

Magnetische Studien der
Cr(001)-Oberfläche
und des
Fe/Cr(001)-Systems
mittels
spinpolarisierter
Rastertunnelspektroskopie

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Robert Ravlić
aus Hamburg

Hamburg
2003

Gutachter der Dissertation:
Prof. Dr. R. Wiesendanger
Prof. Dr. H. P. Oepen

Gutachter der Disputation:
Prof. Dr. R. Wiesendanger
Prof. Dr. J. Kötzler

Datum der Disputation:
07.07.2003

Vorsitzender des Prüfungsausschusses:
Dr. S. Kettemann

Vorsitzender des Promotionsausschusses:
Prof. Dr. R. Wiesendanger

Dekan des Fachbereiches:
Prof. Dr. G. Huber

Inhaltsangabe

In der vorliegenden Arbeit werden die Ergebnisse magnetischer Studien der Cr(001)-Oberfläche und des Fe/Cr(001)-Systems präsentiert, die mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie (SP-RTM/RTS) erzielt wurden. Die SP-RTM/RTS bietet die einzigartige Möglichkeit, Informationen über strukturelle, elektronische und magnetische Eigenschaften zu gewinnen und mögliche Korrelationen direkt zu bestimmen.

Im ersten Teil der Arbeit werden Untersuchungen an der Cr(001)-Oberfläche vorgestellt, an Hand derer der Einfluss verschiedener struktureller Defekte auf die magnetische Struktur der Oberfläche bestimmt wird. Die ungestörte magnetische Struktur wird durch das Modell des topologischen Antiferromagnetismus beschrieben: auf jeder (001)-Terrasse ordnen sich die magnetischen Momente parallel an, während benachbarte Terrassen, die durch eine monoatomare Stufe getrennt sind, antiparallel koppeln. Schraubenversetzungen an der Oberfläche verursachen eine Frustration in der magnetischen Struktur, die zur Ausbildung von Domänenwänden mit Breiten von 120-170 nm führt. Von Interesse ist die Domänenwandbreite in Abhängigkeit vom Abstand zur Schraubenversetzung, wobei die experimentellen Daten mit Resultaten aus mikromagnetischen Simulationen verglichen werden. Deutlich wird dabei, dass die Größe und Form der Spinstruktur nur durch zwei Parameter bestimmt wird, der Austauschsteifigkeit und der effektiven Anisotropie. Vergrabene Stufenversetzungen verursachen eine s-förmige Deformation der Stufenkanten auf der Cr(001)-Oberfläche, jedoch ohne die topologisch bedingte antiferromagnetische Ordnung zu stören. Übersichtsaufnahmen zeigen den seltenen Fall einer Änderung des spinpolarisierten Anteils des Tunnelstroms, welcher sich durch die Vierfach-Symmetrie der Cr(001)-Oberfläche erklären lässt. In der Ebene liegen zwei leichte Richtungen vor ([100] und [010]), entlang derer die magnetischen Momente vorzugsweise orientiert sind. Da beide Richtungen gleichwertig sind, kommt es zur 90°-Entartung und der Bildung entsprechender Domänen auf der Cr(001)-Oberfläche.

Dem zweiten Teil liegt eine Studie des Fe/Cr(001)-Systems zugrunde, die die strukturellen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Fe-Bedeckung erfasst. Die Wachstumsuntersuchungen belegen ein fast perfektes Lagen-Wachstum des Eisens mit einer Ausnahme im Bedeckungsbereich $1.48 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$. Hier kommt es zur simultanen Bildung der zweiten und dritten Lage. Durch Heizen des Fe/Cr(001)-Systems bei erhöhten Temperaturen wird ein Fe/Cr-Gemisch erzeugt, welches eine $c(2 \times 2)$ -Ordnung aufweist. RTS-Messungen am geordneten Gemisch zeigen, dass die Spektren eine signifikante Doppel-Peak-Struktur mit Peaks bei $U = -0.3 \text{ V}$ und $U = +0.15 \text{ V}$ aufweisen. Zeitabhängige RTS-Studien veranschaulichen, dass das Fe/Cr(001)-System instabil gegenüber dem Durchmischen an der Grenzschicht ist. Während Spektren kurz nach der Präparation durch einen einzelnen d_{z^2} -artigen Oberflächenzustand dominiert werden, belegt das schon bekannte Doppel-Peak-Spektrum am folgenden Tag das Auftreten eines Fe/Cr-Gemisches. Spinaufgelöste Messungen zeigen im niedrigen Submonolagenbereich ($\theta \leq 0.2 \text{ ML}$), dass die Fe-Inseln antiferromagnetisch an das darunter liegende Substrat koppeln. Die Verringerung des magnetischen Kontrastes ab $\theta > 0.2 \text{ ML}$ und der komplette Verlust ab $\theta \geq 0.4 \text{ ML}$ wird in Bezug auf eine Reduktion der Néel-Temperatur diskutiert, welche als Folge der Durchmischung angenommen wird. Für $\theta \geq 3 \text{ ML}$ erscheint erneut ein magnetischer Kontrast, der aber geringer ist als für den Fall $\theta \leq 0.2 \text{ ML}$. Ursächlich ist wahrscheinlich eine leichte Verkippung der magnetischen Momente aus einer 90°-Kopplung der Fe-Deckschicht zum Cr-

Substrat. Im Anschluss erfolgen Magnetkraftmikroskop- (MKM) Messungen an Fe-Filmen auf der Cr(001)-Oberfläche. Sie zeigen, dass bei Bedeckungen von $\theta = 4, 8$ und 12 ML die Fe-Filme eine Domänenstruktur aufweisen, die von der Terrassenbreite des darunter liegenden Substrates abhängt. Bei 16 ML dicken Fe-Filmen wurde ein konstantes magnetisches Signal detektiert, was auf einen eindomänigen Zustand oder aber auf Domänengrößen weitaus größer als die maximale Rasterfläche hindeutet.

Abstract

Spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy (SP-STM/SP-STs) are utilized firstly to investigate the Cr(001) surface and the effect of various defects on the magnetic structure at the surface. The usual magnetic structure is determined by the antiferromagnetic ordering of Cr leading to the topological antiferromagnetism of the (001) surface. We found that screw dislocations result in the formation of domain walls with a width of 120-170 nm. The dependence of the domain wall width on the distance from the screw dislocation is studied experimentally and compared to micromagnetic simulations. Our results show that the size and shape of the spin structure is determined by two parameters, the exchange stiffness and the effective anisotropy. Subsurface step dislocations lead to a s-like bending of step edges on the sample surface. In spite of the step bending the topological antiferromagnetic order is strictly maintained. In some rare cases large scale images show a change of the spin-polarized part of the tunneling current. It is explained by the fourfold symmetry of the Cr(001) surface which leads to a 90° degeneracy and the formation of according domains.

Secondly SP-STM is applied to study the growth of Fe on Cr(001) as well as the electronic and magnetic structure in dependence of the Fe coverage. Topographic measurements show an almost perfect layer-by-layer growth except for the coverage range $1.48 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$ where the second and the third layer grow simultaneously. By high-temperature annealing alloying between the Cr substrate and the Fe film is provoked. Scanning tunneling spectroscopy (STS) shows that the electronic structure of the resulting $c(2 \times 2)$ -ordered Fe/Cr alloy is governed by a double peaked dI/dU spectrum with maxima at $U = -0.3 \text{ V}$ and $U = +0.15 \text{ V}$. A time-dependent STS investigation of Fe/Cr(001) reveals that the interface is structurally unstable against alloying. While the spectra are dominated by a single d_{z^2} -like surface state at the day of preparation a double-peak spectrum indicating the presence of a Fe/Cr alloy was found one day after preparation. Spin-resolved measurements show that at small coverage ($\theta \leq 0.2 \text{ ML}$) the Fe islands couple antiferromagnetically to the underlying Cr(001) terraces. The magnetic contrast of the islands and the substrate starts to decrease for $\theta \geq 0.22 \text{ ML}$ and completely vanishes at $\theta \geq 0.4 \text{ ML}$. This observation is discussed in terms of a reduction of the Cr Néel-temperature due to interdiffusion of Fe into the interface-near region of the Cr substrate. For $\theta \geq 3 \text{ ML}$ a weak magnetic contrast reappears which is possibly caused by a spatial variation of the 90° -coupling between the Cr substrate and the Fe overlayer. At last magnetic force microscopy (MFM) measurements were performed to study the magnetic structure of Fe films on Cr(001) in dependance of the coverage. Fe films with 4 - 12 ML thickness exhibit a complex domain structure, which correlates with the terrace width of the underlying Cr(001) surface. A 16 ML Fe film leads to a constant magnetic signal, due to a single domain state or a domain size bigger than the scan area used.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	11
2	Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie	13
2.1	Elastischer eindimensionaler Tunneleffekt	13
2.2	Prinzip der Rastertunnelmikroskopie	15
2.3	Prinzip der Rastertunnelspektroskopie	18
2.4	Spinpolarisierte RTM/RTS	20
3	Experimenteller Aufbau	23
3.1	Ultrahochvakuum-System	23
3.1.1	Präparationskammer	23
3.1.2	Analysekammer	25
3.2	Spitzenpräparation	26
4	Die Cr(001)-Oberfläche	29
4.1	Präparation	32
4.2	Defektfreie Cr(001)-Oberfläche	34
4.3	Versetzungen	39
4.3.1	Schraubenversetzungen	41
4.3.2	Stufenversetzungen	48
4.4	90°-Domänen	52
5	Fe-Filme auf Cr(001)	55
5.1	Präparation	56
5.2	SP-RTM am Fe/Cr(001)-System	58
5.2.1	Strukturelle Eigenschaften	58
5.2.2	Elektronische Eigenschaften	63
5.2.3	Magnetische Eigenschaften	67
5.2.4	Diskussion	72
5.3	MKM am Fe/Cr(001)-System	73
	Zusammenfassung	77
	Literaturverzeichnis	81
	Publikationen	85

Konferenzbeiträge	87
Vorträge	87
Poster	87

Akronyme

AES	Auger-Elektronen Spektroskopie
AFM	antiferromagnetisch
ARPES	Angular Resolved Photoelectron Spectroscopy
BLS	Brillouin Light Scattering = Brillouin-Licht-Streuung
CCM	Constant Currant Mode = Konstant-Strom Modus
CDW	Charge Density Wave = Ladungs-Dichte-Welle
CHM	Constant Hight Mode = Konstante-Höhe Modus
DOS	Density of State = Zustandsdichte
FLAPW	Full Potential Linearized Augmented Plane Wave
FM	ferromagnetisch
FWHM	full width half maximum = volle Halbwertsbreite
GMR	Giant Magneto Resistance
i.A.	im Allgemeinen
IMPF	inelastic mean free path = inelastische mittlere freie Weglänge
LDOS	Local Density of State = Lokale Zustandsdichte
LEED	Low Energy Electron Diffraction = Niederenergie-Elektronenbeugung
MKM	Magnetkraftmikroskop, -mikroskopie
ML	Monolage = eine atomare Lage
MOKE	Magneto-optischer Kerreffekt
RT	Raumtemperatur $\approx 20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$
RTM	Rastertunnelmikroskop, -mikroskopie
RTS	Rastertunnelspektroskopie
SEMPA	Scanning Electron Microscopy with Polarization-Analysis = Rasterelektronenmikroskopie mit Polarisationsanalyse
SP-RTM	spinpolarisierte RTM
SP-RTS	spinpolarisierte RTS
SDW	Spin Density Wave = Spin-Dichte-Welle
t-SDW	transversale SDW
l-SDW	longitudinale SDW
UHV	Ultrahochvakuum ($< 10^{-9}\text{ mbar}$)

Kapitel 1

Einleitung

Die „Nano“-Technik gewinnt in der heutigen Informations- und Kommunikationsgesellschaft immer mehr an Bedeutung. Wie schon die Herkunft des Wortes *Nano* andeutet — es stammt von dem griechischen Wort *nanos* (Zwerg) ab — steht es für die Entwicklung zu immer kleineren Strukturen.

So werden in der Medizin *Nano*-Partikel erforscht, die bei der Krebsbehandlung eingesetzt werden sollen, um gezielt das Geschwür anzugreifen ohne gesundes Gewebe zu beschädigen. Die Herstellung von Halbleiterchips erfolgt aktuell in der 90 nm (*Nano*-Meter-)¹ Technik. Dabei ermöglicht oft erst die Entdeckung neuer physikalischer Phänomene den Schritt in die *Nano*-Welt. Bekannte Beispiele sind die Zwischenlagen-Austauschkopplung [1] und der Riesenmagnetowiderstand [2] (engl.: *giant magneto resistance* (GMR)), die die Grundsteine der Entwicklung zu immer höheren Speicherdichten bei magnetischen Speichermedien bilden. So werden heute schon Speicherdichten bis zu 100 *Gigabits/in*² erzielt,² was einer Bitgröße von etwa 6452 *nm*² entspricht.

Diese stetige Miniaturisierung, d.h. die Herstellung von *Nano*-Strukturen, die durch den Fortschritt der Vakuumtechnik und der Präparationsverfahren erst möglich wurde, führt zu einer Vielzahl neuer magnetischer Phänomene [3], die einen Schwerpunkt in der Grundlagenforschung bilden. Die laterale Skala, auf der die Untersuchungen erfolgen, und das Ziel einer umfassenden Charakterisierung, d.h. die Wechselbeziehung von strukturellen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften, stellen hohe Anforderungen an die Messmethoden dar. Die von BINNIG und ROHRER 1982 entwickelte Rastertunnelmikroskopie [4] (RTM) bietet die benötigte laterale Auflösung bis hin zu einzelnen Atomen. Der dabei verwendete Aufbau eignet sich auch für die Rastertunnelspektroskopie (RTS), die eine Analyse der elektronischen Eigenschaften erlaubt. Der Bereich der magnetischen Eigenschaften ist der konventionellen RTM/RTS aber nicht zugänglich, so dass eine direkte Korrelation der strukturellen, lokalen elektronischen und magnetischen Eigenschaften nicht erfolgen kann. Erst die Weiterentwicklung zur spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie (SP-RTM) liefert die nötige magnetische Sensitivität bis hin zur atomaren Skala [5]. Im Gegensatz zur RTM werden bei der SP-RTM Spitzenmaterialien mit einer von Null verschiedenen Spinpolarisation verwendet. Der gemessene Tunnelstrom hängt dann u.a. von der Spinpolarisation und der Magnetisierungsrichtung der Oberfläche ab. Die Sensitivität auf den Spin ermöglicht wiederum erst die Abbildung

¹1 *nm* = 10⁻⁹ m

²1 *inch* = 2.54 *cm*

einer Domänenstruktur.

Der Nachweis des spinpolarisierten Vakuum-Tunnelns mit dem RTM erfolgte durch Wiesendanger *et al.* [6]. Dabei diente ferromagnetisches CrO_2 als magnetische Sonde, die mittels eines komplexen Präparationsverfahrens hergestellt wurde. Basierend auf den Arbeiten von Bode *et al.* [7] konnte die SP-RTM zu einer routinemäßig eingesetzten Messtechnik weiterentwickelt werden. Der Wechsel zu W-Spitzen, auf die ferro- oder antiferromagnetische dünne Filme aufgedampft wurden, war dabei von Vorteil. Für die magnetischen Studien der Cr(001)-Oberfläche und des Fe/Cr(001)-Systems wurde die Präparationsmethode der Dünnschichtbeschichtung verwendet, um spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie im Ultrahochvakuum (UHV) bei Raumtemperatur (RT) zu betreiben. Nach einer kurzen Einführung in die Theorie der Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie (RTM/RTS) in Kapitel 2, erfolgt in Kapitel 3 eine Darstellung des experimentellen Aufbaus und eine detaillierte Erläuterung der Präparationsmethoden für die Spitzen und die Proben. Den ersten Schwerpunkt der Untersuchungen bildet die Cr(001)-Oberfläche (s. Kapitel 4). Auf Grund ihrer magnetischen Struktur, die durch das Modell des topologischen Antiferromagnetismus beschrieben wird [8], bietet sie eine exzellente Möglichkeit, die SP-RTM, d.h. ihre hohe laterale Auflösung gepaart mit der magnetischen Sensitivität, bei RT zu testen. Nach der Untersuchung der ungestörten Cr(001)-Oberfläche wird der Einfluss struktureller Defekte auf die magnetische Struktur untersucht. Von besonderem Interesse ist hier die Schraubenversetzung, weil sie zur Bildung einer Domänenwand in einem Antiferromagneten führt. Anhand von Detailuntersuchungen der Domänenwände werden dann Rückschlüsse auf die Materialparameter gezogen, die die Domänenwandbreite bestimmen. In Kapitel 5 erfolgt eine Charakterisierung des Fe/Cr(001)-Systems in Abhängigkeit der Fe-Bedeckung. Im ersten Teil wird das Wachstum von Fe auf der Cr(001)-Oberfläche bis Bedeckungen $\theta = 3.2$ Monolagen (ML) untersucht. Es finden sich erste Hinweise auf eine Instabilität des Fe-Filmes, die zur Durchmischung an der Grenzschicht führt. Bestätigt wird dies durch spingemittelte Studien der elektronischen Eigenschaften mittels RTS. Die Abhängigkeit der magnetischen Struktur von der Fe-Bedeckung und ein möglicher Einfluss der Durchmischung werden im Anschluss diskutiert.

Als Ergänzung zu den SP-RTM-Studien erfolgt zum Abschluss ein Vergleich der SP-RTM-Daten mit Daten aus Magnetkraftmikroskopie- (MKM) Messungen an Fe-Filmen auf der Cr(001)-Oberfläche mit Filmdicken von 4, 8, 12 und 16 ML.

Kapitel 2

Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie

Die Rastertunnelmikroskopie liefert fantastische Einsichten bis hin zu atomaren Strukturen. Dabei wird ein quantenmechanischer Effekt, der Tunneleffekt, ausgenutzt. Zwischen einer leitenden (metallischen) Spitze, meistens bestehend aus Wolfram oder PtIr, und der zu untersuchenden Probe wird eine Spannung, im weiteren Bias-Spannung genannt, angelegt und die Spitze dann so nahe an die Probenoberfläche geführt, bis ein Tunnelstrom fließt. Da es keinen mechanischen Kontakt zwischen der Spitze und der Probe gibt, kann die klassische Physik dies nicht erklären. Die Quantenmechanik bietet für dieses Phänomen eine relativ einfache Erklärung. Im Folgenden wird stufenweise die Arbeitsmethode der Rastertunnelmikroskopie erläutert, angefangen vom eindimensionalen Tunnelprozess bis hin zur spinpolarisierten Rastertunnelspektroskopie.

2.1 Elastischer eindimensionaler Tunneleffekt

Als Einstieg, um das Prinzip der RTM zu verstehen und zu erklären, erläutere ich den Tunneleffekt in einer Dimension, wie er in zahlreichen Lehrbüchern der Quantenmechanik behandelt wird. Dazu betrachtet man den Fall der eindimensionalen Potentialbarriere der Höhe V_0 und der Breite S , wie er in Abb. 2.1 dargestellt ist. Ein Teilchen mit der Gesamtenergie $E < V_0$ soll von links einfallen.

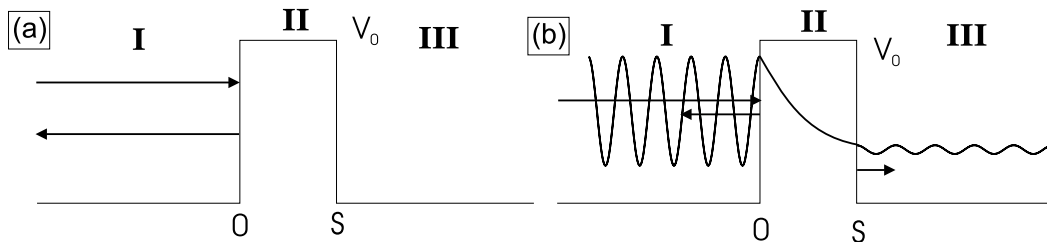


Abbildung 2.1: Eindimensionaler Tunneleffekt. (a) Ein Teilchen mit der Gesamtenergie $E < V_0$ wird im Rahmen der klassischen Physik an der Potentialbarriere reflektiert. (b) Quantenmechanisch wird das Teilchen durch eine Wellenfunktion ψ beschrieben und besitzt immer eine endliche Wahrscheinlichkeit, die Barriere zu durchdringen.

Im Rahmen der klassischen Physik (s. Abb. 2.1 (a)) reicht die Energie des Teilchens nicht aus, um die Potentialbarriere zu überwinden, was dazu führt, dass es elastisch an ihr reflektiert wird. In der Quantenmechanik wird das Teilchen durch eine Wellenfunktion $\psi(z)$ beschrieben. Es besitzt eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Potentialbarriere, womit ein Durchdringen nicht prinzipiell ausgeschlossen ist. Die Wellenfunktion des Teilchens $\psi(z)$ muss dabei der (zeitunabhängigen) Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right) \psi_1(z) = E \psi_1(z) \quad (2.1)$$

genügen, wobei für $V(z)$ gilt:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ V_0 & 0 < z < s \\ 0 & z > s \end{cases} \quad (2.2)$$

Es können also drei Bereiche unterschieden werden: Region **I** ($z < 0$), Region **II** ($0 < z < s$) und Region **III** ($s < z$).

In den Regionen **I** und **III** lauten die Wellenfunktionen

$$\text{Region I: } \psi_1(z) = A \cdot e^{ikz} + B \cdot e^{-ikz} \quad (2.3)$$

$$\text{Region III: } \psi_3(z) = E \cdot e^{ikz} + F \cdot e^{-ikz} \quad (2.4)$$

mit

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar} \quad (2.5)$$

und entsprechen der eines freien Teilchens. Innerhalb der Barriere (Region **II**) ist $V(z) = V_0$ und es gilt:

$$\psi_2(z) = C \cdot e^{\kappa z} + D \cdot e^{-\kappa z} \quad (2.6)$$

mit

$$-\kappa^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar}. \quad (2.7)$$

Da das Teilchen von links einfallen soll, hat man in Region **I** eine Überlagerung einer einfallenden und einer bei $z = 0$ reflektierten Welle. In der Region **II** wird die Wellenfunktion exponentiell gedämpft, aber hat bei $z = s$ immer noch eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit. In Region **III** bewegt sich das Teilchen nach rechts ohne reflektiert zu werden, so dass $F = 0$ gesetzt werden kann. Auf Grund der Nebenbedingung der Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung an den Diskontinuitäten des Potentials $V(z)$ (bei $z = 0$ und $z = s$) (wave-matching method) erhält man einen Satz von vier Gleichungen, die es erlauben, die Werte der Koeffizienten B, C, D und E durch Anteile von A auszudrücken. A kann zur Normierung der Wellenfunktion genutzt werden. Von Interesse ist die Transmissionswahrscheinlichkeit (T) des Teilchens, die durch den Quotienten der einfallenden und der transmittierten Stromdichte

$$T = \frac{j_T}{j_0} \quad (2.8)$$

gegeben ist. Mit

$$j_T = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\psi_3^*(z) \frac{d\psi_3(z)}{dz} - \psi_3(z) \frac{d\psi_3^*(z)}{dz} \right) = \frac{\hbar k}{m} |D|^2 \quad (2.9)$$

und

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} \quad (2.10)$$

erhält man den exakten Ausdruck für T:

$$T = \frac{j_T}{j_0} = |D|^2 = \frac{1}{1 + (k^2 + \kappa^2)^2 / 4k^2 \kappa^2 \sinh^2(\kappa s)}. \quad (2.11)$$

Die Gleichung 2.11 wird durch Annäherung an das Limit $\kappa s \gg 1$ vereinfacht. Für T erhält man in erster Näherung

$$T \approx 16 \frac{k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \exp(-2\kappa s) \quad (2.12)$$

mit einer inversen Abklinglänge $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

In dieser Darstellung ist sehr gut zu erkennen, dass der Faktor $\exp(-2\kappa s)$ den Hauptanteil an der Tunnelwahrscheinlichkeit liefert, mit dem entscheidenden Ergebnis, dass eine exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms von der Barrierenbreite s und der effektiven Barrierenhöhe $V_0 - E$ vorliegt. Die genaue Form der Barriere bleibt unberücksichtigt. Unter Annahme typischer Tunnelparameter ($V_0 - E = 4$ eV, $s = 5$ Å) führt die Verbreiterung der Tunnelbarriere s um 1 Å, entsprechend einer Änderung des Spitzen-Proben-Abstandes, zu einer Verringerung des Tunnelstroms um etwa eine Größenordnung. Genau diese extreme Abhängigkeit von der Tunnelbarriere erlaubt es, Strukturen einer Probe bis hin zur atomaren Auflösung abzubilden.

2.2 Prinzip der Rastertunnelmikroskopie

In der Rastertunnelmikroskopie wird, wie zu Beginn erläutert, eine metallische Spitze sehr nahe an eine Probe gefahren. Typische Abstände für einen Tunnelkontakt sind einige Å.¹ Die Annäherung wird mittels piezoelektrischer Stillelemente bewerkstelligt, die es ermöglichen, die Spitze in einer Rasterbewegung (x,y) über die Probe zu führen. Man unterscheidet zwei Betriebsarten (Modi): den *Konstant-Strom-Modus* (engl.: *constant current mode* (CCM)) und den *Konstante-Höhe-Modus* (engl.: *constant height mode* (CHM)). Im Rahmen dieser Arbeit wurde der *Konstant-Strom-Modus* benutzt.

Bevor auf die Deutung der dabei gewonnenen Daten eingegangen wird, ist eine realistischere Beschreibung des Tunnelprozesses erforderlich. Diese erfordert die Erweiterung auf drei Dimensionen, wie sie schon 1961 von Bardeen [9] für einen Metall-Oxid-Metall Tunnelprozess vorgeschlagen wurde. Bardeen nahm an, dass die metallischen Elektroden ein schwach wechselwirkendes System darstellen, bei dem der Tunnelprozess durch den Überlapp ihrer Wellenfunktion in der Oxidschicht ermöglicht wird. Mittels der zeitabhängigen Störungstheorie entwickelte er einen Ausdruck für den Tunnelstrom.

¹1 Å = 10^{-10} m

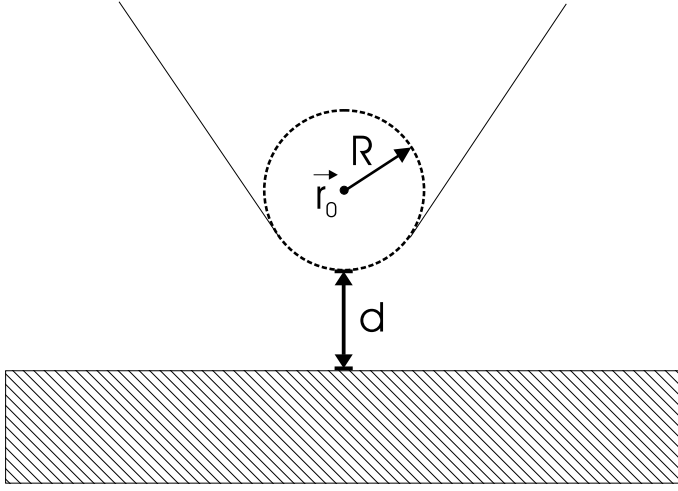


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Tunnelgeometrie im Rahmen des Tersoff-Hamann-Modells: i.A. hat die Sonde eine beliebige Form, nur am äußeren Ende, im Abstand d zur Oberfläche, ist sie sphärisch geformt, mit einem Krümmungsradius von R .

Diesen erweiterten Tersoff und Hamann [10, 11] auf den Metall–Vakuum–Metall Tunnelprozess, wie er in der RTM vorliegt. Mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie erster Ordnung erhielten sie für den Tunnelstrom folgenden Ausdruck :

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \cdot \sum_{\mu, \nu} f(E_\mu) [1 - f(E_\nu + eU)] \cdot |M_{\mu\nu}|^2 \cdot \delta(E_\mu - E_\nu). \quad (2.13)$$

Der Term $f(E)$ beschreibt die Fermi-Funktion, U die angelegte Bias-Spannung zwischen Spitze und Probe, $M_{\mu\nu}$ das Matrixelement der Übergänge zwischen Oberflächenzuständen ψ_ν und Spitzenzuständen ψ_μ und E_μ die Energie des ungestörten Zustandes ψ_μ . Durch die Delta-funktion soll gewährleistet sein, dass nur elastische Tunnelprozesse berücksichtigt werden. Im Bereich geringer Spannungen und tiefer Temperaturen kommt man zu

$$I = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 U \cdot \sum_{\mu, \nu} |M_{\mu\nu}|^2 \cdot \delta(E_\nu - E_F) \cdot \delta(E_\mu - E_F). \quad (2.14)$$

Um erste allgemeine Aussagen über die Wirkungsweise der RTM zu machen, bietet es sich, an die Spitzengeometrie auf eine punktförmige Sonde zu reduzieren. Wenn die Wellenfunktion der Spitze beliebig lokalisiert ist, ist das Matrixelement $M_{\mu\nu}$ proportional zur Amplitude von ψ_ν an der Spitzenposition $\vec{r}_0$, wodurch sich die Gleichung 2.14 auf

$$I \propto \sum_{\nu} |\psi_\nu(\vec{r}_0)|^2 \cdot \delta(E_\nu - E_F). \quad (2.15)$$

reduziert. Dabei beschreibt die Summe die lokale Zustandsdichte (engl.: *local density of states* (LDOS)) der Oberfläche, d.h. die Ladungsdichte der Zustände am Fermi-niveau E_F . Somit ist der Tunnelstrom proportional zur LDOS der Oberfläche an der Position der punktförmigen Sonde, wodurch die mikroskopischen Bilder als Flächen konstanter LDOS der Oberfläche interpretiert werden können. Eine allgemeinere Lösung der Gleichung 2.14 basiert auf der Berechnung des Tunnelmatrixelementes $M_{\mu\nu}$. Wie Bardeen [9] gezeigt hat, wird das Matrixelement beschrieben durch

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \int d\vec{S} \cdot (\psi_\mu^* \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu \vec{\nabla} \psi_\mu^*). \quad (2.16)$$

Die Integration erfolgt über eine beliebige Fläche innerhalb der Vakuumbarriere. Eine exakte Lösung von Gleichung 2.16 erfordert jedoch genaue Kenntnisse der Energien, der Wellenfunktionen und somit der atomaren Struktur der Spitze und der Probe. Da die Spitzengeometrie in der Regel unbekannt ist, führten Tersoff und Hamann folgendes vereinfachtes Modell der Spitze ein (s. Abb. 2.2). Die Spitze hat i.A. eine beliebige Form, ist jedoch näherungsweise sphärisch symmetrisch am vordersten Ende. Der Krümmungsradius ist durch R gegeben und der minimale Abstand zwischen Spitze und Probe beträgt d . Unter ausschließlicher Berücksichtigung s -artiger elektronischer Zustände ($l = 0$) in der Spitze und identischen Austrittsarbeiten ϕ von Spitze und Probe, berechneten sie folgende Abhängigkeiten für den Tunnelstrom

$$I \propto e^2 U \rho_{\text{Spitze}}(E_F) e^{2\kappa R} \cdot \sum_{\nu} |\psi_{\nu}(\vec{r}_0)|^2 \cdot \delta(E_{\nu} - E_F). \quad (2.17)$$

Dabei ist ρ_{Spitze} die Zustandsdichte der Spitze pro Einheitsvolumen, $\kappa = \sqrt{2m\phi}/\hbar$ die inverse Abklinglänge und $\vec{r}_0$ der Mittelpunkt des Krümmungsradius. Die Summe beschreibt die Zustandsdichte der Probe am Fermi-Niveau am Ort der Spitze $\vec{r}_0$ und ist identisch mit der in Gleichung 2.15:

$$\sum_{\nu} |\psi_{\nu}(\vec{r}_0)|^2 \cdot \delta(E_{\nu} - E_F) = \rho_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F). \quad (2.18)$$

Da die Wellenfunktion der Oberfläche im Vakuum exponentiell abklingt und die Flächennormale der z -Richtung entspricht, gilt:

$$|\psi_{\nu}(\vec{r}_0)|^2 \propto e^{-2\kappa z}. \quad (2.19)$$

Am Ort der Spitze $\vec{r}_0$ ist $z = R + d$ und man erhält mit Gleichung 2.17 folgende Beziehung für den Tunnelstrom:

$$I \propto U \cdot e^{-2\kappa d}. \quad (2.20)$$

Somit stellt der Spitze-Probe-Abstand, wie schon im Falle des eindimensionalen Tunnelprozesses, die entscheidende exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms dar.

Unter Ausnutzung dieser exponentiellen Abhängigkeit wird im *Constant Current Mode* die Höhe der Spitze mittels einer Regelschleife variiert, so dass der Wert für den Tunnelstrom konstant bleibt. Trägt man die Werte für die Höhenposition der Spitze als Funktion der lateralen Spitzenposition (x, y) auf, bekommt man eine Karte konstanten Tunnelstroms, die nach Gleichung 2.20 einer Karte der konstanten LDOS der Oberfläche entspricht. Bei einer chemisch homogenen Probe folgt die LDOS der Oberfläche in erster Näherung der Oberflächenstruktur (Stufen, Versetzungen, Defekte etc.). Daher können die gemessenen Bilder als *Topographie* der Probenoberfläche interpretiert werden. Diese einfache Interpretation der Messdaten ist aber nur im Rahmen bestimmter Randbedingungen gültig (z.B. geringe Spitze-Probe-Wechselwirkung, s -artige Spitzenzustände mit $l = 0$, kleine Spannungen $U \ll \phi$, elastisches Tunneln etc.). Bei chemisch inhomogenen Proben offenbart sich jedoch die Grenze der topographischen Interpretation der RTM-Daten. Durch z.B. Verunreinigungen, Durchmischung oder eine Variation der örtlichen Bedeckung bei dünnen Filmen kommt es zu einer lokalen Modifikation der elektronischen Struktur, die i.A. nicht als eine Höhenvariation der Probenoberfläche gedeutet werden kann. So weisen chemisch unterschiedliche Stoffe auch

verschiedene Austrittsarbeiten auf. Bestimmte Adsorbate, z.B. O auf Fe, verursachen eine Verringerung der LDOS der Oberfläche und erscheinen dabei als eine vermeintliche Vertiefung in der Topographie, obwohl sie sich auf der Oberfläche befinden. Einen ähnlichen Effekt können auch durchmischte Gebiete (z.B. Fe/Cr(001)-Gemische) auslösen.

Ein weiteres Defizit dieses Modells ist, dass es die atomare Auflösung, die mit dem RTM auf verschiedensten Oberflächen erzielt werden kann, unter Annahme realistischer Tunnelparameter (s. Abb. 2.2 Tunnelabstand $d + R = 15 \text{ \AA}$ und Krümmungsradius $R = 9 \text{ \AA}$) nicht erklären kann. Dieses Defizit des Modells konnte durch Chen [12] behoben werden, indem er keine reinen s -artigen Spitzenzustände mehr annahm. Da Standard-Tunnelspitzen meistens aus W bestehen, bei dem das d -Band am Fermi-Niveau 85% zur LDOS beiträgt, führte er lokalisierte Spitzenzustände ein, die in das Vakuum hinaus ragen. Für d_{z^2} -artige Spitzenzustände konnte er zeigen, dass hier das letzte Atom an der Spitze sensitiv auf die zweite Ableitung der Oberflächenwellenfunktion der Probe ist. Beim Rastern über die Probe liefert es daher schärfere atomare Korrelationen, als die LDOS am Fermi-Niveau besitzt.

2.3 Prinzip der Rastertunnelspektroskopie

Die RTM nutzt die LDOS der Oberfläche, um indirekt strukturelle Informationen des zu untersuchenden Systems zu gewinnen. In der RTS hingegen ist sie das eigentliche Untersuchungsobjekt. Um die lokalen elektronischen Eigenschaften einer Probe zu charakterisieren, betrachtet man bei der RTS das Verhalten des Tunnelstroms in Abhängigkeit von der angelegten Spannung.

Im Rahmen kleiner Bias-Spannungen (U im mV-Bereich) erhält man nach Tersoff und Hamann, wie aus Gleichung 2.20 ersichtlich, eine lineare Abhängigkeit des Tunnelstroms von der angelegten Spannung U . RTS-Messungen erfolgen aber meistens über ein größeres Spannungsintervall (z.B. $\pm 1 \text{ V}$). Die Abweichung von kleinen Spannungen ($U \ll \phi$) führt i.A. dazu, dass die Wellenfunktionen der Spitze ψ_μ und der Probenoberfläche ψ_ν gestört und ihre Energie-Eigenwerte modifiziert sind. Wie in Ref. [13] beschrieben, können jedoch in der Regel folgende Vereinfachungen vorgenommen werden: ausgehend von ungestörten Wellenfunktionen (bei $U = 0 \text{ V}$), modelliert man den Einfluss einer endlichen Spannung in einer ersten Näherung dadurch, dass die Fermi-Niveaus beider Wellenfunktionen relativ zueinander eine Verschiebung um den Betrag $|eU|$ erfahren. Die eigentliche Struktur der LDOS der Proben- und Spitzenoberfläche bleibt dabei erhalten und wird im Ganzen mit den Fermi-Niveaus verschoben. In Abb. 2.3 ist ein eindimensionales Schema dieses Modells dargestellt.

Die Ausgangssituation — Spitze und Probe befinden sich in genügend großem Abstand und sind wechselwirkungsfrei — ist in Abb. 2.3 (a) zu sehen. Es liegen weiterhin unterschiedliche Austrittsarbeiten ϕ_{Probe} und ϕ_{Spitze} vor. Befinden sich die Spitze und die Probe im Tunnelkontakt, so fließt so lange ein Tunnelstrom, bis sich die Fermi-Niveaus angeglichen haben (s. Abb. 2.3 (b)). Eine endliche Bias-Spannung an Spitze und Probe verschiebt die Fermi-Niveaus relativ zueinander. Bei einer positiven Probenspannung — das Fermi-Niveau der Spitze liegt höher als das der Probe — fließt ein Netto-Tunnelstrom zur Probe (s. Abb. 2.3 (c)). Im Falle einer negativen Probenspannung (s. Abb. 2.3 (d)) — das Fermi-Niveau der Probe liegt höher als das der Spitze — fließt ein Netto-Tunnelstrom zur Spitze. Unter Annahme einer strukturlosen Zustandsdichte (engl.: *density of states* (DOS)) der Spitze werden je nach Polarität der angelegten Spannung einmal die besetzten (negatives U) und einmal die unbesetzten (posi-

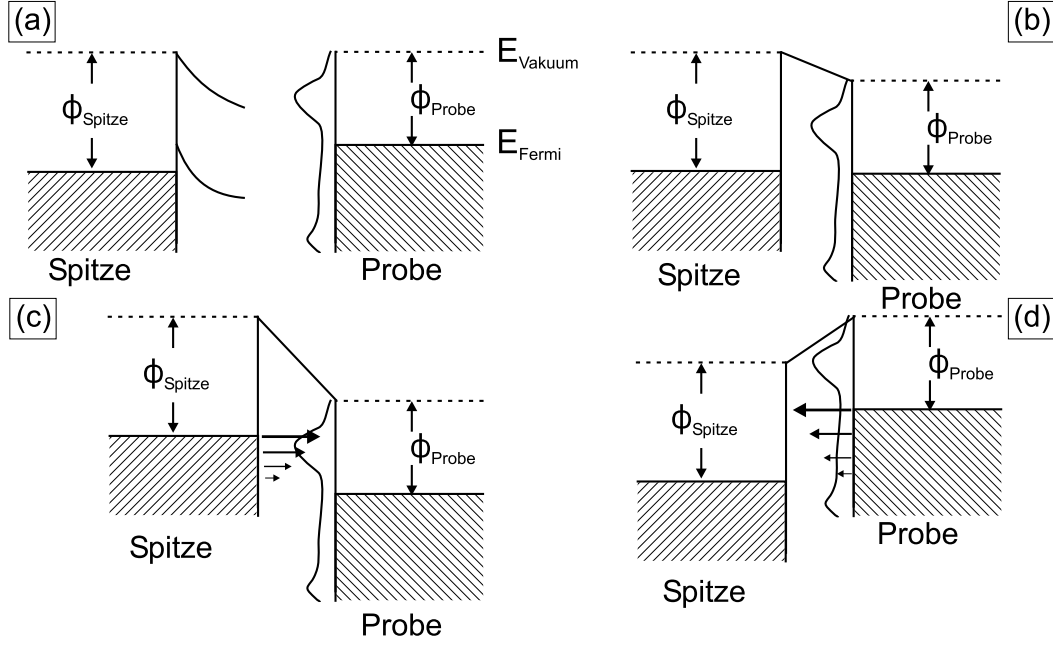


Abbildung 2.3: Energiediagramm des Tunnelübergangs. (a) Probe und Spitze sind in großer Entfernung wechselwirkungsfrei. (b) Bei der Annäherung fließt ein Tunnelstrom bis sich die Fermi-Niveaus angeglichen haben. (c) Bei positiver Probenspannung tunneln Elektronen von der Spitze zur Probe. (d) Bei negativer Probenspannung tunneln Elektronen von der Probe zur Spitze. (Abbildung nach [14])

tives U) Zustände der Probe detektiert. Im Rahmen der vorher gemachten Vereinfachungen erhält man

$$I \propto \int_0^{eU} \rho_{\text{Probe}}(\varepsilon) \cdot \rho_{\text{Spitze}}(\pm eU \mp \varepsilon) T(\varepsilon, eU) d\varepsilon. \quad (2.21)$$

Dabei wird die Energie- und Spannungsabhängigkeit in den Transmissionskoeffizienten $T(\varepsilon, eU)$ einbezogen. Im Rahmen der WKB-Näherung [13] entspricht er

$$T(\varepsilon, eU) = \exp \left\{ -2 d \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\phi_{\text{Probe}} + \phi_{\text{Spitze}}}{2} + \frac{eU}{2} - \varepsilon \right)} \right\}. \quad (2.22)$$

Die Ableitung der Gleichung 2.21 nach der Spannung liefert die LDOS der Probenoberfläche. Nimmt man $\rho_{\text{Spitze}} = \text{konstant}$ an, so gilt

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dU}(U) &\propto \rho_{\text{Spitze}}(0) \rho_{\text{Probe}}(eU) T(eU) \\ &+ \int_0^{eU} \rho_{\text{Probe}}(\varepsilon) \rho_{\text{Spitze}}(\pm eU \mp \varepsilon) \frac{dT(\varepsilon, eU)}{dU} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Der erste Term (obere Zeile) in Gleichung 2.23 beschreibt die gesuchte LDOS der Probenoberfläche, der zweite (das Integral) die Spannungsabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten. Diese Spannungsabhängigkeit ist in Abb. 2.3 durch die verschiedenen großen Pfeile angedeutet. Elektronen, die aus Zuständen nahe dem Fermi-Niveau (der negativen Elektrode) tunneln, tragen am meisten zum Gesamt-Tunnelstrom bei, weil sie die geringste effektive Potential-Barriere durchdringen müssen. Daher nimmt mit steigender Bias-Spannung auch der Transmissionskoeffizient stetig und monoton zu und ist als „Hintergrund“ in dem Spektrum zu erkennen, auf dem das eigentliche Signal der LDOS eingebettet ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde folgender Spektroskopiemodus genutzt: nach der Messung der Topographie wird die Spitze bei einer voreingestellten Bias-Spannung und einem Soll-Tunnelstrom stabilisiert. Typische Regelungsparameter sind $U = 1\text{ V}$ oder $U = 0.7\text{ V}$ und $I = 400\text{ pA}$. Anschließend wird die Regelschleife abgeschaltet und die $I(U)$ Kennlinie aufgenommen, indem der gewünschte Spannungsbereich (z.B. $\pm 1\text{ V}$) bei gleichzeitiger Messung des Tunnelstroms durchgefahren wird. Deren numerische Ableitung (dI/dU) ist ein Maß für die LDOS der Oberfläche. Damit ist es möglich, auch Strukturen nahe des Fermi-Niveaus ($U = 0\text{ V}$) zu detektieren, z.B. können so Zustände in den Bandlücken von Halbleitern gemessen werden. Der Nachteil ist, dass das Signal-Rausch-Verhältnis in diesem Bereich mit abnehmendem U immer schlechter wird. Eine Verbesserung erfolgt durch Überlagerung der eigentlichen Bias-Spannung mit einer hochfrequenten, sinusartigen Modulations-Spannung. Die Frequenz dieser Modulations-Spannung wird so gewählt, dass die Regelschleife ihr nicht mehr folgen kann und somit immer noch auf den eigentlichen Tunnelwiderstand regelt. Zu den ersten beiden Kanälen (Topographie und $I(U)$) wird mittels Lock-In Technik das phasen- und frequenzspezifisch verstärkte Signal des Tunnelstroms (das lokale dI/dU -Signal) aufgezeichnet und das Rauschen, das der Modulation und der Phase nicht folgt, herausgefiltert. Nach Durchfahren der Spannungsrampe wird die Regelschleife wieder eingeschaltet und die Spitze zum nächsten Punkt bewegt, an dem wieder die gleiche Prozedur durchgeführt wird. So erhält man bei festgewählten Energien simultan zur „Topographie“ Karten der differentiellen Leitfähigkeit für verschiedene Energiewerte.

2.4 Spinpolarisierte RTM/RTS

Bei den bisher beschriebenen Konzepten der RTM und RTS wurde der Spin der Tunnelelektronen vernachlässigt. Das Ziel dieser Arbeit ist es aber, neben den strukturellen und elektronischen Charakteristika auch die magnetischen Eigenschaften eines Probensystems zu untersuchen. Dafür muss die Messmethode sensitiv auf den Spin der Tunnelelektronen sein. Da die Standard-Wolfram-Spitzen nur eine spingemittelte Messung ermöglichen, ist es nötig, modifizierte (magnetisch sensitive) Spitzen einzusetzen. Dazu gibt es verschiedene Konzepte, z.B. optisch gepumpte GaAs-Spitzen [15], supraleitende Spitzen mit einer Zeeman-aufgespaltenen Zustandsdichte [16] sowie ferromagnetische (z.B. Fe, Ni, Co) oder antiferromagnetische (z.B. Cr) Spitzen etc.. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Fe-beschichtete W-Spitzen eingesetzt.

Auf Grund der Austauschwechselwirkung kommt es bei Ferromagneten zu einer Aufspaltung der Bandstruktur in Majoritäts- ($\uparrow$) und Minoritätsbänder ($\downarrow$) mit unterschiedlichen energetischen Positionen bezüglich des Fermi-Niveaus. Eine Ungleichbesetzung dieser Zustände führt zu einer Nettomagnetisierung. Beim Tunnelprozess liefert die ungleiche Zahl von Spin $\uparrow$ - und Spin $\downarrow$ -Zuständen nahe der Fermikante für Spitze und Probe verschiedene

Tunnelströme für unterschiedliche relative Spin-Ausrichtungen. Folglich hängt der Tunnelstrom von der Magnetisierungsrichtung der Probe relativ zur Magnetisierungsrichtung der Spitze ab, wie es auch schon Julliere [17] für planare Tunnelübergänge zeigen konnte.

Nach Slonczewski [18] berechnet sich die Leitfähigkeit eines Ferromagnet-Isolator-Ferromagnet-Tunnelübergangs im Rahmen des Modells freier Elektronen im Grenzfall kleiner Spannungen zu:

$$\sigma = \sigma_{\text{fbf}}(1 + P_{\text{fbf}}^2 \cos(\theta)), \quad |P_{fbf}| \leq 1. \quad (2.24)$$

Dabei bezeichnet P_{fb} die effektive Polarisierung am Ferromagnet-Barriere-Übergang, σ_{fbf} die mittlere Leitfähigkeit und θ den Winkel zwischen der Magnetisierung der beiden identisch angenommenen Elektroden. Im Fall unterschiedlicher Ferromagnete lässt sich Gleichung 2.24 verallgemeinern zu:

$$\sigma = \sigma_{\text{fbf}'}(1 + P_{\text{fb}}P_{\text{f'b}} \cos(\theta)). \quad (2.25)$$

Miyazaki *et al.* [19] konnten an einem planaren Fe-Al₂O₃-Fe-Übergang die $\cos \theta$ -Abhängigkeit des Tunnelstroms sehr präzise experimentell nachweisen. In beiden Extrema, parallele ($\theta = 0^\circ$) bzw. antiparallele ($\theta = 180^\circ$) Orientierung der Magnetisierungen, erhält man folgende Maximal- bzw. Minimalwerte für die Leitfähigkeit:

$$\begin{aligned} \sigma_{\uparrow\uparrow} &= \sigma_{\text{fbf}'}(1 + P_{\text{fb}}P_{\text{f'b}}) \\ \sigma_{\uparrow\downarrow} &= \sigma_{\text{fbf}'}(1 - P_{\text{fb}}P_{\text{f'b}}), \end{aligned} \quad (2.26)$$

aus denen sich die effektive Polarisation des Tunnelübergangs bestimmen lässt:

$$P_{\text{fbf}'} \equiv P_{\text{fb}}P_{\text{f'b}} = \frac{\sigma_{\uparrow\uparrow} - \sigma_{\uparrow\downarrow}}{\sigma_{\uparrow\uparrow} + \sigma_{\uparrow\downarrow}}. \quad (2.27)$$

Wiesendanger *et al.* [6] konnten erstmals 1990 spinpolarisiertes Tunneln durch eine Vakuumbarriere nachweisen. Dazu untersuchten sie die Cr(001)-Oberfläche mit einer CrO₂-Spitze, deren Spinpolarisation bei nahe 100% liegt. Realistische Cr(001)-Oberflächen weisen dabei Terrassen auf, die vorzugsweise durch monoatomare Stufen getrennt sind. Nach Blügel *et al.* [8] ist jede Terrasse homogen magnetisiert, wobei benachbarte Terrassen eine entgegengesetzte Magnetisierung aufweisen. Beim Rastern der Spitze über die Terrassen bei konstantem Tunnelstrom ergab sich eine alternierende Variation der Stufenhöhe, wie in Abb. 2.4 gezeigt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass es je nach relativer Orientierung der Spitzen- und Probenmagnetisierung zu unterschiedlichen Tunnelströmen kommt, und somit der Regelkreis den Spitzen-Proben-Abstand variiert. In Kap. 4 wird im Detail auf die Cr(001)-Oberfläche eingegangen.

Die Weiterentwicklung des Tersoff-Hamann-Modells für magnetische Elektroden erfolgte durch Heinze *et al.* [20,21]. Die Zustandsdichte ρ_{Spitze} und Magnetisierung $\mathbf{m}_{\text{Spitze}}$ der Spitze sollen konstant sein und werden durch unterschiedlich besetzte Majoritäts- und Minoritätsbänder ($\rho_{\text{Spitze}}^{\uparrow} = \text{konst.}$ und $\rho_{\text{Spitze}}^{\downarrow} = \text{konst.}$, aber $\rho_{\text{Spitze}}^{\uparrow} \neq \rho_{\text{Spitze}}^{\downarrow}$) charakterisiert:

$$\rho_{\text{Spitze}} = \rho_{\text{Spitze}}^{\uparrow} + \rho_{\text{Spitze}}^{\downarrow}, \quad \text{und} \quad m_{\text{Spitze}} = \rho_{\text{Spitze}}^{\uparrow} - \rho_{\text{Spitze}}^{\downarrow}. \quad (2.28)$$

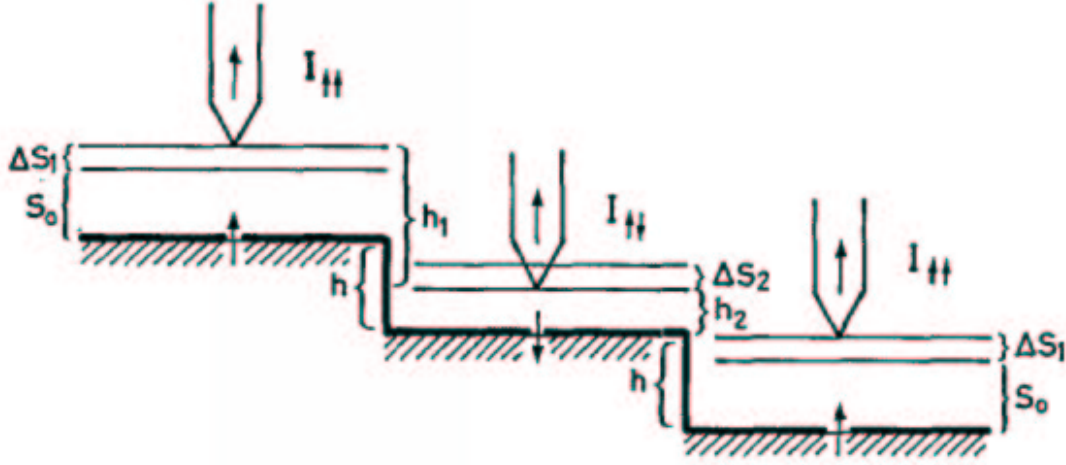


Abbildung 2.4: Nachweis des topologischen Antiferromagnetismus auf der Cr(001)-Oberfläche durch spinpolarisiertes Tunneln. Aufgrund des Spin-Ventil-Effektes ergibt sich über den einzelnen Terrassen abwechselnd hoher und niedriger Tunnelstrom. Da der Abstand der Spitze auf einen konstanten Strom hin reguliert wird, ergibt sich eine Variation der Stufenhöhe (entnommen aus [6]).

Im Grenzfall kleiner Bias-Spannungen, Temperaturen von $T = 0$ K und Spin-Erhaltung beim Tunnelprozess, ergibt sich für den Tunnelstrom am Ort der Spitze

$$I(\vec{r}_0, U, \theta) \propto \rho_{\text{Spitze}} \tilde{\rho}_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU) + \mathbf{m}_{\text{Spitze}} \tilde{\mathbf{m}}_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU), \quad (2.29)$$

wobei $\tilde{\rho}_{\text{Probe}}$ und $\tilde{\mathbf{m}}_{\text{Probe}}$ nicht mehr lokale, sondern über die Energie integrierte lokale Größen [20] sind. Gleichung 2.29 zeigt, dass der Tunnelstrom in einen unpolarisierten und einen polarisierten Anteil aufgeteilt werden kann. Der unpolarisierte Anteil hängt von der integrierten LDOS der Probe am Ort der Spitze ab, während der polarisierte Anteil durch die Projektion des Vektors der integrierten lokalen Spindichte der Probe auf die Magnetisierungsrichtung der Spitze bestimmt wird. Es bleibt zu beachten, dass $\tilde{\rho}_{\text{Probe}}$ oder der unpolarisierte Anteil am Tunnelstrom immer mit steigender Bias-Spannung zunimmt, während $\tilde{\mathbf{m}}_{\text{Probe}}$ oder der polarisierte Anteil dabei gleich bleiben kann.

Um auf den interessanten polarisierten Anteil des Tunnelstroms direkt sensitiv zu sein, wird mittels Lock-In Technik die differentielle Leitfähigkeit der Probe gemessen. Die differentielle Leitfähigkeit ergibt sich aus der Ableitung der Gleichung 2.29 zu:

$$dI/dU(\vec{r}_0, U, \theta) \propto \rho_{\text{Spitze}} \rho_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU) + \mathbf{m}_{\text{Spitze}} \mathbf{m}_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU). \quad (2.30)$$

Mit Gleichung 2.27 und 2.28 erhält man einen zu Gleichung 2.24 analogen Ausdruck für die differentielle Leitfähigkeit

$$dI/dU(\vec{r}_0, U, \theta) \propto \rho_{\text{Spitze}} \rho_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU) [1 + P_{\text{Spitze}} P_{\text{Probe}}(\vec{r}_0, E_F + eU) \cos(\theta(\vec{r}_0))], \quad (2.31)$$

in dem die Winkelabhängigkeit des polarisierten Anteils des Tunnelstroms deutlich wird.

Kapitel 3

Experimenteller Aufbau

Für die erfolgreiche Durchführung der Experimente musste das Messsystem speziellen Anforderungen genügen, die im folgenden Kapitel beschrieben werden. Im Anschluss erfolgt die Erläuterung der Präparationsroutine für die Spitzen, die einen entscheidenden Anteil an den erfolgreich durchgeführten spinaufgelösten RTM/RTS-Messungen hatte.

3.1 Ultrahochvakuum-System

Bei den durchgeführten Messungen geht es um die strukturellen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften zweier Probensysteme: (i) der reinen Cr(001)-Oberfläche und (ii) des Fe/Cr(001)-Systems. Eine Verunreinigung der Proben ist zu vermeiden, weil sonst die eigentlichen Charakteristika des sauberen Probensystems nicht mehr gegeben sind. Hierbei ist es nicht ausreichend, die Proben zu reinigen, sondern es muss auch sichergestellt werden, dass der Transfer zum Messsystem und die Messung selbst ohne signifikante Kontamination der Probe erfolgen. Dieses gewährleistet ein geschlossenes Ultrahochvakuum- (UHV) System. Mit einem Basisdruck von $< 1 \cdot 10^{-10}$ mbar ist es so möglich, die Proben zu reinigen/präparieren und sie anschließend über mehrere Stunden bis Tage ohne störende Kontamination zu untersuchen.

Die in dieser Arbeit beschriebenen Experimente wurden in einem kommerziell erhältlichen UHV-System der Firma Omicron [22] durchgeführt, bestehend aus zwei Haupteinheiten, einer Präparationskammer mit einer Schleuse und einer Analysekammer, die durch ein Ventil getrennt werden können. Die Schleuse besitzt ein eigenes Evakuierungssystem, um Proben und/oder Spitzen in das UHV-System einzuschleusen, ohne das gesamte System zu fluten. Am Hauptsystem sorgen eine Turbo- und eine vorgeschaltete Drehschieberpumpe für einen Druck von $< 1 \cdot 10^{-6}$ mbar. Zum Erreichen des Enddruckes $< 1 \cdot 10^{-10}$ mbar heizt man das gesamte System für ca. 24 Stunden auf 125°C und pumpt nach Abkühlen mit Titansublimations- und Ionengetterpumpen an beiden Hauptkammern weiter, um den Enddruck über die Zeit zu erhalten.

3.1.1 Präparationskammer

An der Präparationskammer befindet sich ein Probenmanipulator mit einer eingebauten **Widerstandsheizung**. Durch das indirekte Heizen erreicht man Probentemperaturen bis 900°C.

Die Bestimmung der Probentemperatur erfolgt indirekt mittels eines Chromel/Alumel-Thermoelements, das am Probenhalter angebracht ist. Zur direkten Temperaturmessung stand ein Infrarotspektrometer zur Verfügung, welches aber nur für Temperaturen $T \geq 600^\circ \text{C}$ geeignet ist.

Desweiteren dient der Manipulator zur Positionierung der Probe bei Reinigung und Beschichtung. Die Reinigung der Probenoberfläche erfolgt durch Sputtern mittels einer **Ionenkanone**, die mit einem Wienfilter (Massenfilter) ausgerüstet ist. Dabei wird in einer Brennkammer durch Elektronenbeschuss aus einem Edelgas (z.B. Argon) ein Ionenplasma erzeugt. Die Ar-Ionen werden elektrostatisch auf die Probe beschleunigt, auf deren Oberfläche sie Atome abtragen. Mittels des Wienfilters werden nur die ausgewählten Ar-Ionen zum Beschuss der Probe verwendet und somit ein Verunreinigen der Probe durch „artfremde“ Ionen verhindert. Ein Maß für die Abtragrate ist der von der Probe zur Masse hinfließende Strom, der während des Sputterns nicht variieren sollte. Die Eichung der Abtragrate erfolgt mit dem RTM. Nach kurzem Ionen-Beschuss und anschließendem Heizen bildet man die Topographie mit den erzeugten „Löchern“ ab (s. Abb. 3.1 (a)).

Das Präparieren dünner Filme auf dem Cr-Substrat und den W-Spitzen erfolgte durch **Elektronenstrahlverdampfen**. Dabei standen zwei Verdampferquellen zur Verfügung (Fe und Cr), wobei Fe von einem Draht und Cr aus einem Tiegel, beides im Folgenden *Target* genannt, aufgedampft wurde. Zwischen dem Filament und dem Target wird eine Hochspannung U_{HV} zwischen 700 V und 900 V angelegt, so dass Elektronen auf das Target beschleunigt werden und dieses aufheizen. Damit nur das Aufdampfmaterial geheizt und somit zum Beschichten verwendet wird, wird der restliche Verdampferaufbau über ein Kupferschild wassergekühlt. Die Hochspannung U_{HV} und der Filamentstrom I_{Filament} werden als Regelparameter genutzt, um den Teilchenfluss beim Aufdampfen konstant zu halten. Bei konstantem

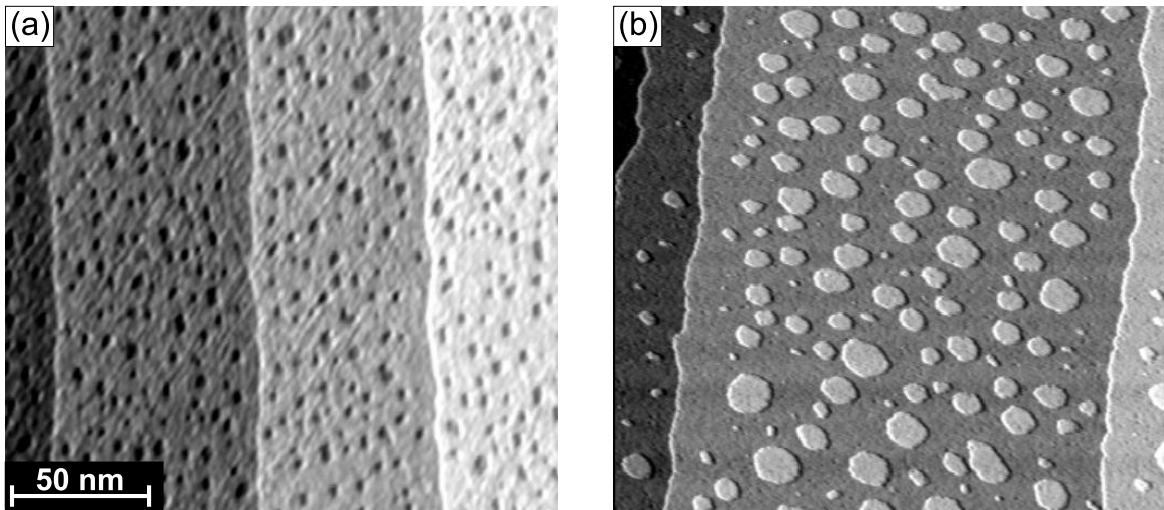


Abbildung 3.1: (a) RTM-Bild der Cr(001)-Oberfläche, nach einer Sputterzeit von 3 min. Die Löcher (negative Inseln) erhält man nach anschließendem Ausheizen der Probe für 4 min bei $T \approx 475 \text{ K}$. Der Quotient aus der Fläche der Löcher und der Sputterzeit ergibt die Sputterrate bei festen Parametern. (b) RTM-Aufnahme einer Fe/Cr(001)-Probe zur Kalibrierung des Elektronenstrahlverdampfers. Der Quotient aus der Fläche der Fe-Inseln und der Aufdampfzeit ergibt die Aufdampfrate bei festen Parametern.

Teilchenfluss werden allein durch die Variation der Aufdampfzeit die gewünschten (Fe- oder Cr-) Bedeckungen eingestellt. Die Eichung der Aufdampfrate erfolgt analog zur Eichung der Abtragrate beim Sputtern: nach dem Aufdampfen (bei konstantem Teilchenfluß) wird die „Topographie“ der aus dem aufgetragenen Material bestehenden „Inseln“ mittels RTM abgebildet (s. Abb. 3.1 (b)). Die Aufdampfrate ergibt sich aus dem Quotienten der Fläche der Inseln und der Aufdampfzeit.

3.1.2 Analysekanal

Das Hauptanalysegerät, ein kombiniertes **Rasterkraft-** und **Rastertunnelmikroskop** mit einem maximalen Scanbereich von $6\mu\text{m} \times 6\mu\text{m}$, befindet sich in einer Satellitenkammer der Analysekanal. Spitzen- und Probenwechsel erfolgen — wie vorher verlangt — *in situ*, d.h. ohne das UHV zu brechen.

Eine weitere Charakterisierung der Probenoberfläche wird mittels der **niederenergetischen Elektronenbeugung** (engl.: *low energy electron diffraction* (LEED)) durchgeführt. Dabei werden Elektronen mit Energien zwischen 10 eV und etwa 1000 eV, was de Broglie-Wellenlängen von etwa 3.9 Å bis 0.39 Å entspricht, auf die Probe beschleunigt. Niederenergetische Elektronen dringen nur wenige Atomlagen tief in die Probe ein und liefern ein Beugungsmuster, das Aussagen über die Probeoberflächenstruktur zulässt. Die reflektierten Teilchenwellen interferieren konstruktiv, wenn der Gangunterschied zwischen ihnen eine Wellenlänge λ oder ein Vielfaches davon beträgt. Mit einem Einfallswinkel φ relativ zur Oberflächennormale erhält man konstruktive Interferenz in einer Dimension unter einem Ausfallwinkel φ_0 :

$$a \cdot (\sin \varphi - \sin \varphi_0) = n\lambda. \quad (3.1)$$

Da die Beugung aber an einer Netzebenenchar (in 2 Dimensionen) erfolgt, erhält man mit $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ und $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$ die Laue'schen Gleichungen:

$$\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h_1, \quad (3.2)$$

$$\vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h_2. \quad (3.3)$$

Die Intensitätsmaxima werden als einzelne „Spots“ auf dem Leuchtschirm angezeigt, die das reziproke Gitter der Probe im k-Raum widerspiegeln.

Elementspezifische Analysen der Oberfläche erfolgen mittels **Augerelektronenspektroskopie** (AES). Dabei wird die Probe mit hochenergetischen Elektronen beschossen, welche Elektronen aus einer inneren Schale (z.B. der K-Schale) der Probenatome herausschlagen. Dieser angeregte Zustand wird durch ein Elektron, das aus einer höher liegenden Schale (z.B. der L-Schale) in die K-Schale übergeht, relaxiert. Die dabei frei werdende Energie kann entweder durch das Aussenden eines Photons abgegeben oder durch das Herausschlagen eines weiteren Elektrons (z.B. aus der L-Schale) kompensiert werden. Der letztgenannte Prozess heißt Auger-Effekt und das sekundäre Elektron wird Auger-Elektron genannt, dessen Energie allein durch die Energien der beteiligten Elektronenniveaus bestimmt wird. Weil diese Energien elementspezifisch sind, erhält man Informationen über die Zusammensetzung der Probenoberfläche. Je nach Energie der eingestrahlteten Elektronen liegt die Tiefeninformation zwischen einigen Ångström bis einigen Nanometern.

Die AES-Messungen erfolgen mit dem gleichen Instrument wie die LEED-Messungen. Dabei werden die Elektronen durch eine Hochspannung von 3 kV auf die Probe beschleunigt, welche sich auf Nullpotential befindet. Eine Gegenspannung U selektiert die Auger-Elektronen, deren kinetische Energie ausreichend groß ist ($> e \cdot U$), um U zu überwinden. Durch die Variation der Gegenspannung kann der gewünschte Energiebereich abgefahren werden. Mittels Lock-In Technik wird die Ableitung des Stromsignals gemessen. Man erzielt damit eine höhere Sensitivität und kann direkt aus den Peakhöhen I und der elementspezifischen Sensitivität S den jeweiligen relativen Anteil eines Elementes nach

$$R_i = \frac{\frac{I_i}{S_i}}{\sum_n \frac{I_j}{S_j}} \quad (3.4)$$

bestimmen. Die Normierung aller Werte (z.B. auf den Cr-Hauptpeak) erlaubt den Vergleich verschiedener AES-Messungen.

3.2 Spitzenpräparation

Bei der spingemittelten und spinaufgelösten RTM/RTS kamen als Sonden Wolframspitzen zum Einsatz. Sie wurden *ex situ* durch Ätzen eines polykristallinen Wolframdrahtes in einer 8%-igen NaOH-Lösung hergestellt und anschließend mit destilliertem Wasser gereinigt. Um die Oxidschicht von den Spitzen zu entfernen, wurden sie im UHV lokal durch Elektronenbeschuss geheizt. Dafür werden Elektronen aus einem Thorium-beschichteten Wolframdraht

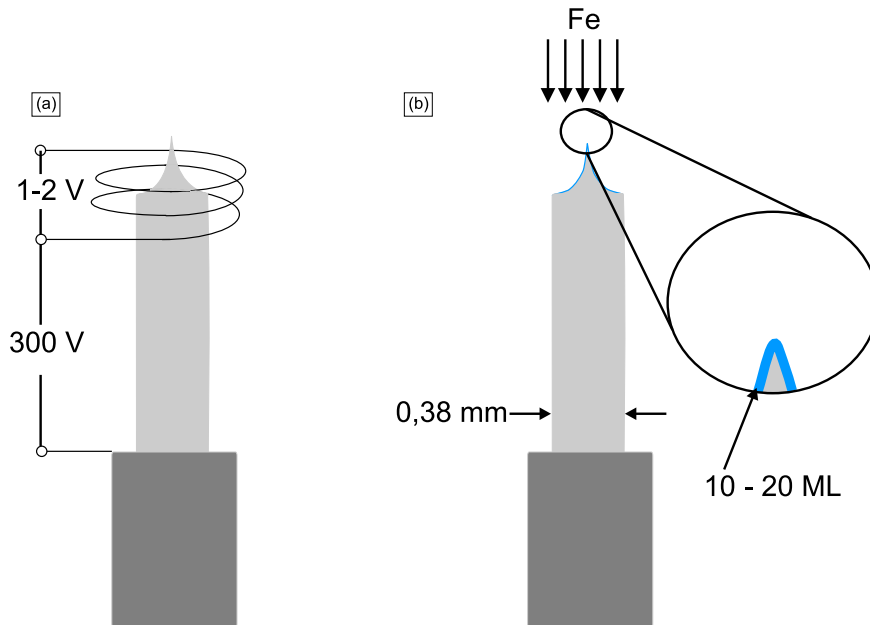


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Spitzenpräparation. (a) Die W-Spitzen werden mittels Elektronenbeschuss auf $T \simeq 2300$ K geheizt. Dazu wird eine Spule aus Thorium-beschichtetem Wolframdraht verwendet. (b) Für die SP-RTM-Messungen wurde Fe (10 - 20 ML) auf die sauberen W-Spitzen aufgebracht.

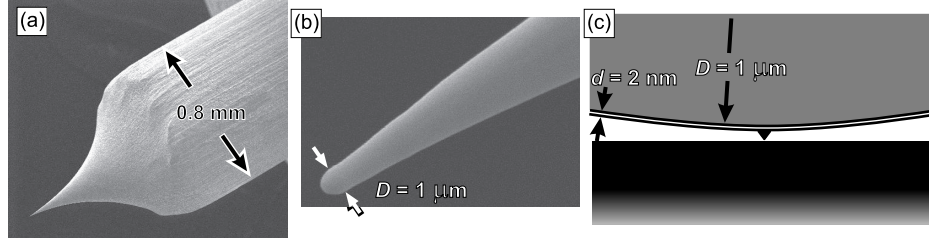


Abbildung 3.3: Rasterelektronenmikroskopaufnahmen einer W-Spitze nach dem Heizen bei etwa 2300 K (entnommen aus Ref. [23]). (a) Auf der makroskopischen Skala erscheint die Spitze scharf. (b) Die Vergrößerung zeigt jedoch, dass die Spitze dabei aufgeschmolzen wurde und einen Krümmungsradius von etwa 500 nm besitzt. (c) Schematische Darstellung des Spitzen-Apex mit passendem Größenverhältnis von Filmdicke zu Krümmungsradius. Die Filmdicke ist verglichen mit dem Krümmungsradius sehr gering. Ein eventuell herausstehendes Cluster am Spitzen-Apex erklärt die hohe Auflösung des RTM.

auf die Spitzen beschleunigt (s. Abb. 3.2 (a)). Diese erhitzt sich dabei bis auf $T \simeq 2300$ K — ausreichend, um Wolframoxid zu desorbieren. Auf die sauberen Wolframspitzen wird mit einem Elektronenstrahlverdampfer magnetisches Material (Eisen) (~ 10 bis 20 Monolagen (ML)) aufgebracht (s. Abb. 3.2 (b)). Zum Abschluss werden die beschichteten Spitzen für 4 min bei $T \approx 500$ K geheizt, um am Spitzenende einen geordneten Film mit wohldefinierter magnetischer Anisotropie (in der Filmebene) herzustellen. Rasterelektronenmikroskopaufnahmen einer W-Spitze nach dem Heizen bei etwa 2300 K, wie sie in Abb. 3.3 (a) und (b) zu sehen sind (entnommen aus Ref. [23]), zeigen auf der makroskopischen Skala (a) eine scharfe W-Spitze. Hochauflösende Rasterelektronenmikroskopaufnahmen derselben W-Spitze (b) verdeutlichen aber, dass die Spitze aufgeschmolzen wurde und einen Krümmungsradius von etwa 500 nm besitzt. In Abb. 3.3 (c) sind die Größenverhältnisse am Spitzen-Apex schematisch dargestellt. Die Filmdicke ist, verglichen mit dem Krümmungsradius, sehr gering. Ein eventuell herausstehendes Cluster am Spitzen-Apex erklärt die hohe Auflösung des RTM.

Kapitel 4

Die Cr(001)-Oberfläche

Die magnetischen Eigenschaften von Chrom haben der Wissenschaft immer wieder Rätsel aufgegeben. Schon 1932 konnte Néel [31] zeigen, dass die paramagnetische Suszeptibilität einer verdünnten Lösung von Cr in Au ein Curie-Weiss Temperaturverhalten aufweist. Als mögliche Ursache schlug er eine antiferromagnetische Ordnung im Cr vor [32]. Der Beweis erfolgte aber erst 1959 durch Shull und Wilkinson [33], die mittels der Neutronenstreuung eine systematische Suche nach Antiferromagneten durchführten. Sie konzentrierten sich auf W, Mo, Nb, V, Cr, Mn und Fe, fanden aber nur für Cr (an der (100) Position) und $\alpha - Mn$ antiferromagnetische Reflektionen. Unabhängig voneinander konnten Bykov *et al.* [34] und Corliss *et al.* [35] (mittels Neutronenstreuung) magnetische Satelliten an der $(0,0,1\pm\delta)$ Position nachweisen, die zu der Spekulation führten, dass eine Anti-Phasen-Domänen-Struktur im Cr vorliegen könnte, bei der nach 14 Einheitszellen eine 180° -Drehung der lokalen Spins erfolgt. Beobachtungen von Hastings [36] bei Streuexperimenten mit Neutronen zeigten, dass es sich um eine sinusförmige Modulation der magnetischen Streuamplitude handelt. Er stellte eine Intensitätsveränderung der Peak-Paare entlang jeder Kante der Einheitszelle fest, die bei Temperaturen von ≈ 110 K auftrat [36]. Daraus folgerte er, dass es zu einer Umorientierung der Phasenpolarisation kommt, und zwar von einer transversal polarisierten Phase (bei hohen Temperaturen) mit Spins $\vec{S}$ senkrecht zum Wellenvektor $\vec{Q}$ zu einer longitudinal polarisierten Phase (bei niedrigen Temperaturen) mit Spins $\vec{S}$ parallel zum Wellenvektor $\vec{Q}$. Ebenfalls mittels Neutronenstreuung ermittelten Shirane *et al.* [37] die Wellenlänge der sinusförmigen Modulation, die sich kontinuierlich mit der Temperatur verändert, und zwar von 21 Einheitszellen bei $T = 78$ K zu 28 Einheitszellen bei $T = 311$ K. Diese kontinuierliche Änderung weist besonders stark auf eine statische Spin-Dichte-Welle (SDW) hin. Die Ursache für den SDW-Antiferromagnetismus ist in der speziellen Form der Fermi-Oberfläche von Cr zu finden. Ähnliche Fermi-Oberflächen für Elektronen (um den Γ - Punkt) und Löcher (um den H - Punkt) sind über einen Nesting Vektor verbunden, der entlang einer Achse der Einheitszelle verläuft und in der Größenordnung der SDW-Wellenlänge liegt. Da die Fermi-Oberfläche der Löcher jedoch etwas größer ist als die der Elektronen, bildet sich eine inkommensurable SDW aus.

In Abb. 4.1 sind einige wichtige Eigenschaften des Chroms schematisch dargestellt. Cr besitzt eine kubisch-raumzentrierte Einheitszelle (engl.: *body-centered-cubic* (bcc)) (Abb. 4.1(a)) mit einer Gitterkonstanten $a = 2,88 \text{ \AA}$ im paramagnetischen Zustand. Es handelt sich bei Chrom um einen itineranten Antiferromagneten mit einer Néel-Temperatur $T_N = 311$ K,

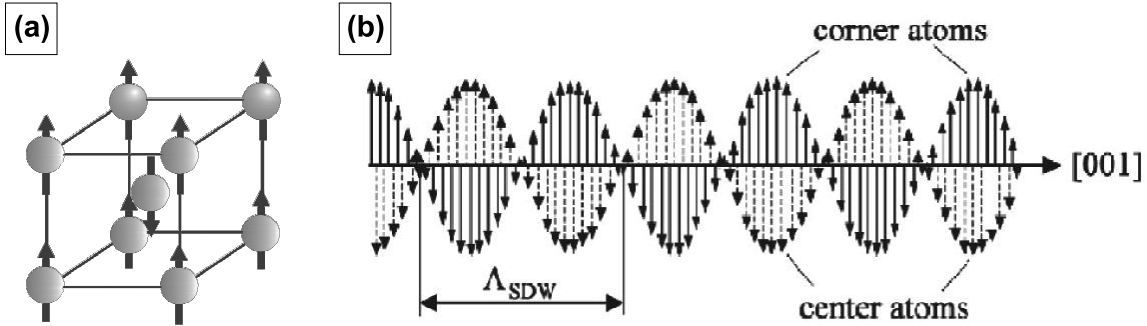


Abbildung 4.1: (a) bcc-Einheitszelle des Chroms: Die Magnetisierung des Zentralatoms ist antiparallel zu der der Eckatome, so dass sich eine kommensurable Spindichtewelle einstellt. (b) Auf Grund des Nestings kommt es zur Ausbildung einer inkommensurablen Spinstruktur. Dargestellt ist die transversale Spindichtewelle mit einem Wellenvektor $\vec{Q}$ in einer beliebigen $\langle 001 \rangle$ -Richtung und dazu senkrecht orientierten Spins (aus Ref. [38]).

dessen magnetische Struktur durch die $3d$ -Elektronen bestimmt wird. Die magnetischen Momente der Eckatome (durch die Pfeile in Abb. 4.1(a) dargestellt) sind antiparallel zum magnetischen Moment des raumzentrierten Atoms ausgerichtet. Diese Anordnung der magnetischen Momente in der Einheitszelle hätte eine kommensurable SDW zur Folge. Auf Grund des Nestings kommt es aber zur Ausbildung einer inkommensurablen SDW. In Abb. 4.1(b) ist der Fall einer transversalen SDW (t-SDW) dargestellt, d.h. die Spins sind senkrecht zur Ausbreitungsrichtung orientiert. Unterhalb der Spin-Flip-Temperatur ($T_{SF} = 123$ K) liegt eine longitudinale SDW (l-SDW) vor. Die Ausbreitungsrichtung beider SDW verläuft entlang einer beliebigen (001) -Achse, was zu drei verschiedenen Domänen führen sollte.

Man sollte meinen, dass es relativ leicht möglich sein sollte, die magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche zu bestimmen. Aber ebenso wie die magnetische Struktur des Volumens war auch die der Oberfläche lange Zeit unklar. Ausgehend von theoretischen Berechnungen [39,40], sollte die Cr(001)-Oberfläche (angenommen als eine perfekt plane Oberfläche ohne Stufen und Versetzungen) eine ferromagnetische Ordnung mit einem im Vergleich zum Volumen erhöhten Oberflächenmoment bis $3\mu_B$ aufweisen. Fu und Freeman [39] konnten durch *ab initio* full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) Rechnungen zeigen, dass das erhöhte magnetische Moment an der Oberfläche mit einem scharfen, spin-aufgespaltenen Oberflächenzustand nahe der Fermi-Energie verbunden ist. Winkelaufgelöste Photoelektronen-Spektroskopie (engl.: angular-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES)) von Klebanoff *et al.* [41,42] bestätigte die theoretischen Vorhersagen von Fu und Freeman. Jedoch lieferten spinaufgelöste Photoemissions-Messungen von Meier *et al.* [43] keine Hinweise auf eine ferromagnetische Ordnung der Cr(001)-Oberfläche.

Auf den ersten Blick scheinen sich die beiden experimentellen Befunde auszuschließen. Einen Lösungsvorschlag boten Blügel *et al.* [8] an, die ein modifiziertes Modell der Cr(001)-Oberfläche als Grundlage für ihre Rechnungen benutzten. Bisher wurde eine perfekt plane Cr(001)-Oberfläche angenommen, realistische Oberflächen weisen aber immer Terrassen auf, die vorzugsweise durch monoatomare Stufen getrennt und selbst bei geringem Fehlschnitt und sorgfältiger Präparation nicht breiter als einige hundert Nanometer sind. In Abb. 4.2 ist ein Modell dieser Cr(001)-Oberfläche dargestellt. Auf jeder Terrasse sind die magnetischen

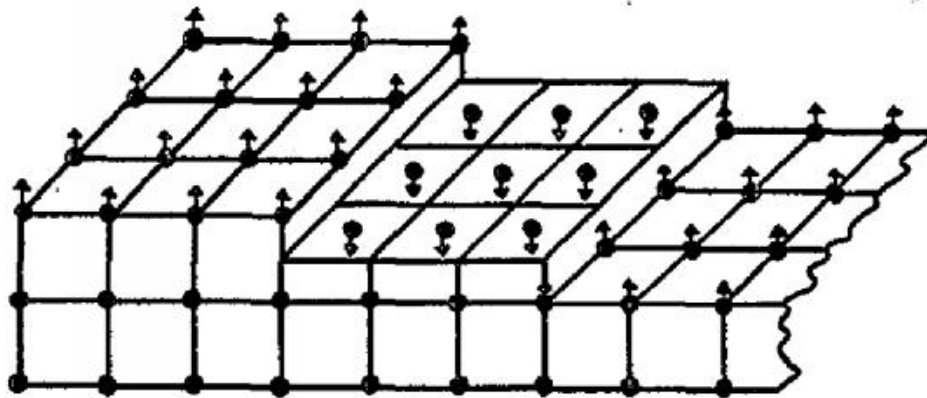


Abbildung 4.2: Magnetische Struktur der gestuften Cr(001)-Oberfläche: Auf jeder (001)-Terrasse sind die Spins ferromagnetisch angeordnet, während benachbarte Terrassen antiferromagnetisch koppeln. Die Richtung der Pfeile wurde willkürlich ausgewählt. Weil mit diesem Modell eine direkte Verbindung zwischen der Topographie und der magnetischen Struktur besteht, wird es „topologischer Antiferromagnetismus“ genannt (aus Blügel *et al.* [8]).

Momente ferromagnetisch angeordnet. Benachbarte Terrassen, die durch eine monoatomare Stufe getrennt sind, koppeln antiferromagnetisch. Die Orientierung der Spins war zu diesem Zeitpunkt nicht bekannt und wurde nur zur besseren Veranschaulichung senkrecht zur Oberfläche gewählt. Auf Grund der direkten Verbindung zwischen den strukturellen und den magnetischen Eigenschaften wird dieses Modell „topologischer Antiferromagnetismus“ genannt. Mittels spinaufgelöster Photoemission konnte keine Nettomagnetisierung gefunden werden, obwohl eine ferromagnetische Ordnung vorliegt. Dieses ist auf die Größe des Messflecks zurückzuführen, welche die mittlere Terrassenbreite bei weitem überstieg. Die spinaufgelösten Photoemissionsmessungen mittelten somit über mehrere Terrassen und waren daher auch nicht im Stande eine Nettomagnetisierung zu detektieren.

Der erste experimentelle Nachweis erfolgte durch Wiesendanger *et al.* [6]. Sie benutzten bei den spinaufgelösten RTM-Messungen CrO₂-Spitzen und stellten im CCM eine alternierende Variation der Stufenhöhe fest (s. Abb. 2.4). Diese führten sie auf die unterschiedlich magnetisierten Terrassen zurück. Der Nachteil dieser Methode ist, dass eine Überlagerung der topographischen und magnetischen Signale vorliegt und damit eine detaillierte Untersuchung der Cr(001)-Oberfläche mit ihren Versetzungen verhindert. Indem aber die differentielle Leitfähigkeit mit magnetischen Spitzen gemessen wird, entweder im reinen Spektroskopie-Modus (s. Kap. 2.3) oder kombinierten Topographie- und Spektroskopie-Modus (s. Kap. 2.4), kann dieses Hindernis überwunden werden. Erfolgreich wurde dies an Cr(001)-Oberflächen durch Kleiber *et al.* [44] schon an dünnen Gd(0001)-Filmen auf W(110) durch Bode *et al.* [7] und am Fe-Nanostreifen auf W(110) durch Pietzsch *et al.* [45] gezeigt. Alle Messungen, die im Folgenden präsentiert werden, wurden, wenn nicht ausdrücklich anders beschrieben, mit Fe-beschichteten W-Spitzen bei RT im UHV durchgeführt.

4.1 Präparation

Die **Reinigung des Cr(001)-Kristalles** ist ein langwieriger und schwieriger Prozess, da die Verunreinigungen (für den Cr-Kristall sind es typischerweise S, N, O und C) eine temperaturabhängige Segregation aufweisen, wie es Schmid *et al.* zeigen konnten [24]. Ein frisch gesputterter Cr(001)-Kristall weist nur die Cr-Peaks und den durch das Sputtern implementierten Ar-Peak auf. Das Heizen für eine Minute führt jedoch zur Segregation der Verunreinigungen an die Probenoberfläche. In Abb. 4.3 ist nach Schmid *et al.* [24] das Auger-Signal (normiert auf den Cr-Hauptpeak bei 529 eV) des jeweiligen Elements nach einminütigem Heizen bei verschiedenen Temperaturen dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Segregationsgeschwindigkeit stark von der Temperatur abhängt und dass die Temperatur für eine maximale Segregation elementspezifisch ist. Nach Einschleusen des Cr-Kristalls wurde zur Entfernung der Oxidschicht bei Raumtemperatur (RT) gesputtert, d.h. der Sauerstoffanteil in der Oberfläche wurde so weit reduziert, dass er durch weiteres Sputtern bei RT nicht mehr verringert werden konnte. Die Entfernung der verbleibenden Kontamination erfolgte durch das Sputtern bei verschiedenen Temperaturen (700 K, 900 K und 1100 K), entsprechend den maximalen Segregationsgeschwindigkeiten von C, N und O. Dadurch entstand eine Verarmungszone in der oberflächennahen Region, in der nur noch eine geringe Restkontamination vorlag. Schließlich lag am Ende der Präparation das Auger-Signal des Stickstoffes und des Schwefels unter der Sensitivität der AES-Einheit ($\sim 1\%$), während Sauerstoff noch einen relativen Anteil von wenigen Prozent hatte.

Die Reduzierung des Kohlenstoffgehaltes erwies sich schwieriger als die Entfernung der

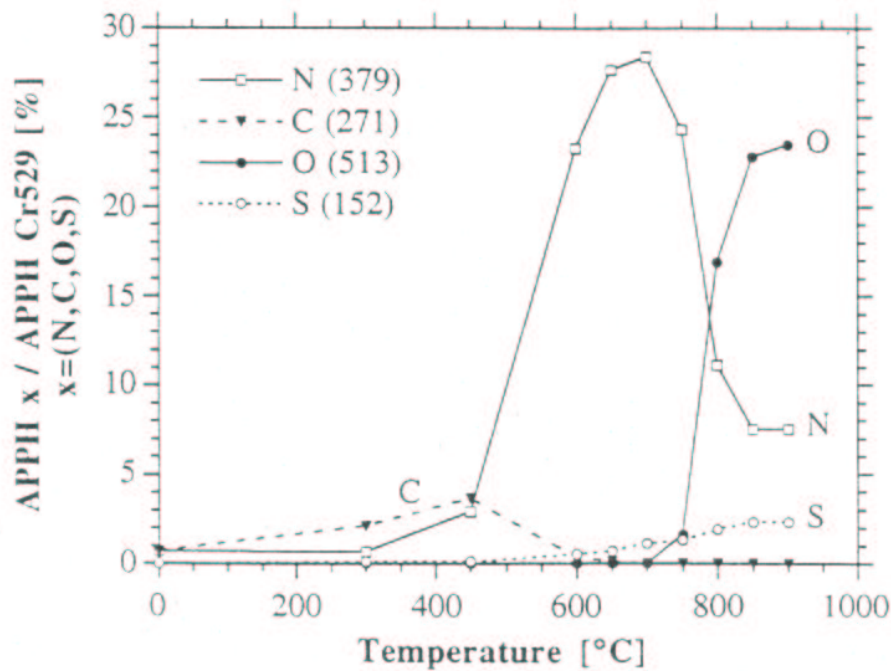


Abbildung 4.3: Segregation von Verunreinigungen an die Oberfläche des Cr(001)-Kristalls. Dargestellt ist das Auger-Signal des jeweiligen Elements, normiert auf das des Chroms, nach Heizen des Kristalls für eine Minute auf die jeweilige Temperatur (entnommen aus Ref. [24]).

übrigen Verunreinigungen. Dieses hatte seine Ursache darin, dass die anfänglich verwendete Ionenkanone ohne Wienfilter betrieben wurde. Dadurch wurden nicht nur die Ar-Ionen auf die Probe beschleunigt, sondern ebenfalls kohlenstoffhaltige Verunreinigungen aus dem Restgas auf der Probe deponiert. Durch Einsatz eines Wienfilters und abschließendes Heizen des Kristalls auf 1150 K ohne Sputtern für ca. 20 min konnte der C-Anteil jedoch deutlich reduziert werden. Beim Heizen durfte eine Temperatur von ~ 1200 K nicht überschritten werden, weil Chrom sonst einen irreversiblen Übergang von der bcc- zur fcc-Struktur vollzieht. Das anschließende Abkühlen des Einkristalls würde mit der Bildung von einzelnen Kristalliten einhergehen, die als Substrat für die Fe-Filme ungeeignet wären.

Die Kontrolle der Reinheit erfolgte mit AES-, LEED- und RTS-Messungen. In Abb. 4.4 sind die entsprechenden Ergebnisse der jeweiligen Messung dargestellt. Die AES-Messung (a) zeigt eine Restkontamination, bestehend aus C (relativer Anteil $\sim 3 - 4\%$), während das O- und das N-Signal unterhalb der Auger-Sensitivität von 1% liegen. Da AES die Probe mit C verunreinigt, wurden die Messungen bei einer Energie von 200 eV gestartet. Im LEED-Bild (eingebettet in (a)) sind die Reflexe der vierzähligen Cr(001)-Oberfläche deutlich erkennbar. Die C-Verunreinigung führt zu einer $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion, die im LEED normalerweise als halbzahlige Spots auftauchen. Da diese Spots bei der gewählten Energie aber nicht zu erkennen sind, spricht das LEED-Bild für eine relativ saubere Cr(001)-Oberfläche. Typisch für bcc-(001)-Oberflächen von Metallen ist ein d_{z^2} -artiger Oberflächenzustand [25], der durch Verunreinigungen (z.B. C, N und O) verschoben und bei ausreichender Kontamination un-

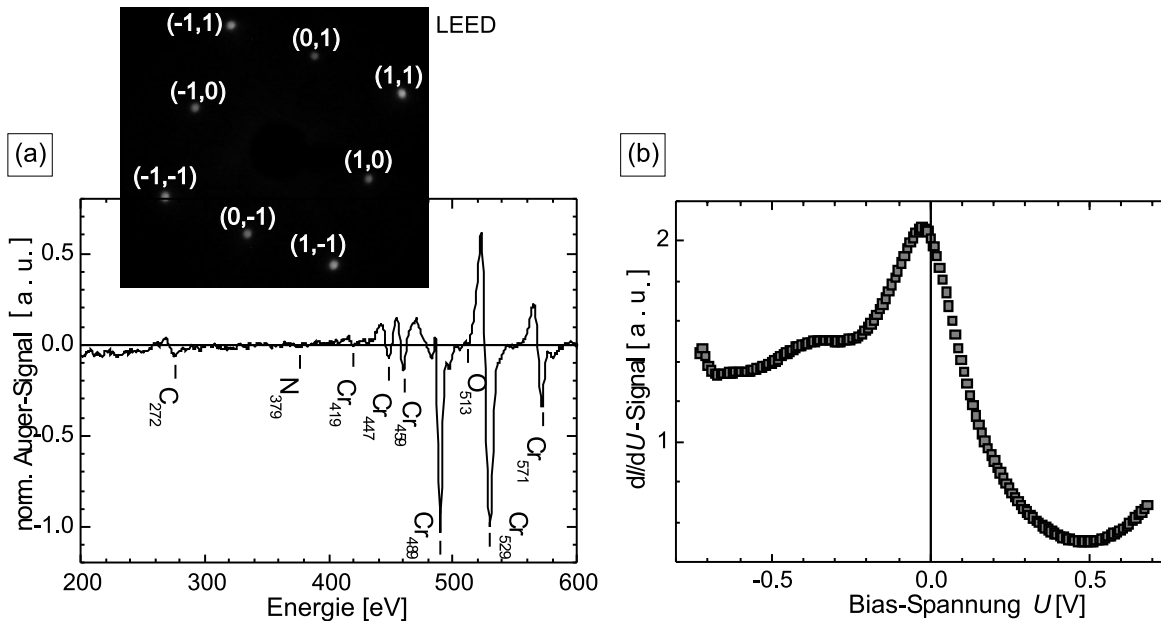


Abbildung 4.4: Analyse-Ergebnisse des Cr(001)-Einkristalls nach der Reinigung mittels Sputtern und Heizen. (a) Das Auger-Spektrum zeigt die Restkontamination der Cr-Probe an: Während der N-, O- und S-Gehalt unterhalb der Sensitivität für AES liegt, bekommt man nach Gl. 3.4 für C einen Restgehalt von 3-4 %. Die LEED-Aufnahme, eingebettet in (a), entstand bei einer Elektronenenergie von 150 eV und zeigt die Spots der vierzähligen Oberfläche. (b) Das Tunnelspektrum, aufgenommen mittels der RTS, weist deutlich einen Peak in der Nähe der Fermi-Kante auf, der typisch für saubere bcc-(001)-Oberflächen ist [25].

terdrückt wird. Mittels spingemittelter RTS (mit einer W-Spitze) konnte aber ein Zustand detektiert werden (s. Abb. 4.4 (b)), der als der erwartete d_{z^2} -artige Oberflächenzustand identifiziert wurde. Es bleibt festzuhalten, dass Verunreinigungen auf der Cr(001)-Oberfläche nicht komplett entfernt werden konnten. Die Restkontamination war aber so gering, dass spinaufgelöste Untersuchungen über einige Stunden bis wenige Tage durchgeführt werden konnten.

4.2 Defektfreie Cr(001)-Oberfläche

Wie durch das Modell des topologischen Antiferromagnetismus beschrieben, weist die Cr(001)-Oberfläche zwei magnetisch unterschiedliche Terrassentypen auf. Auf jeder Terrasse sind die Spins parallel ausgerichtet, wobei angrenzende, durch eine monoatomare Stufe getrennte Terrassen antiferromagnetisch koppeln. Ortsaufgelöste volle Spektren der Cr(001)-Oberfläche, die mittels spinmittelnder RTS gewonnen wurden, sind in Abb. 4.5 zu sehen. Die Messung erfolgte dabei über zwei benachbarte Terrassen, wie sie im Topographiebild (eingebettet in Abb. 4.5) zu sehen sind. Getrennt werden die Terrassen durch eine monoatomare Stufe. Die Einzelspektren wurden durch Mittelung über der jeweiligen Terrassen aufgenommen und weisen — wie erwartet — einen Peak nahe der Fermienergie auf. Entscheidend ist dabei aber, dass die Spektren der Terrassen identisch sind. Es ist somit nicht möglich, mittels der konventionellen RTS, bei der unmagnetische Spitzen zum Einsatz kommen, die magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche abzubilden. Die spinaufgelöste RTS sollte jedoch in der Lage sein, die magnetisch unterschiedlichen Terrassen der Cr(001)-Oberfläche abzubilden. Dabei wird ausgenutzt, dass das austauschtaufgespaltene d -Band, besetzt mit Minoritätsladungsträgern, eine Spinpolarisation von $\sim 20\%$ [6] aufweist.

In Abb. 4.6 ist das Resultat einer orts- und spinaufgelösten RTS gezeigt. Die Messung erfolgte, wie bei der spingemittelten RTS, über zwei benachbarte Terrassen (im eingebetteten RTM-Bild mit A und B gekennzeichnet), wobei die Kurven eine Mittelung über jeweils eine der beiden Terrassen darstellen. Wie erwartet, findet man einen Oberflächenzustand nahe der Fermikante für beide Terrassen, aber im Gegensatz zum spingemittelten Spektrum (vgl.

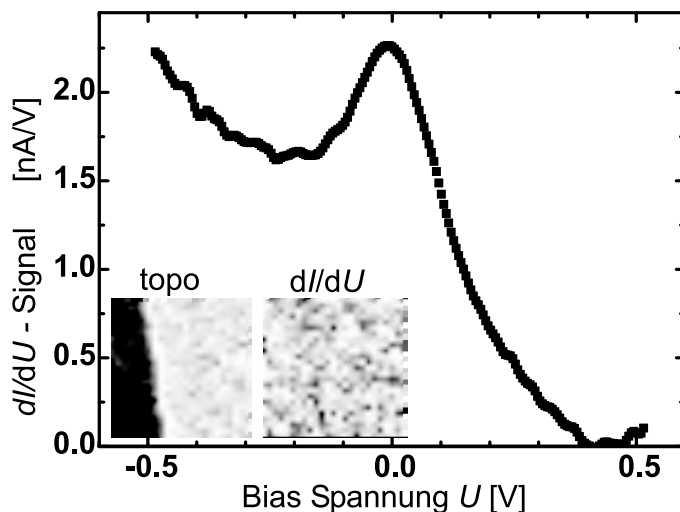


Abbildung 4.5: Tunnelspektren der Cr(001)-Oberfläche, aufgenommen über zwei benachbarten Terrassen, mit dem für saubere bcc-(001)-Oberflächen typischen d_{z^2} -artigen Oberflächenzustand. Eingebettet sind die Topographie (links) und die spingemittelte Karte der differentiellen Leitfähigkeit (rechts) bei der Peakposition (~ -20 mV). Da unmagnetische Spitzen verwendet wurden, findet sich im dI/dU -Bild kein magnetischer Kontrast.

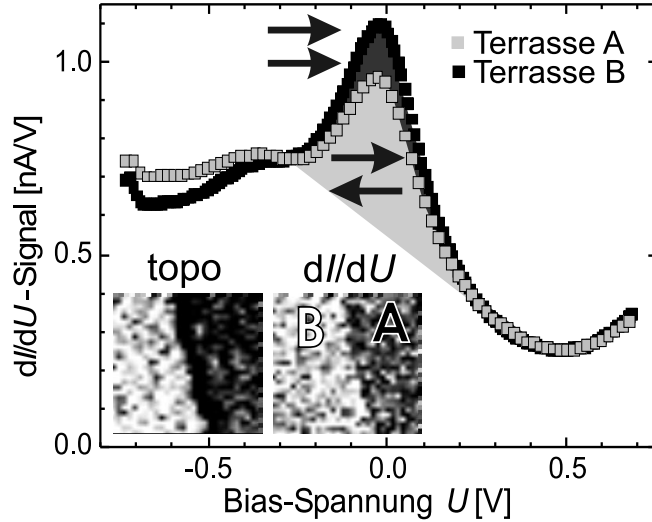


Abbildung 4.6: Tunnelspektren der Cr(001)-Oberfläche, aufgenommen über zwei benachbarten Terrassen A und B, mit dem für saubere bcc-(001)-Oberflächen typischen d_{z^2} -artigen Oberflächenzustand. Eingebettet sind die Topographie (links) und die spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit (rechts) bei der Peakposition (~ -20 mV). Die Terrassen weisen beide eine ferromagnetische Ordnung auf, sind aber zueinander entgegengesetzt magnetisiert. Auf Grund der unterschiedlichen relativen Orientierung zwischen der Spitzen- und Probenmagnetisierung weisen die Peaks bei der Energie des Oberflächenzustandes verschiedene Intensitäten auf.

Abb. 4.4) sind diese unterschiedlich stark ausgeprägt.

Die Ursache dafür liegt im spinabhängigen Anteil des Tunnelstroms bzw. der differentiellen Leitfähigkeit dI/dU , welche nach Gleichung 2.29 bzw. 2.31 vom Winkel zwischen der Spitzen- und Probenmagnetisierung abhängen. Ausgehend davon, dass die Fermi-niveaus beider Elektroden durch die gleiche Sorte von Ladungsträgern, Minoritäts- oder Majoritätselektronen, besetzt sind, erhält man einen minimalen (maximalen) Wert für die differentielle Leitfähigkeit dI/dU bei einer antiparallelen (parallelen) Orientierung der Spitzen- und Probenmagnetisierung, bekannt als der **normale** Tunnelwiderstand. Der Fall des **inversen** Tunnelwiderstandes tritt dann auf, wenn die Fermi-niveaus der beiden Elektroden durch Elektronen mit unterschiedlichen Spins dominiert werden. In diesem Fall ist das dI/dU -Signal für antiparallel magnetisierte Elektroden höher als für parallel magnetisierte. Betrachtet man zwei benachbarten Terrassen, sollte es nach dem Modell des topologischen Antiferromagnetismus unabhängig von der Art des Tunnelwiderstandes zu einer Änderung des dI/dU -Signal kommen. Die eingebetteten RTM-Bilder in Abb. 4.6 zeigen die entsprechende Topographie (links) und das simultan aufgenommene orts aufgelöste dI/dU -Signal (rechts) an der Peakposition. Deutlich sind die benachbarten Terrassentypen A und B anhand der unterschiedlichen Intensität des dI/dU -Signals zu erkennen, während für den Fall der spingemittelten RTS beide Terrassen ein identisches dI/dU -Signal aufweisen (dI/dU -Bild eingebettet in Abb. 4.5).

Aus den vollen Spektren ist der Kontrastmechanismus ersichtlich. Sie verdeutlichen, bei welchen Bias-Spannungen ein maximaler Kontrast im dI/dU -Signal zu erwarten ist. Daher wurde im Folgenden simultan zur Topographie die differentielle Leitfähigkeit mittels Lock-In-Technik bei angepasster Bias-Spannung aufgenommen, bei der ein maximaler Kontrast im dI/dU -Signal zu messen war. Dies ermöglicht es, bei erhöhter Ortsauflösung (mit bis zu 1000×1000 Punkten) in einer akzeptablen Zeit (bis zu 1 h) die Oberflächen abzubilden.¹ Die vollen Spektren (in Abb. 4.6 dargestellt) lassen vermuten, dass an der Peakposition ein

¹Volle Spektren wurden üblicherweise mit 20×20 Punkten (Ortsauflösung) aufgenommen, bei einer Dauer von $\sim 1 - 2$ h.

maximaler Kontrast vorliegen sollte. Es muss aber berücksichtigt werden, dass es bei dem hier benutzten *Konstant-Strom-Modus* (s. Kap. 2.2) zu einer Änderung des Spitzen-Proben-Abstandes kommen kann. Dieser hängt stark von der lokalen differentiellen Leitfähigkeit der Probe ab, aber auch von der relativen Orientierung zwischen der Proben- und Spitzenmagnetisierung. Bei Bias-Spannungen, die der energetischen Peakposition des Oberflächenzustandes entsprechen, wird der Spitzen-Proben Abstand erhöht (verringert), wenn eine antiparallele (parallele) Proben- und Spitzenmagnetisierung vorliegt. Diese Variation führt dazu, dass es zu einer Abweichung in den Werten für die Stufenhöhe, wie sie von Wiesendanger *et al.* gemessen wurde (vgl. Abb. 2.4) [6], und zu einer starken Verringerung des Kontrastes in der differentiellen Leitfähigkeit für benachbarte Terrassen kommt. Ein hoher spektroskopischer Kontrast *Konstant-Strom-Modus* im ergibt sich hingegen dann, wenn unpolarisierte elektronische Zustände zum Tunnelstrom beitragen. Diese Bedingung erfüllen Bias-Spannungen, die deutlich über oder unter der energetischen Peakposition des Oberflächenzustandes liegen. Die meisten Messungen wurden daher bei Bias-Spannungen von $U \approx \pm(250 \pm 50)$ mV durchgeführt. Bei diesen Spannungen sind keine Stufenhöhenvariationen zu erwarten.

Das RTM-Bild in Abb. 4.7 (a) ist im *Konstant-Strom-Modus* aufgenommen und zeigt die Topographie der Cr(001)-Oberfläche. Es sind zehn atomar flache Terrassen mit einem Gefälle

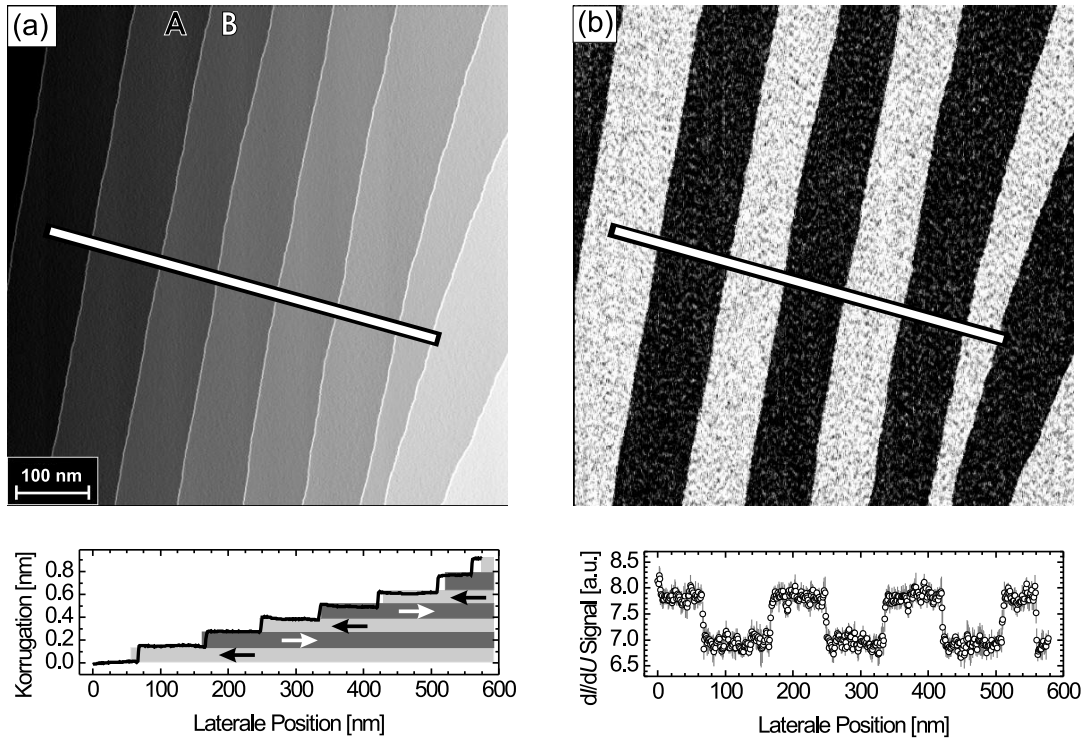


Abbildung 4.7: (a) Topographie und (b) spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche, die im *Konstant-Strom-Modus* mit einer Fe-beschichteten W-Spitze aufgenommen wurden. Die gemittelten Linienprofile in den unteren Teilen wurden entlang der Boxen in den jeweiligen Bildern aufgenommen. Die Terrassen sind durch monoatomare Stufen ($1.45 \text{ \AA}$ hoch) getrennt. Die Parameter bei der Messung waren $U = -150 \text{ mV}$ und $I = 0.7 \text{ nA}$. In (a) sind, analog zu Abb. 4.6, die zwei magnetisch unterschiedlichen Terrassentypen durch A und B gekennzeichnet.

von der unteren rechten zur oberen linken Ecke zu erkennen. Im unteren Teil der Abbildung zeigt der Querschnitt, der entlang der Linie im RTM-Bild aufgenommen wurde, dass benachbarte Terrassen durch monoatomare Stufen mit einer Höhe von $1.45 \text{ \AA}$ getrennt sind. Die Ursache für diese Terrassen- und Stufenstruktur ist ein leichter Fehlschnitt der Cr(001)-Oberfläche (lokal $\sim 0.04^\circ$, gemittelt über die gesamte Probenoberfläche $\sim 0.15^\circ$) und typisch für eine reale Oberfläche. Abb. 4.7 (b) zeigt die zur Topographie in (a) simultan bei einer Bias-Spannung von $U = -150 \text{ mV}$ aufgenommene Karte der differentiellen Leitfähigkeit. Deutlich ist das alternierende dI/dU -Signal zu erkennen, das die zwei magnetisch unterschiedlichen Terrassentypen (A und B) widerspiegelt. Der Wechsel erfolgt abrupt an den Stufenkanten, wie das Linienprofil, aufgenommen entlang der Box in (b), im unteren Teil der Abb. 4.7 (b) zeigt.

Die spinaufgelösten Messungen der vollen Spektren und der differentiellen Leitfähigkeit bei einer festen Bias-Spannung, bestätigen das Modell des topologischen Antiferromagnetismus, wie es von Blügel *et al.* [8] vorhergesagt wurde. Dieses Modell impliziert eine kommensurable SDW (s. Abb. 4.1 (a)). Die magnetische Struktur des Volumens ist aber nicht kommensurabel, sondern wird durch eine inkommensurable SDW (s. Abb. 4.1 (b)) bestimmt, d.h. die Magnetisierungsrichtung der ferromagnetisch geordneten (001)-Terrassen alterniert nicht nur, sondern die magnetischen Momente unterliegen einer sinusartigen Modulation. Dabei beträgt die Wellenlänge L der t-SDW bei RT im Volumen 54 ML [38]. Die spinaufgelösten RTM-Untersuchungen von Bode *et al.* [46], bei der die Spitzenpräparation in analoger Weise erfolgte (Fe-beschichtete W-Spitzen), zeigten, dass diese am Spitzen-Apex vorzugsweise parallel zur Probenoberfläche magnetisiert sind. Damit ließe sich die gemessene magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche durch eine t-SDW erklären, deren Ausbreitungsvektor senkrecht zur Oberfläche orientiert ist, und somit die Magnetisierung in der Oberfläche liegen würde. Tatsächlich liefern Röntgen-Streuexperimente [47] und RTS-Messungen [48] an der Cr(001)-Oberfläche erste Hinweise, dass diese Annahme zutreffend ist. So ist der Ausbreitungsvektor der Ladungsdichtewelle (engl.: *charge density wave* (CDW)) und der SDW vorzugsweise senkrecht zur Probenoberfläche orientiert, weil Domänen, in denen der Ausbreitungsvektor der CDW und der SDW in der Probenoberfläche liegen, stark gedämpft sind. Dies bedeutet, dass die Magnetisierung vorzugsweise in der Probenebene liegt. Wenn nun die Symmetriebrechung an der Oberfläche die t-SDW nicht beeinflusst, sollte eine Modulation des magnetischen Signals bei großflächigen, spinaufgelösten RTM-Bildern zu erkennen sein. Dies bedeutet, dass nach jeweils 27 Terrassen, die durch monoatomare Stufen getrennt sind, immer ein Knoten der t-SDW an der Oberfläche auftreten sollte. In Abb. 4.8 (a) ist dieser Fall schematisch dargestellt.

Sollte die SDW durch die Symmetriebrechung an der Oberfläche beeinflusst werden, können sich verschiedene Spinkonfigurationen einstellen. Zwei Möglichkeiten sind in den Abbildungen 4.8 (b) und (c) dargestellt. In Abb. 4.8 (b) ist die SDW so verschoben, dass immer ein maximales magnetisches Moment auf der jeweiligen (001)-Terrasse vorliegt. Diese Spinkonfiguration könnte bevorzugt sein, weil damit immer ein erhöhtes magnetisches Moment an der Cr(001)-Oberfläche existiert. Folglich müssten aber im Volumen Domänenwände mit einer Wandebene senkrecht zur schrägen Oberfläche vorliegen, so dass es an ihrer Position in jeder (001)-Ebene zu einer Phasenverschiebung der SDW um $2\pi/L$ kommt. Eine weitere mögliche Spinkonfiguration, in Abb. 4.8 (c) zu sehen, hätte eine ungestörte SDW im Volumen. Es käme aber zu einer Variation der Kopplung zwischen der obersten und zweiten Cr-Lage, so

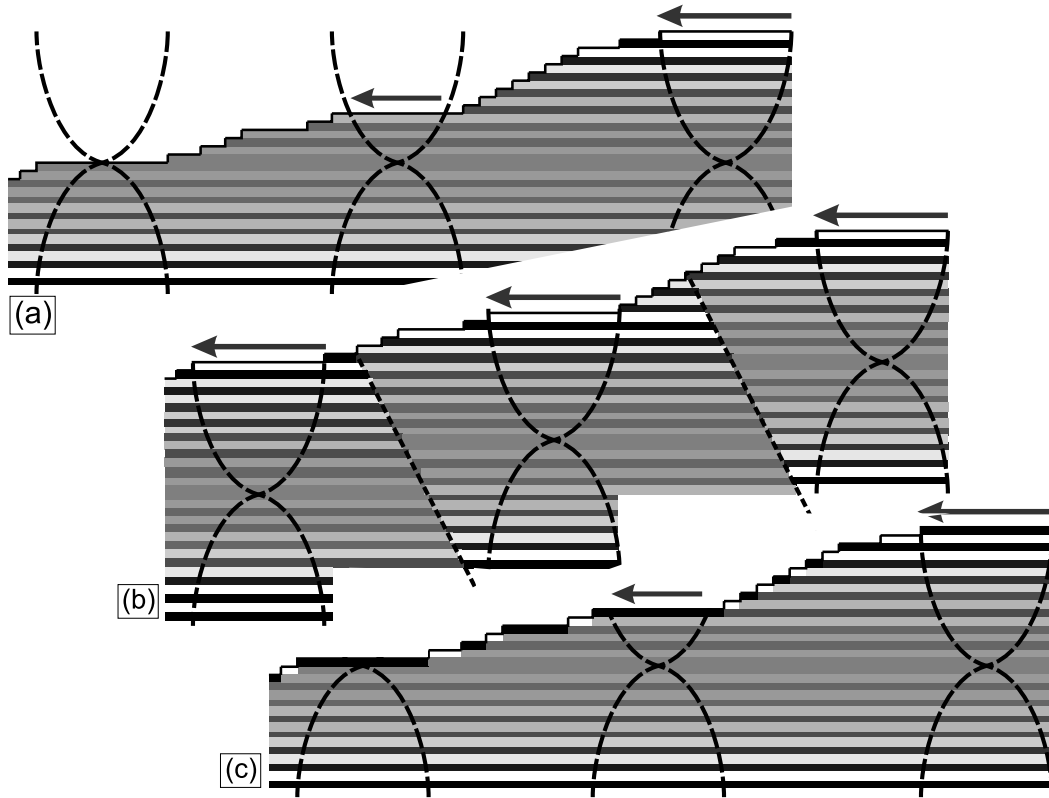


Abbildung 4.8: Drei verschiedene Modelle der SDW an der Cr(001)-Oberfläche. (a) Die SDW aus dem Volumen wird durch die Symmetriebrechung an der Oberfläche nicht beeinflusst. Es sollte daher eine langreichweitige Modulation der magnetischen Momente sichtbar sein. (b) und (c): die SDW weist ein maximales magnetisches Moment für jede (001)-Terrasse auf.

dass immer ein maximales magnetisches Moment an der Cr(001)-Oberfläche existiert. Nach L (Wellenlänge der SDW) Terrassen würde es dann zu einer ferromagnetischen Kopplung zwischen der obersten und zweiten Cr-Lage kommen. Die beiden zuletzt genannten Fälle hätten eine identische Domänenstruktur an der Oberfläche zur Folge.

Um zu klären, welches der genannten Modelle ((a), (b) oder (c)) die wirkliche Domänenstruktur der Cr(001)-Oberfläche beschreibt, wurde eine Übersichtsaufnahme der Probe im *Konstant-Strom-Modus* gemacht, die in Abb. 4.9 dargestellt ist. In der Topographie (a) sind 40 Terrassen zu erkennen, die durch monoatomare Stufen getrennt sind. Die dazu simultan aufgenommene spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit ist in Abb. 4.9 (b) zu sehen. Die gemittelte Schnittlinie, aufgenommen entlang der Box in (b), zeigt klar die zwei Niveaus der differentiellen Leitfähigkeit für benachbarte Terrassen. Die Amplitude bleibt über die gesamte Schnittlinie relativ konstant. Eine langreichweitige Modulation mit Knoten im dI/dU -Signal, wie sie durch das Modell in Abb. 4.8 (a) vorhergesagt wird, ist nicht zu erkennen. Somit kann zwar dieses Modell ausgeschlossen werden, da die RTM (auch die spinauflösende) jedoch nur sensitiv auf die oberste Lage ist, fehlt jede Tiefeninformation.

Abschließend stellt sich die Frage, ob — und wenn ja — welches der beiden verbleibenden Modelle ((b) und (c)) die wahre Spinkonfiguration an der Cr(001)-Oberfläche beschreibt. Dafür müsste geklärt werden, welches der beiden Modelle das energetisch günstigere ist, d.h.

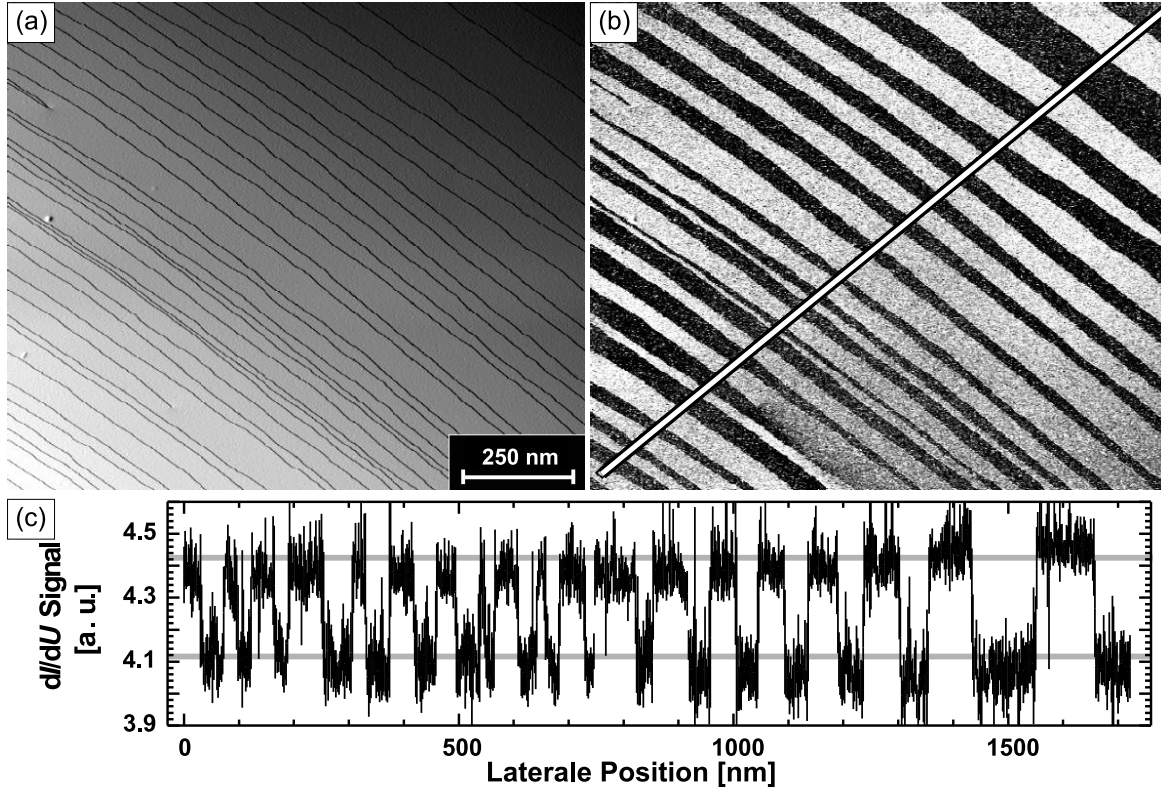


Abbildung 4.9: (a) Übersichtsaufnahme der Cr(001)-Oberfläche im *Konstant-Strom-Modus* über 40 Terrassen, die durch monoatomare Stufen getrennt sind. (b) Die zur Topographie simultan bei einer Bias-Spannung $U = +190$ mV aufgenommene spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit. Auf Grund der antiparallelen Magnetisierung benachbarter Terrassen kommt es zu einem alternierenden dI/dU -Signal. Der Wechsel erfolgt an jeder Stufenkante. (c) Das Linienprofil, aufgenommen entlang der Box in (b), zeigt keine Hinweise auf eine langreichweitige Modulation der magnetischen Momente, sondern einen relativ konstanten Kontrast im dI/dU -Signal.

ob das System mehr Energie für Domänenwände aufbringen muss, die sich ins Volumen des Kristalls erstrecken, oder für eine Frustration zwischen der obersten und der darunter liegenden Cr-Lage. Für das Modell (b) spricht, dass die Domänenwände nicht zwingend durch den gesamten Kristall verlaufen müssen, sondern es könnten sich auch sogenannte Oberflächenabschlusdomänen bilden. Diese würden sich auf einen Bereich unter der Probenoberfläche beschränken und somit den Energieaufwand des Systems eventuell reduzieren. Modell (c) hingegen bietet keine entsprechende Möglichkeit, den Energieaufwand des Systems zu reduzieren. Es müsste zwingend nach jeweils 27 Terrassen die antiferromagnetische Cr–Cr–Kopplung durch eine ferromagnetische ersetzt werden. Folglich erscheint Modell (b) (oder ähnliche) wahrscheinlicher als Modell (c).

4.3 Versetzungen

Unsere Erfahrungen zeigen, dass auf jeder noch so gründlich präparierten Cr(001)-Oberfläche strukturelle Defekte gefunden werden. Wie komplex diese auch sein mögen, sie können immer

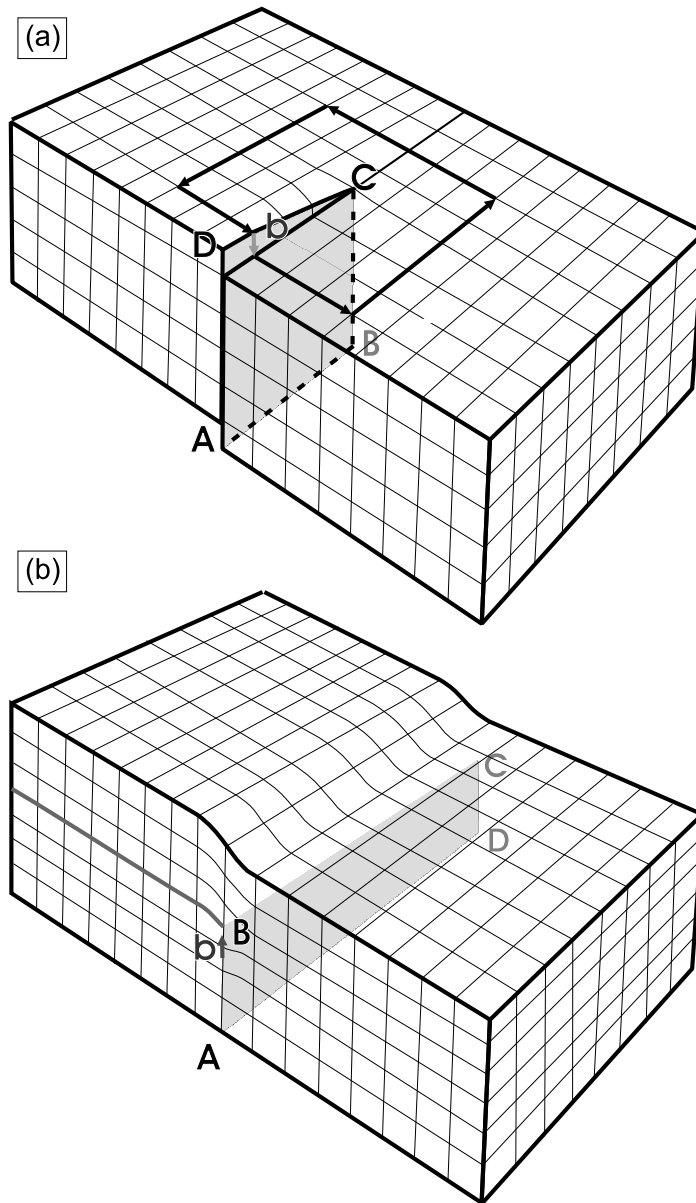


Abbildung 4.10: Schematische Darstellung einer (a) Schrauben- und einer (b) Stufenversetzung.

auf eine Basis aus zwei elementaren Defekten, Schrauben- und Stufenversetzungen, zurückgeführt werden. In Abb. 4.10 sind beide schematisch wiedergegeben. Sowohl die Schrauben- (a) als auch die Stufenversetzung (b) werden durch den so genannten *Burgersvektor* $\vec{b}$ definiert. Er beschreibt die Linie, entlang derer die eine Hälfte des Kristalls verschoben wird. In beiden Fällen wird der Kristall dafür an der $\overline{ABCD}$ -Ebene durchgeschnitten. Um eine Schraubenversetzung zu erzeugen, werden alle Gitterpunkte auf der linken Seite der $\overline{ABCD}$ -Ebene um den Wert einer halben Gitterkonstante entlang der $\overline{AD}$ -Linie verschoben, während die rechte Seite fixiert bleibt. Der Burgersvektor $\vec{b}$ ist somit parallel zur Versetzungslinie $\overline{BC}$ orientiert. Wird die obere Ebene in Abb. 4.10 (a) untersucht, so erscheint eine zusätzliche, halb-unendliche

Stufenkante auf der Oberfläche am Punkt C.

Bei einer Stufenversetzung (s. Abb. 4.10 (b)) wird der untere linke Teil des Kristalls entlang der $\overline{AB}$ -Linie verschoben, während der obere Teil fixiert bleibt. Folglich steht der Burgersvektor $\vec{b}$ bei einer Stufenversetzung senkrecht zur Versetzungslinie $\overline{BC}$. Effektiv wird somit eine zusätzliche halb-unendliche Ebene (durch die schwarze Linie angedeutet) in den Kristall eingefügt. Wenn die Versetzungslinie $\overline{BC}$ hinreichend nahe an der abgebildeten Oberfläche (obere Ebene in Abb. 4.10 (b)) lokalisiert ist, kann der daraus resultierende mechanische Stress nicht relaxieren und die Oberfläche verzieht sich um den Wert einer halben Gitterkonstante. Wie im Folgenden erläutert, wird die magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche durch beide Versetzungen komplizierter.

4.3.1 Schraubenversetzungen

Abbildung 4.11 (a) zeigt die Topographie der Cr(001)-Oberfläche, auf der zwei Schraubenversetzungen (markiert durch Pfeile) zu erkennen sind. Jede für sich erzeugt eine halbunendliche Stufenkante, die an der Stelle beginnt, an der die entsprechende Versetzungslinie die Cr(001)-Oberfläche durchtritt. Die durchgeführten Untersuchungen zeigen, dass die durch Schraubenversetzungen erzeugten Stufenkanten in der Regel parallel zu den restlichen orientiert sind, wodurch ein Überkreuzen vermieden wird.

Es ist offensichtlich, dass die resultierende Oberflächenstruktur (vgl. Abb. 4.11 (a)) keine perfekte antiferromagnetische Ordnung (nach dem Modell des topologischen Antiferromagnetismus) aufweisen kann, so wie sie in Abb. 4.7 dargestellt ist. Die gleichzeitig gemessene spinaufgelöste dI/dU -Karte (s. Abb. 4.11 (b)) belegt dies. Es sind noch Bereiche zu erkennen, in denen die antiferromagnetische Ordnung unverändert ist (untere linke und obere rechte Ecke). Zwischen den Schraubenversetzungen kommt es jedoch zu einer Frustration und Bildung einer Domänenwand. Die Bestimmung der Domänenwandbreite erfolgte durch Vermessung der Höhenprofile entlang der Linien (i) und (ii) in Abb. 4.11 (b). Das Resultat ist in Abb. 4.11 (c) abgebildet und zeigt, dass beide Domänenwandprofile eine graduelle und leicht asymmetrische Übergangsregion mit einer Breite von 100 - 200 nm besitzen. Die Asymmetrie im Linienprofil bedeutet, dass Spitzen- und Probenmagnetisierung nicht kollinear sondern leicht verkantet zueinander orientiert sind. Die mittlere Domänenwandbreite liegt, wie eine Vielzahl an Messungen zeigen, zwischen 120 nm und 170 nm.

Ein quantitative Analyse erfolgte auf der Basis der mikromagnetischen Kontinuums-theorie [49]. Dabei wurde ein Standard-Domänenwandprofil den gemessenen Daten mit

$$y(x) = y_0 + y_{sp} \cdot \cos(\arccos[\tanh((x - x_0)/(w/2))] + \phi) \quad (4.1)$$

angepasst. Hierbei ist $y(x)$ das gemessene dI/dU -Signal an der Position x , x_0 die Position der Domänenwand, w die Breite der Domänenwand, y_0 und y_{sp} der nicht-spinpolarisierte und der spinpolarisierte Anteil des dI/dU -Signals und ϕ der Winkel zwischen der Spitzen- und Probenmagnetisierung. Die beste Übereinstimmung wurde mit einem Winkel $\phi = 30^\circ$ erzielt. Sie lieferte eine Domänenwandbreite von $w_i = (145 \pm 4)$ nm und $w_{ii} = (109 \pm 3)$ nm. Damit spiegelt die Wandbreite w_i sehr gut den mittleren Wert wider, der zwischen 120 - 170 nm liegt, wohingegen w_{ii} etwas darunter liegt. Der Unterschied in den Domänenwandbreiten entsteht dadurch, dass es in der Nähe einer Schraubenversetzung zu einer Verringerung der Breite kommt. Auf diesen Gesichtspunkt wird später eingegangen.

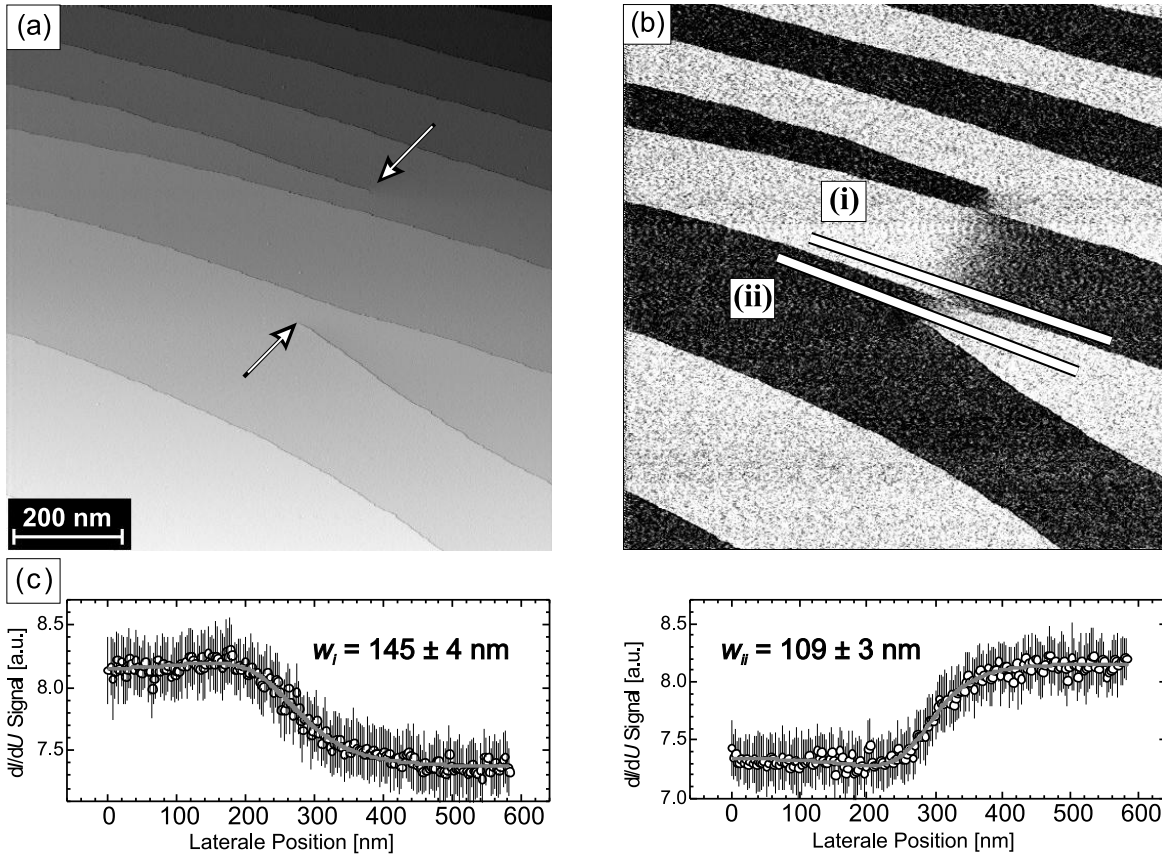


Abbildung 4.11: **a)** Topographie und **(b)** spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche, die im *Konstant-Strom-Modus* simultan bei $U = -150$ mV und $I = 0.7$ nA aufgenommen wurden. Die Schraubenversetzungen, in (a) mit zwei Pfeilen markiert, führen zu einer Frustration, die wiederum die Ursache für die Bildung einer Domänenwand zwischen ihnen ist. **(c)** Linien-Profile der Domänenwand, die entlang der weißen Boxen (i) und (ii) aufgenommen wurden. Ein nach Gl. 4.1 berechnetes Domänenwandprofil (durchgezogene graue Linie in (c)), das an die gemessenen Daten angepasst wurde, liefert Domänenwandbreiten von 145 nm und 110 nm.

Wie bereits erwähnt, ist die Magnetisierung der Fe-beschichteten W-Spitzen vorzugsweise senkrecht zur Spitzenachse orientiert. Hieraus resultiert eine Sensitivität auf die in der Probenebene liegende (in-plane) Magnetisierung. Die Linienprofile der Domänenwände aber zeigen, dass es zu einer leichten Verkipfung kommen kann, die eine zusätzliche Sensitivität auf die Magnetisierung senkrecht zur Probenebene (out-of-plane) bedeutet. Es ist daher nicht möglich, auf der Basis der experimentellen Befunde, wie sie in Abb. 4.11 (b) gezeigt sind, zu bestimmen, ob es sich um eine Néel- oder Blochwand handelt, d.h. ob die Magnetisierung in der Mitte der Wand senkrecht oder parallel zur Wandebene orientiert ist. Bei Materialien mit einer ferromagnetischen Ordnung im Volumen, z.B. Fe, treten bevorzugt Bloch-Domänenwände auf, weil damit „magnetische Ladungen“ vermieden und somit die Streufeldenergie minimiert werden [49]. An der Oberfläche erzeugt jedoch auch eine Blochwand ein Streufeld, welches aber durch die Bildung von Oberflächenabschlussdomänen minimiert wird [50]. Ein Antiferromagnet weist kein Streufeld auf, da sich aneinander grenzende magnetische Momente gegenseitig aufheben. Folglich dominieren andere Parameter die Struktur der Domänenwand,

wie z.B. die Oberflächenanisotropie. Die Ergebnisse aus Röntgen-Streuexperimenten [47] und RTS-Messungen [48] an der Cr(001)-Oberfläche, wie in Kap. 4.2 erwähnt, liefern erste Hinweise, dass sich die CDW und die SDW senkrecht zur Probenoberfläche ausbreiten. Dies hat zur Folge, dass die Magnetisierung für $T_{\text{SF}} < T < T_{\text{N}}$ vorzugsweise in der Probenebene liegt. Es ist daher zu erwarten, dass die Magnetisierung in der Domänenwand in der Probenebene bleibt und somit sich eine Néel-Wand ausbildet. Zur endgültige Bestimmung der Magnetisierung in der Domänenwand werden Spitzen mit einer out-of-plane Sensitivität benötigt. Da aber nicht auszuschließen ist, dass solche Spitzen auch eine in-plane Komponente aufweisen können, d.h. auch sensitiv auf eine Magnetisierungsorientierung in der Ebene sind, sollten die Kontrollmessungen in einem externen Magnetfeld erfolgen. Die Feldstärke sollte dabei so gewählt werden, dass sie gerade ausreicht, die Magnetisierung der Spitze vollständig senkrecht zur Probenebene auszurichten, ohne dabei die magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche zu beeinflussen. Auf Grund der antiferromagnetischen Ordnung im Chrom sollte dieses zu realisieren sein.

Wie bisher gezeigt wurde, werden die beobachteten Domänenwände durch Schraubenversetzungen verursacht. Ihre mittlere Breite beträgt dabei 120-170 nm, solange die Messung in ausreichendem Abstand zur Schraubenversetzung erfolgt. Analog zu den Domänenwänden in Ferromagneten wird durch intrinsische Parameter, wie z.B. die Stärke der Austauschkopplung und der magnetokristallinen Anisotropie, die Domänenwandbreite bestimmt. Zusätzlich wird ein Einfluss durch die Schraubenversetzung erwartet, und zwar in einem Abstand r , bei dem der Kreisumfang gleich groß oder kleiner wird als die intrinsische Wandbreite selbst. Im Folgenden wurde die Abhängigkeit der Domänenwandbreite vom Abstand zur Schraubenversetzung auf der Cr(001)-Oberfläche genauer untersucht. Die experimentellen Ergebnisse sind in Abb. 4.12 dargestellt. Die Topographie (a) weist eine Schraubenversetzung oben links auf und wurde im *Konstant-Strom-Modus* bei einer Bias-Spannung von $U = -43$ mV aufgenommen. Die dazu gleichzeitig gemessene dI/dU -Karte zeigt, dass die Schraubenversetzung als Startpunkt einer Domänenwand dient, die sich zum oberen Rand des Bildes ausbreitet. Angefangen am Ende des Pfeils in Abb. 4.12 (b) wurden um die Schraubenversetzung herum acht kreisförmige Linienprofile gegen den Uhrzeigersinn bei verschiedenen Radien r_{avg} von 75 nm bis 7.5 nm aufgenommen. Die Daten der Messungen sind in Abb. 4.12 (c) zu sehen. Um das Signal-Rausch-Verhältnis zu verbessern, erfolgte eine Mittelung der Daten zwischen einem minimalen (r_{min}) und einem maximalen (r_{max}) Radius durch eine radiale Projektion der gemessenen Daten auf r_{min} . Es wurde, mit Ausnahme des kleinsten mittleren Radius ($r_{\text{avg}} \pm 2.5$ nm) immer über einen Bereich $r_{\text{avg}} \pm 5$ nm gemittelt. Wie bei der ersten Fit-Prozedur der ungestörten Domänenwände, wurde auch hier wieder Gleichung 4.1 benutzt, um ein berechnetes Domänenwandprofil an die Daten anzupassen. Diesmal erfolgte die Fit-Prozedur jedoch in zwei Schritten. Im ersten Durchgang wurden alle acht Domänenwandprofile separat, d.h. mit individuellen Fit-Parametern y_0 , y_{sp} und ϕ , den gemessenen Daten angepasst. Da die experimentellen Daten der acht Domänenwandprofile aus einem einzigen Datensatz (Abb. 4.12 (b)) stammen, sollten die Fit-Parameter y_0 , y_{sp} und ϕ für alle identisch sein. Tatsächlich belegt die sehr geringe Variation für die gefundenen Werte dies sehr deutlich ($y_0 = 8.81 \pm 0.02$, $y_{\text{sp}} = 0.48 \pm 0.02$ und $\phi = -57 \pm 2^\circ$). Im zweiten Durchgang wurden die Mittelwerte y_0 , y_{sp} und ϕ für alle fixiert, so dass als Fit-Parameter nur noch die Wandbreite w und ihre Position x_0 verblieben. Die schwarzen Linien in Abb. 4.12 (c) sind das Ergebnis der Fit-Prozedur. Mit Ausnahme des Falles des kleinsten mittleren Radius ($r_{\text{avg}} \pm 2.5$ nm) lassen

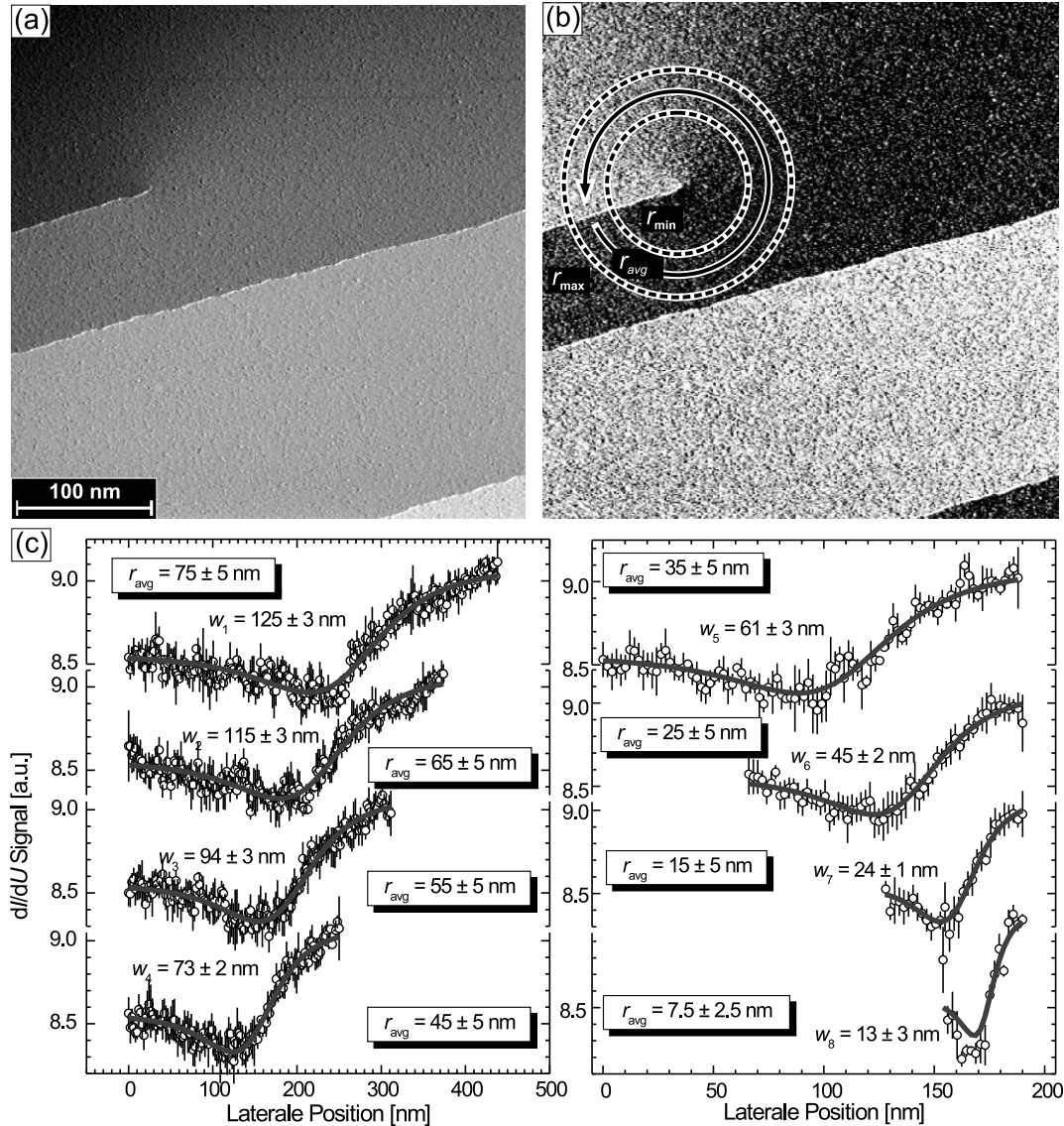


Abbildung 4.12: (a) Topographie und (b) spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche, die im *Konstant-Strom-Modus* simultan bei $U = -43$ mV und $I = 0.22$ nA aufgenommen wurden. Die Schraubenversetzung ist die Ursache für die Bildung einer Domänenwand. (c) Kreisförmige Linien-Profile der Domänenwand, die entlang des Pfeils bei verschiedenen Radien um die Schraubenversetzung herum aufgenommen wurden.

sich die experimentellen Daten sehr gut mit Gleichung 4.1 beschreiben. Bei einem mittleren Radius $r_{\text{avg}} = 75$ nm beträgt die Domänenwandbreite $w_1 = 125 \pm 3$ nm. Dies liegt noch in der Größenordnung der mittleren Domänenwandbreite, die in einer ausreichenden Entfernung zur Schraubenversetzung gemessen wurde. Erwartungsgemäß übertrifft der Kreisumfang (hier beträgt er 471 nm) die Domänenwandbreite bei weitem. Überraschend ist, dass bei einem Radius unter 60 nm eine signifikante Reduzierung der Domänenwandbreite zu beobachten

ist, obwohl der entsprechende Kreisumfang die intrinsische Domänenwandbreite überbietet. Die folgenden Werte wurden für die Domänenwandbreite gefunden (in Klammern steht der zum Radius gehörende Kreisumfang): $w_1 = 125 \pm 3$ nm (471 nm), $w_2 = 115 \pm 3$ nm (408 nm), $w_3 = 94 \pm 3$ nm (346 nm), $w_4 = 73 \pm 2$ nm (283 nm), $w_5 = 61 \pm 2$ nm (220 nm), $w_6 = 45 \pm 2$ nm (157 nm), $w_7 = 24 \pm 1$ nm (94 nm) und $w_8 = 13 \pm 3$ nm (47 nm). Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass die Domänenwandbreite stets beträchtlich kleiner als der Umfang des kreisförmigen Linienprofils ist.

Mittels mikromagnetischer Rechnung [51] wurde die Spinstruktur um eine Schraubenversetzung simuliert. Die magnetische Frustration, die durch eine Schraubenversetzung verursacht wird, wurde durch eine negative Austauschkopplung entlang der Linie $\overline{AB}$ in Abb. 4.13 (a) generiert, während überall sonst eine positive Austauschkopplung vorliegt. Die Probe hat eine Ausdehnung von $1000 \text{ nm} \times 750 \text{ nm}$ bei einer Höhe von 2 nm. Für die Rechnung wurde sie in $1 \text{ nm} \times 1 \text{ nm} \times 2 \text{ nm}$ kleine Zellen unterteilt. Aus der Beziehung $w = 2\sqrt{A/k}$ lässt sich die Domänenwandbreite w direkt durch das Verhältnis A/k bestimmen. A bezeichnet dabei die so genannte Austauschsteifigkeit und k die effektive Anisotropie der Energiedichte. Basierend auf der gemessenen mittleren Domänenwandbreite $w = 150$ nm erhält man $A_{\text{Cr}}/k_{\text{Cr}} = 5.625 \times 10^{-15} \text{ m}^2$, was folgende Werte für A_{Cr} und k_{Cr} vermuten lässt: $A_{\text{Cr}} = 1 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ und $k_{\text{Cr}} = 1.77 \times 10^3 \text{ J/m}^3$. Im Vergleich hierzu ist der Wert für Fe: $A_{\text{Fe}} = 2 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ [58]. Die Tatsache, dass der „Stoner-Parameter“ I von Cr ($I_{\text{Cr}} = 0.58$ – 0.68 eV, [52–54]) etwas kleiner ist als der für Fe ($I_{\text{Fe}} = 0.88$ eV [55]), sollte die oben gemachten Annahmen rechtfertigen. Auf Grund der antiferromagnetischen Ordnung weist Cr kein Streufeld auf, wodurch die Berücksichtigung eines Demagnetisierungsfeldes obsolet wurde.

Die durchgeführten Rechnungen zeigten, dass eine magnetokristalline Anisotropie mit vierzähliger Symmetrie, wie sie bei einer (001)-Oberfläche eines Kristalls mit bcc-Gitterstruktur zu erwarten ist, immer zu einer Bildung von zwei separaten 90° -Domänenwänden um eine Schraubenversetzung führt. Ein ähnliches Verhalten ist auch bei ferromagnetisch kubischem Material ohne einen uniaxialen Anteil an der Anisotropie zu beobachten [49]. Dies widerspricht den experimentellen Ergebnissen, die eindeutig eine einzelne 180° -Domänenwand zeigen. Zur Wiedergabe der experimentellen Befunde in der Simulation, musste eine effektive uniaxiale Anisotropie in der Rechnung eingeführt werden. In Analogie zu einem kubischen, ferromagnetischen Material, kann die Ursache dafür in der magnetostriktiven „Eigenenergie“ liegen [49]. Aus der Tatsache, dass das Domänenwandprofil nur einen Wendepunkt besitzt, folgt für das Verhältnis zwischen der magnetostriktiven und magnetokristallinen Anisotropie: $\kappa = K_{\text{ms}}/K_{\text{mc}} \geq -0.5$ (Ref. [49], S. 227ff). Unter der Annahme, dass $k_{\text{Cr}} = 1.77 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ durch den magnetostriktiven Anteil dominiert wird, erhält man mit $K_{\text{ms}} = \frac{9}{2}C_2\lambda_{100}^2$ [49] und dem Scher-Modul $C_2 \approx 1.4 \times 10^{11} \text{ N/m}^3$ für die Magnetostriktion $\lambda_{100} \approx 10^{-4}$ – 10^{-5} ; nach Hubert und Schäfer (Ref. [49], S. 134) ist das ein typischer Wert für die Magnetostriktion.

Die Simulation auf Basis der oben genannten Material-Parameter liefert eine Domänenwandbreite (s. eingebettete Figur in Abb. 4.13 (a)), die in guter Übereinstimmung mit der experimentell gefundenen ist, solange der mittlere Radius des kreisförmigen Linienprofils ($r_{\text{avg}} \geq 240$ nm) um die Schraubenversetzung ausreichend groß gewählt wird.

Nachdem festgestellt wurde, dass die Entfernung zur Schraubenversetzung einen Einfluss auf die Domänenwandbreite hat, bleibt zu klären, ob die Drehung der Magnetisierungsorientierung in der Domänenwand ebenso durch die Nähe zur Schraubenversetzung beeinflusst

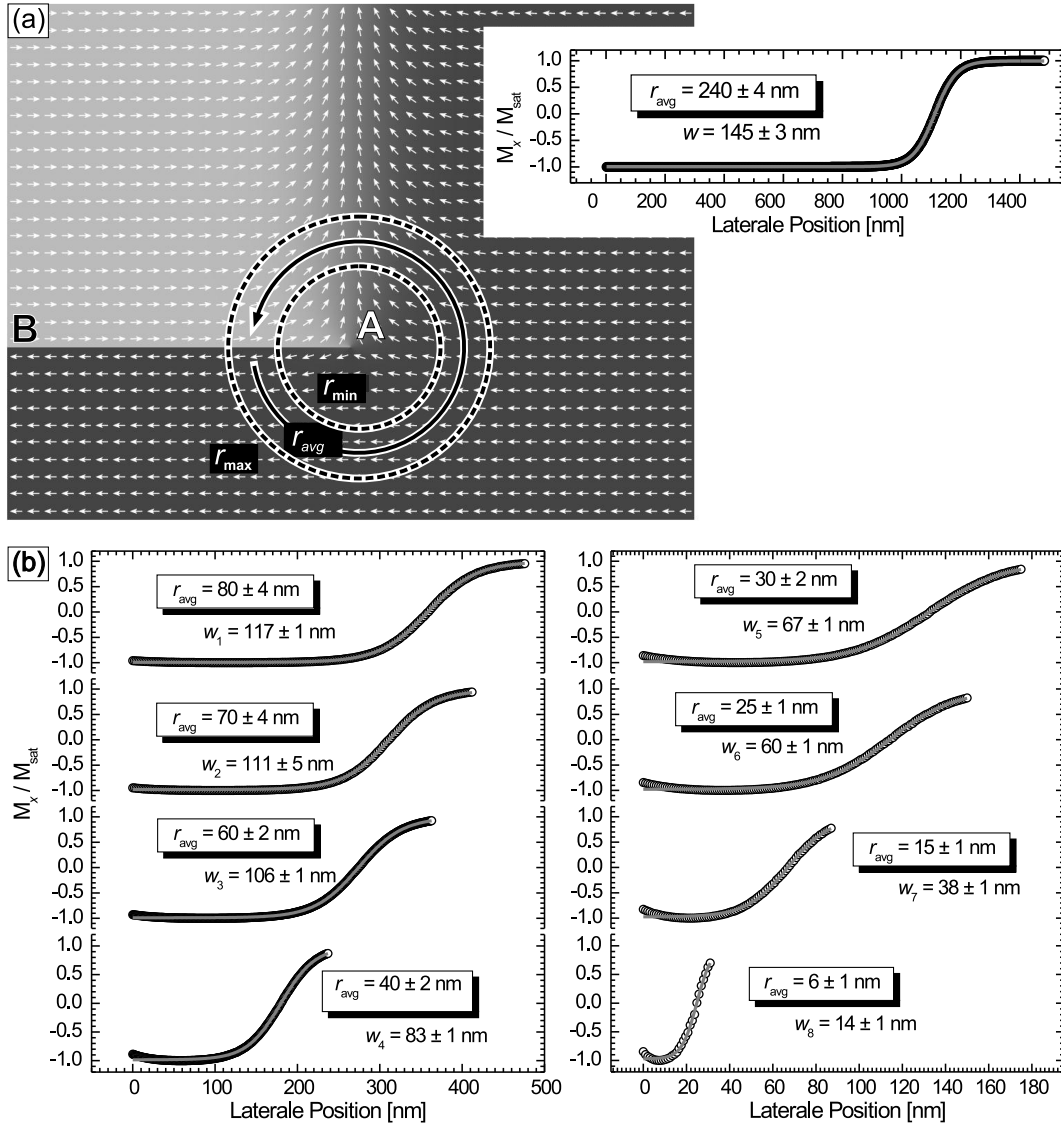


Abbildung 4.13: (a) Simulierte Spinkonfiguration einer Schraubenversetzung (1000 nm $\times$ 750 nm). Die eingebettete Figur zeigt das bei einem Radius von $r_{\text{avg}} = 240 \text{ nm}$ aufgenommene kreisförmige Linienprofil um die Schraubenversetzung, welches die x-Komponente der gemessenen Magnetisierung widerspiegelt. Radien von $r_{\text{avg}} \geq 240 \text{ nm}$ resultieren in Domänenwandbreiten, die konsistent mit denen einer unendlichen Domänenwand sind. (b) Kreisförmige Querschnitte der berechneten Spin-Struktur (o) aufgenommen bei unterschiedlichen Radien um die Schraubenversetzung. Jedes Linienprofil wurde mit Gl. 4.1 an die Daten angepasst (durchgezogene, graue Linie).

wird. In gewisser Hinsicht ist dabei die Spinstruktur um eine Schraubenversetzung auf der Cr(001)-Oberfläche (s. Abb. 4.13 (a)) vergleichbar der auf kleinen ferromagnetischen Inseln, z.B. bei punktförmigen Inseln aus Permalloy im Sub-Mikrometerbereich [56, 57] oder kleinen Fe-Inseln auf W(110) [58]. Um deren Streufeldenergie zu minimieren, wird eine magnetische

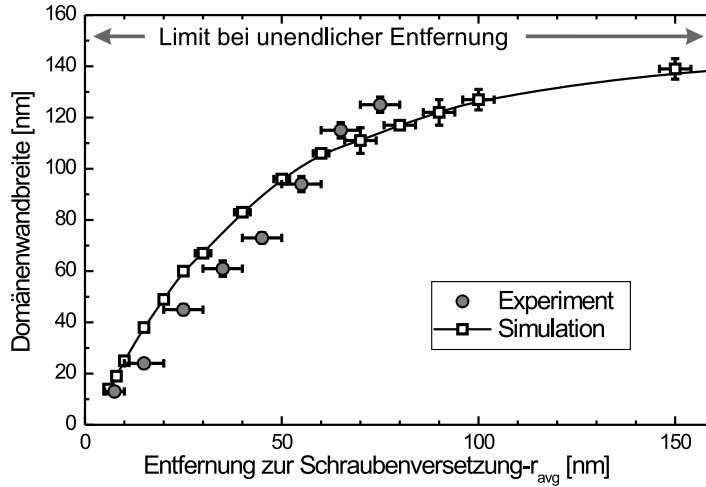


Abbildung 4.14: Vergleich der experimentell bestimmten und der mikromagnetisch simulierten Domänenwandbreite in einem lageweißen Antiferromagneten in Abhängigkeit von der Entfernung zur Schraubenversetzung. Die durchgezogene Linie soll den Verlauf verdeutlichen.

Wirbelstruktur gebildet, bei der sich die Magnetisierung sich kontinuierlich tangential um den Mittelpunkt des Teilchens dreht. Am Rand des Teilchens liegt die Magnetisierung in der Probenoberfläche (in-plane Magnetisierung), während sie am Mittelpunkt senkrecht zur Probenoberfläche (out-of-plane Magnetisierung) orientiert ist. Der Übergang von der planaren zur senkrechten Magnetisierung definiert den Wirbelkernbereich, dessen laterale Ausdehnung in etwa 10 nm beträgt. In diesem Bereich nimmt der Anteil der out-of-plane Magnetisierung graduell von außen zur Mitte gehend zu, bis am Mittelpunkt eine reine out-of-plane Magnetisierung vorliegt. Mittels spinaufgelöster RTM konnten Wachowiak *et al.* [58] zeigen, dass die Form und die Größe des Vortex-Kernbereiches nur durch zwei Material-Parameter, die Austauschsteifigkeit und die Sättigungsmagnetisierung, bestimmt wird. Die Sättigungsmagnetisierung bestimmt wiederum die Streufeldenergie. Das oben erläuterte Beispiel unterscheidet sich von der Situation um eine Schraubenversetzung in einem Antiferromagneten jedoch in zwei Punkten: (i) Im Gegensatz zum ferromagnetischen Wirbel, bei dem die sich kontinuierlich um 360° drehende Magnetisierung aus topologischen Gründen zu einer senkrechten Magnetisierung im Kernbereich des Wirbels führt, verursacht der Schnittpunkt der Schraubenversetzung an der Probenoberfläche nur einen Wechsel des Vorzeichens der Kopplungskonstanten (von positiv zu negativ bzw. umgekehrt) entlang der Schnittlinie $\overline{AB}$. Die daraus resultierende magnetische Frustration kann entweder durch eine Drehung der Magnetisierung in der Probenebene oder aus der Probenebene heraus kompensiert werden. Anders ausgedrückt ist eine senkrechte Magnetisierung in der Nähe der Schraubenversetzung zwar möglich, aber nicht zwingend notwendig. (ii) Wie bereits erwähnt, werden bei Ferromagneten die Größe und die Form des Vortex-Kernbereiches durch die Austauschsteifigkeit und die Sättigungsmagnetisierung bestimmt. Da ein Antiferromagnet aber kein Streufeld aufweist, muss die Sättigungsmagnetisierung durch die effektive Anisotropie ersetzt werden. Unter Berücksichtigung der Oberflächenanisotropie und der Annahme, dass die untersuchten Domänenwände vom Néel-Typ sind, sollte die Magnetisierung um eine Schraubenversetzung auf

der Cr(001)-Oberfläche in der Probenebene liegen. Um diese Frage endgültig zu klären, müssen Kontrollmessungen mit senkrecht magnetisierten Spitzen erfolgen, wie sie schon vorher bei der Bestimmung des Domänenwandtypes beschrieben wurden.

In Analogie zu den oben präsentierten Ergebnissen (s. Abb. 4.12 (b)) wurden um die simulierte Schraubenversetzung (Punkt A) acht kreisförmige Querschnitte mit verschiedenen Radien r_{avg} aufgenommen. Die gewonnenen Linienprofile sind in Abb. 4.13 (b) zu sehen. Zur Bestimmung der Domänenwandbreite wurden die simulierten Daten erneut nach Gleichung 4.1 angepasst. Das Resultat ist durch die graue Linie in Abb. 4.13 (b) dargestellt. Die experimentellen und theoretischen Ergebnisse sind in Abb. 4.14 zusammengefasst. Die hervorragende Übereinstimmung zwischen den experimentellen und den mikromagnetisch simulierten Daten bestätigt, dass die Spinkonfiguration um eine Schraubenversetzung in einem lagenweisen Antiferromagneten durch die Austauschsteifigkeit A und die effektive Anisotropie k bestimmt ist. Die geringe Abweichung für Radien von $20 \text{ nm} \leq r_{\text{avg}} \leq 50 \text{ nm}$ kann durch die elastische Deformation des Kristallgitters um Schraubenversetzungen herum verursacht sein, welche in den Simulationen nicht berücksichtigt wurden.

4.3.2 Stufenversetzungen

Die zweite Form der im Kristall nachweisbaren Versetzungen ist die Stufenversetzung. Die Messergebnisse aus Abb. 4.15 geben den ersten Hinweis auf die Existenz derartiger Versetzungen auf der Cr(001)-Oberfläche. Das Topographie-Bild (a), im *Konstant-Strom-Modus* aufgenommen, weist elf normale Stufenkanten auf, die von der oberen linken Ecke zur unteren rechten Ecke des Bildes verlaufen. Sie werden durch eine weitere Stufenkante geschnitten, die fast senkrecht zu ihnen verläuft. Letztere wird wahrscheinlich durch eine relaxierte Stufenversetzung verursacht. Auf Grund der Überschneidung existieren Doppel-Stufen an den Schnittpunkten mit Knickstellen auf jeder Stufenkante. Es ist anzunehmen, dass die halb-unendliche Gitterebene, die in den Kristall eingefügt wurde (vgl. dunkle Gitterpunkte in Abb. 4.10 (b)), während des letzten Heizprozesses der Präparation an die Oberfläche gewandert ist, so dass die vorher existierende Stufenversetzung vernichtet wurde. Die Querschnitte, aufgenommen entlang der vier Boxen in Abb. 4.15 (a) und (b), sind unter den jeweiligen Bildern dargestellt. Die Linienprofile für die normalen Stufen ((i) und (ii)) und die relaxierten Stufenversetzungen ((iii) und (iv)) ergeben eine identische Stufenhöhe von $1.47 \pm 0.03 \text{ nm}$, passend zur Gitterkonstanten von Cr. Die spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit in Abbildung 4.15 (b) belegt, dass jede Stufenkante, unabhängig von ihrer Ursache, zu einer Umkehrung der Oberflächenmagnetisierung führt, d.h. der topologische Antiferromagnetismus wird stets beibehalten.

Aufnahmen der Topographie und des magnetischen dI/dU -Signals über einen großen Bereich sind in Abb. 4.16 (jeweils in (a) und (b)) zu sehen. Im oberen Bereich der Bilder ist eine relaxierte Stufenversetzung zu erkennen. In der Topographie (a) erscheint sie nur sehr schwach (links und rechts markiert durch weiße Pfeile), da sie annähernd parallel zur schnellen Rasterichtung verläuft. Auf Grund der dadurch verursachten Störung der magnetischen Ordnung ist diese in der Karte des magnetischen dI/dU -Signals um so deutlicher zu erkennen. Zusätzlich zur relaxierten Stufenversetzung tritt eine „nicht-kontinuierliche Stufenkante“ auf (links und rechts markiert durch schwarze Pfeile). Dabei hat jede Stufenkante an der entsprechenden örtlichen Position eine s-förmige Krümmung, die aus einem lateralen Offset, äquivalent zu einer Terrassenbreite, resultiert. Desweiteren zeigt der untere Teil des Bildes

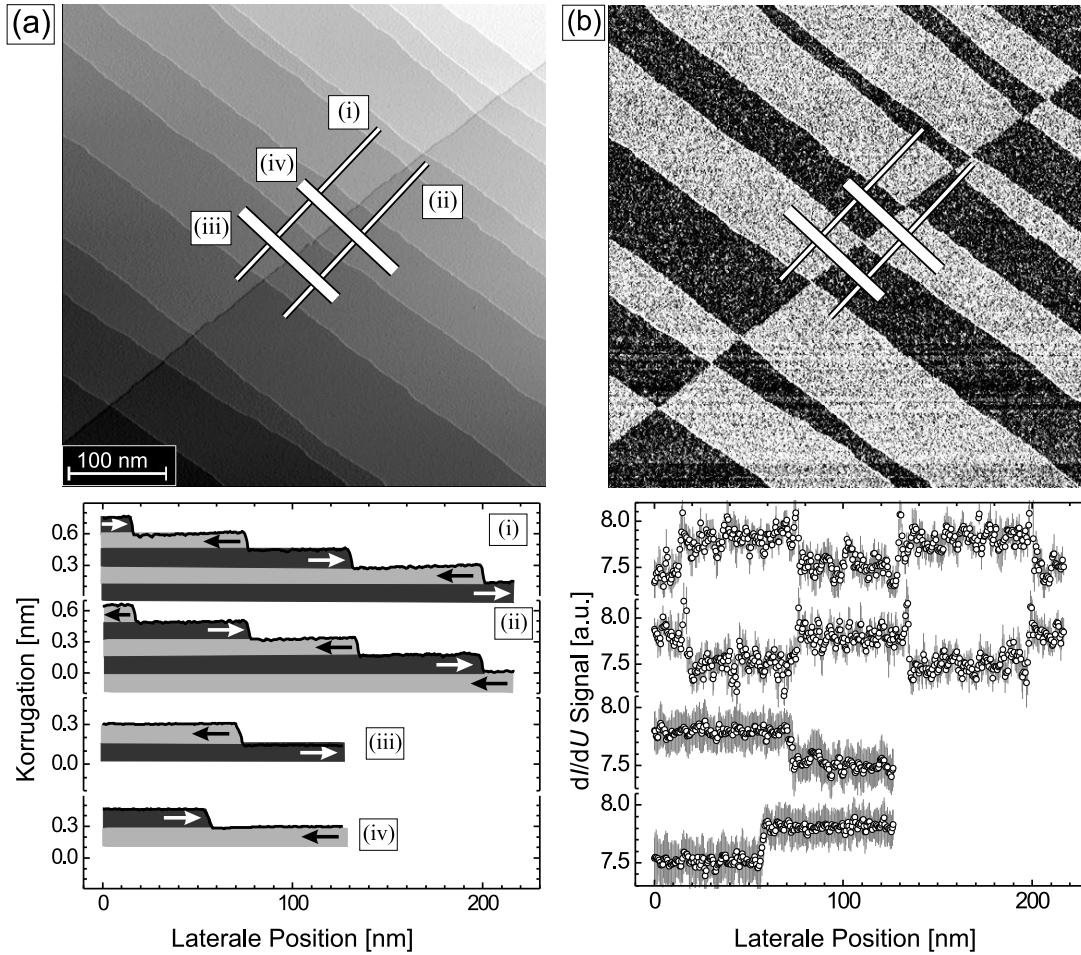


Abbildung 4.15: (a) Topographie und (b) spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche mit einer Stufenversetzung (Aufnahmeparameter: $U = -130$ mV, $I = 0.5$ nA). Im unteren Teil sind die Linien-Profile dargestellt, die entlang der Boxen (i)-(iv) aufgenommen wurden. Der topologisch bedingte Antiferromagnetismus wird durch eine Stufenversetzung nicht gestört.

eine Erniedrigung um den Wert einer halben Cr-Gitterkonstanten. Eine mögliche Erklärung für diese strukturelle Besonderheit könnte eine relaxierte Stufenversetzung sein, bei der aber, im Gegensatz zu der in Abb. 4.12 gezeigten, die Stufenkanten zur Vermeidung energetisch ungünstiger Knickstellen geglättet sind. Auch bei diesem strukturellen Defekt wird die magnetische Struktur auf der Cr(001)-Oberfläche, wie sie durch das Modell des topologischen Antiferromagnetismus beschrieben wird und in Abb. 4.16 (b) noch einmal wiedergegeben ist, strikt beibehalten. Dieses liefert die Bestätigung für einen konstanten Kontrast im magnetischen dI/dU -Signal der Cr(001)-Oberfläche. Kompositionen aus beiden Versetzungstypen finden sich im mittleren Teil der Abb. 4.16, bestehend aus jeweils zwei Stufenversetzungen, die zusammen einen stumpfen Winkel ($\approx 150^\circ$) bilden, an dessen Enden sich Schraubenversetzungen (Kreise) befinden.

Eine komplexere Anordnung aus Schraubenversetzungen und beiden Formen der Stufenversetzungen, inkl. Kompositionen aus beiden Versetzungstypen, sind in der Übersichtsaufnahme in Abb. 4.17 zu sehen, wobei (a) die Topographie und (b) die spinaufgelösten Karten

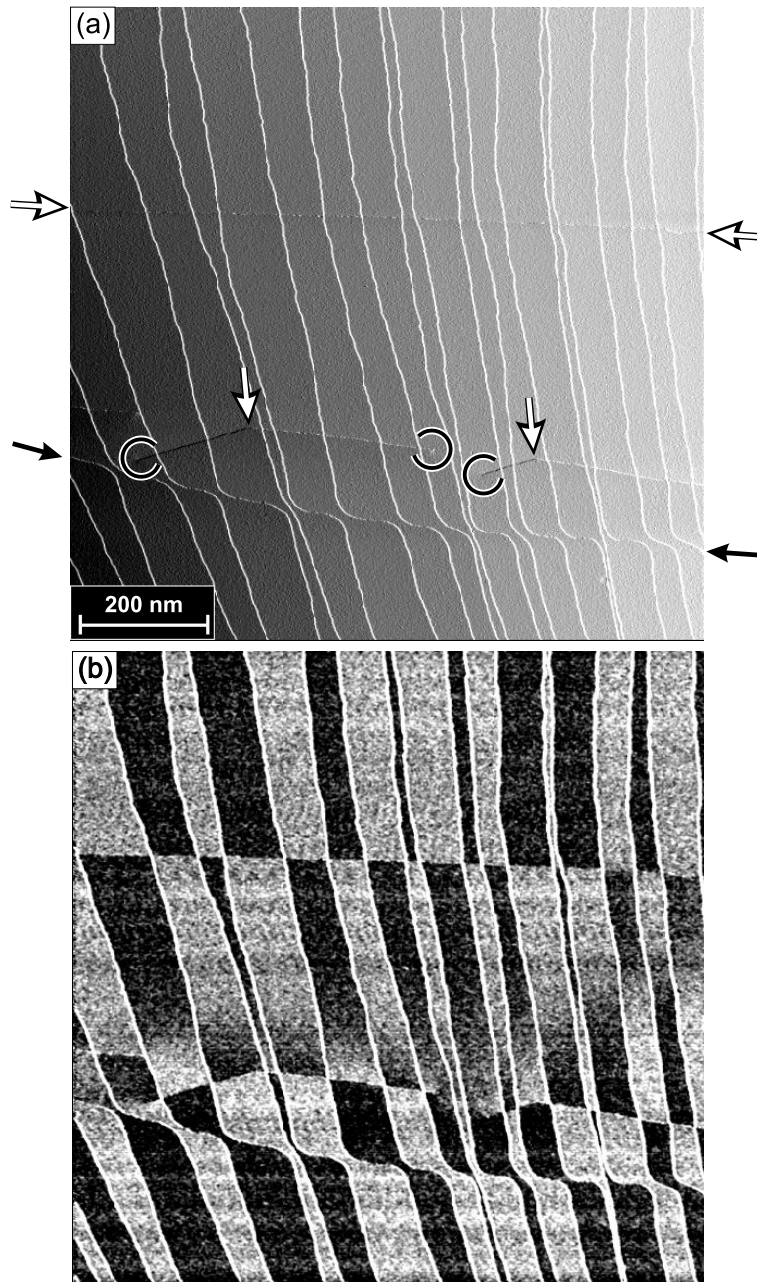


Abbildung 4.16: (a) Topographie und (b) spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche, die im *Konstant-Strom-Modus* simultan bei $U = -130$ mV und $I = 0.5$ nA aufgenommen wurden. Es sind mehrere Stufen- und Schraubenversetzungen erkennbar, die durch die Pfeile bzw. offenen Kreise markiert sind.

der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche zeigt. Beide Übersichtsaufnahmen bestehen aus jeweils sechs einzelnen SP-RTM-Bildern mit einer Kantenlänge von $1\text{ }\mu\text{m}$. Auf der linken Seite ist eine „nicht-kontinuierliche Stufenkante“ mit der bekannten s-Form zu erkennen (weiße Pfeile am Bildrand), die durch zwei Schraubenversetzungen (offene Kreise) unterbrochen ist. Zusätzlich finden sich sowohl Kompositionen aus relaxierten Stufenversetzungen und

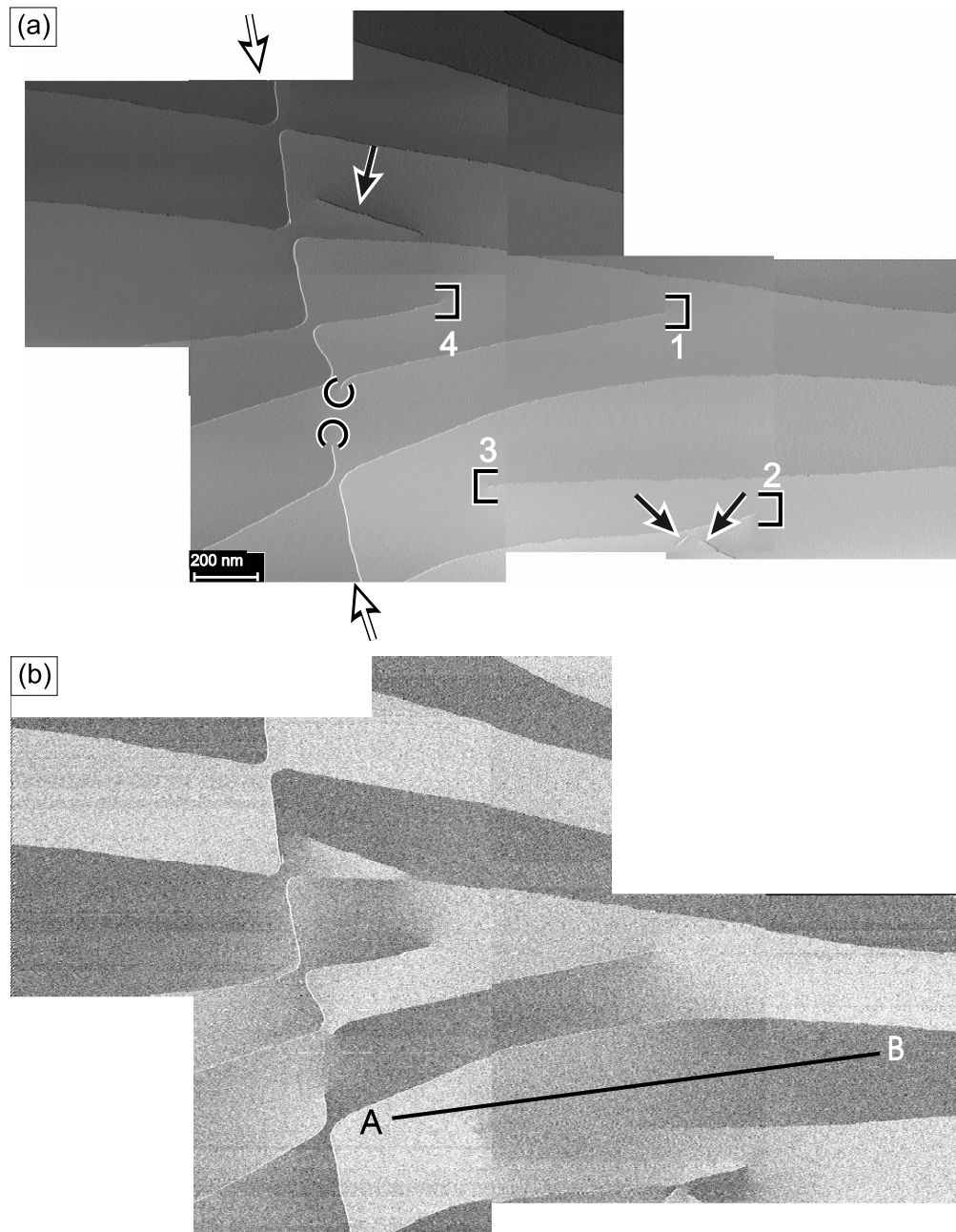


Abbildung 4.17: Übersichtsaufnahme, zusammengesetzt aus jeweils sechs Einzelbildern, der (a) Topographie und der (b) spinaufgelösten Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche, die im *Konstant-Strom-Modus* simultan bei $U = -150\text{ mV}$ und $I = 0.7\text{ nA}$ aufgenommen wurden. Es sind eine „nicht-kontinuierliche Stufenkante“ (weiße Pfeile) und mehrere Schraubenversetzungen erkennbar.

Schraubenversetzungen (schwarze Pfeile) als auch einfache Schraubenversetzungen (offene Vierecke). Wie zuvor beschrieben, führen Stufenversetzungen zu keiner Störung der magnetischen Struktur. Schraubenversetzungen hingegen verursachen eine magnetische Frustration,

deren Grad von der Anzahl der Schraubenversetzungen abhängt. Die Untersuchungen aus Kap. 4.3.1 zeigten, dass zwischen zwei Schraubenversetzungen eine 180° -Domänenwand eingebaut wird. Bedingt durch die Magnetostriktion zerfällt sie nicht in zwei 90° -Wände, wie es bei einer magnetokristallinen Anisotropie mit vierzähliger Symmetrie zu erwarten wäre. Die bisherigen Untersuchungen erfolgten allerdings an alleinstehenden Domänenwänden, die zwischen zwei Schraubenversetzungen gebildet wurden. Was ist aber zu erwarten, wenn sich lokal mehr als zwei Schraubenversetzungen ansammeln? Bei einer geraden Anzahl bildet sich zwischen je zwei Schraubenversetzungen eine Domänenwand aus, so dass jede Schraubenversetzung den Ausgangs- bzw. Endpunkt genau einer Domänenwand bildet. Bei einer ungeraden Anzahl ist dies jedoch nicht möglich; es bleibt immer eine Schraubenversetzung ohne Gegenpart. Folglich muss mindestens eine Schraubenversetzung den Ausgangs- bzw. Endpunkt von zwei Domänenwänden bilden. Der Fall einer lokalen Ansammlung von drei Schraubenversetzungen ist in Abb. 4.17 (offene Vierecke 1-3) zu sehen. Wie erwartet bildet eine Schraubenversetzung (1) den Ausgangs- bzw. Endpunkt von zwei Domänenwänden, die zu den anderen beiden Schraubenversetzungen (2 und 3) verlaufen. Nach den Ergebnissen aus Kap. 4.3.1 sind in einer hinreichenden Entfernung zu den Schraubenversetzungen zwei 180° -Wände mit einer mittleren Breite von etwa 150 nm zu erwarten. Auch wenn eine exakte Auswertung durch das Zusammensetzen der Einzelbilder in Abb. 4.17 (b) verhindert wird, ist dennoch klar ersichtlich, dass entlang der Linie $\overline{AB}$ nur *ein* breiter Übergang auftritt, der sich über 500 ± 100 nm erstreckt und somit die mittlere Domänenwandbreite bei weitem überschreitet. Im Gegensatz zum Fall einer Domänenwand muss hier die magnetische Frustration über zwei Domänenwände abgebaut werden, d.h. dass bei Schraubenversetzung 1 nicht zwei 180° -Wände, sondern zwei 90° -Wände starten. Dadurch wird aber zwischen ihnen eine Domäne erzeugt, deren Magnetisierung relativ zum restlichen Bereich um 90° gedreht ist. Die Magnetostriktion, die ein Auseinanderfallen einer alleinstehenden 180° -Wand verhindert, führt in diesem Fall zur Verbreiterung der 90° -Wände [49].

4.4 90° -Domänen

Die Vierfach-Symmetrie des bcc-Chroms sollte eigentlich dazu führen, dass zwei entartete Domänen mit einer topologisch bedingten antiferromagnetischen Ordnung existieren, deren Orientierungen senkrecht zueinander stehen. Die spinaufgelöste RTM ist sensitiv auf die Projektion der Oberflächen- auf die Spitzenmagnetisierung (vgl. Gl. 2.31) und sollte deshalb die beiden Domänen durch einen in der Intensität unterschiedlichen Hell/Dunkel-Kontrast abbilden. Nur für den sehr unwahrscheinlichen Fall, dass der Winkel zwischen der Spitzenmagnetisierung und den Magnetisierungen in den *beiden* Domänen 45° beträgt, würde man identische Intensitäten erhalten. Die meisten spinaufgelösten Messungen zeigten keine solche Domänenstruktur, was möglicherweise auf ein Eindomänenverhalten der gesamten Oberfläche oder Domänen, die viel größer sind als der untersuchbare Bereich, hindeutet. Bei magnetischen Untersuchungen mittels Röntgenmikroskopie, die im Bereich der Spinflip-Temperatur durchgeführt wurden, fanden Evens *et al.* Domänen mit einer Größe bis zu einigen hundert μm . Der maximale Rasterbereich des hier verwendeten Mikroskop ($6\mu\text{m} \times 6\mu\text{m}$) macht es aber relativ unwahrscheinlich, zwischen solch großen Domänen auf die Domänenwände zu stoßen.

In seltenen Fällen konnte dennoch die erwartete Domänenstruktur gefunden werden, wie

in Abb. 4.18 zu erkennen ist. In der Topographie (a), aufgenommen im *Konstant-Strom-Modus*, sind eine Vielzahl von Stufen- und Schraubenversetzungen zu erkennen. Die spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit (b) zeigt deutlich zwei unterschiedliche Kontrastniveaus. Die Querschnitte, die entlang der zwei Boxen (I) und (II) aufgenommen wurden, sind in Abb. 4.18 (c) zu sehen. Wie vorhergesagt, sind zwei signifikant unterschiedliche Amplituden im dI/dU -Signal zu erkennen: Domäne I $A_I = 0.91$ a.u. (engl.: *arbitrary units*) und Domäne II $A_{II} = 0.44$ a.u.. Aus dem Verhältnis der beiden Amplituden lässt sich die relative Orientierung zwischen Spitzen- und Probenmagnetisierung über beiden Domänen berechnen, die durch die Relationen

$$\tan \alpha_1 = \frac{A_{II}}{A_I} \quad (4.2)$$

und

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 90^\circ. \quad (4.3)$$

bestimmt ist. Man erhält so $\alpha_1 = 25.8 \pm 4.5^\circ$ und $\alpha_2 = 64.2 \pm 4.6^\circ$. Das Ergebnis ist schema-

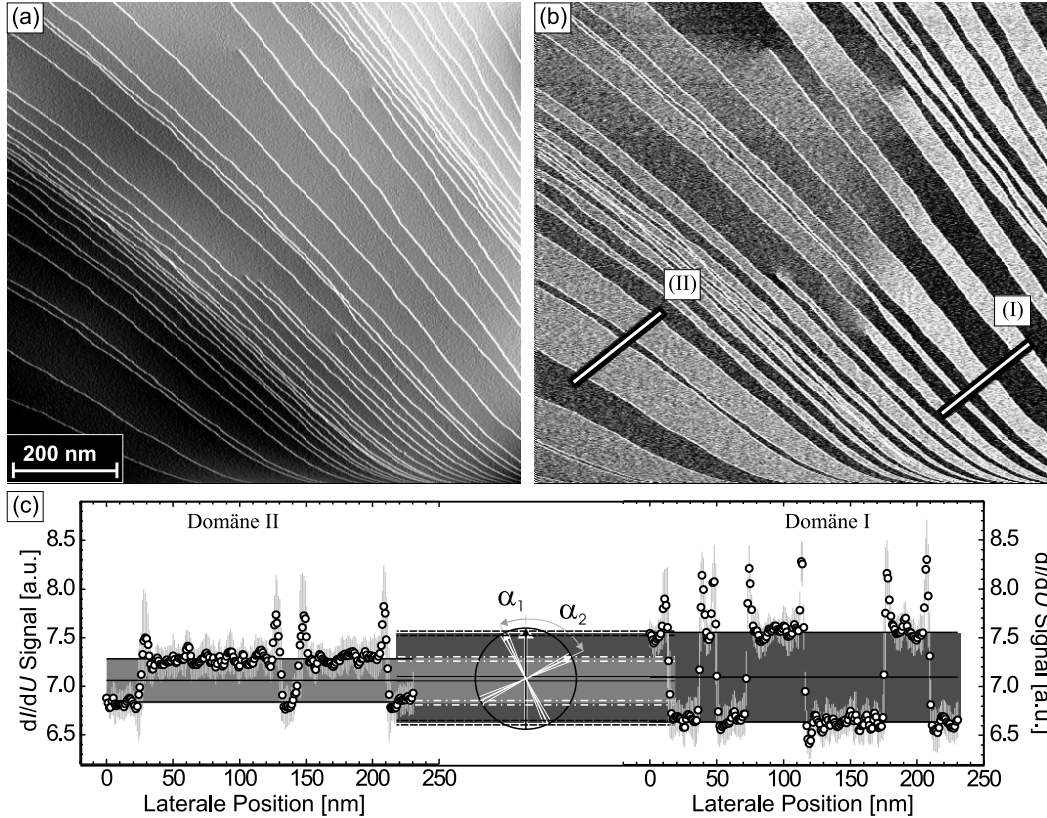


Abbildung 4.18: Übersichtsaufnahme der (a) Topographie und der (b) spinaufgelösten Karte der differentiellen Leitfähigkeit der Cr(001)-Oberfläche (Aufnahmeparameter: $U = -130$ mV und $I = 0.5$ nA) mit einer Vielzahl an Schraubenversetzungen. Der magnetische Kontrast in (b) ist rechts deutlich ausgeprägter als links. Die Ursache sind zwei um 90° zueinander verdrehte Domänen, entsprechend der Vierfach-Symmetrie der Cr(001)-Oberfläche. (c) Eine Analyse der Linien-Profile, die entlang der Boxen (i) und (ii) aufgenommen wurden, liefert den Azimuth-Winkel der Spitzenmagnetisierung.

tisch im mittleren Teil der Abbildung 4.18 (c) dargestellt, in der die Spitzenmagnetisierung durch den schwarzen Pfeil (nach oben zeigend) und die Orientierung der Probenmagnetisierung in den Domänen durch die zwei senkrecht zueinander stehenden weißen Pfeile (inkl. den Fehlerbalken) dargestellt ist.

Kapitel 5

Fe-Filme auf Cr(001)

Multilagensysteme, bestehend aus alternierenden Fe- und Cr-Schichten, zeigen eine außerordentliche Vielfalt magnetischer Charakteristika, z.B. die Austauschkopplung [1], den Riesenmagnetowiderstand [2] und die oszillatorische Zwischenlagenkopplung [59]. Wie aus theoretischen und experimentellen Studien bekannt ist, hängen die magnetischen Eigenschaften der Multilagensysteme nicht nur von der Dicke der Cr-Schicht ab, sondern werden u.a. auch von der intrinsischen magnetischen Struktur des Chroms, sowie der Beschaffenheit der Fe/Cr-Grenzschicht (z.B. Durchmischung) beeinflusst.

Sauberes Chrom ist, wie bereits im vorherigen Kapitel erläutert, ein Antiferromagnet mit einer t-SDW unterhalb der Néel-Temperatur $T_N = 311$ K. Bei der Spin-Flip-Temperatur $T_{SF} = 123$ K erfolgt ein Reorientierungsübergang von der t-SDW zur l-SDW. In beiden Fällen liegt die Ausbreitungsrichtung entlang einer beliebigen $\{001\}$ -Richtung. Es ist bekannt, dass die Austauschkopplung an der Grenzfläche zweier halbunendlicher Fe- und Cr-Kristalle negativ ist, d.h. Fe und Cr koppeln antiferromagnetisch. Dementsprechend sollten bei einem perfekten Fe/Cr/Fe-System ohne Durchmischung an den zwei Grenzschichten die beiden Fe-Schichten ferromagnetisch [FM] (antiferromagnetisch [AFM]) koppeln, wenn eine ungerade (gerade) Anzahl an atomaren Cr-Lagen vorliegt. Während *ab initio* und semi-empirische Theorien diese Annahme unterstützen, liefern experimentelle Studien ein gegenteiliges Bild. So belegen Rasterelektronen-Mikroskopie mit Polarisationsanalyse (engl.: *scanning electron microscopy with polarization analysis* (SEMPA)) [60] und Brillouin-Licht-Streuung (engl.: *Brillouin Light Scattering* (BLS)) gepaart mit magneto-optischen Kerr-Effekt- (MOKE) Messungen [61], dass die Phase der kurzwelligen Oszillation gegensätzlich zu der theoretisch vorhergesagten ist, d.h. eine ungerade (gerade) Anzahl an atomaren Cr-Lagen führt zu einer AFM (FM) Kopplung der Fe-Schichten.

Als eine mögliche Erklärung für diese π -Phasenverschiebung wurde von Heinrich *et al.* [26] eine Durchmischung an einer Grenzschicht vorgeschlagen. Unter Berücksichtigung thermodynamischer Aspekte und der unterschiedlichen Schmelztemperaturen von Fe und Cr sagten sie voraus, dass das Durchmischen nur an der Cr/Fe-Grenzschicht auftreten, während an der Fe/Cr-Grenzschicht beide Spezies chemisch scharf getrennt vorliegen sollten. RTM-Messungen von Davies *et al.* [62] belegten dann auch tatsächlich das Durchmischen von Cr auf einem Fe-Whisker; in der Anfangsphase des Aufdampfens von Chrom verblieben nur 25% der deponierten Cr-Atome auf der Fe(001)-Oberfläche, während die restlichen in das Substrat diffundierten. Jedoch konnten Choi *et al.* [30] im Gegensatz zum Postulat aus Ref. [26] zeigen,

dass es auch an der zweiten Grenzschicht, d.h. bei Fe auf Cr(001), zu einer Durchmischung kommt. Dieses wiederum würde nach Ref. [26] zu einer zusätzlichen Phasenverschiebung von π führen, mit dem Resultat, dass das gestörte Fe/Cr/Fe-System eine gesamte Phasenverschiebung um 2π hat, und es somit nicht von einem perfektem Fe/Cr/Fe-System zu unterscheiden wäre.

Eine weitere grundlegende Abweichung von einer perfekten Grenzschicht stellen Stufen auf der Substrat-Oberfläche dar. Diese führen beim Chrom zum bekannten topologischen Antiferromagnetismus [8], bei dem zwar auf jeder Terrasse die magnetischen Momente parallel orientiert, aber angrenzende Terrassen entgegengesetzt magnetisiert sind. Wird ein Fe-Film auf solch eine Oberfläche aufgedampft, kommt es auf Grund des Wettstreits zwischen der AFM Inter-Lagen-Kopplung an der Fe/Cr-Grenzschicht und der FM Intra-Lagen-Kopplung in der Fe-Deckschicht zu einer magnetischen Frustration. Die resultierende Domänenstruktur war zu Beginn dieser Arbeit noch unbekannt.

5.1 Präparation

Bei der **Präparation des Fe/Cr(001)-Systems** war es entscheidend, glatte Fe-Filme über den gesamten Bedeckungsbereich — und zwar ohne Durchmischung von Fe und Cr — zu erzeugen. In der Literatur werden häufig folgende zwei Methoden beschrieben:

1. Aufdampfen des Fe bei erhöhter Substrattemperatur,
2. Aufdampfen des Fe bei RT mit anschließendem Heizen des Probensystems.

Die Substrattemperatur T_S liegt nach Methode 1 [26–29] zwischen 480 – 590 K, und wurde bei den hier durchgeführten Wachstumsuntersuchungen entsprechend gewählt. In der oberen Zeile der Abb. 5.1 sind RTM-Aufnahmen der Topographie des Fe/Cr(001)-Systems für zwei Bedeckungen ($\Theta = 0.5$ ML und $\Theta = 16 \pm 1$ ML) dargestellt. Im Submonolagenbereich lieferte die erste Methode (s. Abb. 5.1 oben links; $T_S = 550$ K) das gewünschte Ergebnis: einen glatten Film ohne Anzeichen von Durchmischung. Bei einer Bedeckung $\Theta = 16 \pm 1$ ML hingegen (s. Abb. 5.1 oben rechts; $T_S = 510$ K) stellt sich ein Pyramidenwachstum ein, womit die erste Methode unbrauchbar wird.

Die Präparationsroutine von Choi *et al.* [30] diente als Grundlage, um nach der zweiten Methode das Fe/Cr(001)-System herzustellen. Choi *et al.* dampften die Fe-Filme bei RT mittels eines Elektronenstrahlverdampfers auf das saubere Cr-Substrat auf. Anschließend heizten sie das Gesamtsystem für 10 min. Um das Durchmischungsverhalten von Fe auf Cr(001) zu studieren, wählten sie Temperaturen von 475 K bis 575 K. Sie stellten fest, dass Fe und Cr ein Gemisch bilden, sichtbar an den Unterseiten der Stufenkanten und im Umfeld der Inseln, wenn sie Heiztemperaturen von $T = 475$ K und eine Bedeckung im niedrigen Submonolagenbereich wählten. Die Erhöhung auf $T = 575$ K führte dann zu einer vollständigen Inkorporation des Eisens in die Cr-Matrix. Analog zu Choi *et al.* wurden daher die Fe-Filme bei RT mit Hilfe eines Elektronenstrahlverdampfers mit Aufdampfraten von ca. 0.8 ML/min auf das saubere Cr-Substrat aufgebracht. Das anschließende Heizen erfolgte im Gegensatz zu Choi *et al.* nur für 4 min bei $T \simeq 500$ K. Das Ziel waren glatte Fe-Filme, wobei die Reduzierung der Heizzeit eine Durchmischung verhindern sollte. Auch nach der zweiten Methode wurden zwei Fe/Cr(001)-Proben mit unterschiedlichen Bedeckungen ($\Theta = 0.3$ ML und $\Theta = 16$ ML)

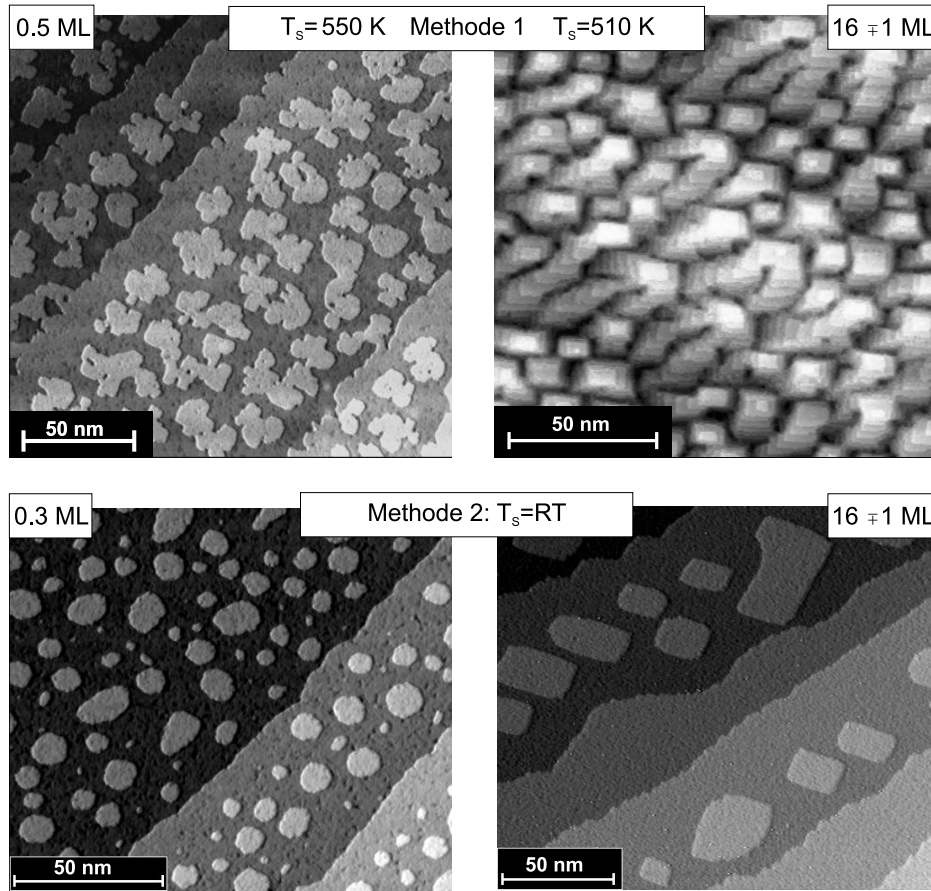


Abbildung 5.1: Topographie-Bilder von Fe/Cr(001)-Proben, die nach zwei unterschiedlichen Präparationsroutinen hergestellt wurden. **Methode 1** (obere Zeile): Bei Substrattemperaturen $T_s = 550\text{ K}$ und $T_s = 510\text{ K}$ wurden $\theta = 0.5\text{ ML}$ und $\theta = 16 \pm 1\text{ ML}$ Fe aufgedampft. Im Submonolagenbereich erhält man einen glatten Film (Inseln), während sich beim dicken Fe-Film ein Pyramidenwachstum zeigt. **Methode 2** (untere Zeile): Das Fe wurde bei RT aufgedampft und anschließend die gesamte Probe für 4 min auf $T = 475\text{ K}$ geheizt. Bei einer Bedeckung von $\theta = 0.3\text{ ML}$ (unten links) erhält man einen glatten Film (Inseln). Im Gegensatz zu Methode 1 erhält man auch bei hohen Fe-Bedeckungen einen glatten Film (unten rechts).

hergestellt. In der unteren Zeile der Abb. 5.1 sind RTM-Aufnahmen der Topographie bei der Fe/Cr(001)-Proben zu sehen. Im Submonolagenbereich (s. Abb. 5.1 unten links) erhielt man 1 Monolage hohe Inseln, die eine rundliche Form aufwiesen. Bei einer Bedeckung von $\Theta = 16 \pm 1\text{ ML}$ zeigte sich im Vergleich zur Methode 1 ein anderes Wachstum. Wie in Abb. 5.1 unten rechts zu erkennen ist, bildete sich ein glatter Fe-Film mit Inseln der nächsten Lage. Bei beiden Bedeckungen zeigten sich keine Anzeichen einer (geordneten) Durchmischung, wie sie bei Choi *et al.* auftrat.

Da nur die Herstellung der Fe/Cr(001)-Systeme nach der zweiten Methode (Aufdampfen bei RT mit anschließendem Heizen des Systems) auch für dickere Fe-Filme die gewünschten Ergebnisse lieferte, wurden im Folgenden alle untersuchten Fe/Cr-Proben auf diese Weise hergestellt.

5.2 SP-RTM am Fe/Cr(001)-System

Um das magnetische Kopplungsverhalten von ultradünnen Fe-Filmen bis 3.2 ML auf der terrasierten Cr(001)-Oberfläche zu klären, erfolgt mittels der SP-RTM eine Charakterisierung der strukturellen, lokalen elektronischen und magnetischen Eigenschaften des Fe/Cr(001)-Systems in Abhängigkeit von der Fe-Bedeckung. Die Ergebnisse werden in der genannten Reihenfolge präsentiert.

5.2.1 Strukturelle Eigenschaften

Die Abbildungen 5.2 und 5.3 zeigen *Konstant-Strom*-Bilder, d.h. die Topographie des Fe/Cr(001)-Systems bei Fe-Filmdicken zwischen 0.05 ML und 3.2 ML. Die Aufnahmen wurden innerhalb der ersten 6 h nach Präparation des Systems aufgenommen. Es können vier verschiedene Wachstumsbereiche unterschieden werden. Der erste Bereich (s. Abb. 5.2 obere vier Bilder), der sich bis zu einer Bedeckung $\theta \leq 0.35$ ML erstreckt, ist charakterisiert durch die Nukleation von isotropen, 1 ML hohen Inseln, beginnend in der Mitte einer Cr(001)-Terrasse und einer Aufrauung der Stufenkanten. Die Inseldichte steigt sukzessive mit der Bedeckung bis zu 585 ± 55 Inseln pro μm^2 bei $\theta \leq 0.35$ ML. Im Gegensatz zu Choi *et al.* [30], deren Präparationsmethode als Richtschnur diente, beobachten wir keine Bildung eines Fe/Cr-Gemisches, weder an der Unterseite der Stufenkanten, noch im Umfeld der Inseln. Dies könnte an der reduzierten Heizdauer nach Aufdampfen des Fe liegen. Ein möglicher Austausch von einzelnen Fe-Atomen mit Cr-Atomen des Substrats, der auch die Ursache für das Aufrauen der Stufenkante sein könnte, kann jedoch nicht ausgeschlossen werden.

Im zweiten Wachstumsbereich ($0.4 \text{ ML} \leq \theta \leq 1.48 \text{ ML}$ vgl. Abb. 5.2 untere Reihe und Abb. 5.3 obere Reihe) findet man ein fast perfektes Lagenwachstum: Die Bildung der zweiten Lage ist wiederum durch das Keimen und Wachsen von Inseln gekennzeichnet, auch wenn die erste Lage noch Löcher aufweist. Überraschenderweise zeigen die RTM-Daten bei einer nominellen Bedeckung von $\theta = 1.02$ ML nur eine gemessene Bedeckung von $\theta = 0.77$ ML, d.h. 0.25 ML weniger als erwartet. Eine ähnliche Beobachtung wurde auch von Choi *et al.* [30] gemacht. Auf Grund der Eichung ihres Fe-Verdampfers wurde eine Bedeckung von 0.8 ML erwartet, aber nur eine von 0.55 ML mittels RTM gemessen. Als Ursache schlagen sie eine mögliche Löslichkeit von Fe im Cr-Substrat vor. Der Unterschied zwischen der nominellen Gesamt- und der tatsächlich auftretenden Bedeckung wurde nur bei Bedeckungen unter $\theta \approx 1.2$ ML beobachtet. Auch in diesem Bereich konnten jedoch keine Anzeichen für ein geordnetes Fe/Cr-Gemisch gefunden werden.

Im Rahmen des Fehlerbereiches ist die nominelle Gesamt- und die tatsächlich auftretende Bedeckung für $\theta > 1.2$ ML wieder gleich. Dies lässt eine bedeckungsabhängige Löslichkeit vermuten. Bei $\theta = 1.27$ ML sind eine Vielzahl von Inseln erkennbar, deren Kanten vorzugsweise entlang der [100] und [010] Richtung orientiert sind. Zwischen $\theta = 1.27$ ML und $\theta = 1.48$ ML wachsen die Inseln zusammen. Wie später beschrieben wird, ist die Oberfläche der zweiten Fe-Lage viel glatter als die der ersten, was als erster Hinweis auf ein bedeckungsabhängiges Durchmischungsverhalten von Fe auf Cr zu werten ist. Unterstützt wird diese Argumentation durch die Beobachtung einer zeitabhängigen Strukturveränderung des Fe-Filmes, der sich bei RT befand. Dieser Effekt ist in Abb. 5.4 dargestellt. Die *Konstant-Strom*-Aufnahmen zeigen die Topographie einer Fe/Cr-Probe mit einer Bedeckung $\theta = 1.27$ ML am Tag der Präparation (a) und 20 h später (b). Bei einer frisch präparierten Probe wachsen schon Inseln auf

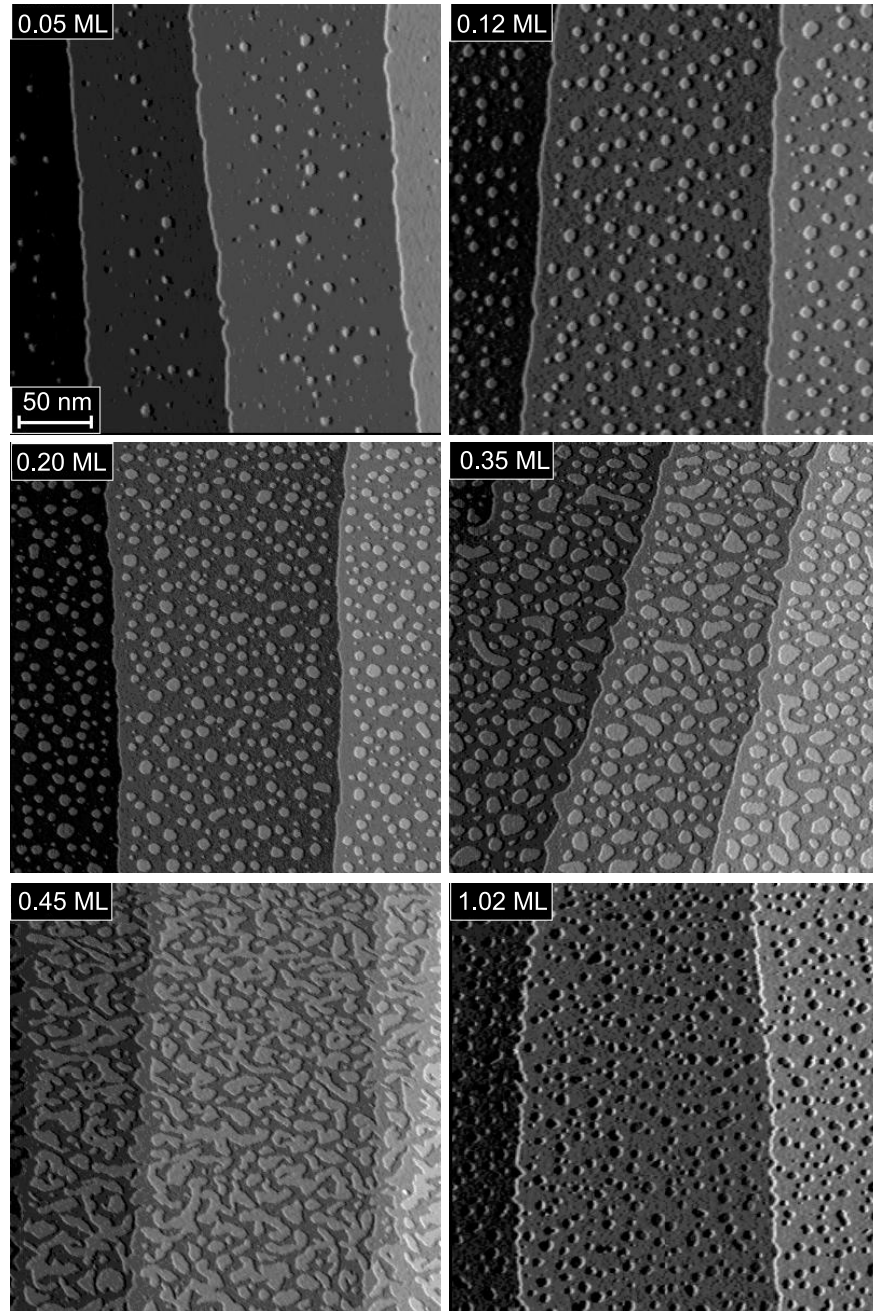


Abbildung 5.2: Übersicht Teil 1 zum Wachstum von Fe auf der Cr(001)-Oberfläche. Alle Bilder sind im *Konstant-Strom*-Modus aufgenommen (Bildgröße: 250 nm $\times$ 250 nm) und zeigen die Topographie des Fe/Cr(001)-Systems bei Bedeckungen von 0.05 ML bis 1.02 ML.

der ersten Fe-Lage, während diese noch Löcher aufweist. Diese Löcher sind am nächsten Tag verschwunden, obwohl die Probe in der Zeit weder geheizt, noch mittels RTM untersucht wurde.

Der dritte Wachstumsbereich beginnt zwischen $\theta = 1.48$ ML und $\theta = 1.91$ ML. Er ist

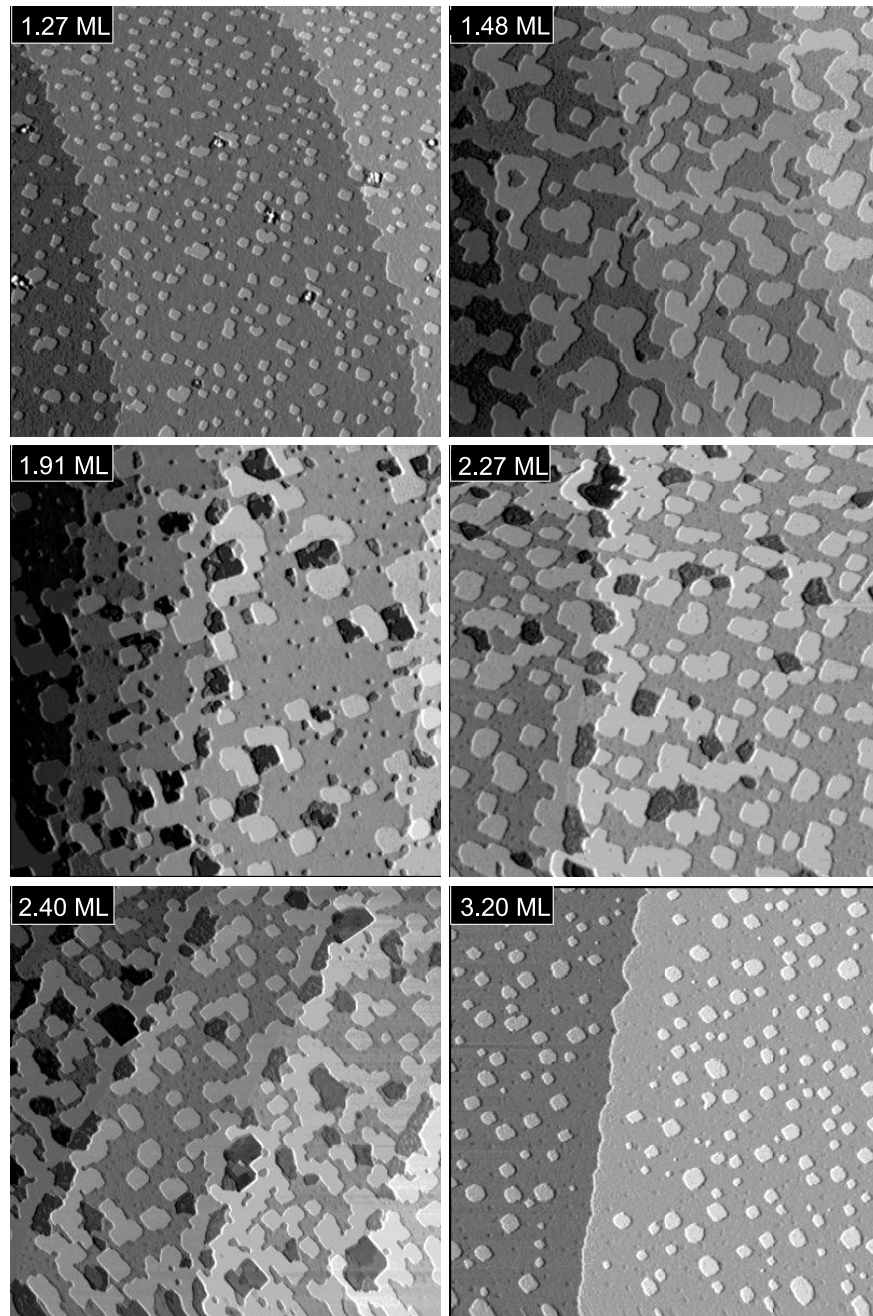


Abbildung 5.3: Übersicht Teil 2 zum Wachstum von Fe auf der Cr(001)-Oberfläche. Alle Bilder sind im *Konstant-Strom*-Modus aufgenommen (Bildgröße: $250\text{ nm} \times 250\text{ nm}$) und zeigen die Topographie des Fe/Cr(001)-Systems bei Bedeckungen von 1.27 ML bis 3.2 ML.

charakterisiert durch das gleichzeitige Wachsen von Inseln der dritten Lage und dem fortschreitenden Auffüllen der Löcher in der zweiten Lage. Auch in diesem Bereich findet sich eine lagenabhängige Rauigkeit, die höchstwahrscheinlich auf einen unterschiedlichen Grad an Durchmischung hindeutet. In Abb. 5.5 sind *Konstant-Strom*-Aufnahmen des Fe/Cr(001)-

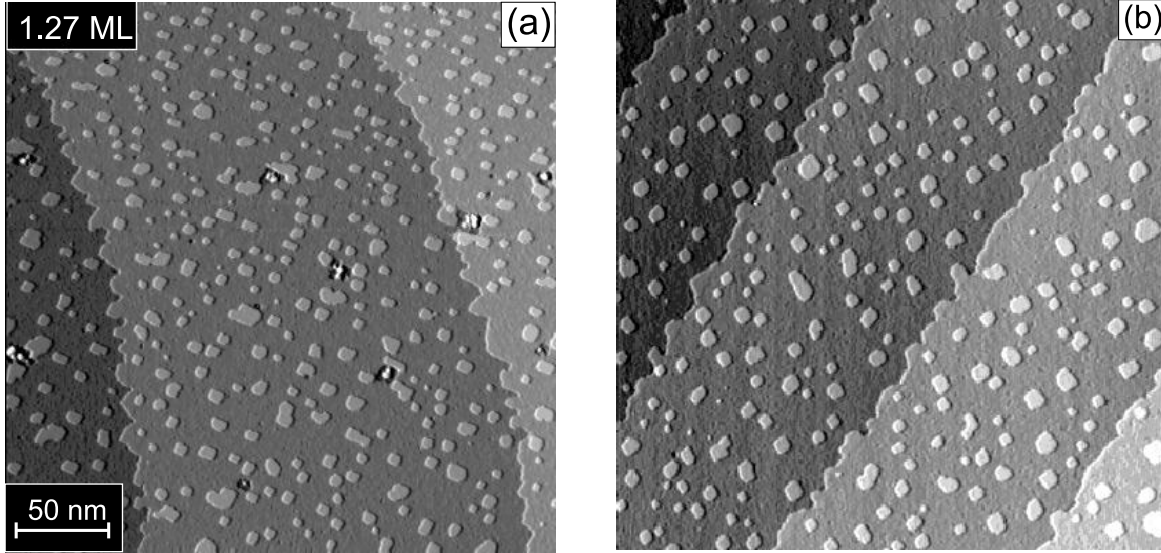


Abbildung 5.4: Topographieaufnahmen der gleichen Probe mit einer nominellen Gesamtbedeckung von 1.27 ML einmal 3 h (a) und einmal 20 h (b) nach der Präparation. Während kurz nach der Präparation (a) das System Inseln der zweiten Lage und eine nicht abgeschlossene erste Lage aufweist, ist 20 h später die erste Lage geschlossen. Die Probe wurde während der 20 h weder geheizt noch untersucht.

Systems in einer detaillierteren Ansicht zu sehen, die bei einer nominellen Bedeckung zwischen $\theta = 1.02$ ML und $\theta = 2.4$ ML gemacht wurden. Bei $\theta = 1.02$ ML weist die erste Fe-Lage eine signifikante Rauigkeit auf. Der Vergleich von Bereichen mit unterschiedlichen lokalen Bedeckungen θ_{loc} zeigt deutlich, dass die Oberflächenrauigkeit für $\theta_{\text{loc}} = 1$ ML die höchste ist und mit zunehmendem θ_{loc} abnimmt. Bei $\theta = 2.4$ ML (Bild unten rechts in Abb. 5.5) sind Gebiete mit einer scheinbar reduzierten Höhe ($0.4 \text{ \AA}$ bei $I = 0.5 \text{ nA}$ und $U = -0.2 \text{ V}$) in der zweiten Fe-Lagen zu erkennen, die, wie noch gezeigt wird, die Vorstufe für ein geordnetes Fe/Cr-Gemisch sind.

Um die Tiefe und den Grad der Durchmischung zwischen der Fe-Deckschicht und dem Cr(001)-Substrat abzuschätzen, wurden bedeckungsabhängige Auger-Messungen vor und nach Heizen des Fe/Cr-Systems durchgeführt. Dafür wurde die Abhängigkeit der inelastischen mittleren freien Weglänge (engl.: *inelastic mean free path* (IMFP)) der Auger-Elektronen in Festkörpern von der kinetischen Energie ausgenutzt. Der MNN Übergang erfolgt bei den kinetischen Energien $E_{\text{MNN}}^{\text{Fe}} = 47 \text{ eV}$ und $E_{\text{MNN}}^{\text{Cr}} = 36 \text{ eV}$, wohingegen der LMM Übergang bei den kinetischen Energien $E_{\text{LMM}}^{\text{Fe}} = 703 \text{ eV}$ und $E_{\text{LMM}}^{\text{Cr}} = 529 \text{ eV}$ stattfindet. Dementsprechend gilt für die Abklinglängen $\lambda_{\text{MNN}} < \lambda_{\text{LMM}}$. Folglich hängen die Auger-Resultate stark davon ab, ob und—wenn ja—wie tief Cr in die Deckschicht diffundiert [63].

Abbildung 5.6 zeigt das Intensitätsverhältnis der LMM-Linie ($I_{\text{Fe}703}/I_{\text{Cr}529}$) (Kreise) und der MNN-Linien ($I_{\text{Fe}47}/I_{\text{Cr}36}$) (Quadrate) vor (schwarze Symbole) und nach (graue Symbole) dem Heizen der Proben. An die experimentell gewonnenen Daten wurden unter der Annahme einer perfekten Grenzschicht die theoretischen Kurvenverläufe angepasst. Die Intensitäten der Fe-Deckschicht I_{Fe} und des Substrates I_{Cr} sind gegeben durch

$$I_{\text{Fe}} = A_{\text{Fe}} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta}{\lambda \cos(\alpha)}\right) \right] \cdot \exp\left(-\frac{S_{\text{Cr}}}{\lambda \cos(\alpha)}\right) \quad (5.1)$$

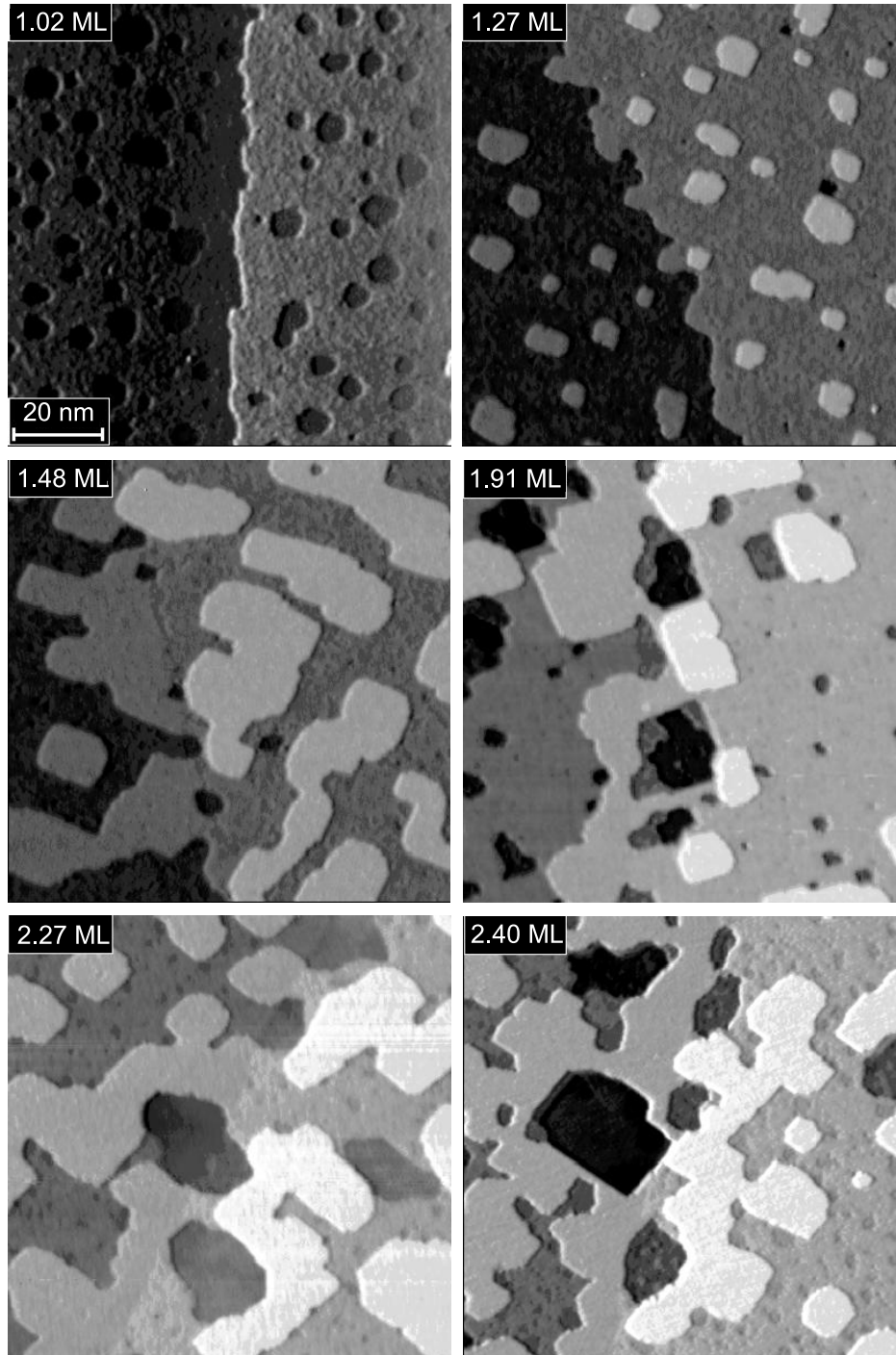


Abbildung 5.5: Detailaufnahmen der Topographie von Fe/Cr(001)-Systemen mit Bedeckungen von 1.02 ML bis 2.4 ML. Die Bildgröße beträgt für alle Bilder $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$.

und

$$I_{\text{Cr}} = A_{\text{Cr}} \cdot \left\{ \exp \left(-\frac{\theta + S_{\text{Cr}}}{\lambda \cos(\alpha)} \right) + \left[1 - \exp \left(-\frac{S_{\text{Cr}}}{\lambda \cos(\alpha)} \right) \right] \right\} , \quad (5.2)$$

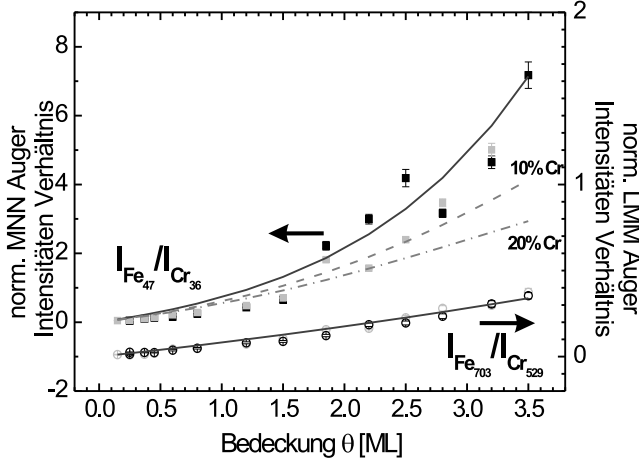


Abbildung 5.6: Das Verhältnis der Auger-Intensitäten der LMM- (Kreise) und der MNN- (Quadrate) Linien von Fe (bei 703 eV und 47 eV) und Cr (bei 529 eV und 36 eV) vor (volle Symbole) und nach (leere Symbole) Heizen des Fe/Cr(001)-Systems. Die Linien sind nach Gl. 5.1 und 5.2 an die gemessenen Daten angepasst, mit $\lambda_{\text{LMM}} = 8 \text{ ML}$ für das $I_{\text{Fe703}}/I_{\text{Cr529}}$ - $\lambda_{\text{MNN}} = 1.5 \text{ ML}$ für das $I_{\text{Fe47}}/I_{\text{Cr36}}$ -Verhältnis. Die beste Übereinstimmung in den gemessenen und den berechneten Werten ergab sich mit einer Cr-Oberflächenkonzentration $S_{\text{Cr}} < 10\%$.

wobei A_{Fe} und A_{Cr} Skalierungsfaktoren sind, die einen Streuquerschnitt des jeweiligen Auger-Übergangs darstellen, θ die Fe-Bedeckung, λ der IMFP, S_{Cr} der Wert für den Cr-Gehalt, der an die Filmoberfläche diffundiert ist und α den Winkel zwischen der Oberflächennormalen und dem primären Elektronenstrahl angibt. Die Auger-Messungen wurden unter einem Winkel $\alpha = 90^\circ$ durchgeführt ($\cos \alpha = 1$). Mit $\lambda_{\text{MNN}} = 1.5 \text{ ML}$ und $\lambda_{\text{LMM}} = 8 \text{ ML}$ [64] wurden die besten Resultate erzielt, wenn $S_{\text{Cr}} < 10\%$ angenommen wird. Ein geringer Cr-Anteil in der Oberfläche kann jedoch auf Basis der erzielten Auger-Resultate, selbst bei höheren Bedeckungen, nicht ausgeschlossen werden. Wie noch in Kap. 5.2.2 gezeigt wird, belegen die RTS-Daten die Anwesenheit eines Fe/Cr-Gemisches an der Oberfläche.

Im vierten und somit letzten Wachstumsbereich ab $\theta \geq 3 \text{ ML}$ (unteres rechtes Bild in Abb. 5.3) beobachtet man ein Wiederauftreten des Lagen-Wachstums.

Letztendlich muss hier eingestanden werden, dass das Ziel — die Präparation von glatten Fe-Filmen auf der Cr(001)-Oberfläche ohne Durchmischung — nicht erreicht wurde. Zwar konnte, durch sorgfältige Wahl der Präparationsparameter (Heizzeit und -temperatur), eine ausgedehnte Durchmischung und die Bildung eines geordneten Fe/Cr-Gemisches vermieden werden. Dennoch fanden sich Hinweise auf ein ungeordnetes Gemisch, bei dem die Cr-Konzentration unter der Sensitivitätsgrenze der Auger-Apparatur lag. Diese Interpretation wird durch die spingemittelten Studien der elektronischen Eigenschaften des Fe/Cr(001)-Systems, die im Folgenden präsentiert werden, unterstützt.

5.2.2 Elektronische Eigenschaften

Im vorangegangenen Kapitel wurde deutlich, dass es nicht möglich war, ein Fe/Cr(001)-System mit einer perfekten, chemisch scharfen Grenzschicht herzustellen. Um die elektronische Signatur eines $c(2 \times 2)$ -geordneten Gemisches zu identifizieren, wurde absichtlich ein Durchmischen durch Erhöhung der Heiztemperatur ($T = 630 \text{ K}$ für 4 min) verursacht. Die erzeugte Oberflächenstruktur ist in Abb. 5.7 bei vier verschiedenen Vergrößerungen zu sehen. Drei verschiedene Bereiche können identifiziert werden: (1) Auf den Terrassen sind ungeordnete, kreisförmige Vertiefungen mit einer vollen Halbwertsbreite (engl.: *full width at half*

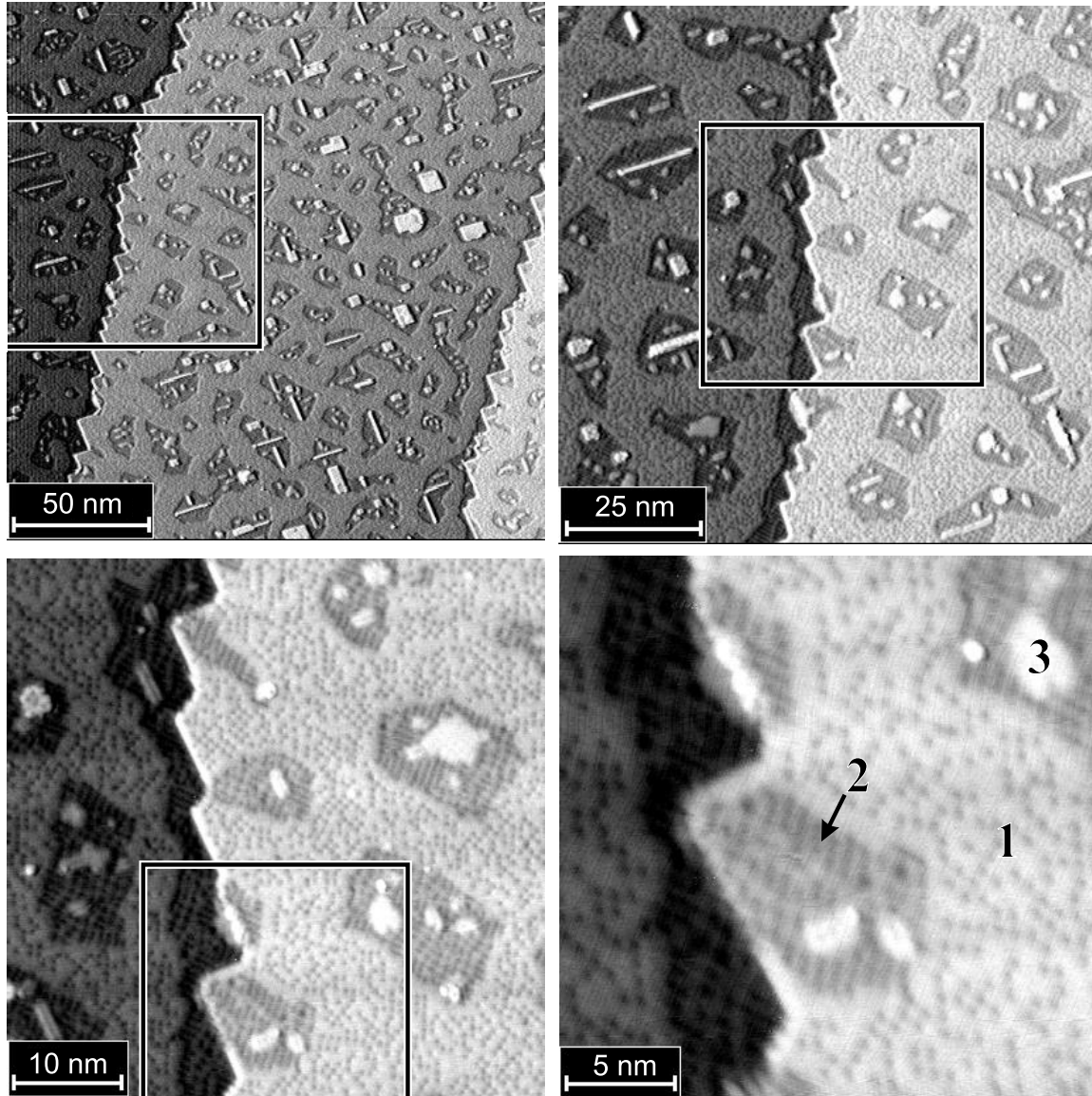


Abbildung 5.7: Topographieaufnahmen eines 0.15 ML dicken Fe-Filmes auf der Cr(001)-Oberfläche nach Heizen des Systems für 4 min bei $T = 630 \pm 100$ K (Aufnahmeparameter: $U = -1$ V und $I = 275$ nA). Auf der Proben-Oberfläche können drei Regionen unterschieden werden: (1) Terrassen mit muldenförmigen, etwa $0.2 \text{ \AA}$ tiefen Markierungen, (2) rekonstruierte Gebiete rund um die Inseln und an den Stufenkanten, die $0.7 \text{ \AA}$ tiefer erscheinen als die Terrassen selbst und (3) teilweise nadel-förmige Inseln, die $0.6 \text{ \AA}$ höher als die Terrasse erscheinen. Bereich 2 wurde als ein (2×2) Fe/Cr-Gemisch identifiziert. Die muldenförmigen Markierungen sind wahrscheinlich einzelne Fe-Atome in der Cr-Matrix.

maximum (FWHM)) von 0.5 nm zu erkennen. Bei den verwendeten Abbildungsparametern ($U = -1$ V und $I = 275$ pA) beträgt die Korrugation der Markierungen etwa $0.2 \text{ \AA}$. Es handelt sich wahrscheinlich um einzelne Fe-Atome, die in die Cr-Oberfläche diffundiert sind. (2) Auf den Terrassen befinden sich nadelförmige Inseln, die $0.6 \text{ \AA}$ höher erscheinen als die

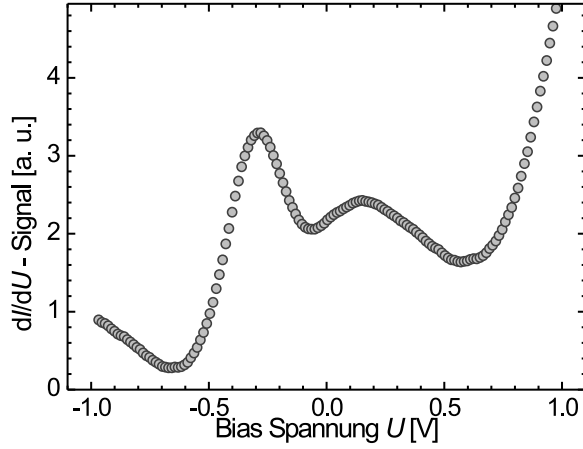


Abbildung 5.8: Typisches Tunnelspektrum eines (2×2) Fe/Cr-Gemisches mit der charakteristischen Doppel-Peak-Struktur.

Terrassen selbst. (3) In der Umgebung der Inseln ist ein rekonstruiertes Gebiet zu sehen, das um $0.7\text{\AA}$ niedriger als die Terrasse zu sein scheint. Diese Gebiete ähneln denen, die von Choi *et al.* [30] gefunden wurden und ein geordnetes Fe/Cr-Gemisch aufweisen. In Abb. 5.8 ist das diesem Gebiet zugehörige elektronische Spektrum dargestellt, das mittels spingemittelter RTS aufgenommen wurde. Im Gegensatz zum Spektrum des sauberen Cr(001), das einen einzelnen Peak nahe der Fermi-Kante aufweist, findet sich jetzt eine Doppel-Peak-Struktur mit Maxima bei $U = -0.3\text{ V}$ und $U = +0.2\text{ V}$. Das Spektrum ist den Tunnelspektren einzelner Cr-Atome auf einer Fe-Whisker-Oberfläche sehr ähnlich, wie sie von Davies *et al.* [62] beschrieben wurden. Ihre Spektren wiesen auch zwei Maxima (bei $U = -0.3\text{ V}$ und $U = +0.2\text{ V}$) auf. *Ab initio* Rechnungen von Heinze [65] belegen, dass die gleiche Doppel-Peak-Struktur ebenso bei einem $c(2 \times 2)$ -geordneten Fe/Cr-Gemisch auftritt. Die kurze Abklinglänge der involvierten Wellenfunktion bewirkt, dass die elektronische Struktur eines Fe-Atoms in der Cr-Matrix bzw. eines Cr-Atoms in der Fe-Matrix durch die nächsten Nachbarn dominiert. Daher sollten die Spektren einzelner Fe-Atome in Cr(001) bzw. einzelner Cr-Atome in Fe(001) und des $c(2 \times 2)$ -geordneten Fe/Cr-Gemisches fast identisch sein.

Im Folgenden wurde die spingemittelte elektronische Struktur der Fe-Filme auf Cr(001), die bei RT aufgedampft und anschließend bei $T \approx 480\text{ K}$ geheizt wurden, in Abhängigkeit von der Fe-Filmdicke und der seit der Präparation vergangenen Zeit untersucht. Die dabei erzielten Tunnelspektren sind in Abb. 5.9 abgebildet, bei Bedeckungen von $\theta = 0.2\text{ ML}$, 1.02 ML , 1.91 ML und 2.27 ML (von oben nach unten betrachtet). In der linken Spalte ist die elektronische Struktur, wie sie am Tag der Präparation, und in der rechten Spalte, wie sie ungefähr 24 h später vorlag, abgebildet. Es sind in jedem Diagramm die typischen Spektren der jeweils vorhandenen lokalen Bedeckung θ_{loc} gezeigt. Um einen ungewollten Überlapp zu vermeiden, wurden die Spektren in allen Diagrammen um einen konstanten Wert relativ zueinander verschoben.

In der obersten Zeile von Abb. 5.9 sind die spingemittelten Spektren 0.2 ML Fe auf Cr(001) gezeigt. Die Probe besteht aus einem sauberen Substrat und Inseln der lokalen Bedeckung $\theta_{\text{loc}} = 1\text{ ML}$ (s. Topographie Abb. 5.2). Im Rahmen der möglichen Messgenauigkeit weisen beide Regionen das gleiche Spektrum auf, mit einem einzelnen Maxima der differentiell-

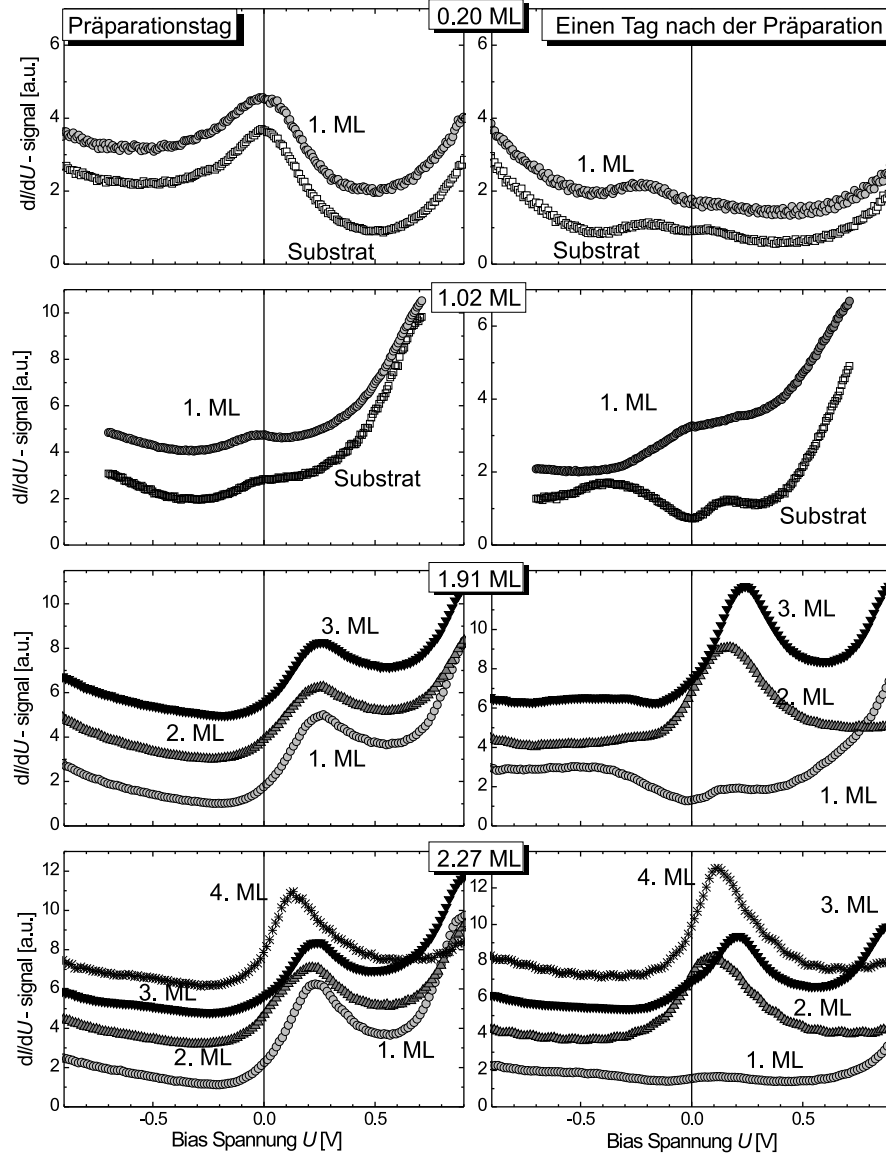


Abbildung 5.9: Bedeckungsabhängige elektronische Struktur von Fe-Filmen auf der Cr(001)-Oberfläche kurz nach (linke Spalte) und einen Tag nach (rechte Spalte) der Präparation. Die RTS-Messungen erfolgten mit einer unmagnetischen Wolfram-Spitze. Zur besseren Visualisierung wurden die unterschiedlichen Spektren relativ zueinander um einen konstanten Wert verschoben. Im niedrigen Bedeckungsbereich ($\theta \leq 1.2$ ML) ähnelt die elektronische Struktur des Substrates und der ersten Lage der der sauberen Cr(001)-Oberfläche, mit einem einzelnen Peak nahe der Fermi-Kante. Für Bedeckungen $\theta \geq 1.9$ ML verschiebt sich der Peak zu $U \approx +0.2$ V. Einen Tag nach der Präparation weisen die dI/dU -Spektren der am dichtesten zur Grenzschicht liegenden, noch sichtbaren Lagen eine drastische Veränderung auf: es stellt sich eine signifikante Doppel-Peak-Struktur ein, die charakteristisch für ein Fe/Cr(001)-Gemisch ist.

len Leitfähigkeit nahe der Fermi-Kante. Dabei gleichen diese Spektren denen der sauberen Cr(001)-Oberfläche (s. Abb. 4.6). Da die Auger-Messungen (s. Abb. 5.6) ausschließen, dass die Inseln hauptsächlich aus Cr bestehen, bedeutet dies, dass das Spektrum der ersten Monolage Fe auf Cr(001) annähernd identisch mit der sauberen Cr(001)-Oberfläche ist. Einen Tag nach der Präparation (oberste Zeile, linke Spalte Abb. 5.9) ist der Einzelpeak nahe der Fermi-Kante verschwunden und eine schwache Doppel-Peak-Struktur, ähnlich der in Abb. 5.8, zu erkennen. Es ist offensichtlich, dass die Struktur des Fe-Filmes nicht nur bei erhöhten Temperaturen, sondern auch bei RT instabil ist. Die Interdiffusion erfolgt je nach Temperatur auf unterschiedlichen Zeitskalen. Ein ähnliches Verhalten ist auch für den Fall einer Bedeckung von 1.02 ML Fe auf Cr(100) zu beobachten (zweite Reihe in Abb. 5.9). Auch wenn der Peak nahe der Fermi-Kante nicht so stark ausgeprägt ist, was auf die unterschiedlichen Stabilisierungsparameter zurückzuführen sein kann, so ist er doch noch deutlich für das Substrat und die erste Lage zu erkennen. Am folgenden Tag weist das Spektrum der Substrat-Oberfläche die wohlbekannte Doppel-Peak-Struktur auf, die stark ausgeprägt ist und eindeutig auf ein Fe/Cr-Gemisch hinweist. Das Spektrum der ersten Lage hat eine breite Schulter rund um die Fermi-Energie.

Bei einer nominellen Gesamtbedeckung von $\theta = 1.91$ ML ist eine signifikante Änderung in den Spektren festzustellen. Ein einzelnes Maximum ist nunmehr im Bereich der unbesetzten Zustände bei $U \approx +0.25$ V zu sehen. Die gefundene Position des Maximums weicht leicht von der bei vorherigen Experimenten auf sauberen Fe(001)-Oberflächen gefundenen ab ($U = +0.17$ V) [25]. Dieses deutet darauf hin, dass es durch den d_{z^2} -artigen Oberflächenzustand des Fe [25] verursacht wurde und dass die Deckschicht hauptsächlich aus Fe besteht. Aber auch in diesem Fall ist eine zeitabhängige Veränderung der Spektren zu erkennen (dritte Reihe, rechte Spalte in Abb. 5.9). Am Tag nach der Präparation zeigen RTM-Messungen, dass sich die elektronische Konfiguration der ersten und zweiten Lage verändert hat. Das Spektrum der ersten weist eine klare Doppel-Peak-Struktur auf, wieder ein klarer Beleg für ein Fe/Cr-Gemisch, während der Peak der zweiten Lage zu $U \approx +0.1$ V verschoben ist. Nur das Spektrum der dritten Lage ist unverändert.

Die RTS-Spektren einer Probe mit einer nominellen Gesamtbedeckung $\theta = 2.27$ ML sind in der untersten Reihe der Abb. 5.9 zu sehen. Die ersten drei Lagen (von unten gezählt: $\theta_{\text{loc}} = 1, 2$, und 3 ML) weisen ein ähnliches Spektrum auf mit einem Peak bei $U = +0.2$ V. Die Peakposition im Spektrum der vierten Lage liegt bei $U = +0.15$ V. Während die Spektren der dritten und vierten Lage am folgenden Tag unverändert sind, zeigen die Spektren der ersten und zweiten Lage das bekannte Verhalten: eine leichte Verschiebung des Peaks der zweiten Lage Richtung Fermi-Kante und eine schwach ausgeprägte Doppel-Peak-Struktur im Spektrum der ersten Lage.

5.2.3 Magnetische Eigenschaften

Die magnetisch sensitiven RTS-Messungen erfolgten mittels Fe-beschichteter W-Spitzen. Abbildung 5.10 zeigt ein typisches spinaufgelöstes RTS-Spektrum von 0.2 ML Fe/Cr(001) mit einer Topographie analog zur Bedeckung in Abb. 5.2. Die unterschiedlichen Intensitäten der Oberflächenzustände angrenzender Terrassen belegen, dass der topologische Antiferromagnetismus des Cr(001) trotz des deponierten Fe unverändert ist. Nahe der Fermi-Kante weist das Spektrum der linken Terrasse (leere Kreise) ein geringeres dI/dU -Signal auf als das Spektrum der rechten Terrasse (leere Quadrate). Wie zu Beginn des Kapitels erwähnt, ist eine

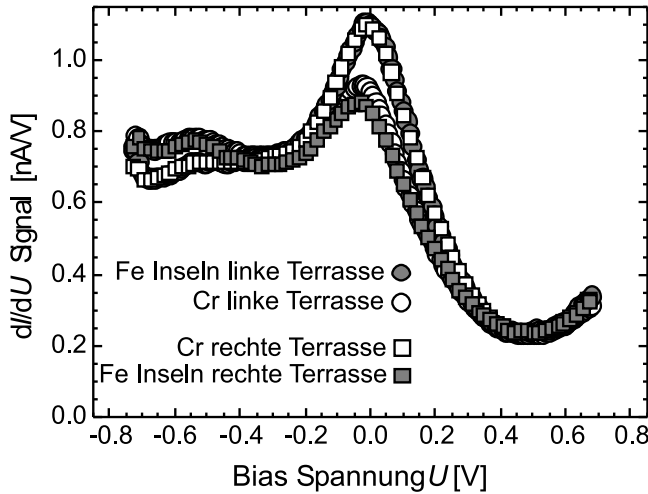


Abbildung 5.10: Spinaufgelöste Tunnel-spektren von Fe/Cr-Proben mit einer Bedeckung von $\theta \leq 0.2$ aufgenommen über zwei benachbarten Terrassen A und B mit einer Fe-beschichteten W-Spitze. An der Position des für saubere bcc-(001)-Oberflächen typischen d_{z^2} -artigen Oberflächenzustandes nahe der Fermi-Kante, weist die linke Cr-Terrasse ($\circ$) ein geringeres dI/dU Signal auf, als die rechte Terrasse ($\square$). Die Fe-Peaks ($\bullet$, $\blacksquare$) zeigen ein invertiertes Verhalten bezüglich der jeweils darunterliegenden Terrasse; ein Hinweis auf eine antiferromagnetische Kopplung zwischen Chrom und Eisen.

antiferromagnetische Kopplung zwischen Fe und Cr zu erwarten. Tatsächlich ist die Intensität des dI/dU -Signals an der Peakposition des Oberflächenzustandes über den Fe-Inseln (volle Kreise und Quadrate) stets entgegengesetzt zu dem der darunterliegenden Cr-Terrassen.

Wie schon in Kap. 4.2 erfolgte die weitere Untersuchung der magnetischen Struktur des Fe/Cr(001)-Systems, indem simultan zur Topographie mittels Lock-In-Technik die differentielle Leitfähigkeit bei einer konstanten Bias-Spannung aufgenommen wurde. In Abb. 5.11 und 5.12 ist eine Serie von Bildern der Topographie (links) und der spinaufgelösten Karte des dI/dU -Signals zu erkennen. Bis zu einer Gesamtbedeckung von $\theta = 0.2$ ML ist der bekannte alternierende Kontrast von angrenzenden Cr(001)-Terrassen erkennbar; ein weiterer Beleg für die Beibehaltung der topologisch bedingten, antiferromagnetischen Ordnung. Zusätzlich ist ein klarer Kontrast zwischen Inseln auf benachbarten Terrassen zu beobachten: dunkle Inseln finden sich auf hellen Terrassen und helle Inseln auf dunklen Terrassen. Der magnetische Kontrast beträgt dabei 10-12%, identisch dem sauberer Cr(001)-Terrassen. Eine geringe Erhöhung der Gesamtbedeckung führt zu einem drastischen Verlust der Intensität des magnetischen Signals. Schon bei $\theta = 0.22$ ML ist der Kontrast für benachbarte Terrassen abgeschwächt und der für Inseln fast komplett verschwunden. Dieser Effekt schreitet voran, bis bei einer Bedeckung von $\theta > 0.4$ ML der magnetische Kontrast des Substrates und der Inseln vollständig verschwunden ist. Trotz häufiger Versuche, einen magnetischen Kontrast für Fe-Bedeckungen von $0.4 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$ zu erzielen, konnte dieser nicht nachgewiesen werden. Für den Fall von $\theta > 3 \text{ ML}$ stellte sich ein, wenn auch schwacher, aber dennoch klar erkennbarer magnetischer Kontrast ein. Abbildung 5.13 zeigt die Topographie (a) und das magnetische dI/dU -Signal (b) von 3.2 ML Fe auf der Cr(001)-Oberfläche. Während sämtliche Inseln der vierten Lage eine identische differentielle Leitfähigkeit aufweisen, findet sich ein schwacher magnetischer Kontrast im dI/dU -Signal der dritten Lage. Analog zur topologisch antiferromagnetischen Ordnung der unbedeckten Cr(001)-Oberfläche, wechselt der Kontrast zwischen angrenzenden Terrassen.

Jedoch wird diese allgemeine Regel nicht strikt beibehalten, wie es auf der linken und rechten Seite der Abb. 5.13 zu erkennen ist: zum einen finden sich auf der linken Seite drei und auf der rechten Seite zwei angrenzende Terrassen mit gleichem dI/dU -Signal, zum anderen zeigt

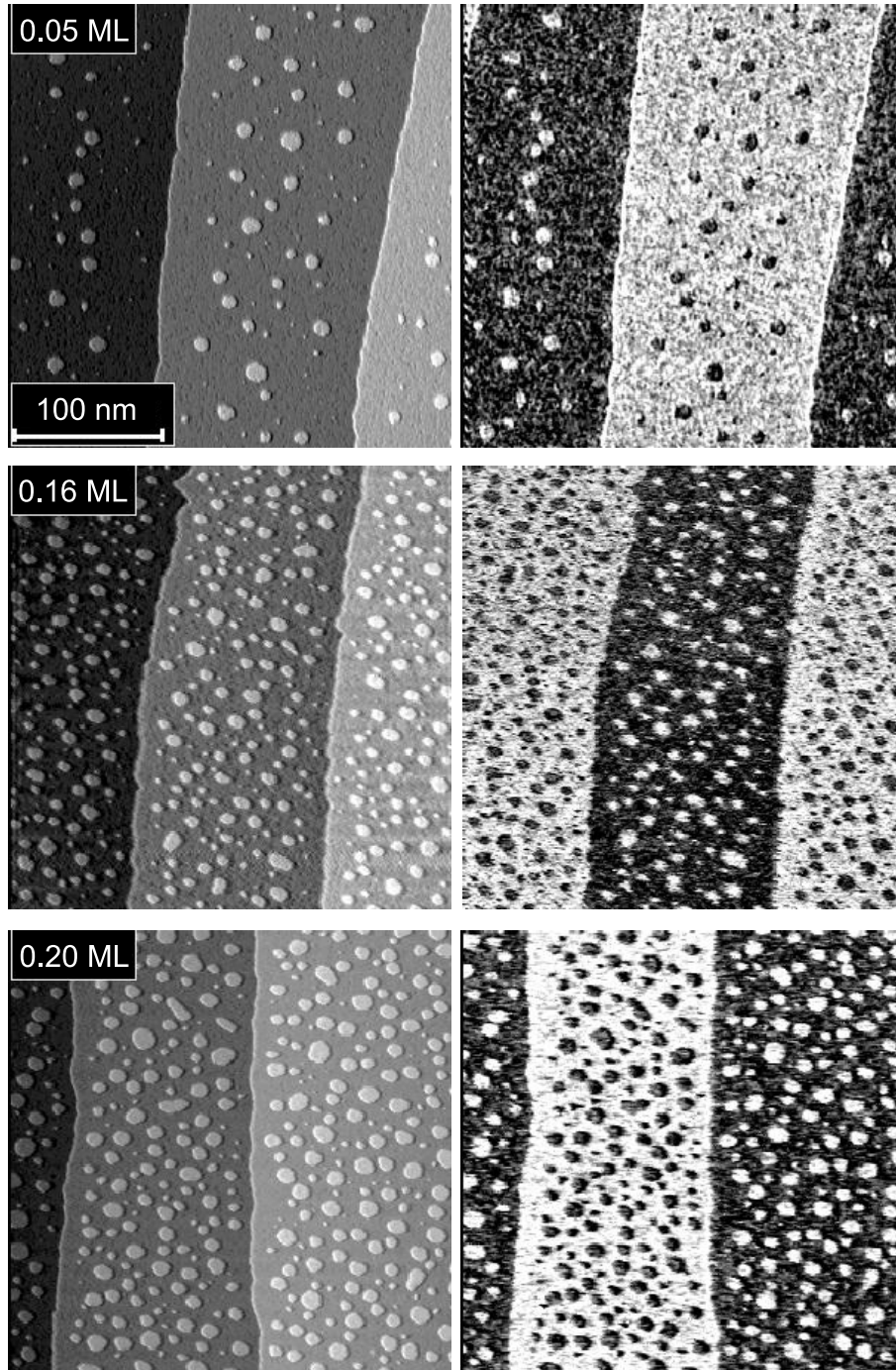


Abbildung 5.11: Bedeckungsabhängige Serie von RTM-Bildern ($250 \times 250 \text{ nm}^2$) für $\theta \leq 0.2 \text{ ML}$, bei der simultan zur Topographie (linke Spalte) auch spinaufgelöste Karten der differentiellen Leitfähigkeit (rechte Spalte) aufgenommen wurden. Deutlich ist die topologisch bedingte, antiferromagnetische Ordnung der Cr(001)-Terrassen erkennbar und das dazu invertierte Kontrast-Verhalten der Fe-Inseln, das die antiferromagnetische Kopplung des Fe zum Cr widerspiegelt.

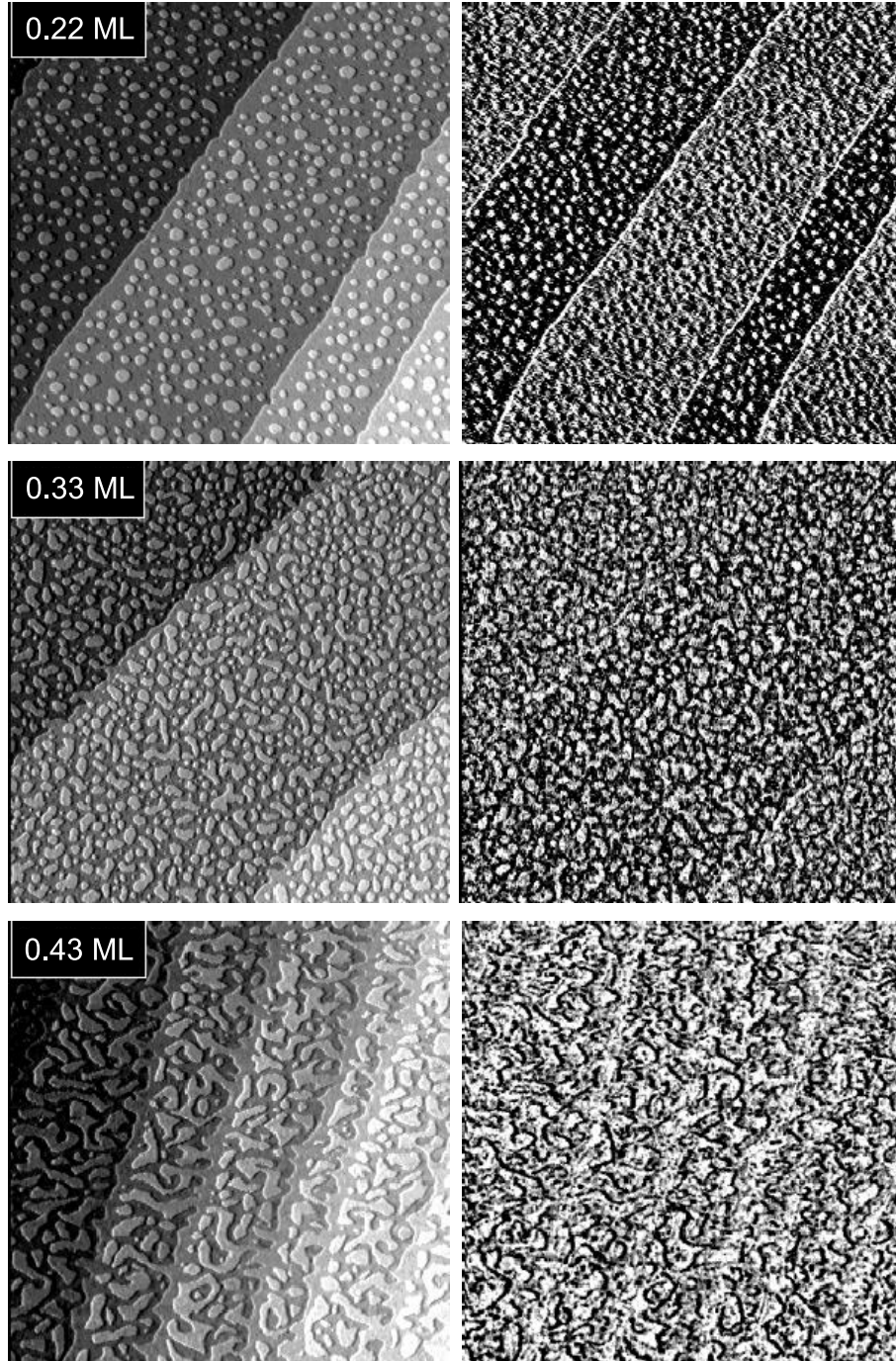


Abbildung 5.12: Bedeckungsabhängige Serie von RTM-Bildern ($250 \times 250 \text{ nm}^2$) für $0.2 \text{ ML} < \theta \leq 0.2 \text{ ML}$, bei der simultan zur Topographie (linke Spalte) auch spinaufgelöste Karten der differentiellen Leitfähigkeit (rechte Spalte) aufgenommen wurden. Der für Bedeckungen $\theta \leq 0.2 \text{ ML}$ gefundenen antiferromagnetischen Ordnung folgt eine graduelle Angleichung der dI/dU -Signale aller Fe-Inseln und der Cr(001)-Terrassen, sobald die Bedeckung 0.2 ML übersteigt. Bei $\theta \geq 0.33 \text{ ML}$ findet sich ein relativ homogenes dI/dU -Signal über der gesamten Oberfläche.

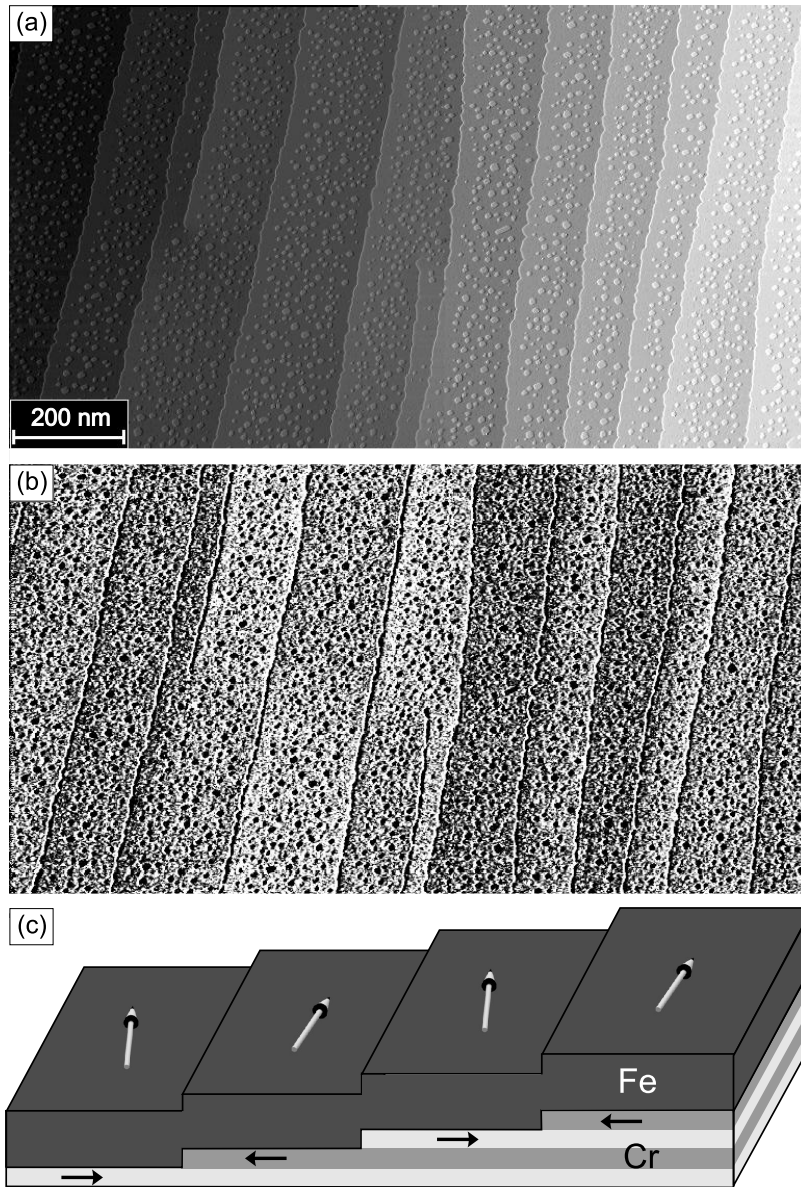


Abbildung 5.13: (a) Topographie und (b) spinaufgelöste Karte der differentiellen Leitfähigkeit einer Fe/Cr(001)-Probe bei einer Bedeckung von $\theta = 3.2$ ML. Im mittleren Teil von (b) findet sich ein schwacher magnetischer Kontrast für angrenzende Terrassen, der durch einen kleinen, verbleibenden antiferromagnetischen Anteil im Kopplungsterm, der die Austauschkopplung zwischen dem Substrat und der Deckschicht beschreibt, erklärt werden kann. Diese verbleibende antiferromagnetische Kopplung führt zu einer Verdrehung der Fe-Magnetisierung in die zur Magnetisierung der darunter liegenden Cr(001)-Terrassen entgegengesetzte Richtung, wie es in (c) schematisch dargestellt ist.

sich ein Kontrastwechsel, der nicht an die Stufenkante gebunden ist, sondern etwas neben ihr verläuft. Der beobachtete Kontrast war stets kleiner als der für unbedecktes Cr und Submonolagen-Filme und überstieg dabei nie 1-2 %.

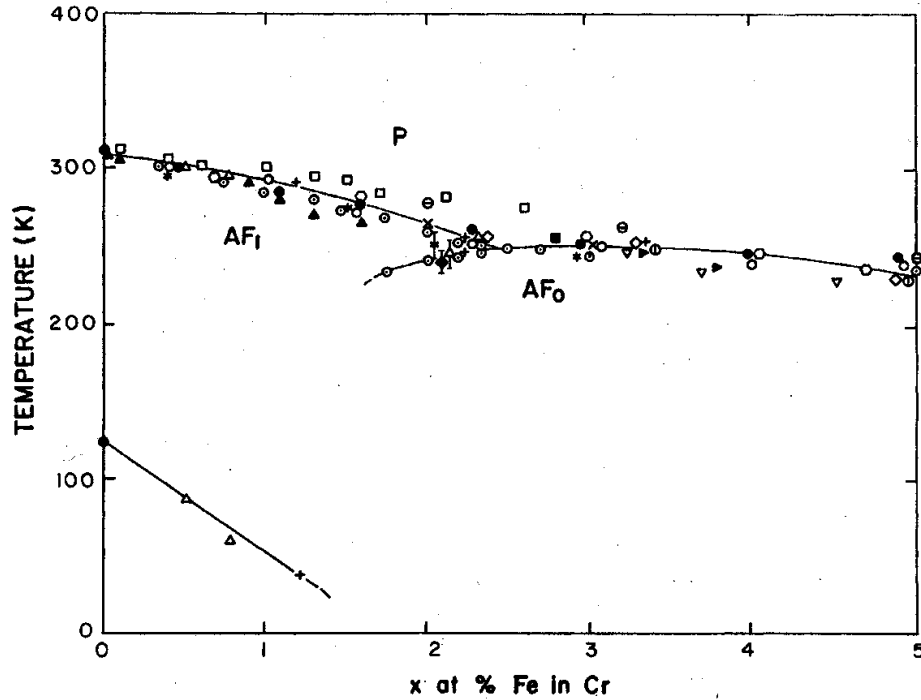


Abbildung 5.14: Magnetisches Phasendiagramm eines $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Gemisches entnommen aus Ref. [66] (S.45).

5.2.4 Diskussion

Betrachtet man die experimentellen Daten, so überraschen dabei zwei Effekte: (1) Das Fehlen jeglichen magnetischen dI/dU -Kontrastes bei Bedeckungen von $0.4 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$ und (2) das Wiederauftreten eines, wenn auch schwachen, magnetischen dI/dU -Kontrastes für $\theta > 3 \text{ ML}$. Der erstgenannte Effekt wird vermutlich durch das Durchmischen der Fe-Deckschicht mit der Cr-Unterlage verursacht. Wie verschiedene experimentelle Studien zeigen, wird die Néel-Temperatur eines $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ -Gemisches stark durch den Fe-Gehalt beeinflusst [66]. In Abb. 5.14 ist das entsprechende Phasendiagramm aus Ref. [66] (S. 45) wiedergegeben, in dem experimentelle Daten von verschiedenen Autoren zusammengefasst sind. Demnach senkt eine Beimengung von nur 2% Fe in Cr dessen T_N um 50 K. Dies bedeutet aber, dass eine sehr geringe Menge an Fe ausreicht, um die Néel-Temperatur des reinen Chroms, welche bei 311 K liegt, unter die aktuelle Arbeitstemperatur des Messsystems, die etwa 290 K beträgt, zu senken. Unstrittig zeigen die gewonnenen RTS-Daten, dass der Fe-Film auf der Cr(001)-Oberfläche strukturell instabil ist. Am Tag nach der Präparation des Fe/Cr-Systems weisen die Spektren eine signifikante Doppel-Peak-Struktur auf, die typisch für ein Fe/Cr-Gemisch ist. Daher ist zu vermuten, dass mit steigender Fe-Bedeckung Fe in die oberflächennahen Substrat-Region eindiffundiert. Sobald die Bedeckung 0.4 ML übersteigt, wird diese Oberflächenschicht paramagnetisch, weil ihre Néel-Temperatur unter die Arbeitstemperatur von $\approx 293 \text{ K}$ gesunken ist.

Die Erklärung des magnetischen Verhaltens der Fe-Inseln ist stark mit dem des darunterliegenden Substrates verbunden. Die präsentierten Resultate zeigen, dass bis zu einer Fe-

Bedeckung von $\theta \leq 0.2$ ML der magnetische Kontrast des Cr-Substrates gleich bleibt. Daher ist die Magnetisierungsrichtung der Fe-Inseln, die einen Durchmesser zwischen 10 und 20 nm haben und wegen ihrer kleinen Anisotropie-Barriere thermisch instabil sind, durch die antiferromagnetische Austauschkopplung zur Cr-Unterlage bestimmt. Deutlich wird dies durch den invertierten Kontrast zwischen jeder Cr(001)-Terrasse und den entsprechend darauf befindlichen Fe-Inseln (s. Abb. 5.11). Die steigende Fe-Konzentration in den grenzschichtnahen Bereichen bewirkt eine Reduzierung der magnetischen Ordnung des Chroms an der Grenzfläche, was wiederum zu einer graduellen Verringerung der antiferromagnetischen Austauschkopplung führt. Schließlich wird die antiferromagnetische Austauschkopplung so schwach, dass sie nicht mehr ausreicht, den Fe-Inseln eine magnetische Vorzugsrichtung zu geben. Die Fe-Inseln werden daher superparamagnetisch. In diesem Fall erfolgt die Fluktuation der Inselmagnetisierung auf einer kürzeren Zeitskala als es der Rasterfrequenz des RTM entspricht. Eine Kontrolle der genannten Hypothese könnte mit temperaturvariablen spinaufgelösten RTS-Messungen durchgeführt werden.

Bei einer Bedeckung von $\theta \geq 3$ ML übersteigt letztendlich die Curie-Temperatur T_C der Fe-Schicht die Arbeitstemperatur von 300 K, so dass der Fe-Film ferromagnetisch wird [67]. Escorcia-Aparicio *et al.* [68] fanden bei MOKE-Messungen, dass eine niedrige Stufendichte zu einer 90° -Kopplung eines Fe-Films bezüglich der Cr(001)-Oberfläche führt. Jegliche verbleibende antiferromagnetische Komponente im Kopplungsterm, die den Austausch zwischen dem Cr-Substrat und der Fe-Deckschicht beschreibt, kann zu einer leichten Abweichung der Fe-Magnetisierung in die entgegengesetzte Richtung zur Magnetisierung des darunterliegenden Cr-Substrates führen. Dieser Fall ist in Abb. 5.13 (c) schematisch dargestellt.

5.3 MKM am Fe/Cr(001)-System

Mit Hilfe der bislang gezeigten SP-RTM Daten lassen sich Resultate aus früheren Magnetkraftmikroskopie- (MKM) Messungen, welche im Folgenden präsentiert werden, neu diskutieren. Da diese MKM-Messungen nur einen sehr kleinen Beitrag zur Charakterisierung des Fe/Cr(001)-System liefern, erfolgt hier keine detaillierte Beschreibung der Funktionsweise der MKM. Eine allgemeine Beschreibung findet sich in Ref. [13], während in Ref. [69] eine detaillierte Beschreibung des Betriebsmodus erfolgte.

Die Funktionsweise und das Einsatzgebiet der MKM, wie sie hier betrieben wurde, unterscheiden sich erheblich von denen der SP-RTM. Das Ziel der MKM ist die Abbildung der magnetischen Struktur unter Ausnutzung magnetischer Kraftgradienten, d.h. die Messung erfolgt in einem Abstand von 15 - 150 nm, bei dem nur die langreichweitigen dipolaren magnetischen Kräfte dominieren. Daraus ergeben sich folgende, wichtige Unterschiede zur SP-RTM:

1. Ein geringeres Auflösungsvermögen von 10 - 100 nm.
2. MKM-Messungen setzen Proben voraus, die ein Streufeld ins Vakuum aufweisen.

Somit wird deutlich, dass sich die MKM nicht eignet, die Cr(001)-Oberfläche und das Fe/Cr(001)-System bei sehr geringen Bedeckungen zu untersuchen. Sie bietet sich aber an, großskalige Übersichtsaufnahmen zu machen. Daher erfolgten die MKM-Messungen an Fe/Cr-Systemen mit Bedeckungen von $\theta = 4, 8, 12$ und 16 ML.

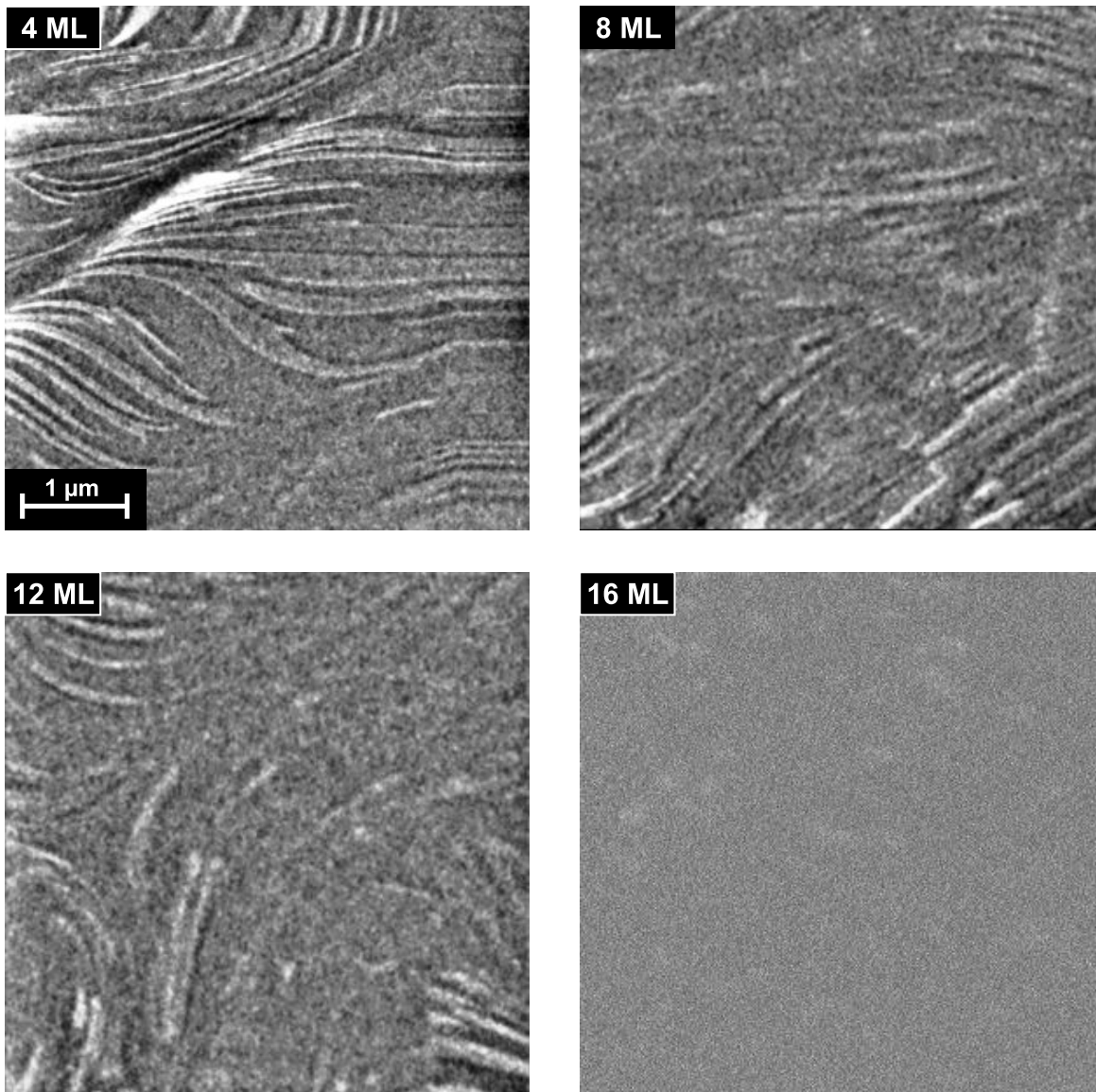


Abbildung 5.15: MKM-Aufnahmen ($5\mu\text{m} \times 5\mu\text{m}$) von vier Fe/Cr-Proben mit unterschiedlichen Bedeckungen: 4 ML, 8 ML, 12 ML und 16 ML. Mit zunehmender Fe-Bedeckung verändert sich die Domänenstruktur; bei 16 ML sind keine Domänenwände mehr zu sehen, was auf sehr große Domänen oder aber auf einen eindomänen Zustand deutet.

In Abb. 5.15 ist die Domänenstruktur des Fe/Cr(001)-Systems in Abhängigkeit der Bedeckung zu sehen, angefangen bei 4 ML bis hin zu 16 ML. Wichtig ist die Tatsache, dass MKM sensitiv auf einen Kraftgradienten, d.h. das Streufeld der Probe, ist. Unter der Voraussetzung, dass die Magnetisierung der Probe in der Ebene liegt, sollten auch nur Domänenwände eine Änderung im Kontrast hervorrufen. Die $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ großen MKM-Aufnahmen zeigen bis 12 ML Domänenwände, deren Anzahl mit der Bedeckung abnimmt. Ohne die dazugehörige Topographie lässt sich nicht klären, ob dies nur auf die veränderte Bedeckung zurückzuführen ist, oder ob auch ein Einfluss der Oberflächenstruktur eine Rolle spielt. Die Domänenstruktur

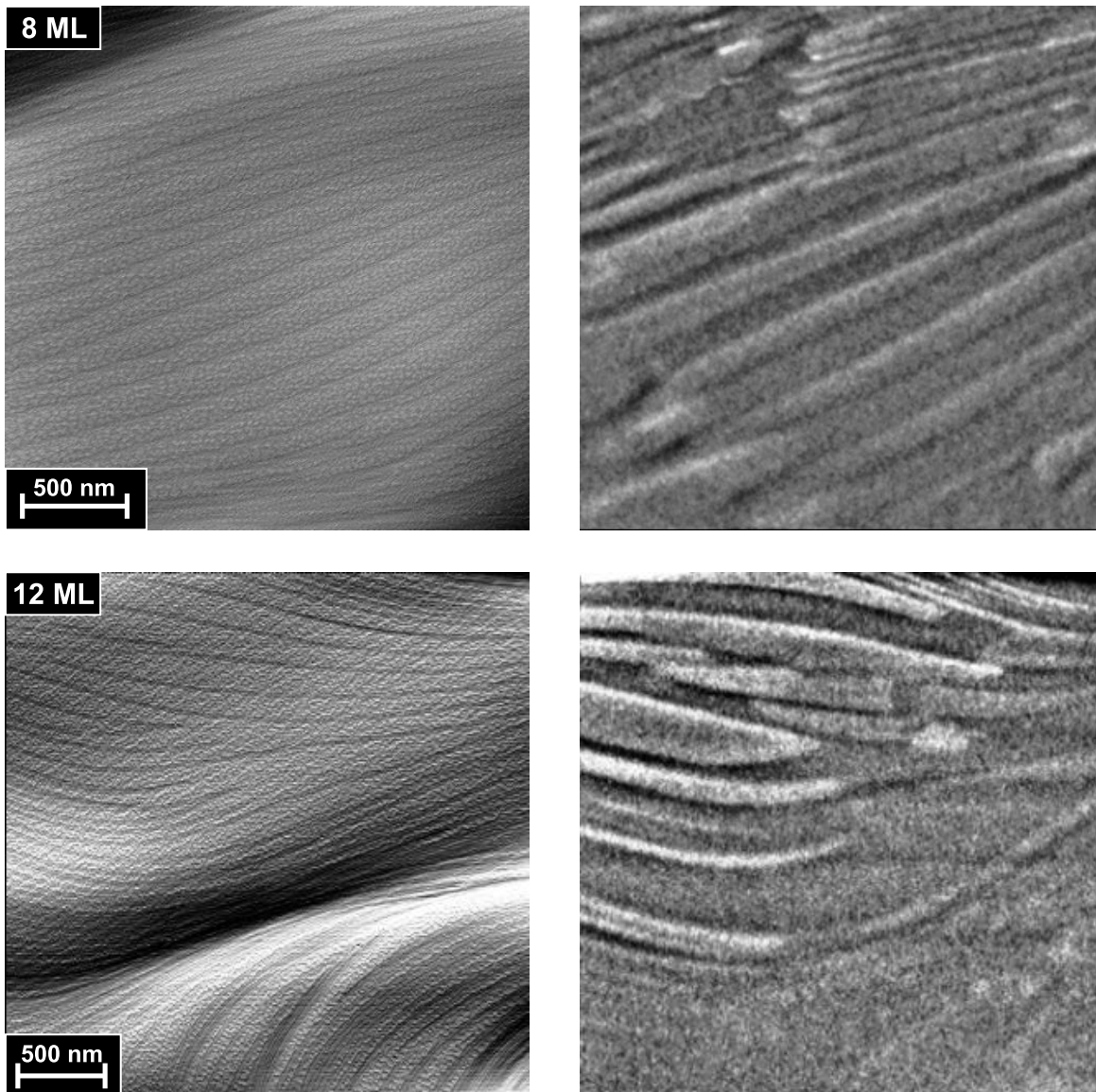


Abbildung 5.16: RTM- (linke Seite) und MKM- (rechte Seite) Aufnahmen der jeweils gleichen Stelle von zwei Fe/Cr -Proben mit 8 ML und 12 ML Fe auf $\text{Cr}(001)$, dabei wurden die Aufnahmen nacheinander gemacht (erst MKM, dann RTM). Die Domänenstruktur scheint in beiden Fällen von der Topographie, genauer der Terrassenbreite abzuhängen, was besonders deutlich beim 12 ML Fe-Film zu sehen ist. Während oben links über breiten Terrassen Domänenwände auftreten, findet sich über einem Stufenband und über schmalen Terrassen (unten rechts) kein magnetischer Kontrast.

weist keine regelmäßige Ordnung auf, wie sie von der $\text{Cr}(001)$ -Oberfläche bekannt ist, sondern entspricht eher den Aufnahmen des magnetischen dI/dU -Signals in Abb. 5.13 (b). Der weiße Bereich in Abb. 5.15 (a) ist durch ein Überlagern der Topographie im magnetischen Signal zu erklären. Bei 16 ML ist kein magnetischer Kontrast zu erkennen, was auf sehr große Domänen oder aber auf einen eindomänigen Zustand hindeutet und mit den SEMPA-Messungen von Hopster [70] übereinstimmt.

Wie zu Beginn des Kap. 3.1.2 erwähnt, handelt es sich bei dem verwendeten Mikroskop um ein kombiniertes Rasterkraft- und Rastertunnelmikroskop, mit dem es möglich ist, zwischen den Betriebsarten zu wechseln. Um eine Korrelation der Oberflächenstruktur mit der magnetischen Domänenstruktur zu untersuchen, wurde ein Bereich erst mit MKM und anschließend mit RTM abgebildet. Bei beiden Messungen wurde die gleiche Sonde verwendet, ein mit Fe beschichteter Cantilever [69]. Die großskaligen RTM-Aufnahmen wurden differenziert, um die Oberflächenstruktur hervorzuheben.

Abb. 5.16 zeigt RTM- (linke Seite) und MKM- (rechte Seite) Aufnahmen von zwei Fe/Cr-Proben mit 8 ML und 12 ML Fe auf Cr(001). Dabei sollten die RTM- und die dazugehörige MKM-Aufnahmen die gleiche Stelle abbilden. Es ist aber deutlich zu erkennen, dass die RTM-Aufnahmen einen größeren Bereich der Probe zeigen, d.h. im Vergleich zu den MKM-Aufnahmen gestaucht wirken. Deutlich wird dies für den Fall des 12 ML Fe-Filmes, bei dem der Verlauf des Stufenbandes in beiden Aufnahmen nicht identisch ist. Ungestört davon ist in beiden Fällen zu erkennen, dass die Domänenstruktur mit der Terrassenbreite korreliert. Die Aufnahmen des 12 ML Fe-Film zeigen klar, dass in dem Bereich des Stufenbandes, der sehr schmale Terrassen aufweist, keine Domänenwände zu finden waren, was vermutlich auf die limitierte laterale Auflösung der MKM zurückzuführen ist. Die abgebildete Domänenstruktur passt zu einer in der Probenebene liegenden Magnetisierung. Damit ergänzen sich die SP-RTM- und MKM-Daten bei dem hier untersuchten System in idealer Weise. Die Ergebnisse der SP-RTM/RTS können nur durch zwei Punkte ergänzt werden: die Domänenstruktur des Fe-Films wird durch (i) seine Dicke und (ii) die Cr(001)-Oberflächenstruktur, d.h. die Terrassenbreite beeinflusst.

Beim Vergleich der SP-RTM- und MKM-Daten lässt vermuten muss beachtet werden, dass bei der SP-RTM der magnetische Kontrast auf unterschiedliche magnetischen Domänen basiert, während mit der MKM Domänenwände abgebildet werden. Im Falle von Fe-beschichteten Sonden ist die SP-RTM auf die in-plane Komponente der Magnetisierung sensitiv, während die MKM die out-of-plane Komponente des Streufeldes der Oberfläche detektiert. Dabei stellt sich die Frage: Wodurch wird das Streufeld verursacht? Die Antwort liefert die SP-RTM. Domänen, wie sie auch bei einer Bedeckung von $\theta = 3,2$ ML beobachtet wurden, führen zu magnetischen Ladungen an den Domänengrenzen. Zwischen den Domänengrenzen bildet sich deshalb ein Streufeld aus, welches bei der MKM detektiert wird.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden magnetische Studien der Cr(001)-Oberfläche und des Fe/Cr(001)-Systems bei Raumtemperatur und im Ultra-Hoch-Vakuum präsentiert, die mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie durchgeführt wurden.

Der Präsentation und Diskussion der Ergebnisse geht in Kap. 2 eine kurze Einführung in die Theorie der Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie voran. Im anschließenden Kap. 3 wird der experimentelle Aufbau und die angewandten Präparationstechniken für die Probensysteme und die Spitzen beschrieben.

Kap. 4 behandelt die Untersuchung der reinen Cr(001)-Oberfläche. An der defektfreien Cr(001)-Oberfläche konnte das Modell des topologischen Antiferromagnetismus [8] mittels spinpolarisierter RTM/RTS deutlich belegt werden. Nach diesem weist jede (001)-Terrasse für sich eine ferromagnetische Ordnung auf. Benachbarte, durch monoatomare Stufen getrennte Terrassen koppeln aber antiferromagnetisch. Das Modell impliziert eine kommensurable SDW, wohingegen Chrom typischerweise eine inkommensurable SDW besitzt, die bei Raumtemperatur transversal polarisiert ist. Wäre die SDW unbeeinflusst von der Symmetriebrechung an der Oberfläche, sollte eine Variation des magnetischen Signals entsprechend ihrer Wellenlänge – bei RT beträgt sie 54 ML [38] – auf der terrassierten Cr(001)-Oberfläche zu finden sein, d.h. auf jeder 27. Terrasse sollte ein Knoten auftreten. Übersichtsaufnahmen mit mehr als 27 Terrassen zeigen aber keine entsprechende Variation. Der Kontrast bleibt im Rahmen der Messgenauigkeit konstant, so dass sich offenbar an der Oberfläche immer ein maximales Moment einstellt, was wiederum mit den theoretischen Vorhersagen eines erhöhten magnetischen Momentes an der Oberfläche übereinstimmt [39, 40]. Da die spinpolarisierte RTM/RTS aber nur sensitiv auf die oberste Lage ist, kann nicht geklärt werden, wie sich diese Beeinflussung im Volumen manifestiert.

Die Untersuchung zeigt weiter, dass auf der Cr(001)-Oberfläche eine Vielzahl von Defekten auftreten, wobei Schraubenversetzungen am häufigsten zu finden sind. Sie erzeugen jeweils eine halb-unendliche Stufenkante, die meistens parallel zu den restlichen orientiert ist. Die daraus resultierende Oberflächenstruktur verhindert eine perfekte antiferromagnetische Ordnung. Da Schraubenversetzungen an der Cr(001)-Oberfläche immer Start/Endpunkte von Domänenwänden sind, bleibt die allgemeine Regel erhalten, wie sie durch das Modell des topologischen Antiferromagnetismus beschrieben wird. Die mittlere Breite einer Domänenwand beträgt in einer ausreichenden Entfernung zur Schraubenversetzung $\bar{w} = 145 \pm 25$ nm. Nähert man sich der Schraubenversetzung, stellt sich die Frage, ab welchem Abstand eine Veränderung der Domänenwandbreite zu beobachten ist. Die Strecke entlang eines geschlossenen Kreises um die Schraubenversetzung herum gibt den maximalen Wert an, den die Domänenwandbreite annehmen kann. Spätestens wenn diese Strecke, d.h. der Kreisumfang kleiner

wird als die intrinsische Domänenwandbreite selbst, sollte eine Veränderung der Breite zu detektieren sein. Ein Kreisumfang, der der mittleren Domänenwandbreite von $\bar{w} = 145 \pm 25$ nm entspricht, findet sich bei einem Radius $r_w = 23 \pm 4$ nm. Folglich sollte sich die Domänenwandbreite für Abstände (Radien) $r \leq r_w$ verringern. Linienprofile, die entlang eines Kreises um die Schraubenversetzung bei unterschiedlichen Radien r aufgenommen wurden, belegen aber, dass es zu einer signifikanten Reduzierung der Domänenwandbreite kommt, sobald der Radius r unter 60 nm liegt.

Simulationen der Spinkonfiguration um eine Schraubenversetzung mittels mikromagnetischer Berechnungen zeigen, dass eine Vierfach-Symmetrie, wie sie für eine bcc(001)-Oberfläche typisch ist, immer zur Bildung von zwei separaten 90° -Domänenwänden um eine Schraubenversetzung herum führt. Erst mit einer effektiven uniaxialen Anisotropie liefert die Simulation Domänenwandbreiten, die gut mit den experimentell gefundenen übereinstimmen. Der Radius bei dem kreisförmigen Linienprofil um die Schraubenversetzung musste dafür ausreichend groß gewählt werden ($r \geq 240$ nm). In die Simulationen gingen nur die Austauschsteifigkeit A und die effektive Anisotropie k ein.

Nicht so häufig wie die Schraubenversetzungen fanden sich Stufenversetzungen. Diese treten entweder als zusätzliche Stufenkanten auf der Oberfläche auf oder äußern sich in einer s-förmigen Deformation der regulären Stufenkanten. In beiden Fällen wird der topologisch bedingte Antiferromagnetismus strikt beibehalten.

Spinaufgelöste RTM-Untersuchungen zeigten bereits früher, dass Fe-beschichtete W-Spitzen am Spitzen-Apex vorzugsweise parallel zur Probenoberfläche magnetisiert sind. Damit lässt sich die gemessene magnetische Struktur der Cr(001)-Oberfläche durch eine t-SDW erklären, deren Ausbreitungsvektor senkrecht zur Oberfläche und die magnetischen Momente parallel zu ihr orientiert sind. Damit kann zwar eine Magnetisierung senkrecht zur Probenebene ausgeschlossen werden, jedoch verbleiben in der Probenebene zwei leichte, gleichwertige Richtungen ((100) und (010)), entlang derer die magnetischen Momente orientiert sein können. In sehr seltenen Fällen wurde eine Änderung im spinpolarisierten Teil des Tunnelstroms gemessen, was durch zwei Domänen, deren Magnetisierung um 90° relativ zueinander orientiert sind, beschrieben werden kann.

Im Anschluss an die Charakterisierung der Cr(001)-Oberfläche, werden in Kap. 5 die Resultate der spingemittelten und spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie am Fe/Cr(001)-Systems präsentiert. Es erfolgt eine Korrelationsuntersuchung bezüglich struktureller, lokal elektronischer und lokal magnetischer Eigenschaften in Abhängigkeit von der Fe-Bedeckung bis zu wenigen Monolagen. Dabei wurde ein fast perfektes Lagen-Wachstum für Bedeckungen $\theta \leq 1.48$ ML und $\theta \geq 3$ ML gefunden. Im Bedeckungsbereich zwischen $1.48 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$ erfolgt ein simultanes Wachstum der zweiten und der dritten Lage, teilweise sogar der vierten Lage. Die Fe-Filme erweisen sich bei Raumtemperatur als instabil gegenüber Durchmischung, was durch zeitabhängige Untersuchung der Topographie und der elektronischen Struktur belegt wird. Magnetisch-sensitive RTS-Messungen zeigen eine antiferromagnetische Kopplung von Fe-Inseln zu der darunterliegenden Cr(001)-Terrasse bis zu einer Bedeckung $\theta = 0.2$ ML. Jedoch verringert sich der magnetische Kontrast bei einer geringfügigen Erhöhung der Bedeckung ($\theta = 0.22$ ML) und verschwindet dann bei $\theta = 0.4$ ML Fe auf Cr(001). Vermutlich ist der beobachtete Effekt die Folge der Durchmischung von Fe und Cr, bei der die Néel-Temperatur der oberflächennahen Substrat-Region mit steigender Fe-Bedeckung unter die Arbeitstemperatur von 300 K herabgesetzt wurde. Im Bedeckungs-

bereich $0.4 \text{ ML} < \theta < 3 \text{ ML}$ finden sich keine Kontraste, die eindeutig auf magnetische Effekte zurückzuführen sind. Erst bei $\theta = 3.2 \text{ ML}$ stellt sich wieder ein magnetischer Kontrast ein. Dieser ist jedoch deutlich schwächer ausgeprägt, als der im niedrigen Submonolagenbereich. Ursächlich dafür könnte eine veränderte Kopplung der Fe-Deckschicht zum Substrat sein. Während im niedrigen Submonolagenbereich eine 180° -Kopplung vorliegt, handelt es sich bei $\theta = 3.2 \text{ ML}$ offenbar im Mittel um eine 90° -Kopplung. Der gefundene Kontrast wäre auf eine leichte Abweichung von der 90° -Kopplung zurückzuführen.

Schließlich werden frühere MKM-Messungen am selben Fe/Cr(001)-System diskutiert. Auf Grund der sehr viel geringeren lateralen Auflösung und der Sensitivität auf ein Streufeld, wurden großskalige MKM-Aufnahmen gemacht, um die magnetische Struktur auf der Fe-Filmoberfläche in Abhängigkeit von der Bedeckung (4 - 16 ML) zu untersuchen. Es zeigt sich, dass bei 4-12 ML dicken Fe-Filmen eine komplexe Domänenstruktur zu beobachten ist. RTM-Aufnahmen von Bereichen, die vorher mittels MKM abgebildet wurden, belegen, dass die Domänenstruktur mit der Terrassenbreite korreliert. Während über Gebieten mit hinreichend breiten Terrassen mehrere Domänen existieren, lässt sich über einem Stufenband, bestehend aus einer Vielzahl von sehr schmalen Terrassen, keine magnetische Bereichsstruktur mehr auflösen. Der schwache Kontrast und die Tatsache, dass die Linien in den MKM-Aufnahmen als Domänenwände identifiziert sind, deuten übereinstimmend mit SP-RTM-Messungen auf eine Magnetisierung der Fe-Filme in der Probenebene hin. Bei einer Bedeckung von 16 ML wird kein magnetischer Kontrast mehr beobachtet, was mit den SEMPA-Messungen von Hopster [70] übereinstimmt. Es handelt sich hierbei entweder um einen Zustand mit sehr große Domänen oder um einen Eindomänenzustand des Fe-Films.

Literaturverzeichnis

- [1] P. Gruenberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky und H. Sowers *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 2442 (1986).
- [2] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich und J. Chazelas *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2472 (1988).
- [3] F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey und R.F. Willis *Adv. Phys.*, **47**, 511 (1998).
- [4] G. Binnig und H. Rohrer *Helv. Phys. Acta*, 726 (1982).
- [5] S. Heinze, M. Bode, A. Kubetzka, O. Pietzsch, X. Nie, S. Blügel und R. Wiesendanger *Science*, **288**, 1805 (2000).
- [6] R. Wiesendanger, H. J. Güntherodt, G. Güntherodt, R. J. Gambino und R. Ruf *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 247 (1990).
- [7] M. Bode, M. Getzlaff und R. Wiesendanger *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 4256 (1998).
- [8] S. Blügel, D. Pescia und P. H. Dederichs *Phys. Rev. B*, **39**, 1392 (1989).
- [9] J. Bardeen *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 57 (1961).
- [10] J. Tersoff und D. R. Hamann *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1998 (1983).
- [11] J. Tersoff und D. R. Hamann *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 805 (1985).
- [12] C. J. Chen *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 448 (1990).
- [13] R. Wiesendanger *Scanning Probe Microscopy und Spectroscopy*. Cambridge University Press (1994).
- [14] R. J. Hamers *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **40**, 531 (1989).
- [15] D. T. Pierce, J. Ungaris, R. J. Celotta und M. D. Stiles *J. Magn. Magn. Mater.*, **200**, 290 (1999).
- [16] R. Meservey, P. M. Tedrow und P. Fulde *Phys. Rev. Lett.*, **25**, 1270 (1970).
- [17] M. Julliere *Phys. Lett. A* **54**, 225 (1975).
- [18] J. C. Slonczewski *Phys. Rev. B*, **39**, 6995 (1989).

- [19] T. Miyazaki und N. Tezuka *J. Magn. Magn. Mater.*, **139**, L231 (1995).
- [20] D. Wortmann, S. Heinze, Ph. Kurz, G. Bihlmayer und S. Blügel *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 4123 (2001).
- [21] S. Heinze *First-Principles Theory of Scanning Tunneling Microscopy Applied to Transition-Metal Surfaces*. Dissertation, Universität Hamburg, Hamburg (2000).
- [22] OMICRON NanoTechnology GmbH, D - 65232 Taunusstein.
- [23] M. Bode *Rep. Prog. Phys.*, **66**, 523 (2003).
- [24] M. Schmid, M. Pinczolis, W. Hebenstreit und P. Varga *Surf. Sci.*, **377-379**, 1027 (1997).
- [25] J. A. Stroscio, D. T. Pierce, A. Davies, R. J. Celotta und M. Weinert *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 2960 (1995).
- [26] B. Heinrich, J. F. Cochran, T. Monchesky und R. Urban *Phys. Rev. B*, **59**, 14520 (1999).
- [27] K. Mibu, M. Almokhtar, S. Tanaka, A. Nakanishi, T. Kobayashi und T. Shinjo *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2243 (2000).
- [28] C. M. Schmid, D. E. Buergler, D. M. Schaller, F. Meisinger und H. J. Güntherodt *Phys. Rev. B*, **60**, 4158 (1999).
- [29] A. Berger und H. Hopster *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 193 (1994).
- [30] Y. J. Choi, I. C. Jeong, J.-Y. Park, S.-J. Kahng, J. Lee und Y. Kuk *Phys. Rev. B*, **59**, 10918 (1998).
- [31] L. Néel *J. Phys. (Paris)*, **3**, 2035 (1932).
- [32] L. Néel *C. R. Acad. Sci.*, **203**, 304 (1936).
- [33] C. G. Shull und M. K. Wilkinson *Rev. Mod. Phys.*, **25**, 100 (1953).
- [34] V. N. Bykov, V. S. Golovkin, N. V. Ageev, V. A. Levдик und S. I. Vinogradov *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **128**, 1153 (1959).
- [35] L. M. Corliss, J. M. Hastings und R. J. Weiss *Phys. Rev. Lett.*, **3**, 211 (1959).
- [36] J. M. Hastings *Bull. Am. Phys. Soc.*, **5**, 455 (1960).
- [37] G. Shirane und W. J. Takei *J. Phys. Soc. Jpn.*, **17**, Suppl. B-111, 35 (1962).
- [38] H. Zabel *J. Phys.: Condens. Matter*, **11**, 9303 (1999).
- [39] C. L. Fu und A. J. Freeman *Phys. Rev. B*, **33**, 1755 (1986).
- [40] R. H. Victoria und L. M. Falicov *Phys. Rev. B*, **31**, 7335 (1985).

- [41] L. E. Klebanoff, S. W. Robey, G. Liu und D. A. Shirley *Phys. Rev. B*, **30**, 1048 (1984).
- [42] L. E. Klebanoff, R. H. Victoria, L. M. Falicov und D. A. Shirley *Phys. Rev. B*, **32**, 1997 (1985).
- [43] F. Meier, D. Pescia und T. Schriber *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 645 (1982).
- [44] M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlic und R. Wiesendanger *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 4606 (2000).
- [45] O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode und R. Wiesendanger. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5212 (2000).
- [46] M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, S. Heinze und R. Wiesendanger *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 2142 (2001).
- [47] J. P. Hill, G. Helgesen und D. Gibbs *Phys. Rev. B*, **51**, 10336 (1995).
- [48] K.-F. Braun, S. Fölsch, G. Meyer und K.-H. Rieder *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 3500 (2000).
- [49] A. Hubert und R. Schäfer *Magnetic Domains*. Springer (1998).
- [50] H. P. Oepen und J. Kirschner *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 819 (1989).
- [51] Dazu wurde das OOMMF program, release 1.2 alpha 2 benutzt:
(<http://math.nist.gov/oommf/>).
- [52] N. E. Christensen, O. Gunnarsson, O. Jepsen und O. K. Andersen **49**, C-8, 17 (1988).
- [53] D. van der Marel und G. A. Sawatzky *Phys. Rev. B*, **37**, 10674 (1988).
- [54] G. Stollhoff, A. M. Oleś und V. Heine *Phys. Rev. B*, **41**, 7028 (1990).
- [55] O. K. Andersen, O. Jepsen und D. Götzl *Highlights of Condensed Matter Theory*. Eds. F. Bassani, F. Fumi und M. P. Tosi, North Holland, Amsterdam (1985).
- [56] T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto und T. Ono *Science*, **289**, 930 (2000).
- [57] J. Raabe, R. Pulwey, R. Sattler, T. Schweinböck, J. Zweck und D. Weiss *J. Appl. Phys.*, **88**, 4437 (2000).
- [58] A. Wachowiak, J. Wiebe, M. Bode, O. Pietzsch, M. Morgenstern und R. Wiesendanger *Science*, **297**, (2002).
- [59] S. S. P. Parkin, N. More und K. P. Roche *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 2304 (1990).
- [60] F. Herman, J. Sticht und M. V. Schilfgaarde *J. Appl. Phys.*, **69**, 4783 (1999).
- [61] A. Vega, A. Rubio, L. C. Balbas, J. Dorantes-Davila, S. Bouarab, C. Demangeat, A. Mokrani und H. Dreyssé *J. Appl. Phys.*, **69**, 4544 (1991).
- [62] A. Davies, Joseph A. Stroscio, D. T. Pierce und R. J. Celotta *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 4175 (1996).

- [63] A. Schmid, D. Atlan, H. Itoh, B. Heinrich, T. Ichinokawa und J. Kirschner *Phys. Rev. B*, **48**, 2855 (1993).
- [64] M. P. Seah und W. A. Dench *Surf. Interf. Anal.*, **1**, 2 (1979).
- [65] S. Heinze *private communication (2002)*.
- [66] E. Fawcett, H. L. Alberts, V. Yu. Galkin, D. R. Noakes und J. V. Yakhmi *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 25 (1994).
- [67] W. Guo, L. P. Shi und D. L. Lin *Phys. Rev. B*, **62**, 14259 (2000).
- [68] Ernest J. Escorcia-Aparicio, Hyuk J. Choi, W. L. Ling, R. K. Kawakami und Z. Q. Qiu *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 2144 (1998).
- [69] M. Dreyer *Untersuchung ultradünner Kobaltfilme mittels Magnetkraftmikroskopie im Ultrahochvakuum*. Dissertation, Universität Hamburg, Hamburg (1999).
- [70] H. Hopster *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 1227 (1999).

Publikationen

1. M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlić, and R. Wiesendanger: *Topology induced spin frustrations at the Cr(001) surface studied by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **85**, 4606 (2000).
2. M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlić, N. Tezuka, and R. Wiesendanger: *Magnetic properties of the Cr(001) surface studied by Spin-Polarized Scanning Tunneling Spectroscopy*, J. Magn. Magn. Mater. **240**, 64 (2002).
3. R. Ravlić, M. Bode, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger: *Correlation of dislocation and domain structure of Cr(001) investigated by Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy*, Phys. Rev. B. **67**, 174411 (2003).
4. R. Ravlić, M. Bode, and R. Wiesendanger: *Correlation of structural, local electronic and magnetic properties of Fe/Cr(001) studied by Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy*, J. Phys.: Condens. Matter. (in press).

Konferenzen

Vorträge

1. 29.03.2001: R. Ravlić, M. Kleiber, M. Bode und R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Hamburg: *Untersuchung der Cr(001)-Oberfläche mittels SP-STs/STM*
2. 13.03.2002: R. Ravlić, M. Bode und R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg: *SP-STs/STM Untersuchung von Sub-Monolagen Fe-Filmen auf Cr(001)*
3. 19.03.2003: R. Ravlić, M. Bode und R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden: *STs/STM Untersuchung der morphologischen und elektronischen Eigenschaften von dünnen Fe-Filmen auf Cr(001)*
4. 20.03.2003: R. Ravlić, M. Bode und R. Wiesendanger, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden: *Korrelation von morphologischen und magnetischen Eigenschaften von Fe/Cr(001): Untersuchungen mittels SP-STs/STM*
5. 21.07.2003: R. Ravlić, M. Bode und R. Wiesendanger, 12th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques, Eindhoven: *Correlation of the electronic and magnetic structure of Fe on Cr(001) by Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy*
6. 25.07.2003: R. Ravlić, M. Bode und R. Wiesendanger, 12th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques, Eindhoven: *Spin-polarized Scanning Tunneling Microscopy study of dislocations and the resulting domain structure on a Cr(001) surface*

Poster

1. Juli 2000: M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlić und R. Wiesendanger, 3rd International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy, Hamburg: *Ultrathin Fe-Films on Cr(001) Investigated by MFM under UHV Conditions*
2. Juli 2000: M. Kleiber, M. Bode, R. Ravlić und R. Wiesendanger, 2nd International Conference on Scanning Tunneling Spectroscopy, Hamburg: *A SP-STs Study of the Cr(001) Surface*

3. — **First Prize Poster Award** —

25.06.2001: R. Ravlić, M. Kleiber, M. Bode und R. Wiesendanger, Symposium on Metallic Multilayers, Aachen: *Properties of Fe/Cr(001) studied by MFM and SP-STM*

Danksagung

An dieser Stelle ein herzlicher Dank an alle, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt **Herrn Prof. R. Wiesendanger**, in dessen Arbeitsgruppe diese Arbeit entstand. Die von ihm geschaffenen exzellenten Arbeitsbedingungen ermöglichten mir ein konzentriertes und erfolgreiches Forschen.

Matthias Bode danke ich für die engagierte Betreuung, die inspirierenden Diskussionen, seine ehrliche und direkte Meinung und den immer wieder lustigen Sommerfesten in seinem Garten. Ich habe mehr gelernt, als ich erwartet habe.

Ein Danke an **Michael Kleiber**, der mich während meines Diploms und im ersten Jahr der Promotion betreut hat. Gemeinsam haben wir die Magnetkraftmikroskopie-Messungen an den Fe-Filmen auf Cr(001) (Kapitel 5.3) und die ersten erfolgreichen SP-RTM-Untersuchungen an der Cr(001)-Oberfläche durchgeführt.

Ein dickes Dankeschön auch an **André Kubetzka**, der hauptverantwortlich für die OOMMF-Simulationen war und mich in dieses Programm eingewiesen hat. Ein zusätzliches Danke an ihn, **Oswald Pietzsch** und **Alexander Schwartz** für deren Hilfs- und Diskussionsbereitschaft während der gesamten Zeit.

All den nicht namentlich erwähnten aus der **Gruppe R** sei auch gedankt. Es macht Spaß, in einer so angenehmen und fähigen Gemeinschaft zu arbeiten.

Besonders möchte ich mich noch bei meinen Schwiegereltern **Ursula** und **Helmut Gotthardt** bedanken. Nicht nur, dass ich dank ihnen das Skifahren gelernt habe, sondern auch für ihre Geduld bei meinen Vorträgen und die enorme Arbeit, die sie in das Korrekturlesen meiner Dissertation investiert haben. Ich freue mich schon riesig auf weitere physikalische und nicht-physikalische Diskussionen mit ihnen.

Meinen Eltern **Ljubica** und **Ante Ravlić** danke ich aus tiefstem Herzen für ihr Vertrauen und ihre Unterstützung während des gesamten Studiums und der Promotion. Und meinem kleinen Bruder, **Daniel Ravlić**, danke ich, dass er immer zur Stelle war, wenn Hilfe benötigt wurde oder es Kaffee gab.

An letzter Stelle die wichtigste Person, der ich danke: meine zauberhafte Ehefrau **Isabel**. Trotz aller Widrigkeiten und Probleme hat sie mir immer geholfen, mich aufgebaut, mir zugehört und immer wieder schlaue Fragen zur Physik gestellt.