev.* **85** (1952), 808.
- [Ye95] P. D. Ye, D. Weiss, R. R. Gerhardts, M. Seeger, K. von Klitzing, K. Eberl und H. Nickel. *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), 3013.

# Abkürzungen

## Physikalische Konstanten:

---

$a_{Co} = 0,2507 \text{ nm}$	Gitterkonstante von Kobalt
$a_{Mn} = 0,8913 \text{ nm}$	Gitterkonstante von Mangan
$a_{Fe} = 0,2867 \text{ nm}$	Gitterkonstante von Eisen
$a_W = 0,3165 \text{ nm}$	Gitterkonstante von Wolfram
$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Elementarladung
$\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$	Vakuum-Dielektrizitätskonstante
$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$	Plancksches Wirkungsquantum
$k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8,618 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$	Boltzmannkonstante
$\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$	Bohrsches Magneton
$\mu_{Fe} = 2,2\mu_B$	Magnetisches Moment von Fe
$\mu_{Fe}^{ML} = 2,5\mu_B$	Magnetisches Moment der ML Fe/W(110) bei $T = 0 \text{ K}$
$\mu_0 = 1,257 \cdot 10^{-6} \text{ Vs/Am}$	Induktionskonstante
$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	Ruhemasse des Elektrons

---

---

 Formelsymbole:
 

---

$A$	Austauschsteifigkeit
$E_F$	Fermi-Energie
$e_i$	Fehlanpassungsdehnung in $i$ -Richtung
$e_K$	magnetische Anisotropieenergie pro Atom
$\varepsilon_K$	Kerr-Elliptizität
$\epsilon_W$	Domänenwandenergie pro Wandfläche
$F(S,U)$	symmetrische Tunneltransmissionsfunktion
$f_i$	Versetzungsdichte in $i$ -Richtung
$H_s$	Sättigungsfeldstärke
$J$	Austauschintegral
$K$	magnetische Anisotropiekonstante
$M_r$	remanente Magnetisierung
$M_s$	Sättigungsmagnetisierung
$\mu$	Magnetisches Moment
$\Psi_K$	Komplexer Kerr-Winkel
$\sigma_W$	Domänenwandenergie
$\theta$	pseudomorphe Bedeckung
$\theta_K$	Kerr-Drehung
$T_A$	Spinblockaktivierungstemperatur
$T_C$	Curie-Temperatur, bei der $M_r$ Null wird
$T_C(\infty)$	Curie-Temperatur der unendlich ausgedehnten Monolage
$T_P$	Präparationstemperatur
$T_s$	kritische Temperatur, bei der $M_s$ Null wird
$T_T$	Tempertemperatur
$T(S,U,E)$	Tunneltransmissionswahrscheinlichkeit
$x$	Fe-Anteil der Legierung
$W_a$	Streifenabstand in Atomreihen
$W$	Streifenbreite in Atomreihen
$w$	Domänenwandbreite

---

---

Abkürzungen:

---

1D	eindimensional
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
AES	Augerelektronenspektroskopie
cp	dicht gepackt (engl. <i>close packed</i> )
DL	Doppellage
fcc	kubisch flächenzentriert (engl. <i>face centered cubic</i> )
hcp	hexagonal dicht gepackt (engl. <i>hexagonal close packed</i> )
LEED	Niederenergetische Elektronenbeugung (engl. <i>low energy electron defraction</i> )
LDOS	lokale Zustandsdichte (engl. <i>local density of states</i> )
MBE	Molekularstrahlepitaxie (engl. <i>molecular beam epitaxy</i> )
ML	Monolage
MOKE	Magnetooptischer Kerr-Effekt
ps	pseudomorph
SP-STs	Spinpolarisierte Rastertunnelspektroskopie
STM	Rastertunnelmikroskopie (engl. <i>scanning tunneling microscopy</i> )
STS	Rastertunnelspektroskopie (engl. <i>scanning tunneling spectroscopy</i> )
TL	Tripellage
UHV	Ultrahochvakuum

---

# Veröffentlichungen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sind folgende Veröffentlichungen entstanden:

1. M. Pratzner, H. J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, R. Wiesendanger: *Atomic-Scale Magnetic Domain Walls in Quasi-One-Dimensional Fe-Nanostripes*. Phys. Rev. Lett. **87** (2001), 127201.
2. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Lateral indirect exchange coupling in a two-dimensional nanostripe array*. Phys. Rev. B **66** (2002), 033402.
3. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Structural and Magnetic Properties of Co-Fe Binary Alloy Monolayers on W(110)*. Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 077201.
4. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Domain wall energy in quasi-one-dimensional Fe/W(110) nanostripes*. Phys. Rev. B **67** (2003), 094416.
5. M. Pratzner, H. J. Elmers, M. Getzlaff: *Heteroepitaxial growth of Co on W(110) investigated by scanning tunneling microscopy*. Phys. Rev. B **67** (2003), 153405.
6. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Structure and electronic properties of ultrathin Co films on W(110)*. Surf. Sci. **550** (2004), 223.
7. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Magnetic and structural investigations of ultra-thin Co-Fe alloy films on W(110)*. J. Magn. Magn. Mater. **272-276** (2004), 1201.
8. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Magnetic and electronic properties of binary alloy monolayers:  $Fe_xMn_{1-x}$  and  $Co_{1-x}Fe_x$  on W(110)*. Phys. Rev. B **69** (2004), 134418.
9. M. Pratzner, H. J. Elmers: *Heteroepitaxial growth of Co-Fe alloy monolayers on W(110)*. J. of Cryst. Growth (2004), akzeptiert.

Folgende Veröffentlichungen stehen nicht im Zusammenhang mit der Arbeit:

10. J. Prokop, A. Kukunin, M. Pratzner, H. J. Elmers: *Oxidation-driven changes of the in-plane magnetic surface anisotropies of the Fe(110)/Al interface*. J. Magn. Magn. Mater. **265** (2003), 60.
11. J. Prokop, D. A. Valdaitsev, A. Kukunin, M. Pratzner, G. Schönhense, H. J. Elmers: *Strain-induced magnetic anisotropies in Co films on Mo(110)*. Phys. Rev. B. **70** (2004), 1.

# Präsentationen

1. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Magnetische Kopplung in Fe-Nanostreifen auf vizinalen W(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Hamburg (2001).
2. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Lateral indirect exchange coupling in a two-dimensional nanostripe array*. Drei-Königs-Treffen der Magnetiker, Bad Honnef (2002).
3. H. J. Elmers, M. Pratzter, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka und R. Wiesendanger: *Quasi-one-dimensional Fe nanostripes*. Drei-Königs-Treffen der Magnetiker, Bad Honnef (2002).
4. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Magnetische Kopplung in quasi ein-dimensionalen Fe-Nanostreifen auf W(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2002).
5. J. Prokop, A. Kukunin, M. Pratzter und H. J. Elmers: *In situ XPS and MOKE studies on oxidation driven modifications of the magnetic properties of the Fe/Al interface*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2002).
6. H. J. Elmers und M. Pratzter: *Structural and magnetic properties of Co-Fe binary alloy monolayers on W(110)*. Drei-Königs-Treffen der Magnetiker, Bad Honnef (2003).
7. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Strukturelle und magnetische Eigenschaften von zwei-dimensionalen Fe-Co Legierungen auf W(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden (2003).
8. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie an Co-Monolagen auf W(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden (2003).
9. J. Prokop, A. Kukunin, M. Pratzter und H. J. Elmers: *Structural and chemical properties of epitaxial aluminium oxide thin films grown on 1 ML Fe/W(110) and W(110) measured by LEED and XPS*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden (2003).
10. M. Pratzter und H. J. Elmers: *Magnetic and Structural Investigations of ultra-thin film Co-Fe alloys on W(110)*. International Conference on Magnetism, Rom (2003).

11. J. Prokop, D. A. Valdeitsev, A. Kukunin, M. Pratzner, H. J. Elmers und G. Schönhense: *Out-of-plane and in-plane magnetic anisotropies in thin Co(0001) films on Mo(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2004).
12. M. Pratzner und H. J. Elmers: *Rastertunnelspektroskopie an ultra-dünnen Co-Filmen auf W(110)*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2004).
13. M. Pratzner und H. J. Elmers: *Magnetische und elektronische Eigenschaften von zweidimensionalen Fe-Mn und Co-Fe Legierungen*. Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg (2004).
14. H. J. Elmers und M. Pratzner: *The growth of two-dimensional binary transition metal alloys*. The Fourteenth International Conference on Crystal Growth, Grenoble (2004).



