

Hyungdong Kang

Struktur und Magnetismus
in ultradünnen Fe_xCo_{1-x} -Schichten

Structure and Magnetism
in ultra-thin Fe_xCo_{1-x} -Films

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK

Boltzmannstr. 2, D-85748 Garching bei München

Struktur und Magnetismus
in ultradünnen Fe_xCo_{1-x} -Schichten

Structure and Magnetism
in ultra-thin Fe_xCo_{1-x} -Films

Hyungdong Kang

Dieser IPP-Bericht ist als Manuskript des Autors gedruckt. Die Arbeit entstand im Rahmen der Zusammenarbeit zwischen dem IPP und EURATOM auf dem Gebiet der Plasmaphysik. Alle Rechte vorbehalten.

This IPP-Report has been printed as author's manuscript elaborated under the collaboration between the IPP and EURATOM on the field of plasma physics. All rights reserved.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Magnetismus ultradünner Filme	4
2.1	Kollektiver Magnetismus in 3d-Bandmagneten	4
2.2	Magnetische Eigenschaften ultradünner Filme	8
3	Auftrittspotentialspektroskopie	14
3.1	Auftrittspotentialspektroskopie (APS)	14
3.2	Eigenschaften von APS	16
3.2.1	Oberflächensensitivität	16
3.2.2	Linienform	16
3.2.3	Struktursensitivität	18
3.2.4	Elementspezifität	18
3.2.5	Magnetische Untersuchungen	20
4	Experimentelles	22
4.1	Quelle für spinpolarisierte Elektronen	23
4.2	Elektronen-Transferoptik	24
4.3	Spinrotator	28
4.4	SX-Detektor	32
4.5	Präparation und Charakterisierung magnetischer Schichten	34
5	Oberflächenmagnetismus von Fe/W(110)	36
5.1	Spin-Reorientierungsübergang	37
5.2	Strukturabhängigkeit der Magnetisierung	40
5.3	Oberflächen- und Grenzflächenmagnetismus	43

6	Struktur und Magnetismus von hcp- und fcc-Co Filmen	48
6.1	Strukturelle und magnetische Eigenschaften von Co-Filmen auf W(110) und Cu(001)	49
6.2	Spinintegrierte Messungen	51
6.3	Spinpolarisierte Messungen	55
7	Elementspezifische Untersuchung von $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]/\text{Cu}(001)$	63
7.1	Strukturanalyse	65
7.2	Magnetische Eigenschaften	70
8	Zusammenfassung und Ausblick	75

Kapitel 1

Einleitung

Seitdem ultradünne Filme hoher Qualität und bestimmter Eigenschaften gezielt hergestellt werden konnten, wurden in niederdimensionalen magnetischen Systemen zahlreiche neue Phänomene entdeckt. Dazu gehören zum einen der Riesenmagnetowiderstand (*giant magneto resistance*, GMR) (Baibich et al., 1988; Schad et al., 1994) und die oszillierende Austauschkopplung (Grünberg et al., 1986; Grünberg, 1995). Diese bieten vielversprechende Anwendungsmöglichkeiten für magnetische Speichermedien hoher Informationsdichte, kontaktlose Sensoren und Spin-Transistoren (Falicov et al., 1990; Monsma et al., 1995; Kortright et al., 1999). Zum anderen wurden neue Phänomene an Ober- und Grenzflächen und in dünnen Filmen wie hohe magnetische Momente, Oberflächenanisotropie, komplexe magnetische Ordnung und höhere Oberflächen-Curie-Temperatur beobachtet (Siegmann, 1992; Donath, 1993; Allenspach, 1994; Rau, 1989). Aus der grundlagenphysikalischen Sicht bieten diese neuen Erscheinungen interessante Hinweise, die die Erforschung bisher ungeklärter Fragen im Magnetismus ermöglichen.

Entsprechend zu dieser Entwicklung wurden auch viele mikroskopische und spektroskopische Techniken zur Untersuchung von magnetischen und elektronischen Strukturen entwickelt. Dabei beschränken sich die Methoden meistens auf entweder strukturelle oder magnetische Studien. Da aber die mikroskopische Beschreibung und damit ein tieferes Verständnis des Magnetismus nur durch Analyse der zugrundeliegenden spinabhängigen elektronischen Strukturen möglich sind, ist eine direkte Korrelation zwischen magnetischer Ordnung und elektronischer Struktur nötig, nämlich eine *in-situ*-Untersuchung von beiden. Dies gilt besonders für dünne Schichtsysteme, bei denen die Probeneigenschaften kritisch von Präparationsbedingungen abhängen.

Spinpolarisierte Aufttrittspotentialspektroskopie (SPAPS), die Hauptuntersuchungsme-

thode in dieser Arbeit, ist struktursensitiv, da sie unbesetzte lokale Zustandsdichten spektroskopiert, und durch Verwendung von spinpolarisierten Elektronen auch sensitiv auf magnetische Eigenschaften. Vor allem erlaubt die Rumpfniveau-Anregung von SPAPS elementselektive Untersuchungen von Mehrkomponenten-Systemen. Ihre Stärke wurde in einer Reihe von Untersuchungen an Volumen-Fe, -Ni (Vonbank, 1992) und Fe-Filmen auf Cu(001) (Detzel et al., 1995; Detzel et al., 1996) sowie FeNi₃ (Reinmuth et al., 1997; Reinmuth et al., 1998) nachgewiesen.

In dieser Arbeit werden die Struktur und der Magnetismus am ultradünnen magnetischen System [Fe_xCo_{1-x}] mit SPAPS untersucht. Die von Substrat, Filmdicke und Zusammensetzung abhängende Filmstruktur wird im Zusammenhang mit magnetischen Eigenschaften charakterisiert. Der Einfluß der Filmmorphologie an Ober- und Grenzflächen auf den Magnetismus dünner Filme wird diskutiert. Aus den strukturellen und magnetischen Messungen sowohl an reinen ($x = 0, 1$) als auch an Legierungsfilmen ($0 < x < 1$) soll die breite Einsetzbarkeit von SPAPS demonstriert werden.

Der Symmetriebruch und die Niederdimensionalität dünner Schichten führen zu Modifikationen der elektronischen Struktur und damit der magnetischen Momente (Ohnishi et al., 1983; Freeman und Fu, 1986). Auch Defekte an Oberflächen, die durch Gitterfehlanpassung und anschließende Relaxationsprozesse verursacht werden, verändern die magnetische Struktur. Experimentell ist der Nachweis einer solchen Modifikation aber schwierig, da sie ein Monolageneffekt ist. Vor allem sind die Grenzflächen von bedeckten Filmen mit experimentellen Methoden bisher schwer zugänglich. SPAPS ist aufgrund der hohen und veränderbaren Oberflächensensitivität in der Lage, Änderungen der magnetischen Momente in oberflächennahen Bereichen zu bestimmen. Auch verdeckte Schichten können durch die Elementselektivität der APS innerhalb der Informationstiefe untersucht werden. Untersuchungen an Fe-Filmen in Kap. 5 beschäftigen sich mit dieser Problematik.

Um Korrelationen zwischen Struktur und Magnetismus zu untersuchen, sind Systeme erwünscht, bei denen alle Parameter bis auf die kristallographische Struktur identisch sind. Ein solches System wurde mit Co-Filmen auf zwei verschiedenen Substraten realisiert. Interessant ist, wie sich die unterschiedlichen Strukturen des gleichen Elements im APS-

Spektrum äußern. Hier kann also ein rein struktureller Effekt auf magnetische Eigenschaften abgelesen werden. In Kap. 6 wurde die Struktursensitivität der APS auch dazu verwendet, das gitterparameterabhängige unterschiedliche Wachstum der beiden Co-Filme zu charakterisieren.

In Kap. 7 werden strukturelle und magnetische Eigenschaften des Legierungssystems $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]/\text{Cu}(001)$ untersucht. Die Meßergebnisse aus SPAPS-Spektren werden mit Untersuchungen einer struktur-(LEED, *low-energy electron diffraction*) und einer magnetischsensitiven Methode (MOKE, *magneto-optic Kerr-effect*) verglichen. Dadurch wird demonstriert, daß SPAPS die strukturelle und magnetische Ordnung von Oberflächen gleichzeitig analysieren kann. Der Vergleich der SPAPS-Daten von Legierungsfilmern mit denen der reinen Filme liefert weiterhin detaillierte Informationen über strukturelle und magnetische Änderung in Legierungsfilmern.

In Kap. 2 wird ein Überblick über die wichtigsten theoretischen Modelle zur Beschreibung des Bandmagnetismus und die allgemeinen Eigenschaften von ultradünnen magnetischen Schichten gegeben. Kap. 3 und 4 beschäftigen sich mit den prinzipiellen Aspekten bzw. dem experimentellen Aufbau von SPAPS. In Kap. 8 werden alle Ergebnisse zusammengefaßt.

Kapitel 2

Magnetismus ultradünner Filme

2.1 Kollektiver Magnetismus in 3d-Bandmagneten

In Ferromagneten richten sich die magnetischen Momente unterhalb einer kritischen Temperatur, der Curie-Temperatur T_c , spontan (ohne äußere Magnetfelder) aus. Es kommt zu einer langreichweitigen kollektiven Ordnung der magnetischen Momente. Oberhalb der kritischen Temperatur T_c zerstört die Wärmebewegung die spontane Ordnung, der kollektive Magnetismus geht in Paramagnetismus über. Bereits vor der Entdeckung der Quantenmechanik konnte *Weiß* (1907) das erste phänomenologische Modell, die Molekularfeldtheorie, postulieren, das das Hochtemperaturverhalten der Suszeptibilität und den Phasenübergang zwischen Ferro- und Paramagnetismus eines Ferromagneten qualitativ erklären konnte. Sein klassisches Modell war aber nicht in der Lage, das für die parallele Stellung der magnetischen Momente notwendige riesige 'Molekularfeld' (Austauschfeld) abzuleiten, da es quantenmechanischen Ursprungs ist.

Obwohl in den letzten Jahrzehnten große Fortschritte sowohl bei den experimentellen als auch bei den theoretischen Kenntnissen zum Magnetismus erzielt wurden, fehlt bis heute ein vereinheitlichtes Bild zur Beschreibung des Magnetismus, und es tauchen immer mehr neue Erscheinungen und Fragen, vor allem in niederdimensionalen Systemen, auf, als geklärt werden. Neben der Tatsache, daß die Schrödinger-Gleichung für Vielteilchensysteme nicht exakt lösbar ist, ist der kollektive Charakter des Ferromagnetismus verantwortlich dafür. So ist die Theorie zur Beschreibung des Magnetismus auf Näherungen und Modellvorstellungen angewiesen.

Der Elektronenspin in magnetischen Materialien wurde erstmals im *Einstein-de-Haas* Experiment (1916) als die mikroskopische Ursache des Magnetismus erkannt. Die Wech-

selwirkung zwischen Elektronen, die für den kollektiven Magnetismus entscheidend und rein quantenmechanischen Ursprungs ist, wurde von *Dirac* (1926) und *Heisenberg* (1926) als die sogenannte 'Austauschwechselwirkung' zusammengefaßt: stehen die Spins zweier Elektronen parallel zueinander, können sie sich aufgrund des Pauliprinzips nicht am selben Ort aufhalten, sondern sie entfernen sich möglichst weit voneinander. Dadurch wird die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen reduziert und die gesamte potentielle Energie des Systems abgesenkt. Die elektrostatische Coulomb-Wechselwirkung und das Pauliprinzip sind also die Ursachen für die spontane Ausrichtung von Elektronenspins.

Die klassische Dipol-Dipol-Wechselwirkung für die 3d-Bandmagnete resultiert in einem Austauschfeld von maximal $2 T$ (Nolting, 1986). Das in den Bandmagneten herrschende Austauschfeld ist jedoch um 3 Größenordnungen höher, wie es aus einer einfachen Überlegung $\mu_B B = k_B T_c$ abgeschätzt werden kann. Daher kann die Dipol-Dipol-Wechselwirkung nicht die Ursache für den Ferromagnetismus sein. Sie kann aber bei Substanzen mit einem kleinen T_c wie niederdimensionalen magnetischen Systemen als Korrekturterm zur Austauschwechselwirkung auftreten und einen Anisotropie-Effekt verursachen (Nolting, 1986).

In den Bandmagneten Fe, Co und Ni sind die d-Elektronen, die für die elektrische Leitung verantwortlich sind, gleichzeitig die Quelle des Ferromagnetismus. Die Austauschwechselwirkung sorgt bei $T < T_c$ für eine spinabhängige Bandverschiebung und damit für ein von Null verschiedenes magnetisches Netto-Moment.

Die Grundlage für das Verständnis der Bandferromagneten bildet das Stoner-Modell (Stoner, 1936, 1938, 1951). Es beginnt mit nicht-korrelierten Elektronen in einem Metall. Da nach dem Pauliprinzip zwei Elektronen mit gleichem Spin nicht am gleichem Ort sein können, wird nur die Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen mit entgegengesetztem Spin berücksichtigt. Eine unterschiedliche Besetzung der Majoritäts- und Minoritätszustände führt daher zu einer Reduktion der potentiellen Energie eines Systems.

Wie bei der Molekularfeldtheorie wird das Austauschfeld $M(T)$ eingeführt, das die sogenannte temperaturabhängige 'Austauschspaltung' E_{ex} bestimmt:

$$E_{ex}(T) = J \cdot M(T), \quad (2.1)$$

wobei J das intraatomare Coulomb-Integral ist und als *Stoner-Parameter* bezeichnet wird.

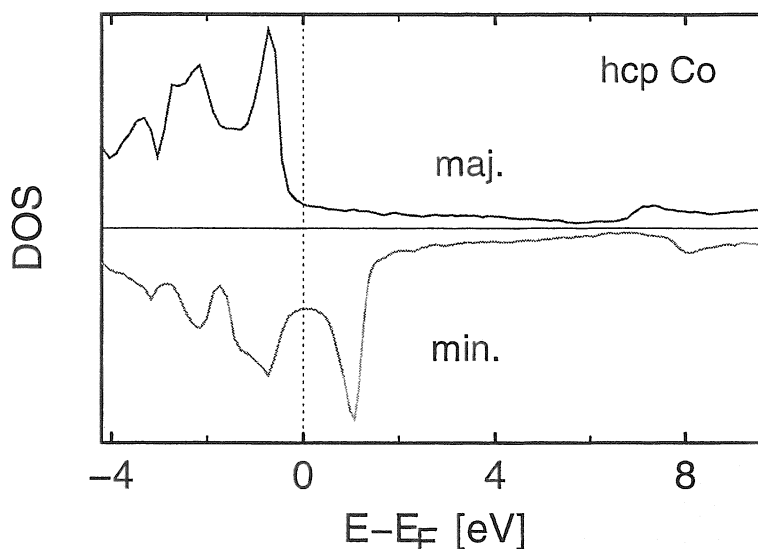


Abbildung 2.1: Spinaufgelöste Zustandsdichte (DOS) für hcp Co, die mit der Korringa-Kohn-Rostoker-Methode berechnet wurden (Ebert und Popescu, LMU München).

Die Abnahme des magnetischen Moments wird ausschließlich auf die Änderung der Besetzungsverhältnisse der spinaufgespaltenen Zustandsdichte zurückgeführt. Der Überschuss der Elektronen mit dem Majoritätsspin gegenüber denjenigen mit dem Minoritätsspin beschreibt die Ausbildung der magnetischen Momente. Beispielsweise ergibt sich für hcp-Co beim Grundzustand eine Austauschspaltung von etwa 1.8 eV (Abb. 2.1), die in einem permanenten magnetischen Moment von $1.72 \mu_B/\text{Atom}$ resultiert (Kittel, 1986).

Ein wichtiges Ergebnis dieses Modells ist das Stoner-Kriterium (Stoner, 1936, 1938), das Aussage darüber gibt, unter welchen Bedingungen eine ferromagnetische Ordnung auftritt. Nach Stoner gilt dies, wenn das intraatomare Coulomb-Integral J und die paramagnetische Zustandsdichte $\rho(E_F)$ groß sind:

$$J\rho(E_F) > 1. \quad (2.2)$$

Ein hoher Betrag von J und $\rho(E_F)$ bedeutet einen hohen Gewinn an potentieller Energie bzw. einen geringen Verlust an kinetischer Energie, so daß die Aufspaltung der Energiebänder energetisch günstig ist.

Das Stoner-Modell kann erfolgreich die Grundzustandseigenschaften der Bandmagnete approximieren und den Phasenübergang zwischen Ferro- und Paramagnetismus vorhersagen.

Es versagt aber bei der Bestimmung des Temperaturverhaltens bei höheren Temperaturen. So liefert das Modell eine unrealistisch hohe Curie-Temperatur ($T_c^{Stoner} > 10^4 K$).

Das von *Hubbard* (1963, 1964a, 1964b) vorgestellte Modell beschreibt Systeme mit starkem Gitterpotential und schwacher Beweglichkeit der Elektronen und wird für die 3d-Bandmagnete meist verwendet. *Hubbard* (1964a, 1964b) berücksichtigt nur die intraatomare Coulomb-Wechselwirkung und vernachlässigt sämtliche interatomare Wechselwirkung, was durch die geringe Überlappung der in Gitterplätzen zentrierten Wellenfunktionen von Elektronen aus den schmalen d-Bändern begründet werden kann. Der Hamiltonoperator dafür lautet

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} \cdot c_{i\sigma}^\dagger \cdot c_{j\sigma} + \frac{1}{2} U \cdot \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} \cdot n_{i-\sigma}, \quad (2.3)$$

mit $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger \cdot c_{i\sigma}$. Hierbei bezeichnet T_{ij} das Hoppingintegral und σ den Spin eines itineranten Elektrons. $c_{i\sigma}^\dagger$ und $c_{i\sigma}$ stehen für den Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator. Der erste Summand in (2.3) beschreibt die Bewegung eines Elektrons vom Platz i zum Nachbarplatz j , ohne dabei seinen Spin zu ändern, und berücksichtigt damit die kinetische Energie und den Einfluß des Gitterpotentials. Der zweite Teil in (2.3) beschreibt die Wechselwirkung zweier Elektronen mit unterschiedlichem Spin am Platz i . Die Operatoren $n_{i\sigma}$ und $n_{i-\sigma}$ zählen die Elektronen mit *up*-Spin bzw. *down*-Spin, und U ist das intraatomare Coulomb-Matrixelement. Zwei Elektronen wechselwirken also nur dann, wenn sie sich in ein und derselben Wigner-Seitz-Zelle aufhalten.

Hubbard (1963) fand, daß die in (2.3) vernachlässigten Anteile, vor allem die Coulomb-Wechselwirkung mit nächsten Nachbarn, im Vergleich zu intraatomaren Coulomb-Matrixelementen nicht sehr klein sind und daß die Beschränkung der elektrostatischen Wechselwirkung auf intraatomare Elektronen nicht unproblematisch ist. Eine mögliche Erweiterung des Hubbard-Modells, die die Wechselwirkung der nächsten Nachbarn berücksichtigt, wurde von *Kishore und Joshi* (1969) vorgeschlagen. Es zeigte sich, daß die durch die Erweiterung ermittelte Bedingung für den Ferromagnetismus gegenüber derjenigen von *Hubbard* stark modifiziert wird und daß daher die interatomare Wechselwirkung nicht vernachlässigt werden darf. Neue theoretische Ansätze im Rahmen eines verallgemeinerten Vielteilchenmodells wurde von *Nolting* (1992) vorgeschlagen. Trotz der bestehenden Beschränkung

der Coulomb-Wechselwirkung auf den intraatomaren Anteil liefert das verallgemeinerte Hubbard-Modell realistische Werte für die Austauschspaltung und die exakten Curie-Temperaturen für Ni und Fe (Nolting et al., 1988; Nolting et al., 1995).

Im Spinfunktions-Modell (Capellmann, 1979; Korecki und Gradmann, 1985; Hubbard, 1981; Hasegawa, 1983) bleiben magnetische Momente bei allen Temperaturen lokal erhalten und es wird eine Richtungsfluktuation magnetischer Momente erlaubt. In der lokalen *band-theory* (LBT) (Capellmann, 1979; Korenman et al., 1977) wird die Kopplung zwischen den lokalen Momenten mit zunehmender Temperatur abgeschwächt, so daß bei T_c keine Fernordnung mehr vorliegt. Die spinabhängigen Energiebänder können auch oberhalb T_c austauschaufgespalten sein, nur die Netto-Spinpolarisation verschwindet. Im Modell ungeordneter lokaler Momente (DLM, *disordered local moments*) (Hubbard, 1981; Hasegawa, 1983) fluktuieren oberhalb $T = 0\text{ K}$ effektive magnetische Momente statistisch (unkorreliert) von Gitterplatz zu Gitterplatz. Ähnlich wie im Stoner-Modell verringert sich die Austauschspaltung mit zunehmender Temperatur und verschwindet oberhalb T_c . Die beiden Modelle liefern realistische Werte für T_c . Die Temperaturabhängigkeit der Austauschspaltung wird aber kontrovers diskutiert. Während Ni sich *Stoner*-artig verhält (Donath, 1989), zeigt Fe sowohl *collapsing* als auch *non-collapsing* Verhalten der Austauschspaltung (Kirschner et al., 1984; Kisker et al., 1985).

2.2 Magnetische Eigenschaften ultradünner Filme

Ultradünne Filme zeigen verglichen mit Volumenmaterialien erhebliche Unterschiede in den elektronischen und magnetischen Eigenschaften. Zum einen beeinflußt die begrenzte Filmdicke die magnetische Ordnung und die elektronische Struktur (*size effect*) und damit auch die spontane Magnetisierung sowie die Curie-Temperatur. Zum anderen resultiert die Anwesenheit der zwei Grenzflächen in zusätzlichen magnetischen Anisotropien und verursacht Änderungen der magnetischen Momente.

Magnetische Ordnung

Theoretisch (Mermin und Wagner, 1966) wurde gezeigt, daß die langreichweitige magnetische Ordnung in ein- und zweidimensionalen isotropen Heisenberg-System verschwin-

det. Später wurde jedoch an mehreren Systemen wie Co/W(110) (Baumgart et al., 1991), Co/Cu(001) (Pescia et al., 1987; Schneider et al., 1990; Kram et al., 1992), Fe/W(110) (Elmers et al., 1995) und Fe/Cu(001) (Stampanoni et al., 1988) gefunden, daß dünne Schichten magnetisch aktiv und in vielen Fällen bereits im Monolagenbereich ferromagnetisch sind. *Döring* (1961) konnte auf Grundlage der Spinwellentheorie zeigen, daß die magnetischen Anisotropien bei endlicher Temperatur ($T > 0$) die ferromagnetische Ordnung stabilisieren kann, wie es auch von anderen Autoren nachgewiesen wurde (Dürr et al., 1989; Fritzsche et al., 1995). *Bander und Mills* (1988) zeigen, daß selbst eine schwache Formanisotropie, die in meisten theoretischen Arbeiten nicht berücksichtigt wurde, zu einer langreichweitigen magnetischen Ordnung führen kann. Ein direkter Nachweis für diese Rolle der magnetischen Anisotropie wurde von *Kram et al.* (1992) gefunden. Es wurde am Co/Cu(001)-System gezeigt, daß das Verschwinden der magnetischen Anisotropie durch eine entsprechende Abschwächung der ferromagnetischen Ordnung begleitet wird.

Temperaturverlauf der Magnetisierung und Curie-Temperatur

Obwohl das Temperaturverhalten von para- und ferromagnetischen Materialien und der magnetische Phasenübergang durch die klassische Molekularfeldtheorie von *Langevin* und *Weiß* erfolgreich beschrieben werden, wird immer wieder eine Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment gefunden. Verantwortlich dafür sind möglicherweise quantenmechanische Effekte wie die Anregung der Spinwellen und die Spin-Spin-Korrelation (Mauri et al., 1989), die in klassischen Modellen nicht behandelt werden können. Es wird vermutet, daß solche Fluktuationen und Korrelationen in dünnen Schichten stärker ausgeprägt sein können (Allenspach, 1994).

Magnetische Phasenübergänge werden meistens durch das Potenzgesetz der Form

$$M(T) \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta \quad (2.4)$$

beschrieben. Für eine quantenmechanische Behandlung muß β abhängig von Dimension, magnetischer Anisotropie und Freiheitsgrad der Elektronenspins modifiziert werden (Qui et al., 1994). *Bander und Mills* (1988) berichten, daß Schichtsysteme mit einer uniaxialen Anisotropie durch das 2D-Ising-Modell ($\beta = 1/8$) beschrieben werden können, während Systeme ohne uniaxiale Anisotropie das 2D-XY-Verhalten ($\beta = 1/4$) zeigen (Kosterlitz, 1974;

Bramwell und Holdsworth, 1994). Die experimentell gefundenen Werte variieren aber stark. Während in 2 ML Fe auf Pd(100) das perfekte 2D-Ising-Verhalten gefunden wurde (Rau et al., 1993), ergeben sich für 1 bis 2.5 ML Fe auf Au(100) $\beta = 0.22$ (Dürr et al., 1989) und für 1.6 und 5 ML Ni auf Cu(111) $\beta = 0.56$ bzw. 0.5 (Ballentine et al., 1989).

Die verschiedenen experimentellen Werte beruhen zum Teil auf experimentellen Schwierigkeiten: die Bestimmung des kritischen magnetischen Verhaltens muß durch Messung der spontanen Magnetisierung erfolgen. Diese ist aber nur in Experimenten mit hoher Ortsauflösung möglich, bei denen die Magnetisierung einzelner Domänen bestimmt werden kann (Allenspach und Bischof, 1992). Sowohl das Anlegen eines Magnetfeldes bei der Aufnahme der Temperaturkurve, als auch die Messung der Remanenz, können zu verschiedenen Resultaten führen, so daß die experimentellen Werte für β nicht nur von theoretischen Ergebnissen, sondern auch voneinander abweichen können (Siegmann, 1992).

Neben dem Temperaturverhalten wird auch die Curie-Temperatur in ultradünnen Schichten stark modifiziert. Allan (1970) zeigt, daß mit einer Abnahme der Ordnungstemperatur zu rechnen ist, wenn die magnetische Korrelationslänge die geometrischen Abmessungen von untersuchten Schichten erreicht. Experimentell wurde eine reduzierte Curie-Temperatur zum Beispiel an Fe/Au(100) (Dürr et al., 1989), Fe/W(100) (Muhlollan et al., 1991), Fe/Cu(100) (Stampanoni et al., 1988), Co/Cu(100) (de Miguel et al., 1989) und Co/W(110) (Przybylski und Gradmann, 1987) beobachtet. Anschaulich kann diese Abnahme von T_c durch die abnehmende Überlappung von Orbitalen bzw. die Abschwächung der Kopplungsstärke aufgrund der reduzierten Anzahl von Nachbaratomen verstanden werden. Eine systematische Abhängigkeit der kritischen Temperatur läßt sich aber nicht einfach herausfinden. Denn in reellen Systemen, bei denen ein 3-dimensionales Wachstum und eine Inselbildung üblich sind, bestimmt neben der Atomlagenzahl eine Reihe von schwer kontrollierbaren Parametern der Filmpräparation die geometrische Abmessung einer Schicht. Eine Erhöhung von T_c an Oberflächen von Gd/W(110) (Weller et al., 1985; Rau und Eichner, 1986), FeNi₃ (Mamaev et al., 1987) und Tb/W(110) (Rau, 1989) sind daher nicht unerwartet, wobei die Richtigkeit für das Gd/W(110)-System noch umstritten ist.

Magnetische Anisotropie

Wichtige Eigenschaften von ultradünnen magnetischen Filmen sind ungewöhnliche magnetische Anisotropien. Sie bestimmen nicht nur die magnetischen Eigenschaften, sondern sind auch entscheidend für die Existenz der magnetischen Ordnung in 2-dimensionalen Systemen. Die Oberflächen-, Form- und Spannungsanisotropie in dünnen Schichten gewinnen mehr Gewicht gegenüber der magnetischen Kristallanisotropie.

Kristallanisotropie beruht auf der Spin-Bahn-Wechselwirkung (Darby und Isaac, 1974), über die die Ladungsverteilung der Elektronen im Kristallgitter die Richtung des Spins vorgibt. Sie beschreibt die Abhängigkeit der freien Energie von der Magnetisierungsrichtung in ungestörten Kristallen. Im Volumen der 3d-Übergangsmetalle ist das Bahnmoment im Kristallfeld weitgehend ausgelöscht, und daher ist die magnetische Kristallanisotropie relativ schwach (Gradmann, 1993).

Oberflächenanisotropie beruht auf der Abweichung der Isotropie der kristallinen Umgebung von magnetischen Atomen auf Oberflächen (Néel, 1954; Gradmann et al., 1986). Der dominierende Anteil für diese Anisotropie ist die *out of plane* Anisotropie, die in allen magnetischen Oberflächen vorhanden ist (Gradmann, 1993). Die Anisotropieenergie hängt aber stark von mechanischen Spannungen und vom Symmetriegrad ab (Bruno und Renard, 1989). So wurde z.B. für Co- und Fe-Filme auf W(110) eine *in plane* Anisotropie beobachtet (Gradmann und Waller, 1982; Fritzsche et al., 1995). Aufgrund der verstärkten Spin-Bahn-Wechselwirkung ist die Oberflächenanisotropie um zwei bis drei Größenordnungen stärker als die Kristallanisotropie und entscheidet bei dünneren Filmen über die leichte Magnetisierungsrichtung (Freeman und Wu, 1991; Gradmann, 1993).

Formanisotropie, die auf der Dipol-Dipol-Wechselwirkung beruht, nimmt linear mit der Schichtdicke zu und favorisiert immer die Orientierung des Moments in der Filmebene. In der phänomenologischen Ansicht führt die Konkurrenz der *out of plane* Oberflächen- und Formanisotropie häufig zu einem Spin-Reorientierungsübergang (Chappert et al., 1986; Detzel et al., 1995).

Eine durch mechanische Spannung verursachte Dehnung oder Stauchung eines Kristallgitters ruft die Spannungsanisotropie hervor, deren kennzeichnende Größe mit den elastischen Konstanten und Magnetostruktionskonstanten beschrieben werden kann. Hauptursachen für diese Anisotropie in Schichtsystemen sind die Gitterfehlpassung zwischen Film und Substrat bzw. die aus Relaxationsprozessen resultierenden Defekte.

Die letzten drei Anisotropien können in Schichtsystemen bewirken, daß die leichte Magnetisierungsachse der Filme nicht mit der des Volumens übereinstimmt. So ist die *easy* Achse von Fe/W(110) die $[1\bar{1}0]$ -Richtung statt $[001]$ für bcc Volumen-Fe (Gradmann und Waller, 1982) und die vom hcp Co/W(110) die $[1\bar{1}00]$ -Richtung statt $[0001]$ im Volumen (Kaya, 1928; Fritzsche et al., 1995).

Elektronische Struktur und magnetisches Moment

Eine auf einem Substrat aufgebrachte Schicht spürt zwei neue Umgebungen an ihren Grenzen. An der Seite zum Vakuum haben die Atome weniger Nachbarn als diejenigen im inneren der Schicht. Dies resultiert aufgrund der schwächeren Hybridisierung im allgemeinen in einer Verschmälerung der Energiebänder. Auf der anderen Seite der Schicht befinden sich Atome einer anderen Sorte bzw. elektronischen Struktur. Es kann zu einer Überlappung der Wellenfunktionen und damit auch zum Ladungstransport kommen, wobei die Richtung und die Stärke der Ladungsbewegung von der detaillierten elektronischen Struktur abhängen.

Bei Fe/W(110) zum Beispiel hybridisiert das 3d-Band von Fe mit dem 5d-Band von W, welches zu einer Verschiebung der Minoritätszustände von Fe näher an die Fermikante führt (Hong et al., 1988). Für Edelmetallsubstrate wie Cu und Ag wird dagegen wegen der fehlenden Zustände an der Fermikante ein unwesentlicher Hybridisierungseffekt an der Grenzfläche erwartet (Freeman und Wu, 1991).

Eine vom Substrat induzierte Gitterrekonstruktion, zum Beispiel fcc-Fe auf Cu(001) (Stampanoni et al., 1988) und bcc-Co auf GaAs(110) (Prinz, 1985), führt natürlich zu erheblicheren Änderungen der elektronischen Struktur.

Da der Magnetismus eines Materials durch Elektronen bzw. deren elektronische Struktur bestimmt wird, werden aus der elektronischen Modifikation an Oberflächen entsprechende Änderungen der magnetischen Eigenschaften erwartet. So führt die Bandverschmälerung an der Oberfläche, die in einer Zunahme der Zustandsdichte an der Fermikante resultiert, in der Regel zur Erhöhung magnetischer Momente. Rechnungen bestätigen einheitlich diese Folgerung (Fu et al., 1985; Richter et al., 1985; Jepsen et al., 1982). Eine erhöhte Zustandsdichte an der Fermikante von V auf Ag(100) (Rau et al., 1988) und Ag(111) (Drube und Himpsel, 1987; Mooderea und Meservey, 1989), Mn auf Ag(111) (Drube und Himpsel, 1987), Pd auf Ag(100) und W(110) (Rau, 1989) und Ru auf C(0001) (Steierl et al., 1994)

kann sogar verursachen, daß die im Volumen nicht-magnetischen Materialien ferromagnetisch werden, was im Stoner-Kriterium (2.2) ersichtlich ist. *Freeman und Wu* (1991) zeigen jedoch, daß der Oberflächenmagnetismus nicht nur von der Koordinationszahl, sondern auch von Details der Atomanordnung an der Oberfläche abhängt. An Kanten und Stufen, wo die Bindung zwischen den Atomen schwächer als an einer glatten Oberfläche ist, kann eine weitere Erhöhung der magnetischen Momente erwartet werden. An Grenzflächen kann eine Hybridisierung zur Delokalisierung von 3d-Elektronen führen, was eine Reduktion der magnetischen Momente bewirken oder zu magnetisch 'toten' Lagen führen kann (Mauri et al., 1989).

Kapitel 3

Auftrittspotentialspektroskopie

3.1 Auftrittspotentialspektroskopie (APS)

Bei APS wird eine Festkörperoberfläche mit Elektronen variabler Energie beschossen und die dabei emittierten Elektronen oder Photonen in Abhängigkeit von der Anregungsenergie nicht-dispersiv aufgenommen. Erreicht die kinetische Energie der Primärelektronen E_p die Bindungsenergie eines Rumpfniveaus E_c in Atomen, können sie die Rumpfelektronen über das Fermi-niveau E_F anregen und werden selber in die unbesetzten Zustände gestreut (Abb. 3.1). Nachgewiesen werden diese Prozesse über die Rekombination der Rumpflöcher, bei der Elektronen und Photonen ausgestrahlt werden. Die APS-Linienform wird durch die Anregungswahrscheinlichkeit bestimmt, die im wesentlichen von der unbesetzten Zustands-

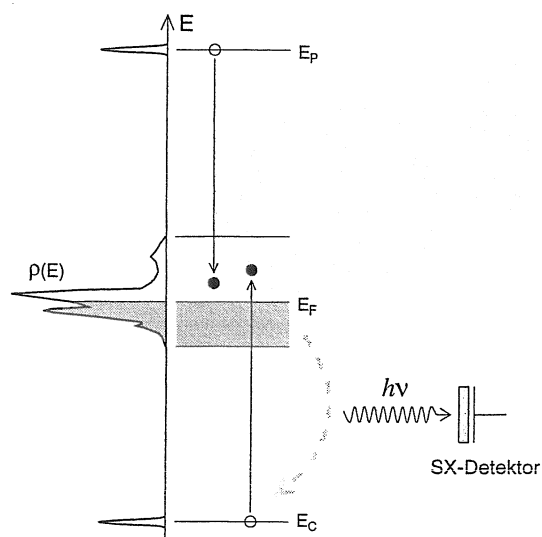


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der APS-Anregung. Der Nachweis von APS-Prozess über die Detektion von emittierten Photonen ist dargestellt.

dichte abhängt. APS spektroskopiert also die elektronischen Zustandsdichten oberhalb E_F . Entsprechend dem Nachweis der unterschiedlichen Sekundärprodukte unterscheiden sich die Methoden AEAPS (*Auger electron appearance potential spectroscopy*) und SXAPS (*soft x-ray appearance potential spectroscopy*). Die APS-Anregung kann auch über die elastisch reflektierten Elektronen (DAPS, *disappearance potential spectroscopy*) detektiert werden (Kirschner, 1975). Bei der Detektion von *Auger*-Elektronen (AEAPS) kann der Beugungseffekt zu Intensitätsschwankungen führen und dadurch das APS-Signal verändern. Bei der Potentialmodulation stellt auch die kapazitive Einkopplung der Primärelektronen auf das *Auger*-Signal ein unvermeidbares Problem dar (Vonbank, 1992). Aus diesen Gründen wird in der vorliegenden Arbeit ein SX-Detektor benutzt, und mit APS ist im folgenden SXAPS gemeint.

APS, als eine Schwellenspektroskopie, ist durch ein einfaches Meßprinzip und einen kompakten Meßaufbau ausgezeichnet. Der Ursprung dieser Technik geht auf den berühmten *Franck-Hertz*-Versuch zurück, der als erster diskrete Energieniveaus in Atomen nachwies (Franck und Hertz, 1911). Dieser wurde für die chemische Analyse und die Bestimmung der Bindungsenergien von Rumpfelektronen weiter entwickelt (Thomas, 1925; Williams, 1933), war aber erst mit dem Einsatz differentieller Meßtechnik und mit der Entwicklung der Ultrahoch-Vakuum-Technik in den 60er Jahren erfolgreich (Shinoda et al., 1954; Redhead, 1966). *Park und Houston* (1974) wendeten die Potentialmodulations- und die *Lock-In*-Technik an APS an, wodurch sich die Empfindlichkeit von APS stark erhöhte, und machten APS zu einer Standard-Oberflächentechnik. Damit wurde der Einsatzbereich von APS gewaltig erweitert, so konnten zum Beispiel die chemische Verschiebung und die elektronische Struktur eines Kristalls analysiert werden (Dose et al., 1984; Dose et al., 1986; Giber et al., 1991). Durch Verwendung von spinpolarisierten Elektronen konnte APS die spinabhängige Zustandsdichte spektroskopieren und wurde somit auch magnetisch sensitiv (Kirschner, 1984).

Die Entwicklung theoretischer Modelle zur Beschreibung des APS-Prozesses spielte in den letzten Jahren eine wichtige Rolle für die Interpretation der gewonnenen experimentellen Daten (Dose und Scheidt, 1979; Ebert und Popescu, 1997).

Im folgenden werden die Einzelheiten von APS näher diskutiert. Die Stärken dieser

Technik sollen im Vergleich zu anderen Oberflächentechniken verdeutlicht werden und ihre Problematik bzw. Beschränkungen beim Einsatz zur Oberflächenanalyse diskutiert werden.

3.2 Eigenschaften von APS

3.2.1 Oberflächensensitivität

Beim Eindringen in einen Festkörper wechselwirken Elektronen stark mit Oberflächenatomen. Sie regen beispielsweise gebundene Elektronen an oder können zu einer kollektiven Bewegung der Elektronen (Plasmon) führen. Dadurch verlieren sie schnell ihren monochromatischen Charakter. Bei Detektion der APS-Anregung über Photonen ist daher die Informationstiefe der Technik durch die inelastische Eindringtiefe der anregenden Elektronen bestimmt, wobei sie von der kinetischen Energie der Elektronen und dem Targetmaterial abhängig ist.

In der Literatur ist eine universelle Kurve für die inelastische mittlere freie Weglänge λ von Elektronen zu finden (Seah und Dench, 1979). Demnach beträgt λ in dem hier verwendeten Energiebereich von 700 ~ 800 eV etwa 12 Å, welche einer Filmdicke von etwa 6 Atomlagen entspricht. Diese Eigenschaft macht APS zu einer oberflächensensitiven Technik und wird zum Beispiel benutzt, Änderungen magnetischer Momente an Ober- und Grenzflächen zu detektieren (siehe Abs. 5.3).

3.2.2 Linienform

Die Erzeugungsrate charakteristischer Sekundärprodukte $P(E)$ bei APS-Prozessen ist in der Literatur unter der Annahme energieunabhängiger Übergangsmatrixelemente durch die Selbstfaltung der unbesetzten Zustandsdichte $\rho(E)$ angegeben (Park und Houston, 1973; Nilsson und Kanski, 1973):

$$P(E) \sim \int_0^E \rho(E') \rho(E - E') dE', \quad (3.1)$$

wobei $\rho(E)$ bei endlichen Temperaturen aus $\rho(E) = n(E)(1 - f_T)$ mit der Zustandsdichte $n(E)$ und der *Fermi-Dirac*-Verteilung f_T resultiert. Bei Verwendung der *Lock-In*-Technik, wie in dieser Arbeit, entspricht das APS-Signal der ersten Ableitung von $P(E)$ nach der Energie. Die Formel (3.1) beschreibt, daß die beiden Prozesse, die Anregung der Rumpf-

elektronen und die Abregung der Primärelektronen, in unbesetzten Zuständen nahe der Fermikante enden.

Obwohl viele experimentelle Daten durch diesen Ansatz erklärt werden konnten (Amelio, 1970; Dose et al., 1981), ist er mit nicht immer offensichtlichen Annahmen verknüpft. Die einfache Faltung (3.1) behandelt den Zweiteilchenprozeß streng im Einteilchen-Bild und vernachlässigt jede Wechselwirkung zwischen den beteiligten Elektronen. So versagt das Modell vor allem für Systeme wie EuO (Nolting et al., 1988), bei denen der Korrelations-effekt zwischen den Elektronen dominiert (Powell, 1973; Pandey, 1976). Außerdem bleibt das Pauliprinzip trotz starker Lokalität des APS-Prozesses unberücksichtigt.

Die Verbesserung des einfachen Selbstfaltungsmodells durch Berücksichtigung der in der Formel (3.1) vernachlässigten Parameter war in letzten Jahren das Thema von mehreren theoretischen Arbeiten (Nolting et al., 1993; Powell et al., 1992; Ebert und Popescu, 1997). Es wurden energie- und drehimpuls- sowie spinabhängige Übergangsmatrixelemente $W_{l,l',\sigma,\sigma'}$ eingeführt (Ebert und Popescu, 1997), die als Gewichtungsfaktoren in die Faltung der nach Drehimpulsen aufgelösten Zustandsdichte eingehen:

$$P(E) \sim \int dE' \sum_{l,l'} W_{l,l',\sigma,\sigma'}(E', E - E') \rho(E') \rho(E - E'), \quad (3.2)$$

wobei l, l' und σ, σ' die Drehimpuls- und Spinoperatoren für die beiden Elektronen im Endzustand darstellen. Die Übergangsmatrixelemente beschreiben unter anderem das Pauliprinzip und berücksichtigen dadurch die Lokalität der Rumpfniveauanregung. Die Formel (3.2) wurde sowohl für die reinen Elemente Fe und Ni, als auch für die Legierung FeNi₃ erfolgreich benutzt (Reinmuth et al., 1997; Ebert und Popescu, 1997).

Powell et al. (1992) untersuchten den Effekt der Rumpflöcher, ausgehend von einer modifizierten Zustandsdichte bei Existenz eines Rumpflochs, und fanden heraus, daß für leichte 3d-Übergangsmetalle wie Ti, V eine solche Korrektur notwendig ist, während die schweren Elemente wie Co, Ni wenig davon beeinflusst werden. Der Einfluß der Elektronenkorrelation wurde von *Nolting et al.* (1992) und *Potthoff et al.* (1993) im Rahmen einer Modellrechnung untersucht.

Der Zweiteilchen-Prozeß bzw. die Elektronenkorrelation verhindern zwar eine direkte Spektroskopie der Energiezustände, aber APS-Spektren geben wichtige Korrelationsfunktionen

von geladenen Teilchen wieder, über die andere Techniken nicht verfügen (Nolting et al., 1993). Dies ermöglicht, einen neuen Einblick in korrelationsrelevante Phänomene zu gewinnen.

3.2.3 Struktursensitivität

Die 3d-Elektronen in Bandmagneten sind stark im realen Raum lokalisiert und zeigen entsprechend eine schwache Dispersion. Die resultierende hohe Zustandsdichte an der Fermikante führt zu einem dominierenden Peak an der Schwelle eines APS-Spektrums. sp-Elektronen sind dagegen nicht lokalisiert und zeigen eine starke Dispersion. Aufgrund der geringen Gruppengeschwindigkeit der sp-Bänder an Hochsymmetriepunkten der Brillouinzone entstehen Maxima, die für die spektrale Charakteristik von APS-Spektren verantwortlich sind (Dose et al., 1984; Park, 1975).

Eine Strukturumwandlung eines Kristalls und die damit verbundene Rekonstruktion der elektronischen Strukturen äußern sich hauptsächlich in den struktursensitiven sp-Bändern bzw. im sp-Anteil eines APS-Spektrums. Die Veränderung der sogenannten 'Satellitenstruktur' ist also ein Sensor für strukturelle Modifikationen. Der Hauptpeak kann dagegen wegen der Lokalität der 3d-Elektronen wenig von kristallographischen Änderungen spüren. Die Struktursensitivität von APS wurde zum Beispiel eingesetzt, strukturelle Einzelheiten wie die Nahordnung in metallischen Gläsern (Dose et al., 1984), Modifikationen während der flüssig-fest-Phasenübergänge (Dose et al., 1986) und den strukturellen Phasenübergang von Kobalt (Giber et al., 1991) zu identifizieren.

3.2.4 Elementspezifität

Bei APS-Prozessen werden Elektronen aus den inneren Schalen eines Atoms über das Fermi-niveau angeregt. So können diskrete Rumpfniveaus über die Wahl der Anregungsenergie bestimmt werden, wodurch APS elementspezifisch ist. Die Bindungsenergie eines Rumpfniveaus kann aus der Relation $E_p = E_c$ an der Schwelle eines Spektrums bestimmt werden. E_p ist experimentell gegeben durch

$$E_p = eU + \phi, \quad (3.3)$$

wobei U das elektrische Potential zwischen der GaAs-Kathode und der Probe ist und ϕ die Energie, welche die Elektronen beim Verlassen des GaAs-Kristalls relativ zu dessen Fermi-niveau gerade haben und bei gleichem experimentellen Aufbau zu $\phi = 1.4 \pm 0.1 \text{ eV}$ bestimmt wurde (Donath, 1994). Eine exakte Bestimmung der Bindungsenergie aus dem im allgemeinen einige eV breiten APS-Peak ist nicht so einfach möglich. Früher wurde der Anstiegspunkt oder das Peakmaximum des Spektrums zur Bestimmung des energetischen Bezugspunktes benutzt (Fukuda et al., 1977; Anderson et al., 1982). Ein solches Verfahren vernachlässigt die Form sowie die Änderungen der Zustandsdichte und enthält dadurch einen maximalen systematischen Fehler von einer halben Peakbreite. Diese Schwierigkeit kann durch ein modernes Rechenverfahren für die Bandstruktur und deren Faltung überwunden werden (Ertl et al., 1993; Ebert und Popescu, 1997). Durch einen Vergleich des errechneten APS mit experimentellen Spektren können der energetische Bezugspunkt bzw. die Bindungsenergie eines spektroskopierten Rumpfniveaus bestimmt werden. Diese Prozedur führte zu einer besseren Übereinstimmung zwischen den mit APS und XPS bestimmten Werten für Bindungsenergien (Reinmuth et al., 1997; Ebert und Popescu, 1997).

Trotz dieser Korrektur erweisen sich die aus APS erhaltenen Werte der Bindungsenergie immer noch etwas kleiner gegenüber XPS-Werten. Ein Grund dafür ist, daß der angeregte Atomzustand nicht mehr der Grundzustand ist, wie in Modellrechnungen angenommen. Das bei einer APS-Anregung entstehende Rumpfniveauloch erzeugt eine anziehende Kraft für die umliegenden Elektronen und führt zu einer energetischen Absenkung des Valenzbandes. Bei XPS dagegen verlassen die Photoelektronen den Kristall so rasch, daß sie vom Relaxationsprozeß des Elektronensystems wenig beeinflußt werden.

Es muß noch darauf hingewiesen werden, daß APS nicht gleich sensitiv für alle Elemente ist. Das APS-Signal hängt, wie bereits erwähnt, von unbesetzten elektronischen Zuständen ab. Elemente mit hoher Zustandsdichte an der Fermikante liefern ein stärkeres APS-Signal im Vergleich zu denjenigen mit niedriger Zustandsdichte, da die Anregungswahrscheinlichkeit mit der Zustandsdichte steigt, und sind daher leichter nachzuweisen. So können die meisten 3d- und 5d-Elemente im allgemeinen sehr gut mit APS untersucht werden. Elemente wie Cu, welche eine fast gefüllte Schale und daher eine kleine Zustandsdichte an der Fermikante haben, können dagegen schwer nachgewiesen werden.

Da die Untergrundintensität mit zunehmender Anregungsenergie stark zunimmt, ist es effektiver, Elektronen aus möglichst äußerern Schalen, z. B. 3p- von Fe und Co statt 2p-Rumpfniveaus, anzuregen. Aber Bindungsenergien von den nahe Valenzbändern liegenden Rumpfelektronen überlappen meistens mit Plasmonanregungen, so daß das gesuchte APS-Signal in einem breiten (30~50 eV) Plasmonpeak verborgen ist (Park und Houston, 1974). Hinzu kommt die kleinere Quantenausbeute von Photonen gegenüber Sekundärelektronenemission bei niedrigeren Anregungsenergien (Park und Houston, 1974). So ist es schwierig für 3d-Übergangsmetalle, ein vernünftiges APS-Signal aus der Anregung der 3p-Schale zu beobachten. Dies ist der Grund dafür, warum mit APS fast ausschließlich die L-Schale untersucht wird.

3.2.5 Magnetische Untersuchungen

Spinpolarisierte Elektronen verursachen in einem Ferromagneten eine spinabhängige Intensitätsdifferenz des APS-Signals (Kirschner, 1984; Ertl et al., 1993). Abb. 3.2 zeigt schematisch den Anregungsprozeß eines Bandferromagneten mit spinpolarisierten Elektronen. Ein einfallendes Minoritätselektron mit Spin (\downarrow) sieht verglichen mit einem Majoritätselektron mit Spin (\uparrow) eine höhere Zustandsdichte an der Fermikante. Da die Primärelektronen beim Stoß ihren Spin behalten, ergibt sich eine unterschiedliche Anregungsrate für die beiden Spinrichtungen. Die direkte Wechselwirkung der Primärelektronen mit den Rumpfelektronen wird als spinunabhängig angenommen (Kirschner, 1984; Ertl et al., 1993). Das spinabhängige APS-Signal wird dann als Faltung der spinabhängigen- mit der gesamten Zustandsdichte beschrieben:

$$P_{\downarrow(\uparrow)}(E) \sim \int_0^E \rho_{\downarrow(\uparrow)}(E') \rho_{\downarrow+\uparrow}(E - E') dE', \quad (3.4)$$

wobei $\rho_{\downarrow(\uparrow)}$ die unbesetzte Minoritäts(Majoritäts)zustandsdichte und $\rho_{\downarrow+\uparrow}$ die Summe der beiden darstellt. Die unterschiedliche Anzahl von Zuständen ρ_{\uparrow} und ρ_{\downarrow} über E_F begründet also die experimentell beobachtete Intensitätsdifferenz.

Die experimentelle Intensitätsdifferenz wird in Form der Asymmetrie A angegeben:

$$A = \frac{I_{\downarrow} - I_{\uparrow}}{I_{\downarrow} + I_{\uparrow}}, \quad (3.5)$$

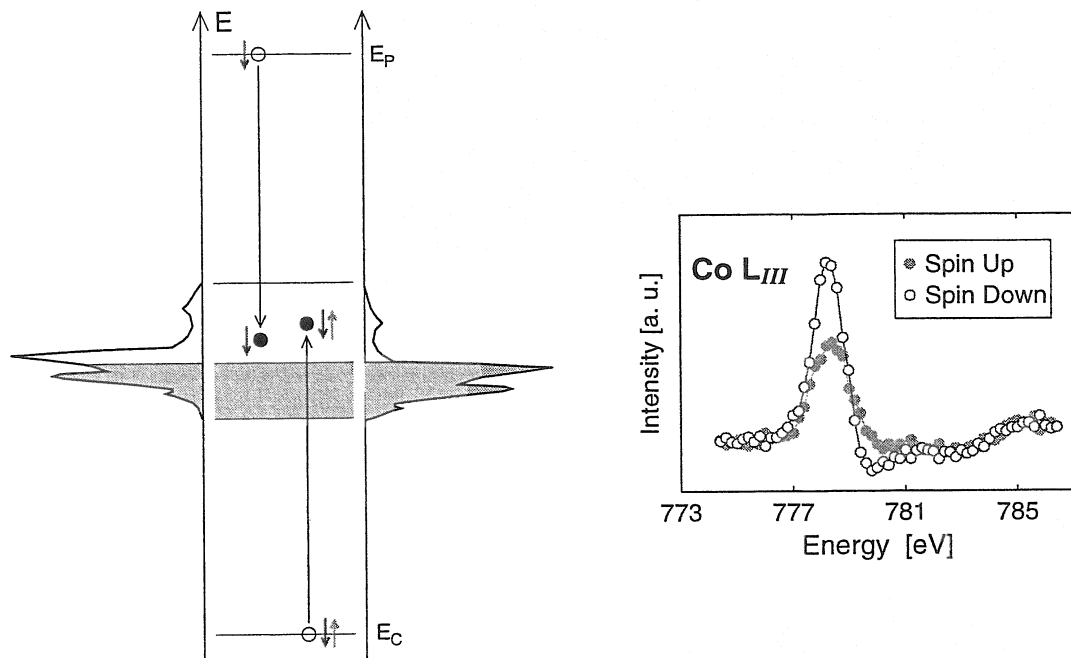


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der APS-Anregung mit spinpolarisierten Elektronen in einem Ferromagnet. Rechts ist ein Beispiel-Spektrum der Co $2p_{3/2}$ -Linie (L_{III}) dargestellt.

die als 'Spinasymmetrie' bezeichnet wird. A enthält Informationen über die magnetischen Eigenschaften der untersuchten Probe. Obwohl die Spinasymmetrie als Maß für die Probenmagnetisierung M erfolgreich zur Aufnahme von temperaturabhängigen Magnetisierungskurven (Detzel et al., 1996; Reinmuth et al., 1998) und Spin-Reorientierungsübergängen (Detzel et al., 1995) benutzt wurde, ist es nicht berechtigt, A und M gleich zu setzen, da die Magnetisierung $M = n_A n_B \mu_B$ mit der Atomdichte n_A und der von jedem Atom getragenen Anzahl vom Bohrschen Magneton n_B anders definiert ist. Eine absolute Magnetometrie ist also mit APS nicht möglich, aber es können unterschiedliche Spinasymmetrien direkt auf Änderungen der Probenmagnetisierung zurückgeführt werden.

Die magnetische Empfindlichkeit der APS kann mit der Elementspezifizität kombiniert werden. Dies ist ein wichtiger Vorteil besonders für magnetische Mehrkomponenten- und Mehrschichtensysteme, bei denen eine elementare Trennung der magnetischen Beiträge für ein tieferes Verständnis zur magnetischen Kopplung und Ordnung entscheidend ist.

Kapitel 4

Experimentelles

Der experimentelle Aufbau für das spinpolarisierte APS-Experiment ist wegen der Quelle für spinpolarisierte Elektronen etwas aufwendig. Abb. 4.1 zeigt den Aufbau eines spinpolarisierten APS-Experiments. Die Apparatur besteht aus zwei Ultra-Hoch-Vakuum-Kammern. Eine enthält die Quelle für die spinpolarisierten Elektronen, und die zweite dient als Präparations- und Meßkammer. Sie werden mit einer Turbomolekularpumpe und jeweils einer Ionengetterpumpe und einer Titansublimationspumpe gepumpt. Dadurch wird ein Basisdruck von $1 \cdot 10^{-11} \text{ mbar}$ für die Quellenkammer und $5 \cdot 10^{-11} \text{ mbar}$ für die Probenkammer erreicht.

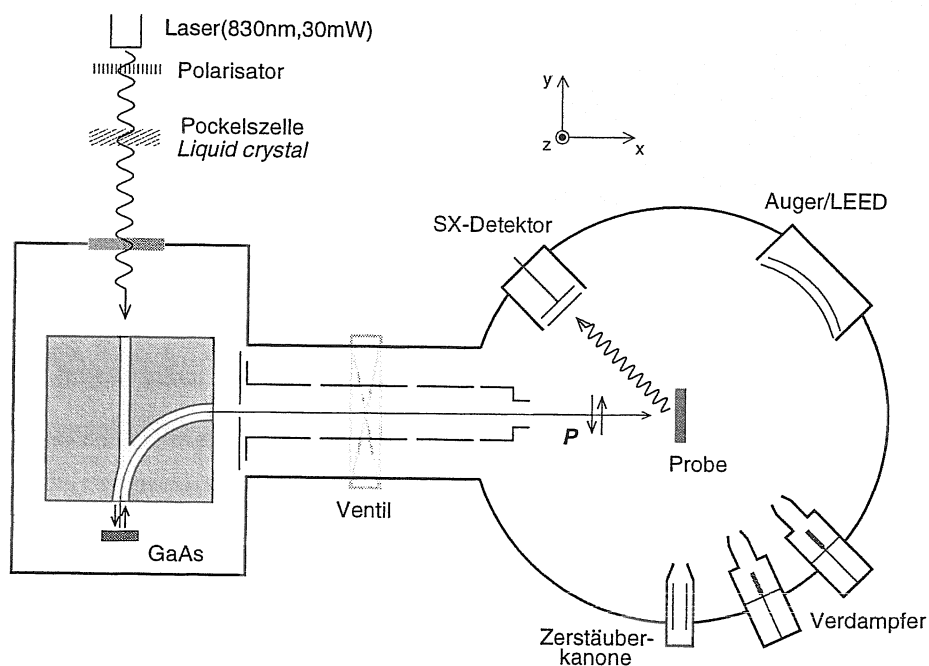


Abbildung 4.1: Darstellung des experimentellen Aufbaus für spinpolarisierte SXAPS (Soft-x-ray appearance potential spectroscopy).

reicht. Durch eine vakuummäßige Trennung der beiden Kammern durch ein Schieberventil wird eine separate Präparation der Quelle und der Proben ermöglicht. Die aus dem GaAs-Kristall emittierten Elektronen werden nach der elektrostatischen Umlenkung um 90° von einer Transferoptik auf einer ca. 60 cm langen Strecke zum Target geführt.

Zur Präparation und Charakterisierung ultradünner Schichten befinden sich in der Probenkammer drei Elektronenstrahl-Verdampfer und eine 4-Gitter-Auger/LEED-Optik. Die Analyse der Restgaszusammensetzung erfolgt mit einem Quadrupolmassenspektrometer. Zur Magnetisierung der magnetischen Schichten dient ein Drei-Spulen-System, mit dem in zwei Raumrichtungen, parallel und senkrecht relativ zur Meßebe, Magnetfelder bis 100 G erzeugt werden können. Die Spulen sind so eingebaut, daß longitudinale magneto-optische Kerr-Messungen durchgeführt werden können.

In den folgenden Abschnitten sind die für das APS-Experiment wichtigen Elemente einzeln diskutiert.

4.1 Quelle für spinpolarisierte Elektronen

Spinpolarisierte Elektronen werden über Photoemission aus einem mit Caesium und Sauerstoff bedampften GaAs(100)-Einkristall erzeugt. Dieser Quellentyp ist gegenüber anderen Spinquellen durch hohen Strom, konstante Polarisation und scharfe Energieverteilung ausgezeichnet (Pierce und Meier, 1976; Kessler, 1985).

Zur Anregung des GaAs-Kristalls wird ein Diodenlaser mit der Wellenlänge $\lambda = 830\text{nm}$ und einer maximalen optischen Leistung von 30 mW benutzt, der mit einem elektrischen Temperaturstabilisator ausgerüstet ist. Durch die Kombination aus einem Linearpolarisator und einem *liquid-crystal-retarder* wird das Laserlicht zirkular polarisiert. Der *liquid-crystal-retarder* hat sich gegenüber einer Pockelszelle vorteilhaft erwiesen, weil er mit einer geringen Spannung unter 3 V betrieben wird und somit das häufig auftretende Schaltungsproblem der Pockelszelle mit einer Betriebsspannung $\approx 3\text{kV}$ vermeidet. Für das APS-Experiment beträgt die Schaltfrequenz der Spinpolarisation maximal einige Hz, so daß der Vorteil der schnellen Schaltung der Pockelszelle nicht ausschlaggebend ist. Der Polarisationsgrad des zirkularpolarisierten Lichtes beträgt ca. 96 %.

Bei Bestrahlung mit Licht werden die Valenzelektronen in GaAs, das eine Bandlücke von 1.42 eV besitzt, in das Leitungsband angeregt und verlassen aufgrund der negativen Elektronenaffinität, die durch die Cs- und O-Beschichtung zustande kommt (Bell, 1973), den Kristall. Ein typischer Wert für die Quantenausbeute liegt bei $6 \mu\text{A}/\text{mW}$. Die unterschiedliche Anregungswahrscheinlichkeit der Valenzelektronen je nach der zirkularen Polarisation des Lichtes ist der Ursprung für die Spinpolarisation der emittierten Elektronen und ergibt einen theoretischen Polarisationsgrad von 50 % (Kessler, 1985). Der experimentell gefundene Polarisationsgrad ist etwas niedriger, $\approx 30 \%$, wie es in einer ähnlich aufgebauten Spinquelle an einer IPE (*inverse photoemission*)-Anlage beobachtet wurde (Donath, 1994). Als Grund für den reduzierten Polarisationsgrad können Streuprozesse im GaAs und in der Oxidschicht genannt werden. Die Quantisierungsachse der Spinpolarisation ist parallel zur zirkularen Polarisation des Lichtes, nämlich zu dessen Einfallrichtung. Bei einer Umlenkung der Elektronen um 90° wird die longitudinale Spinpolarisation in eine transversale umgewandelt.

Eine genaue Funktionsweise und die aufwendige Präparation für die GaAs-Spinquelle sind bei Kessler (1985) und Kolac *et al.* (1988) zu finden.

4.2 Elektronen-Transferoptik

Die lineare Transferoptik (Abb. 4.2) besteht aus vier elektrostatischen Linsen, Ablenkplatten und Blenden. Um den Effekt der Streufelder und den Strahldurchmesser zu minimie-

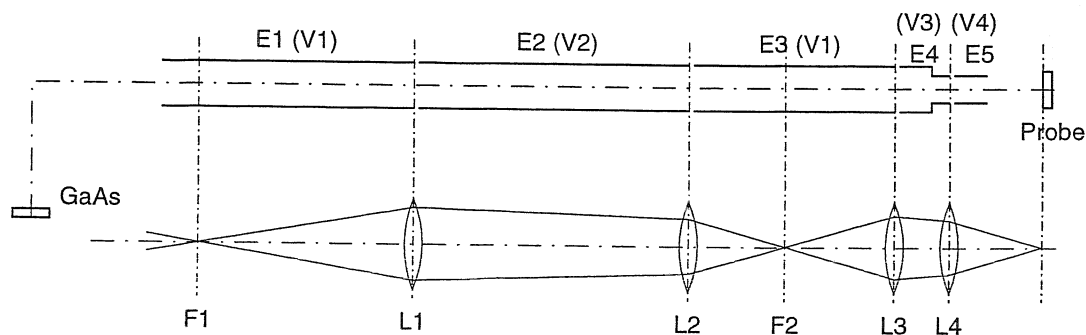


Abbildung 4.2: Elektrodenanordnung der Elektronen-Transferoptik. Ein Strahlengang für den fokussierten Modus wird schematisch eingezeichnet.

ren, werden Elektronen in der mittleren Strecke auf eine kinetische Energie von 1250 eV beschleunigt, und die Brennweite der Linsen wird so gewählt, daß der Strahl möglichst parallel läuft (Kolac et al., 1988). Die gewünschte Primärenergie wird durch eine Abbremsung der Elektronen am Ende der Flugstrecke bestimmt. Störende Magnetfelder wie etwa das Erdmagnetfeld werden im Bereich der Optik durch eine Abschirmung mit dem hochpermeablen Material CONETIC unterdrückt. Für den Normalbetrieb wurde ein paralleler Strahl mit einem Durchmesser von etwa 5 mm verwendet.

Da die Reinigung und die Präparation ultradünner Filme aufwendig sind, wurde in den letzten Jahren häufig versucht, keilförmige Filme aufzudampfen und die verschiedenen dicken Filmabschnitte nacheinander zu untersuchen. Da dafür eine laterale Auflösung Voraussetzung ist, entsteht ein Bedarf nach einem fokussierten Strahl. Elektrostatische Rechnungen zeigen, daß eine Fokussierung des hier verwendeten Elektronenstrahls aus GaAs mit der bestehenden Transferoptik durch Änderung der Potentiale möglich ist (Liebl, 1999).

Abb. 4.2 zeigt schematisch die Anordnung der Elektroden der Transferoptik. Das Linsenpaar L1 und L2 (Elektroden E1, E2, E3) wird so betrieben, daß der Fokus F2 nicht innerhalb E4, sondern zwischen E3 und E4 entsteht. Dieser Zwischenfokus wird dann durch das Linsenpaar L3 und L4 (Elektroden E3, E4, E5) auf die Probe abgebildet.

Für die Fokussierung des Elektronenstrahls muß das Linsenpaar L1 und L2 stärker fokussieren, d.h. das Potentialverhältnis V_2/V_1 (für den parallelen Modus $1250\text{V}/500\text{V} = 2.5$, alle Potentiale bezüglich der Elektronenquelle) muß vergrößert werden. Aus Gründen der Spannungsfestigkeit soll das Potential der Elektrode E2 (1250 V) nicht erhöht werden. Es muß also das Potential der verbundenen Elektroden E1 und E3, d.h. die Absaugspannung V_1 erniedrigt werden.

Die Rechnung mittels der Transfermatrixmethode unter Verwendung von Literaturwerten für die Rohrlinsen ergibt, daß bei Erniedrigung von V_1 auf 400 V ($V_2/V_1 = 3.125$) der Zwischenfokus F2 an der in Abb. 4.2 skizzierten Stelle entsteht. Die Erniedrigung von 500 V auf 400 V betrifft proportional natürlich auch die Potentiale der Kugelkondensatorelektroden (von 629 V auf 503 V für E_{innen} bzw. von 397 V auf 318 V für $E_{\text{außen}}$).

Um den Zwischenfokus F2 auf die Probe abzubilden, werden die Elektroden E3, E4 und E5 ähnlich wie eine unsymmetrische Einzellinse betrieben, und zwar im *Decel-Accel*-Modus.

Der *Accel-Decel*-Modus wäre elektronenoptisch zwar günstiger, würde aber ein hohes Potential der Elektrode E4 erfordern. Die Elektrode E5 und die Probe liegen auf gleichem Potential, der Zwischenraum ist also feldfrei.

Die Potentiale der Mittelelektrode E4 ergeben sich aus der Rechnung wie folgt:

bei Endenergie $600 \text{ eV} \rightarrow V_3 \approx 145 \text{ V}$ (gegen Quelle)

bei Endenergie $800 \text{ eV} \rightarrow V_3 \approx 200 \text{ V}$ (gegen Quelle).

Um den gewünschten Bereich der Endenergie $600 \sim 1000 \text{ V}$ zu überstreichen, muß also das Potential V_3 der Elektrode E4 im Bereich $145 \sim 200 \text{ V}$ gegen die Quelle eingestellt werden können. Der Abbildungsmaßstab variiert von $0.33 : 1$ bei 600 V Endenergie bis $0.39 : 1$ bei 1000 V Endenergie, d.h. der Emissionsfleck wird um diesen Faktor verkleinert auf die Probe abgebildet.

Stärkere Verkleinerung kann erreicht werden, wenn V_1 noch weiter gesenkt wird ($V_1 < 400 \text{ V}$). Dadurch rutscht der Zwischenfokus F2 noch näher zur Elektrode E2. Er kann wieder durch das Linsenpaar L3 und L4 auf die Probe abgebildet werden.

Die berechneten und experimentell bestimmten Potentiale für den fokussierten Modus sind zusammen mit den Betriebspotentialen für den parallelen Modus in Tabelle 4.1 aufgetragen. Die experimentellen Potentiale wurden so bestimmt, daß der Strahl bei gegebenem Potential für die Elektrode E1 am schärfsten fokussiert wird, wobei das Profil des Elektronenstrahls am Probenort mit einem am Manipulator eingebauten *Faraday*-Becher gemessen wurde. Die experimentell bestimmten Potentiale für den fokussierten Modus stimmen

in V	E_{innen}	$E_{außen}$	E1(V1)	E2(V2)	E3(V1)	E4(V3)	E5(V4)
parallel	629	397	500	1250	500	200	0
fokussiert (Rechnung)	503	318	400	1250	400	160	0
fokussiert (Exp.)	518	317	399	1250	429	220	0

Tabelle 4.1: Berechnete und experimentell bestimmte Potentiale für den fokussierten Modus und die Betriebspotentiale für den parallelen Modus. E_{innen} und $E_{außen}$ sind die Elektroden für den Kugelkondensator.

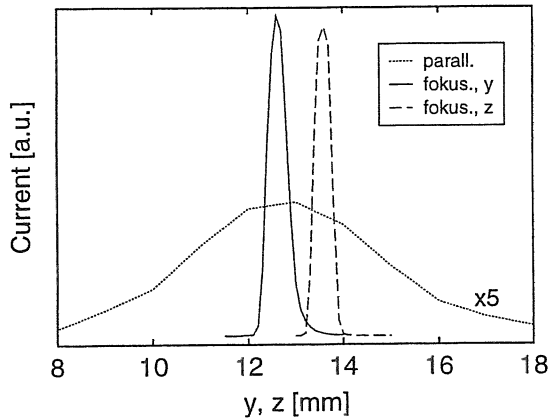


Abbildung 4.3: Profile von Elektronenstrahlen am Probenort, gemessen mit einem Faraday-Becher. Für die Koordinaten y und z , siehe Abb. 4.1. Das Profil für den parallelen Modus ist vergrößert dargestellt.

gut mit den berechneten Werten überein. Nur die Werte für V3 zeigen eine große Abweichung. Dies liegt wahrscheinlich daran, daß das Potential für E3 nicht wie in der Rechnung angenommen gleich dem der Elektrode E1 gelegt werden kann, da die Elektroden seriell geschaltet sind. So muß die Linse L3 die größere Brennweite der Linse L2 kompensieren.

Die gemessenen Profile des Elektronenstrahls sind in Abb. 4.3 aufgetragen. Der Durchmesser des Profils für den fokussierten Modus ist gegenüber dem parallelen um mehr als eine Größenordnung reduziert. Eine Faltung des als *Gauß*-förmig angenommenen Strahlprofils mit der rechteckigen Blende ergibt ein Strahldurchmesser von 0.35 mm . Die Strahlprofile in der y - und der z -Richtung (Abb. 4.1) zeigen auch, daß der Strahl räumlich homogen ist. Andere Messungen (nicht dargestellt) haben gezeigt, daß sich der fokussierte Elektronenstrahl gegenüber der Energieänderung und der Umschaltung der Spinpolarisation stabil verhält.

Eine weitere Verschmälerung des Elektronenstrahls durch Variation von V1 und V3 konnte nicht erreicht werden. Als Grund dafür sind zwei Erklärungen denkbar. Zum einen ist die weitere Verschmälerung mit dem Faraday-Becher, der eine Öffnung von etwa 0.5 mm hat, nicht auflösbar. Zum anderen könnte die beobachtete Fokussierung die experimentelle Grenze sein, die mit der Anordnung der für Elektronenenergien bis 20 eV konstruierten Transferoptik erreicht werden kann (Kolac et al., 1988).

Der minimal erreichbare Strahldurchmesser von 0.35 mm reicht zwar nicht für eine Mikroskopie, bietet aber genügende Auflösung für eine Analyse von keilförmig aufgedampften Filmen.

4.3 Spinrotator

Spin-Reorientierungsübergänge sind in niederdimensionalen magnetischen Systemen kein seltenes Ereignis. Neben der Filmdicke (Abs. 5.1) können andere Parameter wie Temperatur (Schulz und Baberschke, 1994) und Adatome (Gradmann et al., 1986) einen Spin-Reorientierungsübergang verursachen. Die experimentelle Beobachtung einer solchen Spindrehung erfordert ein passendes Werkzeug, welches mit der zu untersuchenden Magnetisierung \mathbf{M} mitgedreht werden kann. Für SPAPS ist die eindeutige Bestimmung der Spindrehung mit einer parallel zu \mathbf{M} drehbaren Spinpolarisation \mathbf{P} möglich, da die Spinasymmetrie proportional zum Skalarprodukt $\mathbf{M} \cdot \mathbf{P}$ ist. Daher wurde in dieser Arbeit versucht, den Primärelektronen einen weiteren Freiheitsgrad, die Rotation des Spins in der transversalen Ebene, zu geben. Dazu wird die wohlbekannte Tatsache benutzt, daß der Spin \mathbf{S} eines Elektrons in einem äußeren Magnetfeld um die Feldachse präzediert, und zwar mit dem Drehmoment (Abb. 4.4)

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}, \quad (4.1)$$

wobei $\boldsymbol{\mu}$ das magnetische Moment eines Elektrons und \mathbf{B} das äußere Magnetfeld ist. Für die Änderung des Spin $d\mathbf{S}$ gilt

$$dS = S \cdot \sin\theta \cdot \omega \cdot dt. \quad (4.2)$$

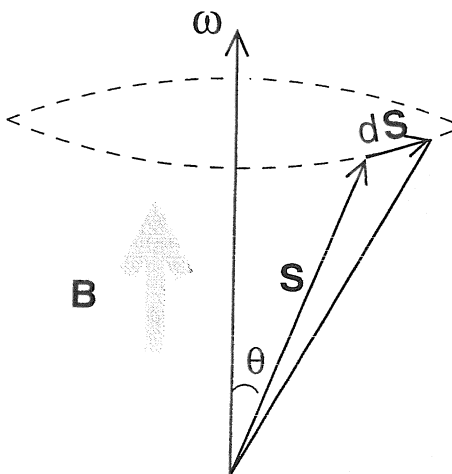


Abbildung 4.4: Präzession eines Spins \mathbf{S} in einem Magnetfeld \mathbf{B} .

Die Drehgeschwindigkeit des Spins ω , die sogenannte *Larmor*-Frequenz, läßt sich aus den Gleichungen (4.1, 4.2) ableiten

$$\omega = \frac{\mu B}{S} = \frac{g\mu_B}{\hbar} B, \quad (4.3)$$

wobei g der Landé-Faktor ($g = 2$ für Elektronenspin), μ_B das Bohrsche-Magneton und \hbar die Plancksche Konstante ist. In einem Zeitintervall Δt präzediert der Spin um einen Winkel $\Delta\psi$

$$\Delta\psi = \omega\Delta t = \frac{\Delta t g \mu_B}{\hbar} B = 2.3 \cdot 10^5 [m/As] \Delta t H. \quad (4.4)$$

Hierbei wird $B = \mu_0 H$ benutzt. Die Zeit Δt , in der ein Elektron dem Magnetfeld \mathbf{B} ausgesetzt ist, wird durch seine kinetische Energie $E_0 = m_0 v^2/2$ bzw. seine Fluggeschwindigkeit v bestimmt.

Experimentell wurde die Spinrotation durch ein axialsymmetrisches Magnetfeld ermöglicht, welches durch eine um das Vakuumrohr an der Stelle der Transferoptik umgewickelte Feldspule (36 Wicklungen mit $\phi 1\text{mm}$ Cu-Draht) realisiert wurde. Unter Annahme eines rechteckigen Magnetfeldprofils ($H = 36I/l$ innerhalb und $H = 0$ außerhalb der Spule mit dem durch die Spule fließenden Strom I und der Länge der Spule $l \approx 0.04\text{m}$) ergibt sich für $\Delta t H$

$$\Delta t H = \frac{l}{v} 36 \frac{I}{l} = 36 I \sqrt{\frac{m_0}{2E_0}}. \quad (4.5)$$

Mit $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ und $E_0 = 1250 \text{ eV}$ folgt

$$\Delta\psi = 0.39 \cdot I \text{ A}^{-1}. \quad (4.6)$$

Für eine Drehung des Spins um $\pi/2$ ist damit theoretisch ein Strom $I = 4.0 \text{ A}$ nötig.

Der Spinrotator wurde an einem 10 ML Fe-Film getestet, indem die APS-Spinasymmetrie als Funktion des durch die Spule fließenden Stromes gemessen wurde. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.5 aufgetragen. Bei $I = 0 \text{ A}$ ist die Spinpolarisation \mathbf{P} parallel zur Probenmagnetisierung \mathbf{M} , die Spinasymmetrie ist hier maximal mit 34 %. Bei Erhöhung des Stroms fällt sie ab und durchläuft den Nullpunkt bei $I = 4.5 \text{ A}$. Der Nullpunkt bedeutet eine senkrechte Stellung von \mathbf{P} und \mathbf{M} . Da sich \mathbf{M} während der Messung nicht dreht, ist dies ein Zeichen

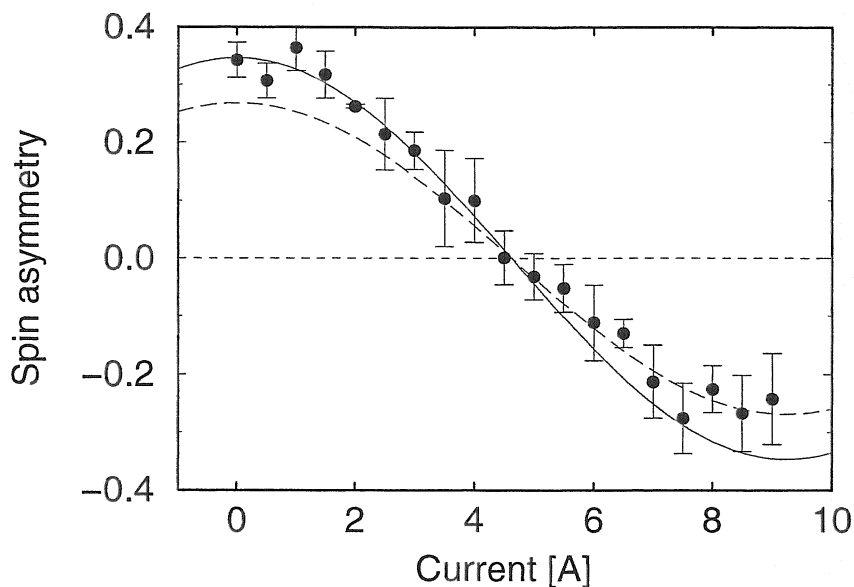


Abbildung 4.5: APS-Spinasymmetrie eines 10 ML Fe-Film auf W(110) als Funktion des durch die Spule fließenden Stroms bzw. des induzierten Magnetfeldes. Die Linien sind die gefitteten Kosinuskurven mit der Amplitude 0.34 (durchgezogen) und 0.27 (gestrichelt).

dafür, daß die Richtung der Spinpolarisation um $\pi/2$ gedreht wurde. Die Übereinstimmung zwischen der Rechnung und dem Experiment ist also exzellent trotz der unrealistischen Annahme des rechteckigen Feldquerschnitts. Bei weiterer Erhöhung des Stroms wechselt das Vorzeichen der Spinasymmetrie und ihr Betrag steigt wieder. Der Spin kann, wie aus der Messung ersichtlich, zumindest um π gedreht werden. Durch die Umpolung des Stroms rotiert der Spin in die umgekehrte Richtung, d.h. der Spin kann in beliebige Richtung in der transversalen Ebene gerichtet werden.

Da die Spinasymmetrie proportional zu $\mathbf{P} \cdot \mathbf{M} = PM \cdot \cos\psi$ ist, kann die gemessene Abhängigkeit der Spinasymmetrie vom Strom mit einer Kosinuskurve (Linien in Abb. 4.5) gefittet werden. Es zeigt sich, daß sich die Spinasymmetrie für $I < 4.5A$ mit einer Kosinuskurve höherer Amplitude als für $I > 4.5A$ besser fitten läßt. Da sich \mathbf{M} nicht ändert, bedeutet dies eine reduzierte Spinpolarisation bei höherem Strom bzw. Magnetfeld. Aus den zwei Kurven wurde eine Reduktion der Spinpolarisation um 6 % auf $P \approx 24$ % ermittelt. Dieser Verlust an Spinpolarisation kann durch die Inhomogenität des Magnetfeldes erklärt werden. Die

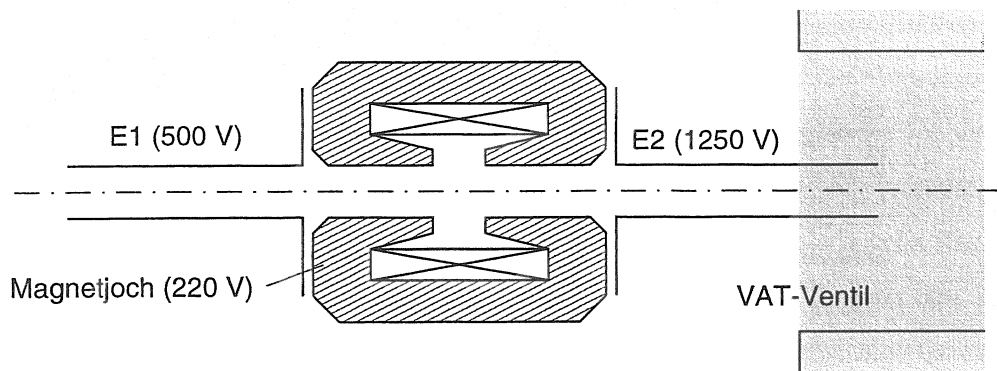


Abbildung 4.6: Die von Duden und Bauer (1995) vorgeschlagene Konfiguration für den Spinrotator (schematisch).

räumlich verteilten Elektronen spüren unterschiedliche Feldstärken und präzedieren entsprechend mit unterschiedlicher *Larmor*-Frequenz, was im Mittel zu einer Reduktion der Spinpolarisation führt.

Auf drei Punkte zum Betrieb des Spinrotators soll hingewiesen werden: i) Die Feldspule verbraucht etwa 5 W bei einer 90°-Drehung. Die dabei entstehende Wärme kann aufgrund der großen Kontaktfläche der Spule einfach in die Luft abgeführt werden und stellt daher kein Problem für einen stundenlangen Dauerbetrieb dar. ii) **B** dreht nicht nur den Elektronenspin, sondern lenkt auch die Elektronenbahnen ab, sofern sie nicht exakt parallel zu **B** sind, was zu einem Verlust an Strahldichte führen kann. Bei einer Drehung der Spinpolarisation bis $\pm 90^\circ$ wurde aber kein erkennbarer Verlust beobachtet. Bei einer $\pm 180^\circ$ -Drehung verlieren dagegen der Elektronenstrahl um etwa 10 % an Intensität, wobei der Betrag des Verlustes sehr stark durch die Justierung des Strahlengangs beeinflusst wird. iii) Das durch den Spinrotator verursachte Streufeld am Proben- und Quellenort ist vernachlässigbar, da das Feld umgekehrt proportional zur dritten Potenz vom Abstand ist.

Der in dieser Arbeit verwendete Spinrotator wurde ohne eine einzige Änderung der Transferoptik und sogar ohne die Vakuumbrechung realisiert. Die Positionierung des Spinrotators war daher nicht ideal, was den meßbaren Verlust an Spinpolarisation und Stromdichte zur Folge hat. Dieses Problem kann aber dadurch gelöst werden, die Feldspule zwischen zwei Elektroden im Strahlengang im Inneren des Vakuumrohrs anzubringen. Abb. 4.6

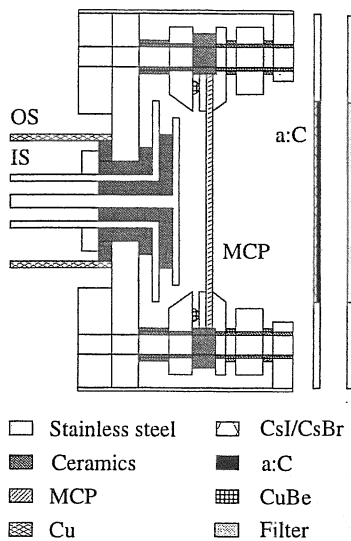


Abbildung 4.7: Detektor für weiche Röntgenstrahlung.

zeigt ein Konfigurationsbeispiel von *Duden und Bauer (1995)*.

4.4 SX-Detektor

Das APS-Signal ist aufgrund der vielfältigen Wechselwirkung von Elektronen mit Festkörpern von einem starken Untergrund überlagert. Der Hauptbeitrag zum Untergrund stammt aus Plasmonanregungen und Anregungen aus Energieniveaus mit niedrigeren Bindungsenergien (Schulz, 1986). Dies führt zu einem typischen Signal-Untergrund-Verhältnis (SUV) von 10^{-4} . Daher ist es für das APS-Experiment wichtig, niederenergetische Strahlung zu unterdrücken. Zu diesem Zweck wird ein speziell entwickelter SX-Detektor verwendet (Rangelov et al., 1998). Auch die Anwendung der Modulationstechnik, bei der die Primärenergie mit einem Sinussignal überlagert wird und das APS-Signal aus dem mit der Energie langsam verändernden Untergrund selektiert wird, trägt zur erheblichen Erhöhung von SUV bei.

Der in dieser Arbeit verwendete SX-Detektor besteht aus einem CsI-Film als Photon-Elektron-Konverter auf einer amorphen C-Schicht als Trägermaterial, die auch als Filter niederenergetischer Strahlung dient, einer Mikrokanalplatte (MCP, *micro channel plate*), und einem Al-Filter (Abb. 4.7). Die vom Target emittierten Photonen durchlaufen das Al-Fenster und werden in der CsI-Schicht in Elektronen konvertiert, die zum MCP beschleunigt und dort verstärkt werden. Die CsI-Photokathode zeichnet sich gegenüber konventionellen Metall-Photokathoden durch eine höhere Quantenausbeute aus, die gerade im verwendeten

Energiebereich von 700 eV eine besonders hohe Quanteneffizienz aufweist (Henke et al., 1981). Zudem ist CsI ein Isolator mit der Energielücke von 6.2 eV und der Vakuumenergie um etwa 1 eV darüber, so daß sie nicht empfindlich für Photonen mit Energie von weniger als etwa 7 eV ist. Die MCP erhöht aufgrund ihrer hohen Sekundärelektronenvervielfachung ($10^2 \sim 10^5$) die Nachweisempfindlichkeit drastisch, wodurch das thermische Rauschen des Vorverstärkers, das sogenannte *Johnson-Rauschen*, nicht mehr ins Gewicht fällt. Durch diese Kombination von Photon-Elektron-Konverter und MCP stellt die geringe Quanteneffizienz der MCP für Photonen keinen Nachteil mehr dar.

Weiterhin dient die Al-Folie (200 nm) als Filter für niederenergetische Photonen und erhöht zusätzlich das Signal-Untergrund-Verhältnis.

SUV ist direkt proportional zur Modulationsamplitude V_{pp} und zur Wurzel des Primärstroms (Lee, 1977). So muß V_{pp} möglichst groß gewählt werden, darf aber nicht zur Verbreiterung des APS-Spektrums führen. Eine *peak-to-peak*-Amplitude von 1.4 V und 2.0 V für Co- bzw. Fe-Filme wurde verwendet.

4.5 Präparation und Charakterisierung magnetischer Schichten

Die untersuchten Fe- und Co-Filme wurden durch Elektronenstoßheizung aus hochreinem stabförmigem Material (Fe:99.998%, Co:99.995%) auf die Substrate aufgebracht. Um die Desorption von Verunreinigungen durch Erwärmen zu verhindern, ist der Aufdampfofen wassergekühlt. Nach einem langen Ausgasen der Metallstäbe konnte der Druck während des Aufdampfens kleiner als $3 \cdot 10^{-10} \text{ mbar}$ für Co- und $5 \cdot 10^{-10} \text{ mbar}$ für Fe-Filme gehalten werden. Die Aufdampfrate betrug 0.3 bis 0.5 Monolagen pro Minute. Zur Bestimmung der Aufdampfrate diente der im Verdampfer integrierte Flux-Monitor, der die ionisierten Atome registriert. Er wurde absolut mit bekannten AES-Knicken und dickencharakteristischen LEED-Reflexen der ersten Atomlagen geeicht (Gradmann und Waller, 1982; Ociepa et al., 1990): Bei einem Lagenwachstum ändern sich die Zahl der zum *Auger*-Signal beitragenden Atome und damit auch das *Auger*-Signal während des Auffüllens einer Lage linear. Nach einer Vollendung einer Lage steigt die *Auger*-Intensität mit einer anderen Steigung, da vergrabene Atome weniger *Auger*-Elektronen emittieren. So treten Knicke auf immer dann, wenn eine Lage gerade gefüllt ist. Der Fehler dieser Dickenbestimmung wurde zu ca. 10 % abgeschätzt.

Die verwendeten Substrate W(110) und Cu(001) wurden vor Beginn des Aufdampfens gereinigt, um mögliche Einflüsse der Kontamination auf die Filmqualität zu minimieren. Für W(110) erwies sich der Kohlenstoff als Hauptverunreinigung. Dieser wird zuerst durch Glühen unter Sauerstoffatmosphäre ($\sim 1 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$) zu CO assoziiert, das durch Heizen des Kristalls auf 2500 K mit sämtlichen anderen Verunreinigungen entfernt wird. Dieser Prozeß wurde so lange wiederholt, bis mit AES keine Fremdatome mehr auf der Oberfläche detektiert wurden und keine Überstruktur in LEED-Aufnahmen zu sehen war. Die Reinigung von Cu(001) erfolgt durch Zerstäuben mit Ne^+ -Ionen (600 eV) und durch anschließendes Tempern bei 700 K, um die dabei entstandenen Defekte zu heilen. Die chemische Reinheit und die Struktur des Kristalls wurden wieder mit AES und LEED geprüft. Die magnetische Qualität der untersuchten Filme wurde mit magneto-optischem Kerr-Effekt überprüft.

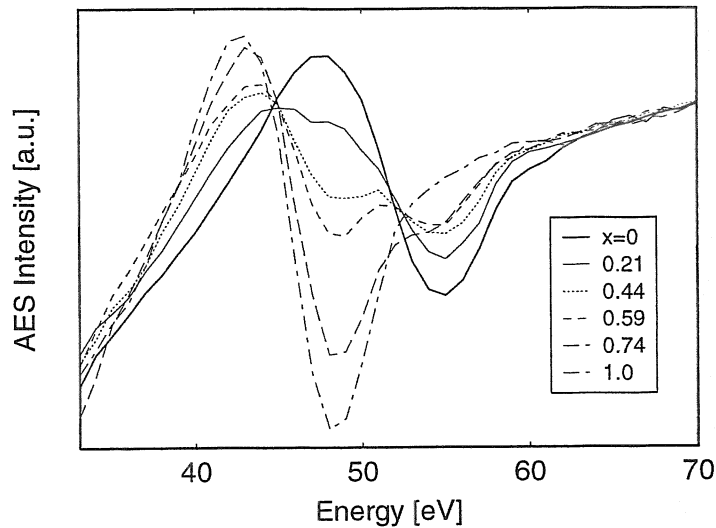


Abbildung 4.8: AES-Spektren ausgewählter Legierungsfilme Fe_xCo_{1-x} . Die Zusammensetzung wurde aus einem linearen Fit aus Spektren der reinen Elemente ermittelt. ($E_{kin} = 1.5kV, 3V_{pp}$)

Die Legierungsfilme Fe_xCo_{1-x} wurden aus zwei Verdampfern gleichzeitig auf Cu(001) bei Raumtemperatur aufgedampft. Eine Aufdampfrate von 1 bis 2 Monolagen pro Minute wurde gewählt. Die Zusammensetzung der Filme wurde durch einen geeichten Fluxmeter am Verdampfer kontrolliert und nach dem Aufdampfen mit AES an der MNN -Linie für beide Elemente (Fe: 47 eV, Co: 56 eV) bestimmt. Da die beiden AES-Linien ziemlich nahe beieinander liegen, erwies sich ein direkter Vergleich der Peakintensität ungünstig. So werden die AES-Spektren I_{ges} von Legierungsfilmen mit denen der reinen Filme linear mit

$$I_{ges} = x \cdot I_{Fe} + (1 - x) \cdot I_{Co} \quad (4.7)$$

gefittet, wobei bei der Aufnahme der Spektren auf die konstanten Meßparameter geachtet wurde. In Abb. 4.8 sind einige Spektren und die aus dem Fit ermittelten Zusammensetzungen für die reinen und einige Legierungsfilme aufgetragen. Die gewonnenen Zusammensetzungen stimmen mit den durch die Aufdampfrate gegebenen Angaben innerhalb 5 % überein.

Die Struktur der Filme wurde mit LEED und spinintegrierter APS charakterisiert. Sie wird in Abschnitt 7.1 diskutiert.

Kapitel 5

Oberflächenmagnetismus von Fe/W(110)

Das homosymmetrische bcc-System Fe/W(110) ist aufgrund seiner interessanten strukturellen und magnetischen Eigenschaften eines der meist untersuchten 2-dimensionalen magnetischen Systeme. Das Wachstum der Fe-Filme auf W(110) ist zunächst pseudomorph (Przybylski et al., 1989), und die gleiche kristalline Symmetrie von Substrat und Film führt zu einem parallelen epitaktischen Wachstum (Gradmann und Waller, 1982). Magnetisch durchläuft der Fe-Film mehrere Phasenübergänge zwischen para-, ferro- und antiferromagnetischen Zuständen innerhalb der ersten 2 ML und wurde Objekt für den sogenannten 'Monolagenmagnetismus' (Elmers et al., 1995). Außerdem findet an diesem System ein Spin-Reorientierungsübergang statt (Gradmann et al., 1986).

Der W-Kristall hat eine im Vergleich zu Fe hohe Oberflächenenergie, die die aufgebrachten Atome benetzend zu wachsen zwingt, und läßt wegen der hohen Schmelztemperatur bzw. kinetischen Barriere für Interdiffusion eine scharfe Grenzfläche zu (Gradmann und Waller, 1982), die für die Realisierung von idealen 2-dimensionalen Systemen notwendig ist. Die große Gitterkonstante von W ($a_W=3.165\text{\AA}$) (Donnay und Ondik, 1973) führt dagegen zu lateralen Unregelmäßigkeiten der aufgebrachten Fe-Filme ($a_{Fe}=2.866\text{\AA}$). Die hohe Gitterfehlpassung dieses Systems ($\approx 9.4\%$) verursacht mechanische Spannungen in pseudomorphen Filmen ($d < 1.8$ ML), die mit zunehmender Filmdicke durch Bildung eines periodischen Netzes von Versetzungen relaxiert werden (van der Merwe, 1991; Jensen et al., 1996). Die restliche mechanische Spannung in dickeren Filmen ist die Quelle für die magnetoelastische Anisotropie (Elmers und Gradmann, 1990). Diese zusammen mit der Oberflächen- und der Grenzflächenanisotropie führt zu den vielfältigen magnetischen Erscheinungen in Fe-Filmen auf W(110).

Eine experimentelle Bestimmung solcher Änderungen ist nicht trivial. Ein Magneto-

meter mit Monolagen-Sensitivität wird benötigt, da die magnetischen Modifikationen meistens sehr nah an der Oberfläche stattfinden (Freeman und Wu, 1991; Li et al., 1991). Die UHV-Kompatibilität ist auch wichtig, da Kontaminationen die magnetischen Eigenschaften der Grenzflächenatome kritisch beeinflussen. In Frage kommen zunächst die Elektronenspektroskopien mit Spinauflösung, wie SPAPS, SPIPE (Donath, 1999), SPLEED (Feder, 1985), wobei jede Technik bezüglich der Sensitivität und Meßstatistik auf spezielle Probleme eingeschränkt ist. CEMS (*conversion electron Mößbauer spectroscopy*) (Korecki und Gradmann, 1985) hat eine reelle Monolagen-Sensitivität, ist aber sehr langsam, so daß die notwendige tagelange Meßzeit ohne Deckschichten nicht verträglich ist (Korecki und Gradmann, 1985). Eine indirekte Methode, bei der magnetische Eigenschaften verschieden präparierter Proben relativ bestimmt und verglichen werden, sind UHV-kompatible Magnetometer wie TOM (*torsion oscillation magnetometer*) (Gradmann und Bergholz, 1984). Weitere konventionelle Techniken wie VSM (*vibrating sample magnetometer*) sind wegen der unzureichenden UHV-Kompatibilität bis jetzt nicht einsetzbar.

In diesem Kapitel werden magnetische Modifikationen des Fe/W(110)-Systems in oberflächennahen Bereichen mit SPAPS untersucht. In Abschnitt 5.1 wird der Spin-Reorientierungsübergang des Fe-Films mit der in der transversalen Ebene drehbaren Spinpolarisation eindeutig bestimmt. In 5.2 wird die Oberflächensensitivität von SPAPS benutzt, die von der Filmmorphologie abhängige magnetische Änderung der obersten Lagen zu detektieren. In 5.3 wird die Oberflächensensitivität variiert, um die Erhöhung und die Reduktion der magnetischen Momente an Oberflächen von freien bzw. mit Cr bedeckten Fe-Schichten zu bestimmen.

5.1 Spin-Reorientierungsübergang

Aufgrund der starken magnetischen Oberflächenanisotropie ist die leichte Magnetisierungsachse für dünne Fe-Filme auf W(110) die $[1\bar{1}0]$ -Richtung (Waller und Gradmann, 1982). Im Volumen von bcc-Fe liegt die leichte Magnetisierungsachse entlang der $\langle 001 \rangle$ -Richtungen. Da die Volumenanisotropie monoton mit der Filmdicke wächst, übertrifft sie die Oberflächenanisotropie bei einer Filmdicke d_c , ein Spin-Reorientierungsübergang von $[1\bar{1}0]$ zu

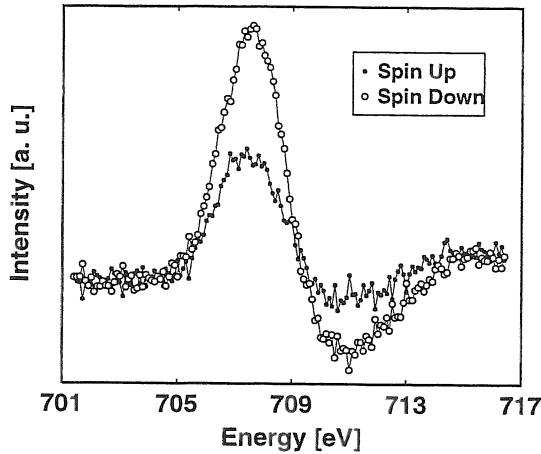


Abbildung 5.1: Spinpolarisiertes APS-Spektrum von Fe- $2p_{3/2}$ für 10 ML Fe auf W(110). Das Spektrum ist auf 100 % Spinpolarisation hochgerechnet (siehe Text).

[001] muß stattfinden. Die kritische Dicke d_c hängt stark von Präparationsbedingungen wie Substrattemperatur und Restgasdruck ab. In der Literatur ist ein Dickenbereich von $65\text{Å} < d_c < 105\text{Å}$ angegeben (Kurzawa et al., 1986; Gradmann et al., 1986).

Der Spin-Reorientierungsübergang von Fe/W(110) wurde mit spinpolarisierter APS verfolgt. Abbildung 5.1 zeigt ein typisches APS-Spektrum von einem 10 ML Fe-Film an der $2p_{3/2}$ -Schwelle, wobei die Spinpolarisation in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung lag. Die spinpolarisierten Rohdaten i_{\uparrow} und i_{\downarrow} sind mit

$$I_{\uparrow,\downarrow} = \frac{1}{2}(i_{\uparrow} + i_{\downarrow}) \pm \frac{1}{2}(i_{\uparrow} - i_{\downarrow})/P \quad (5.1)$$

auf eine 100 %-ige Spinpolarisation hochgerechnet, wobei $P = 0.3$ ist. Es wurde eine starke Intensitätsasymmetrie zwischen dem Minoritäts- und dem Majoritätsteilspektrum beobachtet. Mit einer Spinpolarisation parallel zu [001] zeigte das APS-Spektrum keinen Unterschied zwischen den beiden Spinkanälen (nicht dargestellt). Dies weist darauf hin, daß der Film eindeutig in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung magnetisiert ist.

Für eine quantitative Analyse wurde die Spinasymmetrie A , definiert durch die normierte Intensitätsdifferenz (siehe Gl.(3.5)), betrachtet. A kann durch das Skalarprodukt der Spinpolarisation \mathbf{P} und der Probenmagnetisierung \mathbf{M} beschrieben werden (Rangelov et al., 2000):

$$A = \kappa (\mathbf{P} \cdot \mathbf{M}), \quad (5.2)$$

wobei κ der effektiven Änderung der bedeckungsabhängigen spinaufgelösten Zustandsdichte Rechnung trägt. Da die Spinpolarisation \mathbf{P} durch einen eingebauten Spinrotator in der transversalen Ebene gedreht werden kann, können mit der gemessenen Spinasymmetrie nicht nur die Änderung des Betrags sondern auch der Richtungswechsel von \mathbf{M} eindeutig bestimmt werden.

Da die Spinasymmetrie $A(E_p)$ stark von der Primärenergie E_p abhängt (Reinmuth, 1997), muß A in definierter Weise ermittelt werden. Zwei Methoden wurden verwendet: i) APS-Spektren wurden in einem breiten Energiebereich aufgenommen und A wurde aus den über ein bestimmtes Energieintervall um das Peakmaximum integrierten Intensitäten ermittelt. ii) Um die Meßzeit zu reduzieren und somit den möglichen Einfluß der Kontamination auf magnetische Momente gering zu halten, wurde die APS-Intensität bei zwei E_p , im Untergrund (703.4 eV) und im Peakmaximum (707.6 eV), aufgenommen, und A wurde aus den zwei Punkten ermittelt. Dabei wurde die Potentialmodulation auf 4 V erhöht, um über einen breiten Energiebereich zu integrieren. Eine vom Integrationsintervall abhängige Skalierung wurde vorgenommen, um einen Vergleich der aus den beiden Methoden ermittelten Asymmetriewerte zu ermöglichen.

In Abb. 5.2 ist die Spinasymmetrie A als Funktion der Bedeckung d aufgetragen. Die geschlossenen und offenen Symbole sind jeweils für die Spinpolarisation \mathbf{P} parallel $[1\bar{1}0]$ bzw. $[001]$. Die Ergebnisse zeigen deutlich, daß die Magnetisierung mit zunehmender Schichtdicke von $[1\bar{1}0]$ zu $[001]$ übergeht. Für die kritische Schichtdicke wurde eine Dicke von $d_c = 33 \pm 5$ ML abgeschätzt. Die unterschiedlichen Sättigungswerte für beide Spinpolarisationen beruhen auf dem reduzierten Polarisationsgrad der Primärelektronen durch das räumlich inhomogene Magnetfeld (siehe Abs. 4.1.3).

Die *in plane* Anisotropie und der Spin-Reorientierungsübergang von bcc-Fe(110) Schichten wurden erstmals im Fe/GaAs(110)-System gefunden (Prinz et al., 1982). Rado (1982) konnte zeigen, daß die magnetische Oberflächenanisotropie der Fe(110)-Oberfläche für das magnetische Verhalten dieses Systems verantwortlich ist. Da das Fe/GaAs-System eine sehr kleine Gitterfehlpassung besitzt und trotzdem eine ähnliche magnetische Anisotropie wie die von Fe/W(110) zeigt, wurde die aus der Gitterspannung folgende magnetoela-

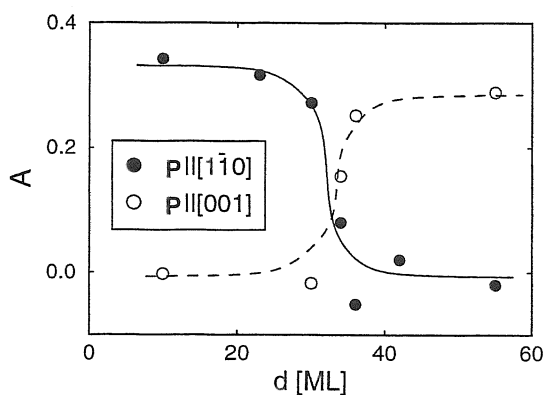


Abbildung 5.2: APS-Spinasymmetrie A von Fe-Filmen auf W(110) als Funktion der Schichtdicke d für zwei Spinpolarisationsrichtungen.

stische Anisotropie von Fe/W(110) zunächst als unrelevant betrachtet. Später wurde aber mit TOM- (Elmers und Gradmann, 1990) und BLS (*Brillouin light scattering*)-Messungen (Baumgart et al., 1991) gezeigt, daß die restliche mechanische Spannung ($\sim 0.39\%$) einen erheblichen Beitrag zur gesamten Volumenanisotropie leistet und bei der Interpretation des Spin-Reorientierungsübergangs nicht vernachlässigt werden darf.

Bei dünnen Filmen ($d < 10$ ML), bei denen die Gitterverzerrung noch sichtbar ist, ist die magnetoelastische Anisotropie in Fe/W(110) umso wichtiger. Der nächste Abschnitt diskutiert das magnetische Verhalten von Fe-Schichten in diesem Dickenbereich.

5.2 Strukturabhängigkeit der Magnetisierung

Die hohe Gitterfehlpassung von 9.4 % und die daraus resultierenden Spannungen im Fe/W(110)-System sind die Quelle der strukturellen Instabilität. Die damit verbundene Änderung der magnetischen Momente von Fe-Atomen wurde mit der APS-Spinasymmetrie analysiert.

Abb. 5.3 zeigt die Spinasymmetrie A von Fe-APS an der $2p_{3/2}$ -Schwelle in Abhängigkeit von der Filmdicke d . Für den 1 ML Film wurde eine verschwindende Spinasymmetrie detektiert. Ab 2 ML steigt A steil an, bildet bei etwa 6 ML ein Maximum, bevor sich ein leichter Abfall anschließt. Ab etwa 10 ML geht A in Sättigung und bleibt auch nach dem Spin-Reorientierungsübergang bis 55 ML unverändert.

Die verschwindende Spinasymmetrie im 1 ML Film weist entweder auf eine fehlende ferromagnetische Ordnung der Fe-Atome oder auf einen nicht magnetisierten Film hin. TOM-Messungen zeigen, daß Fe-Atome auf W(110) schon ab $d \approx 0.6$ ML ferromagne-

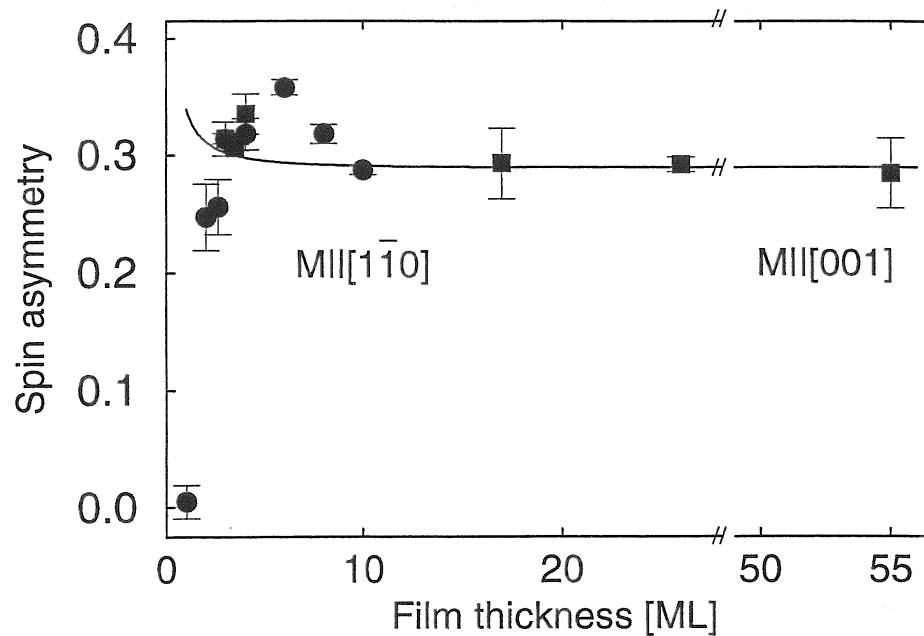


Abbildung 5.3: Spinasymmetrie als Funktion der Filmdicke. Die zwei Symbole bedeuten verschiedene Meßserien. Der Punkt bei 55 ML wurde mit einer Spinpolarisation parallel zu [001] gemessen, wobei die Reduktion der Spinpolarisation durch Drehung um 90° in einem Magnetfeld berücksichtigt wurde. Alle Messungen wurden bei Raumtemperatur durchgeführt.

tisch geordnet sind (Elmers et al., 1995) und daß die Curie-Temperatur T_c der 1 ML Films 210 K beträgt und mit zunehmender Filmdicke auf den Volumenwert 1043 K steigt. Die verschwindende Spinasymmetrie des 1 ML Films kann daher auf das niedrige, unterhalb der Meßtemperatur (RT) liegende T_c zurückgeführt werden. Beim 2 ML Film beträgt $A = 25\%$ und liegt etwas unter dem Sättigungswert ($= 29\%$). Die Ursache für den kleineren Wert ist nicht nur das relativ niedrige T_c ($\approx 450\text{ K}$), sondern auch die Filmmorphologie in diesem Dickenbereich. Sander et al. (1996) berichten, daß das zum Abbau der Gitterspannung ausgebildete Versetzungsnetz als *Pinning* der Domänenwände wirkt und dadurch die Koerzitivfeldstärke H_c erhöht, die zum Teil 1 kG übersteigt. Das zur Magnetisierung der Probe verwendete magnetische Feld ($< 100\text{ G}$) ist also nicht stark genug, um die Filme zur Sättigung zu magnetisieren. Die resultierende reduzierte Remanenz kann die kleinere

Spinasymmetrie für $d \leq 2.5$ ML erklären.

Wie kann aber das Maximum der Spinasymmetrie um $d \approx 6$ ML verstanden werden, welches nach Gl. (5.2) auf eine Erhöhung der magnetischen Momente hinweist? Alle Oberflächenatome, auch wenn eine ideale glatte Oberfläche angenommen wird, sind im Vergleich zu Volumenatomen schwach gebunden. Dies führt zu einer Bandverschmälerung bzw. einer stärkeren Besetzung des Majoritätsbandes und schließlich zur Erhöhung magnetischer Momente (Freeman und Wu, 1991). Kann diese Erhöhung das Maximum der Spinasymmetrie erklären? Eine einfache Überlegung mit einem erhöhten magnetischen Moment an der obersten Lage würde etwa die durchgezogene Linie in der Abb. 5.3 vorhersagen (die zugrunde liegenden Gleichungen sind im nächsten Abschnitt angegeben). Auch wenn man die starke Hybridisierung zwischen Fe 3d- und W 5d-Bändern und damit die Reduktion der magnetischen Momente an der Fe/W-Grenzfläche berücksichtigt, würde man ein Maximum höchstens bei $d = 4$ ML erwarten, da Filme ab 4 ML einen Volumencharakter zeigen (Passek, 1994; Getzlaff et al., 1997) und der Einfluß der W/Fe Grenzfläche nicht mehr bestimmend ist. Der rein aus der Dimensionalität resultierende Effekt kann also das Asymmetriemaximum im Fe/W(110)-System nicht erklären.

Eine Antwort zum Verhalten der Spinasymmetrie findet man bei der Filmmorphologie. STM-Untersuchungen an Fe-Filmen auf W(110) zeigen (Jensen et al., 1996), daß sich an den Versetzungslinien viele kleine Inseln ausbilden, wodurch die Gitterspannungen effizient abgebaut werden können. Dies führt zum sogenannten *statistischen* Lage-für-Lage-Wachstum mit 3 bis 4 Atomlagen an der Wachstumsfront. Folglich erhöht sich die Stufendichte auf der Filmoberfläche. Bei dickeren Filmen ($d \geq 9$ ML) verschwindet die von Gitterspannungen und Versetzungsnetz induzierte Überstruktur in LEED, Fe-Filme wachsen atomar glatt in der bcc-Struktur des Volumen-Fe (Gradmann und Waller, 1982; Gradmann et al., 1989). Die Stufendichte nimmt also ab etwa 6~8 ML ab. D.h. die Stufendichte bzw. die Zahl der Stufenatome verhalten sich qualitativ wie die beobachtete dickenabhängige Spinasymmetrie in Abb. 5.3. Sowohl theoretische als auch experimentelle Untersuchungen zeigen (Freeman und Fu, 1986; Albrecht et al., 1992), daß Atome an Stufen und Kinken aufgrund der fehlenden Bindung ein höheres magnetisches Moment aufweisen. So können der Verlauf der Spinasymmetrie durch Änderung der Stufendichte bzw. der magnetischen Momente von Stufenatomen an der Oberfläche verstanden werden.

Wie die Spinasymmetrie-Messungen zeigen, beeinflusst die Morphologie der Filmoberfläche kritisch die magnetischen Eigenschaften, was mit Änderungen der Elektronenverteilung und der elektronischen Struktur der Oberfläche zusammenhängt.

5.3 Oberflächen- und Grenzflächenmagnetismus

Der Magnetismus von Oberflächen wurde zunächst theoretisch untersucht (Ohnishi et al., 1983; Freeman und Fu, 1986). Eine Erhöhung von magnetischen Momenten von Fe-Atomen um 19-20 % auf einer Fe(110)-Oberfläche wurde mit der FLAPW- (*full potential linearized augmented plan wave*) (Freeman und Fu, 1986) und mit der *tight-binding*-Methode (Victoria und Falicov, 1984) errechnet. Experimentell nachgewiesen wurde sie mit SPLEED (*spin polarized LEED*), was eine Erhöhung des magnetischen Moments von Fe-Oberflächenatomen um 38 % ergab (Tamura et al., 1990). Der höhere experimentelle Wert beruht vermutlich darauf, daß bei der Rechnung eine glatte Oberfläche angenommen wurde. Die Stufen- oder Kinkatome, die in reellen Systemen existieren, treiben das mittlere magnetische Moment höher (Albrecht et al., 1992).

Eine Hybridisierung an Grenzflächen zwischen zwei Metallschichten verursacht auch elektronische und magnetische Änderungen. Zum Beispiel wurde theoretisch von einer Reduktion von Fe-Momenten an der von 1 ML Cr bedeckten Oberfläche berichtet (Dorantes-Dávila et al., 1991; Victoria und Falicov, 1985). Eine experimentelle Bestätigung für die reduzierten Momente an Grenzflächen gibt es bisher nicht. SPLEED mit seiner Sensitivität auf die oberste Lage ist nicht in der Lage, bedeckte Filme zu detektieren.

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, daß SPAPS sowohl die Erhöhung als auch die Reduktion von magnetischen Momenten an Grenzflächen detektieren kann. Dies geschieht dadurch, daß die Oberflächensensitivität der Methode durch Änderung des Einfallswinkels der Primärelektronen variiert werden kann. In Abb. 5.4 sind die schematische Anordnung und der erwartete Verlauf der Spinasymmetrie A dargestellt. Für einen Einfallswinkel θ beträgt die effektive Eindringtiefe λ_{eff} des Elektronenstrahls $\lambda_{eff} = \lambda \cdot \cos\theta$ (Abb. 5.4 (a)), wobei λ für eine Energie von 700 eV etwa 12 Å beträgt (Seah und Dench, 1979).

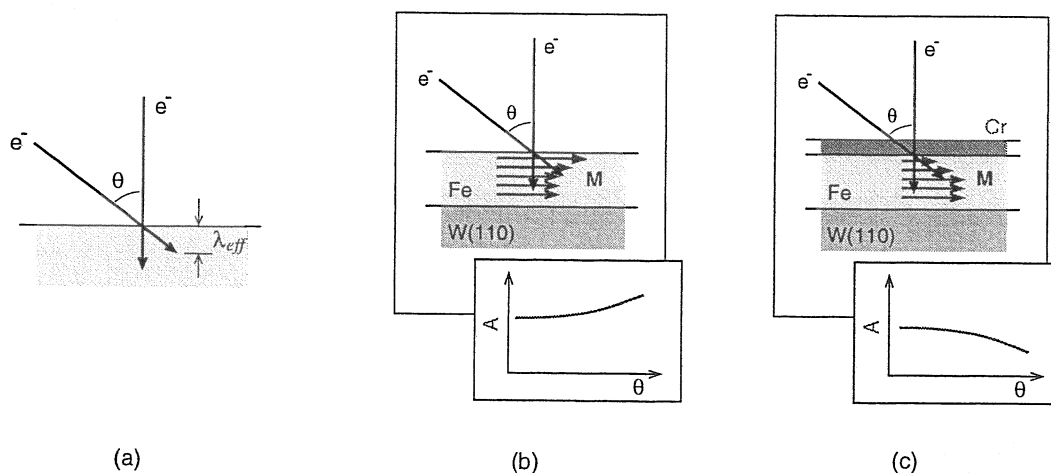


Abbildung 5.4: (a) Schematische Anordnung für die Detektion von modifizierten magnetischen Momenten an Oberflächen. Die erwartete Abhängigkeit der Spinasymmetrie A vom Einfallswinkel θ für (b) erhöhte magnetische Momente an einer freien Oberfläche und (c) reduzierte magnetische Momente an einer mit Cr bedeckten Oberfläche ist dargestellt.

Mit zunehmendem Einfallswinkel werden mehr oberflächennahe Lagen abgetastet, d.h. die Atome nahe der Oberfläche tragen stärker zum gesamten APS-Signal bei. Erhöht sich das magnetische Moment an der obersten Lage, so wird eine Zunahme der Spinasymmetrie als Funktion des Einfallswinkels erwartet (Abb. 5.4(b)). Bei einer Reduktion der magnetischen Momente wird dagegen eine abfallende Tendenz erwartet (Abb. 5.4(c)).

In Abb. 5.5 sind die experimentellen Ergebnisse für eine freie und eine mit 2 ML Cr bedeckte Fe-Oberfläche aufgetragen. Offene und geschlossene Symbole sind für den 10 ML bzw. 55 ML Fe-Film, wobei für den letzteren die Spinpolarisation P in der [001]-Richtung steht. Für die freie Fe-Oberfläche steigt A mit dem Einfallswinkel, wie erwartet. Bei $\theta = 60^\circ$ ist eine Erhöhung der Spinasymmetrie von etwa 15 % gegenüber dem senkrechten Einfall zu beobachten, und zwischen den 10 ML und 55 ML Filmen ist kein Unterschied zu erkennen. Für den mit Cr bedeckten Fe-Film zeigt die Spinasymmetrie einen starken Abfall mit zunehmendem θ , welche auf die Reduktion der magnetischen Momente der Fe-Grenzflächenatome hinweist. Der etwas niedrigere Wert von A ($< 30\%$) bei $\theta = 0$ gegenüber der freien Oberfläche ist auch ein Hinweis für die Reduktion des Fe-Moments. Für die

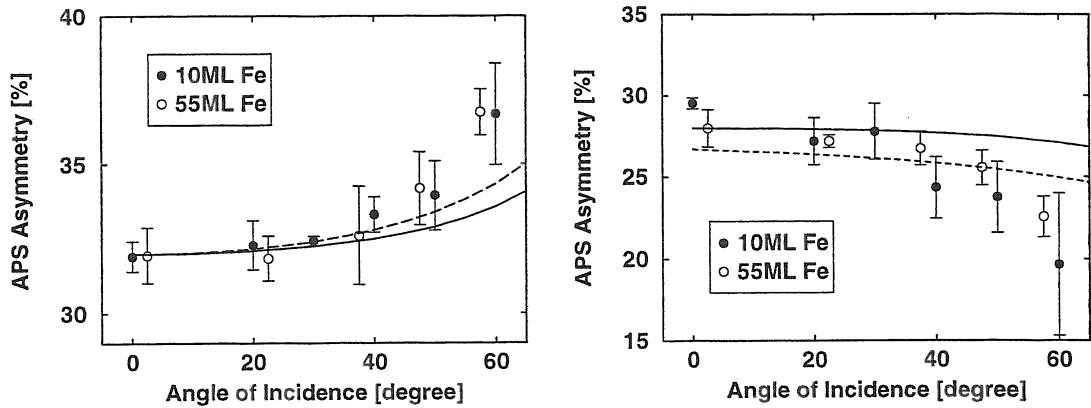


Abbildung 5.5: APS-Spinasymmetrie der freien (links) und der mit Cr bedeckten (rechts) Fe-Oberfläche. Offene Symbole für den 10 ML Fe-Film sind mit \mathbf{M} und \mathbf{P} in der $[1\bar{1}0]$ -Richtung und geschlossene Symbole für den 55 ML Fe-Film sind mit \mathbf{M} und \mathbf{P} in der $[001]$ -Richtung gemessen. Die Reduktion der Spinasymmetrie aufgrund der reduzierten Spinpolarisation bei der Spindrehung wurde berücksichtigt.

bedeckten Filme sind die Fehlerbalken viel größer als für die freien Oberflächen. Dies wird dadurch erklärt, daß die Fe-Schichten unter der 2 ML Cr-Schicht begraben sind und damit ein fast um 50 % reduziertes APS-Signal liefern.

Um die Steigung bzw. die Abnahme der Spinasymmetrie quantitativ zu verstehen, wurde eine einfache Modellrechnung durchgeführt. Das APS-Signal $I_{\uparrow,\downarrow}^n$ von n Fe-Lagen wurde simuliert, welches als Summe von einem Beitrag der obersten Lage $I_{\uparrow,\downarrow}^s$ und einem Beitrag von tieferen Lagen $I_{\uparrow,\downarrow}^{n-1}$ betrachtet werden kann:

$$I_{\uparrow,\downarrow}^n = I_{\uparrow,\downarrow}^s + I_{\uparrow,\downarrow}^{n-1}. \quad (5.3)$$

Diese Annahme ist nicht unrealistisch, da die von Volumen verschiedenen Änderungen fast ausschließlich auf die oberste Atomlage beschränkt sind (Freeman und Wu, 1991; Li et al., 1991). Mit der Informationstiefe $\lambda \cos \theta$ kann $I_{\uparrow,\downarrow}^{n-1}$ beschrieben werden durch:

$$I_{\uparrow,\downarrow}^{n-1} = \sum_{k=1}^{n-1} I_{\uparrow,\downarrow}^k \exp[-k/(\lambda \cos \theta)], \quad (5.4)$$

wobei $I_{\uparrow,\downarrow}^k$ das APS-Signal einer Volumenlage ist. Mit der Gleichung (5.3) und unter Annahme der erhöhten Spinasymmetrie der obersten Lage um α , $I_{\downarrow}^s - I_{\uparrow}^s = \alpha(I_{\downarrow}^b - I_{\uparrow}^b)$, und

des identischen spinintegrierten APS-Signals, $I_{\downarrow}^s + I_{\uparrow}^s = I_{\downarrow}^b + I_{\uparrow}^b$, ergibt sich für die Spinasymmetrie der n Fe-Lagen A_n

$$A_n = \frac{\alpha - 1}{1 + \sum_{k=1}^{n-1} \exp(-k/\lambda \cos\theta)} A_b + A_b, \quad (5.5)$$

wobei

$$A_b = \frac{I_{\downarrow}^b - I_{\uparrow}^b}{I_{\downarrow}^b + I_{\uparrow}^b} \quad (5.6)$$

die Asymmetrie einer Volumenlage ist.

Die daraus resultierenden Spinasymmetrien wurden auf den Wert für $\theta = 0$ normiert. Mit $\alpha = 1.2$ (20 % Erhöhung) und $\alpha = 0.94$ (6 % Reduktion) erhält man die durchgezogenen Linien in Abb. 5.5.

Das Modell zeigt qualitativ eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Allerdings weicht die Modellrechnung für höhere θ von den experimentellen Werten ab. Mit einer Erhöhung der magnetischen Momente um 40 %, wie mit SPLEED beobachtet (Tamura et al., 1990), wurde eine bessere Übereinstimmung zwischen dem Experiment und der Modellrechnung gefunden (gestrichelte Linie). Angesichts einer Erhöhung der magnetischen Momente um 60 % für die Stufenatome (Albrecht et al., 1992), ist die etwas stärkere Steigung der beobachteten Spinasymmetrie nicht unrealistisch.

Für die bedeckten Filme ist die Abweichung der Modellrechnung mit dem Experiment stärker. Auch mit einer Reduktion von 20 % (gestrichelte Linie) kann die starke Winkelabhängigkeit nicht reproduziert werden. Möglicherweise ist die komplizierte Filmmorphologie an der Grenzfläche Fe/Cr die Ursache für den Mißerfolg des einfachen Modells. Fuchs et al. (1996) und Pierce et al. (1994) berichten von einem vom Lage-für-Lage-Modus verschiedenen Wachstum für Cr auf Fe(110), und Schwabenhausen et al. (1997) beobachten ein Stufenwachstum von Cr. Aufdampfen von Cr-Atomen auf einer nicht-idealen Fe-Oberfläche könnte zu weiteren Defekten an der Cr/Fe-Grenzfläche führen. Vega et al. (1995) konnte zeigen, daß die magnetischen Eigenschaften an der Grenzfläche Fe/Cr stark von der Umgebung abhängen und daß die Defekte an der Grenzfläche das magnetische Moment von Fe-Atomen stark reduzieren können. Dieser Effekt kann die starke Winkelabhängigkeit der beobachteten Spinasymmetrie der bedeckten Filme erklären.

Die Änderung der magnetischen Momente an der Oberfläche von magnetischen Filmen konnte mit SPAPS beobachtet werden. Obwohl die Ergebnisse für die mit Cr bedeckten Fe-Filme nicht quantitativ verstanden werden konnten, zeigen sie deutlich eine Abnahme der Fe-Momente an der Fe/Cr-Grenzfläche. Dies ist die erste experimentelle Bestätigung der theoretischen Vorhersage (Victoria und Falicov, 1985; Vega et al., 1995).

Kapitel 6

Struktur und Magnetismus von hcp- und fcc-Co Filmen

Strukturelle Phasenübergänge eines Kristalls werden zur Analyse der gitterstrukturabhängigen Materialeigenschaften häufig untersucht. Die mit den Phasenübergängen verbundenen Modifikationen magnetischer Eigenschaften können insbesondere benutzt werden, die Korrelation zwischen Struktur und Magnetismus zu untersuchen, was ein grundlegendes Thema im Magnetismus ist.

Leider kommt ein solches Ereignis selten in der Natur vor und ist meistens mit mindestens einem Parameter wie etwa der Temperatur verbunden, der den strukturellen Phasenübergang treibt und auch andere Materialeigenschaften beeinflussen kann. So ist eine direkte Folgerung der Strukturabhängigkeit von Materialeigenschaften durch diesen Parameter erschwert. Vor allem ist der häufig auftretende thermische Phasenübergang in vielen Systemen unbrauchbar für eine magnetische Untersuchung, da das Temperaturverhalten selber entscheidend für den Magnetismus ist.

Moderne Filmtechniken ermöglichen, die in Volumenkristallen instabilen oder gar unmöglichen Kristallstrukturen bei bestimmten Bedingungen, zum Beispiel eine fcc-Fe auf Cu(001) (Detzel et al., 1995) und eine bcc-Co auf GaAs(001) (Prinz, 1985) bei Raumtemperatur, zu synthetisieren. Dies erfüllt die Hoffnung, mehrere kristallographische Strukturen eines Elements oder dieselbe Struktur von mehreren Elementen herzustellen, wodurch eine umfangreiche strukturabhängige Untersuchung ermöglicht wird. Obwohl die meisten Filmstrukturen durch die Existenz von Grenzflächen beeinflusst werden, so daß sie nicht einfach mit dem Volumen zu vergleichen sind, zeigen viele Schichtsysteme schon bei einer Filmdicke von 2 nm Volumeneigenschaften und können ungestört untersucht werden (Passek, 1994;

6.1. Strukturelle und magnetische Eigenschaften von Co-Filmen auf W(110) und Cu(001)49

Fritzsche et al., 1995; Getzlaff et al., 1996).

In diesem Kapitel werden Co-Filme in zwei verschiedenen Strukturen untersucht. Eine ähnliche Arbeit wurde von *Giber et al.* (1991) durchgeführt: der thermische strukturelle Phasenübergang von Kobalt wurde mit sp-abgeleiteten APS-Linien detektiert, und die Kristallstrukturen, hcp und fcc, wurden bei unterschiedlichen Temperaturen untersucht. Eine Wiederholung dieses Experiments mit spinpolarisierten Elektronen wäre im Prinzip möglich, da die Curie-Temperatur von Kobalt 1388 K ist (Kittel, 1986) und der strukturelle Phasenübergang bei etwa $T = 690\text{ K}$ stattfindet. Eine einkristalline Probe wird aber beim Phasenübergang in den Polykristall übergehen, so daß nach jedem Phasenübergang die Probe ausgewechselt werden muß. Außerdem ist es schwierig, die polykristalline fcc-Probe in Sättigung zu magnetisieren. Dies ist gerade beim SPAPS-Experiment kritisch, da hier nur Proben im remanenten Zustand untersucht werden können.

Die in dieser Arbeit untersuchten hcp- und fcc-Filme befinden sich dagegen bei Raumtemperatur und werden auf Cu(001)- und W(110)-Oberflächen stabilisiert. So können die magnetischen Eigenschaften der beiden Kristalle ohne thermische Einflüsse auf magnetische Zustände untersucht werden. In Abschnitt 6.1 werden die strukturellen und magnetischen Eigenschaften der beiden Systeme zusammengefaßt. In 6.2 werden die elektronischen Strukturen der hcp- und fcc-Filme mit spinintegrierter APS untersucht. Die Erscheinung des sp-Anteils in APS-Spektren wird auch dazu verwendet, das unterschiedliche Wachstum der Co-Schichten zu bestimmen. Die mit der Filmmorphologie korrelierende dickenabhängige Magnetisierung wird in 6.3 diskutiert.

6.1 Strukturelle und magnetische Eigenschaften von Co-Filmen auf W(110) und Cu(001)

Co/W(110)

Co-Filme auf W(110) wachsen im Lage-für-Lage-Modus. Strukturell verändern sich die Filme innerhalb weniger Atomlagen stark und lassen sich mit LEED gut charakterisieren. Bis zu einer Filmdicke $d = 0.7\text{ ML}$, die einer Substratlage entspricht, zeigen die LEED-Reflexe die des Substrats. Der Film wächst also zunächst pseudomorph. Bei weiterer Deposition bis

$d = 1$ ML bildet sich eine hexagonale kompakte Atomlage wie die hcp (0001)-Oberfläche aus, was zu Übergitterreflexen entlang des [001]-Azimuts führt. Mit zunehmender Filmdicke treten nacheinander (7×1) -, (8×1) - und (4×1) -Überstrukturen auf, die ab einer Bedeckung von 4 ML verschwinden, wobei scharfe hexagonale Reflexe zurückbleiben. ARXPS (*Angle-resolved x-ray photoemission scattering*)-Messungen wiesen für dickere Filme ($d \geq 6$ ML) eine hcp-Kristallstruktur mit der sogenannten *Nishijama-Wassermann-Orientierung* $[11\bar{2}0]\text{Co} \parallel [001]\text{W}$ nach (Knoppe und Bauer, 1993). Co-Filme auf W(110) sind nur bis etwa 500 K thermisch stabil und laufen bei höheren Temperaturen in 3-dimensionalen Inseln zusammen. *Fritzsche et al.* (1995) berichten, daß die verbleibende Gitterspannung der hcp-Filme ab 10 ML relaxiert. Entsprechend unterscheidet sich die elektronische Struktur der dickeren Filme $d \geq 10$ ML nicht von der des Volumens (Getzlaff et al., 1996). Eine starke *in plane* Anisotropie wurde in der $W[1\bar{1}0]$ -Richtung beobachtet (Fritzsche et al., 1995). Die Curie-Temperatur und ihre Dickenabhängigkeit wurde von *Garreau et al.* (1996) mit einem *ac-Susceptometer* genau untersucht. T_c beträgt etwa 400 K bei 2 ML.

Co/Cu(001)

Co/Cu(001) wird als ein Modellsystem für 2-dimensionale magnetische Systeme betrachtet, da Co auf Cu(001) als eine nahezu perfekte Fortsetzung der Cu-Oberfläche lagenweise wächst. Der Film hat also eine fcc(001)-Struktur. Die in Volumen-Co stabile hcp-Struktur ist auf Cu(001) nicht möglich, weil keine niedrigindizierte Orientierung der hcp-Struktur auf der Substratoberfläche existiert. *Huang et al.* (1994) zeigen mit ARXPS ein Lage-für-Lage-Wachstum zwischen 2 und 20 ML. Für die ersten zwei Atomlagen tritt eine Abweichung vom lagenweisen Wachstum auf, es bilden sich Doppellagen-Inseln aus. Glatte Filme werden bei höheren Substrattemperaturen beobachtet, aber auch die bei tieferen Temperaturen aufgedampften Filme bilden durch Heilung bei erhöhten Temperaturen eine glatte Oberfläche. Eine Interdiffusion an der Co/Cu-Grenzfläche, die schon bei 450 K stattfindet, beschränkt aber die Substrattemperatur (Mankey et al., 1993). Trotz des idealen Wachstums ist in Filmen eine geringe aber meßbare mechanische Spannung vorhanden. *Weber et al.* (1996) zeigen mit RHEED, daß die Gitterspannung mit zunehmender Filmdicke relaxiert. Die kritische Dicke für das Einsetzen der Relaxation ist stark von Aufdampfbedingungen abhängig und liegt zwischen 10 und 20 ML. Der Relaxationsprozeß ist auch mit einer Erhöhung der

Koerzitivfeldstärke und der magnetoelastischen Anisotropie verbunden. Filme unter 2 ML sind schon ferromagnetisch geordnet. Da die Oberflächenanisotropie in diesem System mit $\sim 0.049\mu\text{eV}$ sehr klein ist (Freeman und Wu, 1991), wird die ferromagnetische Ordnung möglicherweise durch die Formanisotropie stabilisiert. *Schneider et al.* (1990) beobachten eine starke Dickenabhängigkeit der Curie-Temperatur. T_c ändert sich innerhalb 1 ML ($1.5 < d < 2.5$ ML) um 500 K ($200 < T_c < 700\text{ K}$).

6.2 Spinintegrierte Messungen

Spinintegrierte APS-Spektren von 12 ML hcp- und fcc-Co-Filmen an der L_{III} -Schwelle von Co sind in Abb. 6.1 dargestellt.

Spektrale Unterschiede zwischen den beiden Strukturen werden bei höheren Energien beobachtet. Die Satellitenstruktur für hcp-Filme ist stärker ausgeprägt und das lokale Maximum liegt verglichen mit dem fcc-Spektrum bei einer um etwa 1 eV höheren Energie ($E_p = 785.5\text{ eV}$). Der Hauptpeak bei 778 eV zeigt dagegen fast keinen Unterschied zwi-

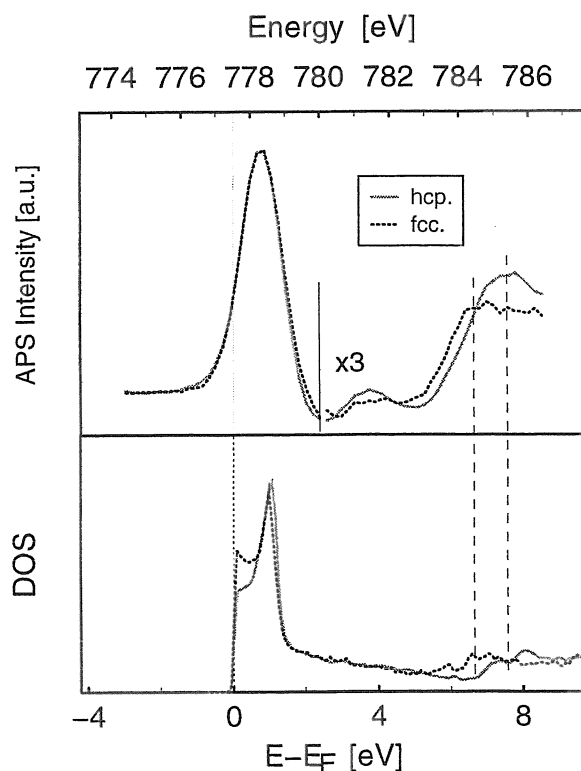


Abbildung 6.1: Experimentelle APS-Spektren von 12 ML hcp- und fcc-Co und spinintegrierte unbesetzte Zustandsdichte (DOS). Datenpunkte bei höheren Energien sind vergrößert dargestellt. Die Zustandsdichten wurden von Ebert und Popescu (LMU, München) mit der Korringa-Kohn-Rostoker-Methode berechnet.

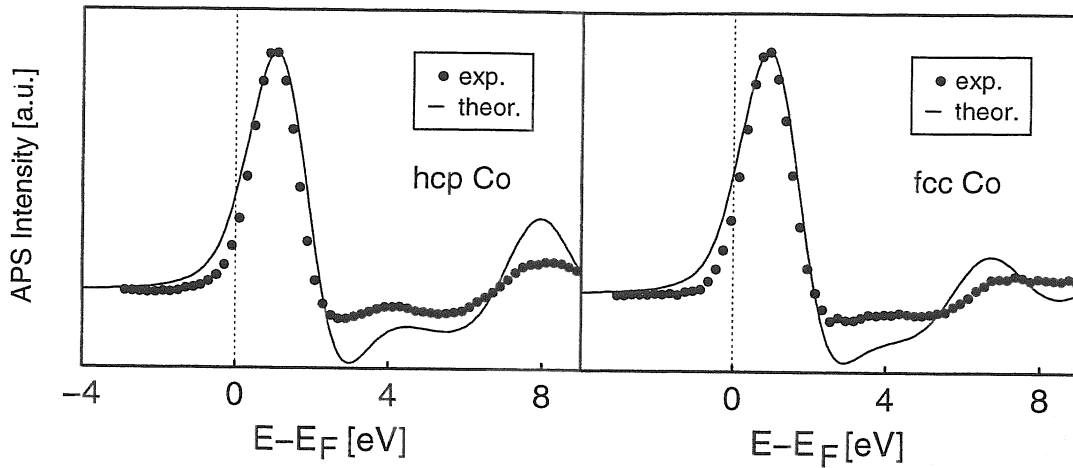


Abbildung 6.2: Theoretische und experimentelle APS Spektren von hcp- und fcc-Co. Bei den berechneten Spektren wurden Verbreiterungsmechanismen berücksichtigt (siehe Text).

schen den beiden Spektren.

Da APS ein 'Fingerabdruck' der zugrunde liegenden elektronischen Struktur ist, müssen die Unterschiede der beiden Spektren auch in den Zustandsdichten zu finden sein. Die berechneten spinintegrierten Zustandsdichten oberhalb des Fermi-niveaus für die beiden Strukturen sind im unteren Teil in Abb. 6.1 aufgetragen. Aus dem Vergleich wird deutlich, daß die Unterschiede in den APS-Spektren aus der kleinen Struktur der Zustandsdichte bei etwa 7 eV über dem Fermi-niveau stammt. Hier ist das im Vergleich zu fcc höher liegende, etwas stärker strukturierte Lokalmakimum für die hcp-Struktur erkennbar. Die lokalisierten d-Bänder an der Fermikante zeigen, wie erwartet, keinen wesentlichen Unterschied zwischen den zwei Kristallstrukturen.

Für eine quantitative Analyse wurde eine Modellrechnung auf Basis der Selbstfaltung von spinpolarisierten Zustandsdichten mit energie- und drehimpuls aufgelösten Übergangsmatrixelementen durchgeführt (Ebert und Popescu, LMU München). Die errechneten Übergangsmatrixelemente weisen abhängig von der Energie einen Unterschied bis zu einem Faktor 5 auf, was darauf hinweist, daß die Annahme der konstanten Gewichtung im vereinfachten Modell (Gl. 3.1) nicht gerechtfertigt ist. In der Modellrechnung wurden diverse Verbreiterungsmechanismen nach Giber *et al.* (1991) und Ertl *et al.* (1993) berücksichtigt: der Lebensdauereffekt der Leitungsbandelektronen wurde durch eine Faltung der Zustands-

dichten mit einer energieabhängigen Lorentzfunktion $\Gamma(E - E_F) = 0.1 \cdot (E - E_F)$ berücksichtigt (Giber et al., 1991). Für die Apparatefunktion, die der endlichen Energieunschärfe der Primärelektronen und der Potentialmodulation Rechnung trägt, und die Verbreiterung des Rumpfniveaus wurde die Selbstfaltung (Gl. 3.2) mit einer Gaußfunktion mit $\sigma = 0.9 \text{ eV}$ bzw. einer Lorentzfunktion mit $\Gamma = 0.48 \text{ eV}$ gefaltet.

Theoretisch berechnete APS-Spektren sind zusammen mit den experimentellen in Abb. 6.2 aufgetragen. Die experimentellen Spektren sind entlang der Energieachse so verschoben, daß sie mit den berechneten zusammenfallen. Es läßt sich zwischen den berechneten und experimentellen Spektren eine gute Übereinstimmung erkennen. Die Peakposition für den sp-Anteil und die Peakform der beiden Spektren sind gut wiedergegeben. Der etwas stärkere Unterschwinger in der Modellrechnung bei etwa 2.5 eV wird im allgemeinen der Vernachlässigung der Energieverluste aufgrund von Elektron-Loch- und Plasmonanregungen zugeschrieben (Schulz, 1986). Ein anderer Grund kann auch im Fehler bei der Berechnung von Zustandsdichten zu finden sein.

Obwohl durch die Verbreiterungsmechanismen die scharfen Strukturen der Zustandsdichte nicht wiedergegeben werden, können aus den lokalen Maxima um 7 eV die Existenz der kritischen Punkte in den Zustandsdichten erkannt werden. Die experimentellen Werte für die kritischen Punkte, L_7 für fcc- und M für hcp-Co, betragen jeweils 6.9 eV und 7.7 eV . Aus der Verschiebung der Energieachse der experimentellen Spektren ergibt sich eine Bindungsenergie des $2p_{3/2}$ -Rumpfniveaus von 777.3 eV für hcp Co und 777.45 eV für fcc Co. Die mit XPS bestimmte Bindungsenergie für hcp-Co ist 778.3 eV (Moulder, 1992). Der Grund für den etwas höheren XPS-Wert als den mit APS gewonnenen wurde in Abschnitt 3.2.4 diskutiert.

Die zwei Kristalloberflächen W(110) und Cu(001) haben unterschiedliche laterale Atomabstände. Dies resultiert in einem unterschiedlichen Wachstum der hcp- und fcc-Filme, das über den spektralen Charakter der sp-Anteile im APS-Spektrum bestimmt werden kann. Abb. 6.3 zeigt spinintegrierte Spektren verschiedener Filmdicken für die beiden Strukturen. Für hcp-Co Filme auf W(110) zeigen die Spektren der dickeren Filme (6.5 und 10 ML) keine Differenz. Abweichungen vom Spektrum des 10 ML Co-Films treten erst bei $d \leq 3.5 \text{ ML}$ auf. Die Satellitenstruktur verschwindet allmählich und es bildet sich ein breites Minimum

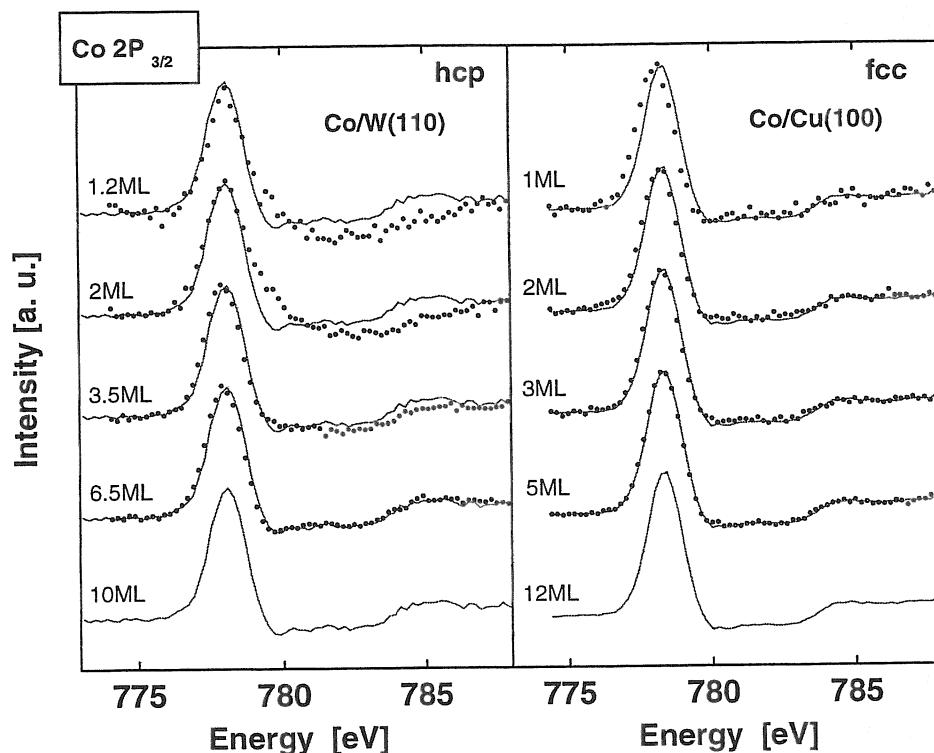


Abbildung 6.3: Spiningrierte APS-Spektren in Abhängigkeit von der Schichtdicke. Das APS-Spektrum von 10 ML Co/W(110) für hcp-Co und das APS-Spektrum von 12 ML Co/Cu(001) für fcc-Co wurden als Bezugsspektrum unterlegt (durchgezogene Linien).

aus. Je dünner der Film ist, desto stärker ist die Abweichung. Dies deutet darauf hin, daß bei dünneren Filmen die hcp-Struktur noch nicht voll ausgebildet ist und daß eine langreichweitige Ordnung für die kritischen Punkte mindestens eine Filmdicke von 4 ML benötigt. Diese Dickenabhängigkeit stimmt genau mit den Ergebnissen der LEED-Analyse überein, bei der das Verschwinden der Überstruktur ab 4 ML festgestellt wurde. Auch *Getzlaff et al.* (1996) fanden, daß sich die elektronische Struktur von Filmen dicker als 4 ML nicht von der des Volumen-Co unterscheidet.

Das Co/Cu(001)-System zeigt dagegen außer der schlechten Statistik bei dünneren Filmen fast keine Dickenabhängigkeit in der Satellitenstruktur. Dies läßt darauf schließen, daß die fcc-Kristallstruktur schon im Monolagenbereich ausgebildet ist. Auffallend in diesem System ist die Peakverschiebung zu niedrigeren Energien mit abnehmender Filmdicke. Eine elektronische Änderung durch Hybridisierung als Grund für die Peakverschiebung ist

bei Edelmetall-Substraten nicht zu erwarten (Freeman und Wu, 1991), da die 3d-Bänder gefüllt sind. Diese Annahme ist auch durch die Tatsache unterstützt, daß keine Verbreiterung der APS-Linien zu beobachten ist, so daß ein möglicher Ladungstransport von Cu- zu Co-Atomen auch nicht in Frage kommt. Die Verschiebung der APS-Linie kann daher auf die chemische Verschiebung des $2p_{3/2}$ -Rumpfniveaus an der Grenzfläche Co/Cu zurückgeführt werden. Eine ähnliche Tendenz der APS-Linien für das Co/W(110)-System wurde auch in dickeren Filmen ($d > 3$ ML) beobachtet. Für Filmen $d < 3$ ML ist der Hauptpeak wieder zur höheren Energie verschoben. An Grenzflächen zwischen Übergangsmetallen und dem W-Kristall wurde ein starker Ladungstransport sowohl theoretisch vorhergesagt (Weimert et al., 1993; Freeman und Wu, 1991) als auch experimentell beobachtet (Rangelov et al., 2000). Für Co/W(110) muß also mit einem Hybridisierungseffekt gerechnet werden. So kann die Linierverschiebung in diesem System durch das Zusammenspiel der Rumpfniveaushiftung und der Hybridisierung erklärt werden.

6.3 Spinpolarisierte Messungen

Abb. 6.4 zeigt spinpolarisierte APS-Spektren von 12 ML hcp- und fcc Co-Filmen. Die Spinasymmetrie des fcc-Spektrums ist etwas größer als die des hcp-Spektrums. Während die Minoritätsspektren kaum voneinander abweichen, wird in den Majoritätsspektren ein geringerer Unterschied in der Peakposition beobachtet. Merkwürdig ist vor allem die Aufspaltung der spinabhängigen APS-Intensitäten für den fcc Co-Film bei höheren Energien. Eine solche Aufspaltung wurde weder im Spektrum von hcp Co noch von Fe und Ni beobachtet, obwohl sie im Rahmen des Selbstfaltungsmodells für alle genannten Fälle vorhergesagt wurde (Ertl et al., 1993; Ebert und Popescu, 1997).

Die berechneten spinpolarisierten APS-Spektren sind zusammen mit den experimentellen Daten in Abb. 6.5 aufgetragen. Die Peakform der berechneten Spektren stimmen mit den Experimentellen grob überein. Die starke Spinaufspaltung des berechneten fcc-Spektrums zwischen 4 und 6 eV im Vergleich zum hcp-Spektrum zeigt, daß die gemessene Aufspaltung der Teilspektren kein Zufall ist. Bezüglich der relativen energetischen Position des Majoritätspeaks zeigen die berechneten und experimentellen Ergebnisse eine Abweichung. Das berechnete Peak ist nämlich näher an die Fermikante gerückt. Eine mögliche Ursache

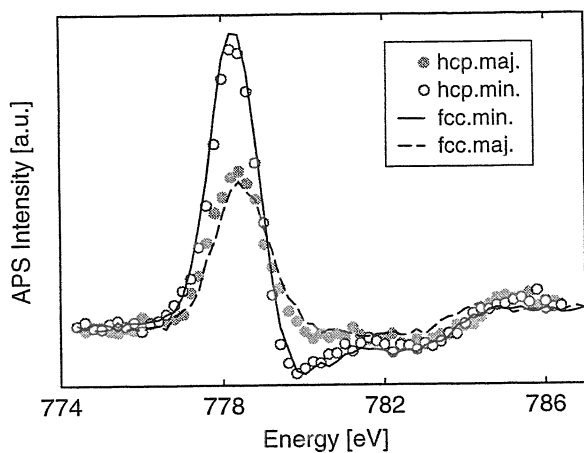


Abbildung 6.4: Spinpolarisierte APS-Spektren vom 12 ML hcp- und fcc-Co-Film. Die Spektren sind auf 100 % Spinpolarisation und auf das Maximum der Summe der beiden Teilspektren normiert.

wäre die Spinaufspaltung des Rumpfniveaus, die sowohl theoretisch (Ebert et al., 1991) als auch experimentell (Baumgarten et al., 1991) beobachtet wurde. In diesem Fall führt das etwas tiefer liegende $2p_{3/2}$ -Majoritätsniveau zu einem zu höherer Energie verschobe-

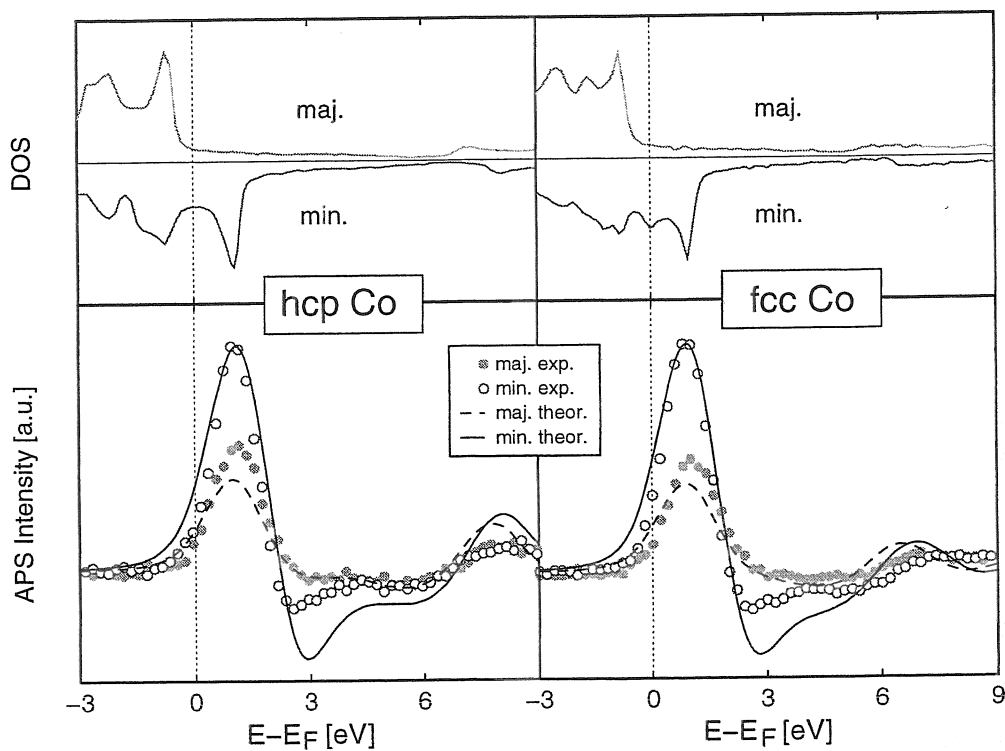


Abbildung 6.5: Oben: Spinpolarisierte Zustandsdichten (DOS) für hcp- und fcc-Co. Unten: Berechnete und experimentelle SPAPS-Spektren.

nen Majoritätsteilspektrum. Die beobachtete Verschiebung zwischen dem theoretischen und dem experimentellen Majoritätspeak beträgt etwa 300 meV , was mit dem von *Baumgarten et al.* (1991) gefundenen Wert von $0.5 \pm 0.2 \text{ eV}$ vergleichbar ist. Die Spinasymmetrie der Modellrechnung ist etwas größer als im Experiment. Da die gleiche Modellrechnung das Asymmetrieverhalten für Fe und Ni sehr gut beschreiben (Ebert und Popescu, 1997), sind die Ergebnisse für Co etwas überraschend. Insbesondere ist die berechnete Spinasymmetrie für Co größer als die von Fe und Ni.

In Abb. 6.6 sind die spinpolarisierten APS-Spektren von 2 und 12 ML Co-Filmen für die beiden Strukturen aufgetragen. Für den 2 ML Co-Film auf W(110) ist die Peakform im wesentlichen dieselbe wie im spinintegrierten Fall (Abb. 6.3), aber der Hauptpeak ist schon deutlich spinaufgespalten, d.h. der 2 ML Film ist ferromagnetisch geordnet. *Garreau et al.* (1997) berichten, daß Co-Filme auf W(110) schon unter 1.5 ML ferromagnetisch sind, wobei die untere Grenze der Filmdicke für die ferromagnetische Ordnung durch die experimentell zugängliche Tiefsttemperatur eingeschränkt ist. Die Spinasymmetrie ($\approx 11 \%$) ist aber kleiner als die des 12 ML Films. Da die Curie-Temperatur für den 2 ML Co-Film 400 K beträgt (Garreau et al., 1997) und somit eine Magnetisierung von größer als 80 % der Magnetisierung im Grundzustand zu erwarten wäre, kann die kleine Spinasymmetrie

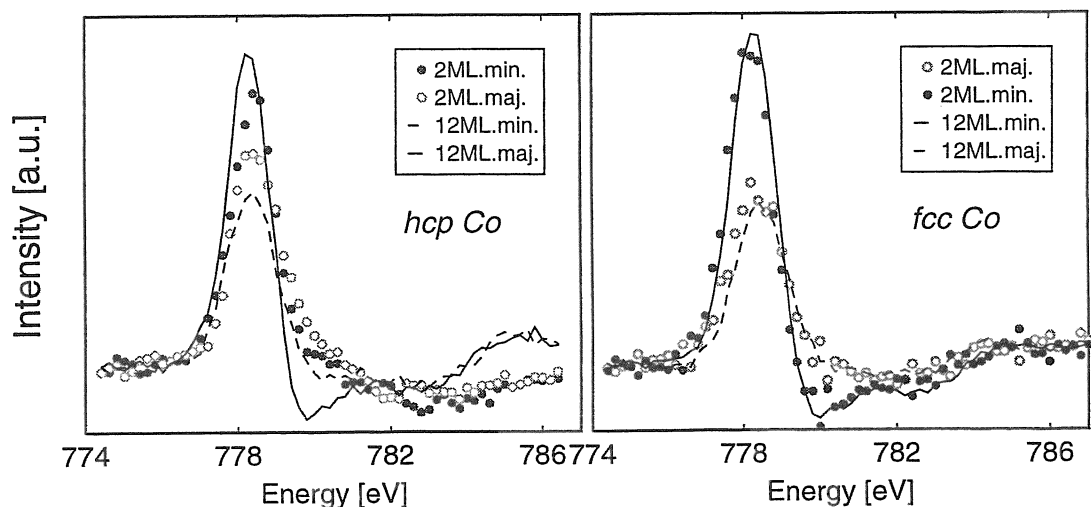


Abbildung 6.6: Spinpolarisierte APS-Spektren von 2 und 12 ML Co-Filmen für das hcp- und das fcc-System.

nicht nur durch das niedrige T_c erklärt werden. Eine weitere Ursache findet man in der ungewöhnlichen magnetischen Ordnung des Co Films auf W(110). Eine SPLEEM-Analyse von *Duden und Bauer* (1996) zeigt, daß die magnetischen Momente von Co-Atomen nicht genau in der Ebene liegen, sondern in die Flächennormale geneigt sind, wobei der Film in mehreren Domänen mit *zick zack*-förmigen Momenten geteilt ist. Der Neigungswinkel beträgt etwa 35° bei einer Filmdicke von 3 ML, abfallend mit zunehmender Filmdicke. Diese Neigung führt zu einer Abnahme des Skalarproduktes $\mathbf{M} \cdot \mathbf{P}$ und damit auch der Spinasymmetrie um einen Faktor $\cos\theta$, wobei θ der Winkel zwischen der Magnetisierung \mathbf{M} und der Spinpolarisation \mathbf{P} ist. Aus einer Extrapolation der θ - d -Kurve von *Duden und Bauer* erhält man $\theta \approx 40^\circ$ für $d = 2$ ML. Eine Hochrechnung der Spinasymmetrie mit der Berücksichtigung dieser Neigung liefert $A \approx 16\%$, was weit unter dem Wert 29% für den 12 ML Film liegt. Eine weitere Erklärung besteht, genauso wie in dünnen Fe-Filmen auf W(110), darin, daß die Versetzungslinien als Hindernisse der Domänenbewegung die Koerzitivfeldstärke H_c erhöhen und eine gleichmäßige Magnetisierung verhindern. Die Überprüfung des magnetischen Zustands durch eine Aufnahme der Magnetisierungskurve des 2 ML Films war wegen der hohen Koerzitivfeldstärke (> 100 G) nicht möglich. Aber wie die Magnetisierungskurven (Abb. 6.7) der 6 ML Filme zeigen, ist H_c für die hcp-Filme generell viel höher als die der fcc-Filme.

Die Spinasymmetrie des 2 ML Co-Films auf Cu(001) ist dagegen vergleichbar mit der des 12 ML Films. Dies liegt daran, daß der 2 ML Film, wie in spinintegrierter APS und LEED erkennbar, gut geordnet ist, so daß die für dünne Filme übliche Magnetostriktion und die

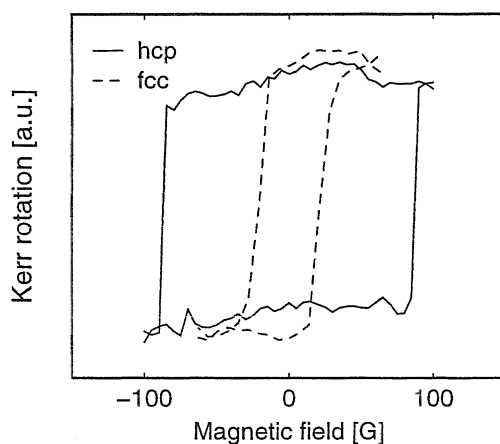


Abbildung 6.7: Magnetisierungskurve von 6 ML Co-Filmen. Die 'square loop' Hysterese zeigt, daß die Feldrichtung, $[1\bar{1}00]$ für hcp-Filme und $[1\bar{1}0]$ für fcc-Filme, die leichte Magnetisierungsrichtung ist.

erhöhte Koerzitivfeldstärke keine Rolle spielen. Eine Hybridisierung der Grenzflächenatome und damit eine eventuelle Änderung der magnetischen Momente für dünne Co-Filme wurden ausgeschlossen, wie im Abschnitt 6.1 diskutiert. Sowohl der Majoritäts- als auch der Minoritätspeak des 2 ML Co-Films wurden zu niedrigerer Energie verschoben. Dies ist ein weiterer Hinweis dafür, daß die Verschiebung der APS-Linien in dünneren Filmen (Abb. 6.3) durch die Rumpfniveaushiftung verursacht wird, wie vermutet wurde. Die Struktur im Hochenergiebereich bleibt, auch in spinpolarisierten Spektren des 2 ML Co-Films erhalten.

Im Fe/W(110)-System (Kap. 5) wurde eine starke Modifikation der magnetischen Eigenschaften für Filme $d \leq 10$ ML beobachtet, was auf die sich stark ändernde Filmmorphologie zurückgeführt wurde. Während für Co/W(110) eine im Vergleich zu Fe/W(110) stärkere Gitterfehlpassung ($\sim 20\%$) vorliegt, zeigt das System Co/Cu(001) verglichen mit den beiden Systemen auf W(110) fast keine Gitterspannung. So können die beiden Co-Systeme benutzt werden, nachzuprüfen, ob das Maximum der Spinasymmetrie im Fe/W(110) (Abb. 5.3) allein durch die Gitterspannung bzw. die Filmmorphologie in dünneren Schichten verursacht wird, oder ob der Effekt der Symmetriebrechung an Oberflächen auch eine Rolle spielt.

Abb. 6.8 zeigt die Spinasymmetrie A als Funktion der Schichtdicke für die beiden Systeme. Die Spinasymmetrie für fcc-Co steigt innerhalb der ersten 2 Monolagen steil an

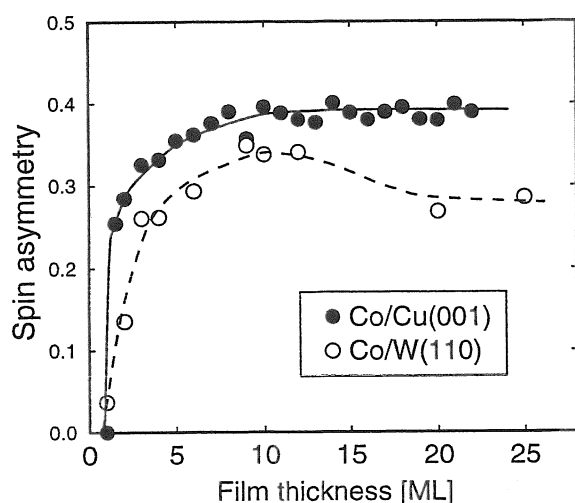


Abbildung 6.8: Spinasymmetrie A als Funktion der Schichtdicke d für Co/W(110) und Co/Cu(001).

und sättigt ab etwa 10 ML bei einem Wert von 40 %. Für hcp-Co ist die Steigung von A etwas langsamer und es bildet sich ein breites Maximum bei etwa 10 ML aus, bevor sie sich ab 20 ML sättigt. Ein solches Verhalten von A wurde im Fe/W(110)-System beobachtet (Abb. 5.3), bei dem das Maximum von A auf eine erhöhte Anzahl von Stufenatomen zurückgeführt wurde. Es ist daher sinnvoll, als Ursache für das Asymmetrieverhalten im Co/W(110)-System zuerst die Gitterspannung zu betrachten. In dünnen Co-Filmen auf W(110) wurden starke Überstrukturen in LEED beobachtet, die mit erhöhten Versetzungs- und Stufendichten verbunden sind. *Fritzsche et al.* (1995) berichten, daß die hohe Gitterspannung von Co-Filmen ab etwa 10 ML zu relaxieren beginnt. So ist das Maximum der Spinasymmetrie für Co/W(110) um $d \approx 10$ ML durch eine Reduktion der Anzahl von schwach gebundenen Atomen an der Oberfläche bzw. durch die damit verbundene Abnahme der magnetischen Momente für $d \geq 10$ ML zu erklären. Die etwas langsamere Relaxation von Co im Vergleich zu Fe-Filmen kann darauf zurückgeführt werden, daß die mechanische Spannung in Co-Filmen aufgrund der viel höheren Gitterfehlpassung zu dickeren Atomlagen fortgesetzt ist.

Eine bessere Atomanordnung führt schneller zu einer magnetischen Ordnung. Daher ist der steilere Anstieg der Spinasymmetrie für fcc-Filme $d \leq 3$ ML recht plausibel. Da die Curie-Temperatur für $d > 2$ ML für die beiden Systeme wesentlich höher als die Meßtemperatur (RT) liegt, spielt T_c in diesem Dickenbereich keine Rolle. Für $d \leq 2$ ML könnte T_c dagegen kritisch werden. Da aber T_c von hcp-Co (Garreau et al., 1997) für $d \leq 2$ ML höher als T_c von fcc-Co (Schneider et al., 1990) ist, so daß in diesem Dickenbereich eine höhere Spinasymmetrie für hcp-Co zu erwarten wäre, kann das unterschiedliche T_c der beiden Systeme nicht die Ursache für das unterschiedliche Asymmetrieverhalten sein. Auch bezüglich der Sättigungsasymmetrie unterscheiden sich die beiden Systeme. Die berechneten Zustandsdichten zeigen fast keine Differenz in der Spinaufspaltung zwischen der hcp- und der fcc-Struktur (Abb. 6.5). Photoemission- und inverse-Photoemission-Untersuchungen von *Mankey et al.* (1993) ergeben eine Spinaufspaltung von 1.2 eV für fcc-Co, und für hcp-Co berichten *Getzlaff et al.* (1996) und *Math* (2000) von einem Majoritätspeak bei -0.6 eV und einem Minoritätspeak bei 0.6 eV mit Photoemission- bzw. inverse-Photoemission-Messungen, so daß sich auch für die hcp-Co eine Spinaufspaltung von 1.2 eV ergibt. Unterschiede in der elektronischen Struktur als Ursache für die unterschiedlichen Spinasymmetrien für dickere

Filme ($d > 20$ ML) sind daher ausgeschlossen. Bei dieser Dicke spielt die gefaltete Struktur der Domänen auch eine untergeordnete Rolle (Duden und Bauer, 1996). Hier könnte man wieder auf die Filmmorphologie zurückgreifen. Wie in Abb. 6.7 beobachtet, zeigen die hcp-Filme eine viel höhere Koerzitivfeldstärke als fcc-Filme, was zu einer unvollständigen Magnetisierung führen kann. Dies kann zusammen mit der beobachteten komplexen Domänenstruktur im hcp Co/W(110)-System zur Abnahme der Spinasymmetrie führen.

Die Untersuchungen der beiden Co-Systeme zeigen, daß SPAPS eine struktursensitive Methode ist. Nicht nur die Unterschiede der Kristallstrukturen, sondern auch ihre Entstehung mit der Zunahme der Bedeckung konnten beobachtet werden. Bei magnetischen Untersuchungen wurde die Rolle der Filmmorphologie für Änderungen der magnetischen Momente verdeutlicht.

APS-Untersuchungen an den drei 3d-Ferromagneten sind hiermit abgehandelt. Spinpolarisierte APS-Spektren von bcc-Fe, hcp-Co und fcc-Ni sind in Abb. 6.9 zusammengetragen (das Ni-Spektrum wurde von *Vonbank* (1992) genommen). Die Spektren können nicht nur durch die elementspezifischen Bindungsenergien, sondern auch durch die strukturabhängige Peakform charakterisiert werden. Daher können in einem Mehrkomponenten-System aus diesen Elementen neben magnetischen Informationen auch die lokale Struktur elementspe-

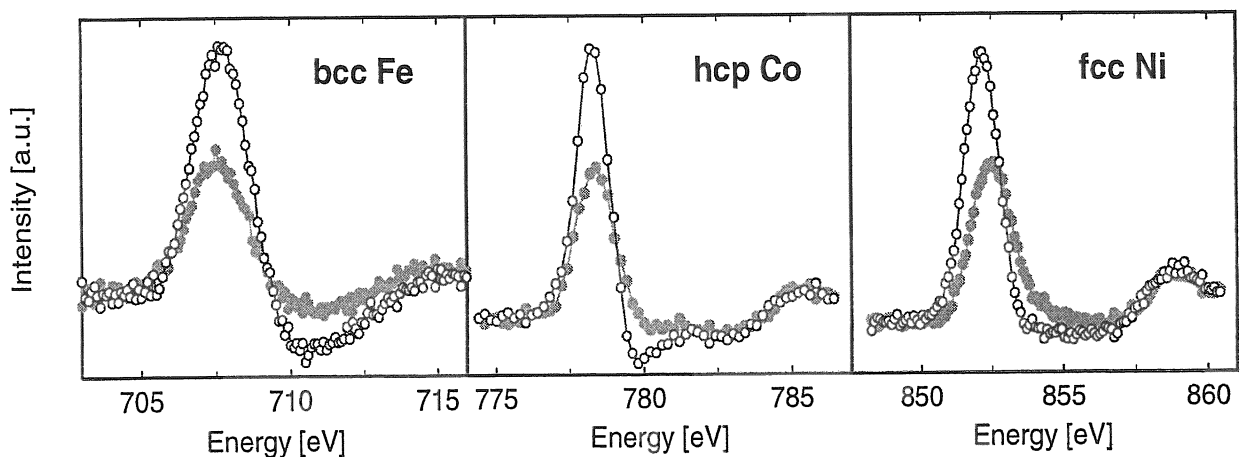


Abbildung 6.9: Spinpolarisierte SPAPS-Spektren von bcc Fe, hcp Co und fcc Ni. Modulationsamplituden von jeweils 2.0, 1.4 und 1.8 V wurden verwendet.

zifisch bestimmt werden. Messungen am [Fe,Co]-Legierungssystem im nächsten Kapitel werden dies zeigen.

Kapitel 7

Elementspezifische Untersuchung von

$[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]/\text{Cu}(001)$

Technische Anwendungen von magnetischen Schichten werden fast ausschließlich durch Mehrkomponenten-Systeme wie magnetische Multilagen-Schichten oder Legierungssysteme ermöglicht (Daughton et al., 1994; Boher et al., 1992). Durch Mischung magnetischer Elemente mit anderen Elementen oder durch Bildung von magnetischen Multilagen mit nicht-magnetischen Zwischenschichten ist es möglich, Materialien bestimmter magnetischer Eigenschaften herzustellen. Eine experimentelle Voraussetzung für die Charakterisierung solcher Systeme ist die Elementselektivität. Techniken mit Rumpfniveauanregung wie APS erfüllen diese Bedingung. Zudem ist es mit SPAPS möglich, die Elementspezifität mit der magnetischen und strukturellen Sensitivität zu kombinieren und dadurch das strukturelle und magnetische Verhalten einzelner Elemente und die Korrelation zwischen Struktur und Magnetismus zu untersuchen.

Fe- und Co-Atome sind aufgrund ihrer ähnlichen elektronischen Strukturen und Atomgrößen gut mischbar und bilden eine bcc-Struktur für einen breiten Zusammensetzungsbereich (bis zu 80 at. % Co) (Lihl, 1951). Bekannt geworden ist dieses Legierungssystem durch sein ungewöhnliches magnetisches Verhalten: das Maximum der sogenannten *Slater-Pauling-Kurve*, die das atomare magnetische Moment der 3d-Übergangsmetalllegierungen in Abhängigkeit von der Elektronenkonzentration außerhalb der 3p-Schale zeigt, liegt in dieser Legierung bei etwa 30 % Co (Kittel, 1986). Dies führte zu zahlreichen theoretischen Arbeiten in der Hoffnung auf ein besseres Verständnis des Magnetismus von Bandmagneten (James et al., 1999; Turek et al., 1994). In Legierungsschichten befinden sich Fe- und Co-Atome in einer völlig anderen Umgebung als im Volumen. Die Kristallstruktur und die

Morphologie werden stark vom Substrat und der Dimensionalität beeinflusst.

Das $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]/\text{Cu}(001)$ -Legierungssystem wurde von *Zharnikov et al.* (1996) und *Dittschar et al.* (1998,2000) strukturell und magnetisch mit MEED, LEED bzw. MOKE untersucht: die Legierungsfilm wachsen chemisch ungeordnet in einer verzerrten fcc-Struktur. Die Stärke der Verzerrung und damit die Filmmorphologie und die Interlagenabstände hängen von der Filmdicke und der Zusammensetzung ab. Während Filme mit $x < 0.6 \sim 0.7$ lagenweise wachsen, zeigen Fe-reiche Filme Abweichungen vom lagenweisen Wachstum und verursachen Überstrukturen in LEED-Mustern, was auf einen regelmäßigen Übergang der x -abhängigen Atomordnung hinweist. *Dittschar et al.* (2000) fanden mit der kinematischen Analyse der LEED- $I(V)$ -Kurven, daß Fe-reiche Filme eine Tendenz des strukturellen Übergangs zu bcc-Struktur mit zunehmender Filmdicke zeigen, wobei der Übergang auch in den 9 ML Filmen noch nicht abgeschlossen sein soll. Es wurde im ganzen gemessenen Dicken- und Zusammensetzungsbereich keine *in plane* magnetische Anisotropie beobachtet.

Im Gegensatz zu *Dittschar et al.* zeigt die in dieser Arbeit vorgenommene Strukturanalyse mit spinintegrierter APS eine klare bcc-Nahordnung der 9 ML Filme zwischen $x = 0.6$ und 0.9 . Während die LEED- $I(V)$ -Analyse aufgrund der Mehrfach-Streuung der energiearmen Elektronen für eine eindeutige Bestimmung der Oberflächenstruktur nicht geeignet ist (Ertl und Küppers, 1986), beobachtet APS klare strukturelle Phasenübergänge, wie im folgenden Abschnitt erläutert. Weiterhin wird die magnetische Struktur dieses Systems mit SPAPS in Kombination mit MOKE untersucht, wodurch eine breitere Kenntnis über die magnetischen Eigenschaften des Legierungssystems gewonnen werden kann.

Die neuartige Anordnung von Fe- und Co-Atomen, der strukturelle Phasenübergang und die damit verbundenen magnetischen Änderungen wie etwa der Spin-Reorientierungsübergang in den Legierungsschichten bieten die Möglichkeit, Korrelationen zwischen Struktur und Magnetismus näher zu studieren.

In dieser Arbeit wurden 9 ML $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]$ -Legierungsfilm verschiedener Zusammensetzung x untersucht. Die Filmdicke wurde gewählt, um möglichst hohe APS-Intensität unter Beibehaltung der fcc-Struktur in Filmen zu gewährleisten. Die Wahl des Substrats Cu(001) bietet außerdem weitere Vorteile: i) Die individuellen Systeme, Fe/Cu(001) und

Co/Cu(001), sind bereits mit SPAPS (Detzel et al., 1995; diese Arbeit) und anderen Techniken (Cochran et al., 1991; Kram et al., 1992) intensiv untersucht. Ihre elektronische Struktur, Morphologie und magnetische Anisotropien sind gut bekannt und können als Referenz für die Analyse des Mischsystems dienen; ii) fcc Fe/Cu(001) besitzt eine *out-of-plane* Anisotropie, während fcc Co/Cu(001) eine *in-plane* Anisotropie hat. Folglich erwartet man als Funktion der Zusammensetzung einen Spin-Reorientierungsübergang (Dittschar et al., 1998); iii) Im Vergleich zu [Fe,Co] mischen Fe- und Co-Atome schlecht mit Cu-Atomen. Dies verspricht die Ausbildung einer wohldefinierten Grenzfläche zwischen Legierung und Substrat.

7.1 Strukturanalyse

Die kristallographische Struktur und die Morphologie von Legierungsfilmen wurden mit LEED und APS untersucht. In Abb. 7.1 sind die LEED Aufnahmen von 9 ML $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]$ -Filmen auf Cu(001) für verschiedene Zusammensetzungen x dargestellt. Das LEED-Bild vom reinen Co-Film ($x = 0$) zeigt klare Reflexe der fcc(001)-Oberfläche und unterscheidet sich kaum von dem der sauberen Cu(001)-Oberfläche (nicht dargestellt). Durch Legieren mit Fe werden die Reflexe diffuser und die Untergrundintensität nimmt allmählich zu ($x = 0.22, 0.48$), was auf wachsende Unordnung der Ad-Atome schließen läßt. Starke Änderungen in LEED wurden im Bereich $0.6 < x < 0.9$ beobachtet. Der Untergrund nimmt stark zu und ein Streifenmuster in $[110]$ - und $[1\bar{1}0]$ -Richtung um die Hauptreflexe taucht auf. Schließlich, bei $x = 0.92$, zeigen die Reflexe wieder ein klares fcc(001)-Muster. Der Übergang zwischen den Reflexen für $x = 0.88$ und 0.92 ist relativ scharf und findet bei etwa $x = 0.9$ statt.

Im ganzen Zusammensetzungsbereich ändern sich die Positionen der Hauptreflexe nicht. Dies deutet darauf hin, daß die laterale Gitterkonstante des fcc Cu-Substrats in den untersuchten 9 ML Legierungsfilmen erhalten bleibt. Abweichungen vom idealen pseudomorphen Wachstum werden besonders bei Fe-reichen Filmen beobachtet. Die verschmierten Hauptreflexe bedeuten Modifikationen in der Filmmorphologie, die wiederum auf Abweichungen vom lagenweisen Wachstum zurückgeführt werden können. Die Streifenmuster längs $[110]$ sind ein Zeichen für uniaxiale Unregelmäßigkeiten in dieser Richtung. MEED-

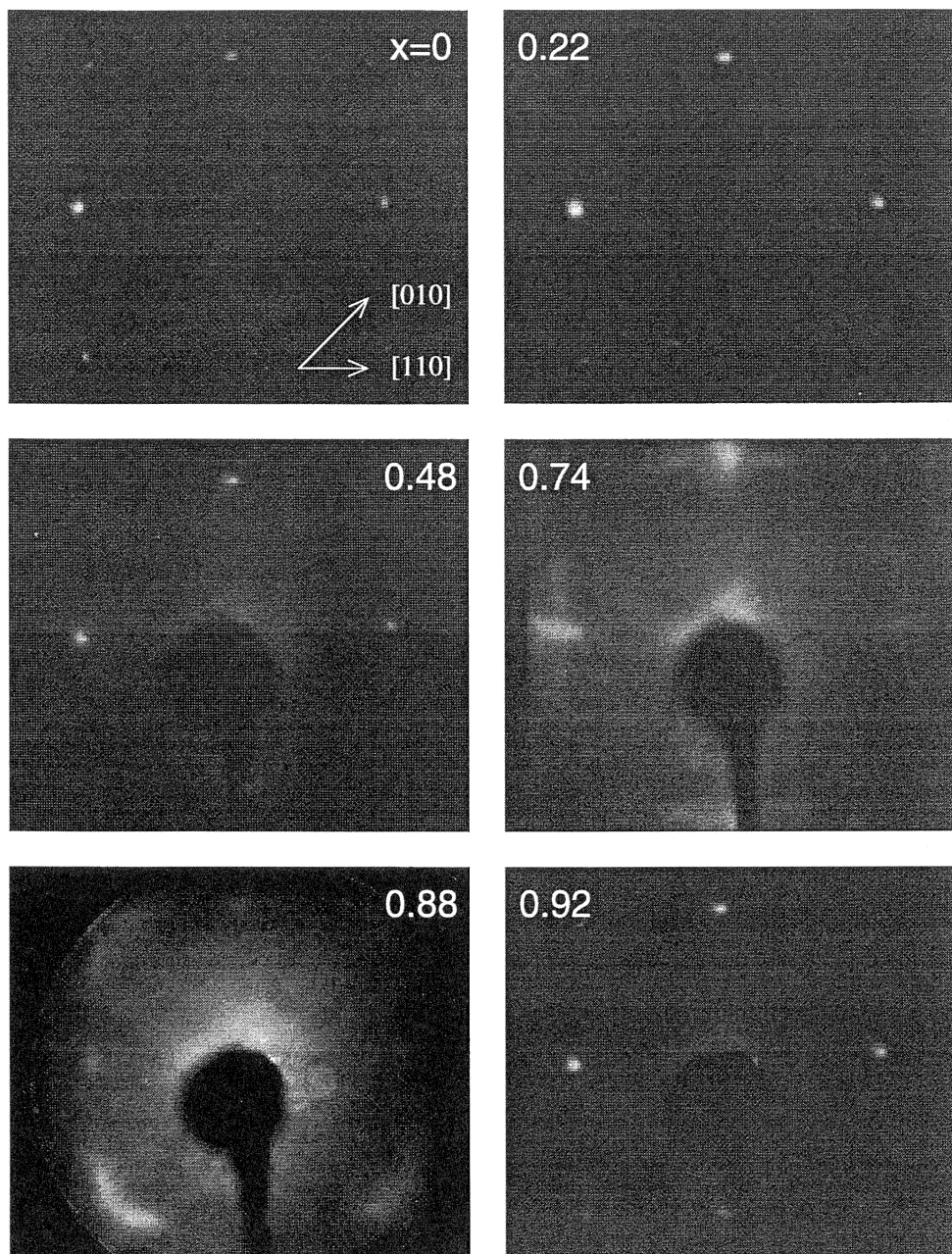


Abbildung 7.1: LEED-Aufnahmen von 9ML $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]$ -Filmen auf $\text{Cu}(001)$. Die Energie der Primärelektronen war 124 eV für $x = 0.74$ und 158 eV sonst. Das Substrat wurde auf Raumtemperatur gehalten.

Untersuchungen von *Zharnikov et al.* (1996) zeigen eine ähnliche Abhängigkeit des Wachstums von der Zusammensetzung: bis zu einer Fe-Konzentration von 60-70 % ist die MEED-Oszillation vergleichbar mit der vom reinen Co-Film, bei dem die Oszillation zumindest bis zur Dicke von 9 ML anhält. Für Fe-reiche Filme wurden nur drei bis vier Oszillationen mit einer anschließenden starken Abschwächung der MEED-Intensität beobachtet.

Was könnten die Ursachen für das Auftreten der Streifenmuster und die strukturellen Unregelmäßigkeiten sein? Frühere LEED-Untersuchungen an Fe/Cu(001) bieten zwei Hinweise darauf (Müller et al., 1995; Wuttig et al., 1993): i) Für vollständig expandierte fcc Fe-Filme unter 4 ML wurde eine reguläre parallele Verschiebung benachbarter Reihen in der [110]-Richtung gefunden, die zu einer (5×1)-Überstruktur in LEED führt. ii) Eine ähnliche Überstruktur beobachtet man auch bei dickeren Fe-Filmen ab etwa 12 ML, die nach dem martensitischen Phasenübergang in bcc(110) stabilisiert werden. Hier sind auch die Verschiebung von Atomreihen in der [110]-Richtung und die daraus resultierende *in-plane* Rekonstruktion verantwortlich für die (3×1)-Überstruktur in LEED-Reflexen. Diese uniaxialen Überstrukturen zusammen mit typischen Unregularitäten in Legierungen können zur Erscheinung der Streifenmuster in LEED-Bildern führen. Eine Festlegung der genauen kristallographischen Struktur ist mit $I(V)$ -Aufnahmen schwierig, insbesondere wenn eine langreichweitige Ordnung fehlt, und wenn es sich um ein verzerrtes Gitter handelt. APS ist dagegen aufgrund ihrer spektralen Sensitivität auf die lokale elektronische Struktur in der Lage, die Nahordnung der Oberfläche indirekt zu bestimmen.

In Abb. 7.2 sind spinintegrierte Spektren des Fe- und Co- $2p_{3/2}$ -Rumpfniveaus für 9 ML $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]$ -Filme auf Cu(001) aufgetragen. Die Punkte stellen die gemessenen Spektren der jeweiligen Zusammensetzung dar, und jedem Spektrum sind als Referenzlinien APS-Spektren bekannter Struktur unterlegt, nämlich die von 7 ML fcc-Fe/Cu(001) und 17 ML bcc-Fe/Cu(001) (jeweils durchgezogene und gestrichelte Linie) für Fe und 9 ML fcc-Co/Cu(001) für Co.

Für $x = 0.21$ ist das Fe-Spektrum verschieden von den beiden Referenzlinien. Dies bedeutet, daß sich die Fe-Atome chemisch und/oder strukturell in einer fremden Umgebung befinden. Eine mögliche Erklärung dafür ist, daß in dieser Zusammensetzung die Fe-Atome

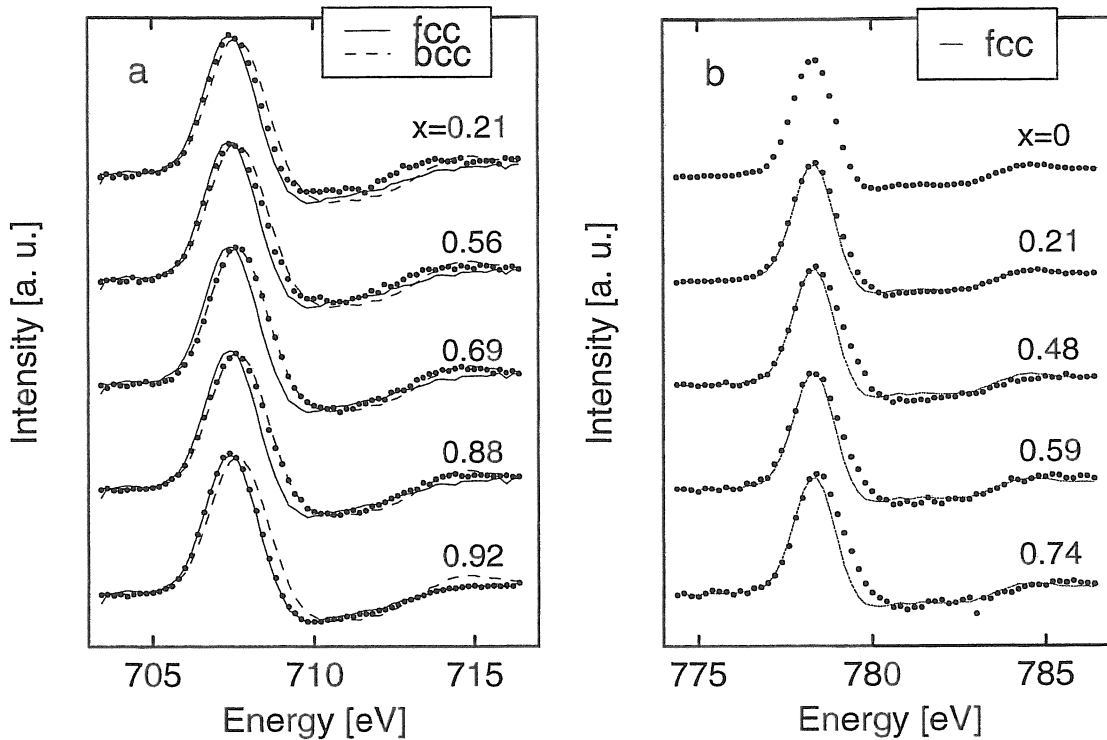


Abbildung 7.2: APS von 9 ML Fe_xCo_{1-x} -Filmen auf $Cu(001)$. Die Spektren sind jeweils an der $2p_{3/2}$ -Kante von Fe(a) und Co(b) aufgenommen. Jedem Fe-Spektrum sind die APS-Spektren von 7 ML fcc Fe/Cu(001) (durchgezogene-) und 17 ML bcc Fe/Cu(001) (gestrichelte Linie) und jedem Co-Spektrum ist das APS-Spektrum von 9 ML fcc Co/Cu(001) unterlegt.

von den überzähligen Co-Atomen umgeben sind, die die gesamte Struktur des Films bestimmen. In diesem Fall würde der Hochenergieanteil des Fe-Spektrums die Satellitenstruktur von fcc-Co annehmen, nicht die der bcc- oder fcc Fe-Filme. Tatsächlich beobachtet man die in Co-Spektren bekannte Doppelmimima-Struktur im Fe-APS bei 709 und 712 eV. Dies ist ein Hinweis dafür, daß die Kristallstruktur der Legierungsfilme sich in den Hochenergieanteil der APS-Spektren überträgt, unabhängig davon, welches Element spektroskopiert wird.

Im Spektrum für $x = 0.56$ ist die Satellitenstruktur mehr oder weniger verschmiert. Dies bedeutet, daß entweder der Film ungeordnet ist, oder, daß der Film aus mehreren Phasen besteht, deren Beiträge sich zur APS-Intensität addieren, so daß das resultierende APS mit keiner der stabilen Strukturen übereinstimmt. Da aber das LEED-Bild der gleichen Zusammensetzung deutliche Reflexe liefert, ist die erste Annahme ausgeschlossen. Die letztere ist

durchaus möglich, weil an den beiden Enden der Zusammensetzungen Filme kontrahiert ($x = 0$) oder expandiert ($x = 1$) sind, welche in mittleren Zusammensetzung gemischt vorkommen können. *Zharnikov et al.* (1996) berichten anhand einer LEED $I(V)$ -Analyse von der Existenz der zwei verschiedenen Interlagenabstände in breiten x -Bereichen. Spektren von Fe-reichen Filmen ($x = 0.69$ und 0.88) überlappen dagegen genau mit dem Spektrum von bcc-Fe. Dies läßt darauf schließen, daß für die Zusammensetzung die Fe-Atome lokal in der bcc-Struktur geordnet sind. Während das Spektrum für $x = 0.69$ mit der gestrichelten Linie exakt übereinstimmt, ist im Spektrum für $x = 0.88$ eine kleine Abweichung zu sehen, nämlich der Hauptpeak und die Struktur bei etwa 714 eV sind zu niedrigeren Energien verschoben. Dies wäre ein Zeichen für einen bevorstehenden weiteren strukturellen Phasenübergang. In der Tat führt eine kleine Erhöhung des Fe-Anteils wieder zu einer fcc-Struktur, der stabilen Struktur des reinen Fe-Films auf Cu(001), wie es aus dem APS-Spektrum für $x = 0.92$ zurückgeschlossen werden kann.

Änderungen in der Filmmorphologie beeinflussen auch die Co-Spektren (Abb.7.2, (b)). Die Doppelminima-Struktur für den reinen Co-Film wurde durch Mischung mit Fe-Atomen in ein breites Minimum verwandelt. Eine stärkere Modifikation der Spektren findet man am Hauptpeak, der mit zunehmendem Fe-Anteil verbreitert wird. Dies läßt auf die Verbreiterung der 3d-Bänder schließen, was wiederum auf die Hybridisierung von Fe und Co zurückgeführt werden kann. LSDA (*local-spin-density approximation*)-Rechnungen von *Turek et al.* (1994) zeigen, daß die mittlere Bandbreite der Minoritäts- und damit der gesamten d-Bänder über dem Fermi-niveau mit wachsendem Fe-Anteil kontinuierlich zunimmt. Daher ist es erstaunlich, daß die Peakbreite der Fe-Spektren unverändert bleibt. Vermutlich ist der Einfluß des Ladungstransports auf das relativ breite Fe d-Band sehr gering.

Die APS-Messungen beweisen deutlich, daß sich die Fe-Atome in Fe-reichen Legierungsfilmen ($0.6 < x < 0.9$) in der lokalen bcc-Umgebung befinden. Damit kann das Streifenmuster in LEED-Bildern als eine verschmierte (3×1)-Überstruktur der bcc-Fe(110) identifiziert werden (Wuttig et al., 1993). Es bleibt dann die Frage, warum bei Zusammensetzungen zwischen $x = 0.6$ und 0.9 die bcc-Phase stabilisiert werden kann, die ansonsten in dickeren und reinen Fe-Filmen vorkommt, bzw. warum die fcc-Struktur des reinen 9 ML-Fe-Films

durch Legieren mit Co auf bcc übergeht. Ein Vergleich des Phasenübergangs bei $x = 0.9$ mit dem martensitischen Übergang vom reinen Fe-Film gibt möglicherweise einen Aufschluß. Die bcc-Struktur ist die stabile Struktur von Volumen-Fe bei Raumtemperatur. Dünne Fe-Filme (< 10 ML) auf Cu(001) haben eine metastabile fcc-Struktur, die durch das Substrat induziert wird. Mit zunehmender Bedeckung steigt die Energiedifferenz zwischen der metastabilen fcc- und der stabilen bcc-Phase kontinuierlich, und bei einer kritischen Dicke d_c wird die fcc-Struktur instabil, es muß ein Phasenübergang zur bcc-Struktur stattfinden. Betrachtet man ein System mit vielen Störstellen, etwa eine unsauber präparierte Cu(001) Oberfläche, ist der Einfluß des Cu-Kristalls sicherlich schwächer, was ein früheres Einsetzen des martensitischen Übergangs erwarten läßt. Genauso kann man interpretieren, daß der Übergang des 9 ML-fcc-Films zu bcc durch Legieren mit Co zustandekommt, wobei der Co-Zusatz als Defekt in einer Fe-Matrix angesehen werden kann.

Der bcc \rightarrow fcc Phasenübergang bei $x = 0.9$ erfolgt in einem kleinen x -Bereich und ist deutlich zu erkennen. Dagegen ist der fcc \rightarrow bcc Übergang bei mittleren Zusammensetzungen ($0.4 < x < 0.6$) wegen der Existenz von mehreren Phasen relativ unscharf.

LEED detektiert die langreichweitige Ordnung von Atomen auf Oberflächen. APS dagegen beobachtet aufgrund ihrer Sensitivität auf die lokale elektronische Zustandsdichte die Nahordnung von Oberflächen. So stellen die beiden Methoden eine exzellente Kombination zur Strukturanalyse dar.

7.2 Magnetische Eigenschaften

Magnetische Eigenschaften, Struktur und Morphologie sind sehr eng miteinander verbunden. Beispielsweise verursacht die Expansion der Interlagenabstände von dünnen Fe-Filmen auf Cu(001) in einem bestimmten Dickenbereich eine senkrechte magnetische Anisotropie, während Co-Filme auf Cu(001) eine kontrahierte fcc-Struktur aufweisen, die eine *in-plane* Anisotropie ergibt (Allenspach und Bischof, 1992; Kram et al., 1992).

Die im vorigen Abschnitt beobachtete Komplexität der Struktur in Legierungsfilmen sollte daher Folgen im Magnetismus haben, die im folgenden diskutiert werden sollen.

Die Magnetisierungskurve des Legierungssystems wurde unmittelbar nach der Struk-

turanalyse *in situ* mit magneto-optischem Kerr-Effekt (MOKE) bei Raumtemperatur aufgenommen, wobei das magnetische Feld in der [110]-Richtung angelegt wurde. Die Ergebnisse von 9 ML-Filmen sind in Abb. 7.3 für fünf verschiedene Zusammensetzungen aufgetragen. Die eckige Magnetisierungskurve des reinen Co-Films ($x = 0$) zeigt, daß die Magnetisierung spontan in der Feldachse [110] liegt. Durch Legieren ($x = 0.34$) wurden Änderungen an der Flanke der Magnetisierungskurve beobachtet, was mit der zunehmenden Untergrundintensität in LEED in diesem Zusammensetzungsbereich zu vergleichen ist und auf Spannungen und Unregelmäßigkeiten schließen läßt. Die Remanenz hat sich aber leicht erhöht.

In Filmen mit $0.4 < x < 0.6$ wurde eine Stufenhysterese wie für $x = 0.48$ beobachtet. Eine ähnliche Magnetisierungskurve wurde für Fe/GaAs(001) beobachtet (Daboo et al., 1995; Gester et al., 1996), das eine 4-zählige Symmetrie und eine uniaxiale Anisotropie besitzt. Steht das angelegte Magnetfeld entlang der *hard* Achse, können sich magnetische Momente wegen der 4-zähligen Symmetrie in zwei unterschiedliche leichte Richtungen richten, was in einer Stufenhysterese resultiert. Die beobachtete Hysterese für $x = 0.48$ kann auch mit demselben Mechanismus erklärt werden. Das Feld ist entlang der schweren Achse [110] gerichtet. [010] und $[\bar{1}00]$ sind dann die leichten Richtungen, in die sich die magnetischen Momente richten können. D.h. die beobachtete Stufenhysterese beweist eine *in-plane* An-

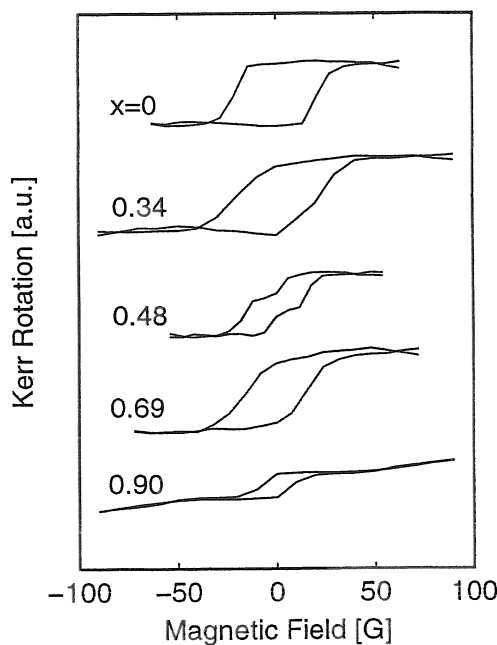


Abbildung 7.3: Magnetisierungskurven von 9 ML Fe_xCo_{1-x} -Filmen verschiedener x auf Cu(001), aufgenommen mit MOKE. Die Feldrichtung war die [110]-Richtung.

siotropie in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen. Die größte Anisotropie wird dort erwartet, wo die Remanenz am kleinsten ist, nämlich bei $x = 0.5$ (siehe Abb. 7.4). Bei dieser Zusammensetzung entspricht der mittlere Lagenabstand des Films dem des Substrats. Zharnikov *et al.* (1996) beobachten dagegen keine signifikante Anisotropie im gemessenen Zusammensetzungs- und Dickenbereich ($d \leq 9$ ML) dieses Systems.

Zwischen $x = 0.6$ und 0.9 wurde eine *hard*-Hysterese wie für $x = 0.69$ gefunden. Dies bedeutet, daß die Magnetisierungsachse nicht die leichte Achse des Films ist. STM-Aufnahmen an reinen bcc Fe-Filmen auf Cu(001) von Wuttig *et al.* (1993) zeigen, daß Fe eine bcc (110)-Oberfläche bildet, bei der die niedrig-indizierte $[1\bar{1}0]$ -Richtung der Fe(110)-Oberfläche um etwa 18° von der $[1\bar{1}0]$ -Richtung der Cu(001)-Oberfläche abweicht. So ist die leichte Achse des bcc-Films nicht mehr entlang der Feldrichtung. Die Remanenz ist aber im Vergleich zu Co-reichen Filmen nicht wesentlich geändert. Bei $x = 0.9$ fällt die Remanenz drastisch ab. Die leichte Achse hat sich also aus $[1\bar{1}0]$ rausgedreht, wahrscheinlich in die Flächennormale, die die leichte Achse des reinen Fe-Films ist (Allenspach und Bischof, 1992).

Eine Auftragung der Remanenz- M_r und der Sättigungsmagnetisierung M_s aus MOKE-Messungen in Abhängigkeit vom Fe-Anteil x (Abb. 7.4) gibt einen Überblick über das komplizierte magnetische Verhalten, das direkt mit strukturellen Änderungen zusammenhängt. In der Abbildung ist die Zusammensetzung x je nach der Form der Hysterese in vier Bereiche aufgeteilt. Die Grenzen zwischen den Bereichen befinden sich an Punkten, an denen die strukturellen Phasenübergänge beobachtet werden.

Die Sättigungsmagnetisierung M_s steigt monoton mit wachsendem Fe-Anteil, wie es auch bei 5 ML-Filmen beobachtet wurde (Zharnikov *et al.*, 1996). Dies stellt die gleiche Abhängigkeit von der Zusammensetzung wie in der Volumenlegierung (*Slater-Pauling-Kurve*) dar. Daher kann die beobachtete Steigung von M_s durch das verglichen mit Co höhere magnetische Moment der Fe-Atome erklärt werden (James *et al.*, 1999; Turek *et al.*, 1994). Laut der *Slater-Pauling-Kurve* soll M_s bei $x = 0.7$ abfallen. Da wegen des schwachen Magnetfeldes Filme ab $x = 0.8$ nicht in Sättigung magnetisiert werden konnten, kann nicht geprüft werden, ob die Spinasymmetrie das in Volumen charakteristische Maximum bei $x = 0.7$ zeigt, und ob Unterschiede in lokalen magnetischen Momenten zwischen Film und Volumen besteht. Im Bereich I ($x < 0.4$) sind Remanenz und Sättigungsmagnetisierung identisch. In II ist

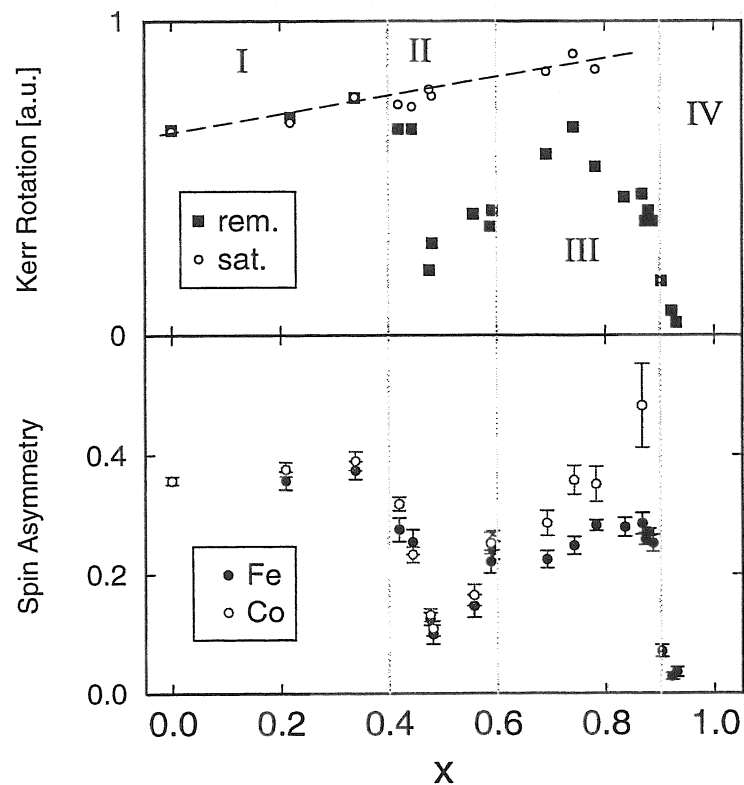


Abbildung 7.4: Kerr-Drehung und Spinasymmetrie als Funktion der Zusammensetzung x von Fe_xCo_{1-x} -Filmen. Oben: remanente (■) und Sättigungsmagnetisierung (○) wurden aus der Magnetisierungskurve bestimmt. Bei den Lücken der Meßwerte für die Sättigungsmagnetisierung konnten die Filme nicht in Sättigung gebracht werden. Unten: die APS-Spinasymmetrie wurden aus Fe- und Co- $2p_{3/2}$ -Linien mit der 2-Punkte-Methode in Remanenz ermittelt.

M_r , wie aus der Stufenform der Hysteresekurve ersichtlich, drastisch gesunken. Ab etwa $x = 0.6$ steigt die Remanenz wieder. Dies bedeutet, daß die leichte Achse immer noch in der Filmebene liegt. Da in diesem Bereich die Atome in der bcc-Struktur geordnet sind, ist die magnetische Anisotropie des Films mit der von reinem bcc Fe/Cu(001)-Film zu vergleichen, deren Anisotropie nach dem martensitischen Phasenübergang von *out-of-plane* zu *in-plane* dreht. Bei $x = 0.9$ fällt M_r aufgrund des Spin-Reorientierungsübergangs steil ab.

Im unteren Teil der Abbildung 7.4 sind die Spinasymmetrien von SPAPS als Funktion

von x aufgetragen. Die offenen und geschlossenen Symbole für Co bzw. Fe wurden jeweils an der $2p_{3/2}$ -Kante ermittelt. Die Spinasymmetrie A verläuft genau wie M_r und zeigt auch die bei den MOKE-Messungen gefundenen Merkmale der strukturellen Phasenübergänge. Dieser direkte Vergleich zwischen SPAPS und der Magnetometrie, MOKE, ist ein Beweis dafür, daß A als Maß für die Magnetisierung betrachtet werden kann.

Die Spinasymmetrie A_{Co} für Co ist im ganzen x -Bereich höher als die für Fe, A_{Fe} . Dies liegt daran, daß das unbesetzte d-Band von Co wegen der höheren Bandfüllung schmaler ist, was zu einer höheren Spinasymmetrie führt. Während A_{Co} und A_{Fe} bis etwa $x = 0.6$ keine große Differenz aufweisen, ist ab $x = 0.6$ mit zunehmender x die Abweichung zwischen den beiden Werten immer größer. Als mögliche Ursache kann die Hybridisierung zwischen 3d-Bändern von Co und Fe genannt werden, die auch im Fall von FeNi_3 eine entscheidende Rolle spielt (Reinmuth et al., 1997): SPAPS-Messungen und Modellrechnungen von FeNi_3 haben gezeigt, daß die Hybridisierung der 3d-Bänder von Fe und Ni zu einer Verschmälerung des Minoritätsbandes und einer Verschiebung des Majoritätsbandes von Fe führt, wodurch die Spinasymmetrie von Fe sich stark erhöht. Da wegen der schlechten Statistik bei Fe-reichen Filmen die Verschiebung des Hauptpeaks in Co-APS nicht festgestellt werden konnte, ist eine genauere Aussage über die Verschiebung der Energiebänder für die $[\text{Fe},\text{Co}]$ -Legierungsfilme nicht möglich. Theoretische Rechnungen für die Volumenlegierung liefern genau das Gegenteil von dem, was für dünne Filme beobachtet wurde (James et al., 1999). Dort ist das magnetische Moment von Co in der Legierung unverändert, und Fe wird ein starker Ferromagnet aufgrund der Bandfüllung in Majoritätsbändern. Auch MCD (*magnetic circular dichroism*)-Messungen an einem 20 ML bcc- $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]$ -Film auf $\text{Ag}(001)$ zeigen ein unterschiedliches magnetisches Moment zwischen beiden Elementen mit einer schwachen x -Abhängigkeit (Schellenberg et al., 1998).

Die Strukturanalyse mit APS zeigt eine klare bcc-Nahordnung bei $0.6 < x < 0.9$, die durch den Co-Zusatz stabilisiert wird. Für $0.4 < x < 0.6$ wurde eine auf *in-plane* Anisotropie an deutende Stufenhysterese beobachtet. Der Spin-Reorientierungsübergang von *in-plane* zu *out-of-plane* wurde bei $x = 0.9$ detektiert.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit konnten am ultradünnen $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ -System die strukturelle, elektronische und magnetische Sensitivität sowie die Oberflächenempfindlichkeit von spinpolarisierter Auftrittspotentialspektroskopie (SPAPS) demonstriert werden.

Experimentell wurden zwei Verbesserungen vorgenommen. Erstens konnte die Spinpolarisation der Primärelektronen durch ein axialsymmetrisch angelegtes Magnetfeld im Strahlengang gedreht und in jede Richtung in der transversalen Ebene gerichtet werden. Damit wurde eine eindeutige Bestimmung der Spindrehung in der Filmebene möglich. Verluste an Spinpolarisation und Stromdichte bei Rotation der Spinpolarisation wurden detektiert und mögliche Verbesserungen vorgeschlagen. Zweitens konnte der Elektronenstrahl durch Änderung der Elektrodenpotentiale der Elektronen-Transferoptik fokussiert werden. Ein Strahldurchmesser kleiner als 0.35 mm wurde bestimmt. Der fokussierte Strahl würde eine effiziente Analyse der dickenabhängigen Eigenschaften von keilförmig aufgedampften Filmen ermöglichen.

Der dickenabhängige Spin-Reorientierungsübergang in $\text{Fe}/\text{W}(110)$ wurde mit der APS-Spinasymmetrie verfolgt. Die Spinpolarisation \mathbf{P} konnte durch den Spinrotator parallel zur Probenmagnetisierung \mathbf{M} eingestellt werden. Aus der Dickenabhängigkeit der gemessenen Spinasymmetrie wurde die Drehung der Magnetisierung eindeutig bestimmt. Eine kritische Filmdicke von $d \approx 33 \pm 5 \text{ ML}$ wurde beobachtet.

Die von der hohen Gitterspannung der Fe-Filme verursachte Modifikation der magnetischen Momente im Dickenbereich unterhalb 10 ML wurde ebenfalls mit der Spinasymmetrie analysiert. Eine ferromagnetische Ordnung wurde für $d \geq 2 \text{ ML}$ beobachtet. Das Asymmetriemaximum bei $d \approx 6 \text{ ML}$ wurde anhand von Änderungen der Anzahl von Stufenatomen erklärt, die aufgrund der schwachen Bindung ein erhöhtes magnetisches Mo-

ment besitzen. Die gesättigte Spinasyymetrie ab $d \approx 10$ ML blieb auch nach dem Spin-Reorientierungsübergang unverändert.

Die Oberflächen- und die Elementsensitivität von SPAPS wurden benutzt, um Änderungen der Fe-Momente von freien und mit Cr bedeckten Fe-Filmen zu untersuchen. Die Spinasyymetrie zeigte eine Erhöhung bzw. Reduktion als Funktion des Einfallswinkels für die freie und bedeckte Oberfläche. Zu einer quantitativen Abschätzung wurde eine Modellrechnung durchgeführt. Bei der freien Oberfläche wurde eine Erhöhung der magnetischen Momente von mehr als 40 % gefunden, was mit anderen experimentellen Ergebnissen übereinstimmt (Tamura et al., 1990; Albrecht et al., 1992). Die Werte sind aber höher als die theoretische Erwartung ~ 20 % (Victoria und Falicov, 1984; Freeman und Fu, 1986), was durch das erhöhte magnetische Moment der schwach gebundenen Defektatome in realen Proben erklärt werden kann. Die starke Reduktion der Spinasyymetrie für den mit Cr bedeckten Fe-Film konnte im Rahmen der einfachen Modellrechnung nicht quantitativ verstanden werden.

Co-Filme der hcp- und der fcc-Struktur wurden auf W(110) bzw. Cu(001) hergestellt. Das unterschiedliche Wachstum auf den beiden Substraten konnte mit spinintegrierten APS-Spektren verfolgt werden. Der sp-abgeleitete Anteil als Sensor für die langreichweitige Ordnung tritt für hcp-Co erst ab etwa 4 ML auf, während bei fcc-Filmen keine Änderungen der Peakform als Funktion der Filmdicke beobachtet wurden, was auf ein pseudomorphes Wachstum hindeutet. Aus der Linienverschiebung der dünneren Co-Filme auf Cu(001) wurde auf die Rumpfniveaushiftung geschlossen. Auch bezüglich magnetischer Eigenschaften unterscheiden sich die beiden Systeme. Die viel höhere Gitterspannung in hcp-Filmen führt zu einer höheren Koerzitivfeldstärke und einer im Vergleich zu fcc-Filmen niedrigeren remanenten Magnetisierung. Für hcp-Co wurde eine ungewöhnliche Dickenabhängigkeit der Spinasyymetrie beobachtet, die sich wie in Fe/W(110) durch eine veränderte Anzahl von Stufenatomen erklären läßt. Das fcc-System zeigt dagegen eine monotone Dickenabhängigkeit der Spinasyymetrie.

Die Ergebnisse der Untersuchungen an Co- und Fe-Filmen konnten zur Analyse der Legierungsfilme verwendet werden.

Da die Fe- und Co-Filme auf Cu(001) chemisch ungeordnet in fcc-Struktur wachsen (Ditt-

schar et al., 2000), wird in den Legierungsfilmern $[\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}]/\text{Cu}(001)$ ebenfalls eine fcc-Struktur erwartet. Mit spinintegrierter APS konnte aber gezeigt werden, daß die 9 ML Legierungsfilme bei der Zusammensetzung zwischen $x = 0.6$ und 0.9 eine bcc-Nahordnung aufweisen, während bei anderen Zusammensetzungen wie erwartet die fcc-Struktur stabilisiert wird. Man beobachtet also zwei strukturelle Phasenübergänge bei $x = 0.5 \pm 0.1$ und 0.9 , bei denen auch magnetische Veränderungen beobachtet wurden. Zwischen $x = 0.4$ und 0.6 zeigt die Magnetisierungskurve eine Stufenform, die auf eine induzierte *in-plane* Anisotropie hindeutet (Gester et al., 1996). Bei $x \geq 0.9$ dreht sich die Magnetisierung in die Flächennormale, die die leichte Magnetisierungsrichtung von Fe/Cu(001) bei dieser Schichtdicke ist. Die relativen Beiträge von Co und Fe zum gesamten magnetischen Momenten konnten aus der Spinasymmetrie abgeschätzt werden. Co- und Fe-Spinasymmetrien zeigten einen erstaunlich ähnlichen Verlauf als Funktion der Zusammensetzung.

SPAPS ist eine Konkurrenzmethode zu *x-ray magnetic circular dichroism* (XMCD) (Schütz et al., 1987; Stöhr, 1999). Die beiden Techniken liefern mit ein und derselben Messung elementselektive lokale Informationen über strukturelle und magnetische Eigenschaften. Zwar ist XMCD bezüglich seiner Leistung, Bahnmomente zu bestimmen, dem APS überlegen, braucht aber prinzipiell eine aufwendige Röntgen-Quelle wie Synchrotronstrahlung, während SPAPS aufgrund des einfachen Meßprinzips und experimentellen Aufbaus als Standard-Labor-Experiment eingesetzt worden ist. Mit *top-table x-ray*-Quellen möchte man ein Labor-XMCD-Experiment ermöglicht werden. Aber ohne die starke Helligkeit und Durchstimrbarkeit der Synchrotronstrahlung muß die Stärke der elementspezifischen Technik weitgehend beschränkt sein.

SPAPS-Untersuchungen an Mehrlagen-Schichtsystemen und *Heusler*-Legierungen sind geplant. Die Fragen der magnetischen Kopplung zwischen zwei magnetischen Lagen, deren Charakterisierung eine wichtige Voraussetzung für technische Anwendungen wie in der Sensorik und 'Spinelektronik' ist (Monsma et al., 1995), und der Korrelation zwischen der atomaren und der magnetischen Ordnung in *Heusler*-Legierungen (Plogmann et al., 1999) können, wie die Analyse an Legierungssystemen zeigen, mit SPAPS beantwortet werden.

Literaturverzeichnis

Albrecht M., T. Furubajashi, U. Gradmann, und W. A. Harrison (1992). *J. Magn. Magn. Mater.*, **104-107**, 1699.

Allan C.A.T. (1970). *Phys. Rev. B*, **1**, 352.

Allenspach R. (1994). *J. Magn. Magn. Mater.*, **129**, 160.

Allenspach R. und A. Bischof (1992). *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 3385.

Amelio G.F. (1970). *Surf. Sci.*, **22**, 301.

Anderson C.R., R.N. Lee, J.F. Morar, und R. Park (1982). *L. Vac. Sci. Technol.*, **20**, 617.

Baibich M.N., J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friedlich, und J. Chazelas (1988). *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2472.

Ballentine C.A., R.L. Fink, J. Araya-Pochet, und J. L. Erskine (1989). *Appl. Phys. A*, **49**, 459.

Bander M. und D.L. Mills (1988). *Phys. Rev. B*, **38**, 12015.

Baumgart P., B. Hillebrands, und G. Güntherodt (1991). *J. Magn. Magn. Mater.*, **93**, 325.

Baumgarten L., C.M. Schneider, H. Petersen, F. Schäfers, und J. Kirschner (1991). *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 492.

Bell R.L. (1973). *Negative electron affinity devices*. Clarenton Press, Oxford.

Boher P., F. Giron, Ph. Houdy, F. Baudalet, A. Fontaine, J.M. Ladouceur, E. Dartyge, P. Beauvillain, C. Chappert, P. Veillet, und K. Le Dang (1992). *J. Appl. Phys.*, **71**, 1798.

Bramwell S.T. und P.C.W. Holdsworth (1994). *Phys. Rev. B*, **49**, 8811.

Bruno P. und J.-P. Renard (1989). *Appl. Phys. A*, **49**, 499.

- Capellmann H. (1979). *Z. Phys. B*, **34**, 29.
- Chappert C., D. Renard, P. Beauvillain, J.P. Renard, und J. Seiden (1986). *J. Magn. Magn. Mater.*, **54-57**, 795.
- Cochran J.F., W.B Muir, J.F. Rudd, B. Heinrich, Z. Cellinski, T.T. Le-Tran, W. Schwarzscher, W. Bennet, und Jr. W. F. Egelhoff (1991). *J. Appl. Phys.*, **69**, 5206.
- Daboo C., R.J. Hicken, E. Gu, M. Gester, S.J. Gray, D.E.P. Eley, E. Ahmad, und J.A.C. Bland (1995). *Phys. Rev. B*, **51**, 15964.
- Darby M.I. und E.D. Isaac (1974). *IEEE Trans. Magn.*, **MAG-10**, 259.
- Daughton J., J. Brown, R. Beech, A. Phom, und W. Kude (1994). *IEEE Trans. Magn.*, **30**, 4608.
- Detzel Th., N. Memmel, und Th. Fauster (1993). *Surf. Sci.*, **293**, 227.
- Detzel Th., M. Vonbank, M. Donath, und V. Dose (1995). *J. Magn. Magn. Mater.*, **147**, L1.
- Detzel Th., M. Vonbank, M. Donath, N. Memmel, und V. Dose (1996). *J. Magn. Magn. Mater.*, **152**, 287.
- Dirac P.A.M. (1926). *Proc. Roy. Soc.*, **112A**, 661.
- Dittschar A., M. Zharnikov, W. Kuch, M.-T. Lin, C.M. Schneider, und J. Kirschner (1998). *Phys. Rev. B*, **57**, R3209.
- Dittschar A., W. Kuch, M. Zharnikov, und C.M. Schneider (2000). *J. Magn. Magn. Mater.*, **212**, 307.
- Donath M. (1989). *Appl. Phys. A*, **49**, 351.
- Donath M. (1991). *Phys. Rev. B*, **43**, 13164.
- Donath M. (1993). *Surf. Sci.*, **287-8**, 722.
- Donath M. (1994). *Surface Science Reports*, **20**, 251.
- Donath M. (1999). *J. Phys.:Condens. Matter*, **11**, 9421.

- Donath M., P.A. Dowben, und W. Nolting, editors (1998). *Magnetism and Electronic Correlations in Local-Moment Systems: Rare-Earth Elements and Compounds*. World-Scientific, Singapore.
- Donnay J.D.H. und H.M. Ondik, editors (1973). *Crystal Data*. National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD.
- Dorantes-Dávila J., A. Mokrani, A. Vega, A. Rubio, C. Demangeat, und H. Dreyssé (1991). *Surf. Sci.*, **251-252**, 51.
- Döring W. (1961). *Z. Naturforschg.*, **16a**, 1146.
- Dose V., R. Drube, und A. Härtl (1986). *Solid State Commun.*, **57**, 273.
- Dose V., Th. Fauster, und H. Scheidt (1981). *J. Phys. F*, **11**, 1801.
- Dose V., A. Härtl, J. Rogozik, und H. Warlimont (1984). *Solid State Commun.*, **49**, 509.
- Dose V. und H. Scheidt (1979). *Appl. Phys.*, **19**, 19.
- Drube W. und F.J. Himpsel (1987). *Phys. Rev. B*, **35**, 4131.
- Duden T. und E. Bauer (1995). *Rev. Sci. Instrum.*, **66**, 2861.
- Duden T. und E. Bauer (1996). *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 2308.
- Dürr W., M. Taborelli, O. Paul, R. Germar, W. Gudat, D. Pescia, und M. Lundolt (1989). *Phys. Rev. Lett*, **62**, 206.
- Ebert H., L. Baumgarten, C.M. Schneider, und J. Kirschner (1991). *Phys. Rev. B*, **44**, 4406.
- Ebert H. und V. Popescu (1997). *Phys. Rev. B*, **56**, 12884.
- Elmers H.J. und U. Gradmann (1990). *Appl. Phys. A*, **51**, 255.
- Elmers H.J., J. Hauschild, H. Fritzsche, G. Liu, und U. Gradmann (1995). *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 2031.
- Ertl G. und J. Küppers (1986). *Low Energy Electrons und Surface Chemistry*. VCH.
- Ertl K., M. Vonbank, V. Dose, und J. Noffke (1993). *Solid State Commun.*, **88**, 557.

- Falicov L.M., D.T. Pierce, S.D. Bader, R. Gronsky, K.B. Hathaway, H.J. Hopster, D.N. Lambeth, S.P. Parkin, G. Prinz, M. Salamon, I.K. Schuller, und R.H. Victora (1990). *J. Mater. Res.*, **5**, 1299.
- Feder R. (1985). *Polarized Electrons in Surface Physics*. World Scientific.
- Franck J. und G. Hertz (1911). *Verh. d. Deutsch. Phys. Ges.*, **16**, 12.
- Freeman A.J. und R. Wu (1991). *J. Magn. Magn. Mater.*, **100**, 497.
- Freeman A.J. und C.L. Fu (1986). *Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems*. Springer, Berlin.
- Fritzsche H., J. Kohlhepp, und U. Gradmann (1995). *Phys. Rev. B*, **51**, 15933.
- Fu C.L., A.J. Freeman, und T. Oguchi (1985). *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2700.
- Fuchs P., V. N. Petrov, K. Totland, und M. Landolt (1996). *Phys. Rev. B*, **54**, 9304.
- Fukuda Y., W.T. Elam, und R. Park (1977). *Phys. Rev. B*, **16**, 3322.
- Garreau G., M. Farle, E. Beaurepaire, und K. Baberschke (1997). *Phys. Rev. B*, **55**, 330.
- Gester M., C. Daboo, R.J. Hicken, S.J. Gray, A. Ercole, und J.A.C. Bland (1996). *J. Appl. Phys.*, **80**, 347.
- Getzlaff M., J. Bansmann, J. Braun, und G. Schönhense (1996). *J. Magn. Magn. Mater.*, **161**, 70.
- Getzlaff M., J. Bansmann, J. Braun, und G. Schönhense (1997). *Z. Phys. B*, **104**, 11.
- Giber J., R. Drube, und V Dose (1991). *Appl. Phys. A*, **52**, 167.
- Gradmann U. (1993). *Handbook of Magnetic Materials*, Vol. 7, Elsevier, Amsterdam.
- Gradmann U. und R. Bergholz (1984). *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 771.
- Gradmann U., J. Korecki, und G. Waller (1986). *Appl. Phys. A*, **39**, 101.
- Gradmann U. und J. Mueller (1968). *Phys. Stat. Solidi*, **27**, 313.

- Gradmann U., M. Przybylsky, H. J. Elmers, und G. Liu (1989). *Appl. Phys. A*, **49**, 563.
- Gradmann U. und G. Waller (1982). *Surf. Sci.*, **116**, 539.
- Grünberg P. (1995). *Phys. Bl.*, **Nov.**, 1077.
- Grünberg P., R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, und H. Sowers (1986). *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 2442.
- Hasegawa H. (1983). *J. Phys. F*, **13**, 1915.
- Heisenberg W. (1926). *Z. Phys.*, **38**, 441.
- Henke B.L., J.P. Knauer, und K. Premaratne (1981). *J. Appl. Phys.*, **52**, 1509.
- Hong S.C., A. J. Freeman, und C. L. Fu (1988). *Phys. Rev. B*, **38**, 12156.
- Huang F., M.T. Kief, G.J. Mankey, und R.F. Willis (1994). *Phys. Rev. B*, **49**, 3962.
- Hubbard J. (1963). *Proc. Roy. Soc. A*, **276**, 238.
- Hubbard J. (1964a). *Proc. Roy. Soc. A*, **277**, 237.
- Hubbard J. (1964b). *Proc. Roy. Soc. A*, **281**, 401.
- Hubbard J. (1981). *Phys. Rev. B*, **23**, 5974.
- James P., O. Eriksson, B. Johansson, und I. A. Abrikosov (1999). *Phys. Rev. B*, **59**, 419.
- Jensen C., K. Reshöft, und U. Köhler (1996). *Appl. Phys. A*, **62**, 217.
- Jepson O., J. Madsen, und O.K. Anderson (1982). *Phys. Rev. B*, **26**, 2790.
- Kang H.D., G. Rangelov, J. Reinmuth, und M. Donath (2000). *Surf. Sci.*, **454-456**, 865.
- Kaya S. (1928). *Sci. Rep. Tôhoko Imp. Univ.*, **17**, 1157.
- Kessler J. (1985). *Polarized Electrons*. Springer, Berlin.
- Kirschner J. (1975). *Appl. Phys.*, **6**, 99.
- Kirschner J. (1984). *Solid State Commun.*, **49**, 39.

- Kirschner J., M. Glöbl, V. Dose, und H. Scheidt (1984). *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 612.
- Kishore R. und S. Joshi (1969). *Phys. Rev.*, **186**, 484.
- Kisker E., K. Schröder, W. Gudat, und M. Campagna (1985). *Phys. Rev. B*, **31**, 329.
- Kittel Ch. (1986). *Introduction to solid state physics*. Wiley, 6 edition.
- Knoppe H. und E. Bauer (1993). *Phys. Rev. B*, **48**, 1794.
- Kolac U., M. Donath, K. Ertl, H. Liebl, und V. Dose (1988). *Rev. Sci. Instrum.*, **59**, 1933.
- Korecki J. und U. Gradmann (1985). *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2491.
- Korenman V., J. Murray, und R.E. Prange (1977). *Phys. Rev. B*, **16**, 4058.
- Kortright J.B., D.D. Awschalom, J. Stöhr, S.D. Bader, Y.U. Idzerda, S.S.P. Parkin, Ivan K. Schuller, und H.C. Siegmann (1999). *J. Magn. Magn. Mater.*, **207**, 7.
- Kosterlitz J.M. (1974). *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **7**, 1046.
- Kram P., F. Laubs, B. Hillebrands, R.L. Stamps, und G. Güntherodt (1992). *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 3674.
- Kurzawa R., K.-P. Kämper, W. Schmitt, und G. Güntherodt (1986). *Solid State Commun.*, **60**, 777.
- Lee R.N. (1977). *Rev. Sci. Instrum.*, **48**, 1603.
- Li C., A.J. Freeman, and C.L. Fu (1991). *J. Magn. Magn. Mater.*, **94**, 134.
- Liebermann L., J. Clinton, D.M. Edwards, und J. Mathon (1970). *Phys. Rev. Lett.*, **25**, 232.
- Liebl H. (1999). Private Mitteilung.
- Lihl F. (1951). *Metall*, **5**, 183.
- Mamaev Y.U.A., V.N. Petrov, und S.A. Starovoitov (1987). *Sov. Tech. Phys. Lett.*, **13**, 642.
- Mankey G.J., R.F. Willis, und F.J. Himpsel (1993). *Phys. Rev. B*, **48**, 10284.

- Martin P., A. Vega, C. Demangeat, und H. Dreyssé (1992). *J. Magn. Magn. Mater.*, **148**, 177.
- Math Ch. (2000). Private Mitteilung.
- Mauri D., D. Scholl, H.C. Siegmann, und E. Kay (1989). *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 1900.
- Mermin N.D. und H. Wagner (1966). *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133.
- van der Merwe J.H. (1991). *J. Electron. Mater.*, **20**, 793.
- de Miguel J.J., A. Cebollada, J.M. Gallego, S. Ferrer, C.M. Schneider, P. Bressler, J. Garbe, K. Bethge, und J. Kirschner (1989). *Surf. Sci.*, **211-212**, 732.
- Monsma D.J., J.C. Lodder, T.J.A. Popma, und B. Dieny (1995). *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 5260.
- Mooderea J.S. und R. Meservey (1989). *Phys. Rev. B*, **40**, 8541.
- Moulder J.F. (ed.) (1992). *Handbook of X-Ray Photoelektron Spectroscopy*. Perkin-Elmer Corporation, Physical Electronics Division, Eden Prairie.
- Muhlollan G.A., R.L. Fink, J.L. Erskine, und G.K. Walters (1991). *Phys. Rev. B*, **43**, 13645.
- Müller S., P. Bayer, C. Rieschl, K. Heinz, B. Feldmann, H. Zillgen, und M. Wuttig (1995). *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 765.
- Néel L. (1954). *J. Phys. Radium*, **15**, 225.
- Nilsson P.O. und J. Kanski (1973). *Surf. Sci.*, **37**, 700.
- Nolting W. (1986). *Quantentheorie des Magnetismus 2*. Teubner, Stuttgart.
- Nolting W., W. Borgiel, und G. Borstel (1988). *Phys. Rev. B*, **37**, 7663.
- Nolting W., W. Borgiel, V. Dose, und Th. Fauster (1989). *Phys. Rev. B*, **40**, 5015.
- Nolting W., G. Geipel, und K. Ertl (1992). *Phys. Rev. B*, **45**, 5790.
- Nolting W., G. Geipel, und K. Ertl (1993). *Z. Phys. B*, **92**, 75.
- Nolting W., A. Vega, und Th. Fauster (1995). *Z. Phys. B*, **96**, 357.

- Ociepa J.G., P.J. Schultz, K. Griffiths, und P.R. Norton (1990). *Surf. Sci.*, **225**, 281.
- Ohnishi S., A. J. Freeman, und M. Weinert (1983). *Phys. Rev. B*, **28**, 6741.
- Pandey K.C. (1976). *Phys. Rev. B*, **14**, 1577.
- Park R.L. (1975). *Surf. Sci.*, **48**, 80.
- Park R.L. und J.E. Houston (1973). *J. Vac. Sci. Technol.*, **10**, 176.
- Park R.L. und J.E. Houston (1974). *J. Vac. Sci. Technol.*, **11**, 1.
- Passek F. (1994). PhD thesis, Universität Bayreuth.
- Pescia D., M. Stampanoni, G.L. Bona, R.F. Willis, und F. Meier (1987). *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2126.
- Pierce D. T. und F. Meier (1976). *Phys. Rev. B*, **13**, 5484.
- Pierce D.T., J. A. Stroschio, J. Unguris, und R. J. Celotta (1994). *Phys. Rev. B*, **49**, 14564.
- Plogmann S., T. Schlathölter, J. Braun, M. Neumann, Yu.M. Yarmoshenko, M.V. Yablonskikh, E.I. Shreder, E.Z. Kurmaev, A. Wrona, und A. Slebarski (1999). *Phys. Rev. B*, **60**, 6428.
- Potthoff M., J. Braun, G. Borstel, und W. Nolting (1993). *Phys. Rev. B*, **47**, 12480.
- Powell C.J. (1973). *Phys. Rev. Lett.*, **30**, 1179.
- Powell C.J., N.E. Erickson, und D.E. Ramaker (1992). *Phys. Scripta*, **T41**, 175.
- Prinz G.A. (1985). *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1051.
- Prinz G.A., G. T. Rado, und J. J. Krebs (1982). *J. Appl. Phys.*, **53**, 2087.
- Przybylski M. und U. Gradmann (1987). *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1152.
- Przybylski M., I. Kaufmann, und U. Gradmann (1989). *Phys. Rev. B*, **40**, 8631.
- Qui Z.Q., J. Pearson, und S.D. Bader (1994). *Phys. Rev. B*, **49**, 8798.
- Rado G.T. (1982). *Phys. Rev. B*, **26**, 2087.

- Rangelov G., K. Ertl, F. Passek, M. Vonbank, S. Bassen, J. Reinmuth, M. Donath, und V. Dose (1998). *J. Vac. Sci. Technol.*, **16**, 2738.
- Rangelov G., H.D. Kang, J. Reinmuth, und M. Donath (2000). *Phys. Rev. B*, **61**, 549.
- Rau C. und S. Eichner (1986). *Phys. Rev. B*, **34**, 6347.
- Rau C. (1989). *Appl. Phys. A*, **49**, 579.
- Rau C., P. Mahavadi, und M. Lu (1993). *J. Appl. Phys.*, **73**, 6757.
- Rau C., G. Xing, und M. Robert (1988). *J. Vac. Sci. Technol.*, **A6**, 579?
- Redhead P.A. (1966). *Bull. Radio. Elec. Eng. Div., Nat. Res. Council, Canada*, **16**, 41.
- Reinmuth J. (1997). PhD thesis, Universität Bayreuth.
- Reinmuth J., M. Donath, F. Passek, und V. N. Petrov (1998). *J. Phys. B*, **10**, 4027.
- Reinmuth J., F. Passek, M. Donath, V. N. Petrov, V. Popescu, und H. Ebert (1997). *Phys. Rev. B*, **56**, 12893.
- Reiss G., H. Brückl, und A. Hütten (1998). *Phys. Bl.*, **4**, 339.
- Richter R., J.G. Gay, und J.R. Smith (1985). *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2704.
- Sander D., R. Skomski, C. Schmidhals, A. Enders, und J. Kirschner (1996). *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 2566.
- Schad R., C.D. Potter, P. Belien, G. Verbanck, V.V. Moshchalkov, und Y. Bruynseraede (1994). *Appl. Phys. Lett.*, **64**, 3500.
- Schellenberg R., E. Kisker, M Faust, A. Fanelisa, und F.U. Hilebrecht (1998). *Phys. Rev. B*, **58**, 81.
- Schneider C.M., P. Bressler, P. Schuster, J. Kirschner, J.J. de Miguel, und R. Miranda (1990). *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1059.
- Schulz S.W. (1986). PhD thesis, Universität Würzburg.

- Schütz G., W. Wagner, W. Wilhelm, P. Kienle, R. Zeller, R. Frahm, und G. Materlik (1987). *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 737.
- Schulz B. und K. Baberschke (1994). *Phys. Rev. B.*, **50**, 13467.
- Schwabenhausen J., T. Dürkop, und H. Elmers (1997). *Phys. Rev. B*, **55**, 15119.
- Seah M.P. und W.A. Dench (1979). *Surf. Interf. Anal.*, **1**.
- Shinoda G., T. Suzuki, und S. Kato (1954). *Phys. Rev.*, **95**, 840.
- Siegmann H.C. (1992). *J. Phys. B*, **4**, 8395.
- Stampanoni M., A. Vaterlaus, M. Aeschlimann, F. Meier, und D. Pescia (1988). *J. Appl. Phys.*, **64**, 5321.
- Steierl G., R. Pfandzelter, und C. Rau (1994). *J. Appl. Phys.*, **76**, 6431.
- Stöhr J. (1999). *J. Magn. Magn. Mater.*, **200**, 470.
- Stoner E.C. (1936). *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A154**, 656.
- Stoner E.C. (1938). *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A165**, 372.
- Stoner E.C. (1951). *J. de Physique*, **12**, 372.
- Tamura E., R. Feder, G. Waller, und U. Gradmann (1990). *Phys. Stat. Sol. (b)*, **127**, 627.
- Thomas C.H. (1925). *Phys. Rev.*, **25**, 322.
- Turek I., J. Kudrnovsky, V. Drchal, und P. Weinberger (1994). *Phys. Rev. B*, **49**, 3352.
- Vega A., C. Demangeat, H. Dreyssé, und A. Chouairi (1995). *Phys. Rev. B*, **51**, 11546.
- Victoria R.H. und L. M. Falicov (1984). *Phys. Rev. B*, **30**, 259.
- Victoria R.H. und L. M. Falicov (1985). *Phys. Rev. B*, **31**, 7735.
- Vonbank M. (1992). *Spinaufgelöste Appearance Potential Spektroskopie an 3d-Übergangsmetallen*. PhD thesis, Technische Universität Wien.
- Waller G. und U. Gradmann (1982). *Phys. Rev. B*, **26**, 6330.

Wang C.S. und A.J. Freeman (1981). *Phys. Rev. B*, **24**, 4364.

Weber W., A. Bischof, R. Allenspach, C.H. Back, J. Fassbender, U. May, B. Schirmer, R.M. Jungblut, G. Güntherrodt, und B. Hillebrands (1996). *Phys. Rev. B*, **54**, 4075.

Weimert B., J. Noffke, und L. Fritsche (1993). *Surf. Sci.*, **289**, 397.

Weiß P. (1907). *J. de Physique*, **6**, 661.

Weller D., S.F. Alvarado, W. Gudat, K. Schröder, und M. Campagna (1985). *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1555.

Williams M.L. (1933). *Phys. Rev.*, **44**, 610.

Wuttig M., B. Feldmann, J. Thomassen, F. May, H. Zillgen, A. Brodde, H. Hannemann, und H. Neddermeyer (1993). *Surf. Sci.*, **291**, 14.

Zharnikov M., A. Dittschar, W. Kuch, K. Meinel, C.M. Schneider, und J. Kirschner (1996). *Thin Solid Films*, **275**, 262.