

# Magnetische Grenzflächenphänomene in Eisen-Palladium-Vielfachschichtsystemen

von

Paul Zakalek

Diplomarbeit in Physik  
vorgelegt der

Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften  
der RWTH Aachen

im  
Juni 2010

angefertigt am

Institut für Festkörperforschung - Streumethoden (IFF-4)  
Forschungszentrum Jülich

Prof. Dr. Th. Brückel  
Dr. U. Rücker



Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Aachen, den 01.06.2010



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theorie des Magnetismus</b>	<b>3</b>
2.1	Atomarer Magnetismus . . . . .	3
2.1.1	Dia- und Paramagnetismus . . . . .	3
2.1.2	Hundsche Regeln . . . . .	5
2.2	Kollektiver Magnetismus . . . . .	6
2.2.1	Dichtefunktionaltheorie mit Spinpolarisation . . . . .	6
2.2.2	Ferromagnetismus im Stoner-Model . . . . .	8
2.3	Pauli-Paramagnetismus . . . . .	11
2.4	Magnetismus von Schichtsystemen . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Streutheorie</b>	<b>15</b>
3.1	Allgemeine Streutheorie . . . . .	17
3.1.1	Makroskopische Definition des Streuquerschnitts . . . . .	17
3.1.2	Quantenmechanische Beschreibung des Streuquerschnitts . . . . .	18
3.2	Streuung unter streifendem Einfall . . . . .	20
3.2.1	Reflektometrie an einzelner Schicht . . . . .	20
3.2.2	Definition des Brechungsindex . . . . .	24
3.2.3	Reflektometrie an Vielfachschichtsystemen . . . . .	25
3.3	Röntgenstreuung . . . . .	25
3.3.1	Elektromagnetische Wellen . . . . .	26
3.3.2	Streuquerschnitte . . . . .	26
3.4	Neutronenstreuung . . . . .	28
3.4.1	Fermi-Pseudopotential . . . . .	29
3.4.2	Magnetisches Wechselwirkungspotential . . . . .	29
3.4.3	Polarisationsanalyse . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Experimentelle Methoden</b>	<b>33</b>
4.1	Molekularstrahlepitaxie (MBE) . . . . .	33
4.2	Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) . . . . .	35
4.3	Auger-Elektronenspektroskopie (AES) . . . . .	36
4.4	Rasterkraftmikroskopie (AFM) . . . . .	37
4.5	Magnetometrie (SQUID und VSM) . . . . .	38
4.6	Röntgenreflektometrie (XRR) . . . . .	39
4.7	Neutronenreflektometrie mit Polarisationsanalyse (TREFF) . . . . .	40

<b>5</b>	<b>Probenpräparation</b>	<b>43</b>
5.1	Materialeigenschaften und Substrat . . . . .	43
5.2	Probenpräparation und alte Aufdampfparameter . . . . .	43
5.3	Neue Präparationsparameter . . . . .	45
<b>6</b>	<b>Analyse</b>	<b>51</b>
6.1	Rasterkraftmikroskopie (AFM) . . . . .	51
6.2	Röntgenreflektometrie (XRD) . . . . .	53
6.2.1	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>2Å</sub> ] <sub>x10</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	53
6.2.2	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>10Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	59
6.2.3	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>150Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	62
6.3	Magnetometrie . . . . .	66
6.3.1	Temperaturabhängigkeit . . . . .	67
6.3.2	Sättigungsmagnetisierung . . . . .	68
6.4	Neutronenreflektometrie (TREF) . . . . .	73
6.4.1	Temperaturabhängigkeit . . . . .	74
6.4.2	Feldabhängigkeit . . . . .	75
6.4.3	Pd- und Fe-Referenzproben . . . . .	77
6.4.4	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>2Å</sub> ] <sub>x10</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	78
6.4.5	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>10Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	82
6.4.6	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>150Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	86
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Fazit</b>	<b>93</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>95</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>97</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>100</b>
A.1	Röntgeneingabedateien . . . . .	101
A.1.1	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>2Å</sub> ] <sub>x10</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	101
A.1.2	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>10Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	102
A.1.3	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>150Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	103
A.2	Neutroneneingabedateien . . . . .	104
A.2.1	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>2Å</sub> ] <sub>x10</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	104
A.2.2	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>10Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	105
A.2.3	[Pd <sub>150Å</sub> /Fe <sub>150Å</sub> ] <sub>x5</sub> /Pd <sub>150Å</sub> . . . . .	106

# 1 Einleitung

Magnetische Vielschichtsysteme sind ein interessantes Forschungsgebiet, welches sehr wichtig für unterschiedliche Anwendungsgebiete ist. Ohne diese Vielschichtsysteme wären die heutigen Rechner so nicht möglich gewesen. Erst durch die Entdeckung des GMR-Effekts durch P. Grünberg [1] und A. Fert [2], konnten extrem sensitive und kleine Sensorköpfe für die modernen Festplatten entwickelt werden. Die heutige Informationsdichte wäre ohne die Entdeckung magnetischer Momente, die senkrecht zur Schichtebene ausgerichtet sind, nicht möglich gewesen. Diese konnten unter anderem in der geordneten  $L1_0$ -Phase in Eisen-Palladium-Legierungen ([3] und [4]) erreicht werden.

Für diese interessanten Kopplungsphänomene bei den Eisen-Palladium-Vielschichtsystemen ist die Hybridisierung der 4d Elektronen des Palladiums mit den 3d Elektronen von Eisen verantwortlich. Wegen der großen Zustandsdichte des Palladiums an der Fermi-Energie und eines großen Stoner-Parameters, erfüllt Palladium fast das Stoner-Kriterium für Ferromagnetismus. In Ref. [5] wurde gezeigt, dass schon kleinste Konzentrationen von Eisen in Palladium  $c_{Fe} > 0,12\%$  ausreichen um in Palladium Ferromagnetismus zu induzieren.

Interessant ist nun die Frage nach einer möglichen Polarisierung des Palladiums an der Grenzschicht zu Eisen und wie diese in einem Vielschichtsystem verteilt ist. Dafür gibt es verschiedene Arbeiten, die aber teilweise unterschiedliche Ergebnisse liefern. Bei der Untersuchung von Fe/Pd/Fe-Dreischichtsystemen, die in (001)-Richtung aufgewachsen wurden, konnte Celinski [6] zeigen, dass bis zu vier Monolagen Palladium mit  $m_{Pd} = 0,25 \mu_B$  ferromagnetisch sind. Dieser Ferromagnetismus wurde aber bei mehr Palladiummonolagen zerstört. In einer anderen Arbeit [7] wurde von Blügel Volumen-Palladium, auf dem eine Eisenschicht liegt, analytisch untersucht. Dabei konnte gezeigt werden, dass die ersten beiden Monolagen des Palladiums ferromagnetisch mit  $m_{Pd} = 0,32 \mu_B$  und  $m_{Pd} = 0,17 \mu_B$  sind. Des Weiteren wurde das magnetische Moment des Eisens in der Grenzschicht um  $1\mu_B$  verstärkt. Dies konnte dann in einer späteren Arbeit [8] verifiziert werden, in der unter anderem auch Blügel gezeigt hat, dass eine Monolage Palladium ferromagnetisch mit einem induzierten magnetischen Moment von  $m_{Pd} = 0,29 \mu_B$  vorliegt und in der Tat Eisen ein erhöhtes magnetisches Moment von  $m_{Fe} = 2,69 \mu_B$  zeigt.

Andererseits gibt es auch Arbeiten, die eine noch stärkere Polarisierung zeigen. In [9] konnte bei einer theoretischen Berechnung des magnetischen Momentes des Palladiums ein magnetisches Moment von  $m_{Pd} = 0,15 \mu_B$ , mit einer Reichweite bis zu 14 Monolagen gezeigt werden. Experimentell gab es sogar Ergebnisse [10], die bei einem induzierten magnetischen Moment von  $m_{Pd} = 0,32 \mu_B$  eine Reichweite der Induktion von bis zu 20 Å aufzeigten. Dabei muss aber erwähnt werden, dass die

Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme in einer anderen Orientierung untersucht wurden.

In einer früheren Arbeit von Schumacher [11] konnte er hingegen keine Polarisation des Palladiums feststellen. Bei der Analyse seiner Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme hat sich gezeigt, dass sich eine Eisen-Palladium-Mischschicht an der Grenzfläche gebildet hat. Diese hat die exakte Bestimmung einer Polarisation des Palladiums verhindert.

In dieser Arbeit soll nun die Arbeit von Schumacher fortgesetzt und bessere Präparationsparameter gefunden werden, um diese Mischschicht zu verhindern. Ziel dieser Arbeit ist es dann zu untersuchen, ob Palladium in der Nähe der Grenzfläche zu Eisen polarisiert wird und im nächsten Schritt die genaue Verteilung in den Vielfachschichtsystemen zu überprüfen. Es ist hierbei interessant zu erfahren, ob sich durch die magnetische Wechselwirkung des polarisierten Palladiums auf das Eisen extrem dünne Eisenschichten magnetisch stabilisieren lassen, bei denen dann der Magnetismus in 2-dimensionalen Systeme untersucht werden kann.

Dafür werden in Kapitel 5 verschiedene Aufdampfparameter für die Probenpräparation in der MBE-Anlage verglichen. Es gelingt durch eine variable Aufdampftemperatur eine Diffusion zu verhindern, aber trotzdem gut definierte Grenzflächen zu bekommen. Mit den gefundenen Präparationsparametern werden die epitaktisch hergestellten Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme in Kapitel 6.2 auf ihre strukturellen Eigenschaften charakterisiert, bevor in Kapitel 6.3 versucht wird mittels Magnetometrie eine mögliche Polarisation des Palladiums nachzuweisen. Zur Sicherung der Ergebnisse wird die Temperatur- und Feldabhängigkeit der magnetischen Momente von Einzelschichten und Eisen-Palladium-Legierungen als Referenz herangezogen. Zu Letzt wird dann mit Hilfe polarisierter Neutronenreflektometrie in Kapitel 6.4 versucht die exakte Verteilung in den Schichtsystemen zu bestimmen.

# 2 Theorie des Magnetismus

Es gibt viele verschiedene Arten von Magnetismus. Grundsätzlich kann man zwischen zwei Arten von Magnetismus unterscheiden, einmal den atomaren Magnetismus, der in unterschiedlichen Ausprägungen immer vorhanden ist und auf dem Pauli-Prinzip beruht. Diese Art von Magnetismus wird im folgenden Kapitel besprochen. Des Weiteren gibt es den kollektiven Magnetismus, der durch eine komplizierte Wechselwirkung aller Teilchen in einem Festkörper entsteht. Bei diesem Magnetismus kann es bei bestimmten Voraussetzungen energetisch günstiger sein, wenn sich alle Momente parallel oder antiparallel ausrichten. Diese Art von Magnetismus wird im Kapitel 2.2 näher beschrieben. In Kapitel 2.3 wird dann auf den Pauli-Paramagnetismus eingegangen, der aus der Aufspaltung der Zustandsdichteparabel auf Grund unterschiedlicher Energien der beiden Spin-Richtungen folgt. Zuletzt, im Kapitel 2.4, wird der spezielle Fall von Magnetismus in Schichtsystemen betrachtet.

## 2.1 Atomarer Magnetismus

Unter dem Begriff des atomaren Magnetismus fasst man im Grunde genommen unterschiedliche Magnetismusarten zusammen. Diese Magnetismusarten sind der Diamagnetismus, der Langevin-, der Van-Fleck-Paramagnetismus. Diese folgen aus der quantenmechanischen Betrachtung des Systems in einem äußeren Feld und werden im folgendem Kapitel beschrieben.

### 2.1.1 Dia- und Paramagnetismus

Zur Erklärung des Dia- und Paramagnetismus der Atome betrachtet man das magnetische Moment der Atome, hervorgerufen durch den Bahndrehimpuls und den Spin der Elektronen nicht als Kollektiv. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird einzig und allein durch das Pauli-Prinzip beschrieben.

Dieser Magnetismus ist ein quantenmechanischer Effekt, weshalb man mit der Schrödingergleichung beginnt:

$$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\Psi = E\psi \quad (2.1)$$

Bei einem zusätzlichem Feld muss beim Hamiltonoperator die kinetische Energie modifiziert werden:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e/c\vec{A} \quad (2.2)$$

mit dem Vektorpotential  $\vec{A}$  des magnetischen Feldes. Nimmt man nun an, dass ein externes magnetisches Feld  $\vec{B}$  parallel zur z-Richtung anliegt, so kann man wegen der Quelfreiheit des magnetischem Feldes das externe Feld durch die Rotation des Vektorpotentials schreiben:  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . Hierbei hat man noch eine Eichfreiheit bezüglich  $\vec{A}$ . Damit der Impuls mit dem Vektorpotential vertauscht, nimmt man hier die Coulomb-Eichung  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ . Somit kann man für das Vektorpotential mit  $\vec{B}$  entlang z-Richtung schreiben:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)^T. \quad (2.3)$$

Dadurch kann der Hamiltonoperator geschrieben werden als

$$\hat{H} = \sum_i \frac{1}{2m} \left( \vec{p}_i + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2 + \sum_i \frac{-Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_i \vec{m}_i \vec{B}. \quad (2.4)$$

Hierbei bezeichnet  $\vec{m}$  das magnetische Moment des Spins der Elektronen,  $\vec{r}$  den Abstand der Elektronen zum Kern,  $Z$  die Kernladungszahl und  $m$  die Masse. Es wurde die Ersetzung 2.2 benutzt und man hat die Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit dem Kern berücksichtigt. Der letzte Term beschreibt die magnetische Wechselwirkung der Spins der Elektronen mit dem externen Feld. Diesen Hamiltonoperator kann man nun in einen vom Magnetfeld unabhängigen und einen vom Magnetfeld abhängigen Teil aufteilen  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ , mit:

$$\hat{H}_0 = \sum_i \left( \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.5)$$

$$\hat{H}_1 = 2\vec{A}(\vec{r}_i) \cdot \vec{p}_i + \mu_B g_e \vec{B} \cdot \vec{s}_i + \frac{e^2}{2mc^2} |\vec{A}(\vec{r}_i)|^2 \quad (2.6)$$

$$= \mu_B \vec{B} (\vec{l}_i + 2\vec{s}_i) + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2). \quad (2.7)$$

Hierbei hat man die Vertauschbarkeit des Impulsoperators und des Vektorpotentials benutzt und die Verknüpfung des magnetischen Moments mit dem Spin:  $\vec{m} = -\mu_B g_e \vec{s}$ , mit  $g_e = 2 \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2) \right) \approx 2$  als Lande g-Faktor und  $\alpha = 1/137$  als Sommerfeld-Feinstrukturkonstante. Des Weiteren wurde benutzt, dass  $\mu_B \vec{l} = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{r} \times \vec{p}$  ist. Somit kommt man auf Gleichung 2.7, die als kleine Störung vom Hamiltonoperator ohne Feld  $\hat{H}_0$  betrachtet werden kann.

Da man das magnetische Moment als Ableitung der Energie nach dem Magnetfeld

definiert:  $\vec{m} = -\frac{\partial E(\vec{B})}{\partial \vec{B}}$ , kann ein anliegendes magnetisches Feld  $B$  als eine kleine Störung angesehen werden. Somit bekommt man bei einer Störungsrechnung für die Grundzustandsenergie:

$$E = E_0 + \langle 0|H_1|0\rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0|H_1|n\rangle|^2}{E_0 - E_n} \quad (2.8)$$

$$= E_0 + \mu_B \vec{B} \langle 0| \sum_i (\vec{l}_i + 2\vec{s}_i) |0\rangle \quad (2.9)$$

$$+ \frac{e^2}{8mc^2} B^2 \langle 0| \sum_i (x_i^2 + y_i^2) |0\rangle \quad (2.10)$$

$$+ \mu_B^2 B^2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0| \sum_i (\vec{l}_i + 2\vec{s}_i) |n\rangle|^2}{E_0 - E_n}. \quad (2.11)$$

Hierbei gibt der Term (2.9), der linear in  $B$  ist, den größten Beitrag, wenn Bahn- oder Spindrehimpuls nicht verschwinden. Dies ist der Langevin-Paramagnetismus, der durch den Bahndrehimpuls und den Spin des Elektrons hervorgerufen wird. Er ist nur ungleich Null, wenn die Schalen des Atoms nicht ganz gefüllt sind, da durch das Pauli-Prinzip nur in diesen Fällen ein resultierendes magnetisches Moment übrig bleibt. Beim Paramagnetismus werden die vorhandenen magnetischen Momente im Mittel parallel zum anliegenden Feld ausgerichtet. Dabei sind diese aber auf Grund thermischer Fluktuationen statistisch um diesen Mittelwert verteilt. Bei einer kleinen Störung der Grundzustandsenergie durch ein anliegendes magnetisches Feld überwiegen die Terme linearer Ordnung. Dadurch geben die Terme quadratischer Ordnung in  $B$  nur signifikante Beiträge zur Grundzustandsenergie, wenn der Term linearer Ordnung verschwindet, also wenn  $L = \sum_i l_i = 0$  und  $S = \sum_i s_i = 0$  gilt. Der erste Term zweiter Ordnung (2.10) beschreibt den Diamagnetismus, der durch ein induziertes magnetisches Feld entsteht, das durch die Lenzsche Regel antiparallel zum ursprünglichem Feld ist. Der dritte Term ist der Van-Fleck-Paramagnetismus, der durch Beimischung von Zuständen höherer Energie in den Grundzustand entsteht.

### 2.1.2 Hundsche Regeln

Bei den Hundschen Regeln handelt es sich um empirisch gefundene Zusammenhänge. Diese beschreiben, wie sich der Gesamtspin, der Gesamtbahndrehimpuls und der Gesamtdrehimpuls aus den Einzelspins und Bahndrehimpulsen zusammensetzt. Die Hundschen Regeln gelten aber zunächst nur für Atome.

1. **Regel:** Der Gesamtspin  $S$  ist maximal.
2. **Regel:** Der Gesamtbahndrehimpuls  $L$  ist maximal, wenn dies verträglich mit Regel 1 ist.

- 3. Regel:** Bei  $n \leq 2l + 1$  wird der Gesamtdrehimpuls  $J$  minimal  $J = |L - S|$ .  
Bei  $n > 2l + 1$  wird der Gesamtdrehimpuls maximal,  $J = S + L$ ;  $n$  ist die Hauptquantenzahl und  $l$  die Bahndrehimpulsquantenzahl.

Hierbei kann man die erste und zweite Regel mit Hilfe der Coulombwechselwirkung und des Pauli-Prinzips verstehen, da bei der Maximierung des Spins und des Bahndrehimpulses der Abstand der Elektronen zueinander maximal wird. Dadurch wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung minimiert. Die dritte Regel kann man aus der Dirac-Gleichung herleiten, was aber hier nicht gezeigt werden soll.

Palladium hat eine  $[Kr]4d^{10}$  Elektronenkonfiguration und besitzt somit nur abgeschlossene Schalen. Dadurch heben sich Bahndrehimpuls und Spin der Elektronen nach den Hund'schen Regeln auf und es gibt keinen Langevin-Paramagnetismus. Des Weiteren kann man zeigen, dass der Diamagnetismus, als auch der Van-Fleck-Paramagnetismus temperaturunabhängig sind, siehe dazu z.B. [12]. Somit würde atomares Palladium keinen Langevin-Paramagnetismus besitzen und man hätte nur temperaturunabhängige magnetische Anteile.

Anders sieht es bei Eisen aus. Dieses hat eine  $[Ar]3d^64s^2$  Elektronenkonfiguration, wodurch es nach den Hund'schen-Regeln ein magnetisches Moment besitzt. Das magnetische Moment von atomarem Eisen ist  $m_{Fe} = 4\mu_B$ .

Dies gilt aber nur für Atome exakt. Bei Festkörpern gelten die Hund'schen Regeln nicht zu 100%, da die Elektronenwellenfunktionen der Atome mit Nachbaratomen überlappen. Somit kann man das Pauli-Prinzip nicht rigoros anwenden und man bekommt auch Magnetismus bei abgeschlossenen Schalen und auch eine Temperaturabhängigkeit. Aus dem selben Grund ist das magnetische Moment bei Elementen mit nicht abgeschlossenen Schalen kleiner, als wenn man einzelne Atome betrachten würde. Eisen im Fe-Metall im Grundzustand hat z.B. ein magnetisches Moment im Festkörper von  $m_{Fe} = 2,2\mu_B$ .

## 2.2 Kollektiver Magnetismus

Wie in Kapitel 2.1 gezeigt wurde, sind Atome mit nicht abgeschlossenen Schalen durch den Spin und den Bahndrehimpuls der Elektronen von sich aus magnetisch. Dies ist aber nicht zwingend erforderlich im Festkörper, da in einem Festkörper sich die magnetischen Momente der Atome parallel ausrichten müssen. Dies würde aber bei einem Überlapp der Wellenfunktionen die kinetische Energie der Elektronen durch das Pauli-Prinzip erhöhen. Zwei Elektronen können nicht den gleichen Zustand einnehmen. Somit ist der Magnetismus im Festkörper eher die Ausnahme. Nur die Übergangsmetalle Fe, Co, Ni und einige seltene Erden, z.B. Gd weisen Ferromagnetismus auf.

### 2.2.1 Dichtefunktionaltheorie mit Spinpolarisation

Der Effekt des Ferromagnetismus ist ein Vielteilcheneffekt und somit schwerer zu beschreiben als der atomare Magnetismus. Man müsste die Schrödingergleichung

für  $10^{23}$  Elektronen lösen, um diesen Effekt zu erklären. Dies ist eine unmögliche Aufgabe, weshalb man auf Näherungslösungen angewiesen ist. Hierbei hat sich die Dichte-Funktional-Theorie (DFT) als erfolgreich erwiesen, bei der der Grundzustand als Funktion der Elektronendichte  $n(\vec{r})$  betrachtet wird. Hier gilt für alle Elektronendichten  $n(\vec{r}) \neq n_0(\vec{r})$ , mit der Elektronendichte  $n_0(\vec{r})$  des Grundzustandes:

$$E[n(\vec{r})] \geq E_0 = E[n_0(\vec{r})] \quad (2.12)$$

Somit kann man durch eine Variationsrechnung die Grundzustandselektronendichte  $n_0(\vec{r})$  approximieren. Da wir an dem Spinsystem der betrachteten Proben interessiert sind, teilen wir die Elektronendichte  $n(\vec{r})$  bezüglich der beiden Spins ( $n^+, n^-$ ) auf und führen eine Magnetisierungsdichte  $m(\vec{r})$  ein:

$$n(\vec{r}) = n^+(\vec{r}) + n^-(\vec{r}), \quad m(\vec{r}) = n^+(\vec{r}) - n^-(\vec{r}), \quad (2.13)$$

Dadurch muss die Energie  $E[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})]$  als Funktional der beiden Spindichten  $n^+(\vec{r})$  und  $n^-(\vec{r})$  betrachtet werden. Entscheidend ist nun die Definition des Energiefunktionals. Nach Kohn und Sham versucht man die Austauschwechselwirkung der Elektronen von den Termen zu separieren, bei denen man die Elektronen als nicht wechselwirkend betrachten muss:

$$E[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})] = T_s[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})] + \int d^3r V_{ext}^+(\vec{r})n^+(\vec{r}) + \quad (2.14)$$

$$\int d^3r V_{ext}^-(\vec{r})n^-(\vec{r}) + \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})]. \quad (2.15)$$

Hierbei beschreibt  $T_s[n(\vec{r})]$  die kinetische Energie der nicht miteinander wechselwirkenden Teilchen. Der zweite und dritte Term beschreibt die Energie der Elektronen innerhalb eines äußeren Potentials. Der vierte Term ist die Coulombwechselwirkung der Elektronen und der letzte Term ist die Energie, welche durch die Austausch-Korrelation der Elektronen hervorgerufen wird. Somit steckt nun die ganze Information der Austauschwechselwirkung in  $E_{XC}$ . Durch diese Aufteilung kann man mit einem effektivem Potential,

$$V_{eff}^\pm(\vec{r}) = e^2 \int d^3r' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{ext}^\pm + \frac{\delta E_{XC}[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})]}{\delta n^\pm(\vec{r})}, \quad (2.16)$$

die Bestimmung der Grundzustandsdichte  $n(\vec{r})$  auf eine Schrödingergleichung mit Einteilchenfunktionen  $\phi_i^\pm(\vec{r})$  zurückführen:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}^\pm(\vec{r}) \right] \phi_i^\pm(\vec{r}) = \epsilon_i^\pm \phi_i^\pm(\vec{r}), \quad (2.17)$$

wobei die Zustandsdichte  $n^\pm(\vec{r})$  mit den Einteilchenfunktionen verknüpft ist durch:

$$n^\pm(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i^\pm(\vec{r})|. \quad (2.18)$$

Somit muss man nur noch  $E_{XC}$  vernünftig approximieren, damit das System gut beschrieben wird, aber die Lösung der Schrödingergleichung noch möglich ist. Als eine gute Approximation hat sich die lokale Dichte-Approximation (LDA) erwiesen. Dabei nimmt man für die Energiedichte die Dichte des homogenen Elektronengases  $\epsilon_{hom}$  an:

$$E_{XC}[n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r})] \approx \int d^3r n(\vec{r}) \epsilon_{hom}(n^+(\vec{r}) + n^-(\vec{r})) \quad (2.19)$$

$$\approx -\alpha \frac{3e^2}{4} (6/\pi)^{1/3} \int d^3r [(n^+(\vec{r}))^{4/3} + (n^-(\vec{r}))^{4/3}] \quad (2.20)$$

Bei der zweiten Approximation hat man die  $X\alpha$ -Approximation benutzt, die sich in den meisten Fällen bewährt hat. Dadurch hat man nun eindimensionale Schrödingergleichungen hergeleitet, die das ganze System beschreibt und wo man nicht die Wechselwirkung von  $10^{23}$  Teilchen betrachten muss, wie in Ref. [13] nachzulesen ist.

## 2.2.2 Ferromagnetismus im Stoner-Model

Im Stoner-Modell verwendet man nun, dass die Magnetisierung  $m(\vec{r})$  klein im Vergleich zu den beiden Spindichten  $n^\pm(\vec{r})$  ist. Dadurch kann man das Austauschpotential  $V^\pm(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}(n^+(\vec{r}), n^-(\vec{r}))}{\partial n^\pm(\vec{r})}$  nach der Magnetisierung entwickeln:

$$V_{XC}^\pm(\vec{r}) \approx V_{XC}^0 \mp m(\vec{r}) V'(n(\vec{r})) \approx V_{XC}^0 \mp \frac{1}{2} IM \quad (2.21)$$

$$\text{mit } M = \int d^3r m(\vec{r}) \quad (2.22)$$

Bei der zweiten Approximation wurde das Stoner-Modell verwendet, bei dem die Potentialänderung durch eine Konstante, den Stonerparameter  $I$  beschrieben wird. Durch diese spinabhängige Potentialänderung werden die Energieeigenwerte abhängig vom Spin angehoben, oder abgesenkt:  $E^\pm = E^0 \mp \frac{1}{2} IM$ . Mit

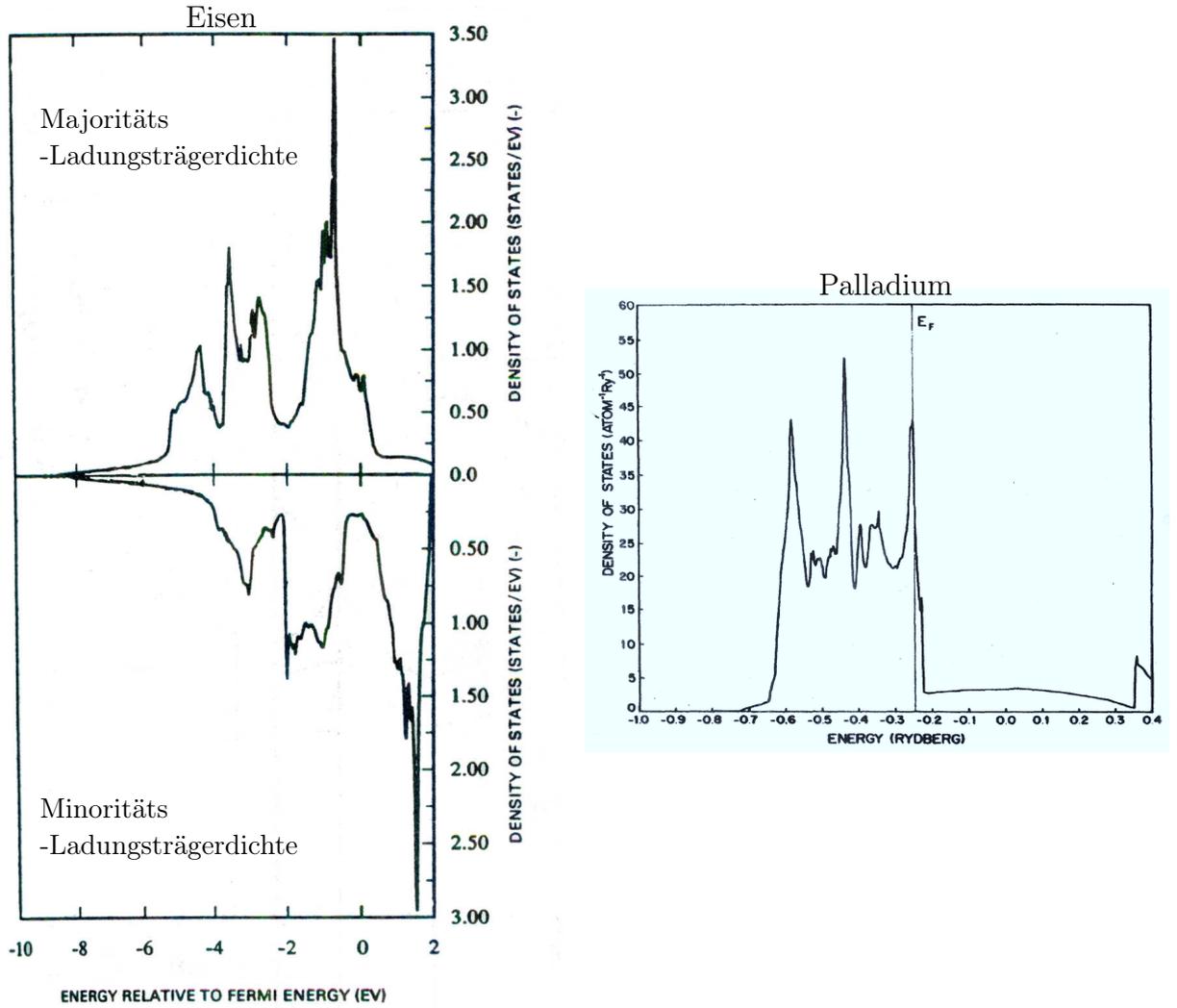


Abbildung 2.1: DFT-Rechnungen der Zustandsdichte von Eisen und Palladium, entnommen aus [14] und [13].

$$n^\pm(E) = \sum \int_{BZ} d^3k \delta(E - E^\pm) = n^0(E \pm \frac{1}{2}IM), \quad (2.23)$$

sieht man, dass sich die Zustandsdichte um einen konstanten Beitrag verschiebt. Dadurch kann für die antiparallele Spinrichtung die Zustandsdichte über die Fermienergie gehoben werden und es bleibt ein effektives magnetisches Moment übrig. Dies kann man z.B in Abb. 2.1 für Eisen sehen.

Wenn man Gleichung 2.23 in Gleichung 2.13 einsetzt und über die Energie integriert, bekommt man:

Elemente	$n^0(E_F)$ [eV <sup>-1</sup> ]	I [eV]	$In^0(E_F)$
Fe	1,54	0,93	1,43
Co	1,72	0,99	1,7
Ni	2,02	1,01	2,04
Pd	1,14	0,68	0,78
Pt	0,79	0,63	0,5

Tabelle 2.1: Zusammenfassung für den Ferromagnetismus wichtiger Parameter, wie die Zustandsdichte an der Fermi-Energie  $n^0(E_F)$ , der Stoner-Parameter I und das Produkt dieser. Ist  $In^0(E_F) \geq 1$ , liegt Ferromagnetismus vor. Die Werte wurden aus [15] entnommen.

$$M = \int^{E_F(M)} dE \left[ n^0\left(E + \frac{1}{2}IM\right) - n^0\left(E - \frac{1}{2}IM\right) \right] = F(M) \quad (2.24)$$

Diese Gleichung muss nun selbstkonsistent gelöst werden, da sowohl auf der linken Seite als auch im Integral in der Fermi-Energie das magnetische Moment steht. Dabei kann es 2 unterschiedliche Fälle geben. Zuerst kann nur die triviale Lösung existieren, bei der keine Magnetisierung vorhanden ist,  $M = 0$ . Hierbei kann im Festkörper keine spontane Magnetisierung auftreten. Im anderem Fall kann es 3 verschiedene Lösungen der Gleichung geben, wieder den trivialen Fall,  $M = 0$ , die aber nicht stabil ist, aber es existiert auch eine Lösung mit spontaner Magnetisierung  $M = M_S$ . Deshalb liegt ein magnetischer Festkörper vor. Wie in [13] gezeigt ist, kann man eine hinreichende Bedingung für die Existenz der Lösung mit spontaner Magnetisierung herleiten. Diese hinreichende Bedingung wird Stonerkriterium genannt:

$$In^0(E_F) \geq 1 \quad (2.25)$$

Dies bedeutet, dass Materialien mit einer hohen Zustandsdichte an der Fermienergie oder großem Austauschintegral Kandidaten für Ferromagnetismus sind. Dies sind insbesondere die Übergangsmetalle, die 3d-Elektronen mit kleinen Bandbreiten und somit großen Zustandsdichten an der Fermienergie besitzen (siehe Abb. 2.1). Einen Vergleich der uns interessierenden Materialien sieht man in Tabelle 2.1. Daran sieht man, dass Eisen das Kriterium für Ferromagnetismus erfüllt und dass das Palladium sehr nah dran ist. Somit kann man hoffen, dass man unter anderem durch Hybridisierung der d-Elektronen des Palladiums mit benachbartem Eisen, dieses polarisieren kann.

## 2.3 Pauli-Paramagnetismus

Darüber hinaus gibt es noch den Pauli-Paramagnetismus, der durch die Aufspaltung der Zustandsdichteparabel erzeugt wird. Die Beschreibung des Magnetismus folgt hauptsächlich der Ref. [13]. Durch das externe magnetische Feld sind die Elektronen mit Spin parallel zum externen Feld  $\rho_{\uparrow}(E)$ , gegenüber den Elektronen mit antiparallelem Spin  $\rho_{\downarrow}(E)$ , energetisch bevorzugt, wobei der Energiegewinn oder -verlust durch  $\Delta E = \pm\mu_B B$  beschrieben wird. Somit ist das magnetische Moment der Probe gegeben durch

$$m = \mu_B(N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) \quad (2.26)$$

Wobei  $N_{\sigma}$  mit  $\sigma \in (\uparrow, \downarrow)$ , das die Besetzungszahlen für parallelen und antiparallelen Spin beschreibt, gegeben ist durch:

$$N_{\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \rho_{\sigma}(E) \quad (2.27)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{\pm\mu_B B}^{\infty} dE f(E) \rho_0(E \pm \mu_B B) \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE f(E \pm \mu_B B) \rho_0(E). \quad (2.29)$$

$f(E)$  ist die Fermi-Funktion, die entweder 1 oder 0 ist. Nach einer Taylor-Entwicklung bekommt man:

$$N_{\sigma} \approx \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE \left( f(E) \pm \mu_B B \frac{\partial f}{\partial E} \right) \rho_0(E) \quad (2.30)$$

Die Aufteilung der Zustandsdichteparabel sieht man in Abb. 2.2

Somit ergibt sich das magnetische Moment zu:

$$m = \mu_B \int_0^{\infty} dE \frac{\partial f(E)}{\partial E} \rho_0(E) \approx -\delta(E - E_f) \mu_B^2 \rho(E_f) \quad (2.31)$$

Daraus folgt, dass der Pauli-Magnetismus in erster Näherung abhängig von der Zustandsdichte bei der Fermi-Energie ist und somit temperaturunabhängig. Bei Betrachtung von höheren Ordnungen stellt man eine kleine Temperaturabhängigkeit fest, diese ist aber vernachlässigbar klein, weshalb ich hier nicht darauf eingehe und auf z.B [12], Kapitel 4.1 verweisen, dem auch diese Beschreibung des Pauli-Paramagnetismus gefolgt ist.

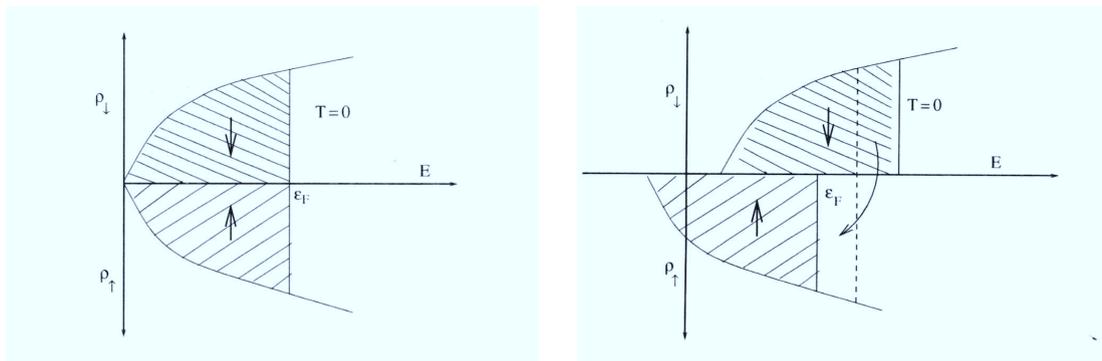


Abbildung 2.2: Links: Zustandsdichteparabel, wenn kein äußeres magnetisches Feld anliegt. Rechts: Zustandsdichteparabel, bei einem angelegtem magnetischem Feld. Es tritt eine Aufspaltung für unterschiedliche Spins auf. Entnommen aus [12].

## 2.4 Magnetismus von Schichtsystemen

Beim Magnetismus in Schichtsystemen spielt eine Vielzahl an Phänomenen eine Rolle, sodass die exakte Beschreibung sehr schwer ist. Deshalb beschränkt man sich oft auf einen phänomenologischen Zugang. Dabei werden zuerst die Anisotropien, die in Schichtsystemen auftreten können, besprochen. Danach wird noch kurz die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung betrachtet.

Die möglichen Anisotropien teilt man auf in: Kristallanisotropie, Oberflächenanisotropie, Formanisotropie, Magnetoelastische Anisotropie, Stufenanisotropie. Hier werden nur kurz die unterschiedlichen Anisotropien beschreiben und für eine genauere Auseinandersetzung auf Kapitel B1 von [13] verwiesen.

**Kristallanisotropie:** Die Kristallanisotropie wird hervorgerufen durch die Elektronenorbitale, die wegen der Spin-Bahn-Kopplung bestimmte Spineinstellungen bevorzugen. Dadurch können sich in einem Kristall leichte und schwere Achsen für die Magnetisierung bilden. Dieser Effekt ist allgemein gültig, nicht nur für Schichtsysteme.

**Oberflächenanisotropie:** Diese Anisotropie ist darauf zurückzuführen, dass die Symmetrie an der Oberfläche der Schichten gebrochen ist. Die Atome an der Grenzschicht haben eine andere Umgebung als die Atome im Volumen. Hierbei kann eine Symmetrierniedrigung auftreten, die sowohl die Ausrichtung der Momente in der Ebene als auch senkrecht zu ihr bevorzugen kann.

**Formanisotropie:** Jedes einzelne magnetische Moment wechselwirkt mit den Momenten in seiner Umgebung. Wegen der starken Richtungsabhängigkeit des Dipolfeldes der einzelnen magnetischen Momente ist die resultierende Energie des Systems stark von der Form und der Verteilung der magnetischen Momente abhängig. In einem Schichtsystem wird z.B. von den magnetischen Momenten

eine Magnetisierung in der Ebene bevorzugt. Diese und die Oberflächenanisotropie sind die stärksten Anisotropien in einem Schichtsystem.

**Magnetoelastische Anisotropie:** Wächst eine Schicht auf einem Substrat auf, dann tritt unweigerlich eine Verzerrung auf. Die Gitterkonstanten des Substrats passen nicht genau zur aufwachsenden Schicht, weshalb die aufwachsende Schicht zuerst mit den Gitterparametern des Substrats aufwächst und erst nach einigen Å, aber teilweise auch erst nach einigen  $\mu\text{m}$ , in ihrem Grundzustand relaxiert. Dies beeinflusst ebenfalls die Momentverteilung, woraus ein magnetoelastischer Energiebetrag entsteht.

**Stufenanisotropie:** An einer Stufe wird die Symmetrie ebenfalls gebrochen und reduziert, weshalb genauso wie bei der Oberflächenanisotropie ein Energiebetrag hervorgeht, der die Verteilung der magnetischen Momente beeinflusst.

Allgemein treten in einem Schichtsystem all diese Anisotropien auf und konkurrieren miteinander. Deshalb ist eine genaue Beschreibung schwierig. Aber wichtig ist festzuhalten, dass sich wegen der Formanisotropie die magnetischen Momente meistens in der Schichtebene ausrichten.

Die zweite wichtige Eigenschaft, bei Schichtsystemen ist die andere Temperaturabhängigkeit der magnetischen Momente als im Volumen-Material. Es hat sich herausgestellt, dass die Curie-Temperatur in Schichtsystemen erniedrigt wird. Dabei kann man diese Erniedrigung beschreiben durch:

$$\frac{T_C(\infty) - T_C(D)}{T_C(\infty)} = \left( \frac{D}{D_0} \right)^{1/0,7} \quad (2.32)$$

Hierbei bezeichnet  $D$  die Dicke der Schichten,  $D_0$  die kritische Dicke, bei der auch bei einer Temperatur von 0 K, eine ferromagnetische Ordnung zusammenbrechen würde. Diese kritische Dicke beträgt ungefähr 2 Atomlagen.  $T_C(D)$  ist die Curie-Temperatur innerhalb der Schicht und  $T_C(\infty)$  bezeichnet die Curie-Temperatur von Volumen-Material, also von unendlich dicken Schichten. Es hat sich herausgestellt, dass die Gleichung 2.32 nur für Schichtdicken gültig ist, die größer als 4 Atomlagen sind. Bei noch kleineren Schichten stellt man eine etwas höhere Curie-Temperatur fest, als es Gleichung 2.32 vorhersagen würde, siehe dazu Ref. [13].



## 3 Streutheorie

Streumethoden sind ein sehr wichtiges Werkzeug des letzten Jahrhunderts, durch welches man nicht destruktiv die Probeneigenschaften bestimmen kann. Diese können bei geeigneter Wahl der Sonden und Experimentparameter Aufschlüsse über die inneren und äußeren Probeneigenschaften wie Kristallstruktur, Atomabstand, Magnetismus und vieles mehr geben. Die zu benutzenden Sonden müssen dabei verschiedene Anforderungen erfüllen, um geeignet zu sein:

- Die Wellenlänge der Sonde muss in der selben Größenordnung sein, wie die zu untersuchenden Strukturen. Im vorliegenden Fall also in der Größenordnung des Atomabstandes von einigen Ångström Å.
- Die Absorption innerhalb des Probenmaterials darf nicht zu groß sein, um tiefenaufgelöst die Volumeneigenschaften bestimmen zu können.
- Die Sonden dürfen nicht zu stark wechselwirken, damit außerhalb des Totalreflektionsplateaus nur Einfachstreuung auftritt. Vielfachstreuung erschwert die Analyse stark, die Theorie der Bornschen Näherung mit gestörten Wellen kann allerdings die Streuung in der Nähe des Totalreflektion zuverlässig beschreiben.
- Um magnetische Strukturen messen zu können, müssen die Sonden mit dem magnetischen Feld der Probe wechselwirken können.

Diese und noch viele andere Anforderungen schränken die Anzahl der zur Verfügung stehenden Sonden stark ein. Als besonders geeignet zur Strukturuntersuchung haben sich Elektronen, Photonen und Neutronen herausgestellt.

In Abb. 3.1 sieht man diese 3 Sonden im Vergleich. Man sieht, dass sich zur Untersuchung von atomaren Strukturen Röntgenstrahlen mit Energien von ca. 10 keV, Elektronen von ca. 100 eV oder thermische Neutronen von einigen 25 meV mit einer Wellenlänge von 1 Å besonders gut eignen, da somit die Wellenlänge innerhalb der Größenordnung der atomaren Abstände ist.

In dieser Arbeit wurden Elektronen zur In-situ-Charakterisierung bei der Präparation der Vielfachschichtsysteme in der MBE (Molekularstrahlepitaxie, siehe Kapitel 4.1) benutzt. Diese eignen sich wegen ihrer geringen Energie und der geringen Eindringtiefe auf Grund der starken Coulomb-Wechselwirkung besonders gut zur Oberflächenuntersuchung. Die Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) wird in Kapitel 4.2 näher beschrieben.

Die Röntgenstreuung eignet sich wegen ihrer guten Verfügbarkeit und hohen Intensität zur Untersuchung der inneren Struktur der Materie. Die Proben zu dieser Arbeit wurden mit der Röntgenreflektometrie untersucht. Diese Untersuchungsmethode ist

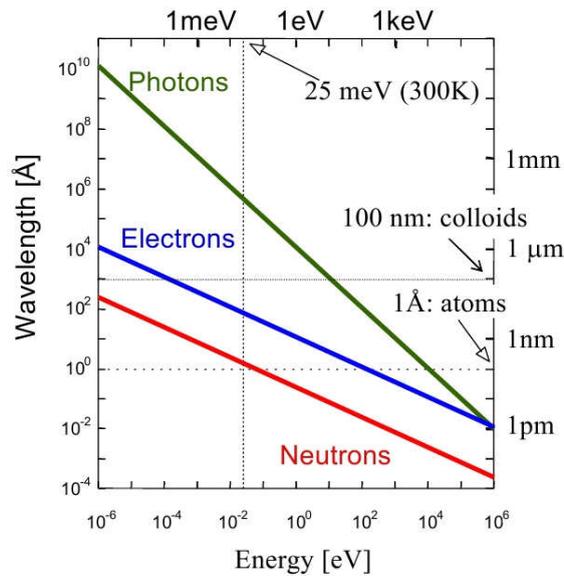


Abbildung 3.1: Vergleich von Elektronen, Photonen und Neutronen. Aufgetragen ist die Wellenlänge in Abhängigkeit der Energie in zweifacher logarithmischer Darstellung. Entnommen aus [16].

besonders sensitiv für mikroskopische bis mesoskopische Größenordnungen wie die Rauigkeit oder Schichtdicke der zu untersuchenden Vielschichtsysteme. Hierbei wechselwirken Photonen anders als Neutronen im Wesentlichen mit den Elektronen der Atomhülle.

Zusätzlich zur Charakterisierung der Proben durch Elektronen und Photonen wird Neutronenreflektometrie durchgeführt, da der Spin der Neutronen mit dem magnetischen Feld der Proben wechselwirkt. Dadurch können Neutronen zusätzlich Informationen über die Verteilung der magnetischen Momente innerhalb der Probe liefern. Anders als Photonen wechselwirken die Neutronen nicht mit den Elektronen, sondern mit den Atomkernen der Proben durch die starke Wechselwirkung. Diese ist sehr kurzreichweitig, weshalb der Streuquerschnitt der Neutronen mit Materie sehr klein ist. Daraus folgt eine hohe Eindringtiefe der Neutronen in Materie. Die beiden Wechselwirkungen des Neutrons sind in der gleichen Größenordnung, weshalb die Neutronen sich zur tiefenaufgelöste Charakterisierung der magnetischen Eigenschaften der Proben eignen, da zu gleichen Teilen strukturelle und magnetische Eigenschaften die Wechselwirkung beeinflussen.

In den folgenden Kapiteln wird zunächst die allgemeine Streutheorie (3.1) beschrieben, die trotz der Verschiedenheit der Wechselwirkungen der Neutronen, Elektronen und Photonen mit Materie allgemein gültig ist. Danach folgt die Beschreibung der Streuung unter streifendem Einfall (3.2), die besonders sensitiv für mesoskopische Strukturen ist. In den letzten beiden Kapiteln wird dann auf die Besonderheiten der Röntgenstreuung (3.3) und der Neutronenstreuung (3.4) eingegangen.

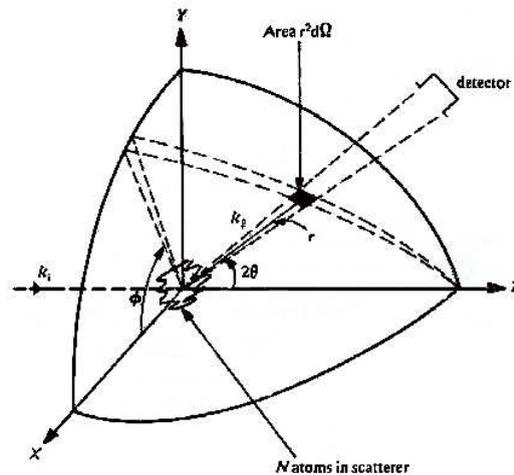


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung eines Streuereignisses. Entnommen aus [16].

## 3.1 Allgemeine Streutheorie

Streuexperimente geben Aufschluss über die innere Struktur der Proben. Dabei ist Streuung im Grunde genommen die Wechselwirkung der Sonden mit einem Potential innerhalb der Probe. Obwohl die Wechselwirkungen von Elektronen, Neutronen und Photonen mit Materie auf unterschiedlichen Prinzipien beruhen, kann man die Streuung auf eine gemeinsame Theorie zurückführen. Dies ist möglich, da für diese Sonden der Welle-Teilchen-Dualismus gilt. Dadurch kann man die Wechselwirkung mit Materie innerhalb der Quantenmechanik im Wellenbild beschreiben.

### 3.1.1 Makroskopische Definition des Streuquerschnitts

Eine wichtige Größe um Streuung zu beschreiben ist der Begriff des Streuquerschnitts  $\sigma$ . Der Streuquerschnitt gibt an, wie viel Strahlung aus einem Volumenelement gestreut wird. Es gilt also  $I \sim \sigma$ . Dabei bezeichnet  $I$  die gestreute Intensität. Die Definition von  $\sigma$  wird anhand Abb. 3.2 verdeutlicht.

Die einfallende Welle wird hier durch den Wellenvektor  $\vec{k}_i$  von links kommend dargestellt. Innerhalb des Probenvolumens wird ein Teil des Teilchenstroms  $dn$  in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut. Hierbei gibt  $\phi$  und  $2\theta$  die Richtung der gestreuten Welle in Bezug zur einfallenden Welle an. Die gestreute Welle wird durch  $\vec{k}_f$  beschrieben. Somit definiert man den differentiellen Streuquerschnitt durch:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dn}{Jd\Omega}, \quad (3.1)$$

als den Teil des einfallenden Teilchenstroms, der in den Winkelbereich  $d\Omega$  gestreut wird, normiert auf den einfallenden Teilchenstrom  $J$ . Integriert man nun über den

ganzen Winkelraum, bekommt man den totalen Streuquerschnitt:

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (3.2)$$

### 3.1.2 Quantenmechanische Beschreibung des Streuquerschnitts

Dieser makroskopischen Betrachtungsweise des Streuquerschnitts muss nun eine mikroskopische Beschreibung folgen, die auf die genaue Wechselwirkung der Sonden mit der Probe eingeht. Dafür ist eine quantenmechanische Betrachtung nötig. Hierbei wird ein System in Raum und Zeit durch die Schrödingergleichung charakterisiert:

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (3.3)$$

Die Lösungen der Schrödingergleichung geben mögliche Zustände des Systems an. Somit ist die räumliche und zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion bei bekannten Anfangsbedingungen deterministisch durch den Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , abhängig vom Wechselwirkungspotential  $V(\vec{r})$ , bestimmt. Beschränkt man sich zuerst auf den Fall der elastischen Streuung, bei welcher keine Energie übertragen wird, dann wird die zeitliche Entwicklung durch den Faktor  $\exp(-iE/\hbar t)$  innerhalb der Wellenfunktion beschrieben. Somit erhält man die stationäre Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi = E\Psi \quad (3.4)$$

Eine weitere Vereinfachung ist die Fraunhofer-Näherung, bei der man annimmt, dass Quelle und Detektor weit von der Probe entfernt sind. Dadurch wird die Wellenfunktion durch ihr Fernfeld beschrieben, das einer ebenen Welle entspricht:  $\Psi_{in} = \Psi_0 \exp(i\vec{k}\vec{r})$ . Die Energie der Welle ist gegeben durch  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Wenn man diese Größen in Gleichung 3.4 einsetzt, erhält man:

$$\hat{D}\Psi = (\Delta + k^2)\Psi = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \quad (3.5)$$

Eine Möglichkeit solche Differentialgleichungen zu lösen ist die Methode der Greenschen Funktion. Hierbei wird angenommen, dass eine Funktion  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  existiert, für die gilt:  $\hat{D}G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ . Eine mögliche Darstellung der Greenschen Funktion ist:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_i(r-i\vec{k}_f/k_i\vec{r}')}}{r} \quad (3.6)$$

Der Abstand zum Detektor ist groß, deshalb kann man die Fraunhofer-Näherung anwenden und den Abstand  $|\vec{r}-\vec{r}'|$  durch  $r - \frac{\vec{k}_f}{k_i}\vec{r}'$  annähern. Hierbei bezeichnet  $\vec{k}_f$  den Wellenvektor der gestreuten Welle,  $\vec{k}_i$  den Wellenvektor der einfallenden Welle und  $\vec{r}$  den Abstand von Probe zum Detektor. Mit der Greenschen Funktion ist die Lösung von Gleichung 3.5 gegeben durch:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0 + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d^3r' \quad (3.7)$$

$$\approx \exp(i\vec{k}_i\vec{r}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_i r} e^{-i\vec{k}_f\vec{r}'}}{r} V(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} d^3r' \quad (3.8)$$

$$= \exp(i\vec{k}_i\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_i r}}{r} \int V(\vec{r}') e^{-i\vec{Q}\vec{r}'} d^3r' \quad (3.9)$$

$$= \exp(i\vec{k}_i\vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_i r}}{r} \langle \vec{k}_f | V(\vec{r}') | \vec{k}_i \rangle, \quad (3.10)$$

wobei  $\Psi_0$  die Lösung im homogenem Fall ohne Potential ist, also die einfallende ebene Welle  $\Psi_0 = \exp(i\vec{k}_i\vec{r})$ . Die Darstellung in integraler Form (Gleichung 3.7) hat den Vorteil, dass man sie iterativ lösen kann. Eine Entwicklung nach den Wellenfunktionen wird als Born-Serie bezeichnet. Bei der ersten Bornschen Näherung wird im Integral anstelle  $\Psi(\vec{r})$  die einfallende Welle  $\Psi_0$  eingesetzt und die Entwicklung nach dem Term erster Ordnung abgebrochen (siehe Gleichung 3.8). Dabei wird der Streuvektor  $\vec{Q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$  eingeführt. Für nicht zu große Wechselwirkungen mit Materie, also bei Einfachstreuung, ist dies eine sinnvolle Annahme, wobei aber zu beachten ist, dass im Bereich der Totalreflektion diese Näherung zusammenbricht, da dort unter anderem bei der Bornschen Näherung die Energieerhaltung verletzt wird.

Die gestreute Welle innerhalb der Bornschen Näherung hat eine Streuamplitude von:

$$f(\Theta, \phi) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}') e^{-i\vec{Q}\vec{r}'} d^3r' = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}_f | V(\vec{r}') | \vec{k}_i \rangle \quad (3.11)$$

Wenn man jetzt die Definition des differentiellen Streuquerschnitts betrachtet (Gleichung 3.1) und beachtet, dass in der Quantenmechanik die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort  $d^3r$  zu finden, durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $|\Psi|^2$  gegeben ist, kommt man zu folgender Gleichung:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Theta, \phi)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int V(\vec{r}') e^{-i\vec{Q}\vec{r}'} d^3r' \right|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \langle \vec{k}_f | V(\vec{r}) | \vec{k}_i \rangle \right|^2. \quad (3.12)$$

In Streuexperimenten misst man den differentiellen Streuquerschnitt und bei Betrachtung der Gleichung 3.12 sieht man sofort, dass durch die Bildung des Betragsquadrats die Phase der gestreuten Welle verloren geht. Dadurch kann man nicht einfach durch eine Fourierrücktransformation des differentiellen Wirkungsquerschnittes auf das Potential innerhalb der Probe schließen. Man ist gezwungen, für die Proben ein Modell anzunehmen und dann durch Vergleich zwischen Simulationen und den gemessenen Streuintensitäten auf die wahre Natur der Probe zu schließen.

## 3.2 Streuung unter streifendem Einfall

Durch den kleinen Einfallswinkel bei Streuexperimenten unter streifendem Einfall ist diese Methode sehr sensitiv für mesoskopische Strukturen, wie zum Beispiel Schichtdicke und Rauigkeit. Dies kann man erkennen, wenn man sich die Größe, die man in einem Streuexperiment misst, ansieht. In einem Streuexperiment wird die Fouriertransformierte des Betragsquadrats der Streuamplitude gemessen, siehe Gleichung 3.12.

Die Struktur der Probe lässt sich darstellen als eine Faltung aus einem periodischen Gitter und einer Dichtemodulation (Abb. 3.3, erste Zeile). Bei der Fouriertransformation auf den reziproken Raum wird nach dem Faltungstheorem diese Faltung durch ein Produkt aus einer Summe von Deltafunktionen und einer sich langsam ändernden Funktion dargestellt (Zeile 2). Dadurch wird bei kleinem Streuvektorübertrag nur eine Deltafunktion ausgewählt, wodurch bei dem Produkt nur die sich langsam ändernde Funktion, welche die Modulation der Dichte darstellt, übrigbleibt (Zeile 3). Somit bleibt bei der Rücktransformation nur die Information aus der Dichtemodulation übrig, das periodische Gitter geht als ein konstanter Hintergrundfaktor in die Faltung ein (Zeile 4).

### 3.2.1 Reflektometrie an einzelner Schicht

Das Streuexperiment, das an nur einer einzelnen Schicht gemacht wird, ist in Abb. 3.4 dargestellt.

An der geometrischen Darstellung in Abb. 3.4 kann man entnehmen, dass die Komponenten des Streuvektors sich darstellen lassen als:

$$Q_x = \frac{2\pi}{\lambda}(\cos \alpha_f - \cos \alpha_i), \quad Q_y = 0, \quad Q_z = \frac{2\pi}{\lambda}(\sin \alpha_f + \sin \alpha_i). \quad (3.13)$$

Dadurch bekommt man bei spekulärer Streuung ( $\alpha_i = \alpha_f$ ):

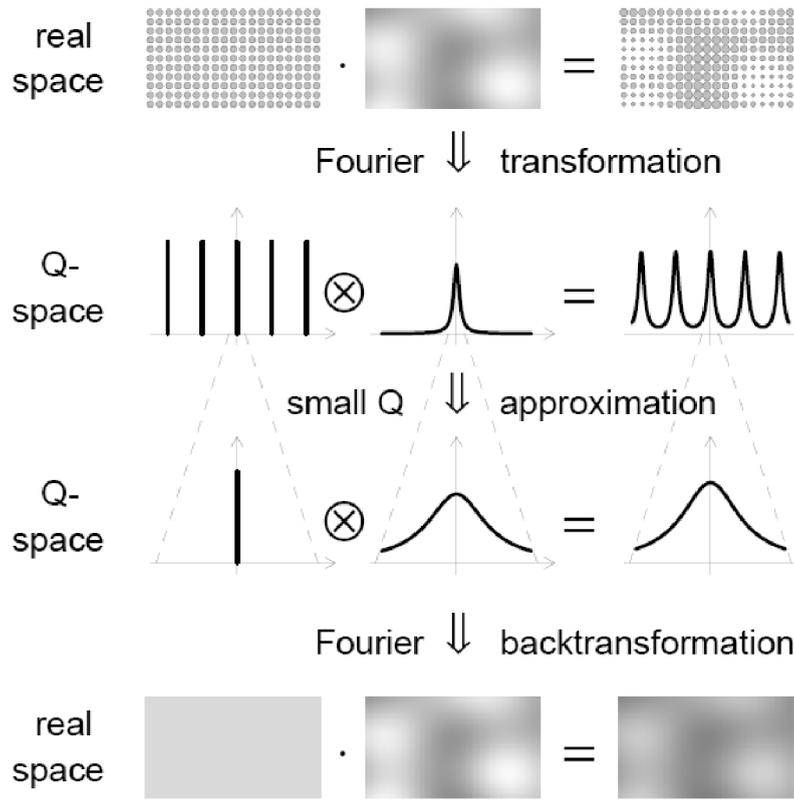


Abbildung 3.3: Darstellung des Informationsgehalts durch Fouriertransformationen unter streifendem Einfall. Entnommen aus [16].

$$|\vec{Q}| = \frac{4\pi}{\lambda}(\sin 2\Theta). \quad (3.14)$$

Bei der Betrachtung der Oberfläche der Einzelschicht wird von Anfang an angenommen, dass diese nicht ideal glatt, sondern rauh ist. Deswegen tritt auch Streuung an der Oberfläche auf, wenn  $\alpha_i \neq \alpha_f$  ist. Diese wird als diffuse Streuung bezeichnet und ist auch bei der Betrachtung der spekulären Reflektivität sehr wichtig. Die Beschreibung folgt der Referenz [17], wobei nur eine kurze Zusammenfassung gegeben werden soll.

Man nimmt wieder an, dass das Wechselwirkungspotential in folgender Form geschrieben werden kann:  $V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}b\rho$ , mit der Streulänge  $b$  und der Dichte  $\rho$ . Somit kann man Gleichung 3.12 in folgender Form schreiben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \rho^2 b^2 \int_V d^3r \int_V d^3r' e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (3.15)$$

$$= \frac{\rho^2 b^2}{(\vec{q} \cdot \vec{n})^2} \int_S \int_{S'} (d\vec{S} \cdot \vec{n})(d\vec{S}' \cdot \vec{n}) e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (3.16)$$

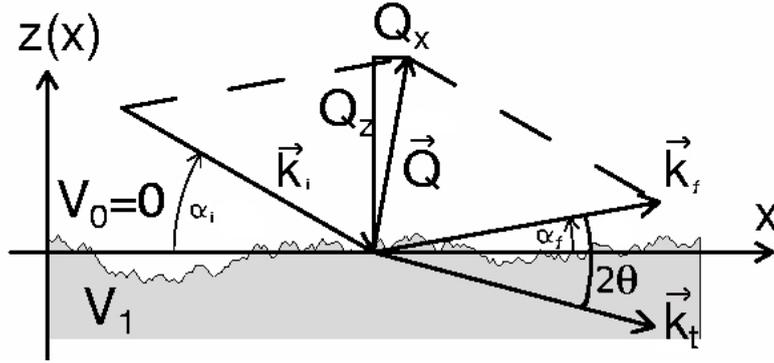


Abbildung 3.4: Darstellung eines Streuungsprozesses an einer rauhen Oberfläche unter streifendem Einfall. Entnommen aus [16].

Hierbei wurde der Satz von Gauß verwendet und das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral umgewandelt. Wenn man jetzt den Vektor  $\vec{n}$  willkürlich in z-Richtung wählt, bekommt man:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\rho^2 b^2}{q_z^2} \int_S dx dy \int_{S'} dx' dy' e^{-iq_z[z(x,y)-z(x',y')]} e^{-i[q_x(x-x')+q_y(y-y')]} \quad (3.17)$$

Somit wird das Integral über das Volumen in ein Integral über die Oberfläche der Schicht umgewandelt. Hierbei beschreibt  $z(x,y)$  die Höhe in Bezug zur Oberfläche. Jetzt nimmt man an, dass das Höhenprofil Gaussform hat:  $\langle [z(x',y') - z(x,y)] \rangle = g(X,Y) = 2\sigma^2[1 - \exp[-(R/\xi)^{2h}]]$  mit  $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$  und  $h \in [0, 1]$  als Fraktalparameter, der angibt, wie rau oder glatt die Oberfläche ist. Hierbei wird auch angenommen, dass die Oberfläche isotrop rau ist. Aus diesem Grunde kann man zu Zylinderkoordinaten übergehen. Somit kann man Gleichung 3.17 nach einigen Umformungen, welche in [17] näher beschrieben sind, folgendermaßen schreiben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi\rho^2 b^2}{q_z^2} \int_0^\infty dR R e^{-q_z^2 g(R)/2} J(q, R), \quad (3.18)$$

mit  $g(R) = g(X, Y)$  wie oben beschrieben und  $J(q, R) = e^{-i[q_x(x-x')+q_y(y-y')]}$ . Diese Gleichung kann man nun in einen spekulären und einen diffusen Term aufteilen:

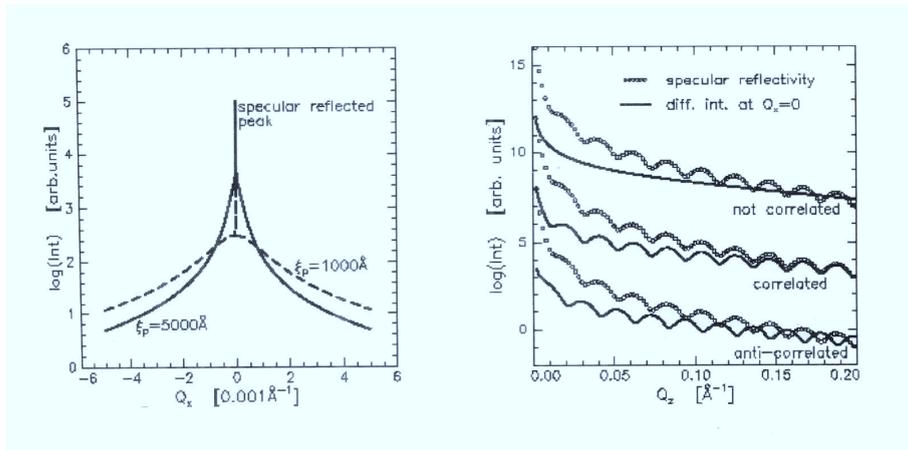


Abbildung 3.5: Darstellung der diffusen Streuung in einem  $q_x$  und  $q_z$  Scan. Im  $q_x$  Scann (links) kann man gut erkennen, dass die diffuse Streuung der spekulären überlagert ist. Im  $q_z$  Scan (rechts) kann man die unterschiedlichen Arten der diffusen Streuung, korreliert, entgegengesetzt korreliert und nicht korreliert sehen. Entnommen aus [16]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{spec}} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{diff}} \quad \text{mit} \quad (3.19)$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{spec}} = \frac{4\pi^2 \rho^2 b^2}{q_z^2} e^{-q_z^2 \sigma^2} \delta(q_x) \delta(q_y) \quad \text{und} \quad (3.20)$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{diff}} = \frac{2\pi \rho^2 b^2}{q_z^2} e^{-q_z^2 \sigma^2} \int_0^\infty dR R \left( e^{q_z^2 \sigma^2 \exp[-(R/\xi)^{2h}] } - 1 \right) J(q, R). \quad (3.21)$$

Man kann erkennen, dass in der spekulären Reflektivität ein Dämpfungsfaktor ( $e^{-q_z^2 \sigma^2}$ ) auftritt. Dieser Dämpfungsfaktor wird Debye-Waller-Faktor genannt und beschreibt die Abnahme der gestreuten spekulären Reflektivität hervorgerufen durch die diffuse Streuung. Eine weitere wichtige Schlussfolgerung aus dieser Herleitung ist die, dass bei  $q_x = 0$  ebenfalls die diffuse Streuung auftritt. Somit wird bei der Messung der spekulären Reflektivität eigentlich die Summe aus der spekulären Reflektivität und der diffusen Streuung gemessen, siehe Abb. 3.5. Um die „wahre“ spekuläre Reflektivität zu bestimmen, muss man die diffuse Streuung zuerst subtrahieren. Dies wird für die spätere Auswertung von besonderer Wichtigkeit sein, wobei aber zu beachten ist, dass dies nur eine Näherung ist.

Zu beachten ist aber noch die Anisotropie der Messungen in  $q_x$  und  $q_z$  der Reflektometrie. Nach Gleichung (3.13) wird für  $q_x$  und  $q_z$  einmal die Differenz und einmal die Summe der Einfallswinkel genommen. Dadurch ist der erreichbare  $q$ -Bereich stark unterschiedlich. Bei der Reflektometrie gilt annähernd  $\Delta q_x \approx 1000 \Delta q_z$ , wie man auch schön in Abb. 3.5 sehen kann.

### 3.2.2 Definition des Brechungsindex

Eine wichtige Größe zur Beschreibung von Reflektometrieexperimenten ist der Brechungsindex. Diese schon aus der Optik bekannte Beschreibung kann man auch bei Neutronenreflektometrie und Röntgenreflektometrie anwenden. Dabei gibt der Brechungsindex Auskunft darüber in welche Richtung der Strahl bei Eintritt in ein Medium gebeugt wird.

Zur Definition des Brechungsindex geht man zunächst zurück zur Schrödingergleichung (3.4), wobei sie diesmal in einer etwas anderen Form geschrieben wird:

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi = E\Psi \Leftrightarrow (\Delta + k_n^2)\Psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.22)$$

Hier wurde das Potential innerhalb des Schichtsystems und die Energie der einfallenden Welle im Wellenvektor  $k_n = \sqrt{2m/\hbar^2(E - V(\vec{r}))}$  innerhalb der Probe zusammengefasst. An der Definition des Wellenvektors kann man direkt sehen, dass dieser imaginär werden kann, wenn das Potential innerhalb des Schichtsystems größer ist als die Energie der einfallenden Welle. Da man als Lösungsansatz ebene Wellen annimmt, klingt bei einem imaginären Wellenvektor die Welle innerhalb des Schichtsystems exponentiell ab. Es tritt Absorption auf und die Welle hat eine endliche Eindringtiefe. Um dies zu beschreiben kann man den Brechungsindex folgendermassen definieren:

$$n = k_n/k_i = \sqrt{1 - V(\vec{r})/E} = 1 - \delta - i\beta \quad (3.23)$$

$$\text{Neutronen: } n = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{\pi} \sum_i b_i \rho_i} \approx 1 - \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_i b_i \rho_i \quad (3.24)$$

$$\text{Photonen: } n = 1 - \frac{N_A}{2\pi} r_0 \lambda^2 \sum_i \rho_i f_i, \quad (3.25)$$

wobei  $k_n$  der Wellenvektor innerhalb und  $k_i$  der Wellenvektor außerhalb der Probe ist.  $\rho_i$  ist die Dichte der Streuzentren und  $\lambda$  die Wellenlänge der Welle. Bei den Neutronen bezeichnet  $b_i$  die Streulänge und bei den Photonen ist  $f_i$  den Formfaktor.  $N_A$  ist die Avogadro-Konstante und  $r_0$  der Bohrsche Radius. Da jeweils für Neutronen und Photonen unterschiedliche Wechselwirkungen und Potentiale gelten, bekommt man jeweils einen unterschiedlichen Brechungsindex. Für Neutronen wurde hierbei das Fermi-Pseudopotential (siehe Kapitel 3.4) eingesetzt. Für die Photonen wurde die allgemein bekannte Dispersionsrelation benutzt. Wenn die Welle von einem Medium in ein anderes übergeht, bestimmt nun die Differenz der Brechungsindizes beider Medien, wie stark die Welle zum Lot hin oder von ihm weg gebeugt wird. Man kann zur Betrachtung ins Teilchenbild gehen und sich das aus der Optik bekannte Snelliussche Brechungsgesetz zunutze machen, womit sich dann der kritischen Winkel folgendermaßen ergibt:

$$\Theta_C = \arccos(n_2/n_1). \quad (3.26)$$

Dieser Winkel gibt den minimalen Winkel an, ab welchem die Welle ins Medium eindringen kann. Bei kleineren Einfallswinkeln wird der Wellenvektor der transmittierten Welle imaginär. Dadurch hat die eintretende Welle eine endliche Eindringtiefe, wodurch nur die reflektierte Welle übrig bleibt. Aus dem Snelliusschen Brechungsgesetz kann man die Fresnel-Formeln herleiten, die dann die Amplituden der reflektierten und der transmittierten Welle definieren. Man bekommt:

$$r_f = \frac{k_z - k_{t,z}}{k_z + k_{t,z}}, \quad t_f = \frac{2k_z}{k_z + k_{t,z}}, \quad (3.27)$$

wobei,  $k_z = k \sin \alpha_i$  und  $k_{t,z} = k \sqrt{n_t^2 - \cos^2 \alpha_i}$  die Projektionen der transmittierten und der reflektierten Welle auf die z-Achse sind.

### 3.2.3 Reflektometrie an Vielfachschichtsystemen

Wenn man obige Definitionen (3.27) rekursiv auf ein Vielfachschichtsystem anwendet kommt man zu der Rekursionsformel von Parrat [18]. Diese Rekursionsformel gibt das Verhältnis der Amplituden der reflektierten Welle und der transmittierten Welle an:

$$X_n = \frac{r_n}{t_n} = \frac{r_{n,n+1} + X_{n+1} e^{2ik_{z,n+1}z_n}}{1 + r_{n,n+1} X_{n+1} e^{2ik_{z,n+1}z_n}} e^{-2ik_{z,n}z_n} \quad (3.28)$$

Hierbei bezeichnet der Index  $r_{n,n+1}$  den Reflexionskoeffizienten beim Eindringen der Welle aus Schicht  $n$  in Schicht  $n + 1$ , und  $k_{z,n+1}$  ist die z-Komponente des Wellenvektors in Schicht  $n + 1$ ;  $z_n$  ist die mittlere Lage der n-ten Schicht in Bezug zur ersten Grenzschicht, der Oberfläche.

## 3.3 Röntgenstreuung

Wie in den letzten Kapiteln beschrieben, kann man die Neutronenstreuung und die Röntgenstreuung in derselben Theorie beschreiben. Hier wird auf die expliziten Wechselwirkungen der Photonen mit Materie eingegangen und die Wechselwirkung näher betrachtet, die für die Charakterisierung der Proben in dieser Arbeit von Wichtigkeit ist.

### 3.3.1 Elektromagnetische Wellen

Röntgenstrahlen werden durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben, deren Lösung elektromagnetische Wellen sind.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (3.29)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (3.30)$$

mit der elektrischen Flussdichte  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$  und der magnetischen Feldstärke  $\vec{H} = \vec{B} / \mu_0$ .  $\rho$  ist die Ladungsdichte und  $\vec{j}$  die Stromdichte. Mit den Maxwell-Gleichungen werden die elektrischen und magnetischen Felder innerhalb Materie komplett beschrieben. Jetzt kann man durch einfache Umformungen auf folgende Wellengleichung kommen:

$$\left( \vec{\nabla}^2 - \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.31)$$

Nimmt man nun wieder ebene Wellen  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \exp(-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}))$  als Lösung an, so erhält man die Wellengleichung:

$$\left( \vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0. \quad (3.32)$$

Diese ist äquivalent zu Gleichung 3.5, wenn man das Potential, wie in Gleichung 3.22 beschrieben, im Wellenvektor zusammenfasst. Dadurch gelten alle Aussagen, die in den Kapiteln 3.1 und 3.2 hergeleitet wurden, für die Neutronenstreuung, als auch für Röntgenstreuung. Dies gilt aber nur solange, wie die Elektromagnetischen Wellen über makroskopische Feldgrößen beschrieben werden können.

### 3.3.2 Streuquerschnitte

Bei Photonenstreuung gibt es unterschiedliche Streuprozesse. Treffen Photonen auf Materie, so sind die wichtigsten Streuprozesse der Photoeffekt, die Compton-Streuung, die Thomson-Streuung und die Paarbildung. Beim Photoeffekt wird das Photon vom Atom absorbiert und ein Elektron wird auf einen höherenergetischen Zustand angeregt. Bei der Compton- und der Thomson-Streuung wechselwirken die Photonen hauptsächlich mit den Elektronen der Atome. Durch die elektromagnetischen Felder des Photons werden die Elektronen zu Schwingungen angeregt, wodurch das Photon gestreut wird. Bei der Compton-Streuung handelt es sich um eine inelastische Streuung und bei der Thomson-Streuung um eine elastische Streuung. Bei der Paarbildung wird durch die Wechselwirkung der Photonen mit Materie aus der Energie des Photons ein Elektron-Positron-Paar erzeugt.

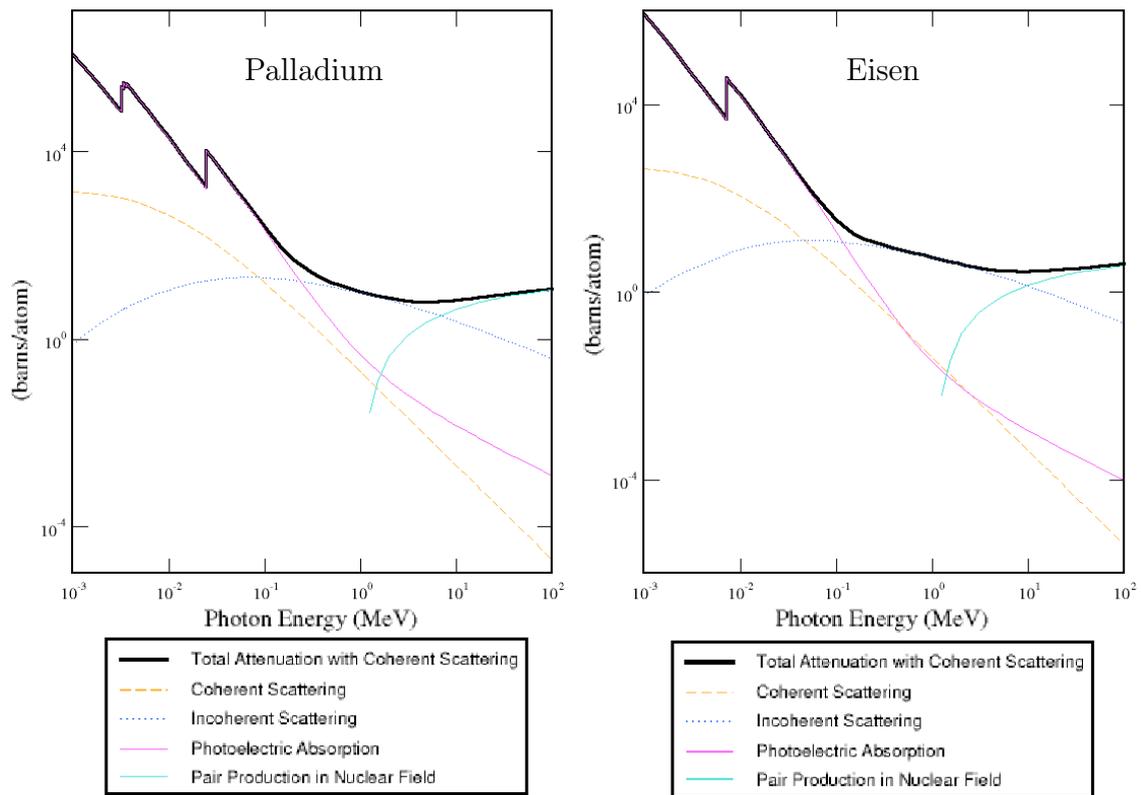


Abbildung 3.6: Streuquerschnitte von Eisen und Palladium in Abhängigkeit der Energie der einfallenden Photonen für die Streuprozesse: Photoeffekt, Thomson-Streuung, Compton-Streuung und Paarbildung. Dies wurde mit XCOM [19] erstellt.

Diese Streuprozesse hängen stark von der einfallenden Energie der Photonen ab, wie gut in Abb. 3.6 für Eisen und Palladium zu sehen ist. Bei Energien bis ca. 100 eV hat der Photoeffekt den größten Streuquerschnitt. Dies ist aber ein absorbierender Prozess und somit für Reflektometrie nur eine konstante Dämpfung der Intensität, weshalb man diesen Prozess bei der Messung der gestreuten Intensität gegebenenfalls in einer Absorptionskorrektur betrachten muss. Paarbildung tritt erst bei Energien von mehr als 1 MeV auf, was der Summe der Ruheenergien von einem Elektron und einem Positron entspricht. Bei der Röntgenreflektometrie wird die  $K_\alpha$ -Linie von Kupfer, mit einer Energie von ca. 8800 eV benutzt, weshalb die Paarbildung noch kein relevanter Prozess ist.

Somit bleiben nur die beiden Prozesse der Compton-Streuung und der Thomson-Streuung übrig. Hierbei ist die Compton-Streuung ein quantenmechanischer Effekt, dessen Herleitung man z.B in [20] finden kann. Für den Streuquerschnitt bei der Compton-Streuung gilt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} Z^2 r_e^2 \left( \frac{k_f}{k_i} \right) \left( \frac{k_f}{k_i} + \frac{k_i}{k_f} - \sin^2(\Theta) \right). \quad (3.33)$$

Hierbei ist  $r_e = \frac{\alpha \hbar c}{m_e c^2}$  der klassische Elektronenradius,  $\alpha = 1/137$  die Feinstrukturkonstante.,  $k_i$  und  $k_f$ , sowie  $\Theta$  sind die Wellenvektoren von ein- und ausfallender Welle und der Streuwinkel, wie in Kapitel 3.1 definiert.

Im Fall kleiner Energien, also  $E_\gamma \ll m_e c^2$ , spielt der Energieübertrag des Photons an das Atom keine Rolle. Wenn man  $k_i = k_f$  setzt, kommt man zur Thomson-Streuung:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = Z^2 r_e^2 \frac{1 + \cos^2\Theta}{2}. \quad (3.34)$$

Wobei zu beachten ist, dass diese nur in Vorwärtsrichtung gilt. Wie man an Abb. 3.6 sehen kann, ist dies der Streuprozess, der den größten Beitrag zum Streuquerschnitt liefert. Eine wichtige Schlussfolgerung der Thomson-Gleichung ist, dass der Streuquerschnitt systematisch von der Kernladungszahl  $Z$ , mit  $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim Z^2$ , abhängt. Dicht beieinander liegende Elemente haben Streuquerschnitte, die sich wenig unterscheiden, weshalb man wenig Streuung von den Grenzflächen dieser Elemente bekommt. Dies folgt aus Gleichung 3.27 für den Reflexionskoeffizienten, da bei nahe beieinander liegenden Elementen sich die Brechungsindizes fast nicht unterscheiden und somit der Reflexionskoeffizient fast verschwindet.

## 3.4 Neutronenstreuung

Wie in Kapitel 3 schon beschrieben wurde, haben Neutronen besondere Eigenschaften, die sich sehr gut zur Untersuchung von magnetischen Proben eignen. Nachdem in Kapitel 3.1 in der Beschreibung der Streuung die ganze spezielle Information der Wechselwirkung zwischen Probe und Sonde in dem Wechselwirkungspotential

$V(\vec{r})$  stand, soll jetzt auf dieses Wechselwirkungspotential eingegangen werden. Für Neutronen, die ungeladene Teilchen mit einem Spin  $1/2$  sind, gibt es viele verschiedene Wechselwirkungen mit Materie. Die beiden Wechselwirkungen mit dem größten Beiträgen sind der direkte Stoß zwischen dem Neutron und den Atomkernen und die magnetische Wechselwirkung zwischen dem Spin und dem magnetischem Feld.

### 3.4.1 Fermi-Pseudopotential

Bei der erste Wechselwirkung, dem direkte Stoß des Neutrons mit den Atomkernen der Probe, hierbei handelt es sich um die starke Wechselwirkung innerhalb des Atomkerns. Es ist noch nicht gelungen, diese Wechselwirkung quantitativ zu beschreiben. Als Sonden werden kalte und thermische Neutronen verwendet, die eine Wellenlänge von einigen Å haben. Somit ist der Kerndurchmesser von Atomen in der Größenordnung von  $10^{-15}$  m vernachlässigbar und man kann diese Wechselwirkung durch ein von Fermi vorgeschlagenes Pseudopotential

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i b_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (3.35)$$

beschreiben. Beim Fermi-Pseudopotential nimmt man an, dass es sich um punktförmige Streuzentren handelt, die isotrop streuen. In Gleichung 3.35 wird davon ausgegangen, dass es unterschiedliche Atome innerhalb der Probe gibt. Dies wird durch die unterschiedlichen Streulängen  $b_i$  beschrieben, die von der Größenordnung des Atomkernradius sind. Mit Gleichung 3.12 und Integration über  $\Theta$  erhält man den totalen Streuquerschnitt eines Atoms  $\sigma = 4\pi |b|^2$ . Die Streulänge hängt von den inneratomaren Kernkräften ab und kann auch negativ werden. Das Besondere bei Neutronen ist, dass diese Streulänge anders als bei Röntgenstrahlung nicht systematisch von der Kernladungszahl abhängt. Des Weiteren haben schon unterschiedliche Isotope eines Atoms unterschiedliche Streulängen.

### 3.4.2 Magnetisches Wechselwirkungspotential

Bei der zweiten Wechselwirkung handelt es sich um die magnetische Wechselwirkung des Spins des Neutrons mit einem magnetischen Feld. Eine gute Zusammenfassung aller wichtigen Zusammenhänge kann man in Kapitel 2 von [16] finden. Diese Wechselwirkung wird durch

$$V_m(\vec{r}) = -\vec{\mu}_n \vec{B} = -\gamma_n \mu_N \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (3.36)$$

beschrieben. Hierbei ist  $\mu_n$  das magnetische Moment des Neutrons,  $\gamma_N = -1.913$  der gyromagnetische Faktor und  $\vec{\sigma}$  der Spinoperator beschrieben durch die Spin Paulimatrizien:

$$\sigma_{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_{\perp} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

Die Indizes der Pauli-Matrizen wurden so gewählt, da die entsprechenden Matrizen die Ausrichtung des Spins bezüglich dem Proben-Koordinatensystem angeben, bei dem  $z$  die Richtung senkrecht zur Oberfläche angibt,  $\parallel$  die Richtung entlang des von außen angelegten Feldes in der Schichtebene und  $\perp$  die Richtung in der Schichtebene senkrecht zum angelegten Feld ist. Das magnetische Feld der Probe wird durch den Spin  $\vec{B}_S$  der ungepaarten Elektronen und den Bahndrehimpuls  $\vec{B}_L$  beschrieben. Dabei ist das gesamte magnetische Feld der Proben gegeben durch die Summe der Magnetfelder des Spins und des Bahndrehimpulses  $\vec{B} = \vec{B}_S + \vec{B}_L$ . Nach der Elektrodynamik sind diese Felder gegeben durch:

$$\vec{B}_L = -\frac{e}{c} \frac{\vec{v}_e \times \vec{r}}{r^3}, \quad (3.38)$$

$$\vec{B}_S = \vec{\nabla} \times \left( \frac{\vec{\mu}_e \times \vec{r}}{r^3} \right) = -2\mu_B \vec{\nabla} \times \left( \frac{\vec{S} \times \vec{r}}{r^3} \right). \quad (3.39)$$

Durch dieses Wechselwirkungspotential wird nun die ganze magnetische Streuung beschrieben. Wenn man dieses Wechselwirkungspotential in Gleichung 3.12 einsetzt bekommt man:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \langle \vec{k}' \sigma' | V_m(\vec{r}) | \vec{k} \sigma \rangle \right|^2. \quad (3.40)$$

Hierbei wurde beachtet, dass sich sowohl der Spin des Neutrons als auch der Wellenvektor während des Streuprozesses ändern kann. Diese Gleichung kann man weiter umformen zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (\gamma_n r_0)^2 \left| \frac{1}{2\mu_B} \langle \sigma'_z | \vec{\sigma} \cdot \vec{M}_{\perp}(\vec{Q}) | \sigma_z \rangle \right|^2, \quad (3.41)$$

wobei bei der Herleitung auf Fachliteratur, z.B [21] verwiesen wird. Hier wird nur auf die wichtigen Schlussfolgerungen dieser Gleichung eingegangen. Zuerst muss man feststellen, dass der Spin der Neutronen sich nur in  $z$ -Richtung, dargestellt durch die  $\sigma_z$  Matrizen, ändern kann. Dies kommt von der Quantisierung des Spins bezüglich einer willkürlich gewählten Achse. Des Weiteren sieht man, dass nur die senkrechte Komponente der Fouriertransformierten der Magnetisierung,  $\vec{M}_{\perp}(\vec{Q})$ , in den differentiellen Streuquerschnitt eingeht. Dies bedeutet, dass man nur die Komponente der Magnetisierung in einem Neutronenstreuexperiment messen kann,

die senkrecht zum Streuvektor liegt.

### 3.4.3 Polarisationsanalyse

Eine wichtige Untersuchungsmethode der magnetischen Eigenschaften der Proben mit Neutronen ist die Polarisationsanalyse. Hierbei werden die Neutronen bezüglich einer Quantisierungsachse polarisiert. Das heißt, dass der Spin eines Großteils der Neutronen (> 95%) in die selbe Richtung ausgerichtet ist. Dadurch muss zuerst der Wellenvektor als ein Spinor geschrieben werden.

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

$\Psi_+(\vec{r})$  beschreibt die Neutronen mit Spin up und  $\Psi_-(\vec{r})$  mit Spin down bezüglich der Quantisierungsachse. Wenn man nun das Wechselwirkungspotential zusammengesetzt aus der nuklearen und der magnetischen Wechselwirkung

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}b\rho_N - \gamma_n\mu_N\vec{\sigma}\vec{B} \quad (3.43)$$

zusammen mit den Paulimatrizen (Gleichung 3.37) und der Spinorwellenfunktion (Gleichung 3.42) in die Schrödingergleichung 3.4 einsetzt, kommt man nach einigen Umformungen zu:

$$\Psi_+''(\vec{r}) + \left[ k^2 - 4\pi b\rho_N + \frac{2m\gamma_n\mu_N}{\hbar^2}B_{\parallel} \right] \Psi_+(\vec{r}) + \frac{2m\gamma_n\mu_N}{\hbar^2}B_{\perp} \Psi_-(\vec{r}) = 0 \quad (3.44)$$

$$\Psi_-''(\vec{r}) + \left[ k^2 - 4\pi b\rho_N - \frac{2m\gamma_n\mu_N}{\hbar^2}B_{\parallel} \right] \Psi_-(\vec{r}) + \frac{2m\gamma_n\mu_N}{\hbar^2}B_{\perp} \Psi_+(\vec{r}) = 0. \quad (3.45)$$

Hierbei hat man den imaginären Beitrag der  $\sigma_z$  Paulimatrix aus zwei Gründen vernachlässigt. Zunächst einmal betrachtet man hier ein Vielfachschichtsystem, weshalb durch Formanisotropie die magnetischen Momente hauptsächlich in der Schichtebene liegen. Dadurch bekommt man fast keinen Beitrag der magnetischen Momente in z-Richtung. Des Weiteren wurde schon gezeigt, dass nur die Komponente des Momentes gemessen werden kann, die senkrecht zum Streuvektor liegt (siehe Gleichung (3.41)). In den Reflektivitätsexperimenten steht der Streuvektor senkrecht auf der Probenoberfläche, wodurch man Beiträge der Magnetisierung, die in der Schichtebene liegen, messen kann. In der diffusen Streuung, leicht außerhalb der spekulären Reflektivität, hat man auch einen um die Größenordnung 1000 kleineren Beitrag von  $Q_x$  als  $Q_z$ . Somit kann man bei normalen Reflektometriemessungen diesen Beitrag des Imaginärteils vernachlässigen.

Jetzt kann man aus Gleichung 3.44 und 3.45 mehrere wichtige Schlussfolgerungen

ziehen. Zuerst kann man feststellen, dass es vier unterschiedliche Prozesse gibt: Zwei Nicht-Spin-Flip-Prozesse (NSF), bei welchen die Spinrichtung der Neutronen erhalten bleibt, und zwei Spin-Flip-Prozesse (SF), bei denen der Spin die Richtung ändert. Nach

$$R^{\pm\pm} = |\langle \Psi_{\pm}(\vec{r}) | \hat{r} | \Psi_{\pm}(\vec{r}) \rangle|^2 \quad (3.46)$$

kann man in einem Reflektometriexperiment mit Polarisationsanalyse (siehe Kapitel 4.7) die Reflektivität dieser vier Kanäle messen. Die SF-Kanäle werden durch eine magnetische Komponente innerhalb der Probe hervorgerufen, die senkrecht zum Spin der Neutronen und damit senkrecht zum äußeren Feld, das die Quantisierungsrichtung vorgibt, liegt. Die parallele Komponente des magnetischen Feldes innerhalb der Probe führt zu einer Änderung der Streulängendichte. Beim “++“-Kanal wird die Streulängendichte erhöht und beim “--“-Kanal wird sie verringert. Somit kann man bei der Polarisationsanalyse auf den Vektorcharakter des magnetischen Feldes innerhalb der Probe schließen.

# 4 Experimentelle Methoden

## 4.1 Molekularstrahlepitaxie (MBE)

Um einkristalline metallische Vielfachschichtsysteme mit guten Schichtqualitäten oder wohl definierte Legierungen herzustellen, bedient man sich der Molekularstrahl-Epitaxie (MBE). Hierbei wird ein geeignetes Substrat unter Ultrahochvakuum (UHV)-Bedingungen (Druck  $p$  max.  $10^{-9}$  mbar) mit Material bedampft. Aufgrund des UHV ist die mittlere freie Weglänge der Teilchen größer als 1 km, weshalb sich die emittierten Teilchen in der MBE-Anlage frei bewegen können. Die Notwendigkeit des UHV ist aber durch die Ablagerung der Restgasatome innerhalb der MBE-Anlage auf dem Substrat gegeben. Bei diesen Drücken wächst eine Monolage von Restgasatomen innerhalb von ca. 10 Stunden auf, was bei einer Wachstumsdauer von ca. 30 min pro Schicht akzeptabel für sauberes Wachstum ist. Bei epitaktischem Wachstum nimmt die aufzuwachsende Schicht die Gitterparameter des Substrates an. Die Gitterparameter des Substrates und des aufzudampfenden Materials müssen hierzu passend gewählt werden.

Die benutzte MBE-Anlage ist in Abb. 4.1 dargestellt. Das UHV von  $10^{-9}$  mbar wird von einer Turbopumpe mit vorgeschalteter Drehschieberpumpe erzeugt. Um ein noch besseres Vakuum zu erzeugen, ist eine flüssig-Stickstoffkühlfalle mit zusätzlicher Titansublimationspumpe eingebaut. Die Titanatome werden auf den Seitenwänden oder an der Kühlfalle abgeschieden und binden die Restgasmoleküle chemisch. Damit kommt man im Ruhezustand auf ca.  $p = 10^{-10}$  mbar und während des Aufdampfens auf ca.  $p = 10^{-9}$  mbar.

Das Substrat wird mittels einer differentiell gepumpten Schleuse auf dem Probentransferstab ins UHV hineingefahren. Befestigt ist das Substrat auf einem Probenhalter aus Edelstahl, auf dessen Unterseite eine Probenheizung eingebaut ist. Bei der Probenheizung handelt es sich um zwei dünne Bleche, die mit dem Probenhalter verbunden sind und mittels eines Stroms von ca. 20 - 60 A das Substrat erwärmen. Somit wird die Substrattemperatur mehr über Wärmeleitung als Wärmestrahlung realisiert. Zur Messung der Substrattemperatur wird ein Thermoelement an der Unterseite des Probenhalters verwendet. Die Temperatur an der Oberseite des Substrates ist deswegen etwas niedriger als die gemessene Temperatur, man kann aber die Präparationsbedingungen gut reproduzieren. Der Probentransferstab ist mitsamt des Substrates drehbar und wird zur Bedampfung mit dem Substrat nach unten gedreht und zur in-situ Charakterisierung nach oben.

Die aufzudampfenden Materialien werden aus 4 Elektronenstrahlverdampfern und 2 indirekten Quellen mit Elektronenbeschuss verdampft. Eine Wolframspule wird mittels Stroms erwärmt, wodurch Elektronen emittiert werden. Diese emittierten Elektro-

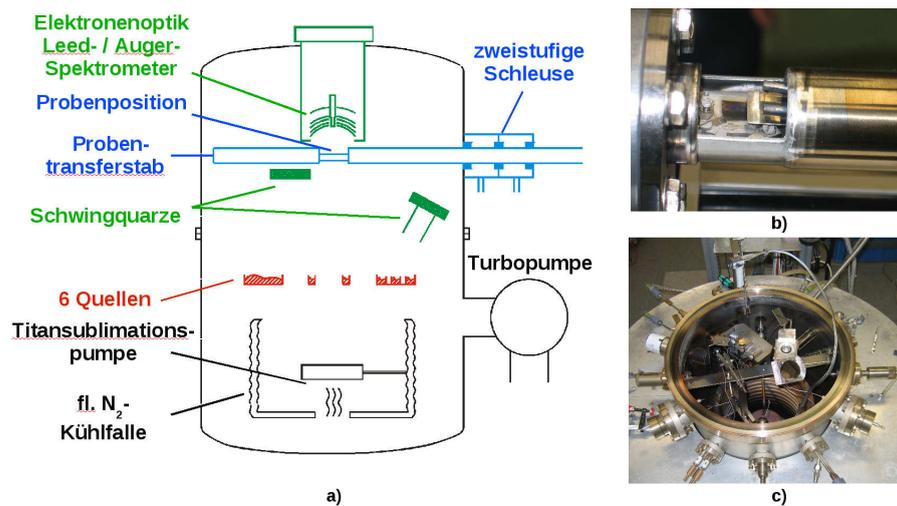


Abbildung 4.1: a) Schematischer Aufbau der MBE-Anlage, b) verwendeter Probenhalter  
c) Einsicht in die Quellenebene der MBE-Anlage; entnommen aus [22].

nen werden durch eine Hochspannung auf den Tiegel, in welchem das aufzudampfende Material enthalten ist, beschleunigt. Gleichzeitig wird bei den Elektronenstrahlverdampfern der Elektronenstrahl mittels eines Magneten auf das Quellenmaterial gelenkt. Bei der indirekten Quelle werden die Elektronen nur mittels einer Hochspannung auf den Tiegel, in welchem das aufzudampfende Material enthalten ist, beschleunigt. Der Tiegel wird erwärmt und das Quellenmaterial emittiert. Mit einem Shutter vor dem Substrat kann die Bedampfdauer gesteuert werden.

Die Dicke der aufgedampften Materialien wird mit zwei Schwingquarzen bestimmt. Hierbei wird ausgenutzt, dass die Eigenfrequenz der Schwingquarze linear mit der Masse abnimmt. Ein Schwingquarz ist direkt unter dem Substrat angebracht und bestimmt die gesamte aufgedampfte Menge, der zweite Schwingquarz ist auf den 3-Tiegel-Elektronenstrahlverdampfer ausgerichtet. Dadurch kann man das Verhältnis der Elemente in Legierungen bestimmen, wenn ein Material aus der direkten Quelle emittiert wird und das zweite Material aus der benachbarten indirekten.

Die Struktur der Probenoberfläche wird mit LEED (Beugung langsamer Elektronen) untersucht, siehe dazu Kapitel 4.2. Mit der Auger-Spektroskopie kann eine chemische Analyse der Probenoberfläche durchgeführt werden, siehe Kapitel 4.3. Beide in-situ Charakterisierungsmethoden sind in der oberen Hälfte der MBE-Kammer angebracht. Durch die Geometrie der Anlage ist es leider nicht möglich, die Proben während des Aufdampfens zu charakterisieren.

Für eine genauere Auseinandersetzung mit diesem Thema siehe [23] oder [24].

## 4.2 Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)

Beim Bedampfungsprozess ist es wichtig, dass die Oberfläche rein von Verunreinigungen ist, um ein epitakisches Wachstum zu ermöglichen. Des Weiteren muss man darauf achten, dass bei einem Vielfachschichtsystem die Rauigkeit von Schicht zu Schicht zunehmen kann, wodurch die letzten Schichten nicht mehr gut definiert wären. Deshalb ist es wichtig, bei der Herstellung der Proben, die Struktur der Oberfläche zu untersuchen. Dafür steht eine LEED Optik (Beugung niederenergetischer Elektronen) zur in-situ Charakterisierung der Proben zur Verfügung.

Hierbei werden niederenergetische Elektronen von ca. 150 eV senkrecht auf die Probenoberfläche geschossen und von ihr reflektiert. Diese reflektierten Elektronen werden dann auf einem Fluoreszenzschirm sichtbar gemacht.

Durch die niedrige Energie der Elektronen nimmt die Intensität des primären Elektronenstrahls mit zunehmender Eindringtiefe exponentiell ab:

$$I(d) = I_0 \exp(-d/\lambda). \quad (4.1)$$

Dadurch ist diese Methode sehr oberflächensensitiv (Eindringtiefe von einigen Å) und man kann nachweisen, dass die Oberfläche der Proben monokristallin ist, was eine nötige Voraussetzung für epitaktisches Wachstum ist.

Durch Interferenz der gebeugten Elektronen an unterschiedlichen Ebenen oder Restgitteratomen auf der Oberfläche entsteht ein Beugungsmuster, aus welchem man auf die Symmetrie der Probenoberfläche sowie auf dessen Struktur schließen kann. Die Intensitätsmaxima des Beugungsmusters sind an der Position sichtbar, an der die reflektierten Elektronen konstruktiv interferieren. Wenn die Laue-Bedingung erfüllt ist, gilt:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}_{hk} \quad (4.2)$$

Hierbei bezeichnet  $\vec{k}_0$  den Wellenvektor des einfallenden Elektronenstrahl,  $\vec{k}$  den Wellenvektor des reflektierten Elektronenstrahl und  $\vec{G}_{hk}$  den reziproken Gittervektor der 2-dimensionalen Kristalloberfläche.

Bei einkristallinen Oberflächen besteht das LEED-Muster auf dem Fluoreszenzschirm aus scharfen Intensitätspunkten, die symmetrisch angeordnet sind. Bei Verunreinigungen, die nicht der kristallinen Ordnung folgen kann man kein LEED-Muster erkennen. Aus diesem Grund kann man aus der Verschmierung der Intensitätspunkte auf die Qualität der Oberfläche schließen. Durch Überstrukturen wird die Einheitszelle vergrößert, was einer Verkleinerung im reziproken Raum gleichbedeutend ist. Deshalb kann man aus dem LEED-Muster bei Auftreten von zusätzlichen Intensitätspunkten auf eine Überstruktur schließen.

### 4.3 Auger-Elektronenspektroskopie (AES)

Nach dem man mit LEED nachweisen kann, ob die Oberfläche einkristallin ist, muss noch überprüft werden, ob die Oberfläche chemisch rein ist. Durch Diffusionsprozesse können beim Aufdampfen der obersten Schicht Atome aus den unteren Schichten in die aufzudampfende Schicht diffundieren, oder beim Tempern werden Vermischungsprozesse aktiviert. Dadurch würde die Qualität der Vielfachschichtsysteme gemindert. Um dies zu überprüfen wird die LEED-Optik als Auger-Elektronenspektrometer genutzt.

Bei der Auger-Elektronenspektroskopie (AES) wird die Probe mit Elektronen höherer Energie, bis zu 3 keV beschossen. Dabei kann ein Elektron aus der inneren Schale eines oberflächennahen Atoms herausgeschlagen werden. Dieses angeregte Atom relaxiert indem ein Elektron einer höheren Schale in das entstandene Loch fällt. Dabei kann es einerseits mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ein Photon emittieren, oder diese Energie kann an ein anderes Elektron übertragen werden, was herausgeschlagen wird. Dieses herausgeschlagene Elektron wird Auger-Elektron genannt.

Bei diesem Prozess handelt es sich um einen Dreiteilchenprozess, wobei die kinetische Energie des Augerelektrons charakteristisch für das jeweilige Material ist. Die beste Beschreibung der kinetischen Energie des Augerelektrons ist gegeben durch die Chung-Jenkins-Gleichung:

$$E_{ABC} = E_A(Z) - \frac{1}{2}[E_B(Z) + E_B(Z + 1)] - \frac{1}{2}[E_C(Z) + E_C(Z + 1)] \quad (4.3)$$

Hierbei bezeichnet A die Schale des primär herausgeschlagene Elektrons, B die des Elektrons, das auf die A-Schale fällt und C die Schale des Augerelektrons. Z beschreibt die Anzahl der Protonen des Atoms. Bei der Gleichung wird beachtet, dass durch das primär herausgeschlagene Elektron ein „positiv geladenes“ Loch entsteht, das eine anziehende Kraft auf das Augerelektron und die restlichen Elektronen des Atoms ausübt. Dies führt zu einer stärkeren Bindung des Augerelektrons und somit zu einer kleineren resultierenden kinetischen Energie.

Diese Methode ist sehr oberflächensensitiv, die emittierten Augerelektronen haben eine kinetische Energie von 10 – 1000 eV und somit eine mittlere freie Weglänge von 4 – 40 Å in Materie. Deshalb kann man damit die chemische Zusammensetzung der Oberfläche analysieren und Rückschlüsse über die Interdiffusion in die oberste Schicht ziehen, da die Nachweisgrenze bei ca. 0,1% liegt.

Bei der Augerspektroskopie wird die Anzahl der Augerelektronen gemessen, aber für die Darstellung gibt es unterschiedliche Möglichkeiten. Die am weitesten verbreitete Variante ist die Darstellung von  $dN(E)/dE$  gegen  $E$ , da dadurch der konstante Untergrund unterdrückt wird. Für weitere Details siehe [25].

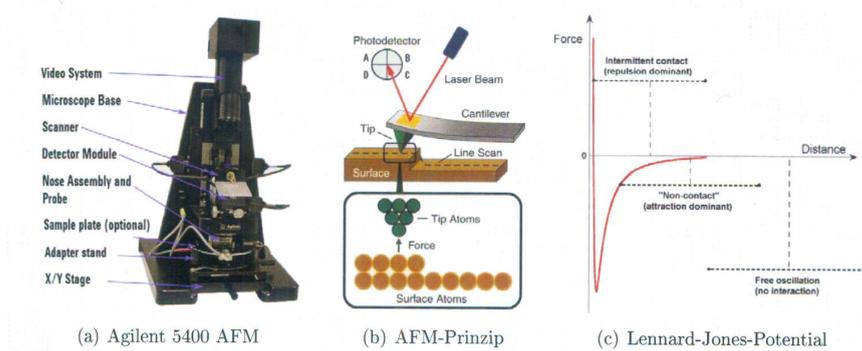


Abbildung 4.2: Das benutzte AFM. Entnommen aus [26]

## 4.4 Rasterkraftmikroskopie (AFM)

Für eine erste Charakterisierung der fertigen Proben bietet sich das Rasterkraftmikroskop als schnelle und einfache Möglichkeit an, die mittlere Rauigkeit der Probenoberfläche zu überprüfen. Beim Rasterkraftmikroskop wird die Oberfläche in einem kleinen Bereich von bis zu  $10\ \mu\text{m}$  abgetastet und auf ihr atomares Wechselwirkungspotential untersucht. Damit lässt sich ein Höhenprofil anfertigen, woraus man die rms-Rauigkeit der Probenoberfläche bestimmen kann. Das von uns benutzte AFM von der Firma Agilent Technologies ist in Abb. 4.2 zu sehen.

Die atomaren Kräfte werden gemessen, indem eine kleine Messspitze zeilenweise mit Hilfe eines piezoelektrischen Scanners über die Probenoberfläche geführt wird. Die Messspitze befindet sich auf einer Blattfeder, dem Cantilever und wird einige Nanometer an die Oberfläche der Probe herangeführt. Dabei schwingt der Cantilever etwas über seiner Resonanzfrequenz. Durch das Wechselwirkungspotential der Oberfläche wird die Resonanzfrequenz, mit der der Cantilever schwingt, etwas herabgesetzt, was zu einer kleineren Amplitude der Schwingung führt. Wird das AFM nun im Nicht-Kontakt-Modus (AC-Mode) betrieben, wird versucht, über einen Regelkreis die Amplitude des schwingenden Cantilevers und somit auch die Frequenz konstant zu halten. Dafür wird ein Laserstrahl auf den Cantilever gerichtet und der vom Cantilever reflektierte Laserstrahl wird mit einem Flächendetektor detektiert und somit die Amplitude der Schwingung bestimmt. Dadurch kann der Cantilever dem Höhenprofil der Probenoberfläche folgen.

Bei diesem Messverfahren wird die Messgenauigkeit stark durch die Spitzenqualität bestimmt. Dabei spielt der Krümmungsradius der Spitze eine entscheidende Rolle, da durch das stark reichweitenabhängige Lennard-Jones-Potential hauptsächlich nur der kleinste Abstand zwischen Spitze und Oberfläche wichtig ist. Mit einer guten Spitze kann man laterale Auflösungen von einigen nm erreichen.

## 4.5 Magnetometrie (SQUID und VSM)

Zur Bestimmung des integrierten magnetischen Moments der Probe bietet sich das SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) oder das VSM (Vibrationsmagnetometer) an.

Um kleinste magnetische Momente zu messen, bedient man sich eines SQUID-Magnetometers, welches in Abb. 4.3 zu sehen ist. Das Funktionsprinzip eines SQUIDs basiert darauf, dass durch das Magnetfeld einer sich bewegenden Probe ein supraleitender Kreisstrom in einem supraleitenden Ring induziert wird. Dabei kann aus quantenmechanischen Gründen nur ein magnetischer Fluss, der ein Vielfaches des magnetischen Flussquants  $\Phi_0 = 2.07 \cdot 10^{-15}$  Vs ist, fließen. Dieser induzierte Kreisstrom ist aber schwer zu messen, weshalb man sich den Josephsen-Effekt zunutze macht. Dabei wird der supraleitende Ring an zwei Stellen, den Josephsen-Kontakten, durch nanometerdickes normalleitendes Material ersetzt. An diesen beiden Josephsen-Kontakten brechen die Cooper-Paare, die den Kreisstrom tragen, auf. Diese aufgebrochenen Cooper-Paare sind jetzt widerstandsbehaftet und an den Josephsen-Kontakten fällt eine Spannung ab.

Jetzt wird ein Gleichstrom durch die Josephsen-Kontakte geleitet. Aus quantenmechanischen Gründen erfährt der Strom durch das den Ring durchströmende Magnetfeld eine Phasenverschiebung. Dadurch oszilliert der Strom als Funktion des durch die Spulen fließenden Magnetfeldes und somit auch die Spannung, wobei die Periode die eines magnetischen Flussquants ist. In modernen SQUIDs wird versucht durch eine weitere um diesen Ring liegende Spule das Magnetfeld der Probe zu kompensieren. Die exakte Messung des Magnetfeldes der Probe erfolgt durch die Messung des Stromes, der erforderlich ist, um das Magnetfeld der Probe kompensieren zu können. Wird das Magnetfeld der Probe exakt kompensiert, treten keine Oszillationen der an den Josephson-Kontakten abfallenden Spannung ab. Durch eine geeignete Wahl des durch den Ring fließenden Gleichstroms können Magnetfelder gemessen werden, die kleiner sind als das magnetische Flussquant.

Anders als das SQUID misst das VSM nicht das absolute magnetische Feld der Probe, sondern das magnetische Moment wird durch Induktion in den Aufnahmespulen durch die vibrierende Probe gemessen. Des Weiteren handelt es sich nicht um supraleitendes Material, sondern um normalleitendes, wodurch die Auflösung des magnetischen Momentes etwas abnimmt. Das VSM ist ebenfalls von der Firma Quantum Design. Beim SQUID wird die Probe in einer nicht magnetischen Kapsel mit Watte fixiert und in einen Strohhalm platziert, der an dem Probenstab befestigt ist. Dieser Probenstab kann ins Probenrohr, das in Abb. 4.3 zu sehen ist, eingeführt werden. Somit befindet sich die Probe direkt in einem Kryostaten und man kann das magnetische Moment feldabhängig und temperaturabhängig messen.

Beim VSM wird die Probe mittels nicht magnetischen Klebers auf einem Glasstab befestigt. Dieser Glasstab wird an den Probenstab montiert und in den Kryostaten eingeführt. Somit kann man wieder eine Temperaturabhängigkeit und eine Feldabhängigkeit des magnetischen Momentes der Proben messen.

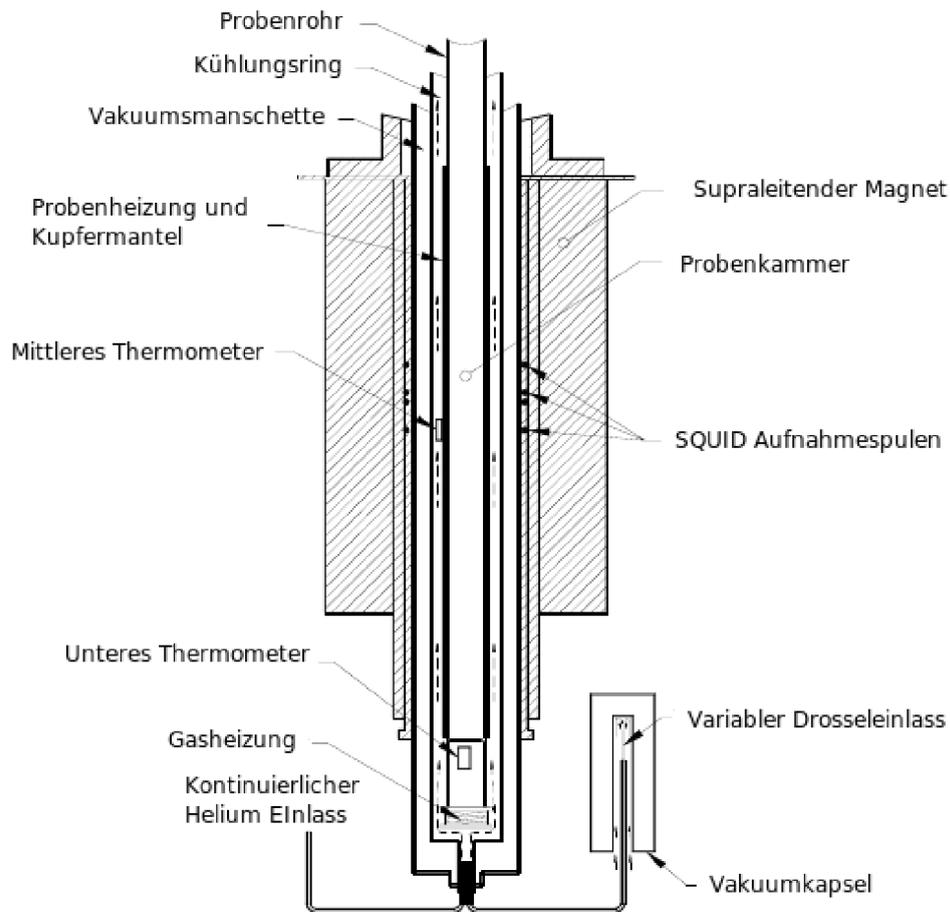


Abbildung 4.3: Schematischer Aufbau des SQUID-Magnetometers MPMS der Firma Quantum Design, entnommen aus [27].

## 4.6 Röntgenreflektometrie (XRR)

Will man tiefenaufgelöst die Struktur der Vielschichtsysteme untersuchen, so bietet sich die Röntgenreflektometrie an, da diese anders als LEED oder Augerspektroskopie eine hohe Eindringtiefe hat und somit Informationen über die Grenzflächenqualität innerhalb der Probe liefern kann. Des Weiteren ist sie anders als Neutronenreflektometrie gut verfügbar und intensitätsstark. Mit XRR kann man Schichtdicken, Dichten und Rauigkeiten der Grenzflächen in Schichtebene bestimmen. Das Prinzip ist in Kapitel 3 beschrieben. Für die Charakterisierung wurde das Röntgenreflektrometer D8 von Bruker AXS verwendet. Der prinzipielle Aufbau ist in Abb. 4.4 dargestellt.

Innerhalb der Röntgenröhre werden Elektronen auf die Kupferanode beschleunigt. Diese Elektronen schlagen andere Elektronen aus den inneren Schalen der Kupferanode heraus. Beim Wiederauffüllen der Löcher durch Elektronen aus höheren Schalen werden die charakteristischen Spektrallinien des Kupfers emittiert. Die dominierende

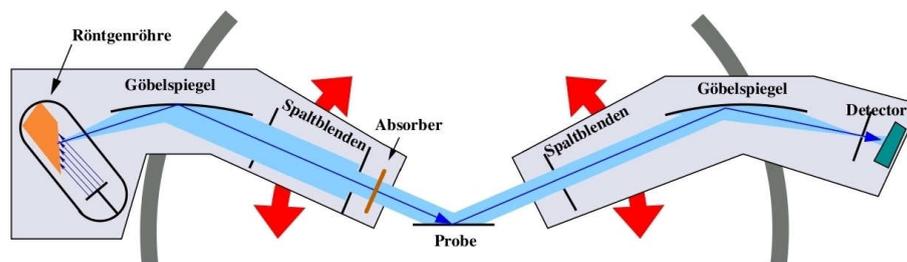


Abbildung 4.4: Schematischer Aufbau des Röntgenreflektometers, entnommen aus [28].

Wellenlänge ist hierbei die des  $K\alpha$ -Übergangs mit einer Wellenlänge von  $1,54 \text{ \AA}$ . Danach trifft der Photonenstrahl auf einen Göbelspiegel. Der Göbelspiegel ist ein Vielfachsichtsystem, das eine parabolische Krümmung aufweist und bei welchem die Schichtdicke der einzelnen Schichten von einem Ende zum anderen dicker wird. Ist nun die Photonenquelle in einem Fokuspunkt der durch die Krümmung beschrieben Parabel, ist der Photonenstrahl nach der Reflektion am Göbelspiegel parallelisiert. Durch den Göbelspiegel wird gleichzeitig der Photonenstrahl auf die Probe gelenkt und monochromatisiert.

Durch ein Blendensystem wird die Spaltbreite festgelegt und trifft dann auf die Probe, die auf einem höhenverstellbaren Probentisch platziert ist. Die definierte Breite des Photonenstrahls ist wichtig für die spätere Auswertung, da die Breite den Winkel festlegt, bei dem der ganze Strahl die Probe trifft. Wie in Kapitel 3 beschrieben, wird der Photonenstrahl innerhalb der Probe durch das Wechselwirkungspotential gestreut.

Danach tritt der reflektierte Strahl in den Detektorarm ein, dort wird zuerst durch eine weitere Spaltblende der nicht spekulär gestreute Teil des Photonenstrahls abgeschnitten, bevor der Strahl durch einen weiteren Göbelspiegel auf den Detektor fokussiert wird. Beide Arme sind frei um die Probe beweglich, sodass man sowohl die spekuläre, als auch die diffuse Streuung messen kann.

## 4.7 Neutronenreflektometrie mit Polarisationsanalyse (TREFF)

Will man zusätzlich zur Struktur noch die Verteilung der magnetischen Momente messen, so bietet sich die Neutronenreflektometrie mit Polarisationsanalyse an, da der Spin des Neutrons mit dem magnetischen Feld der Probe wechselwirken kann, siehe Kapitel 3.4. Die Neutronenreflektometriemessungen wurden am Instrument TREFF am Forschungsreaktor FRM II in Garching nahe München durchgeführt. Am FRM II werden die für das Reflektometrieexperiment benötigten kalten Neutronen durch Kernspaltung von Uran und anschließende Moderation in flüssigem Deuterium (ca.  $20 \text{ K}$ ) erzeugt. Die Neutronen werden mittels Neutronenleitern zu den Experimenten geleitet.

Der prinzipielle Aufbau ist in Abb. 4.5 dargestellt. Hierbei werden die kalten Neutro-

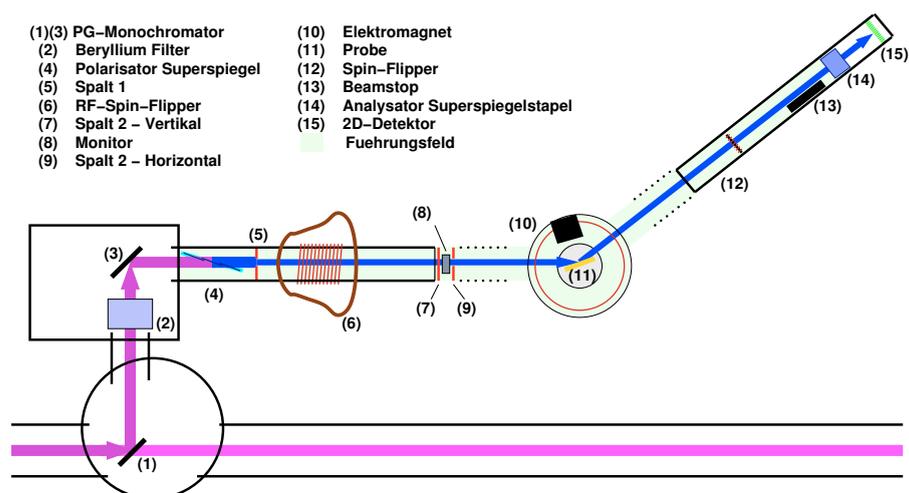


Abbildung 4.5: Prinzipieller Aufbau des Neutronenreflektometers TREFF. Entnommen aus [11].

nen aus dem Neutronenleiter NL5-Nord mittels eines pyrolitischen Graphitkristall aus dem Neutronenleiter durch Braggreflektion abgelenkt, wenn die Bragg-Bedingung erfüllt ist:

$$2d \cdot \sin(\theta) = n\lambda \quad (4.4)$$

Der Graphitkristall ist in einem Winkel von annähernd  $45^\circ$  zum Neutronenstrahl angebracht. Dadurch werden Neutronen, die eine Wellenlänge von  $4,73/n \text{ \AA}$  haben, aus dem Neutronenleiter gestreut und weiter zum Experiment geleitet.

Um nur Neutronen der gewünschten Wellenlänge zu haben, leitet man den Neutronenstrahl bei (2) durch einen polykristallinen Beryllium-Filter, der nur für Neutronen mit einer Wellenlänge größer als  $3,5 \text{ \AA}$  durchsichtig ist. Somit wird beim TREFF Neutronenreflektometrie mit Neutronen durchgeführt, die eine Wellenlänge von  $4,73 \text{ \AA}$  haben. Damit man die magnetischen Eigenschaften der Proben untersuchen kann, muss der Neutronenstrahl polarisiert werden. Dies wird bei (4) mittels eines Superspiegel-Polarisators gemacht, der nur die Neutronen mit Spin down durchlässt. Ab diesem Ort muss ein Führungsfeld als Quantisierungsachse angelegt werden, damit die Neutronen die Polarisation nicht verlieren. Da man alle Kanäle messen will, kann man noch mittels eines Spin-Flippers (6) die Polarisation der Neutronen ändern.

Mittels der beiden Spalte (5 und 9) kann man die Divergenz und somit die Winkelunschärfe des Neutronenstrahls bestimmen. Danach treffen die Neutronen die Probe die sich bei diesem Instrument in einem Elektromagneten und einem Helium-Durchfluss-Kryostaten befinden kann. Dadurch kann man magnetische Felder bis zu  $800 \text{ mT}$  und Temperaturen bis hinab zu  $4 \text{ K}$  direkt an der Probe erzeugen. An der Probe werden die Neutronen, wie in Kapitel 3 beschrieben gestreut.

Die gestreuten Neutronen können mittels eines frei beweglichem Detektorarms bis zu einem Winkel von  $60^\circ$  gemessen werden. Durch die Magnetisierung der Probe kann der Spin der Neutronen gedreht werden, weshalb man einen Spin-Analysator (14) vor dem Detektor braucht. Dieser arbeitet ähnlich wie der Polarisator, wobei hier aber die Neutronen mit Spin up durchgelassen werden. Mit dem Spin-Flipper bei (12) bekommt man eine eindeutige Spin-Analyse der gestreuten Neutronen.

- Bei einer Magnetisierung der Probe parallel zum Führungsfeld misst man gestreute Neutronen im Nicht-Spin-Flip-Kanal.
- Bei einer Magnetisierung der Probe senkrecht zum Führungsfeld, werden die gestreuten Neutronen im Spin-Flip-Kanal gemessen.

Bevor die Neutronen bei (15) den 2-dimensionalen Flächendetektor treffen, wird noch der Hauptstrahl bei (13) durch einen Beamstop bestehend aus einem stark absorbierendem Polymer abgeschirmt. Dadurch kann man auch bei kleinen Winkeln die gestreuten Neutronen messen, ohne dass diese vom Hauptstrahl überstrahlt werden.

# 5 Probenpräparation

## 5.1 Materialeigenschaften und Substrat

Die Pd/Fe-Vielfachschichtsysteme werden in einer MBE-Anlage hergestellt. Dabei ist das Ziel ein möglichst störungsfreies epitaktisches Wachstum zu erreichen. Deshalb sind die Verhältnisse der Gitterparameter der Elemente untereinander und auch zum Substrat wichtig. Nur wenn die Gitterkonstanten der Elemente ähnlich sind, ist es möglich, dass ein epitaktisches Wachstum stattfinden kann.

Aus diesem Grund sind die Elemente Pd und Fe passend zueinander gewählt. Palladium wächst kubisch flächenzentriert (fcc) mit einem Gitterparameter  $a = 3,89 \text{ \AA}$ . Dies entspricht einem Atomabstand von  $2,75 \text{ \AA}$ , wenn man die Elementarzelle um  $45^\circ$  in der [001]-Ebene dreht. Das Eisen wiederum wächst kubisch raumzentriert (bcc) mit einer Gitterkonstanten von  $a = 2,89 \text{ \AA}$ . Somit hat man einen Fehler zwischen den Gitterparametern von weniger als 5% und ein gutes Wachstum ist möglich, wenn die Elemente in (001) Richtung aufwachsen.

Jetzt ist es wichtig, ebenfalls ein gutes Substrat zu finden. Da man ein Vielfachschichtsystem mit jeweils Palladium an den Grenzen haben will, eignet sich als Substrat Silber sehr gut. Dieses wächst auch kubisch flächenzentriert mit einem Gitterparameter von  $a = 4,08 \text{ \AA}$ . Dies entspricht einem Fehler auf den Gitterabstand zum Palladium von ebenfalls weniger als 5%. Des Weiteren ist die Präparation von Silber sehr gut untersucht worden und man hat eine gute Ausgangssituation.

Als Trägermaterial wählt man GaAs, das eine Zinkblende-Struktur aufweist und einen Gitterparameter von  $a = 5,65 \text{ \AA}$  hat. Bei einer Drehung des Silbers um  $45^\circ$ , bekommt man einen Atomabstand von  $a = 5,5 \text{ \AA}$ , was dann auch sehr gut zum GaAs passt. Ein Problem ist, dass Silber ebenfalls in (011)-Richtung auf dem GaAs wachsen kann und somit nicht mehr zu den Gitterparametern der anderen Elemente passen würde. Deshalb muss man eine Eisenkeimschicht zwischen GaAs und Silber einfügen, die in (001)-Richtung wächst. Diese Zwischenschicht zwingt das Silber dann, in die gewünschte (001)-Richtung zu wachsen [29].

## 5.2 Probenpräparation und alte Aufdampfparameter

Bevor man etwas auf dem  $1 \text{ cm}^2$  großem GaAs-Einkristall epitaktisch aufwachsen lassen kann, muss man dieses zuerst von Verunreinigungen und der Oxidschicht befreien. Dafür reinigt man das in reinem Isopropanol liegende Substrat zuerst für ca. 15 min in einem Ultraschallbad. Dieses von groben Verunreinigungen befreite

Substrat wird durch die zweistufige Schleuse in die MBE-Anlage eingeschleust. Die Oxidschicht löst man vom Substrat, indem man dieses für 1 Stunde bei ca.  $650^{\circ}\text{C}$  tempert. Die Reinheit der Oberfläche überprüft man mittels LEED. Ist ein LEED -Bild sichtbar, ist die Oberfläche rein genug, um epitaktisches Wachstum zu ermöglichen. Andernfalls muss man die Tempertemperatur schrittweise erhöhen, aber bei zu hohen Temperaturen fängt das Substrat an zu schmelzen. Eine Erhöhung der Temperzeit hat keine Auswirkungen auf die Oberflächenqualität.

Ist die Oberfläche des Substrats rein, wird die Eisenkeimschicht aufgetragen. Daniel Schumacher hat in [11] festgestellt, dass man gute Ergebnisse bekommt, wenn man  $5 \text{ \AA}$  Eisen bei ca.  $130^{\circ}\text{C}$  aufträgt. Dabei wurde versucht, die Eisen-Keimschicht so dünn wie möglich zu halten, um den magnetischen Hintergrund bei der Magnetometrie zu reduzieren. Weniger als  $5 \text{ \AA}$  war nicht möglich, da die Schichtqualitäten zu schlecht wurden.

Nach der Eisenschicht kann die Silberschicht in (001)-Richtung aufgedampft werden. Dabei werden  $1500 \text{ \AA}$  Silber bei  $130^{\circ}\text{C}$  aufgedampft. Danach wird die Oberflächenspannung des Silbers zur Ausheilung von Fehlstellen ausgenutzt [30]. Dafür tempert man das Silber bei ca.  $300^{\circ}\text{C}$  für eine Stunde. Mittels LEED kann man die Verbesserung der Oberflächenqualität feststellen, siehe Abb. 5.1. Die LEED-Reflexe von der Silberoberfläche werden schärfer, was aber wegen der der Aufhellung der Bilder schwer zu erkennen ist. Eine höhere Tempertemperatur führt zum Diffundieren von Arsenatomen zur Oberfläche des Silbers, was die Oberflächenqualität reduziert. Eine längere Temperzeit führt nicht zu besseren Ergebnissen; dies wird in [30] beschrieben.

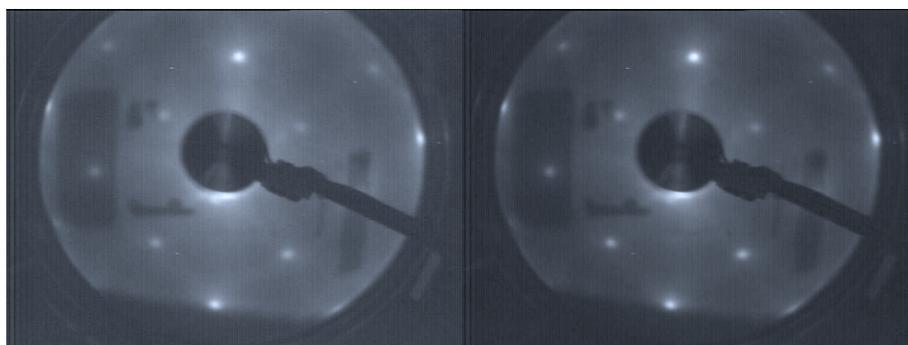


Abbildung 5.1: LEED-Bilder von Silber, links vor dem Tempern und rechts nach 1 Stunde tempeln bei  $300^{\circ}\text{C}$ .

Das Aufdampfen des Pd/Fe-Vielschichtsystems wurde von Schumacher in [11] untersucht. Dort wurde festgestellt, dass die besten Schichtqualitäten beim Aufdampfen von Palladium auf Silber bei einer variablen Temperatur zu beobachten sind. Es werden  $10 \text{ \AA}$  bei Raumtemperatur aufgedampft und dann die Temperatur auf  $130^{\circ}\text{C}$  erhöht. Bei höheren Temperaturen beginnt das Silber in die Palladiumschicht zu diffundieren (siehe Abb. 5.2) und beim Aufdampfen bei Raumtemperatur werden die LEED-Bilder sehr schlecht, was auf eine sehr raue oder unzureichend orientierte Oberfläche hindeutet. Das Aufdampfen des Palladiums bei RT dient als Diffusionsbarriere, da Volumendiffusion höhere Aktivierungsenergien braucht als die

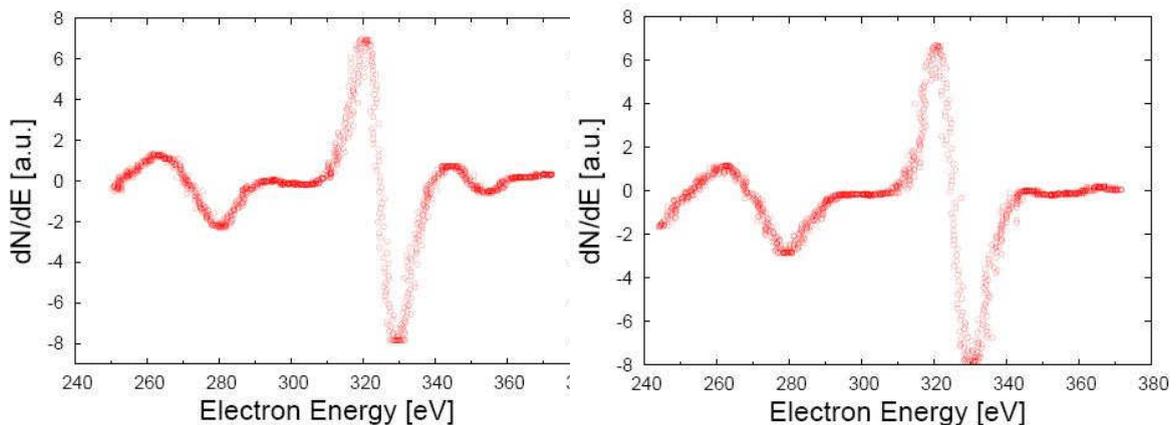


Abbildung 5.2: Augerspektrum des charakteristischen Pd-Peaks, einmal bei einer Aufdampftemperatur von  $130^{\circ}\text{C}$  (links) und einmal bei einer variablen Temperatur (rechts). Man sieht im linken Bild, dass ein zusätzlicher Peak bei  $340\text{ eV}$  vorhanden ist. Dieser kommt vom Silber, das ins Palladium diffundiert ist. Die Bilder wurden entnommen aus [11].

Oberflächendiffusion. Die weiteren Schichten wurden in der Arbeit von Schumacher immer bei  $130^{\circ}\text{C}$  aufgedampft.

Die Auswertung der Proben, die auf diese Weise hergestellt wurden, hat gezeigt, dass die Grenzschicht zwischen Palladium und dem darauf aufgedampftem Eisen sehr gut definiert ist. Es hat sich aber auch ergeben, dass die Grenzschicht zwischen Eisen und dem darauf aufgedampften Palladium nicht klar definiert ist. Das Aufdampfen von Palladium auf Eisen bei  $130^{\circ}\text{C}$  hat dazu geführt, dass Eisen ins Palladium diffundiert ist und eine  $5\text{ - }10\text{ \AA}$  dicke Pd/Fe-Mischschicht gebildet hat. Diese Pd/Fe Mischschicht hat die eindeutige Feststellung der Polarisation von Palladium verhindert.

Vorgeschlagen wurde nun, dass man auch versucht die Oberflächendiffusion beim Aufdampfen des Palladiums auf die Eisenschichten durch eine variable Temperatur zu unterdrücken. Dadurch könnte man vielleicht gut definierte Schichten mit ebenfalls guten Oberflächen bekommen.

### 5.3 Neue Präparationsparameter

Um geeignete Aufdampfparameter für die Palladiumschicht zu finden, wurden Proben mit dem Silbersubstrat und darauf aufgedampften  $150\text{ \AA}$  Palladium und  $40\text{ \AA}$  Eisen präpariert. Jetzt wurden immer  $3\text{ \AA}$  dicke Palladiumschichten mit unterschiedlichen Aufdampfparametern aufgedampft. Nach jeder einzelnen Schicht wurde ein LEED-Bild und Augerspektrum bei den charakteristischen Energien der Peaks von Eisen  $703\text{ eV}$  und Palladium  $330\text{ eV}$  aufgenommen. Dadurch kann man die Einflüsse der einzelnen Parameter auf die Schicht- und Oberflächenqualität bestimmen. Wir haben 3 unterschiedliche Aufdampfparameter untersucht. Zuerst wurde bei Raumtemperatur aufgedampft, dann einmal bei  $130^{\circ}\text{C}$  und zuletzt bei variabler Temperatur, also bis

9 Å bei Raumtemperatur und dann weiter bei 130°C.

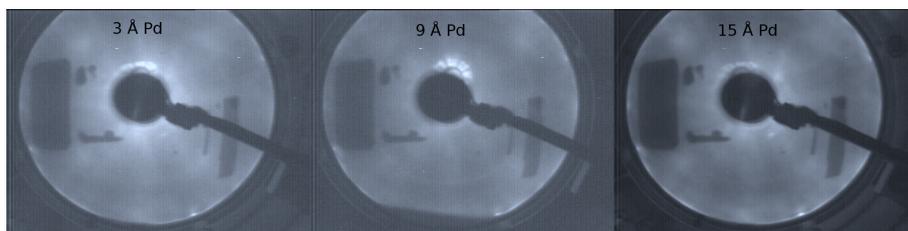


Abbildung 5.3: LEED-Bild bei einer Aufdampftemperatur von RT.

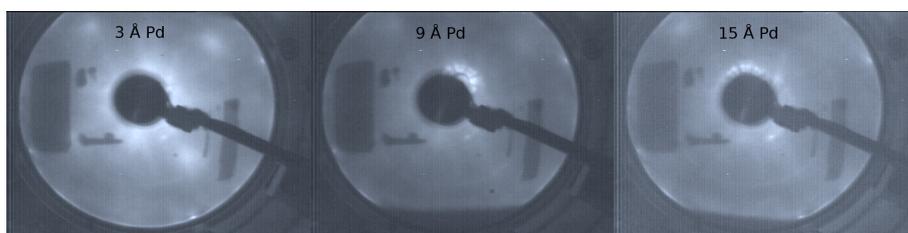


Abbildung 5.4: LEED-Bild bei einer Aufdampftemperatur von 130°C.

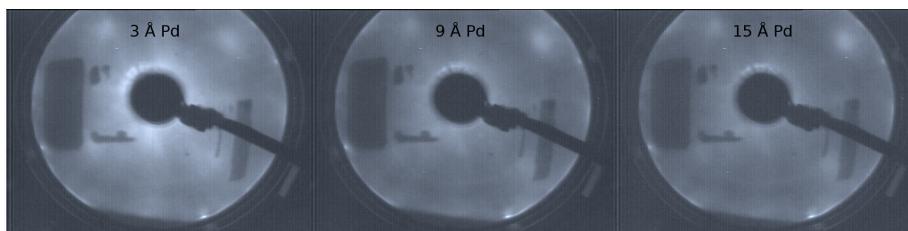


Abbildung 5.5: LEED-Bild bei variabler Aufdampftemperatur.

Wenn man sich die LEED Bilder ansieht, stellt man fest, dass sie sich wenig unterscheiden. Trotzdem scheint es so, dass die LEED Bilder bei variabler Temperatur und 130°C schärfer sind als bei Raumtemperatur. Dies deutet auf eine etwas bessere Oberflächenqualität hin. Man muss aber vorsichtig sein, da die Menge des aufgedampften Palladiums noch sehr gering ist, weshalb die LEED-Bilder noch stark durch die darunter liegende Eisenschicht beeinflusst sein könnten.

Zur Überprüfung, ob die Diffusion durch die neuen Aufdampfparameter unterdrückt werden konnte, werden die Peaks des charakteristischen Augerspektrums betrachtet. Wenn Interdiffusion stattgefunden hat, dann nimmt die Intensität des Eisenpeaks bei 703 eV weniger ab und die des Palladiumpeaks bei 330 eV weniger zu als ohne Interdiffusion. Somit kann man aus dem Verhältnis des Pd-Peaks und des Fe-Peaks auf die Stärke der Interdiffusion bei den unterschiedlichen Aufdampfvarianten schließen. Hier soll nur eine qualitative Auswertung erfolgen.

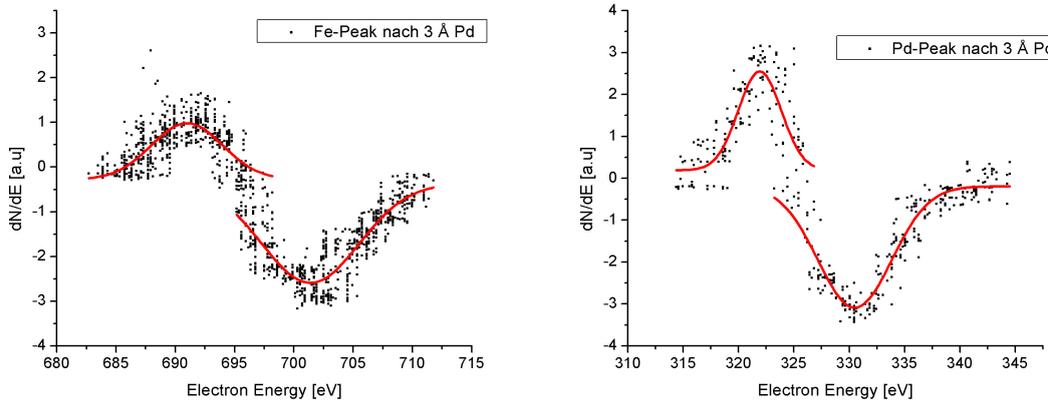


Abbildung 5.6: Augerspektrum des charakteristischen Fe- und Pd-Peaks bei variabler Aufdampftemperatur mit gefitteter Gaußkurve

Dabei wurden an die beiden Pd- und Fe-Peaks des Augerspektrums Gausskurven angefitzt, wie man in Abb. 5.6 sehen kann. Es wurde die Differenz zwischen dem Maximum und dem Minimum des jeweiligen Peaks betrachtet. Diese Größe ist proportional zur Konzentration des jeweiligen Elementes. Wie man in Abb. 5.7 links sehen kann, nimmt die Größe der Intensität des Fe-Peaks annähernd exponentiell ab und die Größe des Pd-Peaks nimmt bis zur Sättigung zu. Da die Augerelektronen trotz 330 eV sehr oberflächensensitiv sind und die Konzentration des diffundierten Eisens im Palladium sehr klein, sieht man nur einen kleinen Unterschied an den Intensitäten der charakteristischen Peaks. Um besser zu entscheiden, ob man mit einer variablen Temperatur eine geringere Diffusion des Eisens ins Palladium erreicht, wird der Quotient der Intensitäten des Eisenpeaks und des Palladiumpeaks betrachtet. Dies sieht man in Abb. 5.7 rechts.

Hier erkennt man, dass der Quotient bei variabler Temperatur oder bei einer Aufdampftemperatur von 30°C besonders bei höheren Palladiumschichtdicken viel größer ist, als bei einer Aufdampftemperatur von 130°C. Der Quotient bei einer Aufdampftemperatur von 130°C scheint sich anscheinend zu einem Wert zu sättigen, was auf eine Diffusion des Eisens ins Palladium schließen lässt.

Bei einer variablen Temperatur und bei Raumtemperatur lässt sich eine starke Abnahme der Eisenkonzentration durch den starken Anstieg des Quotienten bei größeren Palladiumschichtdicken erkennen. Anscheinend hat man die Oberflächendiffusion im entscheidenden Bereich, also bei kleinen Palladiumschichtdicken, unterdrückt. Des Weiteren scheint die Volumendiffusion bei größeren Palladiumschichtdicken bei der Aktivierungsenergie von 130°C noch nicht einzusetzen. Somit kann man auf besser definierte Grenzschichten schließen und muss trotzdem nicht auf die Oberflächenqualität verzichten, die man bei einer Aufdampftemperatur von 130°C hätte. Detaillierte Informationen gibt die Röntgenreflektometrie (Kapitel 6.2).

Es ist aber zu beachten, dass die Fehler auf die berechneten Größen durch die

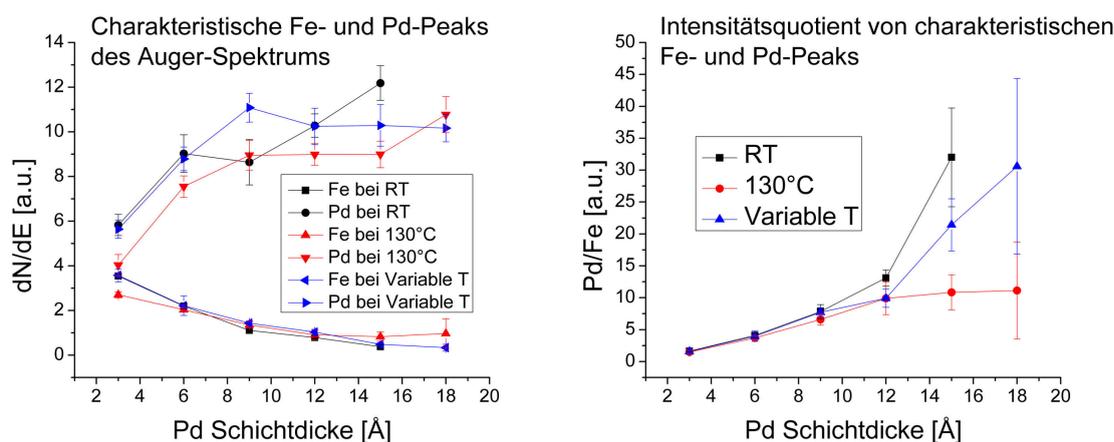


Abbildung 5.7: Links: Peakintensitäten der charakteristischen Peaks von Palladium und Eisen des Augerspektrums bei unterschiedlichen Aufdampfparametern. Rechts: Quotient der Intensitäten der charakteristischen Eisen- und Palladium-Peaks bei unterschiedlichen Aufdampfparametern.

geringen Konzentrationen des Eisens bei größeren Palladiumschichtdicken sehr groß sind. Dennoch kann man einen Trend zu weniger Diffusion beobachten.

Mit diesen neu gefundenen Parametern wurden nun 3 Vielfachschichtsysteme hergestellt, die später auf ihre magnetischen Eigenschaften untersucht wurden. Insbesondere habe ich mich auf die mögliche Stärke und Reichweite der Polarisation des Palladiums konzentriert. Es wurden die folgenden Vielfachschichtsysteme hergestellt:

- $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$
- $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{10\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$
- $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{150\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

Diese unterschiedlichen Vielfachschichtsysteme wurden aus verschiedenen Gründen gewählt. Beim Vielfachschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten, kann man erwarten, dass durch den kleinen Eisenanteil eine mögliche Polarisation des Palladiums gut erkennbar ist. Das magnetische Moment des Eisens dürfte eine kleine Polarisation des Palladiums noch nicht überdecken.

Zwar ist beim Vielfachschichtsystem mit 10 Å dicken Eisenschichten der magnetische Hintergrund des Eisens größer, aber dafür sind die Eisenschichten besser definiert. Somit misst man genau die Grenzflächeneffekte und keine Phänomene, welche durch eine Vermischung der Eisen- und Palladiumschichten hervorgerufen werden.

Beim Vielfachschichtsystem mit 150 Å dicken Eisenschichten dürfte schon eine mögliche Polarisation des Palladiums stark überdeckt werden und schwer nachweisbar sein. Hier macht man sich aber zu Nutze, dass bei exakt gleich dicken Eisen- und Palladiumschichten sich die Bragg-Peaks gerader Ordnung bei der Röntgen- und der

Neutronenreflektometrie auslösen. Dadurch hat man ein sehr sensibles Kriterium für die Symmetrie der Doppelschichten, welche aber durch eine Polarisation des Palladiums gebrochen wird. Mit polarisierter Neutronenreflektometrie kann man somit eine Polarisation des Palladiums in der Nähe der Grenzfläche gut nachweisen.



# 6 Analyse

## 6.1 Rasterkraftmikroskopie (AFM)

Um einen ersten Eindruck über die Qualität der Proben zu bekommen, wurden Rasterkraftmikroskopaufnahmen (siehe Kapitel 4.4) aller 3 Vielschichtsysteme und des Silbersubstrats gemacht. Man bekommt Informationen über die Rauigkeit an der Oberfläche, was bei der späteren Auswertung der Röntgenreflektometrie hilfreich ist.

Da die Oberfläche aller Proben etwas gekippt ist, wird zuerst ein Höhenausgleich durchgeführt, indem man von den topologischen Bildern die Ebene subtrahiert, bei der der mittlere Abstand der gemessenen Höhenpunkte zur Ebene minimal ist. Die dadurch erzeugten Höhenprofilbilder sieht man in Abb. 6.1. Wie man sehen kann, gibt es trotz der Subtraktion der Mittelebene Randeffekte. Es scheint, dass sich die Oberflächen an der oberen und unteren Bildkante nach innen oder nach außen biegen. Dies entsteht durch die nicht lineare Abhängigkeit der Höhenabstandes des Cantilevers von der x- und y-Koordinate beim Abrastern. Dadurch scheint in den Bildern ein größerer Höhenunterschied zu sein, als es tatsächlich ist. Für die Bestimmung der mittleren Rauigkeit wurde zusätzlich noch ein Linienausgleich durchgeführt, wodurch man den Effekt annähernd herausgerechnet hatte. Diese Bilder geben aber einen besseren Einblick in die Wirklichkeit.

Man kann erkennen, dass in allen 4 untersuchten Proben Löcher bis zu 50 nm Tiefe existieren, die in die Proben hineinragen. Diese sind in einigen  $\mu\text{m}$  Abstand voneinander. Dies ist ein Phänomen, das schon früher beobachtet wurde, z.B in [11] oder [30]. In der Referenz [30] hat man aber festgestellt, dass durch ein Tempern des Silbersubstrates sich diese Löcher durch die Oberflächenspannung des Silbers ausheilen und man eine glatte Oberfläche von einigen  $\text{\AA}$  bekommt.

Probe	rms-Rauigkeit [ $\text{\AA}$ ]
Ag	70
$[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$	55
$[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{10\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$	44
$[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{150\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$	51

Tabelle 6.1: Durch AFM bestimmte mittlere Rauigkeit an der Oberfläche der Vielschichtsysteme mit 2  $\text{\AA}$ , 10  $\text{\AA}$  und 150  $\text{\AA}$  dicken Eisenschichten, sowie des Silbersubstrats.

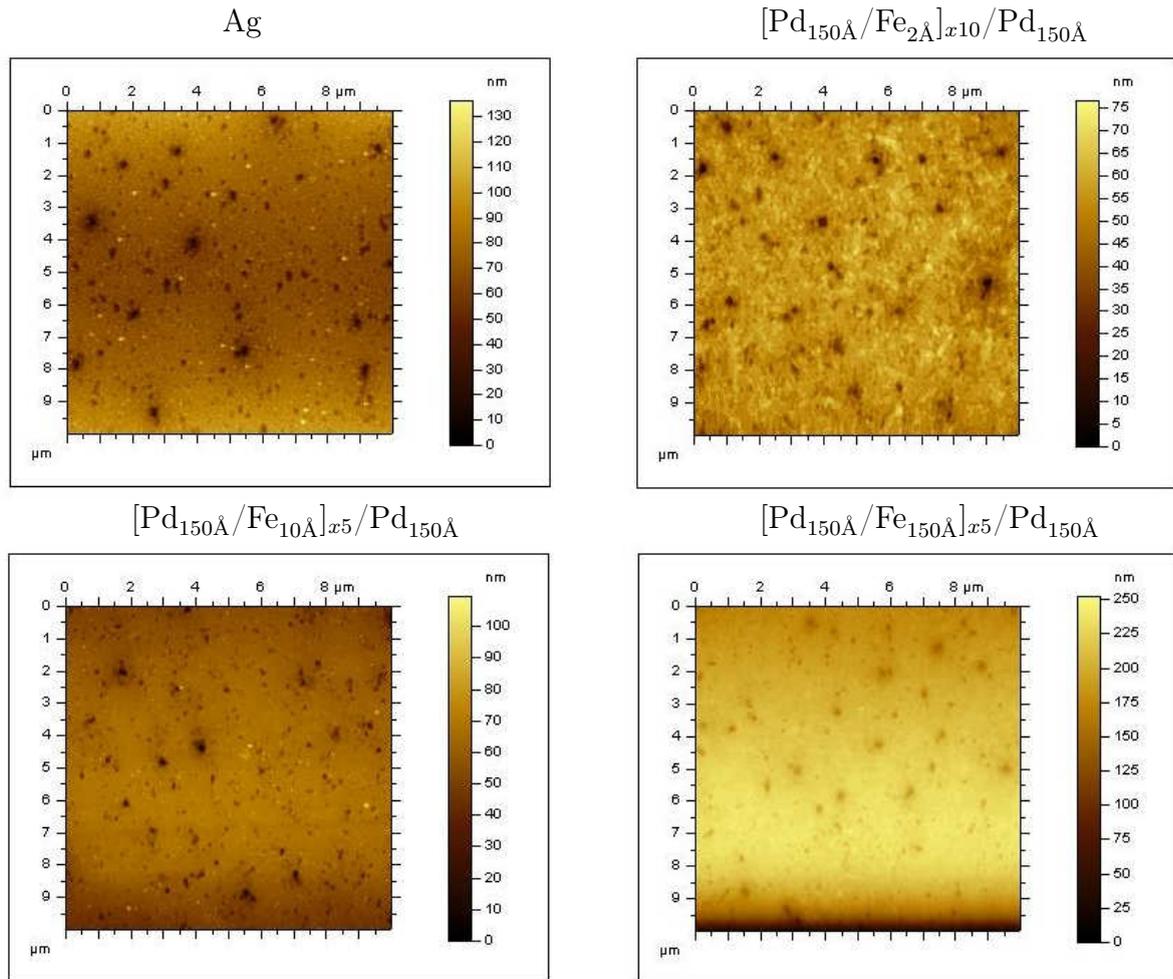


Abbildung 6.1: AFM Höhenprofilbilder von Silber oben links, mit  $2 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten oben rechts, mit  $10 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten unten links und mit  $150 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten unten rechts.

Es scheint, dass die GaAs-Substrate nicht ganz sauber von Verunreinigungen, z.B. Oxidationsstellen waren und das aufgedampfte Silber dort nicht epitaktisch aufwachsen konnte. Dadurch wurden aus Oxidationskeimzellen Löcher in der Größenordnung von bis zu  $0.5 \mu\text{m}$  Durchmesser, die sich dann vom Silber bis zum Vielschichtsystem fortgepflanzt haben. Man könnte bei zukünftigen Experimenten versuchen ein anderes Reinigungsverfahren anzuwenden, um das Substrat sauberer zu bekommen. Eine Idee wäre, das Substrat mit Argon zu sputtern, um auch die letzten Oxidreste zu entfernen.

Wenn man sich nun die Rauigkeiten, also die mittlere quadratische Abweichung von der mittleren Höhe, in Tabelle 6.1 ansieht, stellt man fest, dass diese in der Größenordnung von einigen nm sind. Da die Löcher, die man in den Höhenprofilen gesehen hat aber nur eine kleine Fläche der gesamten gemessenen Oberfläche bedecken, haben sie trotz der Tiefe keine große Auswirkung auf die gemessene Rauigkeit. Diese

hohen Rauigkeiten kann man durch die Oxidation der Oberfläche erklären, somit würde man innerhalb des Vielfachschichtsystems kleinere Rauigkeiten erwarten. Dies werden die späteren Röntgenreflektometriemessungen zeigen (siehe Kapitel 6.2).

## 6.2 Röntgenreflektometrie (XRD)

Bevor man mittels Magnetometrie und Neutronenreflektometrie mit polarisierten Neutronen eine Polarisation des Palladiums und die Verteilung der magnetischen Momente innerhalb des Vielfachschichtsystems untersuchen kann, müssen die Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme zuerst strukturell charakterisiert werden. Dafür werden in den nächsten Kapiteln die Schichtdicken, Streulängendichten und Rauigkeiten der Vielfachschichtsysteme mit 2 Å, 10 Å, und 150 Å dicken Eisenschichten untersucht.

Diese Probenparameter werden bestimmt, indem die Vielfachschichtsysteme modelliert und die daraus erhaltenen Simulationen an die gemessenen spekulären Reflektivitäten der Röntgenreflektometrie und der Neutronenreflektometrie angepasst werden. Für die Simulationen der Modelle wird der entwickelte Formalismus von E. Kentzinger [31] benutzt. Wie genau die einzelnen Parameter angepasst werden, wird später direkt an den Daten erklärt.

Mit den bekannten Schichtdicken kann man dann mit der Magnetometrie eine mögliche Polarisation des Palladiums nachweisen und die Verteilung mit Neutronenreflektometrie untersuchen. Dabei sind auch die hier bestimmten Parameter für die Schichtdicken und Rauigkeiten gute Startparameter für die Neutronenreflektometrie, wobei aber zu beachten ist, dass in der Neutronenreflektometrie die Rauigkeit eine Kombination der magnetischen und der strukturellen Rauigkeit ist.

### 6.2.1 $[\text{Pd}_{150\text{Å}}/\text{Fe}_{2\text{Å}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{Å}}$

Dieses System ist bei der Untersuchung der Polarisation von Palladium von großer Wichtigkeit, da hier der magnetische Hintergrund des Eisens am kleinsten ist. Somit kann man bei einer eventuellen Polarisation des Palladiums, die Polarisation in Stärke und Reichweite am besten nachweisen. Wegen der sehr dünnen Eisenschichten und des damit verbundenen kleinen Kontrastes wäre es hilfreich viele Perioden der Eisen-Palladium-Doppelschichten zu haben. Dafür müsste man aber eine große vertikale Korrelationslänge haben; dem wird im folgenden nachgegangen. Zum Schluß wird an das Vielfachschichtsystem eine Simulation angepasst, um die Parameter für Schichtdicke, Rauigkeit und Streulängendichte zu bekommen.

Es ist bei diesem Vielfachschichtsystem sehr wichtig zu überprüfen, ob die Rauigkeiten, die man im AFM gemessen hat, korreliert sind oder nicht. Hier sind die Eisenschichten so dünn, dass annähernd alle Rauigkeiten größer sind als die Schichtdicken des Eisens, weshalb die Eisenschichten im Palladium über einen relativ großen Bereich verteilt sind. Wären nun die Rauigkeiten nicht korreliert, hätte man keine definierten Parameter, weder die Schichtdicke, noch die Periode der Eisenschichten.

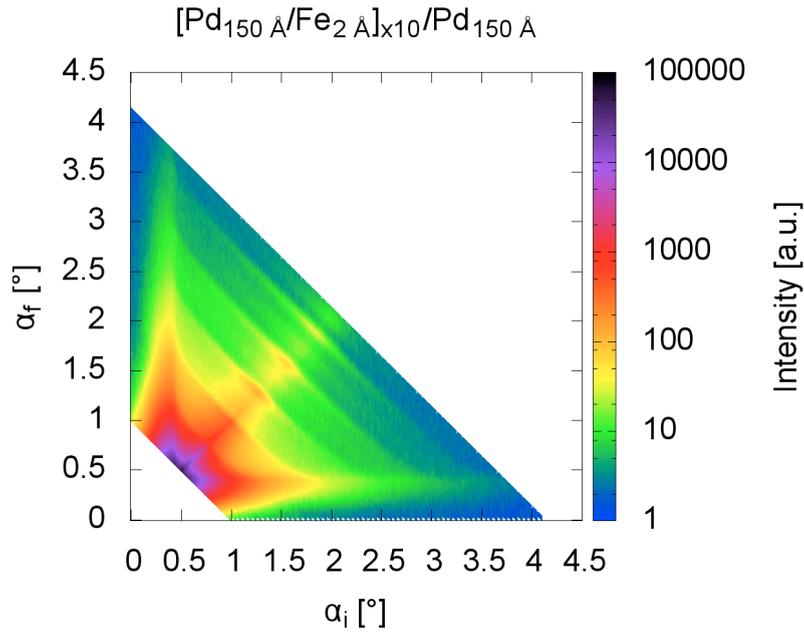


Abbildung 6.2:  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte von  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$ .

Nur bei korrelierten Rauigkeiten ist die Schichtdicke und die Periode im Mittel gut definiert.

Dazu wurde eine  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte gemessen, d.h. dass eine Vielzahl von Rockingkurven in einem Abstand von  $0.05^\circ$  zueinander gemessen wurden. Bei einer Rockingkurve wird der Winkel zwischen einfallendem Strahl und gestreutem Strahl konstant gehalten, also  $\alpha_i + \alpha_f = \text{konstant}$ .

Diese  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte sieht man in Abb. 6.2. Als erstes kann man bei ca.  $\alpha_i = 0.4^\circ$  und  $\alpha_f = 0.4^\circ$  die beiden Yoneda-Reflexe sehen, die durch Vielfachstreuung am Totalreflektionswinkel an den Grenzflächen entstehen. Des Weiteren sieht man bei  $\alpha_i = \alpha_f$  die spekuläre Reflektivität, auf der bei Erfüllung der Bragg-Bedingung die Bragg-Reflexe sichtbar sind.

Wichtig sind nun die „Bragg-Sheets“, die auf der  $\alpha_i + \alpha_f = \text{konstant}$  Linie durch die Bragg-Reflexe gehen. Es ist zu erkennen, dass diese in spekulärer Richtung nicht breiter als die Bragg-Reflexe sind. Die elliptische Form, mit kleiner Halbachse entlang der spekulären Reflektivität und großer Halbachse senkrecht dazu, deutet auf diffuse Streuung aufgrund von korrelierter Rauigkeit hin. Somit kann man zunächst qualitativ von gut definierten Eisenschichten sprechen.

Aus der Breite der Bragg-Reflexe und der „Bragg-Sheets“ kann man mit

$$l = \frac{2 \cdot \pi}{\Delta q} \quad (6.1)$$

die Korrelationslänge  $l$  bestimmen, wobei  $\Delta q$  die Halbwertsbreite der Bragg-Reflexe oder die Reflexbreite der Rockingkurven ist. Dabei gibt die Breite der „Bragg-

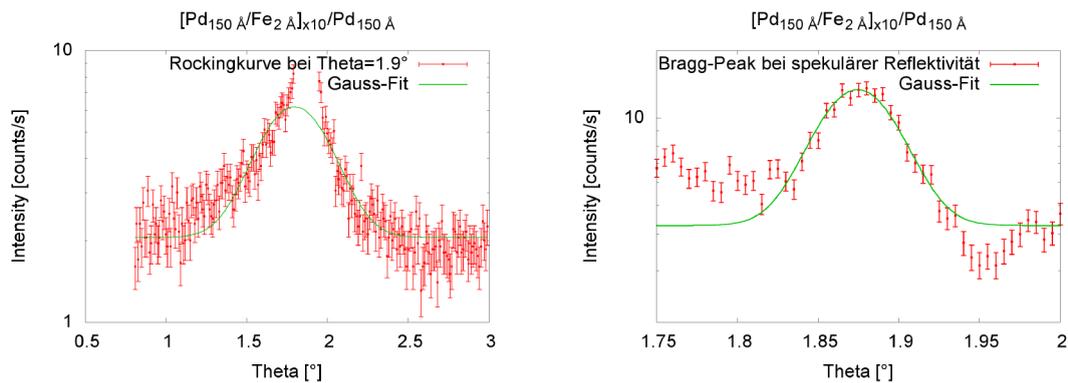


Abbildung 6.3: Links: Rockingkurve bei  $\Theta = 1,9^\circ$  für die Probe  $[\text{Pd}_{150 \text{ \AA}}/\text{Fe}_2 \text{ \AA}]_{x10}/\text{Pd}_{150 \text{ \AA}}$  mit Gauss-Fit zur Bestimmung der lateralen Korrelationslänge. Rechts: Gauss-Fit an den Bragg-Reflex der spekulären Reflektivität bei  $\Theta = 1,87^\circ$  zur Bestimmung der Korrelationslänge in z-Richtung.

Sheets“senkrecht zur spekulären Reflektivität die laterale Korrelationslänge und die Breite der Bragg-Reflexe entlang der spekulären Reflektivität die Korrelationslänge in z-Richtung an.

Zur Bestimmung der Korrelationslänge fittet man an die Reflexe Gauss-Kurven an und aus der Breite der Reflexe bekommt man mit Gleichung 6.1 die gesuchte Größe. In Abb. 6.3 ist beispielhaft ein Gauss-Fit dargestellt.

Dabei muss man beachten, dass bei der Bestimmung der lateralen Korrelationslänge die spekuläre Streuung der gemessenen Rockingkurve überlagert ist. Deshalb wurde die Intensitätsspitze vor dem Fit in der Mitte entfernt.

Die so bestimmten Korrelationslängen kann man in Abb. 6.4 sehen. Dabei sieht man, dass bei kleinem Theta die Korrelationslängen größer werden. Dies sieht man sowohl in der lateralen, als auch in der senkrechten Korrelationslänge, wobei der Effekt in der lateralen viel größer ist. Dies beruht auf zwei unterschiedlichen Phänomenen. Bei der Korrelationslänge in z-Richtung können die Röntgenstrahlen durch lange Wege und damit verbundener Absorption noch nicht die ganze Probe sehen, da man bei kleinem Einfallswinkel nahe dem Totalreflektionsplateau ist. Somit scheint es, dass man eine größere Korrelationslänge innerhalb der Probe hat. Bei der lateralen Korrelationslänge sind der gemessenen Rockingkurve die beiden Yoneda-Reflexe überlagert. Um die Reflexbreite zu bestimmen, muss man die Yoneda-Reflexe abschneiden, dadurch bekommt man einen erhöhten Untergrund und der laterale Reflex ist zusammengestaucht. Dadurch misst man kleinere Reflexbreiten, was in größeren Korrelationslängen resultiert. Des Weiteren spielen dynamische Beugungsphänomene eine größere Rolle bei kleineren Einfallswinkeln, wodurch Gleichung 6.1 nicht mehr uneingeschränkt gilt. Deshalb sind die Korrelationslängen bei großem Einfallswinkel aussagekräftiger und man bekommt Korrelationslängen von ca. 200 nm lateral und von ca. 100 nm in z-Richtung für die Röntgenreflektometrie. Damit ist die Rauigkeit dieses Vielschichtsystems vollständig korreliert, da ein Vielschichtsystem von ca. 165 nm Gesamtdicke betrachtet wurde. Lateral ergibt sich wie erwartet eine

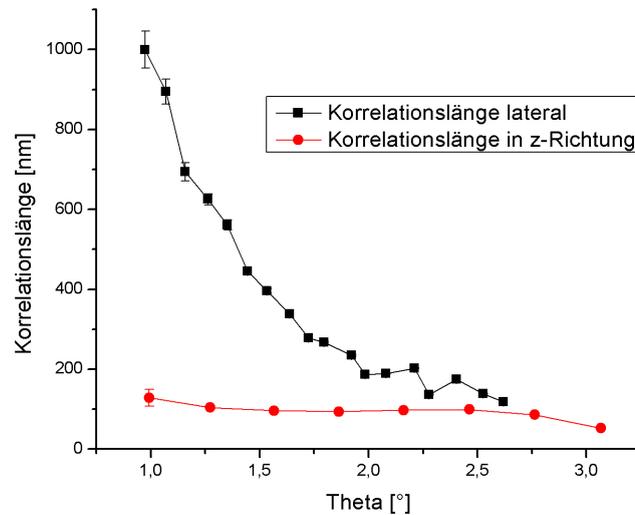


Abbildung 6.4: Korrelationslänge lateral und in z-Richtung der  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$  Probe. Die laterale Korrelationslänge wurde aus den Rockingkurven bestimmt und die in z-Richtung aus der spekulären Reflektivität. Es wurde aufgetragen, die Korrelationslänge gegen  $(\alpha_i + \alpha_f)/2$ .

größere Korrelationslänge als in z-Richtung.

Um die Probe  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$  weiter zu charakterisieren, wurde an die spekuläre Reflektivität eine Simulation angepasst. Dadurch bekommt man Auskunft über die Schichtdicke, die Streulängendichte und die Rauigkeit. Dabei muss man aber beachten, dass diese Probe auch diffus streut. Deshalb wurde von der spekulären Reflektivität die Kurve subtrahiert, die um  $0,1^\circ$  versetzt gemessen wurde, also bei der galt:  $\alpha_i = \alpha_f + 0,1^\circ$ . Dadurch bekommt man die „wahre“ spekuläre Reflektivität. Alle drei Kurven kann man in Abb. 6.5 sehen. Hierbei ist aber zu beachten, dass die Berechnung der „wahren“ spekulären Reflektivität nur eine Näherung ist. Will man die „wahren“ spekuläre Reflektivität bei diesem Vielfachschichtsystem exakt bestimmen, dann muss man diese gemeinsam mit der diffusen Streuung simulieren und diese Simulation an die Messdaten anpassen.

Als erstes sieht man direkt, dass die Intensität der „wahren“ spekulären Reflektivität ohne diffuse Streuung mit zunehmendem Theta stärker abnimmt als bei der gemessenen spekulären Reflektivität. Dies zeigt eine größere Rauigkeit als in der ursprünglich gemessenen Reflektivität. Andererseits sind die Bragg-Reflexe immer noch sehr ausgeprägt, wenn man bedenkt, dass man  $2 \text{ \AA}$  dicke Eisenschichten bei einer Rauigkeit an der Oberfläche von einigen nm hat.

Durch die Anpassung bekommt man nun einen guten Überblick über die Struktur der Probe. Die von uns durchgeführte Simulation ist in Abb. 6.5 rechts zu sehen. Aus der Anpassung folgen die Parameter in Tabelle 6.2:

$\chi^2/DOF = 5,33$	Schichtdicke [Å]	$\delta$ [ $10^{-6}$ ]	$Nb'$ [ $10^{-6} \text{Å}^{-2}$ ]
Fe	$1,87 \pm 0,99$	$22,86 \pm 3,06$	$60,56 \pm 8,1$
Pd	$142,57 \pm 7,84$	$27,86 \pm 0,16$	$73,80 \pm 0,42$

Tabelle 6.2: Durch die Simulation der „wahren“ spekuläre Reflektivität erhaltenen Parameter für die Schichtdicken und Streulängendichten bei Eisen und Palladium.

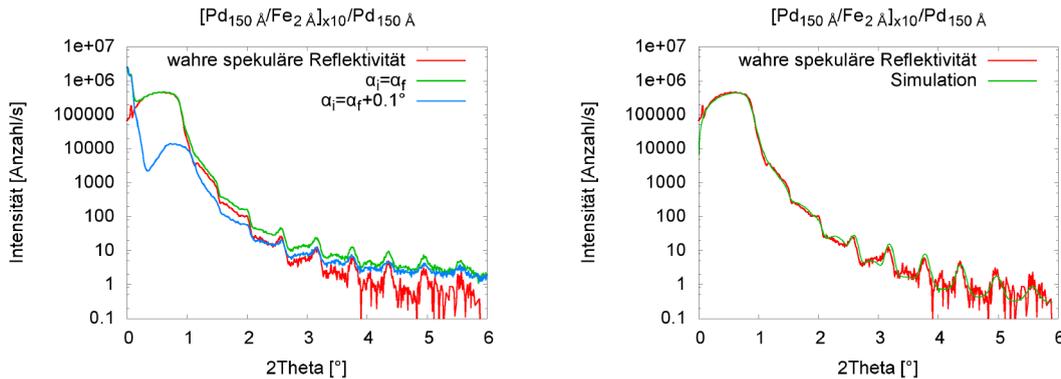


Abbildung 6.5: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität bei  $\alpha_i = \alpha_f$ , zusätzlich die diffuse Streuung bei  $\alpha_i = \alpha_f + 0,1^\circ$  und die Differenz der beiden Kurven. Dies ergibt die „wahre“ spekuläre Reflektivität. Rechts: Die „wahre“ spekuläre Reflektivität mit Simulation.

Hierbei bezeichnet  $DOF$  die Anzahl der freien Parameter;  $\delta$  ist der Parameter, der der Simulation übergeben wird und über  $n = 1 - \delta - i\beta$  mit dem Brechungsindex verknüpft ist (siehe 3.2.2);  $Nb'$  ist die reelle Streulängendichte und es gilt:  $\delta = \frac{\lambda^2}{2\pi} \cdot Nb'$ . Bei den hier angegebenen Standardabweichungen wurden die Fehler der obersten Schicht genommen, da die Simulationskurve am empfindlichsten für Veränderungen dieser Parameter ist. Aber diese Fehler können den wahren Fehler nur andeuten, da alle Parameter miteinander korreliert sind und somit eine exakte Bestimmung der einzelnen Fehler schwierig ist.

Ein  $\chi^2/DOF$  von 5,33 deutet auf eine recht gute Anpassung hin. Dabei bezeichnet  $DOF$ , die Anzahl der Freiheitsgrade. Ein  $\chi^2/DOF \approx 1$  zeigt eine gute Simulation an, ist der Wert größer als 1, dann sind die Fehler unterschätzt und bei einem Wert größer als 1 hat man zu große Fehler angenommen. Man kann eine beliebig gute Anpassung bekommen, wenn man jeden Parameter einzeln anpasst. Dies wäre aber physikalisch nicht sinnvoll, weshalb die Schichtdicken und Streulängen bei den einzelnen Elementen für alle Schichten im ganzen Vielfachschichtsystem gleich gelassen wurden.

Die genaue Eingabedatei ist im Anhang A.1 zu sehen. Bei der Anpassung musste ich eine Oxidschicht annehmen, die eine reduzierte Streulänge von ca.  $50 \cdot 10^{-6} \text{Å}^{-1}$ , aber dafür eine stark erhöhte Rauigkeit an der freien Oberfläche hat. Bei der Rauigkeit

innerhalb des Vielschichtsystems ergibt sich eine lineare Zunahme von 5 Å beim Substrat bis zu 12 Å an der letzten Palladiumschicht. Die Rauigkeit der Oxidschicht an der Oberfläche betrug 48 Å, was sich dann mit der gemessenen Rauigkeit der AFM-Messung deckt. Somit steigt die Rauigkeit nicht besonders stark innerhalb des Vielschichtsystems an. Nur die letzte Oxidschicht muss mit einer sehr hohen Rauigkeit angenommen werden, um den starken Abfall der Intensität bei hohen Winkeln zu beschreiben.

Da die Streulängendichte des Palladiums größer ist als die des Eisens, definiert diese den kritischen Winkel, bei dem der Strahl in die Probe eindringen kann. Somit wird diese Streulänge durch das Totalreflektionsplateau bestimmt. Die Streulänge des Eisens wird dann durch den Kontrast zum Palladium bestimmt, der nötig ist, um die Intensität der Bragg-Reflexe zu simulieren. Somit bekommt man eine Streulängendichte für Eisen, die etwas größer als der Literaturwert von  $59,3 \cdot 10^{-6} \text{Å}^{-2}$  ist, sich aber bei dem großen Fehler mit dem Literaturwert deckt. Eine große Diskrepanz findet man bei der Streulänge des Palladiums, diese ist um ca. 17 % kleiner, als der Literaturwert von  $88,4 \cdot 10^{-6} \text{Å}^{-2}$ . Dieses Phänomen ist schwer zu erklären, da es einerseits durch eine Diffusion des Eisens ins Palladium zu begründen wäre, andererseits aber auch durch andere Gitterparameter des Palladiums in der Ebene. Aber die Diffusion wurde, wie in Kapitel 5.3 beschrieben unterdrückt, und andererseits bleibt normalerweise das Volumen der Einheitszelle durch eine Relaxation der Gitterparameter senkrecht zur Ebene gleich. Dies würde in der gleichen Streulängendichte resultieren. Auch die Löcher, die man in den AFM-Aufnahmen sehen kann, können den Unterschied nicht erklären, da diese nur einen kleinen Bruchteil von ca. 1% von der Gesamtoberfläche bilden und beim Eisen genauso wirken. Wahrscheinlich ist eine Kombination aller drei Phänomene für die große Diskrepanz zwischen dem Literaturwert und dem gemessenen Wert verantwortlich.

Die gesamte Schichtdicke kann durch die Position der Bragg-Reflexe bestimmt werden. Wenn man sich die gemessenen Reflektivitäten ansieht, so erkennt man, dass man erst bei einem Theta von  $1.5^\circ$  von gut definierten Bragg-Reflexen sprechen kann. Mit den Positionen  $x_n$  aufeinanderfolgender Bragg-Reflexe bei großen Einfallswinkeln, die mit Gauss-Fits bestimmt wurden, kann man mit

$$d_G = \frac{2 \cdot \pi}{x_{n+1} - x_n} \quad (6.2)$$

die Gesamtschichtdicke  $d_G$  bestimmen. Man erhält:  $d_G = 145,3 \pm 0,14 \text{Å}$ . Wenn man andererseits die Schichtdicken mit der Simulation anfittet, bekommt man die Werte, die in der Tabelle 6.2 stehen. Da die Werte miteinander korreliert sind, scheint das Simulationsprogramm die Fehler zu überschätzen. Aber mit der Position der Bragg-Reflexe, berechnet durch die Gauss-Fits und dem Wissen, welches man durch den Aufdampfprozess in der MBE hat, kann man sich sicher sein, dass die Fehler zu groß sind. Wie man später sehen wird, verhalten sich die Schichtdicken von Eisen und Palladium in Bezug zur nominellen Schichtdicke gleich. Bei kleinerer Gesamtschichtdicke als  $152 \text{Å}$  erwarten wir bei beiden Schichtdicken leicht kleinere

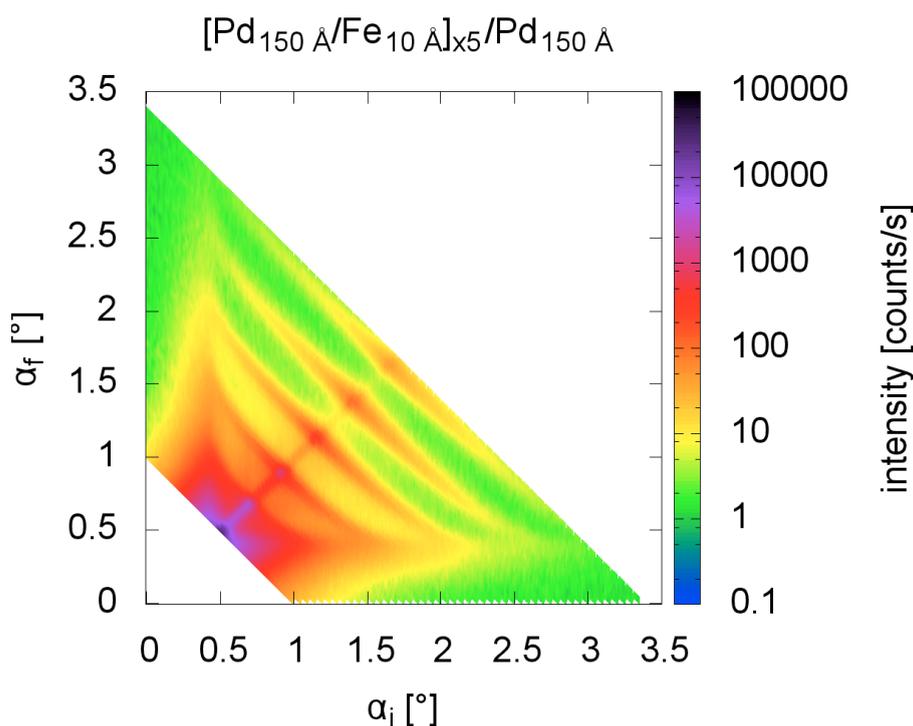


Abbildung 6.6:  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte von  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{10\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$ .

Werte. Somit sind die Fehler sowohl fürs Eisen als auch fürs Palladium zu groß. In der weiteren Auswertung nehmen wir als Fehler für die Eisenschichtdicke 0,3 Å und für die Palladiumschichtdicke 3 Å an. Diese Werte sind glaubhafter als die Fehlerangaben des Simulationsprogramms.

### 6.2.2 $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{10\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

Bei diesem Vielschichtsystem ist der Einfluss des Eisens nominell schon um einen Faktor 5 größer, als bei der Probe mit den 2 Å dicken Eisenschichten. Da, wie schon in Kapitel 6.2.1 und 6.1 gezeigt wurde, die Rauigkeit an den Grenzflächen sehr groß ist, kann man hoffen, dass bei dickeren Eisenschichten die Eisenschichten im Endeffekt besser definiert sind. Bei der Analyse dieses Schichtsystems gehen ich genauso vor wie in Kapitel 6.2.1 schon für die  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$ -Probe.

Die  $\alpha_i - \alpha_f$ -Karte ist in Abb. 6.6 zu sehen. Zuerst sieht man eine große Ähnlichkeit zu der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten. Die Yoneda-Reflexe sind bei den selben Einfalls- und Ausfallswinkeln, was bei gleichen Elementen zu erwarten ist, da der kritische Winkel annähernd gleich bleibt. Als ersten Unterschied kann man erkennen, dass die Bragg-Reflexe und „Bragg-Sheets“ stärker ausgeprägt sind.

Die Korrelation, die in Kapitel 3.2.1 besprochen wurde, kann man an diesem Schichtsystem noch besser erkennen. Die „Bragg-Sheets“ sind entlang der Rockingkurven sehr gut zu erkennen. Somit nimmt die aufwachsende Schicht die Form der unteren Schicht an und man bekommt im Mittel gut definierte Schichtdicken. Des Weiteren kann

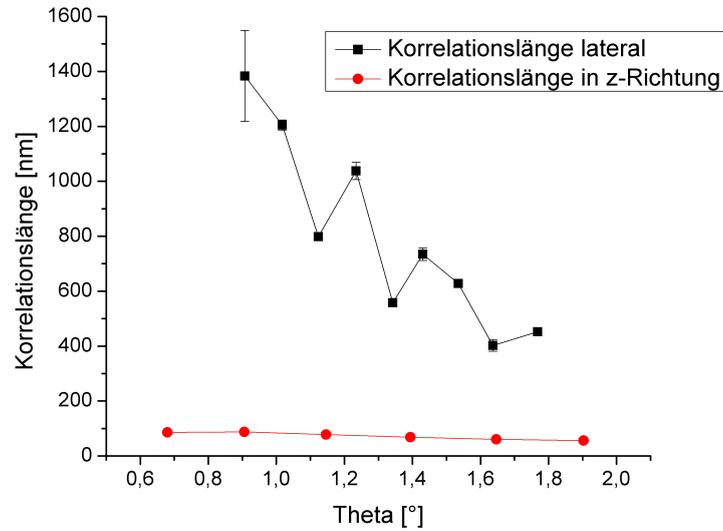


Abbildung 6.7: Korrelationslänge lateral und in z-Richtung der  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{10\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$  Probe. Die laterale Korrelationslänge wurde aus den Rockingkurven bestimmt und die in z-Richtung aus der spekulären Reflektivität. Es wurde die Korrelationslänge gegen  $(\alpha_i + \alpha_f)/2$  aufgetragen.

man gut ausgeprägte Bragg-Reflexe erkennen, was auf eine recht große Korrelationslänge senkrecht zur Oberfläche hindeutet. Um dies quantitativ zu zeigen, kann man die Korrelationslängen mit Formel 6.1 bestimmen (siehe Abb. 6.7). Hierbei wurde genauso verfahren, wie in bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten. Es wurde eine Gauss-Kurve an die Reflexe in den Rocking-Kurven und an die Bragg-Reflexe in der spekulären Reflektivität gefittet. Wie in Kapitel 6.2.1 beschrieben, sieht man wieder eine Erhöhung der Korrelationslänge bei kleinerem Einfallswinkel. Aus den selben Gründen, wie im Kapitel 6.2.1 beschrieben, sind die Korrelationslängen bei hohem Einfallswinkel aussagekräftiger. Man bekommt eine laterale Korrelationslänge von ca. 500 – 700 nm, und von 100 nm senkrecht zur Oberfläche. Bei einer Gesamtdicke der Probe von ca. 100 nm wird sind somit die Rauigkeiten komplett korreliert. Bei einer Probe mit größerer Anzahl der Perioden, konnte man mit Röntgenreflektometrie keine Verbesserung des Kontrastes und damit keine schärferen Bragg-Reflexe feststellen. Wegen der kleineren Rauigkeit wurde die Probe mit den 5 Doppelschichten weiter untersucht.

Bei der Anpassung der Simulation an die „wahre“ spekuläre Reflektivität, muss man, wie man in Abb. 6.8 links sehen kann, zuerst die diffuse Streuung von der gemessenen spekulären Reflektivität subtrahieren. Dies ist noch wichtiger als bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten, da die „Bragg-Sheets“ viel stärker ausgeprägt sind.

Die „wahre“ spekuläre Reflektivität wurde mit der Simulation in Abb. 6.8 rechts ausgewertet. Die physikalischen Größen, wie Rauigkeit, Schichtdicke und die Streulängen bestimmt man wieder durch die Anpassung der Simulation an die „wahre“

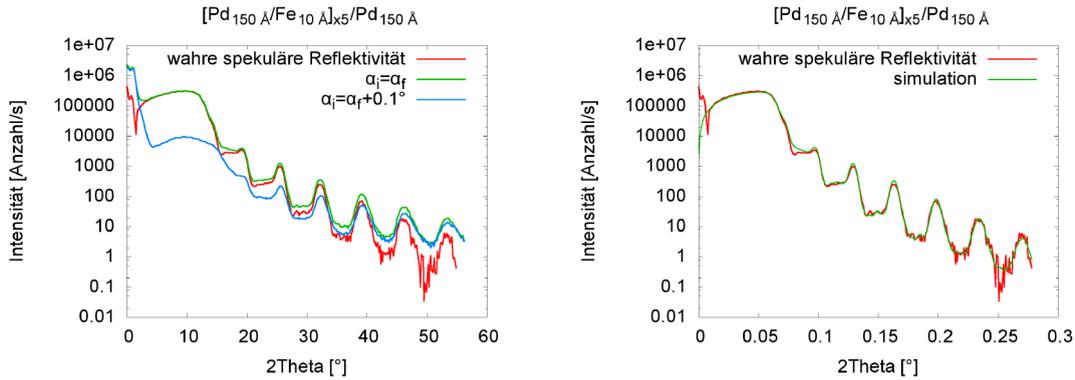


Abbildung 6.8: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität bei  $\alpha_i = \alpha_f$ , zusätzlich die diffuse Streuung bei  $\alpha_i = \alpha_f + 0,1^\circ$  und die Differenz der beiden Kurven. Dies gibt die „wahre“ spekuläre Reflektivität. Rechts: Die „wahre“ spekuläre Reflektivität mit Simulation.

spekuläre Reflektivität. Hierbei ist aber zu beachten, dass die Größen miteinander korreliert sind, wodurch eine eindeutige Festlegung der Parameter sehr schwierig ist. Man bekommt aber einen Einblick in das System und kann die Parameter für die spätere Auswertung weiter benutzen. Man bekommt:

$\chi^2/DOF = 2,78$	Schichtdicke [ $\text{\AA}$ ]	$\delta$ [ $10^{-6}$ ]	Nb [ $10^{-6} \text{\AA}^{-2}$ ]
Fe	$11,26 \pm 0,84$	$23,35 \pm 1,38$	$61,86 \pm 3,66$
Pd	$156,2 \pm 2,78$	$30,84 \pm 0,25$	$81,71 \pm 0,66$

Tabelle 6.3: Durch die Simulation der „wahren“ spekuläre Reflektivität erhaltenen Parameter für die Schichtdicken und Streulängendichten bei Eisen und Palladium.

Bei der Anpassung musste ich wieder eine Oxidschicht annehmen, die ähnliche Parameter aufweist wie die Probe mit 2  $\text{\AA}$  dicken Eisenschichten. Die Rauigkeiten steigen ebenfalls zu den oberen Schichten hin von 5  $\text{\AA}$  bis ca. 12  $\text{\AA}$  an. Somit decken sich diese Parameter mit der anderen Probe.

Bei den Streulängendichte kann man eine große Diskrepanz zu der Probe mit 2  $\text{\AA}$  dicken Eisenschichten erkennen. Hier ist die Streulängendichte des Palladiums von  $81,71 \cdot 10^{-6} \text{\AA}^{-2}$  um 7,5 % kleiner als der Literaturwert und somit viel größer, als bei der Probe mit 2  $\text{\AA}$  dicken Eisenschichten. Da die Werte durch den kritischen Winkel bestimmt werden, sind die Fehler auf die Palladiumstreulängendichten sehr klein und die beiden Streulängen liegen nicht im  $1\text{-}\sigma$ -Intervall. Diese Diskrepanz ist schwierig zu erklären, wahrscheinlich sind die Phänomene, die dafür verantwortlich sind, dass die Streulängendichte bei der 2  $\text{\AA}$  dicken Eisenschichtprobe so stark vom Literaturwert abweicht, auch für die Diskrepanz zwischen den Streulängendichten des Palladiums bei beiden Schichtsystemen verantwortlich.

Bei den Schichtdicken kann man erkennen, dass diese gut definiert sind. Bei Palladium hat man einen relativen Fehler von ca. 2 % und bei Eisen von ca. 8 %. Es war nicht nötig, zusätzliche Zwischenschichten anzunehmen um eine gute Anpassung zu bekommen und die Dicke der Grenzschichten konnte man auch nicht stark variieren, ohne die Anpassung signifikant zu verschlechtern. Somit hat sich gezeigt, dass die gefundenen Präparationsparameter geeignet für diese Vielfachschichtsysteme sind. Anders als bei der Probe mit den 2 Å dicken Eisenschichten sind diese Fehler in einer vernünftigen Größenordnung; dies liegt an den deutlichen Bragg-Reflexe. Durch die größere Eisenschichtdicke wird an der Grenzfläche zwischen Eisen und Palladium ein größerer Teil des einfallenden Teilchenstroms gestreut, als bei kleiner Eisenschichtdicke. Dies resultiert in deutlicheren Bragg-Reflexe, was die Fehler auf die Parameter reduziert.

Das  $\chi^2/DOF$  von 2,78 deutet darauf hin, dass diese Anpassung gut ist und die Simulation die Probe gut beschreibt.

### 6.2.3 $[\text{Pd}_{150\text{Å}}/\text{Fe}_{150\text{Å}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{Å}}$

Die Idee bei diesem Schichtsystem war es, mit gleich großen Eisen- und Palladiumschichten ein sehr sensitives Kriterium für gleiche Schichtdicken zu bekommen. Sind die Schichtdicken exakt gleich groß, dann verschwinden die Reflexe gerader Ordnung, weil die reflektierte Welle an der mittleren Schicht genau den halben Weg zur nächsten Schicht zurückgelegt hat. Dadurch ist der Kontrast entgegengesetzt und die beiden reflektierten Wellen interferieren destruktiv.

Die Auswertung folgt dem gleichen Verlauf wie bei den anderen Vielfachschichtsystemen. Die  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte sieht man in Abb. 6.9.

An dieser Stelle soll nur auf die speziellen Phänomene dieses Vielfachschichtsystems eingegangen werden, da die in allen drei Vielfachschichtsystemen auftretenden Phänomene schon früher besprochen wurden. Als erstes sieht man im Unterschied zu den anderen Schichtsystemen, dass die Reflexe noch viel näher beieinander liegen. Bei diesem Vielfachschichtsystem ist die Periode der Schichtdicke etwa doppelt so groß, wie beim Schichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten. Dadurch folgt im reziproken Raum eine Halbierung der Periode. Des Weiteren kann man erkennen, dass es Reflexe gerader Ordnung gibt. Somit lässt sich feststellen, dass die Eisen- und Palladiumschichten nicht genau gleich dick sind. Die Bragg-Reflexe sind noch stärker ausgeprägt als bei den anderen Vielfachschichtsystemen; insbesondere reichen die „Bragg-Sheets“ sehr weit, teilweise sogar in die Yoneda-Reflexe hinein. Somit ist die Korrelation zwischen den Rauigkeiten der einzelnen Schichten sehr deutlich und bei der Analyse der spekulären Reflektivität muss man die diffuse Streuung herausrechnen. Ein Problem tritt aber auf, wenn man sich den Bereich nahe der totalen Reflexion ansieht, wo der erste sichtbare Bragg-Reflex sehr stark ausgeprägt ist. Dieser Bragg-Reflex liegt auf der Flanke der gemessenen Reflektivität, bei der der Röntgenstrahl gerade in die Probe eindringt. Deshalb macht man bei der Differenzbildung an dieser Position einen großen Fehler, weil man Effekte vom Plateau der Totalreflektion und den Yoneda-Reflexe subtrahiert. Dies ist bei der Auswertung der

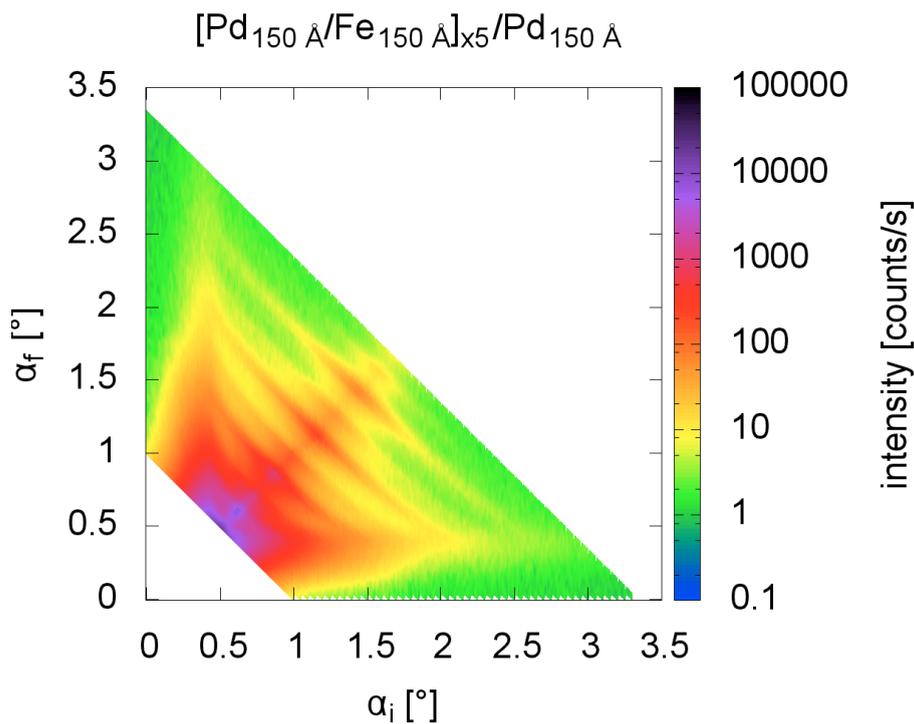


Abbildung 6.9:  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte von  $[\text{Pd}_{150\text{Å}}/\text{Fe}_{150\text{Å}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{Å}}$ .

„wahren“ spekulären Reflektivität zu beachten.

Wenn man, wie in Kapitel 6.2.1 beschrieben, die laterale und die senkrechte Korrelationslänge bezüglich den Schichtebenen bestimmt, bekommt man die Ergebnisse, die in Abb. 6.10 dargestellt sind.

Man kann dieselben Phänomene erkennen wie in den anderen Schichtsystemen, wobei aber hier eine laterale Korrelationslänge von ca. 600 nm und senkrecht zur Schichtebene eine Korrelationslänge von ca. 70 nm vorliegt. Die gestreuten ebenen Wellen aus einer Hälfte der Probe interferieren nicht konstruktiv mit den anderen reflektierten Wellen. Dadurch misst man eine erniedrigte Gesamtintensität. Deshalb würden mehr Perioden nicht zu einer besseren Ausprägung der Bragg-Reflexe führen. Mit 5 Perioden hat man eine optimale Anzahl.

In Abb. 6.11 links kann man wieder sehr gut erkennen, dass man die diffuse Streuung von der gemessenen Reflektivität subtrahieren muss, um die „wahre“ spekuläre Reflektivität zu erhalten. Die so berechnete „wahre“ spekuläre Reflektivität sieht man in Abb. 6.11 rechts mit der angefitzten Simulation. Wie man schon in der  $\alpha_i\alpha_f$ -Karte sehen konnte, verschwinden die Bragg-Reflexe gerader Ordnung nicht. Somit haben wir nicht gleich dicke Eisen- und Palladiumschichten. Wie man bei der Auswertung der Probe mit 10 Å dicken Eisenschichten sehen konnte, ist die Eisenschicht ca. 10 % dicker als nach dem Aufdampfprozess mit der MBE zu erwarten wäre, wobei die Palladiumschicht nur ca. 5 % dicker ist. Dadurch kann man hier annehmen, dass die Eisenschichten dicker sind, als die Palladiumschichten. Dies bestätigt sich auch bei der Anpassung der Simulation an die „wahre“ spekuläre Reflektivität. Nur bei dickeren

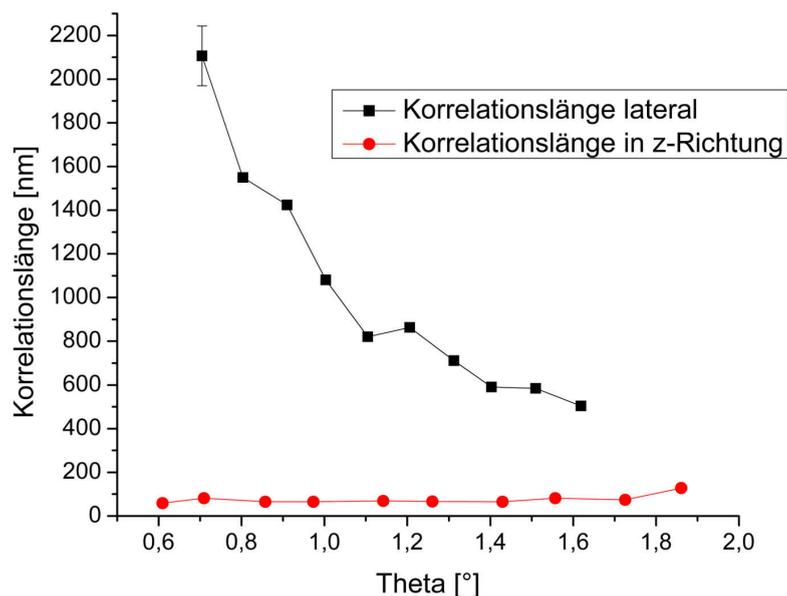


Abbildung 6.10: Korrelationslänge lateral und in z-Richtung der  $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{150\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$  Probe. Die laterale Korrelationslänge wurde aus den Rockingkurven bestimmt und die in z-Richtung aus der spekulären Reflektivität. Es wurde die Korrelationslänge gegen  $(\alpha_i + \alpha_f)/2$  aufgetragen.

Eisenschichten kann man eine gute Anpassung an die Messkurve bekommen. Die so bestimmten Schichtdicken und Streulängen sind in Tabelle 6.4 zusammengefasst.

$\chi^2/DOF = 2,49$	Schichtdicke [ $\text{\AA}$ ]	$\delta$ [ $10^{-6}$ ]	Nb' [ $10^{-6} \text{\AA}^{-2}$ ]
Fe	$145,57 \pm 9,35$	$23,86 \pm 0,83$	$63,2 \pm 2,2$
Pd	$141,16 \pm 3,19$	$27,97 \pm 0,08$	$81,12 \pm 0,21$

Tabelle 6.4: Durch die Simulation der „wahren“ spekulären Reflektivität erhaltenen Parameter für die Schichtdicken und Streulängendichten bei Eisen und Palladium.

Wegen den oben besprochen Schwierigkeiten ist es nicht einfach die „wahre“ spekuläre Reflektivität zu simulieren. Im Bereich der Totalreflektion stimmt die „wahre“ spekuläre Reflektivität nicht mit dem tatsächlichen Sachverhalt überein. Andererseits kann man wegen der starken Korrelation nicht die gemessene spekuläre Reflektivität simulieren. Deshalb wurden für die Simulation die offensichtlich falschen Punkte direkt oberhalb des Totalreflektionswinkels herausgenommen und dann die Simulation durchgeführt.

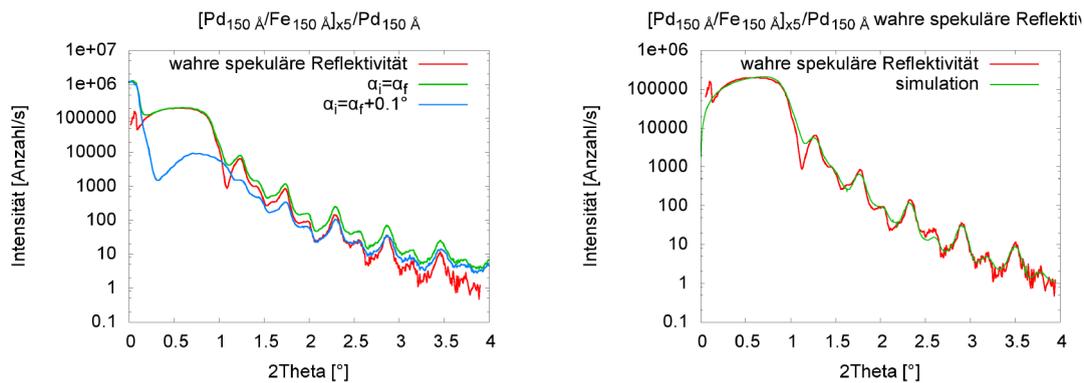


Abbildung 6.11: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität bei  $\alpha_i = \alpha_f$ , zusätzlich die diffuse Streuung bei  $\alpha_i = \alpha_f + 0,1^\circ$  und die Differenz der beiden Kurven. Dies gibt die „wahre“ spekuläre Reflektivität. Rechts: Die „wahre“ spekuläre Reflektivität mit zusätzlicher Simulation.

Bei der Simulation wurde ebenfalls versucht eine Pd/Fe-Mischschicht einzufügen, die eine Streulängendichte zwischen der des Palladiums und der des Eisens hat. Dies hat aber nicht zu besseren Simulationen geführt, weshalb man annehmen kann, dass die Eisen- und Palladiumschichten gut definiert sind. Das Problem ist, dass man wegen der stark ausgeprägten Bragg-Reflexe einen hohen Kontrast zwischen Eisen und Palladium braucht. Andererseits ist durch das Totalreflektionsplateau die Streulängendichte des Palladiums auf einen sehr kleinen Wert (im Vergleich zum Literaturwert) festgelegt. Dadurch ist die Streulängendichte des Eisens auch sehr beschränkt, was man an dem Fehler an der Eisenstreulängendichte sehen kann. Eine Pd/Fe-Mischschicht hat aber eine Streulängendichte zwischen der des Palladiums und der des Eisen, wodurch der Kontrast an der Grenzfläche weiter erniedrigt werden würde. Deshalb war es nicht möglich, bessere Simulationen bei Hinzufügen einer Mischschicht zu bekommen.

An den Simulationsparametern kann man wieder erkennen, dass die Streulänge des Palladiums stark vom Literaturwert abweicht. Es war leider nicht möglich, die Ursache dafür zu bestimmen. Des Weiteren stellt man fest, dass sich dieser Wert bei der Probe mit der dünnsten Eisenschicht stark von den anderen beiden Proben unterscheidet. Meiner Meinung nach sind die Gründe, die in Kapitel 6.2.1 schon besprochen wurden, dafür verantwortlich. Bei diesem Schichtsystem ist der Fehler auf die Eisenstreulänge kleiner als bei den anderen Schichtsystemen. Hier sind die Bragg-Reflexe sehr stark ausgeprägt und somit ist durch den nötigen Kontrast die Streulänge des Eisens und die Streulänge des Palladiums gut bestimmt.

Bei den Schichtdicken sieht man wieder, dass die Fehler der Eisenschichten und der Palladiumschichten stark voneinander abweichen. Der Fehler auf die Palladiumschichtdicke scheint mit ca. 2,5 % vernünftig zu sein. Anders sieht es beim Fehler auf die Eisenschichtdicke aus; dieser ist mit ca. 6,5 % unter der Beachtung, dass man mittels Röntgenreflektometrie die Schichtdicken viel genauer bestimmen kann viel zu groß. Deshalb werden wir wie bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten bei der

späteren Auswertung einen Fehler von 3 Å annehmen.

Bei der Rauigkeit ist es genauso wie bei den anderen Schichtsystemen. Diese steigt kontinuierlich von 5 Å bis 12 Å innerhalb des Vielfachschichtsystems an und hat eine Rauigkeit von 50 Å an der Oxidoberfläche. Dies ist somit konsistent mit den anderen Schichtsystemen und den AFM-Messungen.

Trotz der Schwierigkeit der Anpassung der Simulation an die „wahre“ spekuläre Reflektivität zeigt ein  $\chi^2/DOF$  von 2,49, dass die Anpassung recht gut ist, obwohl am kritischen Bereich keine gute Anpassung möglich ist. Will man bessere Resultate haben, dann muss man bei diesem System die spekuläre Reflektivität und die diffuse Streuung gleichzeitig simulieren.

## 6.3 Magnetometrie

Von allen erzeugten Vielfachschichtsystemen wurden Magnetometriemessungen mit den in Kapitel 4.5 beschriebenen SQUID und Vibrationsmagnetometer gemacht. Ergänzend wurden Referenzmessungen von Eisen-Palladium-Legierungen durchgeführt, um den Einfluss von Grenzflächen auf die Polarisation des Palladiums zu bestimmen. Einerseits wurde die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung untersucht und andererseits wurden magnetische Hysteresen aufgenommen. Die Temperaturabhängigkeit wurde bei 100 Oe von 300 K bis 5 K gemessen. Hieran kann man den Einfluss der Dimensionen der Schichten auf die Magnetisierung beobachten. Die Hysteresen wurden bei verschiedenen Temperaturen bei einem magnetischem Feld von -1 T bis 1 T gemessen. Wenn man das diamagnetische und das paramagnetische Moment aus den gemessenen Kurven herausrechnet, kann man die Sättigungsmagnetisierung bestimmen.

Wegen der Formanisotropie in einem Vielfachschichtsystem sind die Momente hauptsächlich in der Ebene ausgerichtet. Deswegen haben wir uns bei den Messungen auf die leichte Achse dieser Systeme in der Ebene beschränkt, die beim Eisen die (001)-Richtung ist.

Für die Messungen am VSM und am SQUID musste von den 1cm<sup>2</sup> großen Proben eine kleine Ecke abgeschnitten werden. Dies führte zu schrägen Bruchkanten, da GaAs entlang der (111)-Fläche und nicht der (110)-Fläche bricht. Dadurch hat man zwei Beiträge zum magnetischen Moment: Einerseits den Diamagnetismus des GaAs-Substrates, der proportional zur Masse ist, und andererseits den temperaturabhängigen Paramagnetismus des Palladiums und des Silbers, der proportional zur Oberfläche ist. Hierbei sind diese beiden Effekte entgegengesetzt gerichtet. Dadurch ist es schwierig durch eine Messung des Substrats und Subtraktion von den Messungen der Vielfachschichtsysteme diese Effekte herauszurechnen. Um das magnetische Moment der Eisenkeimschicht herauszurechnen, das zur Oberfläche proportional ist, wurden die Vielfachschichtsysteme auf die Oberfläche normiert und dann wurde das Substrat mitsamt der Eisenkeimschicht von den Vielfachschichtsystemen subtrahiert.

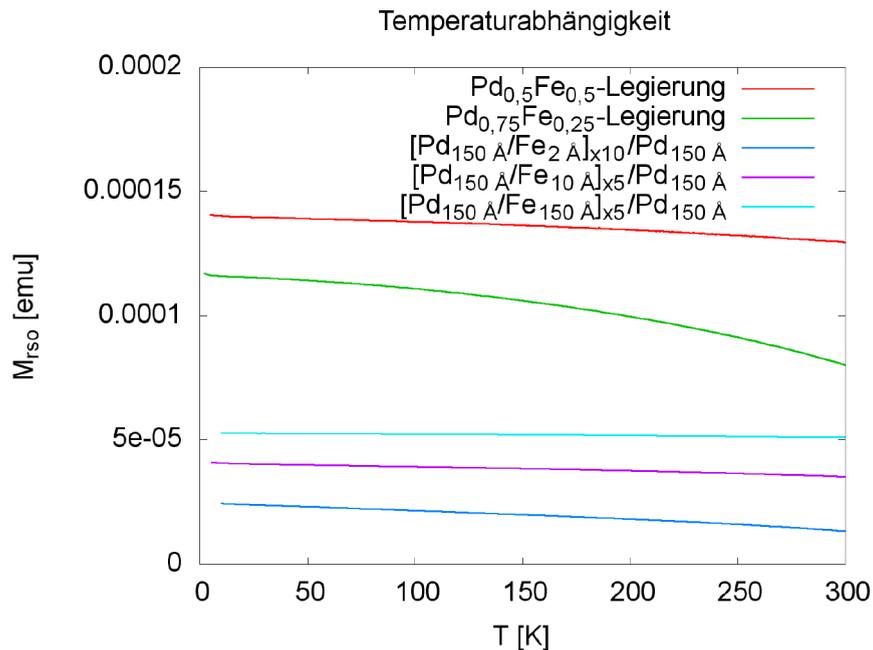


Abbildung 6.12: Temperaturabhängigkeit des magnetischen Momentes bei den Vielschichtsystemen mit 2 Å, 10 Å, 150 Å dicken Eisenschichten und zwei Eisen-Palladium-Legierungen.

### 6.3.1 Temperaturabhängigkeit

Das magnetische Moment der Proben wurde bei angelegten 100 Oe Magnetfeld gemessen, während die Temperatur von 300 K auf ca. 5 K heruntergefahren wurde. Wegen der Bruchkanten und den unterschiedlichen Abhängigkeiten des Para- und des Diamagnetismus kann man die unterschiedlichen Proben nur schwer vergleichen. Dadurch werden die Messergebnisse hier nur qualitativ analysiert. Der Diamagnetismus des Substrats und der Kapsel zur Aufbewahrung geben nur einen temperaturunabhängigen additiven Term zum magnetischem Moment, weshalb dieser keinen Einfluss auf eine qualitative Analyse hat. Die gemessenen Kurven kann man in Abb. 6.12 sehen.

Als erstes kann man erkennen, dass mit dünneren Eisenschichten die Curie-Temperatur abzunehmen scheint. Es scheint, dass schon bei kleineren Temperaturen als der Curie-Temperatur von Eisen ( $T_C = 1041$  K) die Magnetisierung verschwindet. Dies kann man besonders an der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten erkennen. Dies ist das zu erwartende Verhalten, wenn man eine Reduktion von 3 auf 2 Dimensionen durchführt, siehe Kapitel 2.4.

Interessant ist aber die Temperaturabhängigkeit des magnetischen Momentes wenn man sich die Legierungen ansieht. Bei der Legierung mit 25 % Eisenanteil im Palladium deutet sich eine starke Erniedrigung der Curie-Temperatur an. Bei der Legierung mit 50 % Eisen ist keine so starke Abhängigkeit der Magnetisierung von der Tempe-

ratur zu beobachten. Somit dürfte die Curie-Temperatur bei kleineren Eisen-Anteilen im Palladium kleiner werden. Hierbei dürfte aber der Effekt der niedrigeren Dimensionen keine Rolle spielen. Es ist anzunehmen, dass das Palladium ferromagnetisch wird und eine niedrigere Curie-Temperatur aufweist als das Eisen. Die Eisen-Palladium-Legierungen bestehen somit aus zwei verschiedenen ferromagnetischen Stoffen, die unterschiedliche Curie-Temperaturen aufweisen. Somit würde die Temperaturabhängigkeit der Legierung durch eine Kombination dieser Curie-Temperaturen beschrieben und dadurch von den Konzentrationen der einzelnen Elemente abhängen. Interessant wäre es, diese Systeme bei höheren Temperaturen zu untersuchen, um zu entscheiden, ob diese Legierungen nur durch eine Curie-Temperatur zu beschreiben sind oder ob die beiden ferromagnetischen Stoffe bei unterschiedlichen Temperaturen paramagnetisch werden.

Die Untersuchung dieser Legierungen hat einen tieferen Einblick in die Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme geliefert. Die Erniedrigung der Curie-Temperatur bei den Vielfachschichtsystemen ist nicht nur durch die kleinere Dimension zu erklären. Man muss auch beachten, dass das polarisierte Palladium eine andere „Curie-Temperatur“ hat und durch die Wechselwirkung mit dem Eisen die Curie-Temperatur des ganzen Systems ebenfalls erniedrigt wird.

### 6.3.2 Sättigungsmagnetisierung

Aus den gemessenen Hysteresen kann man, sofern das Volumen des in den Proben enthaltenen Eisens bekannt ist, das magnetische Moment pro Eisenatom bestimmen. Ist es gegenüber dem Literaturwert von  $m = 2,2 \mu_B$  erhöht, dann kann man auf eine Polarisation des Palladiums schließen. Dazu wurden von allen Vielfachschichtsystemen Hysteresen bei verschiedenen Temperaturen aufgenommen. Hierfür wird von den gemessenen Hysteresen eine Nullpunktsgerade abgezogen, so dass bei Sättigung das magnetische Moment konstant wird. Dadurch wird der Diamagnetismus und Paramagnetismus aus den gemessenen Hysteresen herausgerechnet. Die gemessenen Hysteresen von allen Vielfachschichtsystemen bei 5 K sieht man in Abb. 6.13. Hier wurde das magnetische Moment bei der 2 Å dicken Eisenschichtprobe halbiert, um ein besseres Vergleichen mit den anderen Vielfachschichtsystemen zu ermöglichen, da diese nur die Hälfte der Eisenschichtenanzahl haben.

Man kann erkennen, dass die Koerzitivfeldstärke bei dünneren Eisenschichten zunimmt. Man braucht also eine größere Energie, um die magnetischen Momente anders auszurichten. Dies folgt aus der größeren Relevanz der Grenzschicht von Eisen zu Palladium bei kleineren Eisenschichtdicken, als bei dickeren. An den Grenzschichten wechselwirken die Eisenatome, die das größte magnetische Moment tragen, mit den Palladiumatomen und werden somit von ihnen „festgehalten“. Deshalb braucht man bei kleineren Eisenschichtdicken größere Energien, um die Momente zu drehen.

Des Weiteren kann man erkennen, dass die Sättigungsmagnetisierung von den 2 Å dicken Eisenschichten nicht um einen Faktor 5 kleiner ist, als die Sättigungsmagnetisierung bei den 10 Å dicken Eisenschichten. Somit hat man hier ein erstes Anzeichen auf eine mögliche Polarisation des Palladiums, da nur an den Grenzflächen

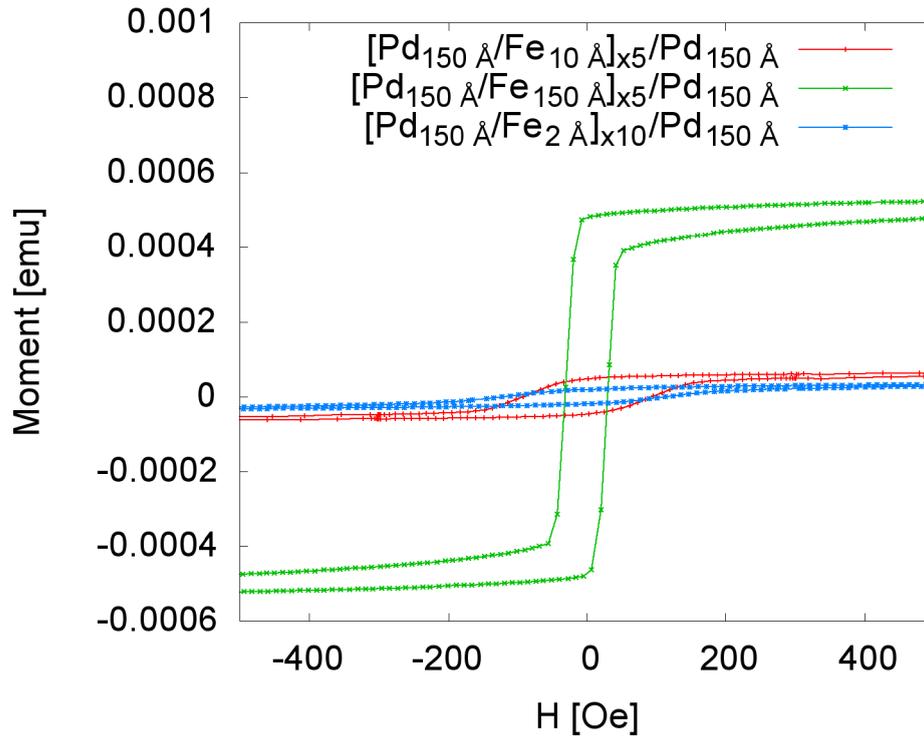


Abbildung 6.13: Hysteresen der Vielschichtsysteme mit 2 Å, 10 Å, 150 Å dicken Eisenschichten bei 5 K.

eine Polarisation des Palladiums möglich ist. Dadurch ist das magnetische Moment, welches vom Palladium kommt, unabhängig von der Dicke der Eisenschichten. Die Temperaturabhängigkeit der Proben sieht man beispielhaft am Vielschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten in Abb. 6.14.

Hier ist zuerst das zu erwartende Verhalten von Ferromagneten festzustellen, dass mit kleinerer Temperatur die Koerzitivfeldstärke, genauso wie die Sättigungsmagnetisierung zunimmt. An der Abhängigkeit der Sättigungsmagnetisierung von der Temperatur kann man wieder ein Indiz für eine mögliche Polarisation des Palladiums feststellen. Bei Eisen liegt die Curie-Temperatur bei 1041 K; somit müsste die Brillouin-Funktion in dem hier beobachteten Temperaturbereich noch nicht stark von der Temperatur abhängen. Man kann aber eine Abnahme von 17 % bei der Sättigungsmagnetisierung von 5 K zu 300 K feststellen.

Wenn wir nun die Sättigungsmagnetisierung durch eine Mittelung über das konstante magnetische Moment von ca. 2500 Oe bis 10000 Oe bestimmen, kann man mit

$$m = \frac{m_{\text{Sättigung}} V_{\text{mol}}}{V_{\text{Eisen}} N_A} \quad (6.3)$$

das magnetische Moment  $m_{Fe}$  pro Eisenatom berechnen. Hierbei bezeichnet  $m_{\text{Sättigung}}$  die aus den Hysteresen bestimmte Sättigungsmagnetisierung,  $V_{\text{mol}}$  das molare Vo-

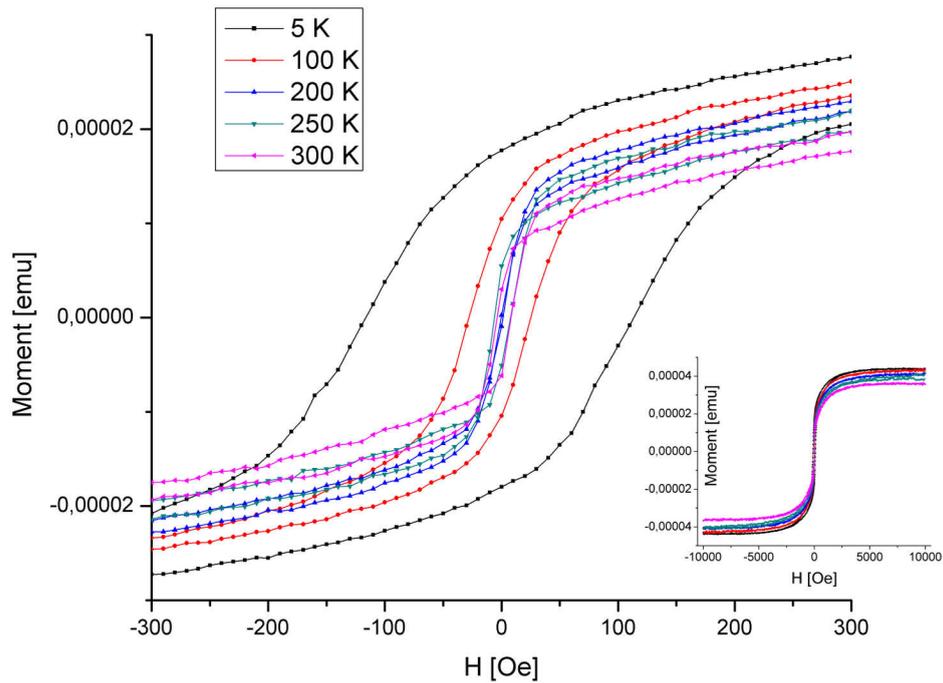


Abbildung 6.14: Hysteresen des Vielschichtsystems mit 2 Å dicken Eisenschichten bei verschiedenen Temperaturen.

lumen von Eisen,  $V_{Eisen}$  das Volumen des Eisens in der untersuchten Probe und  $N_A$  die Avogadrozahl. Das Volumen des Eisens berechnet man aus der Oberfläche der untersuchten Probe und der Dicke der Eisenschichten. Die Dicke der Eisenschichten wurde mittels Röntgenreflektometrie bestimmt, siehe dazu Kapitel 6.2. Um die Oberfläche zu bestimmen wurde ein Foto der Probe gemacht und mit einem Bildbearbeitungsprogramm die Oberfläche berechnet. Die sich ergebenden Oberflächen der untersuchten Proben sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst:

Probe	A [ $10^{-6} m^2$ ]
$[Pd_{150\text{\AA}}/Fe_{2\text{\AA}}]_{x10}/Pd_{150\text{\AA}}$	$5,13 \pm 0,18$
$[Pd_{150\text{\AA}}/Fe_{10\text{\AA}}]_{x5}/Pd_{150\text{\AA}}$	$4,5 \pm 0,14$
$[Pd_{150\text{\AA}}/Fe_{150\text{\AA}}]_{x5}/Pd_{150\text{\AA}}$	$3,6 \pm 0,1$

Tabelle 6.5: Die mittels eines Bildbearbeitungsprogramms bestimmten Oberflächen der Vielschichtsysteme mit 2 Å, 10 Å und 150 Å dicken Eisenschichten.

Bei der Bestimmung des Volumens des Eisens und der Sättigungsmagnetisierung kann man systematische Fehler machen, die die berechneten magnetischen Momente

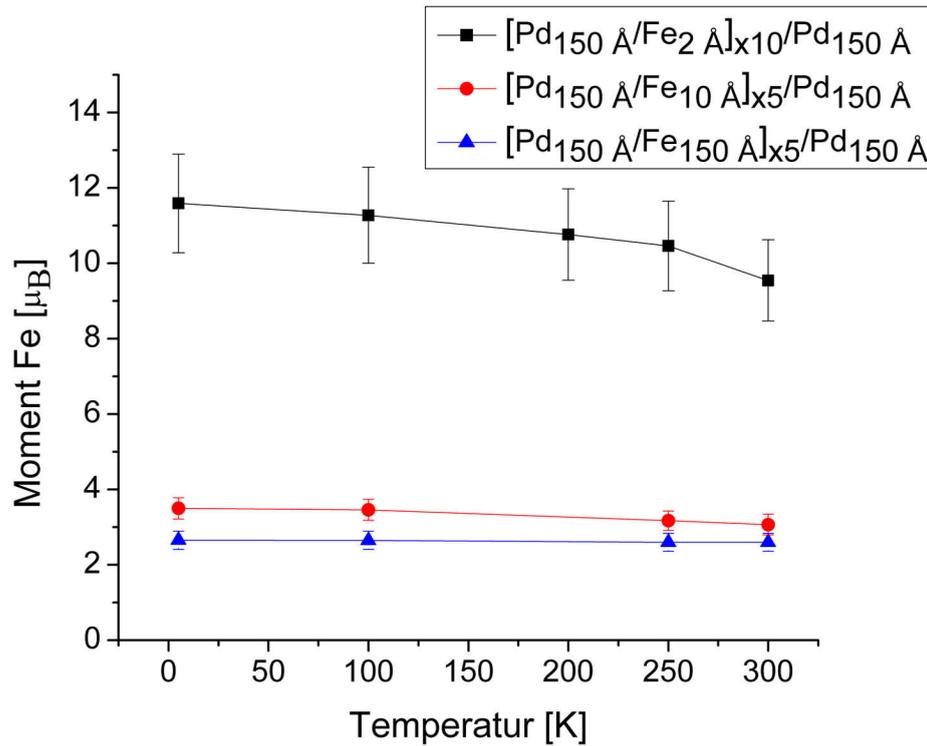


Abbildung 6.15: Aus den Hysteresen berechnete magnetische Momente pro Eisenatom für die Vielschichtsysteme mit 2 Å, 10 Å und 150 Å dicken Eisenschichten.

pro Eisenatom in eine Richtung verschieben könnten. Deshalb wurde eine einzelne Eisenschicht, welche auf dem Substrat mittels MBE aufgedampft wurde, untersucht. Hierbei wurde das Volumen und die Sättigungsmagnetisierung genauso bestimmt, wie bei den anderen Proben. Man bekommt ein magnetisches Moment pro Eisenatom von  $m = 2,52 \pm 0,1\mu_B$ . Somit hat man eine Verschiebung um  $0,32\mu_B$  zu höheren Werten bei der Bestimmung des magnetischen Momentes. Dabei sollten epitaktische Verspannungen keine so großen Effekte, da die Gitterabstände zwischen Silber und Eisen annähernd gleich sind. Die berechneten magnetischen Momente pro Eisenatom kann man in Abb. 6.15 sehen.

Als erstes sieht man, dass die berechneten magnetischen Momente in diesem Temperaturbereich der Brillouin-Funktion folgen. Des Weiteren stellt man fest, dass das magnetische Moment des Eisens bei der Probe mit 150 Å dicken Eisenschichten annähernd konstant ist, wobei bei den dünneren Eisenschichten man eine Abnahme des magnetischen Momentes erkennen kann. Somit scheint das magnetische Moment bei dünneren Eisenschichten stärker mit zunehmender Temperatur abzunehmen, als bei dickeren. Normiert man die Kurven bei  $T = 0$  die Kurven auf 1, erkennt man aber keinen großen Unterschied zwischen den Probe mit 10 Å und 2 Å dicken Eisenschichten. Man kann aber wegen des engen Temperaturbereichs die Brillouin-Funktion nicht anfitzen.

Bei allen Vielfachschichtsystemen kann man eine Erhöhung des magnetischen Moments des Eisens feststellen, sodass man von einer Polarisation des Palladiums ausgehen kann. Hierbei stellt man aber fest, dass das magnetische Moment des Eisens mit abnehmender Eisenschichtdicke zunimmt. Das magnetische Moment des Eisens ist bei der Probe mit 150 Å dicken Eisenschichten nahe dem magnetischen Moment der Referenzprobe  $2,52 \mu_B$ . Hier spielt die Polarisation des Palladiums fast keine Rolle. Bei der Probe mit 10 Å dicken Eisenschichten ist der Einfluss des Palladiums schon größer und man sieht eine Erhöhung des magnetischen Momentes. Dieser Effekt ist bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichtatomen noch verstärkt und das magnetische Moment ist um einen Faktor 5 größer als das normale Eisenmoment von  $2,2 \mu_B$ . Nimmt man eine von der Dicke der Eisenschichten unabhängige Polarisation des Palladiums an, so spielt diese Polarisation bei dünneren Eisenschichten eine größere Rolle. Deshalb folgt ein größeres magnetisches Moment pro Eisenatom bei dünneren Eisenschichten, wenn man das ganze magnetische Moment dem Eisen zuschreibt.

Des Weiteren stellt man noch fest, dass die Fehler bei dünneren Eisenschichten größer werden. Dies hat mit der relativen Unsicherheit bei der Bestimmung der Eisenschichtdicke zu tun. Hier handelt es sich aber um einen systematischen Fehler, der die ganze Brillouin-Funktion nach oben oder unten verschiebt. Aber trotz der großen Fehler, stellt man eine Polarisation des Palladiums fest.

Wenn man annimmt, dass das Eisen in den Vielfachschichtsystemen ein magnetisches Moment des Referenzeisens von  $m = 2,52\mu_B$  aufweist, so kann man mit den magnetischen Momenten pro Eisenatom das Produkt aus der Reichweite der Polarisation  $d_{Pd}$  und des induzierten magnetischen Momentes  $m_{Pd}$  beim Palladium berechnen. Man bekommt hierbei folgende Werte:

T [K]	$d_{Pd} \cdot m_{Pd} [\text{Å}\mu_B]$		
	PdFe2	PdFe10	PdFe150
5	$10,23 \pm 1,58$	$6,64 \pm 1,48$	$11,99 \pm 7,27$
100	$9,88 \pm 1,57$	$6,39 \pm 1,48$	$11,57 \pm 7,26$
250	$8,97 \pm 1,57$	$4,4 \pm 1,45$	$6,89 \pm 7,22$
300	$7,93 \pm 1,55$	$3,72 \pm 1,48$	$6,91 \pm 7,24$

Tabelle 6.6: Das Produkt der Reichweite der Polarisation  $d_{Pd}$  und des induzierten magnetischen Momentes des Palladiums für verschiedene Temperaturen. Das Produkt wurde aus den Sättigungsmagnetisierungen und der Annahme, dass das magnetische Moment des Eisens  $2,2 \mu_B$  beträgt, bestimmt.

Wie man sieht, sind die Fehler sehr groß, aber innerhalb der Fehler sind annähernd die Werte konsistent. Dies hat damit zu tun, dass die Polarisation des Palladiums im Vergleich zum magnetischen Moment des Eisens klein ist. Dadurch ist es schwierig,

diese zu messen. Bei kleineren Eisenschichtdicken nimmt der Einfluss des Eisens ab und man könnte bessere Aussagen über die Polarisierung des Palladiums machen. Dort ist aber die relative Ungewissheit über die Eisenschichtdicke sehr groß und man bekommt davon erhöhte Fehler auf die Polarisierung des Palladiums. Deshalb sind die Werte bei der 10 Å dicken Eisenschichtprobe am aussagekräftigsten.

Insgesamt bekommt man ein Indiz für die Polarisierung des Palladiums und eine grobe Einschätzung des Produktes von der Reichweite der Polarisierung und des induzierten magnetischen Momentes. Mit dem berechneten Produkt aus der Reichweite der Polarisierung und des induzierten magnetischen Momentes kann man nun mittels Neutronenreflektometrie versuchen zu bestimmen, welchen Wert das induzierte magnetische Moment hat und wie weit das Palladium polarisiert wird.

## 6.4 Neutronenreflektometrie (TREFF)

Nachdem mittels Röntgenreflektometrie (Kapitel 6.2) die strukturelle Beschaffenheit untersucht wurde und die Magnetometrie (Kapitel 6.3) gezeigt hat, dass Polarisierung des Palladiums vorliegt, soll nun untersucht werden, wie weit diese Polarisierung reicht und wie stark das induzierte magnetische Moment ist. Nach Kapitel 3.4 bietet sich hierfür Neutronenreflektometrie an, weil diese tiefenaufgelöste Informationen über die Verteilung der magnetischen Momente liefern kann.

Für diese Arbeit wurden bei den meisten Messungen nur die Nicht-Spin-Flip-Kanäle ++ und -- gemessen, da schon bei kleinen, parallel zur Oberfläche angelegten magnetischen Feldern sich die magnetischen Momente in der Ebene ausrichten und dem Feld folgen. Dadurch gibt es keine Spin-Flip-Streuung und bei Vernachlässigung dieser kann man wichtige Zeit sparen und in bessere Statistik der Nicht-Spin-Flip-Messungen investieren. Dass in den Spin-Flip-Kanälen keine Information hat, wurde bei mehreren Reflektometriemessungen bei der Probe mit den 2 Å dicken Eisenschichten nachgewiesen.

Für die Vielschichtsysteme mit 2 Å und 10 Å dicken Eisenschichten wurden die Reflektivitätsmessungen bei verschiedenen Temperaturen und Magnetfeldern durchgeführt. Bei der Probe mit 150 Å dicken Eisenschichten musste ich mich, aus Zeitmangel auf Raumtemperatur und ein Feld beschränken.

Nach der Untersuchung der Temperaturabhängigkeit mittels Magnetometrie (Kapitel 6.3.1 und 6.3.2) würde man eine Abhängigkeit des magnetischen Momentes von der Temperatur erwarten. Zumindest müsste es bei der Probe mit den 2 Å dicken Eisenschichten sichtbar sein, da bei den 2-dimensionalen Eisenschichten die Curie-Temperatur stark abgesenkt sein sollte; dem wird im folgendem Kapitel nachgegangen. Des Weiteren wurde eine Feldabhängigkeit der Reflektometriemessungen untersucht. Wenn man das Koerzitivfeld anlegt, verschwindet das mittlere magnetische Moment innerhalb der Probe und man erwartet andere Kontraste zwischen Palladium und Eisen. Wie sich aber in Kapitel 6.4.2 zeigen wird, kann man wegen des schlechten Signal-Untergrund-Verhältnisses keine Abhängigkeit vom angelegten Feld erkennen. Danach wird die Untersuchung der Proben mit 2 Å und 10 Å dicken Eisenschichten bei

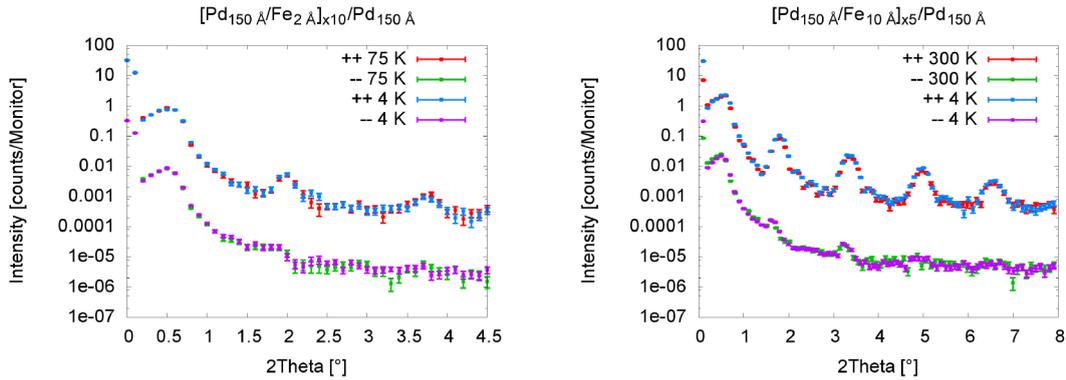


Abbildung 6.16: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität beim Vielfachschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten, bei 4 K und bei 75 K für die beiden Nicht-Spin-Flip-Kanäle. Rechts: Gemessene spekuläre Reflektivität beim Vielfachschichtsystem mit 10 Å dicken Eisenschichten, bei 4 K und bei 300 K für die beiden Nicht-Spin-Flip-Kanäle. Die ++ Kanäle wurden gegenüber den - - Kanälen um einen Faktor 100 zu höheren Intensitäten verschoben.

4 K und 330 mT und der Probe mit 150 Å dicken Eisenschichten bei Raumtemperatur und bei 330 mT ausführlich beschrieben.

### 6.4.1 Temperaturabhängigkeit

Die Temperaturabhängigkeit der Reflektometriemessungen wurde an den Vielfachschichtsystemen mit 2 Å und 10 Å dicken Eisenschichten untersucht. Dazu habe ich bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten die spekuläre Reflektivität bei 4 K und bei 75 K, jeweils von 0 bis 4, 5° gemessen. Die Probe mit 10 Å dicken Eisenschichten wurde bei 4 K und bei Raumtemperatur jeweils von 0 bis 8° untersucht. Die so erhaltenen Reflektivitätskurven sieht man für die ++ und - - Kanäle in Abb. 6.16. Dabei wurde der ++ Kanal der Übersicht halber um einen Faktor 100 zu höheren Intensitäten verschoben.

Sieht man sich die beiden Reflektivitätsmessungen an, so stellt man fest, dass innerhalb der Fehler die beiden Reflektivitätsmessungen bei verschiedenen Temperaturen deckungsgleich sind. Obwohl mittels Magnetometrie eine Temperaturabhängigkeit festgestellt werden konnte, sieht man diese nicht beim Neutronenreflektometer. Die Temperaturabhängigkeit der untersuchten Proben wird durch das Eisen dominiert und die in Kapitel 6.3.1 besprochenen Effekte sind nicht groß genug, um in diesem Temperaturbereich sichtbar zu sein. Das Signal-Untergrund-Verhältnis ist nicht gut genug, um eine Temperaturabhängigkeit der magnetischen Momente nachzuweisen. Man kann innerhalb der Fehler auf die gemessene Intensität nicht zwischen unterschiedlichen Temperaturen unterscheiden.

Vielleicht würde man eine Temperaturabhängigkeit bei einer höheren Strahlintensität und einem besseren Signal-Untergrund-Verhältnis sehen können. Dies könnte man mit

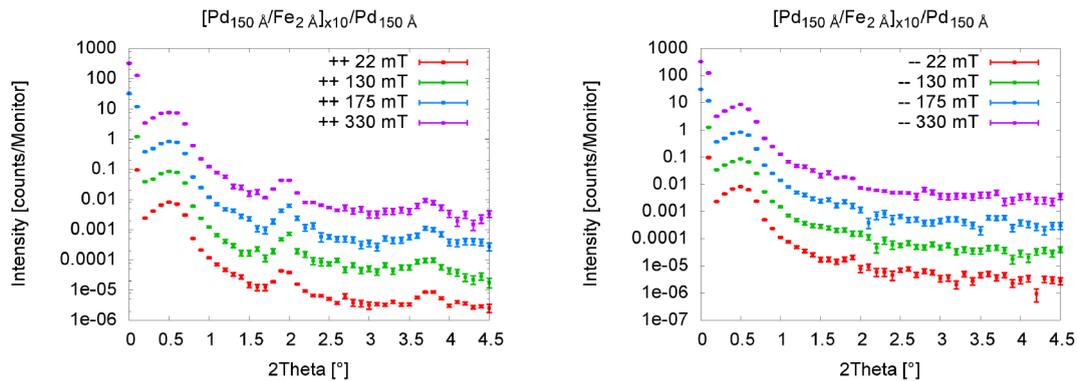


Abbildung 6.17: Gemessene spekuläre Reflektivität der Probe mit  $2 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten bei angelegten magnetischen Feldern von 22 mT, 130 mT, 175 mT und bei 330 mT und 4 K. Links: ++ Kanal. Rechts: - - Kanal. Die einzelnen gemessenen Intensitäten wurden jeweils um einen Faktor 10 gegeneinander verschoben.

dem Reflektometer MARIA zukünftig erreichen. In dieser Arbeit wird die Analyse der Proben sich daher auf eine Temperatur beschränken. Bei den Vielfachschichtsystemen mit  $2 \text{ \AA}$  und  $10 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten werden die Messungen bei 4 K analysiert, da nach der Brillouin-Funktion das größte magnetische Moment vorliegen sollte. Bei der Probe mit  $150 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten war aus Zeitgründen nur die Messung bei Raumtemperatur möglich.

### 6.4.2 Feldabhängigkeit

Nach den gemessenen Hysteresen in Kapitel 6.3.2 kann man versuchen, ein äußeres Magnetfeld einzustellen, so dass die magnetischen Momente innerhalb der Probe kompensiert werden. Dadurch wird im Mittel nur der strukturelle Einfluss, der durch die Schichtdicken und die atomaren Streulängen entsteht, gemessen. Wenn man sich die Hysteresen in Abb. 6.13 ansieht, so erkennt man, dass die Magnetisierung innerhalb eines kleinen Feldbereichs umschlägt und somit die exakte Einstellung des Koerzitivfeldes schwierig ist.

Bei der Messung wurde zuerst ein maximales negatives Magnetfeld angelegt, sodass sich alle magnetischen Momente entlang des Feldes ausgerichtet haben. Danach wurde das gewünschte positive Magnetfeld angelegt und die spekuläre Reflektivität gemessen. Das angelegte Magnetfeld wurde mittels einer Hall-Sonde nahe an der Probe gemessen.

Somit habe ich bei der Probe mit  $2 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten die spekuläre Reflektivität bei angelegtem Feld von 22 mT, 130 mT, 175 mT und einem maximalem Feld von 330 mT gemessen. Den ++ Kanal sieht man in Abb. 6.17 links und den - - Kanal rechts. Dabei wurden die Messungen bei den einzelnen Feldern etwas gegeneinander verschoben.

Man sieht auf einen Blick, dass die gemessenen Reflektivitäten sich wenig voneinander

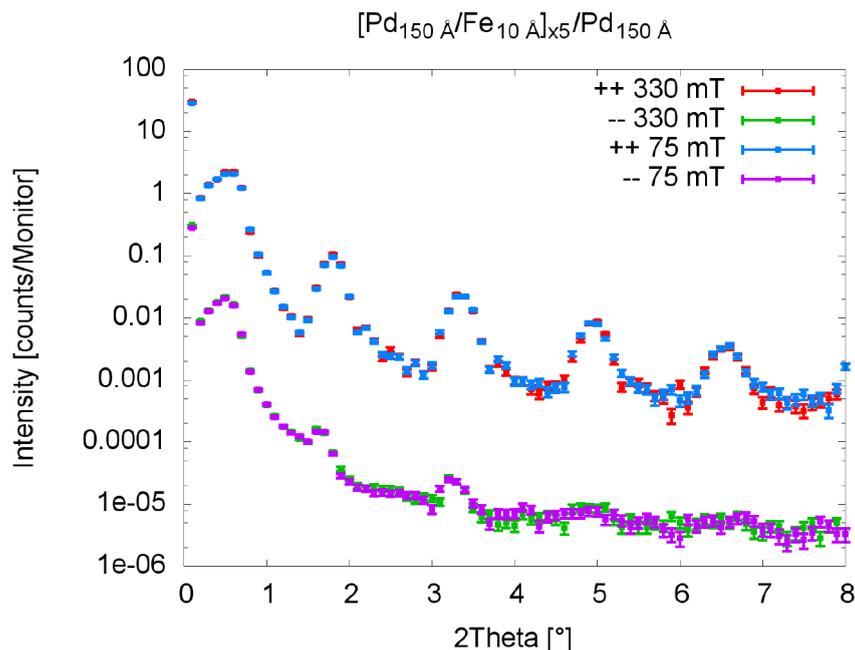


Abbildung 6.18: Gemessene spekuläre Reflektivität der Probe mit 10 Å dicken Eisenschichten bei angelegtem magnetischem Feldern von 75 mT und 330 mT. Die ++ Kanäle sind gegenüber den - - Kanälen, der Übersicht halber um den Faktor 100 zu höheren Intensitäten verschoben.

unterscheiden. Nur beim ersten Bragg-Reflex könnte man vielleicht erahnen, dass sich die Form des Reflexe etwas ändert und bei 175 mT man einen zusätzlichen Seitenreflex bekommt. Diese minimalen Änderungen sind aber alle innerhalb der Fehlergrenzen. Wenn man eine Feldabhängigkeit annehmen würde, würde man die Messungen überinterpretieren. Dafür ist die Statistik etwas zu schlecht. Man wäre wieder auf eine höhere Strahlintensität und auf ein besseres Verhältnis von Untergrund zu Signal angewiesen.

Sieht man sich die gemessenen Reflektivitäten bei der Probe mit den 10 Å dicken Eisenschichten in Abb. 6.18 an, so kann man wieder keine Feldabhängigkeit der gemessenen Reflektivität erkennen. Bei der Abhängigkeit des magnetischen Momentes vom angelegten Feld ist es schwierig, das erforderliche magnetische Feld genau so einzustellen, dass das mittlere magnetische Moment innerhalb der Probe verschwindet. Deshalb werde ich mich bei der genauen Auswertung der Reflektivitäten auf das maximal mögliche magnetische Feld von 330 mT beschränken. Bei diesem Feld sollten alle magnetischen Momente parallel zum Feld ausgerichtet sein und man bekommt den maximalen Einfluss der magnetischen Momente auf die gemessenen Reflektivitäten.

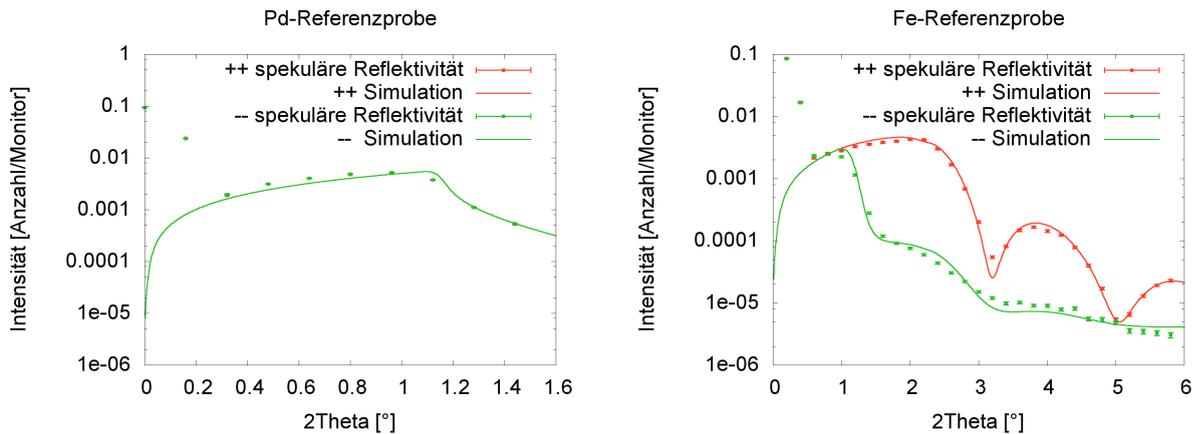


Abbildung 6.19: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität des ++ und des - - Kanals an der Palladium-Referenzprobe mit eingezeichneter Simulation. Rechts: Gemessene spekuläre Reflektivität des ++ und des - - Kanals an der Eisen-Referenzprobe im Magnetfeld von 330 mT mit eingezeichneter Simulation.

### 6.4.3 Pd- und Fe-Referenzproben

Da die Wechselwirkungen bei der Neutronenreflektometrie auf anderen Prinzipien beruhen als bei der Röntgenreflektometrie, kann man die gemessenen Streulängendichten von der Röntgenreflektometrie nicht einfach auf Neutronenreflektometrie umrechnen. Außerdem gibt es durch den Spin des Neutrons zusätzlich die magnetische Wechselwirkung, die nicht aus der Dichte berechnet werden kann. Deshalb wurden Eisen- und Palladium-Referenzproben am Neutronenreflektometer TREFF am Totalreflektionsplateau vermessen, um die Streulängendichten zu bestimmen.

Die Referenzproben bestanden aus einer einzelnen dicken Eisen- oder Palladiumschicht aufgetragen auf Silber und GaAs. Hierbei wurden dieselben Aufdampfparameter benutzt, wie bei den Vielfachschichtsystemen. Die so bestimmten Werte wurden dann als feste Werte für die Streulängendichten bei den Vielfachschichtsystemen verwendet. Die Totalreflektionsplateaus der Eisen- und Palladiumschichten sind in Abb. 6.19 zusammen mit der Simulation dargestellt.

Am Totalreflektionsplateau der Palladiumschicht kann man direkt sehen, dass Palladium aufgetragen auf Silber nicht magnetisch ist, da der ++ Kanal und der - - Kanal sich nicht unterscheiden. Beim Eisen kann man sehr gut den Einfluss eines magnetischen Momentes auf die Reflektivitätsmessungen sehen. Das Totalreflektionsplateau des - - Kanals ist zu kleineren Einfallswinkeln verschoben und ++ zu größeren.

In den Simulationen wurden die Streulängendichten der Literaturwerte benutzt und, wie man sehen kann, bekommt man dadurch eine gute Anpassung an das Totalreflektionsplateau. Somit bekommt man die Streulängendichten aus Tabelle 6.7. Diese Werte werden nun bei allen Vielfachschichtsystemen benutzt. Wie man sehen wird, können diese Werte auch bei allen Proben das Totalreflektionsplateau gut beschreiben.

Element	$Nb'[10^{-6}] \text{ \AA}^{-2}$	$Nb''[10^{-6}] \text{ \AA}^{-2}$	$Nb_m[10^{-6}] \text{ \AA}^{-2}$
Fe	8,09	0,00055	5,12
Pd	4,01	0,00126	0

Tabelle 6.7: Streulängendichten der Eisen- und Palladium-Referenzproben.  $Nb'$  ist der Realteil der nuklearen Streulängendichte und  $Nb''$  der Imaginärteil.  $Nb_m$  bezeichnet die magnetische Streulängendichte.

#### 6.4.4 $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

Nachdem die strukturellen Eigenschaften der Vielfachschichtsystems untersucht wurden und mittels Magnetometrie nachgewiesen wurde, dass eine Polarisation des Palladiums vorliegt, wird jetzt versucht zu bestimmen, wie diese Polarisation innerhalb des Vielfachschichtsystems verteilt ist.

Dazu wurde die spekuläre Reflektivität und die offspekuläre Streuung mit dem Neutronenreflektometer TREFF, das in Kapitel 4.7 beschrieben ist, gemessen. Wie in den letzten Kapiteln gezeigt wurde, ist das Instrument nicht sensitiv genug um eine Temperaturabhängigkeit oder eine Feldabhängigkeit der gemessenen Reflektivitäten zu sehen. Deshalb wird die Analyse auf die tiefste Temperatur und das höchste magnetische Feld eingeschränkt, wodurch innerhalb der Probe das maximale magnetische Moment vorliegt.

Da man am TREFF mit einem Flächendetektor misst, wird bei der Messung der spekulären Reflektivität direkt eine  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karte, ähnlich zur Röntgenreflektometrie, erzeugt. Anders als in der Röntgenreflektometrie werden durch die Messung der beiden Nicht-Spin-Flip Kanäle zwei unterschiedliche  $\alpha_i$ - $\alpha_f$ -Karten gemessen. Diese sind in Abb. 6.20 dargestellt.

Auf der vertikalen Linie bei  $\alpha_i - \alpha_f = 0^\circ$  sieht man die spekuläre Reflektivität. Dort erkennt man direkt über dem Intensitätsmaximum des Primärstrahls einen leichten Anstieg, bei ca.  $\alpha_i + \alpha_f = 0,4^\circ$ . Dies ist nicht ein Bragg-Reflex, sondern das Totalreflektionsplateau, dass wegen der Belichtung der Probe proportional zum Einfallswinkel ansteigt. Die Bragg-Reflexe kann man bei ca.  $\alpha_i + \alpha_f = 2^\circ$  und bei  $\alpha_i + \alpha_f = 3,9^\circ$  im ++ Kanal erkennen. Im - - Kanal sieht man keine expliziten Bragg-Reflexe, dafür ist der Kontrast und die Statistik zu schlecht. Man kann nur an der Position, wo im ++ Kanal der erste Bragg-Reflex sichtbar ist, eine Stufe erkennen, bei der die gemessene Intensität abnimmt. Anders als in der Röntgenreflektometrie kann man hier keine „Bragg-Sheets“ sehen, dafür ist das Signal-Untergrund-Verhältnis zu schlecht. Wenn man einen waagerechten Schnitt durch die Bragg-Reflexe macht, sieht man, dass man eine diffuse Streuung pro gemessenem Winkel von 0,5- 1 Neutronen über dem Untergrund hat. Somit würde man bei der Neutronenreflektometrie einen größeren Fehler machen, wenn man versuchen würde die diffuse Streuung zu subtrahieren, als wenn man die gemessene spekuläre Reflektivität direkt betrachtet.

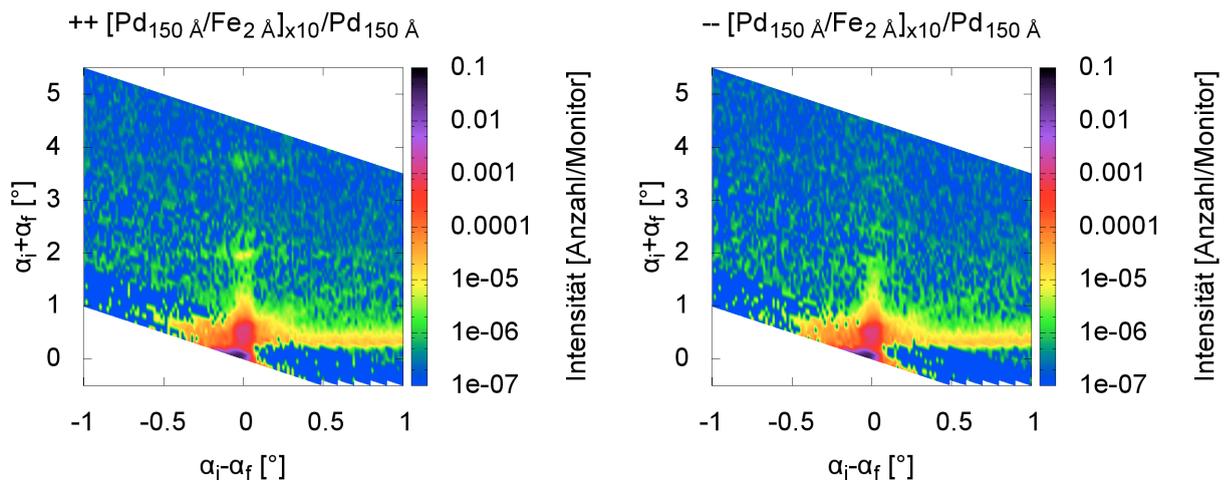


Abbildung 6.20:  $\alpha_i - \alpha_f$ -Karten für das Vielfachsichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten für die beiden Nicht-Spin-Flip-Kanäle; links ist der ++ Kanal dargestellt und rechts der -- Kanal. Aufgetragen wurde die normierte Intensität farblich als Funktion von Summe und Differenz von Einfallswinkel und Ausfallswinkel.

Deshalb wird hier versucht, die gemessene Reflektivität direkt zu simulieren.

In den Bildern kann man, bei einem Einfallswinkel und Ausfallswinkel von  $0^\circ$ , den Primärstrahl erkennen, des Weiteren kann man noch eine waagerechte Linie bei  $\alpha_i + \alpha_f = 0, 3^\circ$  erkennen. Dies ist der Rest des Primärstrahls, welcher nicht ganz vom Beamstop abgeschirmt wird. Die Yoneda-Reflexe, die man in der Röntgenreflektometrie gut sehen konnte, sind hier nur angedeutet bei einem Winkel von etwa  $30^\circ$  vom Punkt  $(0^\circ, 0, 7^\circ)$  ausgehend. Für eine bessere Auflösung dieser ist das Signal-Untergrund-Verhältnis wieder zu schlecht. Des Weiteren kann man schräge Linien erkennen, die von links nach rechts unten laufen und einen Neigungswinkel von ca.  $-30^\circ$  haben. An diesen Stellen wurde die Messdauer erhöht, um eine bessere Statistik zu bekommen, da es schien, dass an diesen Stellen interessante Phänomene sichtbar sind. Dadurch wurden mehr Untergrund-Neutronen gemessen, was zu veränderten Signalen geführt hat.

Wie bei der Röntgenreflektometrie habe ich versucht, die spekuläre Reflektivität zu simulieren. Um die Anzahl der freien Parameter zu reduzieren, wurden für die Streulängendichten die Werte aus den Referenzmessungen (Kapitel 6.4.3) eingesetzt. Für die Struktur der Probe wurde versucht die Parameter wie Schichtdicke und Rauigkeit aus der Röntgenreflektometrie zu benutzen. Dabei hat sich herausgestellt, dass die Periode der Schichtdicken geringfügig größer gemessen wird als in der Röntgenreflektometrie. Dies kann man mit der Wellenlängenunauigkeit erklären, da man sowohl beim Röntgenreflektometer nicht die exakte Wellenlänge der  $K_{\alpha_1}$ -Linie von Kupfer hat, als auch beim Neutronenreflektometer die kalten Neutronen nicht exakt 4,73 Å haben. Da versucht wird, eine Polarisation des Palladiums nachzuweisen, ist das magnetische Moment eine entscheidende Größe. Deshalb wird die Eisenschichtdicke gleich gelassen und dafür die Palladiumschichtdicke etwas

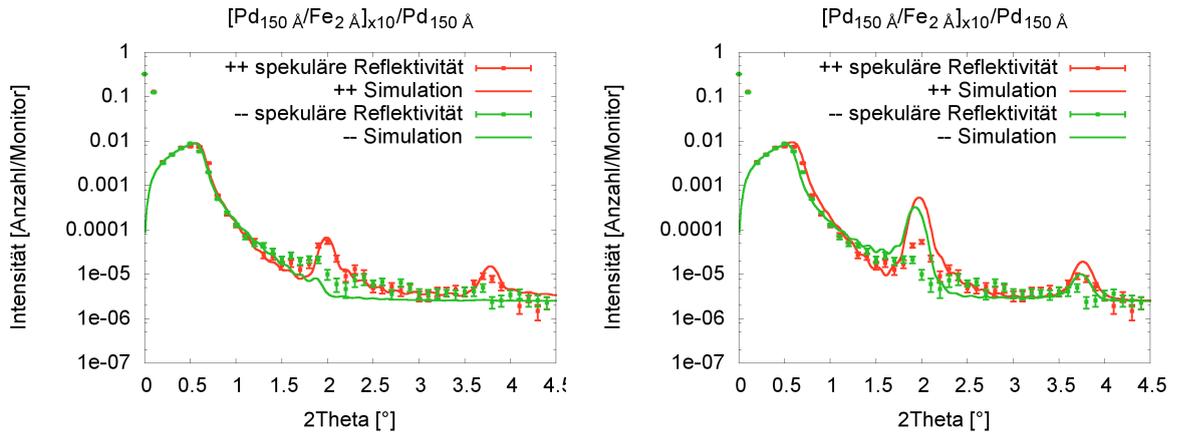


Abbildung 6.21: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität der ++ und -- Kanäle mit eingezeichneter Simulation ohne Polarisation des Palladiums. Rechts: Gemessene spekuläre Reflektivität der ++ und -- Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei einer Polarisation des Palladiums von:  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 10.23 \text{ \AA}\mu_B$ .

angepasst. Für die Rauigkeiten mussten etwas größere Werte eingesetzt werden als bei der Röntgenreflektometrie der Fall war. Da die Rauigkeit eine Kombination der strukturellen und der magnetischen Rauigkeit ist, scheint das magnetische Moment über einen größeren Bereich verschmiert zu sein. Dies ist verständlich, wenn man bedenkt, dass an der Grenzfläche das Palladium polarisiert wird und die Rauigkeit ein Ausdruck für einen magnetischen Gradienten sein kann.

Somit bleiben als freie Parameter nur noch das induzierte magnetische Moment  $m_{Pd}$  des Palladiums und seine Reichweite  $d_{Pd}$ . Nimmt man an, dass keine Polarisation vorliegt, dann kann man die gemessene spekuläre Reflektivität nicht zufriedenstellend simulieren. Die Schwierigkeit ist, den Kontrast zu bekommen, damit die Bragg-Reflexe im ++ Kanal und im -- Kanal die nötige Intensität haben. Man müsste den Kontrast erhöhen, damit im -- Kanal die Stufe, bei der der Bragg-Reflex liegt, simuliert wird. Gleichzeitig würde man aber auch den Kontrast im ++ Kanal ändern und die Intensitäten der beiden Bragg-Reflexe würden nicht passen. Man kann versuchen dies durch die Anpassung der Rauigkeit zu erreichen, aber dann würde die Totalreflektionskante nicht passen. Somit ist es nicht möglich ohne eine Polarisation des Palladiums die gemessene Reflektivität zu simulieren. Eine Simulation ohne Polarisation des Palladiums sieht man in Abb. 6.21 links.

Setzt man aber die Werte ein, die man durch die Magnetometriemessungen bestimmt hat:  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 10.23 \pm 1,58 \text{ \AA}\mu_B$ , dann stellt man fest, dass das magnetische Moment zu groß ist, da man bei den Bragg-Reflexe, sowohl im ++ Kanal, als auch im -- Kanal ein zu großes Signal bekommt. Dabei kann man auch durch unterschiedliche Aufteilungen, von Reichweite und Polarisation des Palladiums die gemessene Reflektivität nicht simulieren. Somit scheinen die Werte, welche durch Magnetometrie gegeben sind, zu groß zu sein. Aber wie man hier sehen konnte, ergibt sich auch ohne Polarisation des Palladiums keine vernünftige Anpassung. Die

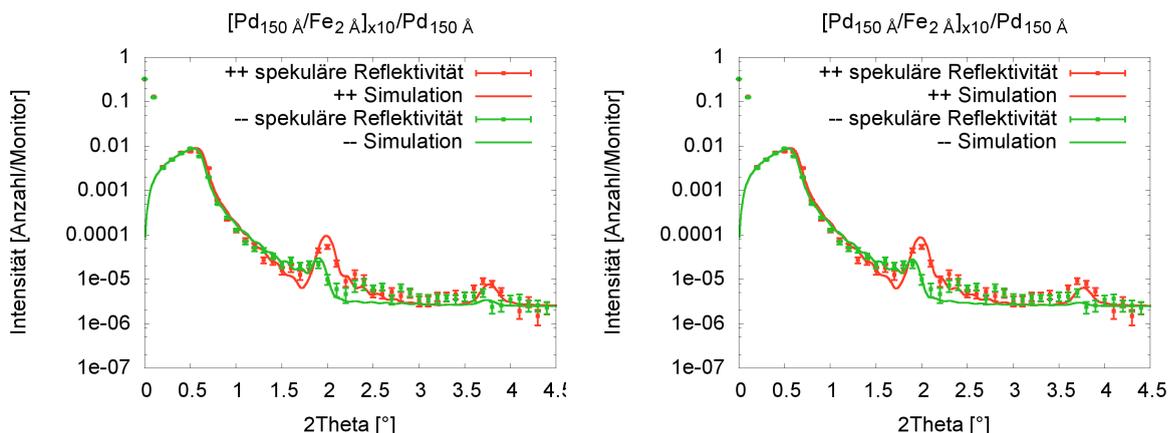


Abbildung 6.22: Links: Gemessene spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei Polarisation des Palladiums von  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA}\mu_B$  mit einer Reichweite  $d_{Pd} = 10 \text{ \AA}$  und einer Magnetisierung von  $m_{Pd} = 0,2 \mu_B$ . Rechts: Gemessene spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei Polarisation des Palladiums von  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA}\mu_B$  mit einer Reichweite  $d_{Pd} = 20 \text{ \AA}$  und einer Magnetisierung von  $m_{Pd} = 0,1 \mu_B$ .

Polarisation des Palladiums muss zwischen den Werten, die mit Magnetometrie gemessen wurden, und Null liegen.

Gute Anpassungen bekommt man z.B. wenn man  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA}\mu_B$  ansetzt. Dabei kann man diesen Wert auf Reichweite und Magnetisierung des Palladiums aufteilen, wie man will. Man sieht nur minimale Unterschiede. In Abb. 6.22 links sieht man z.B. eine Simulation mit Reichweite der Polarisation von  $d_{Pd} = 12 \text{ \AA}$  und einer Magnetisierung von  $m_{Pd} = 0,2\mu_B$ . Andererseits kann man eine genauso gute Anpassung bekommen, wenn man  $d_{Pd} = 20 \text{ \AA}$  und  $m_{Pd} = 0,1\mu_B$  ansetzt und alle anderen Parameter gleich lässt. Einzig an der Intensität des zweiten Bragg-Reflexe kann man einen leichten Unterschied erkennen. Da aber dieser innerhalb der Fehler auf die Intensität liegt, kann man nicht entscheiden, welche Anpassung besser ist. Einen größeren Unterschied in der Intensität würde man, wegen der kleinen Magnetisierung, erst bei höheren Winkeln in einer Schwebung sehen können. Aber dafür ist die gestreute Intensität von diesem Vielfachschichtsystem bei diesem Signal-Untergrund-Verhältnis am TREFF zu gering. Wenn man eine bessere Statistik hätte, könnte man vielleicht die genaue Aufteilung der Polarisation und Magnetisierung bestimmen. So kann man aber nur feststellen, dass eine Polarisation notwendig ist und das Produkt aus induziertem magnetischem Moment und der Reichweite bestimmen. Man bekommt:

$$d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \pm 0,75 \text{ \AA}\mu_B. \quad (6.4)$$

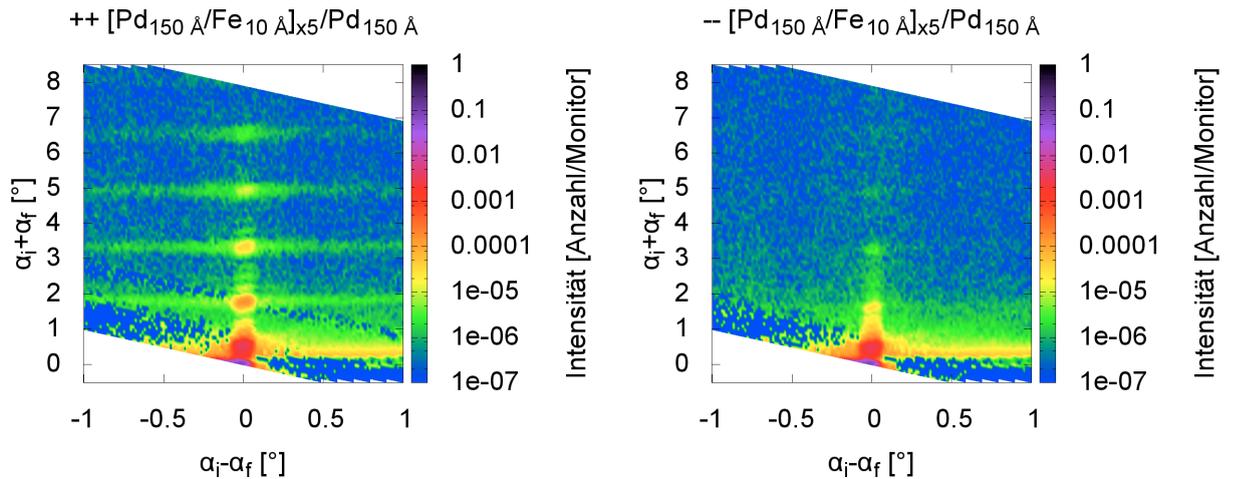


Abbildung 6.23:  $\alpha_i-\alpha_f$ -Karten für das Vielschichtsystem mit 10 Å dicken Eisenschichten für die beiden Nicht-Spin-Flip-Kanäle; Links ist der ++ Kanal und rechts der -- Kanal dargestellt. Aufgetragen wurde die normierte Intensität farbkodiert als Funktion von Summe und Differenz von Einfallswinkel und Ausfallswinkel.

Hierbei ist der Fehler von ca. 37 % sehr groß, man kann dies aber nicht besser bestimmen.

#### 6.4.5 $[\text{Pd}_{150\text{Å}}/\text{Fe}_{10\text{Å}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{Å}}$

Bei der Analyse dieses Vielschichtsystems gehe ich wieder so vor, wie beim Schichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten. Da dieses Vielschichtsystem stärker streut als das Vielschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten, konnte man auch bei höheren Einfallswinkeln messen. Es wurde die spekuläre Reflektivität bis 8° gemessen. Die beiden  $\alpha_i-\alpha_f$ -Karten der zwei Nicht-Spin-Flip-Kanäle sieht man in Abb. 6.23.

Allgemein kann man wieder dieselben Phänomene wie beim Vielschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten erkennen. Der nicht absorbierte Rest des Primärstrahls ist wieder bei  $\alpha_i + \alpha_f = 0,3^\circ$  sichtbar. Auch hier ist das Totalreflektionsplateau gut sichtbar bei  $\alpha_i - \alpha_f = 0$  und  $\alpha_i + \alpha_f = 0,5^\circ$ , wobei man aber jetzt keine ausgehenden Yoneda-Reflexe erkennen kann. Hier sind die Yoneda-Reflexe so schwach, so dass diese vom Untergrund überstrahlt werden. Die Bragg-Reflexe auf der spekulären Reflektivität bei  $\alpha_i - \alpha_f = 0$  sind viel stärker ausgeprägt, als beim Vielschichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten. Man kann erkennen, dass die Intensität der Bragg-Reflexe sogar bis zu einem Winkel von 8° noch nicht auf das Untergrundniveau gesunken ist; nur im -- Kanal scheinen die Bragg-Reflexe bei größeren Winkeln schon fast zu verschwinden.

Anders als beim Schichtsystem mit 2 Å dicken Eisenschichten kann man diesmal auch „Bragg-Sheets“ erkennen. Man sieht, dass diese gut ausgeprägt sind und bis  $\alpha_i - \alpha_f = \pm 1$  reichen. Wenn man einen Schnitt durch die Bragg-Reflexe macht, dann

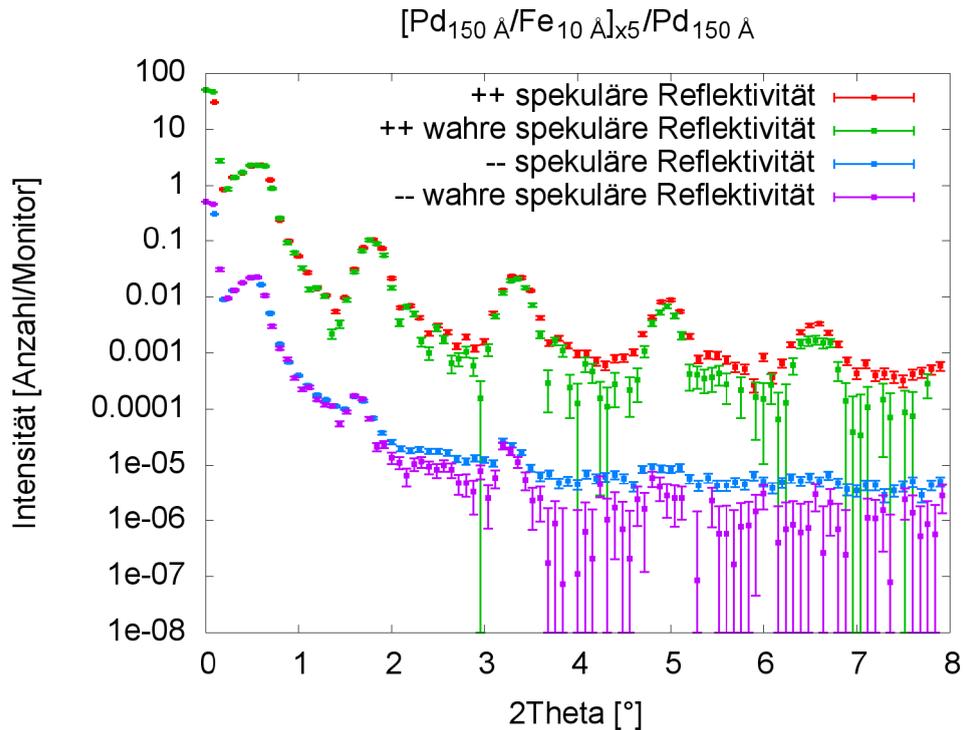


Abbildung 6.24: Aufgetragen ist die Intensität der gemessenen und der „wahren“ spekulären Reflektivität des ++ Kanals und des - - Kanals gegen den zweifachen Einfallswinkel. Die Reflektivitätskurven des ++ Kanals wurden der Übersicht halber zu höheren Intensitäten um den Faktor 100 verschoben.

stellt man fest, dass die Bragg-Sheets um den Faktor 200 über dem Untergrund liegen und man somit die diffuse Streuung zumindest bei höheren Einfallswinkeln nicht vernachlässigen kann. Abb. 6.24 zeigt die gemessene spekuläre Reflektivität und die „wahre“ spekuläre Reflektivität, die man bekommt, wenn man die diffuse Streuung subtrahiert.

Zur besseren Übersicht wurde die spekuläre Reflektivität des ++ Kanals zu höheren Intensitäten verschoben. An Abb. 6.24 kann man direkt erkennen, dass die gestreute Intensität bei größerem Einfallswinkel kleiner ist, als im ursprünglichen Fall. Der subtrahierte Untergrund allein würde nicht so einen großen Einfluss ausmachen. Hier ist es wichtig, dass man die diffuse Streuung beachtet, indem man diese von der gemessenen Reflektivität subtrahiert. Dies kann man besonders am letzten Bragg-Reflex im ++ Kanal erkennen, der etwa die Hälfte an Intensität verliert. Durch die Subtraktion der diffusen Streuung, bekommt man durch die kleinen Intensitäten bei größeren Einfallswinkeln sehr große relative Fehler.

Wenn man bei der Simulation der „wahren“ spekulären Reflektivität genauso vorgeht, wie bei der Probe mit 2 Å dicken Eisenschichten, dann stellt man fest, dass man halbwegs gute Simulationen sowohl ohne Polarisation des Palladiums als auch bei den Werten, die die Magnetometrie geliefert hat, bekommt, siehe Abb. 6.25.

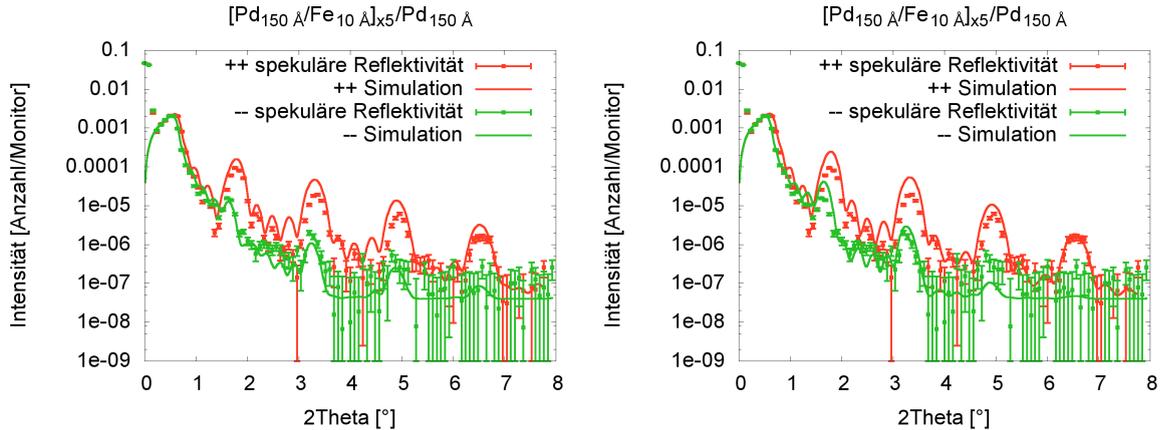


Abbildung 6.25: Links: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation ohne Polarisation des Palladiums. Rechts: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei einer Polarisation des Palladiums gegeben durch die Magnetometrie.

In allen Simulationen scheinen die ersten Bragg-Reflexe im ++ Kanal von der Simulation überschätzt zu werden. Man müsste also einen etwas kleineren Kontrast zwischen dem Palladium und dem Eisen einstellen. Sieht man sich das Totalreflektionsplateau jedoch an, dann stellt man fest, dass diese Werte das Totalreflektionsplateau aber gut beschreiben. Die magnetische Streulängendichte des Eisens kann man auch nicht vernünftig reduzieren um die Intensitäten der Bragg-Reflexe im ++ Kanal zu verkleinern, da man dabei die Intensitäten aller Bragg-Reflexe reduzieren würde, auch der Bragg-Reflexe im - - Kanal. Somit würde es immer Bragg-Reflexe geben, bei denen die Intensität nicht passen würde.

Ohne Polarisation des Palladiums werden die Intensitäten der Bragg-Reflexe im - - Kanal bei der Simulation zu klein dargestellt. Andererseits werden diese bei einer Polarisation des Palladiums, das durch die Magnetometriemessungen bestimmt wurde, etwas überschätzt. Wenn man sich das Totalreflektionsplateau ansieht, stellt man fest, dass im Fall verschwindender Magnetisierung des Palladiums das Totalreflektionsplateau besser simuliert wird als im Fall, wenn  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 12 \text{ \AA} \mu_B$  angesetzt wird. Bei der größeren Magnetisierung des Palladiums ist der Unterschied zwischen dem Totalreflektionsplateau im ++ Kanal und im - - Kanal etwas zu groß. Man kann annehmen, dass auch in diesem Vielfachschichtsystem die Polarisation des Palladiums zwischen diesen beiden Werten liegt.

Wenn man wie bei der Probe mit  $2 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten annimmt, dass  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA} \mu_B$  ist, so kann man eine leicht bessere Simulation erhalten. Dabei ist es wieder möglich, diesen Wert beliebig auf die Reichweite und die Polarisation zu verteilen, ohne die simulierte spekuläre Reflektivität gravierend zu verändern, siehe dazu Abb. 6.26.

In der linken Abb. wurde  $d = 10 \text{ \AA}$  mit einer Polarisation des Palladiums von

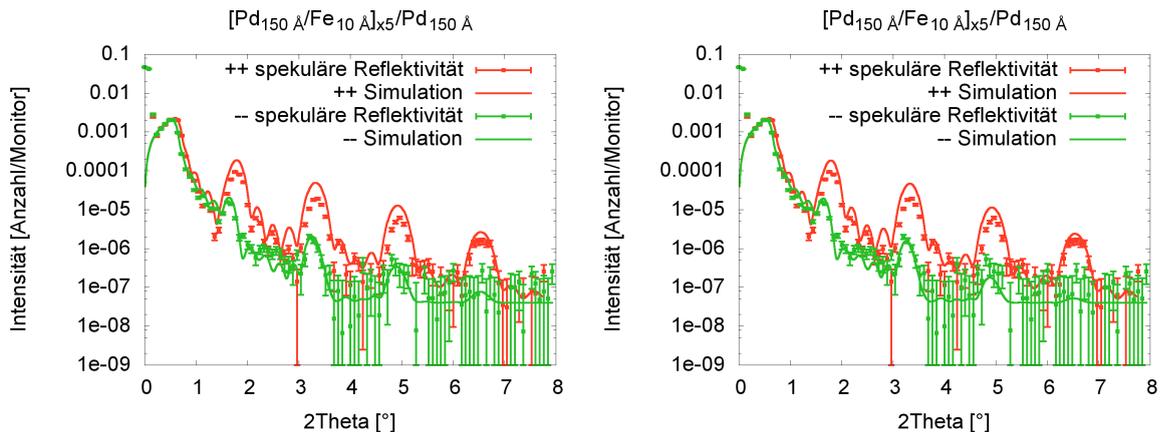


Abbildung 6.26: Links: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation, bei Polarisation des Palladiums von:  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA}\mu_B$ , mit einer Reichweite  $d_{Pd} = 10 \text{ \AA}$  und einer Magnetisierung von  $m_{Pd} = 0,2 \mu_B$ . Rechts: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation, bei Polarisation des Palladiums von:  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \text{ \AA}\mu_B$ , mit einer Reichweite  $d_{Pd} = 20 \text{ \AA}$  und einer Magnetisierung von  $m_{Pd} = 0,1 \mu_B$ .

$m_{Pd} = 0,2\mu_B$  gewählt, in der rechten Abb. die doppelte Reichweite mit halber Magnetisierung. Wenn man sich die Simulationen ansieht, stellt man direkt fest, dass die magnetische Streulängendichte gut gewählt ist, da diese den Unterschied zwischen den Totalreflektionsplateaus im ++ Kanal und im - - Kanal definiert. Zwischen den Kurven kann man nur einen leichten Unterschied im - - Kanal an den Bragg-Reflexe erkennen. Wenn die Reichweite der Polarisation des Palladiums zunimmt, dann nimmt die Intensität der Bragg-Reflexe ab.

Bei dieser Auswertung kann man nur das Produkt aus dem induzierten magnetischen Moment und der Reichweite der Induktion halbwegs gut definieren. Wenn man unterschiedliche Simulationen bei verschiedenen Parametern für das induzierte magnetische Moment und die Reichweite macht, kann man folgenden Wert abschätzen:

$$d_{Pd} \cdot m_{Pd} = 2 \pm 0,8 \text{ \AA}\mu_B. \quad (6.5)$$

Dabei ist aber zu beachten, dass die Unterschiede zwischen den Simulationen nicht groß waren, wie man an Abb. 6.25 und 6.26 sehen kann. Bei den großen Fehlern auf die „wahre“ spekuläre Reflektivität ist es schwer diesen Wert besser abzuschätzen und der angegebene Fehler könnte sogar etwas unterschätzt sein. Nötig wären auch hier Messungen bei höherer Strahlintensität und einem besseren Signal-Untergrund-Verhältnis um zu entscheiden, welches Modell das richtige ist. Eine andere Möglichkeit eine bessere Unterscheidung zwischen den Modellen zu bekommen wäre es, auch die diffuse Streuung zu simulieren, was im Rahmen dieser Diplomarbeit aus Zeitgründen

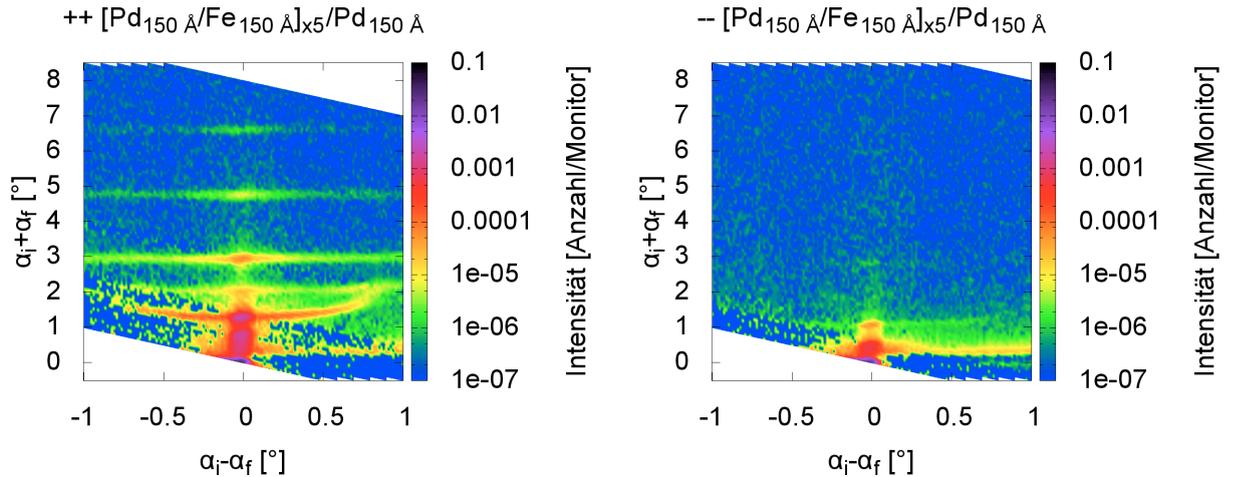


Abbildung 6.27:  $\alpha_i\alpha_f$ -Karten für das Vielschichtsystem mit 150 Å dicken Eisenschichten für die beiden Nicht-Spin-Flip-Kanäle; Links ist der ++ Kanal und rechts der -- Kanal dargestellt. Aufgetragen wurde die normierte Intensität farbkodiert als Funktion von Summe und Differenz von Einfallswinkel und Ausfallswinkel.

nicht mehr möglich war.

#### 6.4.6 $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{150\text{\AA}}]_{x5}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

Sieht man sich wieder die  $\alpha_i\alpha_f$ -Karten an, so stellt man fest, dass sie ähnlich zu denen der anderen Vielschichtsysteme sind. Wieder ist der Rest des Primärstrahls, der nicht vom Beamstop absorbiert wurde, sichtbar bei  $\alpha_i + \alpha_f = 0,3^\circ$ . Beim Totalreflektionsplateau sieht man jetzt einen leichten Unterschied zwischen den beiden Kanälen. Dies folgt aus dem größeren Beitrag der magnetischen Streulängendichte des Eisens durch die dicken Eisenschichten zum kritischen Winkel, was durch die Formel

$$\Theta_C = \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \sqrt{N(a_N \pm a_m)} \quad (6.6)$$

beschrieben wird. Man erkennt eine Aufspaltung des Totalreflektionsplateaus für die beiden Kanäle, das Totalreflektionsplateau ist für den -- Kanal zu kleineren Winkeln verschoben und der ++ Kanal zu größeren. Im Unterschied zu den anderen Vielschichtsystemen kann man erkennen, dass die Bragg-Reflexe im ++ Kanal viel stärker ausgeprägt sind. Besonders am ersten Bragg-Reflex kann man dies sehen, dieser ist von der Intensität auf der Höhe des Totalreflektionsplateaus. Anders sieht es im -- Kanal aus, dort kann nur der erste Bragg-Reflex erkannt werden, der etwas zu kleineren Winkeln verschoben wurde. Den nächsten Bragg-Reflex kann man im -- Kanal nur erahnen. Bei diesem Vielschichtsystem sind die „Bragg-Sheets“ noch stärker ausgeprägt, besonders sichtbar ist es am ersten „Bragg-Sheet“. Dieser trifft

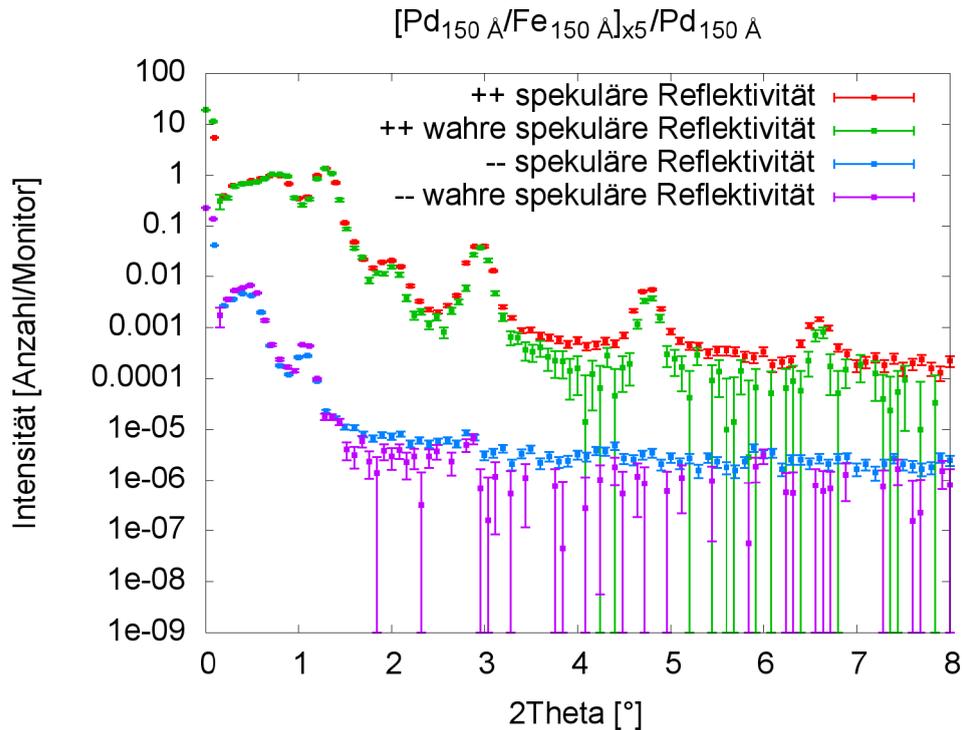


Abbildung 6.28: Aufgetragen ist die Intensität der gemessenen und der „wahren“ spekulären Reflektivität des ++ Kanals und des – Kanals gegen den zweifachen Einfallswinkel. Die Reflektivitätskurven des ++ Kanals wurden der Übersicht halber um den Faktor 100 zu höheren Intensitäten verschoben.

den nicht sichtbaren Yoneda-Reflex und es scheint, dass dieser nach außen zu höheren Winkeln gebogen.

Wegen der stark ausgeprägten „Bragg-Sheets“ muss man wieder die diffuse Streuung von der spekulären Reflektivität subtrahieren. Dabei bekommt man die wahre spekuläre Reflektivität. Der Vergleich der beiden Reflektivitäten ist in Abb. 6.28 zu sehen. Wie man sehen kann, nimmt die Intensität zu höheren Einfallswinkeln stärker ab als mit diffuser Streuung. Zu beachten ist, dass sich die Intensität einiger Bragg-Reflexe nicht ändert, wie des ersten und des dritten Bragg-Reflexe, wobei sich die Intensität des zweiten und der letzten beiden Bragg-Reflexe ändert. Wenn man die diffuse Streuung nicht subtrahiert hätte, dann hätte man den Intensitätszuwachs mancher Bragg-Reflexe der Polarisation des Palladiums zugeschrieben, somit ist es wichtig, die diffuse Streuung zu korrigieren.

Wie schon bei der Röntgenreflektometrie besprochen wurde, ist dieses Vielschichtsystem sehr sensitiv für gleiche Schichtdicken und die daraus folgende Symmetrie. Wenn man sich die  $\alpha_i\alpha_f$ -Karten ansieht, dann erkennt man, dass die Reflexe gerader Ordnung bei der Neutronenreflektometrie stark unterdrückt oder teilweise sogar nicht sichtbar sind. Nach der Analyse der Röntgenreflektometrie kann man annehmen, dass die Eisen- und Palladiumschichten nicht gleich dick sind. Es hat sich gezeigt, dass

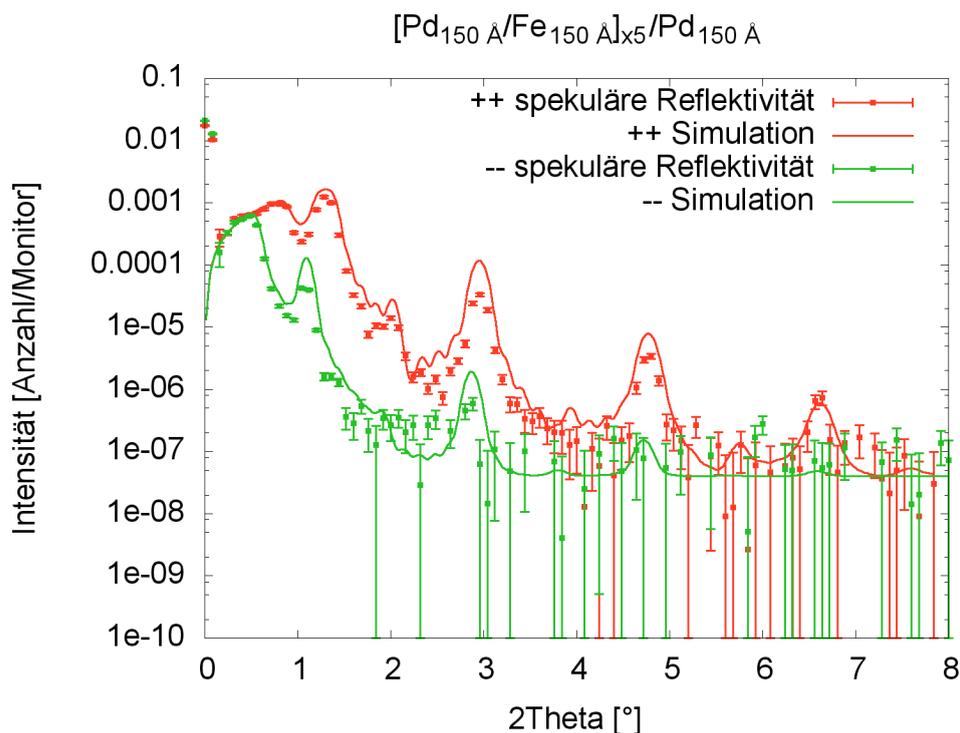


Abbildung 6.29: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und -- Kanäle mit eingezeichneter Simulation ohne Polarisation des Palladiums.

die Eisenschichten etwas dicker waren als die Palladiumschichten, somit müsste man wegen der Symmetriebrechung auch in der Neutronenreflektometrie Bragg-Reflexe gerader Ordnung erwarten. Die einzige mögliche Erklärung für das Fehlen dieser ist, dass durch die magnetische Wechselwirkung zwischen dem Eisen und dem teilweise polarisierten Palladium die Bragg-Reflexe gerader Ordnung unterdrückt werden.

Trotzdem bekommt man eine gute Simulationen, wenn man die Parameter der Röntgenreflektometrie einsetzt und die Rauigkeit etwas erhöht. Die Simulation ist in Abb. 6.29 zu sehen. Dabei kann man sehen, dass durch die Subtraktion der diffusen Streuung die Fehler bei höheren Einfallswinkeln sehr groß werden und die Simulationskurve innerhalb aller Fehler liegt. Somit sind nur die Bragg-Reflexe, die eine etwas erhöhte Intensität haben, für die Anpassung geeignet. Dabei kann man erkennen, dass die Bragg-Reflexe gerader Ordnung auch bei der Simulation leicht unterdrückt werden. Man kann aber feststellen, dass im -- Kanal bei ca.  $2^\circ$  in der Simulation eine kleine Stufe sichtbar ist, die nicht in den Messdaten zu erkennen ist. Des Weiteren sieht man im ++ Kanal bei ca.  $4^\circ$  einen kleinen Bragg-Reflex gerader Ordnung, der etwas über dem Untergrund liegt. An diesen Stellen passt die Simulation nicht zu den Messdaten, es scheint, dass eine kleine Polarisation des Palladiums die Symmetriebrechung durch die unterschiedliche Schichtdicken aufhebt. Diese beiden genannten Stellen sind sehr sensitiv für das magnetische Moment an der Grenzfläche, die Polarisation des Palladiums und die Schichtdicken von Eisen

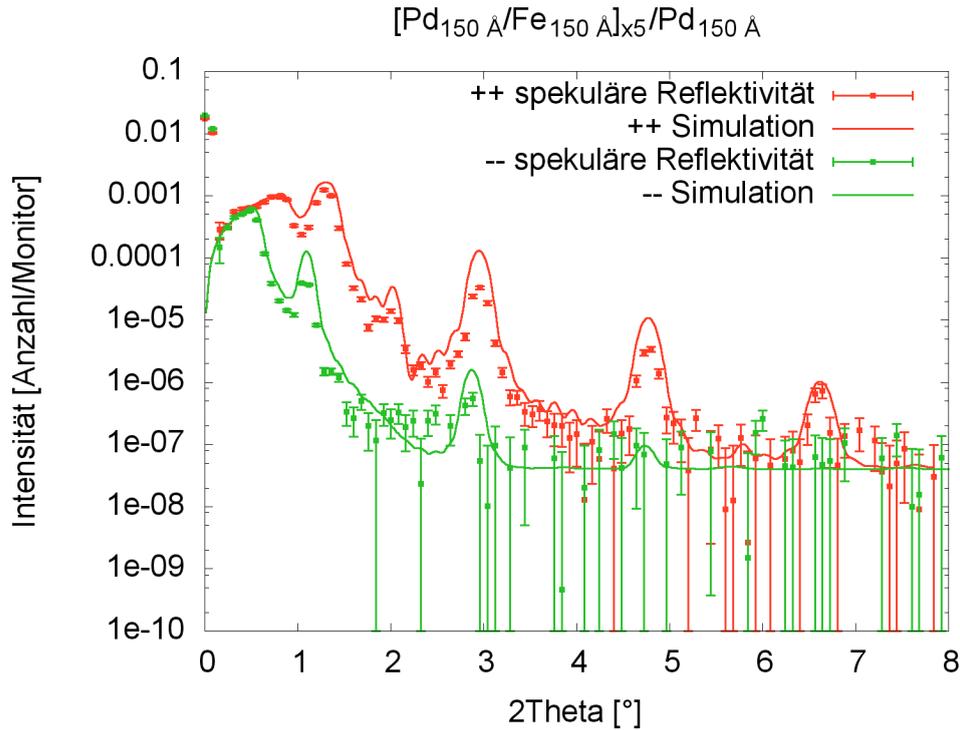


Abbildung 6.30: „Wahre“ spekuläre Reflektivität der ++ und -- Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei Polarisation des Palladiums mit Reichweite  $d_{Pd} = 10 \text{ \AA}$  und einem induzierten magnetischen Moment  $m_{Pd} = 0,26 \mu_B$ . Dabei musste man an der Eisengrenzfläche bis  $d_{Fe} = 2 \text{ \AA}$  eine Abnahme des magnetischen Momentes auf  $m_{Fe} = 0,37 \mu_B$  annehmen.

und Palladium. Nur kleine Änderungen an den Simulationsparametern führen schon zu Bragg-Reflexe gerader Ordnung, dabei ist der Bragg-Reflex bei  $2^\circ$  im -- Kanal viel sensitiver für das magnetische Moment an der Grenzfläche, als der Bragg-Reflex bei  $4^\circ$ . In Abb. 6.30 ist eine Simulation gezeigt, die an den entscheidenden Stellen die Messdaten besser simuliert, die Eingabesimulationsdatei ist im Anhang A.2 angefügt. Dabei wurde eine Polarisation des Palladiums von  $m_{Pd} = 0,26 \mu_B$  bei einer Reichweite von  $d_{Pd} = 10 \text{ \AA}$  angenommen. Es musste aber an der Eisengrenzfläche eine Abnahme des magnetischen Momentes auf  $m_{Fe} = 0,37 \mu_B$  angesetzt werden. Mit diesen Parametern bekommt man eine Simulation, bei der durch die magnetische Streulängendichte der Unterschied in der Dicke der Eisen- und Palladiumschichten und die damit verbundene Asymmetrie in der nuklearen Streulängendichte kompensiert werden kann. Wenn man die Parameter der magnetischen Streulängendichte leicht ändert, entsteht schon ein Bragg-Reflex gerader Ordnung im -- Kanal bei  $2^\circ$ . Des Weiteren kann man im -- Kanal allgemein eine Abnahme der Intensität der Bragg-Reflexe erkennen, was besser zur gemessenen Reflektivität passt als bei der Simulation ohne Polarisation des Palladiums.

Durch die starke Abnahme des magnetischen Momentes des Eisens bleibt das integrale

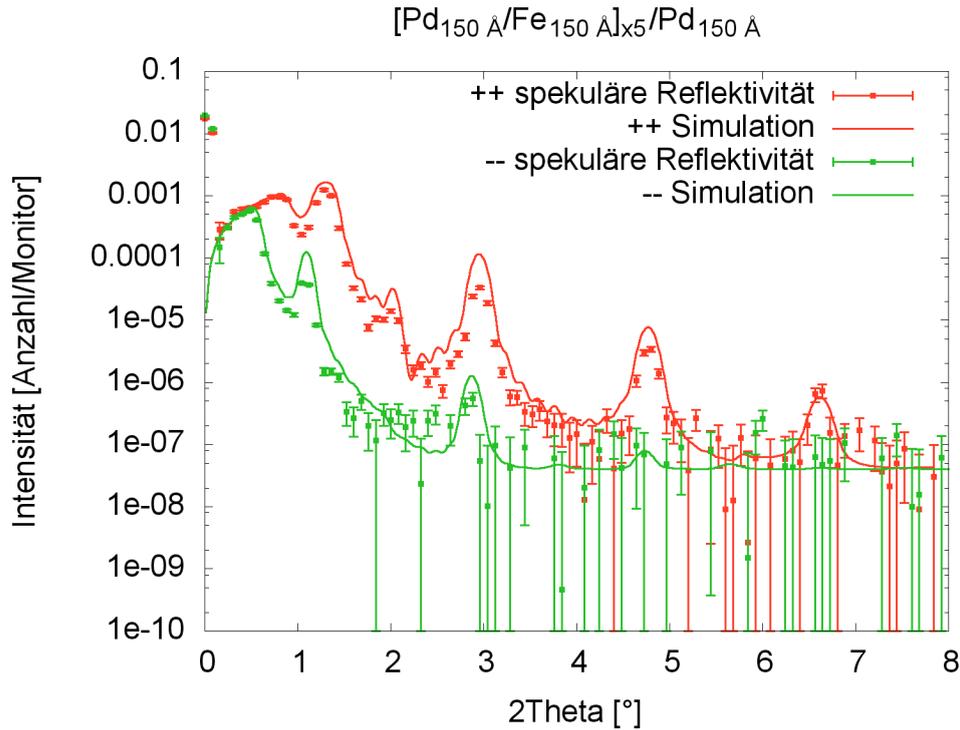


Abbildung 6.31: Wahre spekuläre Reflektivität der ++ und - - Kanäle mit eingezeichneter Simulation bei Polarisation des Palladiums, mit Reichweite  $d_{Pd} = 20 \text{ \AA}$  und eines induzierten magnetischen Momentes  $m_{Pd} = 0,11 \mu_B$ . Dabei musste man an der Eisengrenzfläche bis  $d_{Fe} = 2 \text{ \AA}$  eine Abnahme des magnetischen Momentes auf  $m_{Fe} = 0,74 \mu_B$  annehmen.

Moment innerhalb der Probe gleich dem Moment, dass durch die gleiche Menge an Volumen-Eisen erzeugt werden würde. Wegen den nicht sichtbaren Bragg-Reflexe gerader Ordnung muss eine Polarisation des Palladiums vorliegen, diese Polarisation erzeugt aber wegen der Rückkopplung auf das Eisen in der Grenzschicht kein größeres magnetisches Moment. Dies ist aber nicht im Widerspruch zu den Ergebnissen, die die Magnetometrie geliefert hat. Die Fehler auf das Produkt des induzierten magnetischen Momentes und der Reichweite beim Palladium bei der Probe mit  $150 \text{ \AA}$  dicken Eisenschichten sind annähernd so groß wie der Wert selbst.

Auch bei diesem Vielfachsichtsystem ist es möglich die Reichweite der Polarisation des Palladiums und des induzierten Momentes zu verändern und gleich gute Simulationen zu bekommen. Wegen der Sensitivität dieses Vielfachsichtsystems auf die Symmetrie der Doppelschichten muss man auch das magnetische Moment in der Eisengrenzschicht verändern. Abb. 6.31 zeigt z.B. eine Simulation mit einem induzierten magnetischen Momentes von  $m_{Pd} = 0,11 \mu_B$ , aber doppelter Reichweite beim Palladium. Andererseits musste man aber auch das magnetische Moment des Eisens in der Grenzschicht auf  $m_{Fe} = 0,74 \mu_B$  setzten.

Somit kann man genauso wie bei den anderen Vielfachsichtsystemen nicht genau

sagen, wie stark das Palladium polarisiert wird, man kann nur feststellen, dass eine Polarisation vorhanden ist. Wenn man die Summe des Produkts aus der Reichweite der Polarisation und des induzierten magnetischen Momentes im Palladium und des magnetischen Momentes des Eisens in der Grenzschicht und die Dicke dieser annähernd gleich lässt, kann man die einzelnen Werte beliebig variieren ohne die Simulation signifikant zu verändern. Das Produkt der Summe und der Reichweite scheint bei diesem Vielschichtsystem gut definiert zu sein, man kann diesen Wert nur leicht ändern, ohne schlechtere Simulationen zu bekommen. Durch verschiedene Simulationen konnte der Wert auf

$$d_{Pd} \cdot m_{Pd} + d_{Fe} \cdot m_{Fe} = 3,34 \pm 0,3 \text{ \AA}\mu_B \quad (6.7)$$

abgeschätzt werden. Der Fehler auf  $d_{Pd} \cdot m_{Pd} + d_{Fe} \cdot m_{Fe}$  ist zwar mit ca. 10 % sehr groß, aber besser als die Fehler auf die einzelnen Werte.

Für eine bessere Bestimmung des induzierten magnetischen Momentes des Palladiums müsste man ein besseres Signal-Untergrund-Verhältnis haben, sodass man die Bragg-Reflexe gerader Ordnung bei größeren Winkeln noch auflösen kann. An diesen Bragg-Reflexe könnte man entscheiden, welches Modell das bessere ist und dieses Vielschichtsystem besser beschreibt. Eine andere Möglichkeit wäre es XMCD-Messungen (X-ray Magnetic Circular Dichroism) durchzuführen, dadurch könnte man besser bestimmen wie die magnetischen Momente im Bereich der Grenzfläche auf die Elemente des Palladium und Eisen verteilt sind.

Somit wurden für dieses Schichtsystem leicht andere Ergebnisse bekommen, als in Ref. [7] oder [8] beschrieben. Zwar musste man hier auch eine Polarisation des Palladiums annehmen, die in der gleichen Größenordnung ist, anders sieht es aber bei dem Eisen in der Grenzschicht aus. In den anderen Arbeiten hatte man eine Erhöhung des magnetischen Moments des Eisens festgestellt, hier war es nur möglich eine gute Simulation zu bekommen, wenn man ein kleineres Moment des Eisens ansetzt. Dies könnte auf unterschiedliche Schichtpräparation zurückzuführen sein und auf unterschiedliche Schichtqualitäten.



## 7 Zusammenfassung und Fazit

Ziel dieser Arbeit war es die magnetischen Eigenschaften von Eisen-Palladium-Vielfachschichtsystemen zu untersuchen, wobei speziell auf die Polarisation des Palladiums an der Grenzfläche zum Eisen geachtet werden sollte. In einer früheren Arbeit [11] wurde gezeigt, dass bei nicht optimalen Präparationsparametern sich eine Eisen-Palladium-Mischschicht bildet, welche die eindeutige Feststellung einer Polarisation des Palladiums verhindert hat.

Dafür wurden Eisen-Palladium-Vielfachschichtsysteme in einer MBE-Anlage unter UHV-Bedingungen hergestellt und gleichzeitig in-situ mittels LEED und AES charakterisiert. Speziell gewählte Aufdampfparameter können die Oberflächendiffusion beim Aufdampfen der ersten Monolagen unterdrücken, wodurch die Eisen-Palladium-Mischschicht verhindert wird, aber gleichzeitig die Oberflächenqualität bewahrt bleibt. Bei der in Kapitel 5 gefundenen Präparationsprozedur werden alle Palladiumschichten bei variabler Temperatur aufgedampft. Um die Oberflächendiffusion zu unterdrücken werden die Palladiumschichten bis 10 Å bei Raumtemperatur aufgedampft und erst dann wird die Aufdampftemperatur auf 130°C erhöht, um glattere Oberflächen zu erhalten.

Mit diesen Präparationsparametern hergestellte Vielfachschichtsysteme brauchen keine Eisen-Palladium-Mischschicht um die spekuläre Reflektivität der Röntgenreflektometrie zu simulieren. Das Einfügen einer Mischschicht verbessert die Simulation der spekulären Reflektivität nicht erheblich, wie man in Kapitel 6.2 sehen kann. Dabei unterscheiden sich aber die Streulängendichten teilweise bei den Vielfachschichtsystemen. Das Eisen hat dabei eine Streulängendichte nahe des Literaturwertes von  $59,3 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ , nur die Streulängendichte des Palladiums unterscheidet sich bis zu 17 % vom Literaturwert von  $88,4 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ . Es konnte aber nicht geklärt werden auf was diese große Diskrepanz zurückzuführen ist, wobei mögliche Erklärungsversuche in Kapitel 6.2 beschrieben sind. Dadurch, dass 10 Å des Palladiums bei Raumtemperatur aufgedampft werden, steigt die Rauigkeit linear vom Substrat bis zur obersten Palladiumschicht von 5 Å bis zu 12 Å an. Des Weiteren bildet sich eine Oxidschicht auf der obersten Palladiumschicht, die eine Rauigkeit von bis zu 50 Å aufweist.

Ein erstes Indiz auf eine Polarisation des Palladiums kann man mittels Magnetometrie (Kapitel 6.3) bekommen. Es zeigt sich, dass diese Vielfachschichtsysteme ein erhöhtes magnetisches Moment aufweisen, dass nur mit einer vorhandenen Polarisation des Palladiums erklärt werden kann. Des Weiteren stellt man fest, dass bei dünneren Eisenschichten der Zuwachs des magnetischen Momentes am größten ist. Bei Annahme eines magnetischen Momentes des Eisens von  $m_{Fe} = 2,2 \mu_B$  kann das Produkt aus dem induzierten magnetischen Moment und der Reichweite der Polarisation innerhalb

des Palladium berechnet werden.

Die Neutronenreflektometrie (Kapitel 4.7) zeigt schließlich, dass eine Polarisation des Palladiums notwendig ist, um die gemessenen Reflektivitäten zu simulieren, die Magnetometrie aber die Polarisation des Palladiums überschätzt. Die Bestimmung der Polarisation des Palladiums durch die Magnetometrie weist viele Fehlerquellen auf, die wahrscheinlich zu einer Überschätzung der Polarisation führen. Andererseits erfordert die Neutronenreflektometrie ein gutes Signal-Untergrund-Verhältnis um sensitiv auf eine Polarisation des Palladiums zu sein, was aber am TREFF nicht gegeben ist. Einzig das Produkt des induzierten magnetischen Momentes und der Reichweite kann besser bestimmt werden:  $m_{Pd} \cdot d_{Pd} \approx 2 \pm 0,5 \text{ \AA} \mu_B$ . Es zeigt sich, dass hierbei das Produkt bei allen Vielfachschichtsystemen annähernd gleich ist, weshalb ich auf eine Polarisation des Palladiums schließe, die unabhängig von der Dicke der Eisenschichten ist.

Um eine genauere Festlegung der Polarisation und der Verteilung der magnetischen Momente innerhalb der Vielfachschichtsysteme zu bekommen, müsste man die Vielfachschichtsysteme bei einem besseren Signal-Untergrund-Verhältnis am Neutronenreflektometer MARIA untersuchen. An der spekulären Reflektivität bei höheren Einfallswinkeln sollte man zwischen den unterschiedliche Modellen unterscheiden können, da eine andere Periode sich in einer Schwebung zeigen müsste. Des Weiteren sollten XMCD-Messungen (X-ray Magnetic Circular Dichroism) durchgeführt werden, um elementspezifisch das magnetische Moment zu untersuchen. Diese Messungen sollen in den nächsten Monaten am PETRA III in Hamburg durchgeführt werden, womit man die hier gezeigten Ergebnisse verifizieren sollte. Wegen der in der Röntgen- und Neutronenreflektometrie gesehenen starken diffusen Streuung könnte man auch versuchen, diese zu simulieren. Dabei sollte auch besser zwischen den unterschiedlichen Modellen unterschieden werden können.

Obwohl man wahrscheinlich an der Präparation dieser Vielfachschichtsysteme nicht mehr viel verbessern kann, ist noch einiges an ihnen zu untersuchen. Die Frage der genauen Verteilung der magnetischen Momente konnte immer noch nicht geklärt werden. Darüberhinaus könnte die Temperaturabhängigkeit interessante Phänomene zeigen, da an den Eisen-Palladium-Legierungen gezeigt werden konnte, dass die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung konzentrationsabhängig ist. Die Frage ist nun, wie sich das in den Vielfachschichtsystemen zeigt, wo zusätzlich noch die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung abhängig von der Dimension der Schichten ist. Somit gibt es weiterhin noch interessante Fragestellungen und mit den neuen Präparationsparametern kann man mit den richtigen Untersuchungsmethoden diese hoffentlich in Zukunft hinreichend beantworten.

---

## Danksagung

Diese Arbeit wäre ohne die Hilfe und Unterstützung von vielen Leuten nicht möglich gewesen, weshalb ich mich an dieser Stelle hier bei Ihnen bedanken möchte.

**Prof. Thomas Brückel** gebührt mein größter Dank, dafür, dass er mir die Möglichkeit dieser Arbeit am Institut für Streumethoden gegeben hat und für seine vielen Anregungen bei den Besprechungen der Messdaten. Ohne seine Hilfe wäre diese Arbeit so nicht möglich gewesen. Danke für das Vertrauen in das gute Gelingen dieser Arbeit.

**Prof. Gernot Güntherodt** danke ich für die Übernahme der Zweitkorrektur.

**Dr. Ulrich Rücker** danke ich ganz herzlich für die vielen Diskussionen und Anregungen. Bei allen Problemen mit dieser Arbeit stand er mir zur Seite, ob in Jülich oder bei den Untersuchungen am TREFF in München. Danke für die großartige Betreuung dieser Diplomarbeit.

**Dr. Stefan Mattauch** danke ich nicht nur für seine großartige Unterstützung am Neutronenreflektometer TREFF in München, sondern auch für sein Vertrauen. Dafür, dass er mich bei den verrücktesten Ideen unterstützt hat und die Messungen während des Neutronenpraktikums ermöglicht hat. Ohne seine Hilfe wären die Neutronenmessungen so nicht möglich gewesen.

**Harald Schneider** danke ich ganz herzlich für seine Hilfestellung und Unterstützung bei den Tieftemperaturmessungen am TREFF.

**Dr. Emmanuel Kentzinger** danke ich für die Bereitstellung und Erklärung seines Simulationsprogramms für die Reflektometrie und für seine hilfreichen Anregungen bezüglich der auftretenden Probleme bei der Simulation der Messdaten.

**Daniel Schumacher** danke ich, dass er einem mit seinem Wissen und seinen Anregungen zur Seite stand und bei allen Problemen helfen konnte. Seine hilfreichen Kommentare haben mir sehr geholfen.

**Artur Glavic** danke ich für die vielen fachlichen Diskussionen und Hilfestellungen und für die Bereitstellung seines Programms zur Bearbeitung der Messdaten.

Des Weiteren danke ich dem ganzen Institut für Streumethoden für die nette Aufnahme und gute Atmosphäre. Es hat richtig Spaß gemacht, diese Arbeit am IFF-4 zu schreiben. Ohne die Unterstützung und Hilfe des ganzen Instituts wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen. Danke, dass ich bei Euch allen so viel lernen konnte.

Zu Letzt möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mich nicht im Stich gelassen haben und immer zur Seite standen, wenn ich Probleme hatte.

Diese Arbeit wäre ohne Euch alle nicht möglich gewesen. Danke!



# Literaturverzeichnis

- [1] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Phys. Rev. B*, 39(7):4828–4830, Mar 1989.
- [2] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 61(21):2472–2475, Nov 1988.
- [3] P. Kamp, A. Marty, B. Gilles, R. Hoffmann, S. Marchesini, M. Belakhovsky, C. Boeglin, H. A. Dürr, S. S. Dhesi, G. van der Laan, and A. Rogalev. Correlation of spin and orbital anisotropies with chemical order in  $Fe_{0.5}Pd_{0.5}$  alloy films using magnetic circular x-ray dichroism. *Phys. Rev. B*, 59(2):1105–1112, Jan 1999.
- [4] V. Gehanno, A. Marty, B. Gilles, and Y. Samson. Magnetic domains in epitaxial ordered FePd(001) thin films with perpendicular magnetic anisotropy. *Phys. Rev. B*, 55(18):12552–12555, May 1997.
- [5] J. C. Ododo. The onset of ferromagnetism in PdFe and PdNi alloys. *Solid State Communications*, 25(1):25–29, 1978.
- [6] Z. Celinski, B. Heinrich, J. F. Cochran, W. B. Muir, A. S. Arrott, and J. Kirschner. Growth and magnetic studies of lattice expanded Pd in ultrathin Fe(001)/Pd(001)/Fe(001) structures. *Phys. Rev. Lett.*, 65(9):1156–1159, Aug 1990.
- [7] S. Blügel, B. Drittler, R. Zeller, and P. H. Dederichs. *Magnetic properties of 3d transition metal monolayers on metal substrates*. Applied Physics A: Materials Science & Processing. Springer Berlin / Heidelberg, 1989.
- [8] O. Rader, C. Carbone, W. Clemens, E. Vescovo, W. Eberhardt, and W. Gudat. Exchange-dependent hybridization at the Pd-Fe interface. *Phys. Rev. B*, 45(23):13823–13826, Jun 1992.
- [9] D. Stoeffler, K. Ounadjela, J. Sticht, and F. Gautier. Magnetic polarization of the Pd spacer and interlayer magnetic couplings in Fe/Pd (001) superlattices: First principles calculations. *Phys. Rev. B*, 49(1):299–309, Jan 1994.

- [10] L. Cheng, Z. Altounian, D. H. Ryan, J. O. Ström-Olsen, M. Sutton, and Z. Tun. Pd polarization and interfacial moments in Pd-Fe multilayers. *Phys. Rev. B*, 69(14):144403, Apr 2004.
- [11] D. Schumacher. 2-Dimensionaler Magnetismus von Eisen-Monolagen in Palladium. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2008.
- [12] Wolfgang Nolting and Anupuru Ramakanth. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer, 2009.
- [13] Diverse. *Magnetische Schichtsysteme - 30. Ferienkurs des Instituts für Festkörperforschung*. Forschungszentrum Jülich, Zentralbibliothek, Verlag, 1999.
- [14] H. Chen, N. E. Brener, and J. Callaway. Electronic structure, optical and magnetic properties of fcc palladium. *Phys. Rev. B*, 40(3):1443–1449, Jul 1989.
- [15] V.L. Moruzzi, J.F. Janak, and A.R. Williams. *Calculated electronic properties of metals*. Pergamon Press, New York, 1978.
- [16] T. Brückel, G. Heger, D. Richter, and R. Zorn. *Neutron Scattering - Laboratory Course - Lectures*. Forschungszentrum Jülich, Zentralbibliothek, Verlag, 2008.
- [17] S. K. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff, and H. B. Stanley. X-ray and neutron scattering from rough surfaces. *Phys. Rev. B*, 38(4):2297–2311, Aug 1988.
- [18] L. G. Parratt. Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays. *Phys. Rev.*, 95(2):359–369, Jul 1954.
- [19] XCOM: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>.
- [20] Bogdan Povh and Mitja Rosina. *Scattering and Structures: Essentials and Analogies in Quantum Physics*. Springer Berlin / Heidelberg, 2002.
- [21] G. L. Squires. *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*. Syndics of the Cambridge University Press, 1978.
- [22] E. Josten. Magnetische Korrelationen in lateral strukturierten Fe/Cr-Schichtsystemen. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2009.
- [23] M. A. Herman and H. Sitter. *Molecular Beam Epitaxy*. Springer Series in Materials Science. Springer Verlag, 2. edition, 1996.
- [24] Krishna Seshan, editor. *Handbook of Thin Film Deposition, Processes and Technologies*. Nozes Publications, 2 edition, 2002.
- [25] I.F. Ferguson. *Auger Microprobe Analysis*. Adam Hilger, 1989.
- [26] *Agilent 5400 AFM*.

- [27] *Magnetic Property Measurement System-Continuous Low-Temperature Control Option-User's Manual.*
- [28] A. Glavic. Interferenzlithografie zur Erzeugung magnetischer Nanostrukturen: Von der lateralen Strukturierung bis zur Untersuchung der magnetischen Eigenschaften. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2008.
- [29] P. Etienne, J. Massies, F. Nguyen-Van-Dau, A. Barthélémy, and A. Fert. Critical steps in the molecular beam epitaxy of high quality Ag/Fe superlattices on (001) GaAs. *Appl. Phys. Lett.*, 55:2239–2241, 1989.
- [30] D. E. Bürgler, C. M. Schmidt, J. A. Wolf, T. M. Schaub, and H. J. Güntherodt. Ag films on Fe/GaAs(001): from clean surfaces to atomic Ga structures. *Surface Science*, 366(2):295–305, 1996.
- [31] Emmanuel Kentzinger, Ulrich Rücker, Boris Toperverg, Frédéric Ott, and Thomas Brückel. Depth-resolved investigation of the lateral magnetic correlations in a gradient nanocrystalline multilayer. *Phys. Rev. B*, 77(10):104435, Mar 2008.



# A Anhang

## A.1 Röntgeneingabedateien

### A.1.1 $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

```

8048.0 scattering radiaion energy (Cu-K_alpha)
555 number of datapoints

23 number of interfaces (number of layers + 1)
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd
10.0 layer thickness (in A) parameter 1
20.54 delta *1e6 parameter 2
11.568 delta/beta parameter 3
48.0 layer roughness (in A) parameter 4
# 2: Pd
142.57 layer thickness (in A) parameter 5
27.86 delta *1e6 parameter 6
11.568 delta/beta parameter 7
11.7 layer roughness (in A) parameter 8
# 3: Fe
1.87 layer thickness (in A) parameter 9
22.86 delta *1e6 parameter 10
7.744 delta/beta parameter 11
6.8 layer roughness (in A) parameter 12
# 4: Pd
142.57 layer thickness (in A) parameter 13
27.86 delta *1e6 parameter 14
11.568 delta/beta parameter 15
8.6 layer roughness (in A) parameter 16
# Begin of multilayer 8xPd/Fe RoughnessGradient=5.0# 5: Fe
1.87 layer thickness (in A) parameter 17
22.86 delta *1e6 parameter 18
7.744 delta/beta parameter 19
4.0 layer roughness (in A) parameter 20
# 6: Pd
142.57 layer thickness (in A) parameter 21
27.86 delta *1e6 parameter 22
11.568 delta/beta parameter 23
5.0 layer roughness (in A) parameter 24
# End of multilayer # 21: Fe
1.87 layer thickness (in A) parameter 81
22.86 delta *1e6 parameter 82
7.744 delta/beta parameter 83
5.0 layer roughness (in A) parameter 84
# 22: Pd
142.57 layer thickness (in A) parameter 85
27.86 delta *1e6 parameter 86
11.568 delta/beta parameter 87
6.0 layer roughness (in A) parameter 88
# 23: Ag
29.4355 delta *1e6 parameter 89
11.058 delta/beta parameter 90
5.0 layer roughness (in A) parameter 91
### End of layers.
0.3 background parameter 92
3.5 resolution in q (sigma, in 1e-3 A^-1) parameter 93
5.5 scaling factor *1e6 parameter 94

2.3 theta_max (in deg) for recalibration

```

## A.1.2 [Pd<sub>150Å</sub>/Fe<sub>10Å</sub>]<sub>x5</sub>/Pd<sub>150Å</sub>

```

8048.0 scattering radiaion energy (Cu-K_alpha)
375 number of datapoints

13 number of interfaces (number of layers + 1)
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd0
6.77 layer thickness (in A) parameter 1
20.53 delta *1e6 parameter 2
13.0 delta/beta parameter 3
48.0 layer roughness (in A) parameter 4
# 2: Pd
150.23 layer thickness (in A) parameter 5
30.84 delta *1e6 parameter 6
11.568 delta/beta parameter 7
11.7 layer roughness (in A) parameter 8
# 3: Fe
11.26 layer thickness (in A) parameter 9
23.35 delta *1e6 parameter 10
7.744 delta/beta parameter 11
11.3 layer roughness (in A) parameter 12
# 4: Pd
156.2 layer thickness (in A) parameter 13
30.84 delta *1e6 parameter 14
11.568 delta/beta parameter 15
14.0 layer roughness (in A) parameter 16
# 5: Fe
11.26 layer thickness (in A) parameter 17
23.35 delta *1e6 parameter 18
7.744 delta/beta parameter 19
11.0 layer roughness (in A) parameter 20
# 6: Pd
156.2 layer thickness (in A) parameter 21
30.84 delta *1e6 parameter 22
11.568 delta/beta parameter 23
12.0 layer roughness (in A) parameter 24
# 7: Fe
11.26 layer thickness (in A) parameter 25
23.35 delta *1e6 parameter 26
7.744 delta/beta parameter 27
9.0 layer roughness (in A) parameter 28
# 8: Pd
156.2 layer thickness (in A) parameter 29
30.84 delta *1e6 parameter 30
11.568 delta/beta parameter 31
11.0 layer roughness (in A) parameter 32
# 9: Fe
11.26 layer thickness (in A) parameter 33
23.35 delta *1e6 parameter 34
7.744 delta/beta parameter 35
8.0 layer roughness (in A) parameter 36
# 10: Pd
156.2 layer thickness (in A) parameter 37
30.84 delta *1e6 parameter 38
11.568 delta/beta parameter 39
10.0 layer roughness (in A) parameter 40
# 11: Fe
11.26 layer thickness (in A) parameter 41
23.35 delta *1e6 parameter 42
7.744 delta/beta parameter 43
8.0 layer roughness (in A) parameter 44
# 12: Pd
156.2 layer thickness (in A) parameter 45
30.84 delta *1e6 parameter 46
11.568 delta/beta parameter 47

7.0 layer roughness (in A) parameter 48
# 13: Ag
29.4355 delta *1e6 parameter 49
11.058 delta/beta parameter 50
5.0 layer roughness (in A) parameter 51
### End of layers.
0.0 background parameter 52
2.02219 resolution in q (sigma, in 1e-3 A^-1) parameter 53
3.0 scaling factor *1e6 parameter 54

2.3 theta_max (in deg) for recalibration

```

A.1.3 [Pd<sub>150Å</sub>/Fe<sub>150Å</sub>]<sub>x5</sub>/Pd<sub>150Å</sub>

```

8048.0 scattering radiaion energy (Cu-K_alpha)
372 number of datapoints

13 number of interfaces (number of layers + 1)
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd0
15.0 layer thickness (in A) parameter 1
18.0 delta *1e6 parameter 2
13.0 delta/beta parameter 3
48.0 layer roughness (in A) parameter 4
# 2: Pd
137.0 layer thickness (in A) parameter 5
31.0 delta *1e6 parameter 6
11.568 delta/beta parameter 7
11.3 layer roughness (in A) parameter 8
# 3: Fe
145.57 layer thickness (in A) parameter 9
23.86 delta *1e6 parameter 10
7.744 delta/beta parameter 11
16.0 layer roughness (in A) parameter 12
# 4: Pd
141.16 layer thickness (in A) parameter 13
31.0 delta *1e6 parameter 14
11.568 delta/beta parameter 15
14.0 layer roughness (in A) parameter 16
# 5: Fe
145.57 layer thickness (in A) parameter 17
23.86 delta *1e6 parameter 18
7.744 delta/beta parameter 19
12.0 layer roughness (in A) parameter 20
# 6: Pd
141.16 layer thickness (in A) parameter 21
31.0 delta *1e6 parameter 22
11.568 delta/beta parameter 23
6.0 layer roughness (in A) parameter 24
# 7: Fe
145.57 layer thickness (in A) parameter 25
23.86 delta *1e6 parameter 26
7.744 delta/beta parameter 27
10.0 layer roughness (in A) parameter 28
# 8: Pd
141.16 layer thickness (in A) parameter 29
31.0 delta *1e6 parameter 30
11.568 delta/beta parameter 31
7.5 layer roughness (in A) parameter 32
# 9: Fe
145.57 layer thickness (in A) parameter 33
23.86 delta *1e6 parameter 34
7.744 delta/beta parameter 35
7.5 layer roughness (in A) parameter 36
# 10: Pd
141.16 layer thickness (in A) parameter 37
31.0 delta *1e6 parameter 38
11.568 delta/beta parameter 39
7.0 layer roughness (in A) parameter 40
# 11: Fe
145.57 layer thickness (in A) parameter 41
23.86 delta *1e6 parameter 42
7.744 delta/beta parameter 43
6.0 layer roughness (in A) parameter 44
# 12: Pd
141.16 layer thickness (in A) parameter 45
31.0 delta *1e6 parameter 46
11.568 delta/beta parameter 47

6.0 layer roughness (in A) parameter 48
# 13: Ag
29.4355 delta *1e6 parameter 49
11.058 delta/beta parameter 50
6.0 layer roughness (in A) parameter 51
### End of layers.
0.5 background parameter 52
3.5 resolution in q (sigma, in 1e-3 A^-1) parameter 53
2.24 scaling factor *1e6 parameter 54

2.3 theta_max (in deg) for recalibration

```

## A.2 Neutroneneingabedateien

### A.2.1 $[\text{Pd}_{150\text{\AA}}/\text{Fe}_{2\text{\AA}}]_{x10}/\text{Pd}_{150\text{\AA}}$

```

4.0    first slit opening (mm)
2.0    second slit opening (mm)
10.0   sample length (mm)
2270.0 distance from first slit to sample (mm)
450.0  distance from second slit to sample (mm)
#-----
4.73   wavelength of the neutrons (Angstrom)
0.03   width of the wavelength (Angstrom)
#+++++ Begin of layer parameters +++++
41     number of layers
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd
124.24 layer thickness (in A)           parameter 1
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 2
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 3
0.0    magnetic scat. len. dens. Np     parameter 4
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 5
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 6
30.0   layer roughness (in A)          parameter 7
# 2: Pd
20.0   layer thickness (in A)           parameter 8
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 9
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 10
0.25   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 11
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 12
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 13
15.1   layer roughness (in A)          parameter 14
# 3: Fe
1.87008 layer thickness (in A)         parameter 15
8.09   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 16
0.00055 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 17
5.12   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 18
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 19
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 20
15.1   layer roughness (in A)          parameter 21
# 4: Pd
20.0   layer thickness (in A)           parameter 22
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 23
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 24
0.25   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 25
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 26
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 27
15.1   layer roughness (in A)          parameter 28
# Begin of Multilayer 9xPd/Fe RoughnessGradient=10.0# 5: Pd
104.24 layer thickness (in A)           parameter 29
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 30
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 31
0.0    magnetic scat. len. dens. Np     parameter 32
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 33
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 34
15.0   layer roughness (in A)          parameter 35
# 6: Pd
20.0   layer thickness (in A)           parameter 36
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 37
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 38
0.25   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 39
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 40
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 41
15.0   layer roughness (in A)          parameter 42
# 7: Fe
1.87008 layer thickness (in A)         parameter 43
8.09   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 44
0.00055 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 45
5.12   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 46
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 47
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 48
15.0   layer roughness (in A)          parameter 49
# 8: Pd
20.0   layer thickness (in A)           parameter 50
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 51
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 52
0.25   magnetic scat. len. dens. Np     parameter 53
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 54
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 55
15.0   layer roughness (in A)          parameter 56
# End of Multilayer # 41: Pd
124.24 layer thickness (in A)           parameter 28
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 28:
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 28:
0.0    magnetic scat. len. dens. Np     parameter 28:
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 28:
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 28:
10.0   layer roughness (in A)          parameter 28:
# 42: Ag
3.5    real part Nb', - (A**-2)*1e6     parameter 28:
0.00977 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 28:
0.0    magnetic scat. len. dens. Np     parameter 29:
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 29
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 29:
15.0   layer roughness (in A)          parameter 29:
### End of layers.
0.5    scaling factor                    parameter 29:
2.5    background                        parameter 29:
#### Polarization parameters
0.973  polarizer efficiency              parameter 29:
0.951  analyzer efficiency              parameter 29:
1.0    first flipper efficiency         parameter 29:
1.0    second flipper efficiency        parameter 29:

```

A.2.2 [Pd<sub>150Å</sub>/Fe<sub>10Å</sub>]<sub>x5</sub>/Pd<sub>150Å</sub>

```

4.0    first slit opening (mm)
2.0    second slit opening (mm)
10.0   sample length (mm)
2270.0 distance from first slit to sample (mm)
450.0  distance from second slit to sample (mm)
#-----
4.73   wavelength of the neutrons (Angstrom)
0.03   width of the wavelength (Angstrom)
21     number of layers
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd
145.2  layer thickness (in A)           parameter 1
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 2
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 3
0.0    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 4
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 5
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 6
24.0   layer roughness (in A)          parameter 7
# 2: Pd
10.0   layer thickness (in A)           parameter 8
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 9
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 10
0.5    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 11
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 12
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 13
20.0   layer roughness (in A)          parameter 14
# 3: Fe
11.26  layer thickness (in A)           parameter 15
8.09   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 16
0.00055 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 17
5.12   magnetic scat. len. dens. Np    parameter 18
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 19
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 20
15.0   layer roughness (in A)          parameter 21
# 4: Pd
10.0   layer thickness (in A)           parameter 22
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 23
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 24
0.5    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 25
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 26
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 27
15.0   layer roughness (in A)          parameter 28
# Begin of multilayer 4xPd/Fe RoughnessGradient=0.0# 5: Pd
135.2  layer thickness (in A)           parameter 29
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 30
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 31
0.0    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 32
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 33
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 34
10.0   layer roughness (in A)          parameter 35
# 6: Pd
10.0   layer thickness (in A)           parameter 36
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 37
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 38
0.5    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 39
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 40
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 41
10.0   layer roughness (in A)          parameter 42
# 7: Fe
11.26  layer thickness (in A)           parameter 43
8.09   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 44
0.00055 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 45
5.12   magnetic scat. len. dens. Np    parameter 46
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 47
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 48
10.0   layer roughness (in A)          parameter 49
# 8: Pd
10.0   layer thickness (in A)           parameter 50
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 51
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 52
0.5    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 53
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 54
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 55
10.0   layer roughness (in A)          parameter 56
# End of multilayer # 21: Pd
145.2  layer thickness (in A)           parameter 14
4.01   real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 14
0.00126 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 14
0.0    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 14
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 14
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 14
10.0   layer roughness (in A)          parameter 14
# 22: Ag
3.5    real part Nb', - (A**-2)*1e6    parameter 14
0.00977 imaginary part Nb'' of nuclear and parameter 14
0.0    magnetic scat. len. dens. Np    parameter 15
90.0   theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane) parameter 15
90.0   phi [deg.] (0 on x, 90 on y)     parameter 15
10.0   layer roughness (in A)          parameter 15
### End of layers.
0.12   scaling factor                  parameter 15
0.04   background                      parameter 15
#### Polarization parameters
0.973  polarizer efficiency            parameter 15
0.951  analyzer efficiency             parameter 15
1.0    first flipper efficiency         parameter 15
1.0    second flipper efficiency       parameter 15

```

### A.2.3 [Pd<sub>150Å</sub>/Fe<sub>150Å</sub>]<sub>x5</sub>/Pd<sub>150Å</sub>

4.0	first slit opening (mm)				
2.0	second slit opening (mm)				
10.0	sample length (mm)				
2270.0	distance from first slit to sample (mm)				
450.0	distance from second slit to sample (mm)				
#-----					
4.73	wavelength of the neutrons (Angstrom)				
0.03	width of the wavelength (Angstrom)				
#### Begin of layers, first layer # 1: Pd					
131.0	layer thickness (in A)	parameter 1			
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 2			
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 3			
0.0	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 4			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 5			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 6			
30.0	layer roughness (in A)	parameter 7			
# 2: Pd					
10.0	layer thickness (in A)	parameter 8			
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 9			
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 10			
0.7	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 11			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 12			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 13			
15.0	layer roughness (in A)	parameter 14			
# 3: Fe					
2.0	layer thickness (in A)	parameter 15			
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 16			
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 17			
1.0	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 18			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 19			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 20			
15.0	layer roughness (in A)	parameter 21			
# 4: Fe					
143.315	layer thickness (in A)	parameter 22			
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 23			
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 24			
5.12	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 25			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 26			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 27			
15.0	layer roughness (in A)	parameter 28			
# 5: Fe					
2.0	layer thickness (in A)	parameter 29			
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 30			
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 31			
1.0	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 32			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 33			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 34			
15.0	layer roughness (in A)	parameter 35			
# 6: Pd					
10.0	layer thickness (in A)	parameter 36			
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 37			
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 38			
0.7	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 39			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 40			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 41			
15.0	layer roughness (in A)	parameter 42			
# Begin of multilayer 4xPd/Fe RoughnessGradient=0.0# 7: Pd					
122.0	layer thickness (in A)	parameter 43			
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6	parameter 44			
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and	parameter 45			
0.0	magnetic scat. len. dens. Np	parameter 46			
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)	parameter 47			
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)	parameter 48			
10.0	layer roughness (in A)			parameter 49	
# 8: Pd					
10.0	layer thickness (in A)			parameter 50	
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 51	
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 52	
0.7	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 53	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 54	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 55	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 56	
# 9: Fe					
2.0	layer thickness (in A)			parameter 57	
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 58	
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 59	
1.0	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 60	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 61	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 62	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 63	
# 10: Fe					
143.315	layer thickness (in A)			parameter 64	
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 65	
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 66	
5.12	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 67	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 68	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 69	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 70	
# 11: Fe					
2.0	layer thickness (in A)			parameter 71	
8.09	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 72	
0.00055	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 73	
1.0	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 74	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 75	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 76	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 77	
# 12: Pd					
10.0	layer thickness (in A)			parameter 78	
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 79	
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 80	
0.7	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 81	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 82	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 83	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 84	
# End of multilayer # 31: Pd					
131.0	layer thickness (in A)			parameter 21	
4.01	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 21	
0.00126	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 21	
0.0	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 21	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 21	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 21	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 21	
# 32: Ag					
3.5	real part Nb', - (A**-2)*1e6			parameter 21	
0.00977	imaginary part Nb'' of nuclear and			parameter 21	
0.0	magnetic scat. len. dens. Np			parameter 22	
90.0	theta [deg.] (0 on z, 90 on x-y plane)			parameter 22	
90.0	phi [deg.] (0 on x, 90 on y)			parameter 22	
10.0	layer roughness (in A)			parameter 22	
### End of layers.					
0.04	scaling factor			parameter 22	
0.04	background			parameter 22	
0.973	polarizer efficiency			parameter 22	
0.951	analyzer efficiency			parameter 22	
1.0	first flipper efficiency			parameter 22	
1.0	second flipper efficiency			parameter 22	