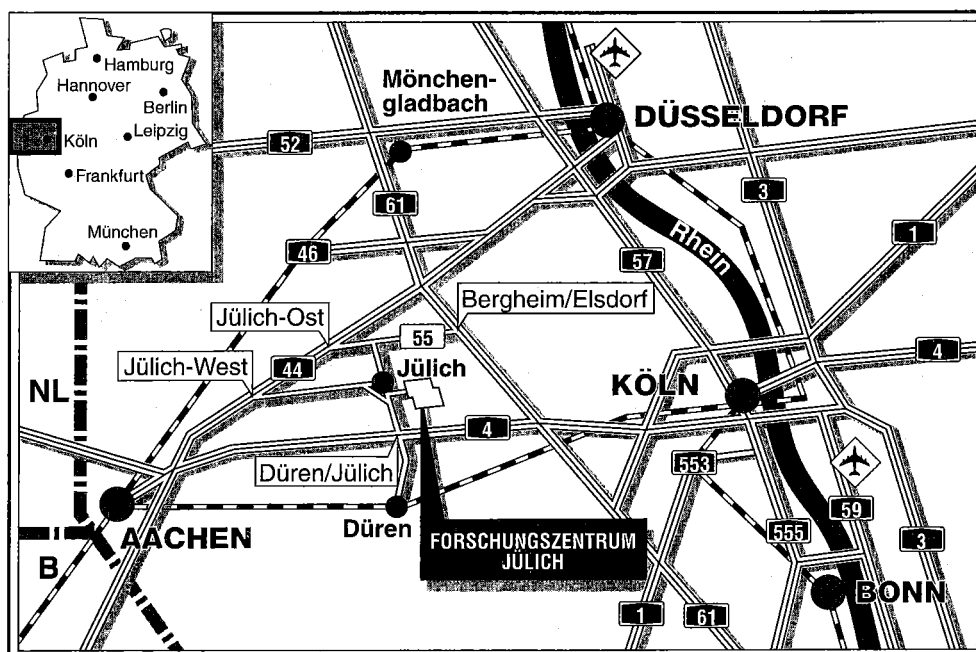


Institut für Festkörperforschung

**Zwischenschichtkopplung in epitaktischen
Fe-Schichtsystemen: Einfluß von Schicht-
wachstum, Grenzflächenrauhigkeit und
paramagnetischen Einschlüssen**

Markus Schäfer



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3290

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jül-3290

D38 (Diss. Universität Köln)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-61 02 · Telefax: 02461/61-61 03 · Telex: 833 556-70 kfa d

Zwischenschichtkopplung in epitaktischen Fe-Schichtsystemen: Einfluß von Schichtwachstum, Grenzflächenrauhigkeit und paramagnetischen Einschlüssen

Markus Schäfer

Abstract

The subject of this study was an examination into the influences of interface and surface structure on the interlayer coupling, more specifically long and short period oscillation of interlayer coupling and biquadratic coupling.

Critical to the study was the preparation and control of high quality epitaxial Fe/X/Fe samples (X=Cr, Ag). The Fe/X/Fe was layered onto a composition of a GaAs substrates with an Fe seed layer and an Ag buffer layer. It was important to observe the influence of the temperature T_S on the sample structure, therefore during growth process of the samples temperatures variances were introduced ranging from 100 K to 523 K. In order to preserve quality of the samples over the length of the study, the samples were prepared and stored in an ultra high vacuum environment.

The surface structure of the Fe/X/Fe-layers was investigated in-situ with SPA-LEED and RHEED. The interface structure was investigated ex-situ with x-ray diffraction. The magnetic properties were studied using an improved magneto-optic hysteresis loop technique developed specifically for this study.

The results of the structural examination of the first Fe-layer surface was the discovery of a ring structure in the SPA-LEED pattern. These patterns demonstrate, that the Fe-surface structure is regularly terraced. Numerical analysis of this pattern concluded that the terraces were grouped in 5 open layers with a terrace step width of 5 ($T_S = 300$ K) to 25 ($T_S = 523$ K) lattice constants.

These results remained constant after depositing an additional Cr-layer on top of this Fe-layer with a Cr-thickness ranging from 4 to 12 atomic layers. Upon examination of the Ag located on top of the first Fe-layer deviations were found to exist. First, no ring structure in the SPA-LEED pattern nor a corresponding spot splitting in the RHEED pattern was observed. Secondly, an increase in the number of open layers from 5 to 7 was found and a decrease within the terrace step width from 5 down to 1-2 ($T_S = 300$ K) to 25 down to 10 ($T_S = 523$ K).

The x-ray diffraction studies on the interface structures showed that the correlation length for the Fe/Cr/Fe-layer grown at $T_S = 300$ K was on average 1-2 lattice constants while it was 45 lattice constants for the samples grown at $T_S = 523$ K.

In reference to interlayer coupling, samples grown at $T_S = 523$ K revealed short and long period oscillations while samples grown at $T_S = 300$ K revealed only long period oscillations. The observed interlayer coupling with respect to short and long period oscillations is explained by the data obtained from both the surface structure analysis and the interface structure analysis.

In the process of examining the biquadratic coupling it was observed that Fe/Cr/Fe-samples grown at $T_S = 523$ K followed SLONCZEWSKI's fluctuation mechanism but the Fe/Cr/Fe-samples grown at $T_S = 300$ K and the Fe/Ag/Fe-samples at all temperatures did not fit the assumption of the model because of their poor surface and interface quality.

A second model explaining biquadratic coupling, SLONCZEWSKI's loose spin model, was studied by developing a second typ of samples. These samples were developed by evaporating additional Fe at low concentrations into the Ag spacer. The models predictions were observed experimentally within these samples. Biquadratic coupling was observed to be dependend upon measurement temperature and loose spin concentration.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zwischenschichtkopplung	3
2.1	Überblick	3
2.2	Aktueller Stand des theoretischen Verständnisses	4
2.3	Einfluß von Grenzflächendefekten	9
2.4	Experimentelle Beobachtung der biquadratischen Kopplung	11
2.5	Theoretische Modelle der 90°-Kopplung	12
2.5.1	Kopplungsterme höherer Ordnung: Intrinsischer Beitrag	12
2.5.2	Biquadratische Kopplung durch Grenzflächendefekte	12
2.5.3	Biquadratische Kopplung durch paramagnetische Verunreinigungen	15
3	Experimentelle Methoden	17
3.1	Schichtpräparation und Analyse	17
3.1.1	UHV-Schichtpräparation	17
3.1.2	Das SPA-LEED System	19
3.2	Magnetooptische Hysteresekurven	23
3.2.1	Magnetooptischer Kerr-Effekt	23
3.2.2	Anhysteretische Ummagnetisierungskurven	25

4	Charakterisierung der Oberflächenmorphologie durch Elektronenbeugung	28
4.1	Beugung an periodischen Strukturen	29
4.1.1	Ewald-Konstruktion	29
4.1.2	Kinematische LEED-Beugungstheorie	30
4.1.3	Streuphase	32
4.2	Der Einfluß von Oberflächendefekten auf das Beugungsbild	33
4.2.1	Punktdefekte	34
4.2.2	Atomare Stufen	34
4.2.3	Facetten und Mosaikstruktur	38
4.3	Quantitative Reflexprofilanalyse	40
4.3.1	Vertikale Rauigkeit: G(S)-Analyse	40
4.3.2	Laterale Verteilung: Domänen-Matrix-Methode	43
4.4	Beugung von Elektronen unter streifendem Einfall: RHEED	45
4.4.1	Beugungsmuster und der Einfluß von Defekten	45
4.4.2	Intensitätsoszillationen	48
5	Präparation und Charakterisierung von epitaktischen Ag-Schichten auf GaAs-Substraten	51
5.1	Grundlegendes zum epitaktischen Wachstum	52
5.2	GaAs als Substrat	55
5.3	Präparation und Charakterisierung einer epitaktischen Ag-Schicht . .	58
5.3.1	Schichtpräparation	58
5.3.2	Charakterisierung der Oberflächenstruktur	60
6	Präparation von Fe/X/Fe-Schichtsystemen auf epitaktischem (001)-Ag und Charakterisierung der Oberflächenstruktur	72
6.1	Präparation von Fe Filmen auf (001)-Ag Oberflächen	72
6.2	Wachstum bei Raumtemperatur	79
6.2.1	Oberflächenstruktur von 10 ML dicken Fe Filmen	79

6.2.2	Oberflächenstruktur von 30 ML dicken Filmen	92
6.3	Abhängigkeit der Oberflächenstruktur von der Wachstumstemperatur	94
6.4	Präparation und Oberflächenstruktur von Cr-Filmen	99
6.5	Präparation und Oberflächenstruktur von Ag-Filmen	104
7	Untersuchung der Grenzflächenstruktur	106
7.1	Rauigkeitsparameter	106
7.2	Röntgendiffraktometrie	107
8	Einfluß von Struktur und von paramagnetischen Einschlüssen auf die Zwischenschichtkopplung	113
8.1	Phänomenologische Beschreibung der Zwischenschichtkopplung	113
8.2	Einfluß der Schichtdickenfluktuation auf die Oszillationsperiode und die Amplitude der Kopplung	117
8.2.1	Schichtsystem Fe/Cr/Fe	117
8.2.2	Schichtsystem Fe/Ag/Fe	124
8.3	Biquadratische Kopplung	127
8.3.1	Biquadratische Kopplung durch Schichtdickenfluktuationen . .	127
8.3.1.1	Fluktuationsmechanismus nach Slonczewski	127
8.3.1.2	Fe/Cr/Fe-Schichten mit großem L	128
8.3.1.3	Schichtsysteme mit kleinem L	131
8.3.1.4	Diskussion der Ergebnisse: Biquadratische Kopplung durch Grenzflächendefekte	133
8.3.2	Biquadratische Kopplung durch paramagnetische Verunreinigungen	136
9	Zusammenfassung	143

1 Einleitung

In den letzten Jahren hat die Entwicklung und Herstellung neuartiger, extrem dünner magnetischer Schichten neue Aspekte in das Verständnis des Magnetismus eingebracht. Einige magnetische Eigenschaften dünner Filme unterscheiden sich gravierend von den Eigenschaften des massiven Materials. Diese besonderen Eigenschaften sind dabei nicht nur für die grundlagenorientierte Forschung von großem Interesse, sondern eröffnen auch der technischen Anwendung neue Perspektiven.

Einen dieser vielversprechenden neuen Effekte stellt die Wechselwirkung zweier dünner magnetischer Filme dar, die durch eine nichtmagnetische Zwischenschicht getrennt sind. In Abhängigkeit von der Dicke der Zwischenschicht ordnen sich die magnetischen Momente der einzelnen Schichten abwechselnd parallel oder antiparallel zueinander an. Die Anordnung der Schichtmagnetisierungen wird dementsprechend als ferromagnetisch oder antiferromagnetisch bezeichnet. Dies wird durch eine phänomenologisch eingeführte, bilineare Kopplung beschrieben.

Direkt verbunden mit der antiparallelen Ausrichtung der Schichtmomente ist der erhöhte Magnetowiderstandseffekt (engl. „Giant Magneto-Resistance“, GMR). Im Vergleich zum derzeit in der Datenspeichertechnologie angewendeten Anisotropen Magnetowiderstandseffekt kann mit dem wesentlich empfindlicheren GMR-Effekt eine Steigerung der Speicherdichte um eine Größenordnung erzielt werden. In anderen, technisch interessanten Bereichen wie beispielsweise in der Medizintechnik, werden hochempfindliche magnetische Sensoren auf Basis des GMR-Effekts neue Anwendungsfelder erschließen.

Inzwischen wurde für viele Schichtsysteme antiferromagnetische Kopplung nachgewiesen. Zusätzlich wird in Abhängigkeit von der Dicke der Zwischenschicht eine Oszillation zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Kopplung beobachtet. Bei bestimmten Schichtsystemen, die bei hoher Substrattemperatur hergestellt wurden, treten zwei Oszillationsperioden auf. Die verwendete hohe Substrattemperatur legt die Vermutung nahe, daß das Auftreten einer zweiten, kurzen Oszillationsperiode mit einer reduzierten Rauigkeit an der Grenzfläche verbunden ist.

Neben der parallelen und der antiparallelen Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen wird bei einer Vielzahl von Schichtsystemen eine orthogonale Anordnung beobachtet, die ebenfalls von der Zwischenschichtdicke abhängig ist. Diese orthogonale Anordnung der Magnetisierungen wird phänomenologisch durch eine biquadratische Kopplung beschrieben. Die Ursache dieser biquadratischen Kopplung ist nicht geklärt, obwohl es eine Reihe von Modellen gibt. Die meisten Modelle erklären die biquadratische Kopplung durch Rauigkeiten der Grenzfläche. Die biquadratische Kopplung kann auch durch paramagnetische Verunreinigung der Zwischenschicht erklärt werden. Sowohl aus der Perspektive der grundlagenorientierten Forschung wie auch mit Blick auf eine mögliche GMR-Anwendung ist es sehr wichtig, das Auftreten der biquadratischen Kopplung zu verstehen. Schichtsysteme mit biquadratischer Kopplung zeigen eine besonders große Änderung des Widerstandes in Abhängigkeit vom angelegten Feld.

Ziel dieser Arbeit ist es, den Einfluß der Rauigkeit an den Grenzflächen auf die bilineare und die biquadratische Kopplung zu untersuchen, um so ein tieferes Verständnis der Zwischenschichtkopplung zu erreichen. Dazu muß das Schichtwachstum, die Oberflächen- und die Grenzflächenstruktur bestimmt werden. Die Grenzflächenrauigkeit kann dann durch systematische Variation der Präparationsbedingungen kontrolliert verändert werden. Der Einfluß der Grenzflächenstruktur auf die Zwischenschichtkopplung wird durch anschließende magnetische Messungen untersucht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Schichtwachstum und die Oberflächenstruktur IN-SITU mit Elektronenbeugung untersucht. Zunächst wird die zur Interpretation der Beugungsdaten nötige Theorie eingeführt. Dann wird die Präparation und die Charakterisierung einer einkristallinen (001)-Ag-Oberfläche als Wachstumsunterlage für die Fe/X/Fe-Schichtsysteme beschrieben (X=Cr, Ag). Anschließend wird das Schichtwachstum und die Oberflächenstruktur des ersten Fe-Films und der Cr- bzw. Ag-Zwischenschicht analysiert. Die Grenzflächenrauigkeit wird mit EX-SITU Röntgenbeugung bei Fe/Cr/Fe-Schichten untersucht. Im letzten Kapitel wird die Zwischenschichtkopplung bei diesen Fe/X/Fe-Systemen gemessen und die Verbindung zwischen den strukturellen Eigenschaften und der Zwischenschichtkopplung diskutiert.

2 Zwischenschichtkopplung

2.1 Überblick

Die magnetische Zwischenschichtkopplung beschreibt die Wechselwirkung zweier dünner ferromagnetischer Filme, die durch eine nichtmagnetische Zwischenschicht getrennt sind. Es werden zwei Kopplungsarten unterschieden: Die bilineare Kopplung richtet die magnetischen Momente der ferromagnetischen Schichten in Abhängigkeit von der Dicke der Zwischenschicht entweder parallel oder antiparallel aus: Die parallele Ausrichtung wird als ferromagnetische Kopplung bezeichnet, die antiparallele Ausrichtung als antiferromagnetische Kopplung. Diese Kopplung wurde erstmals 1986 an Seltenerd- und Übergangsmetallsystemen experimentell beobachtet [1, 2]. Die biquadratische Kopplung führt zu einer orthogonalen Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen [3, 4]. Die orthogonale Ausrichtung ist von der Dicke der Zwischenschicht abhängig und wird für viele unterschiedliche Schichtsysteme wie z.B. Fe/Cr [3], Co/Cu [4] oder Fe/Ag [5] beobachtet. Weil die verwendeten Schichtsysteme keine Asymmetrie in der vierzähligen Kristallanisotropie zeigen, kann eine solche Asymmetrie als Ursache der 90°-Kopplung ausgeschlossen werden [6]. Abb. 2.1 verdeutlicht die beiden Kopplungsarten und die aus ihnen resultierende Anordnung der Schichtmomente.

Für Schichtsysteme aus Übergangsmetallen, wie z.B. Fe/Cr/Fe, konnte zunächst nur ein Cr-Zwischenschichtdickenbereich beobachtet werden, in dem antiferromagnetische Kopplung auftritt. Unter Ausnutzung der GMR-Widerstandserhöhung wurde ein zweiter Schichtdickenbereich entdeckt, in dem sich die magnetischen Momente antiparallel anordnen [7]. Seitdem wurde für eine grosse Anzahl von 3d-, 4d-, und 5d-Übergangsmetallen antiferromagnetische Kopplung nachgewiesen [8, 9, 10].

Die Präparation keilförmiger Zwischenschichten ermöglichte den Nachweis der oszillatorischen Austauschkopplung. Durch die Präparation einer Zwischenschicht mit kontinuierlich variierender Dicke (Keil) konnte die Austauschkopplung auf einer Probe für viele unterschiedliche Zwischenschichtdicken bei Präparation unter

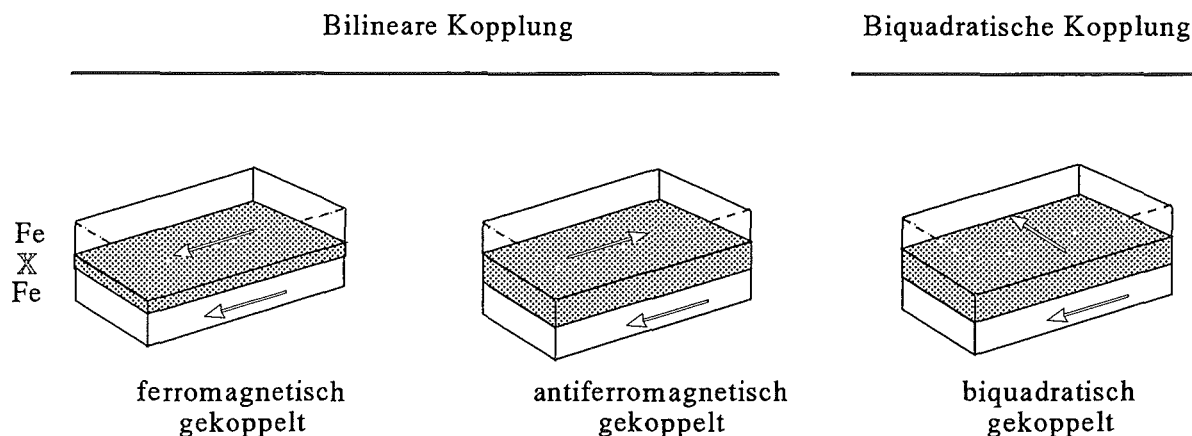


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der beiden Kopplungsarten. Bei der bilinearen Kopplung ordnen sich die Momente der Ferromagneten in Abhängigkeit von der Dicke d der Zwischenschicht alternierend parallel oder antiparallel an. Die biquadratische Kopplung führt zu einer orthogonalen Anordnung der Momente.

identischen Bedingungen untersucht werden. Bei Proben mit keilförmiger Zwischenschicht wird somit nur ein Parameter, die Zwischenschichtdicke, variiert. Mit derartigen Keilschichten gelang unter Verwendung ortsauflösender magnetischer Meßmethoden (magneto-optischer Kerr-Effekt, Brillouin-Lichtstreuung) der Nachweis einer schichtdickenabhängigen Oszillation der Austauschkopplung zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Kopplung [11].

Ebenso bedeutsam waren Keilschichten für den Nachweis einer zweiten Oszillationsperiode. Auf Fe-Einkristalle, Fe-Whiskern, wurden Cr-Keilschichten aufgedampft, wobei systematisch die Substrattemperatur erhöht wurde [12, 13]. Diejenigen Proben, die bei $T_S = 520$ K aufgedampft wurden, zeigten neben der bereits bekannten Oszillationsperiode von etwa 12 Monolagen (ML) Cr eine zweite Periode mit einer wesentlich kleineren Wellenlänge von 2 ML Cr. D.h., mit jeder zusätzlichen Monolage Cr wechselt die Kopplung zwischen ferromagnetisch und antiferromagnetisch!

2.2 Aktueller Stand des theoretischen Verständnisses

HATHAWAY [14] gibt eine aktuelle und umfangreiche Darstellung der verschiedenen theoretischen Ansätze zur Erklärung der Zwischenschichtkopplung. Die große Zahl der theoretischen Arbeiten läßt sich im wesentlichen auf zwei unterschiedli-

che Ansätze zurückführen [15]: Die direkte Berechnung der totalen Energie und die Verwendung von Kopplungsmodellen. In den Arbeiten der ersten Gruppe wird jeweils die totale Energie eines Schichtsystems mit paralleler und mit antiparalleler Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen berechnet. Die Kopplungsenergie ergibt sich dann als Energiedifferenz zwischen den beiden Anordnungen. Da diese Energiedifferenz sehr klein ist (Größenordnung 1 meV pro Einheitszelle), aber die totalen Energien sehr groß sind, ergeben sich bei der Berechnung erhebliche numerische Probleme. Diese Schwierigkeiten werden in der zweiten Gruppe durch Modellannahmen vermieden. Diese Modelle beruhen auf

1. der Annahme einer Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) Wechselwirkung,
2. der Näherung freier Elektronen,
3. der Raumquantisierung von Löchern,
4. dem Anderson Modell.

RKKY-artige Wechselwirkung

Mit einem RKKY-artigen Ansatz können im Fall der Edelmetall-Zwischenschichten die Oszillationsperioden der Zwischenschichtkopplung in sehr guter Übereinstimmung zu den experimentell beobachteten Perioden berechnet werden [16].

Magnetische Ionen, die sich in einem nichtmagnetischen Kristall befinden, polarisieren die Leitungselektronen in ihrer Umgebung. Diese Polarisation läßt sich durch ein RKKY-Störpotential beschreiben [17]. Wegen des Pauli-Prinzips wird die Störung nicht auf die unmittelbare Umgebung des magnetischen Ions beschränkt sein, sondern es wird sich vielmehr eine „Anreicherungs-“ und eine „Verarmungszone“ für die Spinpolarisation der Leitungselektronen ausbilden. Daher wird die Polarisation als Funktion des Abstandes ein oszillatorisches Verhalten aufweisen. Dieser oszillierende Polarisationszustand kann durch andere benachbarte magnetische Ionen „ausgelesen“ werden, so daß eine indirekte Kopplung zweier magnetischer Ionen entsteht. Die Periode der Oszillation wird dabei durch den Fermivektor k_F des nichtmagnetischen Wirtskristalls bestimmt.

Um dieses Modell auf die magnetische Schichten übertragen zu können, muß die ursprünglich betrachtete punktförmige Störung durch eine flächenartige Störung ersetzt werden [18]. Dabei ändert sich die Abhängigkeit der Oszillationsamplitude

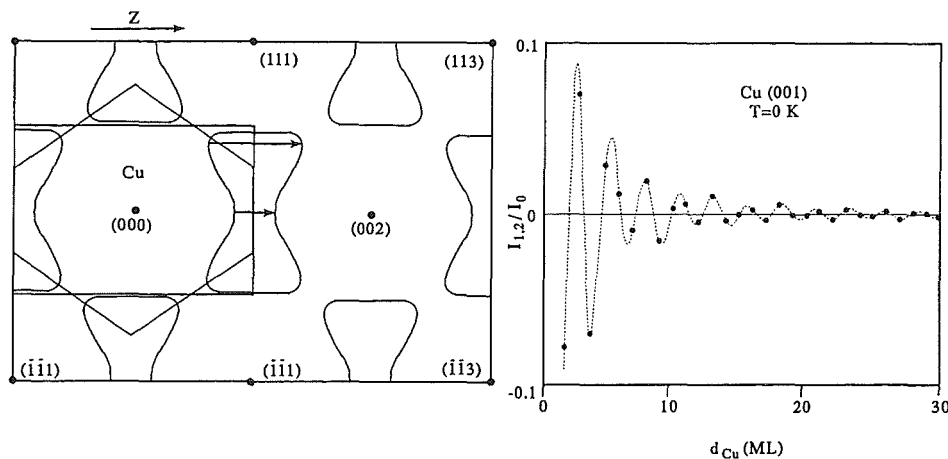


Abbildung 2.2: Links: Schnitt durch die Fermifläche von kubisch flächenzentriertem (kfz) (001)-Cu. Eingezeichnet sind die extremalen Wellenvektoren, die zu einer Oszillation der Kopplung führen (nach [16]).

Rechts: Die mit dem RKKY-Modell berechnete Austauschkopplung von (001)-kfz Cu als Funktion der Zwischenschichtdicke (nach [16]).

vom Abstand r zum Störpotential von $1/r^3$ für punktförmige Störungen nach $1/r^2$ für flächenartige Störungen.

Die Wechselwirkung zweier magnetischer Schichten wird mit Hilfe eines RKKY-artigen Störpotentials berechnet. Die zweite Schicht wird als spinabhängige Störung der durch die erste Schicht induzierten Magnetisierung aufgefaßt und die damit verbundene Änderung der totalen Energie berechnet. Die Oszillationsperiode wird wieder durch den Fermivektor k_F des nichtmagnetischen Materials bestimmt (Abb. 2.2). Eine Oszillation kann jedoch nur für extremale Fermivektoren in ausgezeichneten Richtungen beobachtet werden, da sich i.a. die Beiträge der einzelnen Wellenvektoren gegenseitig aufheben, sie „oszillieren sich weg“ [18]. Aus jedem extremalen Wellenvektor resultiert eine Periodenlänge der Kopplung.

Generalisierter Ansatz mittels Quanteninterferenzen

Durch die Wahl eines speziellen Störpotentials können aus dem generalisierten Ansatz mittels Quanteninterferenzen nach BRUNO [15] die aufgelisteten modellartigen Ansätze 1–4 abgeleitet werden. Ein weiterer Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, daß sich damit die Zwischenschichtkopplung über alle Zwischenschichtmaterialien – Metalle und Isolatoren – beschreiben läßt. Schließlich läßt sich im Rahmen die-

ses Modells auch die Abhängigkeit der Zwischenschichtkopplung von der Dicke des Ferromagneten erklären, ein Resultat, das zunächst durch ein einfaches phänomenologisches Modell erzielt wurde [19].

BRUNO [20, 21] und STILES [22] entwickelten unabhängig voneinander ein Modell zur Austauschkopplung, das die Austauschkopplung mittels resonanter Streuung beschreibt und eine Analogie zu einem optischen Fabry-Perot Interferometer herstellt. Die Grenzflächen zwischen den Ferromagneten und der Zwischenschicht werden als Spiegel aufgefaßt, zwischen denen sich in Abhängigkeit von ihrem Abstand konstruktive oder destruktive Interferenz der Elektronen, die als Blochwellen beschrieben werden, einstellen kann.

Die Zwischenschicht – „Resonator“ – wird als Potentialtopf der Dicke d beschrieben, der durch die Ferromagneten als Potentialbarrieren begrenzt wird (Abb. 2.3) [15]. Eine Welle mit dem Wellenvektor k bewegt sich nach rechts und wird am Potentialwall V_B mit der komplexen Amplitude $r_B = |r_B|e^{i\phi_B}$ reflektiert. Die reflektierte Welle mit Wellenvektor $-k$ wird am Potential V_A erneut mit der Amplitude $r_A = |r_A|e^{i\phi_A}$ reflektiert und bewegt sich wieder nach rechts, wo sich der Prozeß wiederholt. Der Betrag $|r_{A(B)}|$ des Reflexionskoeffizienten bestimmt die Amplitude der reflektierten Welle, das Argument $\phi_{A(B)}$ bestimmt die Phasenänderung durch die Reflexion.

Mehrfache Interferenzen durch Reflektionen an den Potentialen V_A bzw. V_B induzieren in der Zwischenschicht eine Änderung in der Zustandsdichte. Die Phasenverschiebung läßt sich nach einer einfachen Streuung an jedem Potential durch $\Delta\phi = 2kd + \phi_A + \phi_B$ ausdrücken. Konstruktive Interferenz ergibt sich bei einer Phasenverschiebung: $\Delta\phi = 2n\pi$ (n ganzzahlig), die zu einer Erhöhung der Zustandsdichte führt. Bei destruktiver Interferenz mit $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$ erhält man eine Abnahme der Zustandsdichte. Näherungsweise gilt dann für die Änderung der Zustandsdichte Δn :

$$\Delta n \propto d|r_A r_B| \cos(2kd + \phi_A + \phi_B) \quad (2.1)$$

Da das Streupotential des Ferromagneten spinabhängig ist, wird auch die Amplitude der reflektierten Welle spinabhängig sein. Daher wird sowohl eine Änderung der Ladungsdichte als auch eine Spinpolarisation durch den Ferromagneten in den Paramagneten induziert.

Die Zwischenschichtkopplungsenergie wird als Energiedifferenz zwischen der ferromagnetischen Konfiguration (parallele Momente) und der antiferromagnetischen

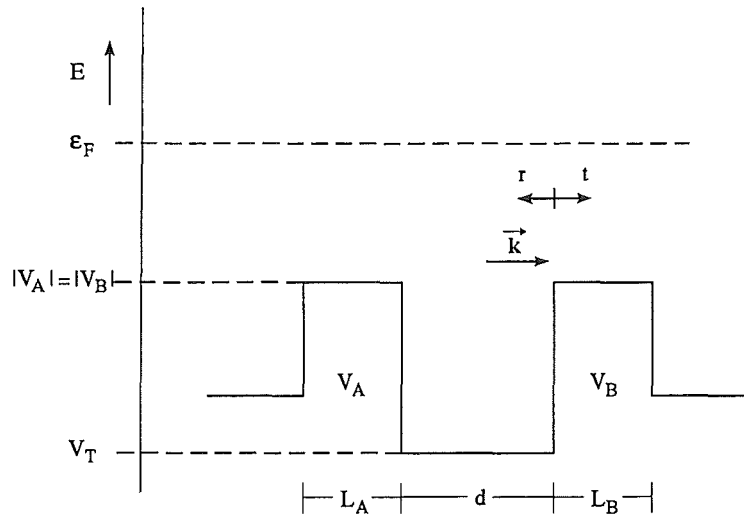


Abbildung 2.3: Eindimensionaler Potentialtopf. Mehrfache Reflexion einer einfallenden Welle mit dem Wellenvektor k am Potential V_A bzw. V_B führen – in Abhängigkeit von der Breite d des Topfes – zu stehenden Wellen.

Konfiguration (antiparallele Momente) berechnet. Dabei wird die Änderung der Energie, die mit diesen Quanteninterferenzen verbunden ist, auf die Änderung der Zustandsdichte Δn (Gl. 2.1) der einzelnen Konfigurationen zurückgeführt. Die Änderung der Zustandsdichte wiederum ergibt sich aus der Berechnung der Reflexionskoeffizienten. Der magnetische Anteil wird durch unterschiedliche Reflexionskoeffizienten für die unterschiedlichen Spinorientierungen berücksichtigt: $r^\uparrow \neq r^\downarrow$. Neben Reflexion kann auch Transmission der Elektronen an der Grenzfläche auftreten. Diejenigen Elektronen, die in den Ferromagneten eingedrungen sind, können an der Rückseite des Ferromagneten reflektiert werden. Die Zwischenschichtkopplung zeigt dann auch Oszillationen in Abhängigkeit von der Dicke der Ferromagneten.

Beim Übergang zu einem realistischen dreidimensionalen Fall erhält man im asymptotischen Grenzfall großer Zwischenschichtdicken nur an besonderen Punkten der Fermifläche Beiträge zur Kopplung [15]. An diesen besonderen Punkten besitzt die Fermifläche in der untersuchten Kristallorientierung einen extremalen Durchmesser. An anderen Punkten der Fermifläche oder in beliebigen Richtungen interferieren die Beiträge zur Kopplung destruktiv. Die Periode der Kopplung wird durch den extremalen Durchmesser der Fermifläche bestimmt, die Amplitude zeigt in Abhängigkeit vom Abstand d zur Grenzfläche eine Dämpfung mit $1/d^2$.

BRUNO [15] zeigt, daß sich andere Modelle aus diesem Ansatz der Quanten-

interferenzen ableiten lassen. So kann z.B. ein RKKY-artiges Störpotential V zur Berechnung der Reflexionskoeffizienten herangezogen werden, wobei die Wechselwirkung zwischen einem Leitungsbandelektron mit Spin s an der Position $\mathbf{r}$ und einem lokalisierten Spin $\mathbf{S}$ am Ort $\mathbf{R}$ durch $V = A\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})\mathbf{s}\mathbf{S}$ beschrieben wird [17].

Mit Hilfe dieses generalisierten Ansatzes kann eine große Bandbreite von aktuellen experimentellen Ergebnissen erklärt werden: (i) Oszillationen der Austauschkopplung als Funktion der Schichtdicke der ferromagnetischen Schicht konnten zuerst am (001)-Co/Cu/Co Schichtsystem [23] beobachtet werden, dann auch für (001)-Fe/Cr/Fe [24]. Die experimentell ermittelte Periodenlänge $\Lambda \approx 3.5$ ML stimmt im Fall des (001)-Co/Cu/Co hervorragend mit dem theoretisch berechneten $\Lambda^{theo} \approx 3.5$ ML [15] überein. (ii) Antiferromagnetische Austauschkopplung wurde auch bei isolierenden Zwischenschichten experimentell nachgewiesen, und auch die qualitative Abhängigkeit von der Temperatur konnte gezeigt werden [25]. Schließlich konnte direkt auf einer nichtmagnetischen Ru Schicht, die auf einem Co Film aufgewachsen war, eine Oszillation des magneto-optischen Kerr Effektes ohne zweite ferromagnetische Schicht nachgewiesen werden [26]. Die Periode dieser Oszillation ist vergleichbar derjenigen von austauschgekoppelten Co/Ru/Co Schichtsystemen und weist auf eine enge Verbindung von Zwischenschichtkopplung und Quantentrogzuständen hin.

2.3 Einfluß von Grenzflächendefekten

Bisher wurden atomar glatte Grenzflächen angenommen. Experimentell lassen sich derartige perfekte Grenzflächen nicht realisieren. An den Grenzflächen gibt es Stufen, die zu einer Variation der Zwischenschichtdicke führen, sofern die Stufen an der Ober- und der Unterseite der Zwischenschicht nicht perfekt korreliert sind. Ein einfaches Modell nimmt eine Änderung der mittleren Zwischenschichtdicke n ML um jeweils eine ML nach oben bzw. nach unten an, d.h. es gibt Bereiche, in denen die Zwischenschicht $(n - 1)$ ML dick ist und entsprechend $(n + 1)$ ML [16, 27]. Als Folge der Variation der Zwischenschichtdicke um ± 1 ML ändert sich das Vorzeichen der Austauschkopplung, sofern es eine Periode $\Lambda = 2$ ML gibt. Unter der Annahme, daß die laterale Ausdehnung der Bereiche konstanter Zwischenschichtdicke groß gegen die mittlere Dicke der Zwischenschicht sind, können die unterschiedlichen Beiträge zur Austauschkopplung addiert werden. Dabei werden die einzelnen Beiträge entsprechend ihrem Anteil an der Grenzfläche gewichtet; in dem einfachen Ansatz werden

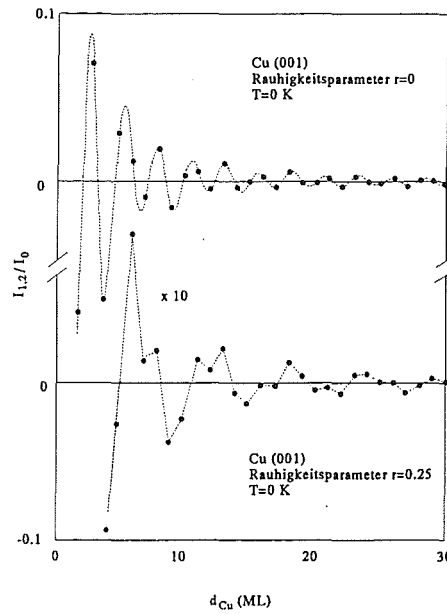


Abbildung 2.4: Berechnete Austauschkopplung als Funktion der Zwischenschichtdicke n_{Cu} für eine (001)-Cu Zwischenschicht (nach [16]).

- (a) Ideale Grenzfläche: $r = 0$ ($0 \leq r \leq 1$: Rauigkeitsparameter)
(b) Grenzfläche mit Rauigkeit: $r = 0.25$.

die Dicken $(n - 1)$ und $(n + 1)$ jeweils mit r gewichtet, n wegen der Normierung mit $1 - 2r$. Abb. 2.4 zeigt den Einfluß der Rauigkeit auf die Zwischenschichtkopplung: Dargestellt wird die Kopplung als Funktion der Zwischenschichtdicke für eine idealisierte Grenzfläche mit $r = 0$ und für eine raue Grenzfläche mit $r = 0.25$ [16]. Durch die Rauigkeit wird die Periode scheinbar vergrößert, weil die kurze Periode durch die Rauigkeit unterdrückt wird. Die Grenzflächenrauigkeit wirkt als „Tiefpassfilter“ für die Oszillationsperiode. Zusätzlich zur Änderung der Periode wird die Amplitude der Kopplung um den Faktor 10 geschwächt. Diese starke Dämpfung kann die Abweichung zwischen theoretisch berechneter Kopplungsamplitude und experimentell beobachteter Amplitude qualitativ erklären.

Neben der Grenzflächenrauigkeit können auch Versetzungen durch Gitterfehl-anpassung und Gitterverzerrungen zu einer sehr starken Dämpfung der Oszillation führen [28]. Diese beiden Effekte können jedoch in (001)-Orientierung, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersucht wird, vernachlässigt werden.

2.4 Experimentelle Beobachtung der biquadratischen Kopplung

Je nach Verhältnis der Kopplungsstärken von bilinearer zur biquadratischen Kopplung wird in Remanenz eine antiparallele oder eine orthogonale Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen beobachtet. Auch wenn die Kopplung antiferromagnetisch und die zugehörige Kopplungsstärke größer ist als diejenige der biquadratischen Kopplung, kann eine 90°-Ausrichtung der Magnetisierungen während des Ummagnetisierungsprozesses auftreten und experimentell nachgewiesen werden. Die biquadratische Kopplung ist jedoch nicht nur wegen der ungewöhnlichen Symmetrie von großem physikalischen Interesse, sondern auch technologisch besonders reizvoll. Der GMR-Effekt weist bei orthogonal ausgerichteten Schichtmagnetisierungen in Remanenz eine besonders große, lineare Änderung des elektrischen Widerstands mit dem angelegten Feld auf [29].

Für eine detaillierte Diskussion werden die Kopplungsparameter J_1 und J_2 eingeführt, die jeweils ein direktes Maß der Kopplungsstärke zwischen zwei ferromagnetischen Schichten darstellen. Wird nur ein kleiner Bereich der Probe betrachtet, so kann eine homogene Magnetisierung dieses Bereiches vorausgesetzt werden. Die statischen magnetischen Eigenschaften des Schichtsystems können dann mit den Magnetisierungen $\mathbf{M}_1$ und $\mathbf{M}_2$ beschrieben werden, die wie makroskopische Momente betrachtet werden. Die Wechselwirkung zweier ferromagnetischer Filme kann phänomenologisch in Analogie zum Heisenberg Austausch durch $E_J = J \mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2$ beschrieben werden, wobei die $\mathbf{m}_i$ durch die normierten magnetischen Momente $\mathbf{m}_i = \mathbf{M}_i / |\mathbf{M}_i|$ gegeben sind. Die Energiedichte E_J wird nur durch J und den Winkel ϑ zwischen den magnetischen Momenten $\mathbf{m}_i$ bestimmt und kann ausgedrückt werden durch:

$$E_{ex} = -J_1 \cos \vartheta - J_2 (\cos \vartheta)^2 \quad (2.2)$$

J_1 ist der Kopplungsparameter für die bilineare Austauschkopplung, der in Abhängigkeit vom Vorzeichen entweder zu paralleler ($J_1 > 0$: ferromagnetische Kopplung) oder antiparalleler ($J_1 < 0$: antiferromagnetische Kopplung) Anordnung der magnetischen Momente führt. J_2 gibt die Kopplungsstärke für die biquadratische Kopplung an, die für $J_2 < 0$ (mit $|J_1| < |J_2|$) zu einer orthogonalen Ausrichtung der Momente führt. Tritt 90°-Kopplung auf, so muß der Parameter J_2 eingeführt werden, da J_1 nicht zu einer orthogonalen Anordnung der Momente führt [3].

2.5 Theoretische Modelle der 90°-Kopplung

2.5.1 Kopplungsterme höherer Ordnung: Intrinsischer Beitrag

Die Austauschkopplungsenergie wird in den theoretischen Ansätzen als Differenz zwischen der parallelen und der antiparallelen Anordnung der Schichtmomente berechnet. Diese Differenz kann nach Potenzen von $\cos \vartheta$ entwickelt werden [15, 18, 30]. Die Terme zweiter Ordnung einer solchen Entwicklung entsprechen dann dem Term zweiter Ordnung in Gl. 2.2. Es resultiert ein intrinsischer Beitrag zur 90°-Kopplung. Im Modell der Quanteninterferenzen (Kap. 2.2) lassen sich diese Beiträge anschaulich als Elektronen verstehen, die zweimal an jeder Seite des Topfes gestreut worden sind [15]. Die resultierende biquadratische Kopplung oszilliert mit halber Periode (doppelter Frequenz), d.h. in Abhängigkeit von der Zwischenschichtdicke oszilliert J_2 mit halber Periode von J_1 . Die Amplitude von J_2 ist nach diesen Berechnungen um 2 bis 3 Größenordnungen kleiner als die von J_1 [15].

Experimentell wird jedoch keine Oszillation von J_2 mit halber Oszillationsperiode von J_1 beobachtet. Die experimentell ermittelten Kopplungsstärken von J_1^{exp} und J_2^{exp} stimmen in der Größenordnung überein, so daß das mit dem intrinsischen Modell berechnete J_2 viel zu klein ist. Somit reichen die intrinsischen Beiträge alleine nicht aus, um die experimentell beobachtete 90°-Kopplung zu erklären.

2.5.2 Biquadratische Kopplung durch Grenzflächendefekte

Fluktuation der bilinearen Kopplung

SLONCZEWSKI [31] schlägt einen auf Grenzflächendefekten beruhenden Mechanismus vor. An beiden Grenzflächen der Zwischenschicht zu den Ferromagneten gibt es Terrassen, die nicht korreliert sind (Abb. 2.5). Die Änderung der Zwischenschichtdicke an einer solchen Terrasse kann an denjenigen Stellen, an denen J_1 einen Nulldurchgang besitzt, zu einer Änderung des Vorzeichens von J_1 führen. Die Änderung des Vorzeichen von J_1 an einer solchen monoatomaren Stufe führt zu einer Fluktuation der bilinearen Kopplung und bevorzugt bei unmittelbar benachbarten Bereichen **innerhalb** einer Schicht eine antiparallele Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen. Innerhalb einer Schicht wirkt jedoch der ferromagnetische Austausch, der eine solche Fluktuation unterdrückt. Es entsteht eine Konkurrenz zwischen der räumlich variierenden Austauschkopplung und der ferromagnetischen Austauschsteifig-

keit, die eine Variation der magnetischen Momente innerhalb der Ferromagneten unterdrückt. Die Konkurrenz der beiden unterschiedlichen Energiebeiträge führt zu einer Relaxation der Gesamtenergie, wenn sich die Schichtmomente nicht kollinear ausrichten. Ist der Betrag von J_1 bei beiden Schichtdicken nahezu gleich, entsteht eine 90° -Anordnung der Momente.

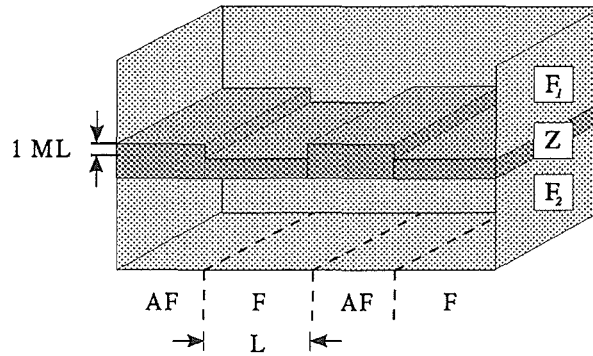


Abbildung 2.5: Die Grenzflächenrauhigkeit führt zu einer Variation der Schichtdicke. Ändert sich das Vorzeichen der Kopplung von Stufe zu Stufe, so fluktuiert die bilineare Kopplung innerhalb einer Schicht.

Nach Abb. 2.5 sei die Länge einer Terrasse mit konstanter Zwischenschichtdicke L , die Änderung der bilinearen Kopplung J_1 zwischen den benachbarten Terrassen betrage $2\Delta J$, und die Dicke der Ferromagneten sei D , dann läßt sich die Kopplungsstärke J_2 aus dem Fluktuationsmechanismus berechnen zu [31]:

$$J_2 = -\frac{4(\Delta J)^2 L}{\pi^3 A} \coth\left(\frac{\pi D}{L}\right) \quad (2.3)$$

wobei der Parameter $A = 2 \cdot 10^{-11}$ J/m den ferromagnetischen Austausch innerhalb der Schichten beschreibt. Aus Gl. 2.3 folgt, daß bei Zunahme der Terrassenlänge L auch die Stärke der von J_2 wächst. Eine zunehmende Terrassenlänge steht aber für glattere Grenzflächen, so daß ein scheinbarer Widerspruch entsteht: Obwohl die Entstehung der biquadratischen Kopplung auf Rauigkeit zurückgeführt wird, wächst J_2 mit immer glatteren Grenzflächen an. Allerdings wird dieser Effekt durch zwei Bedingungen eingeschränkt: Ist die Terrassenlänge L in der Größenordnung der Domänenwandbreiten (bei Fe etwa 70 nm), so zerfallen die einzelnen Terrassen in Domänen, die entsprechend dem Vorzeichen von J_1 gekoppelt sind. Im anderen Grenzfall der kleinen Längen L in der Größenordnung weniger Gitterkonstanten ist Gl. 2.3 nicht mehr gültig, da diese Gleichung durch Anwendung der Kontinuums-theorie abgeleitet worden ist.

Für viele Schichtsysteme wird durch diesen Ansatz das Vorzeichen und die Größenordnung der biquadratischen Kopplung korrekt angegeben [3, 32, 33, 34]. Ein quantitativer Vergleich zwischen Experiment und Theorie ist jedoch problematisch: Die sehr schwierige experimentelle Bestimmung der Terrassenlänge L wird umgangen, indem L als Variationsparameter in den Rechnungen verwandt wird [33].

Die Temperaturabhängigkeit von J_2 wird mit dem Fluktuationsmodell für verschiedene Schichtsysteme nicht übereinstimmend mit dem Experiment wiedergegeben. Wird $\Delta J = J_1$ angenommen, so erhält man mit Gl. 2.3: $J_2(T) \propto (J_1)^2(T)$. Für (001)-Fe/Al/Fe [35] und (001)-Fe/Au/Fe [9] wird jedoch eine wesentlich stärkere Temperaturabhängigkeit beobachtet, so daß weitere Ursachen der biquadratischen Kopplung angenommen werden müssen.

Dipol-Mechanismus

DEMOKRITOV [36] berücksichtigt Dipolfelder als Folge einer gestuften Oberfläche. Die Dipolfelder treten an Terrassen auf (Abb. 2.5) und führen zu langreichweitigen Streufeldern. Bei korrelierter Rauigkeit der oberen und der unteren Grenzfläche unterstützen diese Streufelder in Abhängigkeit von der Phase der Korrelation eine parallele oder eine antiparallele Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen. Im Fall der unkorrelierten Rauigkeit entsteht ein oszillierendes Dipolfeld, dessen Stärke exponentiell mit dem Abstand von der Grenzfläche abfällt. Im unkorrelierten Fall entsteht so ein Beitrag zur Gesamtenergiedichte, der eine senkrechte Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen begünstigt.

Im Vergleich zum Experiment sind die resultierenden Kopplungsstärken J_2 in der Regel klein. Für Terrassen der Größenordnung $L = 20$ nm entstehen Kopplungsstärken von $J_2 \approx 0.01 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$. Entsprechende Werte werden bei z.B. (001)-Fe/Au/Fe [9] beobachtet, für andere Schichtsysteme wie (001)-Fe/Cr/Fe [3] oder (001)-Fe/Al/Fe [9] sind sie jedoch um eine Größenordnung zu klein.

Proximity Magnetismus der Zwischenschicht

SLONCZEWSKI [37] schlägt für Zwischenschichten mit intrinsischem Antiferromagnetismus -z.B. Cr oder Mn- einen weiteren Mechanismus vor, der die besonders starke biquadratische Kopplung dieser Materialien erklären soll. Ausgehend von einer starken Polarisation der Zwischenschicht durch den Ferromagneten entsteht in

der Zwischenschicht auch oberhalb der Néel-Temperatur eine antiferromangetische Anordnung der Spins. Eine Fluktuation der Zwischenschichtdicke durch Rauigkeit auf einer Längenskala $L < 10$ nm (Abb. 2.5) führt zu einer nicht kollinearen Ausrichtung der Spins und somit zu einem nicht kollinearen Beitrag zur Zwischenschichtkopplung.

Durch diesen Beitrag zur biquadratischen Kopplung sollte bei Hysteresekurven die Magnetisierung mit wachsendem Feld nur langsam in die Sättigung kriechen. Ein solches Verhalten wird allerdings nur bei Fe/Cr-Mehrfachschichten beobachtet [38], wobei es sich nicht um einen mikromagnetischen Effekt handelt, wie die Beobachtung von Domänen während des Ummagnetisierungsprozesses gezeigt hat. Die beobachteten Hysteresekurven, die ein solch langsames Kriechen in die Sättigung zeigen, lassen sich nur qualitativ, nicht aber quantitativ mit Hilfe des Proximity-Modells beschreiben [38].

2.5.3 Biquadratische Kopplung durch paramagnetische Verunreinigungen

In einem weiteren Modell schlug SLONCZEWSKI [32] paramagnetische Verunreinigungen als Ursache der biquadratischen Kopplung vor, die zu der beobachteten starken Temperaturabhängigkeit der Kopplungsstärke J_2 führen. Die paramagnetischen Verunreinigungen (engl.: „loose spins“) werden in diesem Modell durch zwei unterschiedliche Mechanismen hervorgerufen. Erstens könnten geringe Mengen des Ferromagneten in die Zwischenschicht eindiffundieren und dort paramagnetische Ionen bilden. Zweitens könnten Atome an der Grenzfläche eine gegenüber dem Volumenmaterial reduzierte ferromagnetische Kopplung an das Volumenmaterial besitzen¹. Die paramagnetischen Verunreinigungen bzw. die Grenzflächenatome koppeln dann über eine RKKY-Wechselwirkung an die beiden Ferromagneten an, was zu einem additiven Beitrag zur ϑ -abhängigen Kopplungsenergiedichte E_J führt. Dieser zusätzliche Beitrag wird nach Potenzen von $\cos \vartheta$ entwickelt (vgl. Gl. 2.2) und liefert Terme für J_1^{ls} und J_2^{ls} , wobei der Index ls die zusätzliche Kopplung als Folge von Verunreinigungen charakterisieren soll. Die Kopplungsstärken J_i^{ls} sind dabei von drei Parametern abhängig: der Temperatur T , der Dichte der Verunreinigungen ρ und dem RKKY-Austauschpotential U . Der Ansatz ist nur für geringe Konzentrationen

¹Analog zur Idee der schwach ferromagnetisch gekoppelten Grenzflächenatomlage entwickelten BARNÁŠ und GRÜNBERG zeitgleich einen Mechanismus, der ebenfalls zur biquadratischen Kopplung führen kann [39].

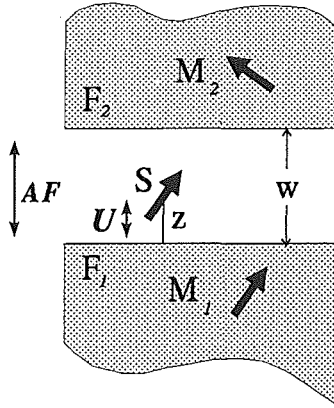


Abbildung 2.6: Paramagnetische Verunreinigungen mit ungepaartem Spin S befinden sich im Abstand z von der Grenzfläche. Sie koppeln über einen RKKY-Mechanismus an die Ferromagneten F_1 und F_2 an. (nach [32]).

- kleines ρ - gültig und zeigt eine lineare Abhängigkeit der Kopplungsstärken J_i^{ls} von der Dichte ρ .

Slonczewski vergleicht seinen Ansatz mit experimentellen Daten, indem er die berechnete Temperaturabhängigkeit von J_2 an die experimentellen Daten für (001)-Fe/Al/Fe und (001)-Fe/Au/Fe Schichtsysteme anpaßt [32]. Dabei dienen ρ und U als Anpassungsparameter. Die zugrundeliegenden experimentellen Daten sind an Proben gewonnen worden, die bei erhöhten Präparationstemperaturen erzeugt worden sind. Daher läßt sich eine erhöhte Wahrscheinlichkeit von paramagnetischen Ionen in der Zwischenschicht annehmen. Erste Experimente, bei denen zusätzlich Material des Ferromagneten in die Zwischenschicht aufgedampft wurde, zeigen eine starke Tendenz, die bilineare Kopplung J_1 zu schwächen, jedoch konnte kein Anstieg von J_2 beobachtet werden [40].

3 Experimentelle Methoden

3.1 Schichtpräparation und Analyse

3.1.1 UHV-Schichtpräparation

Das Schichtpräparations- und Analysesystem besteht aus drei, durch Schleusen voneinander getrennten Kammern (vgl. Abb. 3.1). Als Manipulator dient ein heiz- und kühlbarer Transferstab, auf dem die zu bedampfenden Substrate befestigt werden. Während der Schichtpräparation kann eine Substrattemperatur zwischen 80-900 K gewählt werden. Der Transferstab wird mit einem drehzahlgeregelten Elektromotor mit definierter Geschwindigkeit durch die drei Kammern gefahren.

Das auf dem Transferstab befestigte Substrat wird durch eine differentiell gepumpte Vakuumschleuse in die Vorkammer gefahren. In der Vorkammer wird mittels Turbomolekularpumpe und vorgeschalteter Drehschieberpumpe ein Basisdruck von $5 \cdot 10^{-7}$ Pa ($5 \cdot 10^{-9}$ mbar) erreicht. Hier kann Material wahlweise mit einer Elektronenkanone oder in einem heizbaren Tiegel verdampft werden. Die Schichtdicke wird mit einem Schwingquarz-Schichtdickenmonitor gemessen. Aufgrund des relativ hohen Basisdrucks werden in dieser Kammer im wesentlichen Abdeck- oder Schutzschichten präpariert.

In der Hauptkammer wie auch in der Analysenkammer wird durch einen Turbomolekularpumpstand und eine zusätzliche Titansublimationspumpe ein Basisdruck von $3 \cdot 10^{-9}$ Pa ($5 \cdot 10^{-11}$ mbar) erreicht. Insgesamt können mit drei separaten Elektronenkanonen bis zu fünf unterschiedliche Materialien verdampft werden, wobei eine Kanone über einen Dreifachtiegel verfügt, so daß mit dieser Kanone aus drei Materialien ausgewählt werden kann. Die Schichtdicken werden wiederum mit einem Schwingquarzmonitor bestimmt.

Schichtdickenabhängige Eigenschaften können besonders gut untersucht werden, wenn sich die interessierende Schichtdicke auf einem Substrat linear ändert. Derartige Proben mit keilförmiger Schicht besitzen den Vorteil, daß eine Probe viele

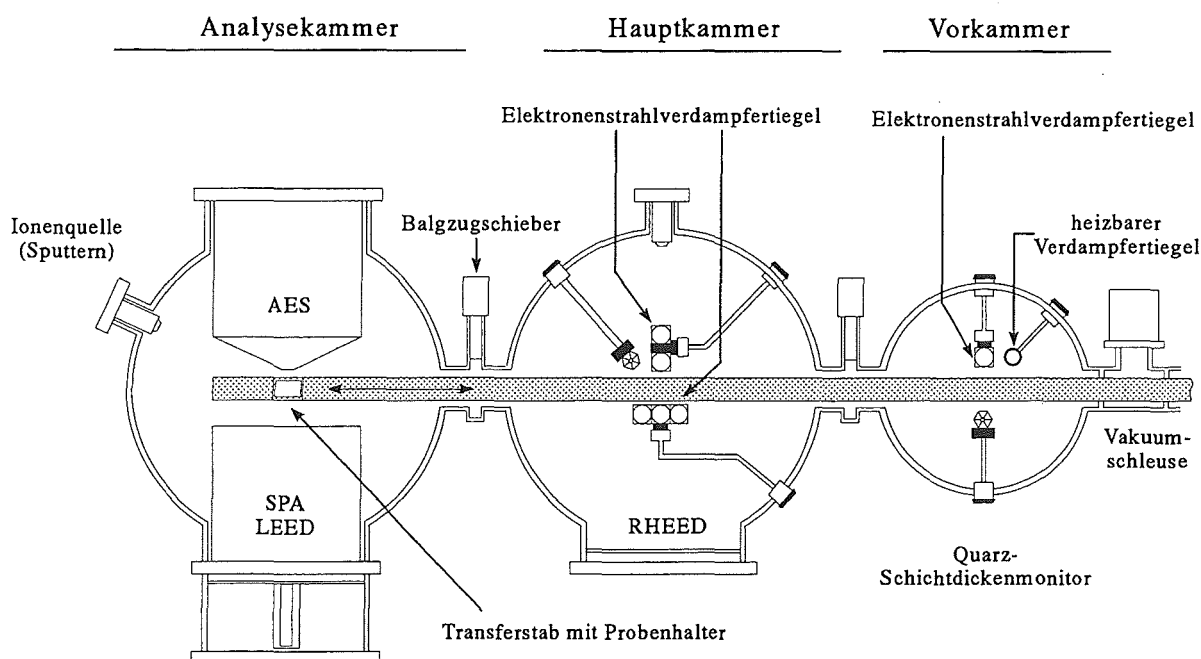


Abbildung 3.1: Aufriß der Schichtpräparationsanlage

Schichtdicken t auf einem Substrat besitzt, die unter den gleichen Präparationsbedingungen erzeugt werden. Der Einfluß von unterschiedlichen Substrateigenschaften oder unterschiedlichen Herstellungsbedingungen kann dadurch wesentlich reduziert werden. Experimentell wird eine keilförmige Schicht erzeugt, indem das Substrat bei konstanter Aufdampftrate kontinuierlich mit konstanter Geschwindigkeit des Transferstabes hinter eine Blende gefahren wird.

Während des Schichtwachstums kann sowohl der Wachstumsprozeß als auch die aufgedampfte Schichtdicke über ein RHEED-System (Reflection High Energy Electron Diffraction) zusätzlich überwacht werden. Dabei fällt ein hochenergetischer Elektronenstrahl unter einem Einfallswinkel $\alpha \leq 3^\circ$ auf die Probenoberfläche. Der gebeugte Strahl trifft auf einen Fluoreszenzschirm und erzeugt dort ein charakteristisches Muster, aus dem Informationen über das Schichtwachstum und die Oberflächenstruktur gewonnen werden können. Das Reflexmuster auf dem Schirm wird über eine Videokamera aufgenommen und in einem PC digitalisiert. Die digitale Bildspeicherung und Auswertung erfolgt durch das kommerziell erhältliche *eeScan*®-Programm. Abb. 3.2 zeigt das RHEED-Muster einer sauberen (001)-Fe-Whiskeroberfläche aufgenommen in (100)-Richtung. Da die Fe-Whisker sehr große Oberflächenterrassen in der Größenordnung von $1 \mu\text{m}$ besitzen, kann Abb. 3.2 als Refe-

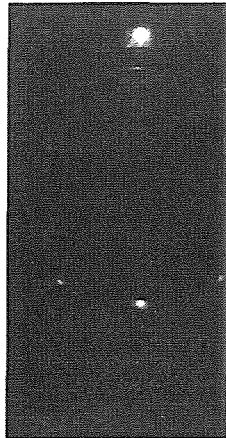


Abbildung 3.2: RHEED-Aufnahme eines Fe-Whiskers bei $E=8400$ eV unter dem Einfallswinkel $\alpha = 1.5^\circ$.

renz und zur Kalibrierung des RHEED-Systems verwendet werden.

In der Analysenkammer befindet sich zur strukturellen Analyse der Oberfläche ein SPA-LEED (Spot Profil Analysis-Low Energy Electron Diffraction). Zur chemischen Analyse wird ein Auger-Elektronenspektrometer mit Zylinderspiegelanalysator (maximales Auflösungsvermögen $1/100$ ML [41]) eingesetzt. Probenoberflächen können durch Ar^+ -Ionenbeschuß aus einer Ionenquelle gereinigt werden (Sputtern).

3.1.2 Das SPA-LEED System

Aufbau

Das SPA-LEED ist eine Weiterentwicklung des optischen LEED und speziell dafür konzipiert, eine möglichst hohe Auflösung zu erreichen. Eine Schemazeichnung ist in Abb. 3.3 dargestellt.

Das SPA-LEED bietet die Möglichkeit des Sichtbetriebes, wobei das Beugungsbild wie beim optischen LEED auf einem Leuchtschirm abgebildet wird. Dies dient hauptsächlich zum schnellen Auffinden von Beugungsreflexen.

Der große Vorteil des SPA-LEED wird beim Betrieb von Channeltron und Ablenkeinheit deutlich. Der an der Probe gebeugte Elektronenstrahl wird mittels einer elektrostatischen Ablenkeinheit über die Eintrittsblende des Channeltrons ($\varnothing = 0.1$ mm) gerastert. Aufgrund der speziellen Ablenkgeometrie mit 2 Oktupolen wird sowohl der einfallende als auch der reflektierte Elektronenstrahl abgelenkt. Dadurch

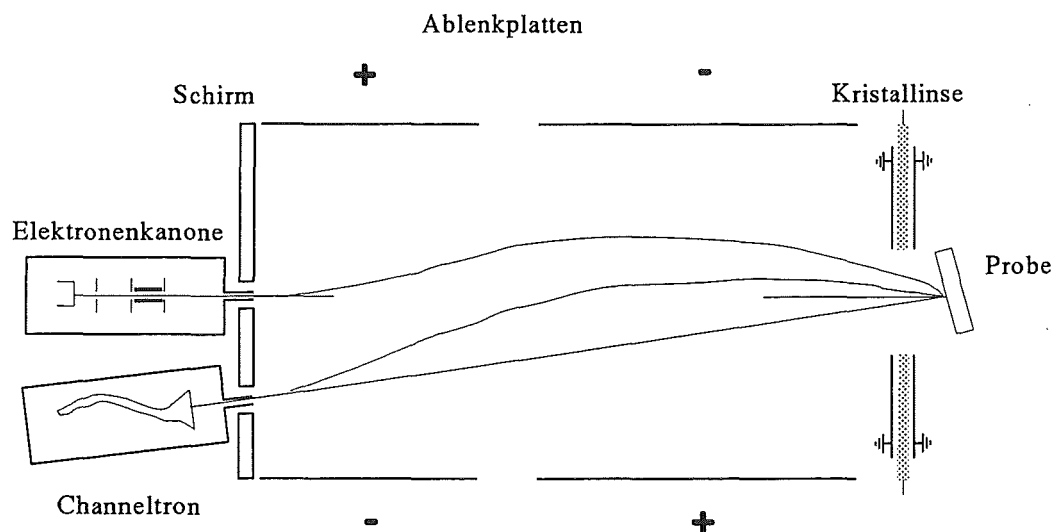


Abbildung 3.3: Aufbau des SPA-LEED

trifft der einfallende Strahl nahezu immer die gleiche Position auf der Probe, und es wird bei einer Messung nur der Anteil des Streuvektors parallel zur Oberfläche $\mathbf{K}_{||}$ variiert, während der Anteil senkrecht zur Oberfläche $K_{\perp}$ im wesentlichen konstant bleibt.

Der maximal durchsteuerbare Winkelbereich beträgt 30° . Die Zählrate des verwendeten Channeltrons (Galileo, Typ CEM 4816) beträgt maximal 10^6 Impulse/Sekunde. Da ab ca. 200 000 Impulse/Sekunde Nichtlinearitäten in der Anzeige auftreten können, wurde der Primärstrom so gewählt, daß die Zählrate unterhalb dieses Wertes lag.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Ansteuerung der Ablenkeinheit und die Datenerfassung auf Computersteuerung umgestellt. Die Ansteuerung der Ablenkeinheit geschieht über einen PC mit D/A-Wandler (Fa. Omicron); gleichzeitig werden die Zählimpulse des Channeltrons nach einer zusätzlichen Verstärkung mit einem Zählmodul eingelesen. Mit dem verwendeten Meßprogramm *SPA-4*¹ können eindimensionale Linienprofile und zweidimensionale LEED-Bilder aufgenommen werden. Zusätzlich wurde zwischen Ablenkeinheit und PC ein Spannungsaddierer geschaltet, der eine manuell gewählte Offset-Spannung zu einer vom PC gegebenen Spannung addiert und so eine manuelle Justierung des Nullpunktes einer Messung auf ein Reflexmaximum ermöglicht.

¹Mit freundlicher Genehmigung von Prof. M. Henzler.

Kalibrierung

LEED-Reflexprofile werden zur strukturellen Charakterisierung von Oberflächen verwendet. Bei der Auswertung dieser Profile muß eine Verbreiterung der Profile durch das Meßinstrument berücksichtigt werden [42]. Selbst bei einer „idealen“ Oberfläche würde man keine Deltafunktion als Profil messen, sondern ein verbreitertes Profil. Diese instrumentelle Verbreiterung ist eine Folge des endlichen Durchmessers von Quelle und Detektor, der endlichen Strahldivergenz, Linsenfehlern etc.. Üblicherweise beschreibt man die resultierende Reflexverbreiterung zusammenfassend durch eine Instrumentenfunktion $T(\mathbf{K})$. Das gemessene Reflexprofil $I_M(\mathbf{K})$ ergibt sich dann durch Faltung von $T(\mathbf{K})$ mit dem idealen Profil $I_0(\mathbf{K})$ des Objektes [42]:

$$I_M(\mathbf{K}) = I_0(\mathbf{K}) \star T(\mathbf{K}) \quad (3.1)$$

Die inverse Fouriertransformation $\mathcal{F}^{-1}$ verdeutlicht die Bedeutung der Funktion $T(\mathbf{K})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}(I_M(\mathbf{K})) &= \mathcal{F}^{-1}(I_0(\mathbf{K})) \cdot \mathcal{F}^{-1}(T(\mathbf{K})) \\ &= C(\mathbf{u}) \cdot t(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

wobei $C(\mathbf{u}) = \mathcal{F}^{-1}(I_0(\mathbf{K}))$ als Autokorrelationsfunktion und $t(\mathbf{u}) = \mathcal{F}^{-1}(T(\mathbf{K}))$ als Transferfunktion bezeichnet wird [43]. Die Funktion $C(\mathbf{u})$ enthält die statistischen Informationen über die Oberflächenstrukturen. Üblicherweise kann die experimentell beobachtete Profilverbreiterung $T(\mathbf{K})$ durch eine Gaußfunktion beschrieben werden, die Funktion $t(\mathbf{u})$ ist dann ebenfalls eine Gaußfunktion. Die Halbwertsbreite dieser Gaußfunktion $t(\mathbf{u})$ bezeichnet man als Transferweite t_M . Die Multiplikation in Gl. 3.2 bedeutet dann, daß $C(\mathbf{u})$ für große Abstände $\mathbf{u}$ abgeschnitten wird. Daraus folgt, daß Objekte auf der Oberfläche, die weiter als die Transferweite voneinander entfernt sind, im Beugungsbild nicht mehr aufgelöst werden können.

Experimentell wurde die Transferweite t_M bestimmt, indem das minimal einstellbare Reflexprofil eines Fe-Whiskers gemessen wurde (In-Phase-Streubedingung, vgl. Kap. 4.1.3). Fe-Whisker besitzen extrem glatte Oberflächen mit einem Stufenabstand von $1 \mu\text{m}$ [44], der deutlich über der typischen Transferweite eines SPA-LEED ($\approx 0.1 \mu\text{m}$) liegt. Ist die Terrassenlänge größer als die Transferweite, so gilt für das minimale Reflexprofil $I_0(\mathbf{K}) = \delta(\mathbf{K})$ (In-Phase-Streubedingung), und das gemessene Profil gibt direkt $T(\mathbf{K})$ wieder.

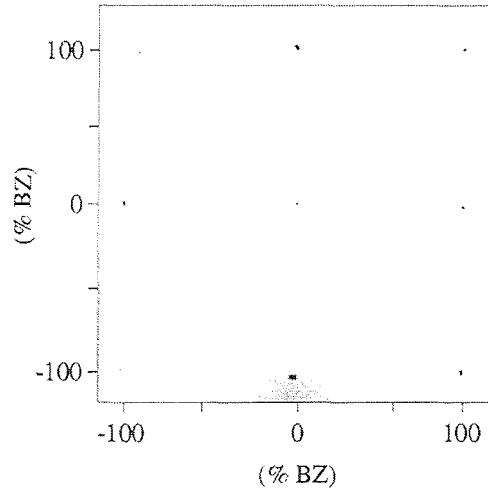


Abbildung 3.4: LEED-Aufnahme eines Fe-Whiskers bei $E=72$ eV.

Abb. 3.4 zeigt das LEED-Muster einer Fe-Whiskeroberfläche². Vor der Aufnahme wurde die Whiskeroberfläche durch mehrfaches Ionenätzen und Tempern gereinigt und ausgeheilt. Die Reflexe sind sehr klein und spiegeln im wesentlichen die Transferweite des SPA-LEED wieder. Am unteren Rand zeigt sich ein Abbildungsfehler der elektrostatischen Linsen.

Die minimale Halbwertsbreite des Reflexprofils (In-Phase-Streubedingung) (vgl. Abb. 3.5) wird zu $h_0 = 0.2$ % bestimmt. Die Transferweite t_M , also der maximal auflösbare Abstand auf der Whiskeroberfläche, folgt aus [42]:

$$\frac{h_0}{K_{10}} = \frac{a_{Fe}}{t_M} \quad (3.3)$$

wobei a_{Fe} die laterale Gitterkonstante und K_{10} den horizontalen Abstand zum Beugungsreflex erster Ordnung angeben. Aus dem Wert für h_0 ergibt sich eine Transferweite von $500 a_{Fe}$.

Eine Eichung des Ablenksystems ist erforderlich, da man bei der Messung eines Reflexprofils eine Intensitätsverteilung im $\mathbf{K}$ -Raum bestimmen will. Die Ablenkempfindlichkeit A ist definiert als [45]:

$$A = \frac{\Delta U}{\Delta K_{||}} \quad (3.4)$$

Dabei ist ΔU die benötigte Ablenkspannung, um eine Verschiebung $\Delta K_{||}$ des Beugungsbildes zu bewirken.

²Die Fe-Whisker wurden mir freundlicherweise von Z. Celinski und B. Heinrich, Simon Fraser Universität Vancouver, zur Verfügung gestellt.

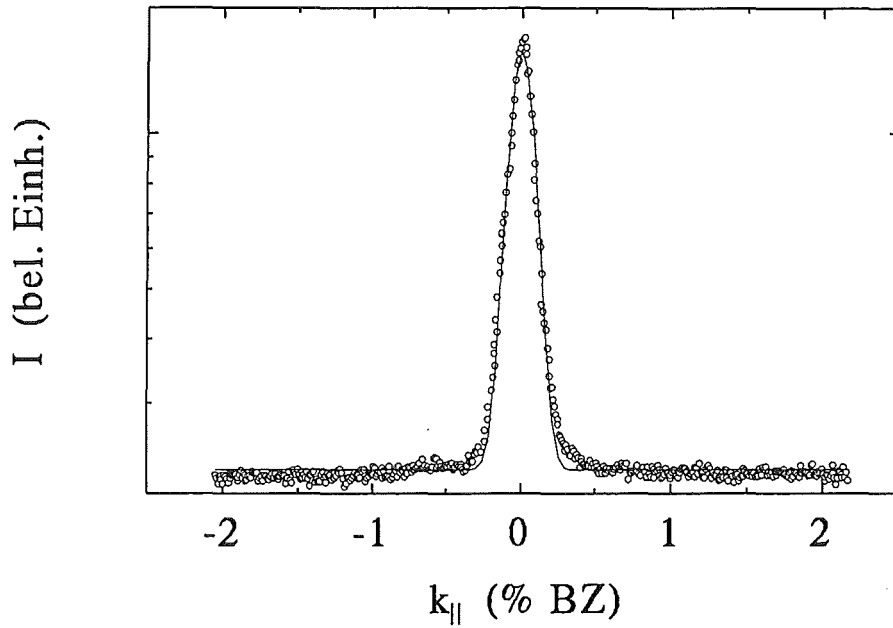


Abbildung 3.5: Reflexprofil des Fe-Whiskers bei $E=72$ eV. Die durchgezogene Kurve stellt eine numerische Anpassung durch eine Gaußfunktion dar.

Zur Bestimmung von A wurde die Spannungsdifferenz zwischen dem (00)-Reflex und einem 2×2 C-Überstrukturreflex für verschiedene Energien gemessen. Der C-Überstrukturreflex konnte auf Fe-Whiskern beobachtet werden, auf deren Oberfläche nach einem Temperschnitt erneut C-Kontaminationen nachgewiesen werden konnten. Für A wurde ermittelt (vgl. Abb. 3.6):

$$A = (2.12 \pm 0.05) \cdot \sqrt{E} \text{ V } \text{\AA} \quad (3.5)$$

3.2 Magnetooptische Hysteresekurven

3.2.1 Magnetooptischer Kerr-Effekt

Das statische magnetische Verhalten einer ferromagnetischen Schicht kann mit magnetooptischen Effekten beobachtet werden. Diese beruhen auf der Abhängigkeit der optischen Konstanten eines Materials vom Magnetisierungszustand. Wesentliche Vorteile der magnetooptischen Effekte sind ihre hohe Empfindlichkeit, die Untersuchungen von wenigen Monolagen ferromagnetischen Materials erlauben, und das

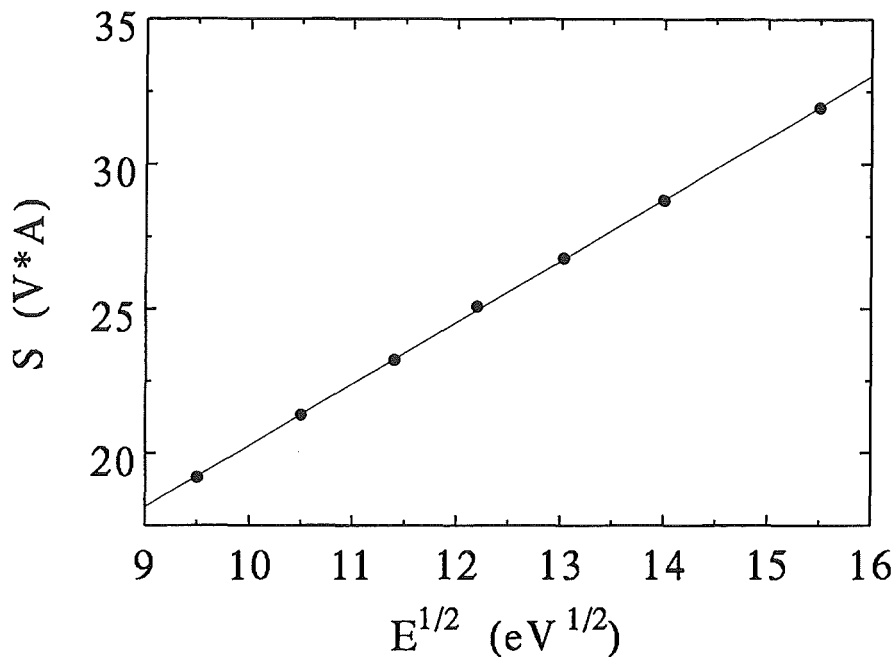


Abbildung 3.6: Ablenkempfindlichkeit A aus der Spannungsdifferenz zwischen dem (00)-Reflex und dem 2×2 C-Überstrukturreflex für verschiedene Energien.

lokale Auflösungsvermögen, welches mit integralen Magnetometern wie Faraday-Waage oder Vibrationsmagnetometer nicht erreicht werden kann. Allerdings kann magnetooptisch nicht die absolute Magnetisierung einer Probe bestimmt werden, sondern nur die relative Magnetisierungsänderung. Für die zu untersuchenden Fragestellungen führt dieser Nachteil von magnetooptischen Messungen zu keinem Informationsverlust, da hier die Änderung des Ummagnetisierungsverhaltens auf einer Probe in Abhängigkeit von einer Schichtdicke untersucht werden soll. Die begrenzte Eindringtiefe des Lichtes (ca. 20 nm bei der hier verwendeten Wellenlänge) stellt keinen Nachteil dar, da die untersuchten Proben deutlich kleinere Schichtdicken besitzen.

Trifft linear polarisiertes Licht auf eine magnetische Probe, so kann eine Drehung der Polarisationsachse des reflektierten oder des transmittierten Lichtes nachgewiesen werden. In Reflexion wird dieser Vorgang als Kerr-Effekt bezeichnet, in Transmission als Faraday-Effekt. Phänomenologisch läßt sich diese Drehung der Polarisationsachse durch die Abhängigkeit der Nichtdiagonalelemente des Dielektrizitätstensors ϵ vom Magnetisierungszustand der Probe beschreiben. Für kubische

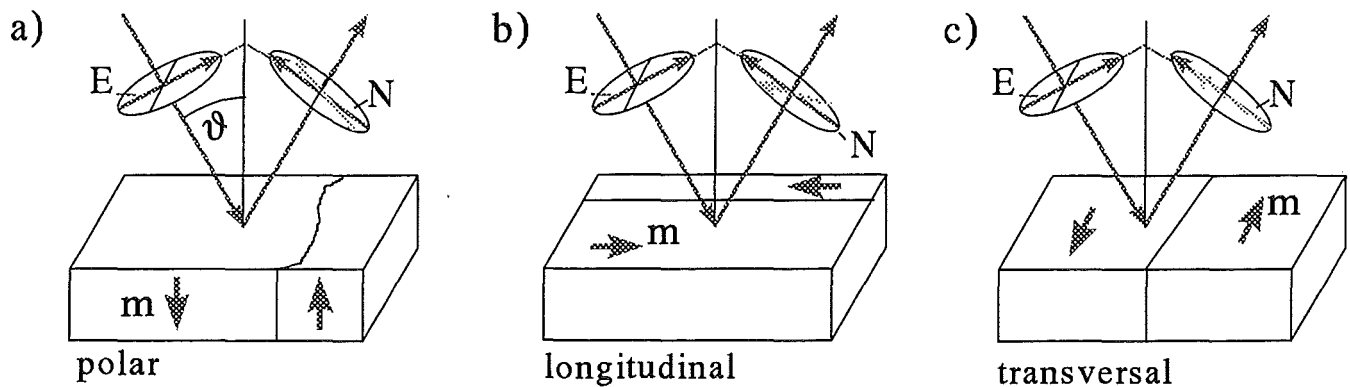


Abbildung 3.7: Die verschiedenen Konfigurationen des Kerr-Effektes. N bezeichnet die Komponente des normal reflektierten Lichtstrahls (nach [47]).

Materialien lautet das dielektrische Gesetz [46, 47]:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & iQm_3 & -iQm_2 \\ -iQm_3 & 1 & iQm_1 \\ iQm_2 & -iQm_1 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E} - i\epsilon \mathbf{Q} \mathbf{m} \times \mathbf{E} \quad (3.6)$$

Dieses Gesetz beschreibt phänomenologisch den Zusammenhang zwischen dem induzierten Verschiebungsvektor $\mathbf{D}$ und dem Vektor $\mathbf{E}$ des elektrischen Feldes des einfallenden Lichtes. Die m_i sind die Komponenten des Einheitsvektors $\mathbf{m}$ der Magnetisierung entlang den kubischen Achsen. Die frequenzabhängige Materialkonstante Q beschreibt die Stärke der Drehung. Andere optische Anisotropien wie der Voigt-Effekt sollen hier vernachlässigt werden.

In Abhängigkeit von der Richtung der Magnetisierung bezüglich der Einfallsebene des polarisierten Lichtes wird der Kerr-Effekt in drei verschiedene Fälle unterteilt (Abb. 3.7). Der polare Kerr-Effekt erlaubt die Beobachtung der Magnetisierungskomponente senkrecht zur Schichtebene. Mit dem longitudinalen Kerr-Effekt und dem transversalen Kerr-Effekt werden die Magnetisierungskomponenten in Schichtebene erfaßt. Die drei Effekte unterscheiden sich in der Stärke der Kerr-Drehung der Polarisationsachse und in der Abhängigkeit vom Einfallswinkel des Lichtes.

3.2.2 Anhysteretische Ummagnetisierungskurven

Nach Abb. 3.7 wird die Magnetisierungskomponente in Schichtebene in Richtung eines angelegten Feldes H mit dem longitudinalen Kerr-Effekt beobachtet.

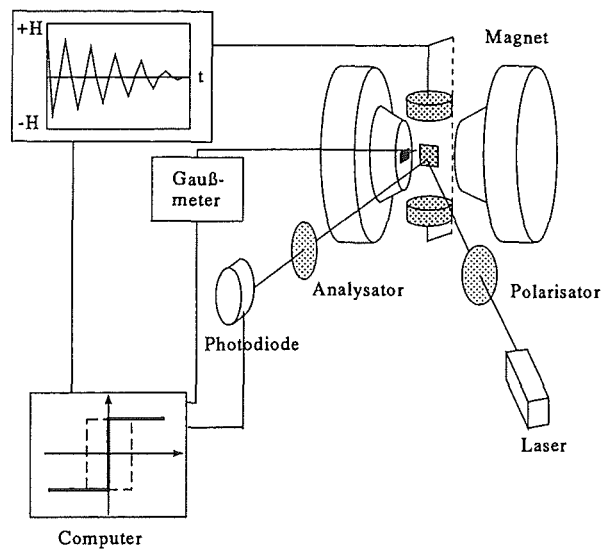


Abbildung 3.8: Versuchsaufbau zur Messung des magnetooptischen Kerr-Effektes. Ein zweites Spulenpaar erzeugt ein abklingendes Wechselfeld, so daß sich für die Magnetisierungen ein Gleichgewichtszustand einstellt.

Die Probe befindet sich zwischen den Polschuhen eines Elektromagneten (vgl. Abb. 3.8). Als Lichtquelle wird ein Halbleiterlaser ($\lambda = 750 \text{ nm}$) verwendet. Das aus dem Laser austretende Licht wird auf die Probe fokussiert, wobei der Fokussdurchmesser $d \leq 0.2 \text{ mm}$ beträgt. In geringem Abstand zur Probe befindet sich eine Polarisationsfolie (Polarisator), die das einfallende Licht linear polarisiert. Da die Polarisationsebene des einfallenden Lichtes so gewählt wurde, daß sie senkrecht zum angelegten Magnetfeld H steht, kann nur die Komponente der Magnetisierung parallel zum angelegten Feld beobachtet werden (longitudinaler Kerr-Effekt). Durch die Reflexion an der magnetischen Schicht wird die Polarisationsachse des Lichtes aus der ursprünglichen Richtung gedreht. Diese Kerr-Drehung, die in guter Näherung direkt proportional zur Magnetisierung der Probe ist, wird mit Hilfe einer zweiten Polarisationsfolie (Analysator), die nur geringfügig aus der Auslöschstellung gedreht ist, in eine Intensitätsänderung umgewandelt. Eine Photodiode detektiert diese Intensitätsänderung, die in erster Näherung proportional zur Magnetisierungskomponente M parallel zum äußeren Feld H ist.

Im Experiment steuert ein Computer die Feldänderung. Nach jeder Feldänderung wird eine Zeit von 200 ms gewartet, bevor das Intensitätssignal der Photodiode ausgelesen wird.

Mit einer verbesserten Meßtechnik, den anhysteretischen Ummagnetisierungskur-

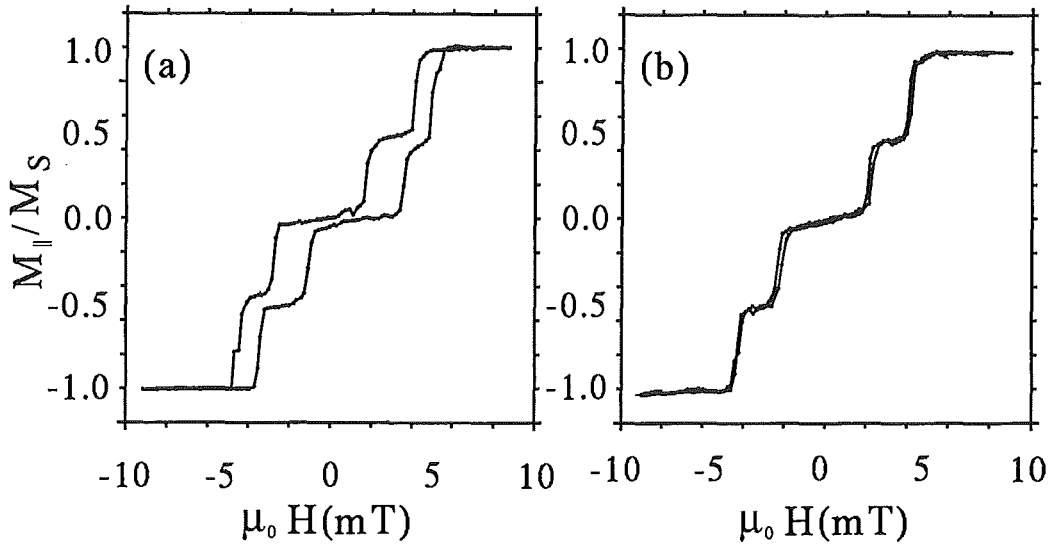


Abbildung 3.9: Ummagnetisierungskurve einer antiferromagnetisch gekoppelten Fe/Ag/Fe-Schicht mit $d_{Ag} = 9$ ML.

(a) In der üblichen Technik aufgenommene $M(H)$ -Kurve, wobei nach jeder Feldänderung 200 ms gewartet wurde, bevor das Intensitätssignal der Photodiode ausgelesen wurde.

(b) Wird ein zusätzliches Wechselfeld H_{ac} angelegt, dessen Amplitude von $H_{ac}^{MAX} > H_C$ auf $H_{ac} = 0$ abklingt, so verschwinden die Hystereseeffekte. Das Sättigungsfeld und andere wichtige Felder können mit größerer Genauigkeit bestimmt werden.

ven, konnte die Sättigungsfeldstärke wesentlich genauer bestimmt werden [48, 49]. Dazu wurde ein zusätzliches Wechselfeld H_{ac} ($f \approx 100$ Hz) mit abnehmender Amplitude in Schichtebene senkrecht zum Feld H_{ext} angelegt, bevor das Intensitätssignal der Photodiode nach einer Änderung des angelegten Feldes H_{ext} ausgelesen wurde. Dieses zusätzliche Wechselfeld besitzt zu Beginn eine Amplitude H_{ac}^{MAX} , die größer ist als das Koerzitivfeld H_C der Probe. Die Amplitude von H_{ac} wird dann schnell auf $H_{ac} = 0$ reduziert. Danach wird das Signal der Photodiode für den Feldwert H_{ext} ausgelesen. Auf diese Art werden die Domänen in einen Gleichgewichtszustand gebracht, der zum Verschwinden der Hysterese bei den Ummagnetisierungskurven führt. Abb. 3.9 zeigt eine mit der konventionellen Technik aufgenommene Ummagnetisierungskurve einer antiferromagnetisch gekoppelten Fe/Ag/Fe-Schicht und eine Ummagnetisierungskurve, die mit der Wechselfeldtechnik aufgenommen wurde (anhysteretische Messung).

Mit einem optischen Kryostaten (Durchflußkryostaten) konnten Ummagnetisierungskurven im Temperaturintervall $T = 6 - 300$ K gemessen werden.

4 Charakterisierung der Oberflächenmorphologie durch Elektronenbeugung

Die Analyse der Oberflächenmorphologie muß *in-situ* erfolgen, um Verschmutzungen durch Adsorbate zu vermeiden. Ferner muß die Analyse zerstörungsfrei sein.

Eine Standardtechnik zur Charakterisierung der Oberflächenmorphologie nutzt die Beugung von Elektronen an der Oberfläche. Elektronen mit geringer Energie (engl. LEED: Low Energy Electron Diffraction, $E \sim 100\text{eV}$) werden bei senkrechtem Einfall direkt an der Oberfläche reflektiert. Die Morphologie der Oberfläche kann dann aus dem Beugungsmuster der rückgestreuten Elektronen bestimmt werden. Die Elektronenbeugung bietet einige Vorteile gegenüber direkt abbildenden Methoden wie der Raster-Sonden-Mikroskopie (RSM), die ebenfalls äußerst erfolgreich zur Charakterisierung von Oberflächen eingesetzt wird. Mit beiden Verfahren lassen sich langreichweitige Korrelationen beobachten. Bei der Elektronenbeugung erfolgt gleichzeitig eine Mittelung über einen großen Bereich der Probe, wohingegen die RSM-Verfahren nur lokal einen kleinen Bereich der Proben abbilden können. Außerdem erlauben Elektronenbeugungsverfahren eine dynamische Abbildung der Oberfläche ohne Unterbrechung des Schichtwachstums, so daß auch der Wachstumsprozeß selber studiert werden kann.

Allerdings muß für diese Vorteile ein Preis gezahlt werden: Nur ein Teil der gewünschten Informationen kann direkt aus dem Beugungsbild gewonnen werden. Der nicht direkt zugängliche Teil der Informationen muß mittels Zusatzannahmen und theoretischen Rechnungen nachträglich aus den Beugungsbildern ermittelt werden. In diesem Kapitel werden die dafür nötigen theoretischen Werkzeuge vorgestellt und am Beispiel einer Fe Oberfläche illustriert.

4.1 Beugung an periodischen Strukturen

4.1.1 Ewald-Konstruktion

Die beobachteten LEED-Reflexe sind eine Abbildung des reziproken Gitters der Oberfläche [42] [50]. Danach muß -wegen der Impulserhaltung- der Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ ein Vektor des reziproken Gitters sein, was durch die $\mathbf{a}_i^*$ definiert wird. Das reziproke Gitter einer Oberfläche unterscheidet sich vom reziproken Gitter eines Volumenkristalls dadurch, daß die Beugungsbedingung senkrecht zur Oberfläche entartet ist. Senkrecht zur Oberfläche liegt keine Periodizität des Kristalls vor, die nächst benachbarte Lage ist „unendlich“ weit entfernt. Im reziproken Raum müssen dann die Gittervektoren $\mathbf{a}_z^*$ senkrecht zur Oberfläche eine verschwindende Länge besitzen. Die reziproken Gitterpunkte entarten daher senkrecht zur Oberfläche zu Stangen (Abb. 4.1).

Die Ewald-Konstruktion erklärt das Auftreten von Reflexen. Im Fall der elastischen Streuung sind die Wellenvektoren der einfallenden Welle $\mathbf{k}_i$ und der gestreuten Welle $\mathbf{k}_f$ betragsgleich: $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$. In das reziproke Gitter wird eine Kugel mit dem Radius des Betrages von $\mathbf{k}_i$ gezeichnet, die sogenannte Ewald-Kugel. Die Position der Beugungsreflexe ergibt sich nun aus den Schnittpunkten der Ewald-Kugel mit den reziproken Gitterstäben, da nur an diesen Positionen die Bedingung der Energieerhaltung ($|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$) und der Impulserhaltung (Streuvektor $\mathbf{K}$ ist Vektor des reziproken Gitters) gleichzeitig erfüllt sind. Die Reflexe werden entsprechend den Komponenten (h, k) der zugehörigen reziproken Gittervektoren ($\mathbf{g}_1^* = h\mathbf{a}_1^*$; $\mathbf{g}_2^* = k\mathbf{a}_2^*$) indiziert.

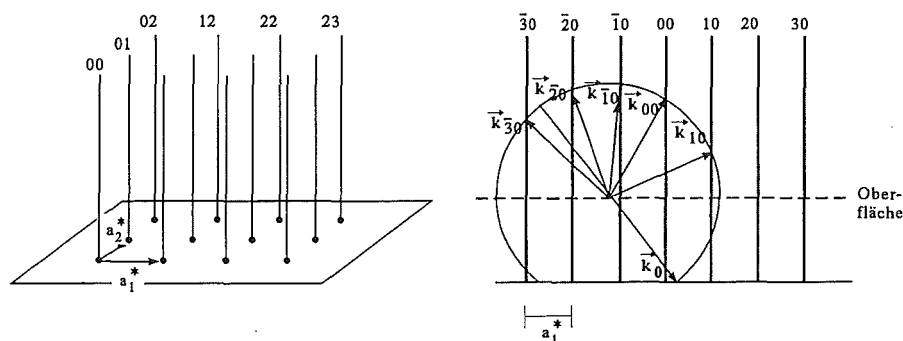


Abbildung 4.1: Ewald-Konstruktion zur Entstehung der Reflexe. (nach [51]).

Aus der Position der Reflexe lassen sich Aussagen über Überstrukturen und geneigte Flächen machen.

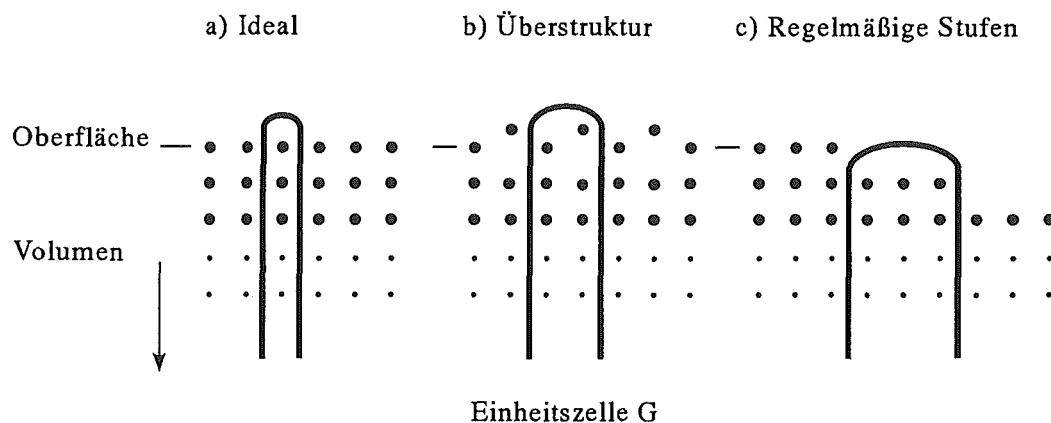


Abbildung 4.2: Beispiele für Einheitszellen, wie sie in der kinematischen Beugungstheorie benutzt werden (nach [51]).

4.1.2 Kinematische LEED-Beugungstheorie

Zur Untersuchung von Oberflächen werden Elektronen mit geringer Energie verwendet [42, 50]. Wegen der geringen Energie E beschränkt sich die Eindringtiefe t auf die obersten Atomlagen, im Idealfall auf die oberste Lage (für typische $E \sim 100\text{eV}$ ist $t \sim 2 - 3\text{ML}$ [42]). Soll nicht nur die Symmetrie sondern auch die Struktur der Oberfläche studiert werden, so muß das Beugungsbild hinsichtlich Intensität und Profilform genau analysiert werden. Vollständig kann dies nur im Rahmen der dynamischen LEED-Theorie erfolgen, die auch mehrfache Streuprozesse der Elektronen berücksichtigt. Derartige Rechnungen sind sehr aufwendig und derzeit noch nicht in der Lage, allgemein zur Oberflächenstrukturanalyse eingesetzt zu werden. Beschränkt man sich auf die Analyse der **Reflexprofile** (SPA-LEED, engl. Spot Profil Analysis-LEED), so kann die kinematische Beugungstheorie gute und überprüfbare Beschreibungen der Oberflächenmorphologie liefern.

In der kinematischen Beugungstheorie wird die Oberfläche in Einheitszellen unterteilt, die als Einheitszellen der Streuung betrachtet werden [42]. Abb. 4.2 zeigt einige Beispiele für solche Unterteilungen. Die Oberfläche kann durch geeignete Anordnung der Einheitszellen beschrieben werden. Eine streng periodische Oberfläche wird durch vollkommen identische Einheiten der Einheitszelle erzeugt. Eine nicht periodische Oberfläche kann z.B. durch Kombination von verschiedenen Einheitszellen erzeugt werden. Die Näherung der kinematischen Beugungstheorie besteht in der Annahme identischer Streuverhalten der verschiedenen Einheitszellen. Diese Annahme läßt sich für die LEED-Beugung experimentell rechtfertigen [42].

Die Intensität des gebeugten Elektronenstrahls läßt sich im Rahmen der kinematischen Beugungstheorie in zwei Teile separieren, den Formfaktor F und den Gitterfaktor G . LENT und COHEN [43] berücksichtigen nur einfache Streuprozesse an der Oberfläche der Einheitszellen, wobei die Anordnung der Einheitszellen durch die Gitterfunktion $g(\mathbf{r})$ gegeben ist. Der Gitterfunktion $g(\mathbf{r}_0)$ wird der Wert 1 zugeordnet, wenn es am Ort $\mathbf{r}_0$ einen Oberflächenstreuer gibt, andernfalls wird $g(\mathbf{r}_0)$ zu 0 gesetzt. Die Intensität I des gebeugten Elektronenstrahls wird mit folgendem Ansatz berechnet:

$$I(\mathbf{K}) = \left| \sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{K}, k, E) g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \right|^2$$

Mit dem Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$, wobei $\mathbf{k}_f$ und $\mathbf{k}_i$ die Wellenvektoren der reflektierten bzw. einfallenden Welle mit dem Betrag $k = 2\pi/\lambda$ sind sowie $f(\mathbf{K}, k, E)$ als Atomformfaktor bezeichnet wird. In der kinematischen Näherung wird der Atomformfaktor $f(\mathbf{K}, k, E)$ unabhängig von seiner individuellen Nachbarschaft als überall identisch und nur von der Energie E abhängig angenommen:

$$|f(\mathbf{K}, k, E)|^2 = F(E)$$

Dadurch kann die gebeugte Intensität geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} I(\mathbf{K}) &= |f(\mathbf{K}, k, E)|^2 \cdot \left| \sum_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \right|^2 \\ &= F(E) \cdot G(\mathbf{K}) \end{aligned} \quad (4.1)$$

$F(E)$ wird als Formfaktor, $G(\mathbf{K})$ als Gitterfaktor bezeichnet. Der Formfaktor $F(E)$ bestimmt die Intensität der Reflexe. Die Profilform wird durch die Komponente $K_{\parallel}$ des Streuvektors parallel zur Oberfläche der Einheitszellen festgelegt. Der Formfaktor ist i.a. nur schwach von $K_{\parallel}$ abhängig, so daß das Reflexprofil des gebeugten Elektronenstrahls im wesentlichen durch den Gitterfaktor $G(\mathbf{K})$ bestimmt ist [43] [52].

Der Gitterfaktor – und damit das Reflexprofil – wird aber nach Gl. 4.1 durch die Gitterfunktion $g(\mathbf{r})$ festgelegt und ist somit direkt mit der Oberflächenstruktur verknüpft. Dieser Zusammenhang wird noch deutlicher, wenn für $G(\mathbf{K})$ geschrieben wird (N_0 ist die Anzahl der Streuer):

$$G(\mathbf{K}) = \sum_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} \cdot \sum_{\mathbf{r}'} g(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}'} = N_0 \sum_{\mathbf{u}} C(\mathbf{u}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{u}} \quad (4.2)$$

wobei $C(\mathbf{u})$ die Autokorrelationsfunktion ist, die definiert wird durch:

$$C(\mathbf{u}) = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}) g(\mathbf{r} + \mathbf{u}) \quad (4.3)$$

Die Autokorrelationsfunktion $C(\mathbf{u})$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, zwei Streuer im Abstand $\mathbf{u}$ zu finden. Gl. 4.2 drückt den Zusammenhang zwischen Beugungsbild und Autokorrelationsfunktion aus: Die Fouriertransformation der Autokorrelationsfunktion $C(\mathbf{u})$ liefert das Beugungsbild, sofern der Formfaktor konstant gehalten wird (kinematische Näherung). Die Autokorrelationsfunktion läßt sich eindeutig aus der Gitterfunktion $g(\mathbf{r})$ ermitteln, und somit kann aus $g(\mathbf{r})$ direkt das Beugungsbild berechnet werden. Die Umkehrung ist allerdings nicht möglich: Aus der Autokorrelationsfunktion kann nicht eindeutig auf die Gitterfunktion zurückgerechnet werden. Immerhin kann die Autokorrelation aus den gemessenen Profilen bestimmt werden, welche die weitestgehende exakte Information darstellt, die aus einem Beugungsexperiment erhalten werden kann.

4.1.3 Streuphase

Es wird angenommen, daß sich alle Atome auf einem gemeinsamen Grundgitter befinden. Zur weiteren Berechnung ist es günstig, den Vektor $\mathbf{u}$ aus Gl. 4.2 in die Anteile parallel und senkrecht zur Schichtebene zu zerlegen:

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}_{\parallel} + \mathbf{r}_{\perp} = m\mathbf{a} + h\mathbf{d}$$

mit der Einheitszelle $\mathbf{a}$ der Oberfläche $\mathbf{a} = (a_x, a_y, 0)$ und $\mathbf{d}$ als Einheitsvektor senkrecht zur Oberfläche sowie der Stufenhöhe h . In dieser Arbeit wird durchgängig mit $\mathbf{a}$ ein lateraler Gittervektor und mit $\mathbf{d}$ ein vertikaler Gittervektor bezeichnet.

Für beliebig gestufte Oberflächen erhält man bei senkrechtem Einfall der Elektronen aus der 3.Laue Bedingung im Rahmen der kinematischen Theorie:

$$h = \frac{1}{2} \mathbf{d} \mathbf{K}$$

zusätzliche Beugungsbedingungen. An einer Stufe ändert sich je nach der Wellenlänge der Elektronen der Gangunterschied zwischen den Netzebenen des Kristalls, wodurch es zu destruktiver oder konstruktiver Interferenz kommt.

Betrachtet wird der Beugungsreflex 0.ter Ordnung, für den „Einfallswinkel“ = „Ausfallswinkel“ gilt. Der Wegunterschied Δ berechnet sich für Elektronen, die an benachbarten Netzebenen mit dem vertikalen Abstand d gestreut werden, zu:

$$\Delta = 2d \cos \vartheta$$

mit dem Einfallswinkel ϑ . Mit Hilfe der DE BROGLIE-Wellenlänge der Elektronen:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$$

wird die Streuphase S definiert:

$$\Delta = S \cdot \lambda = S \cdot \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} \quad (4.4)$$

Aus Gl. 4.4 folgt für den Zusammenhang von Energie E und Streuphase S :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2 \cos^2 \vartheta} S^2 \quad (4.5)$$

Die Streuphase S legt die Beugungsbedingung fest [52]. Aus der Streuphase S ergeben sich die Energien für konstruktive Interferenz bei $S = n$ (n ganzzahlig) –In-Phase-Bedingung– und für destruktive Interferenz bei $S = \frac{2n+1}{2}$ –Gegenphase–. Über die Streuphase S ist somit eindeutig die Beugungsbedingung definiert. Die Streuphase S besitzt gegenüber der Energie den Vorteil, daß S nicht von spezifischen experimentellen Parametern wie z.B. der Stufenhöhe d abhängig ist.

Schließlich kann noch ein Zusammenhang zwischen der Streuphase S und dem Betrag des senkrechten Anteils des Streuvektors $\mathbf{K}_\perp$ formuliert werden, da die Energie der Elektronen $E = \hbar^2 \mathbf{k}_i^2 / 2m$ und der senkrechte Anteil $\mathbf{K}_\perp = 2|\mathbf{k}_i| \cos \vartheta$ ist:

$$2\pi S = |\mathbf{K}_\perp| d$$

4.2 Der Einfluß von Oberflächendefekten auf das Beugungsbild

Störungen der Periodizität der Oberfläche führen zu einer Änderung des Gitterfaktors G . Der Strukturfaktor F wird durch Störungen der langreichweitigen Periodizität nicht beeinflusst, wohl aber durch Störungen in der lokalen Nachbarschaft der Einheitszellen. Wird eine hinreichend niedrige Stufendichte vorausgesetzt (Terrassenlänge $l > 10 \text{ Å}$ [53]), so kann F im Rahmen der kinematischen Näherung als konstant angenommen werden. Zur Strukturanalyse werden daher die durch den Gitterfaktor G bewirkten Veränderungen der Reflexprofile verwendet.

4.2.1 Punktdefekte

Punktdefekte können aus statistisch verteilten Fehlstellen im Substrat oder aus statistisch verteilten Adsorbatatomen bestehen. Allerdings kann hier nicht die Änderung des Strukturfaktors F vernachlässigt werden, da sich dieser nun von Einheitszelle zu Einheitszelle ändern kann, da Adatom und Substratatom in der Regel verschiedene F aufweisen werden. Eine Berechnung über eine große Zahl von Streuern zeigt [42], daß sich dann das Beugungsbild aus zwei Anteilen zusammensetzt: Einem homogenen Untergrund und dem Produkt aus modifiziertem Formfaktor F' und dem ursprünglichen Gitterfaktor G . Demnach bleibt die Profilform erhalten, lediglich der Untergrund wird durch die Punktdefekte angehoben.

4.2.2 Atomare Stufen

An atomaren Stufen kann es in Abhängigkeit vom Verhältnis von Stufenhöhe zu Wellenlänge der Elektronen zu Interferenzen kommen. Diese Interferenzen führen zu einer charakteristischen Änderung der Reflexprofile mit der Streuphase, aus der unmittelbar die mittlere Stufenhöhe und die mittlere Terrassenlänge bestimmt werden kann.

Nach LENT und COHEN kann die Autokorrelationsfunktion aus Gl. 4.2 für Oberflächen mit einer endlichen Anzahl von Schichten in ihre Anteile senkrecht zur Schicht und in Schichtebene separiert werden [43]:

$$C(\mathbf{u}) = C(\mathbf{r}_{\parallel}, \Delta h \neq 0) = C_{\Delta h}(1 - \varphi_{\Delta h}(\mathbf{n})) \quad (4.6)$$

mit $\varphi_{\Delta h}(\mathbf{0}) = 1$ und $\lim_{\mathbf{n} \rightarrow \infty} \varphi_{\Delta h}(\mathbf{n}) = 0$. Die Funktionen $\varphi(\mathbf{n})$ charakterisieren, wie die Autokorrelation $C(\mathbf{r}_{\parallel}, \Delta h \neq 0)$ zwischen ihren beiden Limites $C(\mathbf{0}, \Delta h) = 0$ und $C(\mathbf{n} \rightarrow \infty, \Delta h \neq 0) = C_{\Delta h}$ verläuft. Dieser Verlauf wird durch Details der Terrassenlängenverteilung bestimmt. Der Grenzwert $C_{\Delta h}$ ergibt sich aus der sichtbaren Bedeckung p_h einer Schicht, welches derjenige Anteil der Oberflächenatome ist, die sich in Schicht l befinden:

$$C_{\Delta h} = \sum_h p_{h+\Delta h} p_h \quad (4.7)$$

Die bisher nicht definierte Komponente $C(\mathbf{n}, \Delta h = 0)$ kann aus der Normierung

$$\sum_{\Delta h} C(\mathbf{n}, \Delta h) = 1$$

bestimmt werden.

Verwendet man die Separation nach Gl. 4.6 für die Gitterfunktion nach Gl. 4.2, so erhält man:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{K}_{\parallel}, K_{\perp}) &= G(\mathbf{K}_{\parallel}, S = \frac{h}{2\pi} K_{\perp}) \\ &= G(S) \delta(\mathbf{K}_{\parallel}) + [1 - G(S)] \cdot \phi_{Stufen}(\mathbf{K}_{\parallel}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Der Gitterfaktor spaltet nach Gl. 4.8 in zwei Anteile auf: In einen Zentralreflex (δ -Funktion des ersten Summanden), der vergleichbar ist zu der Beugung an einer defektfreien, idealen Kristalloberfläche, und in eine Verbreiterung (diffuse Intensität, zweiter Summand), die durch Interferenz der Elektronen an unterschiedlichen, durch atomare Stufen getrennten Schichten, hervorgerufen wird [43]. Die Funktion $\phi_{Stufen}(\mathbf{K}_{\parallel})$ beschreibt dabei das skalierte Profil der Reflexverbreiterung durch atomare Stufen.

Die integrale Intensität $G(S)$ des Zentralreflexes wird durch Integration des zweidimensionalen Reflexprofils errechnet. Das Integral erstreckt sich dabei nur über die zentrale Spitze, so daß mit $\mathbf{K}_{\parallel} \approx \mathbf{0}$ und $G(\mathbf{K})$ aus Gl. 4.2 geschrieben werden kann [54]:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{K}_{\parallel} \approx \mathbf{0}, K_{\perp}) &= G(S) \\ &= \int d\mathbf{K}_{\parallel} \quad G(\mathbf{K}) \\ &= \frac{1}{N'} \int d\mathbf{K}_{\parallel} \sum_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \cdot e^{-iK_{\perp} r_{\Delta h}} \end{aligned} \quad (4.9)$$

mit N' als Normierungsfaktor. Die Summation über $\mathbf{r}_{\parallel}$ läßt sich wegen $\mathbf{K}_{\parallel} \approx \mathbf{0}$ abtrennen, der Gitterfaktor $g(\mathbf{r})$ durch die vertikale Autokorrelation $C_{\Delta h}$ nach Gl. 4.7 ausdrücken [54, 55]:

$$\begin{aligned} G(S) &= \frac{1}{N'} \int d\mathbf{K}_{\parallel} \sum_{\mathbf{r}_{\parallel}} e^{-i\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \cdot \sum_{\Delta h} C_{\Delta h} e^{-iK_{\perp} r_{\Delta h}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\Delta h} C_{\Delta h} \cos(2\pi S \Delta h) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\Delta h} \sum_h p_{h+\Delta h} p_h \cos(2\pi S \Delta h) \end{aligned} \quad (4.10)$$

wobei die Normierungen N, N' mit der Normierung aus Gl. 4.2 zu eins gesetzt werden. Die p_h geben den sichtbaren Teil der Lage h an. Die $\cos$ -Abhängigkeit der $G(S)$ -Funktion in Gl. 4.10 ist eine Folge der Symmetrie von $C_{\Delta h}$. Es gilt:

$$C_{\Delta h} = C_{-\Delta h}$$

Somit ist in Gl. 4.8 über eine gerade Funktion zu integrieren, so daß nur die cos-Terme übrig bleiben.

Für die Summanden in Gl. 4.8 ergibt sich damit [54]:

$$\begin{aligned}
 G(S) &= \sum_{\Delta h} C_{\Delta h} \cos(2\pi S \Delta h) \\
 (1 - G(S)) \cdot \phi_{Stufen}(\mathbf{K}_{\parallel}) &= \sum_{\Delta h \neq 0} C_{\Delta h} \cdot [1 - \cos(2\pi S \Delta h)] \phi_{\Delta h}(\mathbf{K}_{\parallel}) \\
 \phi_{\Delta h}(\mathbf{K}_{\parallel}) &= \sum_{\Delta \mathbf{n}} \varphi_{\Delta h}(\Delta \mathbf{n}) e^{i\mathbf{K}_{\parallel} \Delta \mathbf{n}}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Die zwei Anteile des Gitterfaktors nach Gl. 4.8 – zentrale Spitze und Schulter – variieren gegenphasig mit der Streuphase, das Verhältnis der Anteile zueinander hängt empfindlich von der Streuphase S ab. Bei ganzzahligem S (konstruktive Interferenz, vgl. Kap. 4.1.3) erfolgt keine Verbreiterung des Reflexprofils, während bei halbzahligem S (destruktive Interferenz) die Verbreiterung am stärksten sichtbar wird. Aus der Analyse der Variation des Zentralreflexes mit der Streuphase kann auf diese Art die vertikale Rauhigkeit (Schichtverteilung p_h) ermittelt werden [54, 55], während die laterale Rauhigkeit aus der Analyse der Reflexverbreiterung gewonnen werden kann [52, 56].

Regelmäßige Folge von Stufen

An zwei Beispielen soll die Bestimmung der mittleren Stufenlängen veranschaulicht werden. Zunächst wird der Fall der regelmäßigen Abfolge von Auf- und Abstufen behandelt, der z.B. eine defektfreie Substratoberfläche beschreibt, auf die 1/2 Monolage des gleichen Materials aufgedampft wurde. Die mittlere Länge der Stufen-Einheitszelle soll l_{EZ} und die Stufenhöhe h betragen (vgl. Abb. 4.3). In der In-Phase-Bedingung – ganzzahliges S – wird nur ein Zentralreflex sichtbar sein, da zwei an unterschiedlichen Terrassen gestreute Wellen konstruktiv interferieren. In der Gegenphase – halbzahliges S – interferieren die Wellen destruktiv und der erste Summand in Gl. 4.8 verschwindet. Als Folge der regelmäßigen Anordnung der Stufen spaltet der zweite Summand des Gitterfaktors nach Gl. 4.8 in zwei Teile auf, wodurch in der Gegenphase zwei Reflexe zu beobachten sind. Die Aufspaltung des Reflexes bei halbzahligem S ist eine Folge des nicht monotonen Verlaufs von ϕ_{Stufen} und somit von $C_{\Delta h}$ in Gl. 4.8 [43]. Die Breite der Aufspaltung $1/l_{EZ}$ gibt dann den mittleren Abstand zweier Inseln an. Aus zwei aufeinanderfolgenden In-Phase-

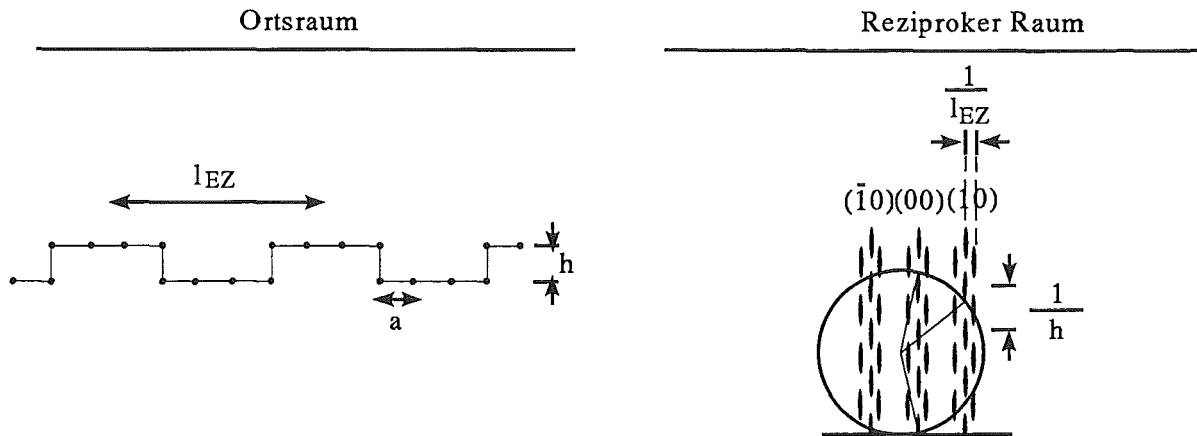


Abbildung 4.3: Eine regelmäßige Folge von Auf- und Abstufen bewirkt eine Aufspaltung des Zentralreflexes in der Gegenphasebedingung. (nach [51]).

Bedingungen kann über die Streuphase S nach Gl. 4.5 die Stufenhöhe bestimmt werden.

Anschaulich läßt sich die Aufspaltung der Reflexe als Folge einer zusätzlichen Einheitszelle mit Gitterkonstante l_{EZ} verstehen [42]: Jedem Abstand zwischen zwei beliebigen Reflexen im Beugungsbild entspricht auf der Oberfläche ein häufig auftretender Abstandsvektor. Der erste Einheitszellenvektor – die atomare Gitterkonstante a – führt zur Entstehung der (00) , (01) , ... -Gitterstangen mit dem Abstand $2\pi/a$ (vgl. Kap. 4.1.1). Zusätzlich zu diesen Gitterstangen treten nun noch die Gitterstangen mit dem Abstand $2\pi/l_{EZ}$ auf, die wegen des geringeren Abstandes $1/l_{EZ} < 1/a$ zwischen den ursprünglichen Gitterstangen liegen. Der Wert des Strukturfaktors fällt mit zunehmendem Abstand von der (00) -Stange schnell gegen Null ab [42, 57]. Daher können i.a. nur die zusätzlichen Stangen in unmittelbarer Nachbarschaft der (00) -Stange beobachtet werden. Außerdem bewirkt die gegenphasige Aufspaltung des Reflexes als Funktion der Streuphase S , daß die Stangen entlang der z -Richtung moduliert werden: Es sind keine durchgehenden Stangen mehr, sondern Stangenstücke wie in Abb. 4.3 dargestellt. Die Ewald-Kugel schneidet in Abhängigkeit von der Streubedingung die Punkte des dreidimensionalen reziproken Gitters so, daß in der In-Phase-Bedingung nur der Zentralreflex beobachtet werden kann und in der Gegenphase die Aufspaltung des Reflexes sichtbar wird.

Zufällige Verteilung der Stufen

Sind die Stufen und die Stufenlängen zufällig verteilt, so gibt es keine definierte Aufspaltung des Reflexes in der Gegenphase. Jede der vorkommenden Einheitszellenlängen l_i würde zu einer entsprechenden Reflexaufspaltung führen. Die Überlagerung aller der aufgespaltenen Reflexe führt bei halbzahligen S zu einem verbreiterten Reflexprofil, das sich durch eine Lorentzfunktion beschreiben läßt [43]. Die Halbwertsbreite $\Delta K_{1/2}$ dieser Lorentzfunktion gibt dann eine mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle$ an [42]:

$$\frac{\Delta K_{1/2}}{K_{10}} = \frac{a}{\langle l \rangle} \quad (4.12)$$

wobei K_{10} den Abstand vom (00)- zum (10)-Reflex angibt. Im Rahmen der Ewald-Konstruktion führt die Überlagerung der unterschiedlichen Einheitszellenlängen l_i dazu, daß die Stangen wellenartig verbreitert werden [42]. Die Knoten der Wellen treten in der In-Phase-Bedingung auf, die breiten Bäuche in Gegenphase. Die Ewald-Kugel schneidet entsprechend ihres Radius – also der Streuphase – die Stangen, welches zu einer periodischen Verbreiterung und wieder Verengung der Reflexe führt. Dieses periodische Verhalten entspricht der gegenphasigen Oszillation von Spitze und Schulter (vgl. 4.2.2).

4.2.3 Facetten und Mosaikstruktur

Facetten

Als Facetten werden kleine Bereiche der Oberfläche bezeichnet, deren Orientierung leicht von der mittleren Orientierung der Oberfläche abweicht (vgl. Abb. 4.4). Facetten bilden somit eine andere ebene Kristallfläche auf einer gemeinsamen Substratfläche. Da die Gitterstangen im reziproken Raum senkrecht zur Oberfläche verlaufen, müssen die Gitterstangen um den Neigungswinkel der Facetten gekippt werden, wie dies in Abb. 4.4 gezeigt wird. Durch die starke Neigung der Facettenstangen kreuzen diese die Stangen der mittleren Oberfläche. Bei Variation der Streuphase wandern die Facettenreflexe entlang dieser Facettenstangen, so daß aus der Auftragung von Facettenposition gegen die Streuphase der Neigungswinkel der Facetten bestimmt werden kann.

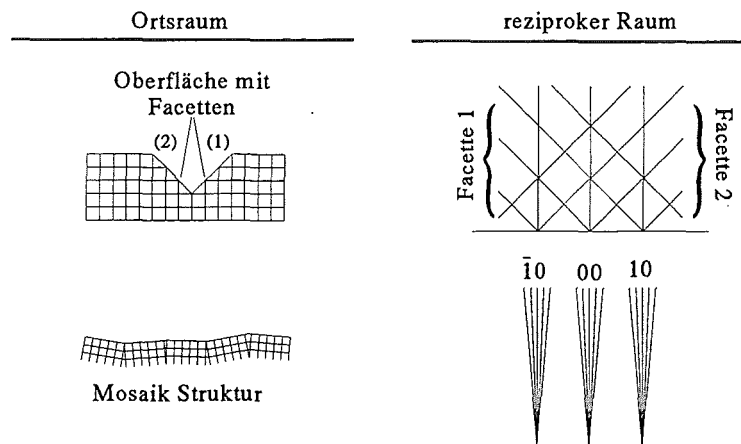


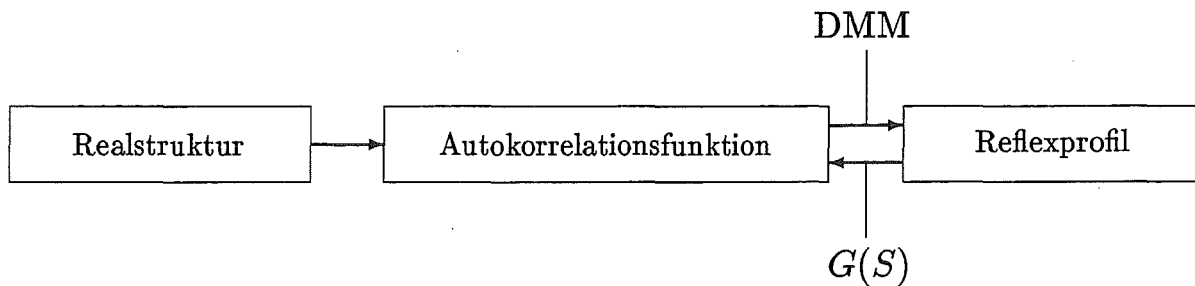
Abbildung 4.4: Ortsraum: Modell einer Facette und einer Mosaik-Struktur (nach [42]). Reziproker Raum: Die zugehörigen Modell des reziproken Gitters (nach [42]).

Mosaik

Eine andere Abweichung von der Idealstruktur stellt die Mosaikstruktur dar. Sind größere Teilbereiche (bis zu einigen μm) selber defektfrei, aber die einzelnen Teilbereiche gegeneinander verkippt, so wird dies als Mosaik bezeichnet. Die Oberfläche setzt sich dann aus einem Mosaik der Teilbereiche zusammen wie dies in Abb. 4.4 gezeigt ist. Als Folge der Mosaikstruktur erfolgt eine lineare Verbreiterung der Reflexe mit steigender Streuphase [42], ähnlich einem häufig beobachteten linearen Zusammenhang [58]. Aus den zugehörigen Gitterstangen in Abb. 4.4 kann man sofort den Unterschied zu den Facetten erkennen: Mosaikstrukturen führen zu einer gleichmäßigen Verbreiterung der Reflexprofile. Daher können Facetten und Mosaikstrukturen leicht unterschieden werden.

4.3 Quantitative Reflexprofilanalyse

Die quantitative Reflexprofilanalyse erfolgt über die Bestimmung der Autokorrelationsfunktion $C(\mathbf{r})$ (vgl. Gl. 4.2). Die Bestimmung von $C(\mathbf{r})$ kann grundsätzlich auf zwei unterschiedliche Arten erfolgen. Entweder wird aus den gemessenen Reflexprofilen auf $C(\mathbf{r})$ zurückgerechnet, oder es wird eine Oberflächenkonfiguration angenommen und aus dieser $C(\mathbf{r})$ und damit nach Gl. 4.2 das Reflexprofil berechnet. Zu den ersten Verfahren gehört die $G(S)$ -Analyse, die im nächsten Abschnitt beschrieben wird. Die Domänen Matrix Methode (DMM) gehört zu der zweiten Gruppe und wird im nachfolgenden Abschnitt beschrieben. Beide Methoden werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit sowohl komplementär als auch zur wechselseitigen Kontrolle eingesetzt.



4.3.1 Vertikale Rauigkeit: $G(S)$ -Analyse

Die vertikale Schichtverteilung wird aus der integralen Intensität des Zentralreflexes bestimmt [54, 59]. Die vertikale Verteilung beschreibt die Verteilung der sichtbaren Oberflächenschichten. Hierbei interessiert nicht die laterale Anordnung der Einheitszellen sondern nur der Anteil p_h der sichtbaren Streuer in der jeweiligen Schicht h . Nach Gl. 4.8 kann die Gitterfunktion und somit das Reflexprofil als Überlagerung einer zentralen Spitze mit einer Schulter beschrieben werden, wobei Spitze und Schulter in Abhängigkeit von der Streuphase gegenphasig variieren. Wird die Intensität der zentralen Spitze über die Brillouinzone integriert, so wird diese integrale Intensität $G(S)$ ebenfalls mit der Streuphase variieren. Die Variation von $G(S)$ mit S ist von der Schichtverteilung p_h abhängig: Für eine ideale Oberfläche ohne Stufen ist $G(S)$ konstant und ändert sich nicht mit S , wohingegen bei einer Oberfläche mit zwei offenen Lagen (z.B. Substrat mit Adlage) $G(S)$ bei halbzahligen Werten von S in Abhängigkeit von der Bedeckung gegen Null geht. Aus dem Verlauf der integralen Intensität $G(S)$ kann daher die Schichtverteilung bestimmt werden.

Um aus der Intensität I den Gitterfaktor G zu ermitteln, muß die Energieabhängigkeit von F eliminiert werden. Nach Gl. 4.1 läßt sich für die im Experiment zugängliche Intensität I schreiben:

$$I(\mathbf{K}) = F(E) \cdot G(\mathbf{K})$$

Experimentell läßt sich zeigen, daß der Formfaktor F nur wenig von $k_{\parallel}$, aber stark von der Energie E abhängt ist [42, 53, 60, 61]. Durch Normierung des Intensitätsprofils auf die Gesamtintensität kann F eliminiert werden. Dabei wird die integrale Intensität des Zentralreflexes I_{Spitze} auf die integrale Gesamtintensität I_{Gesamt} der Brillouinzone bezogen¹ [55, 59, 61]:

$$\begin{aligned} \frac{\int d\mathbf{K}_{\parallel} I_{Spitze}}{\int d\mathbf{K}_{\parallel} I_{Gesamt}} &= \frac{\int d\mathbf{K}_{\parallel} F(E) G_{Spitze}(\mathbf{K}_{\parallel})}{\int d\mathbf{K}_{\parallel} F(E) G(\mathbf{K}_{\parallel})} \\ &\approx \frac{F(E) \int d\mathbf{K}_{\parallel} G_{Spitze}(\mathbf{K}_{\parallel})}{F(E) \int d\mathbf{K}_{\parallel} G(\mathbf{K}_{\parallel})} \\ &\approx \frac{G(S)}{\int d\mathbf{K}_{\parallel} G(\mathbf{K}_{\parallel})} \\ &\approx G(S) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Bei entsprechender Normierung kann $G(S)$ aus Gl. 4.11 berechnet werden [54]:

$$\begin{aligned} G(S) &= \sum_{\Delta h} C_{\Delta h} \cos(2\pi S \Delta h) \\ &= \sum_{\Delta h} \sum_h p_{h+\Delta h} p_h \cos(2\pi S \Delta h) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Experimentell kann $G(S)$ als Verhältnis der integralen Intensität der zentralen Spitze I_{Spitze} zur integralen Gesamtintensität I_{Gesamt} bestimmt werden. Aus dieser Kurve kann durch numerische Anpassung der cos-Terme in Gl. 4.14 mit den p_h als Anpassungsparameter die Schichtverteilung bestimmt werden. Abb. 4.5 zeigt den Verlauf von $G(S)$ für verschiedene Bedeckungen.

Zur Charakterisierung der vertikalen Oberflächenrauigkeit wird häufig die Rauhtiefe Δ verwandt. Diese ist definiert als Standardabweichung der Höhenverteilung:

$$\Delta \equiv \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2} \quad (4.15)$$

¹Die integrale Gesamtintensität I_{Gesamt} ist unabhängig von der Anordnung der Einheitszellen für einen gegebenen Wert $k_{\parallel}$ konstant [55].

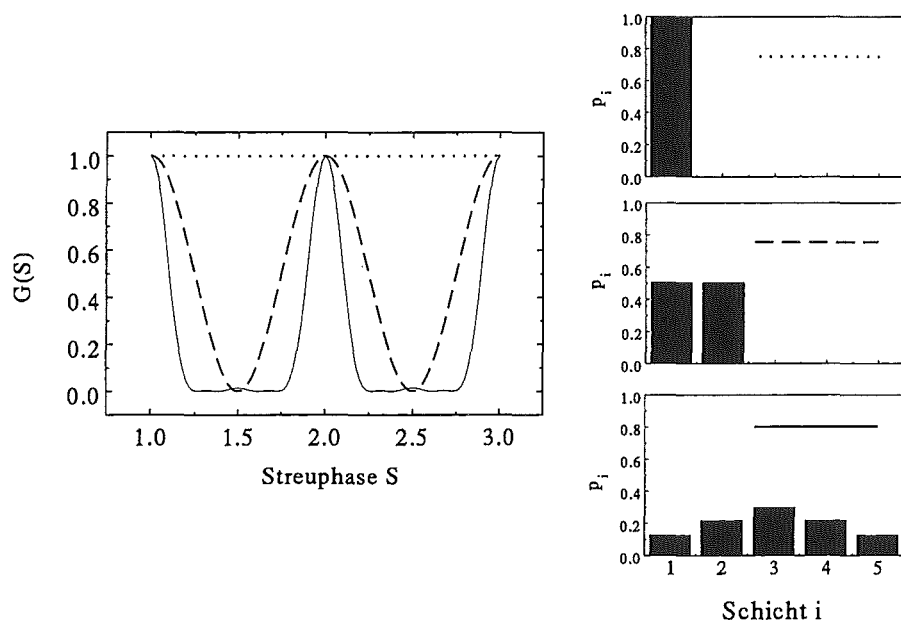


Abbildung 4.5: $G(S)$ als Funktion der Streuphase S für unterschiedliche Schichtverteilungen p_h .

Gepunktete Linie: $G(S) = 1$, ideale Oberfläche, bei der nur eine Schicht sichtbar ist.

Gestrichelte Linie: Zwei sichtbare Lagen mit gleichem Anteil an der Oberfläche.

Durchgezogene Linie: Fünf sichtbare Lagen, wobei die p_h durch eine Gaußverteilung beschrieben werden.

Aus der Krümmung der $G(S)$ -Kurve bei der In-Phase-Bedingung S_0 kann die Rauhtiefe bestimmt werden [62]:

$$\Delta = - \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi} \frac{\partial^2}{\partial S^2} G(S)|_{S=S_0}$$

Die $G(S)$ -Kurve kann in der Nähe der In-Phase-Bedingung S_0 durch eine Gaußsche Glockenkurve angenähert werden [62]:

$$G(S) = e^{-\Delta^2 (2\pi \Delta S)^2} \quad \text{mit} \quad \Delta S = S - S_0 : \text{Abstand zur In-Phase-Bedingung}$$

Damit ergibt sich die Rauhtiefe Δ aus der Halbwertsbreite (HWB) δS der Gauß-Funktion:

$$\Delta = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{2\pi \delta S} \quad (4.16)$$

4.3.2 Laterale Verteilung: Domänen-Matrix-Methode

Für eine gegebene Oberflächenkonfiguration ermöglicht die Domänen-Matrix-Methode (DMM) die Berechnung von Reflexprofilen im Rahmen der kinematischen Beugungstheorie [63]. Die Berechnung der Profile erlaubt eine Variation von einer großen Zahl von Parametern, so daß eine Oberfläche hinsichtlich der statistischen Größen hervorragend charakterisiert werden kann. Umfangreiche Tests und Vergleiche mit Analysen durch RSM-Verfahren, die den Realraum abbilden, demonstrieren die Zuverlässigkeit und die hinreichende Eindeutigkeit der DMM [57]. Die DMM wurde von PFLANZ und MORITZ entwickelt und stellt eine Erweiterung der Matrix Methode dar, die ursprünglich auf Landau, Lifschitz und Wilson für die Röntgenbeugung formuliert worden ist.

Die Basisidee der DMM besteht darin, eine Oberfläche aus definierten Grundeinheiten -den Domänen- zusammenzusetzen [63]. Abb. 4.6 zeigt einige Beispiele für Domärentypen. Jede Domäne der Konfiguration n tritt mit der *a priori* Wahrscheinlichkeit $p_\alpha(n)$ auf. Diese Wahrscheinlichkeit setzt sich aus der *a priori* Wahrscheinlichkeit p_α für das Auftreten des Domärentyps α und der Längenverteilung $\nu_\alpha(n)$ zusammen: $p_\alpha(n) = (p_\alpha, \nu_\alpha(n))$. Die Anordnung der einzelnen Domänen wird über die Transfermatrix $\mathbf{P} = P_{\alpha,\beta}$ bestimmt, deren Einträge die $p_{\alpha,\beta}$ sind. Der Eintrag $p_{\alpha,\beta}$ gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß nach einem Domärentyp α ein Domärentyp β auftritt. Zur Berechnung der Autokorrelationsfunktion ist es günstig, eine Verbundwahrscheinlichkeit $p(k = \alpha, k' = \alpha')$ einzuführen. Die Verbundwahrscheinlichkeit gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß unter der Bedingung einer

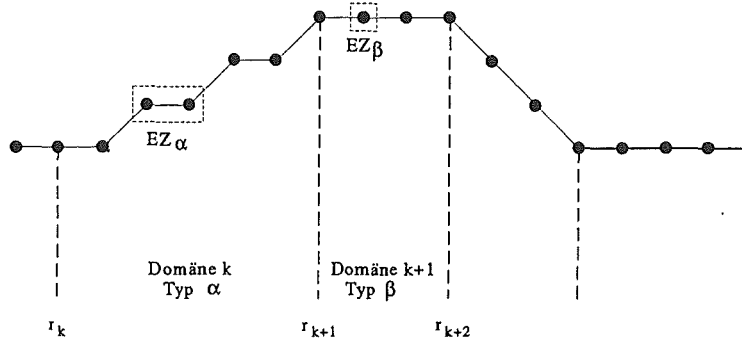


Abbildung 4.6: Schematische Darstellung von Domänentypen. Jede Domäne kann aus einer Anzahl von Einheitszellen zusammengesetzt werden. Die Anordnung der Domänen wird durch $p_{\alpha\beta}$ festgelegt, α und β kennzeichnen die Domänentypen. Jede Domäne tritt mit der a-priori Wahrscheinlichkeit p_α auf. Die Längen der Domänenabschnitte sind nach $\nu_\alpha(n)$ verteilt (nach [63]).

Domäne vom Typ α an der Position k eine zweite Domäne vom Typ α' am Ort k' zu finden ist. Die Verbundwahrscheinlichkeit wird aus den Einträgen in die Transfermatrix und den a-priori Wahrscheinlichkeiten berechnet:

$$p(k, k' = k + l) = p_\alpha p_{\alpha\alpha'}^l$$

Die Berechnung der Autokorrelation kann jetzt über die Summation über alle Domänenpaare (k, k') beliebigen Typs multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit für die Typkombination $(k = \alpha, k' = \alpha')$ erfolgen, anstatt über alle Domänenpaare (k, k') festen Typs (α, α') . Aus der Autokorrelationsfunktion kann dann analog zu Gl. 4.2 über eine Fouriertransformation die gebeugte Intensität berechnet werden. Es ergibt sich ein allgemeiner Ausdruck für die gebeugte Intensität einer fehlgeordneten Domänenstruktur, der es erlaubt, Reflexprofile zu berechnen.

Mit der DMM ist es möglich, Reflexprofile für die unterschiedlichsten Defektstrukturen wie Facetten, regelmäßig und unregelmäßig gestufte Oberflächen oder Anti-Phasen Domänen zu berechnen. Auch unterschiedliche Terrassenverteilungen von gestuften Oberflächen können berücksichtigt werden. Insbesondere können die Terrassenverteilungen sowohl hinsichtlich ihrer Art (Gauß, geometrisch) als auch ihrer Breite berücksichtigt werden. Durch Vergleich mit experimentell beobachteten Reflexprofilen können so Probenoberflächen sehr genau charakterisiert werden. Abb. 4.7 zeigt Beispiele von Reflexprofilen für unterschiedliche Verteilungsfunktionen, die mit der DMM berechnet worden sind.

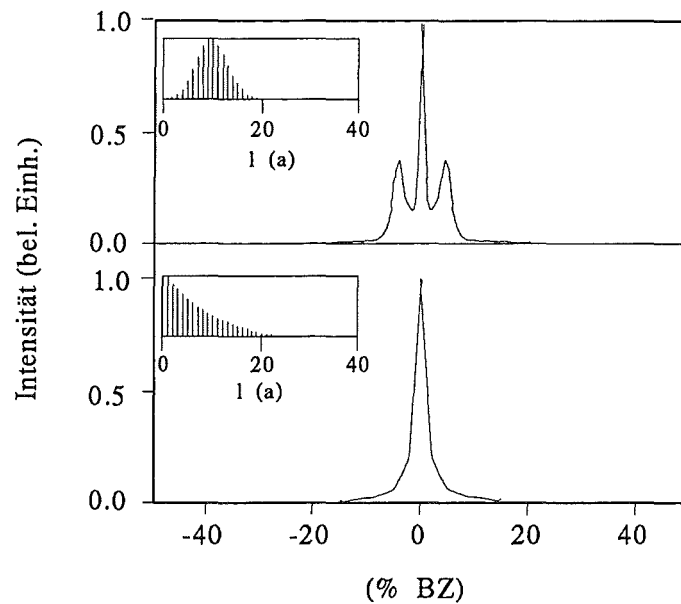


Abbildung 4.7: Einfluß von unterschiedlichen Terrassenverteilungsfunktionen. Für beide Profile wurde die gleiche mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle = 10a$ gewählt ($S = 0.75$) (nach [63]).

Aus der DMM entwickelte PFLANZ einen FORTRAN-Algorithmus, der dem Autor freundlicherweise von S. Pflanz zur Verfügung gestellt wurde. Alle mittels der DMM berechneten Reflexprofile wurden mit diesem Programm berechnet.

4.4 Beugung von Elektronen unter streifendem Einfall: RHEED

4.4.1 Beugungsmuster und der Einfluß von Defekten

Neben der LEED-Beugung langsamer Elektronen, i.d.R. unter senkrechtem Einfall, hat sich die Beugung von hochenergetischen Elektronen unter streifendem Einfall RHEED (engl.: Reflection High Energy Electron Diffraction) als Standardtechnik zur *in-situ* Strukturanalyse bewährt². Elektronen mit einer Energie E von etwa $E \sim 10$ keV fallen unter kleinem Einfallswinkel $\theta \sim 1^\circ$ auf die Probenoberfläche. Der reflektierte Elektronenstrahl wird mit einem Fluoreszenzschirm nachgewiesen. Die beobachteten Beugungsmuster erlauben eine Beurteilung der Oberflächenstruktur. Der streifende Einfall ist sehr günstig, da durch diese geometrische Anordnung

²Eine Einführung und eine aktuelle Literaturübersicht findet sich in [64]

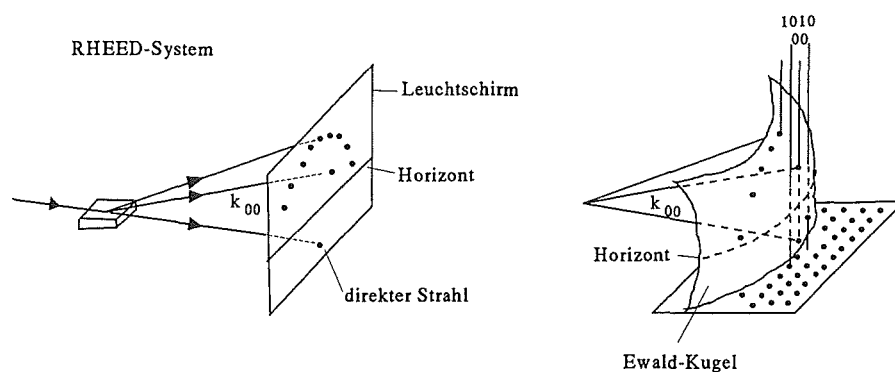


Abbildung 4.8: Beugungsanordnung und K-Raum mit Ausschnitt aus der Ewald-Kugel für die Beugung schneller Elektronen (RHEED) (nach [42]).

das Reflexmuster auch während des Wachstumsprozesses beobachtet und analysiert werden kann, ohne den Wachstumsprozeß zu unterbrechen oder zu beeinflussen. Vorteile von RHEED gegenüber LEED liegen – wegen der höheren Elektronenenergie – in der besseren Fokussierbarkeit des Elektronenstrahls und in einem reduzierten Umfang von Abschirmmaßnahmen. Der wesentliche Nachteil von RHEED ist auch mit der höheren Elektronenenergie direkt verknüpft: inelastische Streuprozesse können nicht vernachlässigt werden, was eine quantitative Reflexprofilauswertung i.a. äußerst schwierig oder gar unmöglich macht. Außerdem ist nachteilig, daß das Beugungsbild nur Strukturinformationen entlang der Einfallrichtung der Elektronen enthält.

Der experimentelle Aufbau und die Entstehung der Reflexmuster ist in Abb. 4.8 dargestellt. Mit Hilfe der Ewald-Konstruktion (vgl. Kap. 4.1.1) kann das Beugungsbild beschrieben werden [42]. Reflexe können wegen der Energieerhaltung nur dort beobachtet werden, wo die Ewald-Kugel die „Stangen“ des reziproken Gitters schneidet. Wegen der gewählten Geometrie liegen die Reflexe auf einem Halbkreis. Durch die Probenebene wird der Horizont (Schattenkante) bestimmt und nur die Schnittpunkte der über dem Horizont liegenden, oberen Halbkugel mit den „Stangen“ sind beobachtbar.

Das beobachtbare Beugungsbild entsteht im wesentlichen durch elastische Streuung an der Oberfläche. Elastische Streuprozesse bestimmen die Position und den Hauptteil der Intensität, da ein großer Teil der inelastisch gestreuten Elektronen den Leuchtschirm nicht erreicht oder nicht erleuchtet [42]. Zwar ist die Energie der Elektronen groß, aber durch den kleinen Einfallswinkel $\theta \sim 1^\circ$ werden die Elektro-

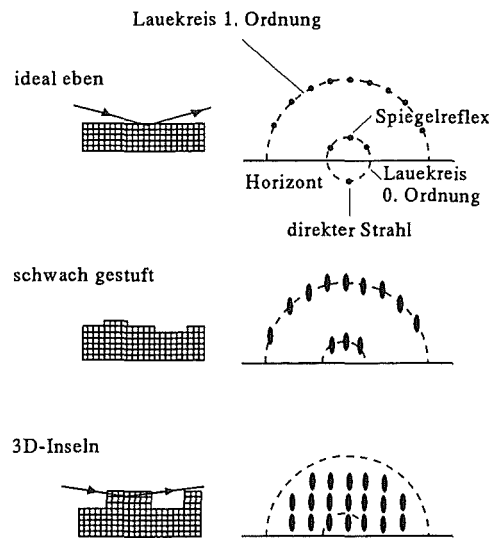


Abbildung 4.9: Beispiel für Oberflächenstrukturen und zugehörige RHEED-Beugungsmuster. (nach [42]).

nen an der obersten Lage gestreut: Um 1 ML tief in die Probe einzudringen, müssen die Elektronen einen transversalen Weg von etwa $\sim 100 \text{ \AA}$ innerhalb der obersten Lage zurücklegen. Die mittlere freie Weglänge beträgt bei $E \sim 10 \text{ keV}$ lediglich $\sim 50 \text{ \AA}$ [50], so daß von Streuung an der obersten Lage ausgegangen werden kann.

Die Beugungsmuster enthalten Informationen über die Oberflächenstruktur [42]. Eine ideal glatte Oberfläche erzeugt runde Reflexe, die auf dem Laue Kreis liegen entsprechend den Schnittpunkten der Ewald-Kugel mit den Stangen des reziproken Gitters (Abb. 4.9). Schwach gestufte Oberflächen oder auch Mosaikstrukturen führen zu einer Verbreiterung der Stangen (vgl. Kap. 4.2.2): Im Beugungsmuster dehnen sich die Punkte zu Strichen senkrecht zur Horizontlinie, bei stärkerer Stufung zu durchgehenden Streifen. Stark gestufte Oberflächen oder mit größeren Inseln bedeckte Oberflächen zeigen Durchstrahlungsmuster, die denen der Röntgenstrahlung vergleichbar sind.

Da die Entstehung der Reflexe aus der Ewald-Konstruktion folgt, stehen prinzipiell die gleichen Werkzeuge wie bei der LEED-Beugungstheorie zur Verfügung. Eine quantitative Analyse der RHEED-Reflexprofile ist wegen des im Vergleich zu LEED höheren Anteils an inelastisch gestreuten Elektronen äußerst problematisch [42]. Erste Ansätze, mittels einer Spot Profil Analyse mit Energiefilter und Chan-

neltron (SPA-RHEED) auch RHEED-Profilen in gleicher, umfangreicher und detailreicher Weise wie LEED-Profilen auszuwerten, sind neuesten Ursprungs und bisher einzigartig [66].

Ein typischer Vertreter der inelastischen Effekte sind die häufig auftretenden KIKUCHI-Linien [65], die sich dem beschriebenen Reflexmuster als komplexes Linienmuster überlagern. Sie entstehen durch inelastische und diffuse Streuung der Elektronen an den obersten Atomlagen und einer anschließenden elastischen Streuung an tieferen Netzebenen. Klare Kikuchi-Linien deuten auf gute Kristallqualität hin, über die Oberflächenstruktur kann aus ihnen wenig Information gewonnen werden. Da die auftretenden Energieverluste gering sind [66] und die Linien oftmals Reflexe schneiden, wird hierdurch eine Reflexprofilanalyse kritisch, da eine Analyse eine Abtrennung der inelastisch gebeugten Elektronen erfordert.

4.4.2 Intensitätsoszillationen

Der Wachstumsprozeß kann während des Wachstums in Echtzeit durch RHEED beobachtet werden. Neben einer Änderung der Reflexmuster nach Abb. 4.9 kann häufig eine Oszillation der integralen Intensität des (00)-Reflexes beobachtet werden [64]. Mit Hilfe der Intensitätsoszillationen läßt sich die Anzahl der deponierten Monolagen bestimmen. Zusätzlich kann durch Modellannahmen auf die Art des Wachstums geschlossen werden.

Das Auftreten von Oszillationen während des Schichtwachstums kann durch zwei Modelle erklärt werden, wenngleich es noch nicht vollständig verstanden ist [64]. Das erste Modell berücksichtigt Interferenzen der Elektronenwellen an einer Stufe der Höhe d mit Hilfe eines kinematischen Ansatzes (Abb. 4.10). Die Weglängendifferenz an einer Stufe führt in Abhängigkeit von der Wellenlänge λ der Elektronen und vom Einfallswinkel θ zu konstruktiver oder zu destruktiver Interferenz. Zur Beobachtung der Wachstumsoszillationen werden λ und θ so gewählt, daß an einer Stufe destruktive Interferenz auftritt (Anti-Bragg-Bedingung):

$$\lambda \left(n + \frac{1}{2} \right) = 2d \sin \theta, \quad (4.17)$$

wobei n ganzzahlige Werte annimmt und die Beugungsordnung angibt. Bei einer idealen Oberfläche gibt es keine Stufen, es folgt eine maximale Amplitude der Intensität. Wächst auf dieser idealen Oberfläche eine neue Lage auf, dann nimmt die Intensität des gebeugten Elektronenstrahls wegen der gewählten Beugungsbedingung (Gl. 4.17) mit zunehmender Bedeckung ab. Bei halb gefüllter Lage wird das

Minimum der Intensität erreicht, bei weiterem Schichtwachstum vermindert sich der Anteil der destruktiven Interferenz und die Intensität steigt wieder an, um bei der geschlossenen Monolage ihr Maximum zu erreichen.

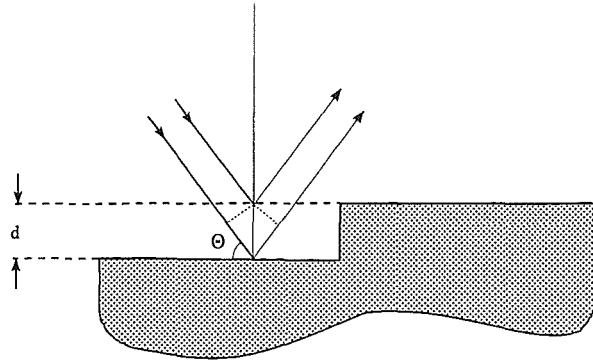


Abbildung 4.10: Die Weglängendifferenz an einer Stufe führt in einem kinematischen Modell in Abhängigkeit vom Verhältnis des Einfallswinkels θ zur Wellenlänge λ zu destruktiver Interferenz.

Der zweite Ansatz zur Erklärung der Wachstumsoszillationen geht von diffuser Streuung durch Oberflächeninseln aus. Bei idealer Oberfläche werden die Elektronen zum Schirm gebeugt. Mit zunehmender Bedeckung während des Wachstums werden Teile des einfallenden Elektronenstrahls durch diffuse Streuung unter anderen Winkeln gestreut. Die Intensität des Reflexes nimmt ab, bis die oberste Lage halb gefüllt ist. Dann nimmt die Intensität wieder zu, bis sie bei geschlossener oberster Lage ihr Maximum erreicht.

Die Oszillationen können auch mit geringeren Elektronenenergien vergleichbar zu LEED oder MEED (Medium Energy Electron Diffraction) beobachtet werden (z.B. in [67]), da ihre Entstehung nicht an die Elektronenenergie gebunden ist.

Durch Abzählen der Oszillationsperioden kann die Anzahl der deponierten Monolagen – bei Halbleitern evt. auch Doppellagen – bestimmt werden. Allerdings bedeutet der Abbruch des Wachstums nach dem Äquivalent von n ML nicht, daß es exakt n geschlossene Lagen gibt. Je nach Art des Wachstums kommt es zur Aufrauheit der Schicht, so daß z.B. die $(n - 1), n, (n + 1)$ Lagen offen sind, obwohl insgesamt ein Äquivalent von n Lagen aufgebracht worden ist. Vergleichende Experimente von Raster-Tunnel-Mikroskop mit RHEED-Oszillationen zeigen, daß im Maximum der Oszillation die Schichtrauigkeit am geringsten ist, auch wenn nicht alle Lagen komplett gefüllt sind [44].

Die Form der Intensitätsoszillationen kann Aufschlüsse über die Art des Wachstums geben [64]: Bei idealem Lagenwachstum ergibt sich ein parabelförmiger Verlauf zwischen zwei Maxima. Beginnt die zweite Lage bereits zu wachsen, bevor die erste geschlossen ist, ergeben sich Abweichungen von diesem idealen Verhalten. Durch Annahme von Wachstumsmodellen kann von der sich ergebenden Oszillationsform auf das Wachstum geschlossen werden. Das Fehlen von Oszillationen kann zwei Ursachen haben: (i) ideales Lagenwachstum, bei dem sich durch schnelle Oberflächendiffusion der Atome an den Kanten eine quasi stationäre Oberfläche ergibt; (ii) schlechtes Wachstum, wenn die Atome auf den Plätzen bleiben, auf denen sie kondensiert sind und sich dadurch die Oberfläche schnell aufraut. Daher ist eine Beurteilung des Wachstumsprozesses durch die Oszillationen alleine sicher problematisch.

5 Präparation und Charakterisierung von epitaktischen Ag-Schichten auf GaAs-Substraten

Das Studium der Austauschkopplung an ultradünnen Schichten setzt voraus, Proben von höchstmöglicher Grenzflächen- und Kristallqualität präparieren zu können. Dies ist insbesondere beim Vergleich von experimentellen Ergebnissen mit theoretischen Rechnungen notwendig.

Als Wachstumsunterlage für hochwertige Fe-Schichten haben sich metallische Einkristalle aus Silber oder Wolfram bewährt. Der Nachteil einer langwierigen Vorbehandlung derartiger Einkristalle kann vermieden werden, indem epitaktische Schichten auf Halbleitersubstraten wie z.B. GaAs präpariert werden. Dadurch kann eine wesentlich größere Zahl von Proben hergestellt werden, auf die dann auch ergänzende Meßmethoden wie Röntgenbeugung und ferromagnetische Resonanz angewendet werden können.

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist ein bekanntes Rezept für hochwertige Fe/X/Fe-Schichtsysteme. Diese Schichtsysteme werden auf GaAs-Substraten mit einer Fe-Keimschicht und Ag-Pufferschicht präpariert. Die Oberfläche der Ag-Pufferschicht dient als Wachstumsunterlage für die Fe/X/Fe-Schichten.

Im ersten Abschnitt werden grundlegende Überlegungen zur Epitaxie vorangestellt, um Bedingungen für gutes Schichtwachstum zu formulieren. Anschließend werden die Ergebnisse der Arbeit behandelt, durch optimierte Prozeßschritte die Oberfläche der verwendeten GaAs-Substrate zu verbessern. Danach wird die Herstellung eines Ag-Einkristalls mit Fe-Keimschicht auf GaAs vorgestellt, wobei insbesondere die Oberfläche des Ag-Einkristalls hinsichtlich Rauigkeit detailliert untersucht wird.

5.1 Grundlegendes zum epitaktischen Wachstum

Gitterfehlanpassung

Als Standardkriterium für epitaktisches¹ Schichtwachstum dient die Gitterfehlanpassung. Unter der Gitterfehlanpassung Δa versteht man den relativen Unterschied zwischen der lateralen Gitterkonstante a_S des Substrats und der lateralen Gitterkonstante a_E der aufgedampften Schicht:

$$\Delta a = \frac{a_E - a_S}{a_S} \quad (5.1)$$

Zur Herstellung hochwertiger Schichten sollte die Gitterfehlanpassung Δa möglichst klein sein, da bei großem Δa eine Relaxation der Verspannung durch Versetzungen erzeugt werden kann [69]. Allerdings ist die Forderung nach geringer Fehlanpassung nicht streng, da verspannte Gitter oft nach wenigen Monolagen relaxieren und die weiter aufgedampften Lagen mit der Gitterkonstanten des Volumenmaterials aufwachsen können. Tabelle 5.1 gibt eine Übersicht über die Gitterparameter der verwendeten Materialien:

Metall	Fe	Cr	Ag	GaAs
Gitterstruktur	krz	krz	kfz	zb
Gitterkonstante a [nm]	0.2866	0.2885	$0.2888 \cdot \sqrt{2}$	0.5653
Metallsystem	Fe/Cr	Cr/Fe	Ag/Fe	Fe/GaAs
$\Delta a = (a_E - a_S)/a_S$	0.65%	0.65%	0.76%	1.4%

Tabelle 5.1: Gitterstruktur, -konstanten und Fehlanpassung für das Wachstumsverhalten bei (001)-Orientierung.

In der Tabelle ist berücksichtigt, daß kubisch-raumzentriertes (krz) (001)-Fe mit einer Rotation von 45° auf kubisch-flächenzentriertem (kfz) (001)-Ag aufwächst. Die Fehlanpassungen Δa sind sehr klein, dieses Kriterium ist gut erfüllt.

¹Das griechische Wort *Epitaxie* bedeutet: Kristallabscheidung einer Kristallart auf einem gleichartigen Kristall [68]. Der physikalische Begriff ist nicht scharf definiert.

Oberflächenenergien

Nach BAUER [70] wird der Mechanismus des Kristallisationsprozesses durch die Oberflächen- und Grenzflächenenergien bestimmt. Dabei wird die Bildung einer Legierung oder weitere Änderungen der Oberfläche vernachlässigt. Es wird die Bilanz $\Delta\gamma$ der Oberflächenenergien gebildet:

$$\Delta\gamma = \gamma_E + \gamma_I - \gamma_S$$

Durch $\Delta\gamma$ wird ausgedrückt, welche Wechselwirkung größer ist; diejenige zwischen zwei deponierten Atomen oder diejenige zwischen einem deponierten Atom und dem Substrat. Zusätzlich wird eine schichtdickenabhängige Verspannung berücksichtigt, die durch Gitterfehlانpassung entstehen kann. Daher erhält jede Oberflächenenergie den Index n , der für die n -te Monolage steht:

$$\Delta\gamma^{(n)} = \gamma_E^{(n)} + \gamma_I^{(n)} - \gamma_S^{(n)} \quad (5.2)$$

Damit lassen sich drei Wachstumsarten unterscheiden:

1. Für $\Delta\gamma^{(n)} \leq 0$ ergibt sich Lagenwachstum (Frank-van der Merwe): Eine neue Atomlage der Schicht beginnt erst dann zu wachsen, wenn sich die darunterliegende Lage komplett geschlossen hat.
2. Für $\Delta\gamma^{(n)} > 0$ ergibt sich Inselwachstum (Volmer-Weber): Es bilden sich dreidimensionale Inseln auf dem Substrat. Eine geschlossene Schicht entsteht erst bei vergleichsweise großen Schichtdicken.
3. Falls zu Beginn des Wachstumsprozesses $\Delta\gamma^{(n)} < 0$, aber mit zunehmender Schichtdicke n die elastische Gitterverzerrung zunimmt, d.h. $\gamma_I^{(n)}$ anwächst, so ergibt sich eine kritische Dicke, ab der $\Delta\gamma^{(n)} > 0$ wird. Das anfängliche Lagenwachstum geht dann in Inselwachstum über (Stranski-Krastanov).

Streng erfüllt ist die Bedingung für Lagenwachstum nur bei Homoepitaxie: $\gamma_E^{(n)} = \gamma_S^{(n)}$ und $\gamma_I^{(n)} = 0$. Daher kann i. a. Wachstum nach Stranski-Krastanov oder Volmer-Weber erwartet werden.

Die konkrete Vorhersage des Wachstumsmodus wird zusätzlich dadurch erschwert, daß die $\gamma_i^{(n)}$ nur für das Volumenmaterial bekannt sind. Bei dünnen Schichten können sich erhebliche Abweichungen ergeben, insbesondere unter Berücksichtigung der Gitterfehlانpassung. Überdies schwanken die Angaben für die $\gamma_i^{(n)}$ beträchtlich, wie in

Tabelle 5.2 dargestellt ist. Die Ursache für die Schwankungen liegt gleichermaßen in den unterschiedlichen Meßtechniken als auch in der Schwierigkeit, diese Größen zu messen. Darüber hinaus ist eine Übertragung der makroskopischen Größen auf extrem dünne Filme von wenigen Monolagen Dicke generell problematisch.

Fe	Cr	Ag	Ref.
2.50	2.40	1.25	[71]
2.48	2.30	1.25	[72]
2.94	2.06	1.32	[73]
2.0			[74]

Tabelle 5.2: Die Oberflächenenergien γ_i der Metalle Fe, Cr und Ag.

Die Oberflächenenergiebilanz $\Delta\gamma$ als Kriterium für unterschiedliche Wachstumsarten schränkt die Möglichkeit für gutes Lagenwachstum für Vielschichtsysteme vom Typ A/B/A noch weiter ein. Denn gilt z.B. für das Wachstum von A auf B: $\Delta\gamma < 0$ - Lagenwachstum -, dann gilt wegen der Definition für das Wachstum von B auf A: $\Delta\gamma > 0$ - also Inselwachstum. Daher wird für Vielschichten die „Oberflächenenergie-Fehlanpassung“ Γ von BAUER und VAN DER MERWE [75] als ein weiteres Kriterium für gutes Wachstum vorgeschlagen:

$$\Gamma_{ES} = \frac{2|\gamma_E - \gamma_S|}{\gamma_E + \gamma_S} < \Gamma_{Krit.} \approx \frac{1}{2} \quad (5.3)$$

Je nach Wert für γ_i aus Tab. 5.2 erhält man $\Gamma_{ES}^{Fe/Cr} \approx 0.04 - 0.36$ für das System Fe/Cr und $\Gamma_{ES}^{Fe/Ag} \approx 0.60 - 0.76$ für das System Fe/Ag. Da auch die Gitterfehlanpassung für das System Fe/Cr lediglich 0.65% beträgt, wird für Fe/Cr gutes Wachstum erwartet und zwar bei Wachstum von Fe auf Cr und bei Wachstum von Cr auf Fe. Im Fall von Fe/Ag ist sowohl die Gitterfehlanpassung größer als auch der Unterschied der Oberflächenenergien γ_i und der Verhältnisse Γ größer, aber immer noch annähernd erfüllt. Jedoch sind bei Fe/Ag die Wachstumsverhältnisse wegen der unterschiedlichen γ_i nicht mehr symmetrisch: Ag wächst nach Gl. 5.2 auf Fe lagenweise, hingegen wächst Fe auf Ag im Inselmodus.

Diffusion

Die bisher diskutierten Argumente für gutes epitaktisches Wachstum sind, streng betrachtet, nur im thermodynamischen Gleichgewicht gültig. Bei der Molekularstrahlepitaxie (MBE) von metallischen Schichtsystemen ist man weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernt. Kinetische Aspekte, das Zusammenspiel von Substrattemperatur und Aufdampfrate, bestimmen das Wachstumsverhalten entscheidend mit. Für die Substrattemperatur ist nur ein kleines Fenster günstig, welches durch die Oberflächendiffusion und die Volumendiffusion bestimmt wird. Die Substrattemperatur sollte während des Aufwachsens möglichst hoch sein, um eine Oberflächendiffusion zu begünstigen. Dann führt die große Beweglichkeit der ankommenden Atome zu geringer Rauigkeit der Schicht. Andererseits darf die Substrattemperatur nicht zu hoch gewählt werden, da sonst Volumendiffusion einsetzt. Die Aufdampfrate muß jetzt der gewählten Substrattemperatur angepaßt werden. Je geringer die Temperatur ist, desto kleiner sollte die Rate eingestellt werden, um die Oberflächendiffusion der ankommenden Depositionsatome zu begünstigen.

Die hier diskutierten Anforderungen an die Auswahl der Materialien zur Herstellung von epitaktischen Schichten ergeben ein qualitatives Verständnis. Experimentell bedeutend sind aber noch weitere Faktoren, wie z. B. die Rauigkeit des verwendeten Substrats, Oberflächenkontaminationen oder Überstrukturen. Für jeden Experimentator ist daher die Optimierung der Wachstumsbedingungen eine große Herausforderung, deren alchemistischen Charakter der Autor nur betonen kann.

5.2 GaAs als Substrat

Voraussetzung für die benötigte hohe Probenqualität ist eine glatte Oberfläche des verwendeten Substrates. Neben metallischen Einkristallen wie W, Ag oder Fe erfüllen kommerziell erhältliche Halbleitersubstrate diese Anforderung. Halbleitersubstrate haben gegenüber metallischen Einkristallen den Vorteil, daß die Vorbehandlung zur Oberflächenreinigung wesentlich kürzer ist. Zeitraubende, mehrfache Temper- und Ionenätzzyklen sind nicht erforderlich. Bei GaAs reicht ein einstündiges Tempern aus, um Oberflächenkontaminationen zu beseitigen.

Zur Vorreinigung werden die GaAs Substrate (typische Abmessung $6 \times 16 \text{ mm}^2$) zunächst in einem Ultraschallbad gereinigt und nach Aufkochen in Propanol in das UHV-System eingeschleust. Anlassen der Substrate im UHV auf 560°C für die Dauer

einer Stunde entfernt die Sauerstoffkontamination der Oberfläche bis unter die mit Auger-Spektroskopie nachweisbare Konzentration (1/100 ML).

Als Folge dieser thermischen Oberflächenreinigung entsteht gleichzeitig eine starke Aufrauung der Oberfläche. Abb. 5.1 zeigt das RHEED-Muster einer GaAs-Oberfläche nach einstündigem Tempern bei $T_S = 560^\circ\text{C}$. Die Reflexe liegen zwar auf einem Halbkreis, jedoch sind sie senkrecht zur Schattenkante stark verlängert, parallel zur Schattenkante sind sie verbreitert. Mit SPA-LEED wird in (10)-Richtung eine FWHM-Reflexbreite von $\Delta K_{1/2} \approx 16\%$ gemessen, was nach (Gl. 4.12) einer Terrassenlänge $\langle L \rangle \approx 6a_{\text{GaAs}} \approx 3.5\text{nm}$ entspricht.

Ex-situ wurde die makroskopische Oberflächenstruktur mit dem Rasterkraftmikroskop (RKM) in Zusammenarbeit mit CHRISTIANE DOMKE [77] untersucht. Oberflächenadsorbate verzerren die *ex-situ* RKM Abbildungen einer Oberfläche naturgemäß, da sie wie ein „Teppich“ wirken können. Es werden z. B. Stufenhöhen beobachtet, die kleiner als der Abstand zweier Lagen sind. Diese Stufen entstehen durch Adsorbate, die sich an der Oberfläche anlagern. Da die Adsorption ein statistischer Prozeß ist, muß eine Stufe im Adsorbat nicht unbedingt einer Stufe im Substrat entsprechen. Die Interpretation der RKM-Aufnahmen hinsichtlich Schichtrauigkeit wird entsprechend erschwert. Beschränkt man die Interpretation der gemessenen Bilder jedoch auf Längen- und Höhenmaßstäbe, für die $l > 1 - 2\text{ nm}$ gilt, so kann das RKM wertvolle, ergänzende Informationen bereitstellen.

RKM-Aufnahmen vor dem Temperprozeß zeigten Oberflächen, die über Abstände im Bereich von einigen μm innerhalb des apparativen Auflösungsvermögens des verwendeten RKM ($\Delta h \geq 0.1\text{ nm}$) glatt sind. Nach dem Temperprozeß wurden die GaAs-Proben wieder mit dem RKM untersucht. Abb. 5.2 zeigt die Aufnahme einer solchen getemperten GaAs-Oberfläche. Auffällig sind die vielen Löcher, deren Tiefe oft bis zu 15nm beträgt. Die mittlere Inselbreite² beträgt $\langle L \rangle \approx 180\text{ nm}$ und der mittlere Inselabstand $\langle D_L \rangle \approx 260\text{ nm}$. Aus den Bildern kann aus der mittleren quadratischen Rauigkeit σ^2 die Rauhtiefe σ bestimmt werden zu: $\sigma = 2.4\text{ nm}$.

Die Aufrauung des GaAs nach dem Temperprozeß ist in der Literatur schon früh beschrieben worden [78]. Die Ursache dieser starken Aufrauung ist nicht vollständig geklärt, aber sie muß mit der Desorption des Oxides eng verknüpft sein [79]. Die typische Dicke des Oberflächenoxides vor dem Temperprozeß beträgt ca. 1.5 nm [79]. Die Löcher, deren Tiefe bis zu einer Größenordnung über der Dicke der Oxidschicht

²Die Werte liegen deutlich über der Transferweite des SPA-LEED

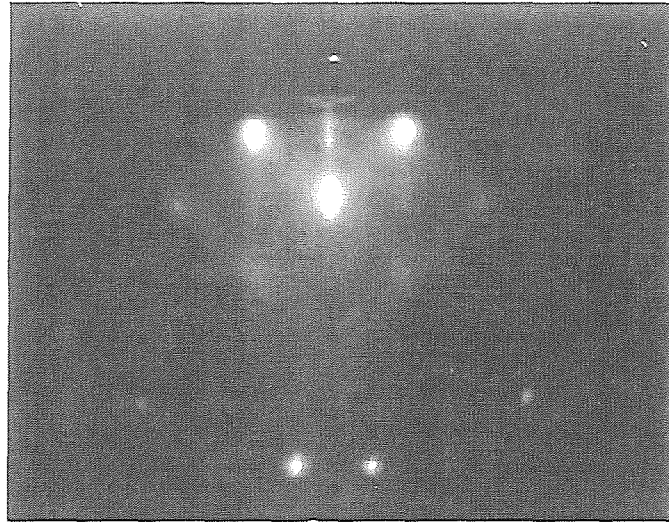


Abbildung 5.1: RHEED-Muster einer getemperten GaAs-Oberfläche (Einstrahlwinkel $\alpha = 1^\circ$, Energie $E = 10\text{keV}$). Die Reflexe liegen auf einem Halbkreis, sind jedoch stark verbreitert.

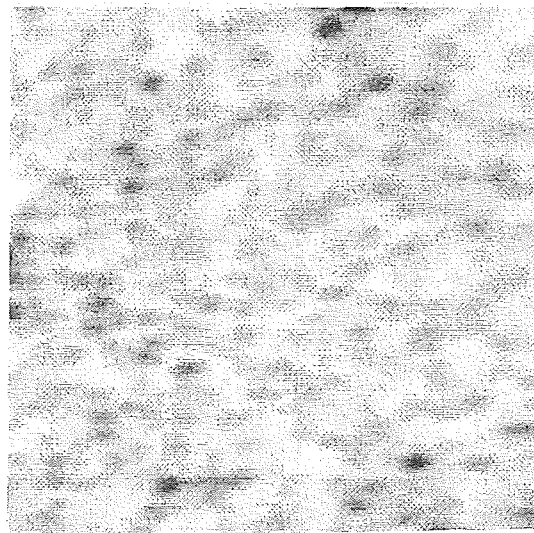


Abbildung 5.2: RKM Aufnahme einer GaAs Oberfläche nach Tempn. Größe des Bildausschnitts: $5\mu\text{m} \times 5\mu\text{m}$. (nach [77]).

liegt, können folglich nicht einfach durch die Oxidschicht überdeckt und nach dem Ablösen der Oxidschicht freigelegt werden. Das bedeutet, daß der Desorptionsprozeß für die Entstehung der Löcher verantwortlich ist. In Folge des Kristallzuchtverfahrens bilden sich As-Einschlüsse im Substratmaterial. Als Ursache für die Entstehung der Löcher wird angenommen, daß As-Einschlüsse beim Tempern abgelöst werden und dabei Löcher in die Oberfläche reißen [80].

Verwendet man epitaktisch aufgewachsenes GaAs, so sollten herstellungsbedingt kaum As-Einschlüsse auftreten. Eine solche Schicht mit $2\mu\text{m}$ epitaktisch aufgewachsenem GaAs wurde durch A. FÖRSTER (Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich) für weitere Untersuchungen hergestellt. Die Oberfläche einer solchen Schicht ist sehr glatt, mittlere Terrassengrößen liegen bei $0.5\mu\text{m}$. Wird eine solche Schicht getempert, so entstehen wieder Löcher in der Oberfläche des GaAs, die mit den in Abb. 5.2 gezeigten Löchern sowohl in Tiefe, Größe, Abstand und Häufigkeit vergleichbar sind. Daher kann die Vermutung von As-Einschlüssen als Ursache der Löcher nicht bestätigt werden.

5.3 Präparation und Charakterisierung einer epitaktischen Ag-Schicht

5.3.1 Schichtpräparation

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist ein bekanntes Rezept für Fe/X/Fe-Schichtsysteme [81] und dessen Verfeinerung [82]. Diese Schichtsysteme werden auf GaAs-Substraten mit Fe-Keimschicht und Ag-Pufferschicht präpariert. Die Oberfläche der Ag-Pufferschicht dient als Wachstumsunterlage für die Fe/X/Fe-Schichten.

Zunächst wird auf das getemperte GaAs eine Fe-Keimschicht aufgedampft. Diese Fe-Keimschicht wächst in (001)-Orientierung auf. Die Gitterfehlpassung zwischen Fe und GaAs beträgt 1.4 % (vgl. Tab 5.1). Während des Bedampfungsvorgangs beträgt die Substrattemperatur $T_S = 373\text{ K}$ und die Aufdampftrate $0.01 - 0.02\text{ nm/s}$. Da das GaAs nach dem Temperschnitt sehr rauh ist (vgl. Kap. 5.2), ist auch die Oberfläche der 1 nm dicken Keimschicht rauh, so daß im RHEED-Muster der Fe-Oberfläche Durchstrahlungsreflexe erkennbar sind [82]. Außerdem bilden Fe und As eine Legierung [83], wodurch die magnetischen Eigenschaften des Fe wesentlich verändert werden. Wegen der schlechten Oberflächenstruktur und wegen der

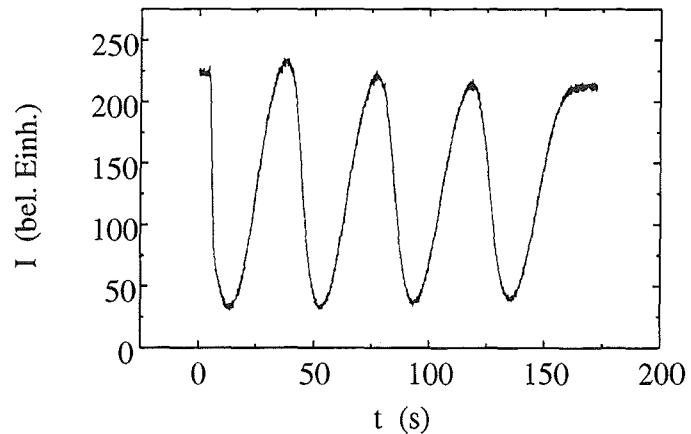
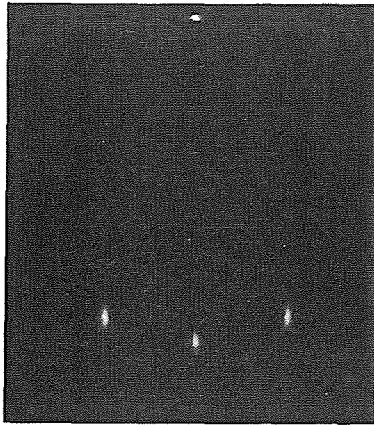


Abbildung 5.3: Links: RHEED-Muster der getemperten Ag-Oberfläche (Einstrahlwinkel $\alpha = 3^\circ$, -energie $E = 10$ keV).

Rechts: RHEED-Intensitätssoszillationen des (00)-Reflexes bei Wachstum von Ag auf Ag ($T_S = 273$ K). Einstrahlwinkel $\alpha = 1^\circ$, -energie $E = 7.4$ keV entsprechend der ersten Anti-Bragg-Bedingung.

starken Legierung von Fe und As ist eine Präparation der gewünschten Fe/X/Fe-Schichtsysteme direkt auf dem GaAs nicht sinnvoll. Dennoch ist die Fe-Keimschicht von zentraler Bedeutung, da das nachfolgende Ag in zwei Orientierungen – (001) und (111)– auf dem (001)-GaAs aufwachsen kann [76]. Durch die Fe-Keimschicht kann das Ag nur in (001)-Orientierung aufwachsen.

Auf diese Fe-Keimschicht wird bei einer Substrattemperatur von $T_S = 373$ K mit einer Rate von 0.1 nm/s eine 150 nm dicke Ag-Pufferschicht aufgedampft. Kubisch-flächenzentriertes Ag in (001)-Orientierung wächst auf krz Fe in (001)-Orientierung mit einer Rotation von 45° um die Schichtnormale auf. Die Gitterfehlانpassung zwischen Fe und Ag beträgt in diesem Fall 0.76 % (vgl. Tab 5.1). Anschließend wird die Probe bei $T = 573$ K eine Stunde getempert.

Auf die getemperte Ag-Oberfläche wurden 4 ML Ag bei $T = 293$ K aufgedampft. Dabei wurden RHEED-Oszillationen während des Wachstums aufgezeichnet (Abb. 5.3). Im vierten Maximum wurde das Wachstum unterbrochen und die Schicht abermals für 5 min bei $T = 573$ K getempert. Durch die Kontrolle des Wachstums mittels der RHEED-Oszillationen wird sichergestellt, daß die oberste Lage der Oberfläche möglichst geschlossen ist. Zusätzliche Rauigkeit infolge nicht vollständig gefüllter Lagen an der Oberfläche kann auf diese Art reduziert werden.

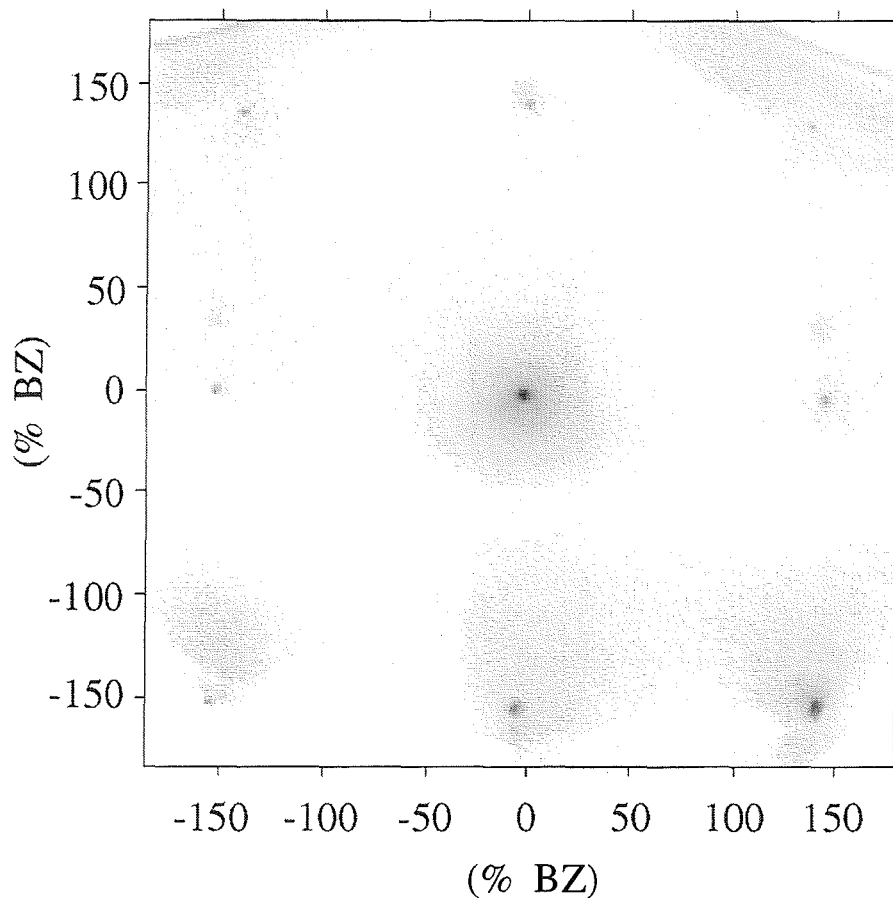


Abbildung 5.4: LEED-Aufnahme einer getemperten Ag Oberfläche ($E = 140$ eV, $S = 4.1$). In der Mitte befindet sich der zentrale (00)-Reflex, in den Ecken sind die (20)-Reflexe zu erkennen.

Die ausgezeichnete Kristallqualität konnte durch Rutherford-Rückstreuung (RBS engl.: Rutherford Back Scattering) demonstriert werden [84]. Die durch die RBS-Methode erhaltenen Kristallparameter sind vergleichbar mit den Parametern von sehr guten metallischen Einkristallen.

5.3.2 Charakterisierung der Oberflächenstruktur

Das LEED-Muster einer derart präparierten Ag-Oberfläche wird in Abb. 5.4 gezeigt. Sichtbar ist der zentrale (00)-Reflex in der Mitte und die (20)-Reflexe in den Ecken. Die (11)-Reflexe liegen auf einer horizontalen und auf einer vertikalen Linie, die sich im Ursprung schneiden. Wegen der kfz-Struktur des Ag-Gitters können nur Reflexe

beobachtet werden, deren Summe aller Indizes gerade ist. Somit können die (10)-Reflexe nicht beobachtet werden. Das Auftreten der Reflexe höherer Ordnung zeigt die gute Epitaxie des Ag. Die Atome sitzen auf wohldefinierten Gitterplätzen, die laterale Gitterkonstante entspricht derjenigen von massivem Ag: $a_{Ag} = 0.405 \text{ nm}$, $a_{Ag}^{Lit} = 0.41 \text{ nm}$. Im Vergleich zum Fe-Whisker (vgl Abb. 3.4) erscheinen die Reflexe verbreitert, was auf eine rauhere Oberfläche schließen läßt.

Die Streuphasen S ergeben sich nach Gl. 4.5 aus der Energie der Elektronen E_S . Bei der Umrechnung muß jedoch noch das konstante innere Potential V berücksichtigt werden [42], welches von der experimentell gemessenen Energie E_{exp} in Gl. 4.5 subtrahiert werden muß: $E_S = E_{exp} - V$. Das innere Potential V berücksichtigt eine Erhöhung der Elektronenenergie beim Eintritt in den Kristall und führt zu einer Verkürzung der Wellenlänge der Elektronen. Für Ag wurde experimentell ein Wert von $V = 15 \text{ eV}$ bestimmt.

Die Untersuchung der Variation des (00)-Reflexes mit der Streuphase ermöglicht die genaue Bestimmung der Oberflächenstruktur. Abb. 5.5 zeigt drei vergrößerte Aufnahmen des (00)-Reflexes bei unterschiedlichen Streuphasen. Die Form des Reflexes ändert sich bei den unterschiedlichen Streuphasen nicht. Der Reflex ist bei allen Streuphasen rund, was auf eine isotrope Oberfläche schließen läßt. Der Reflex verbreitert sich in der Gegenphase bei $S = 3.5$ nur wenig, was charakteristisch für glatte Oberflächen ist.

Vertikale Rauhigkeit

Zur quantitativen Analyse muß die Variation des (00)-Reflexes für eine große Zahl von Streuphasen untersucht werden. Dazu werden durch den (00)-Reflex lineare Schnitte entlang der (10)-Richtung gelegt. Die Beschränkung auf eine Dimension ist hier erlaubt, da die Reflexprofile isotrop sind. Die Auswahl der Schnittrichtung ist daher nicht wesentlich für die Analyse der Profile.

Abb. 5.6 zeigt eine Auswahl von Reflexprofilen als Funktion des lateralen Streuvektors $k_{||}$ für verschiedene Streuphasen. Die Schnitte wurden entlang der (10)-Richtung gelegt. Die x-Achse ist durch den Abstand zum nächsten Beugungsreflex skaliert (hier die Breite der ersten Brillouinzone). Die Intensität ist logarithmisch aufgetragen, um den Untergrund zu betonen. Bei der In-Phase-Bedingung $S = 3$ ist der (00)-Reflex schmal, seine Halbwertsbreite beträgt $\approx 2 \%$ und liegt damit deutlich über der minimalen instrumentellen Auflösung ($T_{Instr} \approx 0.4 \%$ (vgl.

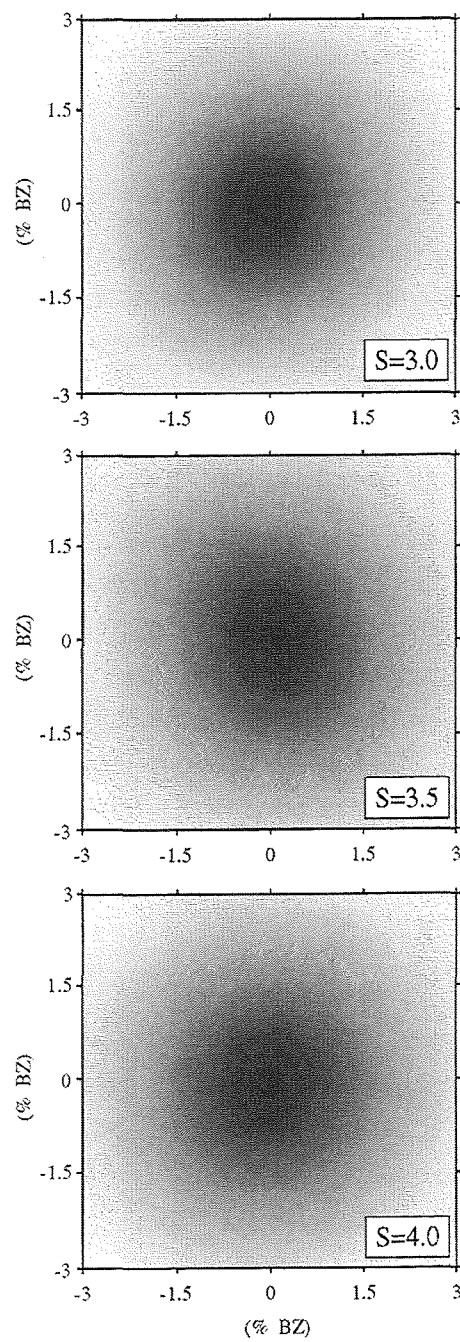


Abbildung 5.5: LEED-Aufnahme des (00)-Reflexes einer getemperten Ag Oberfläche bei verschiedenen Streuphasen $S = 3, 3.5, 4$. Der Reflex ist bei allen Streuphasen rund, die Verbreiterung in Gegenphase ist klein.

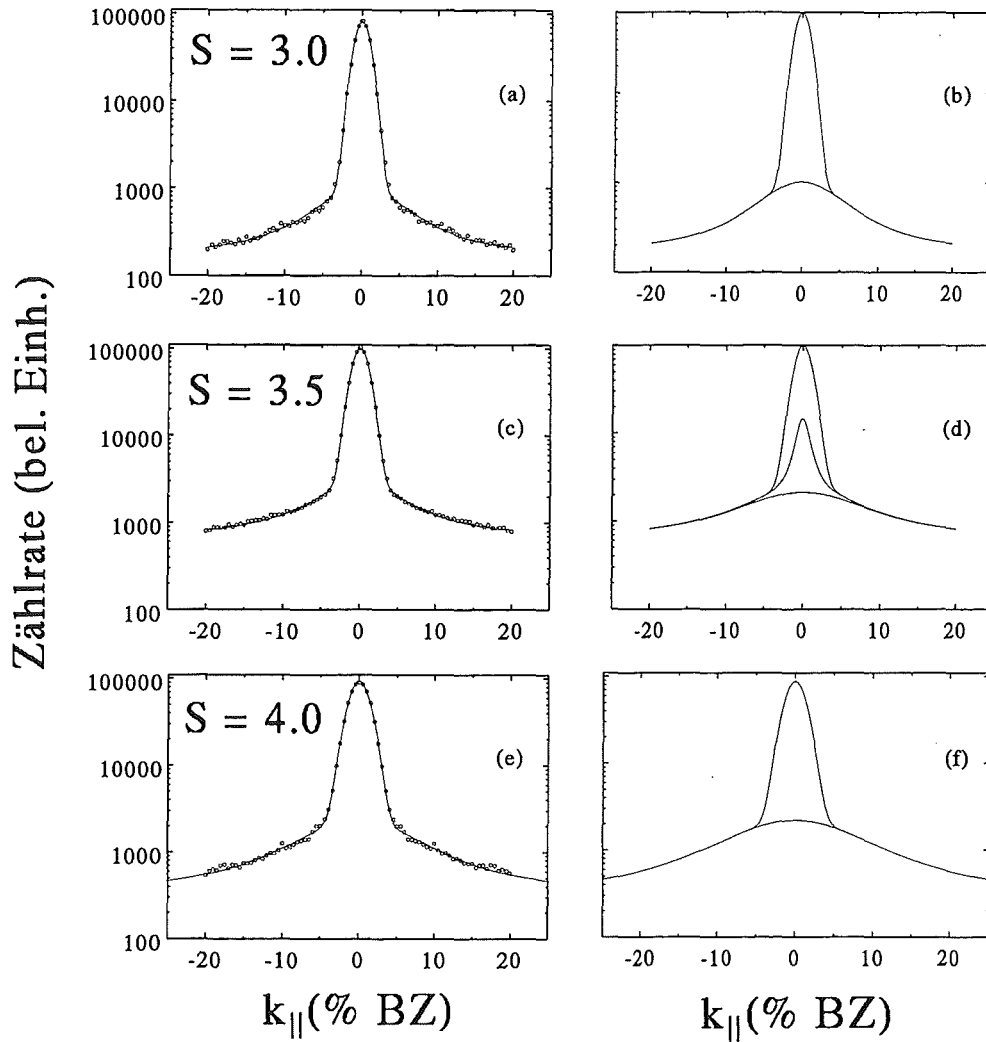


Abbildung 5.6: Die Variation des (00)-Reflexprofils mit der Streuphase S . In der linken Spalte sind die gemessenen Reflexprofile als Punkte dargestellt, die durchgezogenen Linien sind numerisch angepasste Kurven. In der rechten Spalte sind die einzelnen Funktionen aufgetragen, die zur numerischen Anpassung verwendet wurden (Details siehe Text). Die starke Verbreiterung des Profilfußes, die bei allen Profilen auftritt, ist unabhängig von S und entsteht durch Inhomogenitäten.

Kap. 3.1.2). Das entspricht nach Gl. 3.3 einer Transferweite von $t_{Ag} = 50 a_{Ag}$. Die Transferweite der Ag-Oberfläche ist geringer als die Transferweite des Fe-Whiskers ($t_{Fe-Whisker} = 250 a_{Fe}$): Die Ag-Schicht besitzt eine rauhere Oberfläche als der Fe-Whisker. Gleichzeitig bedeutet die verringerte Transferweite auch, daß die maximale, beobachtbare Korrelationslänge auf die Größe der hier gemessenen Transferweite absinkt. Das große Verhältnis zwischen der Spitzenintensität und der Hintergrundintensität von 500:1 zeigt, daß nahezu alle Oberflächenatome auf ihren Gitterplätzen sitzen und daß die kinematische Näherung zur quantitativen Auswertung verwendbar ist.

Weiter ist zu erkennen, daß unabhängig von der Streuphase S eine sehr starke Verbreiterung des Profilfußes auftritt. Diese Verbreiterung zeigt keine Abhängigkeit von der Streuphase und entsteht daher nicht durch Oberflächendefekte sondern durch Inhomogenitäten, wie weiter unten ausgeführt wird.

Ausgehend von der In-Phase-Streubedingung $S = 3$ interferieren mit zunehmender Streuphase diejenigen Elektronen destruktiv, die an unterschiedlichen Terrassenniveaus gestreut wurden. Der untere Teil des Reflexprofils erscheint daher in Abb. 5.6 (c) verbreitert und erreicht bei $S = 3.5$ ein Maximum. Der zentrale Reflex bleibt dabei auch in der Gegenphase klar erkennbar, was bei glatten Oberflächen erwartet wird. Wird die Phase weiter von $S = 3.5$ nach $S = 4$ erhöht, so verschwindet die Verbreiterung wieder und bei $S = 4$ hat der Zentralreflex seine ursprüngliche Form wieder angenommen. Allerdings hat sich die Halbwertsbreite des Zentralreflexes von 2% auf 3% erhöht.

Zur Analyse werden die Reflexprofile aus Abb. 5.6 in Gauß- und Lorentzfunktionen zerlegt. Der zentrale Reflex wird durch Faltung der instrumentenabhängigen Transferfunktion mit einer δ -förmigen Spitze erzeugt und durch eine Gaußfunktion beschrieben [42, 52]. Die Profilverbreiterung in Gegenphase entsteht durch Oberflächenrauigkeit, die Form dieser Verbreiterung des Reflexprofils in Gegenphase wird durch die laterale Verteilung der Stufenlängen bestimmt (vgl. Kap. 4.3). Die beobachtete isotrope Verbreiterung ist ein typisches Merkmal einer statistischen Verteilung der Terrassenlängen. Als Vertreter der statistischen Verteilungen hat sich die geometrische Verteilung der Terrassenlängen sehr bewährt [42] und wird auch hier zur Beschreibung der Terrassenlängenverteilung angewandt. Die Wahrscheinlichkeit P_i für die Existenz einer Terrasse i der Länge Γ_i bei einer mittleren Terrassenlänge

$\langle \gamma \rangle$ wird für eine geometrische Verteilung definiert als

$$P(\Gamma_i) = N \cdot e^{-\frac{\Gamma_i}{\langle \Gamma \rangle}} \quad , \text{ mit } \sum_i \Gamma_i P(\Gamma_i) = 1$$

wobei N als Normierungskonstante dient. Wegen der Rotationssymmetrie der Reflexe kann eine *isotrope* geometrische Verteilung der Terrassenlängen in zwei Dimensionen zugrunde gelegt werden. Aus der zweidimensionalen Verteilungsfunktion wird die Autokorrelationsfunktion und aus dieser durch Fouriertransformation der Beugungsreflex berechnet (vgl. Kap. 4.1.2). Das Reflexprofil, das sich aus einer solchen zweidimensionalen isotropen, geometrischen Verteilung $P(\Gamma_i)$ ergibt, kann als spezielle Lorentzfunktion mit dem Exponenten 3/2 beschrieben werden und wird im weiteren als Lorentz-3/2-Funktion bezeichnet [52]:

$$\phi_{Stufen} = \frac{1}{(\langle \Gamma \rangle^2 + (K_{||}a)^2)^{3/2}} \quad (5.4)$$

mit a als atomarer Gitterkonstante. Durch Addition einer Gauß- und einer Lorentz-3/2-Funktion wurden an die gemessenen Reflexprofile numerisch Kurven angepaßt³. Ein konstanter Untergrund kann vernachlässigt werden, da er durch diffuse thermische Streuprozesse verursacht wird [67].

In Abb. 5.6 sind die einzelnen Fitfunktionen in der rechten Spalte dargestellt, die durchgezogenen Linien in der linken Spalte zeigen die Addition der einzelnen Fitfunktionen. Aus dem Fit läßt sich die integrale Intensität $G_{Stufen}(S)$ bestimmen. Dabei kann die Abhängigkeit der Intensität vom dynamischen Formfaktor nach Gl. 4.13 durch Normierung der integralen Spitzenintensität auf die gesamte Intensität der Brillouinzone eliminiert werden

$$G_{Stufen}(S) = \frac{\int_{BZ} I_{Spitze}(S, \mathbf{K}_{||}) d\mathbf{K}_{||}}{\int_{BZ} I(S, \mathbf{K}_{||}) d\mathbf{K}_{||}} \quad (5.5)$$

In Abb. 5.7 sind die $G_{Stufen}(S)$ -Werte, die nach der numerischen Anpassung der Profile aus Gl. 5.5 berechnet worden sind, als Funktion der Streuphase aufgetragen. Die beiden In-Phase-Streubedingungen $S = 3$ und $S = 4$ treten als Maxima der Meßpunkte auf. In der Gegenphase bei $S = 2.5, 3.5$ und 4.5 reduziert sich der $G_{Stufen}(S)$ -Wert von 1 auf ≈ 0.8 . Wie erwartet, geht in der Gegenphase ein Teil der Intensität von der zentralen Schulter in die Verbreiterung über.

³Zur numerischen Anpassung wurde das Programm NUMFIT 2.0 mit freundlicher Genehmigung durch Prof. M. Henzler verwendet.

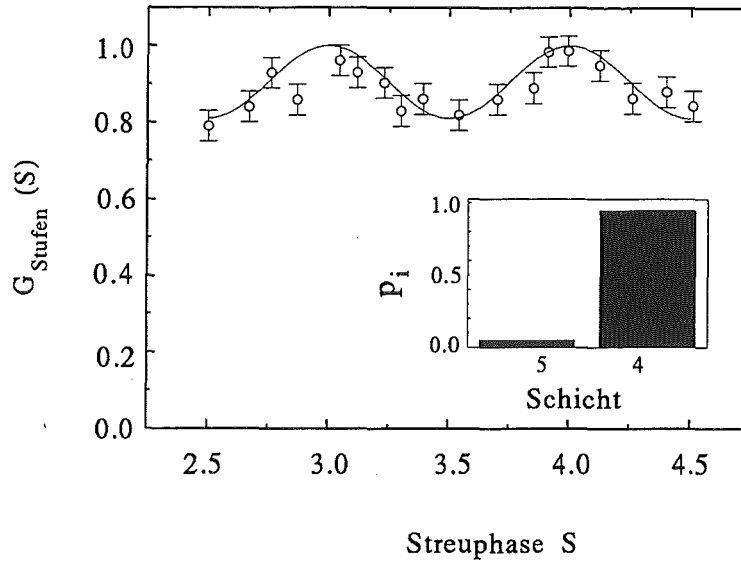


Abbildung 5.7: Die relative Intensität der zentralen Spitze $G_{Stufen}(S)$ als Funktion der Streuphase S . Zwischen den In-Phase-Bedingungen $S = 3$ und $S = 4$ ändert sich der Wert von $G_{Stufen}(S)$ nur wenig. Die numerische Anpassung liefert die durchgezogene Linie mit den Schichtparametern p_i , wie sie im kleinen Bild dargestellt sind.

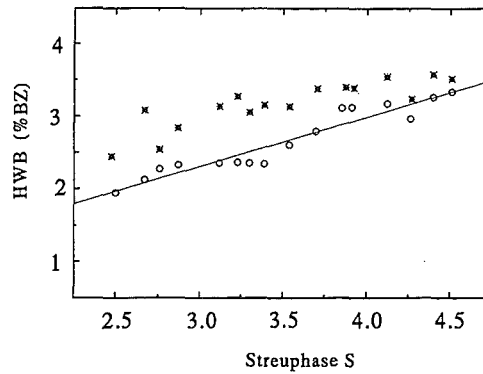
Nach Gl. 4.10 kann $G_{Stufen}(S)$ als Funktion der sichtbaren Bedeckung p_i dargestellt werden, wobei die sichtbare Bedeckung p_i denjenigen Anteil der Streuer in der i -ten Schicht angibt, der an der Oberfläche liegt und nicht von höheren Schichten bedeckt ist

$$G_{Stufen}(S) = \frac{1}{N} \sum_{\Delta h} \sum_i p_{i+\Delta h} p_i \cos(2\pi S \Delta h) \quad (5.6)$$

Die durchgezogene Linie in Abb. 5.7 stellt die numerische Anpassung nach Gl. 5.6 an die experimentellen $G_{Stufen}(S)$ -Werte dar, die mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate durch Variation der p_i erzeugt wurde. Innerhalb der beobachtbaren Korrelationslänge von $t_{Ag} \approx 50 a_{Ag}$ werden die experimentellen $G_{Stufen}(S)$ -Werte gut durch die Annahme von 2 sichtbaren Lagen beschrieben, deren Anteile an der Oberfläche bei aufgedampften 4 ML Ag $p_4 = 0.95$ und $p_5 = 0.05$ betragen. Die Rauhtiefe Δ wurde nach Gl. 4.16 bestimmt zu $\Delta = 0.24$. Die Rauhtiefe Δ entspricht der Standardabweichung, daher liegen im Intervall $\pm 2\Delta$ um den Mittelwert bereits 95 % der Meßwerte. Verwendet man 4Δ als Breite der Verteilung der sichtbaren Schichten, so beträgt diese 1 ML.

Durch die geringe Änderung der Reflexprofile ist die Beschreibung als Schichtsystem mit 2 sichtbaren Lagen innerhalb der Fehlergrenzen nicht völlig eindeutig.

Abbildung 5.8: Es ist keine Abhängigkeit der HWB der lorentzartigen Schulter ($\star$) als Funktion der Streuphase erkennbar. Mosaikartige Verkippen der Oberfläche lassen die HWB der gaußförmigen zentralen Spitze ($\circ$) kontinuierlich anwachsen.



So würde eine Verteilung von 3 sichtbaren Schichten mit $p_3 = 0.025$, $p_4 = 0.95$ und $p_5 = 0.025$ einen äquivalenten Verlauf der $G_{Stufen}(S)$ Kurve in Abb. 5.7 erzeugen. Erst für größere Abweichungen vom Idealwert $G_{Stufen}(S) = 1$ unterscheidet sich der Verlauf der Kurven deutlich. Dies wurde hier jedoch nicht beobachtet. Für ein Schichtsystem mit 2 sichtbaren Lagen spricht weiter der Verlauf der HWB der lorentzartigen Schulter (Abb. 5.8). Bei mehreren offenen Lagen würde eine Überlagerung von mehreren Schultern unterschiedlicher HWB erwartet. Die Überlagerung führt dann zu einer Oszillation der HWB mit S : $HWB \propto 1 - \cos(2\pi S)$ [43]. Da hier keine Oszillation beobachtet wird, bestätigt dies die ursprüngliche Annahme eines 2-Schichtsystems.

Zusätzlich kann aus der $G_{Stufen}(S)$ -Kurve der vertikale Schichtabstand bestimmt werden. Über Gl. 4.5 sind die Meßgrößen Elektronenenergie E und die Streuphase S miteinander verknüpft. Aus dem Energieabstand ΔE zweier In-Phase-Streubedingungen kann die vertikale Gitterkonstante d_{Ag} ermittelt werden. Hier ergibt sich für d_{Ag} der Wert $d_{Ag} = 0.206\text{nm}$, eine nur geringfügig ($< 1\%$) vom Literaturwert abweichende vertikale Gitterkonstante (vgl. Tab. 5.1).

Abb. 5.8 zeigt den linearen Anstieg der HWB des zentralen Gaußreflexes als Funktion der Streuphase. Der lineare Anstieg der HWB läßt sich durch eine mosaikartige Verkippen einzelner Oberflächenbereiche erklären (vgl. Kap. 4.2.3). Aus dem linearen Anstieg läßt sich ein Verkippenwinkel α zu $\alpha \approx 0.1^\circ$ abschätzen [67]. Die Größe des Verkippenwinkels stimmt sehr gut mit Röntgenstrukturanalysen überein. Dort wurde ein Mosaikwinkel von $\alpha = 0.2^\circ$ ermittelt [38].

Reflexschulter bei ganzzahliger Streuphase

In Abb. 5.6 (a) und (e) ist zu erkennen, daß in der In-Phase-Streubedingung eine zusätzliche Schulter mit sehr großer HWB auftritt. Ein instrumenteller Artefakt kann eindeutig ausgeschlossen werden, da eine solche Verbreiterung bei Reflexprofilen des Fe-Whiskers nicht auftrat (vgl. Abb. 3.5). Auch in der Gegenphase (Abb. 5.6 (c)) ist die zusätzliche Schulter zu erkennen. Eine Schulter, die sowohl in der In-Phase- als auch in der Gegenphase-Streubedingung beobachtet wird, kann nicht durch strukturelle Oberflächendefekte verursacht werden, da diese in der In-Phase-Bedingung nicht sichtbar sind.

Die Beobachtung einer Schulter in der In-Phase-Bedingung wird nach WOLLSCHLÄGER auf Inhomogenitäten zurückgeführt [52, 62]. Inhomogenitäten führen demzufolge zu einer lokalen Variation des Strukturfaktors f . Diese Variationen des Strukturfaktors f können z. B. durch chemische Verunreinigungen der Oberfläche oder durch unterschiedliche Strukturfaktoren von Streuern an Stufenkanten im Gegensatz zu Streuern auf mittleren Inselplätzen verursacht sein. Wird in erster Näherung angenommen, daß die Inhomogenitäten nicht mit atomaren Stufen korreliert sind, so ist die Wirkung der Inhomogenitäten auf das Reflexprofil mit derjenigen einer gestuften Oberfläche vergleichbar: Es resultiert eine Profilverbreiterung. Wird eine geometrische Verteilung der Inhomogenitäten vorausgesetzt, so kann die Reflexprofilverbreiterung infolge der Inhomogenitäten durch eine Lorentz-3/2-Funktion ϕ_{Inh} analog zu Gl. 5.5 beschrieben werden.

Zur numerischen Anpassung der zusätzlichen Schulter wurde daher eine Lorentz-3/2-Funktion verwendet, die die beobachteten Reflexprofile sehr gut wiedergibt (vgl. Abb. 5.6 (b), (d), (f)). Die Amplitude und die HWB dieser zusätzlichen Schulter zeigen keine periodische Abhängigkeit von der Streuphase S (Abb. 5.9). Die HWB dieser Schulter ist um den Faktor 10 größer als die HWB der ersten Schulter in Gegenphase.

Da die HWB der Inhomogenitäten-Schulter wesentlich größer ist als die HWB der Stufen-Schulter, kann nach Gl. 4.12 geschlossen werden, daß die Korrelationslänge der Stufen L_{Stufen} größer ist als die Korrelationslänge der Inhomogenitäten. In diesem Fall existiert jedoch ein wesentlicher Unterschied zur Profilverbreiterung durch Stufen, welcher die Separation der beiden Effekte erlaubt: Diejenige Schulter, die durch Inhomogenitäten auftritt, ist **nicht** von der Streuphase abhängig (vgl. Abb. 5.9, Abb. 5.10) [62]. Das bedeutet, daß sich mit der Variation der Streupha-

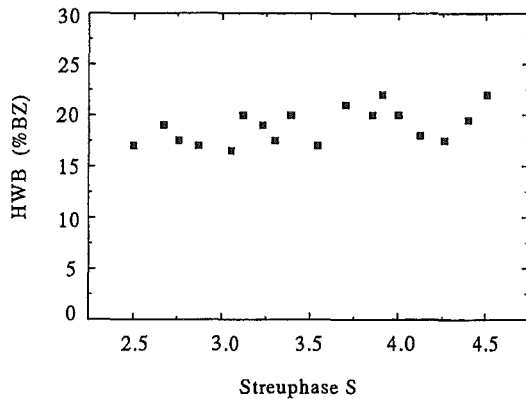


Abbildung 5.9: Die HWB der zusätzlichen Schulter als Funktion der Streuphase S . Es ist keine periodische Abhängigkeit der HWB von S erkennbar.

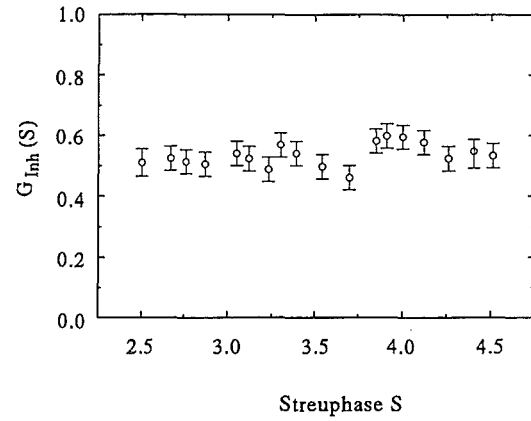


Abbildung 5.10: G_{Inh} als Funktion der Streuphase S . Die zusätzliche Schulter nimmt einen konstanten Anteil an der Gesamtintensität ein.

se die Form der Schulter nicht ändert. Die Gesamtintensität kann dann aus drei Anteilen zusammengesetzt werden, die sich ohne Wechselwirkung überlagern [62]:

$$I(S, \mathbf{K}_{||}) = I_{Gaus}(S, \mathbf{K}_{||}) + I_{Stufen}(S, \mathbf{K}_{||}) + I_{Inh}(\mathbf{K}_{||}) \quad (5.7)$$

Da auf diese Weise die Wirkung der Inhomogenitäten auf die Reflexprofile von der Wirkung der strukturellen Oberflächendefekte abgetrennt wird, kann die vertikale Rauigkeit alleine aus dem integralen $G_{Stufen}(S)$ bestimmt werden [62]:

$$G_{Stufen}(S) = \frac{G_{Spitze}}{G_{Spitze} + G_{Stufen}} \quad (5.8)$$

Analog zu $G_{Stufen}(S)$ in Gl. 5.5 kann auch für die Inhomogenitäten-Schulter das Verhältnis der integralen Intensität der Schulter G_{Inh} zur integralen Gesamtintensität gebildet werden:

$$G_{Inh}(S) = \frac{\int_{BZ} I_{Inh}(S, \mathbf{K}_{||}) d\mathbf{K}_{||}}{\int_{BZ} I(S, \mathbf{K}_{||}) d\mathbf{K}_{||}} \quad (5.9)$$

Die Funktion G_{Inh} ist in Abb. 5.9 als Funktion der Streuphase aufgetragen. Entsprechend der HWB ist auch für G_{Inh} keine periodische Variation mit der Streuphase erkennbar. Der Anteil der Schulter an der Gesamtintensität beträgt ca 50 % in dem gesamt gemessenen Energiebereich.

Wie lassen sich diese Inhomogenitäten auf der untersuchten Ag-Oberfläche verstehen? Auger-Analysen zeigen, daß eine geringe Oberflächenkontamination durch

Kohlenstoff vorhanden ist, die etwa 3 at% beträgt. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, daß auf der glatten Ag-Oberfläche kleine Ag-Inseln vorhanden sind, deren Formfaktor f vom Formfaktor einer glatten Ag-Oberfläche abweicht. Da innerhalb der Transferweite von $50 a_{Ag}$ nach der $G(S)$ -Analyse statistisch ca. 5 % der Oberfläche auf ein höheres Niveau entfallen, könnten sich kleine Inseln von wenigen Atomen bilden. Die Kantenatome dieser Inseln könnten einen unterschiedlichen Formfaktor im Vergleich zu denjenigen Atomen besitzen, die sich in der glatten Schicht befinden. Aus der HWB der Inhomogenitäten-Schulter kann nach Gl. 4.12 auf eine mittlere Strukturgröße von etwa $5a_{Ag}$ geschlossen werden. Da der Anteil dieser Inseln an der Gesamtoberfläche klein ist, wird das Reflexprofil nur geringfügig durch das zusätzliche Auftreten einer Schulter beeinflusst. Allerdings kann dann Gl. 5.7 nur als erste Näherung betrachtet werden, da zu ihrer Ableitung vorausgesetzt wurde, daß es keine Korrelation zwischen den Inhomogenitäten und den Stufen gibt [62].

Laterale Verteilung

Zur Charakterisierung der lateralen Verteilung der Insellängen wurde die DMM eingesetzt. Dazu wurden Spotprofile zwischen den Streuphasen $S = 3$ bis $S = 4$ numerisch angepaßt. Die Profilverbreiterung infolge Inhomogenitäten und der konstante Untergrund wurden vor der Anpassung vom Profil abgezogen, da sie für die Inselstruktur der Oberfläche nicht von Bedeutung sind.

Abb. 5.11 zeigt das gemessene Reflexprofil und die zugehörige numerische Anpassung nach der DMM. Für den Fit wurden 2 sichtbare Lagen angenommen. Die mittlere Terrassenlänge wurde zu $\langle L \rangle = 52 \pm 3a_{Ag}$ bestimmt. Es wurde eine geometrische Verteilung der Insellängen l vorausgesetzt, wobei sich für die Häufigkeit p_l des Auftretens der Inselgröße l ergibt:

$$p_l = N^* \cdot \frac{1}{\langle L \rangle} \cdot \left(1 - \frac{1}{\langle L \rangle}\right)^l \quad \text{mit:} \quad \langle L \rangle = \sum_i p_i \cdot l_i$$

Die Konstante N^* dient zur Normierung. Die Terrassenlängenverteilung ist in Abb. 5.11 im kleinen Bild aufgetragen.

Die zur Anpassung verwendete geometrische Verteilung der Terrassenlängen führt zu einer sehr guten Übereinstimmung zwischen Meßdaten und Fit. Die Verteilung ist sehr breit, ihr Mittelwert entspricht der mittleren Terrassenlänge $\langle L \rangle$. Direkt aus der HWB der Reflexschulter in Gegenphase kann nach Gl. 4.12 die mittlere

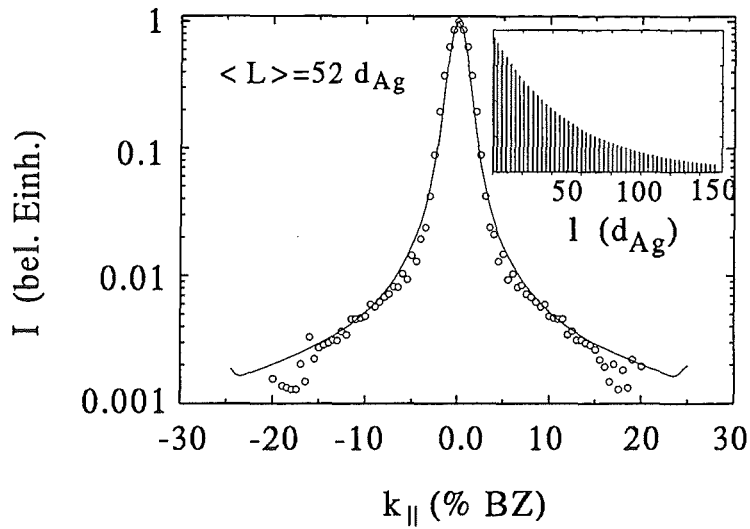


Abbildung 5.11: Reflexprofil des (0,0)-Reflexes in der Gegenphase ($S = 3.5$). Die durchgezogene Linie beschreibt die numerische Anpassung mittels DMM. Das kleine Bild zeigt die Häufigkeit p_l , mit der eine Insel der Länge l auftritt.

Terrassenbreite abgeschätzt werden zu: $\langle L_{HWB} \rangle = 50a_{Ag}$. Die Übereinstimmung beider Werte ist gut.

Die Fitparameter sind identisch mit denen der $G(S)$ -Analyse zur vertikalen Verteilung. Somit liefern zwei unterschiedliche Wege zur Reflexprofilanalyse die gleichen Werte für die Oberflächenstruktur.

6 Präparation von Fe/X/Fe-Schichtsystemen auf epitaktischem (001)-Ag und Charakterisierung der Oberflächenstruktur

Zur Untersuchung der Austauschkopplung werden Fe/X/Fe-Schichtsysteme auf (001)-Ag-Oberflächen aufgedampft. Dabei wurde ein drastischer Einfluß der Substrattemperatur auf die Austauschkopplung beobachtet. Die Vermutung liegt nahe, daß durch die Veränderung der Substrattemperatur unterschiedliche Oberflächenstrukturen erzeugt werden, die die Austauschkopplung beeinflussen.

Zur Überprüfung dieser Hypothese wurden Fe-Filme auf (001)-Ag-Oberflächen bei unterschiedlichen Substrattemperaturen aufgedampft und die präparierten Oberflächen analysiert. Auf die unterschiedlich hergestellten Fe-Filme wurden dann ebenfalls bei verschiedenen Substrattemperaturen Cr und Ag als Zwischenschichtmaterialien aufgewachsen und deren Oberflächenstrukturen untersucht.

6.1 Präparation von Fe Filmen auf (001)-Ag Oberflächen

Abb. 6.1 zeigt das LEED-Muster einer 10 ML dicken Fe Schicht, die bei Raumtemperatur auf den Ag-Puffer aufgewachsen ist. Aus dem Vergleich zum Fe-Einkristall ergibt sich eine laterale Gitterkonstante $a_{Fe} = 0.285\text{nm}$, die lediglich um 1 % vom Literaturwert $a_{Fe} = 0.288\text{nm}$ abweicht.

Abb. 6.2 zeigt das RHEED-Muster einer 10 ML dicken Fe-Schicht, die unter gleichen Bedingungen hergestellt worden ist. Die Reflexe sind scharf und liegen auf einem Halbkreis. Allerdings sind sie senkrecht zur Schattenkante verbreitert. Diese Verbreiterung weist auf eine im Vergleich zum Fe-Whisker und auch zur Ag-Oberfläche größere Oberflächenrauigkeit hin.

Abb. 6.2 zeigt die Intensitätsoszillation des (00)-Reflexes während des Aufdampfens. Mit Beginn des Fe-Wachstums auf dem Ag-Puffer fällt die Intensität des (00)-

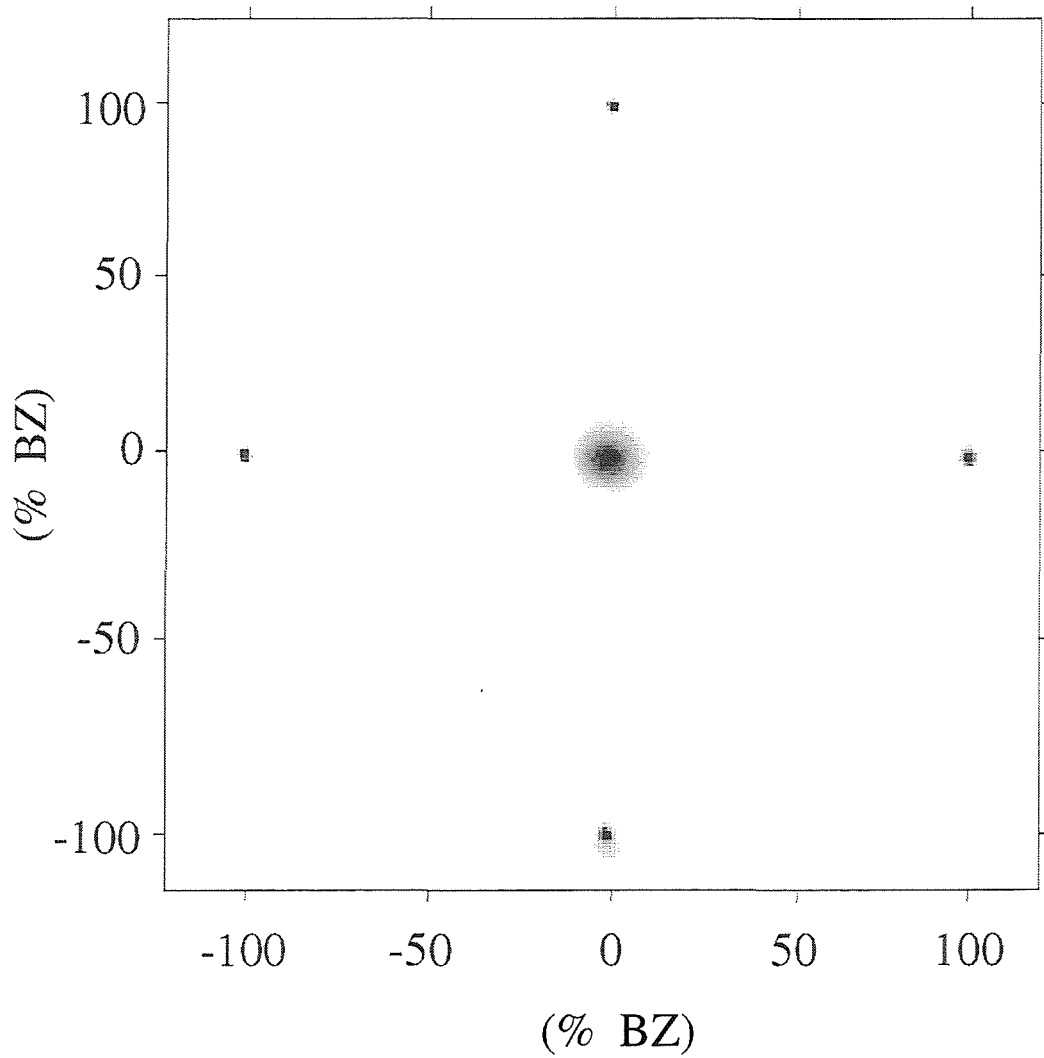


Abbildung 6.1: LEED Aufnahme einer Fe-Oberfläche ($E = 140$ eV, $S = 2.7$). In der Mitte befindet sich der zentrale (00)-Reflex. Die (10)-Reflexe liegen auf waagerechten und senkrechten Linien, die sich im (00)-Reflex schneiden.

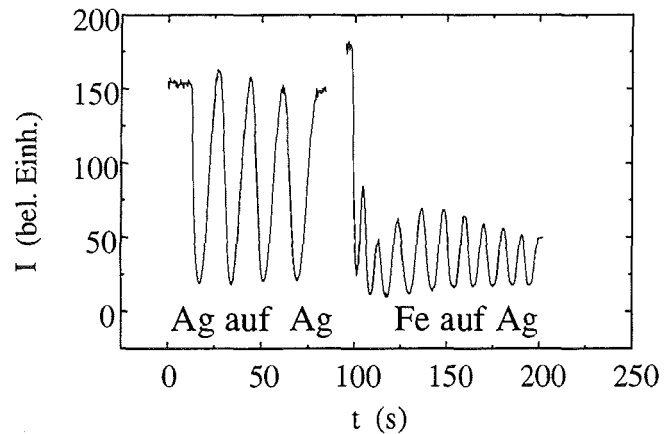
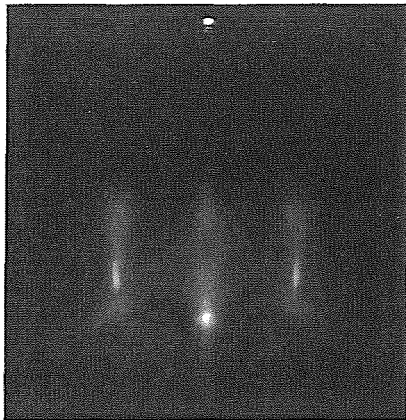


Abbildung 6.2: Links: RHEED-Muster der Fe- Oberfläche (Einstrahlwinkel $\alpha = 3^\circ$, Energie $E = 7.4$ keV). Die Reflexe liegen auf einem Halbkreis, sind jedoch im Vergleich zum Fe-Whisker verbreitert.

Rechts: Intensitätsoszillation des (00)-Reflexes. Einstrahlwinkel und Energie wurden entsprechend einer Anti-Bragg-Bedingung gewählt.

Reflexes drastisch ab. Anschließend folgen 3 Oszillationen, deren Periode nicht dem Äquivalent einer Monolage entspricht, obwohl der Fluß der Fe-Atome konstant gehalten wurde. Nach der dritten Periode setzt eine regelmäßige Oszillation ein. Die Oszillation ist nur schwach gedämpft und kann üblicherweise bis über 20 ML hinaus beobachtet werden. Der regelmäßige Verlauf und die schwache Dämpfung der Oszillation läßt auf ein quasi lagenweises Wachstum ab der vierten Lage schließen. Die im Vergleich zum Wachstum von Ag auf Ag kleinere Amplitude der Intensitätsoszillation von Fe auf Ag wird nicht nur durch den unterschiedlichen Wachstumsprozess (Heteroepitaxie) bedingt, sondern auch durch den im Vergleich zu Ag unterschiedlichen Formfaktor von Fe.

Die vertikale Fehlanpassung und die stark unterschiedlichen Oberflächenenergien sind die wesentlichen Quellen des irregulären Verhaltens des (00)-Reflexes während des Wachstums der ersten 3 – 4 ML. Die große vertikale Fehlanpassung zwischen Fe und Ag von ca. 16 % führt bei großer Rauigkeit des Ag-Substrates – Insellängen $\langle l_{Ag} \rangle < 15a_{Ag}$ – zu einer sehr rauen Fe-Oberfläche, bei der keine RHEED-Oszillationen beobachtet werden können [33, 85]. Für Insellängen $\langle l_{Ag} \rangle \gg 40 a_{Ag}$ werden RHEED-Oszillationen beobachtet, jedoch sind die ersten 3-4 Perioden gestört, analog zum hier nachgewiesenen Verlauf. Erst ab der fünften Periode verläuft die Oszillation gleichmäßig. Die Periode entspricht dann der durch

Schwingquarz ermittelten Fe-Menge. Daher wird geschlossen, daß die ersten 3-4 ML Fe benötigt werden, um die vertikale Fehlanpassung zwischen dem Ag-Substrat und dem Fe auszugleichen.

Wird eine Fe-Menge, die 1.5 ML Fe entspricht, auf einen Ag-Einkristall gedampft, so wird mittels Conversionselektronen Mössbauer Spektroskopie (CEMS) beobachtet, daß ein Äquivalent von 0.1 ML Fe in das Ag-Substrat eindiffundiert, und je 0.7 ML Fe in der ersten bzw. zweiten Lage liegen [86]. Es werden 4 ML Fe benötigt, um das Ag-Substrat vollständig mit Fe zu bedecken. Nach Aufdampfen einer Fe-Menge, die 3 ML Fe entspricht, bleibt noch ca 1/4 der Ag-Oberfläche unbedeckt. Die ersten Fe-Lagen wachsen somit nicht lagenweise auf, sondern bilden Cluster auf der Ag-Oberfläche, vergleichbar mit Wassertröpfchen auf einer nicht entfetteten Glasplatte. Das Wachstum von Fe auf Ag ist ein Beispiel für das Wachstum eines Metalls mit hoher Oberflächenenergie – Fe – auf einem Metall mit niedriger Oberflächenenergie – Ag –. Das ungünstige Verhältnis der beiden Oberflächenenergien stört das Wachstum (vgl.Kap. 5.1).

Eine weitere Schwierigkeit beim Wachstum von Fe auf Ag entsteht durch das „Aufschwimmen“ von Ag auf dem aufgedampften Fe. Nachdem mehrere Monolagen Fe aufgewachsen waren, konnte Ag auf der Fe-Oberfläche mit Auger-Spektroskopie nachgewiesen werden. Entscheidend im Hinblick auf die Austauschkopplung ist die Fragestellung, wie das Ag an der Oberfläche des aufgedampften Fe das weitere Wachstum einer Zwischenschicht beeinträchtigt. Das kann erstens bedeuten, daß das Wachstum strukturell beeinflusst wird (Cr hat zu Ag ein ähnlich ungünstiges Oberflächenenergieverhältnis wie Fe zu Ag). Zweitens wird experimentell beobachtet, daß die Menge des aufschwimmenden Ag mit zunehmender Fe-Dicke abnimmt. Das bedeutet, daß ein Teil des Ag in das Fe eingebaut wird. Diese Beobachtung ist insofern bemerkenswert, da Fe und Ag bei den hier verwendeten Temperaturen $T_S < 525$ K nicht mischbar sind [87]. Wird auf die Fe-Oberfläche Cr aufgedampft, so läßt sich Ag auch auf der Cr-Oberfläche nachweisen, wobei ebenfalls die Menge des aufschwimmenden Ag mit zunehmender Cr-Dicke abnimmt. Durch das zusätzliche Ag in der Zwischenschicht wird aber die elektronische Struktur und damit auch die Austauschkopplung gestört.

Um beide Einflüsse systematisch zu studieren, wurde eine Präparationsweise erarbeitet, die das Aufschwimmen von Ag stark reduziert. Zunächst wurde bei der Substrattemperatur $T_S = 293$ K ein Fe-Keil auf das Ag-Substrat gedampft, wobei ein Teil der Probe als Ag-Referenz unbedampft blieb. Anschließend wurden Au-

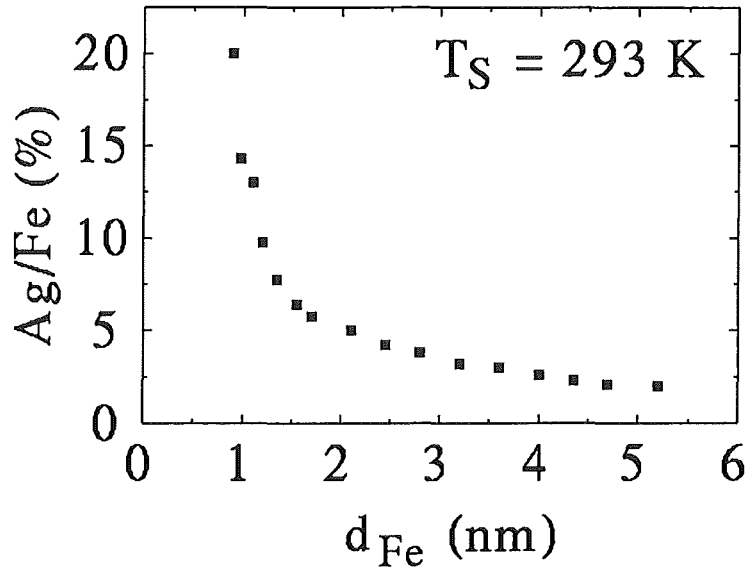


Abbildung 6.3: Auger-Signalverhältnis von Ag (351 eV) zu Fe (703eV) als Funktion der Fe-Schichtdicke nach Aufdampfen bei $T_S = 293$ K: Meßtemperatur $T = 300$ K. Die Auftragung berücksichtigt die unterschiedlichen Auger-Empfindlichkeiten.

gerspektren bei verschiedenen Fe-Dicken aufgenommen. Dabei wurden die Schichtdicken mit Schwingquarz und RHEED-Oszillationen gemessen. Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Auger-Empfindlichkeiten S_{Fe} und S_{Ag} von Fe bzw. Ag (bei Primärenergie $E = 3$ keV: $S_{Fe}/S_{Ag} = 1/5$) wurden dann die Intensitäten der differenzierten Augeramplituden von Fe (703 eV) und Ag (351 eV) gegen die Schichtdicke aufgetragen¹ (Abb. 6.3). Die Eindringtiefe beträgt bei der verwendeten Elektronenenergie ca. 3-5 ML. In Abb. 6.3 ist jedoch zu erkennen, daß ein Ag-Signal bis weit über die Eindringtiefe der Elektronen nachgewiesen werden kann. Somit muß Ag an der Oberfläche vorhanden sein. Erst bei sehr dicken Fe-Schichten $d_{Fe} > 70$ ML fällt die Signalhöhe des Ag unter die Nachweisgrenze ab.

Aus dem Abfall des Auger-Signals kann die Menge des aufschwimmenden Ag abgeschätzt werden. Die Anzahl der Elektronen, die aus einer Tiefe x austreten, kann unter Annahme einer exponentiellen Dämpfung durch die Funktion $e^{-(x/\lambda_i)}$ beschrieben werden, wobei λ_i die mittlere freie Weglänge der Elektronen bei der Elektronenenergie i angibt. Diese mittleren freien Weglängen λ_i der Elektronen in der Fe-Schicht und im Ag-Substrat müssen aus den experimentellen Daten bestimmt

¹Als Abschätzung können die differenzierten Augerspektren verwendet werden, da die Linienbreite der Ag-Linie und der Fe-Linie vergleichbar sind.

werden.

Die mittlere freie Weglänge λ wird nun durch numerische Anpassung einer exponentiell gedämpften Funktion f an den Abfall der Augerintensitäten von Ag und Fe bestimmt. Dazu wurden die experimentellen Fe- bzw. Ag-Signale einzeln als Funktion der jeweiligen Schichtdicke x aufgetragen und eine exponentiell abfallende Funktion f numerisch angepaßt:

$$\begin{aligned} f_{Ag}(x) &= A e^{-\frac{x-x_0}{\lambda \cos \vartheta}} \\ f_{Fe}(x) &= A \left(1 - e^{-\frac{x-x_0}{\lambda \cos \vartheta}}\right) \end{aligned} \quad (6.1)$$

Der Faktor A berücksichtigt den vom Augerübergang und von der Elektronenenergie abhängigen Wirkungsquerschnitt sowie die Apparatfunktion. Aus der numerischen Anpassung nach Gl. 6.1 ergibt sich für die mittlere freie Weglänge λ der Ag-Linie (351 eV) ein Wert von: $\lambda_{351} = 3.8$ ML, und für die Fe-Linie (703 eV): $\lambda_{703} = 5.4$ ML. Beide Werte stimmen sehr gut mit den Literaturdaten für mittlere freie Weglängen überein [42]. Allerdings sollte ein Fehler von 10 % angenommen werden, der im wesentlichen durch die Schichtdickenmessung verursacht wird. Außerdem ist die Annahme eines lagenweisen Wachstums für die ersten drei ML sicher nicht korrekt (vgl. Abb. 6.2).

Die relative Intensität der Fe-Linie kann bei einer Bedeckung von x ML Fe beschrieben werden durch:

$$I_{Fe}(x) = \int_0^x dx' S_{Fe} e^{-\frac{x'}{\lambda_1 \cos \vartheta}} = S_{Fe} (1 - e^{-\frac{x}{\lambda_1 \cos \vartheta}}) \quad (6.2)$$

wobei der Faktor $\cos \vartheta$ den Öffnungswinkel des Zylinderspiegelanalysators berücksichtigt. Analog gilt für die Ag-Linie:

$$I_{Ag}(-x) = \int_x^\infty dx' S_{Ag} e^{-\frac{x'}{\lambda_2 \cos \vartheta}} = S_{Ag} e^{-\frac{x}{\lambda_2 \cos \vartheta}} \quad (6.3)$$

Da sich in erster Näherung die mittleren freien Weglängen λ_1 und λ_2 nur geringfügig unterscheiden,

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$$

läßt sich das Verhältnis der Intensitäten nach der Fe-Schichtdicke x auflösen:

$$\frac{I_{Fe}(x)}{I_{Ag}(-x)} = \frac{S_{Fe}}{S_{Ag}} \left(e^{-\frac{x}{\lambda \cos \vartheta}} - 1 \right) \rightarrow x = \lambda \cos \vartheta \ln \left(\frac{S_{Ag}}{S_{Fe}} \frac{I_{Fe}(x)}{I_{Ag}(-x)} + 1 \right) \quad (6.4)$$

Zur Berechnung der Schichtdicke der Ag-Auflage auf der Fe-Schicht muß in Gl. 6.4 die Schicht - Fe - gegen das Substrat - Ag - getauscht werden: $I_{Fe} \leftrightarrow I_{Ag}$ und

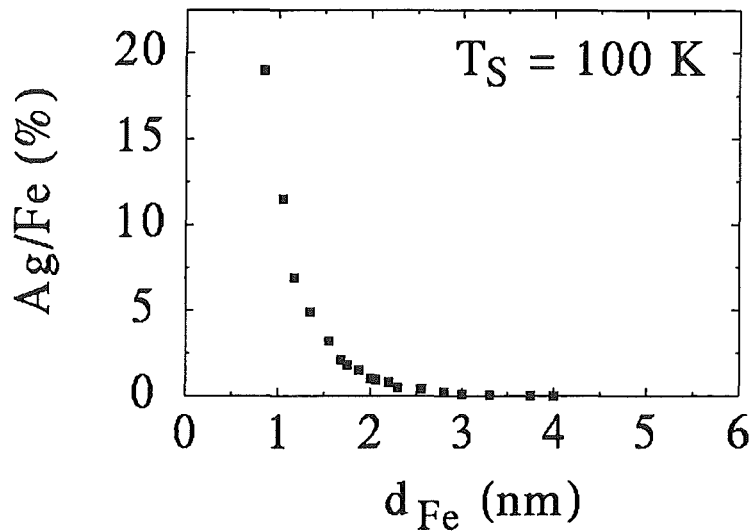


Abbildung 6.4: Auger-Signalverhältnis von Ag (351 eV) zu Fe (703eV) als Funktion der Fe-Schichtdicke nach Aufdampfen bei $T_S = 100$ K: Meßtemperatur $T = 520$ K. Die Auftragung berücksichtigt die unterschiedlichen Auger-Empfindlichkeiten.

$S_{Fe} \leftrightarrow S_{Ag}$. Wird als Abschätzung die mittlere freie Weglänge des Ag verwendet, so erhält man eine Dicke der Ag-Auflage von $x_{Ag} = 0.16$ ML. Wird die mittlere freie Weglänge des Fe verwendet, so beträgt $x_{Ag} = 0.24$ ML. Dieser Wert der Ag-Auflage von ~ 0.2 ML stimmt mit den in der Literatur angegebenen Schichtdicken überein [88, 89, 90].

Bei einer zweiten Probenserie wurde das Ag-Substrat vor Beginn des Aufdampfens auf $T_S = 100$ K abgekühlt und anschließend ein Fe-Keil bei dieser Temperatur aufgedampft. Wie in Abb. 6.4 gezeigt, kann sogar bei dieser Präparationstemperatur oberhalb einer der Eindringtiefe des Elektronenstrahls entsprechenden Fe-Dicke ein Ag-Signal beobachtet werden. Der Abfall der Ag-Augeramplitude ist jedoch bedeutend stärker als bei der bei Raumtemperatur hergestellten Probenserie. Das Ag-Signal verschwindet bei einer Fe Dicke von ca 3 nm unterhalb der Nachweisgrenze. Die Probe konnte anschließend bis auf $T_S = 520$ K erwärmt werden, ohne daß ein erhöhtes Ag-Signal beobachtet wurde. Erst bei Temperaturen oberhalb von $T_S = 540$ K wurde ein Anstieg der Ag-Amplitude beobachtet. Schließlich konnte mit einer weiteren Probenserie gezeigt werden, daß eine bei $T_S = 100$ K aufgedampfte, 5 ML dicke Fe-Schicht als Ag-Barriere ausreicht. Auf diese 5 ML konnte bei $T_S = 520$ K weiteres Fe aufgedampft werden, ohne daß eine erhöhte Ag-Amplitude des Augersignals beobachtet wurde. Daraus folgt, daß das „Aufschwimmen“ von Ag unmittelbar mit

dem eigentlichen Wachstumsprozeß verbunden sein muß.

EGELHOFF schlägt einen atomaren Platzwechsel als Mechanismus vor, der zu dem beobachteten Aufschwimmen von Ag führt [88]. Eine thermische Diffusion als Ursache kann ausgeschlossen werden, da auch bei $T_S = 100$ K ein Aufschwimmen von Ag beobachtet wurde. Bei dieser Temperatur kann eine thermische Diffusion sicher vernachlässigt werden. Bei Raumtemperatur aufgewachsene Schichten bilden nach EGELHOFF eine agglomerierte Fe/Ag-Legierung, wobei in Übereinstimmung mit CEMS-Ergebnissen Fe in die oberste Ag-Lage eingebaut wird [86]. Das Aufschwimmen von Ag soll demnach vor allem an Stufenkanten durch atomaren Platzwechsel erfolgen. Wird die Probe gekühlt, so wird die Beweglichkeit der ankommenden Fe-Atome stark reduziert, so daß die Fe-Atome keine Stufenkante erreichen können. Dadurch wird das Aufschwimmen von Ag reduziert, gleichzeitig wird eine regelmäßige RHEED-Oszillation während des Aufwachsens der ersten Fe-Lagen beobachtet.

6.2 Wachstum bei Raumtemperatur

6.2.1 Oberflächenstruktur von 10 ML dicken Fe Filmen

Zunächst wird die Oberflächenstruktur von Fe-Filmen charakterisiert, die bei Raumtemperatur auf die Ag-Oberfläche aufgebracht wurden. Untersucht wurden jeweils zwei Fe-Schichtdicken: 10 ML und 30 ML. Die Schichtdicken entsprachen den typischen Schichtdicken, wie sie zum Studium der Austauschkopplung an den Systemen Fe/Ag/Fe bzw. Fe/Cr/Fe präpariert wurden. Die Oberflächenstruktur im Anfangsstadium des Wachstums, die Keimbildungsphase mit Schichtdicken zwischen 0-4 ML, wurde nicht detailliert analysiert, da sie in Bezug auf die Austauschkopplung nicht von primärer Bedeutung ist.

Die Streuphase S wurde aus dem Verlauf der Intensitätsmaxima des (00)-Reflexes mit der Elektronenenergie E (nach Gl. 4.5) bestimmt. Im Gegensatz zum Ag wurde zur numerischen Anpassung des Intensitätsverlaufs kein inneres Potential V benötigt, man erhält einen Wert für den vertikalen Schichtabstand d_{Fe} , der wiederum weniger als 1 % vom Literaturwert abweicht.

Abb. 6.5 zeigt vergrößerte LEED-Aufnahmen des zentralen (00)-Reflexes einer Fe-Oberfläche einer 10 ML dicken Schicht bei verschiedenen Streuphasen. In der In-Phase-Bedingung (Abb. 6.5 (a)) $S = 2$ ist ein scharfer, runder Reflex zu erkennen.

Wird die Streuphase von $S = 2$ auf $S = 2.15$ erhöht, so erscheint ein Ring geringer Intensität, der den zentralen Reflex symmetrisch umgibt. Bei weiterer Erhöhung der Streuphase nimmt zunächst die Intensität des zentralen Reflexes stark ab, die Intensität des Ringes ändert sich nur wenig. In der Nähe der Gegenphase – zwischen $S = 2.4 - 2.6$ – verschwindet auch der Ring. Ein stark verbreiteter Untergrund ist sichtbar (Abb. 6.5 (c)). Bei erneuter Annäherung an die In-Phase-Bedingung wird wieder die Ringstruktur mit zentralem Reflex sichtbar ($S = 2.8$: Abb. 6.5 (d)), während in der nächsten In-Phase-Bedingung bei $S = 3$ nur der zentrale Reflex sichtbar bleibt (Abb. 6.5 (e)).

Solche ringartigen Strukturen wurden erstmals im Jahr 1980 bei Homoepitaxie am System W auf (110)-W beobachtet [91]. Anschaulich verstehen läßt sich das ringförmige Reflexprofil anhand der Reflexprofilaufspaltung in Gegenphase bei regelmäßig gestuften Flächen. Der Unterschied liegt darin, daß die regelmäßigen Stufen in Kap. 4.2.2 eine ausgezeichnete Richtung besitzen, in der die Terrassen der Oberfläche nur eine Länge von wenigen Gitterkonstanten besitzen. Entlang dieser Richtung spaltet ein Reflex in Gegenphase auf. Sind die Terrassen aber in allen Richtungen nur wenige Gitterkonstanten lang, so „spaltet“ der Reflex in allen Richtungen in Gegenphase auf, ein Ring entsteht. Aus der Beugungstheorie folgt, daß die reziproken Ringradien proportional eines sich wiederholenden, typischen Abstands auf der Probenoberfläche sind. Durch Modellrechnungen wurde gezeigt, daß dieser typische Abstand dem mittleren Inselabstand entspricht.

Mit RHEED wird ebenfalls eine Aufspaltung der Reflexe beobachtet. Infolge der Geometrie (streifender Einfall) schneidet die Ewald-Kugel die reziproken Gitterstäbe unter einem sehr kleinen Winkel. Die regelmäßige Stufung erzeugt Hohlzylinder, die die Gitterstäbe des reziproken Gitters umhüllen [91]. Durch den kleinen Schnittwinkel erscheinen die RHEED-Reflexe des Hohlzylinders als Nebenreflexe des spekulär reflektierten (00)-Reflexes. Abb. 6.7 zeigt das RHEED Muster der gleichen Fe-Schicht aus Abb. 6.2, jedoch wurde jetzt eine Streubedingung nahe der Anti-Bragg-Bedingung gewählt ($E = 7.4 \text{ keV}$, $\alpha = 1.4^\circ$).

Quantitative Analyse: Terrassenlängen

Zur quantitativen Analyse wurden Schnitte durch die Reflexe entlang der (10)-Richtung gelegt. Wegen der Rotationssymmetrie der Reflexe ist die Reduktion auf eine Dimension möglich. Die Ergebnisse bezüglich Terrassenlängen, vertikaler Rau-

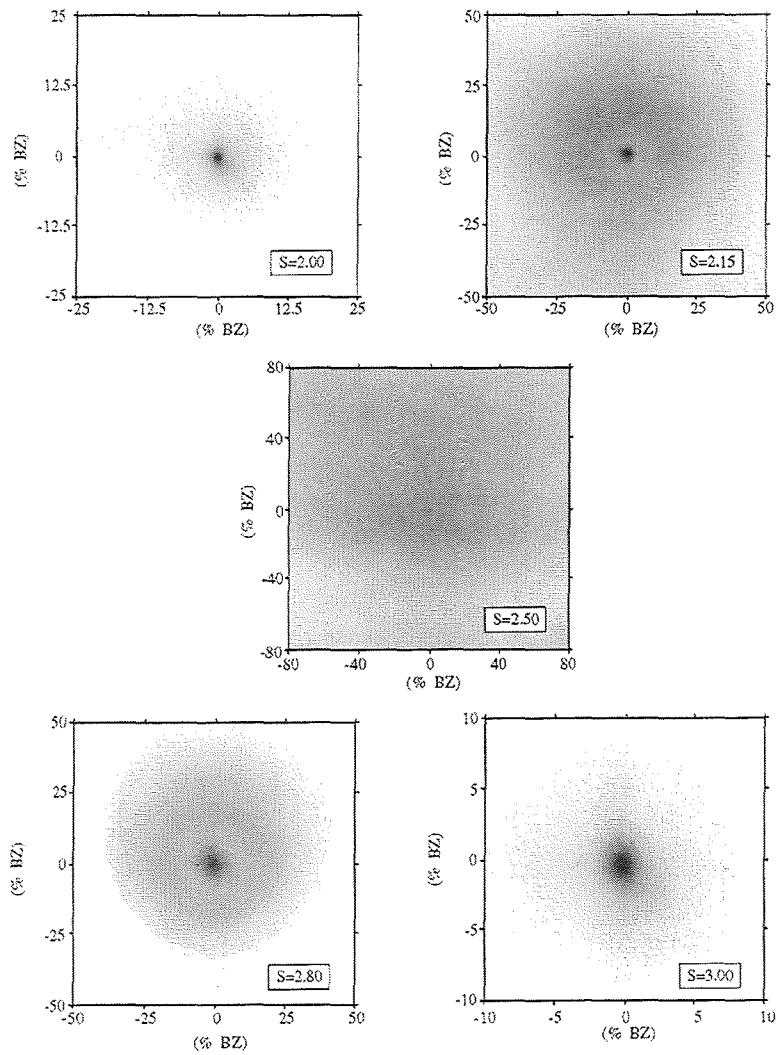


Abbildung 6.5: Vergrößerte LEED-Aufnahme des (00)-Reflexes bei Erhöhung der Streuphase von $S = 2$ nach $S = 3$. Ein Ring umgibt den (00)-Reflex symmetrisch bei $S = 2.15$ und bei $S = 2.8$.

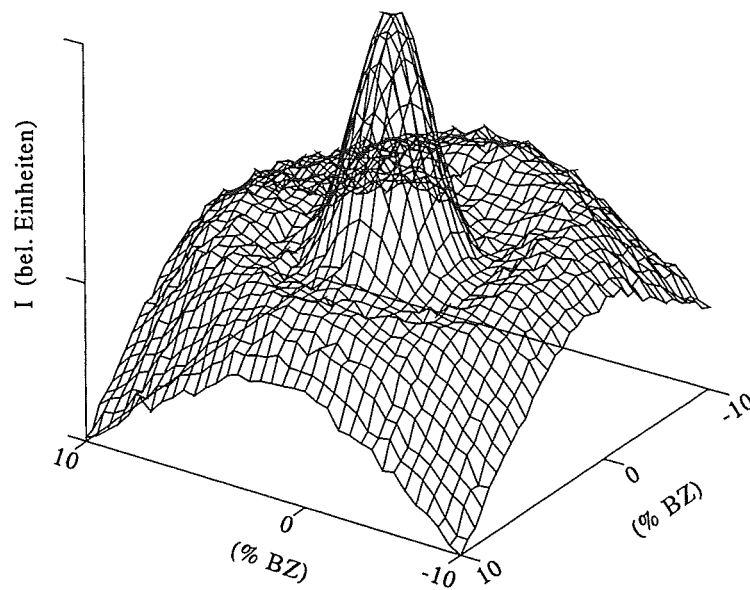


Abbildung 6.6: Dreidimensionale Abbildung des Ringes bei $S = 2.12$.

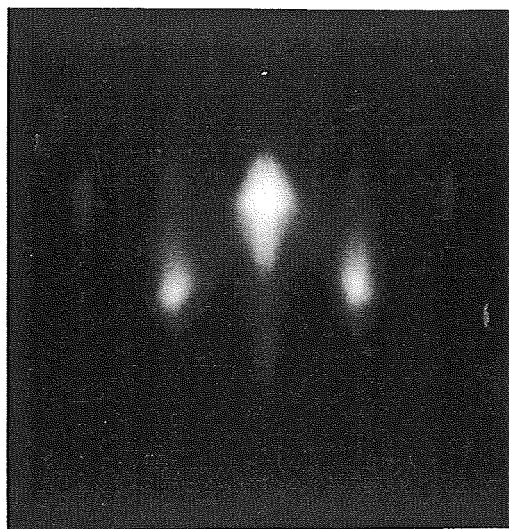


Abbildung 6.7: RHEED-Aufnahme der Fe Oberfläche entlang der (10)-Richtung nahe der Anti-Bragg-Bedingung ($E = 7.4$ keV, $\alpha = 1.4^\circ$).

higkeit und Terrassenlängenverteilungen lassen sich auf die anderen Richtungen übertragen. Abb. 6.8 zeigt drei typische Reflexprofile bei unterschiedlichen Streuphasen. Die x-Achse ist durch den Abstand zum nächsten Beugungsreflex skaliert. Die Intensität ist logarithmisch aufgetragen, um den Untergrund zu betonen.

In der In-Phase-Bedingung bei $S = 2$ ist der Reflex schmal, seine Halbwertsbreite beträgt 1.7 %. Das entspricht einer Transferweite $t_{Fe} \approx 60 a_{Fe}$. Somit ist die Transferweite und damit die maximal auflösbare laterale Korrelation vergleichbar zur Transferweite der Ag-Oberfläche. Auffällig ist weiterhin, daß es auch hier wieder in der In-Phase-Bedingung einen breiten Untergrund gibt, der durch Inhomogenitäten hervorgerufen wird (vgl. Kap. 5.3.2). Die Inhomogenitäten lassen sich sowohl durch Ag-Atome erklären, die sich auf der Fe-Oberfläche befinden, als auch durch Stufenatome mit gegenüber Inselatomen verschiedenen Atomformfaktoren f (vgl. Kap. 6.1).

Wird die Streuphase nur leicht geändert, so wird ein Zentralreflex mit zwei Schultern beobachtet, die symmetrisch zum Zentralreflex angeordnet sind. Die Schultern lassen auf eine nicht-geometrische Verteilung der Inselgrößen schließen, wobei eine mittlere Terrassenlänge ausgezeichnet ist.

Zur quantitativen Analyse wurden die Reflexprofile wieder mittels numerischer Anpassung von Gauß- und Lorentzfunktionen durch insgesamt 3 Funktionen dargestellt (vgl. Gl. 5.7):

$$I(S, \mathbf{K}_{||}) = I_{Gaus}(S, \mathbf{K}_{||}) + I_{Stufen}(S, \mathbf{K}_{||}) + I_{Inh}(\mathbf{K}_{||}) \quad (6.5)$$

Hierbei beschreibt I_{Gaus} die Intensität der zentralen Spitze, $I_{Stufen}(S, \mathbf{K}_{||})$ die aus der Terrassenlängenverteilung resultierende Intensität und $I_{Inh}(\mathbf{K}_{||})$ die Intensität der Reflexprofilverbreiterung infolge von Inhomogenitäten. Für die Inhomogenitäten wurde eine Lorentz-3/2-Funktion verwendet, analog zur Vorgehensweise bei der Ag-Oberfläche. Die HWB der Lorentzschulter ist dabei nicht von der Streuphase abhängig und betrug 25 %. Ihr Anteil an der integralen Intensität G_{Inh} nach Gl. 5.9 zeigt ebenfalls keine periodische Abhängigkeit von der Streuphase und betrug ca. 40 % im gesamten gemessenen Energiebereich.

Die Funktion $I_{Stufen}(S, \mathbf{K}_{||})$ wurde durch eine ringförmige Lorentzfunktion mit Exponenten 3/2 beschrieben. Eine ringförmige Lorentzfunktion ist eine Funktion, deren Maximum in allen Richtungen um einen definierten Betrag, den Radius R_{Ring} , aus dem Zentrum verschoben wurde. Die integrale Intensität wird dann durch Ro-

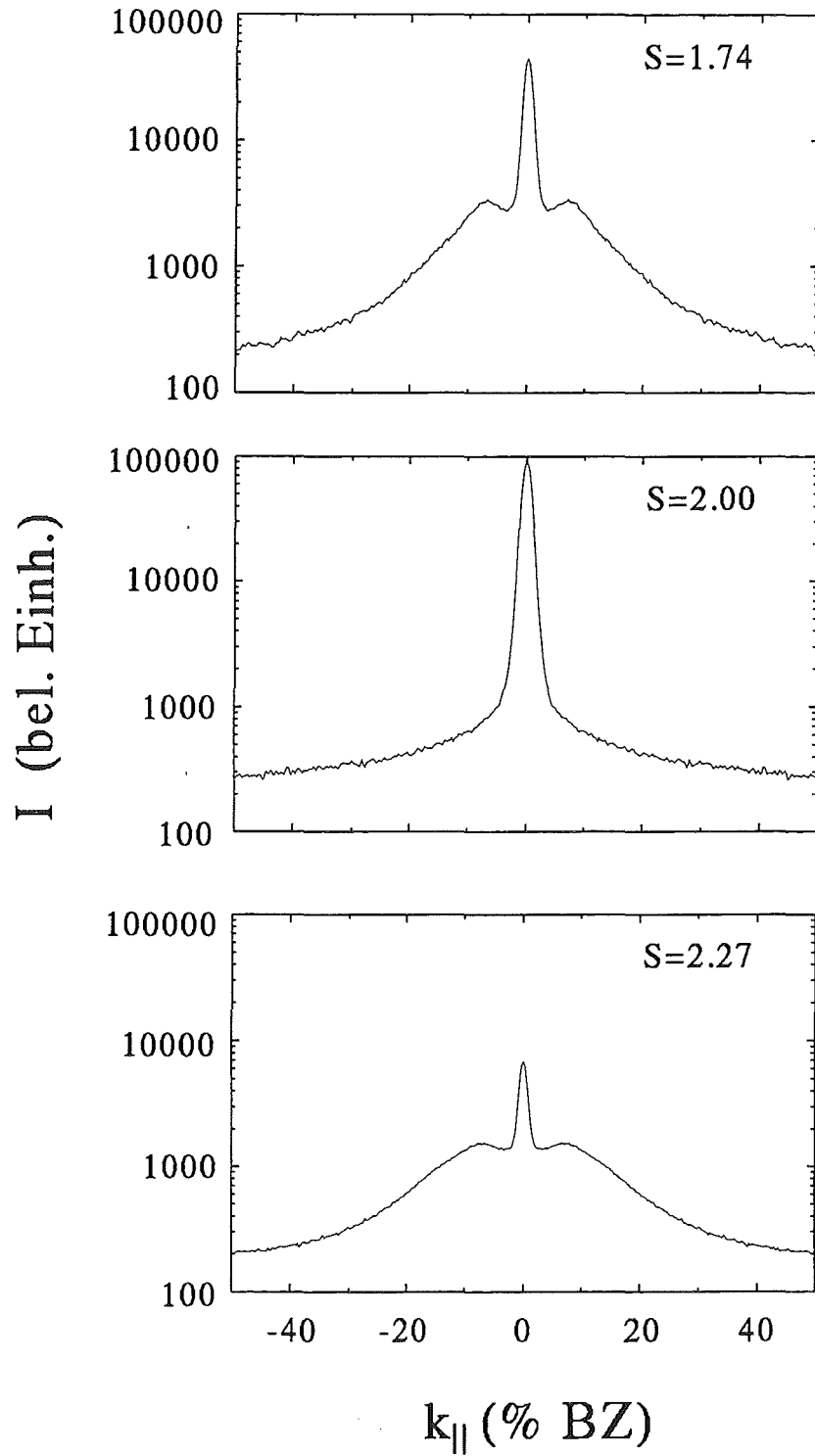


Abbildung 6.8: Reflexprofile des (00)-Reflexes bei unterschiedlichen Streuphasen S entlang der (10)-Richtung.

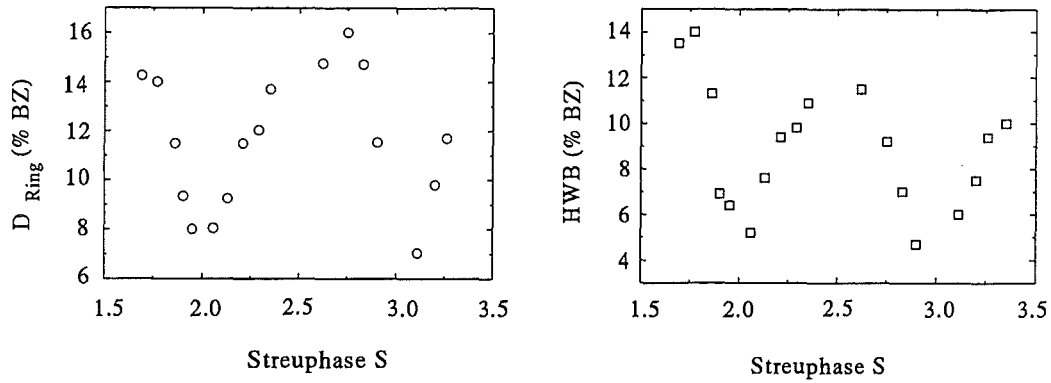


Abbildung 6.9: Ringdurchmesser D_{Ring} und Ring-HWB als Funktion der Streuphase S .

tation dieser Lorentzfunktion um die Intensitätsachse berechnet. Als Fitparameter dienen neben der Intensität der Radius und die HWB des Ringes.

Der Radius des Ringes entspricht dem mittleren Abstand zwischen zwei Terrassen [91]. Sind nur zwei Lagen sichtbar, so kann nicht unmittelbar auf die Terrassenlänge geschlossen werden. Wenn mehrere Lagen sichtbar sind, dann entspricht der halbe Abstand zwischen zwei Inseln der mittleren Terrassenlänge $\langle l \rangle$. Mehrere Lagen der Fe-Oberfläche sind hier sichtbar, wie die Oszillation des Ringradius und der Ring-HWB zeigen [43]. Im weiteren wird daher der Ringdurchmesser als Maß für die mittlere Terrassenlänge untersucht. Abb. 6.9 zeigt den Durchmesser $D_{Ring} = 2R_{Ring}$ und die HWB des Ringes als Funktion der Streuphase S . Der Ringdurchmesser und die HWB zeigen beide eine periodische Oszillation mit der Streuphase. Dabei oszilliert der Durchmesser D_{Ring} zwischen Minima von 8 % in der Nähe zu In-Phase-Bedingungen und Maxima von 15% nahe den Gegenphasen. Die HWB oszilliert gleichphasig, d.h. zwischen 4 % in der Nähe zu In-Phase-Bedingungen und 18 % nahe zu Gegenphasen. Eine direkte Anpassung von D_{Ring} in der Gegenphase war nicht möglich, da hier kein eindeutiger Ring mehr zu beobachten ist (vgl. Abb. 6.5). Durch Extrapolation des Ringdurchmessers auf seinen Wert in Gegenphase $D_{Ring} \approx 15$ % kann die mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle$ nach Gl. 4.12 bestimmt werden zu:

$$\langle l \rangle = 6.25 a_{Fe} \approx 6a_{Fe}$$

Analog kann aus dem Abstand der Nebenreflexe im RHEED-Muster die mittlere Terrassenlänge bestimmt werden. Allerdings reduziert sich hier die erreichbare Genauigkeit erheblich. Mit Gl. 4.12 ergibt sich ein Wert für $\langle l \rangle$:

$$\langle l \rangle_{RHEED} = 6.6 a_{Fe} \pm 1 a_{Fe}$$

Vertikale Rauhigkeit

Die vertikale Rauhigkeit wird durch die $G(S)$ -Auftragung bestimmt. Dazu wird nach Gl. 5.8 das Verhältnis der integralen Spitzenintensität zur Summe der integralen Intensitäten aus Spitze und Lorentzring gebildet:

$$G_{Stufen}(S) = \frac{G_{Spitze}}{G_{Spitze} + G_{Ring}} \quad (6.6)$$

Die Verbreiterung der Reflexprofile durch Inhomogenitäten wird nicht berücksichtigt, da die integrale Intensität G_{Inh} keine periodische Abhängigkeit von der Streuphase zeigt (vgl Kap. 5.3.2).

Abb. 6.10 zeigt $G_{Stufen}(S)$ als Funktion der Streuphase. Bei $S = 2$ und $S = 3$ sind Maxima der Funktion zu erkennen, wohingegen der Wert der Funktion bei halbzahlgiger Streuphase auf Null abfällt. Aus dem schnellen Abfall des Funktionswertes kann auf eine raue Oberfläche geschlossen werden. Die durchgezogene Linie zeigt eine numerische Anpassung nach Gl. 4.10, wobei die sichtbaren Bedeckungen p_i der i -ten Lage als Anpassungsparameter verwendet wurden. Die aus der Anpassung folgende Gesamtbedeckung beträgt 9.9 ML, die Rauhtiefe $\Delta = 1.1$ ML. Das Ergebnis der Anpassung zeigt, daß insgesamt 5 sichtbare Lagen vorhanden sind. Die Anpassung nach Gl. 4.10 ist bei mehr als drei sichtbaren Lagen nicht mehr eindeutig [55]. Als weitere Nebenbedingung der Anpassung wurde eine Gesamtbedeckung von 10 ML berücksichtigt, wie dies experimentell durch RHEED-Oszillationen und Schwingquarz bestimmt wurde. Dennoch kann die Anzahl der offenen Lagen um ± 1 variieren ohne die Anpassung drastisch zu verschlechtern. Abb. 6.10 veranschaulicht diese Schwierigkeit: Dargestellt sind $G(S)$ Kurven für je eine Schicht mit 4 sichtbaren Lagen und mit 6 sichtbaren Lagen. Die Abweichung der beiden Fits von den Meßwerten ist relativ klein, jedoch ergeben sich Gesamtbedeckungen von 9.5 bzw. 10.4 Lagen, die mit der aufgedampften Schichtdicke von 10 ML nicht gut übereinstimmen. Empirisch wird häufig eine symmetrische Verteilung der Schichtbedeckungen p_i beobachtet [57, 54, 92]. Da die beobachteten Ringe auf eine regelmäßige Stufung der Oberfläche hinweisen, liegt die Annahme einer symmetrischen Verteilung nahe. Daher wurde hier zusätzlich die Funktion so angepaßt, daß eine symmetrische Verteilung der p_i realisiert wurde.

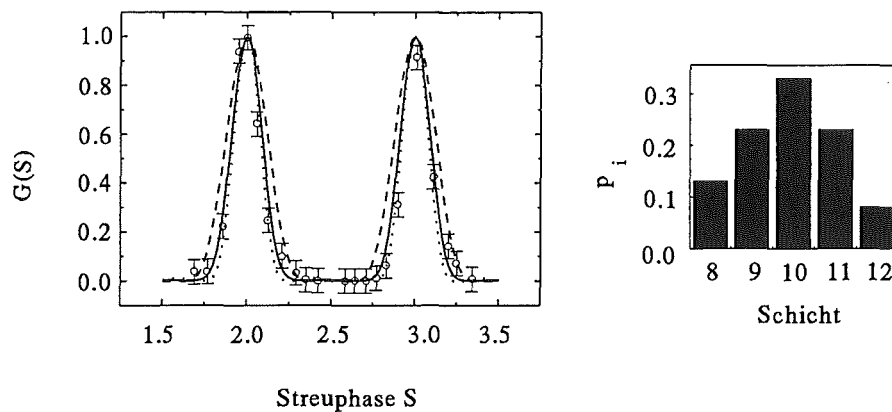


Abbildung 6.10: $G(S)_{\text{Stufen}}$ als Funktion der Streuphase S . Die durchgezogene Linie ist eine numerische Anpassung an die Daten mit 5 sichtbaren Lagen. Die Verteilung p_i der 5 sichtbaren Lagen ist schematisch dargestellt. Gestrichelte Kurve: 4 sichtbare Lagen, gepunktete Kurve: 6 sichtbare Lagen.

Laterale Insellängenverteilung

Zur Charakterisierung der Insellängenverteilung wurde die DMM eingesetzt. Die Verteilungsfunktion der Insellängen muß bei einer charakteristischen Länge ein Maximum besitzen, um die beobachtete Ringstruktur im Beugungsbild zu erzeugen. Als Verteilungsfunktion von Insellängen mit ausgezeichneter Länge hat sich die Gaußfunktion bewährt. Das Maximum der Gaußverteilung gibt dann die mittlere Terrassenlänge an. Es wurde eine Oberfläche mit fünf offenen Lagen angenommen. Die Annahme von weniger als vier offenen Lagen führte nicht zu der experimentell beobachteten Abhängigkeit des Ringdurchmessers von der Streuphase (vgl. Abb. 6.9). Würden mehr als sieben offene Lagen vorausgesetzt, so änderte sich der Ringdurchmesser deutlich stärker als experimentell beobachtet. Daher wurden in Anlehnung an die $G(S)$ -Analyse fünf offene Lagen angenommen. Die Verteilung der sichtbaren Anteile p_i auf die einzelnen Lagen erfolgte gemäß der $G(S)$ -Analyse des vorhergehenden Abschnittes.

Weiter wurde eine zufällige Abfolge der Stufen angenommen. Würde eine regelmäßige Abfolge von fünf Ab- und fünf Aufstufen angenommen, ergeben sich in Abhängigkeit von der Streuphase² mehrere Ringe, da es zwischen den Stufen zu In-

²Die zusätzlichen Maxima bei regelmäßiger Stufung treten nur zwischen der In-Phase- und der Gegenphase-Bedingung auf. Exakt in der In-Phase und in der Gegenphase Streubedingung kann kein Unterschied beobachtet werden.

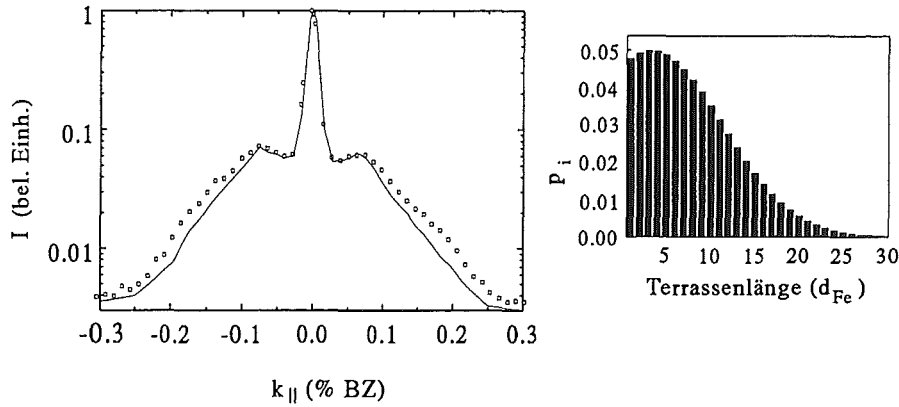


Abbildung 6.11: Vergleich von gemessenem Profil ($\circ$) und mittels DMM berechnetem Profil bei Streuphase $S = 1.75$. Die Terrassenlängenverteilung ist rechts dargestellt.

terferenzeffekten kommt [93]. Diese zusätzlichen Maxima werden aber experimentell nicht beobachtet, daher muß eine zufällige Abfolge der Stufen angenommen werden.

Abb. 6.11 zeigt ein gemessenes Reflexprofil bei Streuphase $S = 1.75$ und das mittels DMM numerisch angepaßte Reflexprofil. Die Insellängenverteilung ist im rechten Teil der Abbildung dargestellt. Das gemessene Profil wird durch die angenommene gaußförmige Verteilung von Insellängen und Inselabständen zufriedenstellend reproduziert. Die typischen Schultern rechts und links vom Zentralreflex und insbesondere deren Breite werden in akzeptabler Übereinstimmung wiedergegeben. Als Anpassungsparameter wurden verwendet: Mittlere Insellänge: $\langle l \rangle = 3 a_{Fe}$, HWB der Insellängenverteilung: $HWB = 7 a_{Fe}$.

In Abb. 6.12 ist ein schematischer Querschnitt durch eine Fe-Oberfläche dargestellt. Die Abfolge der Auf- und Abstufen ist statistisch verteilt. Die Stufenlängen sind um den Mittelwert $\langle l_{Fe} \rangle$ verteilt. Insgesamt sind fünf Lagen sichtbar.

Die mittlere Insellänge, die durch Anpassung der Reflexprofile mittels DMM berechnet wurde, und die direkt aus den Reflexprofilen bestimmte mittlere Inselgröße stimmen nicht überein. Die direkt aus den Profilen ermittelte Inselgröße ist größer als diejenige, die durch die Anpassung mit der DMM bestimmt wurde. Dieser Effekt ist eine Folge der Insellängenverteilung [63, 93]. Wird die mittlere Insellänge konstant gesetzt, die Verteilungsfunktion aber variiert, so verschieben sich die Schultern bei Verbreiterung der Verteilungsfunktion zum zentralen Reflex hin. Dieser Effekt kann so groß werden, daß die Seitenbanden nicht mehr vom Zentralreflex unterschieden werden können. Abb. 6.13 zeigt ein Beispiel für diesen Effekt. Mit der DMM wurde

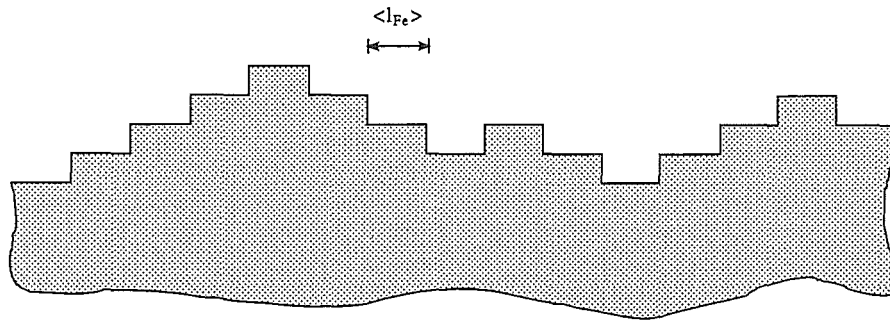


Abbildung 6.12: Schematischer Querschnitt durch eine Fe-Oberfläche mit einer zufälligen Abfolge von Stufen, wobei die Stufenlängen um den Mittelwert $\langle l_{Fe} \rangle$ verteilt sind. Insgesamt sind fünf Lagen sichtbar.

bei konstanter mittlerer Terrassenlänge $\langle l \rangle = 10 a$ unterschiedlich breite Gaußverteilungen der Insellängen angenommen ($S = 0.5$). Die Verbreiterung der Seitenbanden sowie die Verschiebung der Maxima der Seitenbanden sind klar zu erkennen. Gleichzeitig wird dieser Effekt anschaulich: Die Terrassenlängenverteilung ist zwar symmetrisch um den Mittelwert $10 a$, aber die Verteilungen werden nicht symmetrisch abgeschnitten. Diejenigen Längen, die größer als der Mittelwert sind, haben auf diese Weise einen größeren Einfluß auf die Seitenbanden als diejenigen Längen, die kleiner als der Mittelwert sind. Somit stellen die mittleren Terrassenlängen, die direkt aus den Reflexprofilen bestimmt werden, immer nur eine obere Grenze dar. Ist die HWB der Schultern vergleichbar mit dem Radius des Ringes, so ist der Fehler klein; erst wenn die HWB wesentlich größer wird als der Radius, wird der Fehler groß.

Vergleich mit Literaturdaten

Der Idealfall des homoepitaktischen Wachstums von Fe auf Fe wurde mittels RTM untersucht [44]. Als Substrat wurden (001)-Fe Whisker verwendet, die sich durch eine sehr kleine Stufendichte von ca. $1/\mu\text{m}$ auszeichnen. Nach Aufwachsen von 5 ML Fe bei Raumtemperatur ergeben sich Rauheitsparameter, die den Parametern der in dieser Arbeit untersuchten Schichten nahezu entsprechen (siehe Tab. 6.1). Zwar ist die mittlere Terrassenlänge geringfügig größer und die Rauhtiefe Δ etwas kleiner, jedoch sind ebenfalls fünf Lagen sichtbar. Da bei weiterem Wachstum eine Aufrauung zu erwarten ist, verringern sich die geringfügigen Vorteile der auf einem Fe Whisker aufgedampften Schicht gegenüber der hier untersuchten Oberfläche. Somit

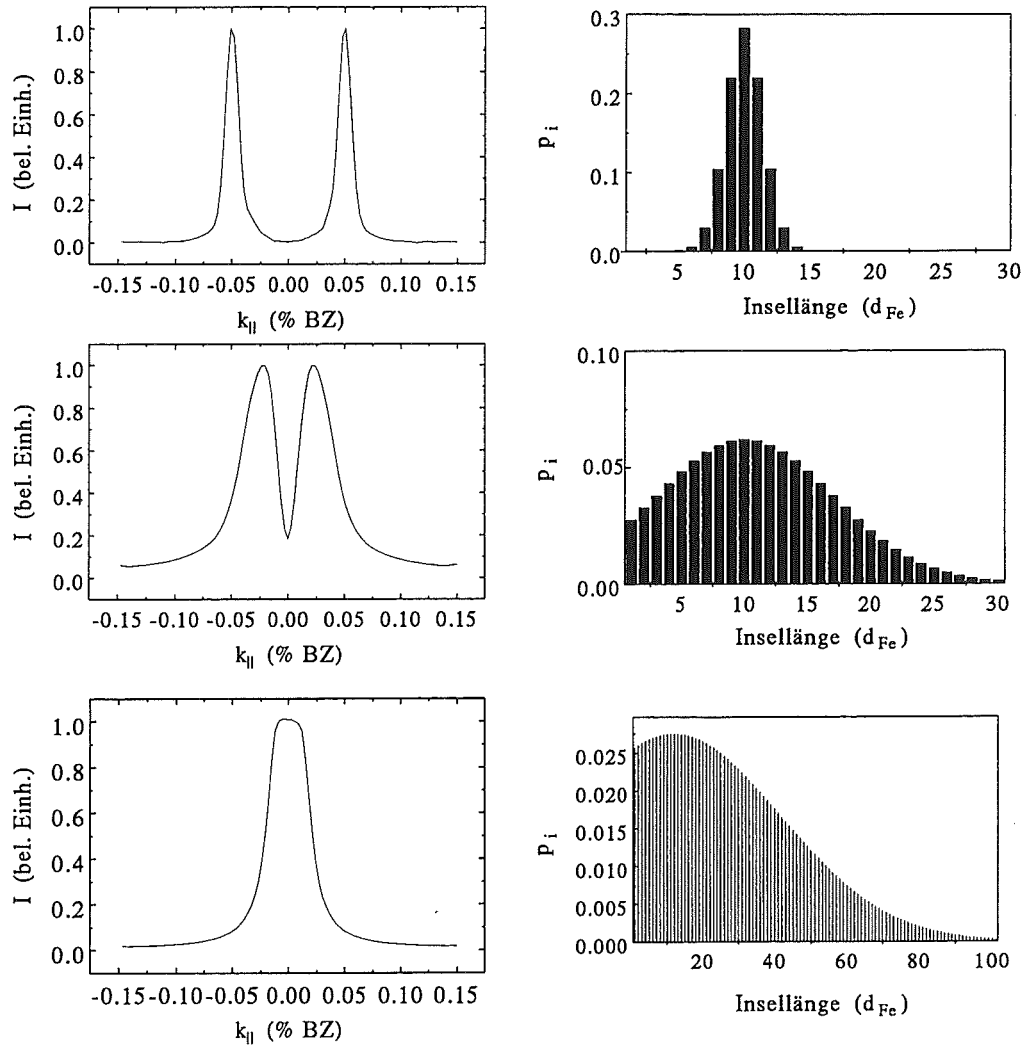


Abbildung 6.13: Eine steigende HWB der Insellängenverteilung führt zu einer Verschiebung des Maximums der Schultern und zu dessen Verbreiterung. Im Extremfall wachsen die Schultern zusammen. Bei allen Kurven wurde die gleiche mittlere Länge $\langle l \rangle = 10 \text{ \AA}$ und die gleiche Streuphase $S = 0.5$ verwendet.

entsteht trotz der wesentlich glatteren Substratoberfläche sowie des günstigeren Oberflächenenergieverhältnisses keine wesentlich glattere Oberfläche.

Meßtechnik	Substrat	d (ML)	$\langle l \rangle$ (a_{Fe})	Δ	VR: Σi	Ref.
SPA-LEED	Epi. Ag	10	6	1.1	5	diese Arbeit
RTM	Fe Whisker	5	8	0.8	5	[44]
optisches RHEED	Ag Einkristall	~ 6	10	–	(3)	[33]
CEMS	Ag Einkristall	~ 7	7-10	–	(3)	[86]
SPA-LEED	Cu Einkristall	~ 2	5	–	–	[94]

Tabelle 6.1: Vergleich der Oberflächenstrukturen von dünnen Fe-Filmen, die bei Raumtemperatur aufgedampft wurden. Die aufgedampfte Schichtdicke ist durch d gegeben, $\langle l \rangle$ steht für die mittlere Terrassenlänge, Δ für die mittlere quadratische Abweichung. VR bezeichnet die vertikale Rauigkeit und gibt die Anzahl der offenen Lagen an. Für $\langle l \rangle$ wurde der in dieser Arbeit direkt aus den Profilen bestimmte Wert verwendet ohne eine Insellängenverteilung zu berücksichtigen.

Die Untersuchungen auf (001)-Ag-Einkristallen zeigen auf den ersten Blick eine größere Terrassenlänge, die durch die glatteren Oberflächen der Ag-Einkristalle bedingt wird (typische Ag-Terrassenlängen mehrere 10 nm). Allerdings wurde diese mittlere Fe-Terrassenlänge aus der Reflexprofilauflösung einer optischen RHEED-Aufnahme bestimmt und besitzt daher nicht die gleiche Genauigkeit wie die SPA-LEED- oder die RTM-Daten. Außerdem berücksichtigen diese optisch ermittelten Längen keine Insellängenverteilung. Zum Vergleich sind daher in der Tabelle 6.1 die hier direkt mit SPA-LEED aus den Profilen bestimmten Werte für $\langle l \rangle$ eingetragen, da diese entsprechend den RHEED-Aufnahmen ohne Berücksichtigung einer Verteilung bestimmt wurden. Die Anzahl der offenen Lagen wurde bei diesen Experimenten nur grob abgeschätzt; daher erscheinen diese Werte in Klammern. Insgesamt läßt sich aber auch hier kein wesentlicher Unterschied zu den in dieser Arbeit ermittelten Werten erkennen, wenn – bedingt durch die Meßmethode – eine Unsicherheit von 25 % unterstellt wird. Die CEMS-Ergebnisse wurden auf äquivalenten Ag-Einkristallen erzielt und zeigen Übereinstimmung, wenn berücksichtigt wird, daß nur drei offene Lagen bei den verwendeten Modellrechnungen angenommen wurden.

Interessant sind weiterhin die auf (001)-Cu-Oberflächen gewonnenen Daten. Diese

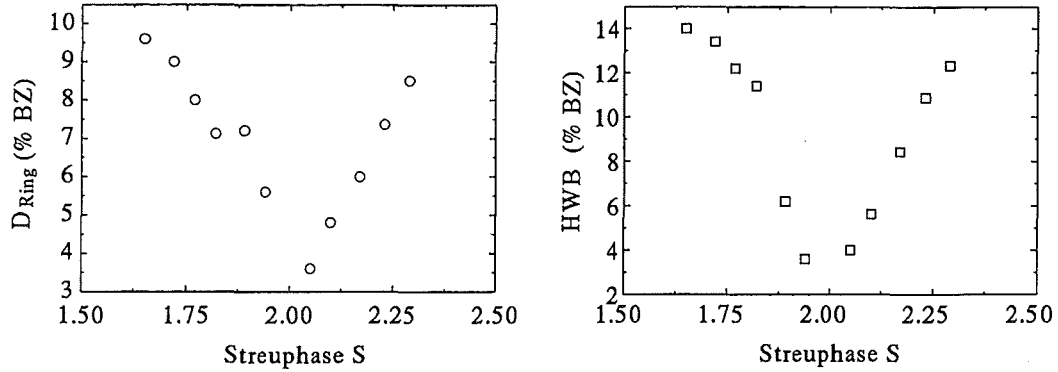


Abbildung 6.14: Ringdurchmesser und Ring-HWB als Funktion der Streuphase S .

wurden ebenfalls mit SPA-LEED aufgenommen. Auch hier lassen sich Ringe erkennen. Die Terrassenlängen sowie die HWB der Schultern sind vergleichbar.

6.2.2 Oberflächenstruktur von 30 ML dicken Filmen

Im nächsten Schritt wurde die Oberflächenstruktur bestimmt, nachdem insgesamt 30 ML Fe bei Raumtemperatur aufgedampft worden waren. LEED-Aufnahmen einer derartigen Oberfläche zeigen in der In-Phase-Bedingung einen scharfen Reflex mit einer HWB von 1.5 %, die somit einer lateralen Transferweite von ca. $t = 66 a_{Fe}$ entspricht. Wird die Streuphase erhöht, so wird ein Ring erkennbar, der symmetrisch zum Zentralreflex angeordnet ist. In der Gegenphase bei $S = 1.5$ und $S = 2.5$ wird dagegen kein Ring, sondern nur ein breiter Untergrund beobachtet.

Der wesentliche Unterschied zum 10 ML dicken Fe-Film liegt im Ringdurchmesser. Abb. 6.14 zeigt den Ringdurchmesser D_{Ring} und die HWB des Ringes als Funktion der Streuphase S . Analog zum dünneren Film ist auch hier eine Oszillation des Ringdurchmessers erkennbar. Allerdings wird der maximale Wert von D_{Ring} in Gegenphase zu $D_{Ring} = 10$ % interpoliert, woraus ohne Berücksichtigung der Insellängenverteilung die mittlere Insellänge $\langle l \rangle$ bestimmt wird zu:

$$\langle l \rangle = 10 a_{Fe}$$

Somit hat sich die mittlere laterale Insellänge nahezu verdoppelt. Die HWB des Ringes oszilliert mit der Streuphase. Sie ist gegenüber der 10 ML Fe Schicht nur geringfügig reduziert und beträgt in Gegenphase ca. 15 %.

Die vertikale Rauigkeit wurde mittels $G(S)$ -Analyse bestimmt. Dazu wurden Reflexprofile, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, numerisch angepaßt und

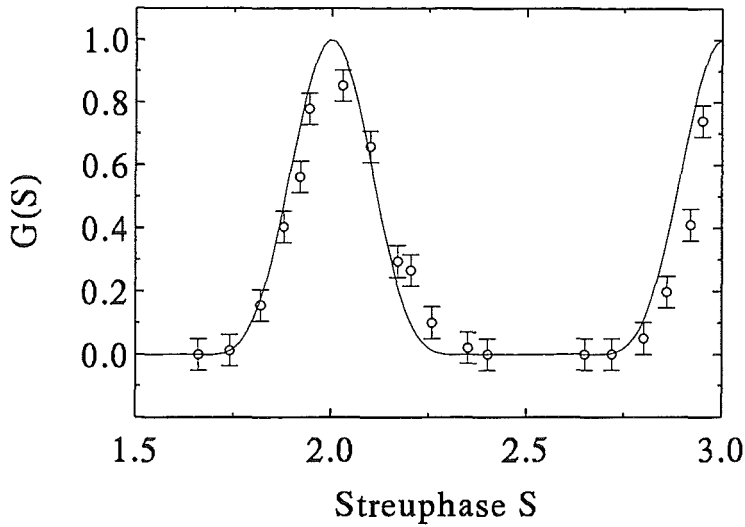


Abbildung 6.15: $G(S)_{Stufen}$ als Funktion der Streuphase S . Die durchgezogene Linie ist eine numerische Anpassung an die Daten.

$G(S)$ nach Gl. 6.7 berechnet. Abb. 6.15 zeigt $G(S)$ als Funktion der Streuphase und die zugehörige Verteilung der sichtbaren Schichten. Im Vergleich zur 10 ML dicken Fe-Schicht (Abb. 6.10) ist kein wesentlicher Unterschied in der Variation des $G(S)$ -Wertes mit der Streuphase zu erkennen. Zur numerischen Anpassung der $G_{Stufen}(S)$ -Kurve wurden 5 sichtbare Lagen benötigt, die Verteilung der offenen Lagen weicht dabei nur geringfügig vom Vergleichswert der 10 ML dicken Schicht ab. Die Rauhtiefe Δ wurde bestimmt zu $\Delta = 1.1$ und entspricht ebenfalls dem Wert der dünneren Schicht.

Auf den ersten Blick ist dieses Ergebnis erstaunlich. Bei Temperaturen, bei denen die Diffusion der Oberflächenatome nur einen geringen Einfluß besitzt, erfolgt während des Wachstums eine Aufrauung der Oberfläche. Die Rauhtiefe Δ als Maß der Aufrauung kann dabei durch die Schichtdicke t gemäß

$$\Delta^{theo} = C \times t^{\beta} \quad (6.7)$$

beschrieben werden [95]. Im Fall des homopepitaktischen Wachstums von Fe auf (001)-Fe-Whiskern wurden experimentell $C \approx 0.41$ und $\beta = 0.46$ bestimmt [44]. Im Fall der 10 ML dicken Schicht ergibt sich mit diesen Werten aus Gl. 6.7 in Übereinstimmung mit dem in dieser Arbeit ermittelten Wert von $\Delta^{exp} = 1.1$ ML ein Wert von $\Delta^{theo} \approx 1.2$. Für 30 ML wird dagegen experimentell ein Wert von $\Delta^{exp} = 1.1$ ML bestimmt, wohingegen $\Delta^{theo} \approx 2.0$ ML aus der Rechnung folgt. Dieses Ergebnis kann wegen der geringen Substrattemperatur nicht durch erhöhte

Diffusion erklärt werden. Die Ursache für die vergrößerte mittlere Terrassenlänge und für die vergleichbare Rauhtiefe liegt vielmehr im Übergang zur Homoepitaxie [96]. Bei den dünneren Schichten wirkt sich die Störung durch das heteroepitaktische Aufwachsen in Verbindung mit dem Aufschwimmen des Ag noch stark aus, bei 30 ML Schichtdicke ist dieser Einfluß zu vernachlässigen.

6.3 Abhängigkeit der Oberflächenstruktur von der Wachstumstemperatur

Der Einfluß der Substrattemperatur auf die Fe-Oberflächenstruktur wurde durch systematische Variation der Substrattemperatur untersucht. Dazu wurden sowohl 10 ML dicke als auch 30 ML dicke Fe-Filme im Temperaturintervall von $T_S = 100$ K bis $T_S = 525$ K auf das Ag Substrat aufgedampft.

Die Schichtpräparation erfolgte auf vier Arten, die sich durch die Wahl der Substrattemperatur T_{Ini} während des Aufwachsens der ersten 4 ML Fe unterscheiden:

1. $T_{Ini} = T_S = 293$ K: Gesamte Präparation bei Raumtemperatur (vgl. Kap. 6.1)
2. $T_{Ini} = 293$ K: Die ersten 4 ML Fe bei Raumtemperatur, dann Erhöhung auf Wachstumstemperatur $T_S > 293$ K
3. $T_{Ini} = T_S = 100$ K: Gesamte Präparation bei 100 K
4. $T_{Ini} = 100$ K: Die ersten 4 ML Fe bei 100 K, dann Erhöhung auf Wachstumstemperatur $T_S \geq 293$ K

Die Präparation von 4 ML bei Raumtemperatur bzw. 100 K mit anschließender Erhöhung auf die Wachstumstemperatur T_S diente dazu, das Aufschwimmen von Ag möglichst gering zu halten oder im Falle von $T_{Ini} = 100$ K ganz zu unterdrücken [33, 88]. Anschließend konnte die Substrattemperatur bis $T_S = 520$ K angehoben werden, ohne ein Aufschwimmen nachweisen zu können (vgl. Kap. 6.1).

Wurden die Schichten vollständig bei $T_S = 100$ K präpariert, so zeigte sich im LEED nur eine starke Reflexverbreiterung, die durch eine sehr raue Oberfläche hervorgerufen wird. Die RHEED-Reflexe lagen nicht auf einem Halbkreis, sondern waren quadratisch angeordnet, welches eine Folge der Durchstrahlung von Oberflächeninseln war. Weil diese Oberflächen sehr rauh waren, wurden diese Schichten nicht detaillierter untersucht.

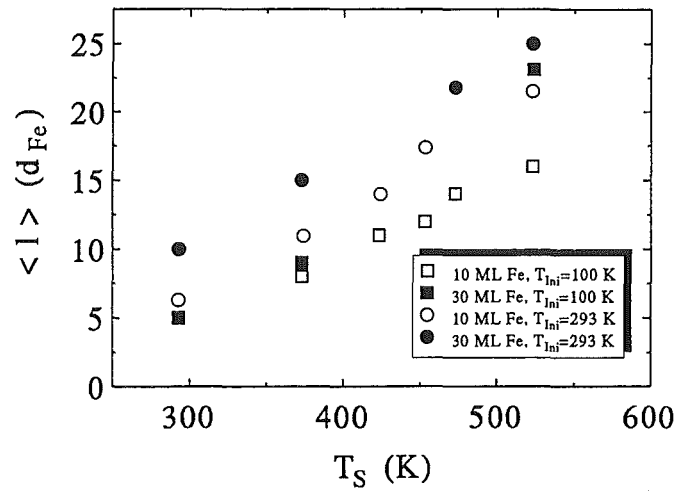


Abbildung 6.16: Die mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle$ als Funktion der Substrattemperatur T_S . Die Meßdaten von 10 ML dicken Filmen sind durch offene Symbole wiedergegeben, die der 30 ML dicken Filme durch geschlossene Symbole. Quadrate ($\square$) stehen für die Substrattemperatur $T_{Ini} = 100$ K, Kreise ($\circ$) stehen für $T_{Ini} = 293$ K.

Die HWB des zentralen Gaußreflexes bei der In-Phase-Streubedingung und somit die Transferweite lag bei allen anderen Präparationstemperaturen zwischen 1.5 % und maximal 2 %, was einer Transferweite von ca. $60 a_{Fe}$ entspricht. Bei Streubedingungen, die zwischen In-Phase und Gegenphase gewählt wurden, konnten symmetrisch angeordnete Ringe um den Zentralreflex beobachtet werden. Ihr Durchmesser war sowohl von der Substrattemperatur als auch von der Schichtdicke abhängig. Abb. 6.16 zeigt die aus dem Ringdurchmesser berechnete mittlere Terrassenlänge ohne Berücksichtigung der Insellängenverteilungen. Sowohl für die 10 ML dicke Fe-Schicht als auch für die 30 ML dicke Fe-Schicht ergibt sich ein annähernd linearer Zusammenhang zwischen T_S und $\langle l \rangle$. Der Anstieg von $\langle l \rangle$ mit T_S ist für beide Schichtdicken gleich groß, der Anfangswert ist jedoch für die 30 ML dicke Schicht doppelt so groß. Eine Abhängigkeit der mittleren Inselgröße von der Substrattemperatur T_{Ini} während des Wachstums der ersten 4 ML kann aus den vorliegenden Ergebnissen nicht festgestellt werden. Somit kann der Einfluß des Aufschwimmens von Ag für die mittlere Terrassengröße vernachlässigt werden.

Zwar nimmt $\langle l \rangle$ mit steigendem T_S zu, gleichzeitig sinkt die HWB der Seitenbanden in gleichem Maße, so daß keine gravierende Änderung der Verteilungsfunktionen festgestellt werden kann.

Die Anzahl der sichtbaren Lagen nimmt mit steigender Substrattemperatur T_S

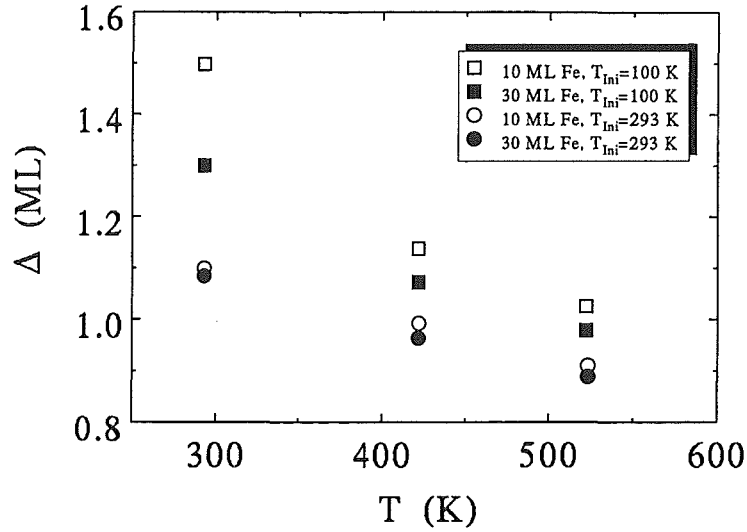


Abbildung 6.17: Die Rauhtiefe als Funktion der Substrattemperatur T_S . Die Meßdaten von 10 ML dicken Filme sind durch offene Symbole wiedergegeben, die der 30 ML dicken Filme durch geschlossene Symbole. Quadrate ($\square$) stehen für die Substrattemperatur $T_{Ini} = 100$ K, Kreise ($\circ$) stehen für $T_{Ini} = 293$ K.

ab. Bei $T_S = 293$ K ergeben sich 5 offene Lagen bei beiden Schichtdicken. Bei der höchsten Temperatur $T_S = 523$ K werden bei beiden Schichtdicken 4 offene Lagen ermittelt. Wird ein Fehler von ± 1 Lage berücksichtigt (vgl. Abb. 6.10), so ist dieser Unterschied nicht allzu groß.

Die Rauhtiefe Δ als Funktion von T_S für die verschiedenen Anfangstemperaturen T_{Ini} ist in Abb. 6.17 aufgetragen. Die Rauhtiefe Δ nimmt mit steigendem T_S ab und erreicht bei $T_S = 523$ K den kleinsten, in dieser Arbeit beobachteten Wert (vgl. Abb. 6.17). Aus diesem minimalen Wert $\Delta \approx 0.9$ ML folgt, daß 95 % der sichtbaren Oberfläche innerhalb von ± 1.8 ML um den Mittelwert 10 bzw. 30 ML liegen, woraus eine Gesamtzahl von 4.6 sichtbaren Lagen folgt.

Ein Vergleich mit derzeit verfügbaren Literaturdaten, die aus dem Wachstum von Fe auf (001)-Fe-Whiskern mit RTM bestimmt worden sind, ist wiederum hilfreich [44]. Zwar wurden in der zitierten Arbeit nur 5 ML Fe auf die Whisker-Oberfläche deponiert, aber ein Vergleich ist dennoch sehr aufschlußreich. Die Insellängen, die dort ermittelt worden sind, liegen erheblich über den in dieser Arbeit gemessenen Insellängen. So wird für $T_S = 453$ K ein Wert von $\langle l \rangle \approx 50 a_{Fe}$ angegeben, für $T_S = 523$ K ein Wert von $\langle l \rangle \approx 175 - 200 a_{Fe}$. Die Anzahl der offenen Lagen wird bei $T_S = 453$ K mit 4 angegeben, bei $T_S = 523$ K sind es im wesentlichen zwei, die

dritte Lage wächst aber bereits. Die Rauhtiefe liegt hier deutlich niedriger als in der vorliegenden Arbeit, denn es werden Werte von $\Delta = 0.62$ ML und $\Delta = 0.41$ ML angegeben. Zusätzlich wurde beim homoepitaktischen Wachstum festgestellt, daß die charakteristischen Inseln bereits während des Wachstums der ersten Lage festgelegt werden. In guter Übereinstimmung zur vorliegenden Arbeit wird dort bei $T_S = 293$ K eine Reflexprofilaufspaltung im RHEED beobachtet.

Zwar besitzen die hier hergestellten Ag-Oberflächen kleinere Terrassenlängen als die Fe-Whisker, aber bei $T_S = 293$ K sind die statistischen Oberflächenparameter nahezu äquivalent (vgl. Tab. 6.1). Daher muß die wesentliche Ursache im Diffusionsverhalten der Fe-Atome begründet sein. Eine experimentelle Überprüfung dieser Annahme gestaltet sich schwierig, da die Ag-Substrate keine höheren Temperaturen erlauben als die, die in dieser Arbeit verwendeten. Dafür finden sich wichtige Hinweise auf ein entsprechendes Diffusionsverhalten der Fe-Atome bei der Untersuchung sehr dünner Fe-Filme auf Fe-Whiskern [97].

Vergleich mit RTM-Daten

Gleichartige Schichtstrukturen wie in der vorliegenden Arbeit wurden von D. BÜGLER, Universität Basel, hergestellt: Auf GaAs-Substraten wurden eine Fe-Keimschicht und ein Ag-Puffer aufgedampft. Anschließend wurden Fe Schichten bei $T_S = 293$ K und bei $T_S = 523$ K auf die Ag Oberfläche aufgedampft. Die Oberflächenstrukturen wurden *in-situ* mit RTM abgebildet und analysiert.

Bei einer Fe-Schichtdicke von 2 nm ergaben sich bei beiden Präparationsarten Oberflächenstrukturen in der Höhe von ca. 1 nm entsprechend 6 ML. Bei $T_S = 293$ K konnten diese Oberflächenstrukturen nicht detailliert aufgelöst werden, da die Oberfläche in sehr kleine Inseln zerfiel, wobei die abbildende Spitze der Oberflächentopographie nicht folgen konnte. Wurde die Fe-Schicht bei $T_S = 523$ K präpariert, so wurde eine Folge von statistisch verteilten Auf- und Abstufen beobachtet (Abb. 6.18). Die Farbstufen in Abb. 6.18 entsprechen dabei atomaren Stufen. Die Anzahl der sichtbaren Lagen kann daher zu 6 ML bestimmt werden. Die aus dem Bild bestimmte Verteilung der offenen Lagen stimmt gut mit der mittels $G(S)$ -Analyse bestimmten Verteilung überein (Abb. 6.19). Die laterale Stufengröße läßt sich durch die Annahme einer Folge von 6 Auf- und 6 Abstufen auf einer Längenskala von 20 nm abschätzen. Es resultiert eine mittlere Stufenlänge von $\langle l \rangle = 1.66$ nm $\approx 5.8a_{Fe}$. Die geringe Differenz bei den mittleren Inselgrößen, könnte – neben Abweichungen



Abbildung 6.18: RTM Abbildung einer 2 nm dicken Fe-Oberfläche, die bei $T_g = 523$ K präpariert wurde. Die Übersichtsaufnahme oben zeigt einen Ausschnitt der Größe 400×400 nm, die Detailaufnahme einen Ausschnitt von 50×50 nm. Die Farbstufen entsprechen dabei atomaren Stufen. Mit freundlicher Genehmigung von D. Bürgler, Universität Basel.

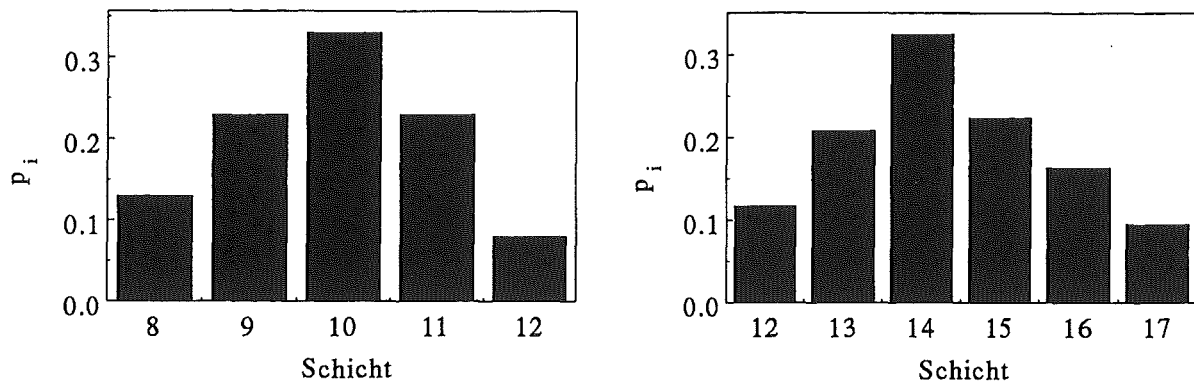


Abbildung 6.19: Links: Die durch SPA-LEED ermittelte Verteilung der sichtbaren Lagen. Rechts: Die aus der RTM-Aufnahme ermittelte Verteilung der sichtbaren Lagen.

in den Präparationsbedingungen wie Substrattemperatur, Hintergrunddruck etc. – auch durch die Schichtdicke von 2 nm $\sim$ 13.8 ML erklärt werden, da sie keiner kompletten Lagenzahl entspricht. Somit werden die wesentlichen Aussagen der Reflexprofilanalyse gut bestätigt.

6.4 Präparation und Oberflächenstruktur von Cr-Filmen

Die Präparation der Cr-Schichten erfolgte auf Fe-Schichten, die nach den Herstellungsverfahren 1,2 und 4 (vgl. Kap. 6.3) hergestellt worden waren, d.h. die Fe-Schichten wurden (1) vollständig bei $T_S = 293$ K präpariert, (2) die ersten 4 ML wurden bei $T_{Ini} = 293$ K aufgedampft, dann erfolgte eine Erhöhung auf $T_S = 523$ K oder (4) $T_{Ini} = 100$ K bei anschließender Erhöhung auf $T_S = 523$ K.

Abb. 6.20 zeigt die Oszillation des (00)-RHEED-Reflexes während des Cr-Wachstums bei $T_S = 293$ K. Die Sinusform der Oszillationen weist auf einen Wachstumsprozeß hin, der nicht lagenweise erfolgt [64]. RHEED-Wachstumsoszillationen konnten nur bei $T_S = 293$ K beobachtet werden, bei Temperaturen $T_S > 420$ K wurden keine Oszillationen nachgewiesen. Das Fehlen einer Intensitätsoszillation kann hier durch zwei Ursachen bedingt sein: Erstens kann ideales, gleichmäßiges Wachstum dazu führen, daß sich die Oberfläche während des Wachstumsprozesses in einem quasi konstanten Zustand befindet [64]. Dabei ändert sich die relative Verteilung der sichtbaren Schichten nicht. Ein solcher Wachstumsprozeß ist mit großen Diffusionslängen der ankommenden Atome verknüpft und somit für hohe Temperaturen zu erwarten. Eine zweite Ursache für das Fehlen der Oszillationen kann schlechtes

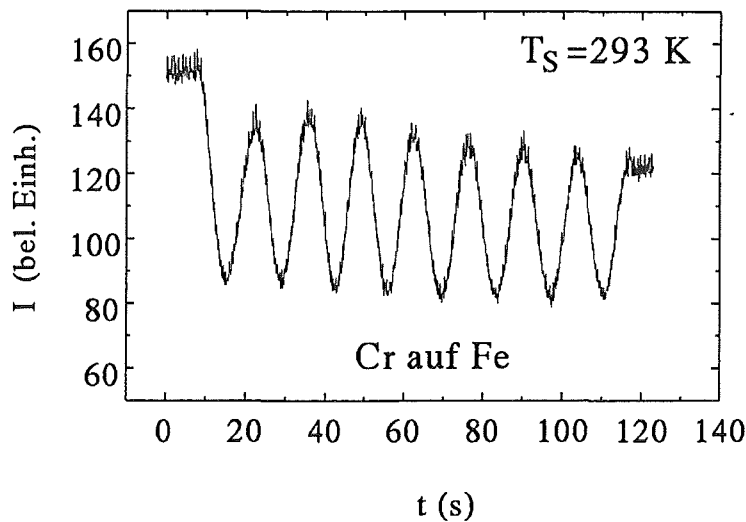


Abbildung 6.20: Die Intensitätssoszillation des RHEED (00)-Reflexes während des Cr-Wachstums bei $T_S = 293$ K. Die Einstrahlbedingung entspricht der ersten Anti-Bragg-Bedingung.

Wachstum sein, bei dem die Oberfläche sehr schnell aufraut [64]. Schließlich kann drittens die Kohärenzlänge des verwendeten RHEED-Systems zu klein sein [98]. Die Kohärenzlänge des Elektronenstrahls und somit die Transferweite des RHEED-Systems liegen üblicherweise bei ca. $1\text{ }\mu\text{m}$. Durch Oberflächenrauigkeiten kann aber die Transferweite abgesenkt werden, ähnlich der Reduktion beim SPA-LEED. Die Längenskala, auf der Intensitätssoszillationen beobachtet werden können, wird aber zusätzlich noch durch den Öffnungswinkel des Detektors bestimmt [98], wie im Rahmen der kinematischen Theorie gezeigt werden kann. Die typische Kohärenzlänge kann sich durch den Einfluß des Detektors auf 5-10 nm reduzieren. Sind die typischen Längen auf der Oberfläche während des Wachstumsprozesses wesentlich größer als diese Kohärenzlänge, so werden keine Oszillationen beobachtet.

RHEED-Intensitätssoszillationen können auch nach Ende des Wachstums beobachtet werden. Dazu wurde eine keilförmige Cr-Schicht bei $T_S = 293$ K aufgedampft. Anschließend wurde die Probe entlang des RHEED-Strahls mit gleichmäßiger Geschwindigkeit bewegt und die Intensität des gebeugten Strahls detektiert. Abb. 6.21 zeigt ein Beispiel einer solchen Intensitätssoszillation, mit der der lateralen Probenposition sehr exakt eine Cr-Dicke zugeordnet werden kann.

Die Oberflächenstruktur der Cr-Schichten wurde mit LEED untersucht. Die gemessenen Transferweiten sind vergleichbar zu den Transferweiten von Fe-Oberflächen

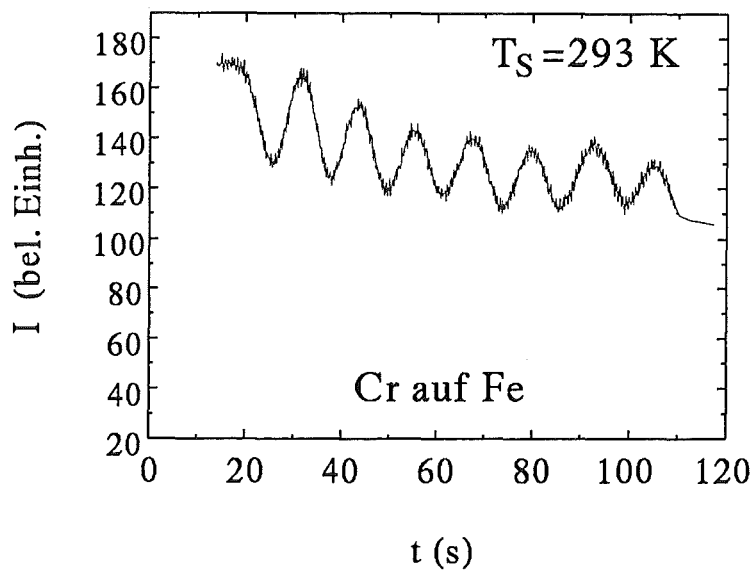


Abbildung 6.21: Intensitätsoszillation des RHEED-Reflexes nach dem Wachstum einer keilförmigen Cr-Schicht ($T_S = 293$ K). Dazu wurde die Probe mit konstanter Geschwindigkeit senkrecht zum einfallenden Elektronenstrahl bewegt. Einstrahlbedingung: Erste Anti-Bragg-Bedingung.

und haben den Wert $t \approx 60 a_{Cr}$. Auch die Änderung des zentralen Reflexes mit der Streuphase verläuft analog zu den beobachteten Änderungen des LEED-Reflexes der Fe-Oberfläche. Symmetrisch um den (00)-Reflex sind Ringe zu beobachten. Abb. 6.22 zeigt ein Profil des LEED-Reflexes einer 8 ML dicken Cr-Schicht, die bei $T_S = 293$ K auf einen gleichartig präparierten Fe-Film der Dicke 30 ML aufgedampft wurde.

Aus der Präparation bei $T_S = 293$ K wurden die Rauigkeitsparameter bestimmt, die mit denjenigen der 30 ML dicken Fe-Schicht vergleichbar sind. Die mittlere Terrassenlänge bei den Cr-Schichtdicken $d_{Cr} = 4,8$ und 16 ML wird ohne Berücksichtigung der Terrassenlängenverteilung zu $\langle l \rangle \approx 10 a_{Cr}$ bestimmt. Die mittlere Terrassenlänge ist somit in dem untersuchten Cr-Dickenbereich nicht von der Cr-Schichtdicke abhängig. Das gute Wachstum von Cr auf Fe ist durch die sehr ähnlichen Oberflächenenergien und Gitterkonstanten bedingt (vgl. Kap. 5.1). Die Zahl der sichtbaren Lagen beträgt nach der $G(S)$ -Analyse $n = 5$, die Verteilung auf die einzelnen Schichten ist innerhalb des Meßfehlers mit derjenigen der Fe-Schicht aus Abb. 6.15 vergleichbar. Die Rauhtiefe für die untersuchten Schichtdicken beträgt $\Delta = 1.20, 1.37$ und 1.39. Die Relation von HWB der Schultern zum Abstand vom

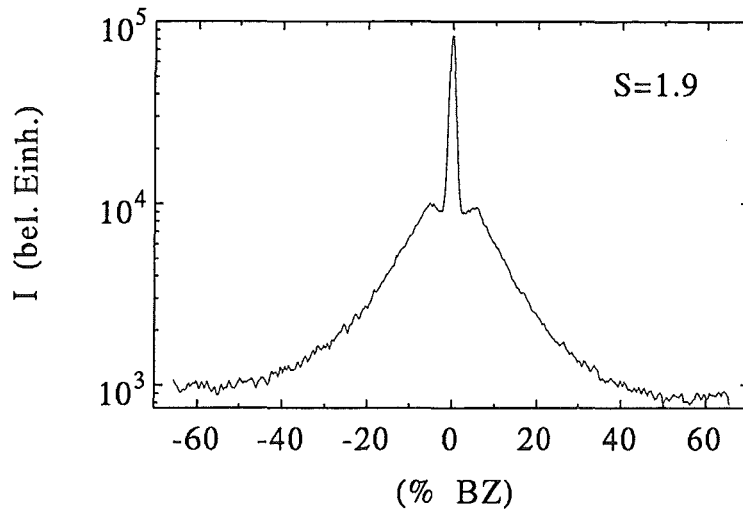


Abbildung 6.22: Reflexprofil einer 8 ML dicken Cr-Schicht ($T_S = 293$ K) bei Streuphase $S = 1.90$. Auf beiden Seiten des zentralen Reflexes sind die zusätzlichen Reflexe zu erkennen.

Zentralreflex ist ebenfalls mit dem Wert für die Fe-Oberfläche vergleichbar. Aus dieser Relation kann auf die Verteilungsfunktion der Terrassenlängen geschlossen werden, die somit ebenfalls mit derjenigen der Fe-Oberfläche übereinstimmt.

Die Rauigkeitsparameter, welche aus der Cr-Präparation bei erhöhten Temperaturen $T_S = 523$ K ermittelt wurden, stimmen ebenfalls mit denjenigen der bei dieser Temperatur hergestellten Fe-Oberfläche überein. Es konnte kein Einfluß der Anfangstemperatur T_{Ini} auf die Oberflächenstruktur festgestellt werden. Im einzelnen: Die mittlere Terrassenlänge beträgt für alle untersuchten Cr-Dicken ($d_{Cr} = 4, 8, 16$) $\langle l \rangle \approx 25 a_{Cr}$; die Zahl der sichtbaren Lagen wird mittels $G(S)$ -Analyse zu 4 bestimmt; die Verteilung auf die einzelnen Lagen ist für eine mittlere Cr-Schichtdicke von 8 ML: $p_7 = 0.16, p_8 = 0.4, p_9 = 0.33, p_{10} = 0.11$. Die resultierende Rauhtiefe ist kleiner als diejenige der bei $T_S = 293$ K präparierten Schichten und hat für die einzelnen Schichtdicken den Wert $\Delta = 0.94, 1.01, 1.03$.

In Tab. 6.2 sind die in dieser Arbeit gemessenen Rauigkeitsparameter der Cr-Oberflächen denjenigen von Cr-Filmen gegenübergestellt, die auf (001)-Fe-Whiskern hergestellt worden sind [92]. Der Wachstumsprozeß dieser Cr-Schichten wurde ebenfalls mit Hilfe von RHEED überwacht und jeweils im Maximum einer Oszillation abgebrochen. Aus RTM-Abbildungen der Oberfläche wurden dann die Rauigkeitsparameter bestimmt. Die Verteilung der offenen Lagen ließ sich durch eine Gaußfunktion beschreiben, wobei im Falle von $T_S = 323$ K sehr ähnliche Ergebnisse zu

Substrat	T_S (K)	d (ML)	$\langle l \rangle$ (a_{Cr})	Δ (ML)	VR: Σi	Ref.
Epi. Fe	293	8	10	1.37	5	diese Arbeit
Epi. Fe	523	8	25	1.01	4	diese Arbeit
Fe Whisker	323	5	12	0.86	4	[92]
Fe Whisker	488	5	70	0.47	3	[92]
Fe Whisker	573	5	260	–	2	[92]

Tabelle 6.2: Vergleich der Oberflächenstrukturen von dünnen Cr-Filmen. Die Substrattemperatur während der Schichtpräparation wird durch T_S angegeben, d gibt die aufgedampfte Schichtdicke an, $\langle l \rangle$ steht für die mittlere Terrassenlänge, Δ für die Rauhtiefe, VR steht für vertikale Rauigkeit und gibt die Anzahl der offenen Lagen an. Für $\langle l \rangle$ wurde der in dieser Arbeit direkt aus den Profilen bestimmte Wert verwendet ohne eine Insellängenverteilung zu berücksichtigen.

den hier bestimmten Werten ermittelt wurden. Insgesamt läßt sich feststellen, daß das Wachstum der Cr-Schichten auf Fe-Whiskern zu glatteren Oberflächen führt als das Wachstum von Cr auf den hier verwendeten epitaktischen Schichten. Ein gravierender Unterschied tritt jedoch erst bei Substrattemperaturen $T_S > 450$ K auf.

Wie kann nach der Oberflächenstrukturanalyse erklärt werden, daß bei der hohen Substrattemperatur keine RHEED-Wachstumsoszillationen beobachtet wurden? Die beobachteten Terrassenstrukturen und die ermittelten Rauheitsparameter schließen schlechtes Wachstum als Ursache aus. Wesentlich ist hier der Einfluß des Detektors, der die Transferweite auf ≈ 10 nm absenkt [98]. Die Wachstumsoszillationen werden beobachtet, indem die Intensitätsänderung des (00)-Reflexes aufgezeichnet werden. Dabei wird über den Reflex integriert, so daß das Auflösungsvermögen – Transferweite – reduziert wird [98]. Eine experimentelle Bestimmung der Transferweite ist schwierig, die Theorie der Wachstumsoszillationen ist hierzu noch nicht genügend ausgereift.

6.5 Präparation und Oberflächenstruktur von Ag-Filmen

Auf die epitaktischen Fe-Schichten wurden Ag-Filme gedampft. Dazu wurden auf 10 ML dicken Fe-Schichten Ag-Filme bei $T_S = 293$ K und bei $T_S = 353$ K der Dicke $d_{\text{Ag}} = 5, 10$ und 15 ML gedampft. Während des Schichtwachstums konnten keine RHEED-Oszillationen beobachtet werden. Da die Substrattemperaturen den Schluß auf ideales Schichtwachstum nicht erlauben, muß auf schlechtes Schichtwachstum geschlossen werden.

Diese Vermutung bestätigt sich bei der LEED-Analyse. Die HWB des zentralen Reflexes beträgt in der In-Phase-Bedingung ca 3 %, woraus eine Transferweite von $t \approx 33a_{\text{Fe}}$ folgt. Abb. 6.23 zeigt ein LEED-Muster einer 10 ML dicken Ag-Schicht, die bei $T_S = 293$ K aufgedampft worden ist. Die Reflexe sind stark verbreitert, es wird kein Ring beobachtet. Aus den Reflexprofilen wird die HWB in Gegenphase zu HWB = 30 % bestimmt, welches einer mittleren Inselgröße von $\langle l \rangle = 3 a_{\text{Ag}}$ entspricht. Da kein Ring beobachtet wird, muß von einer geometrischen Verteilung der Insellängen ausgegangen werden. Wegen der großen Rauigkeit ist die $G(S)$ -Analyse mit einem großen Fehler behaftet und kann für diese Substrattemperatur lediglich abgeschätzt werden. Die Anzahl der sichtbaren Lagen ist größer als 6, die Rauhtiefe $\Delta > 3.00$ ML.

Eine glattere Oberfläche, die zu einem ringartigen LEED-Reflex führt, wird nach der Ag-Schichtpräparation bei $T_S = 353$ K beobachtet. Aus dem Ringdurchmesser folgt eine mittlere Terrassenlänge von $\langle l \rangle \approx 12 a_{\text{Fe}}$, die Relation HWB des Ringes zu seinem Radius ist derjenigen der Fe-Schichten vergleichbar, woraus eine ähnliche Verteilungsfunktion der Terrassenlängen folgt. Die $G(S)$ -Analyse zeigt aber auch hier, daß die Oberfläche sehr rauh ist: bei einer Gesamtschichtdicke von 10 ML werden 5 offene Lagen festgestellt. Die Rauhtiefe beträgt $\Delta = 2$ ML. Entgegen der Annahme, daß das Wachstum von Ag auf Fe wegen der das Wachstum begünstigenden Oberflächenenergie zu glatten Oberflächen führt, muß hier klar festgestellt werden, daß die Ag-Oberflächen sehr rauh sind (vgl. Kap. 5.1).

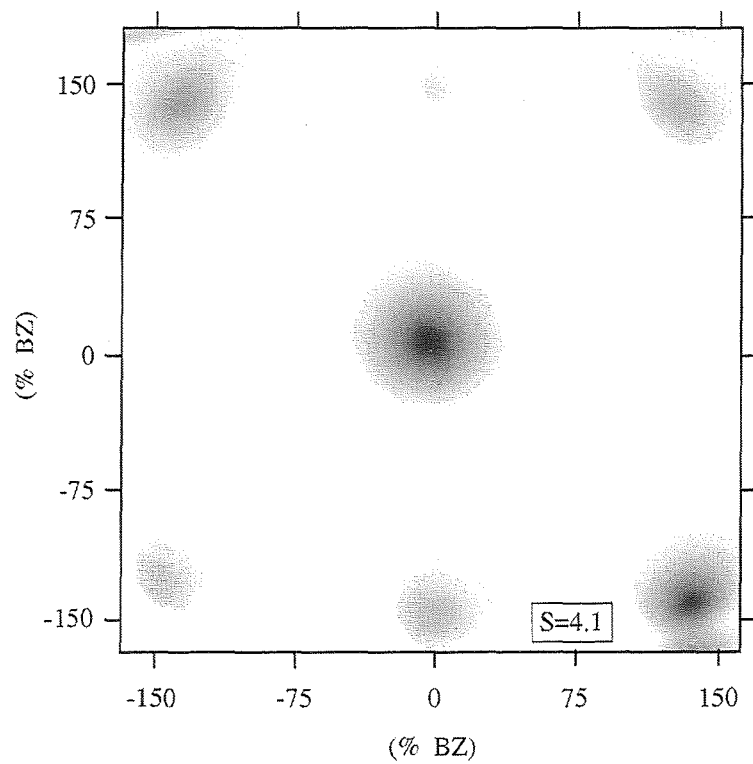


Abbildung 6.23: Das LEED-Muster einer 10 ML dicken Ag-Schicht, die bei $T_S = 293$ K auf eine 10 ML dicke Fe-Schicht aufgedampft wurde, zeigt sehr stark verbreiterte Reflexe, die für schlechtes Wachstum typisch sind

7 Untersuchung der Grenzflächenstruktur

Bisher wurden die statistischen Rauigkeitsparameter der einzelnen Schichten systematisch analysiert. Wie wirkt sich aber eine Stufe in der Fe-Schicht auf die darüberliegende Cr-Schicht aus? Wenn aus der Stufe im Fe gleichfalls eine Stufe im Cr resultiert, so ändert sich die Zwischenschichtdicke nicht. Andernfalls erhöht oder verringert sich die Zwischenschichtdicke um einen Lagenabstand. Die Änderung um einen Lagenabstand kann bereits das Vorzeichen der Austauschkopplung umkehren! Diese Fluktuationen der Zwischenschichtdicke können jedoch prinzipiell nicht mit den Methoden der Oberflächenphysik untersucht werden.

Interdiffusion an den Grenzflächen kann ebenfalls zu Schichtdickenfluktuationen führen. Zusätzlich kann das magnetische Verhalten des Fe stark verändert werden. Beide Effekte können ebenfalls nicht oder nur sehr unzureichend mit den bisher verwendeten Meßmethoden untersucht werden.

Diese Fluktuationen werden mit Röntgendiffraktometrie untersucht; weiter wurden Ergebnisse der Konversions-Elektronen-Mößbauer-Spektroskopie in die Analyse einbezogen.

7.1 Rauigkeitsparameter

Zunächst werden die Parameter σ und ξ eingeführt, die zur Beschreibung der Rauigkeit benötigt werden. Dabei beschreibt die Standardabweichung $\sigma = \sqrt{\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2}$ die mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert $\langle z \rangle$. Experimentell hat sich eine Gaußverteilung zur Beschreibung der Abweichungen vom Mittelwert bewährt. Die Standardabweichung σ gibt dann die HWB dieser Gaußverteilung an (vgl. Abb. 7.1).

Der Parameter ξ ist ein Längenmaßstab für die Korrelation der beiden Grenzflächen. Dabei müssen sowohl ξ und als auch σ in zwei Anteile zerlegt werden, nämlich einen Anteil für die korrelierte Rauigkeit ξ^C (σ^C) und einen Anteil für die

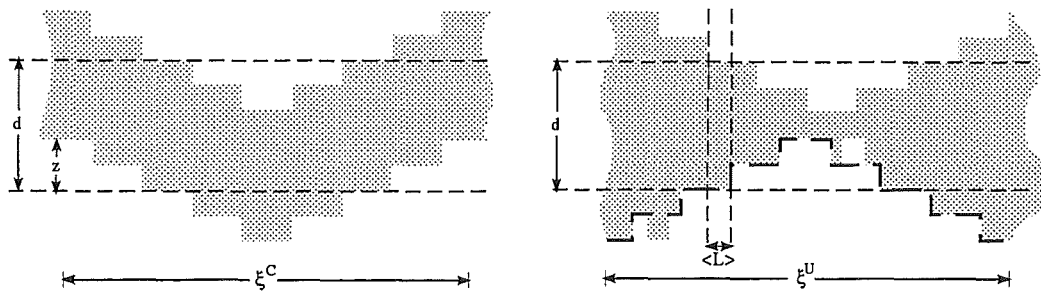


Abbildung 7.1: Schematischer Querschnitt durch eine Dreifachschicht. Sind die Grenzflächen streng korreliert, so ändert sich die Zwischenschichtdicke nicht (links). Bei geringer Korrelation dagegen ändert sich die Zwischenschichtdicke (rechts). Als Näherung wird angenommen, daß im Falle korrelierter Grenzflächen ξ^C dem Abstand zweier Maxima entspricht, im Falle geringer Korrelation ξ^U . Die Standardabweichung σ^C bzw. σ^U ist ein Maß für die Abweichung vom Mittelwert. Im Fall der unkorrelierten Rauigkeit (rechts) wird zur Abschätzung die gestrichelte Linie verwendet.

unkorrelierte Rauigkeit ξ^U (σ^U). Die korrelierte Rauigkeit ändert die Dicke der Zwischenschicht nicht, die unkorrelierte Rauigkeit führt dagegen zu einer Änderung der Zwischenschichtdicke.

Für die Zwischenschichtkopplung ist die entscheidende Größe die mittlere Länge L , für die eine konstante Dicke der Zwischenschicht angenommen werden kann. Die Länge L ergibt sich aus σ^U und ξ^U (vgl. Abb. 7.1). Nimmt man eine regelmäßige Stufenfolge der Grenzfläche entsprechend der Oberflächenanalyse mit $\sigma = 1$ an, so gibt es demnach 5 ($= \langle z \rangle \pm 2\sigma$) verschiedene Zwischenschichtdicken. Diese 5 verschiedenen Dicken verteilen sich im Abstand ξ^U zweier Maxima auf etwa 8 Bereiche. Die mittlere Terrassenlänge kann dann zu $\xi^U/8$ abgeschätzt werden, die sich durch die zweite Grenzfläche auf

$$\langle L \rangle = \frac{\xi^U}{16} \quad (7.1)$$

halbiert, wobei keine Korrelation zwischen den beiden Grenzflächen angenommen wird.

7.2 Röntgendiffraktometrie

Die Vorteile der Röntgendiffraktometrie sind ähnlich den Vorteilen der LEED-Elektronenbeugung: Statistische Parameter wie mittlere Schichtdicke und Kohärenzlänge

können entweder direkt aus den Beugungsdaten entnommen oder durch numerische Anpassung bestimmt werden. Gegenüber Elektronen besitzen Röntgenstrahlen eine höhere Eindringtiefe, so daß der Strahl nicht nur an der Oberfläche sondern in der gesamten Schicht gebeugt wird.

Für die Röntgenbeugung wurden spezielle Proben hergestellt: Auf dem Ag-Puffer wurde anstelle eines Fe/Cr/Fe-Dreischichtsystems ein Fe/Cr-Mehrschichtsystem mit 5 bzw. 9 Wiederholungen der Schichtfolge Fe/Cr präpariert¹, sogenannte Übergitter. Für die einzelnen Fe- und Cr-Schichten wurden konstante Dicken gewählt, und zwar betrug die Dicke der Fe-Filme 5 nm (≈ 35 ML), diejenige der Cr-Filme bei der ersten Probenserie 0.9 nm (≈ 6.25 ML), bei der zweiten Probenserie 1.7 nm (≈ 11.8 ML). Eine Probenserie wurde bei einer Substrattemperatur von $T_S = 293$ K hergestellt, die im weiteren als niedrige Präparationstemperatur bezeichnet wird. Bei dieser Temperatur wird auf Keilproben nur eine lange Oszillationsperiode der Austauschkopplung beobachtet. Eine zweite Probenserie wurde bei $T_S = 523$ K hergestellt. Dies entspricht derjenigen Substrattemperatur, die zur Präparation von Proben verwandt wird, bei denen sowohl eine kurze als auch eine lange Oszillationsperiode der Kopplung beobachtet wird. Im weiteren werden diese Proben als bei hohen Substrattemperaturen hergestellte Proben bezeichnet.

Generell lassen sich Ergebnisse, die an Vielfachschichten erzielt wurden, nur mit Einschränkung auf Doppelschichten übertragen. Eine statistische Aufräuhung der Grenzflächen von Vielfachschichten mit zunehmender Schichtdicke nach Gl. 6.7 sollte vernachlässigt werden können, da die Oberflächenenergien und Gitterkonstanten von Fe und Cr sehr gut übereinstimmen (vgl. Kap. 5.1). Bestätigt wird diese Annahme dadurch, daß die hier gemessenen Rauigkeitsparameter für 5 und für 9 Wiederholungen der Fe/Cr-Schichtung innerhalb der Fehlergrenzen übereinstimmen.

A. SCHREYER² (Inst. für Experimentalphysik, Universität Bochum) untersuchte die Grenzflächenstruktur dieser Fe/Cr-Schichten mittels Röntgendiffraktometrie [38, 99]. Es wurde eine Röntgenquelle mit rotierender Anode und hoher Strahlintensität eingesetzt, wobei CuK_α - und MoK_α -Strahlung verwendet wurde.

Röntgenspektren wurden unter verschiedenen Einstrahlbedingungen aufgenommen. Durch numerische Anpassung kann aus dem spekulären Signal die Standard-

¹Wegen des schlechten Wachstums von Ag auf Fe wurden keine Fe/Ag-Schichten zum Studium der Grenzflächen eingesetzt (vgl. Kap. 6.5).

²Die hier dargestellten Ergebnisse folgen aus der Auswertung von A. Schreyer [99]. Eine ausführliche Darstellung der zugehörigen Theorie findet sich bei Warren [100].

abweichung σ bestimmt werden, die ein quantitatives Maß für die Variation der Schichtdicke ist. Für die hohe Substrattemperatur wurde $\sigma_{523K} \approx 2.5 \pm 0.5$ ML ermittelt, für die niedrige Substrattemperatur $\sigma_{293K} \approx 0.7 \pm 0.5$ ML.

Auf den ersten Blick ein unerwartetes Bild: Diejenigen Schichten, die bei der niedrigeren Präparationstemperatur hergestellt worden sind, scheinen glattere Grenzflächen zu besitzen als diejenigen Schichten, die bei der höheren Temperatur hergestellt worden sind. Jedoch muß berücksichtigt werden, daß die Standardabweichung σ sowohl die korrelierte als auch die unkorrelierte statistische Schichtdickenabweichung enthält [99]. Die tatsächliche Schichtdickenvariation wird nur durch den unkorrelierten Anteil σ^U der Standardabweichung beschrieben. Wird im Falle der hohen Substrattemperatur ein großes σ^C angenommen, so erklärt dies den Unterschied in den experimentell ermittelten σ . Im weiteren wird die Größe σ^U des unkorrelierten Anteils abgeschätzt.

Mit Hilfe der Austauschkopplung kann $\sigma^U \leq 1$ ML abgeschätzt werden. Antiferromagnetische Kopplung setzt unabhängig von der Präparationstemperatur bei einer Cr-Schichtdicke $d_{Cr} \geq 4$ ML ein. Demnach muß bei einer mittleren Bedeckung von 4 ML die Cr-Schicht weitestgehend geschlossen sein, da kleinste Fe-Brücken sofort zu einer ferromagnetischen Kopplung führen würden. Bei 4 ML wäre der größte akzeptable Wert etwa $\sigma^U = 1$ ML. Aus diesem Wert von σ^U folgt, daß 95 % der Zwischenschicht innerhalb einer Dickenvariation von ± 2 ML um den Mittelwert streuen.

Darüber hinaus wird angenommen, daß $\sigma_{523K}^U \leq \sigma_{293K}^U$ gilt. Diese Annahme ergibt sich aus folgenden Argumenten:

1. **Oberflächenstruktur:** Mit wachsender Substrattemperatur T_S konnte eine Abnahme der Oberflächenrauigkeit nachgewiesen werden (vgl. Tab. 6.2). Die Breite der unkorrelierten Schichtdickenverteilung σ^U kann als monotone Funktion der Inselgrößen angenommen werden. Demnach sollte σ^U mit wachsender Inselgröße abnehmen, so daß bei erhöhter Substrattemperatur wegen der größeren Inseln größere Bereiche homogener Zwischenschichtdicke entstehen sollten.
2. **Oberflächendiffusion:** Das Schichtwachstum von epitaktischen Schichten wird wesentlich durch das Verhältnis von Diffusionskoeffizient zum Fluß der ankommenden Atome bestimmt. Ist der Diffusionskoeffizient klein gegenüber

dem Fluß, so bleiben die auf dem Substrat ankommenden Atome auf denjenigen Plätzen, an denen sie „angekommen“ sind. Die Folge ist statistisches Wachstum; die Oberfläche rauht „kinetisch“ auf, und die Korrelation zwischen Substrat und Schichtoberfläche wird mit zunehmender Schichtdicke schlechter [101]. Bei niedrigen Substrattemperaturen $T_S = 293$ K ist der Diffusionskoeffizient bei Homoepitaxie³ von Fe auf (001)-Fe um mehrere Größenordnungen kleiner als bei $T_S = 523$ K [44].

3. **RHEED-Oszillationen:** Bei $T_S = 293$ K werden RHEED-Oszillationen während des Wachstums beobachtet, bei $T_S = 523$ K nicht. Da die Oberflächenrauigkeit bei der höheren Wachstumstemperatur sowohl bei Fe als auch bei Cr kleiner ist als bei der niedrigen Temperatur (vgl. Tab. 6.2), kann hier das Fehlen der RHEED-Oszillationen auf sehr gutes, lagenweises Aufwachsen des Cr zurückgeführt werden („Step-Flow-Growth“).

Neben diesen strukturellen Argumenten ist die Interdiffusion von Fe und Cr an den Grenzflächen wichtig. Mittels Konversions-Elektronen-Mößbauer-Spektroskopie (CEMS) wurde die Interdiffusion in Abhängigkeit von der Aufdampftemperatur an Fe/Cr-Schichten untersucht, die auf einem ähnlichen Schichtaufbau präpariert wurden [90]. Als Substrat wurde (001)-MgO verwendet, auf das nach Aufdampfen einer Fe-Keimschicht eine 50 nm dicke Ag-Pufferschicht aufgebracht wurde. LEED- und RHEED-Beugungsreflexe sind mit denjenigen aus dieser Arbeit vergleichbar. Die Auswertung der CEMS-Spektren ergab folgende Ergebnisse:

- Unabhängig von der Substrattemperatur wurde eine Breite der Durchmischungszone zwischen Fe/Cr von 1-2 ML aus den Spektren bestimmt.
- Wächst Fe auf Cr auf, so ist die Interdiffusion größer als im umgekehrten Fall.
- In den CEMS-Spektren ist der durch paramagnetisches Fe erzeugte Signalanteil bei denjenigen Proben, die bei der niedrigen Substrattemperatur hergestellt wurden, nur halb so groß wie bei Proben, die bei der hohen Substrattemperatur hergestellt worden sind.
- Zur strukturellen Auswertung wurde ein einfaches Legierungsmodell angenommen und die resultierenden Mößbauerspektren an die gemessenen Spektren an-

³Wegen der ähnlichen Oberflächenenergien von Fe und Cr kann dieses Resultat in erster Näherung auch auf die Heteroepitaxie von Fe und Cr übertragen werden (vgl. Kap. 5.1).

gepaßt. Bei der niedrigeren Substrattemperatur $T_S = 293$ K ergab die Anpassung, daß es nur kleine zusammenhängende Fe-Bereiche gibt, die nicht größer als $10a_{Fe}$ sind. Die Auswertung der CEMS-Spektren von Proben, die auf GaAs mit Fe-Keimschicht und Ag-Pufferschicht hergestellt worden waren, ergaben geringfügig bessere Werte.

- Nimmt man eine regelmäßige Stufung der Oberfläche an wie sie hier beobachtet wurde und berücksichtigt die mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle \approx 6a_{Fe}$ (vgl. Kap. 6.2.1), so kann die Diffusion zwischen Fe und Cr im Rahmen dieses Legierungsmodells bei $T_S = 293$ K vernachlässigt werden. Dagegen existieren bei $T_S = 473$ K andere Bedingungen: Hier sind die gemessenen Terrassenlängen erheblich größer $\langle l \rangle \approx 15a_{Fe}$. Daher führt hier Interdiffusion zu einer Aufrauung der Schicht.

Daher wird σ^U für beide Präparationstemperaturen abgeschätzt zu: $\sigma_{523K}^U \leq \sigma_{293K}^U \approx 1$ ML. Die unkorrelierten Rauigkeiten sind annähernd gleich, jedoch lassen die Präparationstemperaturen den Schluß zu, daß die Ursachen für diese unkorrelierte Rauigkeit verschieden sind. Bei niedrigem T_S wird die unkorrelierte Rauigkeit im wesentlichen durch eine kinetische Aufrauung verursacht. Bei hohem T_S dagegen führt die Oberflächendiffusion zu großen, korrelierten Oberflächenstrukturen. Die Interdiffusion an den Grenzflächen führt hingegen zu einer unkorrelierten Rauigkeit. Im Fall der Präparation bei $T_S = 293$ K bedeutet dies, daß nahezu die gesamte Grenzflächenrauigkeit unkorreliert ist $\sigma = \sigma^U$. Für $T_S = 523$ K ergibt sich zusätzlich ein großer Anteil an korrelierter Rauigkeit $\sigma = \sigma^U + \sigma^C$.

Als nächstes wurden die Korrelationslängen ξ^C bzw. ξ^U aus den Röntgendaten ermittelt (vgl. Abb. 7.1) [99] [102]. Für die ξ^C wurde dabei unabhängig von der Präparationstemperatur ein Wert von $\xi_{523K}^C = \xi_{293K}^C \approx 200$ nm bestimmt. Der Abstand zweier unkorrelierter Maxima der Cr-Schichtdicke ξ^U lag bei der hohen Substrattemperatur vergleichbar zum Wert der ξ^C : $\xi_{523K}^U = 200$ nm. Bei der niedrigen Präparationstemperatur ergab sich dagegen ein wesentlich geringerer Wert mit $\xi_{293K}^U \approx 5$ nm, wobei dieser Wert nur eine grobe Abschätzung darstellt. Es läßt sich aber festhalten, daß sich die ξ^U in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur um mindestens eine Größenordnung unterscheiden.

Das ursprüngliche Ziel, die mittlere Länge $\langle L \rangle$ eines Bereichs mit konstanter Zwischenschichtdicke abzuschätzen, kann nun durch Auswertung der σ^U und der ξ^U erreicht werden. Unter Vernachlässigung der Grenzflächeninterdiffusion wird eine re-

gelmäßige Stufung der Grenzflächen angenommen, wie dies für die Oberflächen in der LEED-Strukturanalyse ermittelt wurde. Mit $\sigma^U \approx \pm 1$ ML ergibt sich eine Variation an beiden Grenzflächen um etwa ± 2 Lagen. Die gesamte Anzahl unterschiedlicher Schichtdickenbereiche beträgt dann 16. Die mittlere Länge $\langle L \rangle$ resultiert nach Gl. 7.1 als Quotient von Abstand der Maxima und Gesamtzahl der verschiedenen Schichtdickenbereiche: $\langle L \rangle = \xi^U / 16$. Für $T_S = 523$ K wird $\langle L \rangle$ berechnet zu $\langle L \rangle_{523K} \approx 12.5 \text{ nm} \approx 45a$, entsprechend folgt $\langle L \rangle_{293K} \approx 0.33 \text{ nm} \approx 1a$.

8 Einfluß von Struktur und von paramagnetischen Einschlüssen auf die Zwischenschichtkopplung

In diesem Kapitel wird der Einfluß des Schichtwachstums und der Grenzflächenstruktur auf die Zwischenschichtkopplung untersucht. Dazu wird zunächst eine phänomenologische Beschreibung der Zwischenschichtkopplung eingeführt.

Dann werden die Oberflächen- und die Grenzflächenstrukturen, die in den vorangegangenen Kapiteln bestimmt worden waren, dazu verwandt, den Einfluß der Rauigkeit auf die Oszillationsperiode und auf die Amplitude der Kopplung zu untersuchen.

Theoretische Modelle führen die biquadratische Kopplung auf Grenzflächendefekte oder auf paramagnetische Einschlüsse zurück. Im folgenden Abschnitt werden diese Modelle experimentell überprüft.

8.1 Phänomenologische Beschreibung der Zwischenschichtkopplung

Wird nur ein kleiner Bereich der Probe betrachtet, so kann eine homogene Magnetisierung dieses Bereichs vorausgesetzt werden. Die statischen magnetischen Eigenschaften des Schichtsystems können dann mit den Magnetisierungen M_1 und M_2 beschrieben werden [103].

Bei ferromagnetischer Kopplung sind die beiden Schichtmagnetisierungen M_1 und M_2 parallel angeordnet. Bei antiferromagnetischer Kopplung wird ohne äußeres Feld eine spontane, antiparallele Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen M_1 und M_2 beobachtet.

Aus der Analyse des Ummagnetisierungsprozesses kann die Art und die Stärke der

Zwischenschichtkopplung bestimmt werden. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 8.1 die vier typischen Ummagnetisierungskurven für eine Doppelschicht schematisch dargestellt, wobei eine identische Dicke der ferromagnetischen Schichten vorausgesetzt wird. Zur Vereinfachung der Rechnung wird angenommen, daß die Magnetisierungen ohne äußeres Feld wegen der Kristallanisotropie in leichter Richtung liegen. Das äußere Feld wird entlang einer leichten Achse angelegt und diejenige Komponente der Nettomagnetisierung aufgetragen, die parallel zum äußeren Feld liegt.

Abb. 8.1 (a) zeigt eine schematische $M(H)$ -Kurve einer ferromagnetisch gekoppelten Doppelschicht, aufgenommen in leichter Richtung. Die Rechteckform der Kurve unterscheidet sich nicht von einer Magnetisierungskurve einer Einzelschicht. Die Kopplungsstärke von ferromagnetisch gekoppelten Schichten kann daher nicht direkt mit Ummagnetisierungskurven bestimmt werden. Die Stärke der ferromagnetischen Kopplung kann entweder durch Brillouin-Lichtstreuung [11] oder durch spezielle Probengeometrien mit Ummagnetisierungskurven bestimmt werden [104]. Die Ummagnetisierungskurve einer antiferromagnetischen Doppelschicht ist in Abb. 8.1 (b) schematisch dargestellt. Ohne äußeres Feld ($H = 0$) kompensieren sich die magnetischen Momente, in Remanenz verschwindet die Nettomagnetisierung. Wird ein äußeres Feld H angelegt und die Feldstärke bis zur Sättigung erhöht, so ergeben sich deutliche Unterschiede in der Kurvenform verglichen mit einer ferromagnetisch gekoppelten Schicht. Erst oberhalb der Sättigungsfeldstärke H_S ist das angelegte Feld stärker als die Zwischenschichtkopplung, und die Magnetisierungen M_1 und M_2 sind parallel zueinander ausgerichtet. Die Sättigungsfeldstärke kann als direktes Maß für die Stärke der antiferromagnetischen Kopplung verwendet werden. Abb. 8.1 (c) zeigt eine schematische Ummagnetisierungskurve einer biquadratisch gekoppelten Doppelschicht. Die Nettomagnetisierung in Remanenz beträgt $\pm M_S/2$ in Richtung des vorher angelegten Feldes. Wiederum wird ein Feld der Stärke H_S benötigt, um die Schicht zu sättigen. Innerhalb des Feldintervalls $\pm H_S$ liegt dabei jeweils eine Schicht parallel zum angelegten Feld und eine Schicht senkrecht zum angelegten Feld. Daher resultiert in Remanenz eine Magnetisierung von $\pm M_S/2$. Gleichzeitiges Auftreten von antiferromagnetischer und biquadratischer Kopplung führt zu der in Abb. 8.1 (d) dargestellten Form einer $M(H)$ -Kurve sofern die antiferromagnetische Kopplung stärker ist als die biquadratische Kopplung.

Diese Interpretation der Ummagnetisierungskurven wurde durch systematische Untersuchungen des Ummagnetisierungsprozesses und der Domänenstruktur mit Hilfe des Kerr-Mikroskops bestätigt [3]. Das Verhältnis von Kristallanisotropie zur

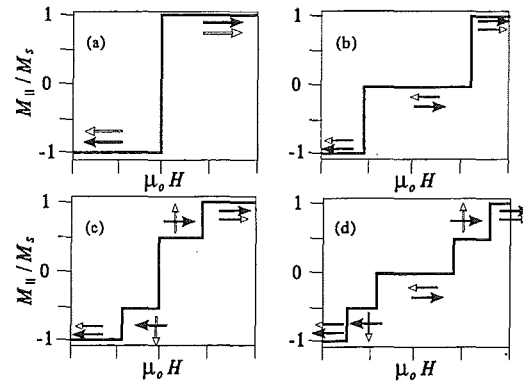


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung der vier Ummagnetisierungskurven von austauschgekoppelten Doppelschichten. Die ferromagnetischen Schichten besitzen die gleiche Dicke, die Zwischenschichtkopplung ist schwächer als die Kristallanisotropie.

- (a) ferromagnetische Kopplung
- (b) antiferromagnetische Kopplung
- (c) biquadratische Kopplung
- (d) antiferromagnetische Kopplung mit einem Beitrag von biquadratischer Kopplung

Kopplungsstärke bestimmt den Ummagnetisierungsprozeß. Aus der Kristallanisotropiekonstanten k_1 kann das zugehörige Anisotropiefeld $H_k = 2k_1/M_S$ berechnet werden. Im Fall starker Kopplung gilt $H_S > H_k$, der Ummagnetisierungsprozeß verläuft dann über eine Drehung der Schichtmagnetisierungen in Richtung des angelegten Feldes. Im Fall schwacher Kopplung $H_S < H_k$ erfolgt die Ummagnetisierung über Domänenwandverschiebungen.

Zur phänomenologischen Beschreibung der beiden Zwischenschichtkopplungsarten wird der Energiedichtebeitrag zur Zwischenschichtkopplung pro Flächeneinheit E_J eingeführt [104]:

$$E_J = -J_1 \frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{|\mathbf{M}_1| \cdot |\mathbf{M}_2|} - J_2 \left(\frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{|\mathbf{M}_1| \cdot |\mathbf{M}_2|} \right)^2 \quad (8.1)$$

Die Parameter J_i beschreiben die Größe und die Art der Kopplung. Ein negatives J_1 entspricht antiferromagnetischer Kopplung, ein positives J_1 ferromagnetischer Kopplung. Ein negatives J_2 führt zur biquadratischen Kopplung (Abb. 8.1 (c)), wenn $|J_1| < |J_2|$ ist. Bei Kurven dieses Typs können J_1 und J_2 nicht separat bestimmt werden, da unterschiedliche Parametersätze den gleichen Kurvenverlauf ergeben. Es hat sich dann bewährt, die Summe $J = J_1 + J_2$ zu bilden, da J eindeutig den Kurvenverlauf beschreibt. Im anderen Fall $|J_1| > |J_2|$ wird antiferromagnetische

sche Kopplung mit einem Anteil von biquadratischer Kopplung beobachtet, der als zusätzliche Stufe auftritt (Abb. 8.1 (d)). Für Gl. 8.1 läßt sich auch schreiben

$$E_J = -J_1 \cos(\phi_1 - \phi_2) - J_2 (\cos(\phi_1 - \phi_2))^2 \quad (8.2)$$

wobei die ϕ_i die Winkel zwischen den Magnetisierungen der jeweiligen Schichten und der Feldrichtung angeben.

Die magnetische Gesamtenergiedichte E läßt sich als Summe der Beiträge von Kristallanisotropieenergie E_k , Zeeman-Energie des angelegten Feldes E_Z und Kopplungsenergie E_J schreiben [104]. Das Feld H wird in Schichtebene in Richtung einer leichten Achse angelegt. Die Zeeman-Energiedichte E_Z läßt sich schreiben als

$$E_Z = -\mu_0 M_S H (\cos(\phi_1) + \cos(\phi_2)) \quad (8.3)$$

mit der Sättigungsmagnetisierung M_S . Die kubische Kristallanisotropieenergie E_k kann dargestellt werden durch:

$$E_k = \frac{k_1}{4} (\sin^2(2\phi_1) + \sin^2(2\phi_2)) \quad (8.4)$$

Die Gesamtenergiedichte E wird dann geschrieben als Summe der einzelnen Beiträge:

$$\begin{aligned} E = & - \mu_0 M_S H (\cos(\phi_1) + \cos(\phi_2)) \\ & + \frac{k_1}{4} (\sin^2(2\phi_1) + \sin^2(2\phi_2)) \\ & - \frac{J_1}{d_{Fe}} \cos(\phi_1 - \phi_2) \\ & - \frac{J_2}{d_{Fe}} (\cos(\phi_1 - \phi_2))^2 \end{aligned} \quad (8.5)$$

Ummagnetisierungskurven können durch numerische Minimierung der Gesamtenergiedichte (Gl. 8.5) simuliert werden¹. Zu gewählten Parametern J_1 und J_2 wird für jeden Feldwert H das absolute Energieminimum berechnet, indem die Winkel ϕ_i variiert werden. Für jeden Feldwert H , der zwischen den beiden Sättigungsfeldwerten $-H_S$ und $+H_S$ liegt, erhält man so die Winkel ϕ_1 und ϕ_2 , die von den Schichtmagnetisierungen M_1 bzw. M_2 und dem äußeren Feld eingeschlossen werden. Die experimentelle Meßgröße M berechnet sich als in Feldrichtung weisende Komponente der Magnetisierung zu

$$\frac{M}{M_S} = \frac{1}{2} (\cos \phi_1(H) + \cos \phi_2(H)) \quad (8.6)$$

¹Eine analytische Lösung ist in der Regel nicht möglich [105].

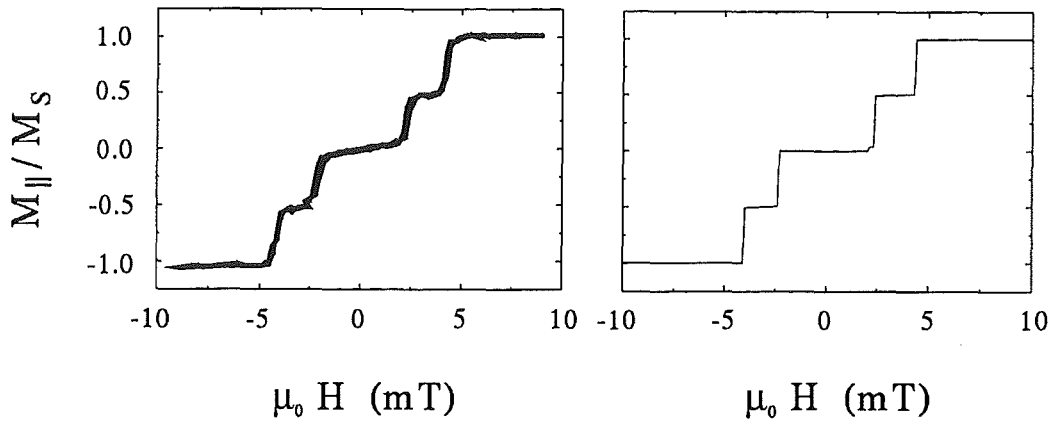


Abbildung 8.2: Gemessene (links) und berechnete (rechts) Ummagnetisierungskurve einer Fe/Ag/Fe-Doppelschicht. Die Fe-Dicke beträgt jeweils 10 ML, die Ag-Dicke 9 ML. Als Parameter wurde $J_1 = -0.008 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$ und $J_2 = -0.002 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$ ermittelt.

Die Ummagnetisierung der hier betrachteten Fe-Schichten erfolgt durch Domänenwandverschiebung [3]. Daher bestimmt das absolute Energieminimum die Lage der Magnetisierung, wenn Hystereseeffekte vernachlässigt werden können.

Abb. 8.2 zeigt eine magneto-optisch gemessene Ummagnetisierungskurve und die zugehörige berechnete Kurve einer Fe/Ag/Fe-Doppelschicht. Die Kurve wurde mit einem Programm von ACHIM FUSS berechnet. Der Verlauf der Ummagnetisierung wird gut wiedergegeben. Bei den hier untersuchten Schichtdicken ($d \leq 10 \text{ nm}$) muß die endliche Eindringtiefe des Lichtes nicht berücksichtigt werden. Die untere Schicht trägt ebensoviel wie die obere Schicht zum Signal bei.

8.2 Einfluß der Schichtdickenfluktuation auf die Oszillationsperiode und die Amplitude der Kopplung

8.2.1 Schichtsystem Fe/Cr/Fe

Mit dem in Kap. 6.1 eingeführten Präparationsverfahren wurden Fe/Cr/Fe-Schichten mit keilförmiger Cr-Zwischenschicht ($d_{\text{Cr}} = 0 - 25 \text{ ML}$) bei den Substrattemperaturen $T_S = 293 \text{ K}$ und $T_S = 523 \text{ K}$ hergestellt. Aus den magneto-optisch gemessenen Hysteresekurven von Fe/Cr/Fe-Schichten wurden durch numerische Anpassung die Kopplungsparameter J_1 und J_2 für die unterschiedlichen Wachstumstemperaturen ermittelt, wobei die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Methode verwen-

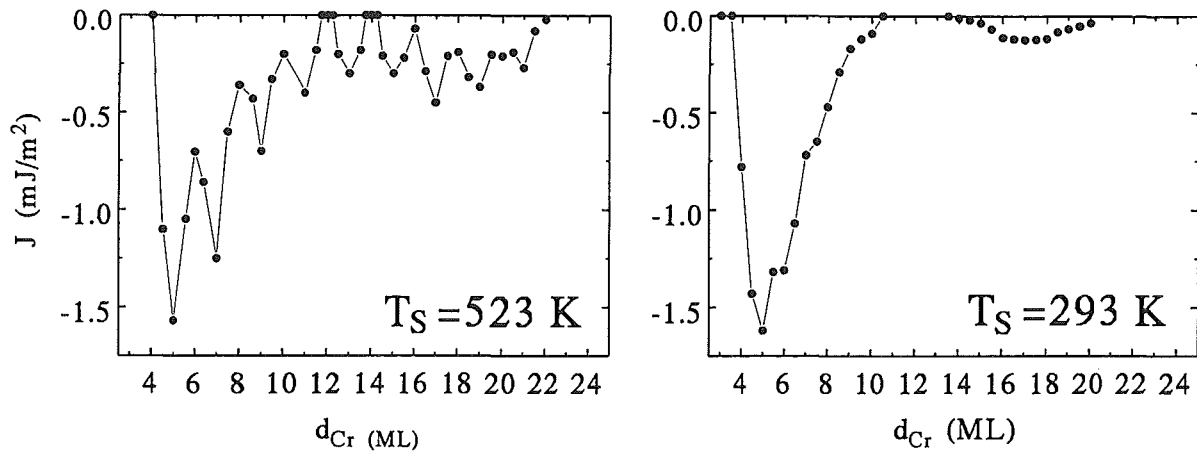


Abbildung 8.3: Die Kopplungsstärke $J = J_1 + J_2$ als Funktion der Cr-Zwischenschichtdicke. Proben, die bei der Präparationstemperatur $T_S = 523 \text{ K}$ hergestellt worden sind, zeigen zwei Oszillationsperioden. Proben, die bei $T_S = 293 \text{ K}$ hergestellt worden sind, weisen jedoch nur eine Periode auf. Die maximale Amplitude der Kopplung bleibt dagegen nahezu unverändert.

det wurde (vgl. Kap. 8.1). Da nicht für alle Schichtdicken J_1 und J_2 separat bestimmt werden können, wird zunächst $J = J_1 + J_2$ berechnet. Abb. 8.3 zeigt den Kopplungsparameter J als Funktion der Cr-Zwischenschichtdicke für beide Präparationstemperaturen.

Bei der Substrattemperatur $T_S = 523 \text{ K}$ sind zwei Oszillationsperioden der Kopplung J erkennbar, eine lange Periode mit der Länge $\Lambda_l = 12 \text{ ML}$ und eine kurze Periode mit $\Lambda_k = 2.0 \text{ ML}$. Bei der Substrattemperatur $T_S = 293 \text{ K}$ wird nur die lange Periode von J_1 mit $\Lambda_l = 12 \text{ ML}$ beobachtet. Dieser Unterschied in den Oszillationsperioden der bilinearen Kopplung als Funktion der Substrattemperatur wurde zuerst auf Fe/Cr/Fe-Schichtsystemen beobachtet, die auf Fe-Whiskern präpariert worden sind [12, 13]; dann auch bei Schichtsystemen, die den hier verwendeten Systemen auf GaAs-Substraten mit Ag-Puffer entsprechen [84].

Simulation der Grenzflächenrauigkeit

Zunächst muß ein Modell eingeführt werden, das den Einfluß der Grenzflächenrauigkeit auf die Zwischenschichtkopplung beschreibt [16, 27].

Die Grenzflächenrauigkeit führt dazu, daß neben der mittleren Dicke t der Zwischenschicht auch Schichtdicken $t - 2, t - 1, t + 1, t + 2$ vorhanden sind. Die Ver-

teilungsfunktion $p(t, n)$ beschreibt den Anteil jeder einzelnen Schichtdicke n an der Grenzfläche bei einer mittleren Dicke t . Die effektive Kopplung $J_1(t)$ bei der mittleren Dicke t wird dann als Summe der Kopplungsbeiträge $J_1^\circ(n)$ berechnet, wobei $J_1^\circ(n)$ die Kopplungsstärke einer n Monolagen dicken Schicht im idealen Fall verschwindender Rauigkeit angibt. Die einzelnen Beiträge $J_1^\circ(n)$ werden mit ihrem Flächenanteil gewichtet [92]:

$$J_1(t) = \sum_n p(n, t) J_1^\circ(n) \quad (8.7)$$

Eine oszillatorische Kopplung läßt sich nach Kap. 2.2 durch eine Überlagerung von sin-Funktionen darstellen, wobei die Perioden der Kopplung durch extremale Fermivektoren k_F bestimmt werden. Die Kopplung $J_1^\circ(n)$ für den idealen Fall kann dann näherungsweise als Summation von sin-Funktionen dargestellt werden [16, 22, 92]:

$$J_1^\circ(n) = \sum_S F_S(t) \sin(k_S t + \Phi) \quad (8.8)$$

wobei F_S eine langsam variierende, einhüllende Funktion beschreibt, $k_S = 2\pi/\Lambda$ den zugehörigen Fermivektor und Φ_S die Phase.

Im ersten Schritt muß $J_1^\circ(n)$ für den idealen Fall ohne Schichtdickenfluktuation bestimmt werden. Dazu werden nach Gl. 8.8 entsprechend den beiden Perioden zwei Funktionen verwendet. Neben der Periode unterscheiden sich die Funktionen durch ihre Einhüllenden. Im Grenzfall großer Schichtdicken ist die Einhüllende $F_S(t)$ nach Kap. 2.2 proportional zu $1/t^2$ [16]. Die kurze Oszillationsperiode entsteht durch das Extremum der Segmente der Cr-Fermiflächen, die um die Punkte Γ und H zentriert sind [28]. Diese beiden Segmente der Cr-Fermifläche „passen“ besonders gut zusammen, welches als „Nesting“-Effekt bezeichnet wird [27]. Dieser Effekt führt zu einer Verstärkung der Kopplung, so daß die Einhüllende der kurzen Oszillationsperiode proportional $1/t$ abfällt [28], was auch experimentell beobachtet wird [92, 106]. Bei der Summation von $J_1^\circ(n)$ nach Gl. 8.8 wird daher die unterschiedliche Abhängigkeit von der Zwischenschichtdicke berücksichtigt [92]:

$$J_1^\circ = \frac{1}{nd_{Cr}} A_k \sin(2\pi nd_{Cr}/\Lambda_k + \Phi_k) + \frac{1}{(nd_{Cr})^2} A_l \sin(2\pi nd_{Cr}/\Lambda_l + \Phi_l) \quad (8.9)$$

Die Oszillationsperioden $\Lambda_k = 2.0$ ML und $\Lambda_l = 12.0$ ML wurden dem experimentellen Verlauf der Kopplungskurve nach Abb. 8.3 entnommen. Die weiteren Parameter des zweiten Summanden, Amplitude $A_l = 0.5$ und Phase $\Phi_l = 1.6$, wurden so angepaßt, daß die experimentell beobachtete Kopplungskurve mit langer

Periode Λ_l nach Abb. 8.3 wiedergegeben wurde. Die Parameter $A_k = 1$ und $\Phi_k = 1.8$ wurden dem optimalen Fall der Kopplung über eine Cr-Zwischenschicht auf einem Fe-Whisker entnommen [92], wobei die Phase zur besseren Übereinstimmung mit den hier gewonnenen experimentellen Daten der kurzen Periode geringfügig variiert wurde.

Abb. 8.4 (a) zeigt den Kopplungsparameter J/J^* nach Gl. 8.9 als Funktion der Cr-Dicke einer idealen Grenzfläche ohne Rauigkeit, wobei die Kopplungsstärke auf den Wert bei der Cr-Dicke $n = 2d_{Cr}$ normiert wurde. Die kurze Periode bestimmt die Kopplung, die mit jeder zusätzlichen Cr-Monolage das Vorzeichen wechselt.

Vergleich zwischen experimenteller und theoretischer Kopplungskurve

Aus dieser Kurve für den idealen Fall wurden mittels Gl. 8.7 die Kurven für Cr-Zwischenschichten mit Dickenvariation erzeugt. Als Verteilungsfunktion $p(t, n)$ wurde eine Gaußfunktion verwendet, deren HWB σ so variiert wurde, daß die Kurven in Abb. 8.4 (b) und (c) den experimentell ermittelten Kurven (vgl. Abb. 8.3) entsprechen. Zwar enthalten die Kurven in Abb. 8.3 auch einen Anteil an J_2 , der aber in dem betrachteten Cr-Dickenintervall in erster Näherung als konstant angenommen werden kann (vgl. Kap. 8.3). Für ein qualitatives Verständnis kann eine Verbreiterung der Verteilung mit zunehmender Cr-Schichtdicke nach $\sigma = Ct^\beta$ (vgl. Gl. 6.7) vernachlässigt werden. Für die HWB $\sigma = 0.85$ ergeben sich eine kurze und eine lange Periode, für $\sigma = 1.1$ ist nur noch eine lange Periode zu erkennen. Auch Details der Kopplungskurve werden qualitativ richtig wiedergegeben: Im Schichtdickenintervall $d_{Cr} = 5 - 10$ ML oszilliert die Kopplungsstärke bei denjenigen Proben, die bei der erhöhten Substrattemperatur $T_S = 523$ K hergestellt worden sind, mit einer Periode von 2 ML, ohne jedoch das Vorzeichen zu wechseln. Im Intervall $d_{Cr} = 10 - 15$ ML ändert sich auch das Vorzeichen, d.h. die Kopplung oszilliert zwischen dem ferromagnetischen und dem antiferromagnetischen Zustand. Im Bereich $d_{Cr} = 16 - 22$ ML resultiert wiederum nur eine Oszillation der Kopplungsstärke, nicht aber des Vorzeichens.

Vergleicht man die hier erhaltenen σ mit denjenigen, die aus den Röntgendaten bestimmt wurden (vgl. Kap. 7.2), so stellt man eine zufriedenstellende Übereinstimmung fest: $\sigma_{523K} \leq \sigma_{293K} \approx 1.0 \pm 0.5$ ML. Somit kann das Auftreten von zwei bzw. nur einer Oszillationsperiode in folge der unterschiedlichen Substrattemperaturen mit den strukturellen Eigenschaften verknüpft werden.

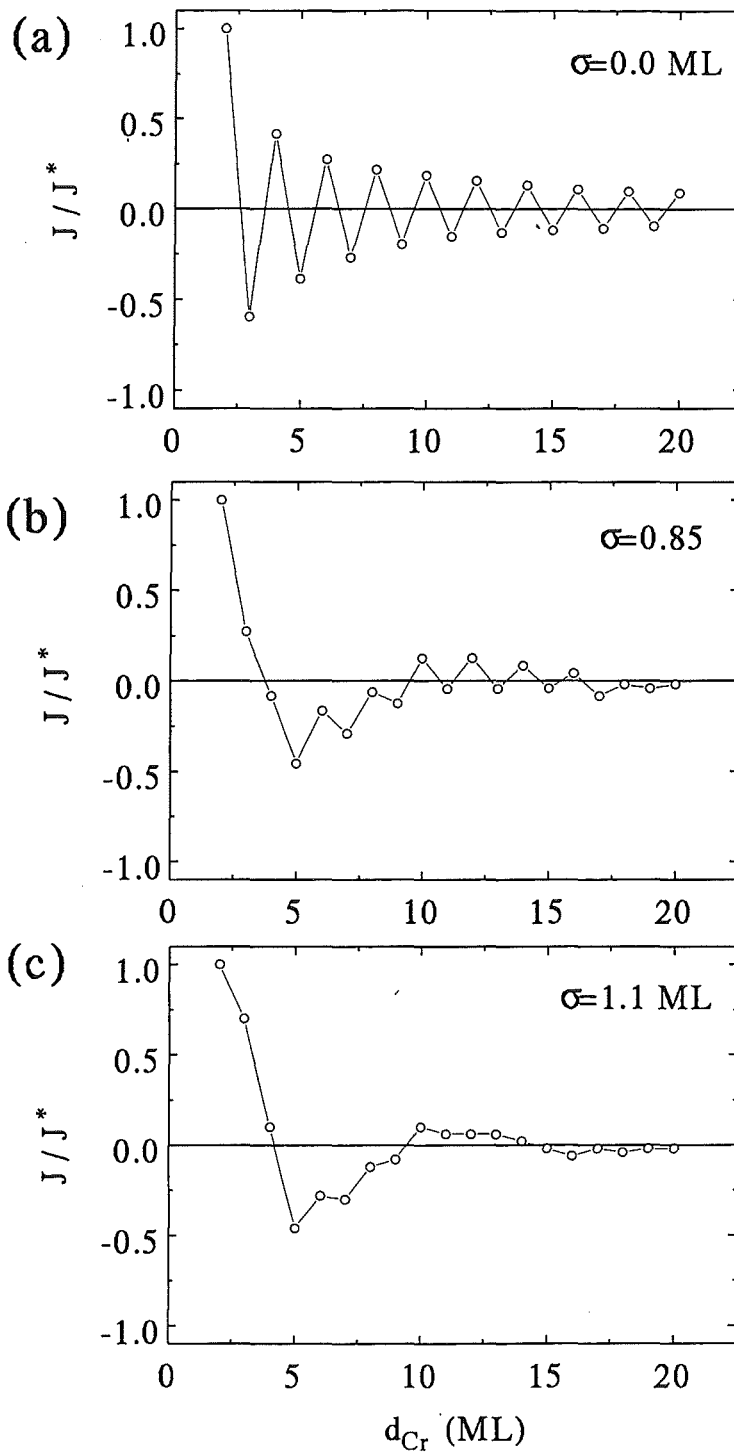


Abbildung 8.4: Die relative Kopplungsstärke J/J^* als Funktion der Cr-Dicke für unterschiedliche Breiten σ der Gaußverteilung $p(t, n)$.

(a) „ideale“ Grenzfläche $\sigma = 0$

(b) Die Breite $\sigma = 0.85$ ML erzeugt einen Verlauf von J/J^* , der dem experimentellen Verlauf einer bei $T_S = 523$ K hergestellten Probe entspricht.

(c) Entsprechend erzeugt $\sigma = 1.1$ den Verlauf der bei $T_S = 293$ K hergestellten Probe.

Die Kopplungsamplitude wird durch eine Mittelung nach Gl. 8.7 gegenüber dem „idealen“ Fall um den Faktor ≈ 10 gedämpft. Eine Dämpfung in dieser Größenordnung entspricht dem Unterschied zwischen theoretischen Rechnungen und experimentellen Ergebnissen [16]. Die maximalen Amplitudenwerte einer Gaußverteilung ergeben sich aus $1/(\sigma\sqrt{2\pi})$. Da sich die Werte von σ für die unterschiedlichen Präparationstemperaturen nicht wesentlich unterscheiden, ist auch die Dämpfung der maximalen Amplitude vergleichbar. Daher kann auch die Äquivalenz der Amplitudenwerte in Abb. 8.3 durch diese Mittelung erklärt werden.

Diskussion der Ergebnisse

Parallel zu der Arbeit an der vorliegenden Dissertation konnte eine Studie den experimentellen Nachweis des Zusammenhangs zwischen der Struktur der Oberfläche und der Periode der Kopplung bei Fe/Cr-Schichten führen [92]. Dazu wurden REMPA-Ergebnisse (Raster Elektronen Mikroskop mit Polarisations Analyse) [12] mit RTM-Oberflächenanalysen [92] kombiniert. Bei den separat durchgeführten Experimenten, REMPA und RTM, wurden Fe/Cr-Schichten auf Fe-Whiskern bei unterschiedlichen Substrattemperaturen präpariert. Mittels REMPA wurde gezeigt, daß nach Schichtpräparation bei Substrattemperaturen $T_S > 473$ K zusätzlich zu den langperiodischen Oszillationen kurzperiodische Oszillationen auftreten. Mittels RTM konnte mit wachsender Substrattemperatur eine starke Zunahme der mittleren Terrassenlängen bei gleichzeitiger Abnahme der Rauhtiefe nachgewiesen werden. Die Schichtdickenfluktuation kann direkt aus den RTM-Daten bestimmt werden, wenn die Substratoberfläche des Fe-Whiskers als „ideal“ glatt angenommen wird. Mit den aus den RTM-Bildern erhaltenen Verteilungen $p(t, n)$ wurde dann nach Gl. 8.7 die Kopplung J als Funktion der Cr-Dicke für die unterschiedlichen Substrattemperaturen berechnet. In Übereinstimmung mit den REMPA-Ergebnissen resultierten aus diesen Rechnungen eine lange Periode $\Lambda_l = 12$ ML und eine kurze Periode $\Lambda_k = 2.1$ ML, wenn die Proben bei $T_S = 473$ K und bei $T_S = 623$ K präpariert worden waren und nur eine lange Periode für die bei $T_S = 293$ K hergestellten Proben.

Die in dieser RTM-Studie erzielten Ergebnisse werden durch die vorliegende Arbeit bestätigt und ergänzt. Dabei wurde hier zusätzlich zur Oberflächenstruktur auch die Grenzflächenstruktur bestimmt und der Zusammenhang zwischen der Grenzflächenstruktur und der Oszillationsperiode der Zwischenschichtkopplung untersucht: Die hohe Substrattemperatur reduziert die Grenzflächenrauigkeit σ , und es werden

übereinstimmend zur Literatur [92] zwei Oszillationsperioden der Zwischenschichtkopplung beobachtet.

Allerdings wurde bei den auf Fe-Whiskern präparierten Fe/Cr/Fe-Schichten eine größere Periode der kurzperiodigen Oszillation von $\Lambda_k^{Fe-Whisker} = 2.1$ ML gegenüber der hier beobachteten Periode $\Lambda = 2.0$ ML festgestellt. Die etwas größere Periode führt zu einem Schwebungseffekt, aus dem ein Phasensprung der Kopplung bei $d_{Cr} = 25$ ML führt, der auch auf den auf Whisker-Schichten präparierten Systemen beobachtet wird [12]. Dieser Phasensprung der Zwischenschichtkopplung folgt auch aus der theoretischen Analyse der Cr-Fermifläche, wenn derjenige Fermivektor, der die Oszillation hervorruft, geringfügig von einem reziproken Gittervektor a_{Cr}^* abweicht. Ein solcher Fermivektor existiert an der Cr-Fermifläche, wobei sich dieser Vektor $\mathbf{Q} = 0.95 a_{Cr}^*$ zwischen den beiden Punkten Γ und H durch besonders gutes „Nesting“ auszeichnet [22]. Allerdings konnte die Theorie bisher noch nicht eindeutig nachweisen, daß genau dieser Fermivektor die kurzperiodige Oszillation hervorruft, da andere extremale Fermivektoren existieren, die zu einer kurzperiodigen Oszillation mit einer Periode von 2.0 ML führen [22].

Der Phasensprung wird bei den hier auf Ag-Puffer präparierten Fe/Cr/Fe-Schichtsystemen nicht beobachtet. Eine zweite Arbeit, die ebenfalls Fe-Whisker als Substrate verwendet, zeigt eine kurze Periode von $\Lambda = 2.0$ ML und somit auch keinen Phasensprung [108], obwohl in dieser zweiten Arbeit sehr große Terrassen der Cr-Oberfläche beobachtet wurden. Die Präparationstemperatur dieser Fe-Whisker/-Cr/Fe-Schichten betrug $T_S = 553$ K. Die Kopplung der Schichten blieb in Übereinstimmung mit den auf Ag-Puffer erzielten Ergebnissen im Intervall $d_{Cr} = 4 - 10$ ML antiferromagnetisch, nur die Kopplungsstärke oszillierte, wobei eine maximale Amplitude von $J = 1.6 \text{ mJ/m}^2$ erreicht wurde. Daher wird deutlich, daß nicht allein die Substratoberfläche entscheidend für die Periode und Stärke der Kopplung ist, sondern auch die Wahl der optimalen Substrattemperatur, die dann zu annähernd lagenweisem Wachstum mit korrelierten Grenzflächen führt. Nur an Schichten mit sehr gut korrelierten Grenzflächen, bei denen die Kopplung ihr Vorzeichen mit jeder Monolage wechselt, kann die Frage nach dem exakten Betrag der kurzen Oszillationsperiode beantwortet werden, da dort keine Störung durch Rauigkeiten auftreten.

Einfluß der Ag-Kontamination

Der Einfluß des aufschwimmenden Ag wurde untersucht, indem die Substrattemperatur während des Wachstums der ersten 6 ML Fe auf dem Ag-Puffer variiert wurde (vgl. Kap. 6.1). Die Substrattemperatur betrug $T_S = 100$ K für die erste Serie und $T_S = 293$ K für die zweite Probenserie. Anschließend wurde die Substrattemperatur bei beiden Serien auf 523 K erhöht und dann das Schichtsystem mit 24 ML Fe, einem Cr-Keil und weiteren 30 ML Fe abgeschlossen. Es zeigte sich jedoch keine Änderung der Kopplungsperiode oder der Kopplungsamplitude. Somit kann der Einfluß dieses aufschwimmenden Ag auf die Zwischenschichtkopplung vernachlässigt werden.

8.2.2 Schichtsystem Fe/Ag/Fe

Der Einfluß der Substrattemperatur auf die Kopplung über Ag-Zwischenschichten wurde durch systematische Variation der Substrattemperatur untersucht. Dazu wurden Fe/Ag/Fe-Schichtsysteme auf Ag-Pufferschichten nach drei Verfahren hergestellt:

1. Das ganze Fe/Ag/Fe-Schichtsystem wurde bei $T_S = 293$ K aufgedampft.
2. Die ersten 4 ML der ersten Fe-Schicht wurden bei $T_S = 293$ K, weitere 6 ML Fe bei $T_S = 423$ K aufgebracht; die Ag-Zwischenschicht und die zweite Fe Schicht wurden bei $T_S = 293$ K präpariert.
3. Die ersten 4 ML der ersten Fe-Schicht wurden bei $T_S = 293$ K, weitere 6 ML Fe bei $T_S = 423$ K aufgebracht; die Ag-Zwischenschicht wurde bei $T_S = 353$ K und die zweite Fe-Schicht bei $T_S = 293$ K aufgedampft.

Die Tab. 8.1 gibt eine Übersicht über die Präparationsarten und die daraus folgenden mittleren Terrassenlängen der ersten Fe-Schicht und der Ag-Zwischenschicht.

Nach diesen drei Verfahren wurden Schichtsysteme mit keilförmiger Ag-Zwischenschicht aufgedampft, wobei die Ag-Dicke $d_{Ag} = 0 - 20$ ML gewählt wurde. Anschließend wurden Ummagnetisierungskurven dieser Proben aufgenommen und die zugehörigen Kopplungsparameter J_i nach dem Verfahren aus Kap. 8.1 bestimmt. Abb. 8.5 zeigt die Kopplungsstärke als Funktion der Ag-Dicke für die drei unterschiedlichen Herstellungsverfahren.

Typ	1.Fe-Schicht	Ag-Zwischenschicht	2.Fe-Schicht	$\langle l \rangle (a_{Fe})$	$\langle l \rangle (a_{Ag})$
I	293 K	293 K	293 K	6	3
II	4 ML 293 K, 6 ML 423 K	293 K	293 K	12	4
III	4 ML 293 K, 6 ML 423 K	353 K	293 K	12	12

Tabelle 8.1: Substrattemperatur und resultierende mittlere Insellänge für die Fe/Ag/Fe-Schichten. Die mittlere Insellänge $\langle l \rangle$ bezieht sich auf die oberste Lage der ersten 10 ML dicken Fe-Schicht bzw. der 10 ML dicken Ag-Schicht.

Für alle drei Herstellungsverfahren wird oszillierende, antiferromagnetische Kopplung mit einer Periodenlänge $\Lambda_l = 5$ ML beobachtet. Dabei nimmt die Kopplungsstärke mit der Erhöhung der Substrattemperatur deutlich zu.

Das Wachstum von Ag auf Fe bei $T_S = 293$ K -Typ I- führt zu sehr rauen Schichten mit einer Rauhtiefe $\Delta > 3$ ML. Dies bedeutet, daß die Ag-Zwischenschicht ohne Berücksichtigung der Interdiffusion mindestens 7 unterschiedlichen Dicken aufweist. Schätzt man die HWB der Zwischenschichtdickenverteilung $p(t, n)$ durch diesen Wert $\Delta = 3$ ab und setzt ihn in Gl. 8.7 ein, so folgt eine Dämpfung der Austauschkopplung um den Faktor ~ 20 gegenüber dem idealen Fall. Aus der Erhöhung der Substrattemperatur resultiert nach Tab. 8.1 eine Vergrößerung der mittleren Terrassenlängen und eine Reduktion der Rauhtiefe Δ (vgl. Kap. 6.3). Im Fall des Herstellungsverfahrens III war $\Delta \approx 2.0$ ML, woraus mit dem gleichen Ansatz nach Gl. 8.7 eine um den Faktor 3 höhere Kopplungsstärke gegenüber den nach Verfahren I hergestellten Proben berechnet wird. Diese qualitativen Abschätzungen erklären die experimentell beobachtete Abhängigkeit der Kopplungsstärke von der Substrattemperatur -und damit von der Oberflächenstruktur- sehr gut.

Auf Fe-Whiskern präparierte Fe/Ag/Fe-Schichten zeigen zusätzlich zu der hier beobachteten langen Periode noch eine kurze Periode mit $\Lambda_k = 2.4$ ML [10]. Diese kurze Periode wird jedoch nur bei denjenigen Schichten beobachtet, bei denen die Ag-Zwischenschicht im Temperaturintervall $T_S = 333 - 353$ K präpariert wurde. Werden dagegen Ag-Einkristalle als Substrate verwendet [109], so wird bei Proben, die nach Verfahren I hergestellt worden sind, nur ferromagnetische Kopplung

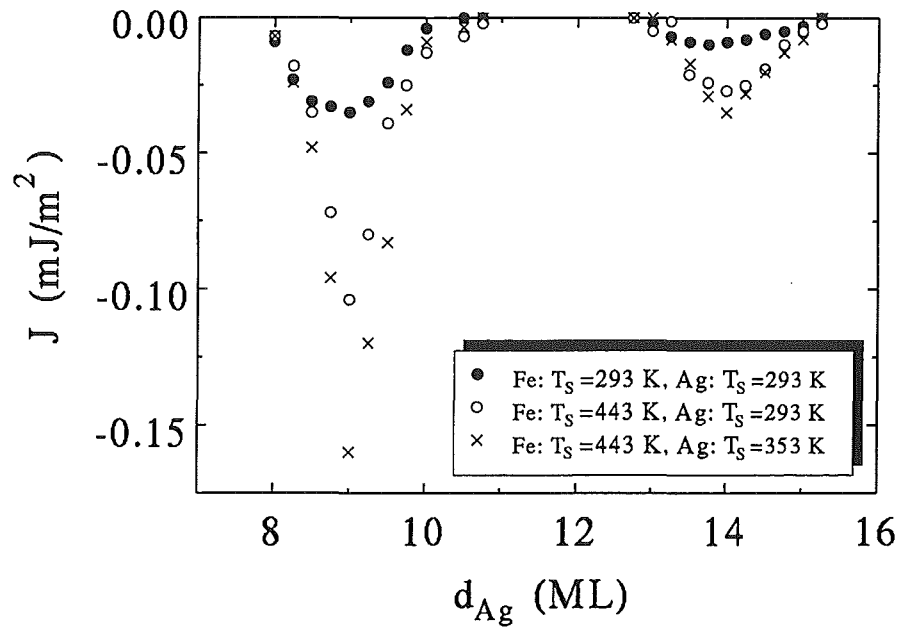


Abbildung 8.5: Die Kopplungsstärke $J = J_1 + J_2$ als Funktion der Ag-Dicke für die drei unterschiedlichen Herstellungsverfahren.

beobachtet; Proben, die nach Verfahren II präpariert wurden, zeigen dagegen antiferromagnetische Kopplung mit einer Periode von 5 ML und einer Kopplungsstärke von $J = 0.1 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$.

Sowohl die Fe-Whisker/Ag/Fe-Schichten als auch die Ag-Einkristall/Fe/Ag/Fe-Schichten zeigen ein Maximum der antiferromagnetischen Kopplung bei $d_{Ag} = 10$ ML im Gegensatz zu dem Maximum bei $d_{Ag} = 9$ ML, das bei den hier auf Ag-Puffer erzeugten Schichten beobachtet wird. Interdiffusion an den Grenzflächen kann die Angabe der absoluten Schichtdicke beeinträchtigen und diesen Unterschied erklären. So weisen CEMS-Analysen das deutliche Auftreten von Interdiffusion an den Fe/Ag- und an den Ag/Fe-Grenzflächen nach (vgl. Kap. 6.1). Diese Interdiffusion wird für die verschiedenen Substrate - sehr glatter Fe-Whisker im Vergleich zur epitaktischen Fe-Schicht - unterschiedlich stark sein und kann somit Ursache dieser unterschiedlichen Schichtdicken mit maximaler antiferromagnetischer Kopplung sein.

8.3 Biquadratische Kopplung

8.3.1 Biquadratische Kopplung durch Schichtdickenfluktuationen

Der größte Beitrag zur biquadratischen Kopplung wird durch den Fluktuationsmechanismus nach SLONCZEWSKI erzeugt [31]. Die anderen Beiträge zu J_2 reichen nicht aus, um die starke biquadratische Kopplung hervorzurufen, die bei Fe/Cr/Fe-, Fe/Cu/Fe- und Fe/Al/Fe-Schichtsystemen experimentell beobachtet wird [3, 9, 33].

Mit Hilfe der Ergebnisse der Strukturbestimmung aus Kap. 7.2 wird untersucht, ob die experimentell beobachtete biquadratische Kopplung qualitativ und quantitativ mit Hilfe dieses Fluktuationsmechanismus erklärt werden kann.

8.3.1.1 Fluktuationsmechanismus nach Slonczewski

Bei den hier untersuchten Schichtsystemen sind die typischen Längen konstanter Zwischenschichtdicke ($\approx 1 - 20$) nm kleiner als die Domänenwandbreiten (≈ 70 nm). Gleichzeitig ändert sich bei Fe/Cr-Schichten das Vorzeichen der Zwischenschichtkopplung mit jeder Variation der Zwischenschichtdicke um eine Atomlage. Das bedeutet, daß innerhalb der Austauschlänge Bereiche unterschiedlicher Kopplung vorhanden sind. Da sich aber die Magnetisierungsrichtung innerhalb einer Schicht über derart kurze Abstände nicht um 180° -den Winkel zwischen ferromagnetisch und antiferromagnetisch gekoppelten Schichten- ändern kann, erfolgt eine Mittelung über Bereiche unterschiedlicher Kopplung. Somit entsteht eine Konkurrenz zwischen der Kopplung innerhalb einer Schicht und der Kopplung zwischen den beiden Schichten. Nach SLONCZEWSKI [31] führt diese Konkurrenz der beiden unterschiedlichen Kopplungen zu einer Relaxation der Gesamtenergie, wenn sich die Schichtmomente nicht kollinear ausrichten. Ist der Betrag von J_1 bei beiden Schichtdicken nahezu gleich, entsteht eine orthogonale Anordnung der Momente.

Die biquadratische Kopplungsstärke J_2 kann in erster Näherung mit Hilfe der Kontinuumstheorie aus dem Fluktuationsmechanismus berechnet werden [31], wobei angenommen wird, daß die Länge konstanter Zwischenschichtdicke L größer ist als die Dicke der Zwischenschicht d_{Cr} . Unter der Annahme, daß die Änderung der bilinearen Kopplung J_1 zwischen den benachbarten Terrassen $2\Delta J$ betrage und die Dicke der Ferromagneten d_{Fe} sei, dann gilt [31]:

$$J_2 = -\frac{4(\Delta J)^2 L}{\pi^3 A} \coth\left(\frac{\pi d_{Fe}}{L}\right), \quad (8.10)$$

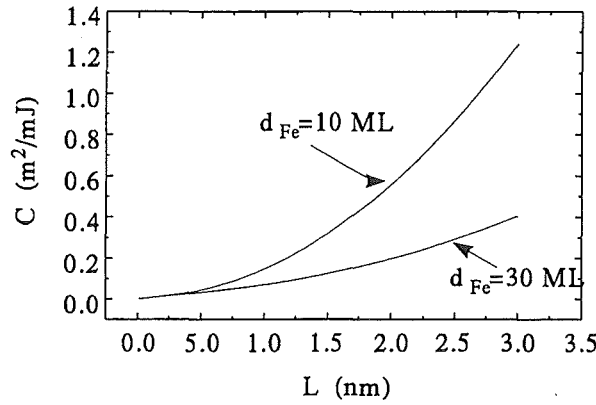


Abbildung 8.6: Der Proportionalitätsfaktor C als Funktion der mittleren Länge L für die Fe-Schichtdicken 10 und 30 ML. Die Länge L gibt den Bereich konstanter Zwischenschichtdicke an.

wobei der Parameter $A = 2 \cdot 10^{-11}$ J/m den ferromagnetischen Austausch innerhalb der Schichten beschreibt. Gl. 8.10 läßt sich schreiben als

$$J_2 = -C * (\Delta J)^2 \quad \text{mit: } C = \frac{4L}{\pi^3 A} \coth \left(\frac{\pi d_{Fe}}{L} \right) \quad (8.11)$$

Mit zunehmender Länge L wächst nach Gl. 8.10 auch die Stärke der biquadratischen Kopplung J_2 an (Abb. 8.6). Eine zunehmende Länge L steht aber für glattere Grenzflächen, so daß die Stärke der biquadratischen Kopplung bei glatten Grenzflächen größer ist als bei rauen Grenzflächen, wobei Gl. 8.10 ungültig wird, wenn $J_2 \approx \Delta J$ gilt. Die Gültigkeit von Gl. 8.10 wird durch zwei Bedingungen an die Länge L limitiert: Ist die Länge L größer als die Domänenwandbreite, so können die einzelnen Bereiche in Domänen zerfallen, die entsprechend dem Vorzeichen von J_1 gekoppelt sind. Im anderen Grenzfall der kleinen Längen L in der Größenordnung weniger Gitterkonstanten ist Gl. 8.10 nicht mehr gültig, da diese Gleichung durch Anwendung der Kontinuumstheorie abgeleitet worden ist.

8.3.1.2 Fe/Cr/Fe-Schichten mit großem L

In der Literatur finden sich für eine Reihe von Schichtsystemen Daten über J_1 und J_2 [32], jedoch keine Angaben zu experimentell bestimmten Längen L konstanter Dicke. Die Angabe von Terrassengrößen der Oberfläche [92] ist für das Wachstum und die Qualität der Schichten wichtig, zur Überprüfung des Fluktuationsmechanismus ist diese Angabe aber nicht ausreichend. Durch Diffusion an der Grenzfläche

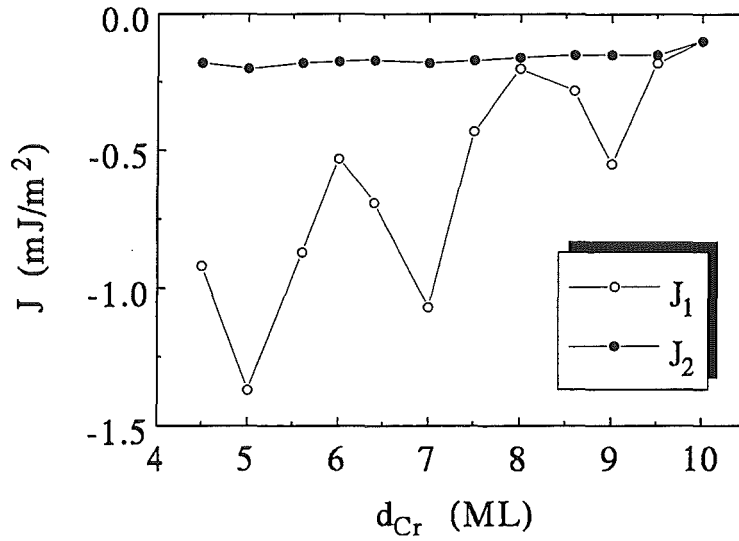


Abbildung 8.7: Die separierten Kopplungsstärken J_1 und J_2 als Funktion der Cr-Dicke. Während J_1 oszilliert, bleibt J_2 annähernd konstant.

während des Wachstums der Zwischenschicht bzw. der zweiten ferromagnetischen Schicht kann sich die Grenzflächenstruktur erheblich von der beobachteten Oberflächenstruktur unterscheiden [86]. Außerdem kann aus der Oberflächenstruktur die für die Kopplung wichtige Korrelation der Grenzflächen nicht bestimmt werden.

Abb. 8.7 zeigt die separierten Parameter J_1 und J_2 als Funktion der Cr-Zwischenschichtdicke, wobei die Fe-Dicke 30 ML betrug. Während J_1 mit den oben beschriebenen Oszillationsperioden variiert, bleibt J_2 im betrachteten Cr-Dickenintervall konstant. Die Probe wurde bei der hohen Substrattemperatur ($T_S = 523$ K) hergestellt. Berechnet man mittels Gl. 8.11 den Parameter C im Maximum der Kopplung bei $d_{Cr} = 5$ ML unter der Annahme $\Delta J \approx J_1$, so läßt sich aus Abb. 8.6 die mittlere Länge L für dieses Modell berechnen. Für den Wert $C = 0.10$ erhält man aus dem Fluktuationsmodell die mittlere Länge $L \approx 13\text{nm} \approx 45a_{Fe}$.

Mit Hilfe der Strukturanalyse war die mittlere Länge konstanter Zwischenschichtdicke zu $L_{Struktur} = 12.5$ nm bestimmt worden (vgl. Kap. 7.2). Dieser Wert stimmt sehr gut mit demjenigen Wert überein, der aus der Kopplung unter Anwendung des Fluktuationsmodells bestimmt worden ist. Somit kann die experimentell gemessene Grenzflächenstruktur die biquadratische Kopplung im Rahmen des Fluktuationsmodells sehr gut erklären.

Einschränkend muß angemerkt werden, daß das Fluktuationsmodell, so wie es hier eingeführt wurde, nur für ein Schichtsystem mit einer Dickenvariation um ± 1

ML gültig ist. Die Strukturanalyse hat jedoch gezeigt, daß die Dickenvariation größer ist und ± 2 ML beträgt. Da dadurch auch unterschiedlich starke J_1 mit wechselnden Vorzeichen an der Mittelung beteiligt werden, stellt der einfache Fluktuationsansatz nur eine Näherung dar.

Mit zunehmender Cr-Schichtdicke fällt J_1 stark ab, während J_2 konstant bleibt. Daraus würde sich nach Gl. 8.11 eine anwachsende Länge L ergeben. Dies ist aber nach der Oberflächen- und Grenzflächenstrukturanalyse nicht zu erwarten. Vielmehr ist dies wiederum ein Effekt der Rauigkeit. Durch diese wird die Austauschkopplung mit wachsender Cr-Dicke stärker gedämpft als im Fall sehr stark korrelierter Grenzflächen. Die Kopplungsstärke J_1 bei $d_{Cr} = 7$ ML fällt im Falle der rauen Grenzfläche auf die Hälfte des Wertes bei $d_{Cr} = 5$ ML ab, bei vollständiger Korrelation dagegen wird J_1 nur um ~ 10 % reduziert (vgl. Abb. 8.4).

Temperaturabhängigkeit von J_2

Im Temperaturintervall $T = 6 - 300$ K wurden Ummagnetisierungskurven aufgenommen und daraus die Kopplungsparameter J_1 und J_2 ermittelt. Bei der numerischen Anpassung wurde die Temperaturabhängigkeit der Kristallanisotropiekonstanten k_1 und der Sättigungsmagnetisierung M_S berücksichtigt. Die entsprechenden temperaturabhängigen Daten von k_1 und M_S wurden von R. MECKENSTOCK, Universität Bochum, mittels ferromagnetischer Resonanz (FMR) an 2 nm dicken Fe-Schichten ($T_S = 293$ K) gemessen [6]. Dazu wurden Fe-Proben nach dem hier verwendeten Präparationsverfahren auf Ag-Pufferschichten präpariert und für die FMR-Messungen zur Verfügung gestellt. Beide Parameter, k_1 und M_S , stimmen sehr gut mit Literaturwerten überein [6].

Die Temperaturabhängigkeit der Kopplungsparameter J_1 und J_2 ist in Abb. 8.8 dargestellt. Beide Parameter steigen in guter Übereinstimmung mit Literaturdaten [33] linear mit der Temperatur an.

Der beobachtete lineare Anstieg von J_1 mit der Temperatur läßt sich durch

$$J_1(T) = J_0 - \alpha T \quad (8.12)$$

beschreiben. Unter der Annahme $\Delta J \approx J_1$ läßt sich dann aus Gl. 8.10 die Temperaturabhängigkeit von J_2 berechnen:

$$J_2(T) = -C(J_0 - \alpha T)^2 \quad (8.13)$$

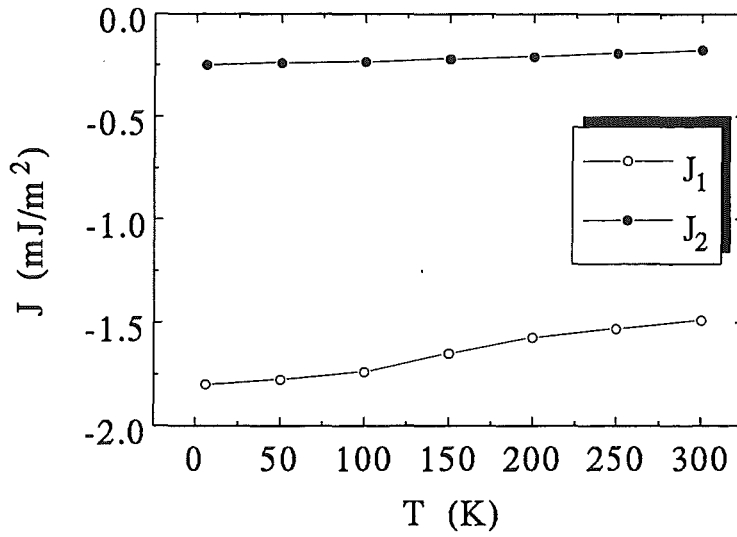


Abbildung 8.8: Die Kopplungsstärken J_1 und J_2 als Funktion der Temperatur T , gemessen bei $d_{Cr} = 5$ ML.

Dennoch ist die Kopplungsstärke J_2 im wesentlichen linear von der Temperatur abhängig, da $\alpha T/J_0 \ll 1$. Wird der in α quadratische Term vernachlässigt, so kann die experimentell beobachtete Temperaturabhängigkeit von J_2 mit Gl. 8.13 gut wiedergegeben werden (Abb. 8.9). Der Anpassungsparameter C wird zu $0.09 \frac{\text{m}^2}{\text{mJ}}$ bestimmt, woraus nach Abb. 8.6 für die mittlere Länge konstanter Zwischenschichtdicke $L \approx 12.5$ nm folgt.

8.3.1.3 Schichtsysteme mit kleinem L

Das Modell der fluktuierenden Momente nach SLONCZEWSKI ist bei Schichten mit kleinem L nicht anwendbar, da hier die wesentliche Voraussetzung $d_X < L$ (mit $X = Cr, Ag$) nicht erfüllt ist. Weiter wurde zur Ableitung von Gl. 8.10 ein Kontinuums-Modell verwendet. Bei den hier beobachteten L von wenigen Gitterkonstanten a_X muß das Kontinuums-Modell durch ein diskretes Modell ersetzt werden, daß die atomistische Struktur berücksichtigt. Erst mit einem solchen Modell kann dann der Zusammenhang zwischen J_2 und L untersucht werden. Da derzeit kein solches Modell existiert, wird unter dieser Einschränkung die auf dem Kontinuums-Modell beruhende Berechnung von J_2 eingesetzt, um den Einfluß der Schichtdickenfluktuation auf die biquadratische Kopplung abschätzen zu können.

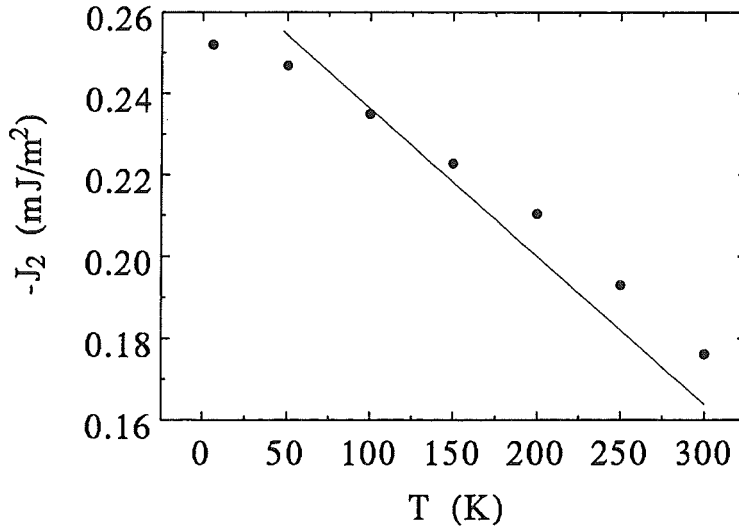


Abbildung 8.9: Die Kopplungsstärke J_2 als Funktion der Temperatur T . Die Gerade resultiert aus der numerischen Anpassung nach Gl. 8.13 mit $d_{Fe} = 30 \text{ ML}$, $C = 0.09 \frac{\text{m}^2}{\text{mJ}}$ sowie J_0 und α aus der Steigung von $J_1(T)$.

Fe/Cr/Fe-Schichten

Im Fall der bei $T_S = 293 \text{ K}$ präparierten Schichtsysteme lassen sich J_1 und J_2 nicht bei allen Cr-Schichtdicken getrennt bestimmen (vgl. Abb. 8.10). Unter der Annahme $J_1 \approx \Delta J$ wird aus Gl. 8.11 der Parameter $C = 0.05 \frac{\text{m}^2}{\text{mJ}}$ bestimmt, der nach Abb. 8.6 einer mittleren Länge $L = 7 \text{ nm} \approx 25a_{Fe}$ konstanter Cr-Zwischenschichtdicke entspricht. Damit ist dieser Wert für L kleiner als bei den bei $T_S = 523 \text{ K}$. Jedoch liegt der Wert von L erheblich über demjenigen Wert, der aus den Strukturanalysen folgte und nur wenige Gitterabstände betrug (vgl. Kap. 7.2).

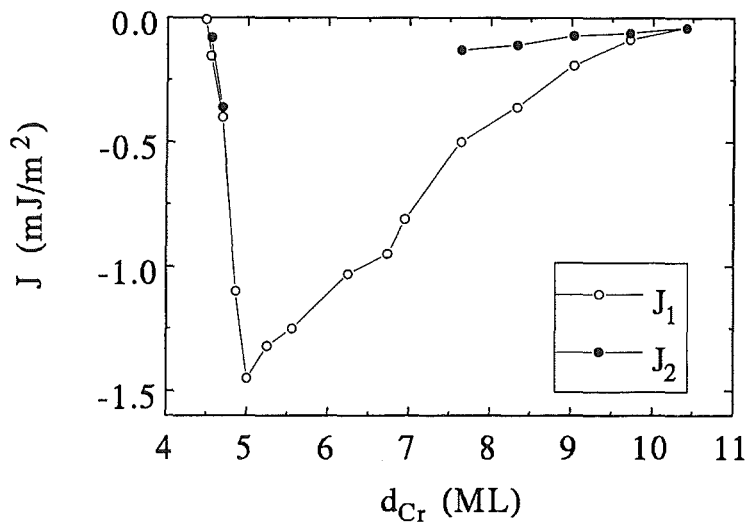


Abbildung 8.10: Die Kopplungsstärken J_1 und J_2 von Proben, die bei $T_S = 293$ K hergestellt worden sind. Im Cr-Dickenintervall von $d_{Cr} = 5 - 7$ ML kann J_2 nicht bestimmt werden, da keine Stufe in den Magnetisierungskurven auftritt.

Fe/Ag/Fe-Schichten

Die Fe/Ag-Grenzflächen sind rauher als die Fe/Cr-Grenzflächen, eine kurze Oszillationsperiode konnte nicht beobachtet werden. Dagegen wird mit steigender Präparationstemperatur ein Anwachsen der biquadratischen Kopplung und damit der magnetischen Länge L beobachtet (Abb. 8.11). Nach Gl. 8.11 und aus der Temperaturabhängigkeit (Abb. 8.12) nach Gl. 8.13 wurde für Proben, die nach dem Verfahren III hergestellt worden sind, übereinstimmend ein Wert von $C = 1.0 \frac{\text{m}^2}{\text{mJ}}$ ermittelt, was einer mittleren Länge von $L = 20$ nm entspricht.

8.3.1.4 Diskussion der Ergebnisse: Biquadratische Kopplung durch Grenzflächendefekte

Im Fall der großen L beschreibt das Fluktuationsmodell die beobachtete biquadratische Kopplung in sehr guter Übereinstimmung zu den experimentellen Daten: Wird derjenige Wert von L verwendet, der durch Röntgenbeugung abgeschätzt werden konnte, so resultiert aus dem Modell ein Wert von J_2 , der dem experimentell beobachteten Wert entspricht.

Im Fall der kleinen L konnte das Modell nicht zu einer quantitativen Auswertung verwendet werden. Die beobachteten Werte von J_2 entsprechen denjenigen

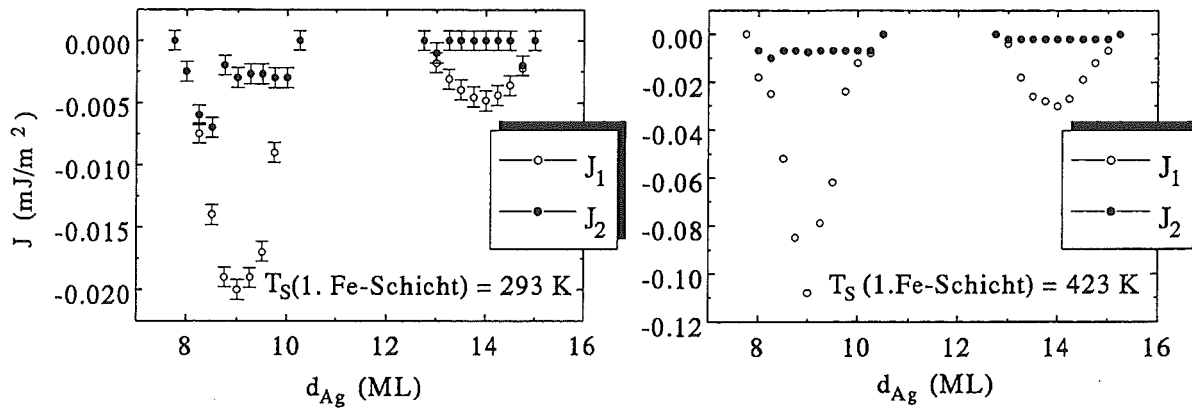


Abbildung 8.11: Die Kopplungsstärken J_1 und J_2 von Proben, die vollständig bei $T_S = 293 \text{ K}$ hergestellt worden sind, und von Proben, deren erste Fe-Schicht bei $T_S = 423 \text{ K}$, die Ag-Zwischenschicht bei $T_S = 353 \text{ K}$ aufgedampft wurden.

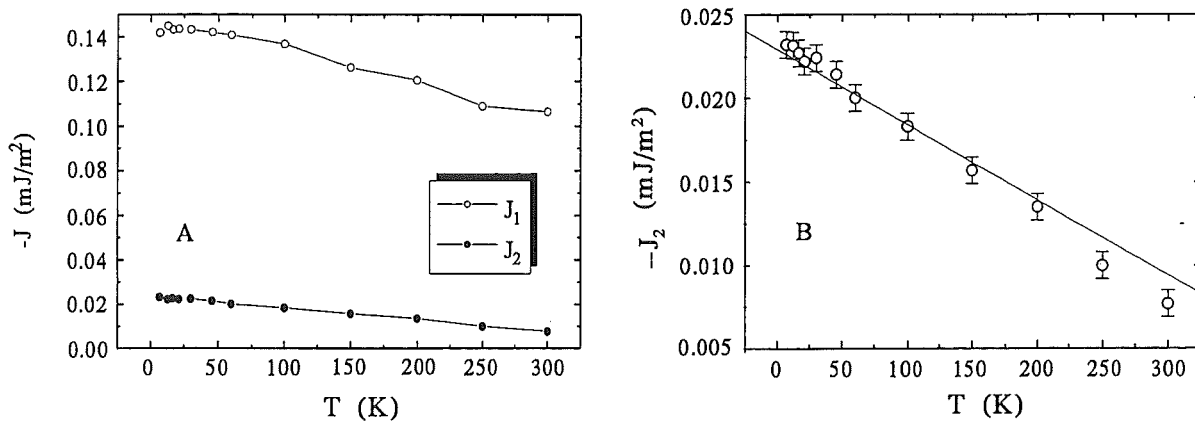


Abbildung 8.12: Die Temperaturabhängigkeit der Kopplungsstärken J_1 und J_2 einer Probe, deren erste Fe-Schicht bei $T_S = 423 \text{ K}$ und deren Ag-Zwischenschicht bei $T_S = 293 \text{ K}$ aufgedampft wurde.

Werten, die an Schichten mit großem L gemessen worden sind. Wird Gl. 8.10 auch im Fall der kleinen L als Abschätzung verwendet, so widerspricht diese Beobachtung dem Modell. Der Parameter J_2 könnte jedoch – wegen der kleinen L – stärker von L abhängen als durch Gl. 8.10 ausgedrückt wird. Es wäre daher sehr interessant, das Fluktuationsmodell auf den Fall von kleinen L auszudehnen. Schließlich könnte J_2 durch eine Mittelung analog der Mittelung über die bilineare Kopplung nach Gl. 8.7 geschwächt werden. Da die Rauigkeitsparameter σ , die die Amplitude bestimmen, bei beiden Schichten sehr ähnlich sind, würde eine vergleichbare biquadratische Kopplungsstärke erwartet.

Nach dem Proximity-Modell [37] könnte ebenfalls eine biquadratische Kopplung in der beobachteten Größenordnung entstehen. Ummagnetisierungskurven von Doppelschichten zeigen kein langsames Kriechen in die Sättigung, wie dies nach dem Proximity-Modell erwartet würde. Im Fall der großen $L \approx 13$ nm wird die obere Grenze für die Gültigkeit dieses Modells (≈ 10 nm) überschritten. Für die kleinen L kann dieses Modell ebenfalls nicht direkt angewendet werden, da bei der Ableitung $L > d_{Cr}$ vorausgesetzt wurde. Ein Vergleich mit der biquadratischen Kopplung über Fe/Al/Fe-Schichten schwächt das Proximity-Modell zusätzlich. Bei Fe/Al/Fe-Schichtsystemen wird sehr starke biquadratische Kopplung beobachtet ($J_2 \approx 0.1 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$) [9, 35], wobei die Kopplungsstärke mit derjenigen von Fe/Cr/Fe-Schichten vergleichbar ist. Das Proximity-Modell kann wegen des fehlenden magnetischen Momentes des Al nicht angewandt werden. Gleichzeitig sind die Oberflächen der Al-Schichten sehr rauh [9, 35], so daß die biquadratische Kopplung mit dem Fluktuationsmodell erklärt werden könnte. Würde das Proximity-Modell die biquadratische Kopplung über Cr-Schichten erklären, so müßte die experimentell beobachtete Kopplungsstärke wesentlich stärker sein, da ja noch ein Beitrag durch das Fluktuationsmodell – wegen der zu Al vergleichbaren Schichtrauigkeit – hinzukäme.

Das Dipol-Modell ergibt mit den experimentellen Werten von L bei Fe/Cr/Fe-Schichten Kopplungsstärken J_2 , die um eine Größenordnung zu klein sind und kann daher die biquadratische Kopplung über Cr-Zwischenschichten nicht erklären. Dagegen könnte bei den Ag-Zwischenschichten durch das Dipol-Modell ein beobachtbarer Beitrag zur biquadratischen Kopplung entstehen. Wegen der großen Oberflächenrauigkeit und der Diffusion an den Fe/Ag-Grenzflächen ist eine quantitative Abschätzung schwierig. Zudem wurde bei der Ableitung des Modells ebenfalls vorausgesetzt, daß $d_X \ll L$, welches durch die Fe/Ag/Fe-Schichten nicht erfüllt wird. Daher ist auch keine gute Übereinstimmung vom Modell mit den experimentellen

Ergebnissen zu erwarten.

8.3.2 Biquadratische Kopplung durch paramagnetische Verunreinigungen

Theoretischer Ansatz

In bestimmten Fällen wird eine Temperaturabhängigkeit der biquadratischen Kopplung beobachtet, die nicht im Rahmen des Fluktuationsmechanismus oder des Dipolmechanismus erklärt werden kann [9, 35]. SLONCZEWSKI schlägt zur Erklärung der starken Temperaturabhängigkeit der biquadratischen Kopplung einen Mechanismus vor, der von paramagnetischen Verunreinigungen, sogenannten „loose-spins“, in der Zwischenschicht ausgeht [32]. Auftreten können diese paramagnetischen Verunreinigungen auf zwei Weisen: Zum einen können geringe Mengen des ferromagnetischen Materials in die Zwischenschicht eindiffundiert sein und dort wegen der geringen Konzentration als paramagnetische Ionen auftreten. Zum anderen wird angenommen, daß ferromagnetisches Material an der Grenzfläche wegen der reduzierten Symmetrie einen stark reduzierten ferromagnetischen Austausch mit dem Fe-Volumen besitzt. Diese „loose spins“ koppeln dann über eine RKKY-artige Wechselwirkung an die ferromagnetischen Schichten an, was zu einem zusätzlichen Beitrag J_i^{ls} zur Zwischenschichtkopplung J_i führt.

Zur Berechnung dieses Kopplungsbeitrages wird zunächst die freie Energie f der RKKY-artigen Wechselwirkung berechnet, die die „loose spins“ an die ferromagnetischen Schichten koppelt (vgl. Abb. 8.13) [32]. Das RKKY-Wechselwirkungspotential U ist eine Funktion des Abstandes zwischen den „loose spins“ und jeder einzelnen ferromagnetischen Schicht $F_{1(2)}$ und des Winkels ϑ zwischen den magnetischen Momenten $\mathbf{M}_1$ und $\mathbf{M}_2$ der Ferromagneten. Das resultierende Potential $U(\vartheta)$ ist durch $U(\vartheta) = (U_1^2 + U_2^2 + 2U_1U_2 \cos \vartheta)^2$ gegeben. Unter der Voraussetzung, daß $U(\vartheta)$ klein ist, müssen nur die thermischen Anregungen der „loose spins“ berücksichtigt werden. Die freie Energie f läßt sich dann ausdrücken durch

$$f(U, T, \vartheta) = -k_B T \ln \left(\frac{\sinh[(1 + (2S)^{-1})U(\vartheta)/k_B T]}{\sinh(U(\vartheta)/2Sk_B T)} \right) \quad (8.14)$$

wobei S den atomaren Spin angibt. Mit der Flächendichte ρ der „loose spins“ kann die makroskopische freie Energie $F(\vartheta) = \rho \cdot f(\vartheta)$ berechnet werden. In Analogie zur phänomenologischen Beschreibung der Austauschkopplung nach Gl. 8.1 läßt sich die freie Energie F definieren:

$$F(\vartheta) = J_0^{ls} - J_1^{ls} \cos \vartheta - J_2^{ls} \cos^2 \vartheta \quad (8.15)$$

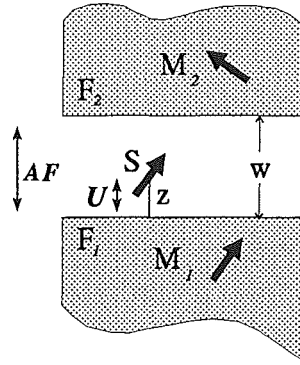


Abbildung 8.13: Querschnitt durch zwei ferromagnetische Schichten, F_1 und F_2 , die durch eine Zwischenschicht der Dicke w getrennt sind. Im Abstand z von F_1 befindet sich ein paramagnetisches Ion mit dem Spin S , das über eine RKKY-artige Wechselwirkung an die beiden Ferromagneten gekoppelt ist (nach [32]).

Mit dieser Definition können die J_i^{ls} durch eine Summe der freien Energie $F(\vartheta)$ mit entsprechend gewählten Winkeln ϑ ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} J_1^{ls} &= \frac{1}{2}\rho\{f(U, T, \vartheta = \pi) - f(U, T, \vartheta = 0)\} \\ J_2^{ls} &= -\frac{1}{2}\rho\{f(U, T, \vartheta = 0) + f(U, T, \vartheta = \pi) - 2f(U, T, \vartheta = \frac{\pi}{2})\} \quad (8.16) \end{aligned}$$

Beide Parameter J_i^{ls} sind direkt proportional zur Konzentration ρ der Verunreinigungen, wobei ein kleines ρ sicherstellt, daß die Verunreinigungen paramagnetisches Verhalten besitzen.

SLONCZEWSKI unterstützt seine Modellrechnungen durch numerische Anpassung der Parameter ρ und U an experimentelle Daten [9, 35]. Dabei berücksichtigt er besonders die Temperaturabhängigkeit und verwendet nur kleine Fe-Konzentrationen, die einer Schichtdicke $d_{Fe} < 0.1$ ML entsprechen. Bei den zugrunde liegenden Experimenten wurden die Schichten bei erhöhten Temperaturen aufgedampft, woraus eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für paramagnetische Verunreinigungen der Zwischenschichten gefolgert werden kann. Durch Aufdampfen einer $1/2$ ML Fe in die Mitte einer Cu-Zwischenschicht wurde dieses Modell von HEINRICH zuerst überprüft [40]. Die erzielten Ergebnisse sind nicht eindeutig. Es wurde eine Abnahme der bilinearen Kopplung J_1 beobachtet, jedoch kein Zuwachs bei der biquadratischen Kopplung J_2 . Die Ursache für das beobachtete Verhalten kann in der Dicke der zusätzlich aufgedampften Fe-Schicht liegen. Die gewählte Fe-Menge erscheint groß genug, um Fe-Cluster bilden zu können, die kein paramagnetisches Verhalten mehr besitzen.

Temperaturabhängigkeit der biquadratischen Kopplung

Zur experimentellen Überprüfung des Modells sind Fe/Ag/Fe-Schichten in mehrfacher Hinsicht besonders geeignet. Die Kopplungsstärke J_2 der biquadratischen Kopplung bleibt im ersten Maximum der antiferromagnetischen Kopplung ($d_{Ag} = 9$ ML) im Temperaturintervall 6–300 K immer kleiner als J_1 , so daß aus Ummagnetisierungskurven J_1 und J_2 im gesamten Temperaturbereich separat bestimmt werden können. Da die zu erwartende biquadratische Kopplung für realistische Potentiale U in der Größenordnung $0.01\text{--}0.02 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$ liegt, sollte J_2 ohne zusätzliche paramagnetische Verunreinigungen in der gleichen Größenordnung sein. Außerdem sind Fe und Ag nicht mischbar [72], so daß eine Fe-Konzentration in der Ag-Zwischenschicht unter den üblichen Präparationsbedingungen vernachlässigt werden kann. Allerdings gibt es an der Fe/Ag-Grenzfläche eine geringe Durchmischung [86], die sich auf eine etwa 1 ML breite Zone beschränkt. Da die biquadratische Kopplung für derartige Fe/Ag/Fe-Schichten ohne zusätzliche Verunreinigungen mit abnehmender Temperatur linear ansteigt, (vgl. Abb. 8.12), können paramagnetische Verunreinigungen vernachlässigt werden, weil diese nach Gl. 8.16 zu einem exponentiellen Anstieg von J_2 mit sinkender Temperatur führen. Schließlich konnte durch Mößbauerspektroskopie gezeigt werden, daß Fe-Filme unterhalb einer Dicke von 1 ML auf Ag-Substraten paramagnetisch sind [110].

Zur Untersuchung des Einflusses der „loose spins“ auf die Kopplung wurden spezielle Proben entwickelt, die in Abb. 8.14 dargestellt sind. Auf den Ag-Puffer wurden zwei Keile aufgedampft. Ein Fe-Keil (0–1 ML) wurde in das Zentrum einer Ag-Zwischenschicht aufgedampft, so daß für die Potentiale der „loose spins“ gilt: $U_1 = U_2 = U$. Der zweite Keil, ein Ag-Keil ohne zusätzliche Fe-Einschlüsse, diente als Referenz.

Zunächst wurde der Einfluß einer kleinen Fe-Konzentration auf die Temperaturabhängigkeit der Kopplung untersucht. Dazu wurden im Temperaturbereich 6–300 K $M(H)$ -Kurven bei einer Dicke des Fe-Keils von $d_{Fe} = 0.008 \text{ nm} \approx 0.055 \text{ ML}$ aufgenommen und daraus die Kopplungsstärken J_1 und J_2 bestimmt. Die Kopplung auf Grund von „loose spins“ ist ein additiver Effekt; um die zugehörige Kopplungsstärke J_i^{ls} zu ermitteln, muß der experimentelle Wert J_i^{exp} um den Betrag der Kopplung über Ag-Zwischenschichten ohne zusätzliche Fe-Atome J_i^{Ag} vermindert werden. Dieser Referenzwert J_i^{Ag} wurde bei jeder Probe aus den $M(H)$ -Kurven in demjenigen Bereich ermittelt, in den kein zusätzliches Fe aufgedampft wurde. In Abb. 8.15 ist der korrigierte Wert $J_2^{ls} = J_2^{exp} - J_2^{Ag}$ als Funktion der Temperatur dargestellt. Deutlich

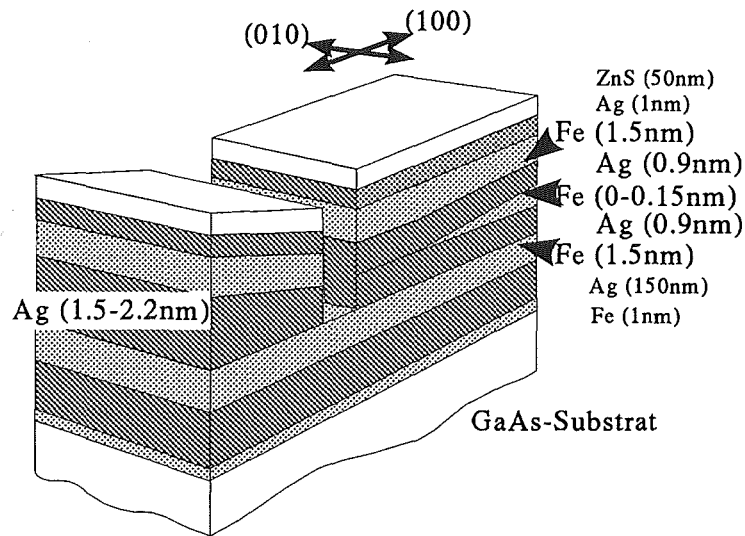


Abbildung 8.14: Schematische Darstellung des speziellen Probenaufbaus, mit dem der Einfluß der paramagnetischen Ionen in der Zwischenschicht auf die Austauschkopplung untersucht wurde. Die Proben setzten sich aus zwei Keilen zusammen, der Fe-Keilschicht im Zentrum einer Ag-Zwischenschicht und einem reinen Ag-Keil.

ist der starke Anstieg von J_2^{ls} mit sinkender Temperatur zu erkennen. Diese starke Temperaturabhängigkeit muß aus dem zusätzlichen Fe in der Ag-Zwischenschicht resultieren, da im Fall ohne zusätzliches Fe ein wesentlich schwächerer Anstieg beobachtet wurde (vgl. Abb. 8.12).

Um die experimentelle Situation wiederzugeben, muß die „loose spin“-Theorie modifiziert werden, da Metallatome auch in geringsten Konzentrationen Cluster auf dem Substrat bilden [111]. Beim homoepitaktischen Wachstum von 0.07 ML Fe auf (001)-Fe-Whiskern bilden sich bei einer Wachstumstemperatur $T_S = 293$ K Cluster in der Größenordnung von 5–10 Atomen auf der Oberfläche [97]. Die Ableitung, die zu Gl. 8.16 führte, ist aber streng nur für isolierte Ionen gültig. Beschränkt man sich auf tiefe Temperaturen, so läßt sie sich jedoch auch auf Cluster übertragen. Bei tiefen Temperaturen werden die Fluktuationen der einzelnen Spins S des Clusters unterdrückt, und der Cluster kann als ein Teilchen mit Spin $N \cdot S$ angesehen werden, wobei N die Anzahl der Atome pro Cluster angibt. Wegen der sehr schwachen Wechselwirkung der Cluster untereinander kann die freie Energie $f(U, T, \vartheta)$ in Gl. 8.14 durch die Substitution von S durch $N \cdot S$ und U durch $N \cdot U$ modifiziert werden [32]. Mit diesem Ansatz wurde J_2^{ls} durch Variation der Parameter U, N und d_{Fe} an die experimentellen Daten angepaßt, und als durchgezogene Linie in Abb. 8.15

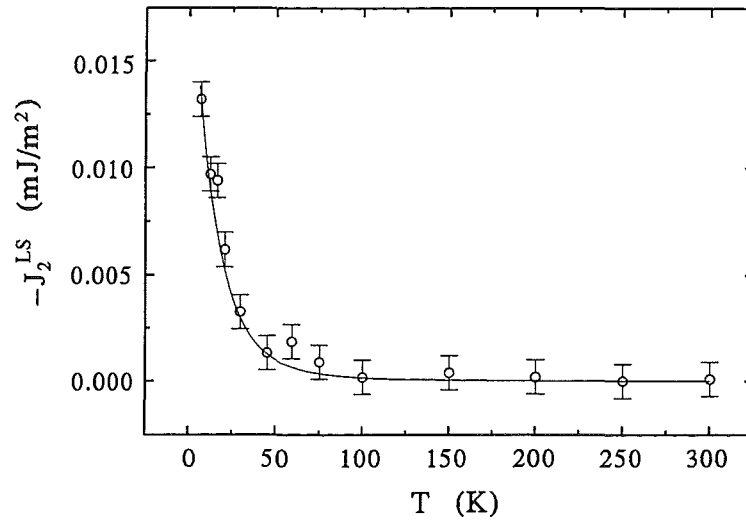


Abbildung 8.15: Die Temperaturabhängigkeit von J_2^{ls} . Die durchgezogene Linie stellt eine numerische Anpassung nach der „loose spin“-Theorie dar. Die Parameter wurden gewählt zu $U/k_B = 10$ K, $N = 5$ Atome pro Cluster. Die Fe-Dicke wurde zu $d_{Fe}^{Fit} = 0.06$ ML gesetzt, was innerhalb der Fehlergrenzen mit dem experimentell bestimmten Wert $d_{Fe}^{exp} = 0.055 \pm 0.005$ ML übereinstimmt.

dargestellt. Die Anpassungsparameter wurden gewählt zu $U/k_B = 10$ K, $N = 5$ und $d_{Fe} = 0.06$ ML.

Zur guten Übereinstimmung zwischen der theoretisch berechneten Kurve und den experimentell ermittelten Daten muß jedoch angemerkt werden, daß die raue Ag-Oberfläche, auf der der Fe-Keil aufgewachsen ist, zu einer Mittelung über unterschiedliche Potentiale U führt. Denn nach Kap. 6.5 setzt sich die Ag-Oberfläche aus 6 sichtbaren Lagen zusammen. Das bedeutet aber, daß sich ein Teil des Fe näher als das Zentrum der Ag-Schicht an der Grenzfläche befindet. Wegen der Abstandsabhängigkeit von U sollte dieses Fe andere Potentialstärken U besitzen als dasjenige Fe, welches sich genau im Zentrum der Ag-Zwischenschicht befindet.

Für einen „loose spin“, der sich im Mittel 5 ML weit von der Grenzfläche befindet, wurde das Potential $U/k_B = 10$ K ermittelt. Der Vergleich zur Kopplungsstärke einer Fe/Ag/Fe-Schicht der Ag-Dicke 5 ML liegt nahe, wobei die Stärke ca. $1 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2} \approx 10$ K beträgt [112]. Auch wenn keine exakte Übereinstimmung zu erwarten ist, passen die Werte doch sehr gut zueinander.

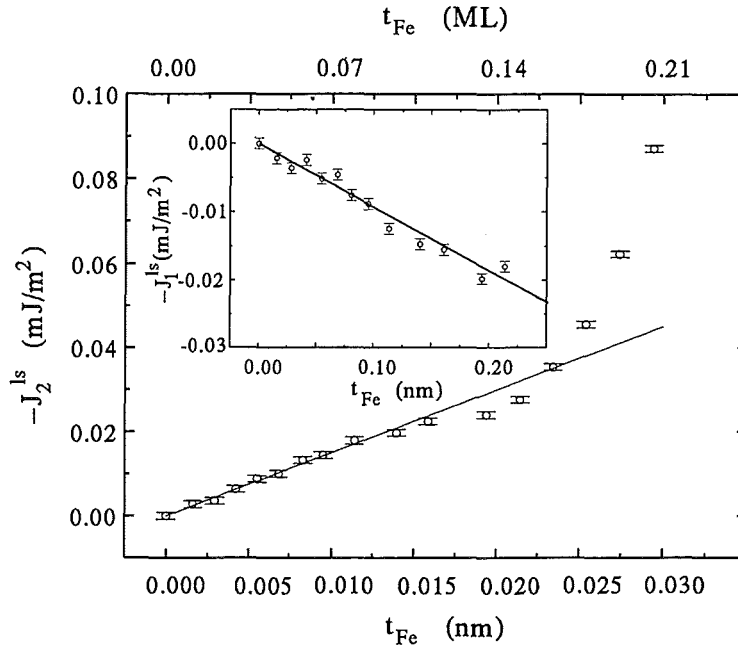


Abbildung 8.16: Die Kopplungsstärken $J_i^{ls} (= J_i^{exp} - J_i^{Ag})$ als Funktion der Fe-Dicke, gemessen bei $T = 7$ K. Die durchgezogenen Linien sind numerische Anpassungen, wobei für J_2^{ls} die Parameter $U/k_B = 10$ K und $N = 5$ und für J_1^{ls} : $U/k_B = 2$ K verwendet wurden.

Abhängigkeit von der Fe-Konzentration

Nach Gl. 8.16 sind die beiden Kopplungsstärken J_1^{ls} und J_2^{ls} linear von der Fe-Konzentration abhängig. Diese Abhängigkeit kann experimentell überprüft werden, indem entlang des Fe-Keils $M(H)$ -Kurven aufgenommen und daraus die Kopplungsparameter bestimmt werden. In Abb. 8.16 sind beide Parameter als Funktion der Fe-Dicke dargestellt. Zu Beginn des Fe-Keils fällt J_1^{ls} linear mit steigender Fe-Dicke ab, während J_2^{ls} linear zunimmt, wie es nach der Theorie erwartet wird. Die Zunahme von J_2^{ls} bzw. die Abnahme von J_1^{ls} kann nicht durch die wachsende Zwischenschichtdicke erklärt werden, da eine Abnahme der Zwischenschichtdicke um 0.01 nm die Kopplungsstärken J_1 und J_2 nur geringfügig ändern würde (vgl. Abb. 8.5).

Die durchgezogenen Linien in Abb. 8.16 sind numerische Anpassungen nach Gl. 8.16, wobei $N = 5$ übernommen wurde. Als einziger Parameter wurde U variiert, wobei für J_2^{ls} ein Wert von $U/k_B = 10$ K verwendet wurde und für J_1^{ls} : $U/k_B = 2$ K. Der Wert von U für J_2^{ls} ist somit gleich demjenigen Wert, der aus der Temperaturabhängigkeit gewonnen wurde. Der geringfügig größere Wert, der aus der Anpassung von J_2^{ls}

resultierte, kann durch Grenzflächenrauigkeit verursacht sein. Das Wachstum des Fe-Keils innerhalb der Ag-Zwischenschicht wird das Wachstum des zweiten Teils der Ag-Schicht stören und zwar umso stärker, je dicker der Fe-Keil wird. Daraus sollte mit zunehmender Fe-Dicke ein erhöhter Wert von J_2 resultieren und somit einen zu hohen Wert für U ergeben.

Die Abweichung vom linearen Verhalten für Fe-Dicken $d_{Fe} > 0.15$ ML kann durch Annahme von größeren Fe-Clustern erklärt werden. Wie STM-Daten bei der Homoepitaxie von Fe auf Fe-Whiskern [97] und Computer-Simulationen, die in Übereinstimmung zu Mößbauerdaten erzeugt wurden [107], zeigen, ist sogar unterhalb des Perkollationslimits (0.59 ML für ein quadratisches Gitter unter Berücksichtigung der nächsten Nachbarn [113]) eine große Wahrscheinlichkeit vorhanden, daß Fe-Cluster mit einer Größe von mehr als 10 Fe-Atomen entstehen. Solche superparamagnetischen Cluster haben gegenüber isolierten Atomen eine erhöhte Suszeptibilität pro Atom und liefern daher einen unterschiedlichen Beitrag zur Kopplung. Die Abweichung der Kopplungskurve vom linearen Verlauf spiegelt die Zunahme der durchschnittlichen Zahl von Atomen pro Cluster mit wachsender Fe-Dicke wieder. Die Ableitung der freien Energie f bezog sich aber nur auf freie Atome. Daher muß, um im Gültigkeitsbereich der Theorie zu bleiben, die Konzentration der Fe-Atome klein sein.

Somit konnte gezeigt werden, daß paramagnetische Verunreinigungen in der Zwischenschicht zu biquadratischer Kopplung führen. In Übereinstimmung zu experimentellen Daten beschreibt das Modell von SLONCZEWSKI die Abhängigkeit dieses zusätzlichen Beitrags zur biquadratischen Kopplung von der Temperatur und von der Konzentration der paramagnetischen Ionen. Der Effekt kann jedoch nur bei tiefen Temperaturen beobachtet werden. Die resultierende Stärke von J_2 ist im Vergleich zu Werten von Cr-Zwischenschichten klein. Paramagnetische Ionen alleine reichen folglich nicht aus, die biquadratische Kopplung zu erklären.

9 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde der Einfluß von Schichtwachstum, Ober- und Grenzflächenstrukturen sowie von paramagnetischen Einschlüssen auf die Zwischenschichtkopplung in epitaktischen Fe-Schichtsystemen untersucht.

Die zu untersuchenden Fe/X/Fe-Schichtsysteme wurden in einem UHV-Mehrkammersystem hergestellt. Als Wachstumsunterlage für die Fe/X/Fe-Schichtsysteme wurde eine epitaktische (001)-Ag-Schicht verwendet, die auf (001)-GaAs-Substraten mit einer (001)-Fe-Keimschicht aufgedampft wurde.

Das Schichtwachstum wurde IN-SITU mit RHEED charakterisiert; die Oberflächenstruktur wurden mit SPA-LEED bestimmt. Dazu wurden die vorhandenen Systeme ausgebaut: Das RHEED-System wurde mit einer kommerziellen, digitalen Bildfassung und -verarbeitung ausgestattet, so daß RHEED-Oszillationen zur Routinekontrolle des Schichtwachstums eingesetzt werden können. Das SPA-LEED-System wurde mit einer computergestützten Datenerfassung erweitert, die eine quantitative Auswertung von LEED-Reflexprofilen ermöglicht. Die quantitative Auswertung der LEED-Reflexprofile erfolgte mit zwei unterschiedlichen Methoden. Mit einem AES-System wurden die Oberflächen chemisch analysiert.

Ummagnetisierungskurven wurden durch eine spezielle Technik mit dem magnetooptischen Kerr-Effekt aufgenommen, bei der die Domänen vor jeder Messung in einen Gleichgewichtszustand gebracht wurden. Die Bestimmung der Kopplungsstärken aus den Ummagnetisierungskurven erfolgte numerisch durch Minimierung der Gesamtenergiedichte des Schichtsystems.

Durch Verbindung der strukturellen Analysen mit dem Ummagnetisierungsverhalten wurde der Einfluß der Schichttrauhigkeit auf die Zwischenschichtkopplung untersucht. Zwei Fragestellungen waren Ausgangspunkt dieser Arbeit:

1. Läßt sich das Auftreten von kurzen und langen Oszillationsperioden der Austauschkopplung mit den strukturellen Grenzflächeneigenschaften verstehen?

2. Kann die experimentell beobachtete biquadratische Kopplung, die zu einer orthogonalen Ausrichtung der Schichtmagnetisierungen führt, durch vorhandene Modelle qualitativ und quantitativ beschrieben werden?

Dazu wurde zuerst die Oberflächenstruktur der Ag-Schicht bestimmt, die als Wachstumsunterlage für die Fe-Schichtsysteme dient. LEED-Reflexprofile der Ag-Oberfläche zeigten neben dem Zentralreflex eine Verbreiterung des (00)-Reflexes. Aus der Halbwertsbreite dieser Verbreiterung konnte die mittlere Ag-Terrassengröße zu $50 a_{Ag}$ bestimmt werden.

Die Fe-Oberflächenstruktur wurde aus den LEED-Reflexen bestimmt, bei denen der Zentralreflex von einem ringförmigen Reflex umgeben war. Das RHEED-Muster einer Fe-Oberfläche zeigte eine Aufspaltung des (00)-Reflexes in der Anti-Bragg-Bedingung, wie sie in der Literatur beschrieben wird. Erstmals konnte gezeigt werden, daß diese RHEED-Aufspaltung einem ringförmigen LEED-Muster entspricht. Aus dem ringförmigen LEED-Reflex konnte auf eine regelmäßig gestufte Oberfläche geschlossen werden, wobei der zusätzliche Reflex bei einer Fe-Dicke auftrat, die größer als 5 ML ist. Aus dem Durchmesser des Ringes wurde die mittlere Terrassenlänge bestimmt. Mit zunehmender Präparationstemperatur T_S stieg die mittlere Terrassenlänge $\langle l \rangle$ an, so daß $\langle l \rangle$ bei der hohen Präparationstemperatur ($T_S = 523$ K) etwa den doppelten Wert im Vergleich zu $\langle l \rangle$ bei niedriger Präparationstemperatur ($T_S = 293$ K) besitzt. Auch mit wachsender Schichtdicke wurde eine Zunahme von $\langle l \rangle$ in gleicher Größenordnung beobachtet. Es wurde ein maximaler Wert von $\langle l \rangle = 25a_{Fe}$ ($T_S = 523$ K) und ein minimaler Wert von $\langle l \rangle = 5a_{Fe}$ ($T_S = 300$ K) ermittelt. Unabhängig von den Präparationsbedingungen sind die obersten 5 ML Fe nicht geschlossen.

Unter Berücksichtigung der Präparationstemperaturen entsprechen die Strukturparameter von Cr-Oberflächen, die auf diesen Fe-Schichten präpariert worden waren, den Parametern der Fe-Schichten. Ag-Oberflächen dagegen zeigten eine erheblich stärkere Rauigkeit.

Neben den Oberflächenstrukturen sind die Grenzflächenstrukturen und insbesondere die Korrelation der beiden Grenzflächen für die Zwischenschichtkopplung von großer Bedeutung. Die Grenzflächenstrukturanalyse durch Röntgenbeugung, die in Kooperation mit der Universität Bochum erfolgte, zeigt, daß die mittlere Länge konstanter Zwischenschichtdicke $\langle L \rangle$ erheblich von der Präparationstemperatur abhängig ist. Diese Länge $\langle L \rangle$ steigt bei hohem T_S um eine Größenordnung

gegenüber ihrem Wert bei niedrigem T_S an. Durch Kombination von Oberflächenstrukturanalyse mit Grenzflächenstrukturanalyse konnte für das hohe T_S ein Wert $\langle L \rangle \approx 45a$ und für die das niedrige T_S ein Wert von $\langle L \rangle \approx 1 - 2a$ abgeschätzt werden.

Mit diesen Ergebnissen über die Ober- und Grenzflächenstruktur kann die erste Frage nach dem Zusammenhang von strukturellen Grenzflächeneigenschaften mit der Oszillationsperiode der Zwischenschichtkopplung eindeutig beantwortet werden. Wurden die experimentell bestimmten Grenzflächenstrukturparameter zur Modellierung der Kopplung verwendet, so konnte die beobachtete Kopplung gut reproduziert werden. Für den Fall der hohen Substrattemperatur ergaben sich aus der Modellierung eine lange und eine kurze Periode der Kopplung, wobei jedoch die Amplitude der Kopplung ihr Vorzeichen nicht wechselt. Im Fall der niedrigen Temperatur ergab sich nur eine lange Periode. Die maximalen Amplituden der Kopplung stimmen bei beiden Herstellungsverfahren überein, da sich die Halbwertsbreiten der Schichtdickenverteilungen nur wenig unterscheiden.

Die zweite Frage nach den Ursachen der biquadratischen Kopplung ließ sich wesentlich schwerer beantworten. Bei Fe/Cr/Fe-Schichten, die bei hoher Temperatur hergestellt worden waren, führte die experimentell bestimmte strukturelle Größe $\langle L \rangle$ bei Anwendung des Fluktuationsmodells zu Kopplungsstärken, die mit den experimentell bestimmten Kopplungsstärken sehr gut übereinstimmen. Auch die Temperaturabhängigkeit der biquadratischen Kopplung wurde durch dieses Modell gut beschrieben. Außerdem ist die biquadratische Kopplungsstärke, die sich aus allen anderen Modellen ergab, wesentlich kleiner als die hier experimentell beobachteten Werte.

Sowohl bei Fe/Cr/Fe-Proben, die bei der niedrigen Temperatur hergestellt worden waren, als auch bei Fe/Ag/Fe-Proben konnte das Fluktuationsmodell nicht angewendet werden, da das experimentell bestimmte $\langle L \rangle$ viel zu klein war und den Gültigkeitsbereich der Theorie verließ. Hier müssen zunächst theoretische Rechnungen durchgeführt werden, die den Gültigkeitsbereich des Modells auf die kleinen $\langle L \rangle$ ausdehnen.

Wurde Fe in geringer Konzentration (< 0.1 ML) zusätzlich in die Zwischenschicht eingebaut, so zeigte sich in Übereinstimmung mit dem „loose spin“-Modell ein linearer Anstieg der biquadratischen Kopplungsstärke mit der Fe-Konzentration. Unter der Voraussetzung, daß sich Fe-Cluster bilden, ließ sich sowohl dieser lineare Anstieg als auch die beobachtete Temperaturabhängigkeit dieses Beitrags zur bi-

quadratischen Kopplung im Rahmen der Theorie erklären. Dieser Beitrag ist jedoch alleine zu klein, um die bei Fe/Cr/Fe- oder bei Fe/Al/Fe-Schichten beobachtete biquadratische Kopplungsstärke zu erklären.

Die biquadratische Kopplung kann nicht durch ein einziges Modell beschrieben werden. Der Fluktuationsmechanismus beschreibt die experimentell beobachtete biquadratische Kopplung sehr gut. Bei kleinen Kopplungsstärken und tiefen Temperaturen muß ein zusätzlicher Beitrag durch paramagnetische Verunreinigungen zur biquadratischen Kopplung berücksichtigt werden. Andere Mechanismen wie Dipol-Kopplung oder Proximity-Modell können ebenfalls zur biquadratischen Kopplung beitragen; ein eindeutiger Nachweis erfordert aber weitere Untersuchungen.

Literaturverzeichnis

Literaturverzeichnis

- [1] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, and H. Sowers, Phys. Rev. Lett. **57**, 2442 (1986)
- [2] C. F. Majkrzak, J. W. Cable, J. Kwo, M. Hong, D. B. McWhan, Y. Yafet, J. V. Waszczak, H. Grimm, C. Vettier, Phys. Rev. Lett. **56**, 2700 (1986)
- [3] M. Rühlig, R. Schäfer, A. Hubert, R. Mosler, J. A. Wolf, S. Demokritov, P. Grünberg, Phys. Stat. Solid. A **125**, 635 (1991)
- [4] B. Heinrich, J. F. Cochran, M. Kowalewski, Z. Celinski, A. S. Arrott, K. Myrtle, Phys. Rev. B **44**, 9348 (1991)
- [5] Q. Leng, V. Cros, R. Schäfer, A. Fuss, P. Grünberg, W. Zinn, J. Magn. Magn. Mater. **126**, 367 (1993)
- [6] R. Meckenstock, O. von Geisau, J. Pelzl, J. Appl. Phys. **77**, (1995)
- [7] S. S. P. Parkin, N. More, K. P. Roche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2304 (1990)
- [8] S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **67**, 3598 (1991)
- [9] A. Fuß, S. Demokritov, P. Grünberg, W. Zinn, J. Magn. Magn. Mater. **103**, L221 (1992)
- [10] J. Unguris, R. J. Celotta, D. T. Pierce, J. Magn. Magn. Mater. **127**, 205 (1993)
- [11] S. Demokritov, J. A. Wolf, P. Grünberg, Europhys. Lett. **15**, 881 (1991)
- [12] J. Unguris, R. J. Celotta, D. T. Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991)
- [13] S. T. Purcell, W. Folkerts, M. T. Johnson, N. W. E. McGee, K. Jäger, J. van de Stegge, W. B. Zeper, W. Hoving, P. Grünberg, Phys. Rev. Lett. **67**, 903 (1991)
- [14] K. B. Hathaway, in: ULTRATHIN MAGNETIC STRUCTURES, VOL II, herausgegeben von B. Heinrich und J. A. C. Bland, Springer Verlag, Berlin (1994)

- [15] P. Bruno, zur Veröffentlichung eingereicht bei Phys. Rev. B
- [16] P. Bruno, C. Chappert, Phys. Rev. Lett. **67**, 1602 (1991)
- [17] W. Nolting, QUANTENTHEORIE DES MAGNETISMUS, Teubner, Stuttgart (1986)
- [18] P. H. Dederichs, in: MAGNETISMUS VON FESTKÖRPERN UND GRENZFLÄCHEN, Forschungszentrum Jülich, Jülich (1993); 24. IFF Ferienkurs
- [19] J. Barnas, J. Magn. Magn. Mat **111**, L215, (1992)
- [20] P. Bruno, J. Magn. Magn. Mater. **121**, 248 (1993)
- [21] P. Bruno, Europhys. Lett. **23**, 615 (1993)
- [22] M. D. Stiles, Phys. Rev. B **48**, 7238 (1993)
- [23] P. J. H. Bloemen, M. T. Johnson, M. T. H. van de Vorst, R. Coehoorn, J. J. de Vries, R. Jungblut, J. aan de Stegge, A. Reinders, W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. **72**, 764 (1994)
- [24] S. N. Okuno and K. Inomata, Phys. Rev. Lett. **72**, 1553 (1994)
- [25] B. Briner, M. Landolt, Europhys. Lett. **28**, 65 (1994)
- [26] A. Carl, D. Weller, Phys. Rev. Lett. **74**, 190 (1995)
- [27] Y. Wang, P. M. Levy, J. L. Levy, Phys. Rev. Lett **65**, 2732 (1990)
- [28] P. Bruno, C. Chappert, Phys. Rev. B **46**, 261 (1992)
- [29] P. Grünberg, in: MAGNETISMUS VON FESTKÖRPERN UND GRENZFLÄCHEN, Forschungszentrum Jülich, Jülich (1993); 24. IFF Ferienkurs
- [30] D. M. Edwards, J. M. Ward, J. Mathon, J. Magn. Magn. Mater. **126**, 380 (1993)
- [31] J. C. Slonczewski, Phys. Rev. Lett **67** 3172, (1991)
- [32] J. C. Slonczewski, J. Appl. Phys. **73**, 5957 (1993)
- [33] B. Heinrich, Z. Celinski, J. F. Cochran, A. S. Arrott, K. Myrtle, S. T. Purcell, Phys. Rev. B **47**, 5077, (1993)

- [34] J. Unguris, R. J. Celotta, D. T. Pierce, J. A. Strosico, J. Appl. Phys. **73**, 5966 (1993)
- [35] C. J. Guiterrez, J. J. Krebs, M. E. Filipkowski, G. A. Prinz, J. Magn. Magn. Mater. **116**, L305 (1992)
- [36] S. Demokritov, E. Tsybal, P. Grünberg, W. Zinn, I. K. Schuller, Phys. Rev. B **49**, 720 (1994)
- [37] J. C. Slonczewski, zur Veröffentlichung eingereicht bei J. Magn. Magn. Mater.
- [38] A. Schreyer, J. F. Ankner, T. Zeidler, H. Zabel, M. Schäfer, J. A. Wolf, P. Grünberg, zur Veröffentlichung eingereicht bei Phys. Rev. B
- [39] J. Barnaś, P. Grünberg, J. Magn. Magn. Mater. **121**, 326 (1993)
- [40] B. Heinrich, Z. Celinski, L. X. Liao, M. From, J. F. Cochran, J. Appl. Phys. **75**, 6187 (1994)
- [41] G. K. Wehner, G. S. Anderson, HANDBOOK OF THIN FILM TECHNOLOGY herausgegeben von L. I. Maissel, R. Glang, McGraw-Hill, London (1983) 3
- [42] M. Henzler, W. Göpel, OBERFLÄCHENPHYSIK DES FESTKÖRPERS, Teubner, Stuttgart (1991)
- [43] C. S. Lent, P. I. Cohen, Surf. Sci. **139**, 121 (1984)
- [44] J. A. Strosio, D. T. Pierce, R. A. Dragoset, Phys. Rev. Lett. **70**, 3615 (1993)
- [45] Leybold Ag, SPA-LEED Manual, Köln (1987)
- [46] R. Schäfer, A. Hubert, Phys. Stat. Sol. (a) **118**, 271 (1990)
- [47] A. Hubert, MAGNETIC DOMAINS, Springer Verlag, in Vorbereitung
- [48] M. Schäfer, S. Demokritov, S. Müller-Pfeiffer, R. Schäfer, M. Schneider, P. Grünberg, W. Zinn, J. Appl. Phys. **77**, 6432 (1995)
- [49] A. Hubert, Universität Erlangen, private Mitteilung
- [50] G. Ertl, J. Küppers, LOW ENERGY ELECTRON DIFFRACTION, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1985)
- [51] M. Henzler, Appl. Phys. A **34** 205 (1984)

- [52] J. Wollschläger, Dissertation Universität Hannover (1990)
- [53] H. Jagodzinski, W. Moritz, D. Wolf, Surf. Sci. **77**, 233 (1978)
- [54] M. Horn, U. Gotter, M. Henzler, J. Vac. Sci. Technol. **B 6**, 727 (1988)
- [55] M. Horn, Dissertation Universität Hannover (1989)
- [56] M. Henzler, Surf. Sci. **152-153**, 963 (1982); J. M. Pimbley, T. M. Lu, J. Appl. Phys. **55**, 182 (1984); H. Busch, M. Henzler, Surf. Sci. **167**, 534 (1986)
- [57] S. Pflanz, Dissertation Ludwig-Maximilians-Universität München (1994)
- [58] O. Waalkes, in: O. WAALKES, Hoffman und Campe, Hamburg (1980)
- [59] K. D. Gronwald, M. Henzler, Surf. Sci. **117**, 180 (1982)
- [60] H. Jagodzinski, W. Moritz, D. Wolf, Surf. Sci. **77**, 249 (1978); Surf. Sci. **77**, 265 (1978); Surf. Sci. **77**, 283 (1978)
- [61] M. Horn, M. Henzler, J. Cryst. Growth, **81**, 428 (1987)
- [62] J. Wollschläger, J. Falta, M. Henzler, Appl. Phys. **A 50**, 57 (1990)
- [63] S. Pflanz, W. Moritz, Acta Cryst. **48**, 716 (1992)
- [64] A. S. Arrott, in: ULTRATHIN MAGNETIC STRUCTURES, VOL II, herausgegeben von B. Heinrich und J. A. C. Bland, Springer Verlag, Berlin (1994)
- [65] P. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley, M. J. Whelan, in ELECTRON MICROSCOPY OF THIN CRYSTALS, Robert E. Krieger Publishing Company (1977); L. Reimer, G. Pfefferkorn, in: RASTER-ELEKTRONENMIKROSKOPIE, Springer-Verlag, Berlin (1977)
- [66] B. Müller, Dissertation Universität Hannover (1994)
- [67] M. Horn van Hoegen, B. H. Müller, A. Al-Falou, Phys. Rev. B **50**, 11640 (1994)
- [68] Duden Band 5: Fremdwörterbuch, Dudenverlag Mannheim (1990)
- [69] P. Etienne, J. Massies, J. de Physique III **8**, 1581 (1993)
- [70] E. Bauer, Z. Krist. **110**, 272, (1958)

- [71] J. Gerkema, A. R. Miedema, *Surf. Sci.* **124**, 351 (1983)
- [72] F. R. de Boer W. C. Mattens, A. R. Miedema, A. K. Niessen, in: *COHESION IN METALS*, Transition Metal Alloys, Vol 1, North Holland Publishing (1988)
- [73] L. Z. Mezey, J. Giber, *Jpn. J. Appl. Phys.* **11**, 1569 (1982)
- [74] L. Z. Mezey, J. Giber, *Surf. Sci.* **117**, 220 (1982)
- [75] E. Bauer, J. W. van der Merwe, *Phys. Rev. B* **33**, 3657 (1986)
- [76] J. Massies, N. T. Linh, *J. Crystal Growth* **56**, 223 (1989)
- [77] Ch. Domke, Diplomarbeit Universität Bochum (1994)
- [78] A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol.* **8**, S31 (1971)
- [79] G. W. Smith, A. J. Pidduck, C. R. Whitehouse, J. L. Glasper, A. M. Keir, C. Pickering, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 3282 (1991)
- [80] A. Förster, private Mitteilung
- [81] P. Etienne, J. Massies, F. Nguyen van Dau, A. Barthelmy, A. Fert, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 223 (1989)
- [82] J. A. Wolf, Dissertation Universität Köln (1992), erschienen als Jül-Bericht 2743
- [83] J. J. Krebs, T. Jonker, G. A. Prinz, *J. Appl. Phys.* **61**, 2596 (1987)
- [84] J. A. Wolf, Q. Leng, R. Schreiber, P. Grünberg, W. Zinn, *J. Magn. Magn. Mater.* **121**, 253 (1993)
- [85] B. Heinrich, S. T. Purcell, J. R. Dutcher, K. B. Uruquhart, J. F. Cochran, A. S. Arrott, *Phys. Rev. B* **38**, 12879, (1988)
- [86] P. J. Schurer, Z. Celinski, B. Heinrich, *Phys. Rev. B* **51**, 2506 (1995)
- [87] F. R. deBoer, R. Boom, W. C. M. Mattens, A. R. Miedema, A. K. Niessen in: *COHESION IN METALS*, Vol. 1: Transition Metal Alloys, North-Holland, Amsterdam (1988)
- [88] W. F. Egelhoff, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **229**, 27 (1991)
- [89] A. Scholl, Diplomarbeit Universität Köln (1995)

- [90] F. Klinkhammer, Diplomarbeit Universität Köln (1995)
- [91] P. Hahn, J. Clabes, M. Henzler, J. Appl. Phys. **51**, 2079 (1980)
- [92] D. T. Pierce, J. A. Strosio, J. Unguris, R. J. Celotta, Phys. Rev B **49**, 14564 (1994)
- [93] M. Henzler, Surf. Sci. **73**, 240 (1978)
- [94] G. L. Nyberg, M. T. Kief, W. F. Egelhoff, Phys. Rev. B **48**, 14509 (1993)
- [95] Y.-L. He, H.-N. Yang, T.-M. Lu, G.-C. Wang, Phys. Rev. Lett. **69**, 3770 (1992)
- [96] M. Henzler, private Mitteilung
- [97] J. A. Strosio, D. T. Pierce, Phys. Rev. B **49**, 8522 (1994)
- [98] D. D. Chambliss, K. E. Johnson, Surf. Sci. **313**, 215 (1994)
- [99] A. Schreyer, Dissertation Universität Bochum (1994)
- [100] B. E. Warren, X-RAY DIFFRACTION, Dover Publications, New York (1990)
- [101] P. I. Cohen, G. S. Petrich, P. R. Pukite, G. J. Whaley, A. S. Arrott, Surf. Sci. **216**, 222 (1989)
- [102] D. E. Savage, J. Kleiner, N. Schimke, Y.-H. Pang, T. Jankowski, J. Jacobs, R. Kariotis, M. G. Lagally, J. Appl. Phys. **69**, 1411 (1991)
- [103] F. Hoffman, A. Stankoff, H. Pascard, J. Appl. Phys. **41**, 1022 (1970)
- [104] A. Fuß, Dissertation Universität Köln (1993)
- [105] F. Saurenbach, Dissertation Universität Köln (1989)
- [106] O. W. Leng, Dissertation Universität Köln (1994)
- [107] E. Tsymbal, Ch. Sauer, wird veröffentlicht
- [108] B. Heinrich, M. From J. F. Cochran, L. X. Liao, Z. Celinski, K. Schneider, K. Myrtle, zur Veröffentlichung eingereicht bei Phys. Rev. **B**
- [109] Z. Celinski, B. Heinrich, J. F. Cochran, J. Appl. Phys. **73**, 5966 (1993)

- [110] F. A. Volkening, B. T. Jonker, J. J. Krebs, N. C. Koon, G. A. Prinz, J. Appl. Phys. **63**, 3869 (1988)
- [111] J. A. Strosio, D. T. Pierce, R. A. Dragoset, P. N. First, J. Vac. Sci. Technol. **A10**, 1981 (1992); J. de la Figuera, J. E. Prieto, C. Ocal, R. Miranda, Phys. Rev. B **47**, 13043 (1993); A. Schmidt, Dissertation, Freie Universität Berlin (1991)
- [112] B. Heinrich, J. F. Cochran, in: ULTRATHIN MAGNETIC STRUCTURES, VOL II, herausgegeben von B. Heinrich und J. A. C. Bland, Springer Verlag, Berlin (1994)
- [113] D. Stauffer, A. Aharony, : INTRODUCTION TO PERCOLATION THEORY, London, Philadelphia, Taylor and Francis (1985)

Ein paar Worte des Dankes...

Zunächst möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Zinn für die Aufnahme in seinem Institut bedanken. Sein reges Interesse am Fortgang der Arbeit war stets ein Ansporn. Sein unerwarteter Tod hinterläßt eine große Lücke.

Herrn Prof. Dr. P. Grünberg möchte ich für die Betreuung meiner Arbeit danken. Seine ruhige Art auch schwierige Probleme anzugehen, habe ich sehr zu schätzen gelernt.

Viele Anregungen und große Unterstützung fand ich bei den Herren *Doctores* S. Müller-Pfeiffer und M. Schneider. *S. Müller-Pfeiffer Consulting* möchte ich besonders für die vielen Diskussionen danken, M. Schneider für umfangreiche Computer-Unterstützung und beiden gemeinsam für die angenehme Zusammenarbeit, auch und gerade außerhalb des Dienstes.

Ganz besonders möchte ich Herrn R. Schreiber danken, der mir sehr geholfen hat, die *Magie* der Schichtherstellung zu erlernen. Bei praktischen Problemen aller Art war er immer eine große Hilfe. Die Zusammenarbeit mit ihm war erstklassig.

Für die konstruktive Zusammenarbeit und die zahlreichen Diskussionen möchte ich Herrn Dr. A. Schreyer, Universität Bochum, danken.

Herrn Prof. Dr. M. Henzler, Universität Hannover, möchte ich für den Aufenthalt in seinem Institut danken. Herrn Dipl. Phys. U. Schneider sei hier besonders für seine großen Mühen gedankt, mir den Eintritt in den reziproken Raum zu erleichtern.

Für die Erklärungen zur DMM und natürlich für die DMM-Software möchte ich Herrn Dr. S. Pflanz, Ludwig Maximilian Universität München, danken.

Viele wichtige Tips zum Kerr-Mikroskop und einige Inspiration verdanke ich Herrn Dr. R. Schäfer.

Für den Bau des Offset-Addierers vom SPA-LEED möchte ich Herrn P. Pickartz danken.

Auch jenseits der Physik habe ich die angenehme Zusammenarbeit, die große Hilfsbereitschaft und das inspirierende Arbeitsklima, zu dem Frau Dr. S. Handschuh, Herr M. Cronenberg, Herr V. Cros, Herr Dr. H. de Gronckel, Herr Dr. A. Fuß, Herr F. Klinkhammer, Herr Dr. C. Osthöver, Herr U. Rücker und Herr S. Schmenn wesentlich beigetragen haben, sehr geschätzt.

Schließlich möchte ich Herrn K. Heinen, Arzt, für seine Unterstützung während des Endspurtes danken.

Jül-3290
Oktober 1996
ISSN 0944-2952