

Wachstum und Magnetismus dünner 3d Metalle auf Cu-Substraten – Einfluß von O als Surfactant

im Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin
eingereichte Dissertation

vorgelegt von
Ramona Nünthel

Dezember 2003

Nünthel, Ramona:

Wachstum und Magnetismus dünner 3d Metalle auf Cu-Substraten : Einfluß von O als Surfactant / Ramona Nünthel. – Als Ms. gedr. –

Berlin : dissertation.de – Verlag im Internet GmbH, 2004

Zugl.: Berlin, Freie Univ., Diss., 2004

ISBN 3-89825-826-2

1. Gutachter: Prof. Dr. K. Baberschke

2. Gutachter: Prof. Dr. P. Fumagalli

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Copyright dissertation.de – Verlag im Internet GmbH 2004

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, auf Datenträgern oder im Internet und der Übersetzung, vorbehalten.

Es wird ausschließlich chlorfrei gebleichtes Papier (TCF) nach DIN-ISO 9706 verwendet.
Printed in Germany.

dissertation.de - Verlag im Internet GmbH
Pestalozzistraße 9
10 625 Berlin

URL: <http://www.dissertation.de>

Meinen Eltern

Kurzfassung

In dieser Arbeit werden dünne magnetische Filme der 3d-Übergangsmetalle auf Kupfersubstraten mittels Rastertunnelmikroskopie, der Beugung niederenergetischer Elektronen, Auger-Elektronen-Spektroskopie und polarem magneto-optischen Kerr-Effekt untersucht. Die Untersuchungen wurden an Ni-Filmen auf der Cu(100)- bzw. der Cu(110)-Oberfläche mit und ohne Einfluß von Sauerstoff als Wachstumshilfe (Surfactant) *in situ* im Ultrahochvakuum durchgeführt.

Bringt man einen Ni-Film auf die $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° rekonstruierte Cu(100)-Oberfläche, so stellt sich heraus, daß der Bereich in dem der Film lagenweise wächst, vergrößert wird, die Rauigkeit abnimmt und sich die Ausrichtung der Inselkanten bedingt durch den Sauerstoff verglichen mit Ni/Cu(100) um 45° dreht. Die Verwendung von Sauerstoff als Surfactant wirkt sich ebenfalls auf den Magnetismus aus, da die Sauerstofflage die Eigenschaft besitzt, auf den wachsenden Ni-Film aufzuschwimmen. Dadurch zeigen Ni-Filme bereits ab 5 Monolagen eine Magnetisierung senkrecht zur Ebene.

Die Untersuchungen für Ni auf Cu(110) zeigen schon bei geringen Ni-Bedeckungen ein sehr rauhes dreidimensionales Wachstum. Aufgrund der C_2 -Symmetrie der Oberflächeneinheit, die mit zwei unterschiedlichen Diffusionslängen einhergeht, ist das Wachstum der Ni-Filme anisotrop. Kerr-Effekt-Messungen zeigen, daß diese Ni-Filme keine eindeutig definierte senkrechte leichte Magnetisierung aufweisen. Werden die Ni-Filme jedoch auf eine $O(2 \times 1)$ rekonstruierte Cu(110)-Oberfläche aufgebracht, so beeinflußt dies ebenfalls die strukturellen und magnetischen Eigenschaften. Analog zu Ni auf dem voroxidierten Cu(100)-Kristall befindet sich auch hier der Sauerstoff während der Präparation des Ni-Filmes stets auf dessen Oberfläche. Nach anfänglichem Wachstum charakterisiert durch eine große Rauigkeit, geht dieses ab einer Schichtdicke von ca. 7 Monolagen in ein lagenweises Wachstum über. Gleichzeitig stellt sich eine senkrechte leichte Richtung der Magnetisierung ein, die ohne Verwendung von Sauerstoff auf dieser Oberfläche nicht existiert.

Die obigen Untersuchungen sind prinzipiell geeignet, das Wachstum von Vielfachschichten bestehend aus gekoppelten magnetischen Lagen gezielt zu beeinflussen. Daher beschäftigt sich diese Arbeit ebenfalls mit der Struktur von Zwei- (V/Fe/Cu(100)) und Dreifachlagen (Ni/Cu/Ni/Cu(100)). Zum Studium der mit der senkrechten einhergehenden Verspannung in den Filmen wurde eine I/V-LEED-Apparatur zur Bestimmung der Interlagenabstände aufgebaut.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
1. Einleitung	1
2. Grundlagen	5
2.1. Kristallstrukturen	5
2.2. Das reziproke Gitter	7
2.3. Miller Indizes	9
2.4. Überstrukturen und Rekonstruktionen	10
2.5. Brillouinzone	11
2.6. Magnetismus	12
3. Experimentelle Methoden	19
3.1. Elektronenbeugung	20
3.2. Auger-Elektronen-Spektroskopie	26
3.3. Rastertunnelmikroskopie	28
3.4. Magneto-Optischer Kerr-Effekt	31
4. Substratcharakterisierung	35
4.1. Die Cu(100)-Oberfläche	36
4.2. Die Cu(110)-Oberfläche	39
5. Nickel auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche	47
5.1. Wachstum und Magnetismus von Nickel auf Cu(100)	47
5.2. Beeinflussung des Wachstums ultradünner Ni-Filme durch Sauerstoff	53
5.3. Beeinflussung des Magnetismus ultradünner Ni-Filme durch Sauerstoff	60
6. Nickel auf der $O(2 \times 1)$ rekonstruierten Cu(110)-Oberfläche	69
6.1. Wachstum und Magnetismus ultradünner Ni-Filme	69
6.2. Einfluß des Sauerstoffes auf das Wachstum ultradünner Ni-Filme	75

6.3. Einfluß des Sauerstoffes auf den Magnetismus ultradünner Ni-Filme	79
7. Grenzflächen in Zweifachlagen	83
7.1. Das System O/Cu/Ni/Cu(100)	83
7.2. Das System Cu/Ni/Cu(100)	85
7.3. Das System V/Fe/Cu(100)	88
8. Zusammenfassung	93
A. Anhang: Ausdrücke der freien Energiedichte	97
B. Anhang: Kalibrierungen und Apparatives	101
B.1. Temperaturkalibrierung	101
B.2. 4-Gitter-LEED-Optik im LEED-Betrieb	102
B.3. 4-Gitter-LEED-Optik im AES-Betrieb	104
B.4. STM-Steuerung	109
Abbildungsverzeichnis	111
Tabellenverzeichnis	115
Literaturverzeichnis	117
Veröffentlichungen	123
Lebenslauf	127
Danksagung	129

1. Einleitung

Das Wachstum ultradünner Metallfilme auf einkristallinen Oberflächen ist von großer Bedeutung für sowohl die technische Anwendung als auch für die Grundlagenforschung. Insbesondere die Präparation dünner *magnetischer* Schichten von nur wenigen atomaren Lagen im Ultrahochvakuum (UHV) trägt zum Verständnis der veränderten magnetischen Eigenschaften solcher Systeme bei [1]. Zudem zeigen derartige Systeme neuartige Eigenschaften, die im Volumen nicht existieren, wie etwa Spinreorientierungsübergänge (Änderung der leichten Magnetisierungsrichtung), Veränderung der Curie-Temperatur als Funktion der Filmdicke oder das Auftreten großer magnetischer Anisotropieenergien. Im Falle zweier durch eine Zwischenschicht getrennte magnetischer Filme tritt eine Interlagenaustauschkopplung zwischen den Schichten auf, die je nach Zwischenschichtdicke eine ferro- bzw. antiferromagnetische Ordnung der Magnetisierung hervorruft [2]. Diese Kopplung führt unter anderem zum Riesenmagnetowiderstand (GMR-Effekt) [3], der in der Anwendung (Sensorik, Schreib-Lese-Köpfe in Festplatten) bereits genutzt wird. Um nun die magnetischen Eigenschaften gezielt verändern zu können, ist sowohl die Kenntnis als auch eine definierte Manipulation des Wachstums und der Grenzflächeneigenschaften der dünnen Filme erforderlich. Eine Möglichkeit die Grenzfläche magnetischer Filme zu beeinflussen, bietet die Adsorption von Gasen *nach* der Präparation. Der Einfluß verschiedener Gase auf die magnetischen Eigenschaften der ultradünnen Filme wurde z. B. in [4] untersucht. Diese Methode erlaubt jedoch keinen Einfluß auf das Wachstum. In der vorliegenden Arbeit wird daher eine Manipulation der Filmeigenschaften durch die Verwendung von Sauerstoff als Wachstumshilfe (Surfactant) genutzt. Hierbei wird *zuerst* das Substrat voroxidiert und *danach* der magnetische Film präpariert. Dieses Verfahren basiert darauf, daß Gase oder auch Metalle als Surfactant dienen [5,6]. Dies bietet den Vorteil, daß: (i) das Wachstum und die magnetischen Eigenschaften gleichzeitig verändert werden können und (ii) die Menge des Surfactants wohl definiert ist.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt in der Untersuchung von Nickelfilmen, deren Wachstum erstmals auf einer voroxidierten Cu(100)-Oberfläche sowie einem Cu(110)-Kristall beobachtet wurde. Nickelfilme wurden deshalb verwendet, da sie auf der reinen Cu(100)-Oberfläche in unserer Arbeitsgruppe einerseits ausführlich untersucht wurden [7–9] und diese andererseits interessante magnetische Eigenschaften aufweisen: So findet man bei Ni/Cu(100) einen Spinreorientierungsübergang aus der Ebene in eine senkrechte leichte Rich-

tung [10]. Ein verglichen mit Ni/Cu(100) eher wenig untersuchtes System ist Ni/Cu(110) [11], was an seinem dreidimensionalen Wachstumsmodus liegt. Der Einfluß des Sauerstoff-Surfactants auf Wachstum und Magnetismus dieses Systems wird hier erstmals untersucht. Dabei zeigt sich, daß durch den Sauerstoff tiefgreifende Veränderungen auftreten.

Die wichtigsten Fragen, die in dieser Arbeit behandelt und beantwortet werden, sind:

Wo ist der Sauerstoff, nachdem der Film auf die oxidierte Oberfläche gelangt?

Beeinflußt der Sauerstoff eventuell das Wachstum des Adsorbates?

Bildet sich ein volumenoxidartiger Film?

Inwieweit wird der Magnetismus durch den Sauerstoff beeinflußt?

Als strukturelle Untersuchungsmethoden wurden Rastertunnelmikroskopie (STM), Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) und Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES) verwendet. Mit diesen Techniken läßt sich sowohl das Wachstum als auch die Bildung von Überstrukturen und Rekonstruktionen im Realraum (STM) sowie im reziproken Raum (LEED) verfolgen. Um auch vertikale Lagenabstände messen zu können, wurde die LEED-Apparatur im Rahmen dieser Arbeit um die Möglichkeit der spannungsabhängigen Intensitätsmessung der Beugungsreflexe (I/V-LEED) erweitert. Durch die I/V-LEED-Messungen konnte für die untersuchten Systeme der Zusammenhang zwischen Verspannungen im Film und dadurch induzierten magnetischen Anisotropien studiert werden. Außerdem wurde für die AES-Messungen ein Meßprogramm erstellt, um die Spektren computerunterstützt weiterverarbeiten zu können. Ergänzende elementspezifische Untersuchungen mittels Röntgenabsorption an der Sauerstoff K-Kante sowie den Nickel und Kupfer L-Kanten, die von unserer Arbeitsgruppe bei BESSY II durchgeführt wurden, liefern eine zusätzliche Bestätigung und ergänzen die gewonnenen Ergebnisse.

Die magnetischen Untersuchungen wurden mittels des polaren Kerr-Effekts durchgeführt. Dabei wurde neben der Messung von Hysteresen auch der polare Kerr-Effekt *während* der Filmpräparation gemessen. Dies erlaubt die instantane Detektion der Spinreorientierung während des Wachstums. Ergänzende ferromagnetische Resonanz (FMR) Untersuchungen aus unserer Arbeitsgruppe liefern zusätzliche Informationen über die magnetische Anisotropie, insbesondere den Einfluß des Sauerstoff-Surfactants auf diese Größe.

Die Arbeit ist in folgende Abschnitte gegliedert: Das Kapitel 2 beschäftigt sich mit den physikalischen Grundlagen der experimentellen Methoden, welche im Kapitel 3 dargestellt werden. Die strukturellen Eigenschaften der Substrate und deren Präparation werden im Kapitel 4 vorgestellt. Das Kapitel 5 befaßt sich mit der Struktur und dem Magnetismus der auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ $R45^\circ$ rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche gewachsenen Nickelfilme. In Kapitel 6 werden die Ergebnisse der Untersuchungen von Nickel auf einem Cu(110)-Einkristall und einem $O(2 \times 1)$ rekonstruierten Cu(110)-Einkristall vorgestellt. Das Kapitel 7 gibt Auskunft

über das strukturelle Verhalten von Zwei- und Dreifachlagen gemessen mittels I/V-LEED und STM. Dabei wird auf das Dreifachlagensystem Ni/Cu/Ni/Cu(100) [7] sowie das Zweifachlagensystem V/Fe/Cu(100) [12] eingegangen. Die hier vorgestellten Experimente liefern wichtige Aussagen bzgl. der in [13] und [14] diskutierten magnetischen Resultate. So konnte für das V/Fe/Cu(100)-System eine Präparationsmethode entwickelt werden, die es gestattet, die Rauigkeit der auf dem Fe-Puffer gewachsenen V-Filme drastisch zu reduzieren. Dadurch wurde die Untersuchung der induzierten V-Grenzflächenmomente in unsere Arbeitsgruppe möglich. Im Falle des Ni/Cu/Ni/Cu(100)-Systems konnte gezeigt werden, daß im Bereich dünner Cu-Zwischenschichten das Cu nicht in seiner Volumenstruktur aufwächst. Diese Strukturinformationen dienten als Ausgangsdaten für *ab initio*-Rechnungen der Interlagenaustauschkopplung.

Im Anhang findet man neben einer Temperaturkalibrierung auch detaillierte Beschreibungen zur 4-Gitter-LEED-Optik im AES- bzw. LEED-Betrieb und eine Beschreibung der verwendeten bzw. erstellten Software.

2. Grundlagen

Im folgenden sollen die grundlegenden Begriffe zur Beschreibung kristalliner Festkörper, insbesondere deren Oberflächen eingeführt werden. Als Substrate wurden in dieser Arbeit Cu-Einkristalle benutzt.

2.1. Kristallstrukturen

Um die Geometrie von Kristallen zu beschreiben, bedient man sich des Konzeptes der Bravaisgitter [15]. Das Bravaisgitter ist eine regelmäßige, periodische Anordnung mathematischer Punkte im Raum, d. h., es besteht aus allen Punkten deren Ortsvektoren der Vorschrift

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (2.1)$$

genügen. Die \vec{a}_i mit $i = 1, 2, 3$ sind beliebige Vektoren, die nicht alle in derselben Ebene liegen und werden auch primitive Vektoren genannt. n_i mit $i = 1, 2, 3$ sind ganzzahlig Koeffizienten. Die primitiven Gittervektoren spannen die primitive Einheitszelle (Elementarzelle) auf. Sie stellt das Volumen im Ortsraum dar, mit welchem der gesamte Raum des Gitters lückenlos ausgefüllt werden kann. In einer Elementarzelle ist genau ein Gitterpunkt enthalten.

Eine Kristallstruktur wird mittels des zugehörigen Bravaisgitters beschrieben, an dessen Gitterpunkten identische Einheiten (Basis) periodisch angeordnet werden. Im einfachsten Fall besteht die Basis aus einem Atom. Es ist jedoch auch möglich die Basis aus Atomgruppen, Molekülen oder Ionen zusammenzusetzen [16].

In Abb. 2.1a) ist ein einfaches quadratisches (sc) Gitter dargestellt. Dieses Gitter wird mittels der beiden primitiven Vektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 aufgespannt. Sie begrenzen gleichzeitig die kleinste Zelle (grau unterlegt) dieses Gitters. Mit dem Translationsvektor $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ kann man jeden Punkt des Gitters erreichen. Abbildung 2.1b) zeigt ein einfach kubisches Gitter (sc). Analog zu dem linken Beispiel sind hier die primitiven Vektoren \vec{a}_i und das von ihnen eingeschlossene Volumen (grau) eingezeichnet. Auch hier kann man durch Translation der primitiven Vektoren jeden Punkt des Gitters erreichen. Die Basis des Gitters ist in beiden Fällen einatomar. Es ist üblich, die primitiven Vektoren in ihre kartesischen Komponenten zu zerlegen und

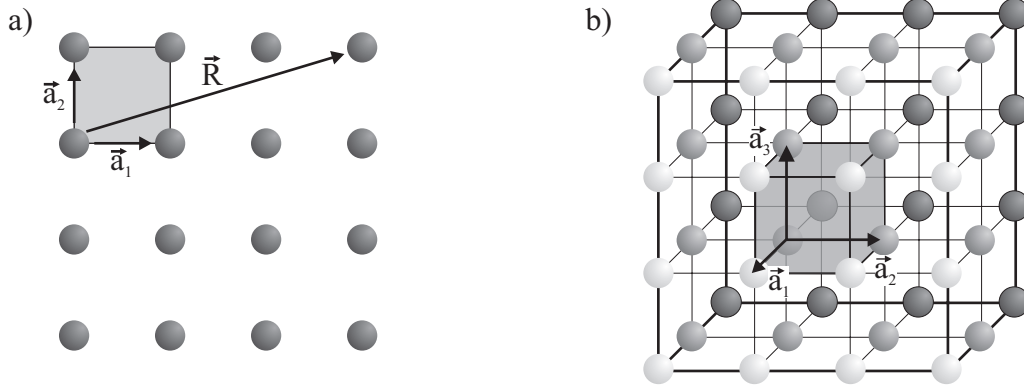


Abb. 2.1.: a) einfaches quadratisches Gitter (sc) mit der Basis \vec{a}_1, \vec{a}_2 und dem Translationsvektor \vec{R} . b) sc-Gitter mit Basisvektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$. In beiden Gittern wird die Elementarzelle durch die primitiven Vektoren aufgespannt.

als Matrix \mathbf{A} wie folgt darzustellen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Durch Multiplikation mit dem Vektor (n_1, n_2, n_3) erhält man die kartesischen Komponenten der Translation (2.1) [17]. Im dreidimensionalen Raum existieren 14 Bravaisgitter, die aufgrund ihrer Symmetrieeigenschaften 7 Kristalltypen zugeordnet werden können [17]. Die Materialien, die in der Arbeit verwendet wurden, gehören dem kubischen Kristallsystem an. Dieses System besitzt die höchsten Symmetrieeigenschaften und besteht aus den in Abb. 2.2 enthaltenen a) einfach kubischen (sc), b) kubisch raumzentrierten (bcc) und c) kubisch flächenzentrierten (fcc) Raumgittern. Dargestellt sind die Einheitszellen mit der Kantenlänge a , die – im Gegensatz zur Elementarzelle – die Symmetrie des Gitters am besten wiedergeben. Die *primitiven* Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, welche die Elementarzelle aufspannen, sind zusätzlich eingezeichnet.

In der Matrixschreibweise ergibt sich für das bcc- bzw. fcc-Gitter aus Abb. 2.2 nach Glg. (2.2):

$$\mathbf{A}_{bcc} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}_{fcc} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Durch bilden der Determinante der Matrizen \mathbf{A}_{bcc} bzw. \mathbf{A}_{fcc} erhält man das Volumen V der jeweiligen Elementarzelle, welches kleiner ist als dasjenige der Einheitszelle:

$$V_{bcc} = \text{Det } \mathbf{A}_{bcc} = \frac{a^3}{2} \quad V_{fcc} = \text{Det } \mathbf{A}_{fcc} = \frac{a^3}{4}. \quad (2.4)$$

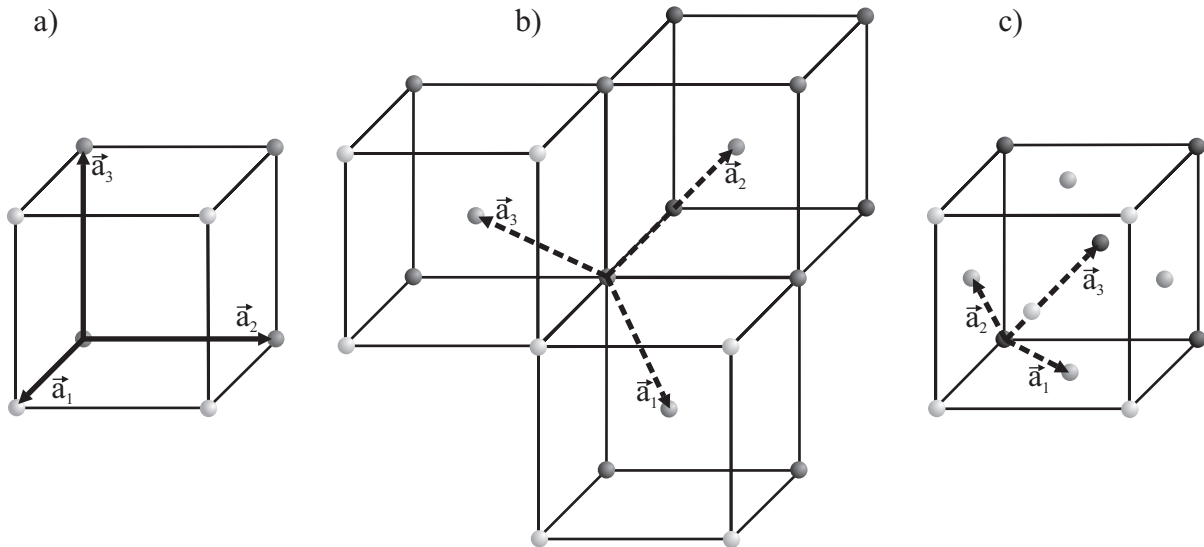


Abb. 2.2.: a) sc-, b) bcc- und c) fcc-Raumgitter mit den Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 , die die Elementarzelle aufspannen. Im sc-Gitter sind Elementarzelle und Einheitszelle identisch.

2.2. Das reziproke Gitter

Das reziproke Gitter spielt eine große Rolle in der Theorie der Beugung an Kristallen und damit in der Analyse der I/V-LEED-Spektren, die im Kap. 3 beschrieben werden. Man kann einem jeden Bravaisgitter bestehend aus der Punktmenge \vec{R} (siehe Glg. (2.1)) ein reziprokes Gitter zuordnen. Dazu betrachtet man eine ebene Welle $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ mit Wellenvektor \vec{k} . Nur für bestimmte Werte von \vec{k} hat die ebene Welle die Periodizität des Bravaisgitters. Als das reziproke Gitter eines Bravaisgitters wird nun die Menge aller Wellenvektoren \vec{K} bezeichnet, die ebene Wellen mit der Periodizität des Bravaisgitters erzeugen. Der Wellenvektor \vec{K} gehört daher genau dann zum reziproken Gitter eines Bravaisgitters, falls gilt [15]:

$$e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}. \quad (2.5)$$

Die Gleichung muß für einen beliebigen Translationsvektor \vec{r} und jedes \vec{R} des Bravaisgitters erfüllt sein. Das Kürzen der Glg. (2.5) liefert eine einfache Definition für das reziproke Gitter:

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1. \quad (2.6)$$

Um diese Bedingung zu erfüllen, muß \vec{K} senkrecht auf \vec{R} stehen. Die Menge aller Vektoren, die diese Bedingung erfüllt, bezeichnet man auch als reziproke Gittervektoren \vec{G} [15]. Es läßt sich zeigen, daß das reziproke Gitter ebenfalls ein Bravaisgitter ist. Die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters lassen sich nach folgender Beziehung aus den primitiven Translationen des realen Gitters berechnen [17]:

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)} \text{ mit } i, j, k = 1, 2, 3 \text{ und } i \neq j \neq k. \quad (2.7)$$

Die Tatsache, daß es sich bei den \vec{b}_i um primitive Vektoren des reziproken Gitters handelt, läßt sich wie folgt zeigen. Zunächst einmal gilt:

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \text{ mit } \begin{cases} \delta_{ij} = 0 & \text{für } i \neq j \\ \delta_{ij} = 1 & \text{für } i = j. \end{cases} \quad (2.8)$$

Handelt es sich bei $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ im speziellen um ein orthogonales Gitter, dann weist \vec{b}_i , der senkrecht auf der von den Vektoren \vec{a}_j und \vec{a}_k aufgespannten Ebene steht, in Richtung von \vec{a}_i . Als nächstes sei festgestellt, daß man – in Analogie zum realen Gitter – jeden Vektor \vec{k} als Linearkombination der drei primitiven Vektoren \vec{b}_i mit $i = 1, 2, 3$ darstellen kann, d. h., $\vec{k} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2 + k_3\vec{b}_3$. k_i mit $i = 1, 2, 3$ sind zunächst beliebige reelle Zahlen. Mit dem Vektor $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ des direkten Gitters gilt wegen Glg. (2.8) $\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi(n_1k_1 + n_2k_2 + n_3k_3)$. Damit \vec{k} ein reziproker Gittervektor ist, muß Glg. (2.6) erfüllt werden, und daher die k_i ganze Zahlen sein. Damit ist gezeigt, daß für ganze k_i die \vec{b}_i aus Glg. (2.7) einen Satz primitiver Vektoren des reziproken Gitters bilden.

Auch für das reziproke Gitter faßt man die \vec{b}_i zu einer Matrix **B** zusammen:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & b_{31} \\ b_{12} & b_{22} & b_{32} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Die Matrizen **A** des realen Gitters und des reziproken Raumes **B** haben folgenden Zusammenhang:

$$\mathbf{B} = 2\pi\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = 2\pi\frac{1}{\text{Det}\tilde{\mathbf{A}}}\tilde{\mathbf{A}}^{adj}. \quad (2.10)$$

$\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ ist das Inverse der transponierten Matrix **A** aus Glg. (2.2). $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ berechnet sich mittels der Determinante von $\tilde{\mathbf{A}}$ und der adjungierten Matrix von $\tilde{\mathbf{A}}$, wie in Glg. (2.10) beschrieben [18]. Wendet man die Vorschrift aus Glg. (2.10) an, so ergibt sich für die Matrizen \mathbf{A}_{bcc} und \mathbf{A}_{fcc} :

$$\mathbf{B}_{bcc} = 2\pi\tilde{\mathbf{A}}_{bcc}^{-1} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}_{fcc} = 2\pi\tilde{\mathbf{A}}_{fcc}^{-1} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Der Index an den Matrizen bezieht sich dabei auf das reale Gitter. Anhand von Glg. (2.11) im Vergleich mit Glg. (2.3) erkennt man, daß die Matrix **A** eines bcc-Gitters im reziproken Raum der eines kubisch flächenzentrierten entspricht und umgekehrt.

Abschließend sei noch etwas über den Zusammenhang zwischen den Vektoren des reziproken Gitters und den Ebenen des direkten (realen) Gitters gesagt. Laut Glg. (2.6) steht der reziproke Gittervektor \vec{K} senkrecht auf den Ebenenscharen des direkten Gitters. Die Ebenen einer Schar haben den Abstand d_i zueinander, wie in Abb. 2.4 deutlich wird. Der Vektor mit dem Betrag $2\pi/d$ ist dann der kürzeste zu \vec{K} parallele Vektor, der senkrecht auf den Ebenen steht.

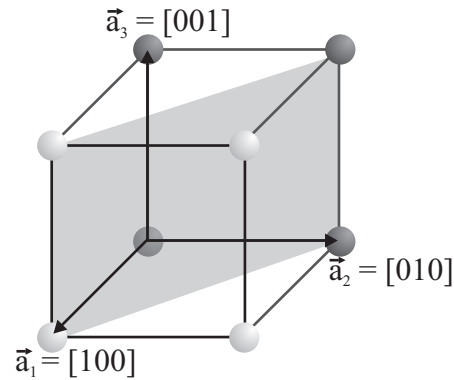


Abb. 2.3.: Ein einfaches dreidimensionales Gitter mit den Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 . Sie entsprechen den Raumrichtungen. Die (110)-Ebene ist grau schraffiert.

2.3. Miller Indizes

Zur Bezeichnung von Netzebenen in Kristallen benutzt man üblicherweise die Miller Indizes [16]. Dazu ist in Abb. 2.3 nochmals die Elementarzelle des sc-Gitters aus Abb. 2.1 dargestellt. In einem kartesischen Koordinatensystem schneidet eine gegebene Gitterebene die Kristallachsen in den Punkten $x_1\vec{e}_1$, $x_2\vec{e}_2$, $x_3\vec{e}_3$, wobei die \vec{e}_i mit $i = 1, 2, 3$ die Einheitsvektoren des kartesischen Gitters sind. Als Millersche Indizes h, k, l bezeichnet man nun den Satz teilerfremder ganzer Zahlen, die umgekehrt proportional zu den Achsenabschnitten sind, d. h. $h : k : l = 1/x_1 : 1/x_2 : 1/x_3$. Wenn die Ebene parallel zu einer Achse liegt, und es daher keinen Schnittpunkt gibt, ist der dazugehörige Miller Index Null. Als Beispiel ist die (110)-Ebene in Abb. 2.3 grau schattiert eingezeichnet.

Im folgenden soll näher auf den in dieser Arbeit am häufigsten auftretenden fcc-Gittertyp und seine Netzebenen eingegangen werden. Bei einem fcc-Gitter befinden sich 4 Gitterpunkte in der Einheitszelle. Die Anzahl der nächsten Nachbarn ist 12, und der nächste Nachbarabstand beträgt $a_{NN} = a/\sqrt{2}$. Bei Kristallen dieses Typs kann man die drei in Abb. 2.4 dargestellten Grundflächen erzeugen. Dabei handelt es sich in a) um die (100)-, b) die (110)- und c) die (111)-Oberfläche. Die Bezeichnung der Fläche erfolgt, wie oben erläutert, nach den Miller Indizes. Der Abstand der Atome in der (100)-Fläche entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ist gerade die Gitterkonstante a . Die Distanz der Atome in der (110)-Ebene entlang der $[001]$ -Richtung entspricht wiederum a , entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung a_{NN} . Diese Oberfläche ist die offenste der drei Basisoberflächen eines fcc-Kristalls. Die (111)-Oberfläche dagegen die geschlossenste. Sie ist die am dichtesten gepackte Oberfläche eines fcc-Kristalls. Der Abstand der Atome in dieser Ebene ist a_{NN} . Abhängig von der Orientierung und damit der Oberfläche sind die einzelnen Stapelfolgen. Dies ist in Abb. 2.4 angedeutet und in Tab. 2.1 zusammengefasst.

In Abb. 2.4d-f) ist die Einheitszelle eines fcc-Kristalls mit der Gitterkonstanten a und den einzelnen Ebenenscharen, die sich in dieser Zelle befinden, gezeigt. Als Ebenenschar werden

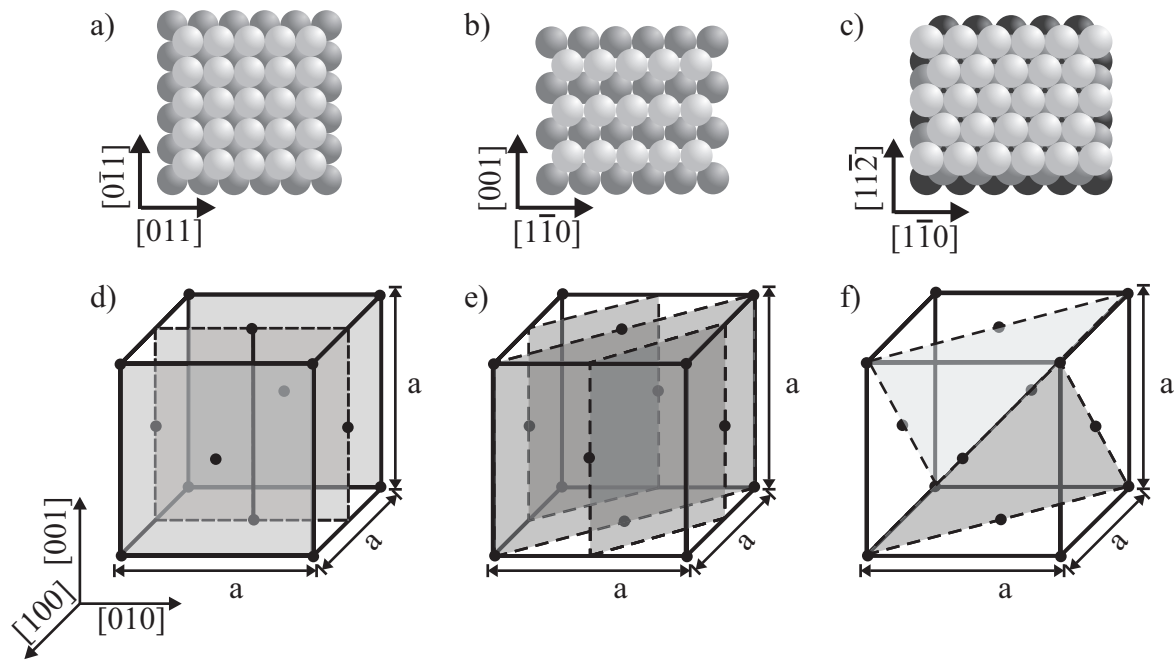


Abb. 2.4.: Hartkugelmodelle eines fcc-Gitters a) der (100)-, b) der (110)- und c) (111)-Oberfläche. Unten: fcc-Kubus mit d) den {200}-, e) den {220}- und f) den {222}-Ebenen (grau schraffiert).

Oberfläche	(100)	(110)	(111)
d_i	$a/2$	$\frac{a}{2\sqrt{2}}$	$a/\sqrt{3}$
Stapelfolge	ABAB	ABAB	ABCA

Tabelle 2.1.: Stapelfolge von fcc-Kristallen abhängig von der Orientierung.

diejenigen Ebenen bezeichnet, die parallel zueinander im selben Netzebenenabstand (Interlagenabstand) d_i liegen [19]. Die grau unterlegten Flächen in Abb. 2.4d) sind die {200}-Flächen, welche die am dichtesten gepackte Ebenenschar entlang der [100]-Richtung bilden. Abbildung 2.4e) zeigt den Kubus mit der {220}-Ebenenschar. Sie ist die am dichtesten gepackte bei einem Einkristall mit (110)-Orientierung. In Abb. 2.4f) ist wiederum das Gitter eines fcc-Kristalls gezeichnet. Bei den grau dargestellten Flächen handelt es sich um die {222}-Ebenen. Der Interlagenabstand der Ebenenschar ist in Tab. 2.1 angegeben.

2.4. Überstrukturen und Rekonstruktionen

Eine gegebene Oberfläche kann Atome adsorbieren. Diese Adsorbate bilden entweder eine Überstruktur auf dem Substrat oder führen zusätzlich zu einer Rekonstruktion der Oberfläche, d. h. zu einer Umorientierung der Oberflächenatome des Substrates. Überstrukturen und rekonstruierte Oberflächen lassen sich eindeutig durch Angabe der primitiven Basisvektoren der an der Oberfläche gebildeten periodischen Struktur beschreiben. Dabei müssen die primitiven

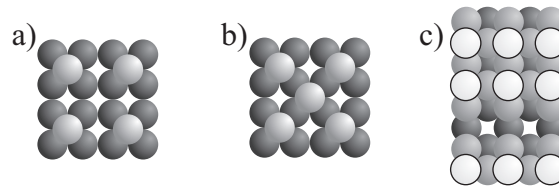


Abb. 2.5.: a) $p(2 \times 2)$ - und b) $c(2 \times 2)$ -Überstruktur auf einem sc-Gitter; c) $(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ $R45^\circ$ -Rekonstruktion einer fcc-(100)-Oberfläche.

Vektoren von Substrat und Adsorbat nicht zwangsläufig dieselben sein. Es seien die primitiven Basisvektoren des Substrates \vec{a}_i und die der Überstruktur bzw. des durch Rekonstruktion gebildeten Oberflächengitters \vec{u}_i mit $i = 1, 2, 3$ gegeben. Die Bezeichnung der Überstruktur bzw. Rekonstruktion ergibt sich dann aus dem Verhältnis der Beträge der Basisvektoren zueinander ($|\vec{u}_i| / |\vec{a}_i|$) und dem Winkel θ , um den die beiden Gitter gegeneinander verdreht sind. Man spricht von einer primitiven Überstruktur oder auch Rekonstruktion, wenn die Flächeneinheit des Adsorbates die Symmetrie des Substrates besitzt. In der Literatur wird dies mittels des Buchstaben p gekennzeichnet, häufig jedoch auch weggelassen (siehe Beispiele der Abb. 2.5). Handelt es sich um eine zentrierte, gekennzeichnet durch den Buchstaben c , so ist die Einheitszelle des Adsorbates gegenüber der des Substrates gedreht. In Abb. 2.5a) ist ein Beispiel für eine $p(2 \times 2)$ -Überstruktur und in b) für eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur dargestellt. In Abb. 2.5c) ist eine $(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ $R45^\circ$ -Rekonstruktion einer fcc-(100)-Oberfläche wiedergegeben. Diese Art der Notation geht auf E. A. Wood zurück [20].

2.5. Brillouinzone

Analog zum realen Raum existieren auch im reziproken Raum eine Einheitszelle und eine Elementarzelle [15]. Es ist üblich, als Elementarzelle nicht diejenige, die durch die drei primitiven Translationen \vec{b}_i gebildet wird, zu verwenden, sondern die sog. erste Brillouinzone. Die Volumina der ersten Brillouinzone und des durch die Vektoren \vec{b}_i aufgespannten Parallelepipeds sind gleich groß [17]. Die Konstruktion der ersten Brillouinzone geschieht wie folgt:

1. Ausgehend von einem Punkt im reziproken Raum werden Verbindungslinien zu den nächsten Nachbarn gezogen.
2. Errichten von Ebenen senkrecht auf den Mittelpunkten der Verbindungslinien.
3. Das Polyeder um den Ursprung mit dem kleinsten Volumen ist die erste Brillouinzone.

Eine solche Konstruktion der Elementarzelle existiert auch im Realraum und wird in diesem Fall Wigner-Seitz-Zelle genannt. Ein Beispiel für die erste Brillouinzone im zweidimensionalen Fall findet man in Abb. 2.6. Dabei handelt es sich um ein sc-Gitter im realen Raum, dessen

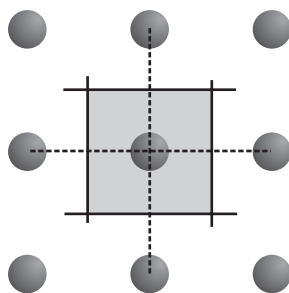


Abb. 2.6.: Erste Brillouinzone eines zweidimensionalen sc-Gitters.

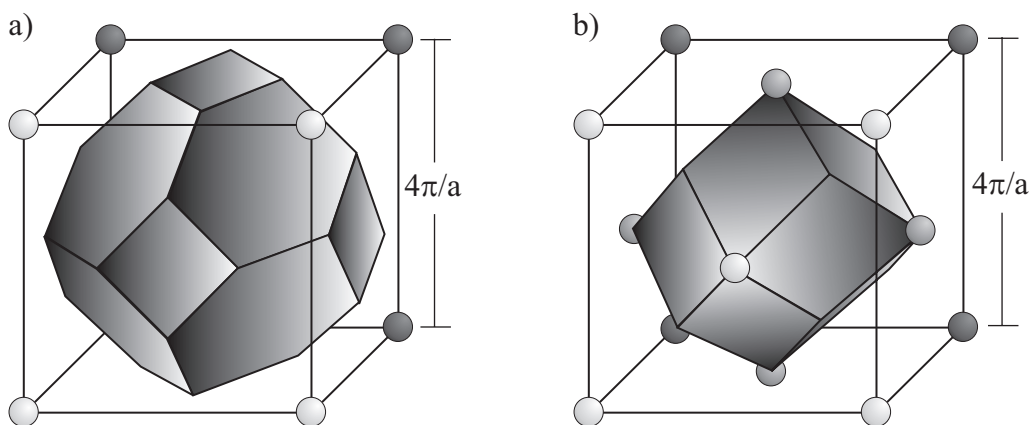


Abb. 2.7.: Erste Brillouinzone eines fcc-Gitters (a) und eines bcc-Gitters (b).

reziprokes Gitter wiederum ein sc-Gitter ist (grau schattiert). In gleicher Weise verfährt man, um die erste Brillouinzone des bcc- bzw. des fcc-Gitters zu erhalten (Abb. 2.7). In Abb. 2.7a) ist die erste Brillouinzone des fcc-Gitters zu sehen. Für ein bcc-Gitter, ergibt sich das in Abb. 2.7b) dargestellte Polyeder als erste Brillouinzone.

2.6. Magnetismus

In dieser Arbeit wurden im wesentlichen strukturelle Messungen durchgeführt. Da es sich bei den untersuchten Filmen jedoch überwiegend um magnetische Materialien handelt, wurden diese Systeme auch bzgl. ihrer magnetischen Eigenschaften charakterisiert.

Der Ferromagnetismus ist ein Ordnungsphänomen, welches durch das korrelierte Verhalten vieler Atome zustande kommt. Ferromagnetische Materialien weisen auch ohne ein äußeres angelegtes Magnetfeld eine spontane Magnetisierung auf. Die (spontane) Magnetisierung kann durch direkte und indirekte Austauschwechselwirkungen verursacht werden [17]. Eine direkte Wechselwirkung kommt durch das Überlappen der Elektronenhüllen benachbarter Gitteratome zu Stande. Aufgrund des Pauli-Prinzips hängt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen von deren Spinreorientierung ab. Im Heisenberg-Modell läßt sich die Austauschwechselwirkung zweier Spins \vec{S}_1 und \vec{S}_2 als $E_A = -J (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$ darstellen [21]. Das Austau-

schintegral J , gegeben durch den Überlapp der Wellenfunktionen, kann sowohl positiv (ferromagnetische Kopplung) als auch negativ (antiferromagnetische Kopplung) sein. Der Austausch kann auch indirekt stattfinden. Dazu zählen i) der Superaustausch, zu finden bei Isolatoren und ii) die Rudermann-Kittel-Kasya-Yosida (RKKY)-Wechselwirkung, zu finden hauptsächlich bei Metallen. Beim Superaustausch findet die Kopplung über ein zwischen 2 ferromagnetischen Ionen liegendes diamagnetisches Ion statt. Ein Beispiel, bei dem die RKKY-Wechselwirkung die entscheidende Ursache des Ferromagnetismus ist, sind die seltenen Erden. Die 4f-Elektronen bilden das magnetische Moment der Atomrümpfe, dieses ist stark lokalisiert. Die Überlagerung von 4f-Elektronen benachbarter Atome spielt daher eine untergeordnete Rolle, vielmehr werden durch die magnetischen Momente der Atomrümpfe die Spins der Leitungselektronen ausgerichtet, was zu einer Kopplung der Atomrümpfe führt [17]. Im Gegensatz zu der direkten Austauschwechselwirkung ist die RKKY-Wechselwirkung eine langreichweitige Kopplung. Bei den in dieser Arbeit verwendeten magnetischen Materialien handelt es sich allerdings um sogenannte 3d-Ferromagneten. Hier ist der Spin der 3d-Elektronen die Ursache für den Ferromagnetismus. Im Gegensatz zu den 4f-Elektronen sind die 3d-Elektronen nicht lokalisiert, sondern vielmehr als quasifreie Elektronen anzusehen. Die spontane Magnetisierung eines Materials ist eine temperaturabhängige Größe, die oberhalb der Curie Temperatur T_C verschwindet, d. h., das Material ist dann paramagnetisch [1].

Magnetische Anisotropie Die freie Energie F ist gegeben durch $F = U - TS$ mit der inneren Energie U , der Temperatur T und der Entropie S . Die Änderung der freien Energie liefert:

$$dF = dU - SdT - TdS. \quad (2.12)$$

Für das Differential der inneren Energie gilt $dU = \delta Q + \delta W$ mit der Wärme $\delta Q = TdS$ und der Arbeit δW . Damit ergibt sich für die freie Energie [22]:

$$dF = \delta W - SdT. \quad (2.13)$$

Betrachtet man dieses Differential bei konstanter Temperatur ($dT = 0$), dann erhält man also $dF = \delta W$. Der im folgenden relevante Anteil der differentiellen Arbeit betrifft die Änderung des magnetischen Momentes $d\vec{m}$, d. h. $\delta W = \vec{B}_0 \cdot d\vec{m}$. Dabei ist \vec{B}_0 das externe Magnetfeld. Das magnetische Moment bezogen auf das Volumen V ist die Magnetisierung $\vec{M} = \sum_i \vec{m}_i / V$. Für das Differential der freien Energie folgt dann $dF = \frac{1}{V} \vec{B}_0 \cdot d\vec{M}$ [22]. Durch Integrieren erhält man:

$$F_2 - F_1 = \frac{1}{V} \int_1^2 \vec{B}_0 \cdot d\vec{M}. \quad (2.14)$$

1 und 2 stehen für den Anfangs- und den Endzustand des Systems, d. h. für zwei Zustände, in denen die Magnetisierung des Systems in unterschiedlichen Richtungen, z. B. schwere bzw.

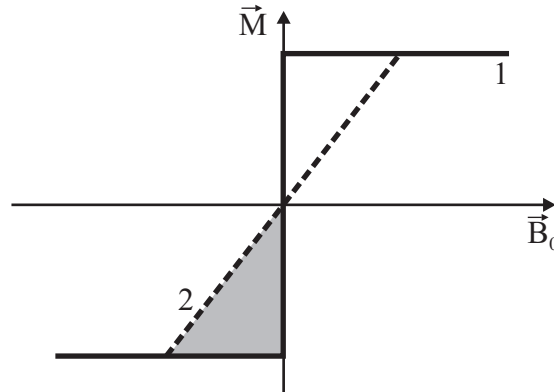


Abb. 2.8.: Magnetisierung als Funktion des angelegten Feldes \vec{B}_0 , magnetische Anisotropieenergie (grau schraffierte Fläche).

leichte Richtung, orientiert ist. Die Differenz $F_2 - F_1$ beschreibt die Änderung des magnetischen Anteiles der freien Energiedichte und wird als magnetische Anisotropieenergie (MAE) bezeichnet.

In Abb. 2.8 ist die Glg. (2.14) veranschaulicht. Aufgetragen ist die Magnetisierung als Funktion des äußeren Feldes. Die durchgezogene Linie entspricht dem Anfangszustand 1. In diesem Beispiel handelt es sich um eine Magnetisierungskurve, bei der die freie Energie minimal ist (leichte Richtung von \vec{M}). In diesem Fall nimmt die Magnetisierung auch ohne äußeres Feld¹ sofort den Sättigungswert M_s an. Ein Beispiel für den Zustand 2 wird durch die gestrichelte Kurve gegeben. Der Verlauf von \vec{M} ist hier linear und der Sättigungswert M_s wird erst bei großen Feldern erreicht, d. h., F hat in dieser Richtung ein Maximum (schwere Richtung). Die Hälfte der Differenz der Flächen unter den Kurven 1 und 2 ergibt gemäß Glg. (2.14) den Wert der MAE (grau schattierte Fläche).

Ursachen der MAE Es gibt 2 Ursachen der MAE, dies sind die Dipol-Dipol-Wechselwirkung und die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die Austauschwechselwirkung gehört nicht dazu, da sie im Ortsraum isotrop ist und nur die Spinkoordinaten enthält [23]. Um eine Anisotropie zu erhalten, benötigt man Wechselwirkungen die Spin- und Ortsraum koppeln.

Die Dipol-Dipol-Wechselwirkung eines Dipols \vec{m}_i im Abstand \vec{r}_{ij} von einem zweiten Dipol \vec{m}_j wird beschrieben durch:

$$E_{dipol} = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{m}_i)(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{m}_j)}{r_{ij}^5}. \quad (2.15)$$

Die Wechselwirkungsenergie hängt damit über \vec{r}_{ij} von der Orientierung der Kristallachsen relativ zur Ausrichtung der magnetischen Momente bzw. der Magnetisierung ab. Sie erzeugt daher einen Beitrag zur Anisotropie. Einen weiteren Beitrag liefert die Spin-Bahn-Kopplung,

¹Dies gilt nur ohne Berücksichtigung von Hystereseeffekten, die an dieser Stelle nicht diskutiert werden sollen.

auch LS -Kopplung genannt. Die Bahnbewegung der Ladungsträger wird durch das periodisch angeordnete Kristallgitter beeinflusst. Die Kopplung des Spins an das Kristallgitter geschieht dann durch die Kopplung der Bahnbewegung an die Spins vermittelt durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung [17,23].

Ausdrücke der freien Energiedichte In diesem Abschnitt werden Ausdrücke für die freie Energie kubischer und tetragonal bzw. orthorhombisch verzerrter Systeme phänomenologisch hergeleitet. Es ist üblich, die freie Energie nach den Richtungskosinus $\alpha_i = \frac{\vec{M}}{|\vec{M}|} \cdot \vec{e}_i$ ($i = 1, 2, 3$) der Magnetisierung bezogen auf die kubischen $\langle 100 \rangle$ -Kristallachsen zu entwickeln.

Bei Kristallen kubischer Symmetrie müssen in der Entwicklung nach den α_i gemischte Terme (z. B. $\alpha_1\alpha_2$) und alle α_i ungerader Potenz verschwinden, da solche Terme die kubische Symmetrie nicht widerspiegeln. Außerdem muß der Ausdruck invariant gegenüber einem Austausch der α_i untereinander sein. Daher lautet die Formel der freien Energie kubischer Systeme [24]:

$$F_{kub} = K_4 (\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2) + K_6 (\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2) + K_8 (\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2)^2. \quad (2.16)$$

Die K_i sind die Anisotropiekonstanten. Die erste nicht verschwindende Ordnung in kubischer Symmetrie ist K_4 , die höheren Terme sind klein und werden im allgemeinen vernachlässigt. Verwendet man für die α_i Polarkoordinaten, d. h. $\alpha_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\alpha_2 = \sin \theta \sin \phi$, $\alpha_3 = \cos \theta$, wobei der Winkel θ gegen die $[001]$ - und der Winkel ϕ gegen die $[100]$ -Richtung gemessen wird, so folgt:

$$\begin{aligned} F_{100} &= K_4 (\sin^2 \theta \cos^2 \theta + \sin^4 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi) \\ &= K_4 \sin^2 \theta - \frac{1}{8} K_4 (\cos 4\phi + 7) \sin^4 \theta. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Verwendet man einen Kristall mit (110) -Orientierung, so müssen zunächst die α_i aus dem 110 - in das 100 -Koordinatensystem überführt werden, da in der Glg. (2.16) die Richtungskosinus im 100 -Koordinatensystem gegeben sind. Diese Rechnung, die in [7,24] durchgeführt wird, führt auf:

$$F_{110} = \frac{K_4}{4} \left(\cos^4 \theta \sin^4 \theta [\sin^4 \phi + \sin^2 (2\phi)] + \sin^2 (2\theta) \left[\cos^2 \phi - \frac{1}{2} \sin^2 \phi \right] \right). \quad (2.18)$$

In der vorliegenden Arbeit wurden dünne Filme präpariert. Diese weisen aufgrund des pseudomomorphen Wachstums im Falle des Wachstums auf der (100) -Oberfläche eine tetragonale, im Falle der (110) -Oberfläche eine orthorhombische Verzerrung auf. Für tetragonale und orthorhombische Systeme stehen alle drei primitiven Vektoren der Elementarzelle senkrecht aufeinander, jedoch sind diese nicht mehr gleich lang. Für die tetragonale Zelle liegt in der Ebene eine C_4 -, für die orthorhombische eine C_2 -Symmetrie vor. Daher sind bei tetragonaler Verzerrung die Achsen in der Ebene gleich lang, unterscheiden sich jedoch von der senkrechten, wohingegen bei einer orthorhombischen Verspannung alle drei Achsen eine unterschiedliche Länge aufweisen.

Durch die tetragonale Verzerrung sind die Achsen nicht mehr gleichwertig, d. h., man erhält einen K_2 -Term. Ebenfalls bedingt durch die Deformation der Zelle, teilt sich der K_4 -Term in einen Beitrag senkrecht und einen parallel zur Ebene auf. Daher ergibt sich für F im tetragonalen Fall [24]:

$$F_{tet} = -K_{2\perp}\alpha_3^2 - \frac{1}{2}K_{4\perp}\alpha_3^4 - \frac{1}{2}K_{4\parallel}(\alpha_1^4 + \alpha_2^4). \quad (2.19)$$

Setzt man wieder die obigen Ausdrücke für die Polarkoordinaten ein, so folgt:

$$F_{tet} = -K_{2\perp}\cos^2\theta - \frac{1}{2}K_{4\perp}\cos^4\theta - \frac{1}{8}K_{4\parallel}(3 + \cos 4\phi)\sin^4\theta. \quad (2.20)$$

Im Fall der (110)-Oberfläche mit einer orthorhombischen Einheitszelle entstehen aufgrund der C_2 -Symmetrie in der Ebene zum einen uniaxiale in-plane Terme 2. Ordnung ($K_{2\parallel}^1$ und $K_{2\parallel}^2$). Zum anderen spaltet sich auch $K_{4\parallel}$ in zwei Komponenten ($K_{4\parallel}^1, K_{4\parallel}^2$) auf. Damit erhält man:

$$F_{ortho} = -K_{2\perp}\alpha_3^2 + K_{2\parallel}^1\alpha_1^2 + K_{2\parallel}^2\alpha_2^2 - \frac{1}{2}K_{4\perp}\alpha_3^4 + \frac{1}{2}K_{4\parallel}^1\alpha_1^4 - \frac{1}{2}K_{4\parallel}^2\alpha_2^4. \quad (2.21)$$

Da in dieser Arbeit an dem (110)-System nur Messungen mit dem polaren Kerr-Effekt durchgeführt wurden, werden die K_{\parallel} -Terme im folgenden vernachlässigt². Damit ergibt sich unter der Verwendung der Polarkoordinaten:

$$F_{ortho} = -K_{2\perp}\cos^2\theta - \frac{1}{2}K_{4\perp}\cos^4\theta. \quad (2.22)$$

Um zu unterscheiden, ob das Volumen oder die Grenzschicht den höheren Anteil zur Anisotropie beiträgt, werden die K_i in einen Volumenanteil K^V und einen Grenzschichtanteil K^S aufgeteilt. Für letzteren läßt sich zeigen, daß er bei ultradünnen Filmen mit der reziproken Filmdicke d skaliert, d. h. $K_i = K_i^V + K_i^S/d$ [10]. Die bisher besprochenen Anisotropien sind die intrinsischen Anisotropien aufgrund der LS-Kopplung. In dünnen Filmen tritt jedoch auch eine Formanisotropie auf, die von der oben diskutierten Dipol-Dipol-Wechselwirkung herrührt. Für einen dünnen Zylinder, dem ein dünner Film in guter Näherung entspricht, gilt $F_{Form} = 2\pi M^2 \cos^2\theta$.

Im angelegten Feld muß auch die Zeeman-Energie $F_{Zeeman} = -\vec{M} \cdot \vec{H}$ berücksichtigt werden, die die Magnetisierung mit zunehmender Stärke des \vec{H} -Feldes in dessen Richtung zwingt [7]. Zusammenfassend ergibt sich dann für die freie Energiedichte der (100)- und (110)-Oberfläche unter Vernachlässigung der K_4 -Terme der folgende identische Ausdruck:

$$F_{100/110} = \left(2\pi M^2 - \left[K_{2\perp}^V + \frac{K_{2\perp}^S}{d} \right] \right) \cos^2\theta - \vec{M} \cdot \vec{H}. \quad (2.23)$$

Der Beitrag, den die Formanisotropie liefert, ist immer positiv. Durch die Abhängigkeit der freien Energiedichte von $\cos^2\theta$, liegt das Minimum von F daher bei $\theta = 90^\circ$. Dies bedeutet,

²Eine ausführliche Diskussion der Ausdrücke der freien Energiedichte befindet sich in Anhang A.

daß die Formanisotropie die Magnetisierung \vec{M} stets in die Ebene zwingt. Aus Experimenten weiß man jedoch, daß aufgrund der Dimensionalität ultradünner Filme senkrechte Magnetisierungen realisiert werden [25]. Um eine solche Magnetisierungsrichtung einstellen zu können, kommt es demzufolge auf die Vorzeichen von $K_{2\perp}^V$ und/oder $K_{2\perp}^S/d$ an. Sind beide kleiner Null, so ist der entsprechende Term in der Glg. (2.23) positiv und die Magnetisierung liegt aus den gleichen Gründen wie bei der Formanisotropie in der Ebene. Wenn $K_{2\perp}^S/d$ und $K_{2\perp}^V$ größer Null sind, dann ist der zweite Teil der Glg. (2.23) kleiner Null, wodurch der Vorfaktor vor dem Kosinus negativ wird. Ein Minimum für die freie Energiedichte stellt sich dann ein, wenn der Kosinus maximal wird, was für $\theta = 0^\circ$ der Fall ist. Daraus folgt, daß die Magnetisierung senkrecht zur Ebene steht. Angemerkt sei noch, daß die Grenzsichtanisotropie aufgrund der $1/d$ -Abhängigkeit nur im Bereich weniger Atomlagen eine Rolle spielt [7]. Bei höheren Bedeckungen ist ihr Beitrag jedoch vernachlässigbar, so daß nur noch die Volumen- und die Formanisotropie entscheidend sind.

3. Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel werden in Kürze die experimentellen Methoden vorgestellt. Die Präparation der Filme und Substrate sowie die Experimente fanden im Ultrahochvakuum (UHV) statt. Dazu wurde die UHV-Kammer benutzt, deren schematischer Aufbau in Abb. 3.1 zu sehen ist. Die Kammer ist in einen Teil für die strukturellen Untersuchungen und einen Präparationsteil, in dem ebenfalls magnetische Messungen durchgeführt werden können (siehe Abschnitt 3.4), unterteilt. Beide Kammerhälften können durch ein Ventil voneinander getrennt werden. Die Probe wird mittels einer Transferachse vom Präparationsteil zum System zur Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) bzw. zum Rastertunnelmikroskop (STM) im Strukturteil transportiert. Weitere Proben und STM-Spitzen werden in einem Karussell in der Nähe des STM's aufbewahrt. Sie können mittels eines Wobbelsticks zwischen STM, Karussell und Transferachse umgesetzt werden [26,27].

Für die LEED-Messungen wurde eine 4-Gitter-LEED-Optik genutzt, mit deren Hilfe auch Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES) durchgeführt werden kann.

Im Präparationsteil ist ein Vierfachverdampfer eingebaut, mit dessen Hilfe Ein- und Mehrschichtsysteme aufgedampft werden können. Desweiteren befindet sich hier ein Magnet,

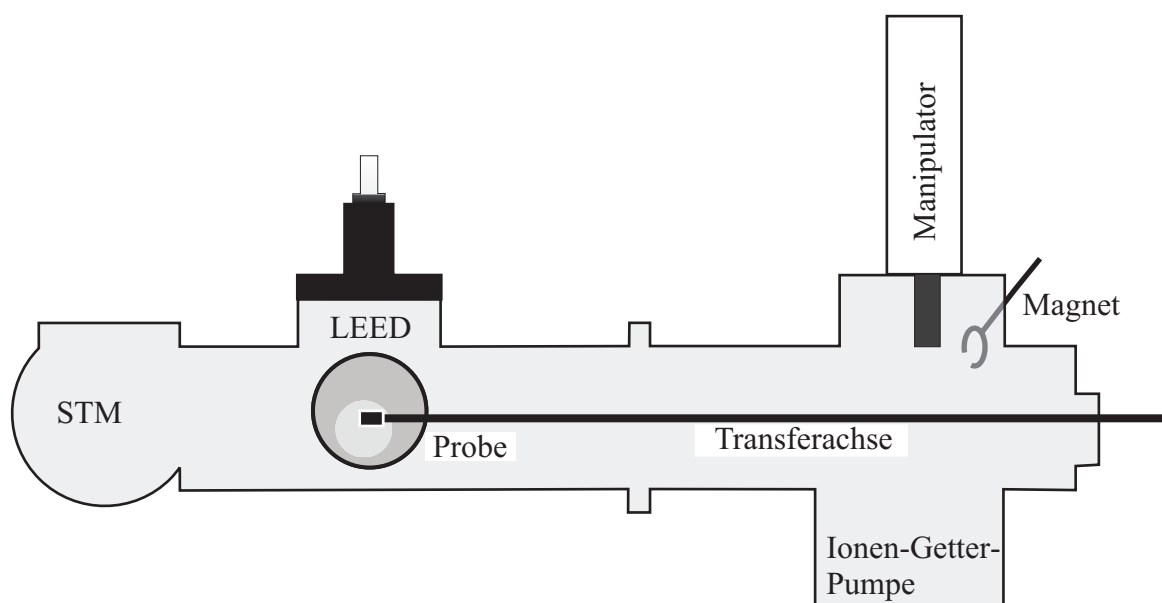


Abb. 3.1.: Skizze des Kammeraufbaus.

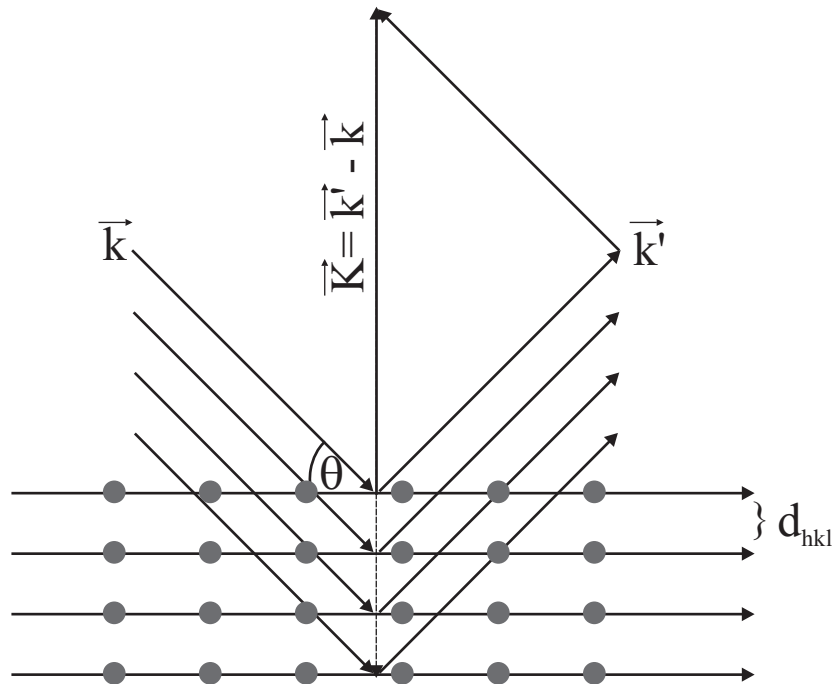


Abb. 3.2.: Strahlengang der Elektronen im elastisch gebeugten Fall in spekulativer Geometrie.

um polare magneto-optische Kerr-Effekt (MOKE)-Experimente durchführen zu können.

3.1. Elektronenbeugung

LEED wird zur Überprüfung der Probenqualität genutzt. Mittels dieser Technik kann man quantitative Aussagen über die Periodizität des Gitters, über Terrassenbreiten oder auch den Interlagenabstand treffen. Eine geringe Hintergrundstreuung bedeutet beispielsweise, daß die Defektdichte innerhalb der Transferweite [28] der LEED-Optik gering ist. Die Schärfe der Beugungsreflexe gibt Auskunft über die Ordnung der Oberfläche des Kristalls. So bedeutet z. B. eine Verbreiterung bis hin zu einer Aufspaltung der Reflexe entlang einer bestimmten Richtung, daß sich parallel zu dieser Richtung Terrassen einer bestimmten Breite befinden. Desweiteren ist es möglich spannungsabhängige Intensitätsspektren der Beugungsreflexe (I/V-LEED) zu detektieren. Die Auswertung der Bragg-Peaks erlaubt Aussagen über den Interlagenabstand d_i von Filmen und Substraten.

Theorie In Abb. 3.2 ist der Strahlengang elastisch gebeugter Elektronen an einem sc-Gitter dargestellt. Der Lagenabstand der Ebenen ist mit d_{hkl} gekennzeichnet, wobei h, k, l die Miller Indizes der Oberfläche bezeichnen (siehe Kap. 2). Der einfallende Strahl mit dem Wellenvektor \vec{k} wird an den Ebenen gestreut. Unter der Voraussetzung von elastischer Beugung wird keine Energie an das Gitter übertragen. Damit gilt für den Wellenvektor \vec{k}' des ausfallenden Strahls

$k' = k$. In der sogenannten kinematischen Näherung geht man von Einfachstreuung an den Netzebenen aus. Diese Näherung ist zwar für die Wechselwirkung von Elektronen mit Festkörperoberflächen im Gegensatz etwa zu derjenigen von Photonen (Röntgenbeugung) meist nur schlecht erfüllt, liefert aber dennoch die grundlegenden Aussagen über die Beugungserscheinungen. Für den speziellen Fall der spekularen Geometrie ist der Winkel θ der einfallenden Strahlen gleich dem der ausfallenden (siehe Abb. 3.2). Gemäß Abb. 3.2 beträgt der Gangunterschied der an benachbarten Netzebenen gestreuten Strahlen $2d_{hkl} \sin \theta$. Um konstruktive Interferenz zu erhalten, muß der Gangunterschied einem ganzzahligen Vielfachen n der Wellenlänge λ entsprechen. Damit folgt die Bragg-Bedingung [16]:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta. \quad (3.1)$$

Eine äquivalente Beschreibung der Elektronenbeugung an Kristallen wird durch die Laue-Bedingungen gegeben [15]. Damit Beugungsreflexe entstehen, muß der Streuvektor $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$, der senkrecht auf den Netzebenen steht, die folgenden Beugungsbedingungen erfüllen [15]:

$$\begin{aligned} \vec{K} \cdot \vec{a}_1 &= 2\pi h \\ \vec{K} \cdot \vec{a}_2 &= 2\pi k \\ \vec{K} \cdot \vec{a}_3 &= 2\pi l. \end{aligned} \quad (3.2)$$

h, k, l sind ganze Zahlen, \vec{a}_i mit $i = 1, 2, 3$ sind die Gittervektoren des realen Raumgitters und \vec{K} ist der Streuvektor. Schreibt man für \vec{K} den Ausdruck $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$, so erhält man unter Verwendung der Laue-Bedingungen $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Dies ist aber gerade die Definitionsgleichung der primitiven Translationsvektoren \vec{b}_i des reziproken Gitters (siehe Kap. 2), womit gezeigt ist, daß der Streuvektor \vec{K} und damit ein Beugungsreflex immer in Richtung eines reziproken Gittervektors \vec{G} liegt. Das Beugungsmuster liefert daher ein Abbild des reziproken Gitters.

Bislang wurde davon ausgegangen, daß die Beugung an einem in drei Raumrichtungen periodischen Kristallgitter stattfindet. Bei Beugung unter Verwendung von Elektronen muß man jedoch bedenken, daß diese eine geringe Eindringtiefe besitzen und daher nur mit den obersten Atomlagen wechselwirken. Die Elektronen „sehen“ damit die Periodizität senkrecht zur Oberfläche kaum, so daß in guter Näherung nur die ersten beiden Gleichungen der Laue-Bedingungen erfüllt werden müssen. Im folgenden wird deshalb zunächst die Beugung an einer idealen zweidimensionalen Oberfläche als Modell herangezogen, um die Beugungsbilder (LEED-Bilder) zu erklären. Die 2D-Oberfläche wird im Realraum durch die Gittervektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 beschrieben. Da senkrecht zur Oberfläche keine Periodizität vorliegt (Periodenlänge = ∞), liegen die Punkte des reziproken Gitters in dieser Richtung unendlich dicht beieinander, so daß das reziproke Gitter einer Oberfläche durch diskrete Werte in der Ebene und Stangen senkrecht zu dieser gegeben ist. Abbildung 3.3(links) stellt dieses reziproke Gitter entlang der k_x -Richtung dar [29]. Die möglichen Richtungen der elastisch gebeugten ausfallenden Strahlen (\vec{k}')

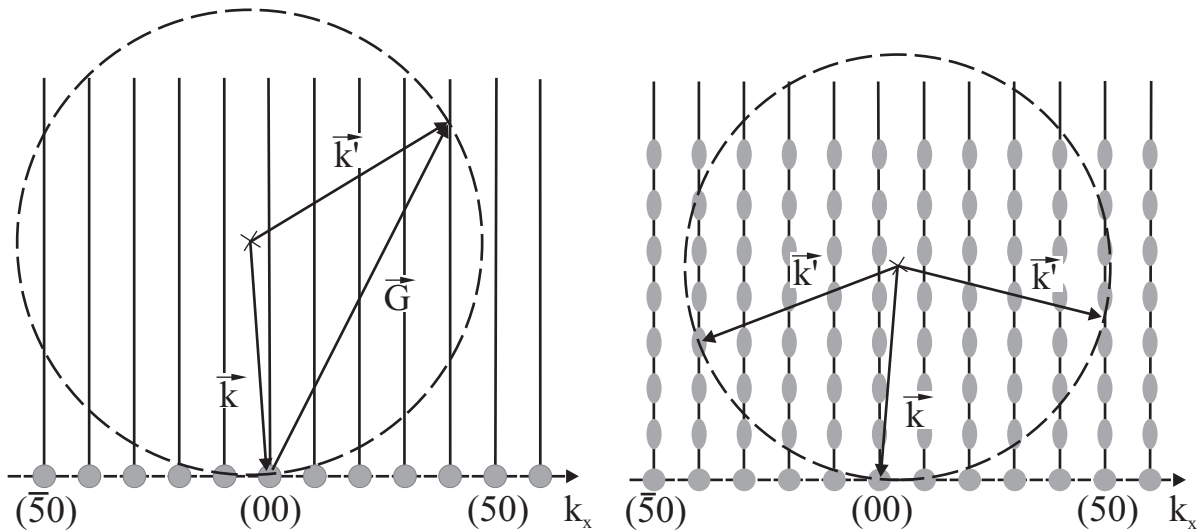


Abb. 3.3.: Links: Darstellung der Ewaldkugel für eine zweidimensionale Fläche entlang der x-Richtung, rechts: Darstellung der Ewaldkugel für dreidimensionale periodische Strukturen entlang der x-Richtung.

lassen sich mittels der Ewaldkonstruktion bestimmen. Dazu zeichnet man den Wellenvektor \vec{k} der einfallenden Welle, so daß er am $(0;0)$ -Punkt des reziproken Gitters endet. Dann konstruiert man um den Anfangspunkt von \vec{k} eine Kugel mit dem Radius k . Die aus den Laue-Gleichungen geforderte Bedingung $\vec{K} = \vec{G}$ ist genau an den Stellen erfüllt, an denen die Kugel die Stangen des reziproken Gitters schneidet. In Abb. 3.3(links) trifft dies z. B. auf den $(4;0)$ -Reflex zu. Eine Erhöhung der Elektronenenergie führt zu einer Vergrößerung des Radius der Ewaldkugel, was bedeutet, daß mehr Stangen geschnitten werden und somit mehr Beugungsreflexe auftreten. Mit zunehmender Energie bewegen sich daher die Reflexe in Richtung des $(0;0)$ -Spots. Würde die Beugung tatsächlich nur an der obersten Atomlage stattfinden, dann würde man unter der Voraussetzung der Energieunabhängigkeit der atomaren Streufaktoren keine Intensitätsvariationen der Beugungsreflexe als Funktion der Elektronenenergie erwarten.

Tatsächlich dringen die Elektronen, wie Abb. 3.2 schematisch zeigt, in den Festkörper ein [28]. Dieser Fall ist in Abb. 3.3(rechts) dargestellt. Die Stangen weisen nun in regelmäßigem Abstand Verdickungen auf. Diese entsprechen der Periodizität des Gitters in z-Richtung. Die Ewaldkonstruktion erfolgt auf dieser quasi 2D-Oberfläche analog zu derjenigen in Abb. 3.3(links). Die Intensität der Beugungsreflexe in Abb. 3.3(rechts) ist nun jedoch abhängig von der Position des Schnittpunktes. Befindet sich dieser in der Mitte einer Verdickung, dann existiert ein Intensitätsmaximum $(\bar{4};0)$. Liegt der Schnittpunkt zwischen zwei Verdickungen, dann handelt es sich um ein Minimum $(5;0)$. Durch Änderung der Energie und damit verbundener Größe der Ewaldkugel lassen sich die verschiedenen Beugungsordnungen erfassen. Die Intensitätsmaxima der Beugungsreflexe nennt man Bragg-Maxima (-Peaks). Die Auswertung der Bragg-Maxima liefert somit Informationen über den vertikalen Lagenabstand.

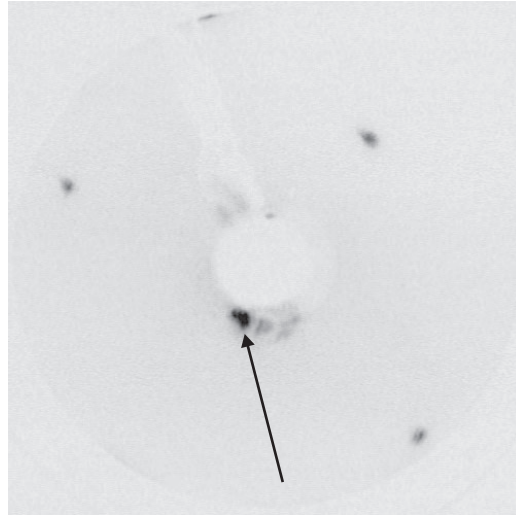


Abb. 3.4.: Beugungsbild (50 eV) eines verkippten Cu(100)-Kristalls zur Messung des spekularen Reflexes. Der Pfeil kennzeichnet den Reflex.

Experiment und Auswertung Die Methode I/V-LEED wird anhand des Cu(100)-Einkristalles erklärt. Zur Durchführung des Experimentes wird die Probe zunächst präpariert (siehe Kap. 4) und im Anschluß unter die 4-Gitter-LEED-Optik geschoben. Aus den LEED-Bildern kann man zum einen den Abstand der Atome in der Ebene bestimmen, in dem man den Abstand zwischen den Beugungsreflexen ebenso wie die Distanz zwischen Kristall und Elektronenkanone ermittelt [30]. Zum anderen ist es möglich, aus der Breite der Reflexe Informationen über die Ordnung des Kristalls bzw. der Oberfläche zu gewinnen (siehe Kap. 4) [28]. Desweiteren können die Intensitätenspektren der Beugungsreflexe als Funktion der Energie detektiert werden. In dieser Arbeit ist der spekulare Reflex gemessen worden, da er über einen großen Energiebereich beobachtet werden kann. Mit steigender Energie nimmt die mittlere freie Weglänge und damit die Eindringtiefe der Elektronen zu [28], dadurch erhält man einen über 10 ML gemittelten Interlagenabstand d_i . Für diese Experimente muß der Kristall minimal aus der horizontalen Lage herausgedreht werden, so daß der spekulare Reflex ((0;0)-Spot) dicht neben der Elektronenkanone erscheint. In Abb. 3.4 ist das Beugungsbild des Cu(100)-Kristalls zu sehen, der um $\theta \approx 3^\circ$ (Kippwinkel) bezogen auf die horizontale Richtung verkippt ist. Das energieabhängige Spektrum dieses Spots zeigt die Abb. 3.5. Man erkennt deutlich die Bragg-Peaks, zusätzlich sind insbesondere bei kleinen Elektronenenergien Intensitätsmaxima zu sehen. Die Positionen der Bragg-Peaks lassen sich mittels Energie- ($E = h\nu$) und Impulssatz ($p = mv$) und der Bragg-Gleichung berechnen. Als Bestimmungsgleichung erhält man:

$$E_k = \frac{h^2}{d_i^2 8m_e \sin^2(90^\circ - \theta)} n^2. \quad (3.3)$$

n ist die Beugungsordnung, θ der Einfallswinkel gemessen gegen die Filmebene und d_i der Interlagenabstand. Mit dieser Gleichung, die von freien Elektronen ausgeht, können jedoch nicht

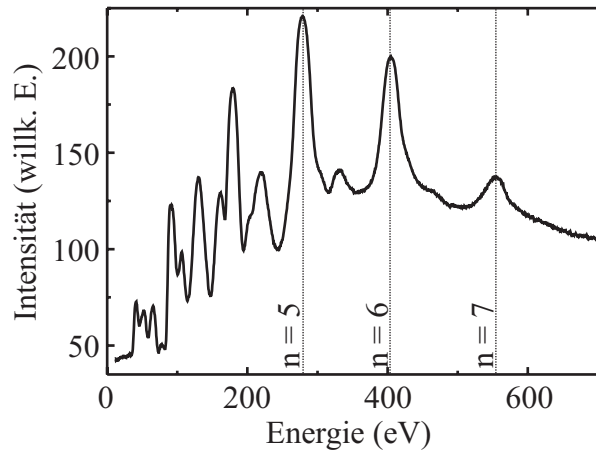


Abb. 3.5.: Spektrum des spekularen Reflexes von Cu(100). Die gestrichelten Linien markieren die Bragg-Peaks, die mit den Nummern $n = 5, 6, 7$ versehen wurden.

alle auftretenden Maxima beschrieben werden. Außerdem wird der Einfluß des inneren Potentials V im Kristall vernachlässigt. Durch dieses erhält das Elektron im Festkörper zusätzliche kinetische Energie und hat daher effektiv eine kleinere Wellenlänge $\lambda_{\text{kristall}} = \sqrt{1,5 / (V_{\text{vak}} - V)}$ verglichen mit derjenigen im Vakuum ($\lambda_{\text{vak}} = \sqrt{1,5 / V_{\text{vak}}}$). Das innere Potential ist auch dafür verantwortlich, daß der Brechungsindex an der Oberfläche $n = \lambda_{\text{vak}} / \lambda_{\text{kristall}} \neq 1$ ist und somit die Elektronen teilweise reflektiert werden [28]. Um den Effekt des inneren Potentials zu verdeutlichen und ein genaueres Verständnis der Intensitätsvariationen der Beugungsreflexe zu erhalten, ist in Abb. 3.6 die Bandstruktur einer halbunendlichen (100)-Oberfläche in $\Gamma - X$ -Richtung der Brillouinzone im reduzierten Zonenschema dargestellt. In Abb. 3.6a) wurde die Bandstruktur für freie Elektronen (Vernachlässigung des inneren Potentials), in Abb. 3.6b) diejenige unter Berücksichtigung des Oberflächenpotentials berechnet. Das in Abb. 3.6b) angenommene periodische Potential bewirkt eine Aufspaltung der Bänder an der Zonengrenze, so daß verbotene (gestrichelt) Energiebereiche entstehen [31]. In Abb. 3.6c) ist die Reflektivität der auf die Oberfläche auftreffenden Elektronen über deren Energie aufgetragen. Die Pfeile kennzeichnen die Positionen der nach Glg. (3.3) erwarteten Bragg-Maxima für freie Elektronen. Man erkennt, daß diese gerade dort auftreten, wo die Bänder der freien Elektronen aus a) die Zonenränder schneiden (primäre Bragg-Reflexe mit ganzzahliger Ordnung) bzw. wo sich die Bänder im reduzierten Zonenschema kreuzen (secondäre Bragg-Reflexe mit nicht ganzzahliger Ordnung). Betrachtet man nun die mittels der realistischen Bandstruktur aus b) berechnete Reflektivität, so erkennt man, daß die Intensitätsmaxima gerade dann auftreten, wenn die Energie der einfallenden Elektronen in einer Bandlücke liegt. Elektronen dieser Energie können sich im Kristall nicht fortbewegen und werden daher reflektiert. Man erkennt außerdem, daß die Intensitätsmaxima verglichen mit der Erwartung für freie Elektronen bei kleineren Energien liegen, was an dem bereits erwähnten Einfluß des inneren Potentials V liegt. Für die in dieser Arbeit durchgeführte Analyse ist nun entscheidend, daß bei großen Elektronenenergien (i) der Einfluß

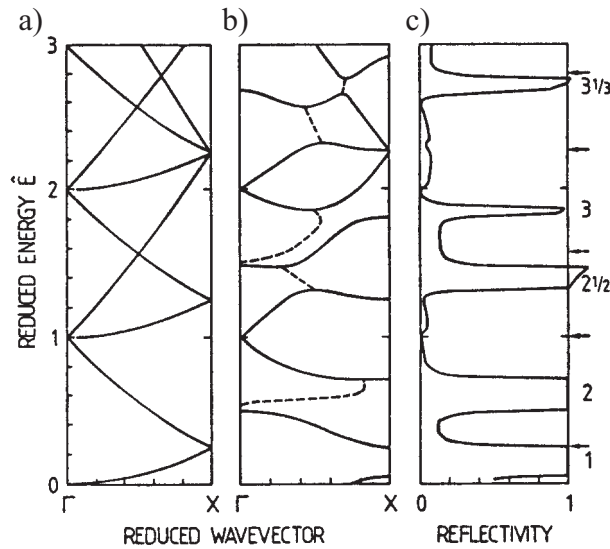


Abb. 3.6.: Bandstruktur und Reflektivität einer halbunendlichen (100)-Ebene a) freier Elektronen und b) berechnete Bandstruktur. Das periodische Potential bedingt eine Aufspaltung in verbotene (gestrichelt) und erlaubte (durchgezogen) Zustände. c) Reflektivität von Elektronen mit senkrechten Einfall auf eine (100)-Oberfläche [31].

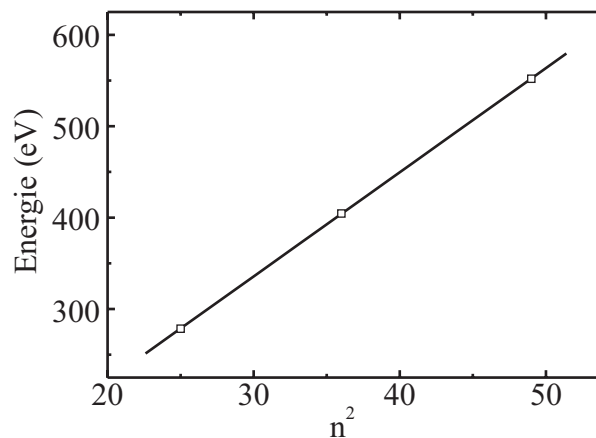


Abb. 3.7.: Position der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 mit Ausgleichsgeraden.

des inneren Potentials vernachlässigbar ist und sich (ii) die Bandstruktur derjenigen freier Elektronen annähert. Daher wurden nur Bragg-Peaks oberhalb von 200 eV zur Berechnung von d_i genutzt. In Abb. 3.5 sind diese mit gepunkteten Linien hervorgehoben. Trägt man die Energie, bei der ein Maximum vorliegt über n^2 auf, dann erhält man den in Abb. 3.7 gezeigten linearen Verlauf. Der Anstieg b der Geraden ist 11,39 eV und der Schnittpunkt mit der y-Achse entspräche dem inneren Potential, wenn man dieses als energieunabhängig ansetzt. Dann gilt der Zusammenhang:

$$y = bx + c \iff E_k = \frac{h^2}{d_i^2 8m_e \sin^2(90^\circ - \theta)} n^2 + V, \quad (3.4)$$

θ (°)	0	1	2	3	4	5	6	7
d_i (Å)	1,817	1,817	1,818	1,819	1,821	1,824	1,827	1,831
θ (°)	8	9	10	11	12	13	14	15
d_i (Å)	1,835	1,839	1,845	1,851	1,858	1,865	1,873	1,881

Tabelle 3.1.: Interlagenabstand d_i als Funktion des Kippwinkels.

wodurch allein der Anstieg der Ausgleichsgeraden den Interlagenabstand bestimmt [32]. Setzt man nun $b = h^2 / (d_i^2 8m_e \sin^2 [90^\circ - \theta])$, dann folgt:

$$d_i = \frac{h}{\sqrt{8bm_e \sin^2 (90^\circ - \theta)}}. \quad (3.5)$$

Der Interlagenabstand d_i beträgt für das hier gezeigte Beispiel 1,82(5) Å und stimmt somit gut mit dem theoretischen Wert von 1,81 Å für Cu(100) überein. In Tab. 3.1 ist d_i als Funktion des Kippwinkels θ aus der Horizontalen berechnet worden. Man erkennt, daß die Unterschiede zwischen einem Kippwinkel von $\theta = 0^\circ$ und $\theta = 5^\circ$ im Bereich des Fehlers liegen. Die größeren Winkel können ausgeschlossen werden, so daß die Fehlerquelle aufgrund eines nur ungenau bekannten Winkels gering ist. Angemerkt sei noch, daß allein die relative Verschiebung der Bragg-Peaks nach Bedeckung durch einen dünnen Film bei bekanntem d_i des Substrates eine empfindliche Methode liefert, relative Änderungen von d_i zu messen.

Sowohl für die Berechnung von d_i aus dem Anstieg b der Ausgleichsgeraden als auch für die Bestimmung der Position, respektive Energien, der Bragg-Peaks ist je ein Programm geschrieben worden.

3.2. Auger-Elektronen-Spektroskopie

Mittels Auger-Elektronen-Spektroskopie ist eine Bestimmung der chemischen Zusammensetzung von Oberflächen möglich. Aus der Intensität des AES-Signals kann zudem die Schichtdicke und damit die Kalibrierung der Rate [7,33], mit der das entsprechende Material aufgedampft wird, ermittelt werden. Die AES-Messungen wurden mithilfe einer 4-Gitter-LEED-Optik durchgeführt, deren technische Funktionsweise in Anhang B.3 erklärt wird. Ebenfalls dort beschrieben ist das PC-Programm, welches zur Datenerfassung der AES-Spektren erstellt wurde. An dieser Stelle wird in kurzer Form der Augerprozeß vorgestellt. Die tiefgestellten Zahlen an den chemischen Elementen Cu, Ni, Fe und V entsprechen im folgenden den Energien der AES-Übergänge in eV.

Die Abb. 3.8 zeigt den Augerprozeß am Beispiel eines KLL -Übergangs. Hier wird die K -Schale des Atoms durch Elektronen der Primärenergie E_P ionisiert. Das Atom hat nun 2 Möglichkeiten zu relaxieren, beide sind in der Abbildung enthalten. Die erste Variante ist das

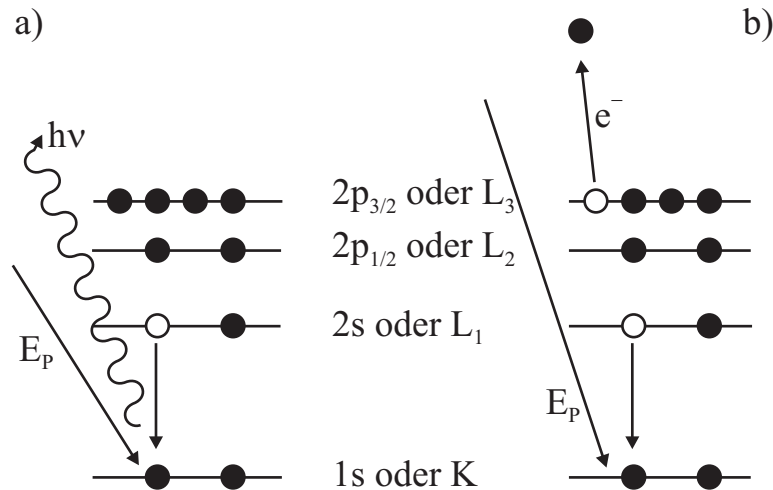


Abb. 3.8.: a) Röntgenfluoreszenz und b) AES-Prozeß anhand eines KLL-Überganges.

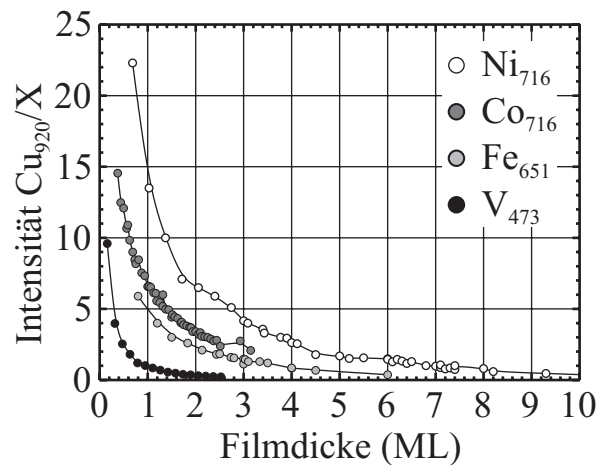


Abb. 3.9.: AES-Intensitäten von Cu_{920} im Verhältnis zu Ni_{716} , Co_{716} , Fe_{651} und V_{473} auf der $\text{Cu}(100)$ -Oberfläche [7,33].

Aussenden eines Photons mit der Energie $h\nu$, Abb. 3.8a). Diese sogenannte Fluoreszenz findet zunehmend bei Elementen höherer Ordnungszahl statt. Die Abb. 3.8b) zeigt die zweite Alternative der Relaxation. Dabei wird ebenfalls durch die Primärenergie E_P aus der K -Schale ein Elektron herausgeschlagen. In der Folge „rutscht“ aus der L_1 -Schale ein Elektron nach. Nun befindet sich in dieser Schale ein Loch, welches wie eine positive Ladung wirkt, die von den umgebenden Elektronen wahrgenommen wird. Durch die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Loch gibt es einen strahlungslosen Übergang, der bewirkt, daß ein Elektron aus der L_3 -Schale herausgeschlagen wird. Die kinetische Energie des Auger-Elektrons wird gemessen [34]. Aus der Abb. 3.8b) wird deutlich, daß man für den AES-Prozeß mindestens 3 Elektronen in der Atomhülle benötigt. Durch den AES-Übergang entstehen Ionen im Festkörper, die diesen positiv aufladen. Daher muß die Probe während des Prozesses geerdet werden (siehe Abb. B.5).

Die AES-Spektren dienen der Bestimmung der Filmdicken eines Materials X. Das Verhältnis von Cu_{920}/X wurde mit den Kalibrierkurven in Abb. 3.9 verglichen. Diese Kurven geben das Verhältnis des Cu_{920} -AES-Peaks zu dem von Ni_{716} , Co_{716} , Fe_{651} bzw. V_{473} in Abhängigkeit der Filmdicke gemessen auf der $\text{Cu}(100)$ -Oberfläche wieder [7,33]. Je mehr Material X auf die $\text{Cu}(100)$ -Oberfläche gelangt, um so schwächer wird die Intensität des 920 eV Cu-Peaks. Allen Kurven gemein ist der exponentielle Verlauf bis zu einem Sättigungswert. Daher ist es sinnvoll die Kalibrierung der Aufdampftrate bei möglichst kleinen Filmdicken vorzunehmen.

3.3. Rastertunnelmikroskopie

Die Morphologie der Filme wurde mittels der Rastertunnelmikroskopie (STM) untersucht. Diese basiert auf dem quantenmechanischen Tunneleffekt. Dieser sowie die experimentelle Durchführung der STM-Messungen werden im folgenden vorgestellt.

Tunnelphänomene treten dann auf, wenn ein Teilchen gegen eine Potentialbarriere $V(\vec{r})$ läuft, die es klassisch betrachtet nicht überwinden kann, da seine kinetische Energie nicht ausreicht [35]. Ist die Breite des Potentialwalls klein genug, gibt es jedoch bei quantenmechanischer Betrachtung eine von Null verschiedene Transmissionswahrscheinlichkeit des Teilchens. Abbildung 3.10a) zeigt den Tunneleffekt im eindimensionalen Falle [36], der zwischen zwei Elektroden (STM-Spitze und Probe) stattfindet, die sich im Abstand s zueinander befinden. Da die Austrittsarbeiten V_{vak} der beiden Elektroden als gleich groß angenommen werden, bildet das Potential eine Rechteckfunktion der Form:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & 0 \leq x \leq s \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Bei $T = 0$ K bildet die Energieverteilung der Elektronen aufgrund der Fermi-Verteilung $f(E) = 1 / \{ \exp [(E - E_F) / kT] + 1 \}$ (k : Boltzmann-Konstante) eine scharfe Stufenfunktion, d. h., alle Zustände unterhalb der Fermi-Energie E_F sind besetzt (grau schattiert), alle oberhalb von E_F unbesetzt. Diese Verteilung gilt in guter Näherung auch bei Raumtemperatur (RT), bei der die Grenzen der Fermi-Funktion nur leicht verschmieren [16]. Trifft nun eine Elektron auf den Potentialwall, so muß die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für die drei in Abb. 3.10 eingezeichneten Bereiche gelöst werden. Der Bereich I ist klassisch erlaubt ($E > V_0$), daher gilt für die Wellenfunktion Ψ_1 :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = E\Psi_1 \quad \Rightarrow \quad \Psi_1 = a_+ \cdot e^{ikx} + a_- \cdot e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}. \quad (3.7)$$

Wie Abb. 3.10b) zeigt, läuft das Elektron mit Masse m_e als ebene Welle mit Amplitude a_+ gegen den Potentialwall. Die Amplitude der rücklaufenden Welle ist a_- . Im Bereich II ($E < V_0$)

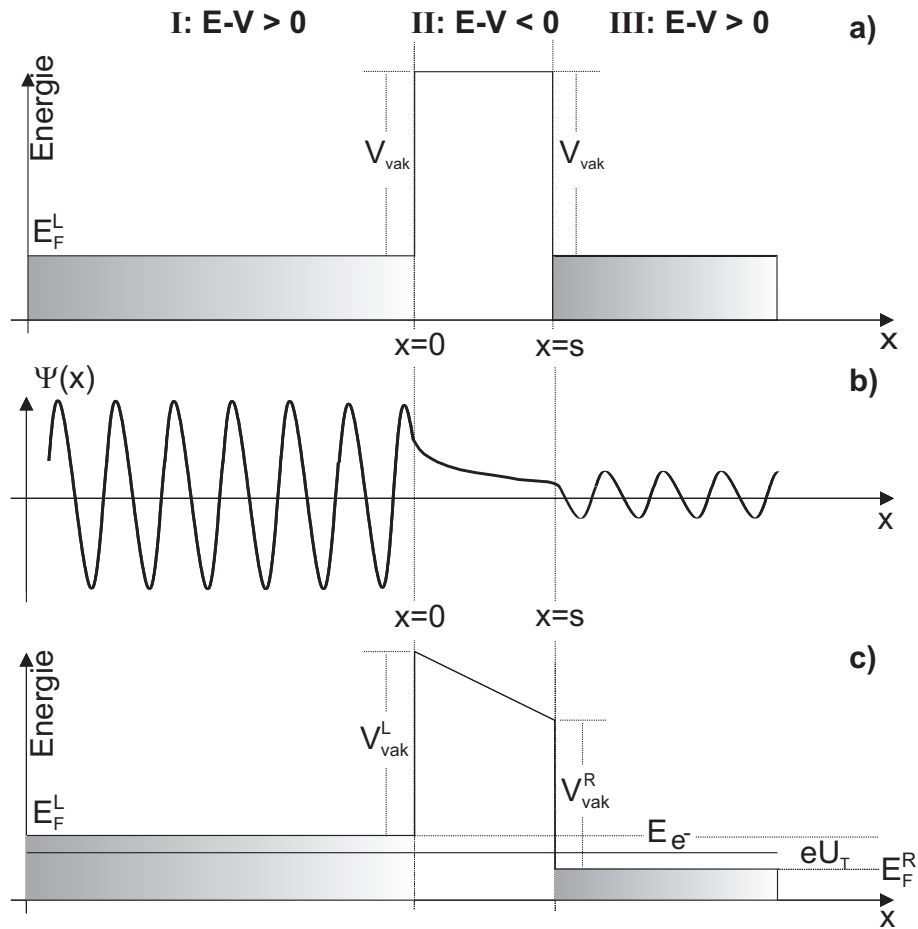


Abb. 3.10.: Eindimensionales Modell des quantenmechanischen Tunnelleffektes. a) stark vereinfachtes Rechteck-Potential für die Tunnelbarriere. b) Wellenfunktion Ψ vor (Region I), innerhalb (Region II) sowie nach der Tunnelbarriere (Region III).

gilt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + V_0\Psi_2 = E\Psi_2 \Rightarrow \Psi_2 = b \cdot e^{ik'x} + c \cdot e^{-ik'x} \text{ mit } k'^2 := -\chi^2 = \frac{2m_e(E - V_0)}{\hbar^2}. \quad (3.8)$$

Da sich das Elektron hier in einem klassisch verbotenen Bereich befindet, ist $k' < 0$. Da die Wellenfunktion in diesem Bereich normierbar sein muß, ist somit $c = 0$ [36] und die Wellenfunktion fällt dann, wie in Abb. 3.10b) gezeigt, exponentiell ab. Ist die Tunnelbarriere genügend schmal, so ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Grenze zu Region III $\neq 0$, und man erhält wieder eine ebene Welle mit Amplitude d (in Region III gibt es keine reflektierte Welle). Es gilt dann:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\Psi_3}{dx^2} = E\Psi_3 \Rightarrow \Psi_3 = d \cdot e^{ikx} \text{ mit } k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}. \quad (3.9)$$

Die Wahrscheinlichkeit des Tunnelprozesses ist durch den Transmissionskoeffizienten D gegeben, der als Verhältnis von durchgehender zu einfallender Wahrscheinlichkeitsstromdichte

($D = j_{out}/j_{in}$) definiert ist [37]. Für ein Teilchen mit Masse m und Wellenfunktion Ψ ist j gegeben durch:

$$j = \frac{\hbar}{2m i} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right). \quad (3.10)$$

Setzt man Ψ_1 in j_{in} und Ψ_2 in j_{out} ein, so folgt $j_{in} = \frac{\hbar k}{m_e}$ sowie $j_{out} = \frac{\hbar k}{m_e} |d|^2$ und somit gilt $D = \frac{j_{out}}{j_{in}} = d^2$. Die Amplituden a , b , c und d ergeben sich aus den Randbedingungen an den Grenzen der drei Teilbereiche, denn dort müssen die Wellenfunktionen und deren Ableitungen stetig ineinander übergehen. Es ergibt sich für D [36]:

$$D = D(E) = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + \chi^2)^2 \cdot \sinh^2(\chi s)}{2k^2 \chi^2}} \quad \text{mit} \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_e(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (3.11)$$

Für eine große Barriere ($\chi s \gg 1$) erhält man näherungsweise:

$$D = D(E) \approx \frac{16k^2 \chi^2}{(k^2 + \chi^2)^2} e^{-2\chi \cdot s}. \quad (3.12)$$

Damit erhält man trotz der Näherungen die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstromes vom Abstand zwischen den beiden Elektroden, die also letztlich vom Transmissionskoeffizienten herrührt. Im allgemeinen bestehen die beiden Elektroden aus unterschiedlichen Materialien, was gleichbedeutend mit unterschiedlichen Austrittsarbeiten der Elektronen und verschiedenen Fermi-Energien ist. Das Anlegen einer endlichen Tunnelspannung verschiebt die beiden Fermi-Energien gegeneinander, wodurch sich ein komplizierterer Potentialverlauf innerhalb der Tunnelbarriere als der in Abb. 3.10a) gezeigte ergibt. Mit der Zustandsdichte $\rho_{L(R)}$ für die linke (rechte) Elektrode, die je nach Polung durch STM-Spitze bzw. Probe gegeben ist, erhält man für den Tunnelstrom (I_T) [37]:

$$I_T \propto \int_0^{eU_T} \rho_L(E - eU_T) \cdot \rho_R(E) \cdot D(E, eU_T) dE. \quad (3.13)$$

Der Tunnelstrom setzt sich demnach aus allen Elektronen zusammen, die von einem links (rechts) besetzten in einen rechts (links) unbesetzten energetisch gleichwertigen Zustand tunneln. Diese Anzahl ergibt sich, wenn die Zustandsdichten von linker und rechter Elektrode mit dem Transmissionskoeffizienten gewichtet und anschließend über die Energie integriert werden.

Das STM basiert nun auf der starken Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes. Durch Messung des lokalen Tunnelstromes kann man sehr empfindlich die Topographie der Probenoberfläche abtasten. Das STM rastert mittels einer Regelschleife (siehe Abb. 3.11), die den Tunnelstrom I_T konstant hält, die Oberfläche ab. Dies entspricht gemäß Glg. (3.12) einem konstanten Abstand zwischen Spitze und Probe. Bewegt man die Spitze über die Probe, so zeichnet die Spitze die Konturen der Oberfläche nach. Durch zeilenweises Abrastern der Oberfläche und Messen der lokalen Regelabweichung vom fest eingestellten I_T -Wert kann man auf diese Weise

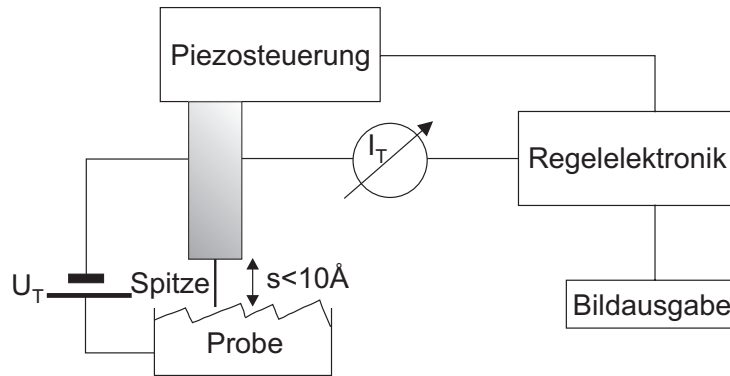


Abb. 3.11.: Schematischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskops.

ein Bild der Oberfläche rekonstruieren. Die genaue Steuerung der Spitze wird dabei mit Hilfe von Piezoelementen durchgeführt. Diese Methode, bezeichnet als Constant Current Imaging (CCI), wird hauptsächlich in dieser Arbeit verwendet.

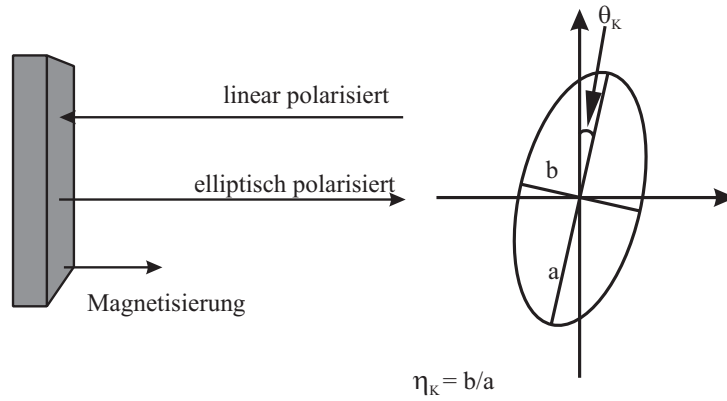
3.4. Magneto-Optischer Kerr-Effekt

Die Magneto-Optik nutzt die Wechselwirkung einer elektromagnetischen Welle mit einem magnetisierten Medium aus. Es gibt im wesentlichen 3 Effekte, die in der Festkörperphysik Anwendung finden. Diese sind der Faraday- und der Voigt-Effekt, die beide in Transmission gemessen werden sowie der Kerr-Effekt, der in Reflexion detektiert wird [34]. Wie Abb. 3.12 zeigt, führt der Kerr-Effekt bei einer linear polarisierten einfallenden Welle zu einer Drehung der Polarisationssebene (Kerr-Rotation, θ_k) und zum Auftreten einer Elliptizität (η_k). Erstere wird durch den Drehwinkel θ_k beschrieben, letztere durch das Verhältnis von kleiner Achse b zu großer Achse a der elliptischen Ebene des Lichtes [38]. Um den Effekt zu verstehen, muß die Antwort des magnetisierten Festkörpers auf die Störung durch die elektromagnetische Welle untersucht werden. Diese wird durch den dielektrischen Tensor ϵ

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{yx} & \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{zy} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

vollständig beschrieben. ϵ setzt sich aus der Polarisierbarkeit der gebundenen Ladungen und der Leitfähigkeit des Mediums aufgrund der freien Ladungen zusammen. Im folgenden soll der Einfachheit halber die Antwort eines freien Elektronengases auf die elektromagnetische Welle diskutiert werden. In diesem Falle reduziert sich ϵ auf den Leitfähigkeitstensor σ . Die Bewegungsgleichung für freie Elektronen lautet [16]:

$$m \left(\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{1}{\tau} \vec{v} \right) = q \left(\vec{E}(t) + \vec{v} \times \vec{B} \right). \quad (3.15)$$



θ_k = Kerr Drehwinkel
 η_k = Elliptizität

Abb. 3.12.: Darstellung des magneto-optischen Kerr-Effektes. [38]

m ist die Masse der Elektronen und \vec{v} deren Geschwindigkeit. τ entspricht der mittleren Stoßzeit der Elektronen, q ist die Ladung und \vec{B} das Magnetfeld. Dieses soll nur entlang der z -Richtung wirken. Mit dem Ansatz $\vec{v} = \vec{v}_0 \exp[i\omega t]$ und durch Ersetzen von \vec{v} durch die Stromdichte $\vec{j} = qn\vec{v}$ mit der Teilchenzahldichte n gelangt man zu [22]:

$$\left(i\omega + \frac{1}{\tau}\right) \vec{j} = \frac{q^2 n}{m} \left(\vec{E}(t) + \vec{j} \times \vec{B}\right). \quad (3.16)$$

Setzt man in der Vektorgleichung $f = i\omega + 1/\tau$ und $g = q^2 n/m$, so folgt für die einzelnen Komponenten:

$$j_x = \frac{g/f}{1 + (g/f)^2 B^2} E_x + \frac{(g/f)^2 B}{1 + (g/f)^2 B^2} E_y, \quad (3.17)$$

$$j_y = \frac{g/f}{1 + (g/f)^2 B^2} E_y - \frac{(g/f)^2 B}{1 + (g/f)^2 B^2} E_x, \quad (3.18)$$

$$j_z = \frac{g}{f} E_z. \quad (3.19)$$

Identifiziert man nun durch Vergleich die Faktoren vor den Komponenten des elektrischen Feldes mit den Einträgen im Leitfähigkeitstensor σ

$$\sigma_{xx} = \frac{g/f}{1 + (g/f)^2 B^2}, \quad (3.20)$$

$$\pm\sigma_{xy} = \pm \frac{(g/f)^2 B}{1 + (g/f)^2 B^2}, \quad (3.21)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{g}{f}, \quad (3.22)$$

so entstehen Nichtdiagonalelemente:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Mittels dieser Matrix kann man die Glg. 3.16 vereinfachen zu:

$$\vec{j} = \boldsymbol{\sigma} \vec{E}. \quad (3.24)$$

Durch das Anlegen des magnetischen Feldes \vec{B} entstehen also die Nichtdiagonalelemente, die proportional zu \vec{B} sind. Wird kein Feld angelegt, dann sind in Glg. 3.23 nur noch die Hauptdiagonalelemente enthalten, die dann feldunabhängig sind. Man hat somit ein isotropes Medium.

Eine analoge Rechnung kann man für einen Festkörper mit einer Magnetisierung \vec{M} durchführen, die auf Nichtdiagonalelemente im dielektrischen Tensor führt. In diesem Falle muß jedoch neben dem Beitrag der freien Elektronen auch die Polarisation durch die gebundenen Ladungen berücksichtigt werden. Die Struktur des Tensors bei einer Magnetisierung in z -Richtung ist die gleiche wie im Falle des freien Elektronengases, jedoch sind die Nichtdiagonalelemente proportional zur Magnetisierung. Durch die Magnetisierung wird also eine optische Anisotropie im Festkörper erzeugt. Diese führt für das einfallende linear polarisierte Licht, das in links- und rechtszirkular polarisiertes Licht zerlegt werden kann, zu unterschiedlichen Brechungsindizes und damit verschiedenen Phasengeschwindigkeiten für die links- und rechtszirkular polarisierte Welle. Die Überlagerung beider Teilwellen nach der Reflexion führt daher i. allg. auf elliptisch polarisiertes Licht und somit zu η_K und θ_K . Beide Größen sind proportional zu den Nichtdiagonalelementen des dielektrischen Tensors und damit zum Betrag von \vec{M} [38]. Durch Messung von η_K und θ_K kann also die Magnetisierung detektiert werden.

Abbildung 3.13 zeigt den Präparationsteil der Kammer mit dem Strahlengang des He/Ne-Lasers und den Komponenten, die für den polaren Kerr-Effekt verwendet wurden [7]. Die optischen Komponenten bestehen aus:

- Linearpolarisator
- Probe
- Photoelastischer Modulator (PEM)
- Analysator (Linearpolarisator)
- Photodiode

Durch den PEM werden die Meßgrößen η_K und θ_K mit 50 kHz moduliert, wodurch die Detektion mittels Lock-In-Technik ermöglicht wird. Mittels Jones-Matrizen kann man zeigen, daß

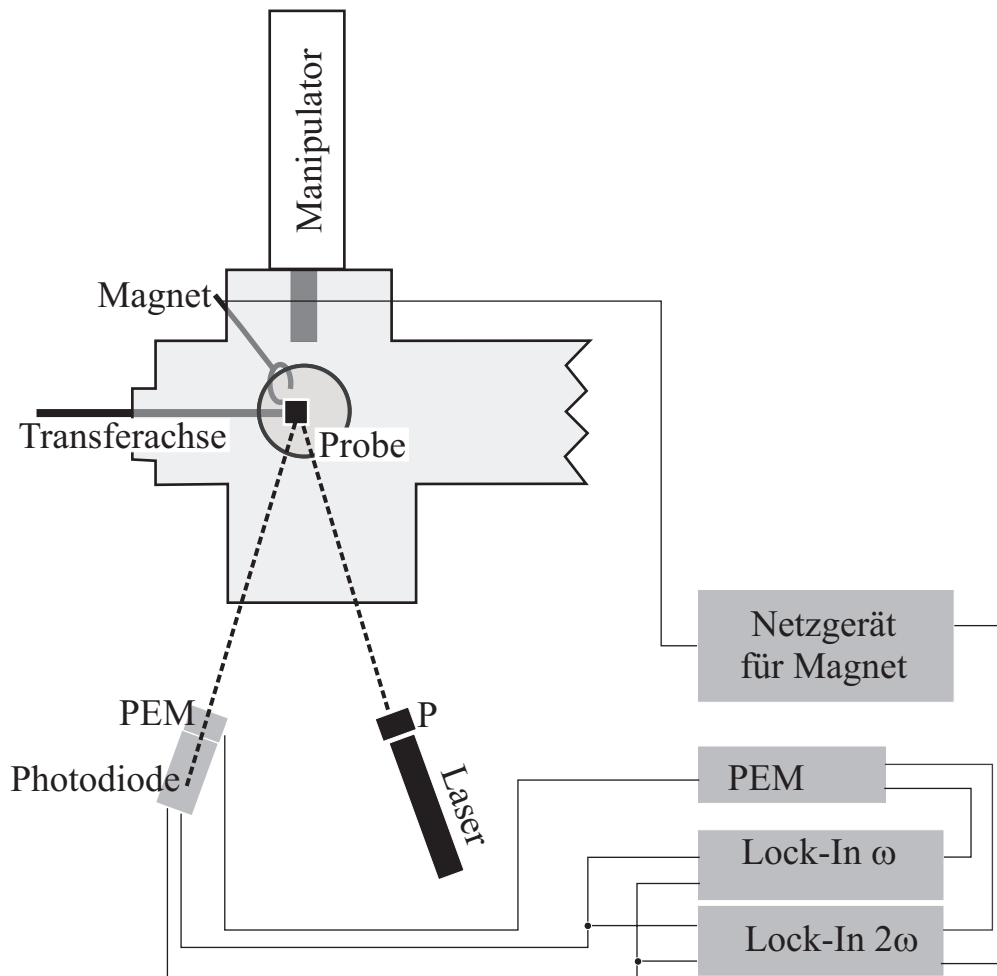


Abb. 3.13.: Aufbau der MOKE-Apparatur für polaren Kerr-Effekt.

die Rotation (θ_K) auf der doppelten Frequenz und die Elliptizität auf der einfachen Frequenz (η_K) zu detektieren ist [39].

Der Magnet für den polaren Kerr-Effekt ist in der UHV-Kammer an einer Linear-Durchführung montiert. Sowohl Magnet als auch der im Winkel von 45° eingebaute Verdampfer und Probe können so zueinander positioniert werden, daß MOKE-Experimente während der Filmpräparation durchgeführt werden können.

4. Substratcharakterisierung

In diesem Kapitel wird auf die Charakterisierung der Cu-Substrate eingegangen. Für die Experimente wurden zwei verschiedene Kristallorientierungen verwendet, die Cu(100)- sowie die Cu(110)-Oberfläche. Angemerkt sei, daß die verwendeten Größen der Atomsorten in den Hartkugelmodellen nicht den wahren Gegebenheiten entsprechen, sondern vielmehr eine schematische Vorstellung der Strukturen liefern sollen.

Die Abb. 4.1 zeigt die fcc-Einheitszelle des Cu-Kristalles, in der die Richtungen sowie die Gitterkonstante a eingezeichnet sind. Die (100)-Fläche findet sich auf der Würfelseite wieder (grau). Betrachtet man nun die Skizze, dann stellt man fest, daß die $\{100\}$ -Ebenen jedoch nicht die am dichtesten gepackten Flächen sind. Vielmehr sind es die $\{200\}$ -Ebenen, die gemäß Abb. 4.1 in ABAB-Stapelfolge vorliegen und den Interlagenabstand $d_i = a/2$ zueinander haben. In dem Hartkugelmodell (rechts) ist die Struktur der (100)-Oberfläche abgebildet (helle Kugeln entsprechen der oberen Lage, dunkle der unteren). Bei der (110)-Oberfläche stellen die $\{220\}$ -Ebenen die dichtest gepackte Ebenenschar dar. Diese haben den Interlagenabstand $d_i = a/(2\sqrt{2})$, wie aus Abb. 4.2 hervorgeht (grau schraffiert). Das Hartkugelmodell (rechts)

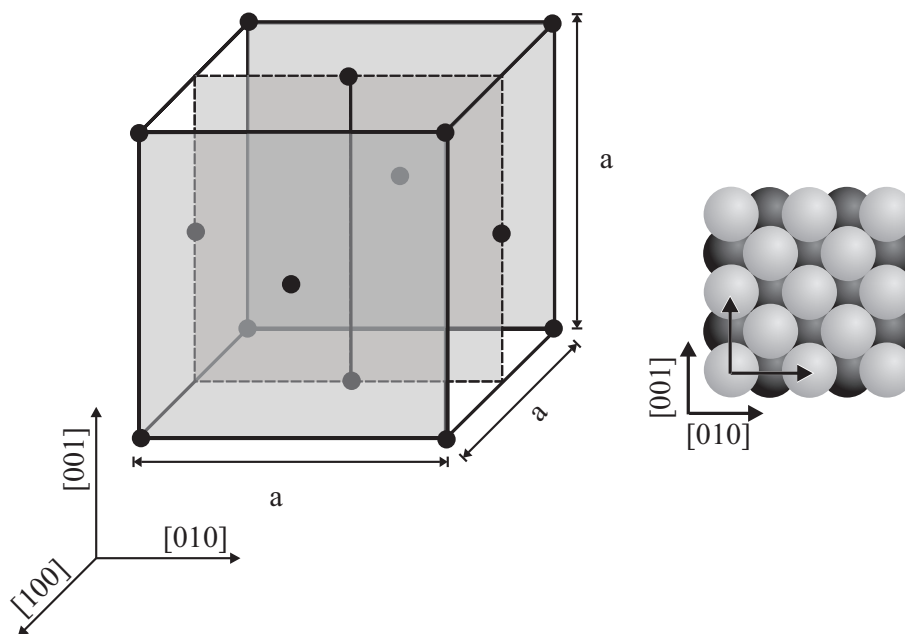


Abb. 4.1.: Links: Schematische Darstellung der Einheitszelle eines fcc Kristalls mit $\{200\}$ -Flächen (grau), rechts: Hartkugelmodell der (100)-Oberfläche.

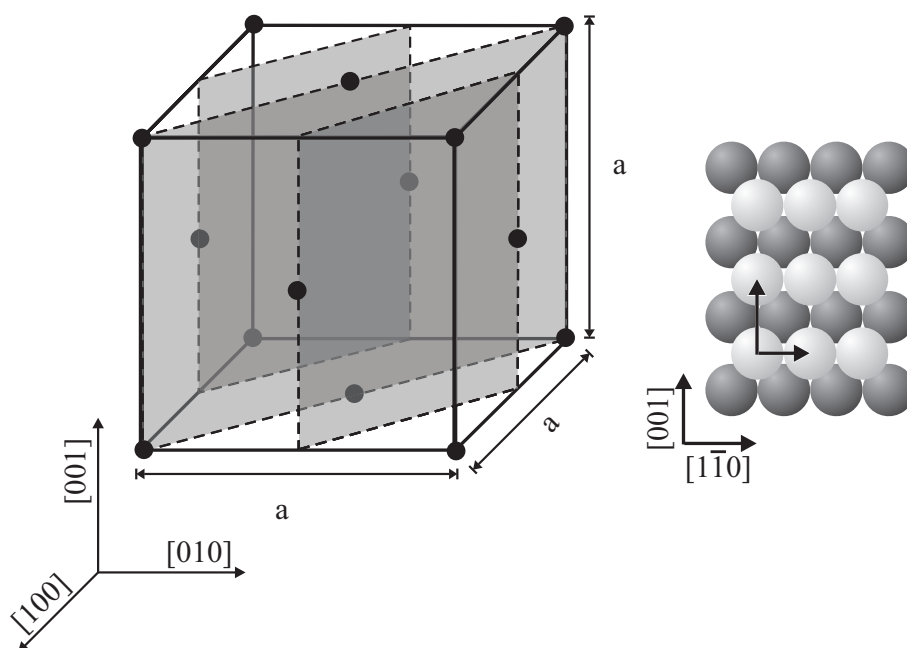


Abb. 4.2.: Links: Schematische Darstellung der Einheitszelle eines fcc-Kristalls mit den eingezeichneten $\{220\}$ -Flächen (grau), rechts: Hartkugelmodell der Oberfläche.

zeigt die Oberflächenstruktur der (110)-Oberfläche. Zunächst wurden beide Kristalle hinsichtlich ihrer Eigenschaften als Substrat charakterisiert. Dazu wurden Rastertunnelmikroskopie-, I/V-LEED- und AES-Untersuchungen durchgeführt.

4.1. Die Cu(100)-Oberfläche

Für die Untersuchungen wurde ein Cu(100)-Kristall verwendet, der durch Argon-Ionen Beschuss bei einem Druck von $p = 1 \cdot 10^{-5}$ mbar und einer Ionenenergie von $U = 2$ keV und anschließendem Heizen bis $T = 830$ K gereinigt wurde. Diese Prozedur wurde solange wiederholt bis mittels AES keine Kontaminationen durch C, S oder andere Stoffe mehr festzustellen waren. Ein AES-Spektrum der sauberen Cu(100)-Oberfläche ist in Abb. 4.3a) dargestellt. Es zeigt die AES-Intensität für Cu. Im Rahmen des Rauschens ist keine Kontamination durch O_{510} festzustellen. Die Krümmung der Kurve ist auf die Charakteristik der 4-Gitter-LEED-Optik zurückzuführen. In Abb. 4.3b) ist ein LEED-Bild des Cu(100)-Einkristalles gezeigt, daß bei 47 eV aufgenommen wurde. Man erkennt eindeutig die typische $p(1 \times 1)$ -Symmetrie dieser Oberfläche. Die Charakterisierung des Kristalls mittels STM ergab Terrassenbreiten von durchschnittlich 100 nm [27]. Abbildung 4.4 zeigt eine STM-Aufnahme des Kristalls, in der die Terrassenbreite zwar kleiner ist, aber sie bietet eine gute Möglichkeit für die Bestimmung der Stufenhöhen.

Das Profil des eingezeichneten Linescans ist auf der rechten Seite der Abbildung zu sehen.

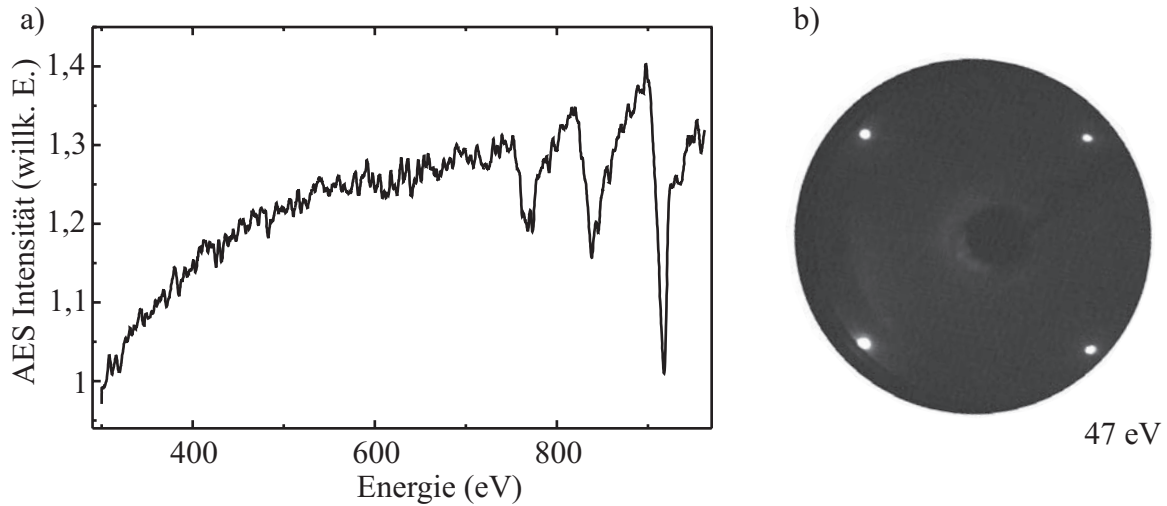


Abb. 4.3.: a) AES-Spektrum und b) LEED-Bild des Cu(100)-Kristalls.

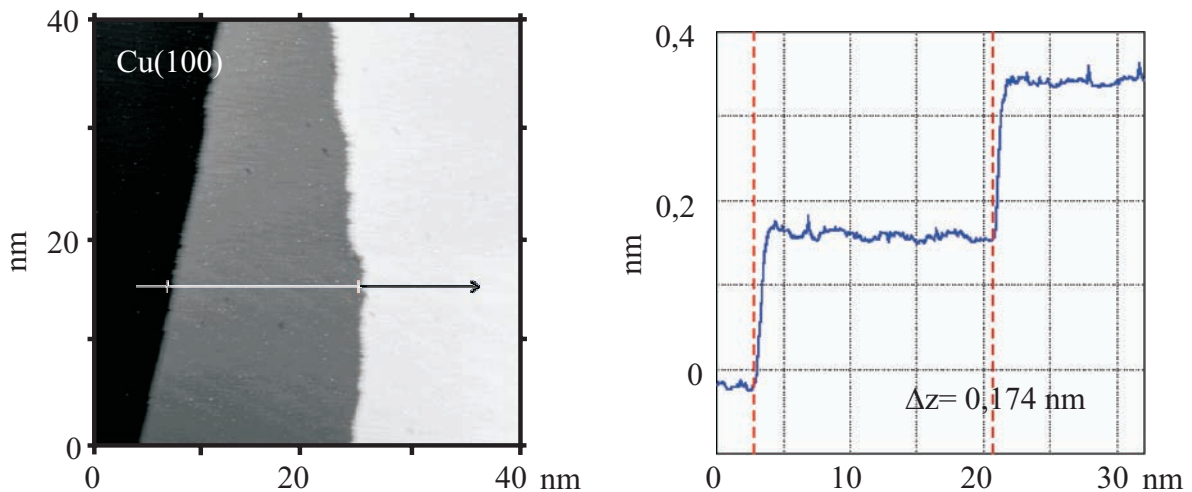


Abb. 4.4.: Links: STM-Bild des Cu(100)-Kristalls mit Linescan, rechts: Höhenprofil.

Man erkennt die Stufenbreiten und deren Höhen. Letztere beträgt $d_i = 0,174 \text{ nm}$ (gestrichelte vertikale Linien). Da die Gitterkonstante für Kupfer $a_{Cu} = 0,361 \text{ nm}$ ist, ergibt sich für den Abstand der Ebenen im Volumen theoretisch der Wert: $d_i = a_{Cu}/2 = 0,1805 \text{ nm}$. Ein Vergleich des theoretischen und des mit dem STM gemessenen Wertes zeigt, daß der experimentelle Wert geringfügig kleiner ist. Diese Abweichung könnte an der bei Metalloberflächen i. allg. auftretenden Kontraktion des Lagenabstandes an der Oberfläche aufgrund der fehlenden Bindungspartner auf der Vakuumseite liegen [37]. Auch für den Interlagenabstand d_i an der Oberfläche der Cu(110)-Probe wurde ein kleinerer Wert gefunden (siehe unten), was die Tendenz zu kleineren Werten bestätigt. Es sei jedoch angemerkt, daß die Abweichung im Fehler der Abstandsmessungen des STM's liegen, der im besten Fall $0,1 \text{ \AA}$ beträgt. In Abb. 4.5a) ist ein I/V-LEED-Spektrum des spekularen Reflexes des Beugungsbildes der reinen (durchgezogen) und der voroxidierten Cu(100)-Probe (gestrichelt) zu sehen. Aus den Energiemaxima kann man

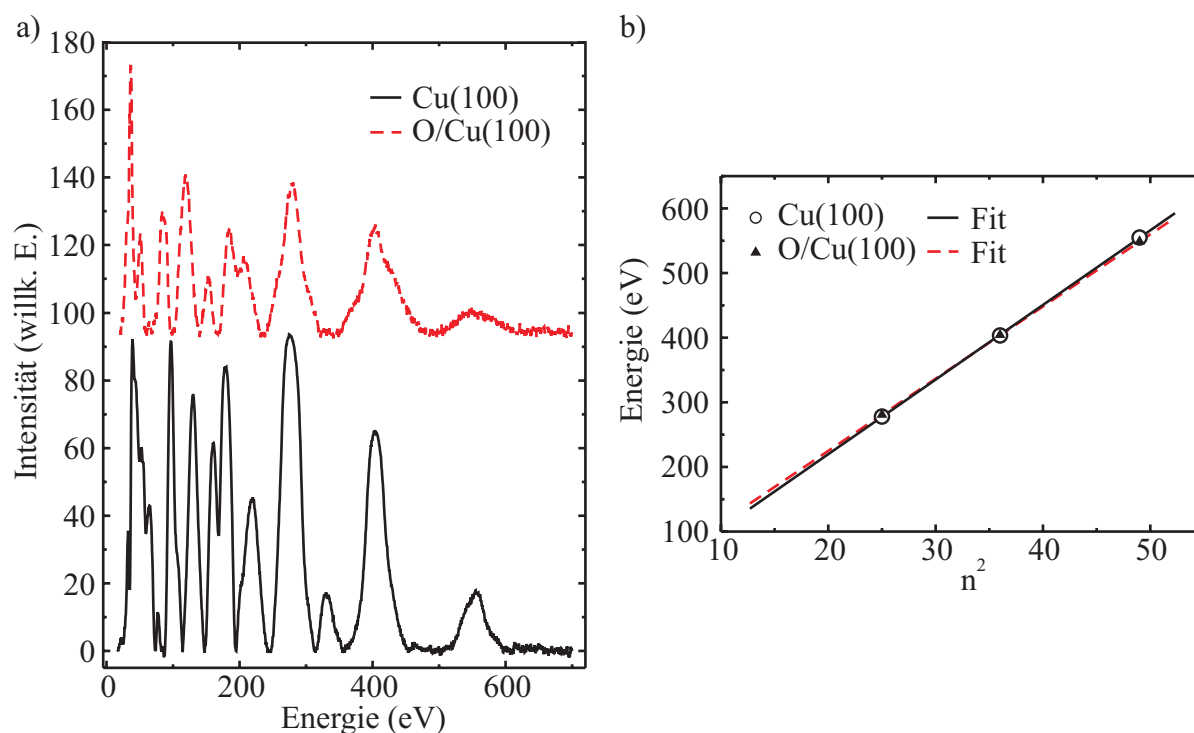


Abb. 4.5.: a) I/V-LEED-Spektrum von Cu(100) (durchgezogen) und der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche (gestrichelt), b) Position der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 für Cu(100) (offene Kreise) bzw. der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche (geschlossene Dreiecke) und zugehörige Fits.

in der in Kap. 3 beschriebenen Weise den mittleren Interlagenabstand bestimmen [30]. Für das Cu(100)-Spektrum ergibt sich ein Anstieg der Geraden von $m = 11,55$ eV. Rechnet man dies mittels der Bragg-Formel um, so erhält man bei einem Kippwinkel von $\theta = 3^\circ$ (siehe Kap. 3) einen Interlagenabstand von $d_i = 1,81$ (6) Å. Im Gegensatz zu den STM-Messungen wird hier der über mehrere Ebenen gemittelte Interlagenabstand d_i bestimmt, wodurch eine sehr gute Übereinstimmung mit dem theoretischen Volumenwert erreicht wird. Dieses Spektrum dient im folgenden auch als Referenz für die I/V-LEED-Messungen an Ni auf der reinen Cu(100)-Oberfläche.

Wird nun dieser Einkristall auf etwa 500 K erhitzt und gleichzeitig mit 1200 L^1 Sauerstoff dosiert, dann bildet sich auf ihm die sogenannte „missing row“ Rekonstruktion [40]. In Abb. 4.6a) ist das LEED-Bild dieser $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° Rekonstruktion zu sehen. In dem STM-Bild, Abb. 4.6b) [26,27], ist die voroxidierte Oberfläche abgebildet. Zu beachten ist die atomare Auflösung bei RT [26,27]. Die Abbildung zeigt eindeutig die fehlenden Reihen, die strukturelle Domänen im Winkel von 90° bilden. Die Domänenbildung erklärt auch die C_4 -Symmetrie des LEED-Bildes, obwohl die Flächeneinheit der rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche innerhalb einer Domäne bezüglich der „missing row“ nur eine C_2 -

¹L \equiv Langmuir; 1 L = Dosierung von Sauerstoff in 1 s, bei $p = 1 \cdot 10^{-6}$ Torr.

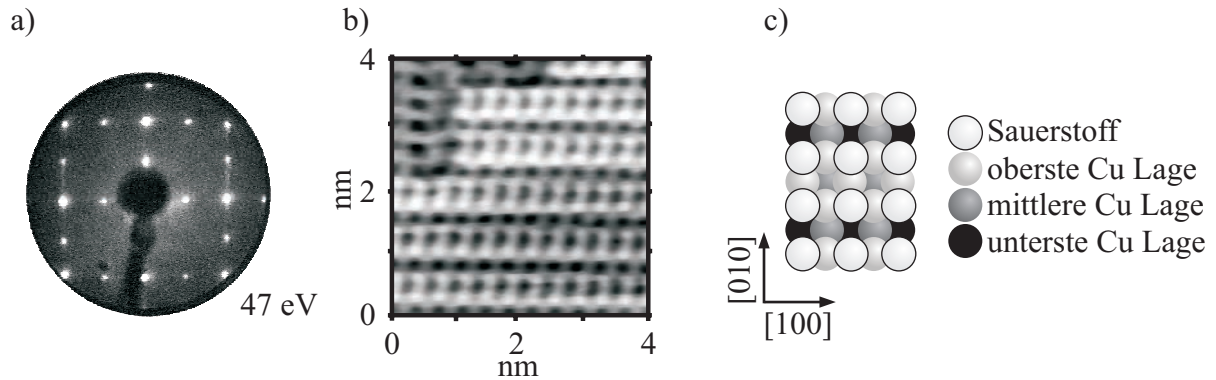


Abb. 4.6.: LEED-Bild (a), STM-Bild [27] (b) und Hartkugelmodell (c) der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche.

Symmetrie aufweist. Anhand des Hartkugelmodells (Abb. 4.6c)) sollen die Strukturen dieser neuen Oberfläche erklärt werden [41,42]. Der Sauerstoff, dargestellt als Kreise mit schwarzem Rand, ist quadratisch angeordnet, wobei der Abstand der Atome etwa dem der Cu-Gitterkonstanten entspricht. Das Kupfer selbst rekonstruiert und formt dabei Reihen entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen im Abstand $2a_{Cu} = 0,72$ nm, d. h., es fehlt jede 2. Reihe. Eine I/V-LEED-Analyse des sauerstoffbenetzten Kristalls lieferte folgende Ergebnisse: (i) Die Bragg-Peaks bei hohen Energien liegen im wesentlichen auf den gleichen Positionen wie die entsprechenden Bragg-Peaks des reinen Cu(100)-Kristalls, wie die Abb. 4.5a) und 4.5b) zeigen. Die Steigung der Ausgleichsgeraden durch die geschlossenen Dreiecke $m = 11,17$ eV liefert einen nur etwas größeren Interlagenabstand $d_i = 1,84$ (6) Å bei einem Kippwinkel von $\theta = 3^\circ$. Damit besitzen beide Oberflächen im Fehler den gleichen mittleren Interlagenabstand. Dies ist nicht überraschend, da die Eindringtiefe der Elektronen ca. 10 ML beträgt [29]. Ein Vergleich der beiden I/V-LEED-Spektren im Bereich unterhalb von 200 eV zeigt jedoch starke Unterschiede, die durch die Streuung der Elektronen am Sauerstoff entstehen. Nach dem Bilden der Rekonstruktion befindet sich genau eine halbe Monolage Sauerstoff auf dem Kristall, was zugleich der Sättigungsbedeckung entspricht.

4.2. Die Cu(110)-Oberfläche

Für die Experimente an der (110)-Oberfläche wurde der Cu-Einkristall mittels Ar^+ -Beschuss (Ionenenergie = 1 keV) bei $p = 1 \cdot 10^{-5}$ mbar und anschließendem vorsichtigen Heizen auf maximal 650 K gereinigt. Dies dient der Vermeidung einer Facettenbildung während der Präparation. Die Ausbildung der Facetten würde man im LEED-Bild durch das Vorhandensein vieler spekularer Reflexe wahrnehmen. Die Abb. 4.7a) zeigt eine AES-Aufnahme des reinen Cu(110)-Einkristalls, aufgenommen mit der 4-Gitter-LEED-Optik. In dem Spektrum treten keine Signale bei den Energien für C, und O auf, und man erkennt eindeutig die Auger-Übergänge für Cu bei

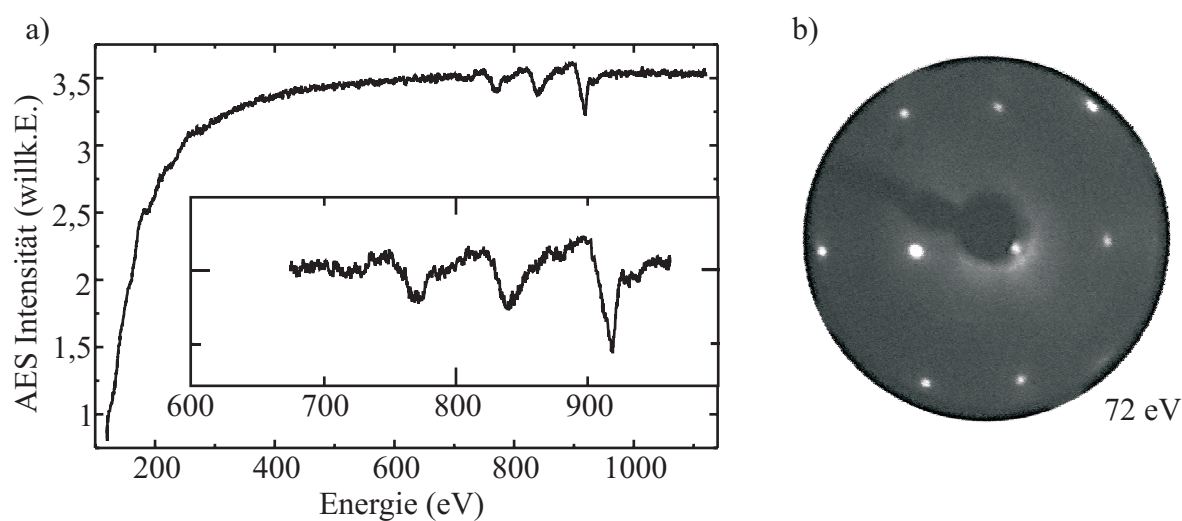


Abb. 4.7.: AES-Spektrum (a) und LEED-Bild (b) der Cu(110)-Oberfläche.

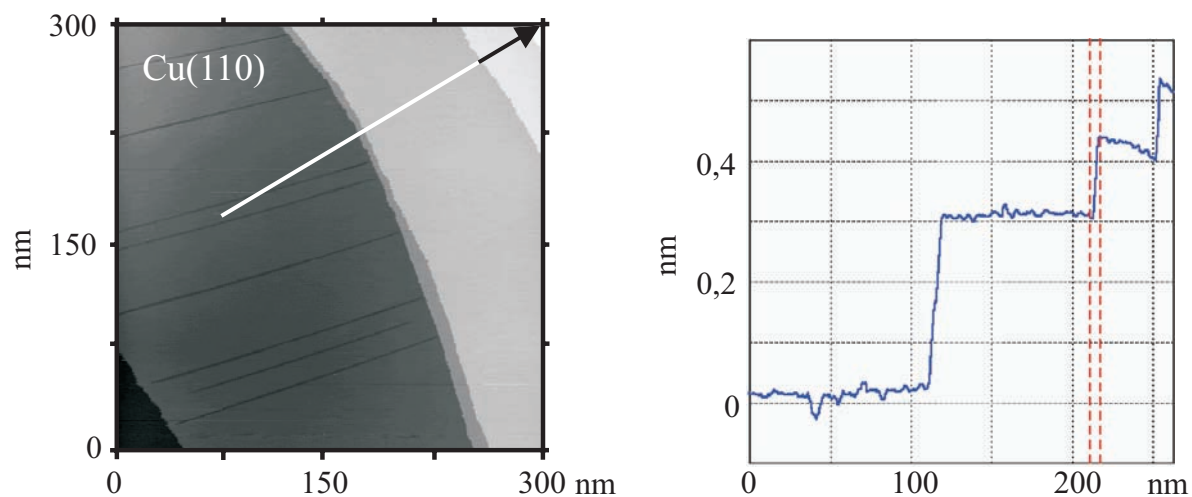


Abb. 4.8.: Links: STM-Bild des Cu(110)-Kristalls mit Linescan, rechts: Höhenprofil.

den hohen Energien. Da die Eindringtiefe der Elektronen bei ca. 10 ML liegt, kann man daraus schließen, daß sich in diesem Bereich keine oder nur eine sehr geringe Verunreinigung befindet. In Abb. 4.7b) ist das LEED-Bild dieser Cu(110)-Oberfläche bei 72 eV abgebildet. Es gibt eindeutig die $p(1 \times 1)$ -Symmetrie des Kristalls wieder. Die Elementarzelle der Oberfläche besitzt eine C_2 -Symmetrie, die sich auch in der Formation der Beugungsreflexe ausdrückt. Das Auftreten nur eines spekularen Reflexes zeigt an, daß keine Facetten vorhanden sind.

In Abb. 4.8 ist eine STM-Aufnahme des präparierten Cu(110)-Kristalls zu sehen. Die mittlere Terrassenbreite des Kristalls beträgt $b = 120$ nm. Der theoretische Terrassenabstand dieser Oberfläche ist $d_i = 0,128$ nm, aber auch hier, wie schon in Abb. 4.4 festgestellt, ergibt der Linescan einen etwas kleineren Wert von $d_i = 0,125$ nm, was evtl. an einer Kontraktion der obersten Cu-Lagen liegt. In der I/V-LEED-Analyse für den reinen Cu(110)-Kristall ist der Ebe-

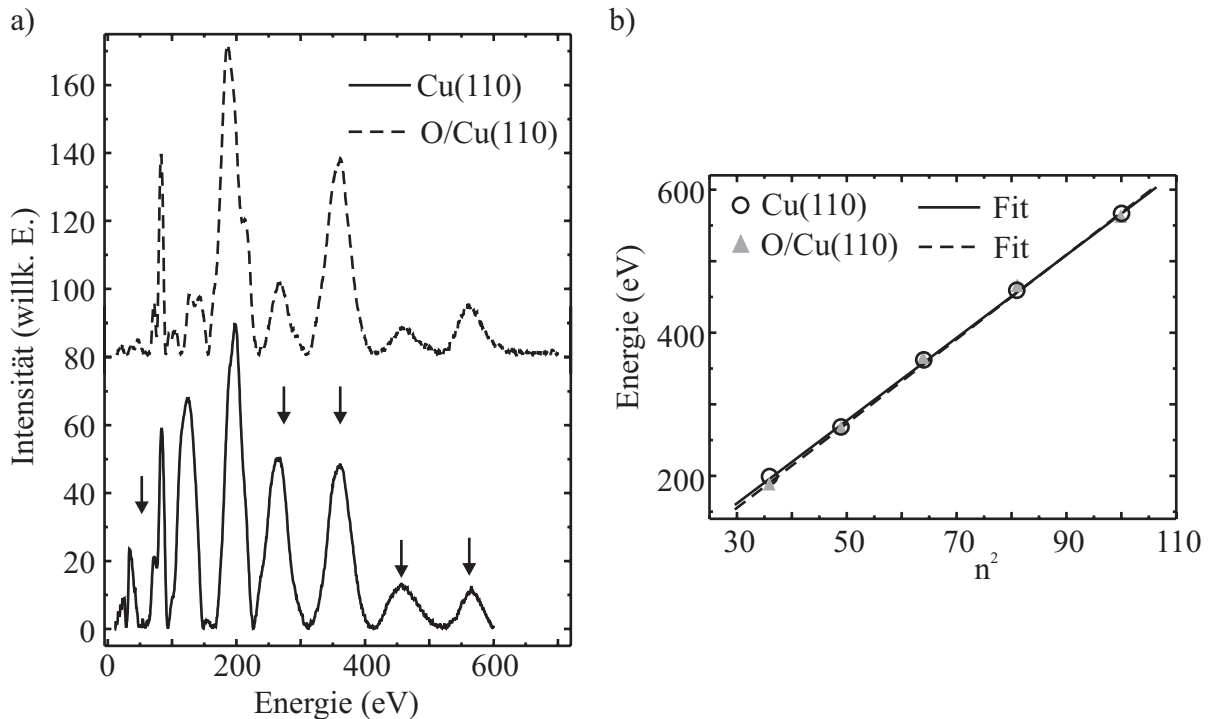


Abb. 4.9.: a) I/V-LEED-Spektrum von Cu(110) (durchgezogen) und der $O(2 \times 1)$ rekonstruierten Cu(110)-Oberfläche (gestrichelt), b) Positionen der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 für Cu(110) (offene Kreise) bzw. für die $O(2 \times 1)$ rekonstruierten Cu(110)-Oberfläche (geschlossene Dreiecke); Fits: für Cu(110) (durchgezogen), für die oxidierte Cu(110)-Oberfläche (gestrichelt). Die Pfeile in a) kennzeichnen die theoretischen Positionen der Bragg-Peaks [29].

nenabstand mit $d_i = 0,128(5)$ nm gemessen worden (siehe Abb. 4.9a) durchgezogene Linie bzw. Abb. 4.9b) offene Kreise). Dieser stimmt sehr gut mit dem theoretischen Wert überein. Die Pfeile in Abb. 4.9a) zeigen die theoretischen Positionen der Bragg-Peaks an, welche durch das innere Potential des Kristalls zu kleineren Energien verschoben sind.

Da auf dieser Oberfläche ebenfalls Untersuchungen von Filmen, die mit Hilfe von Sauerstoff-Surfactant gewachsen wurden, durchgeführt worden sind, wird im folgenden die Präparation der sauerstoffbenetzten Oberfläche beschrieben. Dazu wurde der Kristall verschiedenen hohen Sauerstoffkonzentrationen (1, 10, 20 und 120 L) bei Raumtemperatur ausgesetzt [28]. In Abb. 4.10 sind die LEED-Aufnahmen der unterschiedlichen Sauerstoffbedeckungen dargestellt. Das LEED-Bild der Abb. 4.10a) zeigt den Cu(110)-Einkristall ohne Sauerstoff. Sowohl hier als auch in den folgenden LEED-Bildern, die die Oberfläche mit zunehmender Sauerstoffdosierung zeigen, sind je drei Linescans eingezeichnet, deren Profile jeweils rechts nach der Richtung getrennt, abgebildet sind. Bei den Linescans entlang der $[001]$ -Richtung handelt es sich zum einen um ein Profil für die $(\bar{1}; 0)$ - und $(1; 0)$ -Spots (gestrichelt) und zum anderen um einen Scan durch die Positionen der $(\frac{1}{2}; \frac{1}{2})$ -, $(0; \frac{1}{2})$ - und $(\frac{1}{2}; \frac{1}{2})$ -Beugungsreflexe (Abb. 4.10a), durchgezogen), welche erst durch die Oxidation entstehen. Dementsprechend weist der Lines-

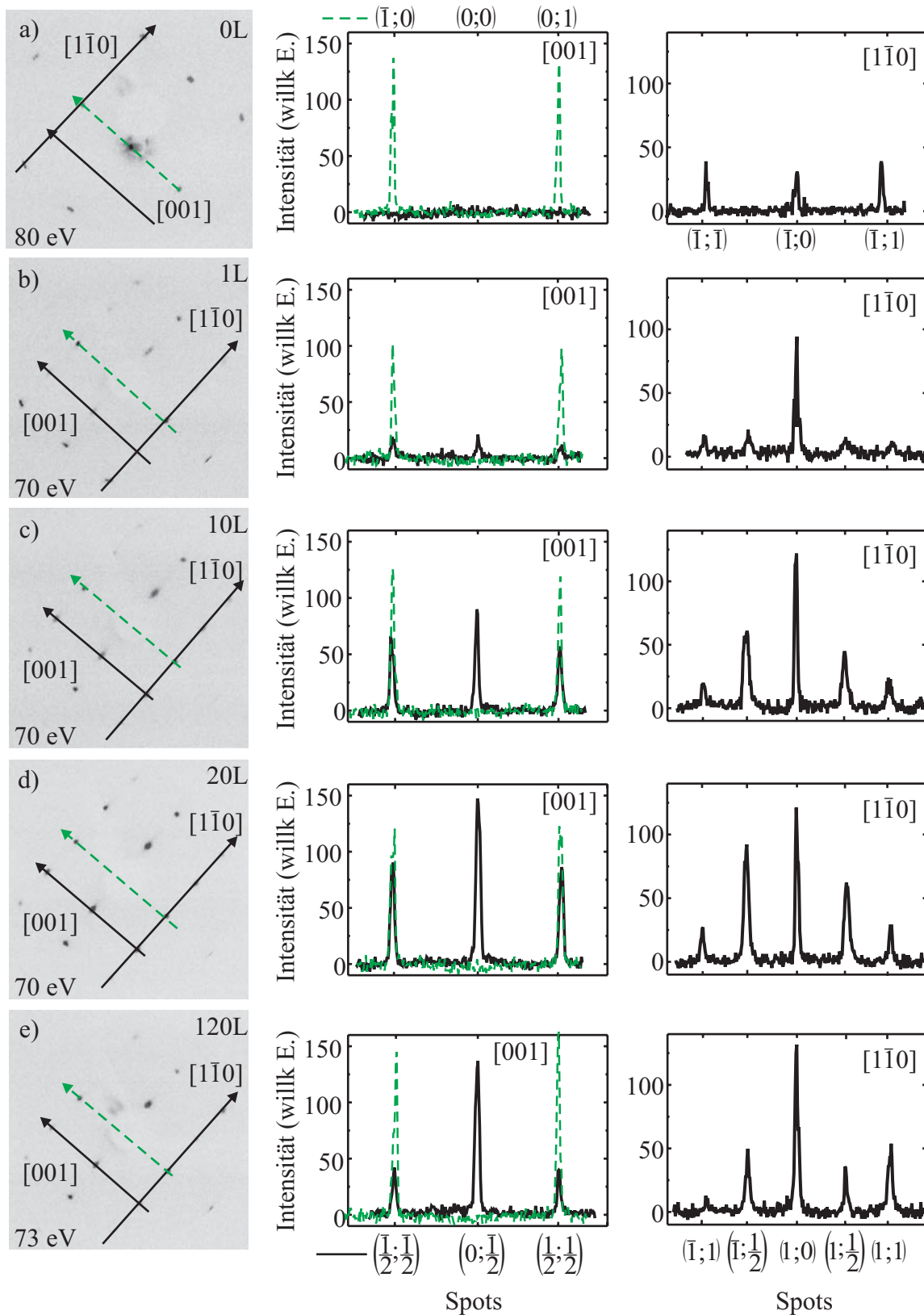


Abb. 4.10.: Entwicklung der $O(2 \times 1)$ -Rekonstruktion auf der Cu(110)-Oberfläche. Der $(0;0)$ -Spot im Linescan a) parallel zur $[001]$ -Richtung ist aus Gründen der Übersichtlichkeit ausgeschnitten worden.

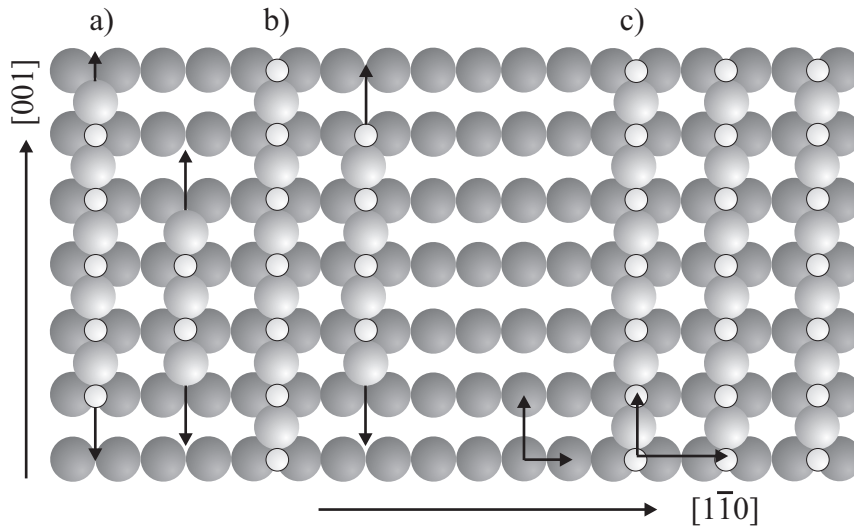


Abb. 4.11.: Modell der Bildung der „added row“ auf der Cu(110)-Oberfläche in verschiedenen Stadien; a) einzelne noch wachsende Cu-O-Reihe, b) einzelne Cu-O-Insel und c) zweidimensionale Insel. [45]

can für den reinen Cu(110)-Kristall entlang dieser Reflexe keine Intensitäten auf. Das Profil parallel zur $[\bar{1}10]$ -Richtung zeigt die Reflexe der $(\bar{1}; \bar{1})$ -, $(\bar{1}; 0)$ - und $(\bar{1}; 1)$ -Spots.

Bietet man der Cu(110)-Oberfläche nun 1, 10, 20, 120 L Sauerstoff an, dann entwickeln sich die Reflexe, die am Ende zu einer (2×1) -Rekonstruktion führen, wie man der Abb. 4.10b) und den Profilen rechts entnimmt. Es zeigt sich, daß die Reflexe in $[001]$ -Richtung, die durch die gestrichelte Linie wiedergegeben werden, weder die Position geändert noch an Intensität verloren haben. Betrachtet man aber das Profil der durchgezogenen Linien und vergleicht es mit dem der Abb. 4.10a), so erkennt man, daß hier kleine Maxima an den Positionen $(\frac{1}{2}; \frac{1}{2})$, $(0; \frac{1}{2})$ und $(\frac{1}{2}; \frac{1}{2})$ entstanden sind. Es tritt auch eine Veränderung in dem Scan für die $[\bar{1}10]$ -Richtung auf. Hier entstehen neben den bereits vorhandenen Maxima $((1; \bar{1})$ -, $(1; 0)$ - und $(1; 1)$) zwei weitere an den Positionen $(\bar{1}; \frac{1}{2})$ und $(1; \frac{1}{2})$. Mit steigendem Sauerstoffangebot nimmt die Intensität der Extrema an den $(\frac{1}{2})$ -Positionen zu, wie man in den folgenden Darstellungen sehen kann. Aus der Halbwertsbreite der Beugungsreflexe lassen sich Aussagen über die Ordnung der Oberfläche treffen [28]. Wie Abb. 4.10 zeigt, ist die Ordnung für die mit 120 L Sauerstoff präparierte Cu(110)-Oberfläche am größten. Die Ursache der entstehenden Maxima auf den halben Positionen sind die „added rows“ [43,44], die sich parallel zur $[001]$ -Richtung ausbilden. Diese zeigen also erst bei 120 L eine maximale Ordnung. Daher wurde diese O-Menge auch für die Untersuchungen der Ni-Filme auf der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche verwendet. Angemerkt sei, daß sich die Probe leicht verkippt unter der Elektronenkanone befand, wodurch innerhalb eines Scans Unterschiede in der Intensität gleichrangiger Beugungsreflexe auftreten können, siehe etwa den Linescan unten rechts in Abb. 4.10.

Die Abb. 4.11 zeigt ein Modell für die Bildung der Cu-O-Reihen entlang der $[001]$ -Richtung, die zu der (2×1) -Rekonstruktion führen. Aus der Literatur ist bekannt, daß der

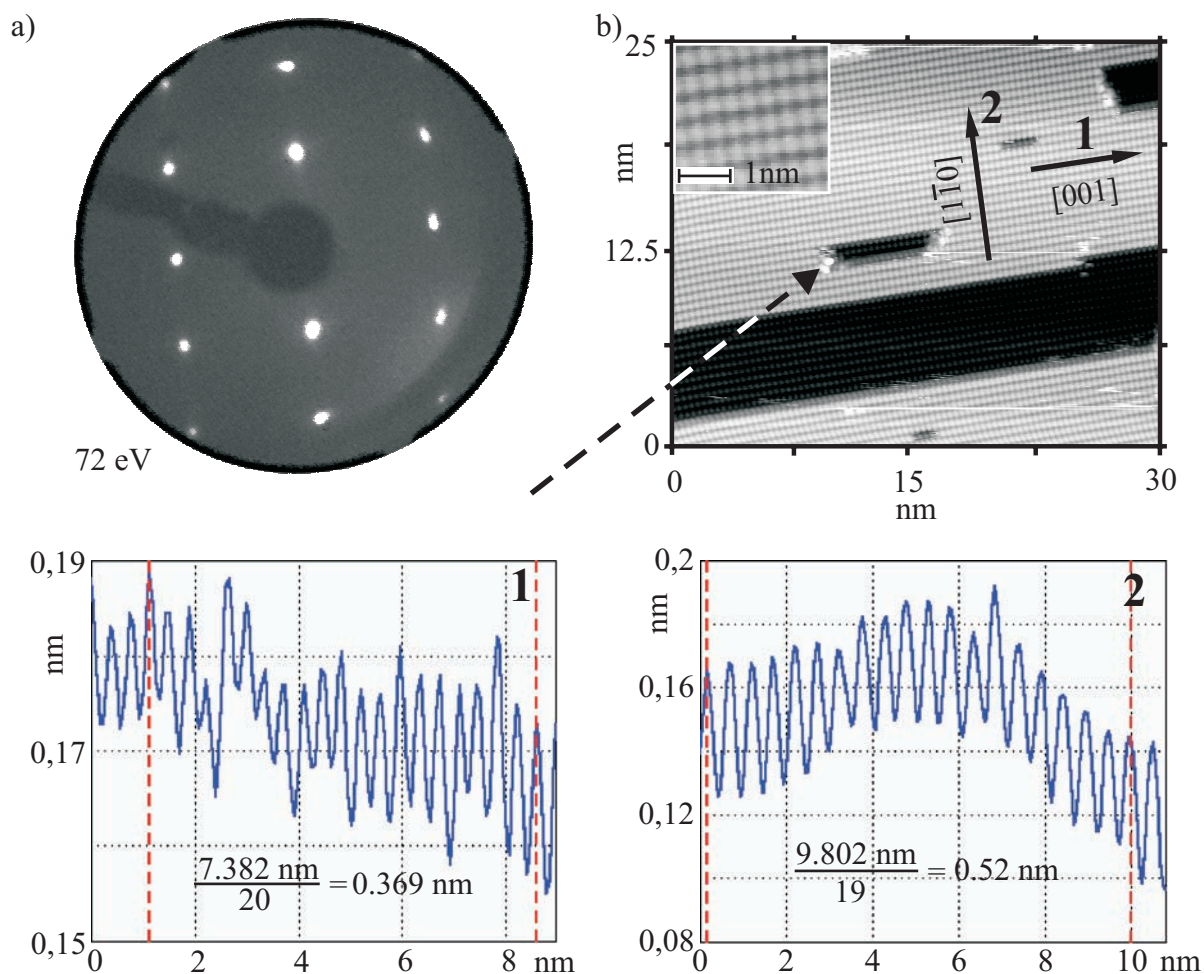


Abb. 4.12.: a) LEED-Bild und b) STM-Aufnahme der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche mit Linescans. Verunreinigung vermutlich durch S (Pfeil).

molekulare Sauerstoff bei Raumtemperatur auf der Cu(110)-Oberfläche dissoziiert und atomaren Sauerstoff bildet, der auf der (110)-Oberfläche sehr beweglich ist [37]. Da es sich hier um die offenste und damit reaktivste Cu-Oberfläche handelt, findet man auf dieser auch Cu-Atome, die sich bei RT sehr schnell über die Terrassen bewegen und ursprünglich von Stufenkanten herrühren [46]. Treffen nun beide Atomsorten aufeinander, dann bilden sie einen Cu-O-Keim, der zu einer Reihenbildung entlang der [001]-Richtung führt, wie in Abb. 4.11a) durch die Pfeile angedeutet [45]. Die bevorzugte Bindung in der [001]-Richtung führt letztlich zu dem stark anisotropen Wachstum der Cu-O-Reihen. Man kann der Abb. 4.11 auch entnehmen, daß jede zweite Reihe parallel zur [001]-Richtung ausgelassen und somit eine (2×1) -Rekonstruktion gebildet wird. Abbildung 4.11c) stellt eine zweidimensionale Insel aus Cu-O-Reihen dar [45]. In Abb. 4.11 sind ebenfalls die Richtungen und Abstände der Oberflächenzellen des reinen wie auch des oxidierten Substrates durch Pfeile gegenübergestellt. Danach ergibt sich, daß entlang der [001]-Richtung in beiden Fällen der Abstand a_{Cu} und entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung für Cu(110) der Abstand a_{NN} bzw. $2a_{NN}$ für die rekonstruierte Oberfläche erwartet wird. Deswei-

teren kann man dem Modell entnehmen, daß die Position des Sauerstoffs zweifach koordiniert ist („bridge side“), was auch experimentell bestätigt wurde [44].

Die Abb. 4.12a) zeigt nochmals ein LEED-Bild der mit 120 L Sauerstoff behandelten Cu(110)-Oberfläche, in dem die $O(2 \times 1)$ rekonstruierte Oberfläche dargestellt ist. Aus diesem Bild wird deutlich, daß es sich hier, wie auch bei der Elementarzelle des Substrates in Abb. 4.7b), um eine C_2 -Symmetrie der nun neugebildeten Elementarzelle an der Oberfläche handelt. Allerdings ist diese Zelle gegenüber der des reinen Substrates um 90° gedreht, wie gemäß dem Modell aus Abb. 4.11 zu erwarten ist. Das STM-Bild in Abb. 4.12b), das atomare Auflösung zeigt, bestätigt dies. In dem kleinen Abschnitt oben links ist eine Vergrößerung der Aufnahme gezeigt. Entlang der beiden Richtungen wurden die Linescans 1 und 2 gelegt, bei denen jeweils über mehrere Atomabstände gemessen wurde. Parallel zur $[001]$ -Richtung, Scan 1, hat man nach wie vor den Abstand von der Länge der Gitterkonstanten $a_{Cu} = 0,369$ nm. Entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung ergibt sich der Abstand $2a_{NN} = 0,52$ nm. Die beiden gemessenen Abstände entsprechen den Werten, die in dem Modell der Abb. 4.11 angesprochen wurden. In dem STM-Bild der Abb. 4.12 findet man Stellen auf der Oberfläche an denen die Cu-O-Reihen wegen restlicher Verunreinigungen durch (gestrichelter Pfeil, vermutlich S) plötzlich abbrechen. Dies geschieht, da das Wachstum der Reihen auf die $[001]$ -Richtung beschränkt ist [37].

Aus der I/V-LEED-Analyse der voroxidierten Oberfläche, wie der Abb. 4.9a) (gestrichelte Linie) bzw. b) (geschlossene Dreiecke) zu entnehmen ist, ergab sich – analog zur Cu(100)-Oberfläche – kein signifikanter Unterschied des Interlagenabstandes im Vergleich zu der reinen Oberfläche.

5. Nickel auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche

In diesem Kapitel werden die strukturellen und magnetischen Eigenschaften von Ni-Filmen auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche vorgestellt. Zum besseren Verständnis werden sie den strukturellen und magnetischen Eigenschaften von Ni/Cu(100) gegenübergestellt.

5.1. Wachstum und Magnetismus von Nickel auf Cu(100)

Wachstum In den Arbeiten [7,9,24,47] ist das Wachstum und die Magnetisierung von ultradünnen Ni-Filmen auf der reinen Cu(100)-Oberfläche untersucht worden. Hinsichtlich der Struktur wurde festgestellt, daß der zunächst in zwei Dimensionen wachsende Film ab Dicken von etwa 5 ML in eine dreidimensionale Struktur übergeht. Mittels der Beugung von Elektronen mittlerer Energie (MEED) wurde das Wachstum der ultradünnen Ni-Filme auf der Cu-Oberfläche beobachtet. In Abb. 5.1 ist eine solche MEED-Kurve von Ni auf Cu(100) bei RT dargestellt (strich-punktiert). Aufgetragen ist die Intensität des spekularen Beugungsreflexes als Funktion der Aufdampfzeit und somit der Schichtdicke. Aus dem Verlauf der Kurve kann man die Art des Wachstums ablesen. Wenn die Intensität des Beugungsreflexes in Abhängigkeit der

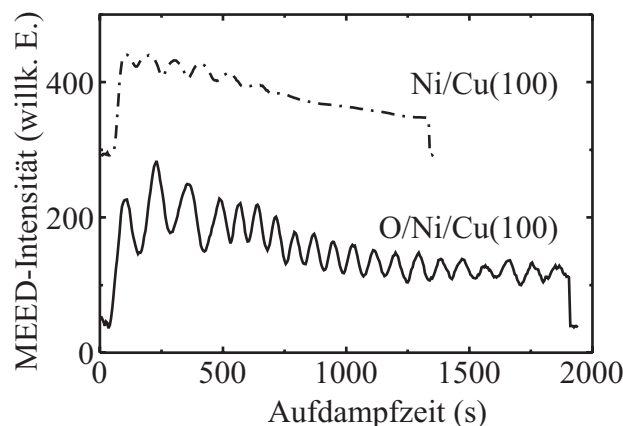


Abb. 5.1.: MEED-Kurven für Ni/Cu(100) (strich-punktiert) und O/Ni/Cu(100) (durchgezogen).

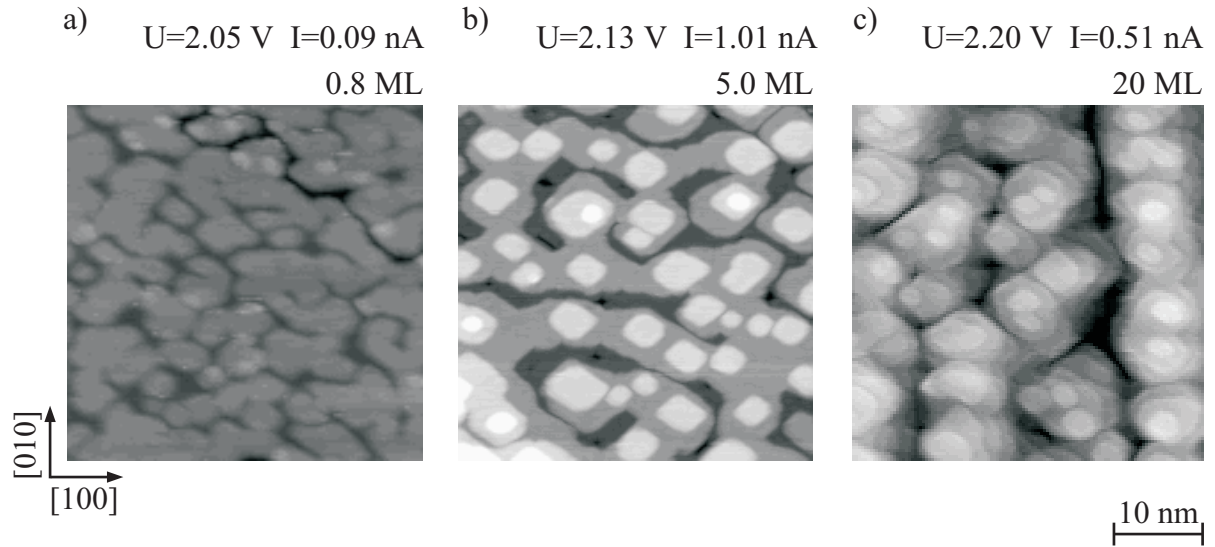


Abb. 5.2.: STM-Aufnahmen für Ni/Cu(100), a) 0,8 ML, b) 5 ML und c) 20 ML.

Rauhigkeit des Filmes oszilliert, so liegt ein lagenweises Wachstum vor. Dabei erhält man bei destruktiver Interferenz ein Maximum der Intensität, wenn die Rauhigkeit am größten ist. Das 3D-Wachstum stellt sich bei der Dicke ein, ab der die Oszillationen verschwinden. Wie zu erkennen ist, findet dies für Ni auf der reinen Cu(100)-Oberfläche bei ca. 5 ML statt, wohingegen für Ni auf der voroxidierten Oberfläche ein besseres Lagenwachstum bis zu großen Filmdicken beobachtet wird (durchgezogen und siehe Abschnitt 5.2). Die STM-Bilder der Abb. 5.2 zeigen Ni/Cu(100) für verschiedene Ni-Dicken. In Abb. 5.2a) (0,8 ML Ni auf Cu(100)) ist zu erkennen, daß die erste Monolage fast geschlossen ist, und die Rauhigkeit aufgrund des Wachstumsmodus sehr gering ist. Man erkennt lediglich zwei durch monoatomare Stufen getrennte Lagen, die durch die schwarze und graue Farbe, die der Höhenskala entsprechen, dargestellt sind. Desweiteren sind die Inseln statistisch verteilt und weisen keine Vorzugsrichtung auf. Mit zunehmender Schichtdicke – hier 5 ML Ni (siehe Abb. 5.2b)) und 20 ML Ni (siehe Abb. 5.2c)) – nimmt die Rauhigkeit zu, und es werden Inseln ausgebildet, deren Kanten entlang den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ausgerichtet sind. Um die Rauhigkeit quantitativ analysieren zu können, wird im folgenden die mittlere arithmetische Rauhigkeit R_a verwendet (siehe Abb. 5.3). Diese Größe, ist wie folgt definiert:

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z_i - \bar{z}| \quad \text{mit} \quad \bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i. \quad (5.1)$$

z_i sind die Datenpunkte mit zugehöriger Grauskala, d. h. die Höheninformation des i -ten Datenpunktes. \bar{z} ist eine Referenzebene, die die mittlere Höhe des Bildes angibt. Die Abb. 5.3 ist aufgeteilt in einen Bereich für Schichtdicken ab 5 ML und einen bis ca. 3 ML (Inset). Die offenen Kreise entstammen der Arbeit von J. Shen et al. [47], die geschlossenen aus [8] sowie dieser Arbeit. Bei den geschlossenen Dreiecken handelt es sich um die Werte für Nickel auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche, welche weiter unten diskutiert werden. Der Inset zeigt ein

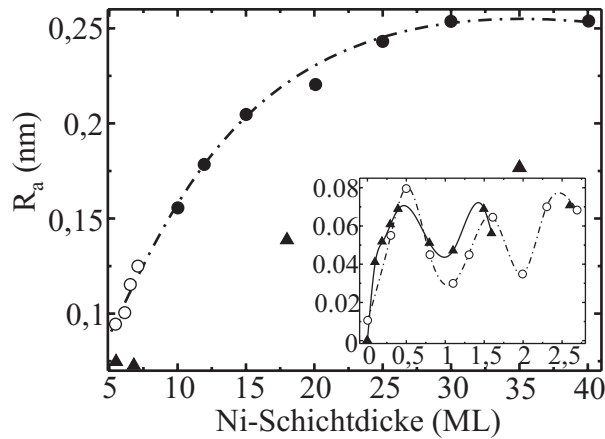


Abb. 5.3.: R_a für Ni/Cu(100) (offene Kreise [47], geschlossene Kreise [8]) und O/Ni/Cu(100) (geschlossene Dreiecke).

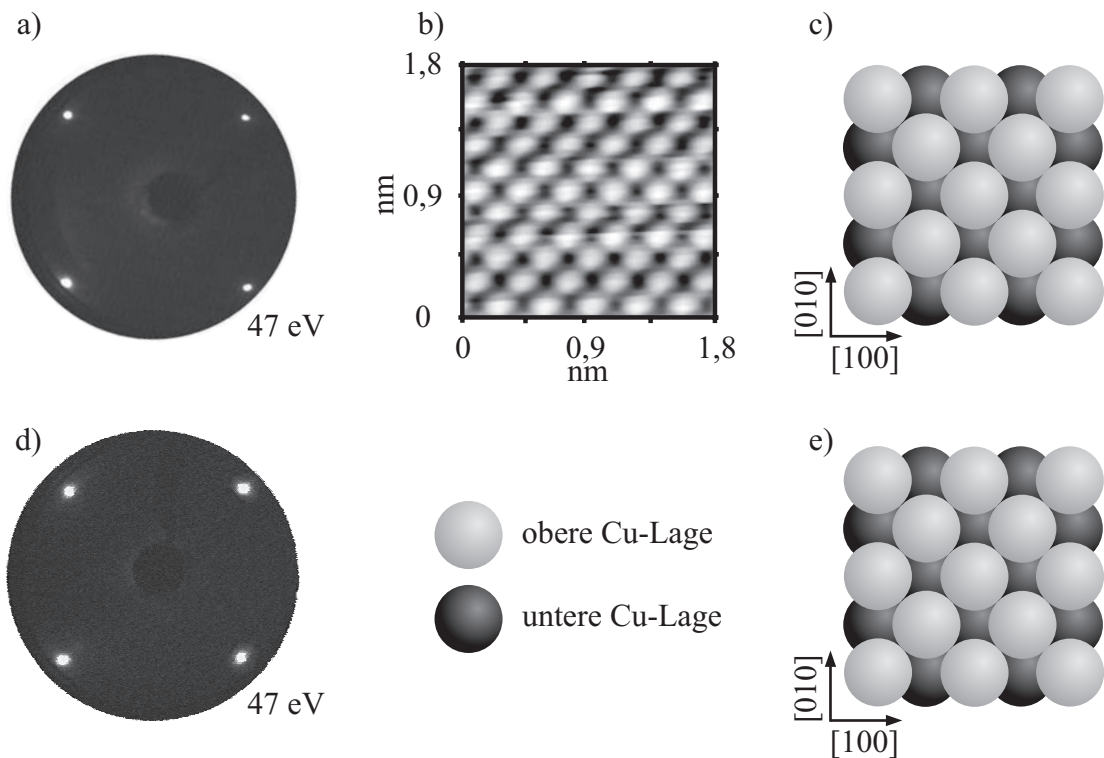


Abb. 5.4.: Cu(100): a) LEED-Bild, b) atomar aufgelöste STM-Aufnahme [27] und c) Hartkugelmodell. 5 ML Ni auf Cu(100): d) LEED-Bild und e) Hartkugelmodell.

oszillatorisches Verhalten für Ni auf Cu(100), daß das lagenweise Wachstum bestätigt, durch das die Rauigkeit bei halbgefüllten Lagen maximal und bei ganzen Lagen minimal ist [48]. Der Bereich ab 5 ML zeigt ein exponentielles Verhalten bis zu einem Sättigungswert, d. h., hier setzt das 3D-Wachstum ein. Das Verhalten von R_a steht also ganz in Analogie zu den MEED-Oszillationen und zeigt ebenfalls das charakteristische Wachstumsverhalten von Ni auf Cu(100) an.

Abschließend soll auf das epitaktische Wachstum der Ni-Filme auf dem Cu-Substrat eingegangen werden. Abbildung 5.4 zeigt dazu ein LEED-Bild des Substratkristalls (a), eine atomar aufgelöste STM-Aufnahme (b) sowie das entsprechende Kugelmodell (c). Desweiteren ist ein LEED-Bild eines 5 ML dicken Ni-Filmes auf dem Cu(100)-Kristall (d) und das entsprechende Kugelmodell (e) dargestellt. Beide LEED-Bilder zeigen eine (1×1) -Symmetrie, d. h., Film und Substrat besitzen die gleiche Symmetrie der Oberflächengitter (siehe Hartkugelmodelle). Aus der Literatur ist bekannt, daß sich die Gitterkonstante des Ni-Films der des Cu-Kristalls anpaßt. Durch dieses pseudomorphe Wachstum wird der Film tetragonal verzerrt [49]. Die laterale Fehlanpassung des Nickels an das Kupfer ist gegeben durch die Differenz der Gitterkonstanten beider Materialien:

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_{Cu} - a_{Ni}}{a_{Ni}}. \quad (5.2)$$

ϵ_{\parallel} ist zugleich die Komponente des Verzerrungstensors in der Ebene, die entlang beider Seiten der quadratischen Oberflächeneinheit zelle des fcc-(100)-Gitters gleich ist. Bei a_{Cu} und a_{Ni} handelt es sich um die Gitterabstände parallel zu den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen. Auf diese Weise erhält man in der Ebene eine Fehlanpassung von 2,55% (2,49%) bezogen auf den Ni-Abstand (Cu-Abstand). Die Streckung der lateralen Abstände des Nickels bewirkt eine Verkleinerung des Interlagenabstandes des Ni-Filmes. Bei einem ferromagnetischen System tritt durch Verzerrungen sowohl eine Änderung der elastischen Energie E_{el} als auch der magneto-elastischen Energie auf. Letztere ist jedoch gegenüber den Veränderungen von E_{el} vernachlässigbar [50]. Die elastische Energie ist durch den Verzerrungs- (ϵ_{ij}) und den Elastizitätstensor c_{ijkl} gegeben [51]:

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \epsilon_{ij} c_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (5.3)$$

Für kubische Systeme nimmt die Energie aus Glg. (5.3) die folgende Form an:

$$E_{el} = \frac{1}{2} \left(c_{11} \sum_i \epsilon_{ii}^2 + c_{44} \sum_{i \neq j} \epsilon_{ij}^2 + c_{12} \sum_{i \neq j} \epsilon_{ii} \epsilon_{jj} \right). \quad (5.4)$$

Die Glg. (5.4) kann man unter der Bedingung, daß für den vorliegenden Fall einer (100)-Oberfläche $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_{\parallel}$ und $\epsilon_{33} = \epsilon_{\perp}$ gilt, vereinfachen und erhält dann:

$$E_{el} = \frac{1}{2} c_{11} (2\epsilon_{\parallel}^2 + 2\epsilon_{\perp}^2) + \frac{1}{2} c_{44} (2\epsilon_{12}^2 + 2\epsilon_{23}^2 + 2\epsilon_{31}^2) + \frac{1}{2} c_{12} (2\epsilon_{11}\epsilon_{22} + 2\epsilon_{22}\epsilon_{33} + 2\epsilon_{33}\epsilon_{11}). \quad (5.5)$$

Das Minimum der elastischen Energie bzgl. ϵ_{\perp} ist – bei gegebenem ϵ_{\parallel} – durch $\partial E_{el} / \partial \epsilon_{\perp} = 0$ gegeben. Stellt man die Ableitung nach ϵ_{\perp} um, so ergibt sich:

$$\epsilon_{\perp} = -2\epsilon_{\parallel} \frac{c_{12}}{c_{11}}. \quad (5.6)$$

Setzt man nun in diese Gleichung die Werte für die Elastizitätskonstanten [51] und ϵ_{\parallel} aus Glg. (5.2) ein, so erhält man eine Fehlanpassung in der Senkrechten von 3,2% (5,5%) bezo-

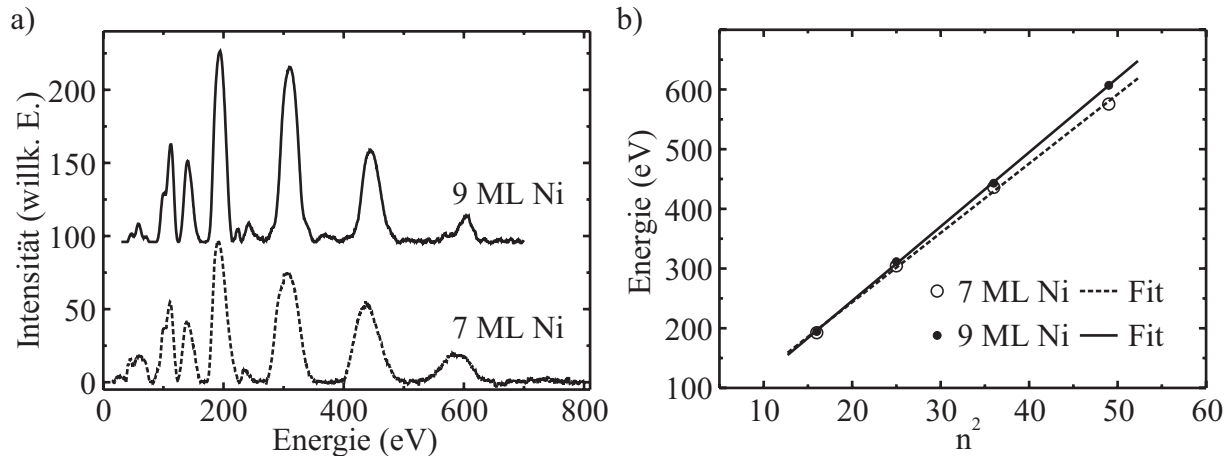


Abb. 5.5.: a) I/V-LEED-Spektren für 7 und 9 ML Ni/Cu(100), b) Position der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 mit den entsprechenden Ausgleichsgeraden.

gen auf den Interlagenabstand von Nickel (Kupfer) [49]. Für einen verzerrten Ni-Film auf einem Cu(100)-Substrat mit dem Interlagenabstand von $d_{Cu} = a_{Cu}/2 = 1,805 \text{ \AA}$ erwartet man daher einen Interlagenabstand von $d_{Ni} = 1,71 \text{ \AA}$. Dies soll im folgenden anhand der I/V-LEED-Messungen untersucht werden.

Anhand der I/V-LEED-Spektren der Abb. 5.5a), in der die Energieabhängigkeit des spekularen Reflexes für 7 bzw. 9 ML Nickel auf Cu(100) aufgetragen ist, erkennt man im Vergleich zu Abb. 4.5 eindeutig eine Verschiebung der Bragg-Peaks zu höheren Energien. Allein aus dieser Verschiebung kann man schließen, daß der Interlagenabstand d_i der Ni-Filme wie erwartet kleiner sein muß als der des Cu-Kristalls. Bei der Berechnung des Interlagenabstandes aus den Peak-Positionen gemäß Kap. 3 (siehe Abb. 5.5b)) erhält man die in Abb. 5.6 aufgetragenen Werte (offene Kreise). Die geschlossenen Dreiecke betreffen das System Nickel auf $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° Cu(100) und werden an späterer Stelle diskutiert. Zusätzlich wurden die Werte für einen Cu- bzw. Ni-Volumenkristall mit (100)-Orientierung eingetragen (Pfeile). Es fällt auf, daß der Wert des 7 ML Ni-Filmes größer ist als der des 9 ML Filmes (siehe auch die größere Steigung für den 9 ML Film in Abb. 5.5b). Dies liegt an der Eindringtiefe der Elektronen, die im analysierten Energiebereich etwa 5-10 ML beträgt [28]. Das bedeutet, daß man in diesem Fall noch ca. 3 atomare Lagen des Cu-Kristalls detektiert, wodurch sich der Wert vergrößert. Abgesehen davon erkennt man jedoch, daß für den 9 ML Film der theoretisch erwartete Interlagenabstand von $1,76(6) \text{ \AA}$ im Rahmen des Fehlers gemessen wird.

Magnetismus Durch die Verspannung, die der Ni-Film erfährt, ergeben sich intrinsische Anisotropien, die ein rein kubisches System nicht besitzt. Dies sind die K_2 -Terme (siehe Kap. 2).

Die Untersuchung der Magnetisierung der Ni-Filme auf Cu(100) ergab, daß die leichte

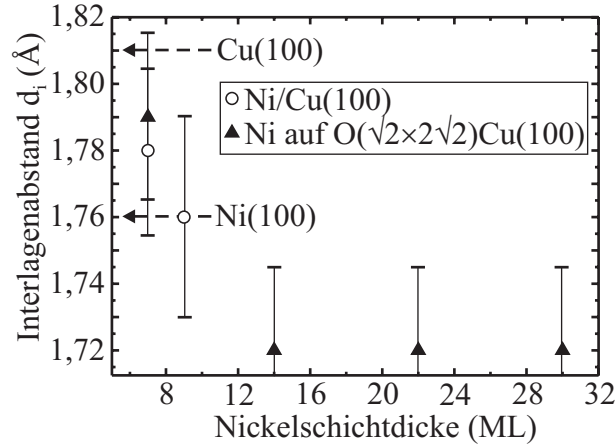


Abb. 5.6.: Interlagenabstand d_i als Funktion der Ni-Schichtdicke von Ni/Cu(100) (offene Kreise) und O/Ni/Cu(100) (geschlossene Dreiecke). Die Volumenwerte für einen Ni(100)- bzw. Cu(100)-Einkristall sind ebenfalls eingetragen (Pfeile).

Ni	Co	Fe
$d > 10-11$ ML	keine	< 4 ML

Tabelle 5.1.: Schichtdickenbereiche mit senkrechter leichter Magnetisierungsrichtung für Ni, Co, und Fe auf Cu(100).

Richtung der Magnetisierung zunächst in der Ebene liegt und ab ca. 10-11 ML eine Reorientierung stattfindet, nach der die Magnetisierung senkrecht zur Oberfläche steht [7,10]. Dies steht im Gegensatz etwa zu Kobalt oder Eisen auf dem gleichen Substrat. Aus Tab. 5.1 geht hervor, in welchem Schichtdickenbereich der einzelnen Materialien die leichte Richtung der Magnetisierung senkrecht zur Ebene steht.

Im Kap. 2 wurden die einzelnen Beiträge, welche die Magnetisierung beeinflussen, aufgeführt. In Glg. (2.23) sind die Formanisotropie, die intrinsischen und die feldabhängigen Anisotropien enthalten. Die intrinsische freie Energiedichte für ein tetragonal verzerrtes System in (100)-Orientierung unter Berücksichtigung uniaxialer Terme lautet:

$$F_{100}^{tet} = \left[2\pi M^2 - \left(K_{2\perp}^V + \frac{K_{2\perp}^S}{d} \right) \right] \cos^2 \theta. \quad (5.7)$$

Je nach Vorzeichen des Vorfaktors $2\pi M^2 - (K_{2\perp}^V + K_{2\perp}^S/d)$ hat F_{100}^{tet} ein Minimum bei $\theta = 0^\circ$ (leichte Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Filmebene) bzw. bei $\theta = 90^\circ$ (leichte Magnetisierungsrichtung parallel zur Filmebene). Bei einer kritischen Schichtdicke d_c , für die der Vorfaktor gerade Null ist, führt Glg. (5.7) daher zu einem Reorientierungsübergang der leichten Richtung der Magnetisierung. Dann gilt:

$$2\pi M^2 - \left(K_{2\perp}^V + \frac{K_{2\perp}^S}{d_c} \right) = 0 \iff d_c = \frac{K_{2\perp}^S}{2\pi M^2 - K_{2\perp}^V}. \quad (5.8)$$

Nickel	Kobalt	Eisen
$K_{2\perp}^S < 0$	$K_{2\perp}^S < 0$	$K_{2\perp}^S > 0$
$ K_{2\perp}^V > 2\pi M^2 $	$ K_{2\perp}^V < 2\pi M^2 $	$ K_{2\perp}^V < 2\pi M^2 $

Tabelle 5.2.: Verhältnisse der Vorzeichen der Anisotropien für eine leichte Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Ebene.

Gemäß Glg. (5.8) müssen die Vorzeichen von Zähler und Nenner gleich sein, um einen physikalisch sinnvollen Wert für d_c zu erhalten. Da die Formanisotropie $2\pi M^2$ immer größer Null ist, ergeben sich zwei Arten von Reorientierungsübergängen. Für den einen gelten die in Spalte 1 von Tab. 5.2 dargestellten Bedingungen (Ni-Typ), für den anderen gelten diejenigen der dritten Spalte (Fe-Typ). Bei dem Fe-Typ ist $K_{2\perp}^S$ die treibende Kraft der Reorientierung, da die Formanisotropie, die stets eine leichte Magnetisierungsrichtung in der Ebene favorisiert, größer als $K_{2\perp}^V$ ist. Beim Ni-Typ ist $K_{2\perp}^V$ die Ursache der Reorientierung, wohingegen $K_{2\perp}^S$ eine leichte Richtung der Magnetisierung in der Filmebene bevorzugt. Da aber die Oberflächenanisotropie proportional $1/d$ ist, läßt deren Einfluß mit zunehmender Filmdicke nach. Deshalb findet die Reorientierung beim Fe-Typ von einer senkrechten Orientierung bei kleinen Filmdicken hin zu einer Magnetisierungsrichtung in der Filmebene oberhalb d_c statt. Beim Ni-Typ ist die Magnetisierung zunächst in der Filmebene orientiert, dreht sich dann aber oberhalb d_c aus der Filmebene heraus. Im Falle von Co auf Cu(100) (mittlere Spalte der Tab. 5.2) ergibt sich $d_c < 0$, so daß bei diesem System keine senkrechte Magnetisierung auftritt.

5.2. Beeinflussung des Wachstums ultradünner Ni-Filme durch Sauerstoff

In Kap. 4 wurde bereits die Präparation des Substratkristalls beschrieben. Durch die Oxidation mit 1200 L Sauerstoff bei einer Temperatur von 500 K bildet sich an der Oberfläche des Kristalls eine $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° Rekonstruktion aus, welche in Abb. 5.7 sowohl im LEED-Bild (a) als auch im STM-Bild mit atomarer Auflösung (b) zu erkennen ist. Das Kugelmodell in Abb. 5.7c) zeigt die Position der einzelnen Elemente und Richtungen (siehe auch Kap. 4). Die in Abb. 5.7d-f) gezeigten Resultate geben das LEED-Bild (d) und zwei STM-Bilder (e) bei verschiedenen Tunnelströmen eines 5,5 ML Ni-Filmes auf der voroxidierten Oberfläche wieder. Das Kugelmodell der Abb. 5.7f) verdeutlicht die Symmetrie und die Position des Sauerstoffs nach Aufbringen des Ni-Filmes. Das LEED-Bild (Abb. 5.7d)) zeigt eine $c(2 \times 2)$ -Symmetrie, woraus zu schließen ist, daß zwar die „missing row“ verschwunden, die Position des Sauerstoffs aber prinzipiell die gleiche wie auf der voroxidierten Oberfläche geblieben ist. Durch den Sauerstoff bildet sich ebenfalls eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur auf einem Ni-Einkristall mit (100)-

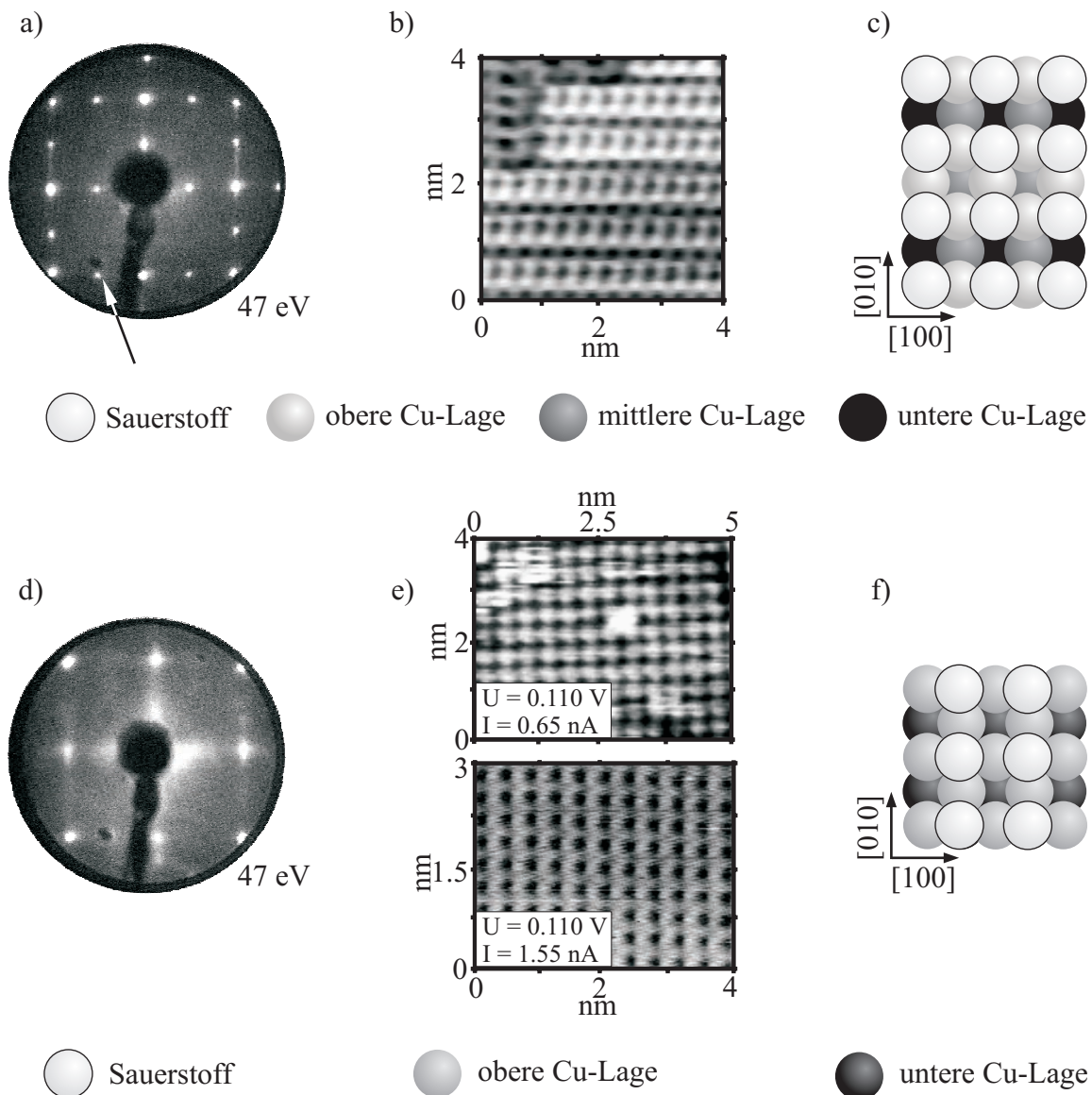


Abb. 5.7.: O/Cu(100): a) LEED-Bild bei 47 eV, b) atomar aufgelöste STM-Aufnahme [26] und c) Hartkugelmodell. 5,5 ML Ni auf O/Cu(100): d) LEED-Bild bei 47 eV, e) zwei atomar aufgelöste STM-Aufnahmen bei verschiedenen Strömen und f) Hartkugelmodell.

Orientierung [52]. Ebenso wie aus dem LEED-Bild geht aus den STM-Bildern klar hervor, daß keine „missing row“ mehr vorhanden ist. Eine zweite Information, die man aus diesen Bildern erhält, ist die Position des Sauerstoffs. Aufgrund der Korrugation des oberen STM-Bildes der Abb. 5.7e), die 0,05 nm beträgt, läßt sich schließen, daß es sich hier um den Sauerstoff handelt, da die Korrugation im Fall von STM-Untersuchungen an reinen Metalloberflächen i. allg. sehr gering ist. Die Korrugation beim Cu(100)-Kristall (siehe Abb. 5.4) beträgt lediglich 0,02 nm. Ein weiteres Indiz dafür, daß man in der STM-Aufnahme (Abb. 5.7) die LDOS der O-Atome „sieht“, liefert die Tatsache, daß der Höhenunterschied einer mit Sauerstoff benetzten Ni(100)-Oberfläche 0,8 nm beträgt [53,54] und somit deutlich größer als für die typischen Metallober-

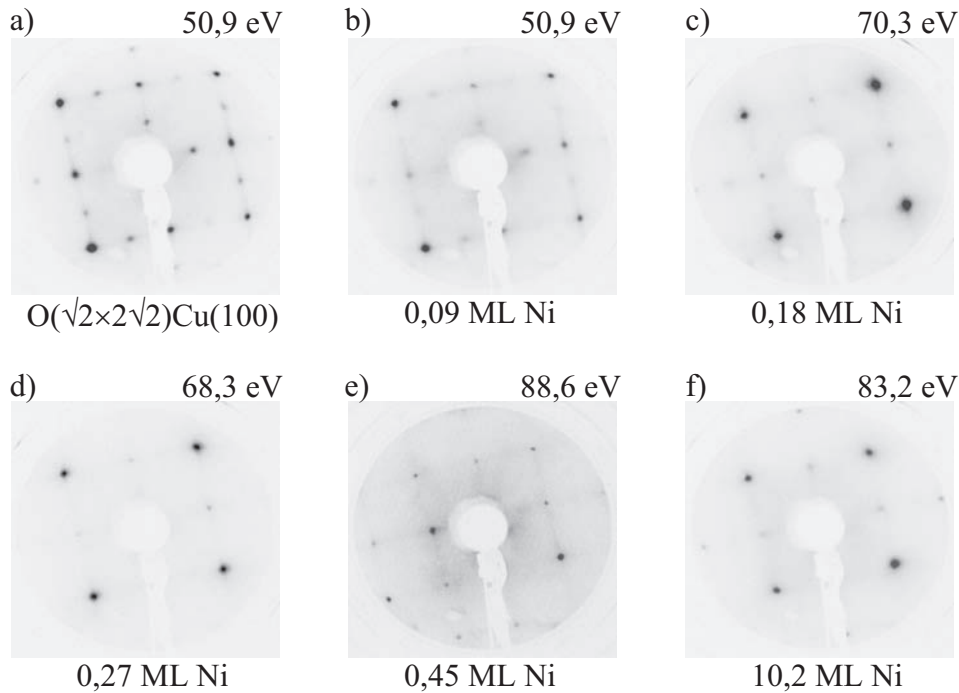


Abb. 5.8.: LEED-Bilder für a) O/Cu(100), b) 0,09 ML O/Ni/Cu(100), c) 0,18 ML Ni , d) 0,27 ML, e) 0,45 ML, f) 10,2 ML. Anhand der Evolution der LEED-Bilder erkennt man das Verschwinden der „missing row“ schon ab einer Bedeckung von etwa 0,2 ML Ni.

flächen ist. Beim Betrachten der Abb. 5.7e) (oberes Bild) stellt sich die Frage, ob es sich bei den hellen Erhebungen oder bei den dunklen Vertiefungen um den Sauerstoff handelt. Dazu ist in Abb. 5.7e) (unteres Bild) ein STM-Bild des gleichen Filmes gezeigt, das bei gleicher Tunnelspannung jedoch größerem Tunnelstrom aufgenommen wurde. Man erkennt deutlich eine Kontrastumkehr zwischen Vertiefungen und Erhebungen. In der Arbeit von G. Doyen et al. [55] wurde theoretisch die lokale Zustandsdichte, die mit dem STM abgebildet wird, für das System O auf Ni(100) in Abhängigkeit des Tunnelstromes berechnet. Je nach Tunnelstrom und dadurch festgelegtem Abstand zwischen STM-Spitze und Probe tragen unterschiedliche Zustände zur lokalen Zustandsdichte bei. Als Resultat soll der Sauerstoff als Vertiefung bei kleineren Tunnelströmen und als Erhebung bei größeren abgebildet werden, wie dies auch im Experiment beobachtet wird. Zusammengefaßt führt somit ein Vergleich der STM-Bilder 5.4b) und 5.7e) auf das Kugelmodell (Abb. 5.7f)) in dem der Sauerstoff 4-fach koordiniert ist und ein Oberflächengitter bildet, das um 45° gegen die Unterlage gedreht ist.

Im folgenden soll der Einfluß einer Submonolagenbedeckung von Nickel auf die Stabilität der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ -Rekonstruktion diskutiert werden. Da die STM-Untersuchungen keine eindeutige Aussage diesbezüglich zulassen, wurden LEED-Messungen im Submonolagenbereich durchgeführt, die in Abb. 5.8 gezeigt sind. Es zeigt sich, daß ungefähr 0,1 ML Nickel (Abb. 5.8b)) die typische „missing row“ der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche (Abb. 5.8a)) noch vorhanden ist. Aus Abb. 5.8c) geht hervor, daß diese jedoch bei ca. 0,2 ML verschwin-

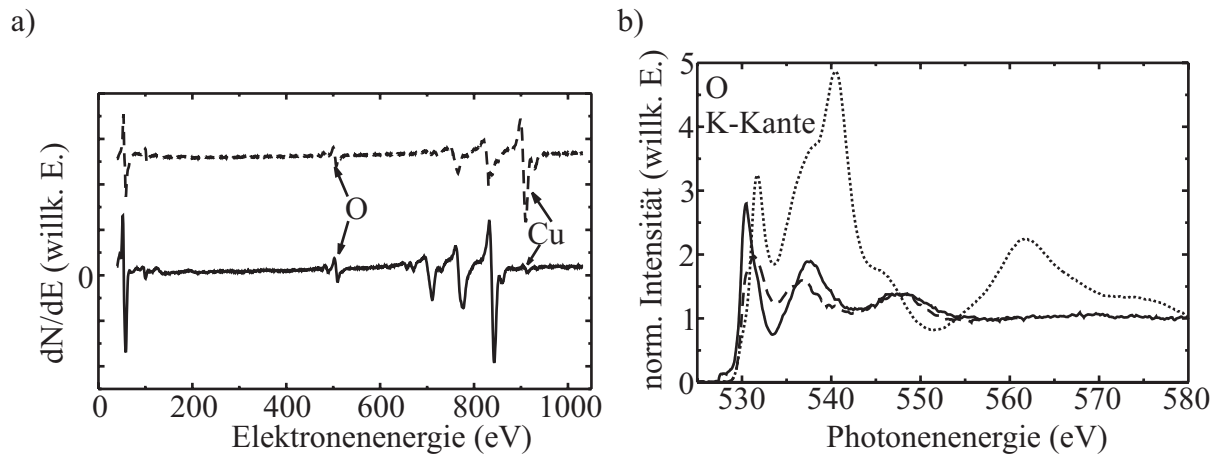


Abb. 5.9.: a) AES von O/Cu(100) (gestrichelt) und 15 ML Ni auf O/Cu(100) (durchgezogen), b) NEXAFS von O/Cu(100) (gestrichelt), 4,5 ML Ni auf O/Cu(100) (durchgezogen), NiO/Cu(100) (gepunktet) [33].

det und sich eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur ausbildet. Ein ähnliches Verhalten wurde für Cu auf der voroxidierten $Cu(100)$ -Oberfläche gefunden [56]. Die Abb. 5.8d-f) zeigen ebenfalls die $c(2 \times 2)$ -Überstruktur. Sie dienen als Vergleich zu den Abb. 5.8a-c) und zeigen gleichzeitig, daß diese Überstruktur für eine zunehmende Ni-Bedeckung stabil ist. Die Arbeiten von T. S. Rahman et al. [42,57,58] zeigen, daß die $c(2 \times 2)$ -Überstruktur von Sauerstoff auf Nickel gegenüber der „missing row“-Rekonstruktion stabil ist.

Bei einer weiteren Erhöhung der Ni-Dicke zeigt sich, daß das lagenweise Wachstum durch den Sauerstoff gefördert wird. In Abb. 5.1 sind die MEED-Oszillationen von Nickel auf der Sauerstoff rekonstruierten Oberfläche denen von Nickel auf der reinen $Cu(100)$ -Oberfläche gegenübergestellt. Wie bereits weiter oben festgestellt, zeigen erstere ein länger anhaltendes oszillatorisches Verhalten, welches auf den Sauerstoff zurückgeführt werden muß. Es deutet sich also an dieser Stelle an, daß der Sauerstoff als Sufactant den Wachstumsprozeß des Nickels beeinflusst [5,59]. In Abb. 5.9a) sind die AES-Spektren eines voroxidierten $Cu(100)$ -Kristalls und einer auf dieser Oberfläche gewachsenen 15 ML Ni-Schicht abgebildet. Das Spektrum des mit 0,5 ML Sauerstoff benetzten Cu-Kristalls zeigt eindeutig die AES-Übergänge des Kupfers und die des Sauerstoffs. Das Aufbringen des Nickels bewirkt eine Abnahme der Intensitäten der Cu-Peaks. Aufgrund der hohen Ni-Bedeckung von 15 ML ist nur noch ein „Rest“ des Cu_{920} -Peaks zu sehen. Gleichzeitig sieht man an dieser Abbildung, daß – im Gegensatz zum Cu-Peak – die Intensität des Sauerstoffs nicht verschwindet, was die Vermutung nahe legt, daß der Sauerstoff während der Präparation des Ni-Filmes immer auf diesen aufschwimmt. Würde der Sauerstoff im Film eingebaut, so müßte dies – selbst bei einer Lokalisierung der O-Atome innerhalb der obersten Ni-Lagen – zu einer Abnahme der Intensität des Sauerstoff-AES-Peaks führen. Dies und die weiter unten aufgeführten Ergebnisse zeigen, daß sich nach dem Filmwachstum genau eine Sauerstofflage auf dem Film befindet.

Um zu klären, ob durch den Sauerstoff Nickeloxid gebildet wird, sind Experimente bei BESSY II durchgeführt worden. Near Edge X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy (NEXAFS)-Experimente an der Sauerstoff K-Kante zeigen eine kovalente Bindung zwischen Nickel und Sauerstoff, die jedoch in ihrer Stärke nicht der von NiO entspricht. Dies ist in Abb. 5.9b) gut zu erkennen, in der die Spektren von der O-rekonstruierten Cu(100)-Oberflächen (gestrichelt), dem darauf präparierten 4,5 ML dicken Ni-Film (durchgezogen) und einem NiO-Film auf dem Cu(100)-Kristall (gepunktet) gegenübergestellt sind. Der O-Kantensprung stellt eine empfindliche Meßgröße für die Anzahl der Atome dar. Da dieser nach dem Aufbringen von Nickel auf die voroxidierte Oberfläche gleich bleibt ($\approx 4\%$), läßt sich eine Dämpfung der O-Absorption ausschließen. Dies ist, in Analogie zu den AES-Daten, ein weiterer Nachweis dafür, daß sich der Sauerstoff vom Cu-Kristall löst und auf den wachsenden Ni-Film aufschwimmt. Desweiteren zeigt ein Vergleich von gestrichelter und durchgezogener Kurve die Ähnlichkeit der beiden Spektren für das oxidierte Cu-Substrat und dem darauf präparierten Ni-Film besonders im erweiterten Energiebereich hinter der Sauerstoff K-Kante. Eine Einbettung des Sauerstoffs in den Ni-Film oder aber eine NiO-Bindung würde eine starke Veränderung in der Form des Spektrums des O-NEXAFS nach sich ziehen. Zum Vergleich ist ein solches NiO-Spektrum (gepunktet) in Abb. 5.9b) gezeigt. Bei NiO erkennt man deutlich Feinstrukturen im erweiterten Energiebereich hinter der Sauerstoff K-Kante, die durch Einfach- und Mehrfachstreuung der Photoelektronen mit der Sauerstoffumgebung entstehen. Die beiden Intensitäten im Nah-Kantenbereich der K-Kante können mit der Hybridisierung der O(2p)-Zustände mit den (3d, 4sp)-Zuständen der Oberfläche in Verbindung gebracht werden [60,61]. Die erste der beiden Strukturen bei der Schwelle entspricht den antibindenden (2p-3d)-Zuständen wenig oberhalb des Fermi-Niveaus. Die stärkere Wechselwirkung zwischen den (2p)-Zuständen des Sauerstoffs und den (4sp) des Cu bzw. Ni bewirken eine Aufspaltung der bindenden-antibindenden Zustände, deren Ergebnis ein breiter Peak 5-6 eV oberhalb des Fermi-Niveaus ist [62]. Eine NiO-Formation an der Oberfläche des Filmes oder innerhalb des Filmes würde somit eine drastische Änderung des O-NEXAFS zur Folge haben, die jedoch für die auf der voroxidierten Cu-Oberfläche hergestellten Ni-Filme nicht vorhanden ist. Es handelt sich daher bei der Sauerstoffoberflächenlage um eine kovalente Bindung, die jedoch nicht derjenigen von NiO gleicht.

Ein weiterer Nachweis der aufschwimmenden Sauerstofflage ist durch Messungen an den Cu L_{2,3}-Kanten möglich, die eine reversible (chemische) Verschiebung zeigen (in Abb. 5.10a)). Man erkennt eine kleine Energieverschiebung zwischen dem reinen Substrat (gestrichelt-2fachgepunktet) und der O-rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche (gestrichelt). Die durchgezogene Linie der Graphik zeigt, daß durch Adsorption von Nickel auf der rekonstruierten Oberfläche diese Verschiebung rückgängig gemacht wird. Die chemische Verschiebung aufgrund der O-Cu-Bindung verschwindet nach dem Aufbringen des Ni-Filmes (siehe Vergrößerung in Abb. 5.10a)). Dies bedeutet, daß sie durch das Ni aufgebrochen wird und sich stattdessen eine

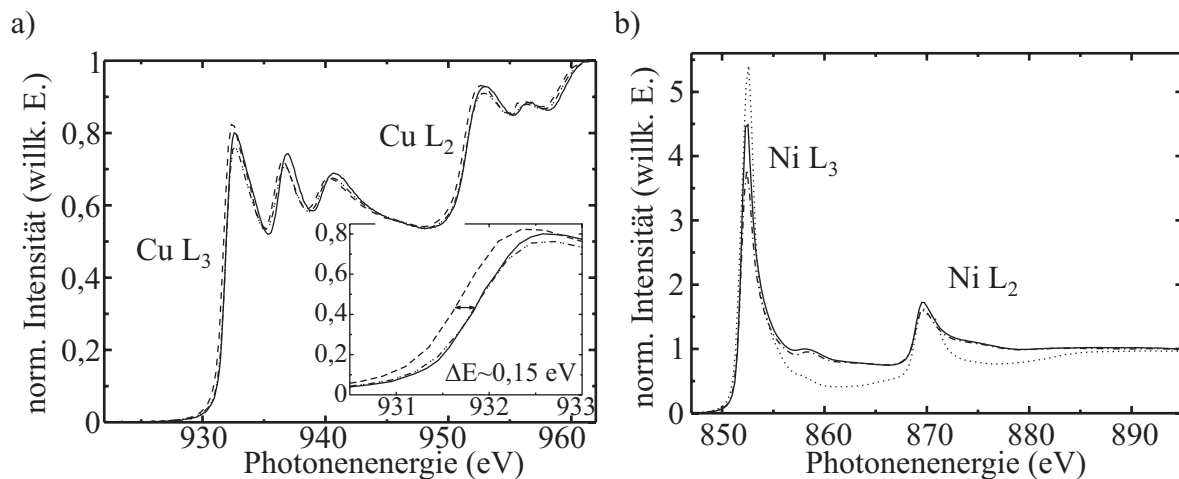


Abb. 5.10.: a) Cu $L_{2,3}$ -Kanten für Cu(100) (gestrichelt-2fach-gepunktet), Cu(100) (gestrichelt), 4,5 ML Ni auf O/Cu(100) (durchgezogen). Der Inset zeigt eine Vergrößerung der L_3 -Kante, welche eine chemische Verschiebung durch die Oxidation des Substrates zeigt. b) Ni $L_{2,3}$ -Kanten für 4,5 ML Ni auf O/Cu(100), 4,5 ML NiO/Cu(100) (gepunktet), 12 ML Ni/Cu(100) (gestrichelt-1fach-gepunktet) [33].

Ni/Cu-Grenzschicht ausbildet.

Durch Analyse der Ni L-Kanten können schließlich über die (2p-3d)-hybridisierten Zustände in der Nähe des Fermi-Niveaus Aussagen getroffen werden. Sie beeinflussen die elektronischen Eigenschaften des Nickels und wirken sich letztlich auch auf die magnetischen Eigenschaften aus, da diese von den d-Zuständen dominiert werden. In Abb. 5.10b) sind die $L_{2,3}$ -Kanten des Nickels für O/Ni/Cu(100) (durchgezogen), einen NiO-Film (gepunktet) und einen 12 ML dicken Ni-Film (Strich-Punkt) aufgetragen. Angemerkt sei, daß der Übergang in unbesetzte d-Zustände oberhalb der Fermi-Kante geschieht. Die Erhöhung der Intensität der $L_{2,3}$ -Kanten von Nickel auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ rekonstruierten $Cu(100)$ -Oberfläche und NiO auf Cu(100) gegenüber dem Spektrum von Ni auf Cu(100) bedeutet eine Erhöhung der unbesetzten d-Zustände und damit einen relativ großen Ladungstransfer von Ni zum O, was eine chemische Bindung anzeigt. Eine Oxidation des Ni-Filmes ist anhand einer Reduzierung der Intensität des Signals hinter den Kanten erkennbar (gepunktete Linie) [62]. Somit zeigen auch die Messungen an den Ni L-Kanten, daß keine NiO-artige Bindung vorliegt. Die Zahl der unbesetzten d-Zustände pro Atom n_h gemittelt über den gesamten Ni-Film ergibt sich ungefähr aus der Fläche unter der „white line“-Intensität [12,33]. Aus der Abb. 5.10b) ist zu entnehmen, daß sich die Anzahl der d-Löcher zwischen der des dicken Ni-Filmes ($n_h = 1,45$ Löcher/Atom [63]) und des NiO-Filmes (2,0 Löcher/Atom) befindet. Durch Integration der Spektren bis zum Maximum der L_3 -Kante ergibt sich eine Löcherzahl von $n_h = 1,52(6)$ Löcher/Ni-Atom. Dabei ist der Beitrag des Ladungstrfers ins Kontinuum vernachlässigbar. Ein Vergleich der Zahlen zeigt, daß die Anzahl der d-Löcher für Ni auf der O rekonstruierten $Cu(100)$ -Oberfläche um etwa 12% erhöht ist. Dies wiederum bedeutet zwar eine chemische Bindung von Ni und O, da die

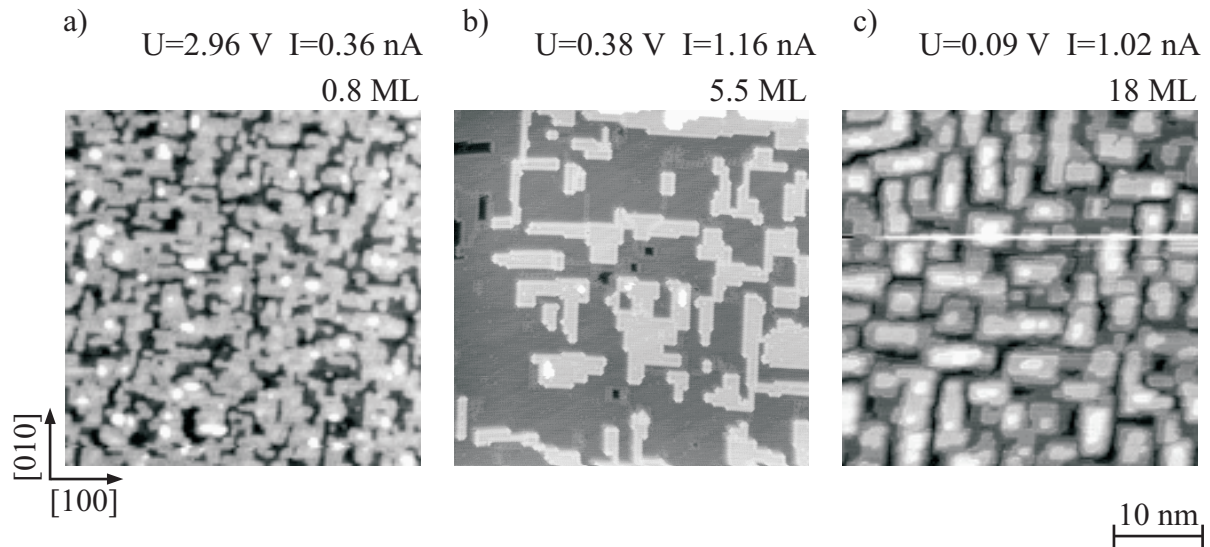


Abb. 5.11.: STM-Bilder für Nickel auf O/Cu(100): a) 0,8 ML, b) 5,5 ML und c) 20 ML.

elektronische Struktur sich von einer Ni-volumenartigen hin zu einer Ni-atomartigen Struktur verändert hat, jedoch wird hierdurch deutlich, daß sich kein NiO bildet.

Weitere strukturelle Untersuchungen wurden mittels STM durchgeführt. In Abb. 5.11 sind STM-Bilder der rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche für verschiedene Ni-Bedeckungen enthalten. Auffällig ist, daß im Gegensatz zu Nickel auf der reinen Oberfläche durch die Verwendung von Sauerstoff sofort eine Vorzugsrichtung der Inselbildung entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen vorliegt. In den Aufnahmen Abb. 5.2a) und Abb. 5.11a) ist jeweils ein 0,8 ML dicker Ni-Film auf Cu(100) bzw. der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche zu sehen. Man erkennt, daß die Ni-Inseln auf der mit Sauerstoff präparierten Oberfläche kleiner sind als die auf dem reinen Cu(100)-Kristall. Die kleineren und um 45° gedrehten Inseln werden vermutlich durch die Anwesenheit des Sauerstoffs gebildet, der die Diffusionslängen und die Richtung der Ausbreitung der Ni-Adatome auf der Oberfläche beeinflusst. Die Abb. 5.11b) zeigt einen 5,5 ML dicken Ni-Film auf dem $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R 45° rekonstruierten Cu(100)-Kristall. Ihm gegenüber steht der 5 ML dicke Ni-Film der Abb. 5.2b), der trotz einer ganzzahligen Filmdicke eine größere Rauigkeit aufweist. Dieser Film befindet sich am Übergang zum 3D-Wachstum. Bei seinem Pendant (Abb. 5.11b)) ist jedoch ein lagenweises Wachstum sichtbar. Dies wirkt sich auch auf die Rauigkeit der Filme aus, die bei dem Ni-Film mit Wachstumshilfe geringer ausfällt. Zudem erkennt man in Abb. 5.11b) gut die um 45° gedrehte Inselorientierung auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R 45° rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche. Abbildung 5.2c) und Abb. 5.11c) zeigen Ni-Filme hoher Bedeckung auf Cu(100) bzw. dem O-rekonstruierten Cu(100)-Kristall. In beiden Fällen nimmt die Rauigkeit zu, aber auch hier ist sie im Sauerstoff-System geringer. In Abb. 5.3 war die arithmetische mittlere Rauigkeit R_a der Ni-Filme als Funktion der Schichtdicke für Nickel auf Cu(100) (offene und geschlossene Kreise) und auf $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R 45° Cu(100) (geschlos-

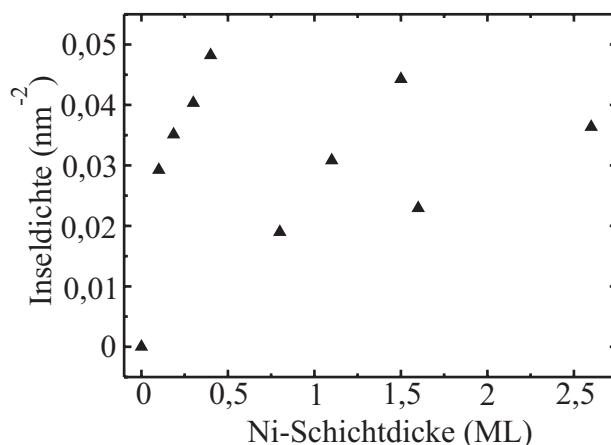


Abb. 5.12.: Inseldichte für O/Ni/Cu(100).

sene Dreiecke) aufgetragen. In dem Inset ist ebenfalls für Ni auf der voroxidierten Oberfläche ein oszillatorisches Verhalten zu erkennen, das ein lagenweise Wachstum widerspiegelt, da die Rauigkeit bei halbgefüllten Lagen maximal und bei ganzen Lagen minimal ist [47]. Der Bereich ab 5 ML zeigt für die Ni-Filme auf dem reinen Kristall ein exponentielles Verhalten bis zu einem Sättigungswert. Die geschlossenen Dreiecke jedoch, die die mit Sauerstoff gewachsenen Filme repräsentieren, liegen alle unterhalb der Kurve der Ni-Filme auf Cu(100), d. h., die Rauigkeit wird durch den Sauerstoff stark reduziert. Dieses Ergebnis bestätigt auch die MEED-Experimente (siehe Abb. 5.1).

In Abb. 5.12 ist schließlich die Inseldichte ebenfalls als Funktion der Ni-Dicke aufgetragen. Man sieht, daß die Inseldichte bis zu einer Dicke von ca. 0,5 ML zunimmt und dann abrupt fällt. Dieses Verhalten entsteht dadurch, daß zunächst viele kleine Inseln gebildet werden, die bei etwa einer halben Monolage Bedeckung zusammenwachsen. Auch im Verhalten der Inseldichte ist daher das lagenweise Wachstum zu erkennen.

Abschließen sei noch bemerkt, daß der Sauerstoff aufgrund der langreichweitigen elektrostatischen Madelung-Energie aufschwimmt [42,57,58].

5.3. Beeinflussung des Magnetismus ultradünner Ni-Filme durch Sauerstoff

Aus den Arbeiten von S. van Dijken et al. [4] ist bekannt, daß Gase, die nach der Präparation des ferromagnetischen Filmes auf dessen Oberfläche gelangen, die magnetischen Eigenschaften beeinflussen können. Es stellt sich also an dieser Stelle die Frage, ob sich der Sauerstoff auf die magnetischen Eigenschaften des Filmes auswirkt. Zu diesem Zweck wurden winkelhängige und temperaturabhängige Messungen mittels ferromagnetischer Resonanz (FMR) und Experimente mittels polarem MOKE durchgeführt.

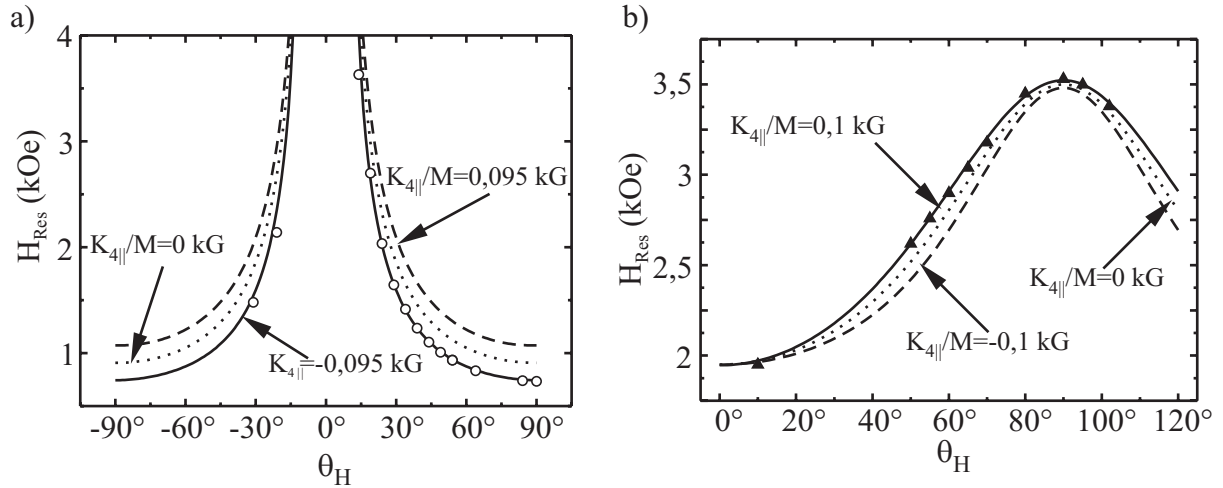


Abb. 5.13.: Winkelabhängige FMR-Messungen für a) 6 ML Ni/Cu(100), b) 6 ML Ni auf O/Cu(100) [48].

Ferromagnetische Resonanz Mit Hilfe der winkelabhängigen FMR hat man die Möglichkeit, die verschiedenen Anisotropiekonstanten zu bestimmen, indem man das Resonanzfeld H_{Res} als Funktion des Winkels θ_H des externen Magnetfeldes gemessen gegen die Filmnormale auswertet. Auf diese Weise kann man die verschiedenen Anisotropiekonstanten voneinander trennen. Wie in der Referenz [64,65] ausführlich beschrieben, lautet die Funktion der freien Energiedichte F eines kubischen Systems mit einer tetragonalen Verzerrung (siehe Kap. 2) [24]:

$$\begin{aligned}
 F &= -MH_0 \cos(\theta - \theta_H) + (2\pi M^2 - K_{2\perp}) \cos^2 \theta \\
 &\quad - \frac{1}{2}K_{4\perp} \cos^4 \theta - \frac{1}{8}K_{4||} (3 + \cos 4\phi) \sin^4 \theta.
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

M ist die Magnetisierung, H_0 ist das extern angelegte Feld und θ ist der Winkel der Magnetisierung bezogen auf die Filmnormale. Bei ϕ handelt es sich um den Winkel der gegen die $[001]$ -Richtung in der Ebene gemessen wird. Die K_i sind die einzelnen Anisotropiekonstanten mit $K_{2\perp}$ der uniaxialen Anisotropie und $K_{4||(\perp)}$ der vierzähligen Anisotropie parallel (senkrecht) zur Filmebene. Die Gleichgewichtsposition von M findet man durch die partielle Ableitung der freien Energiedichte nach θ und ϕ , d. h.: $\partial F/\partial \theta = \partial F/\partial \phi = 0$. Anschließend ermöglicht die Methode von Smit und Beljers [66] die Simulation der vollständigen Winkelabhängigkeit von $H_{\text{Res}}(\theta_H)$.

Die Figur 5.13a) zeigt einen 6 ML dicken Ni-Film auf Cu(100) (offene Kreise), in Abb. 5.13b) ist ein 6 ML Ni-Film (geschlossene Dreiecke) zu sehen, der auf das voroxidierte Substrat aufgedampft wurde. Aus dem Verlauf der Kurven erkennt man, daß sich das Minimum für Ni/Cu(100) bei $\theta = 90^\circ$ und für Ni auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche bei $\theta = 0^\circ$ befindet. Diese Tatsache verdeutlicht, daß die leichte Richtung der Magnetisierung für das System Ni/Cu(100) im Gegensatz zu Ni auf der Sauerstoff rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche in der Filmebene liegt. Dieser Unterschied in der leichten Magnetisierungsrichtung macht sich

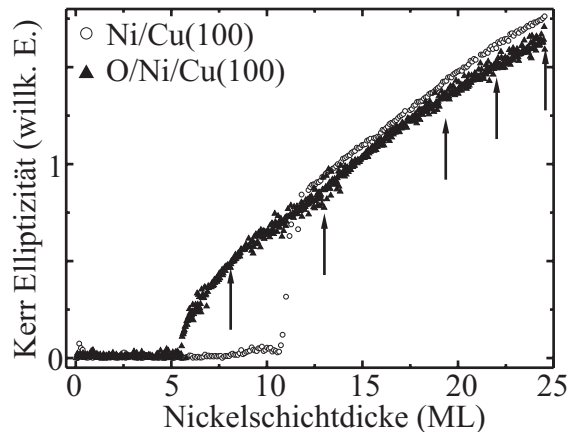


Abb. 5.14.: Elliptizität des magneto-optischen Kerr-Effektes für Ni/Cu(100) (offene Kreise) und Ni auf O/Cu(100) (geschlossene Dreiecke). Die Pfeile geben die Positionen der exemplarisch in Abb. 5.15 dargestellten Hysteresen an.

ebenfalls im Vorzeichen des effektiven Anisotropiefeldes senkrecht zur Ebene ($K_{2\perp}/M - 2\pi M$) bemerkbar. Die Analyse der winkelabhängigen Messungen ergaben für Ni/Cu(100) einen effektiven Wert von $-4,2$ kG bzw. für Ni auf $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ Cu(100) einen Wert von $0,54$ kG. Der Sauerstoff hat also den Effekt, die Reorientierung der Magnetisierung hin zu kleineren Filmdicken zu verschieben. Neben diesem Effekt konnte durch die winkelabhängigen FMR-Messungen auch eine Reorientierung der leichten Richtung der Magnetisierung *innerhalb* der Filmebene von der $[110]$ -Richtung bei Ni/Cu(100) hin zur $[100]$ -Richtung bei Nickel auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche nachgewiesen werden. Deutlich wird dies an der vierzähligen Anisotropie $K_{4\parallel}/M$ parallel zur Ebene. In Abb. 5.13 sind Fits mit gleichen Werten für $K_{2\perp}/M - 2\pi M$ aber unterschiedlichen Werten für $K_{4\parallel}/M$ berechnet und eingezeichnet. Es ist eindeutig zu erkennen, daß der Kurvenverlauf auch durch den $K_{4\parallel}/M$ -Term bestimmt wird. Übereinstimmend mit Glg. (5.9) bedeutet ein positives (negatives) Vorzeichen von $K_{4\parallel}$ eine leichte Richtung der Magnetisierung in $[100]$ - ($[110]$)-Richtung. Vergleicht man nun dieses Ergebnis mit dem Wachstum von Ni/Cu(100) bzw. Ni auf dem voroxidierten Cu(100)-Kristall, in der sich die Ausrichtung der Inselkanten ebenfalls von der $[011]$ -Richtung durch das Sauerstoff beeinflusste Wachstum in die $[001]$ -Richtung gedreht hat, dann kann man davon ausgehen, daß diese beiden Effekte miteinander korreliert sind.

Magneto-optischer Kerr-Effekt In Abb. 5.14 ist die Elliptizität des polaren magneto-optischen Kerr-Effektes als Funktion der Aufdampfzeit, d. h. mit zunehmender Ni-Schichtdicke d , aufgetragen. Die Messungen wurden bei Raumtemperatur durchgeführt. Die offenen Kreise beziehen sich auf Ni/Cu(100), die geschlossenen Dreiecke auf Nickel auf der voroxidierten Oberfläche. Die eingezeichneten Pfeile entsprechen den Dicken, bei denen Hystereseschleifen aufgenommen wurden (siehe unten). Das System Ni/Cu(100) zeigt ab $d_c \approx 10$ ML ein Einset-

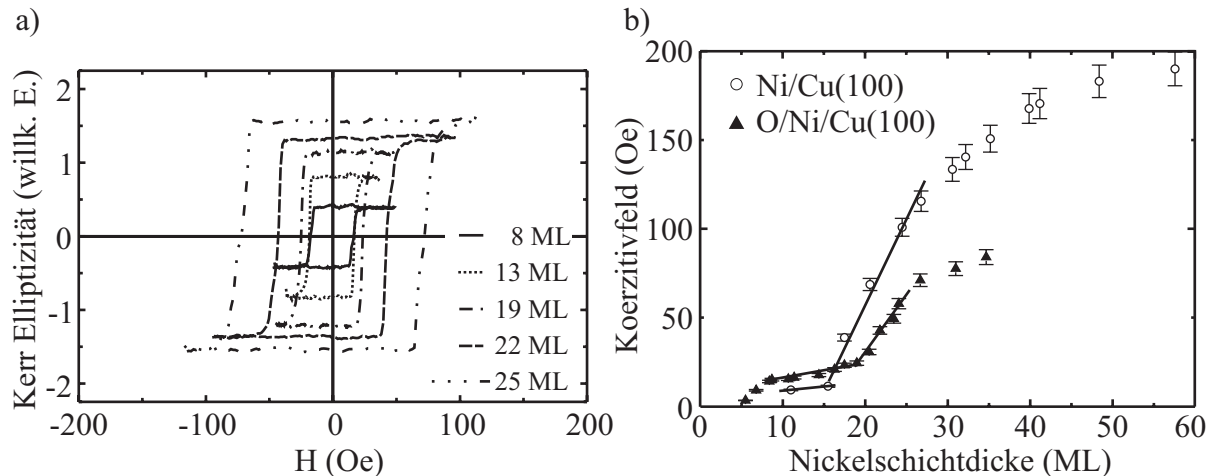


Abb. 5.15.: a) Hysteresen für Ni auf O/Cu(100) und b) Koerzitivfeld als Funktion der Filmdicke von Ni auf O/Cu(100) (geschlossene Dreiecke) und Ni/Cu(100) (offene Kreise).

zen des polaren Kerr-Signal. Bei dieser kritischen Schichtdicke d_c findet eine Reorientierung der Spins, die zunächst parallel zur Ebene ausgerichtet sind, senkrecht zur Ebene statt [1,67]. Oberhalb von 10 ML bis ca. 20 ML Nickel nimmt das Signal linear zu. Dieses Verhalten erklärt sich durch eine homogene Magnetisierung des Filmes. Interessanterweise findet die Reorientierung der Magnetisierung für Nickel auf der voroxidierten Oberfläche schon bei $d_c = 5$ ML statt, was man auch in der Graphik anhand des Signals (geschlossene Dreiecke) bei dieser Schichtdicke erkennt. Der Einfluß des Sauerstoff-Surfactants auf die leichte Richtung der Magnetisierung von Ni/Cu(100) kann einer Modifikation der Oberflächenanisotropie $K_{2\perp}^S$ zugeschrieben werden ([10] und nächster Abschnitt). Die Abb. 5.15a) zeigt die bei RT aufgenommenen Hystereseschleifen für verschieden dicke Ni-Filme auf der voroxidierten Oberfläche. Wie schon in Abb. 5.14 festgestellt wurde, nimmt die Elliptizität mit zunehmender Ni-Menge zu. Desweiteren ist die Form der Hysteresen prinzipiell rechteckig, was auf einen eindomänigen, senkrecht zur Ebene magnetisierten Film hindeutet. Es fällt auch auf, daß bei großen Filmdicken das Koerzitivfeld der Hysteresen ansteigt. Daraus folgt, daß für die Ummagnetisierung des Filmes mehr Energie aufgewandt werden muß. Eine genaue Auswertung des Koerzitivfeldes als Funktion der Ni-Dicke (siehe Abb. 5.15b)) für Ni/Cu(100) (offene Kreise) und Ni auf O($\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}$) R45° Cu(100) (geschlossene Dreiecke), ergibt, daß in beiden Fällen das Koerzitivfeld zunächst nicht zunimmt, aber ab einer bestimmten Schichtdicke stark ansteigt. Bei Ni/Cu(100) vergrößert sich das Koerzitivfeld ab etwa $d \geq 15$ ML, für Nickel auf der voroxidierten Oberfläche ab $d \geq 20$ ML. Deutlich wird dies am Knick (schwarze Linien) der Kurvenverläufe. In der Literatur wurde festgestellt, daß ab dieser Dicke Versetzungen in den Film eingebaut werden [4], die eine lokale Entspannung des Filmes hervorrufen. Die Zunahme der Versetzungen mit der Ni-Schichtdicke bedeutet zum einen, daß für den Ummagnetisierungsprozeß mehr Energie benötigt wird (Verhindern der Domänenwandverschiebung an den Versetzungen), zum anderen

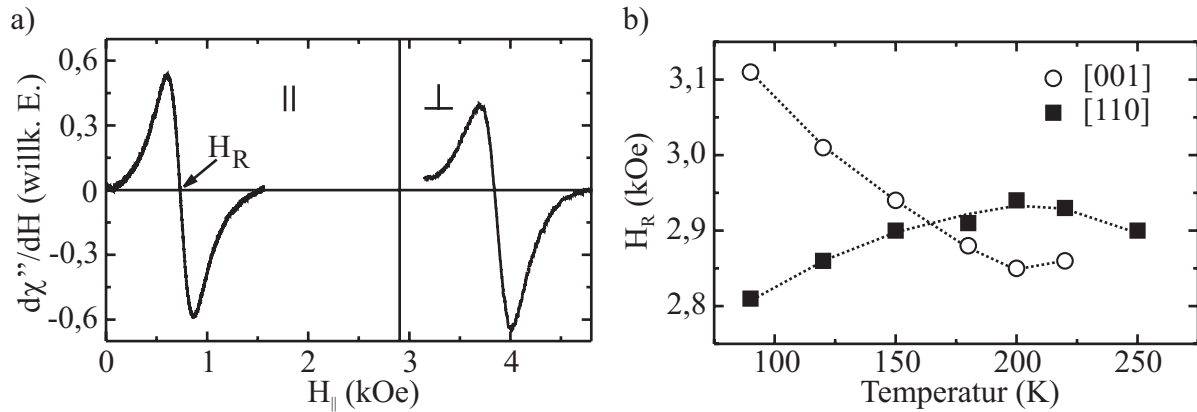


Abb. 5.16.: Messungen der ferromagnetischen Resonanz für a) 6 ML Ni/Cu(100) (links) und 6 ML Ni auf O/Cu(100) (rechts). b) Temperaturabhängige FMR-Messungen für 5 ML Ni auf O/Cu(100) in [001]- und [110]-Richtung [10].

geht der Ni-Film langsam in seine Volumenkonfiguration über und baut die Verspannungen ab, der durch die Fehlanpassung von Ni an das Cu entsteht. Ein Vergleich der Meßdaten beider Systeme zeigt, daß der Abbau der Verspannung bei der Verwendung von Sauerstoff als Surfactant wesentlich später einsetzt (Abb. 5.15b)). Diese Tatsache wurde auch an sehr dünnen Co/Cu(111) Filmen und magnetischen Zweifachlagen, die mit dem Surfactant Blei gewachsen wurden, beobachtet [5].

Modifikation von $K_{2\perp}^S$ In Abb. 5.16a) sind die FMR-Spektren von 6 ML Ni auf Cu(100) (links) bzw. auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ rekonstruierten $Cu(100)$ -Oberfläche (rechts) zu sehen, die bei RT mit einer Frequenz von 9 GHz gemessen wurden. Das statische Magnetfeld wurde parallel zur [110]-Richtung angelegt. Die Linienbreite beider Spektren ist miteinander vergleichbar und zeugt von einer guten Filmqualität [68]. Der große Unterschied der beiden Spektren zeigt sich jedoch in der Position des Resonanzfeldes H_{Res} . Die Verwendung von Sauerstoff als Wachstumshilfe bewirkt eine Verschiebung des Resonanzfeldes um ca. 3 kOe. Die Grenze, die Filme mit leichter Magnetisierungsrichtung in der Ebene ($H_{Res} < 3$ kOe) von solchen mit senkrechter Magnetisierung ($H_{Res} > 3$ kOe) trennt, ist in Abb. 5.16a) durch eine vertikale Linie gekennzeichnet. Das Experiment zeigt, daß ein Ni-Film auf Cu(100), der eine leichte Richtung der Magnetisierung in der Ebene besitzt, durch den Einfluß von Sauerstoff-Surfactant die Magnetisierungsrichtung ändert und senkrecht zur Filmebene magnetisiert ist. Der durch Sauerstoff beeinflusste 6 ML Ni-Film ist bei allen Temperaturen bis hin zur Curie-Temperatur T_C senkrecht magnetisiert, wobei sich T_C oberhalb RT befindet. Die senkrechte magnetische Anisotropie nimmt mit der Filmdicke stark zu, wodurch sich das Resonanzfeld für Filme über 8 ML außerhalb des Meßbereiches (maximale Feldstärke ≈ 13 kOe) befindet. In Abb. 5.16b) ist die Temperaturabhängigkeit von H_{Res} eines 5 ML Ni-Filmes auf der voroxi-

Grenzschicht	$K_{2\perp}^{S1}$ ($\mu\text{eV}/\text{Atom}$)	d_c (ML)
Ni/Vakuum	-107	10,8
Ni/Cu**	-59	7,6
Ni/CO*	-81	7,3
Ni/H* ₂	-70	6,8
Ni/O (Surfactant)	-17	4,9

Tabelle 5.3.: Oberflächenanisotropie und d_c für verschiedene Adsorbate. * [4] und ** [7,10]

dierten Oberfläche gezeigt. Dabei wurde das externe Magnetfeld parallel zur [011]-Richtung, die in der Filmebene liegt, und parallel zur [001]-Richtung, welche sich senkrecht zur Filmebene befindet, angelegt. Die temperaturabhängigen Kurven von H_{Res} für die beiden Richtungen überschneiden sich bei $T = 170$ K. Dieser Punkt markiert daher den Übergang der Spins von der einen Magnetisierungsrichtung in die andere. Bei niedrigen (hohen) Temperaturen ist der Film parallel (senkrecht) zur Ebene magnetisiert. Die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente führen somit zu einer Vergrößerung des Bereiches mit senkrechter Magnetisierung bei der Verwendung von Sauerstoff als Wachstumshilfe. Der Tab. 5.3 kann man die kritische Dicke d_c entnehmen, bei der die Spinreorientierung für reine Ni-Filme, mit Cu bedeckte [7] sowie für Ni-Filme auf die nach der Präparation CO bzw. H₂ [4] dosiert wurde, stattfindet. Der Vergleich mit dem Wert für die mittels O-Surfactant gewachsenen Filme zeigt, daß die Verschiebung von d_c in diesem Falle die bislang größte dokumentierte Verschiebung ist.

Um nun die Ursache der Verschiebung von d_c herauszufinden, muß man das Wechselspiel der verschiedenen Beiträge der magnetischen Anisotropie K betrachten. Dies sind gemäß Kap. 2 die Formanisotropie $2\pi M^2$, die intrinsische Volumenanisotropie $K_{2\perp}^V$ und die Summe der Grenzflächenanisotropie $K_{2\perp}^S$. Geht man von 2 unterschiedlichen Grenzflächen des Filmes aus, dann spaltet sich $K_{2\perp}^S$ in die Anteile $K_{2\perp}^{S1}$ (obere Grenzschicht) und $K_{2\perp}^{S2}$ (untere Grenzschicht) auf. Damit folgt [1]:

$$K = 2\pi M^2 - K_{2\perp}^V - \frac{K_{2\perp}^{S1} + K_{2\perp}^{S2}}{d}. \quad (5.10)$$

Abbildung 5.17 illustriert die einzelnen Anisotropiebeiträge. Bei der kritischen Schichtdicke d_c ist die Summe aller Anisotropiebeiträge bis zur zweiten Ordnung Null. Das bedeutet, daß die Volumenanisotropie $K_{2\perp}^V$, welche für das System Ni/Cu(100) der einzige Term ist, der eine senkrechte Magnetisierungsrichtung favorisiert, d. h. größer Null ist, alle anderen Anteile ausgleicht (siehe Tab. 5.2). Die Formanisotropie für Nickel ist verhältnismäßig klein, etwa $6,5 \mu\text{eV}/\text{Atom}$ bei $t = 0,75$ und favorisiert eine leichte Richtung in der Filmebene. Um eine signifikante Veränderung der Formanisotropie aufgrund des Sauerstoffeinflusses auszuschließen, wurden mittels Röntgenzirkulardichroismus (XMCD) die magnetischen Momente von Ni/Cu(100) und Nickel auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche

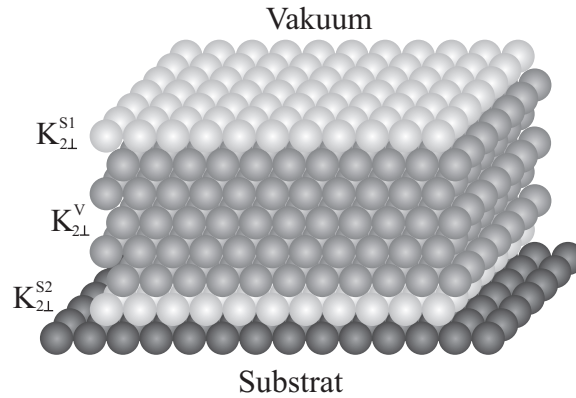


Abb. 5.17.: Hartkugelmodell der Ni-Filme mit den einzelnen Anisotropiebeiträgen.

miteinander verglichen. Im Fehler von ca. 10% sind die Werte für beide Filme gleich groß. Als Ursache der Verschiebung von d_c bleibt also nur eine Änderung von $K_{2\perp}^V$ bzw. $K_{2\perp}^S \cdot K_{2\perp}^V$, welches dreimal größer ist als die Formanisotropie bei $t = 0,75$ [69,70], reagiert sehr empfindlich auf Verzerrungen im Filmvolumen. Die Verzerrung des ca. 11 ML Ni/Cu(100) [49] resultiert in einer starken Erhöhung von $K_{2\perp}^V$ verglichen mit dem Wert für einen Ni-Einkristall [70]. Eine weitere Verspannung der Oberfläche bedingt durch den Sauerstoff könnte $K_{2\perp}^V$ ändern, was im folgenden untersucht werden soll. Dazu wurden für Ni-Filme mit verschiedenen Bedeckungen sowie für die mit Sauerstoff-Surfactant gewachsenen, die mittels FMR ermittelten Werte für $K_{2\perp}$ als Funktion der reziproken Filmdicke aufgetragen (Abb. 5.18). Bei bekannter Formanisotropie ([70], horizontale Linie), die mittels SQUID gemessene Magnetisierung [71], läßt sich $K_{2\perp}^V$ als Achsenabschnitt und $K_{2\perp}^S$ als Steigung ermitteln. Der Schnittpunkt der Ausgleichsgeraden durch die Meßpunkte mit der Formanisotropie gibt die kritische Schichtdicke der Reorientierung an und trennt somit den Bereich mit leichter Magnetisierungsrichtung in der Ebene von demjenigen senkrecht zur Filmebene. Abbildung 5.18 zeigt, daß – im Rahmen des Meßfehlers – für alle 3 Systeme der Wert für $K_{2\perp}^V$ identisch ist und $22 \mu\text{eV}/\text{Atom}$ beträgt [72]. Der Unterschied zwischen reinen Ni-Filmen (volle Kreise), mit Cu bedeckten (offene Kreise) sowie auf der voroxidierten Oberfläche (offene Quadrate) gewachsenen Filmen ist die Steigung und damit die Summe der Oberflächenanisotropien. Eine Trennung der beiden Grenzflächenbeiträge $K_{2\perp}^{S1}$ und $K_{2\perp}^{S2}$ wurde durch bedecken des Ni-Filmes mit Kupfer bestimmt. In diesem Fall liegen auf beiden Seiten idealerweise die gleichen Grenzschichten vor, d. h. $K_{2\perp}^{S1} = K_{2\perp}^{S2}$. Für das System Cu/Ni/Cu(100) so wurde $d_c = 7,6$ ML bei $t = 0,75$ bestimmt [7] (siehe Abb. 5.18) und Tab. 5.3. Aus der Steigung ergibt sich nach Glg. (5.10) für $K_{2\perp}^{S1} = K_{2\perp}^{S2} = -59 \mu\text{eV}/\text{Atom}$ [10]. Analysiert man die Steigungen der anderen Systeme unter Verwendung der eben diskutierten Anisotropie der Ni-Film/Substrat-Grenzfläche $K_{2\perp}^{S2}$, so erhält man die in Tab. 5.3 gezeigten Werte für die obere Grenzflächenanisotropie. Man erkennt, daß – beginnend mit dem reinen Ni-Film – die $K_{2\perp}^{S1}$ -Werte stark abnehmen. Damit ist dies der Grund, daß sich die kritische Schichtdicke der

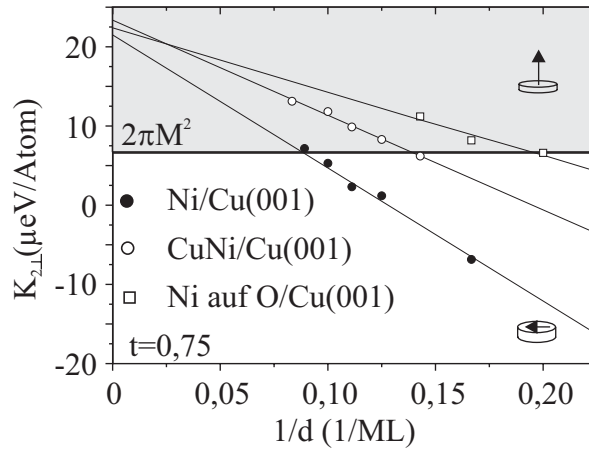


Abb. 5.18.: $K_{2\perp}$ als Funktion von $1/d$ [72].

Reorientierung von ca. 11 ML im Falle von reinen Ni-Filmen auf Cu(100) hin zu etwa 5 ML bei Ni-Filmen auf der $O(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2}) R45^\circ$ rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche verschiebt. Wie bereits durch die I/V-LEED-Messungen nahegelegt, ändert sich die Verspannung im Film nicht und somit nicht $K_{2\perp}^V$.

6. Nickel auf der $O(2 \times 1)$ rekonstruierten $Cu(110)$ -Oberfläche

In diesem Kapitel wird das Wachstum von Nickel auf einem $Cu(110)$ -Einkristall mit Sauerstoff als Wachstumshilfe mit demjenigen von Nickel auf der reinen Oberfläche verglichen. Dazu wurden zunächst dünne Ni-Filme auf die saubere Cu-Oberfläche aufgebracht und mittels STM, LEED, AES und polarem Kerr-Effekt untersucht. Die gleichen Charakterisierungsmethoden wurden für die Ni-Filme auf der sauerstoffbenetzten Oberfläche verwendet. Hinzu kamen hier weitergehende Untersuchungen mittels Synchrotronstrahlung durchgeführt bei BESSY II.

6.1. Wachstum und Magnetismus ultradünner Ni-Filme

Wachstum Kupfer als fcc-Kristall weist in der (110) -Orientierung eine Flächeneinheitszelle mit einer C_2 -Symmetrie auf. Im Kap. 4 ist auf die Präparation und die Charakterisierung des Einkristalles bereits eingegangen worden. In Tab. 6.1 sind die geometrischen Eigenschaften für die im folgenden relevanten Systeme nochmals aufgelistet. Dabei ist d_i der vertikale Abstand der Atomlagen und a_{001} und $a_{1\bar{1}0}$ sind die Abstände parallel zu den im Index angegebenen Richtungen in der Ebene. Ebenfalls enthalten sind die entsprechenden Werte für einen Ni-Einkristall mit der gleichen Orientierung.

In Abb. 6.1 sind die LEED-Aufnahmen der reinen $Cu(110)$ -Oberfläche (a) und die eines 5 ML dicken Ni-Filmes (b) zu sehen. Beide Bilder wurden bei der gleichen Energie aufgenommen und zeigen eindeutig eine (1×1) -Struktur. Dies und die Tatsache, daß Nickel ebenso wie Kupfer eine fcc-Kristallstruktur besitzt, legen die Vermutung nahe, daß sich Nickel der Geometrie des Substrates anpaßt und somit pseudomorph aufwächst.

	d_i	a_{001}	$a_{1\bar{1}0}$
Cu(110)	0,128 nm	0,361 nm	0,256 nm
Ni(110)	0,125 nm	0,352 nm	0,249 nm
$O(2 \times 1)$ -Cu(110)		0,361 nm	0,52 nm

Tabelle 6.1.: Geometrische Eigenschaften eines $Cu(110)$ - bzw. $Ni(110)$ -Kristalls.

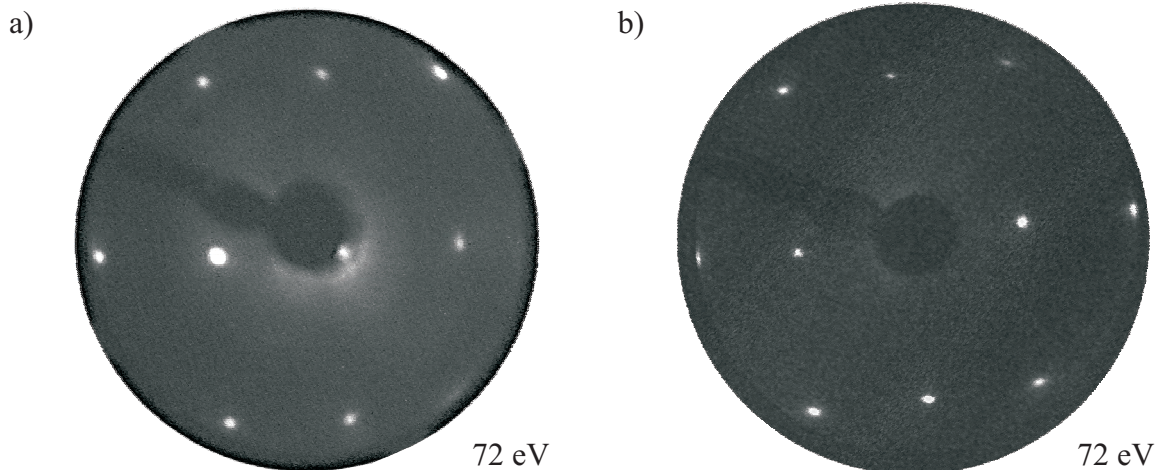


Abb. 6.1.: LEED-Bilder bei 72 eV für a) $Cu(110)$ und b) 5 ML $Ni/Cu(110)$.

Die Morphologie der Ni-Filme zeigt die Abb. 6.2, in der STM-Aufnahmen für verschiedene Bedeckungen enthalten sind. Ersichtlich ist, daß Nickel auf dieser Oberfläche sofort ein dreidimensionales Wachstum anstrebt. In Abb. 6.2a) handelt es sich um 0,1 ML Ni. Die langgezogenen Inseln, welche sich parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung ausbilden, bestehen vermutlich zu großen Teilen aus Cu. Die große Rauigkeit wird durch die mittlere quadratische Abweichung R_q (siehe Abb. 6.4) wiedergegeben. Selbst bei einer Erhöhung der Ni-Bedeckung auf 0,3 ML findet man in dem STM-Bild eine große Rauigkeit, gleichzeitig bilden sich kleine Inseln aus. Die Vorzugsrichtung im Wachstum ist bei dieser Bedeckung noch nicht sehr stark ausgeprägt. Da die Rauigkeit für den Submonolagenbereich verbunden mit einem dreidimensionalen Wachstum so hoch ist, liegt die Vermutung nahe, daß eine Durchmischung von Cu- und Ni-Atomen stattfindet, d. h., das Cu-Atome maßgeblich am Entstehen der beobachteten Morphologie beteiligt sind. Eine solche Durchmischung bzw. Interdiffusion von Ni-Atomen im Submonolagenbereich auf einer Cu-Oberfläche findet man ebenfalls für $Ni/Cu(100)$ [74]. Das AES-Spektrum zu dem 0,1 ML Ni-Film ist in Abb. 6.3 gezeigt. In dieser Abbildung ist neben den AES-Spektren für verschiedene Bedeckungen von $Ni/Cu(110)$ ein AES-Spektrum des reinen $Cu(110)$ -Kristalls zu Vergleichszwecken enthalten. Ersichtlich ist die Entwicklung der Ni_{716} -AES-Intensität mit zunehmender Ni-Bedeckung. Das Spektrum bei einer Bedeckung von 0,1 ML Ni zeigt kein Ni_{716} -AES-Signal. Dies könnte zum einen an den Austauschprozessen liegen, jedoch ist die Empfindlichkeit der 4-Gitter-LEED-Optik unterhalb einer halben Monolage deutlich geringer verglichen mit einem Cylindrical Mirror Analyzer (CMA). Dampft man nun mehr Nickel auf, so nimmt die Durchmischung ab, und die Rauigkeit der Filme vergrößert sich zunehmend. Zunächst bilden sich überwiegend flache Bereiche aus (Abb. 6.2c)), deren Form mit zunehmender Schichtdicke rechteckig wird, wodurch die Vorzugsrichtung im Wachstum stark ausgeprägt wird. Das Ausbilden der bevorzugten Wachstumsrichtung hängt möglicherweise mit unterschiedlichen Diffusionslängen entlang der $[001]$ - und der $[1\bar{1}0]$ -Richtung zusammen, da

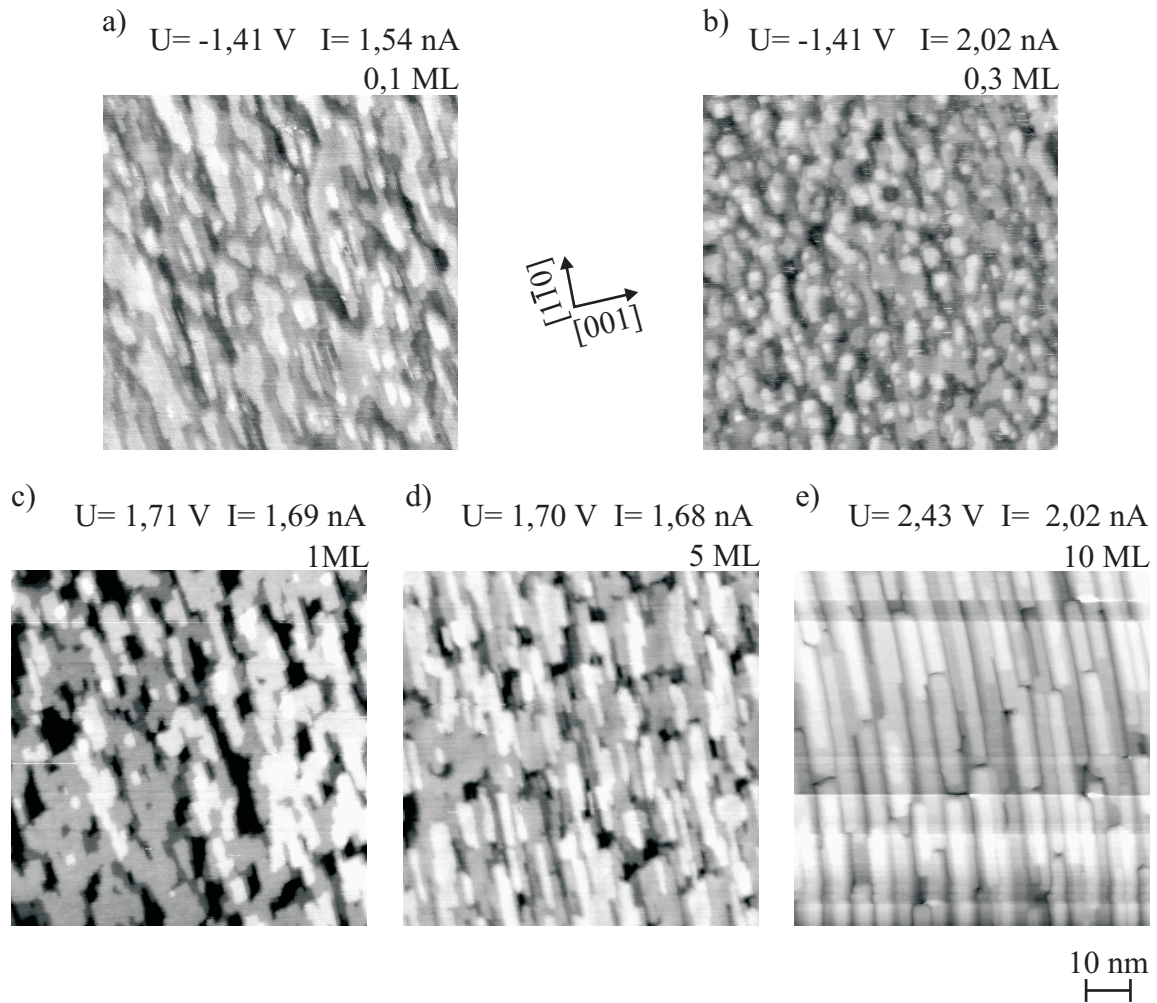


Abb. 6.2.: STM-Bilder für Ni/Cu(110): a) 0,1 ML, b) 0,3 ML, c) 1 ML, d) 5 ML, e) 10 ML. Man erkennt die Vorzugsrichtung des Wachstums entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung und das 3D-Wachstum des Nickels [73].

die Mobilität der Adatome entlang der beiden Richtungen verschieden stark ausgeprägt ist [46]. In Abb. 6.4 sind die Rauigkeiten als Funktion der Schichtdicke aufgetragen, was die bereits in den STM-Bildern erkennbare Tatsache verdeutlicht (Ni/Cu(110) offene Kreise, O/Ni/Cu(100) geschlossene Dreiecke). Die starke Rauigkeit für Ni/Cu(110) und das damit verbundene dreidimensionale Wachstum wirft die Frage auf, ob Nickel in seine eigene Geometrie relaxiert und die Verspannung, die durch die Wechselwirkung mit der Struktur des Cu(110)-Kristalls entsteht, abbaut.

Die in Abb. 6.5 gezeigten I/V-LEED-Spektren des spekularen Reflexes, beginnend bei dem Cu-Einkristall über verschiedene Dicken der Ni-Filme bis hin zu einem Spektrum für einen Ni(110)-Einkristall, liefern nach der Auswertung der Bragg-Maxima (siehe Abb. 6.5b)) gemäß Kap. 3 den mittleren Interlagenabstand d_i , der in Abb. 6.6 als Funktion der Ni-Schichtdicke aufgetragen ist. Die *gemessenen* Interlagenabstände des Cu(110)- bzw. Ni(110)-Einkristalles sind durch Pfeile gekennzeichnet und stimmen im Fehler mit den theoretischen Werten überein (sie-

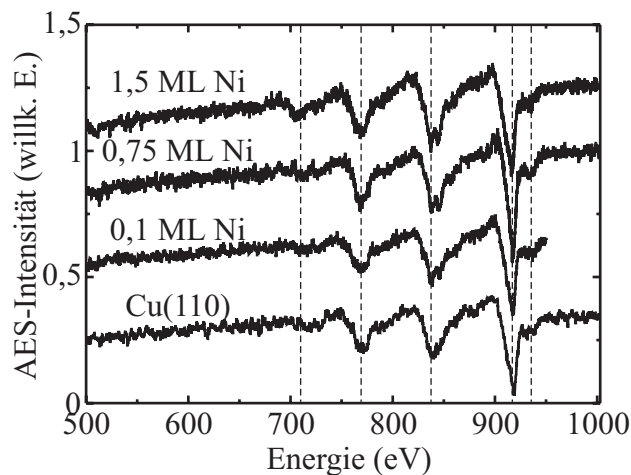


Abb. 6.3.: AES für Ni/Cu(110) im Submonolagenbereich.

he Tab. 6.1). Man erkennt, daß die d_i der reinen Ni-Filme (offene Kreise) ab Schichtdicken von etwa 10 ML systematisch unterhalb des Volumenwertes für Ni(110) liegen. Jedoch beträgt der Unterschied, verglichen mit dem eines Ni-Kristalls, nur 0,002 nm. Die Werte für Schichtdicken kleiner als 10 ML zeigen einen größeren Interlagenabstand, was an der Eindringtiefe der Elektronen von etwa 10 ML liegt. Dies führt dazu, daß noch ein erheblicher Anteil des Cu-Substrates mitgemessen wird. Dieser Effekt ist sehr deutlich bei dem 4 ML dicken Film zu erkennen, dessen d_i -Wert sich zwischen den Volumenwerten von Ni(110) und Cu(110) befindet. Betrachtet man die d_i oberhalb von 10 ML, so erhält man eine vertikale Kontraktion des Ni-Filmes von etwa 1,2% (3,5%) bezogen auf den Ni (Cu)-Volumenwert. Die I/V-LEED-Messungen zeigen also, daß die Verzerrungen nicht so groß sind wie bei dem Wachstum von Ni auf der Cu(100)-Oberfläche [50]. Auch für dieses System soll im folgenden mithilfe der elastischen Konstanten eines Ni-Volumenkristalls der theoretische Interlagenabstand bei einem durch die Fehlanpas-

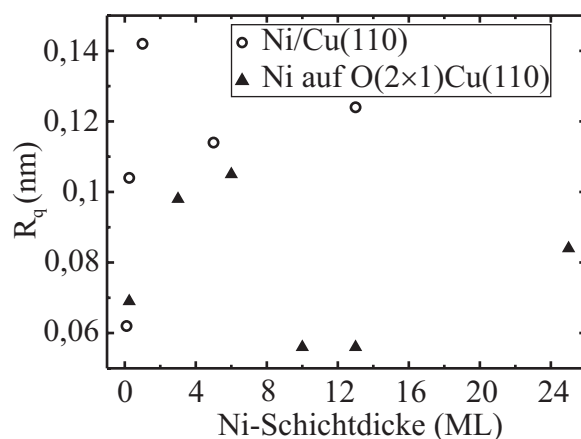


Abb. 6.4.: Mittlere quadratische Rauigkeit für Ni/Cu(110) (offene Kreise) und O/Ni/Cu(110) (geschlossene Dreiecke).

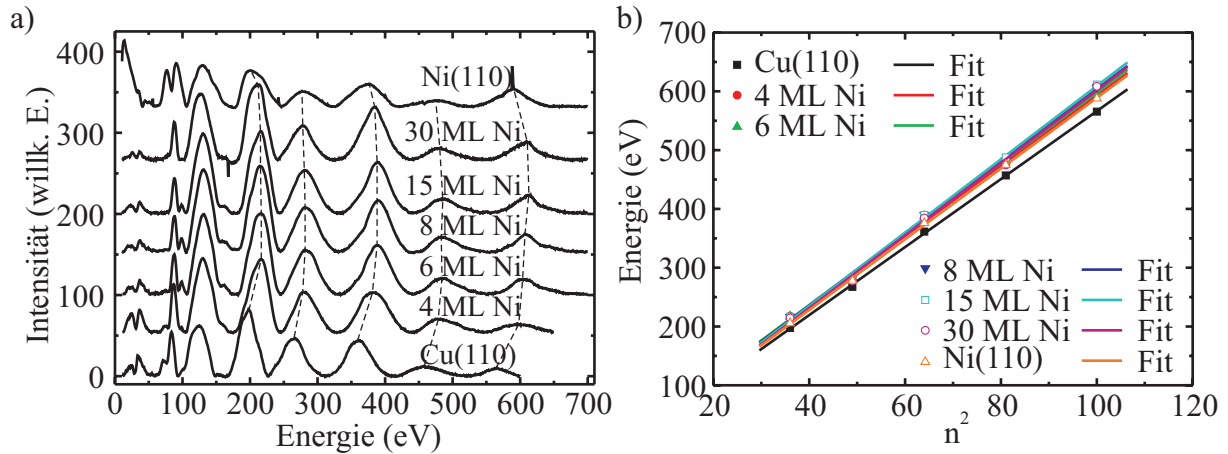


Abb. 6.5.: a) I/V-LEED-Spektren für Ni/Cu(110) mit verschiedenen Bedeckungsgraden, zusätzlich gezeigt sind je ein Spektrum für den Cu(110)- bzw. Ni(110)-Einkristall. b) Positionen der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 mit Ausgleichsgeraden.

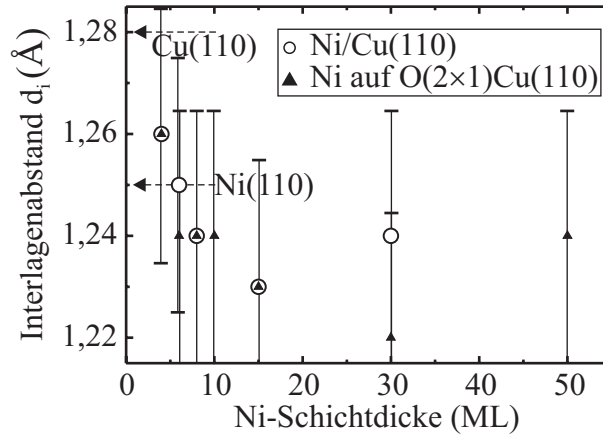


Abb. 6.6.: Interlagenabstand d_i für Ni/Cu(110) (offene Kreise), O/Ni/Cu(110) (geschlossene Dreiecke). Die Pfeile kennzeichnen d_i für einen Cu(110)- bzw. Ni(110)-Einkristall.

sung gegebenem Abstand in der Filmebene berechnet werden. Zur Berechnung der Fehlanpassung in der Ebene ist zu bemerken, daß – im Unterschied zur Cu(100)-Oberfläche – die Cu(110)-Oberfläche eine C_2 -Symmetrie besitzt. Daher existieren bei pseudomorphem Wachstum verschiedene Fehlanpassungen an das Cu(110)-Gitter entlang der $[100]$ - bzw. der $[1\bar{1}0]$ -Richtung, d. h., der Ni-Film bildet eine orthorhombische Elementarzelle aus. Berechnet man analog zu Kap. 5 unter Beachtung der unterschiedlichen Richtungen der Oberflächenelementarzelle die Fehlanpassungen in der Ebene, so ergibt sich für die $[100]$ -Richtung bezogen auf a_{Ni} :

$$\epsilon_{100} = \frac{(0,361 - 0,352)\text{nm}}{0,352\text{nm}} \approx 0,0255 = 2,55\%. \quad (6.1)$$

bzw. bezogen auf a_{Cu} ergibt sich für $\epsilon_{100} = 2,49\%$. Für die Fehlanpassung in der $[1\bar{1}0]$ -

Richtung bezogen auf $a_{Ni}^{1\bar{1}0}$ erhält man:

$$\epsilon_{1\bar{1}0} = \frac{(0,255 - 0,248)\text{nm}}{0,248\text{nm}} \approx 0,0282 = 2,82\%. \quad (6.2)$$

Analog erhält man bezogen auf $a_{Cu}^{1\bar{1}0}$ eine Fehlanpassung der Ni-Atome an das Cu von 2,75%. Da in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei einem fcc-Kristall die Atome am dichtesten gepackt sind, ist hier der Verzerrung durch eine Fehlanpassung größer. Auch bei der Berechnung der elastischen Energie E_{el} muß die anisotrope Verzerrung berücksichtigt werden. Ausgehend von Glg. (5.3) ergibt sich der Ausdruck [51]:

$$\begin{aligned} E_{el} &= \frac{1}{2}c_{11} [\epsilon_{11}^2 + \epsilon_{22}^2 + \epsilon_{33}^2] \\ &+ \frac{1}{2}c_{44} [2\epsilon_{12}^2 + 2\epsilon_{23}^2 + 2\epsilon_{31}^2] \\ &+ \frac{1}{2}c_{12} [2\epsilon_{11}\epsilon_{22} + 2\epsilon_{22}\epsilon_{33} + 2\epsilon_{33}\epsilon_{11}]. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Setzt man $\epsilon_{33} = \epsilon_{\perp}$ und differenziert nach dieser Variablen, folgt:

$$\frac{dE_{el}}{d\epsilon_{\perp}} = c_{11}\epsilon_{\perp} + c_{12} [\epsilon_{22} + \epsilon_{33}]. \quad (6.4)$$

Setzt man für $\epsilon_{11} = \epsilon_{100}$ und $\epsilon_{22} = \epsilon_{1\bar{1}0}$, so folgt durch Nullsetzen der Glg. (6.4) bei festen ϵ_{100} und $\epsilon_{1\bar{1}0}$:

$$\epsilon_{\perp} = -\frac{c_{12}}{c_{11}} [\epsilon_{1\bar{1}0} + \epsilon_{100}]. \quad (6.5)$$

Nach Einsetzen der Werte für c_{ij} [75] erhält man für ϵ_{\perp} bezogen auf a_{Ni} eine Verzerrung in der Senkrechten von ca. -3,4%. Umgerechnet in den Interlagenabstand ergibt dies für den Ni-Film einen theoretischen Wert von $d_i \approx 1,21 \text{ \AA}$. Vergleicht man dies mit dem mittels I/V-LEED für dickere Filme gemessenen Wert von $d_i = 1,23(5) \text{ \AA}$ (entspricht -1,2% Kontraktion), so kann festgestellt werden, daß der experimentelle Wert gerade zwischen dem theoretisch erwarteten und dem eines Ni(110)-Einkristalles ($d_i = 1,25(6) \text{ \AA}$) liegt. Aufgrund des Fehlers sowie des kleineren Absolutwertes des Interlagenabstandes im Falle der (110)-Oberfläche kann jedoch nicht eindeutig festgestellt werden, ob die gemessene Verzerrung tatsächlich kleiner als der theoretische Wert ist. Daß die Filme verspannt sind, ist festzuhalten, und wird im folgenden durch die magnetischen Untersuchungen bestätigt.

Magnetismus Wie zu Beginn des Kapitels erwähnt, wurde das Ni/Cu(110)-System ebenfalls mittels des polaren magneto-optischen Kerr-Effektes untersucht. Im Gegensatz zu der Arbeit von S. Z. Wu [11] konnte keine leichte senkrechte Magnetisierung im Schichtdickenbereich bis ca. 30 ML detektiert werden. In Abb. 6.7a) ist das Signal des polaren Kerr-Effektes für Ni/Cu(110) (grau) und O/Ni/Cu(110) (schwarz und Hysteresen) aufgetragen, letztere werden im Abschnitt 6.3 diskutiert. Es handelt sich um die remanente Magnetisierung für Ni/Cu(110),

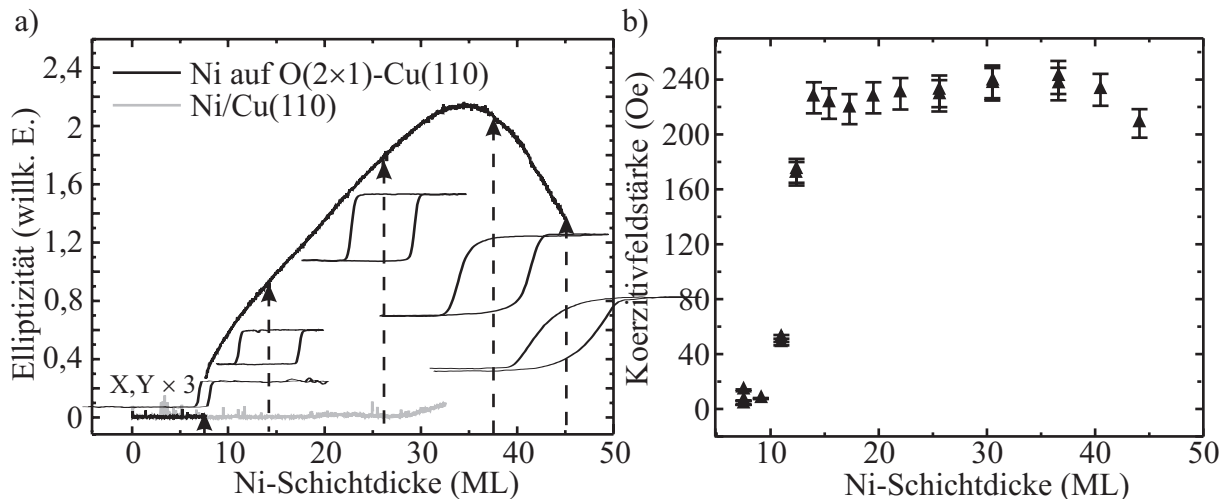


Abb. 6.7.: a) Elliptizität des magneto-optischen Kerr-Effekts für Ni/Cu(110) (grau), O/Ni/Cu(110) (schwarz), Ni/Cu(100) (offene Kreise). Für relevante Schichtdicken sind Hystereseschleifen für O/Ni/Cu(110) eingezeichnet (Pfeile). b) Koerzitivfeldstärke als Funktion der Ni-Schichtdicke für O/Ni/Cu(110).

welche innerhalb des Rauschens bis ca. 28 ML Ni keine senkrechte Magnetisierungsrichtung anzeigt. Desweiteren wurden Messungen im angelegten Feld von 400 Oe durchgeführt (nicht gezeigt). Im Bereich kleiner 28 ML entspricht die Form der Hysterese einer schweren Magnetisierungsrichtung, d. h., die leichte Richtung der Magnetisierung befindet sich in der Ebene. Oberhalb von 30 ML wurde eine remanente Magnetisierung im polaren Kerr-Effekt detektiert. Dies bedeutet zwar ein Auftreten einer senkrechten Magnetisierungskomponente, jedoch kein vollständiges Umklappen der Magnetisierung aus der Ebene heraus. Im Gegensatz zu Ni/Cu(100) geschieht das Auftreten der senkrechten Komponente nicht sprunghaft. Die senkrechte Magnetisierung wird vermutlich auch bei Ni/Cu(110) durch die Verspannung des Filmes bewirkt, die jedoch deutlich kleiner ist als bei Ni/Cu(100). Auf die Ursache der senkrechten Reorientierung wird nach der Beschreibung der auf dem voroxidierten Substrat gewachsenen Ni-Filme genauer eingegangen.

6.2. Einfluß des Sauerstoffes auf das Wachstum ultradünner Ni-Filme

In Kap. 4 wurde die Präparation der Cu(110)-Oberfläche beschrieben. Auf diese mit 120 L voroxidierte Oberfläche wurde Nickel aufgedampft und in verschiedenen Wachstumsstadien untersucht. Abbildung 6.8a) zeigt eine LEED-Aufnahme des mit Sauerstoff benetzten Kristalls. Es ist eindeutig die (2×1) -Rekonstruktion zu erkennen. Das dazugehörige STM-Bild ist in Abb. 4.12 dargestellt. Die Rekonstruktion führt zu einer an der Oberfläche neugebildeten Elementarzel-

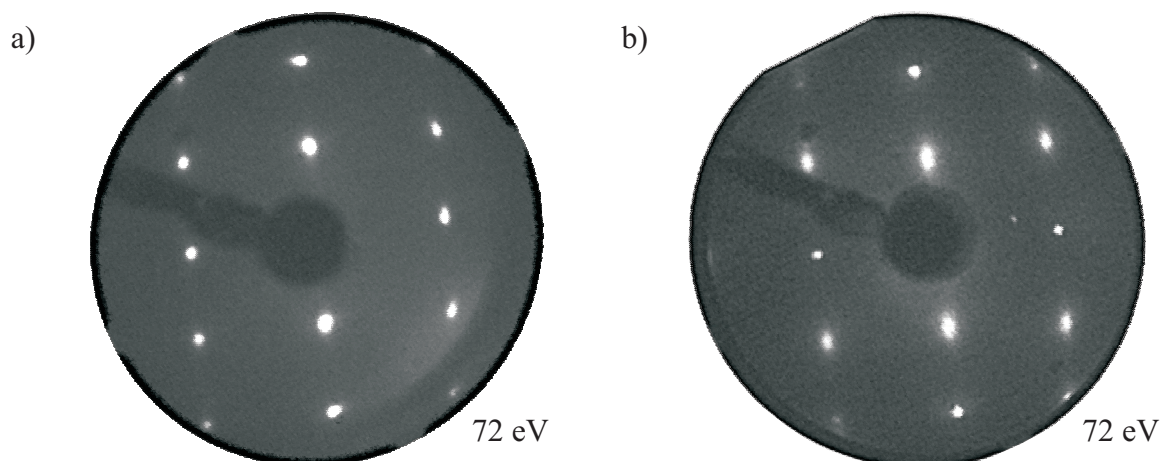


Abb. 6.8.: LEED-Bilder für a) $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$ und b) 3 ML Ni auf $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$.

le, deren Längen in Tab. 6.1 angegeben sind. Auch diese weist analog zu der Elementarzelle von $Cu(110)$ in der Ebene eine C_2 -Symmetrie auf, allerdings ist diese Zelle an der Oberfläche nun um 90° gedreht. In Abb. 6.8b) ist das LEED-Bild eines 3 ML dicken Ni-Filmes, der bei Raumtemperatur auf die rekonstruierte Oberfläche aufgebracht wurde, gezeigt. Auch hier ist klar eine (2×1) -Struktur zu erkennen. Diese bleibt auch für große Filmdicken erhalten. Eine solche (2×1) -Struktur ist ebenfalls für einen $Ni(110)$ -Volumenkristall bekannt [76], allerdings läßt sie sich in diesem Fall erst bei Dosierungen des Sauerstoffs bei ca. $300^\circ C$ erreichen. Es handelt sich dann wie auch bei $Cu(110)$ um eine sogenannte „added row“-Struktur [77]. In den STM-Aufnahmen der Abb. 6.9 sind verschiedene Bedeckungen der Ni-Filme auf der sauerstoffbenetzten Oberfläche dargestellt. Analog zu den Filmen auf der reinen Oberfläche ist auch hier eine Vorzugsrichtung im Wachstum zu erkennen, deren Ursprung in den unterschiedlichen Diffusionslängen [46], bedingt durch die rechteckige Elementarzelle der Oberfläche, zu suchen ist. Vergleicht man jedoch die STM-Bilder der Abb. 6.2 und 6.9, so stellt man fest, daß sich die Vorzugsrichtung, entlang derer die Inseln wachsen, verändert hat. Die Ni-Filme auf der reinen Oberfläche wachsen parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Dagegen richten sich die Inseln auf der voroxidierten Oberfläche entlang der $[001]$ -Richtung aus. Die Größenordnung der Rauigkeit R_q der Filme auf der voroxidierten Oberfläche (geschlossene Dreiecke) ist für den Dickenbereich bis ca. 6 ML die gleiche wie bei den Ni-Filmen auf der reinen $Cu(110)$ -Oberfläche (Abb. 6.4). Die Rauigkeit der Ni-Filme auf $Cu(110)$ nimmt mit zunehmender Filmdicke zu, wohingegen sich die der Ni-Filme auf $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$ verringert, was sich im deutlichen Unterschied von R_q für 6 ML und 10 ML (geschlossene Dreiecke) widerspiegelt. Dieses Verhalten der Ni-Filme auf der voroxidierten Oberfläche ist auch den STM-Bildern zu entnehmen und zeigt, daß sich der Wachstumsmodus von einem 3D- zu einem lagenweisen Wachstum verändert. Ein ähnliches Verhalten wurde für Co auf der voroxidierten $Cu(110)$ -Oberfläche festgestellt [59]. Weitergehende Untersuchungen mittels AES bestätigen dies (siehe Abb. 6.10). Dort

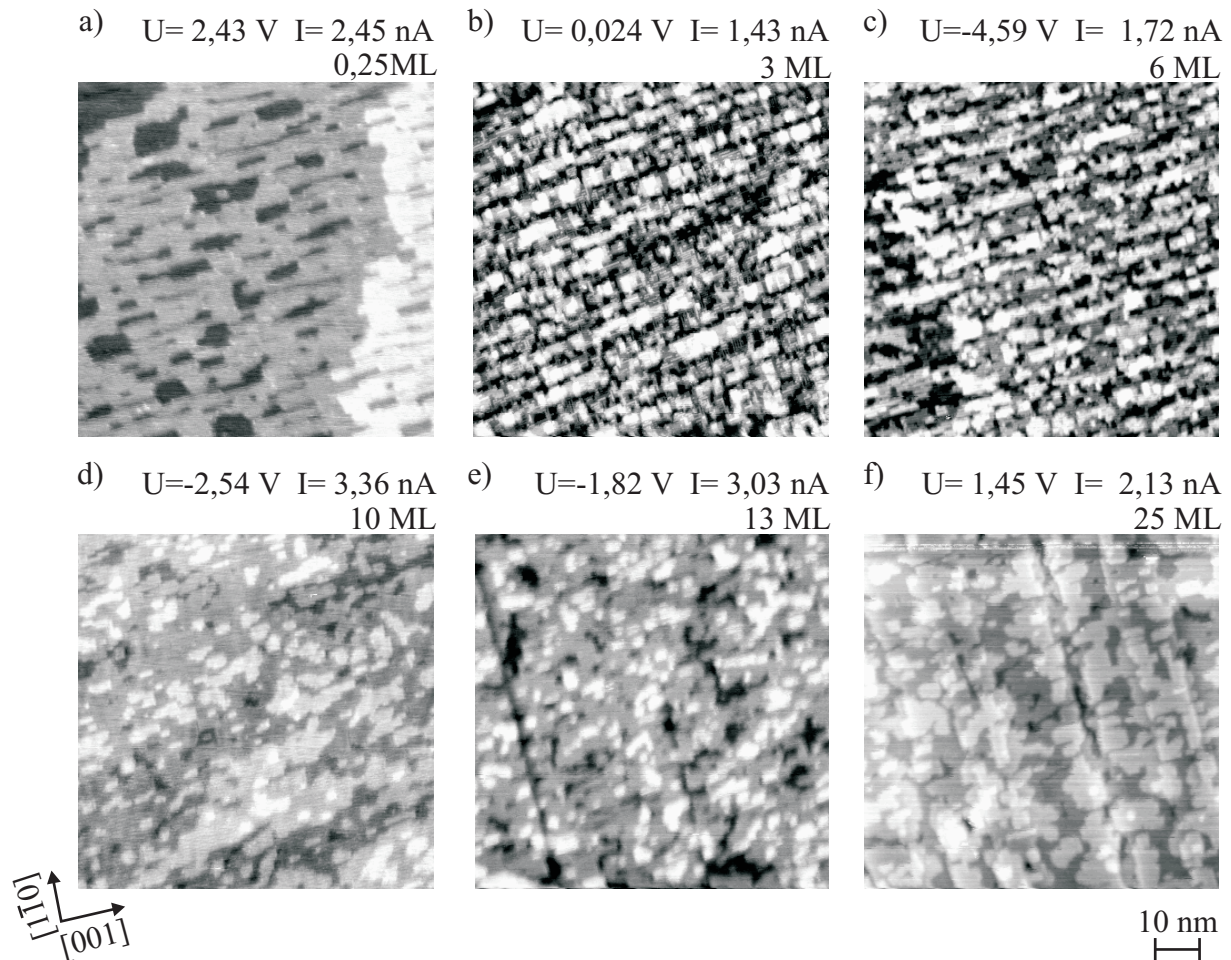


Abb. 6.9.: STM-Bilder für Ni auf $O(2 \times 1)$ -Cu(110): a) 0,25 ML, b) 3 ML, c) 6 ML, d) 10 ML, e) 13 ML, f) 25 ML. Man erkennt die Vorzugsrichtung des Wachstums parallel zur $[100]$ -Richtung und den Übergang von einem 3D-Wachstum hin zu einem 2D-Wachstum [73].

sind beispielhaft AES-Spektren sowohl für verschiedene Ni-Bedeckungen auf der $O(2 \times 1)$ -Cu(110) als auch für die voroxidierte Cu(110)-Oberfläche aufgetragen (Abb. 6.10a)). Die 4 dargestellten Spektren zeigen zunächst den mit 120 L voroxidierten Cu(110)-Kristall (1) mit dem KLL-Übergang für O und den Kupfer-LMM-Übergängen. Durch das Aufdampfen der Ni-Filme wird die Intensität der Kupferübergänge geringer und die des Nickels nehmen zu. Dies wird besonders an den sich nicht überlagernden Übergängen von Cu bei 920 eV bzw. Ni bei 716 eV deutlich. Die Intensität für Sauerstoff ist in etwa gleichbleibend. Für die Auswertung der Schichtdicke (siehe Kap. 3) und des Verhältnisses von Sauerstoff zu Kupfer als Funktion der Ni-Schichtdicke (siehe Abb. 6.10b)) wurde der Cu_{920} -Peak verwendet. In Abb. 6.10b) kann man folgendes erkennen: Zum einen zeigen die beiden durchgezogenen Linien einen Knick bei ca. 6-7 ML, der dem Übergang vom 3D- zum 2D-Wachstum zugeordnet werden kann. Durch das zunächst sehr raue Wachstum ist die Oberfläche nicht vollständig mit Nickel bedeckt. Erst bei dem Übergang schließt sich der Film, wodurch das Signal des Kupfers sehr schnell ge-

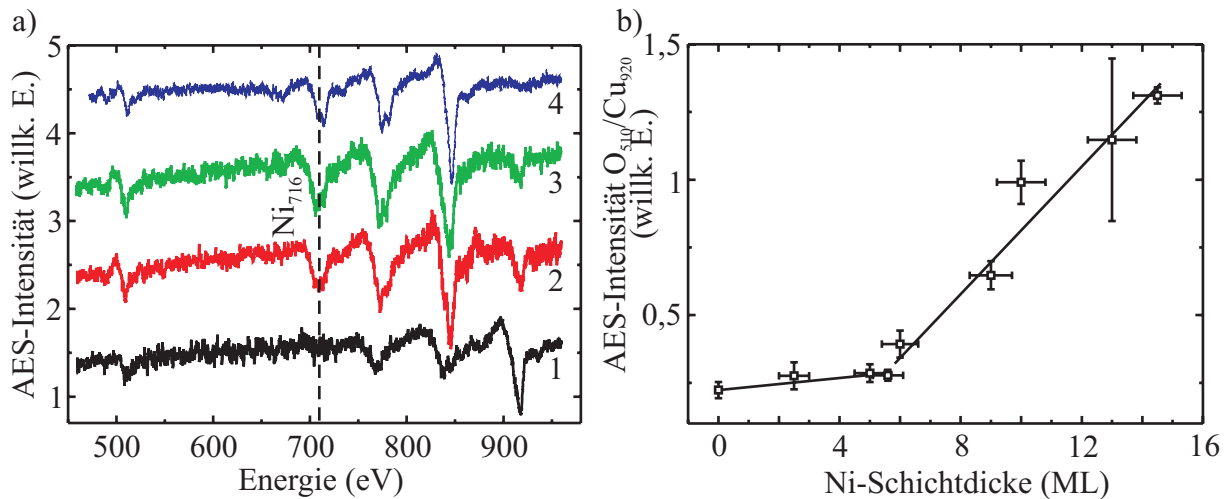


Abb. 6.10.: a) AES-Spektren für Ni auf $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$. b) Das Verhältnis von O_{510}/Cu_{920} als Funktion der Ni-Schichtdicke [73].

dämpft wird, was in der größeren Steigung des Peak-Verhältnisses zum Ausdruck kommt. Zum anderen kann der Abb. 6.10 entnommen werden, daß mit zunehmender Ni-Schichtdicke die AES-Intensität des Sauerstoffsignals gegenüber der des Kupfers bei 920 eV immer mehr ansteigt. Da kein Sauerstoff von außen zugeführt wird, bedeutet dies, daß sich der Sauerstoff von der Cu-Oberfläche ablöst und während der Präparation des Ni-Filmes aufschwimmt. Dadurch bleibt die AES-Intensität des Sauerstoffs gleich, diejenige des Cu nimmt ab, so daß sich das Verhältnis zugunsten des Sauerstoffsignals erhöht.

Die I/V-LEED-Messungen des spekularen Reflexes, die in Abb. 6.11 gezeigt sind, verdeutlichen, daß die vertikale Verspannung der Filme – ähnlich zu denjenigen auf der reinen $Cu(110)$ -Oberfläche – klein ist. Ein Vergleich mit den Interlagenabständen für die Ni-Filme auf der reinen $Cu(110)$ -Oberfläche (Abb. 6.6) zeigt nur geringe Unterschiede, die im Fehler der Meßtechnik liegen. Dies bedeutet, daß der mittlere Lagenabstand d_i von Nickel auf der reinen $Cu(110)$ -Oberfläche (offene Kreise) und auf der $O(2 \times 1)$ rekonstruierten $Cu(110)$ -Oberfläche (geschlossene Dreiecke) innerhalb des Fehlers gleich ist.

Die STM-Bilder (Abb. 6.9) zeigen, daß ab dem Übergang vom 3D-Wachstum hin zu dem lagenweisen Wachstum der Einbau von Versetzungen parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung stattfindet. Dies wird besonders bei größeren Ni-Schichtdicken deutlich. Die Versetzungen weisen auf eine lokale Relaxation des Filmes hin. Aufgrund der I/V-LEED-Ergebnisse, die in diesem Dickenbereich keine systematische Veränderung des Interlagenabstandes zeigen, muß davon ausgegangen werden, daß die Versetzungen jedoch nicht zu einer globalen Entspannung des Filmes führen. Dies wird insbesondere durch die weiter unten diskutierten MOKE-Resultate unterstützt.

Angemerkt sei noch, daß auch Untersuchungen des Systems mittels NEXAFS und XMCD durchgeführt wurden [33]. Analog zum System Ni/ $Cu(100)$ konnte durch NEXAFS-Messungen an der Sauerstoff K -Kante festgestellt werden, daß auch der Sauerstoff auf $Cu(110)$ mit dem

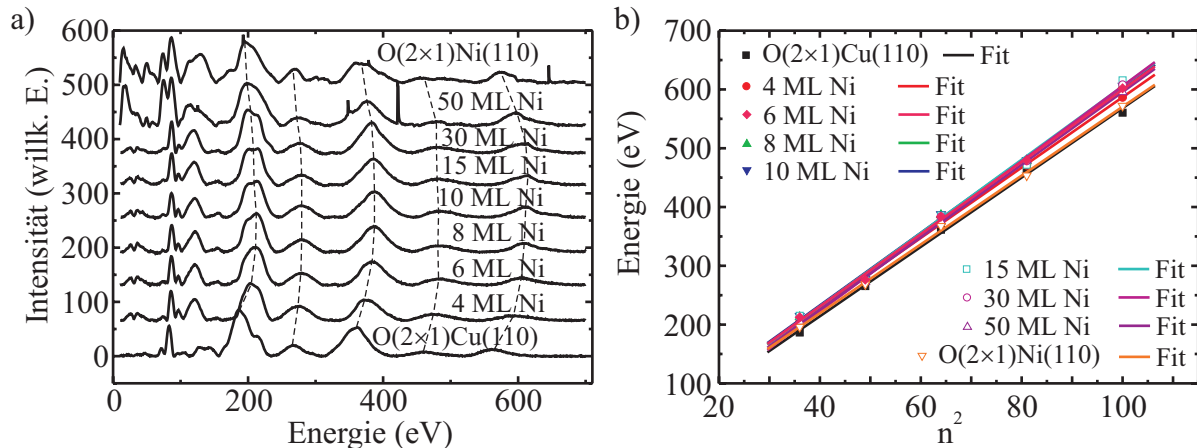


Abb. 6.11.: a) I/V-LEED-Spektren für O/Ni/Cu(110) bei verschiedenen Bedeckungsgraden, zusätzlich gezeigt sind je ein Spektrum für den O/Cu(110)- bzw. O/Ni(110)-Einkristall. b) Positionen der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 mit Ausgleichsgeraden.

Nickel eine kovalente Bindung eingeht, die jedoch nicht der Volumen-NiO-Bindung entspricht [33].

6.3. Einfluß des Sauerstoffes auf den Magnetismus ultradünner Ni-Filme

In dem Abschnitt 6.2 ist hinsichtlich des Wachstums festgestellt worden, daß dieses durch die Verwendung von Sauerstoff beeinflusst wird. Im folgenden soll nun der Einfluß auf den Magnetismus diskutiert werden. Dazu sind in Abb. 6.7a) die Daten der Elliptizität als Funktion der Ni-Bedeckung für Nickel auf der reinen den auf der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche gegenübergestellt. Es handelt sich jeweils um das remanente magnetische Signal. Es ist ersichtlich, daß die Kurve für Nickel auf dem voroxidierten Cu(110)-Kristall (schwarz) bis zu einer Dicke von ca. 7 ML kein Signal bezüglich der senkrechten Richtung zeigt und ab ca. 7 ML zunächst sprunghaft und in der Folge bis ca. 35 ML linear ansteigt. Danach fällt der Wert wieder ab. Aus diesem Verhalten kann man entnehmen, daß es zwei Reorientierungen der Magnetisierung \vec{M} abhängig von der Schichtdicke gibt. Da mittels des polaren Kerr-Effektes die senkrechte Richtung/Komponente gemessen wird, lassen sich aus dem Kurvenverhalten, in Verbindung mit den weiter unten beschriebenen Hysteresen und [78], folgende Aussagen treffen:

1. ab etwa 7 ML steht die Magnetisierung bei RT senkrecht zur Ebene (leichte Richtung).
2. ab ca. 35 ML dreht sich die Magnetisierung in die Ebene zurück.

Vergleicht man die Kurve von Nickel auf der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche (Abb. 6.7a)) mit den gemessenen Daten auf dem Cu(100)-Kristall (siehe Abb. 5.14), so stellt man fest, daß in

beiden Fällen bei kleinen Schichtdicken eine Reorientierung der Magnetisierung, die zunächst parallel zur Ebene orientiert ist, hin zu einer senkrechten Magnetisierungsrichtung stattfindet. Der Unterschied liegt jedoch in der Reorientierung bei höheren Schichtdicken, bei der sich die Magnetisierung wieder in die Ebene dreht. Im Falle von Nickel auf der $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$ findet diese bei deutlich kleineren Schichtdicken statt. Die gestrichelten Pfeile der Abbildung deuten die Schichtdicken an, bei denen Hysteresekurven von Nickel auf der voroxidierten $Cu(110)$ -Oberfläche gemessen wurden (Abb. 6.7a)). Aus den Hysteresen geht hervor, daß bis zu einer Ni-Dicke von etwa 35 ML, sowohl die Intensität des Signals als auch das Koerzitivfeld der Hysteresen zunimmt. Desweiteren ergibt sich aus der Form der Hysteresen bis zu dieser Dicke, daß die leichte Richtung der Magnetisierung senkrecht zur Ebene steht (Remanenz = Sättigung). Die lineare Zunahme der Intensität deutet auf homogen magnetisierte Filme hin, und kommt durch die Proportionalität des Kerr-Effektes zur Filmdicke zustande. Der Anstieg im Koerzitivfeld läßt sich durch die mit STM ab Filmdicken von ca. 10 ML beobachteten Versetzungen erklären (siehe Abschnitt 6.2), die als Pinningzentren der magnetischen Domänenwände wirken [4]. Durch ihren Einbau wird die Ummagnetisierung erschwert. Der sprunghafte Anstieg in der Koerzitivfeldstärke ist in Abb. 6.7b) deutlich sichtbar [78]. Der Einbau der Versetzungen, der gemäß den I/V-LEED-Messungen nicht zu einer globalen Entspannung des Filmes führt, wohl aber den Ummagnetisierungsprozeß beeinflusst, läßt sich also sehr empfindlich durch den Anstieg des Koerzitivfeldes detektieren.

Betrachtet man die Abb. 6.7a) und Abb. 6.7b) ab einer Schichtdicke von 35 ML, so sieht man, daß das Signal für Nickel auf $O(2 \times 1)$ - $Cu(110)$ wieder abnimmt. Die dazugehörigen Hystereseschleifen sind gekippt, d. h., die Magnetisierung dreht sich wieder in die Ebene. Dies entspricht dem weiter oben beschriebenen Verhalten der Remanenz.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß Sauerstoff als Surfactant auf der $Cu(110)$ -Oberfläche eine senkrechte leichte Richtung der Magnetisierung für Filmdicken im Bereich von etwa 7 bis ca. 40 ML bewirkt. Wie in Abschnitt 6.1 gezeigt, tritt eine solche senkrechte Komponente ohne Sauerstoff erst bei großen Filmdicken von etwa 30 ML auf und ist zudem nur schwach ausgeprägt. Verglichen mit der $Cu(100)$ -Oberfläche findet für Ni auf der voroxidierten $Cu(110)$ -Oberfläche jedoch die Reorientierung zurück in die Filmebene bereits bei 35 ML statt, d. h., der Bereich der senkrechten Magnetisierung ist deutlich kleiner. Da außer den bereits vorgestellten polaren MOKE-Messungen keine weiteren magnetischen Untersuchungen bzgl. der $Cu(110)$ -Oberfläche bekannt sind, soll im folgenden ein Modell vorgeschlagen werden, mit dem sich das Verhalten der Ni/ $Cu(110)$ -Filme mit und ohne Sauerstoff als Wachstumshilfe plausibel machen läßt. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß nur durch eine quantitative Bestimmung der magnetischen Anisotropien eine endgültige Klärung des Verhaltens möglich ist. Das Modell lehnt sich an den im Zusammenhang mit Ni auf der voroxidierten $Cu(100)$ -Oberfläche diskutierten Mechanismus an (siehe Kap. 5). Die freie Energiedichte (Glg. (2.23)) unter Berücksichtigung

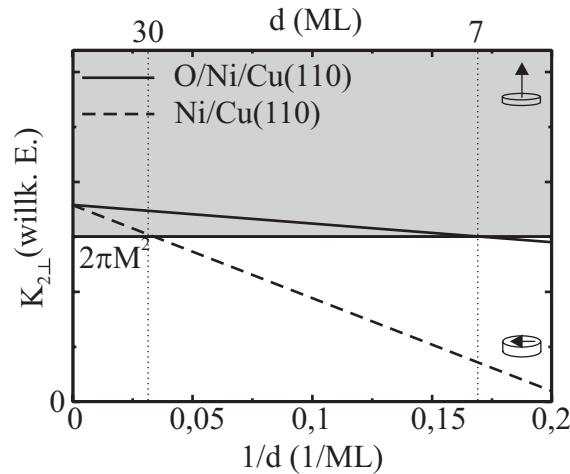


Abb. 6.12.: Schematische Darstellung der uniaxialen Anisotropie von Ni auf Cu(110) bzw. der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche als Funktion von $1/d$. Die horizontale Linie entspricht der Formanisotropie und separiert zwischen einer Magnetisierung parallel zur Ebene (weißer Bereich) bzw. einem senkrecht zur Ebene (grauer Bereich). Der Schnittpunkt für Ni/Cu(110) (gestrichelte Linie) respektive für Ni auf der voroxidierten Oberfläche (durchgezogene Linie) mit der Formanisotropie kennzeichnet den Übergang von der Magnetisierungsrichtung in der Ebene hin zu einer senkrecht zur Ebene.

von Form-, Volumen- sowie Grenzflächenanisotropie lautet:

$$F = \left(2\pi M^2 - \left[K_{2\perp}^V + \frac{K_{2\perp}^S}{d} \right] \right) \cos^2 \theta. \quad (6.6)$$

θ ist der Winkel gemessen gegen die Filmmnormale. Wie bereits in Kap. 5 beschrieben, wird die kritische Dicke d_c bei welcher die Reorientierung der leichten Magnetisierungsrichtung stattfindet, durch die Bilanz der verschiedenen Anisotropiebeiträge bewirkt. Die Formanisotropie $2\pi M^2$ ist stets größer Null und favorisiert daher eine Magnetisierung in der Filmebene. Sie kann daher nie direkt zu einer senkrechten Magnetisierung führen. Da im Bereich dünner Ni-Dicken, bei denen die Oberflächenanisotropie dominiert, sowohl für Ni auf der reinen als auch auf der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche die leichte Richtung der Magnetisierung in der Ebene liegt (siehe MOKE-Messungen), ist zu vermuten, daß $K_{2\perp}^S$ analog zu Ni/Cu(100) kleiner Null ist. Damit bleibt als Ursache für das Auftreten einer senkrechten Magnetisierung und damit der Reorientierung nur ein positiver $K_{2\perp}^V$ -Beitrag, hervorgerufen durch die Verspannung des Ni-Filmes. Unterstützt wird diese Annahme auch durch die Tatsache, daß die leichte Richtung für einen unverspannten Ni-Volumenkristall die $\langle 111 \rangle$ -Richtung ist. Da diese Richtung bei einer (110)-Orientierung in der Filmebene liegt, würde eine Ni-Volumenstruktur der Filme notgedrungen zu einer Magnetisierung in der Filmebene führen. Eine senkrechte Magnetisierung kann, bei negativen $K_{2\perp}^S$, jedoch nur auftreten, wenn $K_{2\perp}^V > 2\pi M^2$ ist, wie dies auch für das System Ni/Cu(100) (Kap. 5) gefunden wurde. Die I/V-LEED-Messungen legen nun allerdings die Vermutung nahe, daß die Verspannung des Filmes und damit $K_{2\perp}^V$ deutlich kleiner ist als

im Falle von Ni/Cu(100), und damit der Unterschied zwischen Volumen- und Formanisotropie für Ni/Cu(110) bzw. Ni auf der voroxidierten Cu(110) geringer ausfällt als für die Systeme in Kap. 5. Unter diesen Voraussetzungen ergäbe sich für $K_{2\perp}$ als Funktion von $1/d$ der in Abb. 6.12 schematisch gezeigte Verlauf. Für Ni/Cu(110) ist $K_{2\perp}^V$ (Achsenabschnitt) nur etwas größer als die Formanisotropie (horizontale Linie) mit dem negativen $K_{2\perp}^S$ (negative Steigung, gestrichelte Linie) erhält man dann die beobachtete senkrechte Magnetisierung bei ca. 30 ML. Die Tatsache, daß im Experiment kein sprunghaftes Auftreten der senkrechten Komponente beobachtet wird, könnte daran liegen, daß sich bei den großen Filmdicken die Verspannung im Film und damit $K_{2\perp}^V$ abzubauen beginnt. Der Sauerstoff könnte nun analog zu Ni/Cu(100) eine Reduktion von $K_{2\perp}^S$ bewirken. In diesem Fall würde aufgrund des kleinen $K_{2\perp}^V$ -Wertes die gleiche Änderung von $K_{2\perp}^S$ wie bei Ni/Cu(100) eine viel stärkere Verschiebung von d_c hervorrufen, wie dies durch die durchgezogene Linie in Abb. 6.12 verdeutlicht wird. Eine Veränderung von $K_{2\perp}^S$ wird auch dadurch nahegelegt, daß die I/V-LEED-Messungen keine signifikanten Unterschiede im Interlagenabstand und damit in der Verspannung der Filme zeigen, die mit und ohne Sauerstoff gewachsen wurden.

Es sei auch darauf hingewiesen, daß eine Dosierung von Sauerstoff *nach* der Präparation des Ni-Filmes nicht die gleiche Wirkung besitzt, wie die in dieser Arbeit vorgestellte Surfactant-Methode [79]. Dies deutet darauf hin, daß neben der Modifikation der Oberflächenanisotropie aufgrund elektronischer Bandstruktureffekte des Sauerstoffs an der Oberfläche auch die durch das veränderte Wachstum beeinflusste Oberflächenmorphologie zur Verschiebung von d_c beiträgt.

7. Grenzflächen in Zweifachlagen

In den folgenden Abschnitten werden die drei Systeme O/Cu/Ni/Cu(100), Ni/Cu/Ni/Cu(100) und V/Fe/Cu(100) vorrangig seitens ihrer strukturellen Eigenschaften vorgestellt. Die erzielten Resultate lieferten einen wichtigen Beitrag zur Interpretation der Ergebnisse in den Arbeiten [13] und [14], in denen die Systeme mittels magnetischer Methoden untersucht wurden. Wegen der unterschiedlichen strukturellen Eigenschaften der Systeme, insbesondere im Fall von Fe/Cu(100), konnte die im Rahmen dieser Arbeit aufgebaute I/V-LEED-Meßapparatur getestet werden. Desweiteren lieferte die I/V-LEED-Methode einen Beweis für eine veränderte vertikale Distanz der Atomlagen der Cu-Zwischenschicht in dem System Ni/Cu/Ni/Cu(100) gegenüber einem Cu(100)-Einkristall.

Im folgenden sind die Schichtdicken in ML als tiefgestellte Zahlen angegeben. Entsprechend der Anzahl der 3d-Metallschichten werden die Systeme als Zweifach- bzw. Dreifachlagen bezeichnet.

7.1. Das System O/Cu/Ni/Cu(100)

Hier werden Ni-Filme auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche präpariert und im Anschluß daran mit einer Cu-Deckschicht versehen. Aus Kap. 5 ist bekannt, daß diese Ni-Filme mittels Sauerstoff-Surfactant in ihren strukturellen Eigenschaften verbessert werden und insbesondere ein verbessertes lagenweises Wachstum aufweisen. Desweiteren wurde festgestellt, daß sich der Sauerstoff fortwährend an der Oberfläche des Filmes befindet. Zur Verwendung dieser Präparationsmethode zur Herstellung von Multilagen liegt es nahe, zunächst einmal eine Zweifachlage bestehend aus einer ferromagnetischen (FM) und einer nicht-ferromagnetischen Schicht, die sog. Zwischenschicht, zu untersuchen. In diesem Fall wurde Cu als Zwischenschichtmaterial genutzt, wie auch bei den Untersuchungen in [7,80]. Es erheben sich die Fragen:

1. Was passiert mit dem Sauerstoff während der Präparation der Zweifachlagen?
2. Werden die magnetischen Eigenschaften von Nickel beeinflusst?

Zur Beantwortung dieser Fragen wurden Experimente mittels MEED, AES und LEED durchgeführt. Die MEED-Kurven der Abb. 7.1a) zeigen einen 6,8 ML dicken Ni-Film auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche. Es sind eindeutig Oszillationen zu erkennen, die auf

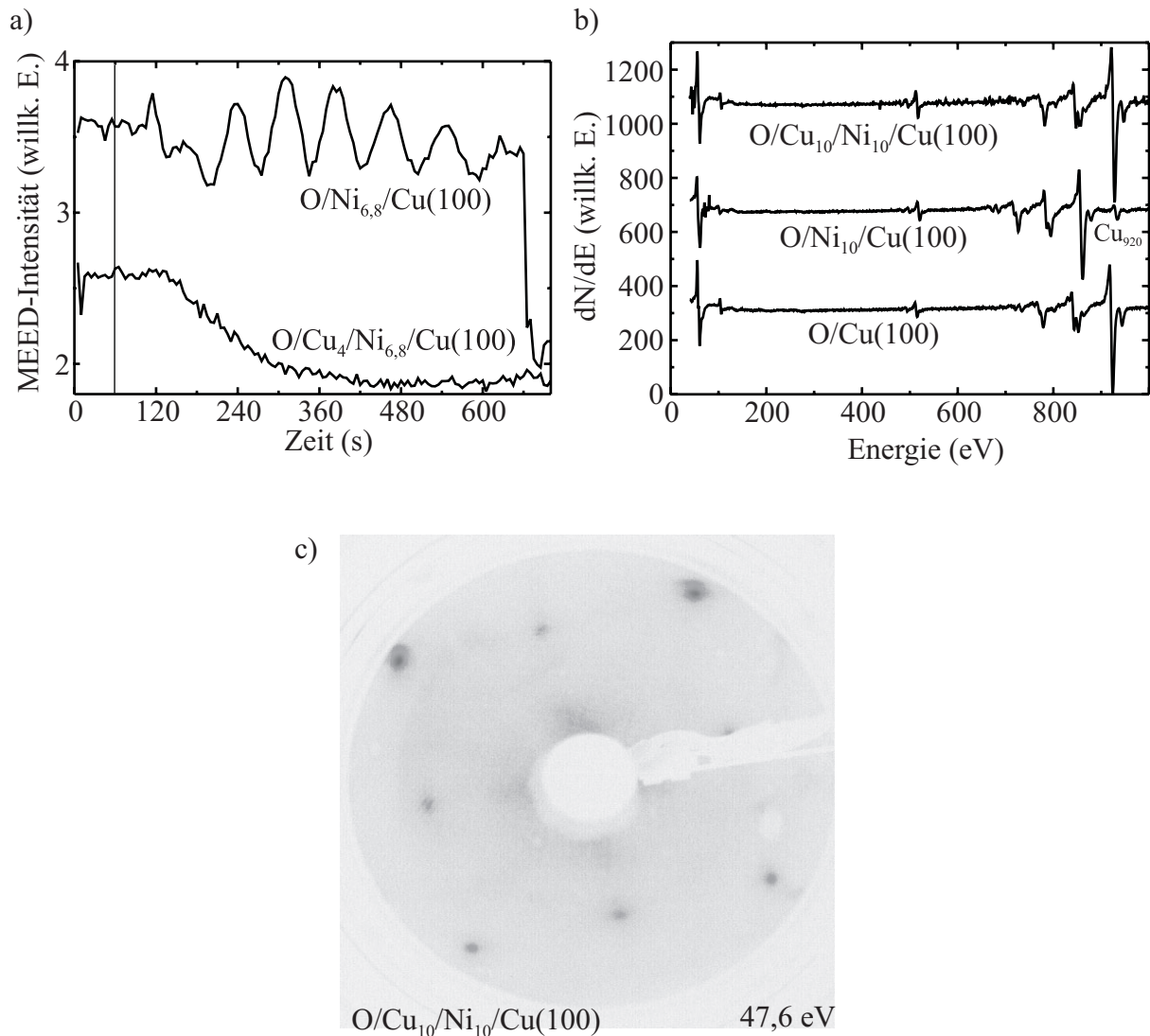


Abb. 7.1.: a) MEED-Intensität als Funktion der Aufdampfzeit für 6,8 ML Ni auf O/Cu(100) und 4 ML Cu auf dem zuvor präparierten Ni-Film. Die vertikale Linie markiert den Beginn der Präparation. b) AES-Spektren für O/Cu(100), O/Ni₁₀/Cu(100) und O/Cu₁₀/Ni₁₀/Cu(100). c) LEED-Bild von O/Cu₁₀/Ni₁₀/Cu(100).

ein lagenweises Wachstum hindeuten (siehe Kap. 5). Die zweite MEED-Kurve, die während der Präparation der Cu-Schicht aufgenommen wurde, zeigt einen exponentiellen Abfall. Dies bedeutet, daß der Cu-Film auf dem mittels Surfactant gewachsenen Ni-Film dreidimensional aufwächst. Um die Frage zu klären, an welcher Stelle der Mehrschichtsysteme sich der Sauerstoff befindet, wurden AES-Experimente durchgeführt (siehe Abb. 7.1b)). Zu sehen ist ein Spektrum der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche, welches die AES-Peaks für Cu und O bei den entsprechenden Energien wiedergibt. Durch das Aufbringen von 10 ML Nickel nehmen die Intensitäten für Cu ab, die des Ni bilden sich aus und diejenige von Sauerstoff bleibt erhalten (Aufschwimmen des O, siehe Kap. 5). Auf diesen Ni-Film wurden nun 10 ML Cu auf-

gebracht. Wie das entsprechende Spektrum in Abb. 7.1b) zeigt, sind die LMM-Übergänge von Ni, insbesondere der bei 716 eV, wieder zurückgegangen, die des Cu haben wieder an Intensität gewonnen. Besonders anschaulich ist dies bei 920 eV. Eine Studie des KLL-Überganges des Sauerstoffs zeigt, daß sich der Sauerstoff – analog zum Aufschwimmen auf dem Ni-Film – von diesem ablöst und während der Präparation der Cu-Schicht auf diese aufschwimmt bzw. sich innerhalb der obersten Lage befindet. Anhand der MEED-Kurven und der AES-Spektren kann geschlossen werden, daß der Sauerstoff bezüglich der Cu-Schicht nicht als Surfactant im Sinne von lagenweisem Wachstum wirkt. Dennoch bildet die Sauerstofflage auf dem Cu-Film eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur aus, wie die Abb. 7.1c) zeigt, d. h., die Elementarzelle des Sauerstoffs ist um 45° zu der der Cu-Zwischenschicht verdreht. Dieses Verhalten steht in Übereinstimmung mit der Literatur für das System Cu auf einer voroxidierten Cu(100)-Oberfläche [56].

Weiterführende Experimente wurden mittels FMR durchgeführt. Dabei zeigte sich, daß ein 6 ML dicker Ni-Film auf der voroxidierten Oberfläche, dessen leichte Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Ebene steht [10], nach der Präparation der Cu-Schicht eine leichte Richtung der Magnetisierung in der Ebene besitzt [7]. Dies ist ein weiterer Nachweis für das Aufschwimmen des Sauerstoffs, da eine Reorientierung der Magnetisierungsrichtung für das System Cu/Ni/Cu(100) erst bei ca. 8 ML Nickel auftritt [7]. Durch das Ablösen des Sauerstoffs vom Nickel verhält sich dieses bezüglich der leichten Richtung wie ein mit Cu bedeckter Ni-Film. Davon ausgehend, daß der Sauerstoff auch bei der Präparation eines weiteren Ni-Filmes auf diesen aufschwimmt, würde sich das Verfahren auch dazu eignen, Ni-Mehrfachlagen mit denen durch den Sauerstoff bewirkten Vorteilen herzustellen [81,82].

7.2. Das System Cu/Ni/Cu(100)

Das System Cu/Ni/Cu/Ni/Cu(100) wurde in [7] vorwiegend mithilfe magnetischer Methoden aber auch mittels STM untersucht. Die Strukturuntersuchungen bezogen sich auf die Morphologie der Cu-Zwischenschicht. Bisher wurde angenommen, daß Cu in seiner Volumenstruktur aufwächst, da der Ni-Film sich dem Cu-Substrat anpaßt [49] (siehe auch Kap. 5) und die Cu-Zwischenschicht somit den Cu-Gitterabstand in der Ebene „angeboten“ bekommt. In [13] sind die Werte der Interlagenaustauschkopplung (IEC) aus Experiment und *ab initio* Theorie des oben genannten Systems gegenübergestellt. Trotz Abweichungen in der absoluten Stärke der Kopplung kann das oszillatorische Verhalten der Kopplung als Funktion der Zwischenschichtdicke durch die Theorie reproduziert werden, das in [2] vorhergesagt wurde. Die im folgenden vorgestellten I/V-LEED-Messungen lieferten hier einen wesentlichen Beitrag zu einer besseren Übereinstimmung, was im folgenden erläutert wird.

In Abb. 7.2a) ist ein Hartkugelmodell des Systems $\text{Ni}_8/\text{Cu}_6/\text{Ni}_9/\text{Cu}(100)$ zu sehen. Die Präparation dieser Dreifachschicht verlief analog zu der in Referenz [64]: Zunächst wurde der

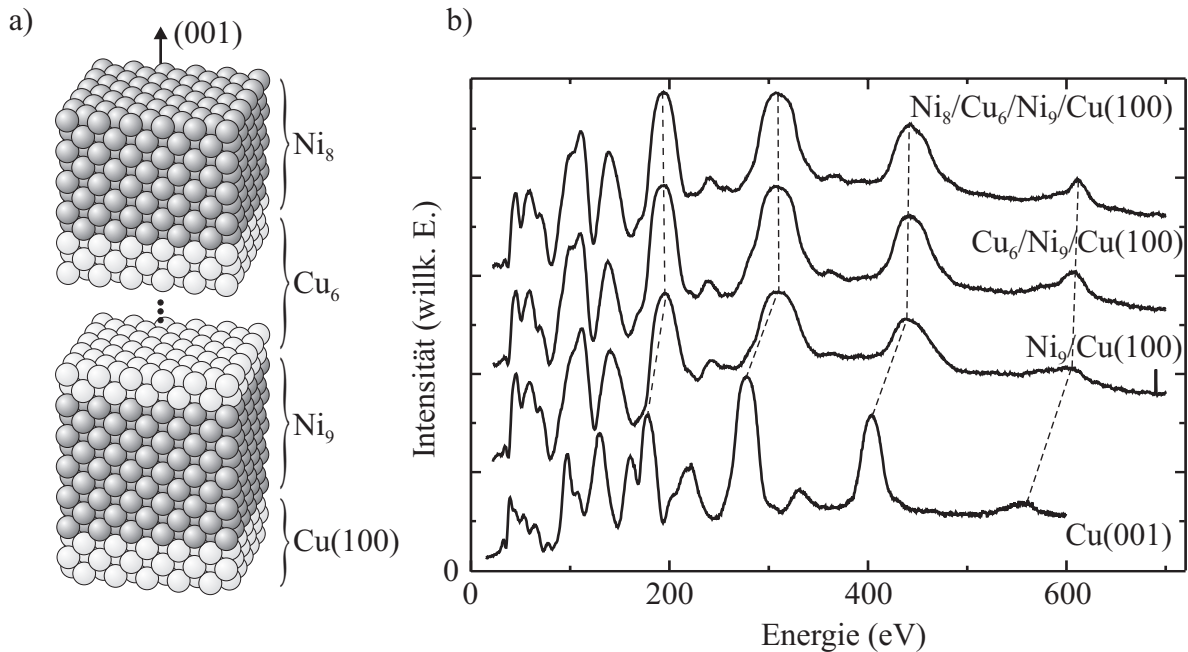


Abb. 7.2.: a) Hartkugelmodell und b) I/V-LEED-Spektren des Systems Ni₈/Cu₆/Ni₉/Cu(100). Die gestrichelten Linien heben die Bragg-Peak-Positionen hervor.

untere Ni-Film auf das Substrat aufgebracht und bis 420 K getempert (siehe Anhang B). In der Folge wurden die Cu-Schicht bzw. die Ni-Schicht jeweils aufgedampft und anschließend getempert. Dabei wurde nach jedem Präparationsschritt ein I/V-LEED-Spektrum aufgenommen, siehe Abb. 7.2b). Bei den I/V-LEED-Spektren handelt es sich jeweils um den spekularen Reflex in Abhängigkeit der Energie. Zum besseren Vergleich ist das Spektrum für einen Cu(100)-Einkristall eingetragen. Die Positionen der Bragg-Peaks des Spektrums des 9 ML Ni-Filmes sind gegenüber denen des Cu(100)-Kristalles zu höheren Energien verschoben. Dies bedeutet, daß der Interlagenabstand des Ni-Filmes kleiner ist als der des Cu(100)-Kristalles (siehe Kap. 3 und Kap. 5). Diese Verschiebung ist mittels der gestrichelten Linien hervorgehoben. Die Positionen der Bragg-Peaks des Spektrums der 6 ML Cu-Zwischenschicht, die auf den Ni-Film aufgebracht wurde, sind die gleichen wie beim Ni-Film. Daraus läßt sich folgern, daß der Cu-Film nicht wie zuvor angenommen in seiner Volumenstruktur aufwächst, sondern vielmehr den Lagenabstand des Ni-Filmes darunter besitzt, d. h. verzerrt ist. Der zweite 8 ML Ni-Film zeigt ebenfalls die zuvor festgestellte Verzerrung. Das Ergebnis dieser Messungen ist also die vertikale Distanz der Cu-Zwischenschicht, die nicht dem Volumenabstand von Cu(100) entspricht. Mit diesem Resultat konnte tatsächlich eine größere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen der IEC erzielt werden.

Um zu beweisen, daß der Grund für die Verzerrung der Cu-Filmes schlichtweg dessen Dicke ist, wurde ein zweites Experiment durchgeführt, welches in Abb. 7.3 dargestellt ist. In diesem Fall wurde ein 9 ML Ni-Film auf das Substrat gebracht und getempert. Das ent-

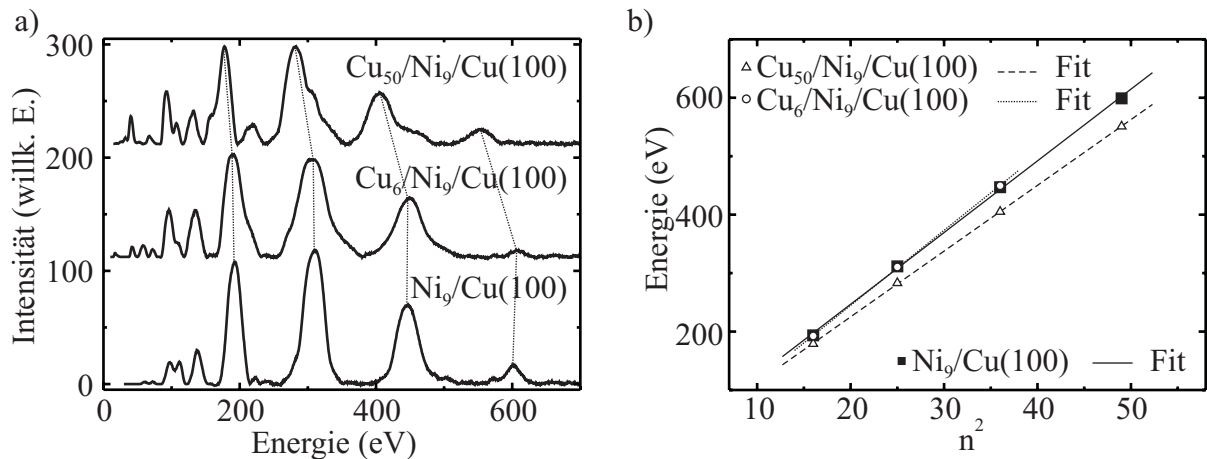


Abb. 7.3.: a) I/V-LEED-Spektren, b) Position der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 mit Ausgleichsgeraden.

sprechende Spektrum des spekularen Reflexes als Funktion der Energie ist in Abb. 7.3a) zu sehen. Anschließend wurden wiederum 6 ML Cu auf den Ni-Film aufgedampft und ebenfalls getempert. In einem weiteren Schritt wurden 44 ML Cu aufgedampft und getempert, so daß sich idealerweise auf dem Ni-Film 50 ML Cu befinden. Die Spektren für Cu₆/Ni₉/Cu(100) und Cu₅₀/Ni₉/Cu(100) sind ebenfalls in Abb. 7.3a) enthalten. Die Positionen der Bragg-Peaks oberhalb von 200 eV sind mittels der gepunkteten Linien hervorgehoben. Sie verdeutlichen, daß im Falle von Ni₉/Cu(100) und Cu₆/Ni₉/Cu(100) die Positionen der Bragg-Peaks in etwa gleich sind. Die Bragg-Peaks von Cu₅₀/Ni₉/Cu(100) jedoch sind gegenüber denen von Ni₉/Cu(100) und Cu₆/Ni₉/Cu(100) zu kleineren Energien verschoben. Dies zeigt einen größeren Interlagenabstand an. Die Auswertung der Bragg-Peaks als Funktion von n^2 (Abb. 7.3b)) liefert bei einem Kippwinkel von $\theta = 3^\circ$ folgende Werte für d_i :

- Ni₉/Cu(100) $\Rightarrow d_i = 1,75(5) \text{ \AA}$
- Cu₆/Ni₉/Cu(100) $\Rightarrow d_i = 1,77(5) \text{ \AA}$
- Cu₅₀/Ni₉/Cu(100) $\Rightarrow d_i = 1,83(6) \text{ \AA}$

So erhält man für die Cu₅₀/Ni₉/Cu(100)-Dreifachlage im Rahmen des Fehlers den Interlagenabstand eines Cu(100)-Kristalles ($d_i = 1,83(6) \text{ \AA}$).

Zusammenfassend liegt im Bereich dünner Cu-Zwischenschichtdicken eine tetragonale Verzerrung im Cu vor, so daß sich die Zwischenschicht nicht wie ein Cu-Volumenkristall verhält. Wie die theoretischen Rechnungen in [13] gezeigt haben, ist die Kenntnis der geometrischen Struktur der Zwischenschicht zur Berechnung der IEC in Dreifachlagen von grundlegender Bedeutung.

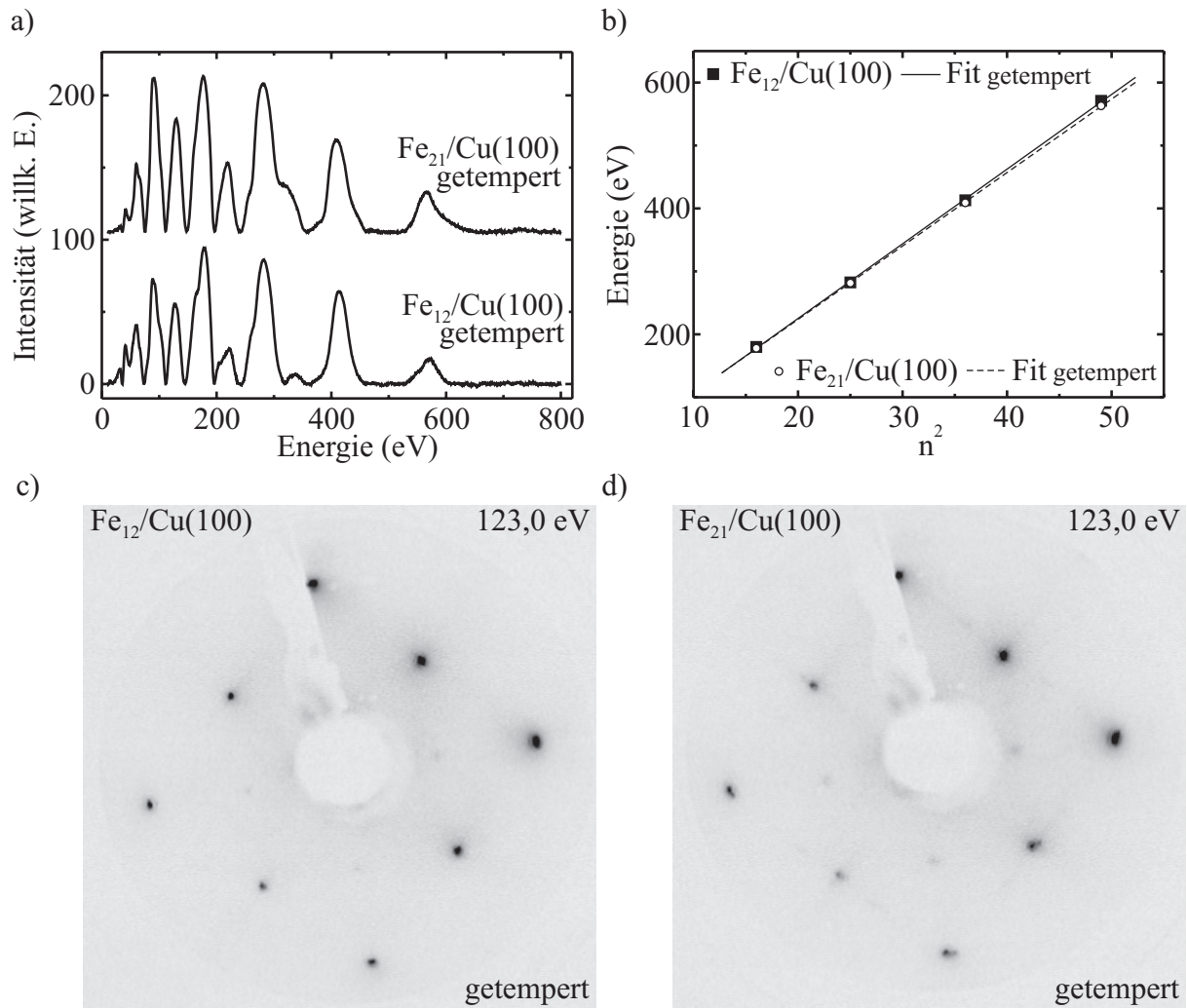


Abb. 7.4.: a) I/V-LEED für 12 ML und 21 ML Fe/Cu(100). b) Bragg-Peak-Position als Funktion von n^2 mit den entsprechenden Ausgleichsgeraden. c) LEED-Bild von Fe₁₂/Cu(100) und d) LEED-Bild von Fe₂₁/Cu(100). Beide Fe-Filme wurden bis 450 K getempert.

7.3. Das System V/Fe/Cu(100)

In diesem Abschnitt werden die strukturellen Untersuchungen für V-Filme auf einem Fe-Puffer, der auf einen Cu(100)-Einkristall aufgetragen wurde, vorgestellt. Ziel war es durch entsprechende Präparationsbedingungen eine möglichst glatte Oberfläche des Puffers zu erreichen. Zugleich sollte der Fe-Film die strukturellen Eigenschaften eines bcc-Fe-Volumenkristalls mit (110)-Orientierung besitzen, gekennzeichnet durch einen Interlagenabstand d_i von 2,03 Å.

Aus der Literatur ist bekannt, daß 12 ML Fe auf einem Cu(100)-Substrat eine bcc-Struktur mit (110)-Orientierung ausbilden [83]. Diese Experimente fanden jedoch an Fe-Filmen statt, die nicht getempert wurden. Durch das Tempern bis 450 K (siehe Anhang B) kann nun die Struktur der Filme beeinflusst werden. Wie in Abb. 7.4 zu sehen ist, passen sich 12 ML Fe dem Cu(100)-Substrat an. Der Einfluß des Temporns wurde bislang in der Literatur nicht untersucht.

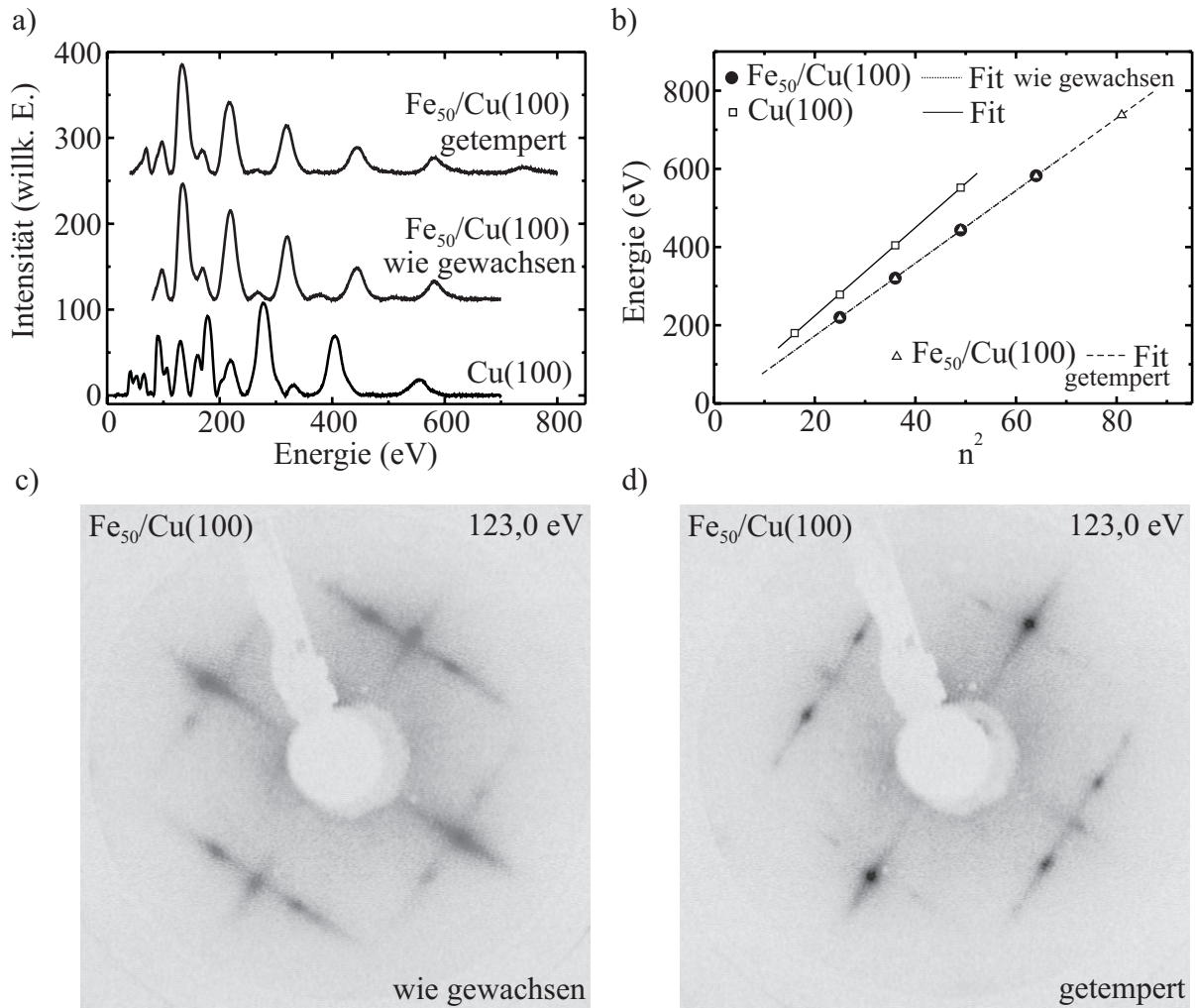


Abb. 7.5.: a) I/V-LEED für Cu(100), 50 ML Fe/Cu(100) wie gewachsen und bis 450 K getempert. b) Bragg-Peak-Position als Funktion von n^2 mit den entsprechenden Ausgleichsgeraden. c) LEED-Bild für Fe₅₀/Cu(100) wie gewachsen und d) LEED-Bild für Fe₅₀/Cu(100) getempert.

Abbildung 7.4a) zeigt die Intensitäten des spekularen Reflexes als Funktion der Energie für 12 ML und 21 ML Fe auf Cu(100). Im Gegensatz zu den Ergebnissen in [83] besitzt dieser 12 ML Film aufgrund des Temperns eine fcc-Struktur. Dies erkennt man sowohl anhand der C_4 -Symmetrie des LEED-Bildes (Abb. 7.4c)) als auch am Interlagenabstand d_i . Aus dem Anstieg der Ausgleichsgeraden in Abb. 7.4b), ergibt sich für diesen Film $d_i = 1,78(5)$ Å. fcc-Eisen besitzt die Gitterkonstante $a_{Fe}^{fcc} = 3,59$ Å [84]. Der experimentell ermittelte Wert für d_i stimmt daher im Fehler sehr gut mit dem theoretischen Abstand von $d_i = a_{Fe}^{fcc}/2 = 1,795$ Å überein. Der Interlagenabstand des 21 ML Fe-Films beträgt $d_i = 1,79(6)$ Å, so daß auch dessen gemittelter Interlagenabstand dem von fcc-Fe(100) entspricht. Erst ab einer Dicke von etwa 50 ML Fe auf Cu(100) zeigt sich eine klar definierte bcc(110)-Orientierung des Fe-Filmes. Abbildung 7.5 zeigt die I/V-LEED- und LEED-Experimente an 50 ML Fe auf Cu(100). Zu sehen sind in Abb. 7.5a) die Spektren des spekularen Reflexes als Funktion der Energie für 50 ML Fe auf

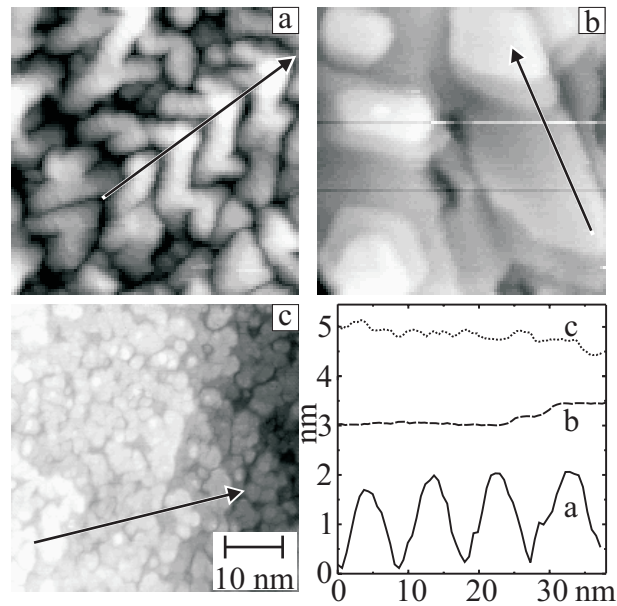


Abb. 7.6.: STM-Aufnahmen von a) Fe₅₀/Cu(100), b) Fe₅₀/Cu(100) 450 K getempert, c) V₃/Fe₅₀/Cu(100). d) Profile von a), b), c).

Cu(100) im ungetemperten Zustand sowie für 50 ML Fe, die im weiteren Verlauf 15 min bei 450 K getempert wurden. Zum Vergleich ist ein Cu(100)-Spektrum eingezeichnet. Die zur Auswertung des Interlagenabstandes genutzten Bragg-Peaks befinden sich oberhalb von 200 eV. Allein aus den Spektren des Fe-Filmes erkennt man bereits eine Verschiebung der Bragg-Peaks gegenüber denen von Cu. Um jedoch eine adäquate Berechnung des Interlagenabstandes durchführen zu können, ist es nötig, eine Vorstellung der Struktur der Elementarzelle zu besitzen. Wie bereits erwähnt, bildet Fe für höhere Schichtdicken eine bcc(110)-Struktur aus [83]. In Abb. 7.5c) haben sich neben den Hauptreflexen weitere herausgebildet. Diese können einer Domänenstruktur zugeordnet werden, deren einzelne Elemente auf der fcc(100)-Unterlage um einen bestimmten Winkel zueinander verdreht aufwachsen [85], wodurch sich 4 strukturelle Domänen ausbilden, die diese Symmetrie um den Hauptspot erklären. Bei der Berechnung von d_i erhält man für 50 ML Fe einen Abstand von 2,01(6) Å und für den getemperten Film 2,02(5) Å. Dies stimmt hervorragend mit dem theoretischen erwarteten Wert von 2,029 Å überein; dabei ist die Gitterkonstante für bcc-Fe $a_{Fe}^{bcc} = 2,87$ Å [17]. Desweiteren zeigt ein Vergleich der beiden LEED-Bilder, daß durch das Tempern die Schärfe der Reflexe zunimmt, d. h., die Ordnung des Fe-Filmes erhöht sich. Dies ist auch aus den STM-Aufnahmen der Abb. 7.6 ersichtlich. Abbildung 7.6a) zeigt den 50 ML Fe-Film, wie er auf die Cu-Oberfläche aufgedampft wurde. Man erkennt zum einen eine große Rauigkeit und zum anderen Strukturen die im Winkel zueinander angeordnet sind. Diese werden in den LEED-Bildern der Abb. 7.5 durch die Extrasspots wiedergegeben. Durch das Tempern wird der Fe-Film glatter, wie die Abb. 7.6b) zeigt. Dies wird auch an den Profilen der Linescans a) und b) in Abb. 7.6d) deutlich. Obwohl ein solcher

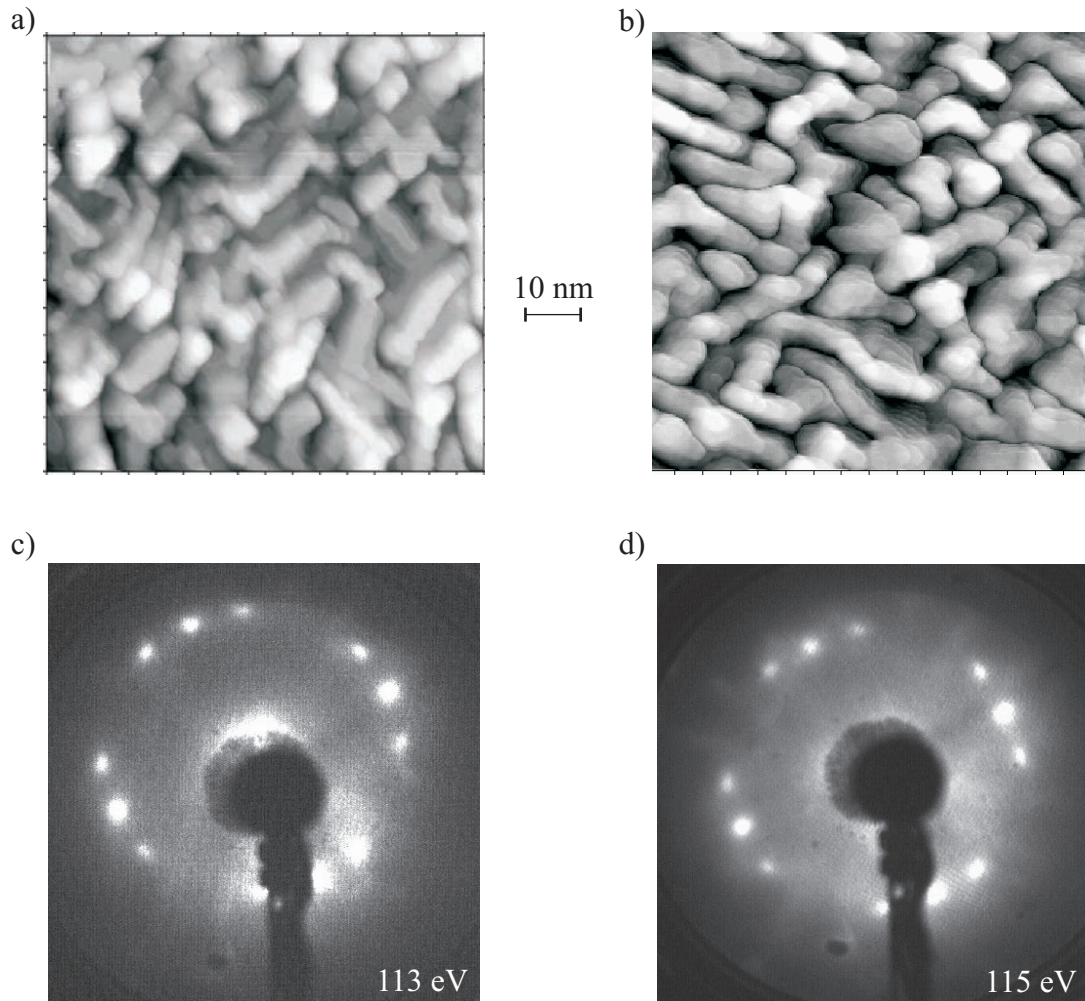


Abb. 7.7.: STM-Aufnahmen von a) $V_{20}/Cu(100)$ wie gewachsen und b) $V_{20}/Cu(100)$ 450 K getempert. LEED-Bilder von c) $V_{20}/Cu(100)$ wie gewachsen und d) $V_{20}/Cu(100)$ getempert bei 450 K.

Film nicht exakt die Eigenschaften eines Fe-Einkristalles besitzt, ist er dennoch aus verhältnismäßig glatten bcc(110)-Domänen zusammengesetzt, die als reproduzierbare Unterlage der V-Filme dienen können.

Bringt man nun einen V-Film auf den getemperten Fe_{50} -Puffer, so hat der Film die Möglichkeit pseudomorph auf dem Fe zu wachsen. Aus Abb. 7.6c) ist zu erkennen, daß 3 ML V auf $Fe_{50}/Cu(100)$ lagenweise aufwachsen. Das Profil c) weist die gleiche Amplitude der Korrugation auf wie die Fe-Unterlage (Profil b)). Es läßt sich außerdem erkennen, daß die V-Inseln lateral deutlich kleiner sind als die glatten Bereich der Fe-Unterlage. Durch die hier vorgestellte Präparation der V-Filme ergibt sich eine drastische Verringerung der Filmrauigkeit verglichen mit Fe/V-Multilagen, die durch Sputterdeposition hergestellt wurden [14]. Durch die hohen Aufdampfraten beim Sputterprozeß entsteht Grenzflächenrauigkeit und – durch die höheren Aufdampftemperaturen – Interdiffusion. Mittels der hier vorgestellten Methode konnte nun die Rauigkeit verringert werden und durch Präparation des V bei verschiedenen Temperaturen der

Einfluß von Interdiffusion auf die induzierten V-Momente an der Grenzfläche gezielt untersucht werden, wie dies in [14] geschehen ist.

V/Cu(100) Abschließend soll das Wachstum eines V-Puffers auf Cu(100) beschrieben werden. Dieses System wurde untersucht, um die Möglichkeit des Fe-Wachstums auf V-Pufferschichten zu studieren. Nach [85] wächst V bereits ab einer Dicke von 2 ML auf einem Cu(100)-Kristall in der bcc(110)-Struktur. Dies konnte anhand eines 20 ML V-Filmes auf diesem Substrat bestätigt werden, wie Abb. 7.7 zeigt. Auch hier erkennt man zusätzliche Beugungsreflexe aufgrund der bereits weiter oben angesprochenen bcc(110)-Domänen. Die STM-Aufnahmen zeigen diese strukturellen Domänen, in denen das V angeordnet ist. Die Rauigkeit, welche schon bedingt durch die Filmdicke von 20 ML sehr hoch ist, nimmt durch das Tempern im Gegensatz zum Fe noch weiter zu.

Zusammenfassend läßt sich schließen, daß ein V-Puffer auf einem Cu(100)-Substrat aus struktureller Sicht durch die oben benannten Forderungen ungeeignet zur Präparation dünner Fe-Filme ist.

8. Zusammenfassung

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung einer Methode, um mittels Surfactant unterstützter Präparation ultradünner Ni-Filme gezielt das Wachstum *und* die magnetischen Eigenschaften dieser Filme zu beeinflussen. Als Prototypsysteme wurden Ni-Filme auf der Cu(100)- und Cu(110)-Oberfläche verwendet. Das erstgenannte System zeigt ohne Einfluß von Sauerstoff eine Spinreorientierung bei etwa 10-11 ML Ni-Dicke und ist in der Literatur eingehend untersucht worden. Dadurch ist ein direkter Vergleich von reinen und auf der voroxidierten Oberfläche gewachsenen Filmen möglich. Das System Ni/Cu(110) ist bislang kaum Gegenstand von Untersuchungen gewesen. Dies liegt zum einen an den ungünstigen Wachstumseigenschaften und zum anderen an der Tatsache, daß keine senkrechte Magnetisierung auftritt. Aus diesem Grund wurde das Surfactant basierte Wachstum auch an diesem System angewendet, um die Eignung der Methode unter diesen Voraussetzungen zu testen und zu untersuchen, ob grundlegende Veränderungen der Filmeigenschaften erreicht werden können.

Die bereits in der Einleitung aufgeworfenen Fragen (i) inwieweit der Sauerstoff die Struktur und den Magnetismus beeinflusst und (ii) wo der Sauerstoff lokalisiert ist, wurden in der Arbeit eingehend studiert. Die Ergebnisse für die verschiedenen Systeme im einzelnen sind:

Ni/Cu(100) Für dieses System konnte gezeigt werden, daß der Sauerstoff für Ni-Filme auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche als Surfactant wirkt und verglichen mit Ni/Cu(100) ein länger anhaltendes lagenweises Wachstum bewirkt. Damit einhergehend wird die Rauigkeit der Ni-Filme, die mittels Surfactant gewachsen wurden, drastisch reduziert. Die strukturellen Auswertungen der Filme auf der voroxidierten Cu(100)-Oberfläche zeigen ebenfalls, daß sich bedingt durch den Sauerstoff die Inselkanten parallel zu den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ausrichten und somit gegenüber denen von Ni/Cu(100) um 45° gedreht sind. Die Wirkung des Sauerstoffs als Surfactant äußert sich in einem Aufschwimmen während des Wachstums des Ni-Films. Dies konnte mittels MEED, LEED, AES und NEXAFS nachgewiesen werden. Desweiteren zeigten NEXAFS-Experimente, daß sich zwischen Ni und O eine kovalente Bindung ausbildet, die jedoch nicht NiO-volumenartig ist. Trotz dieser chemischen Bindung befindet sich der Sauerstoff stets auf dem Ni-Film. Die Ursache dieses Verhaltens wurde durch theoretische Rechnungen von T. S. Rahman und Mitarbeiter geklärt. Demnach ist der Grund die langreichweitige elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Sauerstoffatomen.

Neben den strukturelle Veränderungen wirkte sich der Sauerstoff auch auf die magneti-

schen Eigenschaften aus. So konnte mittels polarem Kerr-Effekt und weiteren Arbeiten mittels FMR und XMCD in der Arbeitsgruppe gezeigt werden, welchen Einfluß die aufschwimmende Sauerstofflage auf das Nickel besitzt. Für Nickel auf der reinen Cu(100)-Oberfläche findet eine Spinreorientierung von einer leichten Magnetisierungsrichtung in der Ebene hin zu einer ab ca. 10 ML senkrecht zur Filmebene stehenden Magnetisierung statt [7]. Durch den Sauerstoff wird diese Spinreorientierung um etwa 5 ML zu kleineren Filmdicken verschoben [10], wodurch der Filmdickenbereich mit senkrechter leichter Richtung ausgedehnt werden kann.

Durch das Aufbringen einer Cu-Deckschicht auf O/Ni/Cu(100) wird abhängig von der Filmdicke die leichte Richtung der Magnetisierung beeinflusst. Auch hier diffundiert der Sauerstoff während der Präparation der Cu-Deckschicht an die Oberfläche und bildet eine $c(2 \times 2)$ -Überstruktur. Dieses Verhalten ermöglicht die Verwendung der durch den Sauerstoff induzierten positiven Einflüsse auch bei der Präparation von Ni/Cu-Mehrfachlagen.

Ni/Cu(110) Im Falle von O/Ni/Cu(110) – analog zu O/Ni/Cu(100) – werden sowohl Struktur als auch Magnetismus gleichzeitig beeinflusst. Auf struktureller Ebene werden die Ni-Inseln mit C_2 -Symmetrie auf der reinen Cu(110)-Oberfläche durch die Präparation des Substrates mit Sauerstoff um 90° gedreht. Zudem stellt sich ab einer bestimmten Schichtdicke ein lagenweises Wachstum ein, welches auf der reinen Cu(110)-Oberfläche nicht beobachtet wird. Gleichzeitig mit dem Übergang von einem 3D- zu einem 2D-Wachstum findet eine Spinreorientierung statt, so daß der Ni-Film nun eine leichte Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Ebene besitzt. Ni/Cu(110) besitzt keine solche senkrechte leichte Richtung. Im Vergleich zu den Systemen O/Ni/Cu(100) und Ni/Cu(100), bei denen der senkrecht magnetisierte Filmdickenbereich um 5 ML Nickel zu kleineren Filmdicken verschoben wird, führt der Sauerstoff auf der Cu(110)-Oberfläche überhaupt erst zu dem Entstehen einer eindeutig definierten senkrechten Orientierung der leichten Richtung.

Vergleicht man die Systeme aus Kap. 5 und Kap. 6 miteinander, so folgt, daß der Sauerstoff das System O/Ni/Cu(110) am stärksten hinsichtlich der Struktur und des Magnetismus verändert. Dies könnte insbesondere dazu genutzt werden, mittels dieser Methode magnetisch homogene Filme auch auf der im Zusammenhang mit Ni-Filmen bislang kaum untersuchten Cu(110)-Oberfläche zu präparieren.

Aufbau der I/V-LEED-Apparatur Um das innerhalb dieser Arbeit aufgebaute I/V-LEED-Meßsystem zu testen, wurden Untersuchungen an Grenzschichten von Prototyp-Mehrfachlagensystemen durchgeführt. Diese lieferten u. a. wichtige strukturelle Details für die Interpretationen von magnetischen Resultaten der Systeme Ni/Cu/Ni/Cu(100) und V/Fe/Cu(100).

Mehrfachlagensysteme Die Strukturanalysen mittels I/V-LEED für Ni/Cu/Ni/Cu(100) zeigten, daß der Cu-Spacer nicht in seiner Volumenkonfiguration aufwächst, obwohl ihm durch

die Verspannung des Ni-Filmes in der Ebene seine Volumengitterkonstante angeboten wird. Er wächst vielmehr verspannt mit einem verglichen mit dem Volumen vertikal reduzierten Interlagenabstand. Die Berücksichtigung der Verspannung in theoretischen Rechnung der Interlagenkopplung zwischen den beiden Ni-Filmen führt zu einer besseren Übereinstimmung mit dem Experiment.

Die Analysen mittels STM und I/V-LEED seitens des Systems V/Fe/Cu(100) zeigen, daß ein V-Film lagenweise auf einem Fe-Puffer aufwächst, der auf einem Cu(100)-Substrat aufgedampft und getempert wurde. Der Puffer besteht aus genügend großen flachen Bereichen und weist eine bcc(110)-Orientierung auf [12]. Diese Eigenschaften sind nötig für das lagenweise Aufwachsen des V-Filmes und bilden die Grundlage für die an diesem System durchgeführten XMCD-Messungen. Durch die Präparation konnte der Einfluß von Rauigkeit an der V/Fe-Grenzfläche stark reduziert werden, wodurch ein Studium der induzierten V-Momente ermöglicht wurde.

A. Anhang: Ausdrücke der freien Energiedichte

Gleichung (2.16) beschreibt die intrinsischen Anisotropien für ein kubisches System ohne jede Verspannung. Aus dem Kapitel 2 geht zudem hervor, daß durch eine Verzerrung eines kubischen Systems Anisotropieenergien zweiter Ordnung entstehen. Dies wird im folgenden näher erläutert, indem ausgehend von einem System mit geringen Symmetrieeigenschaften hin zu einem mit einer hohen Symmetrie die Ausdrücke der freien Energiedichte aufgestellt werden. Das System geringster Symmetrie besitzt in diesem Fall eine *orthorhombische* Elementarzelle, wie im Falle der verspannten Ni-Filme auf Cu(110). Bei orthorhombischer Symmetrie stehen alle Achsen senkrecht aufeinander, sind jedoch unterschiedlich lang. Daher liegt in der Ebene eine C_2 -Symmetrie vor. Zunächst werden die K_2 -Terme besprochen, gefolgt von den K_4 -Termen. Terme höherer Ordnung werden nicht berücksichtigt.

K_2 -Terme Für den ersten aufgrund der Symmetrie zulässigen Anisotropiebeitrag (K_2 -Term) eines Systems mit senkrecht aufeinander stehenden Achsen gilt:

$$F_{K_2} = c_1 \alpha_1^2 + c_2 \alpha_2^2 + c_3 \alpha_3^2. \quad (\text{A.1})$$

Die α_i sind die Richtungskosinus, c_i sind Konstanten. In Polarkoordinaten gilt $\alpha_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\alpha_2 = \sin \theta \sin \phi$ und $\alpha_3 = \cos \theta$. Setzt man dies in die Glg. (A.1) ein, dann ergibt sich:

$$F_{K_2} = c_1 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + c_2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + c_3 \cos^2 \theta. \quad (\text{A.2})$$

Für orthorhombische Systeme sind alle c_i unterschiedlich. Man definiert üblicherweise: $c_1 := K_{2\parallel}^1$, $c_2 := K_{2\parallel}^2$ und $c_3 := -K_{2\perp}$, wobei die K_2^i die Anisotropiekonstanten sind.

$$F_{K_2} = \sin^2 \theta (K_{2\parallel}^1 \cos^2 \phi + K_{2\parallel}^2 \sin^2 \phi) - K_{2\perp} \cos^2 \theta. \quad (\text{A.3})$$

Mittels der Beziehung $\cos^2 \phi = 1/2 (1 - \cos 2\phi)$ bzw. $\sin^2 \phi = 1/2 (1 + \cos 2\phi)$ sieht man, daß obiger Ausdruck wie erwartet zu einer C_2 -Symmetrie in der Ebene führt. Erhöht man nun die Symmetrie in der Ebene zu einer C_4 -Symmetrie, wodurch $c_1 = c_2$ und damit $K_{2\parallel}^1 = K_{2\parallel}^2 := K_{2\parallel}$

folgt:

$$\begin{aligned}
 F_{K_2} &= K_{2\parallel} \sin^2 \theta (\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) - K_{2\perp} \cos^2 \theta \\
 &= K_{2\parallel} (1 - \cos^2 \theta) - K_{2\perp} \cos^2 \theta \\
 &= K_{2\parallel} - (K_{2\perp} + K_{2\parallel}) \cos^2 \theta.
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Anhand der Glg. (A.5) erkennt man, daß K_2 in der Ebene keine Winkelabhängigkeit aufweist, wie es für eine C_4 -Symmetrie erwartet wird. Für die tetragonale Verspannung ist also in zweiter Ordnung nur die Anisotropie bzgl. der c-Achse von Bedeutung. Definiert man sich den Term $K_{2\perp} + K_{2\parallel}$ als „neues“ $K_{2\perp}$ und vernachlässigt konstante Terme, die nicht zu einer Winkelabhängigkeit (Anisotropie) beitragen, so ergibt sich der Ausdruck:

$$F_{K_2} = -K_{2\perp} \cos^2 \theta. \tag{A.5}$$

Eine weitere Erhöhung der Symmetrie des Systems zu einem System mit einer kubischen Einheitszelle bedeutet, daß alle drei Konstanten gleich groß sind, also: $c_1 = c_2 = c_3 \implies K_{2\parallel}^1 = K_{2\parallel}^2 = K_{2\perp} =: K_2$. Daraus folgt für die Glg. (A.2):

$$F_{K_2} = K_2 [\sin^2 \theta (\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) + \cos^2 \theta] = K_2 \cdot 1. \tag{A.6}$$

Dies bedeutet, daß hier keine Winkelabhängigkeit vorliegt und damit in einem kubischen System auch keine Anisotropieenergie zweiter Ordnung auftritt.

K_4 -Terme Der nächste aufgrund der Symmetrie zulässige Anisotropiebeitrag (K_4 -Term) eines orthorhombischen Systems ist $F_{K_4} = -c_1 \alpha_1^4 - c_2 \alpha_2^4 - c_3 \alpha_3^4$. Um jedoch am Ende für kubische Symmetrie die in aus Kap. 2 verwendete Form der freien Energiedichte zu erhalten, wird wegen der Beziehung $\frac{1-\alpha_1^4-\alpha_2^4-\alpha_3^4}{2} = \alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2$ der folgende Ausdruck verwendet:

$$F_{K_4} = \frac{1 - c_1 \alpha_1^4 - c_2 \alpha_2^4 - c_3 \alpha_3^4}{2}. \tag{A.7}$$

Setzt man auch hier die Polarkoordinaten ein, so erhält man:

$$F_{K_4} = \frac{1 - c_1 (\sin^4 \theta \cos^4 \phi) - c_2 (\sin^4 \theta \sin^4 \phi) - c_3 (\cos^4 \theta)}{2}. \tag{A.8}$$

In einem orthorhombischen System mit den Anisotropiekonstanten $c_1 := K_{4\parallel}^1$, $c_2 := K_{4\parallel}^2$ und $c_3 := K_{4\perp}$ ergibt sich dann:

$$F_{K_4} = \frac{1 - \sin^4 \theta (K_{4\parallel}^1 \cos^4 \phi - K_{4\parallel}^2 \sin^4 \phi) - K_{4\perp} \cos^4 \theta}{2}. \tag{A.9}$$

Bei der Betrachtung einer tetragonalen Einheitszelle ist $c_1 = c_2$, d. h. $K_{4\parallel}^1 = K_{4\parallel}^2 =: K_{4\parallel}$ also:

$$F_{K_4} = \frac{1 - K_{4\parallel} \sin^4 \theta (\cos^4 \phi - \sin^4 \phi) - K_{4\perp} \cos^4 \theta}{2}. \tag{A.10}$$

Mittels der trigonometrischen Beziehungen $\cos^4 \phi = 1/8 (\cos 4\phi + 4 \cos 2\phi + 3)$ bzw. $\sin^4 \phi = 1/8 (\cos 4\phi - 4 \cos 2\phi + 3)$ gelangt man zu:

$$F_{K_4} = \frac{1}{2} - \frac{1}{8} K_{4\parallel} \sin^4 \theta (\cos 4\phi + 3) - \frac{1}{2} K_{4\perp} \cos^4 \theta. \quad (\text{A.11})$$

Benutzt man nun die Beziehung $1 = \sin^2 x + \cos^2 x$ und setzt voraus, daß alle drei Anisotropiekonstanten gleich sind ($c_1 = c_2 = c_3$ bzw. $K_{4\parallel}^1 = K_{4\parallel}^2 = K_{4\perp} =: K_4$), dann folgt mit Glg. (A.11) für ein System mit kubischer Symmetrie:

$$F_{K_4} = -\frac{1}{8} K_4 \sin^4 \theta (\cos 4\phi + 7) + K_4 \sin^2 \theta. \quad (\text{A.12})$$

Zusammenfassend findet man also für die verschiedenen Symmetrieeigenschaften folgende Ausdrücke der freien Energie, wobei die winkelunabhängigen Terme vernachlässigt wurden:

- orthorhombische Symmetrie

$$\begin{aligned} F &= \sin^2 \theta (K_{2\parallel}^1 \cos^2 \phi + K_{2\parallel}^2 \sin^2 \phi) - K_{2\perp} \cos^2 \theta \\ &\quad - \frac{1}{2} \sin^4 \theta (K_{4\parallel}^1 \cos^4 \phi - K_{4\parallel}^2 \sin^4 \phi) - \frac{1}{2} K_{4\perp} \cos^4 \theta \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

- tetragonale Symmetrie

$$F = -K_{2\perp} \cos^2 \theta - \frac{1}{8} K_{4\parallel} \sin^4 \theta (\cos 4\phi + 3) - \frac{1}{2} K_{4\perp} \cos^4 \theta \quad (\text{A.14})$$

- kubische Symmetrie

$$F = -\frac{1}{8} K_4 \sin^4 \theta (\cos 4\phi + 7) + K_4 \sin^2 \theta \quad (\text{A.15})$$

B. Anhang: Kalibrierungen und Apparatives

B.1. Temperaturkalibrierung

Einige Wachstumsexperimente der Arbeit wurden in Abhängigkeit der Temperatur (oberhalb der RT) durchgeführt. Für die Temperaturkalibrierung ist der Kristall mit einem Thermoelement versehen worden. Die Probe wurde dann durch Wärmestrahlung erhitzt, wobei das Filament der Elektronenstoßheizung genutzt wurde. Bei diesen Experimenten war die Probe elektrisch isoliert aufgehängt. Da es sich hier im wesentlichen um Messungen handelte, bei denen eine leichte Erwärmung des Substrates oder des Filmes erforderlich war, galt es, eine Temperatur von maximal 450 K zu erreichen. Dazu wurde einerseits der Abstand von Probe und Filament variiert, andererseits verschieden hohe Ströme durch das Heizfilament geschickt. Bei dieser Art der Erwärmung wird die Temperatur langsam erhöht, wobei die Zeit in der die Maximaltemperatur erreicht wird, von dem Strom des Filamentes abhängt, sofern der Abstand konstant bleibt. Aus technischen Gründen wurde ein konstanter Abstand von 2,6 cm gewählt. Um den Abstand zwischen Filament und Probe einzustellen, wird das Filament von hinten gegen die Probe gefahren, so daß beide Kontakt aufnehmen, dies ist gleichzeitig der Nullpunkt. Im Anschluß wird das Wolframfilament um den obigen Abstand zurückgezogen. In Abb. B.1 sind nun Kurven in

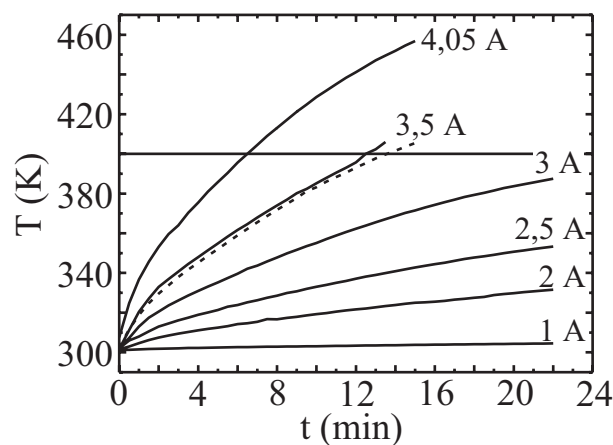


Abb. B.1.: Temperaturkalibrierung für verschiedene Ströme bei einem festen Abstand von 2,6 cm.

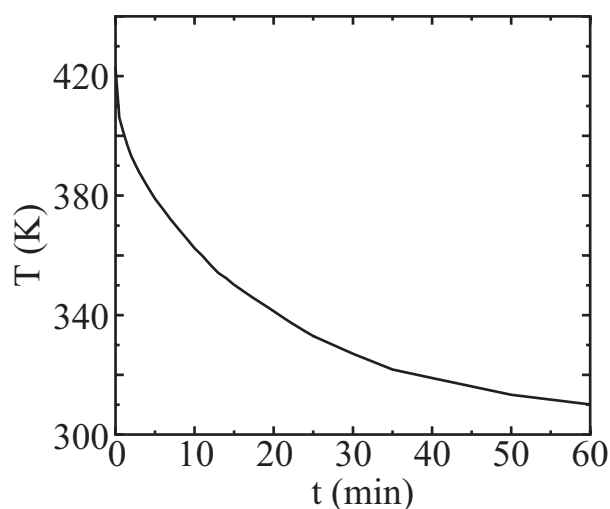


Abb. B.2.: Abkühlrate der Probe.

Abhängigkeit von der Zeit bei konstantem Filamentstrom sowie gleichem Abstand dargestellt. Allen Kurven gemein ist der exponentielle Verlauf. Da sechs Stromstärken benutzt wurden, und der Abstand zwischen Probe und Filament immer 2,6 cm betrug, sättigen die Kurven zu unterschiedlichen Zeitpunkten bei verschiedenen Temperaturen.

Desweiteren wurde die Abkühlrate der Probe bestimmt, was im Diagramm B.2 dargestellt ist. Dies ist entscheidend, um sicherzustellen, daß sich die Probe bei den anschließenden STM-Messungen wieder bei RT befindet. Die Probe wurde zunächst auf 423 K erwärmt, um im Anschluß auf RT abzukühlen. Zu diesem Zweck wurde in regelmäßigen Zeitabständen die Temperatur gemessen. Es handelt sich ebenfalls um einen exponentiellen Verlauf. Durch den Aufbau des Probenhalters, der die Probe mittels einer Keramik elektrisch und damit zu einem erheblichen Anteil auch thermisch isoliert, ist es dem Kristall nur möglich, die Temperatur über Wärmestrahlung zu senken. Aus diesem Grunde ist die Abkühlrate sehr klein.

B.2. 4-Gitter-LEED-Optik im LEED-Betrieb

An dieser Stelle wird der apparative Aufbau der 4-Gitter-LEED-Optik im LEED-Betrieb genauer beschrieben. Durch die Optik werden zwei Meßmethoden ermöglicht, zum einen LEED und zum anderen AES. Letztere wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

In Abb. B.3 ist der Aufbau der 4-Gitter-LEED-Optik für LEED- bzw. I/V-LEED-Messungen dargestellt. Das Instrument besteht aus 4 Gittern, die in der Abbildung mit 1,2,3,4 nummeriert worden sind, und einer Elektronenkanone. In ihr werden die Primärelektronen (e^-) mittels einer Glühkathode erzeugt und durch ein Linsensystem auf die Probe beschleunigt [28]. Diese e^- werden nun am Kristallgitter elastisch gebeugt. Beispiele für Beugungsbilder findet man in den entsprechenden Kapiteln. Die gebeugten Elektronen gelangen zu der Optik. Hier

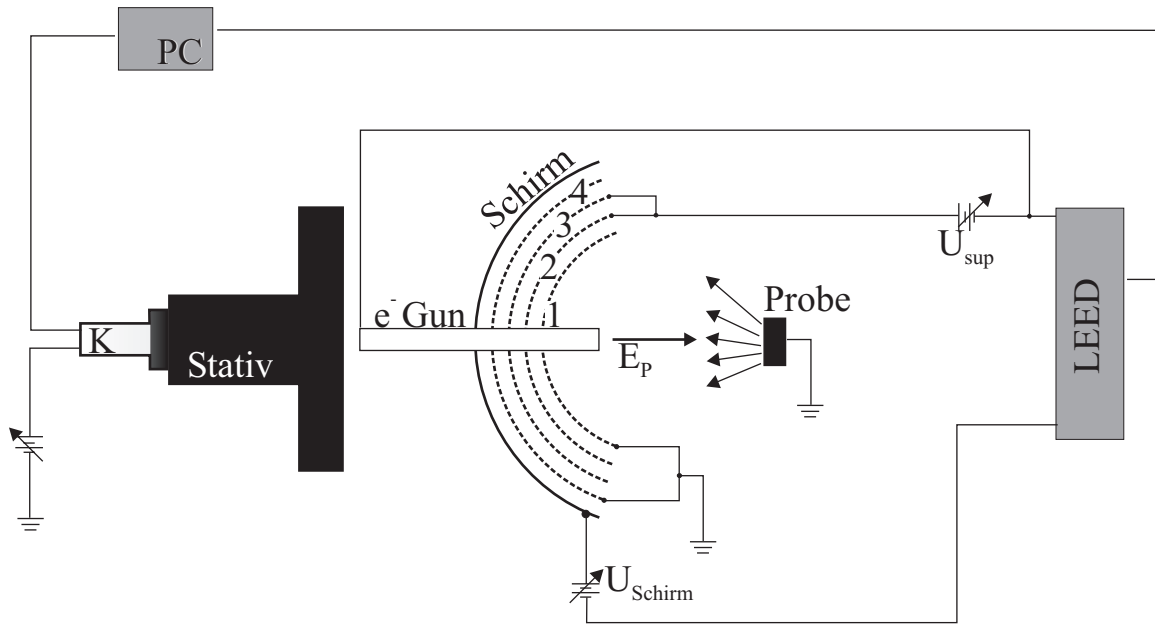


Abb. B.3.: LEED-Optik.

bilden die Gitter 1 und 4 einen Farady'schen Käfig, der eine geradlinige Ausbreitung der e^- gewährleistet. Am Fluoreszenzschirm liegt eine Spannung von üblicherweise 5 - 7 kV an. Durch diesen Potentialunterschied zwischen der geerdeten Probe und dem Kollektor werden die e^- auf den Schirm beschleunigt. Die Gitter 2 und 3, dienen der Unterdrückung (Suppressor) der inelastisch gestreuten e^- , wodurch das Hintergrundleuchten reduziert wird. Um die Beugungsbilder bzw. die spannungsabhängigen Intensitäten der Spots aufzeichnen zu können, wurde die Software *EE2000*[©] mit einer AD/DA-Karte sowie eine Videokarte und zugehöriger Kamera verwendet. Die Videokamera (K) wird außen an der UHV-Kammer befestigt. Über den PC können sowohl Einzelbilder als auch Intensitäten der Beugungsreflexe als Funktion der Energie aufgenommen werden. Für die spannungsabhängigen Messungen ist es nötig, die Energie kontinuierlich durchzufahren. Aus diesem Grunde werden der PC und das LEED-Netzgerät miteinander gekoppelt. Eine externe Steuerung durch den Computer erfolgt durch Umlegen eines Schalters auf der Rückseite des LEED-Netzgerätes.

In Abb. B.4 ist schließlich der Teil der Kammer dargestellt, in dem die LEED-Experimente stattfinden. Ganz links angedeutet ist das STM. Die Position der 4-Gitter-LEED-Optik befindet im Mittelteil. Die Videokamera ist auf das Stativ montiert und mit ihm zusammen oberhalb der Optik angebracht. Für die Experimente muß die Probe, die in einer drehbaren Transferachse sitzt (siehe Kap. 3), um ca. 90° rotiert werden.

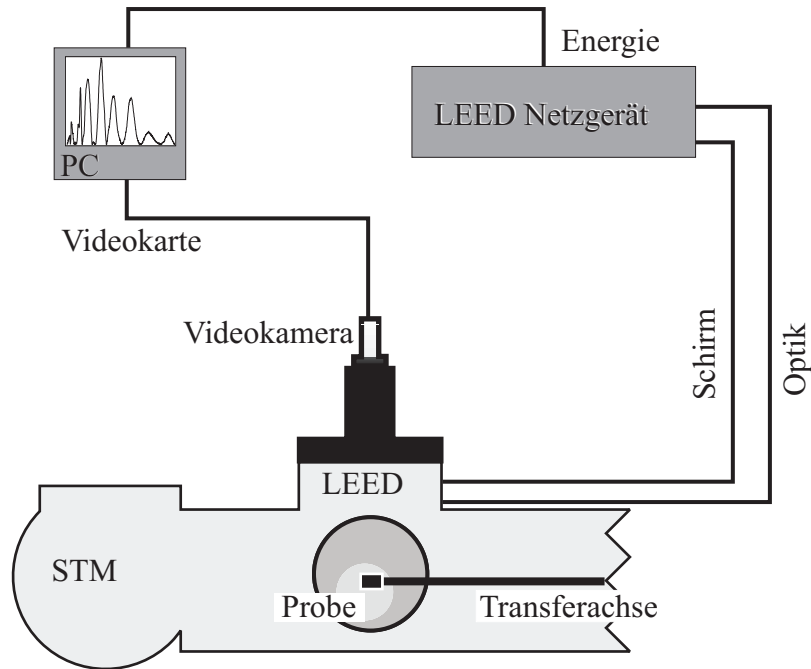


Abb. B.4.: Schaltbild der 4-Gitter-LEED-Optik für I/V-LEED-Experimente.

B.3. 4-Gitter-LEED-Optik im AES-Betrieb

Im folgenden wird erläutert wie die AES-Messungen mit der 4-Gitter-LEED-Optik durchgeführt werden können. Dazu ist in Abb. B.5 links nochmals der Aufbau einer 4-Gitter-LEED-Optik zu sehen. Die Elektronen gelangen mit der Primärenergie von $E_P = 3 \text{ keV}$ auf die Probe. Hier läuft nun der Augerprozeß in der in Kap. 3 beschriebenen Weise ab. Dabei werden die Auger-Elektronen in alle Richtungen gestreut und gelangen zum Detektor. Die Gitter 1 und 4 bilden einen Faraday'schen Käfig, wodurch sich die Elektronen geradlinig ausbreiten können. Gleichzeitig wird durch das auf Erdpotential liegende Gitter 4 eine kapazitive Ankopplung zwischen dem Kollektor und den modulierten Gittern 2 und 3 verhindert. Dies ist nötig, da die Gitter 2 und 3 und der Schirm einen Kondensator bilden, der für Wechselströme – gebildet durch die von der Proben kommenden e^- – durchlässig ist [28].

Die Elektronen werden zum Kollektor hin beschleunigt, da an ihm eine Spannung von konstant 300 V angelegt ist. Bei diesem Vorgang treffen alle Elektronen auf den Kollektor, so daß sämtliche Elektronenenergien und damit alle AES-Übergänge auf einmal detektiert werden. Dies spiegelt sich auch in Glg. (B.1) wieder. An den Gittern 2 und 3 liegt eine Bremsspannung U_r an, die zwischen $U = 0 \dots U_{max}$ durchgeföhren werden kann, so daß der über den Schirm abfließende Strom $I(U_r)$ eine Funktion dieser Retadierspannung ist:

$$I(U_r) \propto \int_{eU_r}^{\infty} N(E)dE. \quad (\text{B.1})$$

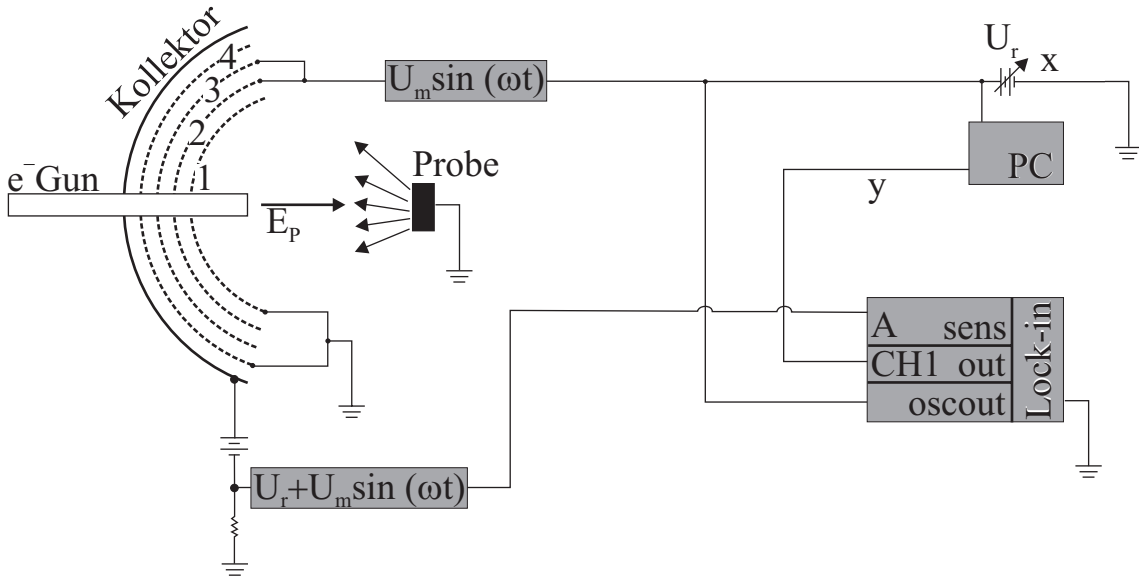


Abb. B.5.: LEED-Optik für AES-Betrieb.

$N(E)$ ist die Energieverteilungsfunktion der Elektronen, die von der Probe emittiert werden. Da man jedoch die Energieverteilungsfunktion selbst messen möchte, ist es nötig die Glg. (B.1) zu differenzieren [18]:

$$N \propto \left. \frac{dI(U_r)}{deU_r} \right|_{E=eU_r}. \quad (\text{B.2})$$

Technisch wird, wie in Abb. B.5 gezeigt, die Retardierspannung mit einer Wechselspannung $U_{AC} = U_m \sin(\omega t)$ moduliert. Damit wird Glg. (B.1):

$$I(U_r + U_m \sin(\omega t)) \propto \int_{eU_r + U_m \sin(\omega t)}^{\infty} N(E) dE. \quad (\text{B.3})$$

Die linke Seite der Glg. (B.3) kann man in eine Taylorreihe entwickeln:

$$I(U_r + U_m \sin(\omega t)) = I(U_r) + \frac{1}{1!} \frac{dI(U_r)}{dU_r} U_m \sin(\omega t) + \frac{1}{2!} \frac{d^2 I(U_r)}{dU_r^2} U_m^2 \sin^2(\omega t) + \dots \quad (\text{B.4})$$

Die erste Ableitung von I nach U_r ist nach Glg. (B.2) proportional zu der Energieverteilungsfunktion der Elektronen [28]. Das bedeutet, daß man durch die Modulation der Spannung bei der einfachen Frequenz ω für die Amplitude des Meßsignals erhält:

$$A(\omega) = \frac{dI(U_r)}{dU_r} U_m + \dots \quad (\text{B.5})$$

Im allgemeinen wird die Ableitung der Energieverteilung der Elektronen nach der Energie gemessen [28]:

$$\frac{d^2 I(U_r)}{deU_r^2} \propto \frac{dN(E = eU_r)}{dE}. \quad (\text{B.6})$$

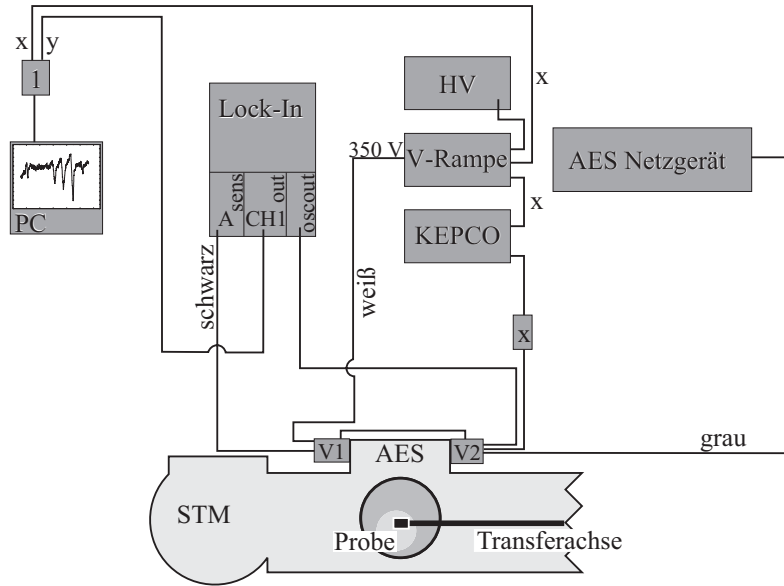


Abb. B.6.: Schaltskizze der 4-Gitter-LEED-Optik im AES-Betrieb mit PC zur Aufzeichnung der Daten.

Dies entspricht der zweiten Ableitung von I nach U_r , die ebenfalls in der Glg. (B.4) enthalten ist. Mittels trigonometrischer Funktionen ist es möglich die quadratischen Anteile der Taylorreihe durch die doppelte Frequenz 2ω auszudrücken:

$$I(U_r + U_m \sin(\omega t)) = I(U_r) + \frac{1}{1!} \frac{dI(U_r)}{dU_r} U_m \sin(\omega t) + \frac{1}{2!} \frac{d^2 I(U_r)}{dU_r^2} U_m^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2\omega t) \right) + \dots \quad (\text{B.7})$$

Für die Amplitude der Komponenten bei 2ω ergibt sich daher:

$$A(2\omega) = \frac{1}{2!} \frac{d^2 I(U_r)}{dU_r^2} U_m^2 + \dots \quad (\text{B.8})$$

Dies kann mit dem Lock-In-Verstärker gemessen werden, sofern man bei 2ω detektiert und die Modulationsspannung nicht zu groß wählt [28]. Dieser Aufbau funktioniert wie ein Hochpaßfilter, d. h., wegen des Durchfahrens der Retadierspannung werden die Energien, die kleiner als diese Spannung sind, nicht durch die Gitter 2 und 3 durchgelassen werden. Dies ist gleichzeitig der Nachteil der Methode, da alle e^- durchgelassen werden, die mindestens die Energie eU_r besitzen. Das Signal am Schirm ist größer, da die Messung nicht in einem kleinen Intervall um U_r geschieht. Dies wiederum hat Auswirkungen auf das Signal-zu-Rausch-Verhältnis und die Zeit, in der ein solcher Scan durchgeführt werden kann. Die Selektion der detektierten Elektronenenergien geschieht erst nach dem Auftreffen auf den Kollektor durch das Differenzieren des modulierten Meßsignals.

Abbildung B.6 zeigt das Schaltbild aller für den AES-Betrieb benötigten Komponenten. Die Probe kann mittels der Transferachse durch die gesamte Kammer bewegt werden. Die Achse ist in der Horizontalen um 360° drehbar. Für AES- wie auch die LEED-Experimente wird

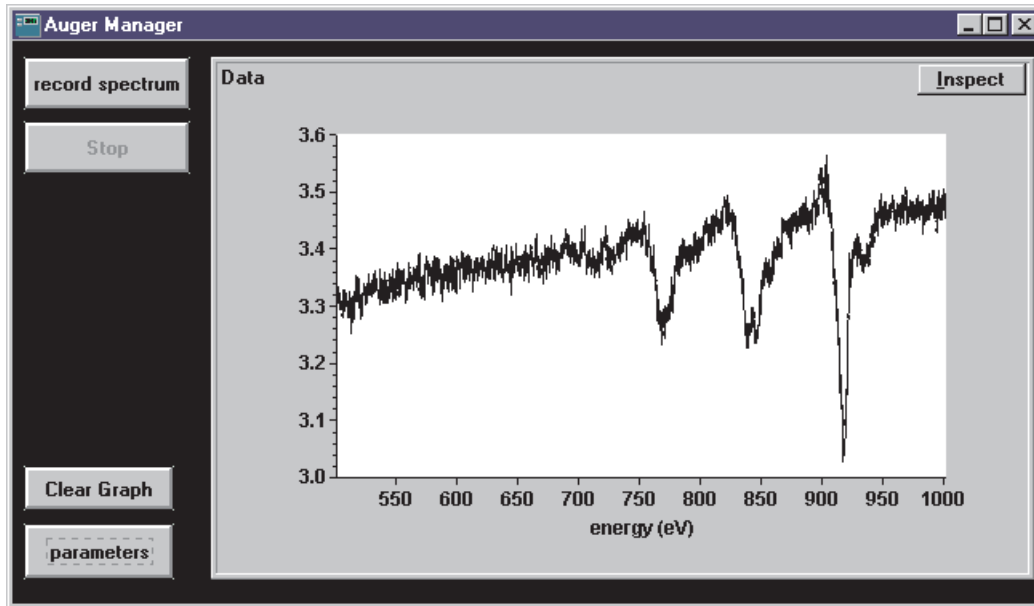


Abb. B.7.: Hauptmenü des AES-Meßprogrammes.

die Probe um ca. 90° rotiert. Dadurch erreicht man einen senkrechten Einfall der Primärelektronen. Das AES-Netzgerät steuert das Linsensystem der 4-Gitter-LEED-Optik, ebenso wie das LaB-Filament und beschleunigt die Elektronen auf maximal 5 keV. Das Hochspannungsnetzteil (HV) liefert dem Rampengenerator (V-Rampe) die Versorgungsspannung. Desweiteren sorgt dieser Rampengenerator über den Kollektor (V1) für eine konstante Spannung von 350 V an der 4-Gitter-LEED-Optik. Durch dieses Potential werden die Elektronen auf den Schirm beschleunigt. Mit diesem Gerät wird ebenfalls die Retadierspannung an den Gittern 2 und 3 durchgeführt. Das Signal wird durch den Vorverstärker (KEPCO) verstärkt. Direkt an der 4-Gitter-LEED-Optik befindet sich ein weiterer Vorverstärker (V2). Er moduliert die Retadierspannung U_r des Rampengenerators mit der Wechselspannung $U_{AC} = U_m \sin \omega t$. Die Rampenspannung wird direkt über den Computer bzw. x/y -Schreiber ausgelesen (x -Achse). Der Strom I , der durch die Sekundärelektronen am Schirm entsteht, wird am Verstärker (V1) ausgekoppelt und in den Lock-In eingespeist. Dort wird das Signal mit der Amplitude $A(2\omega)$ herausgefiltert und an den PC weitergeleitet und verarbeitet (y -Achse).

AES-PROGRAMM Bisher war es nur möglich, die Spektren auf einem x/y -Schreiber aufzuzeichnen. Um diese Spektren auch elektronisch verarbeiten und genauer analysieren zu können, wurde anstelle des Schreibers ein Computer eingesetzt (siehe Abb. B.6). Zur Datenaufnahme wurde eine AD/DA-Karte von Keithley-Instruments eingebaut und ein Programm unter der Entwicklungsumgebung Testpoint[©] geschrieben, das hier kurz vorgestellt wird. Es liest im wesentlichen zwei Kanäle ein, die der x - bzw. der y -Achse entsprechen. Ruft man das Programm „Auger-Measure“ auf, so erscheint zunächst das Hauptmenü, welches in Abb. B.7 gezeigt ist.

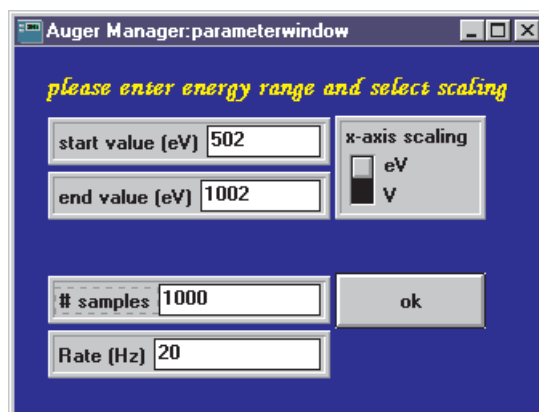


Abb. B.8.: Parameterfenster zur Eingabe des Meßbereiches und der Meßpunktdichte.

Einen Großteil des Fensters nimmt der Schreiber zur Darstellung des Spektrum ein. Die Knöpfe auf der linken Seite haben die folgenden Funktionen (von oben nach unten):

- „record spectrum“: Startknopf um die Aufzeichnung zu beginnen.
- „stop“: Knopf um die Aufzeichnung jederzeit beenden zu können. Durch Drücken des Knopfes wird automatisch der „filemanager“ aufgerufen (siehe unten).
- „Clear Graph“: Dieser Knopf löscht das dargestellte Spektrum.
- „parameter“: Hiermit wird das Parametermenü aufgerufen, das im Anschluß beschrieben wird.

In Abb. B.8 ist das eben erwähnte Parametermenü dargestellt. Das Programm ist so angelegt, daß dieser Knopf gedrückt werden muß, bevor man ein Spektrum aufzeichnen kann. Man hat in diesem Menü die Möglichkeit die x -Achse in Form der Rampenspannung, also in Volt, aufzunehmen oder als Energie, in eV (Schieberegler „x-axis scaling“). Da der Rampengenerator (V-Rampe) aus Abb. B.6 die Spannung immer im Bereich zwischen 0 V und 10 V ausgibt, ist es mittels eines einfachen Dreisatzes möglich im Programm die Spannung in eV umzurechnen und darzustellen. Entscheidet man sich z. B. für die Aufzeichnung und Darstellung der Daten in eV, so gibt man einfach bei „start value (eV)“ seinen Anfangswert, hier 502 eV, und bei „end value (eV)“ den Endwert ein, hier 1002 eV. Über die beiden Felder „# samples“ und „Rate (Hz)“ kann die Punktdichte bzw. die Abfragerate des Computers eingestellt werden. Drückt man nach Beenden der Eingaben „ok“, so begibt man sich wieder zum Hauptmenü. Wird der Energieendwert erreicht, beendet das Programm den Scan und ruft automatisch den „filemanager“ auf (Abb. B.9) gezeigt.

Im Hauptmenü ist es ebenfalls möglich einen Scan mittels „stop“ zu beliebiger Zeit abzubrechen, auch dann erscheint der „filemanager“. Hat man die Daten wahlweise gespeichert,

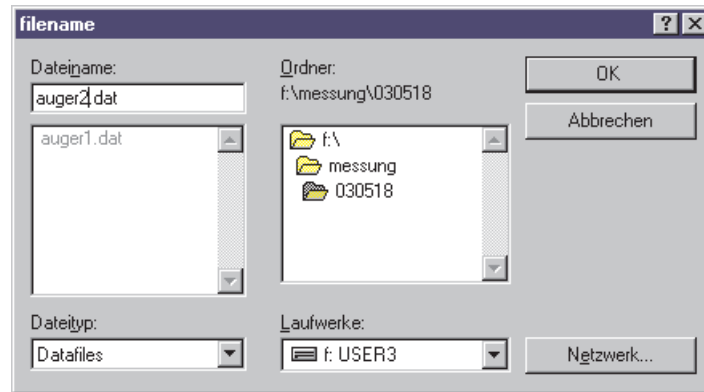


Abb. B.9.: Filemanager.

kehrt man automatisch zum Hauptmenü zurück. Man kann nun durch „Clear Graph“, wie bereits erwähnt, die Darstellung der Kurve löschen, oder man verändert die Parameter und startet einen neuen Scan.

B.4. STM-Steuerung

Das Meßprogramm des Omicron STM1 läuft unter einem hp-unix Betriebssystem. An dieser Stelle werden die wichtigsten Befehle für den Umgang mit diesem Programm erläutert. Um das STM-Programm zu starten, muß man den Befehl `\stm\stmprg` eingeben. Danach wird ein Benutzerpaßwort abgefragt, welches selbst gewählt werden kann. Der im Anschluß erscheinende Bildschirm beinhaltet alle Fenster, in denen man die Parameter des einzelnen Scans eintragen und verändern kann. Ein Fensterwechsel ist mittels der Pfeiltasten möglich. Hat man eine Änderung in einen der Fenster vorgenommen, muß diese mit **ENTER** bestätigt werden.

Die wichtigsten Befehle:

ctrl+i Verbindung Computer/STM-Controller.

Dies muß nach dem Programmstart zuerst ausgeführt werden.

- F2 Scanmodus, bei dem ein einzelner Linescan immer wieder neu abgefahren wird.
- F6 Verlassen des Scanmodus
- F3 Rückkehren zum Parameterfenster
- F1 Starten der eigentlichen Bildaufnahme
- F7 2× drücken, liefert die Bildansicht nach Abschluß des Scanvorganges
- F6 2× drücken, verlassen der Bildansicht und Rückkehr zum Parameterfenster

Um die Bilder in der Bildansicht zu bearbeiten, drückt man F8 und es erscheint ein Command Fenster. Hier kann man folgende Befehle verwenden:

1. Differenzieren:

- diff on *ein Wert zwischen 0 und 1*; entspricht dem Prozentsatz der Ableitung des Bildes, die dem Original hinzuaddiert wird.
- enter
- F6 \Rightarrow F10 \Rightarrow F2

2. Glätten:

- smooth a (b oder c); a,b,c gibt die Anzahl der nächst benachbarten Bildpunkte an, die für die Glättung genutzt werden.
- enter
- F6 \Rightarrow F10 \Rightarrow F2

Für Linescans:

- F1
- ctrl+select Anfangspunkt festlegen
- ctrl(+shift)+Pfeiltasten Linescan ziehen
- shift+select Endpunkt festlegen
- enter Ansehen des Profils

ctrl+q Verlassen des STM-Programmes

Die oben angegebene Bildbearbeitung *innerhalb* des Meßprogrammes wurde im Rahmen der Arbeit mittels des PC-Programms *Scala Pro*© der Firma OMICRON vorgenommen, da dieses eine komfortable Benutzeroberfläche zur Bearbeitung der STM-Bilder zur Verfügung stellt.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Einfache Gitter	6
2.2. Kubische Raumgitter	7
2.3. Einfaches dreidimensionales Gitter	9
2.4. fcc-Gitter mit Grundflächen	10
2.5. Überstrukturen und Rekonstruktionen	11
2.6. Erste Brillouinzone eines zweidimensionalen sc-Gitters	12
2.7. Erste Brillouinzone von Kristallen kubischer Symmetrie	12
2.8. Magnetische Anisotropie	14
3.1. Skizze des Kammeraufbaus	19
3.2. Strahlengang in spekulärer Geometrie	20
3.3. Darstellungen der Ewaldkugel	22
3.4. LEED-Bild des spekularen Reflexes von Cu(100)	23
3.5. Spektrum des spekularen Reflexes von Cu(100)	24
3.6. Bandstruktur und Reflektivität	25
3.7. Position der Bragg-Peaks als Funktion von n^2	25
3.8. Fluoreszenz und AES-Prozeß	27
3.9. AES-Intensitäten von Cu im Verhältnis zu Ni, Co, Fe, V	27
3.10. Eindimensionales Modell des quantenmechanischen Tunneleffektes	29
3.11. Schematischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskops	31
3.12. Darstellung des Magneto-optischen Kerr-Effektes	32
3.13. Aufbau der MOKE-Apparatur	34
4.1. Einheitszelle eines fcc-Gitters mit Hartkugelmodell der (100)-Oberfläche	35
4.2. Einheitszelle eines fcc-Gitters mit Hartkugelmodell der (110)-Oberfläche	36
4.3. AES und LEED von Cu(100)	37
4.4. STM-Bild von Cu(100) und Linescan	37
4.5. I/V-LEED von Cu(100) und der O-rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche	38
4.6. Struktur der O-rekonstruierten Cu(100)-Oberfläche	39

4.7. AES und LEED der Cu(110)-Oberfläche	40
4.8. STM-Bild von Cu(110) und Linescan	40
4.9. I/V-LEED von reinem und O-rekonstruiertem Cu(110)	41
4.10. Verschiedene Sauerstoffbedeckungen auf Cu(110)	42
4.11. „Added row“ Modell auf der Cu(110)-Oberfläche	43
4.12. LEED und STM der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche	44
5.1. MEED für Ni/Cu(100) und O/Ni/Cu(100)	47
5.2. STM für Ni/Cu(100)	48
5.3. Arithmetische Rauigkeit für Ni/Cu(100) und O/Ni/Cu(100)	49
5.4. LEED, STM und Modell für Cu(100) und Ni/Cu(100)	49
5.5. I/V-LEED für Ni/Cu(100)	51
5.6. Vergleich der Interlagenabstände für Cu(100) und Ni _x /Cu(100)	52
5.7. LEED, STM und Modell für O/Cu(100) und O/Ni/Cu(100)	54
5.8. LEED-Bilder für O/Cu(100) und O/Ni/Cu(100) im Submonolagenbereich	55
5.9. AES und NEXAFS für O/Cu(100), O/Ni/Cu(100) und NiO/Cu(100)	56
5.10. Cu- und Ni-Kanten für Cu(100), O/Cu(100), O/Ni/Cu(100), Ni/Cu(100) und NiO/Cu(100)	58
5.11. STM-Bilder für O/Ni/Cu(100)	59
5.12. Inseldichte für O/Ni/Cu(100)	60
5.13. Winkelabhängige FMR-Messungen für O/Ni/Cu(100) und Ni/Cu(100)	61
5.14. Elliptizität des magneto-optischen Kerr-Effekts für O/Ni/Cu(100) und Ni/Cu(100)	62
5.15. Hysteresen für O/Ni/Cu(100)	63
5.16. Temperaturabhängige FMR-Messungen für O/Ni/Cu(100) und Ni/Cu(100)	64
5.17. Hartkugelmodell der Ni-Filme mit den einzelnen Anisotropiebeiträgen	66
5.18. $K_{2\perp}$ als Funktion der reziproken Filmdicke	67
6.1. LEED für Cu(110) und Ni/Cu(110)	70
6.2. STM für Ni/Cu(110)	71
6.3. AES für Ni/Cu(110)	72
6.4. Rauigkeit für Ni/Cu(110) und O/Ni/Cu(110)	72
6.5. I/V-LEED für Ni/Cu(110)	73
6.6. Interlagenabstand für Ni/Cu(110) und O/Ni/Cu(110)	73
6.7. MOKE für Ni/Cu(110) und O/Ni/Cu(110)	75
6.8. LEED für O/Cu(110) und O/Ni/Cu(110)	76
6.9. STM für O/Ni/Cu(110)	77
6.10. AES für O/Ni/Cu(110)	78
6.11. I/V-LEED für O/Ni/Cu(110)	79

6.12. Schematische Darstellung der uniaxialen Anisotropie von Ni auf Cu(110) bzw. der voroxidierten Cu(110)-Oberfläche als Funktion der reziproken Filmdicke	81
7.1. MEED, AES und LEED für O/Cu/Ni/Cu(100)	84
7.2. Hartkugelmodell und I/V-LEED für Ni/Cu/Ni/Cu(100)	86
7.3. I/V-LEED, Fits und AES für Cu/Ni/Cu(100)	87
7.4. I/V-LEED und LEED für Fe-Filme auf Cu(100)	88
7.5. I/V-LEED und LEED für 50 ML Fe auf Cu(100)	89
7.6. STM von V auf Fe/Cu(100)	90
7.7. STM und LEED von V auf Cu(100)	91
B.1. Temperaturkalibrierung	101
B.2. Temperaturabkühlrate	102
B.3. LEED-Optik	103
B.4. Schaltbild der 4-Gitter-LEED-Optik für I/V-LEED-Experimente	104
B.5. LEED-Optik für AES-Betrieb	105
B.6. Schaltskizze der 4-Gitter-LEED-Optik im AES-Betrieb	106
B.7. Hauptmenü des AES-Meßprogrammes	107
B.8. Parameterfenster	108
B.9. Filemanager	109

Tabellenverzeichnis

2.1. Stapelfolge von fcc-Kristallen	10
3.1. Interlagenabstand als Funktion des Kippwinkels	26
5.1. Leichte Richtung der Magnetisierung	52
5.2. Bedingungen der Anisotropien für senkrechte Magnetisierung	53
5.3. Oberflächenanisotropie und kritische Reorientierungsdicke	65
6.1. Geometrische Eigenschaften eines Cu(110)- bzw. Ni(110)-Kristalls	69

Literaturverzeichnis

- [1] P. Pouloupoulos, K. Baberschke, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 9495 (1999)
- [2] P. Bruno, *Phys. Rev. B* **52**, 411 (1995)
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988)
- [4] S. van Dijken, R. Vollmer, B. Poelsema, J. Kirschner, *J. Magn. Magn. Mat.* **210**, 316 (2000)
- [5] J. J. de Miguel, R. Miranda, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, R1063 (2002)
- [6] S. K. Kim, C. Petersen, F. Jona, P. M. Marcus, *Phys. Rev. B* **54**, 2184 (1996)
- [7] J. Lindner, *Ferromagnetische Resonanz an ultradiinnen magnetischen Einfach- und Mehrfachlagen der 3d-Übergangsmetalle – Statik und Dynamik*, dissertation.de, Berlin (2003)
- [8] P. Pouloupoulos, J. Lindner, M. Farle und K. Baberschke, *Surf. Sci.* **437**, 277 (1999)
- [9] K. Heinz, S. Müller, L. Hammer, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 9437 (1999)
- [10] J. Lindner, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, E. Kosubek, H. Wende, K. Baberschke, *Surf. Sci. Lett.* **523**, L65 (2003)
- [11] S. Z. Wu, G. J. Mankey, R. F. Willis, *J. Vac. Sci. and Techn.* **13**, 1497 (1995)
- [12] A. Scherz, *Spin-dependent X-ray absorption spectroscopy of 3d-transition metals: Systematics and Applications*, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin (2003), unveröffentlicht
- [13] R. Hammerling, J. Zabloudil, P. Weinberger, J. Lindner, E. Kosubek, R. Nünthel, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **68**, 092406 (2003)
- [14] A. Scherz, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, J. Lindner, H. Wende, F. Wilhelm, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **68**, R140401 (2003)
- [15] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Festkörperphysik*, Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1. Aufl. (2001)

- [16] Charles Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, R. Oldenbourg Verlag, München, 12. Aufl. (1999)
- [17] K. Kopitzki, *Einführung in die Festkörperphysik*, B. G. Teubner, Stuttgart (1989)
- [18] G. Berendt, E. Weimar-Woods, *Mathematik für Physiker*, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 2. Aufl. (1990)
- [19] W. J. Moore, D. O. Hummel, *PC Physikalische Chemie*, de Gruyter, Berlin, New York, 4. Aufl. (1986)
- [20] E. A. Wood, *J. Appl. Phys.* **35**, 1306 (1964)
- [21] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus 2*, B. G. Teubner, Stuttgart (1986)
- [22] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik, Band 4*, Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 3. Aufl. (1997)
- [23] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus 1*, B. G. Teubner, Stuttgart (1986)
- [24] M. Farle, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 755 (1998)
- [25] K. Baberschke, *Anisotropy in Magnetism*, in *Band-Ferromagnetism, Ground-State and Finite-Temperature Phenomena*, Hrsg. K. Baberschke, M. Donath und W. Nolting, Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin Heidelberg New York (2001)
- [26] M. Stindtman, *Rastertunnelmikroskopie an dünnen Nickelfilmen auf Rhenium, mit Argon beschossenem Kupfer und Sauerstoff auf Kupfer*, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin (1996), unveröffentlicht
- [27] M. Ritter, *Untersuchungen struktureller Eigenschaften von reinen und mit atomarem Sauerstoff dotierten Cu(100)-Oberflächen*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (1995), unveröffentlicht
- [28] G. Ertl, J. Küppers, *Low Energy Electrons and Surface Chemistry*, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 2. Aufl. (1985)
- [29] H. Lüth, *Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films*, Springer, Berlin, Heidelberg, 3. Aufl. (2001)
- [30] J. B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction*, Academic Press Inc. (London) Ltd., London (1974)
- [31] G. Capart, *Surf. Sci.* **13**, 361 (1969)

- [32] W. C. Lin, C. C. Kuo, C. L. Chiu, Minn-Tsong Li, *Surf. Sci.* **478**, 9 (2001)
- [33] T. Gleitsmann, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (2002), unveröffentlicht
- [34] W. Demtröder, *Experimentalphysik 3*, Springer, Berlin, New York, 1. Aufl. (1995)
- [35] W. Zinth, H.-J. Körner, *Physik III*, Oldenbourg, München, Wien, 2. Aufl. (1996)
- [36] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik, Band 5.1*, Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 3. Aufl. (1997)
- [37] R. Wiesendanger, *Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge, 2. Aufl. (1998)
- [38] H. Ebert, Ya. Perlov, *Magnetooptische Effekte (Theorie)*, in *Magnetische Schichtsysteme*, Hrsg. R. Hölzl, Bd. 30 von *IFF-Ferienkurse*, Schriften des Forschungszentrum Jülich, Jülich (1999)
- [39] E. Hecht, *Optik*, R. Oldenbourg Verlag München Wien, Braunschweig Wiesbaden, 2. Aufl. (1999)
- [40] Ch. Woell, R. J. Wilson, S. Chiang, H. C. Zeng, K. A. R. Mitchell, *Phys. Rev. B* **42**, 11926 (1990)
- [41] J. H. Onuferko, D. P. Woodruff, *Surf. Sci.* **95**, 555 (1980)
- [42] S. Stolbov, T. S. Rahman, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 116101 (2002)
- [43] U. Döbler, K. Baberschke, J. Haase, A. Puschmann, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1437 (1984)
- [44] H. Wende, Ch. Litwinski, A. Scherz, T. Gleitsmann, Z. Li, C. Sorg, K. Baberschke, A. Ankudinov, J. J. Rehr, Ch. Jung, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 5197 (2003)
- [45] D. Coulman, J. Wintterlin, R. J. Behm, G. Ertl, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1761 (1990)
- [46] M. Karimi, T. Tomkowski, G. Vidali, O. Biham, *Phys. Rev. B* **52**, 5364 (1995)
- [47] J. Shen, J. Giergiel und J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **52**, 8454 (1995)
- [48] R. Nünthel, T. Gleitsmann, P. Pouloupoulos, A. Scherz, J. Lindner, E. Kosubek, Ch. Litwinski, Z. Li, H. Wende, K. Baberschke, *Surf. Sci.* **531**, 53 (2003)
- [49] W. Platow, U. Bovensiepen, P. Pouloupoulos, M. Farle, K. Baberschke, L. Hammer, S. Walter, S. Müller und K. Heinz, *Phys. Rev. B* **59**, 12641 (1999)

- [50] B. Schulz, *Magnetische Eigenschaften ultradünner Ni/Cu(001)-Filme: Eine Untersuchung mittels ferromagnetischer Resonanz im UHV*, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin (1995), unveröffentlicht
- [51] Sôshin Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Oxford University Press, Oxford New York, 2. Aufl. (1997)
- [52] E. Kopatzki, S. Günther, W. Nichtl-Pecher, R. J. Behm, *Surf. Sci.* **284**, 154 (1993)
- [53] D. Arvanitis, G. Comelli, T. Lederer, H. Rabus, K. Baberschke, *Chem. Phys. Lett.* **211**, 53 (1993)
- [54] T. Lederer, D. Arvanitis, G. Comelli, L. Troeger, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **48**, 15390 (1993)
- [55] G. Doyen, D. Drakova, E. Kopatzki, R. J. Behm, *J. Vac. Sci. and Techn.* **6**, 327 (1988)
- [56] K. Nakamura, M. Yata, *Surf. Sci.* **417**, 268 (1998)
- [57] S. Stolbov, T. S. Rahman, *J. Chem. Phys.* **117**, 8523 (2002)
- [58] S. Stolbov, A. Kara, T. S. Rahman, *Phys. Rev. B* **66**, 245405 (2002)
- [59] Th. Herrmann, K. Lüdge, W. Richter, N. Esser, P. Pouloupoulos, J. Lindner, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **64**, 184424 (2001)
- [60] H. Tillborg, A. Nilsson, T. Wiell, N. Wassdahl, N. Mårtensson, J. Nordgren, *Phys. Rev. B* **47**, 16464 (1993)
- [61] R. W. Godby, G. A. Benesh, R. Haydock, V. Heine, *Phys. Rev. B* **32**, 655 (1985)
- [62] F. May, M. Tischer, D. Arvanitis, M. Russo, J. Hunter Dunn H. Henneken, H. Wende, R. Chauvistré, N. Mårtensson, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **53**, 1076 (1996)
- [63] P. Srivastava, N. Haack, H. Wende, R. Chauvistré, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **56**, R4398 (1997)
- [64] J. Lindner, K. Baberschke, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, R193 (2003)
- [65] J. Lindner, K. Baberschke, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, S465 (2003)
- [66] J. Smit, H. G. Beljers, *Phillips Res. Rep.* **10**, 113 (1955)
- [67] R. Vollmer, Th. Gutjahr-Löser, J. Kirschner, S. van Dijken, B. Poelsema, *Phys. Rev. B* **60**, 6277 (1999)

- [68] W. Platow, A. N. Anisimov, G. L. Dunifer, M. Farle, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **58**, 5611 (1998)
- [69] M. Farle, W. Platow, A. N. Anisimov, P. Pouloupoulos, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **56**, 5100 (1997)
- [70] B. Schulz, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **50**, 13467 (1994)
- [71] A. Ney, *A New Design of an UHV-High- T_c -SQUID-Magnetometer: Absolute Determination of Magnetic Moments of 3d-Transition Metal Films*, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin, dissertation.de - Verlag im Internet (2001), ISBN 3-89825-311-2
- [72] Jisang Hong, R. Q. Wu, J. Lindner, E. Kosubek, R. Nünthel, K. Baberschke, *Phys. Rev. Lett.* (2003)
- [73] R. Nünthel, J. Lindner, P. Pouloupoulos, K. Baberschke, *Surf. Sci.* (2004)
- [74] J. Lindner, P. Pouloupoulos, F. Wilhelm, M. Farle und K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **62**, 10431 (2000)
- [75] E. W. Lee, *Rep. Prog. Phys.* **18**, 184 (1955)
- [76] K. Yagi-Watanabe, Y. Ikeda, Y. Ishii, T. Inokuchi, H. Fukutani, *Surf. Sci.* **482-485**, 128 (2001)
- [77] F. Besenbacher, I. Stensgaard, L. Ruan, J. K. Norskov, K. W. Jacobsen, *Surf. Sci.* **272**, 334 (1992)
- [78] Th. Herrmann, K. Lüdge, M. Wahl, W. Richter, N. Richter, K. G. Georgarakis, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, J. Lindner, K. Baberschke, *Phys. Rev. B* (2003)
- [79] Th. Herrmann, *private Mitteilung* (2003)
- [80] F. Wilhelm, *Magnetic Properties of Ultrathin Films, Coupled Trilayers and 3d/5d Multilayers studied by X-ray Magnetic Circular Dichroism*, Doktorarbeit, Freie Universität Berlin, dissertation.de - Verlag im Internet (2000), ISBN 3-89825-177-2
- [81] S. Miura, M. Tsunoda, M. Takahashi, *J. Appl. Phys.* **89**, 6308 (2001)
- [82] W. F. Egelhoff, Jr., P. J. Chen, C. J. Powell, M. D. Stiles, R. D. McMichael, J. H. Judy, K. Takano, A. E. Berkowitz, *J. Appl. Phys.* **82**, 6142 (1997)
- [83] P. Schmailzl, K. Schmidt, P. Bayer, R. Döll, K. Heinz, *Surf. Sci.* **312**, 73 (1994)
- [84] K. Heinz, S. Müller, P. Bayer, *Surf. Sci.* **352-354**, 942 (1996)

- [85] D. P. Moore, O. Ozturk, F. O. Schumann, S. A. Morton, G. D. Waddill, *Surf. Sci.* **449**, 31 (2000)

Veröffentlichungen

I. Artikel

- 1) J. Lindner, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, E. Kosubek, K. Baberschke
Improved growth and the spin reorientation transition of Ni on $(\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})$ R45° reconstructed Cu(001)
Surf. Sci. **523**, L65 (2003)

- 2) R. Nünthel, T. Gleitsmann, P. Pouloupoulos, J. Lindner, E. Kosubek, Ch. Litwinski, Z. Li, H. Wende, K. Baberschke, S. Stolbov, T. S. Rahman
Epitaxial growth of Ni on Cu(001) with the assistance of O-surfactant and its magnetism compared to Ni/Cu(001)
Surf. Sci. **531**, 53 (2003)

- 3) A. Hahlin, J. Hunter Dunn, O. Karis, D. Arvanitis, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, J. Lindner, K. Baberschke
Ultrathin Co films on flat and vicinal Cu(111) surface: per atom determination of orbital and spin moments
J. Phys.: Condens. Matter **15**, S573 (2003)

- 4) A. Scherz, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, J. Lindner, H. Wende, F. Wilhelm, K. Baberschke
Direct probe of interdiffusion effects on the induced V spin-reorientation at Fe/V interfaces
Phys. Rev. B **68**, 140401(R) (2003)

- 5) R. Hammerling, J. Zabloudil, P. Weinberger, J. Lindner, E. Kosubek, R. Nünthel, K. Baberschke
Interlayer exchange coupling and magnetic anisotropy in prototype trilayers: Ab initio theory versus experiment
Phys. Rev. B **68**, 092406 (2003)

- 6) Th. Herrmann, K. Lüdge, M. Wahl, W. Richter, N. Richter, K. G. Georgarakis, P.

Poulopoulos, R. Nünthel, J. Lindner, K. Baberschke

Optical Anisotropy and Magneto Optical Properties of Ni on Preoxidized Cu(110)

Phys. Rev. B, eingereicht (2003)

7) R. Nünthel, J. Lindner, P. Poulopoulos, K. Baberschke

The influence of substrate preoxidation on the growth of Ni on Cu(110)

Surf. Sci., akzeptiert (2003)

8) Jisang Hong, R. Q. Wu, J. Lindner, E. Kosubek, R. Nünthel, K. Baberschke

Manipulation of spin reorientation transition by oxygen surfactant growth: A combined theoretical and experimental approach

eingereicht (2003)

II. Vorträge

1) R. Nünthel, P. Poulopoulos, J. Lindner, E. Kosubek, K. Baberschke

Verbesserung des Wachstums und der Magnetismus von Ni/Cu(100) mittels O-Surfactant

Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg, 2002

2) R. Nünthel, T. Gleitsmann, A. Scherz, P. Poulopoulos, Ch. Litwinski, H. Wende, Z. Li, C. Sorg, K. Baberschke

Wachstum von Ni auf Cu(110) mit Sauerstoff-Surfactant

Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden, 2003

III. Poster

1) R. Nünthel, T. Gleitsmann, P. Poulopoulos, J. Lindner, E. Kosubek, A. Scherz, H. Wende, K. Baberschke

Improved Ni/Cu Growth via Oxygen Surfactant

281. WE-Heraeus Seminar, Wandlitz, 2002

2) R. Nünthel, T. Gleitsmann, P. Poulopoulos, J. Lindner, E. Kosubek, A. Scherz, Ch. Litwinski, Z. Li, H. Wende, K. Baberschke

Improved Growth and the magnetic Properties of Ni/Cu(100) via Oxygen Surfactant

Bessy-Nutzertreffen, Berlin, 2002

3) R. Nünthel, J. Lindner, P. Pouloupoulos, K. Baberschke

The Influence of Substrate Preoxidation on the Growth of Ni on Cu(110)

ECOSS Konferenz, Prag, 2003

Lebenslauf

I. Persönliche Daten

Name: Ramona Nünthel
Nationalität: deutsch
Geburtsort und -tag: Rostock, 18.09.1975
Anschrift: Freie Universität Berlin,
Institut für Experimentalphysik, Arnimallee 14, D-14195 Berlin
Tel.: +49-30-838 56143, Fax.: +49-30-838 53646,
e-mail: ramonan@zedat.fu-berlin.de

II. Schulausbildung

1982-1989 63. POS Herbert Warncke, Rostock
1989-1994 Ostsee-Gymnasium, Rostock
1994 Abitur

III. Hochschulausbildung

1994-2000 Meteorologiestudium an der Freien Universität Berlin
2000-2001 Diplomarbeit „*Trajektorien in Theorie und Praxis*“
an der Freien Universität Berlin
in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. H.-J. Lange
Januar 2001 Diplom in Meteorologie
Februar 2001 Doktorarbeit an der Freien Universität Berlin
in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. K. Baberschke

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, da eine solche Arbeit neben der Durchführung der Experimente auch eine Menge Diskussionsstoff bietet.

Ich bedanke mich bei meinem Erstgutachter Prof. Dr. K. Baberschke, der mir eine gesamte UHV-Anlage anvertraute und damit eine Promotion im Bereich der Festkörperphysik ermöglichte.

Desweiteren danke ich Prof. Dr. P. Fumagalli, der als zweiter Gutachter reges Interesse an der Arbeit mit Sauerstoff-Surfactant zeigte.

Bedanken möchte ich mich bei den aktuellen und einigen ehemaligen Mitarbeitern der AG Baberschke, im besonderem bei:

- Dr. P. Pouloupoulos, der mir die gesamte UHV-Technik beibrachte und viel Verständnis und immer ein offenes Ohr für neue Ideen und deren Umsetzung hatte.
- Unseren FMR-Experten: E. Kosubek, die mit ihrer ruhigen Art so manchen beeindruckte. K. Lenz, der nicht nur zahllose Korrekturvorschläge für die Arbeit lieferte und die Einheiten des Druckes monierte, sondern auch die Skischuhe auf der Piste vom Schnee befreite. Außerdem bedanke ich mich bei dem FMR-Team inklusive Dr. T. Tolinski für die Experimente, die das physikalische Puzzle vervollständigten.
- T. Gleitsmann, A. Scherz, Ch. Litwinski, Dr. H. Wende, C. Sorg und Dr. N. Ponpandian für ihre Diskussionsbereitschaft und das Korrekturlesen der Arbeit.
- C. Rüdts für das Korrekturlesen und die Maultaschen.
- Dr. A. Ney und V. Ney für zahlreiche Diskussionen und die schönen Tage in Italien.

Bei Prof. Dr. T. S. Rahman und Mitarbeiter möchte ich mich herzlich bedanken, da mit ihrer Hilfe die beliebte Frage geklärt werden konnte, warum der Sauerstoff an der Oberfläche sitzt.

Dank gebührt auch Th. Herrmann, M. Wahl und Dr. N. Esser aus der AG Richter, die so freundlich waren und mir etwas Meßzeit an ihrer Kammer genehmigten.

Ein großes Dankeschön geht an meine Eltern und meine Schwester, die immer mindestens ein

Danksagung

offenes Ohr für meine „Probleme“ hatten. Desweiteren bedanke ich mich bei Familie Lindner und K. Krüger für deren moralische Unterstützung.

Nicht zuletzt bedanke ich mich bei Dr. J. Lindner, der mir in allen Lebenslagen eine große Hilfe war und meine vielen kleinen Fehler liebt.

Diese Arbeit wurde von der DFG innerhalb des Sfb 290 gefördert.