

# **Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen**

vorgelegt von  
Diplom-Physiker

Theodor Herrmann  
Herrieden

Von der Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften

der Technischen Universität Berlin

zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktor der Naturwissenschaften  
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzende: Prof. Dr. B. Kanngießer

Berichter/Gutachter: Prof. Dr. N. Esser

Berichter/Gutachter: Prof. Dr. W. Richter

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 02.11.2009

Berlin2010

D 83



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Wechselwirkung von Licht mit Festkörpern . . . . .	3
2.1.1	Dielektrische Funktion - Drude-Lorentz-Modell . . . . .	3
2.1.2	Fresnelsche Gleichungen: Verhalten an Grenzflächen . . . . .	6
2.1.3	Magneto-optischer Kerr-Effekt . . . . .	9
2.2	Ferromagnetismus . . . . .	11
2.2.1	3d-Übergangsmetalle . . . . .	12
2.2.2	Ferromagnetische Filme . . . . .	12
2.3	Wachstum epitaktischer Filme . . . . .	15
2.4	Verspannungen und Kristallversetzungen . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Untersuchungsmethoden und experimentelle Details</b>	<b>19</b>
3.1	Reflexions Anisotropie Spektroskopie (RAS) . . . . .	19
3.2	Magneto-optische Kerr Spektroskopie . . . . .	20
3.3	Experimentaufbau . . . . .	21
3.4	Probenpräparation und Charakterisierung . . . . .	23
3.4.1	Aufbringen von Kobalt und Nickel . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Optische Anisotropie von Kupfer-Einkristallen</b>	<b>25</b>
4.1	Cu(110) . . . . .	26
4.1.1	Struktur der Oberfläche . . . . .	26
4.1.2	Optische Anisotropie der reinen Cu(110) Oberfläche . . . . .	26
4.1.3	Temperaturverhalten . . . . .	28
4.1.4	Adsorbateinfluss . . . . .	29
4.1.5	Einfluss der Probenpräparation . . . . .	34
4.1.6	Mechanische Verspannung . . . . .	37
4.1.7	Einfluss von Ionenätzen . . . . .	38
4.2	Cu(111) und vizinale Cu(111) Oberflächen . . . . .	40
4.2.1	Optische Anisotropie der reinen Cu(111) Oberfläche . . . . .	42
4.2.2	Optische Anisotropie von vizinalen Cu(111) Oberflächen . . . . .	42
4.2.3	Adsorption von Sauerstoff - Facettierung . . . . .	45
4.3	Analyse der Volumendefektstruktur von Kupfer-Einkristallen . . . . .	49
4.4	Schlussfolgerungen für die optische Anisotropie von Kupfer-Einkristallen . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Optische Spektroskopie an Ni(110)</b>	<b>51</b>
5.1	Struktur der Oberfläche . . . . .	51
5.2	Optische Anisotropie . . . . .	52

5.3	Magneto-optischer Kerr-Effekt . . . . .	53
<b>6</b>	<b>Ferromagnetische Filme auf Cu(110)</b>	<b>55</b>
6.1	Ni/Cu(110) . . . . .	55
6.1.1	Simulation von Verspannungs- und Oberflächenbeiträgen . . . . .	56
6.1.2	Wachstum auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche . . . . .	59
6.1.3	Wachstum mit Sauerstoff als Surfactant . . . . .	64
6.1.4	Schlussfolgerungen der Untersuchung an Ni auf Cu(110) . . . . .	77
6.2	Co/Cu(110) . . . . .	78
6.2.1	Wachstum auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche . . . . .	80
6.2.2	Wachstum mit Sauerstoff als Surfactant . . . . .	82
6.2.3	Schlussfolgerungen der Untersuchung an Co auf Cu(110) . . . . .	88
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>89</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>90</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>93</b>
	<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>95</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>96</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>106</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Zur Charakterisierung von ferromagnetischen Schichten haben sich der magneto-optische Kerr Effekt (MOKE) und die ferromagnetische Resonanz (FMR) etabliert. Mit FMR und MOKE lassen sich die magnetischen Eigenschaften von ferromagnetischen Proben bzw. dünnen Filmen bestimmen. Sie liefern jedoch kaum Aufschlüsse über Oberflächen- und Grenzschichteigenschaften. Mittels Reflexions Anisotropie Spektroskopie (RAS) hingegen wurde in einer Vielzahl von Veröffentlichungen gezeigt, dass Eigenschaften wie Oberflächenzustände, Oberflächenrekonstruktion und -relaxation sowie Verspannungsbeiträge bestimmt werden können. Die Einflussgrößen, die zu einer optischen Anisotropie führen, sind jedoch sehr vielschichtig, oft kaum zu überschauen. Erst eine genaue Analyse der Oberflächen- bzw. Grenzflächeneigenschaften mit komplementären Methoden, wie winkelaufgelöste Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie (ARUPS), Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED), Rastertunnel-Mikroskopie (STM), Ellipsometrie und anderer Methoden, erlaubt eine zuverlässige Zuordnung der RAS Strukturen. Ist jedoch ein System grundlegend charakterisiert kann RAS als eine sehr zuverlässige und einfach einsetzbare Methode angewandt werden, die Prozesse während der Probenpräparation bzw. des Schichtwachstums "sichtbar" werden lässt. Vom prinzipiellen Aufbau her ist ein RAS Spektrometer äquivalent zu einem MOKE Spektrometer für den polaren Kerr Effekt (senkrechter Einfall des Lichtstrahls auf die Probenoberfläche). MOKE bei konstanter Wellenlänge des Lichts ist eine Standardmethode zur Bestimmung grundlegender Parameter, wie Koerzitivfeldstärke, Magnetisierung und Magnetisierungsrichtung von ferromagnetischen Proben bzw. Filmen. MOKE Spektroskopie wird hingegen eher selten eingesetzt. Das liegt vor allem an den relativ "strukturlosen" Spektren im sichtbaren Bereich des Lichts und auch daran, dass z.B. Morphologieveränderungen kaum Einfluss auf die magneto-optischen Spektren haben.

Der Darstellung der Resultate zu den untersuchten Kristallen und Filmsystemen wurde jeweils eine kurze Literaturübersicht und eine Diskussion der bereits bekannten Eigenschaften vorangestellt. Diese Arbeit beschäftigt sich schwerpunktmäßig mit der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen und der Charakterisierung von Nickelfilmen auf Cu(110) Substraten. Die ausführliche Diskussion der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen wird den Einfluss von Kristall-Verspannungen und -Versetzungen auf die optische Anisotropie aufzeigen. Diese Ergebnisse können dann zur Charakterisierung des Schichtwachstums ferromagnetischer Filme verwendet werden. Eine kurze Betrachtung der optischen und magneto-optischen Eigenschaften von Ni(110) vervollständigt die benötigten Daten, um eine zuverlässige Analyse der Ni Filme auf Cu(110) Substraten zu ermöglichen. Das Wachstum von Nickelfilmen auf Cu(110)-(1×1) und Cu(110)-(2×1)-O wird ausführlich behandelt. Es werden die Morphologie der Oberflächen, die optische Anisotropie und die magnetischen Eigenschaften der Filme analysiert. Im Besonderen wird das Auftreten von Defekten und Verspannungen im Film und an der Grenzschicht

Ni/Cu in Abhängigkeit von der Ni Schichtdicke dargelegt.

Abschließend folgt eine Charakterisierung der Wachstumsphasen von Co auf Cu(110)-(1×1) und Cu(110)-(2×1)-O. Die Untersuchung von Co auf Cu wurde zeitlich vor der Untersuchung von Ni auf Cu durchgeführt. Zu diesem Zeitpunkt war das RAS Spektrometer noch nicht mit der nötigen Funktionalität für MOKE Messungen ausgestattet. Außerdem stand noch kein "in-situ" Elektromagnet zur Verfügung. Die Untersuchung des Wachstums von Co auf Cu(110)-(1×1) und Cu(110)-(2×1)-O beschränkt sich deshalb auf eine Analyse der Oberflächenmorphologie und der Wachstumsmechanismen mittels STM und RAS. Eine Analyse der Co/Cu Grenzschicht wurde mittels der Cu-Volumendefektstruktur durchgeführt. Die Interpretation hiervon bleibt jedoch spekulativ, da die optische Anisotropie von flächenzentriert kubischen (fcc) Co nicht bekannt ist. Die Gitterfehlpassung und die damit verbundene Verspannung bei Co auf Cu(110)-(1×1) ist wesentlich geringer als bei Ni auf Cu(110)-(1×1), so dass nur geringe Änderungen der Cu-Volumendefektstruktur zu erwarten sind.

# Kapitel 2

## Grundlagen

### 2.1 Wechselwirkung von Licht mit Festkörpern

#### 2.1.1 Dielektrische Funktion - Drude-Lorentz-Modell

Makroskopisch betrachtet, werden die optischen Eigenschaften eines Materials durch den Brechungsindex  $n$  und den Extinktionskoeffizienten  $k$  beschrieben.  $n$  und  $k$  werden zur komplexen Größe  $\hat{n}$  zusammengefasst:

$$\hat{n} = n + ik. \quad (2.1)$$

Der komplexe Brechungsindex  $\hat{n}$  ist verknüpft mit der dielektrischen Funktion  $\hat{\epsilon}$ .

$$\hat{\epsilon} = \hat{n}^2 \quad \text{mit} \quad \hat{\epsilon} = \epsilon' + i\epsilon'', \quad (2.2)$$

daraus lassen sich dann Gleichungen für den Real- bzw. Imaginärteil ableiten:

$$\epsilon' = n^2 + k^2 \quad \text{und} \quad \epsilon'' = 2nk. \quad (2.3)$$

Die dielektrische Funktion erscheint in der Materialgleichung  $\mathbf{D} = \epsilon_0 \hat{\epsilon} \mathbf{E} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$  und beschreibt den Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Größe  $\mathbf{E}$ , der makroskopischen Verschiebestromdichte  $\mathbf{D}$  und der Polarisation  $\mathbf{P}$ . Im allgemeinen Fall ist  $\hat{\epsilon}$  ein Tensor zweiter Stufe, liegt dagegen ein isotropes Medium vor, ist  $\hat{\epsilon}$  ein Skalar.

Wenn elektromagnetische Strahlung in ein Medium eindringt, induziert sie ein elektrisches Dipolmoment, es findet also eine elektrische Polarisation des Mediums statt. Aus der Polarisation ist es möglich auf die dielektrische Funktion zu schließen. Dieses klassische Modell geht davon aus, dass eine Elektron, das am Atomrumpf gebunden ist, in Schwingung versetzt wird. Es lässt sich folgende Bewegungsgleichung für dieses System aufstellen:

$$\ddot{x} + \Gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E \quad (2.4)$$

Hierbei ist  $e$  die Elementarladung,  $m$  die effektive Masse des Zwei-Körper-Problems,  $\Gamma$  die Dämpfungskonstante, die eine Dämpfung der Lichtwelle beschreibt und  $\omega_0$  die Resonanzfrequenz des Systems. Unter der Annahme, dass  $E$  eine ebene Welle der Form  $E = E_0 e^{i\omega t}$  ist, kommt man zur Lösung der Bewegungsgleichung:

$$x = \frac{e E_0 e^{i\omega t}}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)} \quad (2.5)$$

Aus der Lösung dieser Bewegungsgleichung lässt sich über die Polarisierbarkeit  $\hat{\alpha}$  mit

$$\hat{\epsilon} = 1 + \frac{\hat{\alpha}}{\epsilon_0} = 1 + \frac{eN_e x}{\epsilon_0 E} \quad (2.6)$$

der Ausdruck für  $\hat{\epsilon}$  ermitteln.

$$\hat{\epsilon}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad \text{mit} \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi N_e e^2}{\epsilon_0 m} \quad (2.7)$$

$N_e$  kennzeichnet die Anzahl der Elektronen pro Einheitsvolumen und  $\omega_p$  wird auch als Plasmafrequenz bezeichnet. In diesem Bezug wird auch die optische Leitfähigkeit  $\hat{\sigma}$  definiert:

$$\hat{\sigma} = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{\omega}{i(\omega_0^2 - \omega^2) + \Gamma\omega} \quad (2.8)$$

Freie Elektronen in Metallen können in diesem klassischen Modell durch das Fehlen einer Rückstellkraft in der Bewegungsgleichung 2.4 ( $\omega_0 = 0$ ) berücksichtigt werden (Drude-Modell). Die Lösung der Bewegungsgleichung reduziert sich dann zu:

$$\hat{\epsilon}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (2.9)$$

Die dielektrische Funktion eines Festkörpers lässt sich so durch eine Kombination von Lorentz-Oszillatoren und einem Drude-Term modellieren:

$$\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)} + \sum_j \frac{\omega_{p,j}^2}{\epsilon_0(\omega_{0,j}^2 - \omega^2 + i\omega\Gamma_j)} \quad (2.10)$$

Der additive Faktor  $\epsilon_\infty$  entspricht dem Wert der dielektrischen Funktion im Grenzwert, wenn  $\omega \rightarrow \infty$ . Aus Gleichung 2.9 kann leicht geschlussfolgert werden, dass  $\epsilon_\infty = 1$  ist.

Für die Simulation der optischen Anisotropie und der magneto-optischen Kerr Spektren wurden die RAS Spektren bzw. MOKE Spektren bzw. die aus ihnen ermittelten Differenzen  $\Delta\hat{\epsilon}$  der dielektrischen Funktion nach Gleichung 2.10 modelliert. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass Real- und Imaginärteil von  $\Delta\hat{\epsilon}$  Kramers Kronig konsistent sind, da Imaginärteile teilweise nicht zur Verfügung standen. Der Imaginärteil ist schwierig zu messen, da er häufig durch die "Ver Spannungsdoppelbrechung" des zu durchstrahlenden Fensters an der Ultrahoch-Vakuum (UHV) Kammer stark beeinflusst wird.

### Magneto-optische Effekte

Bei der Wechselwirkung von elektromagnetischen Wellen mit magnetisierbarer Materie lassen sich magneto-optische Effekte beobachten. Um die dadurch induzierte magneto-optische Anisotropie zu erfassen, muss die auf die Elektronen im Kristallgitter wirkende Lorentz-Kraft mitberücksichtigt werden. Die Bewegungsgleichung 2.4 muss ergänzt werden und nimmt dann folgende Form an:

$$\ddot{\mathbf{s}} + \Gamma\dot{\mathbf{s}} + \omega_0^2\mathbf{s} = \frac{e}{m}\mathbf{E} + \frac{e}{m}\dot{\mathbf{s}} \times \mathbf{B} \quad (2.11)$$

## Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen

### Unterkapitel 2.1: Wechselwirkung von Licht mit Festkörpern

---

Bei geeigneter Wahl des Koordinatensystems ( $B \parallel z$ ) vereinfacht sich die Bewegungsgleichung:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \Gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_x + \frac{eB}{m} \frac{dy}{dt} \quad (2.12)$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \Gamma \frac{dy}{dt} + \omega_0^2 y = \frac{e}{m} E_y - \frac{eB}{m} \frac{dx}{dt} \quad (2.13)$$

$$\frac{d^2z}{dt^2} + \Gamma \frac{dz}{dt} + \omega_0^2 z = 0. \quad (2.14)$$

Die z-Komponente entkoppelt sich vollständig von den anderen Koordinaten, die x- und y-Komponente bilden ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem. Das betrachtete System ist rotationsinvariant bezüglich der z-Achse und zur Lösung des gesamten Systems werden Polarkoordinaten eingeführt, welche folgendes Ergebnis liefern:

$$\mathbf{s}_{\pm} = \frac{e}{\sqrt{2m}} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega \pm \omega \omega_c + i\Gamma\omega} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

$s_+$  kennzeichnet die Ausbreitung der rechtszirkular polarisierten und  $s_-$  die der linkszirkular polarisierten Wellen. In diesem Zusammenhang wird die Zyklotronfrequenz  $\omega_c$  mit  $\omega_c = eB/m$  eingeführt. Die zugehörige dielektrische Funktion unterscheidet sich nun für rechts bzw. links polarisiertes Licht.

$$\hat{\epsilon}_{\pm}(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega \pm \omega \omega_c + i\Gamma\omega} \quad (2.16)$$

In diesem Fall ist die dielektrische Funktion kein Skalar mehr. Es handelt sich um einen Tensor zweiter Ordnung. Dargestellt in Polarkoordinaten, besitzt diese Matrix nur Diagonalelemente.

$$\hat{\epsilon}_{\pm} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_+ & 0 & 0 \\ 0 & \hat{\epsilon}_- & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\epsilon}_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Durch einen Wechsel in eine kartesische Basis lässt sich die Matrix in folgende Form umschreiben:

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{xx} & \hat{\epsilon}_{xy} & 0 \\ -\hat{\epsilon}_{xy} & \hat{\epsilon}_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\epsilon}_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Die Diagonalelemente dieser Matrix bestimmen die optischen Eigenschaften des Materials. Die Nichtdiagonalelemente beschreiben die induzierte magneto-optische Anisotropie. Der sich daraus ergebende Zusammenhang für den Brechungsindex nimmt die Form an  $\hat{n}_{\pm} = \sqrt{\hat{\epsilon}_{\pm}} = \sqrt{\hat{\epsilon}_{xx} \pm i\hat{\epsilon}_{xy}}$ , was die unterschiedlichen Brechungsindizes für rechts- bzw. linkszirkular polarisiertes Licht verdeutlichen.

Im allgemeinen Fall der Magnetisierung  $M$  gilt für die komplexe dielektrische Funktion:

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{xx} & \hat{\epsilon}_{xy} & \hat{\epsilon}_{xz} \\ -\hat{\epsilon}_{xy} & \hat{\epsilon}_{yy} & \hat{\epsilon}_{yz} \\ -\hat{\epsilon}_{xz} & -\hat{\epsilon}_{yz} & \hat{\epsilon}_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Wenn  $\hat{\epsilon}_{jk} \ll \hat{\epsilon}_{jj}$  und  $j \neq k$  ist, können die Diagonalelemente  $\hat{\epsilon}_{xx}$  und  $\hat{\epsilon}_{zz}$  annähernd gleich  $\hat{\epsilon}$  gesetzt werden, so dass die Matrix dann folgende Form annimmt:

$$\hat{\epsilon} \approx \begin{pmatrix} \hat{\epsilon} & \hat{\epsilon}_{xy} & \hat{\epsilon}_{xz} \\ -\hat{\epsilon}_{xy} & \hat{\epsilon} & \hat{\epsilon}_{yz} \\ -\hat{\epsilon}_{xz} & -\hat{\epsilon}_{yz} & \hat{\epsilon} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad i\epsilon Q \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{yz} \\ -\hat{\epsilon}_{xz} \\ \hat{\epsilon}_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Dieser Vektor ist parallel zu Magnetisierung  $\mathbf{M}$ , wobei  $\hat{Q}$  die komplexe Voigt-Konstante ist und  $\mathbf{m}$  den Einheitsvektor in Richtung der Magnetisierung beschreibt. Die Größe  $\hat{Q}$  ist eine Materialkonstante, die von der Magnetisierung  $\mathbf{M}$  abhängig ist. Aus diesem Zusammenhang ergibt sich z.B. für  $\hat{\epsilon}$  in Abhängigkeit von  $\hat{Q}$  unter der Voraussetzung einer Magnetisierung in z-Richtung:

$$\hat{\epsilon} \approx \hat{\epsilon} \begin{pmatrix} 1 & i\hat{Q} & 0 \\ -i\hat{Q} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \hat{\epsilon}_{\pm} \approx \hat{\epsilon} \begin{pmatrix} 1 - \hat{Q} & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \hat{Q} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

$\hat{\epsilon}$  kann in eine Summe aus symmetrischen und antisymmetrischen Anteilen zerlegt werden. Daraus folgend lässt sich  $\hat{\epsilon}$  durch die Gleichung

$$\hat{\epsilon} \mathbf{E} \approx \hat{\epsilon} \mathbf{E} + iQ \mathbf{m} \times \mathbf{E} \quad (2.22)$$

beschreiben. In der klassischen Deutung der Gleichung 2.22 beschreibt der zweite Term die Wirkung der Lorentz-Kraft auf bewegte Ladungsträger, in diesem Fall die Elektronen, die durch das elektromagnetische Feld der einfallenden Strahlung bewegt werden. Unter der Annahme von ebenen Wellen lässt sich Gleichung 2.22 wie folgt umschreiben:

$$\hat{\epsilon} \mathbf{E} \approx \hat{n}^2 \mathbf{E} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{n} \quad (2.23)$$

Für ein nichtmagnetisiertes isotropes Medium reduziert sich diese Gleichung zu:

$$\hat{\epsilon} = \hat{n}^2 \quad (2.24)$$

## 2.1.2 Fresnelsche Gleichungen: Verhalten an Grenzflächen

Für die Simulation der optischen Anisotropie von vergrabenen Schichten und Oberflächen dünner Filme wurde in dieser Arbeit ein 4-Lagen Modell verwendet. Zum Verständnis der grundlegenden Zusammenhänge wird zunächst betrachtet, wie sich eine elektromagnetische Welle an der Grenzschicht verhält. Unter der Berücksichtigung der Stetigkeitsbedingungen für die Tangentialkomponente des elektrischen bzw. magnetischen Feldes an der ladungs- bzw. stromfreien Grenzschicht, resultierend aus den Maxwell-Gleichungen, lässt sich auf das Verhältnis  $\hat{r}$  zwischen reflektierter und einfallender Welle bzw. auf das Verhältnis  $\hat{t}$  zwischen transmittierter und einfallender Welle schließen. In Abhängigkeit von der Richtung, in der der  $\mathbf{E}$ -Feldvektor schwingt unterscheidet man zwischen s-Polarisation ( $\mathbf{E}$  senkrecht zur Einfallsebene) und p-Polarisation ( $\mathbf{E}$  parallel zur Einfallsebene). Für eine unterschiedliche Permittivität  $\hat{\epsilon}_r$  und Permeabilität  $\hat{\mu}_r$  ergeben sich folgende Zusammenhänge:

$$\hat{r}_s = \left( \frac{\hat{E}_r}{\hat{E}_0} \right)_s = \frac{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 - \frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_1}{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 + \frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_1} \quad \hat{t}_s = \left( \frac{\hat{E}_t}{\hat{E}_0} \right)_s = \frac{2\hat{n}_0 \cos \varphi_0}{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 + \frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_1} \quad (2.25)$$

$$\hat{r}_p = \left( \frac{\hat{E}_r}{\hat{E}_0} \right)_p = \frac{\frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_0 - \hat{n}_0 \cos \varphi_1}{\frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_0 + \hat{n}_0 \cos \varphi_1} \quad \hat{t}_p = \left( \frac{\hat{E}_t}{\hat{E}_0} \right)_s = \frac{2\hat{n}_0 \cos \varphi_0}{\frac{\hat{\mu}_{r0}}{\hat{\mu}_{r1}} \hat{n}_1 \cos \varphi_0 + \hat{n}_0 \cos \varphi_1} \quad (2.26)$$

## Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen

### Unterkapitel 2.1: Wechselwirkung von Licht mit Festkörpern

---

wobei  $\hat{E}_0$ ,  $\hat{E}_r$  und  $\hat{E}_t$  die komplexen Amplituden des elektrischen Feldes der einfallenden, der reflektierten und der transmittierten Wellen sind. Unter der Annahme, dass  $\hat{\mu}_r$  annähernd 1 ist und mithilfe des Snelliusschen Brechungsgesetzes ergeben sich folgende Relationen:

$$\hat{r}_s = \frac{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 - \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}}{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 + \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}} \quad \hat{t}_s = \frac{2\hat{n}_0 \cos \varphi_0}{\hat{n}_0 \cos \varphi_0 + \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}} \quad (2.27)$$

$$\hat{r}_p = \frac{\hat{n}_1^2 \cos \varphi_0 - \hat{n}_0 \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}}{\hat{n}_1^2 \cos \varphi_0 + \hat{n}_0 \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}} \quad \hat{t}_p = \frac{2\hat{n}_0 n_1 \cos \varphi_0}{\hat{n}_1^2 \cos \varphi_0 + \hat{n}_0 \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}}, \quad (2.28)$$

Hierbei ist  $\varphi_0$  der Einfallswinkel des Lichts und  $\varphi_1$  der Brechungswinkel.

### Einschichtsysteme

Für die Darstellung der Wechselwirkung von Licht mit einem Einschichtsystem soll ein planparalleler dünner Film auf einem Substrat betrachtet werden. In diesem Fall setzt sich das reflektierte Licht aus Partialwellen der Mehrfachreflexionen an den Grenzschichten zusammen. Die Reflexion an den jeweiligen Grenzschichten wird mit  $\hat{r}_{01}$  und  $\hat{r}_{12}$  und die Transmission wird mit  $\hat{t}_{01}$  und  $\hat{t}_{12}$  bezeichnet. Des Weiteren gilt die Konvention:  $\hat{r}_{01} = -\hat{r}_{10}$  und  $\hat{t}_{01} = -\hat{t}_{10}$ . Die Summe der Partialwellen ergibt folgenden Ausdruck [1]:

$$\begin{aligned} \hat{E}_r &= \hat{E}_0(\hat{r}_{01} + \hat{t}_{01}\hat{t}_{10}\hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}} + \hat{t}_{01}\hat{t}_{01}\hat{r}_{10}\hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}} + \dots) \\ &= \hat{E}_0 \left[ \hat{r}_{01} + \hat{t}_{01}\hat{t}_{10}\hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}} \left( \frac{1}{1 - \hat{r}_{01}\hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}}} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.29)$$

wobei  $\hat{E}_0$  und  $\hat{E}_r$  die komplexen Amplituden des elektrischen Feldes der einfallenden bzw. der reflektierten Wellen sind. Die komplexe Größe  $\hat{\delta}$  bezeichnet den Phasenunterschied zwischen zwei benachbarten Teilwellen:

$$\hat{\delta} = \delta' + i\delta'' = 2\pi \frac{d}{\lambda} \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \varphi_0}, \quad (2.30)$$

hierbei ist  $\lambda$  die Wellenlänge und  $d$  die Schichtdicke. Der Zusammenhang aus Gleichung 2.29 kann in folgende Form gebracht werden:

$$\hat{r} = \frac{\hat{E}_r}{\hat{E}_0} = \frac{\hat{r}_{01} + \hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}}}{1 + \hat{r}_{01}\hat{r}_{12}e^{i2\hat{\delta}}}. \quad (2.31)$$

Diese Gleichung wird auch als Airy-Formel bezeichnet. Anzumerken ist hier, dass sich  $\hat{r}_{01}$  und  $\hat{r}_{12}$  für s- und p-Polarisation unterscheiden. Für das weitere Vorgehen wird ausschließlich die s-Polarisation verwendet.

### Mehrschichtsysteme - Matrixformalismus

Für ein Mehrschichtsystem soll eine Schichtabfolge von planaren dünnen Filmen mit verschiedenen optischen Eigenschaften angenommen werden. Der dazu benötigte Formalismus wurde

von Abelès [2, 3] vorgeschlagen und wird auch als Matrixmethode bezeichnet. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen basieren auf diesem Formalismus. Zur Berechnung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten  $\mathbf{R}$  und  $\mathbf{T}$  werden nun Matrizen herangezogen und für das verwendete Zweischichtsystem (4-Lagenmodell) wird die Herleitung des Zusammenhangs für die Reflexion explizit vorgestellt. Der Reflexionskoeffizient  $\mathbf{R}_s$  ist definiert durch:

$$\mathbf{R}_s = \frac{\mathbf{S}_{21s}}{\mathbf{S}_{11s}}, \quad (2.32)$$

wobei  $\mathbf{S}$  eine  $n \times n$  Matrix ist mit den Komponenten  $\hat{S}_{ij}$ . Die Matrix  $\mathbf{S}$  ergibt sich aus der Multiplikation der Schichtmatrix  $\mathbf{L}$  mit der Interfacematrix  $\mathbf{I}$ :

$$\mathbf{S}_s = \mathbf{I}_{01,s} \mathbf{L}_1 \mathbf{I}_{12,s} \mathbf{L}_2 \mathbf{I}_{23,s}. \quad (2.33)$$

Die charakteristischen Matrizen für die Schicht bzw. für die Grenzschicht sind definiert durch:

$$\mathbf{I}_{ij,s} = \frac{1}{\hat{t}_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & \hat{r}_{ij,s} \\ \hat{r}_{ij,s} & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L}_j = \begin{pmatrix} e^{-i\hat{\delta}_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\hat{\delta}_j} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

mit  $\hat{\delta}_j = 2\pi d_j / \lambda \hat{n}_j \cos \varphi_j$ , wobei  $d_j$  die Dicke und  $\hat{n}_j$  der komplexe Brechungsindex der  $j$ -ten Schicht ist.  $\hat{r}_{ij}$  und  $\hat{t}_{ij}$  folgen aus den Fresnelschen Gleichungen (siehe Gl.2.27) an der Grenzschicht vom  $i$ -ten zum  $j$ -ten Medium. Aus diesen Betrachtungen ist es möglich die Reflexionskoeffizienten für ein 4-Lagen Modell anzugeben, das sich mit der folgenden Gleichung beschreiben lässt:

$$\hat{r}_s = \frac{(\hat{r}_{01} + \hat{r}_{12} e^{-i2\hat{\delta}_1}) + (\hat{r}_{01} \hat{r}_{12} + e^{-i2\hat{\delta}_1}) \hat{r}_{23} e^{-i2\hat{\delta}_2}}{(1 + \hat{r}_{01} \hat{r}_{12} e^{-i2\hat{\delta}_1}) + (\hat{r}_{12} + \hat{r}_{01} e^{-i2\hat{\delta}_1}) \hat{r}_{23} e^{-i2\hat{\delta}_2}}. \quad (2.35)$$

Gleichung 2.35 kann zur Simulation der optischen Anisotropie verwendet werden. Die optische Anisotropie  $\frac{\Delta \hat{r}}{\hat{r}}$  ist durch die Differenz der komplexen Reflektivität bezüglich zweier zueinander senkrecht stehender Kristallachsen ( $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ) der Probenoberfläche, normiert auf die Gesamtreflektivität definiert.

$$\frac{\Delta \hat{r}}{\hat{r}} = 2 \frac{\hat{r}_{\vec{a}} - \hat{r}_{\vec{b}}}{\hat{r}_{\vec{a}} + \hat{r}_{\vec{b}}} \quad (2.36)$$

Wird linear polarisiertes Licht parallel zur Oberflächennormale eingestrahlt, lässt sich dieses in zwei Anteile, die jeweils parallel zu  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  polarisiert sind, zerlegen. Diese Anteile sind Eigenmoden der Wechselwirkung des Kristalls mit Licht. Daraus folgt, dass die Reflektivitäten für die Polarisationsrichtungen  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  voneinander unabhängig sind und getrennt berechnet werden können. So kann für jede optisch anisotrope Schicht jeweils eine dielektrische Funktion  $\hat{\epsilon}_{\vec{a}}$  und  $\hat{\epsilon}_{\vec{b}}$  angegeben werden. Für optisch isotrope Schichten gilt natürlich:  $\hat{\epsilon}_{\vec{a}} = \hat{\epsilon}_{\vec{b}}$ .

Die Reflektivität an den einzelnen Grenzschichten bestimmt sich nach Gleichung 2.27:

$$\hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i)} = \frac{\sqrt{\hat{\epsilon}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i)}} - \sqrt{\hat{\epsilon}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i+1)}}}{\sqrt{\hat{\epsilon}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i)}} + \sqrt{\hat{\epsilon}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i+1)}}} \quad \text{mit } i = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.37)$$

sowie die hierzu gehörigen Phasendifferenzen nach Gleichung 2.30

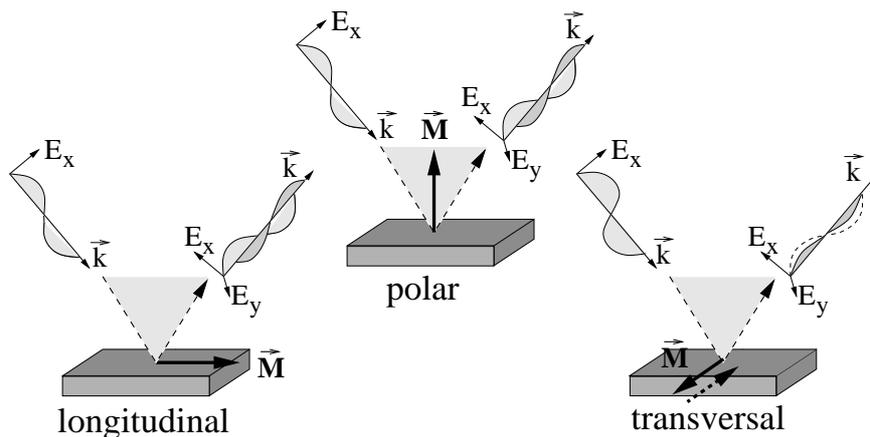
$$\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i)} = 2\pi \frac{d}{\lambda} \sqrt{\hat{\epsilon}_{\vec{a},\vec{b}}^{(i)}} \quad \text{mit } i = 1, \dots, N - 1. \quad (2.38)$$

Hierbei sei  $N$  die Anzahl der Grenzschichten. Mithilfe Gleichung 2.35 und 2.36 lässt sich  $r_{\vec{a}}$  und  $r_{\vec{b}}$  sowie die optische Anisotropie des 4-Lagensystems bestimmen.

$$\hat{r}_{\vec{a},\vec{b}} = \frac{(\hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(0)} + \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)} e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)}}) + (\hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(0)} \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)} + e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)}} \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(2)} e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(2)}})}{(1 + \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(0)} \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)} e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)}}) + (\hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)} + \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(0)} e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(1)}}) \hat{r}_{\vec{a},\vec{b}}^{(2)} e^{-i2\hat{\delta}_{\vec{a},\vec{b}}^{(2)}}}. \quad (2.39)$$

### 2.1.3 Magneto-optischer Kerr-Effekt

Die Änderung der Polarisation bzw. der Intensität von Licht bei Reflexion an einem magnetisierten Medium wird durch den magneto-optischen Kerr-Effekt (MOKE) beschrieben. Je nach Lage der Magnetisierungsrichtung zur Einfallsebene des Lichts wird zwischen drei grundlegenden Konfigurationen unterschieden (siehe Abb. 2.1). Komplexe Kerr-Winkel ergeben sich nur in



**Abbildung 2.1:** Die Kerr-Geometrien unterscheiden sich in der Magnetisierungsrichtung relativ zur Einfallsebene des Lichts. In der polaren Geometrie steht der Magnetisierungsvektor senkrecht zur Oberfläche, in longitudinaler bzw. transversaler Geometrie liegt die Richtung der Magnetisierung in der Ebene und parallel bzw. senkrecht zur Einfallsebene.

longitudinaler und polarer Geometrie. In transversaler Geometrie ändert sich lediglich die Reflektivität bei Umkehr des Magnetfeldes [4]. Die grundlegenden Zusammenhänge sollen hier für den einfachsten Fall, den polaren Kerr-Effekt, veranschaulicht werden.

Der Kerr-Effekt im Speziellen ist beobachtbar, wenn eine linear polarisierte Welle an einer magnetisierten Oberfläche reflektiert wird. Das reflektierte Licht ist nun elliptisch polarisiert und die Polarisationsachse erfährt eine Drehung um den Kerr-Winkel  $\theta_K$  gegenüber der Ausgangspolarisationsebene. Der Tangens des Verhältnisses kleiner zu großen Halbachse der Ellipse wird auch als Kerr-Elliptizität  $\eta_K$  bezeichnet. Anschaulich lässt sich die Drehung der Polarisationsachse dadurch erklären, dass sich das linear polarisierte Licht aus phasengleichen links-

und rechtszirkular polarisierten Anteilen gleicher Amplitude zusammensetzt und dass sich bei der Reflexion am Material aufgrund der unterschiedlichen Brechungsindizes für die verschiedenen Polarisationsarten unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten ergeben. Daraus resultiert eine Phasenverschiebung zwischen links- und rechtszirkular polarisiertem Licht. Will man die Größen  $\theta_K$  und  $\eta_K$  mit der optische Theorie bzw. der dielektrischen Funktion in Zusammenhang bringen, müssen die Reflexionskoeffizienten von links- und rechtszirkular polarisiertem Licht betrachtet werden. Unter der Annahme des senkrechten Lichteinfalls sind die Reflexionskoeffizienten wie folgt definiert:

$$\hat{r}_{\pm}(\omega) = \frac{\hat{n}_{\pm}(\omega) - 1}{\hat{n}_{\pm}(\omega) + 1}. \quad (2.40)$$

Gleichung 2.21 lässt sich durch eine Entwicklung unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung wie folgt umformen:

$$\hat{n}_{\pm} = \sqrt{\hat{\epsilon} \pm \hat{\epsilon}\hat{Q}} \approx \sqrt{\hat{\epsilon}} \left( 1 \pm \frac{\hat{Q}}{2} \right) \quad (2.41)$$

Das Licht breitet sich im Medium in z-Richtung aus und der Feldvektor von  $\mathbf{E}$  ist in x-Richtung polarisiert. Somit nimmt der Vektor der einfallenden Strahlung  $\mathbf{E}^{in}$  bzw. der Vektor des reflektierten Strahls  $\mathbf{E}^{out}$  folgende Form an:

$$\mathbf{E}^{in} = \begin{pmatrix} \hat{E}_x^{in} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{E}^{out} = \begin{pmatrix} \hat{E}_x^{out} \\ \hat{E}_y^{out} \end{pmatrix}$$

In kartesischen Koordinaten erhält man für  $\mathbf{E}^{out}$

$$\mathbf{E}^{out} = \begin{pmatrix} \hat{E}_x^{out} \\ \hat{E}_y^{out} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{r}_+ & 0 \\ 0 & \hat{r}_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_x^{in} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{out} = \begin{pmatrix} \hat{E}_x^{out} \\ \hat{E}_y^{out} \end{pmatrix} &= \frac{1}{(\hat{n}_+ + 1)(\hat{n}_- + 1)} \begin{pmatrix} \hat{n}_+ \hat{n}_- - 1 \\ \hat{n}_+ - \hat{n}_- \end{pmatrix} \hat{E}_x^{in} \\ &\approx \frac{1}{(\sqrt{\hat{\epsilon}} + 1)^2} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon} - 1 \\ -i\sqrt{\hat{\epsilon}}\hat{Q} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Unter der Voraussetzung kleiner Kerr-Winkel ( $\tan \hat{\Theta}_K \approx \hat{\Theta}_K$ ) und  $\hat{\Theta}_K = \hat{E}_y^{out} / \hat{E}_x^{out}$  ergibt sich für den komplexen Kerr Winkel  $\hat{\Theta}_K$ :

$$\hat{\Theta}_K = \frac{i(\hat{r}_+ - \hat{r}_-)}{\hat{r}_+ + \hat{r}_-} \approx \frac{i\sqrt{\hat{\epsilon}}\hat{Q}}{1 - \hat{\epsilon}} \quad (2.44)$$

### Dünne magnetisierte Filme

Den theoretischen Ansatz zur Bestimmung des magneto-optischen Kerr-Effekts von dünnen Filmen liefern die Arbeiten von Zak et al. [5–7]. Diese Arbeiten beschäftigen sich mit der Magneto-optik von Schichtsystemen im Allgemeinen, die dort hergeleiteten Gleichungen dienen zur Berechnung des magneto-optischen Kerr-Effekts für eine beliebige Magnetisierungsrichtung.

Im Rahmen dieser Arbeit wird dieser Algorithmus wesentlich vereinfacht. Es wird nur der polare Kerr-Effekt bei Lichteinfall parallel zur Probennormalen betrachtet. Wie aus der Darstellung des dielektrischen Tensors in Polarkoordinaten (Gleichung 2.21) ersichtlich, sind in diesem Fall zirkular polarisierte Lichtwellen Eigenmoden der Wechselwirkung von Licht mit magnetisierten Medien. Das bedeutet, dass die Reflektivitäten für rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht voneinander unabhängig sind und getrennt berechnet werden können. So zeigt Višňovský [8], dass sich für ein Einschichtsystem aus einem zu dem Zak Algorithmus äquivalenten 4x4 Matrix-System die Airy-Formel ableitet:

$$\hat{r}_{\pm} = \frac{\hat{r}_{\pm}^{(01)} + \hat{r}_{\pm}^{(12)} e^{i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}}{1 + \hat{r}_{\pm}^{(01)} \hat{r}_{\pm}^{(12)} e^{i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}}. \quad (2.45)$$

Die Brechungsindizes  $\hat{n}_{\pm}$  für rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht sind in Gleichung 2.41 angegeben. Eine Näherung ist hier nicht nötig:

$$\hat{n}_{\pm} = \sqrt{\hat{\epsilon} \pm \hat{\epsilon} \hat{Q}} \quad (2.46)$$

Für nichtmagnetisierte Medien wird  $\hat{Q}$  zu Null und es folgt  $\hat{\epsilon} = \hat{n}^2$ . Die Reflektivität an den einzelnen Grenzschichten bestimmt sich wiederum äquivalent zu Gleichung 2.27:

$$\hat{r}_{\pm}^{(i)} = \frac{\hat{n}_{\pm}^{(i)} - \hat{n}_{\pm}^{(i+1)}}{\hat{n}_{\pm}^{(i)} + \hat{n}_{\pm}^{(i+1)}} \quad \text{mit } i = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (2.47)$$

Die hierzu gehörigen Phasendifferenzen sind durch Gleichung 2.30 gegeben

$$\hat{\delta}_{\pm}^{(i)} = 2\pi \frac{d}{\lambda} \hat{n}_{\pm}^{(i)} \quad \text{mit } i = 1, \dots, N - 1. \quad (2.48)$$

Hierbei sei N die Anzahl der Grenzschichten. Aus der Analogie zur Airy-Formel lässt sich direkt die Berechnung eines 4-Lagensystems nach Gleichung 2.35 ableiten und die Kerr-Rotation nach Gleichung 2.44 bestimmen.

$$\hat{r}_{\pm} = \frac{(\hat{r}_{\pm}^{(0)} + \hat{r}_{\pm}^{(1)} e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}) + (\hat{r}_{\pm}^{(0)} \hat{r}_{\pm}^{(1)} + e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}) \hat{r}_{\pm}^{(2)} e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(2)}}}{(1 + \hat{r}_{\pm}^{(0)} \hat{r}_{\pm}^{(1)} e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}) + (\hat{r}_{\pm}^{(1)} + \hat{r}_{\pm}^{(0)} e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(1)}}) \hat{r}_{\pm}^{(2)} e^{-i2\hat{\delta}_{\pm}^{(2)}}}. \quad (2.49)$$

## 2.2 Ferromagnetismus

Für Festkörper ist Ferromagnetismus eher die Ausnahme. Vergleicht man atomaren Magnetismus mit Ferromagnetismus im Festkörper, so sieht man, dass die parallele Ausrichtung der magnetischen Momente im Allgemeinen energetisch ungünstiger ist. Durch eine parallele Ausrichtung

wird zwar Austauschenergie gewonnen, jedoch kann die kinetische Energie aufgrund der Delokalisierung der Valenzelektronen stark ansteigen. Dies lässt sich am besten am Modell des freien Elektronengas erläutern [9]. Die direkte Austauschwechselwirkung ist charakterisiert durch die Kopplung lokalisierter magnetischer Momente  $\vec{s}_{i,j}$  an den Orten  $i, j$  durch überlappende Elektronenwellenfunktionen. Um die so genannte Austauschenergie zu beschreiben, führt man den Heisenbergterm

$$E_{ex} = \sum J_{i,j} \vec{s}_i \vec{s}_j \quad (2.50)$$

ein. Betrachtet man die Austauschwechselwirkung von delokalisierten Elektronen in Metallen, so ist diese verursacht durch Coulombwechselwirkung und dem Pauliprinzip. Dies wird auch als itinerante Austauschwechselwirkung bezeichnet [10]. Grundlegend hierfür ist die spinaufgelöste Dichtefunktionaltheorie. Resultierend ergeben sich energetisch verschobene Zustandsdichten  $n_{\pm}(E)$  und Bandaufspaltungen für Elektronen unterschiedlichen Spins. Eine Näherung dieser Theorie beschreibt das Stoner-Modell, es liefert ein hinreichendes Kriterium für Ferromagnetismus (Stoner-Kriterium)[9]:

$$I \cdot n(E_F) > 1 \quad (2.51)$$

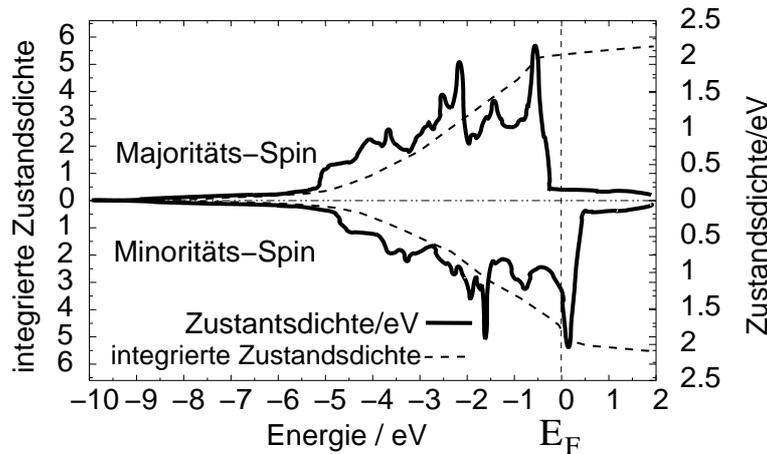
Dieser konstante Term setzt sich aus dem Produkt der Magnetisierung  $M$  mit dem Austauschintegral  $I$  zusammen. Neben einem großen Wert von  $I$  wird eine hohe Zustandsdichte der Elektronen nahe der Fermikante benötigt.

### 2.2.1 3d-Übergangsmetalle

Nickel, Eisen und Cobalt bilden die Gruppe der ferromagnetischen 3-d Übergangsmetalle. Das Charakteristische an 3-d Übergangsmetalle ist, dass ihre d-Bänder nahe der Fermikante, also im Bereich der Leitungselektronen, angesiedelt sind. Aufgrund dessen ist die Zustandsdichte an der Fermikante durch die d-Band Elektronen bestimmt. Erfolgt eine Aufspaltung in energetisch verschobene Bänder verschiedenen Spins, so resultiert daraus eine Besetzung zum Teil höherer Zustände in den Teilbändern. Aufgrund der vielen Zustände in den d-Bändern ist nur ein geringer Energieaufwand nötig und der Einfluss der Austauschwechselwirkung dominiert. Außerdem entsteht durch die energetische Verschiebung von d-Band Elektronen mit Minoritätsspin über das Fermi-niveau ein Ungleichgewicht in der Spinverteilung, so dass ein Gesamtmoment resultiert. Unter der Annahme, dass nur die Spins der Elektronen und nicht ihre Bahnmomente den Magnetismus verursachen, kann man mittels der Dichtefunktionaltheorie die spinaufgelöste Zustandsdichte (Abbildung 2.2) und somit auch das magnetische Gesamtmoment bestimmen [9].

### 2.2.2 Ferromagnetische Filme

Wird die Symmetrie an Oberflächen gebrochen, kommt es zu einer Reduzierung der nächsten Nachbarn auf dem Atomgitter und dies führt in der Regel zu einer Zunahme des magnetischen Moments pro Atom. Dies ist wiederum abhängig von der Orientierung der Oberflächen. Betrachtet man zum Beispiel die Ni(110) Oberfläche, so findet man ein größeres Moment als für die niedrig indizierten Oberflächen [12], aufgrund der größeren Abstände zu den nächsten Nachbaratomen. Gewöhnlich nehmen die magnetischen Momente schon nach 2 Monolagen ihren Volumenwert an.



**Abbildung 2.2:** Spinaufgelöste Zustandsdichte von Nickel. Die durchgezogene Linie entspricht der Zustandsdichte / eV. Die über die Energie integrierte Zustandsdichte wird durch gestrichelte Linien dargestellt. Bis zum Fermi-niveau  $E_F$  sind alle Zustände besetzt. Es besteht ein Ungleichgewicht zwischen Elektronen ungleichen Spins. Das magnetische Gesamtmoment ergibt sich aus der Differenz von Elektronen mit Majoritäts- und Minoritätsspin (Quelle: Moruzzi et al. [11]).

Wichtig für diese Arbeit ist der Einfluss von Adsorbaten. Adsorbate modifizieren unter anderem die Anzahl der Leitungselektronen an der Oberfläche durch Hybridisierung der d-Bänder. Der daraus resultierende Einfluss auf die magnetischen Eigenschaften von dünnen Filmen ergibt jedoch kein einheitliches Bild. Adsorbate können zu einer Vergrößerung wie auch zu einer Abnahme der magnetischen Momente führen. Schon eine marginale Wasserstoffkontamination auf Fe/Cu(100) führt zu einem etwa 20% größeren magnetischen Moment [13]. Bringt man geringe Mengen an Sauerstoffatomen auf Nickelfilme auf, wird eine Abnahme der Magnetisierung beobachtet [14].

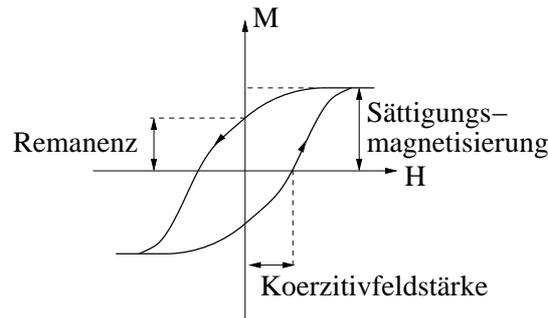
Prinzipiell lässt sich die magnetische Anisotropie in Festkörpern als die durch die Form und Kristallsymmetrie verursachte Richtungsabhängigkeit der freien Energie des Systems beschreiben. Weiterhin unterscheidet man zwischen leichter und schwerer Richtung der Magnetisierung bzw. kleinster und größter Energie. Die Differenz der Magnetisierungsarbeit zwischen leichter und schwerer Richtung wird auch als magnetische Anisotropieenergie bezeichnet. Bei konstanter Temperatur ist sie gleich der Differenz der freien Energie des Systems. Die magnetische Anisotropie wird sowohl durch extrinsische (Form) als auch durch intrinsische (zum Beispiel Kristallsymmetrie) Eigenschaften des ferromagnetischen Materials bestimmt. Aus diesem Grund differenziert man zwischen Formanisotropie und magnetokristalliner Anisotropie.

Die so genannte Formanisotropie wird durch die langreichweitige Dipol-Dipol Wechselwirkung verursacht, es ist also ein mit  $\frac{1}{r^3}$  abfallender Effekt [15]. Diese Wechselwirkung wirkt sich bis auf die makroskopische Ebene aus. Sie führt zu einer Geometrieabhängigkeit der magnetischen Anisotropie. Um Polbildung zu reduzieren, bilden sich im Volumen häufig Domänen gegensätzlicher Magnetisierung aus. Dünne Filme können in erster Näherung als eine unendlich ausgedehnte Ebene gesehen werden. So existiert nur ein Streufeld, das senkrecht zur Oberfläche ausgerichtet ist. Daraus folgt, dass bei dünnen Filmen durch die Formanisotropie stets eine in-plane (in der Filmebene) Magnetisierung bevorzugt wird.

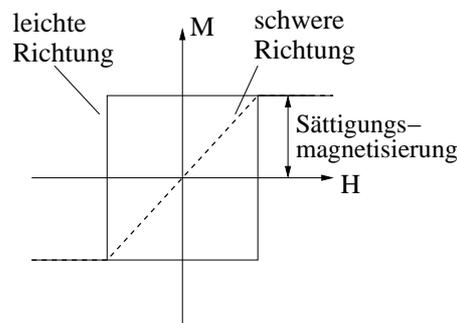
Die magnetokristalline Anisotropie hingegen wird durch Spin-Bahn Wechselwirkung verursacht. Bei den d-Band Elektronen der Übergangsmetalle findet nur ein sehr schwache Abschirmung statt. Dadurch wird der zugehörige Bahndrehimpuls durch das Kristallfeld stark unterdrückt (“quenching”). In diesem Fall wäre die Magnetisierung allein durch die Spins erzeugt, sie wäre also isotrop. Aber die Spin-Bahn Wechselwirkung verursacht außerdem noch einen nicht verschwindenden Anteil der richtungsabhängigen Bahnmomente zum magnetischen Gesamtmoment [16].

Die magnetische Anisotropie ist von einigen Parametern abhängig, wie zum Beispiel von der Temperatur [17], der Schichtdicke [15] oder von dem Anlegen eines externen Magnetfeldes [18], die jeweils zu einer Richtungsänderung der leichten Achse führen können. Im Falle dünner Filme verhält sich die magnetische Anisotropie gänzlich anders als im Volumen. Zieht man die Grenz- und Oberflächen mit in die Betrachtungen ein, führen diese zu einer Oberflächen- oder Grenzflächenanisotropie [19]. Sie entsteht durch die Änderung der Bindungsverhältnisse an der Grenzfläche zweier verschiedener Medien. Anders ausgedrückt, kann die Grenzfläche auch als zweidimensionale Symmetriebrechung gesehen werden. Ein Beispiel für den eindimensionalen Fall sind Stufenkanten. Beide Effekte führen zu einer Modifikation der Anisotropie. Untersucht man dünne Filme auf Substraten, so beobachtet man eine elastische Verzerrung des Kristallgitters, verursacht durch Gitterfehlpassung zwischen Film und Substrat. Diese Verzerrung führt zu einem magnetoelastischen Energiebeitrag, der abhängig von der Magnetisierungsrichtung ist. Aus der Abhängigkeit der Gesamtenergie von der Magnetisierungsrichtung resultiert auch das Auftreten von inverser Magnetostriktion, eine Magnetisierungsänderung verursacht eine Deformation bzw. eine Veränderung der Verspannung. Oberflächen- und Verspannungsbeiträge können bei dünnen Filmen zu einem Auftreten von remanenter out-of-plane (aus der Filmebene herauszeigende) Magnetisierung führen. Oft ist dann die leichte Achse der Magnetisierung parallel zur Filmmnormale orientiert.

Trägt man die Magnetisierung über das angelegte äußere Magnetfeld auf, so erhält man Magnetisierungskurven. Charakteristisch für diese Kurven sind die Remanenz, das Koerzitivfeld und die Sättigungsmagnetisierung (Abb. 2.3). Stimmt die Remanenz mit der Sättigungsmagnetisierung überein, ist der Ferromagnet in einem eindomänigen, vollständig in eine Richtung magnetisierten Zustand. Diese Kurven zeigen deutlich die anisotrope Natur von ferromagnetischen Systemen. Nur bei anisotropen Proben tritt Hysterese auf. Im Grunde genommen heißt das, es existiert eine temporäre Magnetisierung, die maximal bis zu einer Koerzitivfeldstärke  $H_c$  stabil bleibt (bei angelegtem Gegenfeld). Das Beispiel in Abb. 2.4 stellt eine entsprechende Magnetisierungskurve einer Probe uniaxialer Anisotropie in leichter und schwerer Richtung dar. Hierbei muss man annehmen, dass im Falle einer Ummagnetisierung eine kohärente Drehung aller Spins auftritt [20]. Wirkt ein Drehmoment auf die magnetischen Momente, so entsteht durch reversible Drehung der Magnetisierung in Richtung des Feldes die Kurve in schwerer Richtung. Die zur Sättigung in schwerer Richtung benötigte Feldstärke ist identisch mit der Koerzitivfeldstärke der Schleife in leichter Richtung. Betrachtet man nun Kurven von dünnen Filmen in der leichten Richtung, so unterscheiden sie sich häufig von Volumenproben durch wesentlich kleinere Koerzitivfeldstärken. Hier erfolgt der Ummagnetisierungsvorgang bei entsprechend kleinen Feldern hauptsächlich durch Domänenbildung und nicht durch kohärente Drehung. Es nukleieren im Gegenfeld Domänen entgegengesetzter Magnetisierung, die relativ zu den ursprünglichen Domänen durch Domänenwandverschiebung wachsen. Je einfacher diese Verschiebung erfolgen kann, um



**Abbildung 2.3:** Schematische Darstellung einer Magnetisierungskurve mit Hysterese. Aufgetragen wird die Magnetisierung über dem äußeren Magnetfeld. Die charakteristischen Größen sind die Koerzitivfeldstärke (die äußere Feldstärke, bei der die Magnetisierung 0 ist), die Remanenz (Magnetisierung ohne äußeres Feld) und die Sättigungsmagnetisierung.



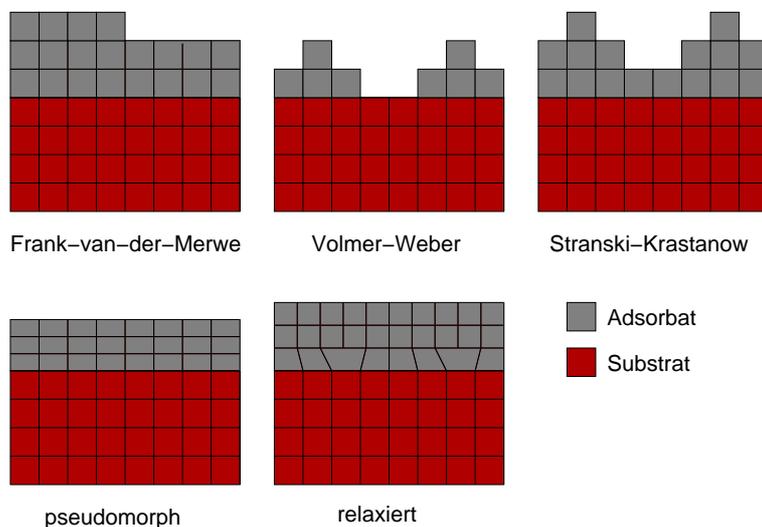
**Abbildung 2.4:** Schematische Zeichnung der Magnetisierungskurven bei uniaxialer Anisotropie in leichter und schwerer Richtung. Die durchgezogene Linie zeigt einen Ummagnetisierungsvorgang in leichter, die gestrichelte Linie in schwerer Richtung. Die Koerzitivfeldstärke in leichter Richtung entspricht dem zur Sättigung benötigten Feld in schwerer Richtung (Stoner-Wohlfarth Modell).

so geringer ist die Koerzitivfeldstärke. Das heißt nichts anderes, als dass die Kurven rechteckiger und schmaler werden. Der Ummagnetisierungsprozess wird im Wesentlichen von Fehlstellen in der Schicht, welche die Domänenwandverschiebung behindern, bestimmt. Aber auch lokale Unterschiede in der Dicke und Rauigkeit des Filmes spielen hierbei eine Rolle. Ebenso die Temperatur, da auch die Domänenbildung (thermische Aktivierung) und die Geschwindigkeit der Domänenwandverschiebung während des Ummagnetisierungsprozesses temperaturabhängig sind.

## 2.3 Wachstum epitaktischer Filme

Unter epitaktischem Wachstum versteht man das geordnete Wachstum eines Adsorbates auf einem einkristallinen Substrat. Hierbei wird die Gitterordnung des Substrates auf die aufwachsende Schicht übertragen. Bestehen Substrat und Adsorbat aus unterschiedlichen Elementen, so

bezeichnet man das Wachstum als Heteroepitaxie. Abbildung 2.5 (oben) zeigt schematisch die bei der Heteroepitaxie beobachtbaren Wachstumsmodi. Das Wachstum wird entscheidend von



**Abbildung 2.5:** Oben: Schematische Darstellung von Wachstumsmodi des epitaktischen Wachstums. Unten: Schematische Darstellung einer pseudomorph verspannten Schicht vor und nach der Relaxierung.

der Oberflächenenthalpie des Substrates  $\sigma_{os}$  und des Adsorbates  $\sigma_{oa}$  sowie von der Grenzflächenenthalpie  $\sigma_g$  beeinflusst. Wächst das Adsorbat lagenweise (Lage für Lage) auf das Substrat auf, spricht man von Frank-van-der-Merwe Wachstum [21–23] ( $\sigma_{os} > \sigma_g + \sigma_{oa}$ ). Bildet das Adsorbat Inseln auf dem Substrat, so liegt Vollmer-Weber Wachstum vor [24] ( $\sigma_{os} < \sigma_g + \sigma_{oa}$ ). Eine Mischform von Frank-van-der-Merwe und Vollmer-Weber Wachstum wird Stranski-Krastanow Wachstum genannt [25]. Hierbei bilden sich nach einer oder mehreren bedeckenden Lagen im Frank-van-der-Merwe Wachstum Inseln aus.

Die Grenzflächenenthalpie  $\sigma_g$  wird wesentlich durch die Verspannung an der Grenzfläche beeinflusst. Bestehen Substrat und Film aus verschiedenen Elementen, haben die von ihnen gebildeten Kristalle bei nicht angepasstem Wachstum fast immer unterschiedliche Gitterkonstanten. Durch das gitterangepasste Wachstum wird eine gemeinsame, laterale Gitterkonstante erzwungen. Diese Gitterfehlanpassung  $f$  (Misfit) ist proportional zur potentiellen Energie der Grenzfläche und ist wie folgt definiert:

$$f = \frac{a_s - a_a}{a_a}, \quad (2.52)$$

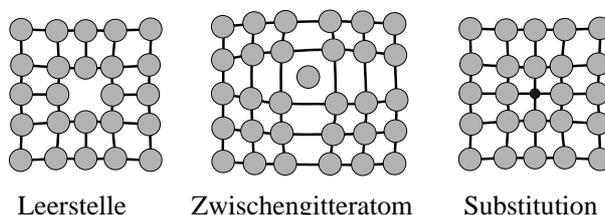
wobei  $a_s$  und  $a_a$  die Gitterkonstanten von Substrat und Film entlang der Oberflächenrichtung sind. Die Grenzflächenenthalpie  $\sigma_g$  wird wesentlich durch die Gitterfehlanpassung  $f$  bestimmt. So erklärt sich das Stranski-Krastanow Wachstum durch einen starken Anstieg der Verspannung während der Ausbildung der ersten Adsorbatlagen.

Liegt Frank-van-der-Merwe Wachstum bei nicht zu vernachlässigender Gitterfehlanpassung vor, so spricht man von pseudomorphem Wachstum. Hierbei wird die Einheitszelle des Adsorbatfilmes tetragonal verzerrt. Ist die Gitterkonstante des Adsorbates kleiner als die des Substrats, wird die Einheitszelle des Adsorbates entlang der Grenzfläche gedehnt und senkrecht dazu ge-

staucht. Auch das Substrat erfährt eine tetragonale Verzerrung, jedoch ist diese aufgrund der Dicke des Substrates wesentlich geringer. Der Anstieg der Verspannung mit zunehmender Adsorbatschichtdicke muss nicht zwangsläufig zum Inselwachstum führen. Die Verspannung kann auch bei Erreichen einer kritischen Adsorbatschichtdicke durch die Ausbildung von Defekten und Versetzungen an der Grenzfläche (Adsorbat - Substrat) abgebaut werden. Der Adsorbatfilm relaxiert und die tetragonale Verzerrung wird vermindert oder aufgehoben. Dies ist bei den in dieser Arbeit untersuchten ferromagnetischen Filmen auf Cu(110)-(2×1)-O der Fall.

## 2.4 Verspannungen und Kristallversetzungen

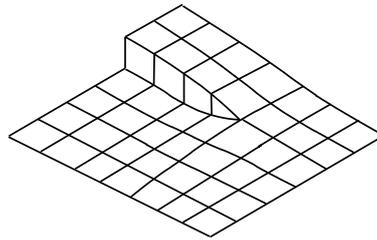
Neben der Gitterfehlانpassung beim epitaktischem Wachstum existiert noch eine Vielzahl weiterer Ursachen für Kristallverspannungen. Eine davon sind Fehlorderungen. Unter einer chemischen Fehlordnung versteht man die Störung des Kristallgitters durch Fremdatome (Kontamination). Diese Verunreinigungen werden oft bereits beim Kristallwachstum (z.B. Ziehen aus der Schmelze) eingebracht. Die Fremdatome können Gitteratome substituieren oder Zwischengitterplätze besetzen. Strukturelle Fehlorderungen werden nach ihrer Dimensionalität unterschieden. Nulldimensionale Störungen, auch Punktdefekte genannt, betreffen nur einzelne Atome, wie z.B. nicht besetzte reguläre Gitterplätze, sogenannte Leerstellen. Trotz der geringen Größe dieser Defekte kann sich die von ihnen ausgehende Störung über einen sehr großen Bereich des Kristallgitters bemerkbar machen. Durch die thermische Energie der Kristallatome sind Punkt-



**Abbildung 2.6:** Schematische Darstellung von Kristallstörungen durch Punktdefekte.

defekte auch schon bei Raumtemperatur unvermeidbar. Bei dieser Temperatur liegt die Dichte der Fehlstellen bei ca  $10^8$  pro  $\text{cm}^3$ . Speziell bei heteroepitaktisch gewachsenen Filmen kann die Interdiffusion von Film- bzw. Substratatom zu einer erheblichen Störung der Kristallstruktur führen.

Neben den Punktdefekten werden vor allem eindimensionale Defekte als Stufen- oder Schraubenversetzungen beobachtet. Diese Defekte sind meist durch mechanische Beanspruchung bzw. Verformung des Kristalls verursacht. Metall-Einkristalle reagieren auf äußeren Druck vorzugsweise mit der Ausbildung von Versetzungen in ihren Gleitebenen [26]. Die Gleitebenen sind die Ebenen des größten Lagenabstandes. Dabei ist die bevorzugte Richtung der Verschiebung parallel zu den kürzest möglichen Gittervektoren. Bei fcc Kristallen, wie Kupfer und Nickel, sind dies die  $\{111\}$  Ebenen mit einer bevorzugten Versetzung entlang der  $[110]$  Richtungen dieser Ebenen. Durch eine mosaikartige Verzahnung der Versetzungen härten die Kristalle mechanisch aus. Die Struktur von Kristalldefekten ist trotz dieser Symmetrie sehr komplex. Obwohl Gitterdefekte eines der ältesten Objekte der Festkörperforschung darstellen, sind diese auch im



**Abbildung 2.7:** Schematische Darstellung einer Kristallstörungen durch eine Schraubversetzung.

Falle von Kupfer-Einkristallen bis heute Gegenstand intensiver Diskussionen [27–31].

Der Einfluss von Verspannungen und Versetzungen in Metall-Einkristallen auf die optischen Übergänge bzw. auf die optische Anisotropie wurde bisher kaum untersucht. Untersuchungen an amorphem Kupfer zeigen eine deutliche Verspannungsabhängigkeit der optischen Anisotropie [32, 33]. Es finden sich jedoch etliche Arbeiten über den Einfluss auf Halbleiter-Kristalle [34–37]. Durch Verspannungen, Versetzungen und Punktdefekten findet immer eine Modifizierung der elektronischen Bandstruktur des Kristalles statt. Somit ist bei allen optisch anisotropen Kristalloberflächen eine Modifizierung der optischen Anisotropie zu erwarten, selbst wenn die Kristallstörung isotrop ist. Im Falle von nominal optisch isotropen Kristalloberflächen müssen die Kristallstörungen anisotrop bezüglich der untersuchten Kristallachsen sein, um eine optische Anisotropie zu bewirken. Auch das epitaktische Filmwachstum kann zu einer anisotropen Verspannung führen. So wurde gezeigt, dass die durch Gitterfehlpassung verursachte Verspannung von Co/Cu(110) eine uniaxiale Ausrichtung aufweist [38].

# Kapitel 3

## Untersuchungsmethoden und experimentelle Details

### 3.1 Reflexions Anisotropie Spektroskopie (RAS)

Durch RAS wird die Anisotropie der komplexen Reflektivität einer Oberfläche bestimmt. Bisher wurde RAS überwiegend auf dem Gebiet der Halbleiteroberflächenanalyse [39] und zur Charakterisierung bei Halbleiterwachstumsprozessen [40] angewandt. Seit einigen Jahren wird RAS auch für die Oberflächenanalyse von Metalloberflächen erfolgreich eingesetzt [41–44]. Für (110) Oberflächen von fcc Kristallen, wie z.B. Kupfer und Nickel, ist aus Symmetriegründen der Volumenbeitrag zur Gesamtreflektivität isotrop. Somit verbleibt als Quelle einer optischen Anisotropie nur die Oberfläche. Daraus resultiert, trotz der großen Eindringtiefe des Lichts (typischerweise  $> 10\text{nm}$ ), die besondere Oberflächensensitivität von RAS. So konnte z.B. der Einfluss von Oberflächenzuständen der Cu(110), Cu(110)-(2×1)-O und Ag(110) Oberflächen auf die Reflektivität durch RAS ermittelt werden [41–43]. Es können jedoch auch bei kubischen Kristallen Volumenanisotropien, z.B. durch mechanische Verspannungen, auftreten.

Gemessen wird die Differenz der komplexen Reflektivität bezüglich zweier zueinander senkrecht stehender Achsen der Oberfläche normiert auf die Gesamtreflektivität. In den hier gezeigten Spektren sind diese Achsen meist die  $[1\bar{1}0]$  und die  $[001]$  Richtung. Die Messgröße wird somit definiert als:

$$\frac{\Delta\hat{r}}{r} = 2 \frac{\hat{r}_{[1\bar{1}0]} - r_{[001]}}{\hat{r}_{[1\bar{1}0]} + \hat{r}_{[001]}} \quad (3.1)$$

Im Falle einer dünnen anisotropen Oberflächenschicht (Dicke  $d \ll \lambda$ ) auf einem optisch isotropen Substrat kann das RAS Signal mit der volumendielektrischen Funktion  $\hat{\epsilon}_b$  und der „Surface Dielectric Anisotropy“ ( $SDA = \Delta\hat{\epsilon} \cdot d$ ) verknüpft werden [45]:

$$\frac{\Delta\hat{r}}{\hat{r}} = \frac{-4\pi id}{\lambda} \frac{\Delta\hat{\epsilon}}{\epsilon_b - 1} \quad (3.2)$$

Wird jedoch eine Volumenanisotropie gemessen, so ist das RAS Signal mit der volumendielektrischen Anisotropie ( $\Delta\hat{\epsilon}_b$ ) verknüpft [45]:

$$\frac{\Delta\hat{r}}{\hat{r}} = \frac{\Delta\hat{\epsilon}_b}{(\hat{\epsilon}_b - 1)\sqrt{\hat{\epsilon}_b}} \quad (3.3)$$

Sind sowohl Oberflächenschicht als auch Kristallvolumen optisch anisotrop, so ist das gemessene RAS Signal in guter Näherung (kleine Anisotropien) die Summe der Anisotropien aus Gleichung 3.2 und 3.3 [45].

Abbildung 3.1 zeigt die Funktionsweise eines RAS Spektrometers. Linear polarisiertes Licht wird nahezu senkrecht zur Probenoberfläche ( $1.5^\circ - 3^\circ$ ) eingestrahlt und erfährt durch die unterschiedliche Reflektivität bezüglich der Achsen  $[1\bar{1}0]$  und  $[001]$  bei der Reflexion eine Veränderung des Polarisationszustandes. Im Allgemeinen liegt dann elliptisch polarisiertes Licht vor.

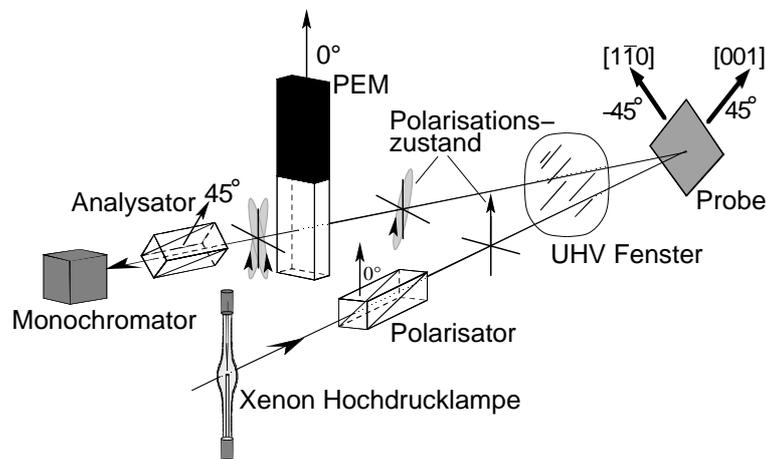


Abbildung 3.1: Prinzipbild eines RAS Spektrometers

Dieser Polarisationszustand kann durch zwei Größen beschrieben werden: Durch eine Verdrehung der Polarisationsrichtung um einen bestimmten Winkel (proportional zu dem Realteil von Ausdruck 3.1) und durch eine Elliptizität, definiert durch das Längenverhältnis der Ellipsenhauptachsen (proportional zu dem Imaginärteil von Ausdruck 3.1).

Die Analyse des elliptisch polarisierten Lichts erfolgt durch eine Kombination von einem photoelastischen Modulator (PEM) und einem Analysator. Beim PEM handelt es sich um einen Quarz oder  $CaF_2$  Kristall, der in mechanische Schwingungen versetzt wird. Durch die hierdurch induzierte zeitlich periodische Spannungsdoppelbrechung wird das durchtretende Licht phasenmoduliert. Der nachfolgende Analysator wandelt diese Phasenmodulation in eine Intensitätsmodulation um.

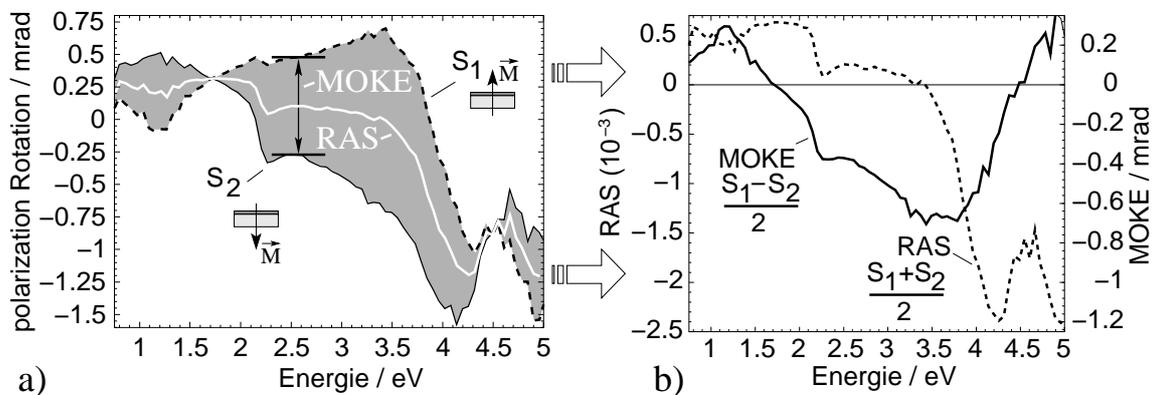
## 3.2 Magneto-optische Kerr Spektroskopie

Im Falle eines ferromagnetischen Films auf einem optisch anisotropen Substrat wird durch die hier verwendete Messapparatur die Summe von Kerr-Effekt (MOKE) und optischer Anisotropie gemessen. Prinzipiell existieren zwei experimentelle Methoden um MOKE- und RAS-Anteile voneinander zu trennen. Zum einen kann die Magnetisierungsrichtung des Filmes durch ein äußeres Feld gedreht werden. Dies führt zu einer Invertierung des MOKE-Anteils, während der RAS-Anteil konstant bleibt. Zum anderen kann die Probe um 90 Grad um die Probennormale gedreht werden, was zu einer Umkehrung des RAS-Anteils führt, der MOKE-Anteil wird dabei jedoch nicht beeinflusst. Zur Trennung von RAS und MOKE sind also zwei Messungen nötig, die sich entweder in der Magnetisierungsrichtung oder der Probenorientierung unterscheiden. In der Praxis ist eine Ummagnetisierung, also die erste Möglichkeit, sinnvoll, da es kaum möglich ist,

die Probe zu rotieren, ohne danach eine Neujustage des Spektrometers durchführen zu müssen. Es wurden somit folgende Messschritte angewandt, um RAS und MOKE Spektren zu ermitteln:

1. Kurzzeitiges Anlegen eines magnetischen Feldes senkrecht zur Probenoberfläche.
2. Messung eines Spektrums ( $S_1$ ).
3. Kurzzeitiges Anlegen eines magnetischen Feldes mit entgegengesetzter Richtung wie zuvor.
4. Messung eines weiteren Spektrums ( $S_2$ ).

Daraus ergibt sich das RAS Spektrum proportional zu  $S_1 + S_2$  und das MOKE Spektrum proportional zu  $S_1 - S_2$  (siehe Abb. 3.2). Für die Aufnahme von Wachstumstransienten wurde für



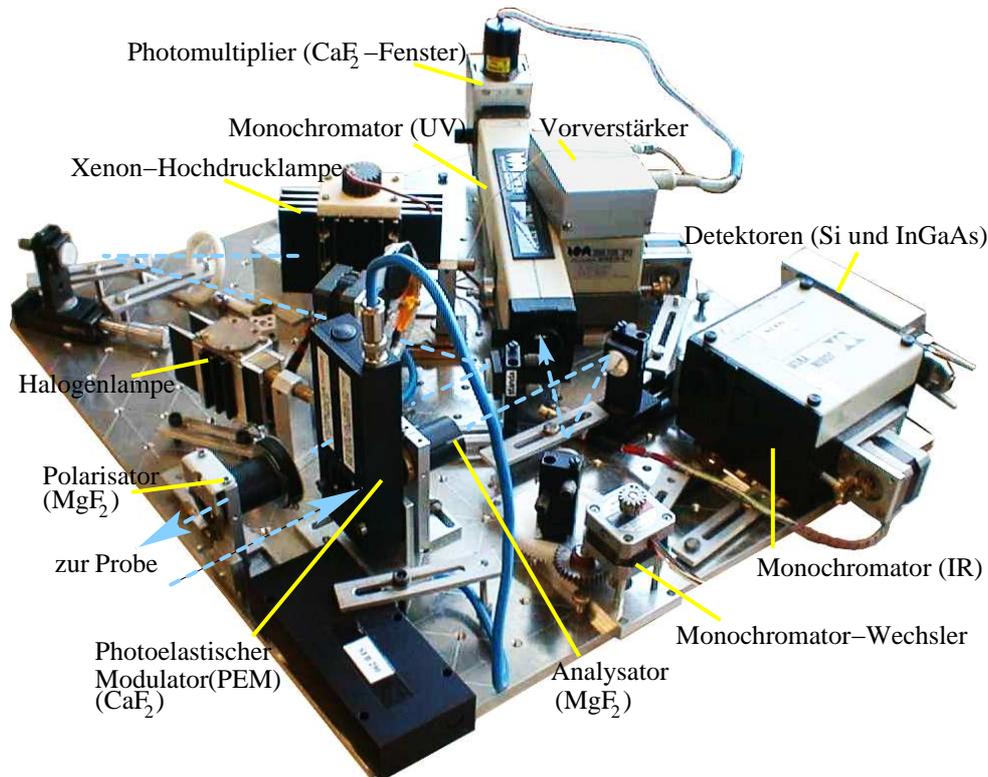
**Abbildung 3.2:** a) Änderung der Polarisation (Realteil) von 14 ML Ni auf Cu(110)-O, aufgenommen für zwei entgegengesetzte Magnetisierungsrichtungen  $\vec{M}$  des Films. RAS und MOKE Spektren sind durch eine weiße Kurve bzw. den grau unterlegten Bereich zwischen den gemessenen Spektren angedeutet. b) Die aus den Messungen ermittelten MOKE und RAS Spektren (RAS Signal von 0.001 entspricht 0.5 mrad).

jeden Messpunkt das obige Verfahren angewandt. Ebenso wurde durch die Messung und Auswertung von Hysteresekurven sichergestellt, dass das angelegte äußere magnetische Feld ausreichend stark für eine Ummagnetisierung des Filmes war. Diese Hysteresemessungen wurden bei einer Energie von 3 eV durchgeführt und zur Bestimmung der bevorzugten Magnetisierungsrichtung verwendet. Es ergaben sich, wie nach dem Stoner-Modell [46] zu erwarten, rechteckige Hysteresekurven bei “out-of-plane” Magnetisierung und diagonale Linien für “in-plane” Magnetisierung.

### 3.3 Experimentaufbau

Die Experimente wurden an drei verschiedenen UHV Apparaturen durchgeführt (A: AG-Richter - TU-Berlin, B: AG Baberschke - FU-Berlin, C: AG Osterwalder - Universität Zürich). Alle Anlagen haben eine Ionenätzkanone zum Ionenätzen, Sauerstoffeinlass, ein verspannungsarmes Fenster für RAS/MOKE Messungen sowie LEED. Der Basisdruck ist unterhalb von  $(1 \cdot 10^{-10})$  Torr. Apparatur A und B sind im Weiteren mit einem Elektronenstrahlverdampfer zum Aufbringen

der ferromagnetischen Filme, einem Eisenjoch mit Spule zum Anlegen eines Magnetfeldes und Auger-Elektronen Spektroskopie (AES) sowie STM ausgestattet. An diesen Apparaturen wurde Ni(110), Nickel und Kobalt auf Cu(110)-(2×1)-O und Cu(110) untersucht. An Apparatur C konnten außerdem ARUPS und Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (XPS) Messungen vorgenommen werden. Hier wurden die vizinalen Cu(111) Oberflächen untersucht.



**Abbildung 3.3:** RAS/MOKE Spektrometer. Die einzelnen Komponenten sind in der Darstellung benannt. Gestrichelte Linien zeigen den optischen Strahlengang. Der Spektralbereich erstreckt sich von 0.75 eV bis 6.5 eV. Im niederenergetischen Spektralbereich (0.75 eV - 3.28 eV) wird ein Infrarot-Monochromator (InGaAs: 0.75 eV - 1.3 eV, Si: 1.3 eV - 3.28 eV) benutzt. Der Wechsel zwischen den Monochromatoren erfolgt mittels eines motorangetriebenen justierbaren Spiegels.

An allen Apparaturen wurde das selbe RAS/MOKE Spektrometer eingesetzt (siehe Abb. 3.3). Der optische Aufbau dieses Spektrometers entspricht im Grundprinzip dem von Sato [47] bzw. Aspnes [48]. RAS/MOKE Spektren sowie MOKE Hysteresekurven können in einem Energiebereich von 0.75 eV bis 6.5 eV gemessen werden. Die Auswahl der Materialien der optischen Komponenten ( $CaF_2$  Polarisatoren und Photomultiplierfenster,  $MgF_2$  PEM) ermöglicht prinzipiell eine Messung bis 9 eV, jedoch begrenzt die Absorption des Lichts durch den in der Luft enthaltenen Sauerstoff die maximal erfassbare Photonenenergie auf 6.5 eV. Die Anordnung der Komponenten an der UHV Apparatur wurde so gewählt, dass sämtliche Schritte der Präparation und des Filmwachstums mit dem Spektrometer beobachtet bzw. überwacht werden konnten.

## 3.4 Probenpräparation und Charakterisierung

Die Nickel- und Kupfer-Einkristalle wurden von einem kommerziellen Hersteller fertig orientiert und poliert geliefert. Alle Kristalle sind zylinderförmig, mit einem Durchmesser von 8 bis 12 mm und einer Dicke von 3 bis 5 mm. Diese Kristalle wurden im Czochralski Verfahren aus der Schmelze gezogen und entsprechend der gewünschten Oberflächenorientierung geschnitten. Die Winkelunsicherheit der Oberflächenorientierung beträgt  $\pm 0.1^\circ$ . Der quadratische Mittelwert (RMS) der Oberflächenrauigkeit der gelieferten Kristalle ist kleiner  $0.03 \mu\text{m}$ .

Die Kristalle wurden von uns im UHV durch mehrere (20 -30) Präparationszyklen, bestehend aus Ionenätzen und anschließendes Tempern, weiterbehandelt. Beim Ionenätzen werden die Oberflächen mit  $\text{Ar}^+$  oder  $\text{Ne}^+$  Ionen beschossen. Die gesamte UHV Kammer wird hierfür mit dem Edelgas bis zu einem Partialdruck von  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar gefüllt, die Atome an einem Wolframfilament ionisiert und in Richtung der Probenoberfläche beschleunigt. Für die Kupferkristalle erfolgte dies mit Argon bei Raumtemperatur für 10 bis 20 Minuten mit einer kinetischen Energie von 1 keV. Der Nickelkristall wurde mit Neon 30 Minuten mit einer kinetischen Energie von 1 keV ionengeätzt. Das Tempern erfolgte durch eine in den Probenhalter eingebaute Widerstandsheizung. Die Probe wird hierdurch erwärmt und für eine bestimmte Zeitspanne auf einer konstanten Temperatur gehalten. Für die Kupferkristalle war dies 10 Minuten bei 850 K und für Nickel 10 Minuten bei 970 K.

Nach der Präparation zeigten alle Kristalle auf der gesamten Oberfläche klare  $1 \times 1$  LEED (Beugung niederenergetischer Elektronen) Reflexe mit geringer Hintergrundintensität. Bei den vizinalen Kristallen war das stufenbedingte Aufspalten der  $1 \times 1$  LEED Reflexe klar erkennbar. Mit AES (Cu(110), Ni(110)) bzw. XPS (vizinale Cu Kristalle) konnte keine Verunreinigung der Oberflächen mit Fremdatomen nachgewiesen werden.

Die Bildung der Cu(110)-(2 $\times$ 1)-O Rekonstruktion erfolgte durch Einlass von molekularem Sauerstoff in die UHV Kammer. Es wurden 10 Langmuir (1 Langmuir =  $1 \cdot 10^{-6}$  Torr·s) Sauerstoff aufgebracht [49, 50]. Das LEED Beugungsbild von Cu(110)-O zeigte eine klare 2 $\times$ 1 Rekonstruktion. RAS Messungen von der reinen Cu(110) und der Cu(110)-(2 $\times$ 1)-O Oberfläche wurden neben den oben genannten Methoden wie LEED und AES zur Charakterisierung der Oberflächenbeschaffenheit herangezogen. Die bekannte Temperaturverschiebung der Cu(110) bzw. Cu(110)-(2 $\times$ 1)-O RAS Strukturen wurde zur Bestimmung der Probertemperatur benutzt [51].

### 3.4.1 Aufbringen von Kobalt und Nickel

Ni und Co Filme wurden auf Cu(110) und Cu(110)-(2 $\times$ 1)-O bei Raumtemperatur mit einer Wachstumsrate von 0.25 - 0.3 Monolagen pro Minute aufgebracht. Während des Wachstums konnte ein Restgasdruck kleiner  $6 \cdot 10^{-10}$  mbar aufrechterhalten werden. Der Wachstumsprozess wurde mit dem Spektrometer bei einer Energie von 2.1 eV (Transiente) beobachtet. Zur Messung von Spektren bzw. Hysteresekurven wurde das Wachstum mehrmals für ca. 5 Minuten unterbrochen. Die Schichtdicke der Filme wurde bis zu 15 Monolagen nach Abschluss der Wachstumsexperimente mittels AES bestimmt. Hierbei wurde die Auger Peak Intensitäten von Kupfer und Kobalt verglichen. Der Vergleich der während des Wachstums aufgenommenen RAS Transienten

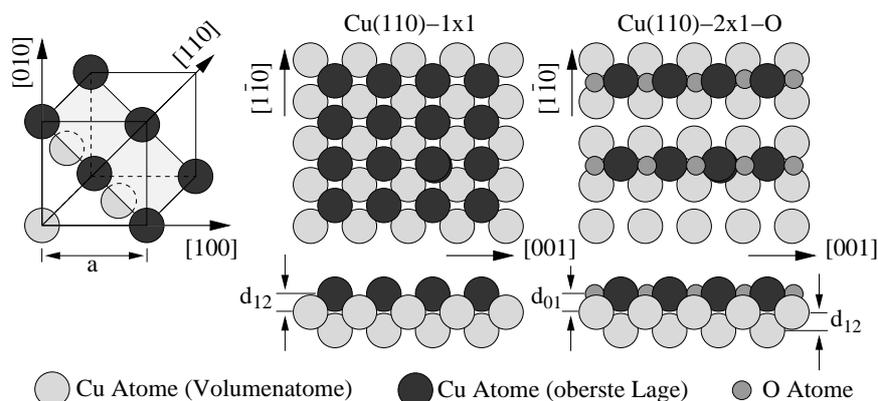
mit den durch AES ermittelten Schichtdicken ermöglichte die Bestimmung der Schichtdicke von dickeren Filmen. Hier wurde durch die RAS Transiente des Wachstums der ersten 10 Monolagen die Wachstumsrate bestimmt und unter der Annahme, dass diese konstant ist, über die Aufdampfzeit die Schichtdicke ermittelt.

Zur Verbesserung der Schichtqualität wurde die erste Monolage von Kobalt auf Cu(110)-(2×1)-O in einer Sauerstoffatmosphäre von  $\approx 5 \cdot 10^{-9}$  mbar aufgebracht [52].

# Kapitel 4

## Optische Anisotropie von Kupfer-Einkristallen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen. Hierbei werden die Oberflächen von Cu(110), Cu(111), Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) behandelt. Zunächst wird ein Überblick über die bekannten Veröffentlichungen zur optischen Anisotropie der reinen Cu(110) Oberfläche gegeben. In den bisherigen Veröffentlichungen wird davon ausgegangen, dass alle Beiträge zur optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen direkt oder indirekt mit der Oberfläche verknüpft sind. Direkte Beiträge stammen hierbei z.B. von Oberflächenzuständen bzw. -resonanzen sowie von einer Relaxierung oder Rekonstruktion der Oberfläche. Indirekte Beiträge hingegen entstehen durch eine Modifikation der elektronischen Bandstruktur in der Nähe der Oberfläche allein aufgrund der Existenz der Oberfläche. Allgemein wird angenommen, dass direkte Beiträge an der Oberfläche lokalisiert sind und indirekte Beiträge der oberflächennahen Region entstammen. Anhand der hier durchgeführten Experimente soll der Versuch einer Zuordnung von Oberflächeneigenschaften und daraus resultierender optischer Anisotropie erfolgen. Die Untersuchungen zeigen jedoch auch, dass einige Beiträge zur optischen Anisotropie unabhängig von der Oberflächenbeschaffenheit sind, was wiederum zu der Vermutung führt, dass diese Beiträge nicht an der Oberfläche oder in oberflächennahen Bereichen lokalisiert sind. Für ein Verständnis der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen ist es somit unumgänglich, mögliche Volumenbeiträge zu identifizieren und zu charakterisieren. Optische Spektroskopie an Metallen im sichtbaren und ultravioletten Bereich kann Eigenschaften des Kristallvolumens nur in Bereichen der Eindringtiefe des Lichtes detektieren. Die übliche Methode zum Nachweis von Volumenanisotropien, Absorptionsmessungen, ist nicht durchführbar. Für Kupfer im gewählten Spektralbereich beträgt die Eindringtiefe des Lichtes 9 nm - 15 nm. Das entspricht 70 - 120 Cu(110) Monolagen. Für den Oberflächenbereich wird allgemein eine Dicke von 0.5 nm - 1 nm angenommen und Bereiche ab 2.7 nm von der Oberfläche entfernt, können bereits als volumenartig bezeichnet werden [53]. Somit kann optische Spektroskopie an Metallen trotz der geringen Eindringtiefe des Lichts Eigenschaften des Kristallvolumens detektieren. Die in diesem Kapitel erarbeitete Zuordnung der einzelnen Beiträge zur Oberfläche, zur oberflächennahen Region oder zum Kristallvolumen bleibt dennoch spekulativ, kann jedoch Anhaltspunkte für zukünftige theoretische Untersuchungen liefern.



**Abbildung 4.1:** Links: Lage der (110) Oberfläche in der fcc-Einheitszelle. Hierbei bezeichnet  $a$  die Gitterkonstante. Mitte und rechts: Schematische Darstellung der Atomanordnung der Cu(110)-(1×1) und Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche. Gezeigt ist die Drauf- (oben) und Seitenansicht (unten) der jeweiligen Oberfläche. ( $d_{01}$ ,  $d_{12}$ ) markieren die Interlagenabstände.

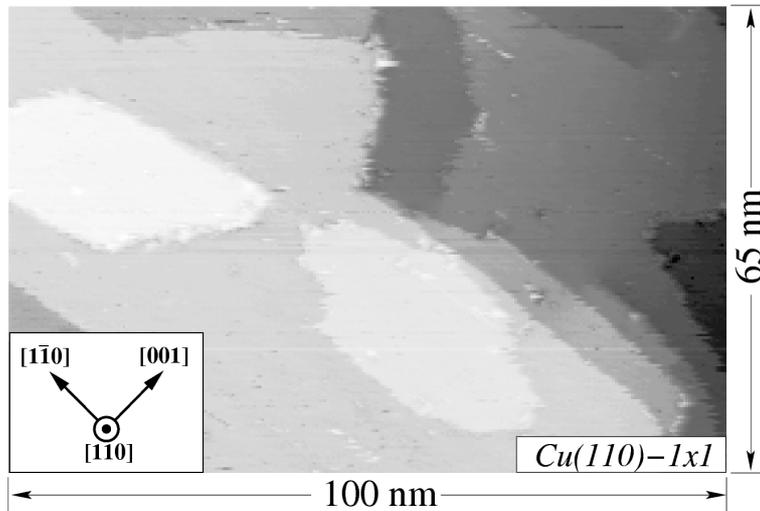
## 4.1 Cu(110)

### 4.1.1 Struktur der Oberfläche

Kupfer bildet einen fcc Kristall mit einer fcc Gitterkonstante  $a$  von  $3.61\text{\AA}$  (siehe Abb. 4.1). Die Cu(110) Oberfläche rekonstruiert nicht, stattdessen relaxieren die Oberflächenatome. Hierbei ist der Interlagenabstand zwischen erster und zweiter Monolage ( $d_{12}$ ) bei Cu(110) um ca. 7% kleiner als der Volumenlagenabstand [54, 55]. Das Aufbringen von Adsorbaten führt in der Regel zu einer Veränderung dieser Relaxierung, oft einhergehend mit einer Rekonstruktion der Oberfläche [56–58]. So führt Adsorption von Sauerstoff bei Raumtemperatur zu einer (2×1) Rekonstruktion. Es bilden sich Cu-O Ketten entlang der  $[001]$  Richtung aus. Diese Rekonstruktion wurde mit STM [49, 50], Photoelektronenbeugung und LEED [59, 60] sowie theoretisch [61] untersucht und als “added row” Rekonstruktion identifiziert. Der Abstand der Cu-O Ketten zur ersten Cu Atomlage ( $d_{01}$ ) ist um 14% größer und der Abstand zwischen erster und zweiter Cu Lage ( $d_{12}$ ) ist 3% kleiner als der Volumeninterlagenabstand [55]. Abbildung 4.2 zeigt eine STM Messung der reinen Cu(110)-(1×1) Oberfläche. Diese Oberfläche wurde unter UHV Bedingungen durch Ionenätzen und Tempern präpariert. Es zeigen sich atomar glatte Terrassen, getrennt durch Stufen. Die Höhe der Stufen entspricht dem Lagenabstand der Cu(110) Oberfläche. Die Stufenkanten zeigen eine bevorzugte Ausrichtung entlang  $[1\bar{1}0]$ .

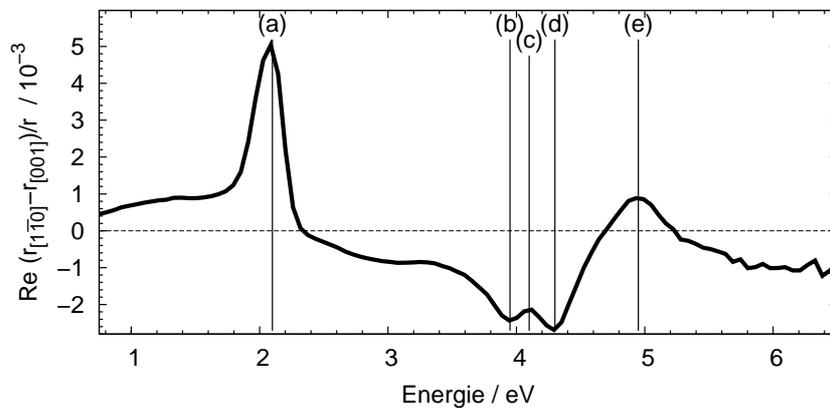
### 4.1.2 Optische Anisotropie der reinen Cu(110) Oberfläche

Die optische Anisotropie der Cu(110) Oberfläche wurde in den letzten Jahren in einer Reihe von Veröffentlichungen eingehend experimentell und theoretisch diskutiert [42–44, 53, 57, 58, 62–68]. Lagenaufgelöste “Ab-initio self-consistent full potential linear-muffin-tin orbital” Berechnungen [53] zeigen, dass die optische Anisotropie in der ersten Oberflächenatomschicht und dem Volumen ( $>21\text{ ML}$ ) auftritt. Die oberflächennahen Schichten dazwischen tragen hingegen



**Abbildung 4.2:** STM Aufnahme von Cu(110)-(1x1). Es zeigen sich bevorzugt ausgerichtete Stufen in  $[1\bar{1}0]$  Richtung.

kaum zur optischen Anisotropie bei. Für die erste atomare Lage (Oberfläche) wird eine Anisotropie bei 2 eV und 3.3 eV berechnet. Die Anisotropie der von der Oberfläche entfernten Atomlagen ( $>21$  ML) zeigt eine breite Struktur unterhalb von 2.5 eV sowie Strukturen bei 3.5 eV, 4.5 eV und 5.2 eV [53]. Eine weitere theoretische Untersuchung von Ziane et al. verdeutlicht die Rolle von parallelen Bändern für die optische Anisotropie [68]. Die optische Anisotropie von der Cu(110)-



**Abbildung 4.3:** RAS Spektrum der Cu(110)-(1x1) Oberfläche. Maxima und Minima des spektralen Verlaufs sind zur weiteren Diskussion mit (a) bis (e) markiert.

(1x1) Oberfläche wurde im Rahmen dieser Arbeit an drei verschiedenen Proben gemessen. Alle Proben zeigen ein RAS Spektrum wie in Abbildung 4.3 dargestellt. Es zeigen sich nur geringe Intensitätsunterschiede zwischen verschiedenen Proben. Die Maxima und Minima des spektralen Verlaufs sind in dieser Abbildung mit den Buchstaben (a) bis (e) markiert. Diese Bezeichnung dient der Orientierung in der weiteren Diskussion. Das RAS Spektrum wird von einer Struktur

bei 2.1 eV (a) dominiert. Weitere Strukturen zeigen sich bei 3.9 eV (b), 4.1 eV (c), 4.3 eV (d) sowie 4.95 eV (e).

### Struktur (a)

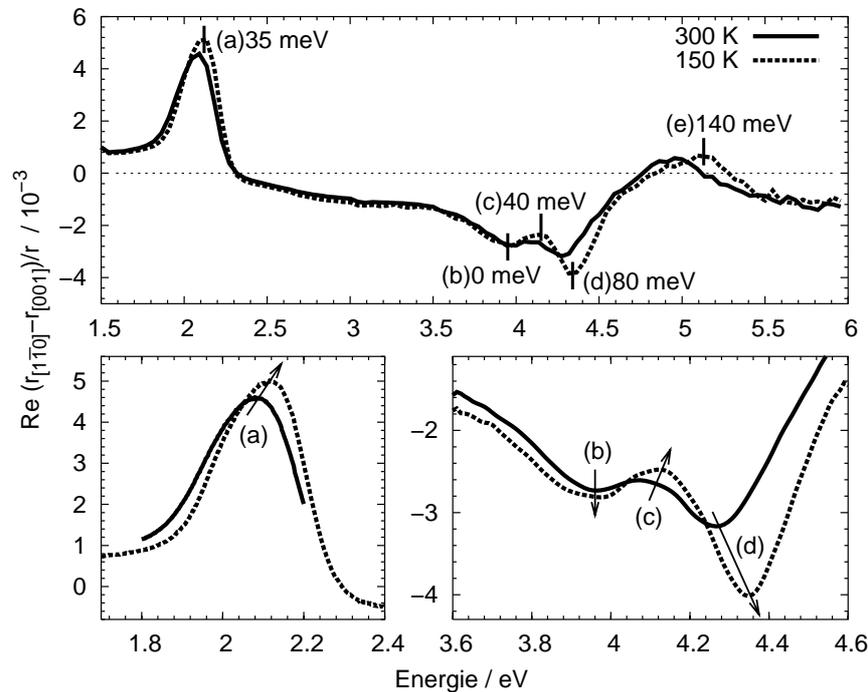
Die Struktur (a) wird optischen Übergängen zwischen Oberflächenzuständen am  $\bar{Y}$  zugeordnet [42, 43]. Abweichend von dieser Interpretation, werden auch Einflüsse von den Interbandübergängen  $\Delta_5 \rightarrow \Delta_1$  nahe des Punktes  $\bar{X}$  der Volumen-Brillouinzone [63] als Ursache vermutet. Die Intensität hängt stark von der Oberflächenbeschaffenheit ab. So verschwindet diese Struktur durch Tempern bei einer Temperatur von 1060 K. Der so präparierte Kristall zeigt eine stark gestufte Oberfläche. Die Stufen verlaufen hierbei parallel zur [001] Richtung [64]. Auch Adsorbatbedeckungen der Oberfläche im Submonolagenbereich (z.B. mit O, CO, Co, Ni und Na) dämpfen die Intensität stark. So wird aus Untersuchungen von CO Bedeckung bei 12 K gefolgert, dass eine Depolarisation der Oberflächenzustände durch Streuung der Elektronenwellen an den CO Molekülen für die Dämpfung verantwortlich ist [65]. Ähnliches wird auch bei Adsorption von Na auf Cu(110) beobachtet [58]. Eine detaillierte Untersuchung der Eigenschaften von Struktur (a) kommt zu dem Schluss, dass drei verschiedene Beiträge identifiziert werden können: Sowohl Übergänge von Oberflächenzuständen als auch Beiträge von oberflächenmodifizierten Interbandübergängen und Intrabandübergängen konnten nachgewiesen werden[67].

### d-Bandbereich

Im Bereich von 2.2 eV bis 5.2 eV liegen Interbandübergänge der stark lokalisierten Kupfer d-Bänder. Der spektrale Verlauf der optischen Anisotropie in diesem Bereich wird auf einen Einfluss der d-Bänder in Form von einer so genannten oberflächeninduzierten optischen Volumen-anisotropie zurückgeführt [42, 44, 66]. Der Ursprung dieser oberflächeninduzierten optischen Volumenanisotropie ist umstritten. Neben dem „surface local field“ Modell [44, 69] wird auch eine oberflächeninduzierte Verspannung der oberflächennahen Atomlagen oder der Einfluß eines anisotropen Oberflächenpotentials auf die elektronische Volumenwellenfunktion als mögliche Ursache in Betracht gezogen [39, 70–72]. Abweichend von obiger Zuordnung des spektralen Verlaufs wird für Struktur (c) ein Einfluss von Oberflächenzuständen bei  $\bar{X}$  der Oberflächenbrillouinzone vermutet [42]. Der spektrale Verlauf der optischen Anisotropie im d-Bandbereich verändert sich stark durch intensives Ionenätzen. Bremer et al. führen dies auf Fehlstellen in den obersten Lagen sowie auf die Ausbildung von „Lochstrukturen“ der oberen Lagen zurück [62]. Diese Lochstrukturen lassen sich mit STM an ionengeätzten Cu(110)Kristallen nachweisen [73, 74].

### 4.1.3 Temperaturverhalten

Abbildung 4.4 zeigt die optische Anisotropie von Cu(110)-(1×1) bei Raumtemperatur und 150 K. Durch Abkühlen der Probe verschieben sich alle spektralen Strukturen hin zu größeren Photonenenergien bei steigender Intensität der Anisotropie. Dieses Verhalten wird bei allen bislang untersuchten Kristallen, sowohl bei Halbleitern als auch bei Metallen, beobachtet. Struktur



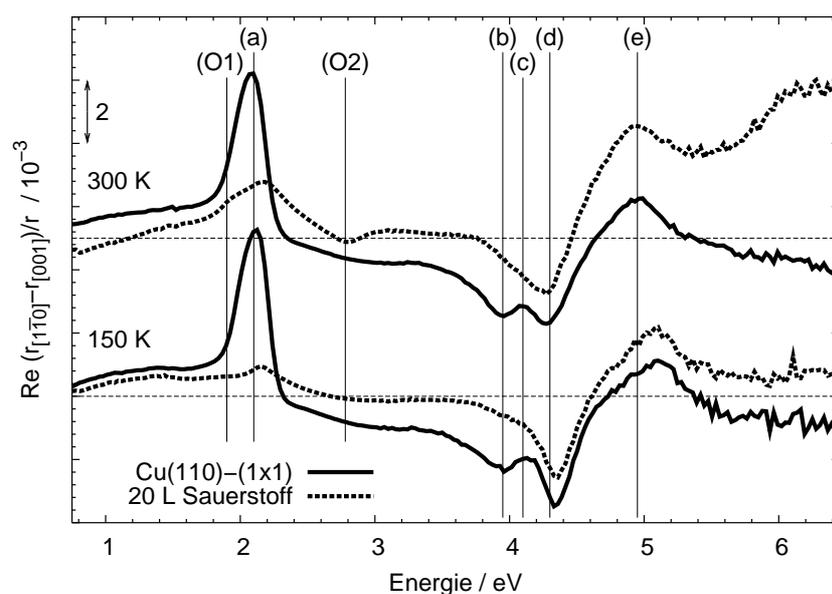
**Abbildung 4.4:** RAS Spektrum von Cu(110)-(1x1) bei 300 K und 150 K. Die spektralen Strukturen sind mit (a) bis (e) und der ermittelten Temperaturverschiebung markiert. Die unteren Graphen zeigen spektral hochaufgelöste Spektren der Strukturen (a) bis (d).

(b) zeigt jedoch keine Verschiebung und markiert wahrscheinlich lediglich den Beginn von Struktur (c). Die Werte der energetischen Verschiebung der Strukturen legen nahe, dass Struktur (a) und (c) aufgrund der geringeren Verschiebung Oberflächenbändern und Struktur (d) und (e) Volumenbändern zugeordnet werden können [51].

#### 4.1.4 Adsorbateinfluss

Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt angesprochen, führen Adsorbate zu einer Dämpfung von Oberflächenzuständen und zu einer Veränderung der Oberflächenrelaxierung. Dabei tritt häufig eine Rekonstruktion der Oberfläche auf. Oberflächenzustände werden durch die Streuung an Adsorbatatomen schon bei sehr geringen Adsorbatbedeckungen im Submonolagenbereich stark gedämpft. Oberflächenzustandsinduzierte Beiträge zur optischen Anisotropie verschwinden dadurch schon bei sehr geringen Bedeckungen der Oberfläche mit Fremdatomen. Die Veränderung der Relaxierung hingegen korreliert mit dem Bedeckungsgrad der Oberfläche. Somit werden von der Relaxierung verursachte Beiträge zur optischen Anisotropie ebenfalls eine lineare Abhängigkeit vom Bedeckungsgrad aufweisen. Beide Einflüsse, Oberflächenzustände sowie Relaxierung, führen zu Intensitätsänderungen von vorhandenen Strukturen der optischen Anisotropie. Das Auftreten zusätzlicher Strukturen hingegen ist unwahrscheinlich. Im Gegensatz hierzu zeigen sich bei einer Rekonstruktion der Oberfläche häufig zusätzliche Strukturen in der optischen Anisotropie. Dies resultiert aus der Veränderung der Oberflächenperiodizität sowie

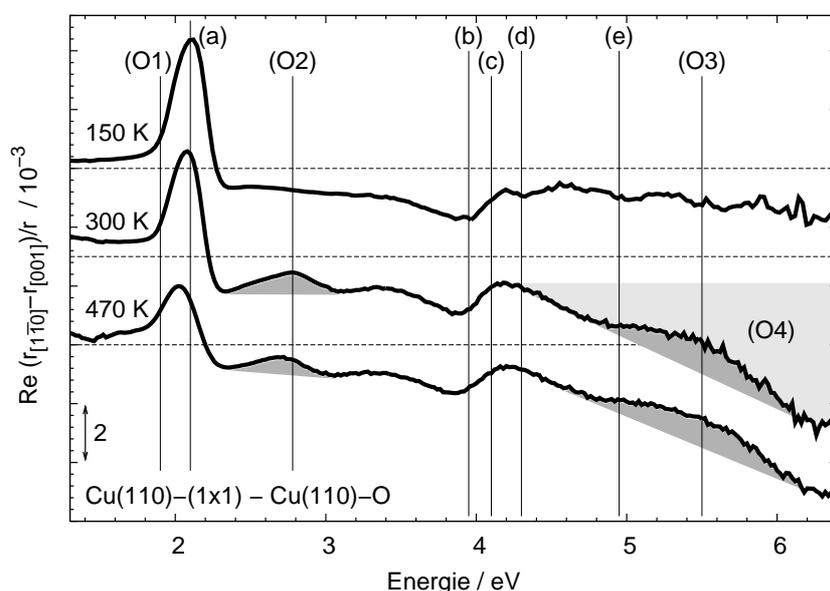
aus der Ausbildung von ausgerichteten Adsorbat-Adsorbat bzw. Adsorbat-Substrat Bindungen. Adsorbate können auch die Mobilität der Oberflächenatome des Substratmaterials verändern. So facetten z.B. die vizinalen Cu(111) Oberflächen Cu(221), Cu(332) und Cu(443) durch Adsorption von Sauerstoff bei Raumtemperatur. Vergleicht man LEED Aufnahmen von Cu(110) vor und nach der Adsorption von Sauerstoff, erscheinen die LEED Reflexe auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche schärfer. Somit lässt sich vermuten, dass Sauerstoffadsorption auf der Cu(110) Oberfläche zu einem "Ausheilen" der Oberflächendefekte beiträgt.



**Abbildung 4.5:** Optische Anisotropie von Cu(110) nach Adsorption von Sauerstoff im Vergleich zur Anisotropie der reinen Cu(110) Oberfläche. Oben: Adsorption bei Raumtemperatur. Unten: Adsorption bei 150 K.

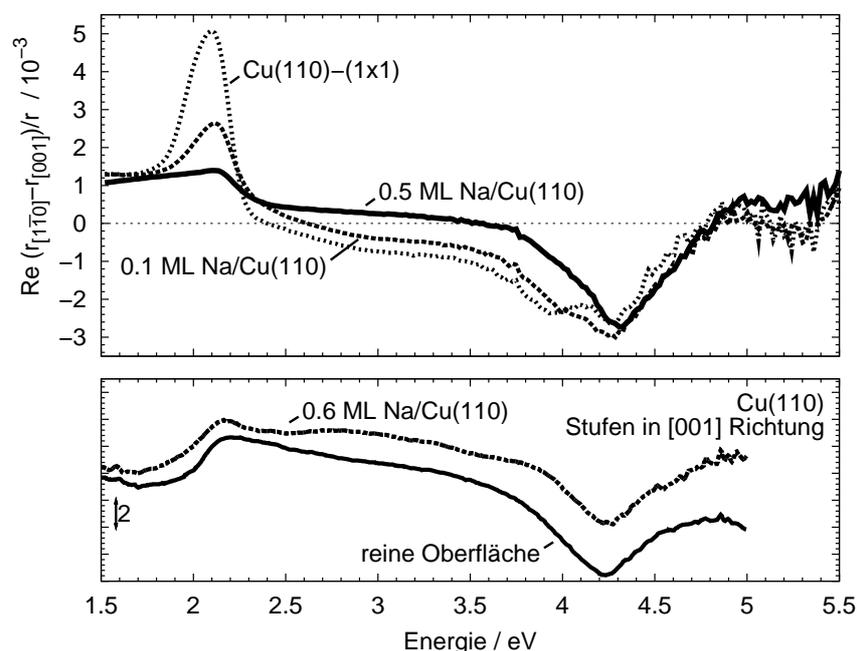
Abbildung 4.5 zeigt RAS Spektren von Cu(110) nach Adsorption von 20 L Sauerstoff bei Raumtemperatur und Adsorption bei 150 K zusammen mit den RAS Spektren der reinen Oberfläche. Die optische Anisotropie der mit einer halben Monolage Sauerstoff bedeckten Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche bei Raumtemperatur ist neben dem Verschwinden der Strukturen (a) und (c), durch neu auftretende Strukturen (O1) und (O2) und einen spektral breiten Anstieg oberhalb von 4 eV (O4) (siehe auch Abb. 4.6) gekennzeichnet. Sauerstoff Adsorption bei 150 K führt ebenfalls zu einem Verschwinden der Strukturen (a) und (c), jedoch treten die Strukturen (O1) und (O2) nicht auf. Auch die Veränderung oberhalb von 4 eV (O4) ist wesentlich kleiner. Vermutlich wird bei dieser Temperatur ein wesentlicher Teil der Sauerstoffmoleküle an der Oberfläche lediglich physisorbiert. Dadurch ist die Ausbildung der Cu-O Ketten stark unterdrückt. Die Strukturen (O1) und (O2) werden bereits bei geringer Koadsorption (<0.1 ML) mit Kobalt oder Nickel stark gedämpft, während (O4) erst bei größeren Bedeckungen mit Co bzw. Ni verschwindet (siehe hierzu auch Abb. 6.32 und 6.11). Aus dem Fehlen von (O1) und (O2) nach Sauerstoffadsorption bei 150 K und dem raschen Verschwinden dieser Strukturen bei Koadsorption an der Oberfläche lässt sich folgern, dass diese von Übergängen zwischen Oberflächen-Zuständen

bzw. -Resonanzen der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche herrühren. Die wesentlich unempfindlichere Struktur (O4) wird wahrscheinlich von Übergängen zwischen O-2p und Cu-3d Zuständen der O-Cu Ketten, deren Anregungsenergien in diesem Energiebereich liegen, verursacht. Diese so genannten “sauerstoffartigen Bindungen” sind durch ARUPS Messungen nachgewiesen und werden als treibende Kräfte der Cu(110)-(2×1)-O Rekonstruktion angesehen [75]. Bemerkenswert ist hier auch, dass alle Strukturen, die der Oberfläche zugeordnet werden, nämlich (a) und (c) sowie (O1) - (O4) nur eine geringe energetische Temperaturverschiebung aufweisen. Während (d) und (e), die durch Sauerstoffadsorption nicht beeinflusst werden, eine wesentlich größere Temperaturverschiebung zeigen. Dies lässt vermuten, dass der Ursprung dieser Strukturen nicht an Oberfläche lokalisiert ist.



**Abbildung 4.6:** Veränderung der optischen Anisotropie durch Adsorption von Sauerstoff bei verschiedenen Temperaturen. Diese Graphen zeigen die Differenz der optischen Anisotropie zwischen reiner und sauerstoffbedeckter Cu(110) Oberfläche. Die auftretenden sauerstoffinduzierten Strukturen sind mit (O1) - (O4) gekennzeichnet. (O2), (O3) und (O4) sind grau unterlegt.

Die Veränderung der optischen Anisotropie durch Sauerstoffadsorption wird in Abbildung 4.6 gezeigt. Dargestellt ist die Differenz der optischen Anisotropie zwischen reiner und sauerstoffbedeckter Oberfläche. Während (O1) durch die starke Dämpfung von (a) kaum erkennbar ist, sind (O2) - (O4) deutlich sichtbar. Diese Darstellung zeigt eine bisher nicht bekannte sauerstoffinduzierte Struktur bei 5.5 eV (O3). (O3) tritt nach Sauerstoffadsorption bei 150 K nicht auf und ist somit wahrscheinlich eine Folge der Oberflächenrekonstruktion. Im Gegensatz zu den rekonstruktionsinduzierten Strukturen verändert sich (c) durch Adsorption von Sauerstoff bei allen Temperaturen gleich. Somit kann (c) durch Oberflächenrelaxation verursacht sein. Aber auch ein Zusammenhang mit Oberflächendefekten ist denkbar, da Sauerstoffadsorption zu einer Veränderung der Oberflächenmorphologie führt. Na-Adsorption auf Cu(110)-(1×1)(Abbildung 4.7 oben) zeigt eine ähnliche Veränderung des RAS Spektrums wie Sauerstoffadsorption bei 150 K.

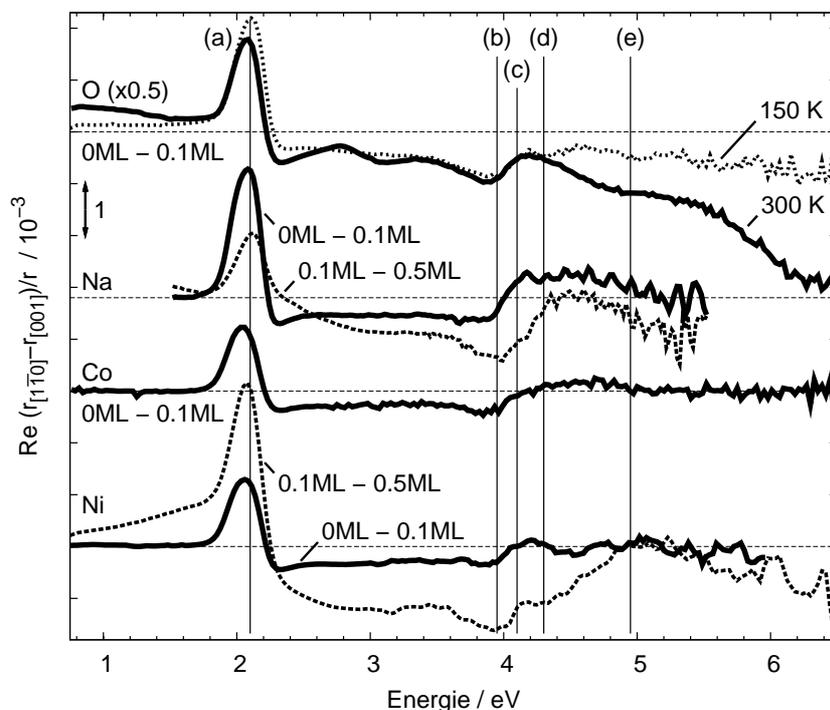


**Abbildung 4.7:** RAS Spektrum von Cu(110)-(1x1) sowie im Submonolagenbereich bedeckt mit Natrium. Die Oberflächenstruktur bei 2.1 eV und die Doppelstruktur bei 4 eV verschwinden durch Natriumkontamination. Der untere Graph zeigt das RAS Spektrum der thermisch aufgerauten Cu(110)-(1x1) sowie 0.6 ML Na auf dieser Oberfläche. Die Spektren der unteren Abbildung wurden der Literatur entnommen [76].

Schon bei einer Bedeckung mit 0.1 ML Na ist Struktur (a) stark gedämpft und Struktur (c) nicht mehr vorhanden. Nach Adsorption von 0.5 ML Na zeigen sich nur noch Strukturen bei 2.2 eV, 4.3 eV (d) und 5 eV (e). In Abbildung 4.7 (unten) sind RAS Spektren der reinen und mit Na bedeckten, thermisch aufgerauten Cu(110) Oberfläche aus Ref. [76] dargestellt. Die thermisch aufgeraute Oberfläche zeigt eine dichte Stufenfolge. Die Stufenkanten verlaufen hierbei parallel zur [001] Richtung. Oberhalb von 2.3 eV zeigen die RAS Spektren der thermisch aufgerauten Oberfläche und das RAS Spektrum von 0.5 ML Na auf der glatten Oberfläche einen nahezu identischen Verlauf. Unterhalb von 2.1 eV unterscheiden sich die Strukturen stark. So findet sich auf der glatten Oberfläche bei 2.2 eV eine Stufe im RAS Spektrum mit abfallender Flanke und auf den thermisch aufgerauten Oberflächen zeigt sich eine ansteigende Flanke. Wie in Abbildung 4.2 zu sehen, verlaufen die Stufenkanten auf der glatten Cu(110) Oberfläche vorzugsweise parallel zur  $[1\bar{1}0]$  Richtung, also gerade senkrecht zu dem Stufenverlauf auf der thermisch aufgerauten Oberfläche. Dieses Ergebnis legt nahe, dass die Struktur im RAS Spektrum bei 2.2 eV von den Oberflächenstufen verursacht wird. Diese Stufen stellen eine Potentialbarriere für die frei beweglichen s- und sp-Band Elektronen dar. Die Elektronen können sich parallel zu den Stufen frei bewegen, senkrecht zu den Stufen sind sie jedoch eingeschränkt. Dies hat eine Anisotropie der Oberflächenleitfähigkeit zur Folge, welche wiederum auch zu einer optischen Anisotropie führt.

Abbildung 4.8 zeigt die Veränderung der optischen Anisotropie durch Adsorption von Co und Ni bei Raumtemperatur zusammen mit den Differenzspektren der Sauerstoffadsorption aus

Abbildung 4.6 sowie der Na-Adsorption. Die Veränderung der optischen Anisotropie durch diese Adsorbate ähnelt stark der Adsorption von Sauerstoff bei 150 K. Die Strukturen (a) und (c) verändern sich stark, während (d) und (e) nahezu unverändert bleiben. Es treten keine neuen RAS Strukturen auf. Das Verhalten von (a) kann durch Betrachtung der Veränderungen bei verschiede-



**Abbildung 4.8:** Differenz zwischen der optischen Anisotropie von Cu(110)-(1x1) und den mit Sauerstoff, Natrium, Kobalt und Nickel Adsorbat bedeckten Oberflächen.

nen Bedeckungsgraden mit Na näher analysiert werden (vergleiche auch Abb. 4.7). Es erscheint wahrscheinlich, dass Struktur (a) aus mindestens zwei elektronischen Beiträgen besteht, (a1) und (a2). Während nach 0.1 ML Na Struktur (a1) (unterhalb von 2.15 eV) bereits sehr stark gedämpft ist und sich bei weiterer Adsorption von Na kaum mehr verändert, zeigt sich die größte Veränderung der Struktur (a2) (oberhalb von 2.15 eV) bei Bedeckungen zwischen 0.1 ML und 0.5 ML Na. Ein Fit von (a) nach dem Drude-Lorentz Modell zeigt, dass  $\Delta\varepsilon$  nur mit mindestens zwei Lorentzoszillatoren (1.95 eV und 2.2 eV) zufriedenstellend angenähert werden kann. Vermutlich handelt es sich um einen Beitrag der Oberflächenzustände bei  $\bar{Y}$  der Oberflächenbrillouinzone (1.95 eV) und einem Beitrag der Oberflächenrelaxierung (2.2 eV).

Bei einer größeren Bedeckung der Cu(110) Oberfläche mit Ni werden auch die Strukturen (d) und (e), verdeutlicht durch das Differenzspektrum von 0.1 ML Ni - 0.5 ML Ni, beeinflusst. Dies wird im Weiteren im Kapitel 6.1 näher betrachtet und es wird sich zeigen, dass die Strukturen (d) und (e) durch Ni Bedeckungen größer 2 ML vollständig verschwinden. Dieses Verhalten zeigt sich auch bei Bedeckung der Cu(110) Oberfläche mit Co. Es ist zu vermuten, dass die Strukturen (d) und (e) nur indirekt von der Oberflächenmorphologie beeinflusst werden und es sich um so genannte oberflächeninduzierte Volumenanisotropien handelt.

Die Veränderungen der RAS Spektren durch Adsorption von O (bei 150 K), Na, Co und Ni zeigen im Wesentlichen nur das Verschwinden von oberflächeninduzierten Strukturen. Die RAS Spektren nähern sich alle dem Verlauf des RAS Spektrums von 0.5 ML Na an (Abb. 4.7 oben). Aus der Untersuchung des Adsorbateinflusses auf die optische Anisotropie von Cu(110) lässt sich folgende Zuordnung der RAS Strukturen ableiten:

- Struktur (a) bei 2.1 eV besteht aus zwei Beiträgen, einem Beitrag von Oberflächenzuständen bei 1.95 eV und einem Beitrag der Oberflächenrelaxierung bei 2.2 eV.
- Ausrichtung der Stufenkanten führt zu einer Flanke im RAS Spektrum bei 2.2 eV.
- Struktur (c) bei 4.1 eV lässt sich der Oberflächenrelaxation oder Oberflächendefekten zuordnen.
- Die Strukturen (d) bei 4.3 eV und (e) bei 4.95 eV werden von der Oberflächenregion nur gering beeinflusst und werden wahrscheinlich von oberflächeninduzierten Volumenanisotropien verursacht.
- Die Adsorption von Sauerstoff bei Raumtemperatur führt zu Strukturen (O1) - (O3), welche aus Oberflächenzuständen bzw. -resonanzen der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche resultieren. Eine weitere, breite Struktur (O4) wird der starken ionischen Bindung von Sauerstoff und Kupfer zugerechnet.

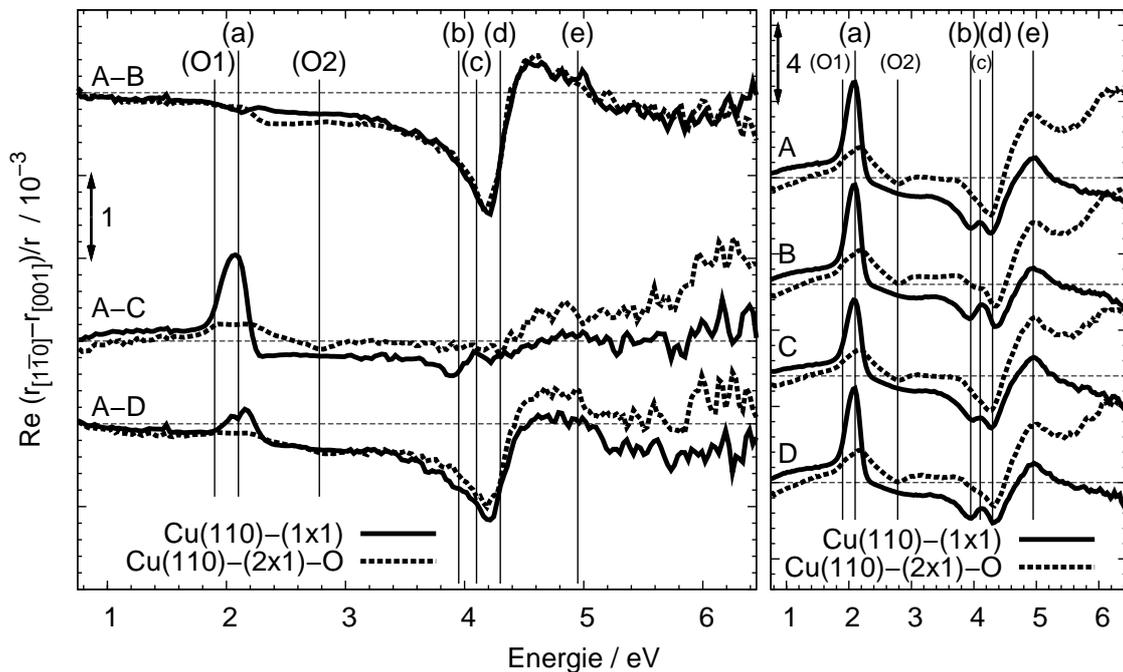
Weitere Aufschlüsse zur Zuordnung der einzelnen Beiträge der optischen Anisotropie liefert eine Analyse verschiedener Präparationen (Ionenätzen - Tempern).

#### **4.1.5 Einfluss der Probenpräparation**

In Abbildung 4.9 (rechts) werden die RAS Spektren von vier verschiedenen Präparationen der Cu(110) Oberfläche gezeigt (A bis D). Bei A, C und D wurde 10 Minuten unter einem Winkel von 75° zur Oberflächennormale mit einer kinetischen Energie der  $Ne^+$  Ionen von 1 keV ionengeätzt und anschließend 10 Minuten bei 850 K getempert. Trotz gleicher Präparation ergeben sich Unterschiede in den RAS Spektren. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Präparationsparameter wie Ionenätzintensität und Ausheiltemperatur nur ungenau eingestellt werden können. Bei Präparation B wurde mit ansonsten unveränderten Parametern unter senkrechtem Einfall ionengeätzt. Hier ist Struktur (c) besonders stark ausgeprägt.

Ionenätzen führt neben dem Abtrag von Atomen zur Ausbildung von Defekten in der oberflächennahen Region. Auch die Implantation von Ne Atomen erscheint nicht unwahrscheinlich. Durch die im Vergleich zu Halbleitern schwachen Bindungskräfte im Kristall können Defekte und Fremdatome relativ leicht schon während des Ionenätzens diffundieren, so dass auch tiefere Regionen des Kristalls beeinflusst werden. Durch den Temperprozess können oft nicht alle erzeugten Defekte "ausgeheilt" werden. Wie bereits diskutiert (siehe Text zu Abbildung 4.6), kann davon ausgegangen werden, dass Adsorption von Sauerstoff zu einer "Ausheilung" der Oberflächendefekte der Cu(110) Oberfläche führt. Die Oberflächen der Präparation A bis D weisen unterschiedliche Oberflächenmorphologien auf. Durch die Adsorption von Sauerstoff werden diese Unterschiede stark verringert.

Dieser Umstand wird in Abbildung 4.9 (links) ausgenutzt. Gezeigt sind die Differenzspektren der Präparationen A bis D vor und nach der Adsorption von Sauerstoff. Alle Strukturen



**Abbildung 4.9:** Links: Differenz der Präparation von Cu(110). Die Präparation der Cu(110)-(1x1) mit anschließender Adsorption von Sauerstoff wurde 4 mal wiederholt (A bis D). Rechts: Die Spektren der präparierten Cu(110) Oberfläche vor und nach der Oxidation für die einzelnen Präparationen A bis D.

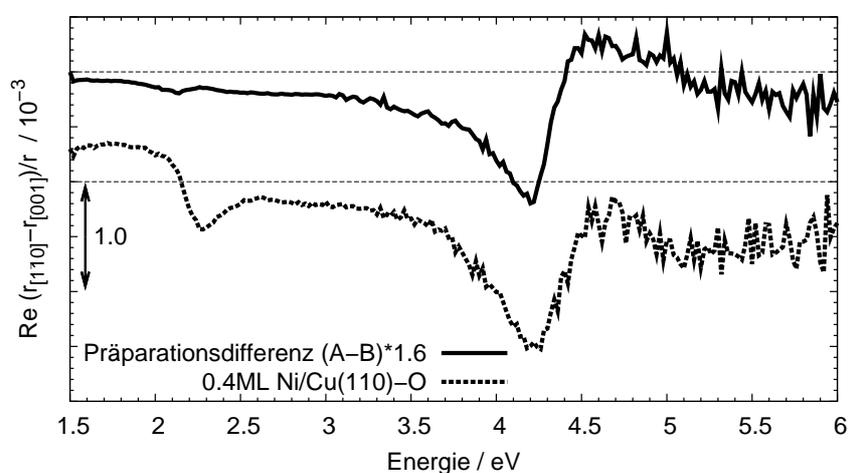
in den Differenzspektren der reinen Cu(110) Oberflächen, die durch Adsorption von Sauerstoff stark gedämpft werden, sind der Oberflächenregion zuzuordnen. Die Strukturen, die durch Sauerstoffadsorption unverändert bleiben, entstammen mit hoher Wahrscheinlichkeit tieferen (oberflächenentfernten) Kristallregionen. Das Differenzspektrum (A-B)(Abb. 4.9 links, oben) zeigt die Unterschiede der optischen Anisotropie bei unterschiedlicher Ionenätzgeometrie. Im Wesentlichen zeigt sich nur eine ausgeprägte Struktur in der Nähe von (d) der reinen Oberfläche mit einem Minimum bei 4.2 eV und einem Maximum bei 4.5 eV. Diese Struktur wird im Folgenden als Volumendefektstruktur bezeichnet. Das Differenzspektrum verändert sich durch Adsorption von Sauerstoff nur leicht bei 2.2 eV. Offensichtlich führen beide Präparationen zu nahezu identischen Oberflächen. Präparation B (Ionenätzen unter senkrechtem Einfall) führt jedoch entweder zu einer größeren Defektdichte in den oberflächenentfernten Regionen des Kristalls, oder durch das Ionenätzen unter senkrechtem Einfall entstehen nicht die “sanddünenartigen” Strukturen wie von Rusponi et al. beschrieben [73, 74].

Das Differenzspektrum (A-C) hingegen zeigt einen Verlauf, wie er bei der Analyse der Bedeckungen im Submonolagenbereich gefunden wurden (siehe Abb. 4.8). Die Oberfläche von C ist offensichtlich noch mit Fremdatomen kontaminiert. Alle Strukturen von (A-C) werden durch Adsorption von Sauerstoff gedämpft. Es liegen also nur Unterschiede an der Oberfläche vor. Sauerstoff führt hier zwar zur “Ausheilung” der Oberflächendefekte, die Fremdatome (vermutlich Kohlenstoff) aber verbleiben auf der Oberfläche, so dass im Differenzspektrum der sauerstoffbe-

deckten Oberflächen die Oberflächenbeiträge O1 - O4 sichtbar werden.

(A-D) schließlich weist sowohl Unterschiede an der Oberfläche als auch in tieferen Regionen auf. Die oberflächeninduzierten Strukturen bei 2.1 eV verschwinden durch Sauerstoffadsorption, während die Volumendefektstruktur zwischen 4.2 eV und 4.5 eV nahezu unverändert bleibt.

Die Analyse verschiedener Präparationen bestätigt die bereits vorher vermutete Zuordnung der Strukturen (a) und (c) zur Oberfläche. Im Weiteren wurde eine Volumendefektstruktur zwischen 4.2 eV und 4.5 eV identifiziert. Diese Struktur wird von oberflächenentfernten Kristalldefekten verursacht. Das Volumen von fcc Kristallen sollte aus Symmetriegründen keine optische Anisotropie zeigen. Die vorangegangene Analyse legt jedoch nahe, dass die vorliegende Defektverteilung zu einer optischen Anisotropie führt.

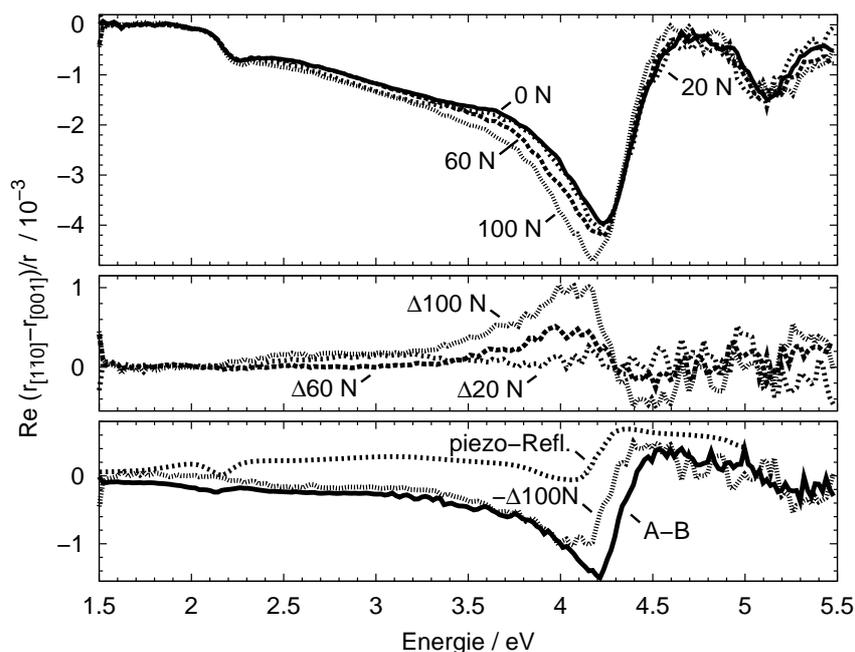


**Abbildung 4.10:** Vergleich der Volumendefektstruktur (multipliziert mit 1.6) mit dem RAS Spektrum von 0.4 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Im Bereich von 3 eV bis 5 eV ergibt sich eine hervorragende Übereinstimmung. Die 0.4 ML Ni bedeckte Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche zeigt nur noch die Volumendefektstruktur.

Da bei der vorangegangenen Analyse nur Differenzspektren betrachtet wurden, stellt sich die Frage, welches "Vorzeichen" die Volumendefektstruktur hat. Abbildung 4.10 vergleicht die Volumendefektstruktur mit dem RAS Spektrum von 0.4 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Im Energiebereich von 3 eV bis 5 eV zeigt die mit 0.4 ML Ni bedeckte Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche nur noch die Volumendefektstruktur. Die spätere Analyse (Kapitel 6) wird zeigen, dass bei noch größeren Ni Bedeckungen alle Cu RAS Strukturen verschwinden, bis auf die Volumendefektstruktur. Aufgrund dieses Vergleiches kann angenommen werden, dass die Volumendefektstruktur auf den präparierten Cu(110)-(1×1) Oberflächen bei 4.2 eV eine größere Reflektivität in  $[1\bar{1}0]$  Richtung besitzt. Möglicherweise handelt es sich bei obiger Volumendefektstruktur nur um die Modifizierung einer bereits vorhandenen Volumenanisotropie, wie sie z.B. durch uniaxiale Kristallverspannungen hervorgerufen werden kann (Verspannungsdoppelbrechung). Zur Klärung dieser Fragestellung wird im Folgenden der Einfluss von Verspannung auf die optische Anisotropie von Cu(110) untersucht.

### 4.1.6 Mechanische Verspannung

Messungen des Verspannungsbeitrages zur optischen Anisotropie von Cu(110) sind bisher nicht bekannt. Es wurden jedoch bereits Untersuchungen der optischen Anisotropie von verspannten amorphen Kupferfilmen durchgeführt [33]. Abbildung 4.11 zeigt ex-situ Messungen des verspannten Cu(110) Kristalls im Vergleich zu der nicht verspannten ex-situ Cu(110) Oberfläche. Der Kristall ist zwischen zwei Platten eingespannt, die Druck parallel zur Oberfläche in [001]



**Abbildung 4.11:** Oben: Ex-situ Messung der optische Anisotropie von Cu(110) mit und ohne äußerem Druck. Auf den Kristall wurde mittels zweier Platten Druck entlang der [001] Richtung ausgeübt. Mitte: Veränderung der optischen Anisotropie durch die uniaxiale Verspannung (Verspannungsbeitrag). Unten: Vergleich des Verspannungsbeitrages bei 100 N mit den Messungen des Verspannungsbeitrages von amorphem Kupfer (Piezo-Reflektanz, Ref. [32]) und mit der Volumendefektstruktur aus Abbildung 4.9.

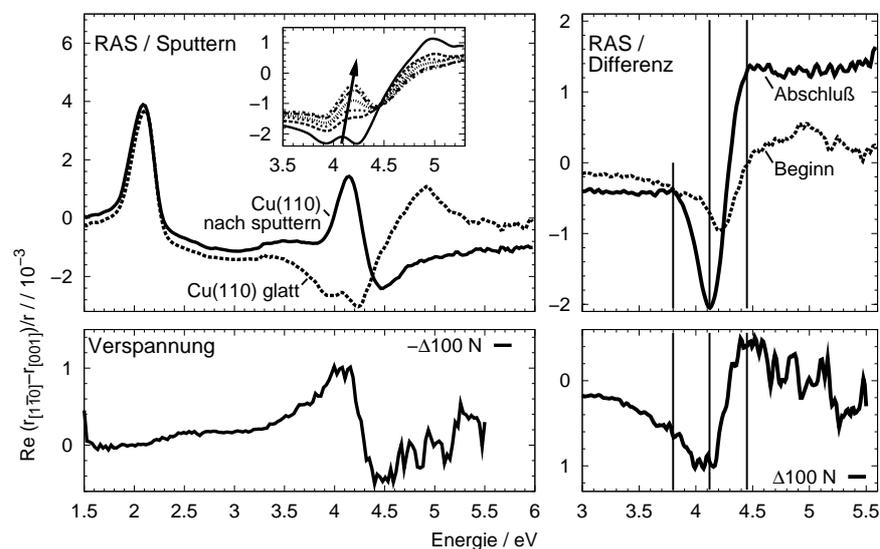
Richtung ausüben. Während die Veränderungen der optischen Anisotropie für Drücke von 20 N und 60 N reversibel sind, verändert sich das RAS Spektrum nach Wegnahme des Drucks von 100 N nicht mehr. Die Veränderung der optischen Anisotropie hat sich also durch Kristallversetzungen eingepägt. Durch eine mosaikartige Verzahnung der Versetzungen härtet der Kristall mechanisch aus. Dadurch zeigen sich nach der Messung mit 100 N selbst bei einem Druck von 200 N in  $[1\bar{1}0]$  Richtung keine messbaren Veränderungen der optischen Anisotropie mehr.

Qualitativ sind die reversiblen und nicht reversiblen Veränderungen der optischen Anisotropie durch äußerem Druck gleich. In allen Fällen bildet sich eine einzige verspannungsinduzierte Struktur mit einem Maximum bei 4.2 eV und einem Minimum bei 4.4 eV aus. Abbildung 4.11 (unten) vergleicht diese verspannungsinduzierte Struktur mit den Messungen der Piezo-Reflektanz aus Ref. [32] und mit der Volumendefektstruktur aus Abbildung 4.9. Die Piezo-Reflektanz Messung an amorphem Kupfer zeigt im Energiebereich oberhalb von 2.5 eV die glei-

che Struktur wie der Verspannungsbeitrag auf der Cu(110) Oberfläche. Auch der Verlauf der Volumendefektstruktur ist bis auf eine kleine energetische Verschiebung nahezu identisch mit dem Verspannungsbeitrag. Durch diesen Vergleich kann ein Zusammenhang der Volumendefektstruktur mit Kristallverspannungen und den damit verbundenen Kristallversetzungen vermutet werden.

### 4.1.7 Einfluss von Ionenätzen

Die Volumendefektstruktur kann durch intensives Ionenätzen das RAS Spektrum der Cu(110) Oberfläche dominieren. Abbildung 4.12 (links oben) zeigt die Veränderung der optischen Anisotropie durch mehrstündiges Ionenätzen der Cu(110) Oberfläche unter einem Winkel von  $45^\circ$  zur Probennormale. Im Energiebereich oberhalb von 2.5 eV verbleibt nach dem Ionenätzen nur



**Abbildung 4.12:** Links: RAS Spektrum von Cu(110)-(1x1) nach Präparation (Ionenätzen, Tempern) und nach mehreren Stunden Ionenätzen ohne Tempern. Das Inset zeigt die Veränderungen der Strukturen um 4 eV zu Beginn des Ionenätzens. Der untere Graph zeigt den Verspannungsbeitrag zur optischen Anisotropie aus Abb. 4.11 (Vorzeichen gedreht). Rechts: Veränderung der optischen Anisotropie (Differenzspektrum) zu Beginn und gegen Ende des Ionenätzens. Der untere Graph zeigt nochmal den Verspannungsbeitrag der Cu(110) Oberfläche

die Volumendefektstruktur. Unterhalb von 2.5 eV sind jedoch so gut wie keine Veränderungen feststellbar. STM und LEED Messungen der ionengeätzten Oberfläche lassen lediglich auf eine große Oberflächenrauigkeit schließen. Es bilden sich keine Facetten oder "sanddünenartige" Strukturen aus, wie sie von Rusponi et. al berichtet wurden [73, 74]. Es handelt sich um eine äußerst defektreiche Cu(110) Oberfläche. Erstaunlich ist hier, dass die den Oberflächenzuständen bei  $\bar{Y}$  der Oberflächenbrillouinzone zugeschriebene Struktur (a) offensichtlich unabhängig von der Oberflächenrauigkeit ist. Die Oberflächenzustände sollten bei einem Aufrauen der Oberfläche stark gedämpft werden. Eventuell handelt es sich bei Struktur (a) um den Einfluss eines Volumenbandes. Volumenbänder werden an der Oberfläche sowie durch fehlende Nachbaratome

an Defekten energetisch modifiziert. Es ist möglich, dass Volumenzustände der Oberflächenatome in der Nähe der Bandlücke bei  $\bar{Y}$  durch die fehlenden Nachbaratome derart modifiziert werden, dass sie in diese Bandlücke "schieben" und somit für den Oberflächenzustand verantwortlich sind. Zur Klärung dieser Frage wären ARUPS Messungen der ionengeätzten Cu(110) Oberfläche hilfreich, konnten aber im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr durchgeführt werden.

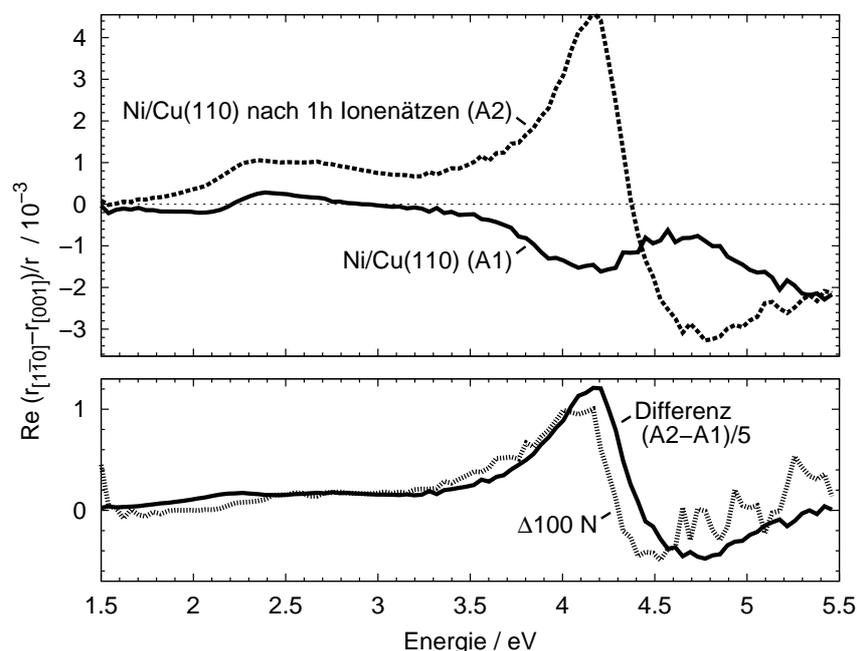
Eine detaillierte Untersuchung der Veränderungen der optischen Anisotropie durch Ionenätzen ist in Abbildung 4.12 (rechts oben) gezeigt. Dargestellt sind die Veränderungen zu Beginn und gegen Abschluss des Ionenätzens. Zu Beginn des Ionenätzens erscheint die Volumendefektstruktur energetisch breiter. Ebenso ist eine Dämpfung von Struktur (e) bei 4.95 eV der Cu(110)-(1×1) Oberfläche erkennbar. Gegen Ende des Ionenätzens zeigt sich die Ionenätzinduzierte Struktur spektral eng begrenzt, mit einem Minimum bei 4.1 eV und einem Maximum bei 4.4 eV. Ein Vergleich des Verspannungsbeitrags der Cu(110) Oberfläche (Abb. 4.12 rechts unten) mit der Veränderung der optischen Anisotropie gegen Ende des Ionenätzens zeigt eine sehr gute Übereinstimmung des spektralen Verlaufs.

Wahrscheinlich wird zu Beginn des Ionenätzens auch Struktur (d) bei 4.2 eV der reinen Cu(110) Oberfläche gedämpft. Dies ist jedoch durch die energetische Überlappung mit der Volumendefektstruktur kaum erkennbar. Als Ursache der Strukturen (d) und (e) wurde bereits im Abschnitt 4.1.4 eine oberflächeninduzierte Volumenanisotropie vermutet. Das Verschwinden dieser Strukturen durch Ionenätzen bestätigt diese Annahme, da hier durch das Einbringen von Defekten die Kristallstruktur in der Nähe der Oberfläche gestört wird und so eine Dämpfung von oberflächeninduzierten Volumenanisotropien zu erwarten ist.

Einen weiteren Hinweis auf die Lokalisierung der Volumendefektstruktur zeigt sich beim Ionenätzen eines 8 ML Ni Filmes auf Cu(110). Abbildung 4.13 zeigt die optische Anisotropie von Ni/Cu Filmen vor und nach einer Stunde Ionenätzens. Zum Entfernen von 8 ML Nickel von der Cu(110) Oberfläche ist bei den hier gewählten Ionenätzparametern eine Ionenätzzeit von 4 bis 5 Stunden notwendig. Nach einer Stunde Ionenätzens befinden sich mindestens noch zwei Monolagen Ni auf der Oberfläche. Trotz dieser Ni Bedeckung hat sich die Volumendefektstruktur bereits vollständig ausgebildet. Dies ist ein weiterer Beleg dafür, dass die Volumendefektstruktur ihren Ursprung nicht an der Oberfläche des Kristalls hat. Diese Struktur scheint vollständig unabhängig von der Oberflächenmorphologie zu sein.

Betrachtet man die Ergebnisse für die Volumendefektstruktur aus den vorangegangenen Abschnitten, so wechselt das "Vorzeichen" dieser Struktur. Während bei den Präparationsunterschieden und der mechanischen Verspannung klar eine größere Reflektivität bei 4.2 eV in  $[1\bar{1}0]$  Richtung gefunden wurde, ist bei intensivem Ionenätzen die Reflektivität bei 4.2 eV in  $[001]$  Richtung größer. Die Volumendefektstruktur kann somit in Abhängigkeit der Vorbehandlung des Cu(110) Kristalls ein unterschiedliches Vorzeichen zeigen.

Die Ergebnisse der Messungen zur optischen Anisotropie von Cu(110) zeigen, dass sowohl die Oberfläche als auch das Kristallvolumen zur optischen Anisotropie beitragen. Als Oberflächenbeiträge wurden die Strukturen (a) (2.1 eV) und (c) (4.1 eV) sowie ein Stufenbeitrag bei 2.2 eV identifiziert. Die Strukturen (d) (4.2 eV) und (e) (4.95 eV) werden nur durch intensives Ionenätzen der Oberfläche oder durch größere Adsorbatbedeckungen beeinflusst und sind somit wahrscheinlich oberflächeninduzierten Volumenanisotropien zuzuordnen. Eine Volumendefektstruktur in der Nähe von 4.2 eV ist unabhängig von der Oberflächenmorphologie oder der Adsorbatbedeckung. Ein Zusammenhang dieser Struktur mit dem Einfluss von Kristallverspannungen



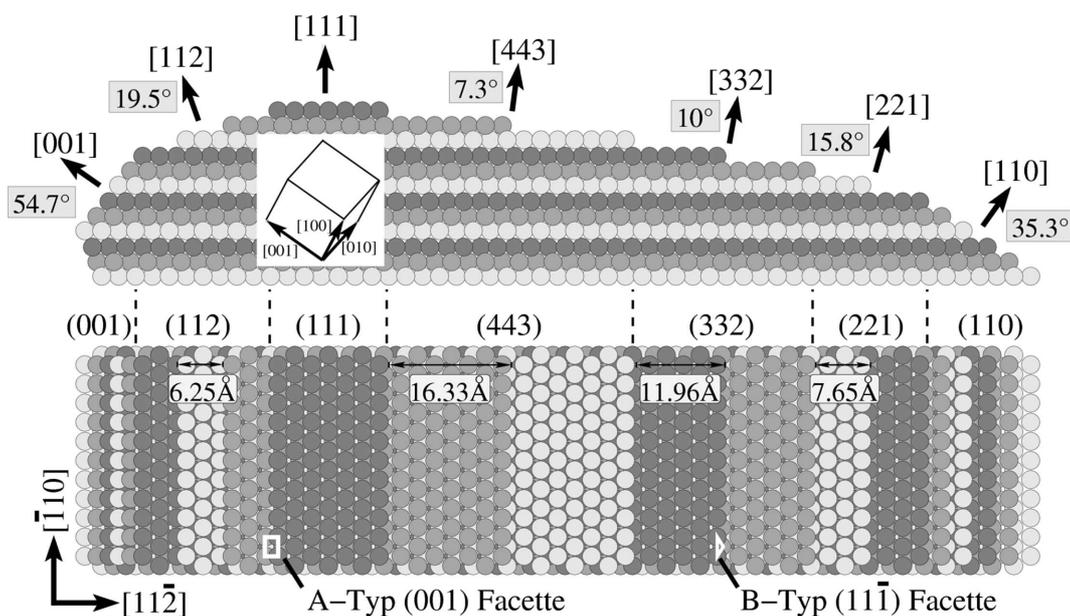
**Abbildung 4.13:** Oben: RAS Spektrum von ca. 8 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O nach der AUGER Messung (Sauerstoff ist desorbiert) und das RAS Spektrum dieser Oberfläche nach einer Stunde Ionenätzens. Unten: Veränderung der optischen Anisotropie von Ni/Cu(110) durch Ionenätzen im Vergleich mit dem Verspannungsbeitrag von Cu(110) (siehe Abb. 4.11)

konnte gezeigt werden.

Im Folgenden wird durch die Untersuchung der optischen Anisotropie von Cu(111) und vizinalen Cu(111) Oberflächen vor allem der Ursprung von Struktur (e) und (d) sowie des Oberflächenstufenbeitrags bei 2.2 eV eingehender behandelt.

## 4.2 Cu(111) und vizinale Cu(111) Oberflächen

Die Cu(111) Oberfläche besteht aus Atomlagen mit hexagonaler Struktur. Die einzelnen Lagen sind so gegeneinander verschoben, dass die dichteste Kugelpackung gebildet wird. Es bildet sich eine Abfolge von jeweils drei unterscheidbaren Lagen (ABC-Stapelfolge). Diese Lagenabfolge wird in Abbildung 4.14 durch Grauschattierungen verdeutlicht. Die reine Cu(111) Oberfläche rekonstruiert ebenso wie Cu(110) nicht. Die Relaxierung der Oberflächenatome ist jedoch wesentlich geringer als bei Cu(110). Oberflächen Röntgenbeugung (S-XRD) zeigt, dass bei Cu(111) der Abstand der Oberflächenlage zur nächsten Lage ( $2 \pm 0.4\%$ ) kleiner (Kontraktion) ist als der Lagenabstand im Volumen [77]. LEED Experimente zeigen eine Kontraktion zwischen 0.7% und 0.8% des Oberflächenlagenabstandes [78–80, 80]. Die Orientierung der hier untersuchten vizinalen Cu(111) Oberflächen, Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) zur (111), (001) und (110) Oberfläche ist in Abbildung 4.14 skizziert. Diese vizinalen Oberflächen weisen alle Stufen parallel zur  $[\bar{1}\bar{1}0]$  Richtung auf und sind gegenüber (111) entweder hin zur (001) Oberfläche (Cu(112))

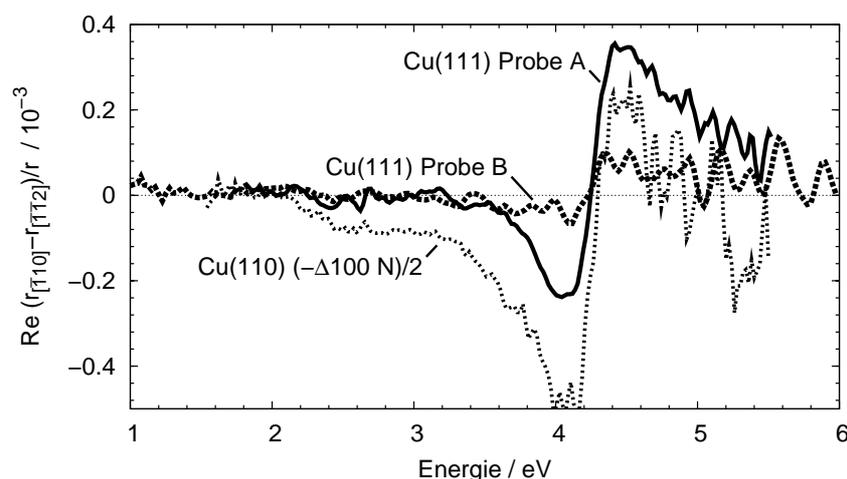


**Abbildung 4.14:** Modell der Cu(111) und der vizinalen (111) Oberflächen sowie der Vergleich mit der Cu(001) und Cu(110) Oberfläche. Oben: Seitenansicht auf die Oberflächen. Pfeile markieren die Oberflächennormale der jeweiligen Oberfläche. Die Lage der Oberflächennormale ist mit Millerschen Indizes in eckigen Klammern angegeben. Der Verkippungswinkel zur  $[111]$  Richtung ist durch grau unterlegten Text neben den Pfeilen bezeichnet. Die eingebettete Darstellung skizziert die Lage der fcc-Einheitszelle zu dem dargestellten Oberflächenschnitt. Unten: Draufsicht auf die Oberflächen. Die Breite der Terrassen ist durch den eingebetteten Text angegeben. Die drei unterscheidbaren Lagen der ABC-Lagenfolge sind durch unterschiedliche Grauschattierungen markiert.

oder hin zur (110) Oberfläche (Cu(221), Cu(332) und Cu(443)) verkipppt. Vizinale (111) Oberflächen mit Verkippungen hin zur (110) Oberfläche zeigen an den Stufenkanten eine Anordnung der Atome in Form eines Dreiecks. Es wird von einer B-Typ Stufe oder ( $11\bar{1}$ ) Facette gesprochen. Bei einer Verkippung hin zu der (001) Oberfläche bilden die Stufenatome die Struktur eines Rechtecks aus (A-Typ oder (100) Facette). Baumberger et al. sehen gerade in diesen unterschiedlichen Stufentypen die Ursache für das Auftreten und das Vorzeichen einer Struktur in der optischen Anisotropie bei 4.2 eV [81]. Die elektronische Bandstruktur von vizinalen Cu(111) Oberflächen ist Gegenstand zahlreicher Publikationen [81–88]. Auf vizinalen Cu(111) Oberflächen werden Beiträge von 1D “Confinement” Elektronenzuständen (Terrassenmodulation) und 2D Überstrukturen (Stufenmodulation) gefunden [85, 86, 88]. Der Oberflächenzustand am  $\bar{G}$  der Oberflächenbrillouinzone zeigt Terrassenmodulation unterhalb einer Verkippung von  $7^\circ$  der Oberflächennormale gegen die  $[111]$  Richtung und eine Stufenmodulation für größere Verkippungen [88]. Die Existenz eines Oberflächen Spiegelzustandes an den Stufenkanten der Cu(111) Oberfläche wird vermutet [84]. Die beobachteten Confinementeffekte durch Stufenkanten zeigen sich besonders deutlich an Oberflächenzuständen, da diese nicht direkt mit den Volumenzuständen wechselwirken können. Es lässt sich jedoch vermuten, dass alle elektronischen Zustände an der Oberfläche durch die Anwesenheit des periodischen Stufenübergitters anisotrop modifiziert

werden. Somit ist ein Einfluss von Stufen der vizinalen Oberflächen auf die optische Anisotropie sehr wahrscheinlich.

### 4.2.1 Optische Anisotropie der reinen Cu(111) Oberfläche

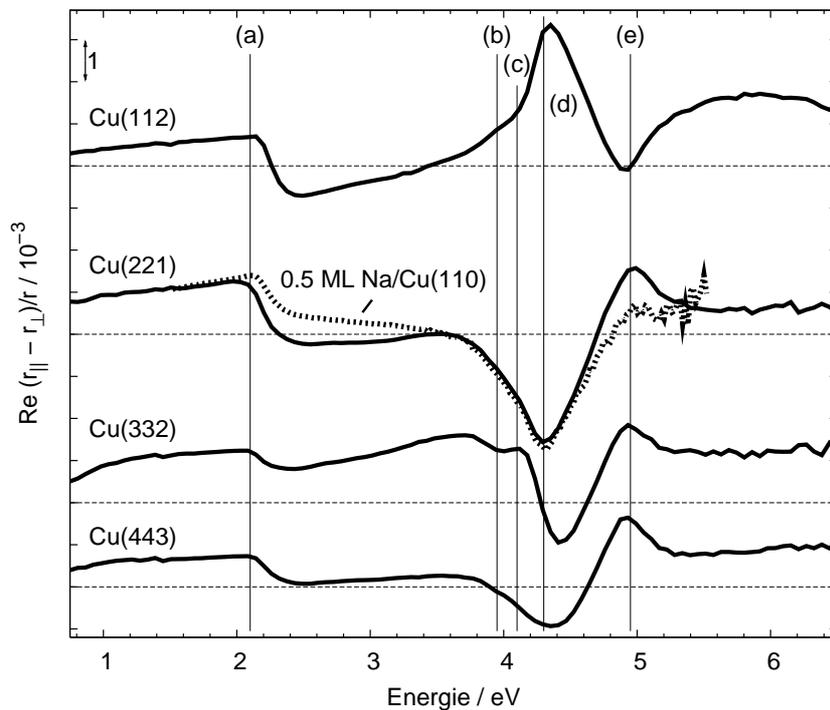


**Abbildung 4.15:** Optische Anisotropie von Cu(111) von zwei unterschiedlichen Proben im Vergleich zu dem Verspannungsbeitrag der Cu(110) Oberfläche (siehe Abb. 4.11).

Die Cu(111) Oberfläche sollte aus Symmetriegründen für RAS Messungen optisch isotrop sein. Ebenso ist bei homogener Verteilung von Kristallversetzungen keine optische Anisotropie zu erwarten. Uniaxiale Verspannung im Kristall kann jedoch zu einer optischen Anisotropie führen, da die hierbei entstehenden Versetzungen nicht homogen über alle Gleitebenen verteilt sind. Abbildung 4.15 zeigt die optische Anisotropie von zwei Cu(111) Proben. Die Proben wurden im UHV mit den selben Parametern wie die Cu(110) Proben durch Ionenätzen und Tempern präpariert. Beide Proben zeigen eine Struktur mit einem Minimum bei 4.1 eV und einem Maximum bei 4.4 eV. Die Intensität dieser Struktur ist jedoch bei Probe A drei mal größer als bei Probe B. Ein Vergleich des spektralen Verlaufs dieser Anisotropien zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem in Abbildung 4.11 dargestellten Beitrag von Kristallverspannung auf die optische Anisotropie von Cu(110). Daraus lässt sich folgern, dass die beobachtete optische Anisotropie von Cu(111) auf den Einfluss von Kristalldefekten bzw. Verspannungen zurückzuführen ist. Es zeigen sich auf den untersuchten Cu(111) Oberflächen keine weiteren Beiträge zur optischen Anisotropie. Somit ist die Cu(111) Oberfläche, wie erwartet, optisch isotrop und die gefundenen Anisotropien stammen nicht von der Oberfläche.

### 4.2.2 Optische Anisotropie von vizinalen Cu(111) Oberflächen

Die optische Anisotropie der reinen Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) Oberflächen ist in Abbildung 4.16 dargestellt. Für den Vergleich der energetischen Positionen ist die Lage der Strukturen von Cu(110) aus Abbildung 4.3 eingezeichnet. Das Spektrum von Cu(221) wird



**Abbildung 4.16:** Optische Anisotropie von Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) nach der Präparation durch Ionenätzen und Tempern. Zum Vergleich sind die energetischen Positionen der RAS Strukturen von Cu(110) (a bis e) (siehe Abb. 4.3) und das RAS Spektrum von 0.5 ML Na auf Cu(110) (siehe Abb. 4.7) eingezeichnet.

mit dem RAS Spektrum von 0.5 ML Na auf Cu(110) aus Abbildung 4.7 verglichen. Die Präparation der Proben erfolgte im UHV äquivalent zu der der Cu(110) Oberfläche und wurde mit LEED, Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie (UPS) und XPS Messungen überprüft. Die Proben wurden auf speziellen Probenträgern montiert, die eine beliebige Rotation um die Normale der Probenoberfläche ermöglichte. Die optische Anisotropie jeder Oberfläche wurde in Winkelschritten von  $15^\circ$  gemessen. Diese Vorgehensweise ermöglicht einerseits die Trennung der optischen Anisotropie der Proben vom Verspannungsbeitrag des Quarzfensters an der UHV Apparatur und andererseits die Bestimmung der Symmetrierichtungen der optischen Anisotropie. Für alle Proben außer Cu(332) zeigte sich, dass die ausgezeichneten Achsen der optischen Anisotropie senkrecht und parallel zu den Stufen der Oberfläche liegen. Aus diesen Messreihen wurden die RAS Spektren, gezeigt in Abbildung 4.16, extrahiert. Dargestellt ist die normierte Differenz der Reflektivität parallel minus senkrecht zu den Stufen der Oberfläche. Projiziert auf die  $\{111\}$  Ebene ergibt sich für die Messgeometrie:  $(r_{[\bar{1}10]} - r_{[\bar{1}\bar{1}2]})/r$ .

Alle Strukturen der optischen Anisotropie von den vizinalen Cu(111) Oberflächen liegen energetisch an Positionen wie sie auch bei Cu(110) gefunden werden (Positionen (a) bis (e)). Es treten keine zusätzlichen Strukturen auf. Während der energetische Verlauf der RAS Spektren von Cu(221), Cu(332) und Cu(443) dem Verlauf der optischen Anisotropie von Cu(110) gleicht, ergeben sich erhebliche Unterschiede für Cu(112). Die optische Anisotropie der vizinalen Cu(111) Oberflächen wird im Folgenden in der Reihenfolge Cu(221), Cu(443), Cu(332) und

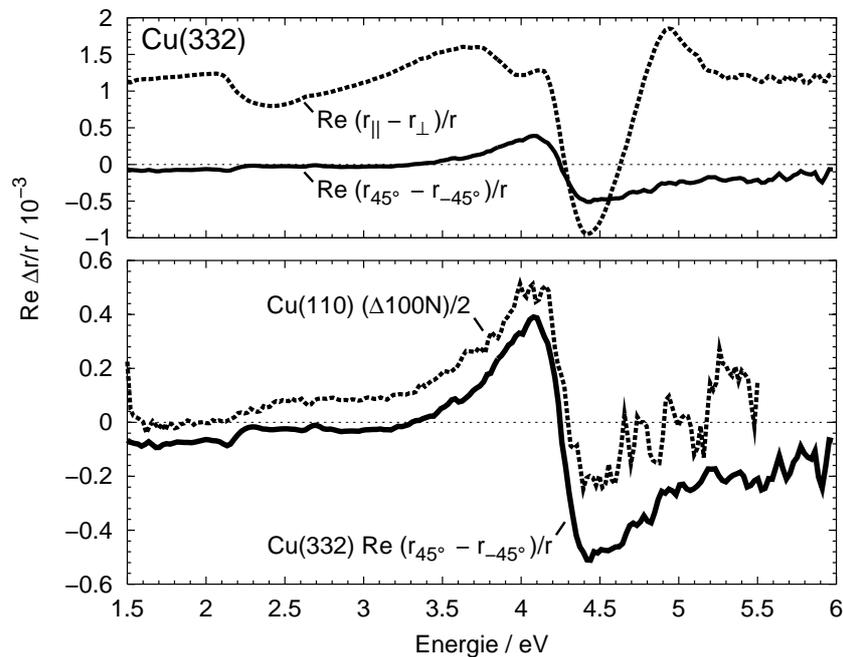
Cu(112) behandelt.

Die Cu(221) Oberfläche ist von den hier untersuchten Oberflächen die am stärksten in Richtung [110] verkippte Oberfläche, was sich auch in einer Ähnlichkeit der optischen Anisotropien von Cu(221) und Cu(110) widerspiegelt. Ein Vergleich der optischen Anisotropie von 0.5 ML Na auf Cu(110) mit Cu(221) zeigt eine ausgezeichnete Übereinstimmung der energetischen Positionen der Strukturen sowie eine gute Übereinstimmung des spektralen Verlaufs. Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, bewirkt die Adsorption von Na auf Cu(110) eine Verminderung der Oberflächenrelaxierung und eine Unterdrückung der Oberflächenzustände. Es treten keine zusätzlichen RAS Strukturen durch Na-Adsorption auf. Die Strukturen (d) und (e) auf Cu(110) und Cu(221) treten energetisch an gleicher Position mit annähernd gleicher Intensität auf. Diese Strukturen wurden im vorangegangenen Kapitel dem Kristallvolumen zugeordnet.

Wie bereits angesprochen, ist die Relaxierung der Oberflächenatome auf Cu(111) wesentlich kleiner als auf Cu(110). Der Oberflächenzustand bei  $\bar{Y}$  der Cu(110) Oberfläche (RAS Struktur bei 2.1 eV) existiert auf der Cu(111) Oberfläche nicht. Somit ist es nicht erstaunlich, dass das RAS Spektrum der Cu(221) Oberfläche dem der Na bedeckten Cu(110) Oberfläche gleicht. Es verbleibt die Stufendichte als wesentlicher Unterschied zwischen beiden Oberflächen. Bei dem Vergleich der Na bedeckten und der thermisch aufgerauten Cu(110) Oberfläche in Abbildung 4.7 wurde bereits ein Zusammenhang des spektralen Verlaufs bei 2.2 eV mit der Stufenausrichtung an der Oberfläche vermutet. Auch der Vergleich der Na bedeckten Cu(110) Oberfläche mit Cu(221) bekräftigt diese Vermutung, da gerade im Bereich nahe 2.2 eV die größten Unterschiede der Spektren auftreten.

Das RAS Spektrum von Cu(443) ist qualitativ bis auf eine verringerte Intensität der Strukturen äquivalent zu dem RAS Spektrum von Cu(221). Die Intensitätsunterschiede entsprechen dem Verhältnis der Stufendichten dieser Oberflächen. Ebenso gleicht das RAS Spektrum der Cu(332) Oberfläche dem der Cu(221) Oberfläche, jedoch ist die Struktur (c) deutlich ausgeprägt. Bei der Diskussion der optischen Anisotropie von Cu(110) im vorangegangenen Kapitel hatte sich gezeigt, dass Struktur (c) wesentlich durch eine Volumendefektstruktur und eine weitere Struktur, verursacht durch Oberflächenrelaxierung, beeinflusst wird. Da die Oberflächenrelaxierung auf Cu(111) Oberflächen wesentlich geringer ist als auf Cu(110), liegt die Vermutung nahe, dass es sich hier um den Einfluss von Kristalldefekten bzw. Verspannungen handelt. Diese Vermutung wird durch eine Analyse der bei verschiedenen Rotationswinkeln gemessenen RAS Spektren erhärtet. In Abbildung 4.17 (oben) sind die RAS Spektren von Cu(332) bei zwei verschiedenen Rotationswinkeln der Probe um die Normalenrichtung der Oberfläche, das bereits in Abbildung 4.16 gezeigte Spektrum und das RAS Spektrum bei einer Drehung der Probe um  $45^\circ$  dargestellt. In der um  $45^\circ$  gedrehten Messgeometrie tragen die Anisotropien, deren ausgezeichnete Achsen parallel bzw. senkrecht zu den Stufen liegen, nicht mehr zum RAS Spektrum bei. Während bei allen anderen vizinalen Cu Proben keine Anisotropie in dieser Geometrie gemessen werden konnte, zeigt aber die Cu(332) Probe eine deutliche Anisotropie. Abbildung 4.17 (unten) vergleicht diese Anisotropie mit dem Verspannungsbeitrag der Cu(110) Oberfläche. Die Übereinstimmung des spektralen Verlaufs und der energetischen Positionen der Strukturen der RAS Spektren bestätigt, dass Struktur (c) von Kristalldefekten des Volumens verursacht wird. Es handelt sich um die bereits im vorangegangenen Kapitel behandelte Volumendefektstruktur.

Von den untersuchten vizinalen Cu(111) Proben ist nur Cu(112) hin zur [001] Richtung verkippt. Dieser Unterschied wird auch im spektralen Verlauf der optischen Anisotropie deutlich.

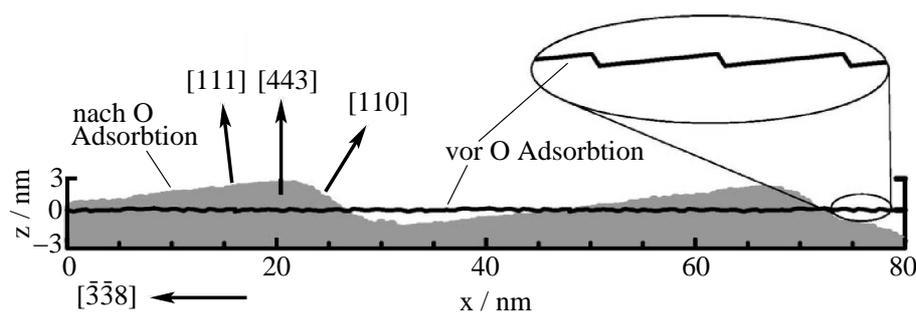


**Abbildung 4.17:** Oben: Optische Anisotropie von Cu(332). Veränderung der Intensität durch Rotation der Probe um die Oberflächennormale. Unten: Vergleich mit dem Verspannungsbeitrag der Cu(110) Oberfläche (siehe Abb. 4.11).

Cu(221) und Cu(112) haben ähnliche Terrassenbreiten (siehe Abb. 4.14). Dies führt offensichtlich auch zu ähnlichen Intensitäten der RAS Strukturen. Die Spektren von Cu(112) und Cu(221) sind bis zu einer Photonenenergie von 3.5 eV nahezu identisch. Für Energien größer 3.5 eV ist das Spektrum von Cu(112) dem an der x-Achse gespiegelten Spektrum von Cu(221) ähnlich. So zeigt bei Cu(112) Struktur (d) ein positives und Struktur (e) ein negatives Vorzeichen der Intensität. Baumberger et al. verknüpfen diese Strukturen mit der Anordnung der Atome an den Stufenkanten [81]. Während sich bei Cu(112) A-Typ Facetten an den Stufenkanten ausbilden, zeigen sich B-Typ Facetten bei Cu(221) (siehe Abb. 4.14). Bei der vorangegangenen Diskussion von Cu(110) hatte sich jedoch gezeigt, dass (d) und (e) unabhängig von der Oberflächenmorphologie sind und wahrscheinlich dem Kristallvolumen zuzuordnen sind. Weitere Aufschlüsse über die Zuordnung von (d) und (e) werden sich durch die anschließende Diskussion der Veränderung der optischen Anisotropie durch Sauerstoffadsorption ergeben.

### 4.2.3 Adsorption von Sauerstoff - Facettierung

Die Adsorption von Sauerstoff auf Cu(221), Cu(332) und Cu(443) bei Raumtemperatur führt zu einer vollständigen Facettierung der Oberfläche [89]. Es bilden sich große, sich abwechselnde (111)- und (110)-Terrassen aus. Die Breite der (111)-(110) Facetten liegt zwischen 12 nm (Cu(221)) und 50 nm (Cu(443)). Abbildung 4.18 skizziert die Facettenbildung durch Adsorption von 5 - 8 L Sauerstoff bei Raumtemperatur auf Cu(443) [89]. Da Cu(111) gegenüber Cu(110) einen um mehrere Größenordnungen kleineren Haftkoeffizienten für Sauerstoff hat, ist bei ei-

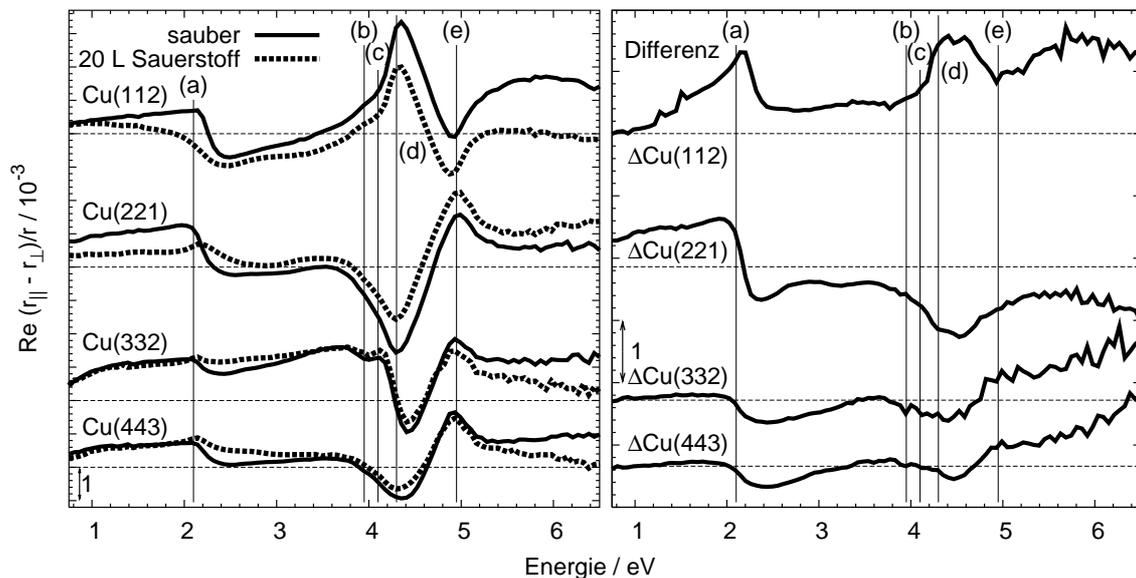


**Abbildung 4.18:** Schematische Darstellung der Veränderungen auf der Cu(443) Oberfläche durch Adsorption von 5 - 8 L Sauerstoff bei Raumtemperatur (Abb. nach Ref. [89]).

nem geringen Sauerstoffangebot von 5 - 20 L keine Sauerstoffkontamination der (111)-Terrassen zu erwarten. Während die (111)-Terrassen somit nicht mit Sauerstoff bedeckt sind, bildet sich auf den (110)-Terrassen die Cu(110)-(2×1)-O Rekonstruktion aus [89]. Die sich durch Sauerstoffadsorption ausbildende Struktur ist der Struktur eines Blazegitters sehr ähnlich, jedoch ist die Strukturbreite wesentlich kleiner als die Wellenlänge des Lichts im untersuchten Spektralbereich. Es zeigt sich jedoch, dass selbst periodische Strukturen im Subwellenlängenbereich die optischen Eigenschaften erheblich beeinflussen können [90–93]. So wurden an in Oberflächen eingätzten Gräben die Kopplung von Oberflächenplasmonen und Licht beobachtet [90, 91]. Transmissionsresonanzen in Wellenlängenbereichen größer der Gitterperiodizität in Abhängigkeit der Polarisationsrichtung des Lichts wurden nachgewiesen [92]. Ebenso wurden Subwellenlängengitter für eine achromatische Phasenretardierung des Lichtes vorgestellt [93]. Die in der Literatur verwendeten Gitterstrukturen wurden meist elektronenlithographisch mit Ätziefen von 100 nm und darüber hergestellt. Die hier betrachtete Facettenstruktur weist aber nur eine Ausdehnung senkrecht zur Oberfläche bis zu 4 nm auf, so dass keine starken Effekte erwartet werden. Dennoch kann ein Einfluss von den oben beschriebenen Phänomenen auf die optische Anisotropie der facettierten Cu(111) Oberflächen nicht ausgeschlossen werden.

Die Veränderungen durch Sauerstoffadsorption auf der Cu(112) Oberfläche unterscheidet sich stark von den oben beschriebenen Facettierungen. Unterhalb von 250 K wird eine ungeordnete Anlagerung von Sauerstoff gefunden. Bei Temperaturen über 300 K bilden sich Doppelstufen aus. Diese Doppelstufen sind bis zu einer Temperatur von 800 K stabil. Sauerstoff wird an den Stufenkanten dieser Doppelstufen adsorbiert und bildet eine c(2×2) Rekonstruktion [94]. Abbildung 4.19 (links) zeigt die Spektren der untersuchten vizinalen Cu(111) Oberflächen vor und nach der Adsorption von 20 L Sauerstoff. Für alle Oberflächen zeigt sich eine ausgeprägte Veränderung des spektralen Verlaufs in der Nähe von Struktur (a) bei 2.2 eV. Die Strukturen (d) und (e) werden kaum verändert. Der vermutete Zusammenhang von Stufenkanten und spektralem Verlauf bei 2.2 eV bestätigt sich auch hier. Offensichtlich sind die Strukturen (d) und (e) unabhängig von der Stufendichte. Nach Baumberger et al. sind jedoch (d) und (e) durch die Stufenatome verursacht [81].

Auf der rechten Seite von Abbildung 4.19 sind die Veränderungen der optischen Anisotropie durch Sauerstoffadsorption dargestellt. Deutlich zeigt sich die Veränderung bei 2.2 eV. Es bildet sich jedoch auch eine Struktur bei 4.5 eV heraus. Eventuell ist diese Struktur auf eine

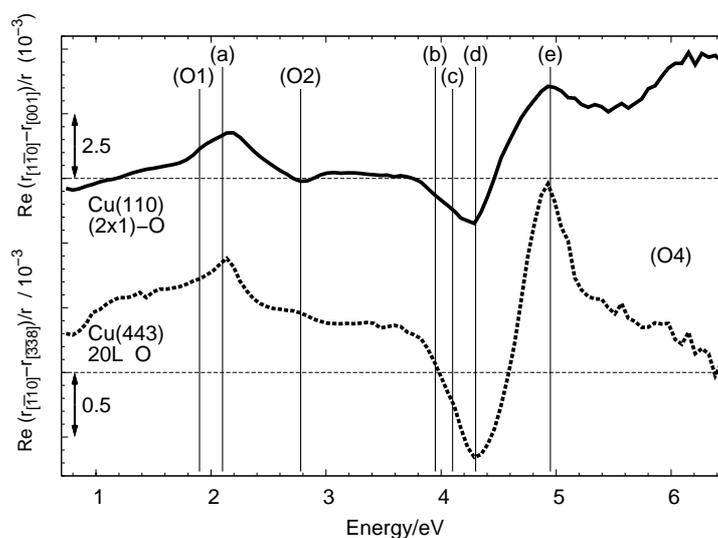


**Abbildung 4.19:** Links: Optische Anisotropie von den reinen Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) Oberfläche und den jeweiligen sauerstoffbedeckten Oberflächen. Rechts: Differenzspektren zwischen reinen und sauerstoffbedeckten Oberflächen.

Veränderung von (d) und (e) zurückzuführen. Die Untersuchung an Cu(110) erbrachte aber keinen Hinweis einer Abhängigkeit von (d) und (e) von der Oberflächenmorphologie. Gemessen an der Intensität von (d) und (e) fallen die Veränderungen durch Sauerstoff Adsorption und Facettierung geradezu verschwindend gering aus. So erscheint es sehr unwahrscheinlich, dass diese Strukturen direkt mit der Oberflächenmorphologie verknüpft sind.

Bemerkenswert ist auch der nahezu identische spektrale Verlauf der Differenzspektren von Cu(332) und Cu(443). Die optische Anisotropie des reinen Cu(332) Kristalls zeigt einen deutlichen Beitrag der Volumendefektstruktur, Cu(443) dagegen keinen. Die identischen Veränderungen durch Sauerstoffadsorption zeigen deutlich, dass die Struktur beider Oberflächen bis auf die unterschiedliche Stufendichte identisch ist und die Volumendefektstruktur durch eine Änderung der Oberflächenmorphologie nicht beeinflusst wird.

Weitere Aufschlüsse liefert ein Vergleich der optischen Anisotropie der facettierten Cu(443) Oberfläche mit dem RAS Spektrum von Cu(110)-(2×1)-O. Auf der facettierten Cu(443) Oberfläche sind 20% der Oberfläche mit Cu(110) Facetten bedeckt. Diese Facetten zeigen eine (2×1) Sauerstoffrekonstruktion, wie sie auch auf der Cu(110) Oberfläche gefunden wird. Es ist also anzunehmen, dass das RAS Spektrum der Cu(110)-(2×1)-O den Flächenanteilen entsprechend auf der facettierten Cu(443) Oberfläche auftritt. In Abbildung 4.20 sind die RAS Spektren der facettierten Cu(443) und der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche gezeigt. Die Intensität des Cu(110)-(2×1)-O RAS Spektrums ist dem Flächenanteil entsprechend um den Faktor 5 verkleinert dargestellt. Es zeigt sich, dass die Strukturen (d) und (e) auf der facettierten Cu(443) Oberfläche doppelt so groß sind, wie durch den Cu(110)-(2×1)-O Anteil zu vermuten wäre. Es stellt sich jedoch die Frage, inwieweit der Beitrag der Cu(110) Facetten zur optischen Anisotropie dem spektralen Verlauf von Cu(110)-(2×1)-O entspricht. Betrachtet man die sauerstoffinduzierten Strukturen (O1) bis

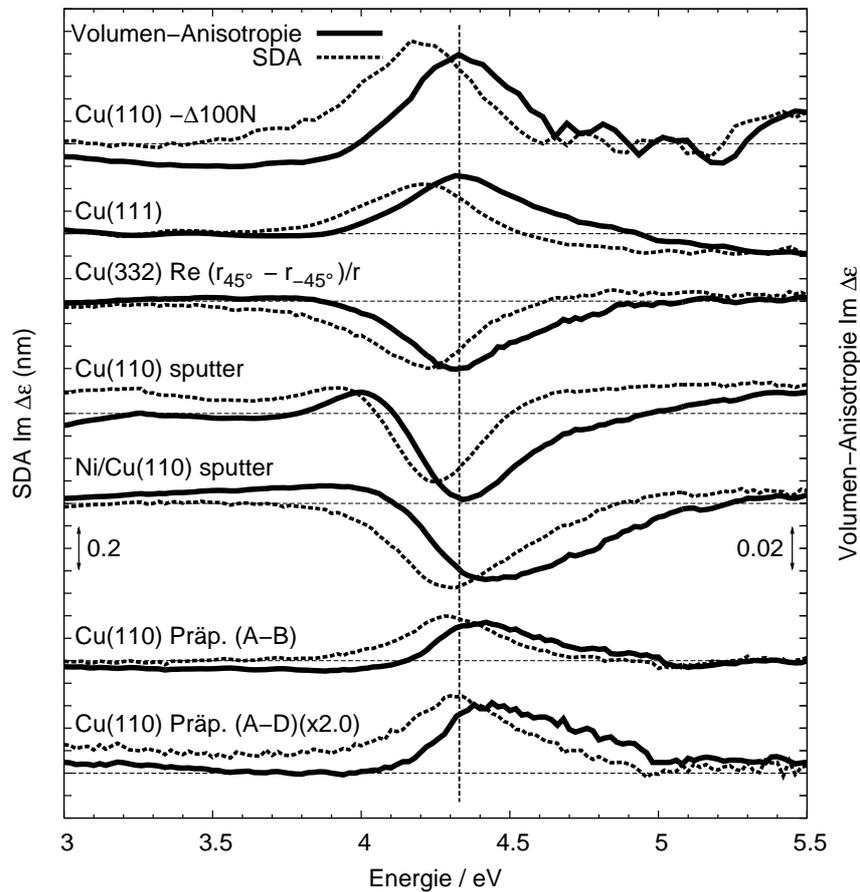


**Abbildung 4.20:** Vergleich von Cu(110)-(2×1)-O und der durch Sauerstoffadsorption facettierten Cu(443) Oberfläche. Links an den Graphen ist der Darstellungsmaßstab des jeweiligen Spektrums angegeben.

(O4), so finden sich dort deutliche Unterschiede. Während die Strukturen (O1) und (O3) nicht erkennbar sind, zeigen die Strukturen (O2) und (O4) gerade ein entgegengesetztes Vorzeichen wie auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche. Dieses Verhalten kann eine Folge der Verkippung (28°) der Cu(110) Facetten gegenüber der Cu(443) Oberfläche sein, oder Folge der geringen lateralen Ausdehnung (10 nm) der Cu(110) Facetten in  $[\bar{3}\bar{3}8]$  Richtung. Auch Effekte bedingt durch die periodische Struktur der Facetten, wie sie oben beschrieben werden, sind denkbar [90–93]. Es erscheint unwahrscheinlich, dass die Stufenatome zu den Strukturen (d) und (e) führen, da die Intensität dieser Strukturen auf den facettierten Oberflächen größer als erwartet ist. Auch die Analyse der sauerstoffinduzierten Strukturen im Vergleich zu Cu(110)-(2×1)-O lässt auf einen stark veränderten Beitrag der Cu(110) Facetten zur optischen Anisotropie schließen.

Die Untersuchung der optischen Anisotropie von Cu(111) und den vizinalen Cu(111) Oberflächen bekräftigt somit die Ergebnisse aus den Messungen an Cu(110). Diese Oberflächen zeigen nur die auch bei Cu(110) auftretenden Anisotropien (a) - (d). Das Verhalten des spektralen Verlaufs der optischen Anisotropie bei 2.2 eV korreliert mit der Stufendichte. Die Cu(111) Oberfläche ist optisch isotrop. Die gefundene Anisotropie auf den untersuchten Cu(111) Proben wird als Volumendefektstruktur identifiziert. Diese Volumendefektstruktur wird auch auf der Cu(332) Probe gefunden und ist dort unabhängig von der Oberflächenmorphologie. Die Analyse der Strukturen (d) und (e) legt nahe, dass diese Strukturen nicht von den Stufenatomen verursacht werden, jedoch sind sie nicht gänzlich unabhängig von der Oberflächenmorphologie.

### 4.3 Analyse der Volumendefektstruktur von Kupfer-Einkristallen



**Abbildung 4.21:** Berechnung der SDA und der Volumenanisotropie für die gefundenen Volumendefektstrukturen. Durch die energetische Position der Strukturen lässt sich der oberflächen- bzw. volumenartige Ursprung der Anisotropie ableiten.

Die im vorangegangenen Abschnitt gefundenen Volumendefektstrukturen lassen sich auf eine Verspannung der Oberfläche bzw. des gesamten Kristalls zurückführen. Während bei mechanischer Verspannung eine Volumenanisotropie offensichtlich erscheint, ist dies für die gefundenen Anisotropien in den anderen Fällen noch unklar. Der spektrale Verlauf für alle Volumendefektstrukturen ist gleich, jedoch ergeben sich energetische Verschiebungen. Diese energetischen Verschiebungen können Hinweise darauf geben, ob es sich um eine volumen- oder oberflächennahe Anisotropie handelt.

In Abbildung 4.21 wird die SDA und die volumendielektrische Anisotropie der Volumendefektstrukturen, berechnet nach Gleichung 3.2 und 3.3, verglichen. Unter der Annahme, dass hier immer die gleiche Modifikation der dielektrischen Funktion ( $\Delta\epsilon$ ) zu den beobachteten "Volumendefektstrukturen" führt, sollte diese immer an der gleichen energetischen Position liegen. Ei-

ne Verspannung des gesamten Kristalls liegt eindeutig bei der mechanisch verspannten Cu(110) Probe vor (siehe Abb. 4.11). Hier muss die dielektrische Anisotropie nach Gleichung 3.3 berechnet werden. Es findet sich eine Struktur bei 4.32 eV. Auch die dielektrischen Anisotropien der Cu(111), der Cu(332) ( $45^\circ$ ) und der intensiv ionengeätzten Cu(110) Oberflächen zeigen Strukturen genau bei 4.32 eV. Es ist davon auszugehen, dass diese Anisotropie der Kristalle bis in die oberflächenentfernten Regionen reicht, zumindest in Bereiche größer als die Lichteindringtiefe.

Die unteren drei Spektren sind gegenüber den oberen vier energetisch verschoben. Hier liegt die SDA (Gleichung 3.2) in der Nähe von 4.32 eV. Es sind die Cu(110) Präparationsunterschiede (A-D) sowie (A-B) und die Struktur der ionengeätzten Ni/Cu(110) Oberfläche. Diese Anisotropien stammen somit wahrscheinlich von oberflächennahen Regionen. Für den Präparationsunterschied (A-B) ist dies jedoch nicht mehr so eindeutig. Hier erreicht vermutlich die Tiefe der Verspannung bereits die Größenordnung der Lichteindringtiefe.

Die obige Analyse der SDA bzw. der volumendielektrischen Anisotropie zeigt, dass alle gefundenen Volumendefektstrukturen der gleichen dielektrischen Anisotropie zugeordnet werden können. Die energetischen Verschiebungen der RAS Strukturen sind durch unterschiedliche Ausdehnung der Verspannung (Volumenverspannung vs. Oberflächenverspannung) bedingt.

## **4.4 Schlussfolgerungen für die optische Anisotropie von Kupfer-Einkristallen**

Die Analyse der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallen zeigt, dass nur die Kristallverspannung einen Volumenbeitrag zur optischen Anisotropie liefert. Alle anderen beobachteten Anisotropien sind direkt oder indirekt mit der Oberfläche verknüpft.

Als Oberflächenanisotropien wurden die Strukturen (a) bei 2.1 eV und Struktur (c) bei 4.05 eV identifiziert. Während Struktur (a) von Oberflächenzuständen verursacht ist, erscheint Struktur (c) mit der Relaxierung der Oberflächenatome verknüpft zu sein.

Die Strukturen (d) bei 4.3 eV und (e) bei 4.95 eV sind wahrscheinlich oberflächeninduzierte Volumenanisotropien und somit nur mittelbar durch die Oberfläche verursacht. Die Analyse der facettierten vizinalen Cu(111) Oberflächen legt nahe, dass hier auch die Cu(111) Flächen zu den Strukturen (d) und (e) beitragen.

Die Volumendefektstruktur bei 4.2 eV wird durch Kristallverspannungen verursacht. Diese Anisotropie ist nicht von der Oberfläche abhängig, kann jedoch durch die Präparation (Ionenätzen, Tempern) in der Oberflächenregion lokalisiert sein. Ob die Verspannung in der Oberflächenregion lokalisiert ist oder eine Verspannung des gesamten Kristalls vorliegt, kann durch die energetische Position dieser Struktur ermittelt werden.

Für die Analyse der optischen Anisotropie von Ni Filmen im Kapitel 6.1 wird diese "Volumendefektstruktur" als Verspannungsbeitrag berücksichtigt. Bei dem dort verwendeten Kristall zeigte sich ein an der Oberfläche lokalisierter Verspannungsbeitrag.

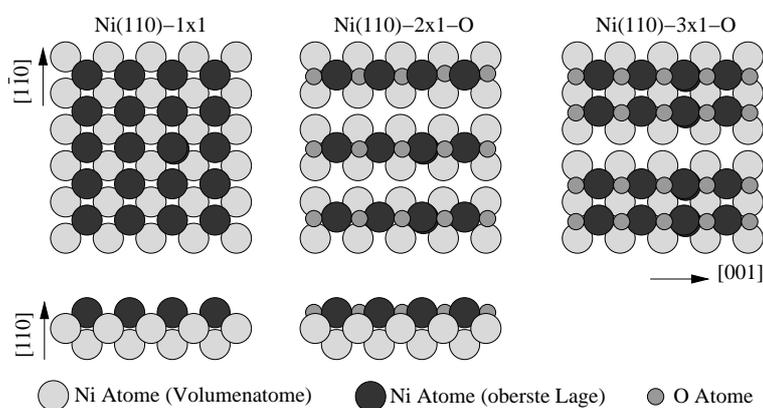
# Kapitel 5

## Optische Spektroskopie an Ni(110)

Die optischen und magneto-optischen Eigenschaften von Ni bzw. von Ni(110) Oberflächen sind in zahlreichen Veröffentlichungen dargestellt worden [95–98]. Die publizierten Daten der optischen Anisotropie und der magneto-optischen Konstanten sind jedoch sehr widersprüchlich. Für das im nächsten Kapitel dargestellte Wachstum von Ni auf Cu(110) ist eine Charakterisierung der Ni(110) Oberfläche unumgänglich. Die Untersuchung von Ni(110) dient nur der Vorbereitung auf die nachfolgende Betrachtung des Wachstums von Ni Filmen auf Cu(110).

### 5.1 Struktur der Oberfläche

Nickel bildet, ebenso wie Kupfer, einen fcc Kristall mit einer Gitterkonstante  $a$  von  $3.52 \text{ \AA}$  (siehe Abb. 5.1). Wie die Cu(110) rekonstruiert die reine Ni(110) Oberfläche nicht, stattdessen relatieren die Oberflächenatome. Die sauerstoffinduzierte Oberflächenrekonstruktion von Ni(110)

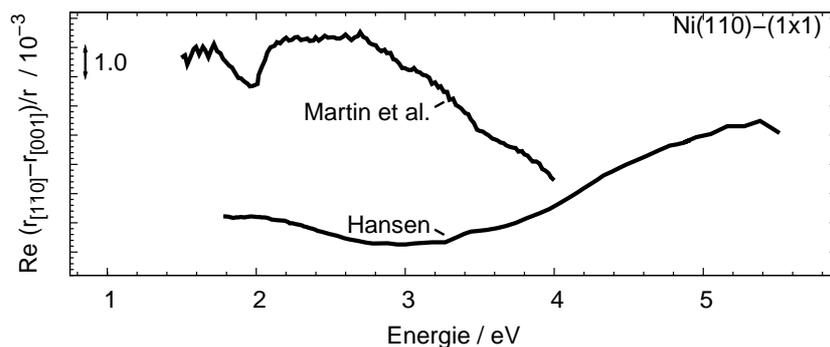


**Abbildung 5.1:** Schematische Darstellung der Atom-Anordnung der Ni(110)-(1×1), Ni(110)-(2×1)-O und Ni(110)-(3×1)-O Oberfläche. Gezeigt ist die Drauf- (oben) und Seitenansicht (unten) der jeweiligen Oberfläche.

hängt von der Sauerstoffdosierung ab [99]. Die (3×1) Rekonstruktion bildet sich nach der Adsorption von mehr als 4 Langmuir Sauerstoff. Diese Rekonstruktion besteht aus Ni-O Doppelreihen entlang der [001] Richtung. Es sind 2/3 der Oberfläche mit Ni-O Reihen bedeckt. Durch Tempern der Ni(110)-(3×1)-O Oberfläche bilden sich weitere Rekonstruktionen aus. Zuerst bildet sich die Ni(110)-(2×1)-O Rekonstruktion und danach wiederum eine Ni(110)-(3×1)-O Rekonstruktion, jedoch mit einer 1/3 Bedeckung der Oberfläche mit Ni-O Ketten.

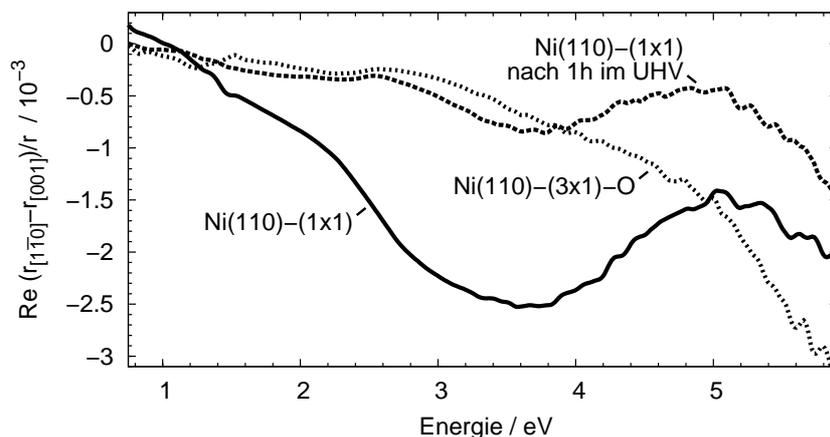
## 5.2 Optische Anisotropie

Im Gegensatz zu Cu(110) wurde die optische Anisotropie von Ni(110) bisher kaum untersucht. Abbildung 5.2 zeigt Messungen der optischen Anisotropie von Ni(110)-(1x1) [95, 96]. Die Autoren vermuten „local field“ Effekte und den Einfluss von elektronischen Übergängen zwischen besetzten d-Bändern und unbesetzten Bändern. Jedoch erscheint angesichts der inkonsistenten



**Abbildung 5.2:** Veröffentlichte Spektren der optischen Anisotropie von Ni(110)-(1x1) [95, 96]. Martin et al. publizierten nur eine relative Intensität (y-Achse), so dass der Nullpunkt der Intensität nicht angegeben werden kann.

Messergebnisse eine Diskussion über mögliche Ursachen der Anisotropie von Ni(110) zum jetzigen Zeitpunkt nicht sinnvoll. In Abbildung 5.3 sind RAS Spektren von der reinen Ni(110)-

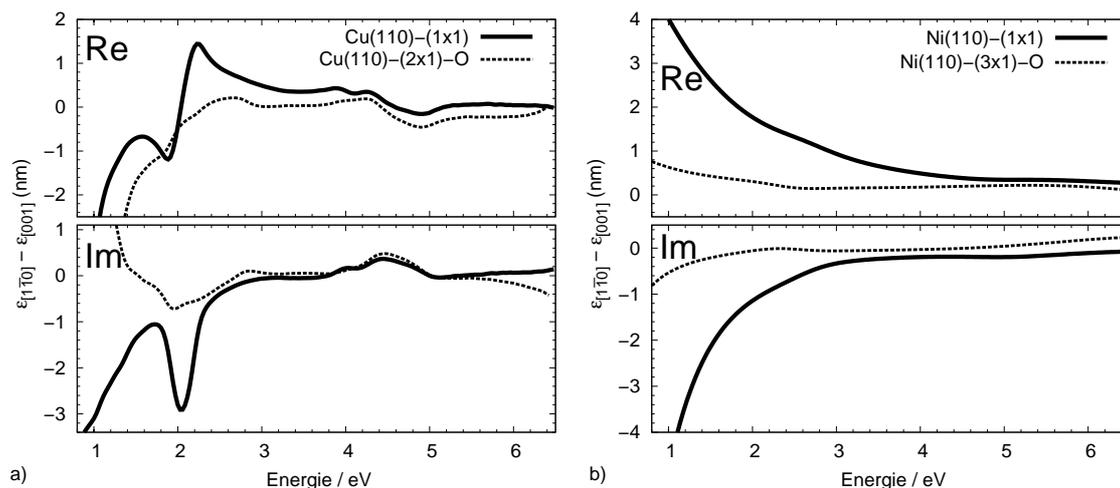


**Abbildung 5.3:** Optische Anisotropie von Ni(110)-(1x1) und Ni(110)-(3x1)-O

(1x1) Oberfläche nach der Präparation durch Ionenätzen und Tempern sowie nach einer Stunde im UHV gezeigt. Wasserstoffmoleküle, enthalten im Restgas des UHV, werden an der Nickel Oberfläche aufgebrochen und atomarer Wasserstoff lagert sich an, was zu einer raschen Änderung des RAS Spektrums führt. Im Weiteren wurde durch Einlass von Sauerstoff direkt nach der Präparation der reinen Oberfläche die Ni(110)-(3x1)-O Oberfläche gebildet. Die Anisotropie der

Ni(110)-(3x1)-O Rekonstruktion blieb über mehrere Stunden im UHV unverändert und ist somit inert gegenüber der reinen Oberfläche. Hansen et al. zeigten, dass die optische Anisotropien von Ni(110)-(3x1)-O und Ni(110)-(2x1)-O nahezu identisch sind [95].

Während das von uns gemessene Spektrum der Messung von Hansen gleicht, findet sich keine Übereinstimmung mit der Veröffentlichung von Martin et al. [96]. Ein Vergleich der SDA von Cu(110) und Ni(110), dargestellt in Abbildung 5.4, zeigt charakteristische Unterschiede. Während Cu(110) scharfe spektrale Strukturen zeigt, wird Ni(110) von einer drudeartigen di-



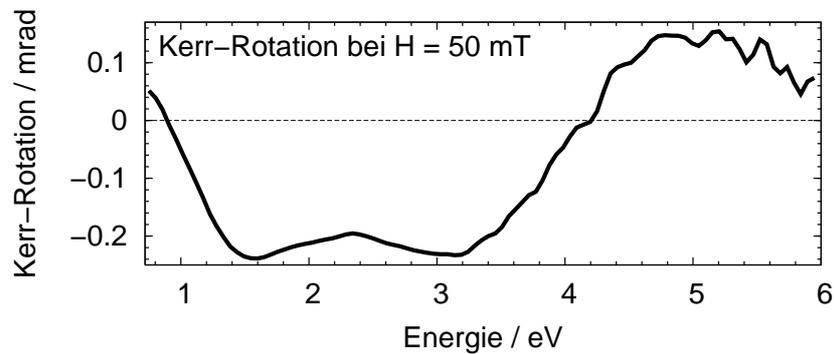
**Abbildung 5.4:** SDA der reinen und sauerstoffbedeckten Oberflächen von a) Cu(110) und b) Ni(110). Während Cu(110) spektral scharfe Strukturen zeigt, wird Ni(110) von einer drudeartigen Anisotropie dominiert.

elektrischen Anisotropie dominiert. So lässt sich vermuten, dass die bei Ni(110) auftretenden Anisotropien durch die freien Elektronen an der Oberfläche oder durch elektronische Übergänge im infraroten Spektralbereich verursacht werden.

Die hier gemessene optische Anisotropie von Ni(110)-(3x1) wird im nachfolgenden Kapitel zur Simulation der optischen Anisotropie von Ni Filmen auf Cu(110) verwendet. Für das Anliegen dieser Arbeit ist eine tiefere Analyse der optischen Anisotropie von Ni(110) nicht notwendig.

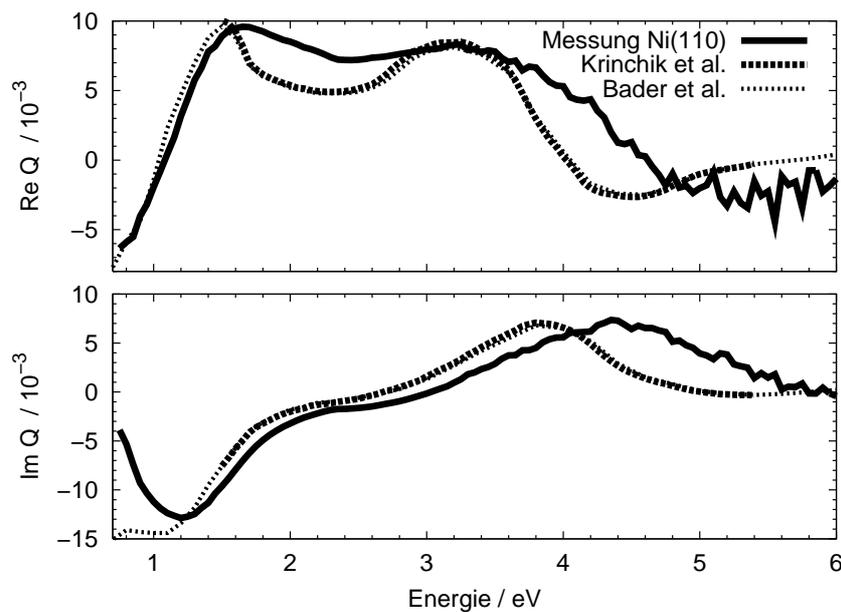
### 5.3 Magneto-optischer Kerr-Effekt

Das Anlegen eines äußeren Magnetfeldes parallel zur Probennormale ermöglichte die Messung eines polaren Kerr-Effektes. Da die leichte Achse der Magnetisierung für Nickel-Einkristalle in der [111] Ebene und somit in der Oberflächenebene liegt, konnte durch das äußere Magnetfeld die Magnetisierungsrichtung nicht vollständig parallel zur Oberflächennormale ausgerichtet werden. Eine MOKE Messung unter senkrechtem Einfall liefert somit eine zu kleine Intensität. Abbildung 5.6 zeigt die aus dem gemessenen Kerr-Effekt ermittelte Voigt Konstante von Ni(110), verglichen mit dem Literaturwert [97, 98]. Da durch das äußere Magnetfeld die Magnetisierung nicht vollständig senkrecht zur Oberfläche ausgerichtet werden konnte, kann nur der spektrale



**Abbildung 5.5:** Polare Kerr-Rotation von Ni(110). Da Ni(110) in Remanenz „in plane“ magnetisiert ist, wurde mit einem äußeren Magnetfeld (Richtung senkrecht zur Oberfläche) von 50 mT gemessen. Dieses Magnetfeld führt nur zu einer teilweisen „out-of plane“ Magnetisierung.

Verlauf der Voigt Konstante berechnet werden. Die Intensität wurde deshalb durch eine Anpassung an den Literaturwert festgelegt. Die hier ermittelte Voigt Konstante wird im nachfolgenden



**Abbildung 5.6:** Voigt Konstante von Ni(110), berechnet aus dem Kerr-Spektrum von Abb. 5.5, verglichen mit Messungen an amorphem Nickel [97, 98]

Kapitel mit der an Ni/Cu(110)-(2×1)-O Filmen bestimmten Voigt Konstante verglichen.

# Kapitel 6

## Ferromagnetische Filme auf Cu(110)

Für die im Rahmen dieser Arbeit veröffentlichten Ergebnisse von ferromagnetischen Filmen wurde folgende Definition der Dicke einer Monolage gewählt:  $1\text{ML} = \sqrt{2a^2}/2$ . Wobei  $a$  die Gitterkonstante des fcc Kristalls des entsprechenden Elements darstellt (z.B. Ni:  $1\text{ML} \hat{=} 0.2489\text{ nm}$ ). Zwar gilt für die (110) Oberfläche von fcc Kristallen, dass die Oberfläche bereits ab einer Bedeckung von  $\sqrt{2a^2}/4$  vollständig mit einer Lage Atomen besetzt ist und dies auch als Definition einer Monolage in den vorangegangenen Kapiteln verwendet wurde, aber hier wurde zum besseren Vergleich der Ergebnisse mit den Veröffentlichungen an (100) Oberflächen eine abweichende Definition der Schichtdicke bevorzugt.

### 6.1 Ni/Cu(110)

Eine große Anzahl von Veröffentlichungen beschäftigt sich mit Nickel auf Kupfer, vor allem wegen der hier auftretenden interessanten strukturellen und magnetischen Eigenschaften. Der größte Teil dieser Veröffentlichungen beschäftigt sich mit dem System Ni/Cu(001). So wurde pseudomorphes Wachstum für dieses System gemessen. Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten (Ni:  $3.52\text{ \AA}$ , Cu:  $3.61\text{ \AA}$ )[100] ist bei pseudomorphem Wachstum der Ni Atomabstand in der Filmebene vergrößert und senkrecht dazu verkleinert (tetragonale Verzerrung). Dies wurde für Schichtdicken bis zu mindestens 11 ML nachgewiesen [101–103]. An diesen Filmen wurde auch eine Rotverschiebung in den Off-Diagonal Elementen des Leitfähigkeitstensors nachgewiesen und als Folge der tetragonalen Verzerrung interpretiert, welche zusammen mit der Oberflächensymmetriebrechung zu einer Verengung der Ni-3d-Bänder führt [104]. Besonders intensiv wurden die magnetischen Eigenschaften von Ni/Cu(001) bei Raumtemperatur untersucht. Für Ni Filmdicken von bis zu 4 Monolagen konnte keine remanente Magnetisierung nachgewiesen werden [105–108]. Für Schichtdicken von 4 ML - 7 ML wurde eine Magnetisierung mit der leichten Achse in Richtung der Filmebene (in-plane) berichtet [105, 106, 109]. Ein Spinreorientierungsübergang zu einer leichten Achse der Magnetisierung senkrecht zur Filmebene (out-of-plane) folgt im Schichtdickenbereich von 8 ML bis 11 ML Ni [101, 106, 110–114]. Dieser Spinreorientierungsübergang ist eine Folge des Zusammenspiels unterschiedlicher Beiträge, wie magnetischer Volumen- und Oberflächenanisotropie, sowie der Formanisotropie des Films [111, 115]. Die „out-of-plane“ Anisotropie ist für mehr als  $10^6$  Ummagnetisierungszyklen stabil [116]. Oberhalb einer Ni Filmdicke von 15 ML zeigt ein starker Anstieg der Koerzitivität das Ende des epitaktischen Wachstums durch entstehende Fehlstellen an [117]. Neuere Veröffentlichungen zeigen, dass bei Verwendung von Sauerstoff als Surfactant der Spinreorientierungsübergang zu „out-of-plane“ Anisotropie bereits bei einer Ni Schichtdicke von 4.9 ML stattfindet, sowie dass Fehlstellen erst ab einer Schichtdicke von 20 ML eingebaut werden [117, 118]. Aufgrund

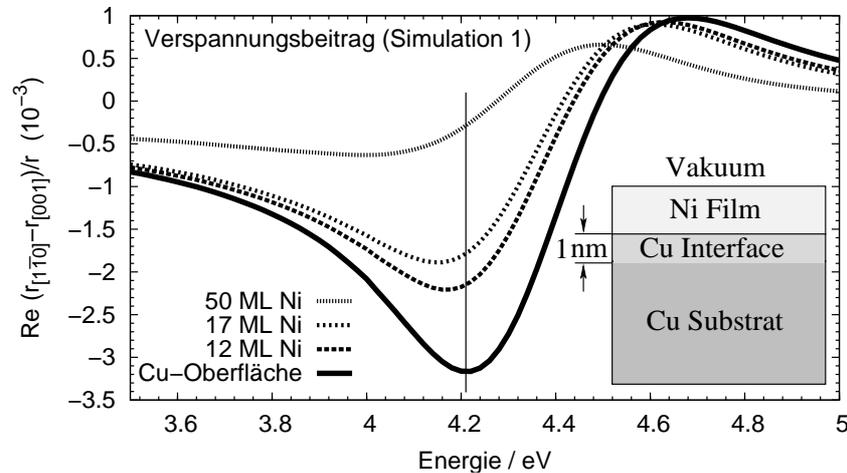
des mit der Schichtdicke steigenden Einflusses der Formanisotropie findet bei 40 ML Ni ein weiterer Spinreorientierungsübergang zurück zu „in-plane“ Magnetisierung statt [106, 119, 120].

Nickel auf der Cu(110) Oberfläche ist bisher selten Gegenstand von Untersuchungen gewesen. Dies begründet sich darin, dass Nickel auf Cu(110) kein pseudomorphes Wachstum und keine „out-of-plane“ Magnetisierung zeigt [121]. Wu et al. berichten jedoch von einer „out-of-plane“ Magnetisierung ab einer Ni Schichtdicke von 16 ML [122]. In diesem Kapitel wird gezeigt, dass diese widersprüchlichen Ergebnisse mit einer Kontamination der Oberfläche mit Sauerstoff erklärt werden können. Im Weiteren wird das Einsetzen der remanenten Magnetisierung („in-plane“) bei einer Schichtdicke von 5 ML Ni beobachtet [121]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, dass Sauerstoff auch auf der Cu(110) Oberfläche als Surfactant für das pseudomorphe Wachstum von Ni Filmen wirkt [123, 124]. Dies wurde auch durch AES, STM und LEED Messungen bestätigt [125].

### 6.1.1 Simulation von Verspannungs- und Oberflächenbeiträgen

Im Kapitel 4 wurde der Einfluss von Verspannungen auf die optische Anisotropie von Cu(110) gezeigt. Da dieser Verspannungsbeitrag auch durch die Präparation durch Ionenätzen und Tempern auftritt, muss dieser bei der Interpretation der Ni/Cu RAS Spektren berücksichtigt werden. Das pseudomorphe Wachstum von Ni auf Cu(110) bedingt, aufgrund der Gitterfehlانpassung von Ni und Cu, eine Verspannung an der Ni/Cu Grenzschicht. Es kann davon ausgegangen werden, dass diese Verspannung, ebenso wie auf dem Co/Cu(110) System, eine uniaxiale Ausrichtung aufweist [38] und somit zu einer optischen Anisotropie führt. Vermutlich würde aber auch eine „isotrope“ Verspannung zu einer Modifizierung der schon vorher vorhandenen optischen Anisotropie führen und somit beobachtbar sein. Die Gitterfehlانpassung führt zu einer Verspannung sowohl von Cu als auch von Ni. Dadurch wird neben der bereits bekannten Cu RAS Verspannungsstruktur auch ein Beitrag der Ni Verspannung zu erwarten sein. Die spektrale Breite von RAS Strukturen ist, wie die RAS Messungen an Ni und Cu vermuten lassen, von der spektralen Breite der Strukturen in der dielektrischen Funktion der entsprechenden Materialien abhängig. Somit kann angenommen werden, dass die RAS Strukturen der Ni Verspannung spektral um etwa eine Größenordnung breiter sind als die Cu Verspannungsstruktur. Eine Betrachtung der Veränderung der Cu Verspannungsstruktur bei 4.3 eV in Abhängigkeit von der Ni Schichtdicke wird somit Rückschlüsse auf die Verspannung an der Ni/Cu Grenzschicht ermöglichen. Im Abschnitt 4.3 wurde gezeigt, dass die energetische Position der Cu Verspannungsstruktur von der Tiefenverteilung der Verspannung abhängt. Daneben kann aber auch die energetische Breite sowie das „Vorzeichen“ dieser Verspannungsstruktur variieren (siehe Kapitel 4). Es ist also zu erwarten, dass der RAS Verspannungsbeitrag der Gitterfehlانpassung die schon vorhandene Verspannungsstruktur der präparierten Cu(110) Oberfläche modifiziert. Die im Kapitel 4 Abbildung 4.10 gefundene optische Anisotropie der Volumendefektstruktur wird als Anisotropie der Cu Grenzschicht in einem 4-Lagenmodell verwendet, um die Reflektivität des (Vakuum/Ni/Cu-Grenzschicht/Cu-Substrat) Systems zu bestimmen[126]. Diese Volumendefektstruktur wurde durch Lorentz-Oszillatoren simuliert und entsprechend der bei Cu(110) vor dem Wachstums gefundenen Intensität skaliert. Zur Bestimmung der optischen Anisotropie wird die Reflektivität getrennt für die  $[001]$  und  $[1\bar{1}0]$  Richtung ermittelt. Das RAS Spektrum ergibt sich aus der Differenz dieser Reflektivitäten, normiert auf die Gesamreflektivität. Im Weiteren

wird durch Variation der Ni Schichtdicke ermittelt, wie sich diese RAS Verspannungsstruktur bei anderen Ni Schichtdicken darstellt. Dies ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Es zeigt sich deutlich,

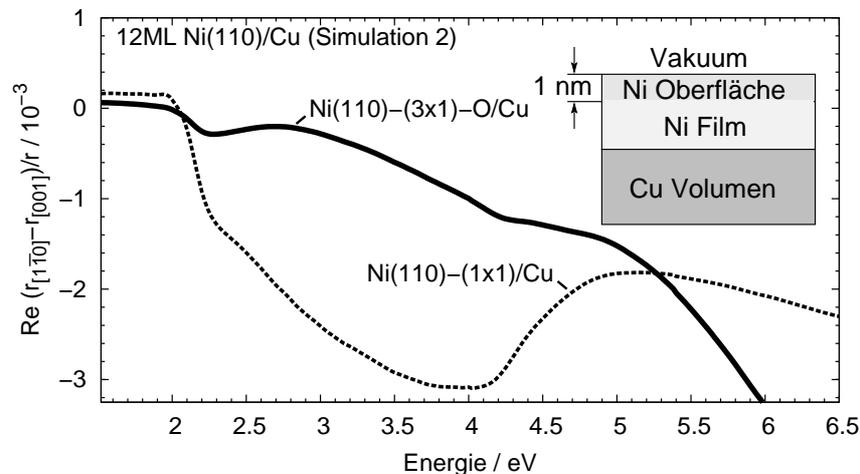


**Abbildung 6.1:** Simulation (Simulation 1) der optischen Anisotropie von Ni/Cu Filmen. Der Ni Film und das Cu Substrat werden als optisch isotrop angenommen. Für die Grenzschicht wird die Anisotropie der Cu Volumendefektstruktur angenommen.

dass die spektrale Signatur des Verspannungsbeitrages mit zunehmender Ni Schichtdicke kleiner wird und die Struktur zu kleineren Energien schiebt. Für die Simulation wurden die in der Literatur veröffentlichten optischen Konstanten für Ni und Cu angenommen [51, 127, 128]. Diese Simulation zeigt, dass ein optisch isotroper Film zu einer energetischen Verschiebung der RAS Strukturen führen kann, obwohl die Anisotropie der vergrabenen Schicht (Cu Grenzschicht) nicht verändert wird. Für Ni Filme auf Cu(110) ist somit eine Verschiebung des Cu Verspannungsbeitrages zu niedrigeren Energien zu erwarten. Es stellt sich jedoch die Frage, inwieweit dieser Cu Verspannungsbeitrag zuverlässig auf dem Ni/Cu System identifiziert werden kann, oder ob Strukturen der optischen Anisotropie von Ni die Zuordnung erschweren werden.

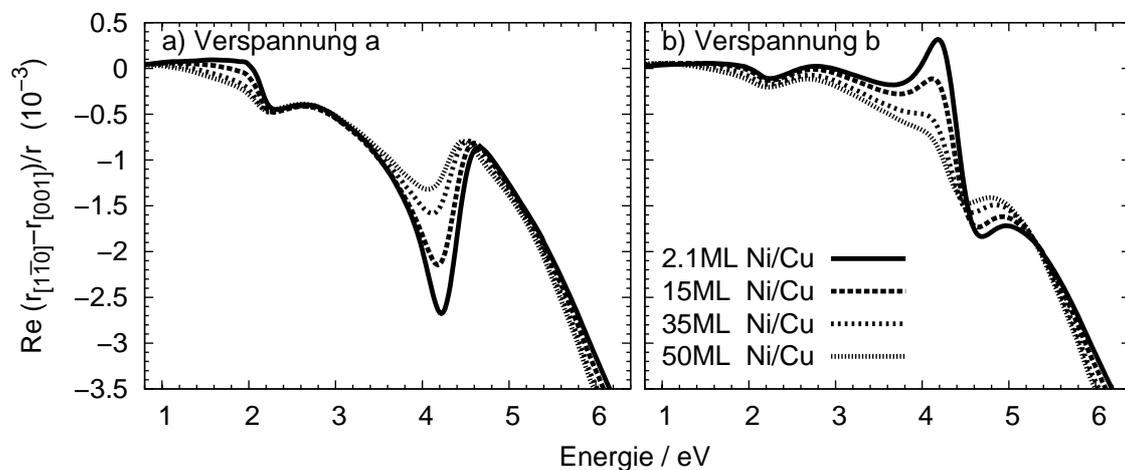
Für die auf Ni(110)-(1×1) bzw. Ni(110)-(3×1)-O aus Abbildung 5.3 gefundene optische Anisotropie wurde die SDA berechnet und diese in einem 4-Lagen Modell zur Simulation des Ni/Cu Systems verwendet. Abbildung 6.2 zeigt, welche RAS Spektren für diese Ni Oberflächen zu erwarten wären, wenn die Ni Filme auf ein optisch isotropes Cu Substrat aufgebracht werden. Die optische Anisotropie von Ni(110)-(1×1) unterscheidet sich erheblich von der der Ni(110)-(3×1)-O Oberfläche. Die gemessenen Spektren sollten somit schon “augenfällig” enthüllen, ob die Ni Oberfläche mit Sauerstoff bedeckt ist. Diese Vorbetrachtungen lassen darauf schließen, dass die Cu Verspannungsstruktur im System Ni/Cu gut identifiziert werden kann und nicht durch Anisotropien des Ni Filmes gestört ist.

Die SDA der optischen Anisotropie an der Ni/Cu Grenzschicht und an der Ni Oberfläche ist sehr klein gegenüber den jeweiligen dielektrischen Funktionen ( $\Delta\varepsilon/\varepsilon < 0.01$ ). Daher errechnet sich die optische Anisotropie des Gesamtsystems Ni(110)-(3×1)-O/Cu(110) in guter Näherung durch die Summe der Grenzschicht- und Oberflächenanisotropie (Simulation 1 plus Simulation 2). Abbildung 6.3 zeigt die vermutete Anisotropie von Ni(110)-(3×1)-O/Cu(110) unter der



**Abbildung 6.2:** Simulation (Simulation 2) der optischen Anisotropie von Ni(110)-(1×1) bzw. Ni(110)-(3×1)-O Filmen auf einem isotropen Cu Substrat. Die Berechnung erfolgte nach einem 4-Lagen-Modell mit den Literaturdaten der optischen Konstanten und den von Ni(110) (siehe Kapitel 5 Abbildung 5.3) ermittelten optischen Anisotropien.

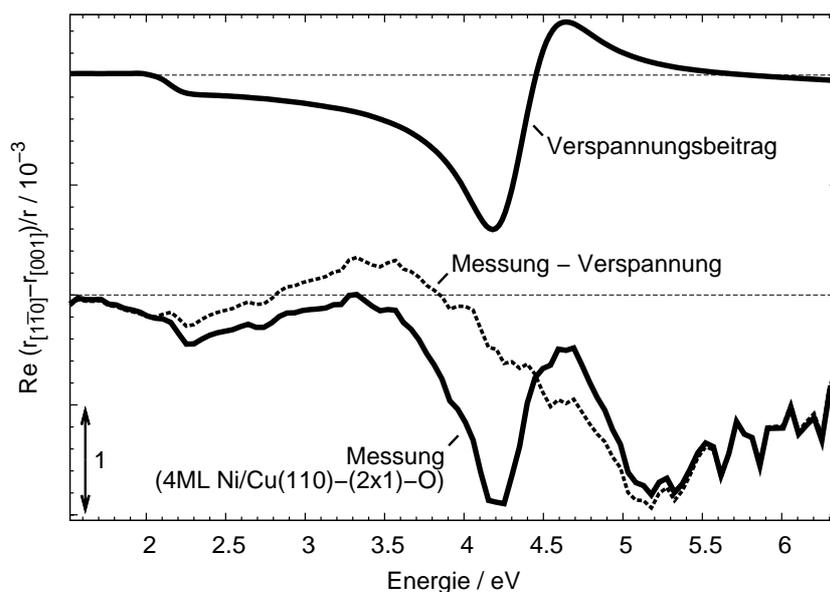
Berücksichtigung der optischen Anisotropie von Ni(110)-(3×1)-O und der Volumendefektstruktur von Cu(110). Im Kapitel 4 (Abbildung 4.9 und 4.12) wurde gezeigt, dass sich die optische



**Abbildung 6.3:** Simulation der optischen Anisotropie von Ni(110)-O Filmen auf Cu(110) unter Berücksichtigung der Cu Volumendefektstruktur. a) Verspannungsbeitrag wie bei der Präparation von Cu(110) gefunden. b) Verspannung wie bei Cu(110) Ionenätzen gefunden (vergleiche Kapitel 4 Abbildung 4.12). Intensität und spektrale Position sowie spektrale Breite wurden wie Verspannungsbeitrag a) gewählt.

Anisotropie der Cu Verspannungsstruktur unterschiedlich darstellt. Während die Verspannungsanisotropie nach mechanischer Verspannung von Cu(110) bei ca. 4.2 eV ein Minimum und bei ca. 4.5 eV ein Maximum aufweist (Verspannung a) in Abbildung 6.3), zeigt die Verspannungsaniso-

trope nach intensivem Ionenätzen ein Maximum bei ca. 4.2 eV und ein Minimum bei ca. 4.5 eV (Verspannung b). Diese Beiträge unterscheiden sich also im Wesentlichen nur durch das Vorzeichen. Diese Verspannungsbeiträge werden im Folgenden als Verspannung a bzw. Verspannung b bezeichnet. Für das Wachstum von Ni auf der reinen Cu(110) Oberfläche wurde kein Modell berechnet, da weiter unten gezeigt wird, dass hierbei kein Lagenwachstum vorliegt und somit eine Simulation einen völlig anderen Ansatz erfordern würde.



**Abbildung 6.4:** RAS Messung von 4 ML Ni/Cu(110)-(2×1)-O im Vergleich zum vermuteten Verspannungsbeitrag (oben). Das Differenzspektrum der Messung und des Verspannungsbeitrages (Messung minus Simulation 1) zeigt keine Struktur bei 4.2 eV.

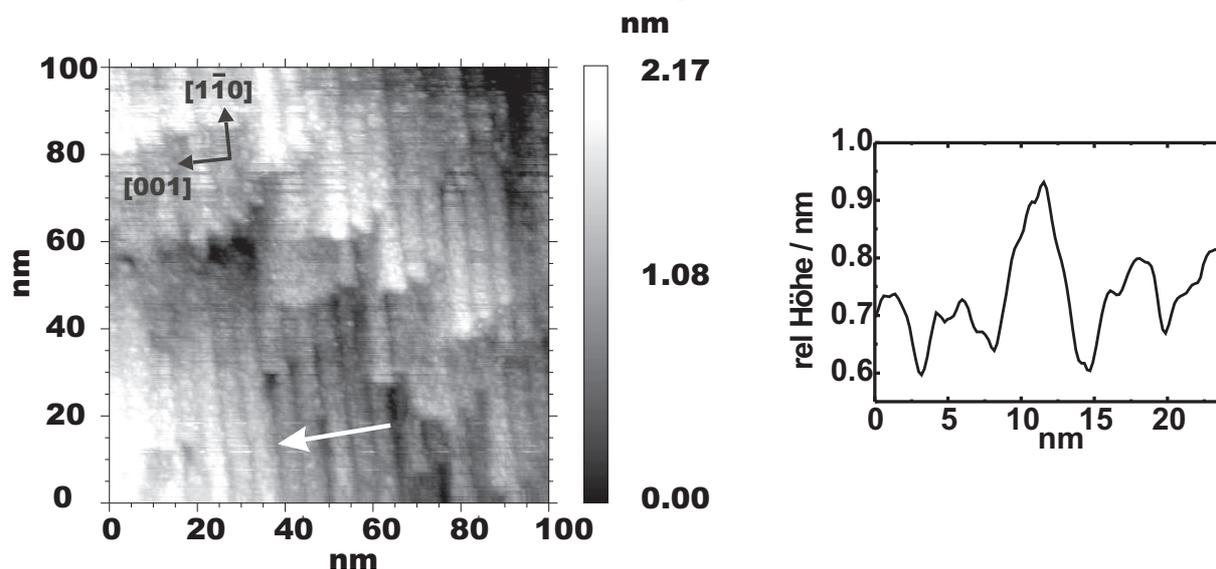
Von besonderem Interesse ist, ab welcher Schichtdicke des aufwachsenden Ni Filmes eine Veränderung der Verspannung an der Grenzschicht bewirkt. Um diese Veränderung in den gemessenen Spektren sichtbar zu machen, wird bei den Ni Filmen auf Cu(110)-(2×1)-O der nach Abbildung 6.1 ermittelte Verspannungsbeitrag (Simulation 1) abgezogen. Verschwindet dadurch der Verspannungsbeitrag, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Verspannung an der Cu Grenzschicht nicht verändert hat. Exemplarisch ist dieses Vorgehen in Abbildung 6.4 gezeigt. Die Subtraktion des Verspannungsanteils von der RAS Messung zeigt hierbei keine Struktur bei 4.2 eV. Die vor dem Aufbringen des Ni Films vorhandene Verspannung ist damit unverändert geblieben. Eine Änderung der Verspannung an der Cu Grenzschicht wird somit in den Differenzspektren direkt sichtbar.

### 6.1.2 Wachstum auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche

#### Rastertunnelmikroskopie

Wie die bekannten Veröffentlichungen[121, 122] über Ni/Cu(110)-(1×1) nahelegen, wächst Ni auf dieser Oberfläche nicht lagenweise. Die STM Aufnahme 6.5 zeigt eine raue Oberfläche. Ei-

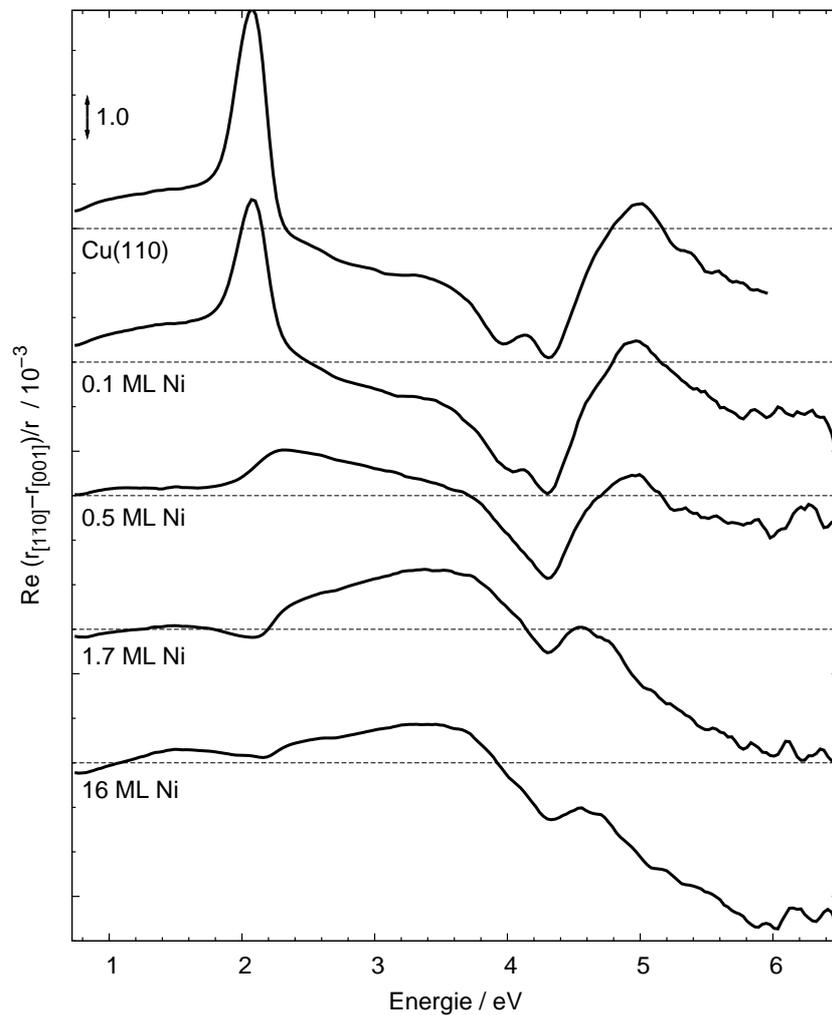
ne atomare Auflösung der Strukturen konnte aufgrund der Filmrauigkeit nicht erreicht werden. Die Oberfläche zeigt stabförmige, 17 nm bis 50 nm lange Strukturen in  $[1\bar{1}0]$  Richtung. Die Breite dieser Strukturen ist für ungeordnetes Wachstum erstaunlich homogen (4.5 nm bis 6.5 nm). Jedoch scheint die innere Struktur dieser „Stäbe“ ungeordnet zu sein.



**Abbildung 6.5:** Links: STM Aufnahme von 10 ML Ni auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche. Die Oberfläche ist sehr rau, so dass keine Abbildung mit atomarer Auflösung gelang. Es zeigen sich stabförmige Strukturen mit einer Breite von 4.5 nm bis 6.5 nm und einer Länge von 17 nm bis 50 nm in  $[1\bar{1}0]$  Richtung. Rechts: Linienprofil der Oberfläche entlang des weißen Pfeils in der STM Aufnahme.

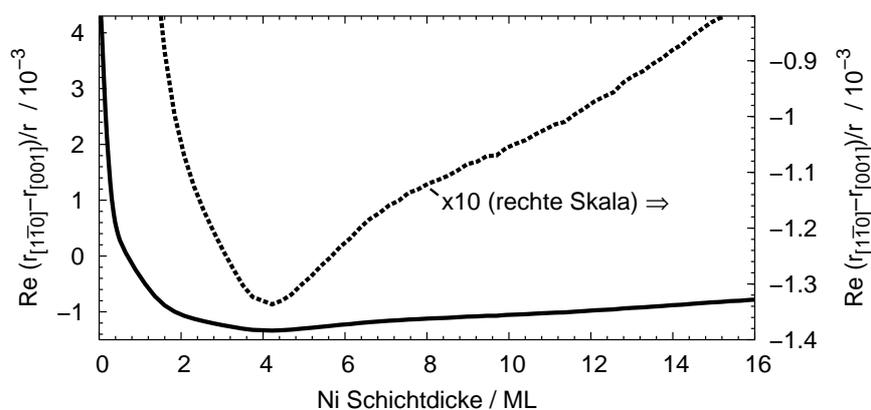
### Optische Anisotropie

Es ist zu vermuten, dass die „makroskopische“ Anisotropie der Oberflächenmorphologie einen Einfluss auf die optische Anisotropie des Films hat. Abbildung 6.6 zeigt RAS Spektren von Ni auf Cu(110)-(1×1). Die Veränderung der optischen Anisotropie wird deutlich von der Dämpfung des Cu(110) Oberflächenzustandes dominiert (2.1 eV). Für größere Schichtdicken werden alle vorhandenen Strukturen mit zunehmender Schichtdicke kleiner. Das Verschwinden von Strukturen im RAS Spektrum lässt sich mit dem ungeordneten Wachstum erklären. Hierbei führt jedoch die in Abbildung 6.5 gezeigte strukturelle Anisotropie zu einer optischen Anisotropie, welche mit zunehmender Photonenenergie größer wird, da die Wellenlänge des Lichts der Größenordnung der stabförmigen Oberflächenstrukturen nahe kommt. Daraus resultiert eine verminderte Reflektivität der in  $[1\bar{1}0]$  Richtung polarisierten Lichtkomponente mit zunehmender Photonenenergie. Die Anisotropiebeiträge von Ni sind alle energetisch wesentlich breiter als der Cu Verspannungsbeitrag. So ist die Struktur bei 4.2 eV klar dem Cu Verspannungsbeitrag zuzuordnen. Sie ist auch noch bei einer Bedeckung von 16 ML deutlich erkennbar. Jedoch sind keine signifikanten Veränderungen der Verspannungsstruktur erkennbar. Somit ist zu vermuten, dass das 3D-Wachstum des Ni Filmes die Verspannung an der Ni/Cu Grenzschicht zumindest bis zu der gemessenen ma-



**Abbildung 6.6:** RAS Spektren von Ni auf Cu(110)-(1×1). Die optische Anisotropie wird mit zunehmender Ni Schichtdicke geringer, jedoch bleibt die Cu-Verspannungsanisotropie klar sichtbar erhalten.

ximalen Schichtdicke von 16 ML nicht beeinflusst. Die Wachstumstransiente der RAS Intensität bei einer Photonenenergie von 2.1 eV zeigt wenig Strukturen (siehe Abb. 6.7). Abgesehen von der deutlichen Intensitätsänderung durch Dämpfung des Cu(110) Oberflächenzustandes zeigen sich keine weiteren Intensitätsänderungen, welche auf eine Umstrukturierung des Films schließen lassen. Die RAS Intensität erreicht erst bei einer nominalen Bedeckung von 4 ML Ni ein Minimum, gefolgt von einem leichten Anstieg für größere Schichtdicken. Eventuell wird, bedingt durch das 3D Wachstum, erst ab einer nominalen Bedeckung von 4 ML Ni die Oberfläche vollständig mit Ni bedeckt, woraus dann das Minimum in der RAS Transiente resultiert.

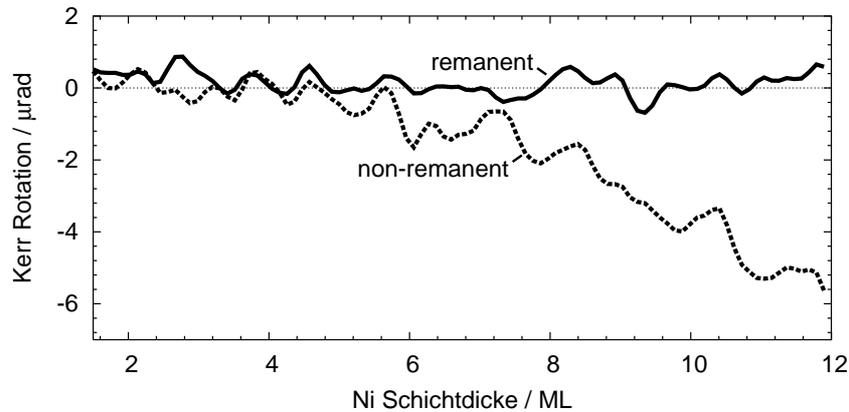


**Abbildung 6.7:** RAS Wachstumstransiente während des Aufbringens von Ni auf Cu(110)-(1×1) bei einer Photonenenergie von 2.1 eV. Der obere Graph zeigt die Transiente in einem vergrößerten Maßstab. Die RAS Intensität verringert sich mit zunehmender Ni Schichtdicke und erreicht ein Minimum bei 4 ML Ni, gefolgt von einem leichten kontinuierlichen Wiederanstieg.

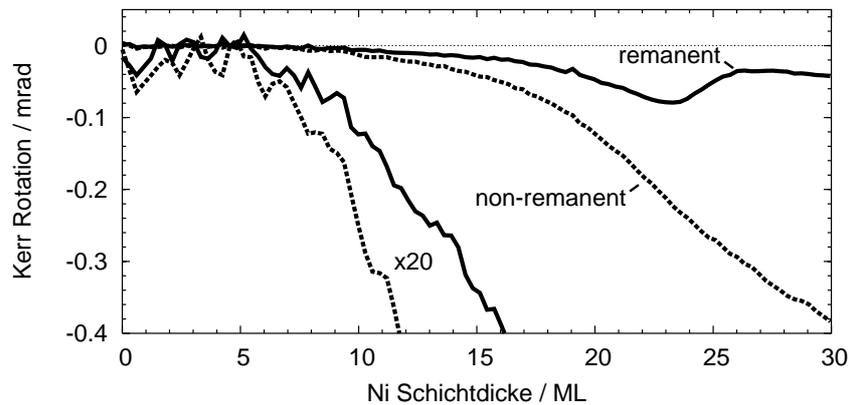
### Magnetische und magneto-optische Eigenschaften

Wie im einleitenden Abschnitt dieses Kapitels bereits angesprochen, existieren widersprüchliche Ergebnisse bezüglich der magnetischen Anisotropie von Ni Filmen auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche. Zur Klärung dieser Widersprüche wurden Wachstumstransienten des polaren Kerr-Effektes durchgeführt. Wie im Kapitel 3.2 erläutert, wird mit der hier verwendeten Messgeometrie nur ein Kerr-Signal detektiert, falls die Richtung der Magnetisierung eine Komponente senkrecht zur Oberfläche besitzt. Beim Wachstum von Ni auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche zeigt sich über die gesamten untersuchten Schichtdickenbereiche kein Kerr-Effekt ohne äußeres Magnetfeld (siehe Abb. 6.8, remanent). Ab einer Ni Schichtdicke größer 5 ML zeigt sich ein mit der Schichtdicke nahezu linear ansteigendes Kerr-Signal in einem äußeren Magnetfeld in [110] Richtung (non-remanent). Somit ist der Film bis zu einer Schichtdicke von 4 ML - 5 ML nicht ferromagnetisch und ab größeren Schichtdicken ferromagnetisch mit einer „in-plane“ Magnetisierung. Auch ein nachträgliches Aufbringen von Sauerstoff auf die Ni Filme führte zu keiner remanenten „out-of-plane“ Magnetisierung. Das Wachstum von Ni auf der Cu(110) Oberfläche mit geringer Sauerstoffkontamination (0.5 % - 5 %) zeigt keine signifikanten Veränderungen der RAS -Spektren und Transienten (hier nicht gezeigt). Offensichtlich wächst auch dieser Film in einer ungeordneten 3D Struktur. Jedoch ergeben sich, wie Abbildung 6.9 zeigt, erhebliche Unterschiede in der Magnetisierung. Wieder ist der Film unterhalb einer Ni Schichtdicke von 4 ML - 5 ML nicht ferromagnetisch. Für größere Schichtdicken wird eine remanente „out-of-plane“ Magnetisierung detektiert. Bei angelegtem äußeren Magnetfeld vergrößert sich der Kerr-Effekt noch erheblich (non-remanent in Abb. 6.9). Daraus lässt sich schlussfolgern, dass entweder die leichte Achse der Magnetisierung verkippt, mit einem Winkel nahe 45° zur Oberflächennormalen, oder der Film gleichermaßen Domänen mit „in-“ sowie „out-of-plane“ Magnetisierung aufweist. Bei mehr als 23 ML Ni verkleinert sich die „out-of-plane“ Magnetisierung, wahrscheinlich aufgrund des Einflusses der Formanisotropie (siehe Kapitel 2.2.2), wieder.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass bei Ni Wachstum auf der reinen Cu(110) Ober-



**Abbildung 6.8:** Wachstumstransiente des polaren Kerr-Signals von Ni auf Cu(110)-(1 $\times$ 1). Gemessen wurde mit einem angelegten Magnetfeld in [110] Richtung (non-remanent) sowie ohne äußeres Magnetfeld (remanent). Ab ca. 5 ML Ni ist ein Kerr-Signal messbar (ferromagnetische Phase). Der Film zeigt keine „out-of-plane“ Komponente der Magnetisierung und ist somit „in-plane“ magnetisiert.



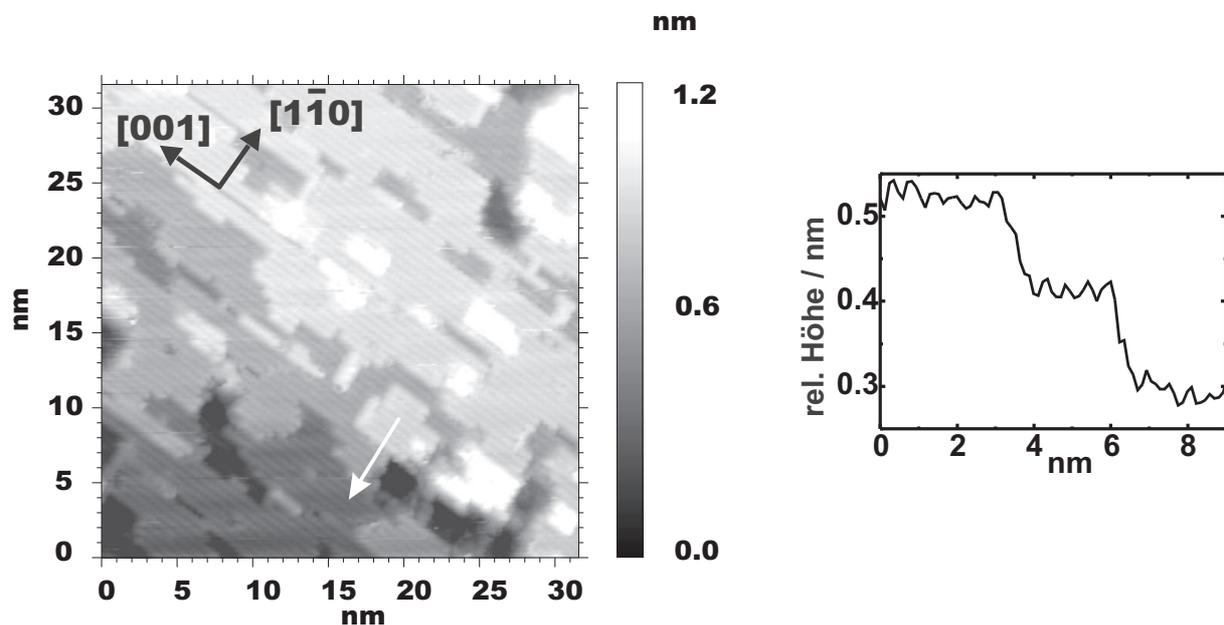
**Abbildung 6.9:** Wachstumstransiente des polaren Kerr Signals von Ni auf Cu(110)-(1 $\times$ 1) bei einer Kontamination der Oberfläche mit Sauerstoff (0.5 % - 5 %). Gezeigt ist das Kerr-Signal mit (non-remanent) und ohne äußeres Magnetfeld in [110] Richtung. Die unteren Graphen zeigen die zwanzigfache Vergrößerung der Transienten. Der Film ist ab 5 ML ferromagnetisch. Ab dieser Schichtdicke wird sowohl eine „in-plane“ als auch eine „out-of-plane“ Komponente gemessen.

fläche keine „out-of-plane“ Magnetisierung auftritt. Schon eine geringe Kontamination der Cu Oberfläche mit Sauerstoff führt zu einer remanenten „out-of-plane“ Magnetisierungskomponente. Aus der Tatsache, dass ein Aufbringen von Sauerstoff nach dem Ni Wachstum die magnetischen Eigenschaften nicht verändert, lässt sich folgern, dass der Sauerstoff das Wachstum und damit die Morphologie der Ni Schichten beeinflusst. Nicht das Vorhandensein von Sauerstoff per se, sondern sein Einfluss auf das Wachstum der Ni Schichten führt zu einer „out-of-plane“ Magnetisierung. Die widersprüchlichen Veröffentlichungen [121, 122] zu den magnetischen Eigen-

schaften von Ni Filmen beruhen somit möglicherweise auf einer nicht erkannten Kontamination der Cu Oberfläche.

### 6.1.3 Wachstum mit Sauerstoff als Surfactant

#### Rastertunnelmikroskopie

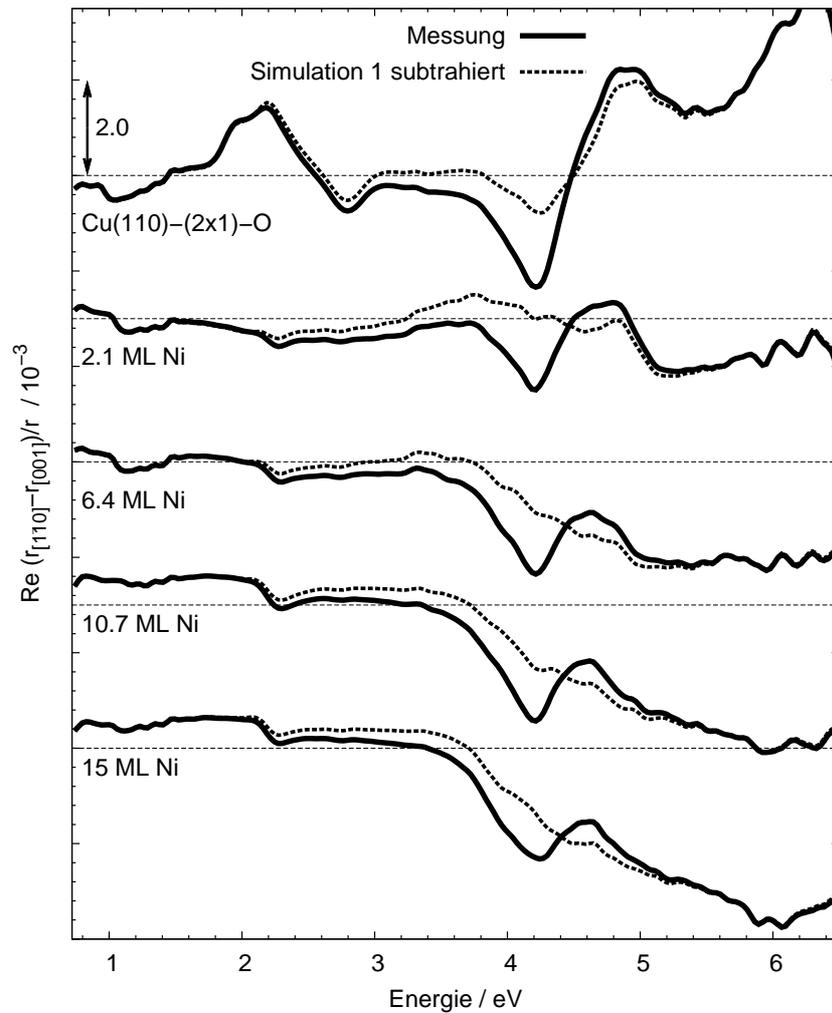


**Abbildung 6.10:** Links: STM an 9 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Die Oberfläche ist bedeckt mit atomar glatten Terrassen mit Ketten in [001] Richtung. Rechts: Linienprofil der Oberfläche entlang des weißen Pfeils in der STM Aufnahme. LEED zeigt eine 2×1 Rekonstruktion. AES Messungen zeigen im Rahmen der Messgenauigkeit die gleiche Sauerstoffkonzentration wie die Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche.

Wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt, verändert das Vorhandensein schon geringer Mengen Sauerstoffs die magnetischen Eigenschaften des Ni Films dramatisch. Es liegt die Vermutung nahe, dass Sauerstoff ebenso wie bei Co/Cu(110) auch für Ni/Cu(110) als Surfactant wirkt. Abbildung 6.10 zeigt eine STM Aufnahme von 9 ML Ni auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche. Die Oberfläche besteht aus glatten Terrassen mit Ketten in [001] Richtung. LEED Beugungsbilder dieser Oberfläche zeigen eine klare (2×1) Rekonstruktion mit scharfen Beugungsmaxima und geringem Hintergrund. AES Messungen lassen auf eine im Rahmen der Messgenauigkeit gleiche Sauerstoffkonzentration wie auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche schließen. Somit kann gefolgert werden, dass Sauerstoff als Surfactant wirkt und zu einem 2D Lagenwachstum von Ni führt, ohne in den Film eingebaut zu werden. Aufgrund dieser Ergebnisse lässt sich ableiten, dass es sich um eine Ni(110)-(2×1)-O Oberfläche handelt.

Optische Anisotropie

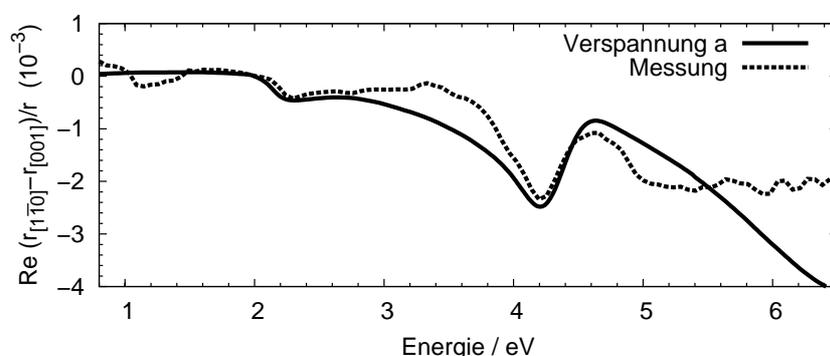
Abbildung 6.11 zeigt RAS Spektren von Nickel Filmen, gewachsen auf der Cu(110)(2×1)-O Oberfläche.



**Abbildung 6.11:** RAS Spektrum von der Cu(110)(2×1)-O Oberfläche und Spektren von 2.1 - 15 ML Ni auf dieser Oberfläche. Die gestrichelten Graphen zeigen die entsprechenden RAS Spektren ohne Verspannungsbeitrag (Simulation 1), siehe Abbildung 6.3 und 6.4.

Die gestrichelten Graphen in Abbildung 6.11 zeigen, wie sich die optische Anisotropie darstellt, wenn der Cu Verspannungsbeitrag (Simulation 1) abgezogen wird. Dieses Verfahren wurde im vorangegangenen Unterkapitel 6.1.1 erläutert. Zum Vergleich ist das Spektrum der Cu(110)(2×1)-O Oberfläche ebenfalls dargestellt. Dieses RAS Spektrum wurde bereits im Kapitel 4.1 besprochen. Die verspannungskorrigierten Spektren zeigen alle keine Struktur bei 4.2 eV. Daraus kann man schließen, dass sich die Verspannung an der Ni-Cu Grenzschicht zumindest bis zu einer Ni Schichtdicke von 15 ML wenig verändert. Der direkte Vergleich der Simulation mit den gemessenen Spektren in Abbildung 6.12 zeigt eine gute Übereinstimmung. Für die

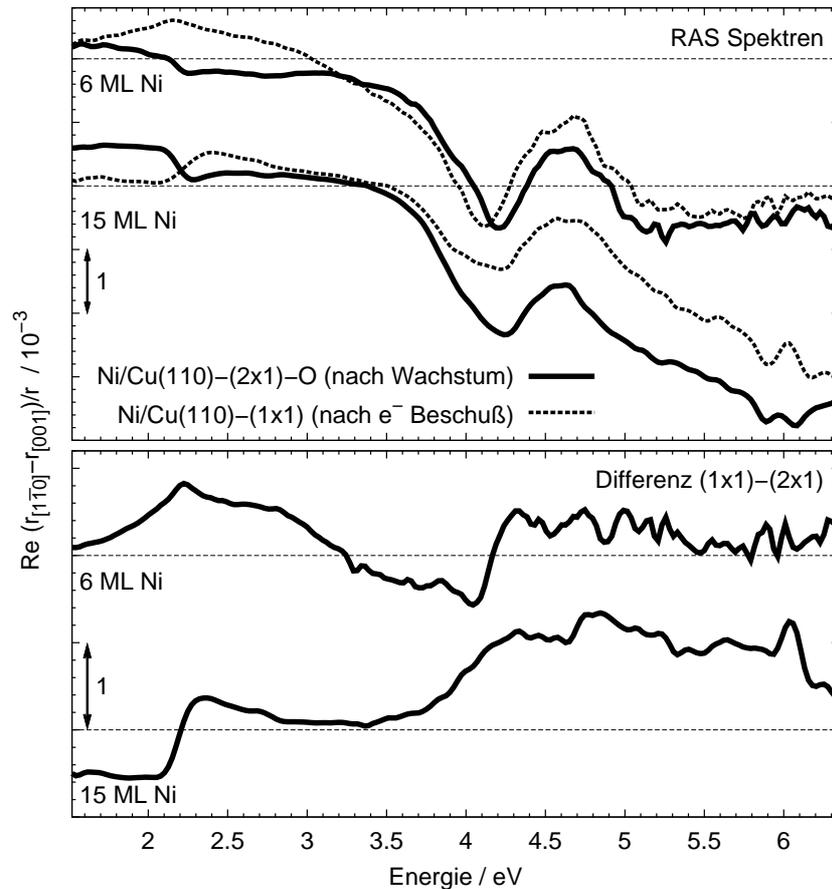
Ni(110)-(1×1) Oberfläche wäre ein völlig anderer Verlauf zu erwarten. Diese gute Übereinstimmung bekräftigt die Vermutung, dass Sauerstoff als Surfactant wirkt und auf der Ni Oberfläche “aufschwimmt”. Die in der Messung sichtbare Cu Verspannungsstruktur bei 4.2 eV wird aus-



**Abbildung 6.12:** Vergleich des RAS Spektrums von 6.4 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O mit dem berechneten Spektrum (Verspannung a, siehe Abb. 6.3).

gezeichnet durch die Simulation wiedergegeben. Während bei der Simulation die Intensität der Anisotropie bei Energien größer 5 eV mit zunehmender Schichtdicke kaum zunimmt, zeigen hier die gemessenen Spektren einen deutlichen Intensitätszuwachs mit zunehmender Ni Schichtdicke. Der Verlauf ist überlagert mit einer gleichförmig mit der Energie ansteigenden Anisotropie. Es scheint gut möglich, dass diese Anisotropie auf die Verspannung des Ni Filmes zurückzuführen ist. Der spektrale Verlauf der Spektren lässt somit vermuten, dass doch eine Verspannung im Ni Film vorliegt. Eventuell ist diese Verspannung wesentlich geringer als die Verspannung an der Cu Grenzschicht und bewirkt nur eine geringe Veränderung der Cu Verspannungsstruktur. Da die durch die Filmverspannung hervorgerufene optische Anisotropie ein Volumeneffekt ist, können die Spektren dennoch deutlich beeinflusst werden.

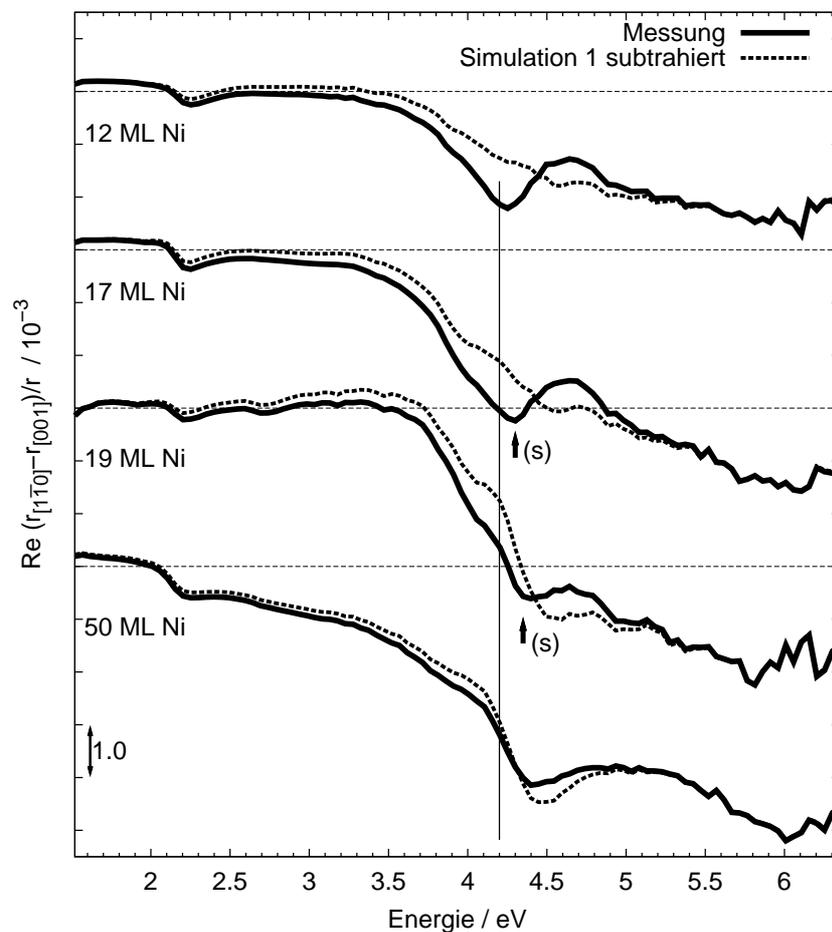
Sauerstoff desorbiert von der Ni Oberfläche durch intensiven Elektronenbeschuss bei 3 keV. Abbildung 6.13 zeigt die optische Anisotropie von Nickelschichten vor und nach dem Entfernen des Sauerstoffs. Deutlich zeigt sich, dass die Verspannungsstruktur bei 4.2 eV beeinflusst wird. Die Interpretation dieser Messung ist jedoch schwierig. Offensichtlich ändert sich die optische Anisotropie der Ni Oberfläche bzw. des Ni Filmes. Daraus resultieren Änderungen des Verlaufs im gesamten spektralen Bereich. Auffällig sind die Veränderungen nahe 2.2 eV. Es lässt sich zeigen, dass eine geringe Verschiebung (Intensitätsachse) der optischen Anisotropie von Ni(110)-(3×1)-O genügt, um in einer 4-Lagen Simulation Spektren wie hier beobachtet zu berechnen. Obwohl die Struktur bei 2.2 eV eindeutig von Cu verursacht ist, so ist doch die beobachtete Modifizierung wahrscheinlich nur durch eine Veränderung der optischen Anisotropie des Ni Filmes hervorgerufen. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Desorption von Sauerstoff eine Morphologieänderung des Ni Filmes triggert, was wiederum die Verspannung beeinflusst. Trotz dieser Unsicherheiten lässt sich feststellen, dass Desorption von Sauerstoff bei einer Schichtdicke von 6.4 ML zu einer deutlichen Änderung der Cu Verspannungsstruktur führt. Bei 15 ML Ni ist eine Änderung der Verspannungsstruktur nicht nachweisbar. Es scheint sich die optische Anisotropie des Ni Filmes bzw. der Ni Oberfläche deutlich zu verändern, die Grenzschicht wird



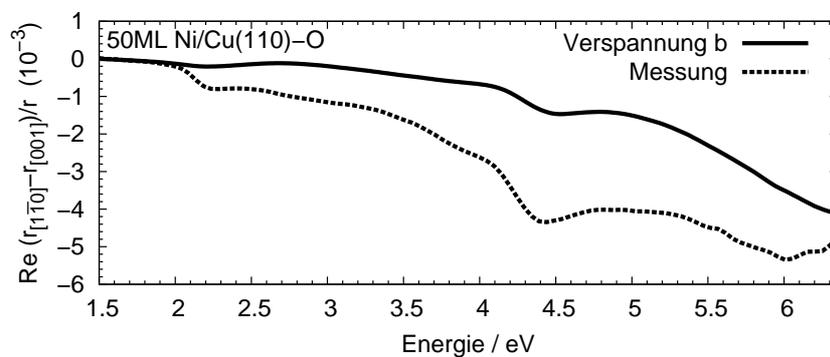
**Abbildung 6.13:** Oben: Vergleich von RAS Spektren von 6 und 15 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O vor und nach dem Beschuss mit Elektronen ( $E_{kin}$  3 keV). Unten: Differenzspektren vor und nach Einwirkung der Elektronen. Es zeigt sich bei 6 ML Ni eine deutliche Veränderung der Verspannung.

aber kaum beeinflusst.

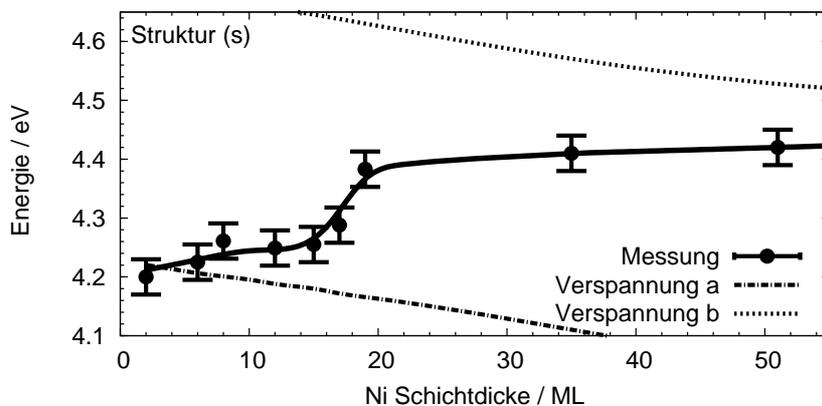
In Abbildung 6.14 sind RAS Spektren von 12 ML bis 50 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O dargestellt. Hier zeigt sich deutlich, dass ab einer Schichtdicke von 19 ML die Cu Verspannungsstruktur nicht mehr mit der Verspannung  $a$  (siehe Abbildung 6.3) kompensiert wird. Ab dieser Schichtdicke ändert sich die Verspannung an der Ni-Cu Grenzschicht. Auch die "Verzerrung" der Spektren durch Verspannung nimmt mit größerer Schichtdicke weiter zu. Ein direkter Vergleich der Messung bei 50 ML Ni mit der Simulation (Verspannung  $b$ ) in Abbildung 6.15 zeigt bezüglich der Cu Volumendefektstruktur eine gute Übereinstimmung. Offensichtlich hat sich das Vorzeichen der Volumendefektstruktur gedreht. Diese Übereinstimmung mit der Verspannung  $b$  zeigt sich ab einer Ni Schichtdicke von 19 ML. Es ist also zu vermuten, dass der Ni Film bei einer Schichtdicke zwischen 17 ML und 19 ML relaxiert und sich Versetzungen und Fehlstellen ausbilden. Diese Veränderung lässt sich auch anhand der energetischen Verschiebung des RAS Minimums ( $s$ ) bei 4.2 eV dokumentieren. Abbildung 6.16 zeigt, dass sich die energetische Position des Minimums ( $s$ ) der Cu Verspannungsstruktur zwischen 17 ML und 19 ML deutlich ändert.



**Abbildung 6.14:** RAS Spektren von 12 ML bis 50 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Die energetische Position der Cu Verspannungsstruktur ist beispielhaft mit (s) markiert. Die verspannungskorrigierten RAS Spektren sind gestrichelt eingezeichnet (Verspannung a, siehe Abbildung 6.3 und 6.4).



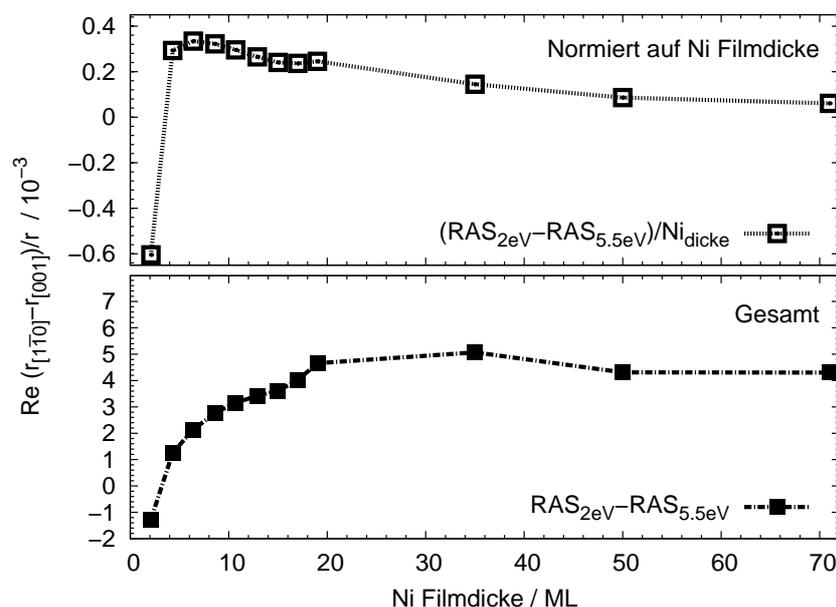
**Abbildung 6.15:** Vergleich des RAS Spektrums von 50 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O mit dem berechneten Spektrum (Verspannung b).



**Abbildung 6.16:** Energetische Position der Cu Volumendefektstruktur (s) in Abhängigkeit der Ni Schichtdicke. Deutlich zeigt sich, dass ab ca. 18 ML eine Veränderung eintritt. Die Graphen “Verspannung a” sowie “Verspannung b” zeigen, bei welcher Energie Struktur (s) nach der Simulation zu erwarten wäre (siehe auch Abbildung 6.3).

Dies bestärkt die Vermutung, dass hier der Film relaxiert. Es zeigt aber auch, dass sich (s) mit zunehmender Schichtdicke immer zu größeren Energien verschiebt. Die Simulationen zeigen, dass sich bei gleichbleibender Verspannung die Struktur (s) mit zunehmender Ni Schichtdicke zu kleineren Energien verschieben sollte. Während der Abzug der Verspannung in Abbildung 6.11 die Vermutung nahelegte, dass sich die Verspannung an der Grenzschicht bis zu einer Ni Schichtdicke von 15 ML nahezu nicht verändert, zeigt der Verlauf der energetischen Position von Struktur (s) einen stetigen Anstieg der Verspannung.

Der Vergleich von Messung und Simulation in Abbildung 6.15 zeigt aber auch deutlich, dass die gemessene optische Anisotropie mit einer Anisotropie überlagert ist, die mit größerer Energie immer stärker wird. Dieser Beitrag ist wahrscheinlich in der Verspannung des Ni Filmes begründet. Diese Verzerrung der Spektren führt dazu, dass die in Abbildung 6.16 gezeigte Verschiebung der Struktur (s) mit zunehmender Schichtdicke systematisch zu größeren Energien verschoben sein sollten. Eine Analyse der Peakposition nach Abzug der Verzerrung von den Spektren zeigte nur eine unwesentliche Korrektur der Verschiebung von Struktur (s). Die Verzerrung kann aber als “Marker” für die Ni Filmverspannung analysiert werden. Zur Analyse dieser Verspannungen wird als Maß für die Verzerrung die Differenz der RAS Intensitäten bei 2 eV und 5.5 eV benutzt. Bei diesen Energien ist kein Einfluss der sich verändernden Cu-Volumendefektstruktur zu erwarten und die Differenzbildung stellt sicher, dass Messunsicherheiten bezüglich der Lage der Nullintensität korrigiert werden. In Abbildung 6.17 ist die Differenz der RAS Intensitäten bei 2 eV und 5.5 eV und diese Differenz, normiert auf die Ni Filmdicke, dargestellt. Es ist anzunehmen, dass das Differenzsignal von einer Volumenanisotropie des Filmes herrührt. Damit wäre die RAS Differenz (Abb. 6.17 unten) proportional zur Gesamtverspannung des Ni Filmes. Der Nullpunkt der Verspannung bleibt hier unbestimmt. Aus dem Vergleich der Messung mit der Simulation lässt sich nur schließen, dass die Verspannung des Ni Filmes bei ca. 6.4 ML der Verspannung des Ni(110) Kristalls nahekommt. Die normierte RAS Differenz (Abb. 6.17 oben) lässt Rückschlüsse auf die Oberflächenlagen des Filmes zu. Ein ansteigender Verlauf zeigt an,



**Abbildung 6.17:** Oben: Differenz der RAS Intensitäten von 2 und 5.5 eV normiert auf die Ni Filmdicke. Unten: RAS Differenz bei diesen Energien, nicht normiert. Diese RAS Differenzen können “Marker” für die Stärke der Filmverspannung sein.

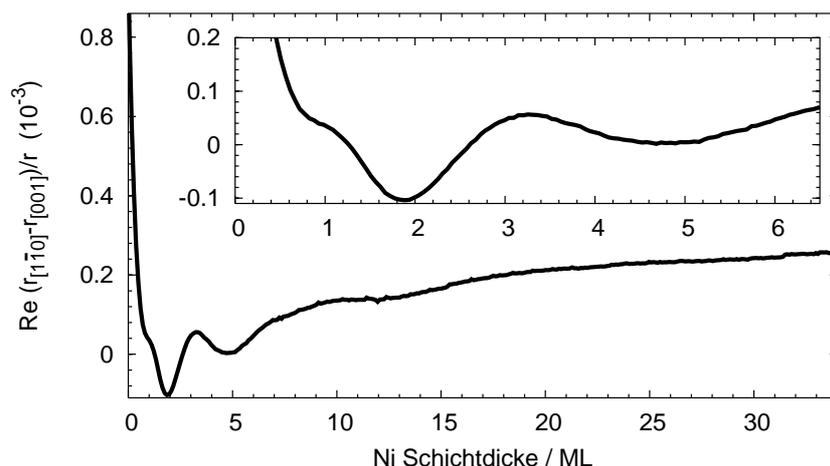
dass die oberflächennahen Ni Lagen stärker verspannt sind als der Mittelwert der darunter liegenden. Ein abfallender Verlauf deutet dann entsprechend darauf hin, dass die oberflächennahen Ni Lagen weniger verspannt sind. Dementsprechend lässt sich dann die Verspannung des Ni Filmes wie folgt interpretieren: Die Gesamtverspannung steigt mit zunehmender Schichtdicke kontinuierlich an, erreicht bei ca. 35 ML ein Maximum und wird bei noch größeren Schichtdicken wieder etwas kleiner. Eine Änderung des Verlaufs in der Nähe von 17 ML bis 19 ML ist nur gering. Der normierte Verlauf zeigt an, dass die Oberflächenschichten bis zu einer Ni Filmdicke von ca. 6.3 ML immer stärker verspannt sind als die darunterliegenden Ni Lagen. Danach kehrt sich das Verhalten um. Es ist also anzunehmen, dass schon ab dieser Schichtdicke mit jeder neu hinzukommenden Ni Lage Defekte bzw. Versetzungen in den Film eingebaut werden.

Diese Analyse legt nahe, dass mehr oder weniger kontinuierlich während des Schichtwachstums Versetzungen bzw. Defekte in den Ni Film eingebaut werden. Die dramatische Änderung der Cu Verspannungsstruktur bei ca. 19 ML scheint nur gering mit der Filmverspannung verknüpft zu sein. Die Verspannung nimmt jedoch ab dieser Schichtdicke nur noch sehr gering zu. Wahrscheinlich zeigt der Übergang von Verspannung a zu Verspannung b bei ca. 18 ML nur an, dass ab dieser Schichtdicke die Verspannungen an der Grenzschicht Ni/Cu zur Ausbildung von Defekten bzw. Versetzungen im Cu führen. Offensichtlich wird der Verspannungsbeitrag der neu aufwachsenden Schichten für Schichtdicken größer 19 ML teilweise durch die Ausbildung von Defekten bzw. Versetzungen im Cu kompensiert.

Bezüglich der Verspannungsanalyse der gewachsenen Ni Filme lässt sich festhalten, dass sich mittels der optischen Anisotropie die Verspannung im Film und an der Ni/Cu Grenzschicht beobachten lässt. RAS eignet sich somit hervorragend zur “in-situ” Wachstumskontrolle dieser Schichten, wenngleich ein Zusammenhang von Filmverspannung und Verzerrung der RAS

Spektren nicht belegt ist.

Während im Energiebereich um 4 eV Verspannungs- und Fehlstellen- bzw. Versetzungsbeiträge dominieren, kann im Energiebereich nahe 2 eV vor allem eine Änderung der Oberflächenanisotropie beobachtet werden. Wachstumstransienten der optischen Anisotropie bei 2.1 eV während des Aufbringens von Ni zeigen für dieses System charakteristische Strukturen (Abb. 6.18). Für dünne Filme (bis zu 10 ML Ni) wurde die Schichtdicke mittels AES Messungen



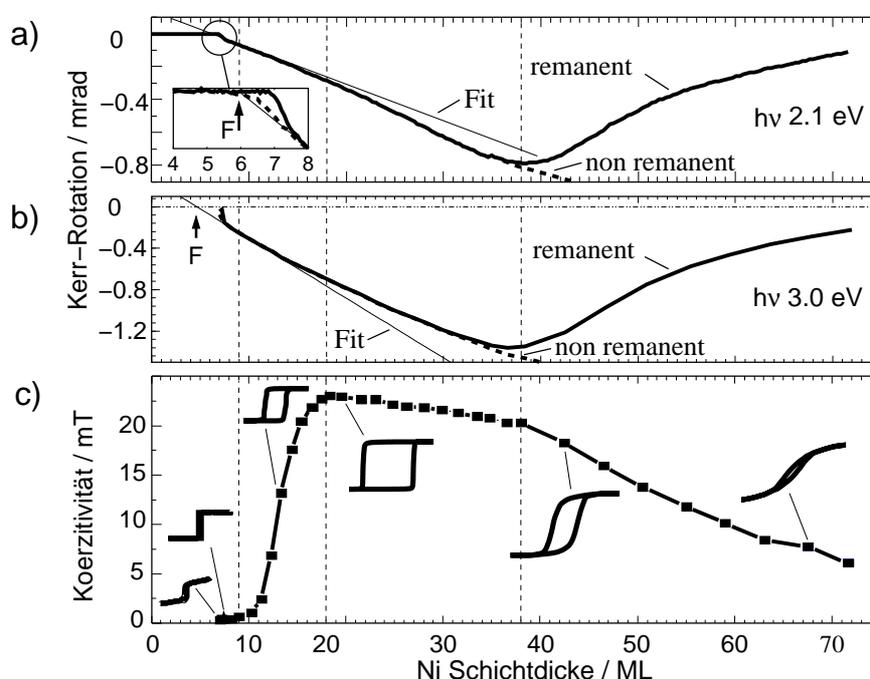
**Abbildung 6.18:** RAS Transiente aufgenommen bei einer Photonenenergie von 2.1 eV während des Wachstums von Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Das Inset zeigt die Transiente in einem vergrößerten Maßstab.

bestimmt. Hierbei zeigte sich, dass die RAS Strukturen der Transienten unabhängig von der Wachstumsrate stets bei gleicher Schichtdicke liegen. Somit eignet sich RAS hervorragend zur Online-Schichtdickenbestimmung beim Wachstum von Ni auf Cu(110)-(2×1)-O. Unter der Voraussetzung einer konstanten Wachstumsrate können so auch die Schichtdicken dickerer Ni Filme mit RAS bestimmt werden. Die einzelnen RAS Strukturen der Transienten markieren die Veränderung der Oberfläche während des Wachstums. Zu Beginn des Wachstums, bis zu einer Bedeckung von 0.7 ML, wird eine starke Intensitätsänderung der optischen Anisotropie beobachtet. Hier findet vermutlich ein Austausch von Cu Atomen der Cu-O Ketten durch Ni statt und damit eine Dämpfung der Oberflächenzustände von Cu(110)-(2×1)-O. Darauf folgend, bis zu einer Schichtdicke von 1.9 ML, bildet sich die Sauerstoff-Nickel-Kupfer Grenzschicht aus. Im Weiteren entwickelt sich schließlich die Ni/Cu(110)-(2×1)-O Oberflächenrekonstruktion.

### Magnetische und magneto-optische Eigenschaften

Wie im Kapitel 3.3 beschrieben, wurden zeitgleich mit den RAS Messungen auch MOKE Spektren, Transienten und Kerr-Hysteresekurven erfasst. Die Magnetisierung des Nickelfilms wurde schichtdickenabhängig durch MOKE Transienten bei 2.1 eV gemessen (siehe Abbildung 6.19 a und b). Bedingt durch den senkrechten Lichteinfall auf die Oberfläche bei der Messung kann nur der “out-of-plane” Anteil der Magnetisierung des Films detektiert werden. Die Analyse der Orientierung der leichten Achse der Magnetisierung erfolgt durch MOKE Messungen mit und

ohne äußerem Magnetfeld senkrecht zur Oberfläche. Wird weder mit noch ohne äußeres Magnetfeld ein Kerr-Signal gemessen, so ist der Film entweder nicht ferromagnetisch (bzw. Temperatur > Curie Temperatur) oder es liegt eine "in-plane" Magnetisierung vor, die jedoch durch eine starke magnetische Anisotropie durch das äußere Magnetfeld nicht aus der Filmebene herausgezogen werden kann. Zeigt sich nur bei angelegtem Magnetfeld ein Kerr-Signal, liegt die leichte Achse der Magnetisierung in der Filmebene. Wird sowohl mit und ohne äußeres Magnetfeld ein Kerr-Signal gemessen und ist aber gleichzeitig die remanente Intensität kleiner als die nicht-remanente, so ist die leichte Achse der Magnetisierung entweder „verkippt“ (Winkel  $\vartheta$  zwischen leichter Achse und Probennormale:  $0^\circ < \vartheta < 90^\circ$ ) oder es haben sich Domänen mit unterschiedlichen Richtungen der leichten Achse ausgebildet. Eine "out-of-plane" Magnetisierung schließlich ist durch gleiche Intensität des remanenten und nicht-remanenten Kerr Signals gekennzeichnet. In der Abbildung 6.19 a) ist die Messung mit (non-remenant) und ohne (rema-



**Abbildung 6.19:** a) und b): Polare Kerr Rotation bei 2.1 eV a) und 3 eV b) in Abhängigkeit der Ni Schichtdicke mit (non-remenant) und ohne (remenant) äußerem Magnetfeld. (F) kennzeichnet die aus der Extrapolation des Transientenverlaufs zwischen 8 ML und 12 ML abgeleitete Schichtdicke der nicht ferromagnetischen Ni Lagen. Die 3 eV Kurve wurde aus den Kerr-Hysteresekurven ermittelt. c): Die aus den Kerr-Hysteresekurven ermittelte Koerzitivität in Abhängigkeit der Ni Schichtdicke. Zur Anschauung sind exemplarisch die Kerr-Hysteresekurven eingezeichnet. Diese sind zu besseren Veranschaulichung auf ungefähr gleiche Größe skaliert. Senkrechte Linien begrenzen unterschiedliche Wachstumsphasen.

nant) angelegtem Magnetfeld bei einer Photonenenergien von 2.1 eV dargestellt. Das Wachstum wurde mehrmals zur Durchführung von Kerr-Hystereseschleifen bei einer Photonenenergie von 3 eV unterbrochen. Diese wurden zur Ermittlung der MOKE Transiente und der Koerzitivität, gezeigt in Abbildung 6.19 b) und c), verwendet.

Ab einer Ni Schichtdicke von ca. 6 ML kann eine Magnetisierung des Films nachgewiesen werden. Die leichte Achse der Magnetisierung ist bis zu einer Ni Schichtdicke von 7 ML “in-plane”. Oberhalb von 7 ML sind bis zu einer Schichtdicke von 7.5 ML sowohl “in-plane” als auch “out-of-plane” Anteile nachweisbar. Es handelt sich entweder um Domänen unterschiedlicher Richtung der leichten Achse der Magnetisierung, oder die Richtung der leichten Achse ist gegenüber der Probenormale verkippt. Für Schichtdicken von 7.5 ML bis 34 ML ist der Ni Film vollständig “out-of-plane” magnetisiert. Die tetragonale Verzerrung des Ni Filmes, bedingt durch die Gitterfehlpassung, führt zu einer “out-of-plane” Magnetisierung. Diese Verzerrung wird mit zunehmender Schichtdicke durch vermehrten Einbau von Gitterfehlstellen reduziert. So führt schließlich der Einfluss der Formanisotropie, welche eine “in-plane” Orientierung der leichten Achse der Magnetisierung zur Folge hat, bei Schichtdicken größer 34 ML zu einem “in-plane” Anteil der remanenten Magnetisierung. Jedoch verschwindet bis zur größten untersuchten Schichtdicke von 72 ML die “out-of-plane” Komponente nicht vollständig.

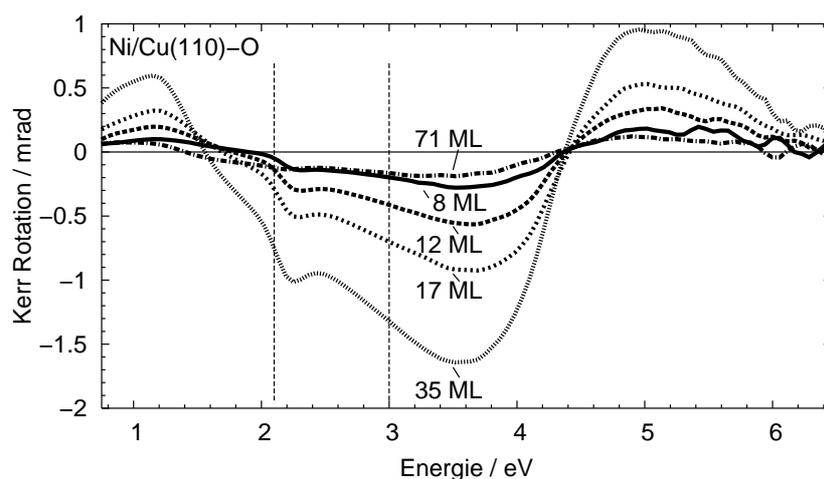
Die Stärke der Koerzitivität ist im Falle dünner Filme eng mit der Schichtqualität verknüpft. Insbesondere markiert ein Ansteigen der Koerzitivität den beginnenden Einbau von Gitterfehlstellen. Der Zusammenhang von Koerzitivität und Defektdichte wurde bereits für Ni auf Cu(100) gezeigt [106]. Somit kann aus der geringen Koerzitivität unterhalb einer Ni Bedeckung von 11 ML auf ein defektarmes, pseudomorphes Wachstum des Filmes geschlossen werden. Im Bereich von 11 ML bis 20 ML führt der Einbau von Defekten zu einem starken Anstieg der Koerzitivität. Die anschließende Verminderung bei Schichtdicken größer 20 ML kann eventuell auf den Einfluss der Formanisotropie zurückgeführt werden, die den Ummagnetisierungsprozess durch die Bevorzugung der “in-plane” Komponente unterstützt. Die Analyse der Cu Verspannungsstruktur im vorangegangenen Abschnitt zeigte aber auch, dass ab einer Ni Schichtdicke von ca. 19 ML Defekte bzw. Versetzungen an der Ni/Cu Grenzschicht auftreten und die Verspannung des Filmes ab dieser Schichtdicke nur noch sehr gering zunimmt. Die teilweise Kompensation der Verspannung durch die Ausbildung von Defekten bzw. Fehlstellen an der Ni/Cu Grenzschicht kann zur Folge haben, dass die Defektdichte der neu aufwachsenden Ni Lage wieder geringer wird. Aber auch ein Wechsel des Ummagnetisierungsprozesses bei 19 ML Ni kann eine Ursache der sich vermindern Koerzitivität ab dieser Schichtdicke sein. Bei defektarmen, dünnen Filmen wird häufig beobachtet, dass die Ummagnetisierung durch Wanderung von Domänengrenzen [129] erfolgt. Dieser Prozess erlaubt eine Ummagnetisierung des Films, selbst wenn das angelegte äußere Feld wesentlich kleiner ist als die magnetische Anisotropie. Die Wanderung der Domänengrenzen wird stark durch Gitterfehlstellen und Versetzungen behindert. Bei genügend hoher Defektdichte wird schließlich eine Ummagnetisierung durch Umklappen einzelner Domänen energetisch günstiger [129].

Die nahezu rechteckige Form der Hystereseschleifen im Bereich von 11 ML bis 36 ML Ni ist ein Indiz für pseudomorphes Wachstum mit vollständiger “out-of-plane” Orientierung der leichten Achse der Magnetisierung. Die Parallelogramm-Form der Hysteresekurven zwischen 11 ML und 20 ML lässt sich auf einen Beitrag von Bereichen unterschiedlicher Schichtdicken zurückführen, da sich hier die Koerzitivität stark mit der Schichtdicke verändert und fast die gesamte Probenoberfläche zum Kerr-Signal beiträgt (Fokus des Lichtstrahls). Aus der Abweichung von der Rechteckform lässt sich der Schichtdickenunterschied des Nickelfilms bestimmen. Es ergibt sich, dass die Abweichung von der nominalen Schichtdicke an keinem Ort der Probenoberfläche größer als  $\pm 0.4$  ML ist. Nach dem Auftreten von “in-plane” Domänen ab 38 ML ändert sich der

Kurvenverlauf der Koerzitivität abrupt. Es treten nun Domänen mit “in-plane” Magnetisierung auf, die im weiteren Verlauf des Schichtwachstums schließlich dominieren und zu typischen „Schwere-Achse-Hysteresekurven“ führen.

Die Intensität des polaren Kerr-Signals ist für dünne Filme ( $d \ll \lambda$ ) in erster Näherung direkt proportional zur Magnetisierung des Filmes, falls der Film vollständig “out-of-plane” magnetisiert ist. Bei vollständig eindomäniger “out-of-plane” Magnetisierung des Films ist somit die Kerr-Intensität direkt proportional zur Schichtdicke der ferromagnetischen Lagen des Films. Ab 7.5 ML ist die leichte Achse der Magnetisierung “out-of-plane” und eine Extrapolation des Kurvenverlaufs lässt auf die Dicke der nicht ferromagnetischen Ni Lagen (F) schließen. Für die bei 2.1 eV gemessene Transiente (Abb. 6.19 a) kann eine Schichtdicke (F) von 6 ML ermittelt werden. Die aus den Hysteresekurven extrahierte Transiente bei 3 eV (Abb. 6.19 b) führt jedoch zu einer Schichtdicke (F) von 4.6 ML. Weiter unten wird gezeigt, dass diese Diskrepanz auf den spektralen Verlauf des MOKE Signals zurückgeführt werden kann.

Durch MOKE Spektren von Ni auf Cu(110)-(2×1)-O, gezeigt in Abbildung 6.20 a, lässt sich das Wachstum detaillierter charakterisieren. Die Spektren des polaren Kerr-Effekts wurden in Remanenz (ohne äußeres Magnetfeld) gemessen. Es lässt sich leicht erkennen, dass die MOKE

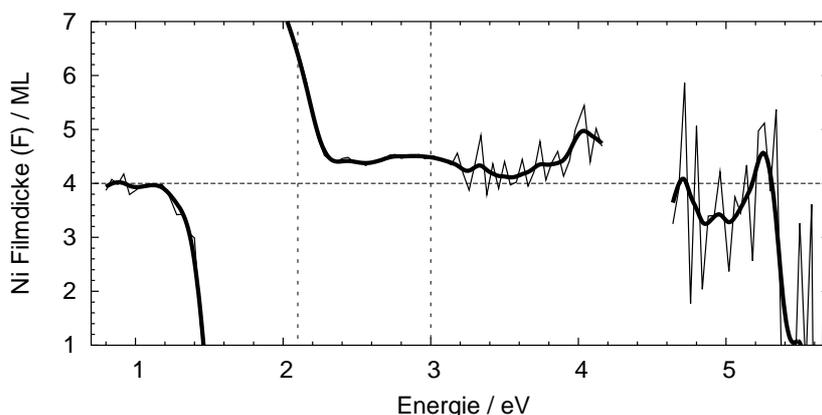


**Abbildung 6.20:** Polare MOKE Spektren (Rotation) von 8 ML bis 71 ML Ni auf Cu(110)-O(2×1). Die senkrechte Linie bei 2.1 eV markiert die Energie, bei der die MOKE Transiente aus Abbildung 6.19 a gemessen wird. Alle Spektren wurden in Remanenz gemessen.

Intensität nahezu direkt proportional zur Ni Schichtdicke anwächst. Nur bei dem 71 ML dicken Film ist die Intensität zu klein, da der Film größtenteils “in-plane” magnetisiert ist. Mit zunehmender Schichtdicke schieben die Strukturen der MOKE Spektren zu kleineren Photonenenergien. Dieses Verhalten wird in der Literatur der 3d-Band Verengung in Folge der Verspannung des Ni Films zugerechnet [104]. Die nachfolgende Analyse wird jedoch zeigen, dass diese “Rotverschiebung” auf einen rein optischen Multilageneneffekt zurückgeführt werden kann.

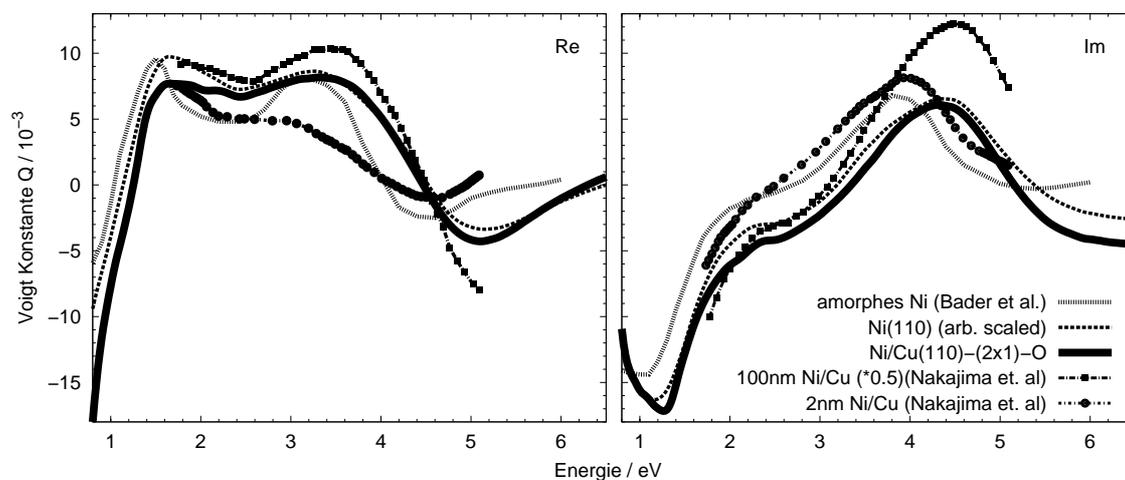
Diese spektrale Abhängigkeit der MOKE Intensität erklärt die unterschiedlichen Ergebnisse der Bestimmung der Dicke (F) der nicht ferromagnetischen Ni Lagen. Eine zuverlässige Extrapolation zur Bestimmung der Dicke (F) kann nur bei einer Energie erfolgen, bei der die Steigung

des MOKE Graphen Null ist, also hier bei einer Energie von ca. 1.1 eV, 3.5 eV oder 5 eV. Abbildung 6.21 verdeutlicht diesen Zusammenhang. Die Extrapolation zur Ermittlung der Dicke (F) wurde für jede gemessene Energie der MOKE Spektren von 8 ML und 12 ML durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.21 dargestellt. Diese Analyse reproduziert das Extrapolations-



**Abbildung 6.21:** Aus den MOKE Spektren ermittelte Schichtdicke der nicht-ferromagnetischen Lagen (F) des Nickelfilms (dicke Linie: geglättete Kurve). (F) wurde für jede Photonenergie durch Vergleich der Spektren von 8 ML und 12 ML Ni ermittelt. Die vertikalen Linien markieren die Photonenergien, bei welchen die MOKE Transiente (2.1 eV) und die Hysteresekurven (3.0 eV) gemessen wurden. Es zeigt sich hier, dass nur die ersten 4 ML Ni nicht-ferromagnetisch sind.

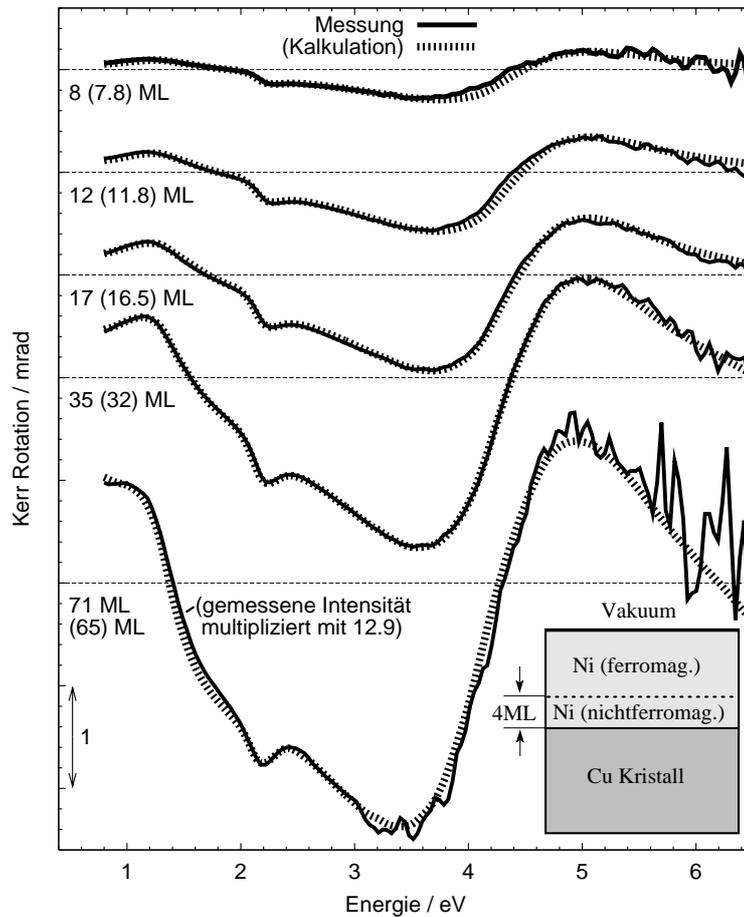
ergebnis für die Transienten bei 2.1 eV und 3 eV und zeigt deutlich, dass die Dicke (F) 4 ML beträgt. Es kann also davon ausgegangen werden, dass 4 ML Ni an der Ni/Cu Grenzschicht bei Raumtemperatur nicht ferromagnetisch sind, unabhängig von der Gesamtdicke des Ni Filmes. Zur Analyse der MOKE Spektren wurde zunächst aus dem MOKE Spektrum des 35 ML dicken Ni Filmes die Voigt Konstante der Magnetisierung berechnet. Hierfür wurde ein 4-Lagenmodell (Vakuum/Ni(ferromagnetisch)/Ni(nicht-ferromagnetisch)/Cu), wie im Kapitel 2.1.3 beschrieben, verwendet. Abbildung 6.22 zeigt die so bestimmte Voigt Konstante von 35 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O im Vergleich mit Literaturangaben [104, 130] und im Vergleich zur Voigt Konstante von Ni(110) (siehe Kapitel 5 Abbildung 5.6). Die Voigt Konstante des Ni Filmes zeigt eine gute Übereinstimmung mit der Voigt Konstante von Ni(110). Die Unterschiede in der Nähe von 2 eV sind eventuell auf eine Ungenauigkeit der dielektrischen Funktion von Cu zurückzuführen. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Veröffentlichungen sind beträchtlich, so dass sich hieraus keine weitere Aussage ableiten lässt. Mit Hilfe der so bestimmten Voigt Konstante kann nun ermittelt werden, wie sich die MOKE Spektren bei anderen Schichtdicken darstellen, unter der Voraussetzung, dass sich die optischen und magneto-optischen Konstanten nicht verändern. Eine eventuell vorhandene Ungenauigkeit der dielektrischen Funktion von Cu im Energiebereich um 2 eV würde sich hier teilweise wieder kompensieren, so dass diese Unsicherheit die Simulation kaum beeinflusst. Der Vergleich der Messung mit der Simulation zeigte, dass die Ni Schichtdicke etwas zu groß angenommen wurde. Iterativ wurde die Ni Schichtdicke für die Bestimmung der Voigt Konstante angepasst bis Simulation und Messung konsistent übereinstimmten. Für Ni Schichtdicken bis 17 ML ergibt sich eine Unsicherheit kleiner 3% und für 71 ML eine Unsicher-



**Abbildung 6.22:** Voigt Funktion von 35 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O im Vergleich mit Literaturangaben [104, 130] und Ni(110) (vergl. Abb. 5.6). Die Voigt Funktion des Nickelfilmes wurde mittels eines 4-Lagenmodells (Vakuum/Ni(ferromagnetisch)/Ni(nicht-ferromagnetisch)/Cu) bestimmt. Die optischen Konstanten für Ni und Cu wurden der Literatur entnommen [127, 128].

heit von ca. 9%. Dies ist leicht möglich, da die Bestimmung der Wachstumsrate nur bei sehr dünnen Filmen ( $< 2.5$  nm) mit RAS bzw. AES erfolgen kann. So bleibt eine leichte Änderung der Wachstumsrate während des Experimentes unbemerkt.

In Abbildung 6.23 sind die gemessenen MOKE Spektren von 8 ML bis 71 ML dargestellt und mit den berechneten Spektren verglichen. Für alle berechneten MOKE Intensitäten wurde die Voigt Konstante aus Abbildung 6.22 verwendet. Es zeigt sich eine ausgezeichnete Übereinstimmung von Experiment und Simulation. So kann die beobachtete “Rotverschiebung” auf einen rein optischen Multilageneneffekt zurückgeführt werden. Eine “Rotverschiebung” aufgrund einer 3d-Band Verengung in Folge der Verspannung des Ni Films, wie sie von Nakajima et al. [104] berichtet wird, liegt hier offensichtlich nicht vor. Neben der “Rotverschiebung” zeigt die Simulation aber auch, dass durch optische Multilageneneffekte die MOKE Intensität nicht direkt proportional zur Schichtdicke der ferromagnetischen Lagen ist. Würde man die Extrapolation, wie in Abbildung 6.21 gezeigt, mit einem Vergleich von 12 ML und 17 ML durchführen, würde sich eine Schichtdicke ( $F$ ) von 4.5 ML ergeben. Die Bedingung  $d \ll \lambda$  ist somit unzureichend, vielmehr muss die mittlere Eindringtiefe des Lichtes als schärferes Kriterium mitberücksichtigt werden. Der Methode der Extrapolation zur Bestimmung der Schichtdicke ( $F$ ) sind enge Grenzen gesetzt. Die Betrachtung der mittleren Eindringtiefe des Lichtes von Ni, gezeigt in Abbildung 6.24, verdeutlicht, dass die Methode der Extrapolation nur bei sehr dünnen Filmen bei kleinen Photonenenergien zuverlässige Ergebnisse liefern kann. Somit resultiert, dass die Methode der Extrapolation zur Bestimmung der Schichtdicke ( $F$ ) bei 1.1 eV durchgeführt werden sollte. Das hier gezeigte 4-Lagenmodell kann bei anderen Photonenenergien zu einer zuverlässigen Bestimmung der Schichtdicke ( $F$ ) benutzt werden. Auch die Simulationen der MOKE Intensitäten bestätigen, dass die Schichtdicke der nicht ferromagnetischen Lagen ( $F$ ) beim System Ni auf Cu(110)-(2×1)-O 4 ML beträgt.

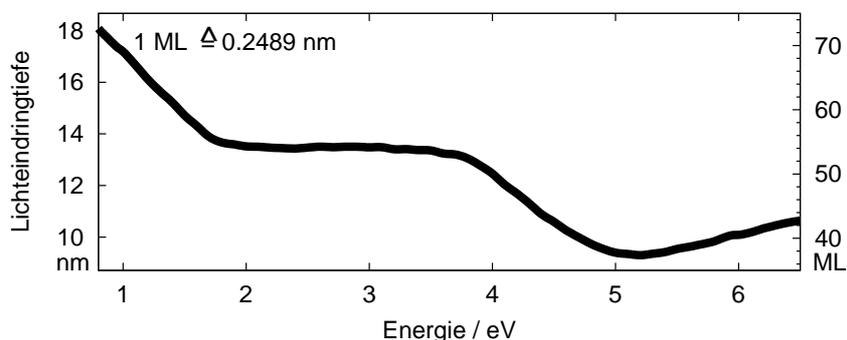


**Abbildung 6.23:** Simulation der MOKE Spektren von Ni/Cu Filmen im Vergleich mit den gemessenen MOKE Spektren. Die Simulation erfolgte nach einem 4-Lagenmodell (Vakuum/Ni(Ferromagnetisch)/Ni(nicht Ferromagnetisch)/Cu) [7]. Die Dicke des Ni Films (Simulation) wurde hierbei als freier Parameter zur Anpassung verwendet. Die durch die Simulation gefundene Dicke ist in Klammern angegeben. Die MOKE Intensität vom 71 ML Film wurde entsprechend skaliert, da nur ca. 8% der Oberfläche “out-of-plane” magnetisiert war.

### 6.1.4 Schlussfolgerungen der Untersuchung an Ni auf Cu(110)

Ni wächst nicht epitaktisch auf der reinen Cu(110)-(1×1) Oberfläche. Es zeigt sich ein 3D-Wachstum. Die gewachsenen Ni Schichten sind vollständig “in-plane” magnetisiert und auch nach dem Wachstum aufgebracht Sauerstoff ändert die magnetischen Eigenschaften der Filme nicht. Jedoch konnte gezeigt werden, dass schon eine geringe Sauerstoffkontamination auf der Cu(110) Oberfläche zu einer teilweisen “out-of plane” Magnetisierung führt. Die widersprüchlichen Ergebnisse in der Literatur [121, 122] können durch eventuell nicht erkannte Kontaminationen erklärt werden.

Sauerstoff wirkt beim Wachstum von Ni auf Cu(110) als Surfactant. RAS und AES Messungen konnten das “Aufschwimmen” des Sauerstoffs nachweisen. Es konnte gezeigt werden, dass Ni auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche zumindest bis zu einer Schichtdicke von 12 ML epitak-



**Abbildung 6.24:** Mittlere Eindringtiefe des Lichts in Ni im Spektralbereich von 0.85 eV bis 6.5 eV. Die optischen Konstanten für Ni wurden der Literatur entnommen [127].

tisch wächst. Die ersten vier Monolagen Ni an der Ni/Cu Grenzschicht sind bei Raumtemperatur nicht ferromagnetisch. In einem Schichtdickenbereich von 7.5 ML bis 35 ML ist die leichte Achse der Magnetisierung vollständig “out-of-plane” orientiert. Mittels RAS und MOKE Messungen kann das Auftreten von Verspannungen und Defekten bzw. Versetzungen qualitativ bestimmt werden. Sowohl die Ni Filmverspannung als auch die Verspannung an der Grenzschicht können analysiert werden. Die Verknüpfung der Verzerrung der RAS Spektren mit der Filmverspannung bleibt jedoch spekulativ. Ab 12 ML Ni werden vermehrt Defekte in den Ni Film eingebaut und ab einer Schichtdicke von ca. 18 ML treten Defekte bzw. Versetzungen im Cu an der Ni/Cu Grenzschicht auf. Die magneto-optischen Konstanten des Ni Films konnten bestimmt werden und es zeigte sich, dass diese für alle Ni Schichtdicken gleich sind. Eine 3d-Band Verengung [104] in Folge der Verspannung des Ni Films konnte nicht beobachtet werden. Vielmehr zeigte sich, dass die “Rotverschiebung” der MOKE Spektren auf einen rein optischen Multilageneffekt zurückgeführt werden kann.

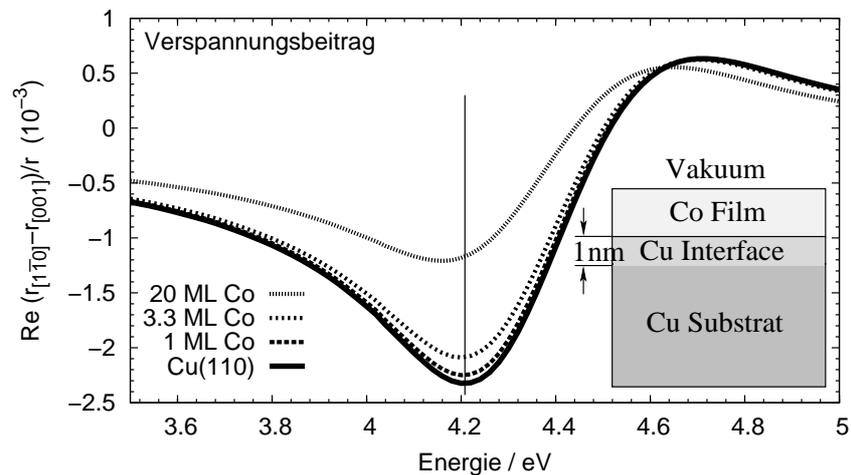
## 6.2 Co/Cu(110)

Die Untersuchung von Co auf Cu wurde zeitlich vor der Untersuchung von Ni auf Cu durchgeführt. Zu diesem Zeitpunkt war das RAS Spektrometer noch nicht mit der nötigen Funktionalität für MOKE Messungen ausgestattet. Außerdem stand noch kein “in-situ” Elektromagnet zur Verfügung. Die Untersuchung des Wachstums von Co auf Cu(110)-(1 $\times$ 1) und Cu(110)-(2 $\times$ 1)-O beschränkt sich deshalb auf eine Analyse der Oberflächenmorphologie und der Wachstumsmechanismen mittels STM und RAS.

Co Schichten auf Kupfer sind bereits eingehend untersucht worden, jedoch bezieht sich ein Großteil der Publikationen auf Co/Cu(100), da hier Lagenwachstum beobachtet wird [131, 132]. Während des Wachstums von Co Filmen auf Cu(100) kann es selbst bei Raumtemperatur leicht zu einer Interdiffusion von Co und Cu an der Grenzfläche kommen. Diese Interdiffusion ist besonders bei kleinen Wachstumsraten ausgeprägt [133, 134].

Auf der Cu(110) Oberfläche hingegen wächst Kobalt in einer 3D Inselstruktur (Vollmer-Weber-Wachstum) [135]. Durch den Einsatz von Sauerstoff als Surfactant kann aber auch auf

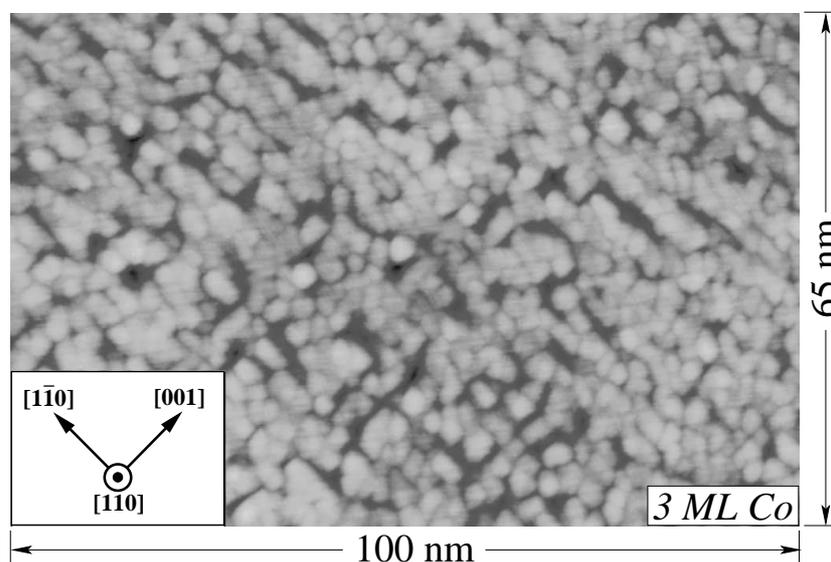
der Cu(110) Oberfläche ein Lagenwachstum erzwungen werden. Dieses wurde zuerst durch He-Streuung an Co Filmen, gewachsen auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche, nachgewiesen [136]. Die He-Streuintensität nimmt zu Beginn des Wachstums zunächst stark ab, Indiz für ein Aufrauen der Oberfläche. Zwischen 7 ML und 20 ML Co zeigen sich jedoch wieder für Lagenwachstum charakteristische Schichtdicken-Oszillationen [52]. Modellrechnungen auf Basis der gemessenen Streuintensitäten lassen auf eine atomar glatte Oberfläche bei einer Bedeckung von 18 ML Co schließen [137]. STM Messungen bestätigen das Lagenwachstum [138, 139]. Auch zeigen diese Messungen, dass während des Wachstums der ersten Monolage nacheinander zwei unterschiedliche Oberflächenstrukturen auftreten. In der ersten Phase werden Cu Atome der Cu-O Ketten durch Co Atome verdrängt. Ab einer bestimmten Co Konzentration findet eine Umordnung der Oberflächenatome statt, die von den Autoren [138, 139] als „Kobalt Grenzschichtstruktur“ bezeichnet wird. Die Cu-Volumendefektstruktur lässt sich für eine Bewertung der Grenzschichteigenschaften des Co/Cu Systems nutzen. Abbildung 6.25 zeigt die Veränderung der Cu-Volumendefektstruktur durch Co Wachstum auf Cu. Für die Simulation wurden die in der Li-



**Abbildung 6.25:** Simulation der Veränderung der Cu-Volumendefektstruktur durch Aufbringen von Co.

teratur veröffentlichten optischen Konstanten für Co und Cu angenommen [51, 127, 128]. Die Simulation zeigt ein nahezu identisches Verhalten wie Ni auf Cu (siehe Abb. 4.21).

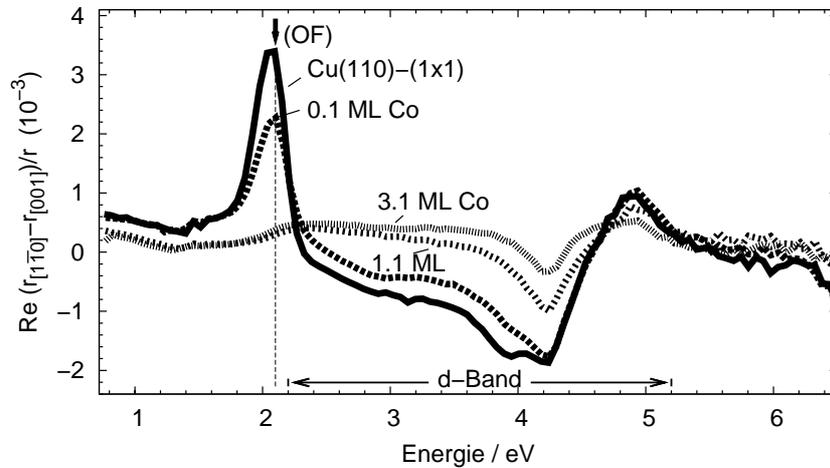
### 6.2.1 Wachstum auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche



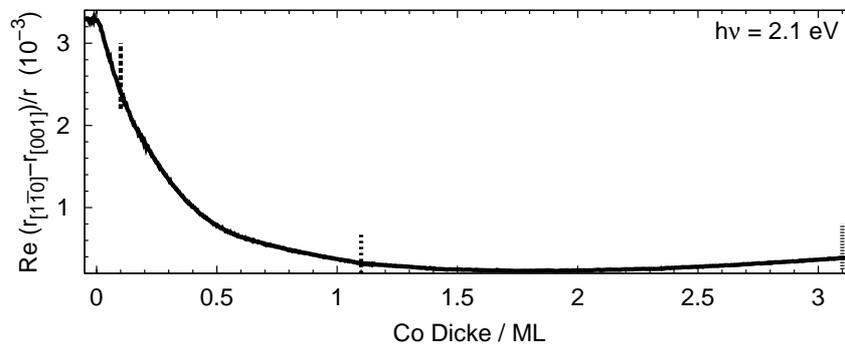
**Abbildung 6.26:** STM Aufnahme von einer nominalen Bedeckung mit 3 ML Co auf Cu(110). Co zeigt 3D Wachstum. Es bilden sich ungeordnete kreisförmige Co Inseln mit einem lateralen Durchmesser von 7 - 15 nm.

STM Messungen von Co auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche (Abb. 6.26) zeigen eine ungeordnete 3D Inselstruktur. Bei einer nominalen Bedeckung von 3 ML bilden sich kreisförmige Co Inseln mit einem Durchmesser von 7 - 15 nm. Dieses Ergebnis ist konsistent mit den bereits bekannten Veröffentlichungen [135, 139].

Die Abbildung 6.27 zeigt das RAS Spektrum der Cu(110)-(1×1) Oberfläche und Spektren von darauf aufgetragenen Co Filmen (0.1 ML - 3.1 ML). Auf das Spektrum der Cu(110)-(1×1) Oberfläche wurde bereits im Kapitel 4.4.1 näher eingegangen. Auch die Veränderungen der optischen Anisotropie durch Aufbringen von Co lassen ein ungeordnetes Wachstum vermuten. Schon eine Bedeckung der Oberfläche mit 0.1 ML Co führt zu einer starken Dämpfung des Cu(110) Oberflächenzustandes (mit (OF) markierte Struktur). Im Bereich der Cu(110) d-Bandzustände können geringe Veränderungen beobachtet werden, während das restliche Spektrum bei dieser Bedeckung nahezu unverändert bleibt. Weiteres Aufbringen von Co führt zu einer Verkleinerung der vorhandenen Strukturen, neue Strukturen erscheinen nicht. Ab einer nominalen Bedeckung von 1.1 ML Co dominiert die optische Anisotropie der Cu Volumendefektstruktur. Eine Verschiebung dieser Struktur, wie bei Ni/Cu(110)-O-(2×1) beobachtet, zeigt sich hier nicht. Dies lässt vermuten, dass die Co Ablagerung optisch isotrop ist. Somit kann auf ein ungeordnetes 3D Wachstum geschlossen werden. Vergleicht man die Dämpfung der Intensität der Cu-Volumendefektstruktur mit der Simulation in Abbildung 6.25, so zeigt sich, dass hier die Intensität wesentlich stärker abfällt. Es erscheint wahrscheinlich, dass Co Atome in das Cu Substrat diffundieren und so eine Veränderung der Verspannung im Cu bewirken. Auch die RAS Transiente bei 2.1 eV bestätigt, dass Co auf Cu(110)-(1×1) optisch isotrop aufwächst. Es zeigen sich keine Strukturen (Abb. 6.28). Mit Beginn des Wachstums verringert sich die optische Anisotropie stark, gefolgt von einem leichten Anstieg nach einer nominalen Bedeckung mit 2 ML Co.



**Abbildung 6.27:** RAS Spektren von Co/Cu(110)-(1×1), gewachsen bei Raumtemperatur. Zur Messung der Spektren wurde das Wachstum jeweils für einige Minuten unterbrochen. Der Oberflächenzustand der reinen Cu(110) Oberfläche ist mit (OF) markiert. Die vertikale Linie bei 2.1 eV markiert die Energie, bei der die Transiente während des Wachstums gemessen wurde (siehe Abb. 6.28).

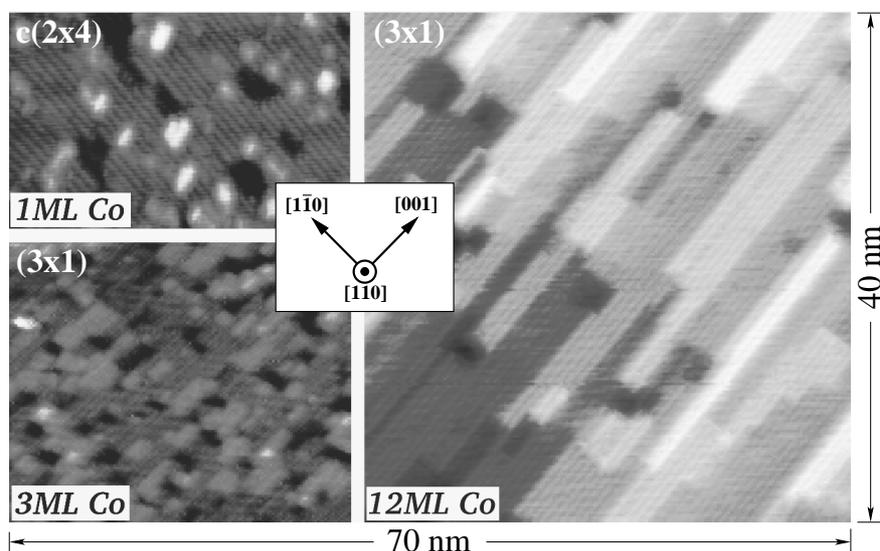


**Abbildung 6.28:** RAS Transiente des Co/Cu(110)-(1×1) Wachstums. Die vertikalen Linien markieren Schichtdicken, bei welchen das Wachstum zur Messung von RAS Spektren unterbrochen wurde (siehe Abb. 6.27).

Dieser Verlauf verdeutlicht, dass die optische Anisotropie von Cu(110)-(1×1) gedämpft wird, bis schließlich nur noch die Cu Volumendefektstruktur verbleibt. Der leichte Anstieg oberhalb einer nominalen Bedeckung mit 2 ML Co kann eventuell auf die Durchmischung von Co und Cu an der Grenzfläche zurückgeführt werden.

## 6.2.2 Wachstum mit Sauerstoff als Surfactant

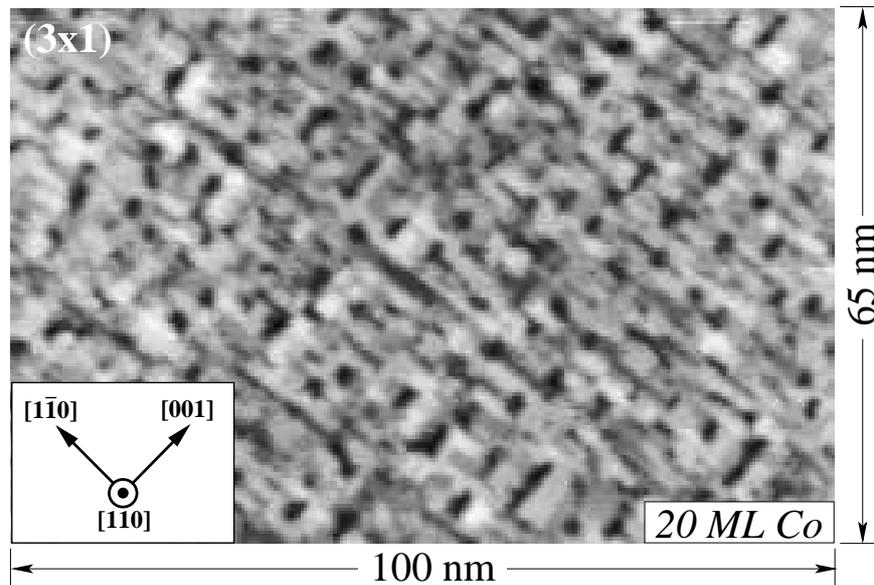
### Rastertunnelmikroskopie



**Abbildung 6.29:** STM Aufnahmen von 1 ML, 3 ML und 12 ML Co auf Cu(110)-O(2×1). Alle Bilder zeigen atomar glatte Oberflächen, somit kann auf ein Lagenwachstum geschlossen werden. 1 ML Co zeigt Ketten in  $[1\bar{1}0]$  Richtung. Die beginnende zweite Monolage (helle Bereiche im Bild links oben) zeigt Ketten in  $[001]$  Richtung, die bei 3 ML und 12 ML die gesamte Oberfläche bedecken.

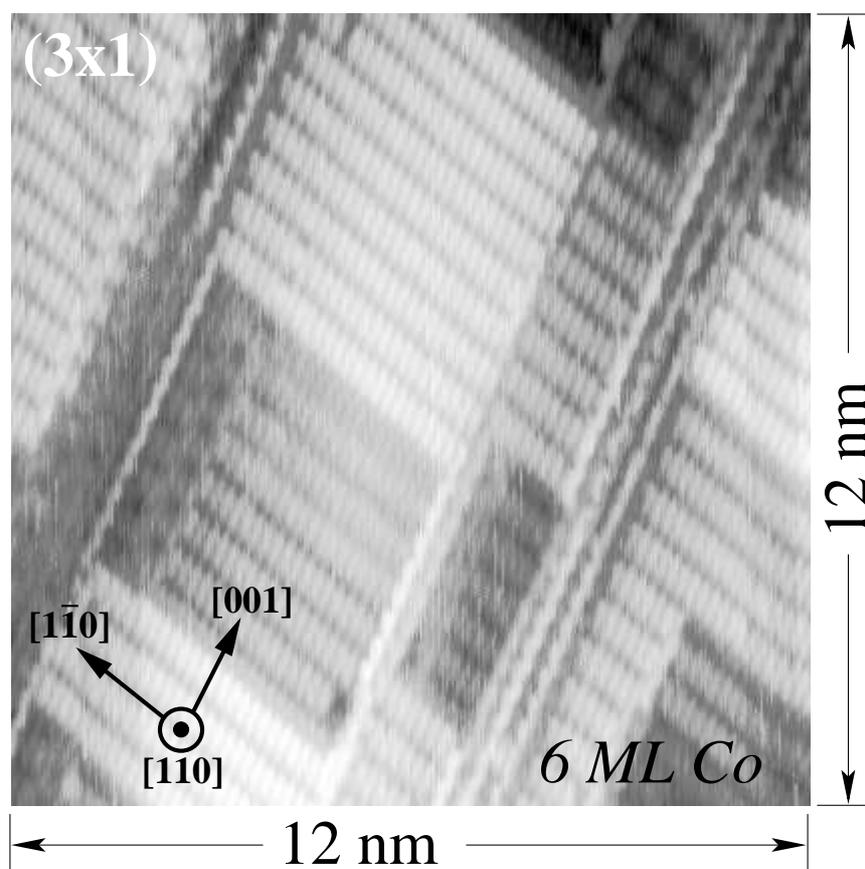
STM Messungen an verschiedenen dicken CoFilmen auf Cu(110)-(2×1)-O sind in Abbildung 6.29 gezeigt. Während STM an Cu(110)-(2×1)-O Cu-O Ketten in  $[001]$  Richtung zeigt, sind bei 1 ML Co auf diesem Substrat klar Ketten in  $[1\bar{1}0]$  Richtung erkennbar. Diese Struktur wurde als “Co Grenzschicht Phase” identifiziert und zeigt eine  $(2\times 2)/c(2\times 4)$  Oberflächenperiodizität (LEED) [138]. Für größere Co Bedeckungen führt die Nukleation von Co Atomen auf der “Co Grenzschicht Phase” zu einer erhöhten Rauigkeit der Oberfläche. Es bilden sich kleine einatomar hohe Inseln aus. Diese Inseln sind mit einer  $2/3$  Monolage Sauerstoff bedeckt und zeigen eine  $(3\times 1)$  Oberflächenperiodizität (LEED). Diese Periodizität bleibt auch bis zur größten untersuchten Schichtdicke von 20 ML erhalten und belegt, dass Sauerstoff stets an der Oberfläche verbleibt und nicht in die gewachsenen Schichten eingebaut wird. AES Untersuchungen bestätigen das “Aufschwimmen” von Sauerstoff. Für Schichtdicken größer 3 ML ist die Oberfläche wieder glatter, so dass mit He-Streuung ein Wiederauftreten von Schichtdicken-Oszillationen bei 7 ML Co beobachtet wird [52]. Bei einer Schichtdicke von 12 ML Co sind die Inseln zu Terrassen zusammengewachsen. Aufgrund der Gitterfehlانpassung wächst Co auf Cu tetragonal verzerrt. Für größere Schichtdicken wird diese Verspannung des Films durch den Einbau von Versetzungen abgebaut. Dies ist in der STM Abbildung der Oberfläche (Abb. 6.30) eines 20 ML Films auf Cu(110)-(2×1)-O deutlich erkennbar. Der atomar glatte Film ist durchbrochen mit Vertiefungen. Diese Vertiefungen sind in  $[001]$  oder  $[1\bar{1}0]$  Richtung ausgerichtet.

Der 20 ML Co Film wurde nach der Charakterisierung mit RAS, LEED und STM für



**Abbildung 6.30:** STM Aufnahme von 20 ML Co auf Cu(110)-(2x1)-O. Bei dieser Schichtdicke zeigt sich die Relaxation des Films durch Versetzungen in Form von Vertiefungen der ansonsten atomar glatten Oberfläche. LEED zeigt eine (3x1) Rekonstruktion, wobei die 1x1 Reflexe als kurze Striche in [001] Richtung und die Reflexe der Rekonstruktion nur sehr schwach sichtbar sind.

10 Minuten ( $6 \cdot 10^{-6}$  mbar  $\text{Ar}^+$ ,  $E_{kin} 800 \text{ eV}$ ) ionengeätzt und kurz bei  $155^\circ\text{C}$  getempert. Aufgrund der geringen Ionenätzintensität ist zu erwarten, dass nur einige Atomlagen Co abgetragen werden. Die Oberfläche hat, wie auch schon der Ausgangsfilm, eine (3x1) Periodizität (LEED). Jedoch sind die Beugungsreflexe wesentlich klarer und zeigen sich als kurze helle Striche in [001] Richtung. Wie durch das LEED Bild zu erwarten, zeigt sich mit STM (Abb. 6.31) eine außerordentlich gut geordnete, atomar glatte und versetzungsfreie Oberfläche. Eine Analyse mit AES ergab eine verbleibende Co Schichtdicke von 6 ML. Es wurden direkt hintereinander mehrere AES Messungen durchgeführt. Zu Beginn konnte Sauerstoff nachgewiesen werden, jedoch verschwand der Sauerstoff im Verlaufe weiterer Auger Messungen. LEED, im Anschluss an die Auger Messungen durchgeführt, zeigte nun eine 1x1 Periodizität. Das Verschwinden des Sauerstoffs durch die Auger Messung kann entweder auf eine direkte Wechselwirkung der Oberflächenatome mit den hochenergetischen Elektronen (3 keV) zurückgeführt werden oder ist Folge der Bildung atomaren Wasserstoffs im Restgas der UHV-Apparatur durch hochenergetische Elektronen. Die Wechselwirkung atomaren Wasserstoffs mit der Co(110)-(3x1)-O Oberfläche kann zu einer Desorption des Sauerstoffs von der Oberfläche führen [140]. Wie Abbildung 6.31 deutlich zeigt, kann durch vorsichtiges Modifizieren der Oberfläche (Ionenätzen/Tempern) die Ordnung wesentlich erhöht werden. Eventuell ist hier jedoch der entscheidende Faktor das Tempern des Films. Auch eine Interdiffusion von Cu und Co durch das Tempern ist möglich. Ein "Aufschwimmen" von Cu Atomen hingegen findet hier nicht statt. Das lässt sich aus der Tatsache ableiten, dass die 3x1 Oberflächenrekonstruktion durch AES Messungen verschwindet und somit keine Cu-Co Rekonstruktion sein kann.

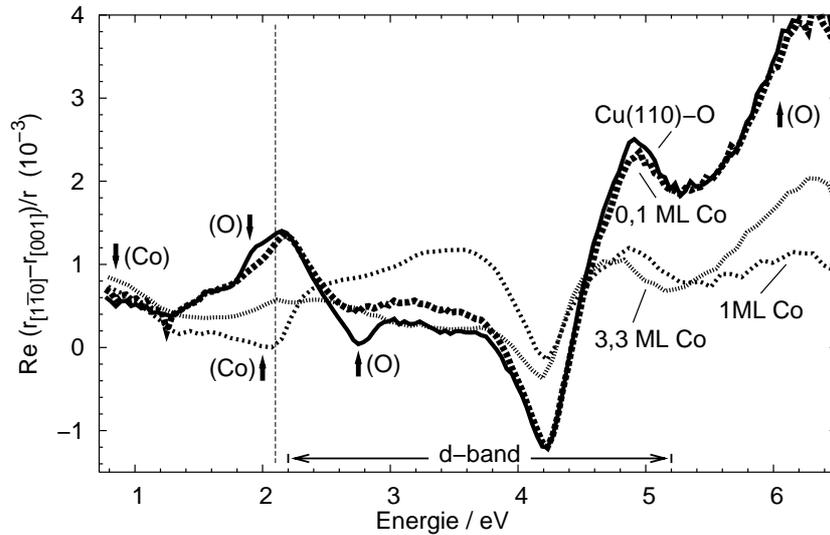


**Abbildung 6.31:** STM Aufnahme von 6 ML Co auf Cu(110)-O(2×1). Der Film wurde durch kurzes Ionenätzen des 20 ML Filmes (siehe Abb. 6.30) und kurzes Tempern bei 155 °C präpariert. LEED zeigt eine klare (3x1) Rekonstruktion. Alle Reflexe sind kurze Striche in [001] Richtung.

### Optische Anisotropie

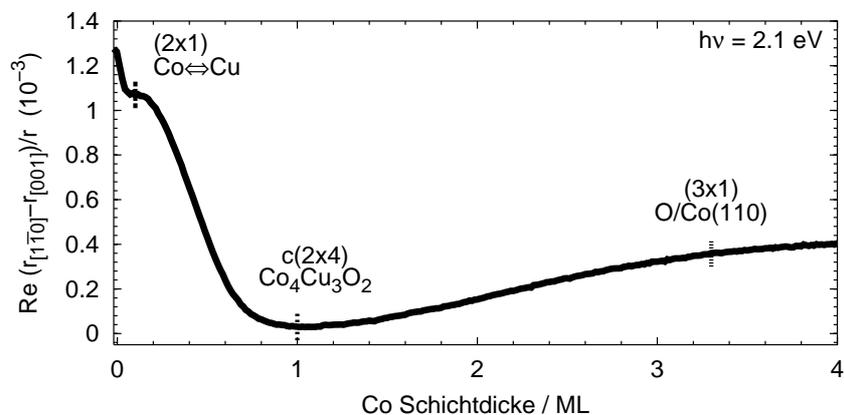
Abbildung 6.32 zeigt RAS Spektren von 0.1 ML bis 3.3 ML Co auf Cu(110)-(2×1)-O. Zum Vergleich ist ebenfalls das Spektrum der sauerstoffbedeckten Cu Oberfläche dargestellt. Die durch Sauerstoff induzierte optische Anisotropie wurde bereits eingehend im Kapitel 4.1 behandelt. Bereits nach einer Bedeckung von 0.1 ML Co sind die mit den Cu-O Ketten verknüpften Strukturen (O) bei 2.1 eV und 2.75 eV nahezu vollständig verschwunden. Die Volumenzustände im Bereich der Cu d-Band Zustände und die hochenergetische Struktur (O) bei 6 eV sind jedoch nahezu unverändert. In der ersten Phase des Co Wachstums ( $< 0.2$  ML Co) werden die Cu Atomen der Cu-O Ketten durch Co verdrängt [138]. Das Verschwinden der Strukturen (O) bei 2.1 eV und 2.75 eV ist mit dieser Substitution verknüpft.

Bei weiterer Bedeckung mit Co ändert sich die Struktur des Filmes. Es bildet sich eine  $\text{Co}_4\text{Cu}_3\text{O}_2$  Grenzschicht Struktur [138]. Diese ist bei einer Bedeckung von 1 ML Co voll ausgeprägt. Es zeigt sich eine negative Struktur bei 2.1 eV im RAS Spektrum. Diese ist nach einer Bedeckung mit 3 ML Co wieder verschwunden, was die Verknüpfung mit der Grenzschichtstruktur verdeutlicht, da bei 3 ML Co eine weitere Umordnung stattgefunden hat (siehe Abbildung 6.29).

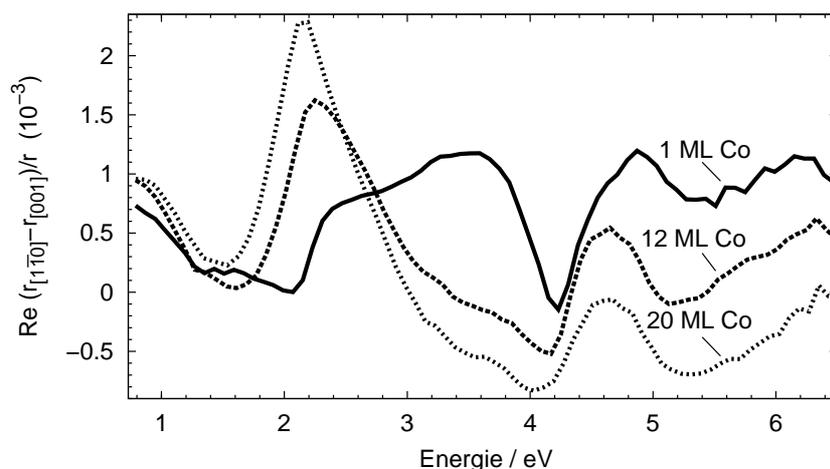


**Abbildung 6.32:** RAS Spektren von Co auf Cu(110)-O(2×1) (0.1 ML - 3.3 ML). Zur Messung der Spektren wurde das Wachstum jeweils für einige Minuten unterbrochen. Die vertikale Linie bei 2.1 eV markiert die Energie bei der Transienten während des Wachstums gemessen wurden (siehe Abb. 6.33). Der Energiebereich der Cu d-Bänder ist an der x-Achse gekennzeichnet. Strukturen, welche den Cu-O Ketten zugeschrieben werden, sind mit (O) markiert. Bei einer Bedeckung von einer Monolage bildet sich eine Cu-Co-O Grenzschicht Struktur aus, welche zur (Co) Struktur bei 2.1 eV führt.

Diese Umordnung ist auch durch eine Verschiebung der Cu-Volumendefektstruktur hin zu kleineren Energien gekennzeichnet. Die Verspannung an der Co/Cu Grenzschicht wird offensichtlich durch diese Umordnung modifiziert. Die Cu-Volumendefektstruktur wird im Vergleich zu dem Wachstum von Co auf der reinen Cu(110)-(1×1) Oberfläche wesentlich geringer gedämpft, so dass auf eine geringere Diffusion von Co Atomen in das Cu Substrat geschlossen werden kann. Im Vergleich zu Spektren geringerer und höherer (siehe Abbildung 6.34) Bedeckung erscheinen die RAS Strukturen bei einer Bedeckung von 3.3 ML Co am geringsten ausgeprägt. Dies kann als eine Folge der großen Oberflächenrauigkeit gedeutet werden. Eine direkte Beobachtung der Wachstumsprozesse auf der Oberfläche ermöglichen RAS-Transienten. Die Photonenenergie von 2.1 eV wurde gewählt, da bei dieser Energie Veränderungen an der Oberfläche zu ausgeprägten Strukturänderungen in den RAS-Spektren führen. Mithilfe der Wachstumstransiente (Abb. 6.33) lassen sich die unterschiedlichen Wachstumsphasen unterscheiden. Der starke Abfall der Transiente zu Beginn des Wachstums (bis 0.05 ML) resultiert aus der Dämpfung der Oberflächenzustände der Cu(110)-O(2×1) Oberfläche. In der zweiten Phase zeigt sich ein Plateau (0.05 ML bis 0.2 ML), kennzeichnend für den hier stattfindenden Austausch der Cu Atome der Cu-O Ketten mit Co Atomen [138]. Die danach folgende Umordnung zur  $\text{Co}_4\text{Cu}_3\text{O}_2$  Grenzschicht Struktur [138] führt zu einer weiteren Verringerung der RAS Intensität, bis diese Struktur bei 1 ML Co die Oberfläche vollständig bedeckt. Die nun entstehende (> 1 ML) Co(110)-(3×1)-O Oberfläche führt wiederum zu einem leichten Anstieg der RAS Intensität. Das Wachstum für größere Schichtdicken (Abb. 6.34) ist gekennzeichnet durch die Ausbildung einer starken

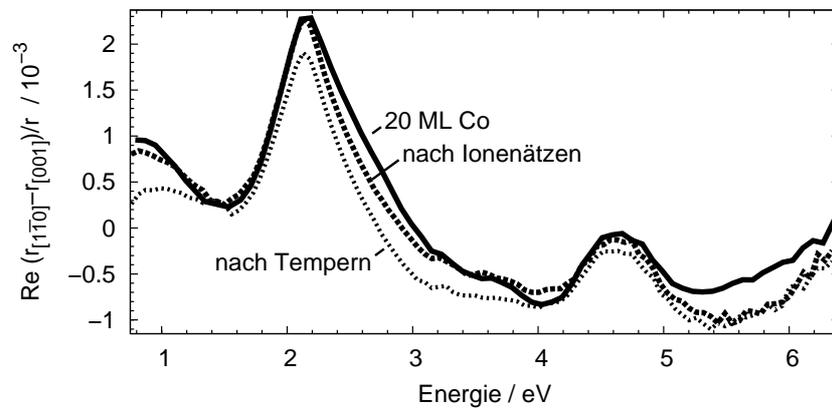


**Abbildung 6.33:** RAS Transiente des Wachstums von Co auf Cu(110)-O(2×1) bei einer Photonenenergie von 2.1 eV. Das Aufbringen von Co erfolgte mit einer Wachstumsrate von 0.29 ML pro Minute. Die vertikalen Linien kennzeichnen Schichtdicken der RAS Spektren in Abbildung 6.32. Die Oberflächenrekonstruktion (LEED) und die daraus abgeleiteten Oberflächenmorphologien sind für 0.1 ML, 1 ML und 3 ML angegeben.



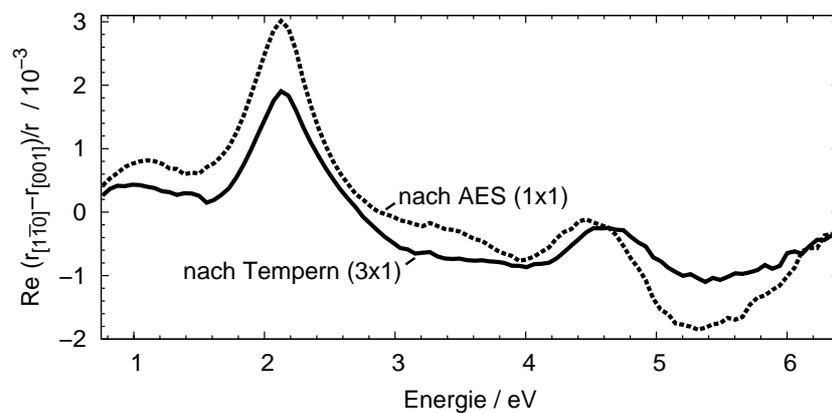
**Abbildung 6.34:** RAS Spektren von Co auf Cu(110)-(2×1)-O (1 ML bis 20 ML). Für Schichtdicken größer 3 ML zeigt sich eine Struktur bei 2.2 eV.

Struktur bei 2.2 eV und einer Schwächung der Strukturen für Photonenenergien größer 4 eV. Die energetische Verschiebung der Cu-Volumendefektstruktur im Schichtdickenbereich von 12 ML bis 20 ML ist wesentlich stärker als nach der Simulation zu erwarten. Dies lässt darauf schließen, dass der Film in diesem Schichtdickenbereich relaxiert. Es scheint, dass die 2.2 eV Struktur charakteristisch für die Co(110)-(3×1)-O Oberfläche ist. Dieser Vermutung wird im Folgenden anhand einer Modifikation des Films nachgegangen. Bei dem durch Ionenätzen und Tempern modifizierten 20 ML Co Film (Abb. 6.35) zeigt sich, betrachtet man im Vergleich dazu die Veränderung der Oberflächenstruktur (Abb. 6.31), eine überraschend geringe Änderung des RAS Spektrums. Sowohl Ionenätzen als auch Tempern hat, bis auf eine Änderung unterhalb von 1 eV,



**Abbildung 6.35:** RAS Spektren von 6 ML Co auf Cu(110)-(2×1)-O, präpariert durch Ionenätzen und Tempern eines 20 ML Co Films. Siehe auch Abb. 6.31.

nahezu keinen Einfluss auf die optische Anisotropie des Films. Da trotz wesentlich geringerer Co Schichtdicke die Intensität der Struktur bei 2.2 eV unverändert geblieben ist, kann diese nur von der Oberfläche oder der Grenzfläche verursacht sein. Es lässt sich vermuten, dass weder die Oberflächenmorphologie eine grundlegende Veränderung erfahren hat, noch dass eine weitere Durchmischung von Co und Cu stattgefunden hat. Es handelt sich weiterhin um eine Co(110)-(3×1)-O Oberfläche. Jedoch ist die Struktur bei 2.2 eV wesentlich ausgeprägter als dies für einen direkt gewachsenen Co Film von 6 ML der Fall ist. Durch den Einfluss hochenergetischer Elek-



**Abbildung 6.36:** Vergleich der RAS Spektren des mittels Ionenätzen und Tempern präparierten 6 ML dicken Films vor und nach Aufnahme von AES Spektren. Durch die AES Messung desorbiert Sauerstoff von der Oberfläche. In Klammern sind die mit LEED gemessenen Oberflächenrekonstruktionen angegeben.

tronen desorbiert Sauerstoff von der Oberfläche. Abbildung 6.36 zeigt die RAS Spektren des 6 ML Films aus Abbildung 6.35 vor (LEED: (3×1)) und nach (LEED: (1×1)) der Desorption. Die Änderung der Oberflächenrekonstruktion hat einen wesentlich größeren Einfluss auf das

RAS Spektrum als das vorhergehende Ionenätzen und Tempern. Es zeigen sich jedoch nur Intensitätsänderungen der bereits vorhandenen Strukturen. Auffällig ist hierbei die Verstärkung der Struktur bei 2.1 eV. Somit erscheint es unwahrscheinlich, dass diese Struktur eine direkte Folge der  $(3 \times 1)$  Oberflächenrekonstruktion ist. Vielmehr scheint diese aus der Anisotropie der Co-Cu Grenzfläche zu resultieren, oder sie ist durch die Verspannung des Films bedingt. Auch die Cu-Volumendefektstruktur schiebt energetisch durch die Desorption von Sauerstoff. Dies weist auf eine Veränderung der Verspannung an der Co/Cu Grenzschicht hin.

### **6.2.3 Schlussfolgerungen der Untersuchung an Co auf Cu(110)**

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass Co auf Cu(110)- $(1 \times 1)$  ungeordnetes Inselwachstum zeigt. STM sowie RAS Spektren und Transienten belegen dies konsistent. Co auf Cu(110)- $(2 \times 1)$ -O hingegen wächst Lagenweise. Die unterschiedlichen Wachstumsphasen bei kleiner Co Bedeckung können anhand charakteristischer RAS Strukturen identifiziert werden. Sauerstoff wirkt als Surfactant und ermöglicht Lagenwachstum bis zu einer Schichtdicke von mindestens 12 ML. Die Schichten relaxieren oberhalb einer Dicke von 12 ML durch den Einbau von Versetzungen bzw. Lücken. Nachträgliches Modifizieren der Schichten durch Ionenätzen und Tempern ermöglicht eine erhebliche Verbesserung der Oberflächenordnung, ohne zu einer Interdiffusion beizutragen. Die in den RAS Spektren sichtbaren Strukturen für größere Schichtdicken scheinen alle von der Co/Cu Grenzschicht und der Cu Verspannung verursacht zu sein. Wie auch im Falle von Ni auf Cu(110)-O- $(2 \times 1)$ , ermöglicht die Analyse der Cu-Volumendefektstruktur Rückschlüsse auf die Eigenschaften der Co/Cu Grenzschicht.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Reflexions Anisotropie Spektroskopie und magneto-optische Kerr-Spektroskopie erfolgreich zur Analyse des Schichtwachstums ferromagnetischer Filme auf Cu(110) Substraten eingesetzt. Die ausführliche Behandlung der optischen Anisotropie von Kupfer-Einkristallobereflächen führte zur Charakterisierung bisher nicht diskutierter RAS Strukturen. Insbesondere erfolgte eine Zuordnung der verschiedenen RAS Beiträge als oberflächen-nah bzw. oberflächenentfernt. Die RAS Volumendefektstruktur von Cu Einkristallen wurde genau charakterisiert und ermöglichte dadurch die Beobachtung der Verspannung bzw. der Versetzungsdichte an der Ni/Cu Grenzschicht.

Sauerstoff wirkt beim Wachstum von Ni und Co auf Cu(110) als Surfactant. Hierbei "schwimmt" Sauerstoff während des Wachstums stets auf der Oberfläche auf. Ni und Co wachsen auf der Cu(110)-(2×1)-O Oberfläche zumindest bis zu einer Schichtdicke von 12 ML epitaktisch. Die ersten vier Monolagen Ni an der Ni/Cu Grenzschicht sind bei Raumtemperatur nicht ferromagnetisch. In einem Schichtdickenbereich von 7.5 ML bis 35 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O ist die leichte Achse der Magnetisierung vollständig "out-of-plane" orientiert. Ab 12 ML Ni werden vermehrt Defekte in die Filme eingebaut und ab einer Schichtdicke von ca. 18 ML bis 20 ML treten Defekte bzw. Versetzungen im Cu an der Ni/Cu bzw. Co /Cu Grenzschicht auf. Die magneto-optischen Konstanten des Ni Films konnten bestimmt werden und es zeigte sich, dass diese für alle Ni Schichtdicken gleich sind. Eine 3d-Band Verengung [104] in Folge der Verspannung des Ni Films konnte nicht beobachtet werden. Vielmehr zeigte sich, dass die "Rotverschiebung" der MOKE Spektren auf einen rein optischen Multilageneneffekt zurückgeführt werden kann.

Diese Untersuchung hat gezeigt, dass Reflexions Anisotropie Spektroskopie in Verbindung mit komplementären Methoden wie STM und MOKE eine umfassende Analyse des Schichtwachstums ferromagnetischer Filme ermöglicht. Insbesondere die Möglichkeit die Verspannung bzw. Defektdichte an der Film/Substrat Grenzschicht zu beobachten, ist hier von großem Vorteil.

Bisher wurden RAS "Signaturen", die von Verspannungen und Defekten verursacht sind, nicht tiefergehend analysiert. Diese Arbeit zeigt wie solche RAS Strukturen quasi als Marker benutzt werden können, um die Eigenschaften an Film/Substrat Grenzschichten zu untersuchen. Weitergehende Untersuchungen mögen zusätzliche Möglichkeiten aufzeigen, um für spezielle Fragestellungen geeignete Analyseverfahren mittels RAS zu entwickeln.



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Kerr-Geometrien (polar, transversal und longitudinal) . . . . .	9
2.2	Spinaufgelöste Zustandsdichte von Nickel . . . . .	13
2.3	Schematische Darstellung einer Magnetisierungskurve mit Hysterese . . . . .	15
2.4	Magnetisierungskurven bei uniaxialer Anisotropie . . . . .	15
2.5	Schematische Darstellung von Wachstumsmodi des epitaktischen Wachstums . .	16
2.6	Schematische Darstellung von Punktdefekten . . . . .	17
2.7	Schematische Darstellung einer Schraubversetzung . . . . .	18
3.1	Prinzip eines RAS Spektrometers . . . . .	20
3.2	Ermittlung von MOKE und RAS Anteilen aus den Messungen . . . . .	21
3.3	Das RAS/MOKE Spektrometer . . . . .	22
4.1	Atom-Anordnung der Cu(110)-(1×1) und Cu(110)-(2×1)-O Oberflächen . . . . .	26
4.2	STM Aufnahme von Cu(110)-(1x1) . . . . .	27
4.3	RAS Spektrum der Cu(110)-(1×1) Oberfläche . . . . .	27
4.4	RAS Spektrum von Cu(110)-(1x1) bei 300 K und 150 K . . . . .	29
4.5	Optische Anisotropie von Cu(110)-O bei RT und 150 K . . . . .	30
4.6	RAS Veränderung durch Adsorption von O bei verschiedenen Temperaturen. . .	31
4.7	RAS von Cu(110)-(1x1), sowie im Submonolagenbereich bedeckt mit Natrium. .	32
4.8	Veränderung der optischen Anisotropie durch Adsorbatbedeckung . . . . .	33
4.9	Präparationsdifferenz von RAS Spektren der Cu(110)-(1x1) Oberfläche . . . . .	35
4.10	RAS Volumendefektstruktur und RAS von 0.4 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O . . .	36
4.11	Ex-situ RAS Messung von Cu(110) mit und ohne äußerem Druck . . . . .	37
4.12	Veränderung des RAS Spektrums von Cu(110)-(1x1) durch Ionenätzen. . . . .	38
4.13	Veränderung der optischen Anisotropie von Ni/Cu(110) durch Ionenätzen . . . .	40
4.14	Modell der Cu(111) und der vizinalen (111) Oberflächen . . . . .	41
4.15	Optische Anisotropie von Cu(111) . . . . .	42
4.16	Optische Anisotropie von Cu(112), Cu(221), Cu(332) und Cu(443) . . . . .	43
4.17	Optische Anisotropie von Cu(332), Rotation der Probe . . . . .	45
4.18	Schematische Darstellung der Facettierung von Cu(443) . . . . .	46
4.19	RAS Veränderung von vizinalen Cu Oberflächen durch Sauerstoffadsorption. . .	47
4.20	Vergleich von Cu(110)-(2×1)-O und der facettierten Cu(443)-O Oberfläche . . .	48
4.21	SDA und Volumenanisotropie der gefundenen Volumendefektstrukturen . . . . .	49
5.1	Atom-Anordnung von Ni(110) und Ni(110)-O . . . . .	51
5.2	Veröffentlichte Spektren der optische Anisotropie von Ni(110)-(1x1) . . . . .	52
5.3	Optische Anisotropie von Ni(110)-(1×1) und Ni(110)-(31×1)-O . . . . .	52
5.4	SDA der reinen und sauerstoffbedeckten Oberflächen von Cu(110) und Ni(110) .	53

5.5	Polare Kerr Rotation von Ni(110) in Remanenz . . . . .	54
5.6	Voigt Konstante von Ni(110) . . . . .	54
6.1	Simulation 1 der optischen Anisotropie von Ni/Cu Filmen . . . . .	57
6.2	Simulation 2 der optischen Anisotropie von Ni/Cu Filmen . . . . .	58
6.3	Simulation der optischen Anisotropie von Ni(110)-O Filmen auf Cu(110) . . . . .	58
6.4	RAS Messung von 4 ML Ni/Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	59
6.5	STM Aufnahme von 10 ML Ni auf der Cu(110)-(1×1) Oberfläche . . . . .	60
6.6	RAS Spektren von Ni auf Cu(110)-(1×1) . . . . .	61
6.7	RAS Wachstumstransiente während des Aufbringens von Ni auf Cu(110)-(1×1) . . . . .	62
6.8	Wachstumstransiente des polaren Kerr-Signals von Ni auf Cu(110)-(1×1) . . . . .	63
6.9	Wachstumstransiente des polaren Kerr Signals bei einer Kontamination mit O . . . . .	63
6.10	STM Aufnahme von 9 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	64
6.11	RAS Spektren von 2.1 - 15 ML Ni auf Cu(110)(2×1)-O . . . . .	65
6.12	RAS Spektrum von 6.4 ML Ni auf Cu(110)-O und berechnetes Spektrum . . . . .	66
6.13	RAS Spektren von Ni auf Cu(110)-O vor und nach dem Beschuss mit Elektronen . . . . .	67
6.14	RAS Spektren von 12 ML bis 50 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	68
6.15	RAS Spektrum von 50 ML Ni auf Cu(110)-O und berechnetes Spektrum . . . . .	68
6.16	Energetische Position der Cu-Volumendefektstruktur (s) . . . . .	69
6.17	Differenz der RAS Intensitäten von 2 und 5.5 eV normiert auf die Ni Filmdicke . . . . .	70
6.18	RAS Transiente (2.1eV) des Wachstums von Ni auf Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	71
6.19	Polare Kerr Rotation sowie die Koerzitivität in Abhängigkeit der Ni Schichtdicke . . . . .	72
6.20	Polare MOKE Spektren (Rotation) von 8 ML bis 71 ML Ni auf Cu(110)-O(2×1) . . . . .	74
6.21	Aus den MOKE Spektren ermittelte Schichtdicke (F) des Nickelfilms . . . . .	75
6.22	Voigt Funktion von 35 ML Ni auf Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	76
6.23	Simulation der MOKE Spektren von Ni/Cu Filmen . . . . .	77
6.24	Mittlere Eindringtiefe des Lichts in Ni . . . . .	78
6.25	RAS Simulation der Cu-Volumendefektstruktur von Co/Cu(110) . . . . .	79
6.26	STM Aufnahme von 3 ML Co auf Cu(110) . . . . .	80
6.27	RAS Spektren von Co/Cu(110)-(1×1) . . . . .	81
6.28	RAS Transiente des Co/Cu(110)-(1×1) Wachstums . . . . .	81
6.29	STM Aufnahmen von 1 ML, 3 ML und 12 ML Co auf Cu(110)-O(2×1) . . . . .	82
6.30	STM Aufnahme von 20 ML Co auf Cu(110)-(2×1)-O . . . . .	83
6.31	STM Aufnahme von 6 ML Co auf Cu(110)-O(2×1)(Ionenätzen des 20 ML Films) . . . . .	84
6.32	RAS Spektren von Co auf Cu(110)-O(2×1) (0.1 ML - 3.3 ML) . . . . .	85
6.33	RAS Transiente (2.1 eV) des Wachstums von Co auf Cu(110)-O(2×1) . . . . .	86
6.34	RAS Spektren von Co auf Cu(110)-(2×1)-O (1 ML bis 20 ML) . . . . .	86
6.35	RAS Spektren von Co auf Cu(110)-(2×1)-O nach Ionenätzen . . . . .	87
6.36	Veränderung der RAS Spektren durch AES Messungen . . . . .	87

## Symbolverzeichnis

$a$	Gitterkonstante	16
$\hat{\alpha}$	Polarisierbarkeit	4
$d$	Schichtdicke	7
$\hat{\delta}$	komplexer Phasenunterschied	7
$\Delta\hat{\epsilon}$	Differenz von dielektrischen Funktionen	4
$\mathbf{D}$	Verschiebestromdichte	3
$\hat{E}$	komplexe Amplitude des E-Feldes	7
$e$	Elementarladung	3
$\hat{\epsilon}$	komplexe dielektrische Funktion	3
$\epsilon_{\infty}$	dielektrischen Funktion für $\omega \rightarrow \infty$	4
$\hat{\epsilon}_{jj}$	Diagonalelemente des dielektrischen Tensors	6
$\hat{\epsilon}_{jk}$	Offdiagonalelemente des dielektrischen Tensors	6
$\eta_K$	Kerr Elliptizität	9
$\mathbf{E}$	E-Feld Vektor	3
$f$	Gitterfehlpassung	16
$\Gamma$	Dämpfungskonstante	3
$H_c$	Koerzitivfeldstärke	14
$\mathbf{I}$	Interfacematrix	8
$k$	Extinktionskoeffizient	3
$\lambda$	Lichtwellenlänge	7
$\mathbf{L}$	Schichtmatrix	8
$\mathbf{M}$	Magnetisierungsvektor	5
$m$	Masse	3
$\mathbf{m}$	Einheitsvektor in Richtung der Magnetisierung	6
$\hat{\mu}_r$	Permeabilität	6
$N$	Anzahl der Grenzschichten	9
$n$	Brechungsindex	3

## Theodor Herrmann

### Symbolverzeichnis

---

$N_e$	Anzahl der Elektronen pro Einheitsvolumen	4
$\hat{n}$	komplexer Brechungsindex	3
$\omega_0$	Resonanzfrequenz	3
$\omega_c$	Zyklotronfrequenz	5
$\omega_p$	Plasmafrequenz	4
$\varphi_0$	Lichteinfallswinkel	7
$\varphi_1$	Brechungswinkel des Lichts	7
<b>P</b>	Polarisation	3
$\hat{Q}$	komplexe Voigt-Konstante	6
$\hat{r}$	komplexe Reflektivität	6
$\frac{\Delta\hat{r}}{\hat{r}}$	optische Anisotropie	8
<b>R</b>	Reflexionskoeffizient	8
<b>S</b>	Matrix des Schicht- Interfacesystems	8
$\hat{\sigma}$	optische Leitfähigkeit	4
$\sigma_g$	Grenzflächenenthalpie	16
$\sigma_{os}$	Oberflächenenthalpie	16
$\hat{t}$	komplexe Transmission	6
<b>T</b>	Transmissionskoeffizient	8
$\hat{\Theta}_K$	komplexer Kerr Winkel	10
$\theta_K$	Kerr-Drehung	9

## Abkürzungsverzeichnis

AES	Auger-Elektronen Spektroskopie
ARUPS	winkelaufgelöste Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie
fcc	flächenzentriertes kubisches Kristallgitter
FMR	ferromagnetische Resonanz
LEED	Beugung niederenergetischer Elektronen
MOKE	magneto-optischer Kerr-Effekt
PEM	photoelastischer Modulator
RAS	Reflexions-Anisotropie Spektroskopie
RMS	quadratischer Mittelwert
S-XRD	Oberflächen Röntgenbeugung
SDA	dielektrische Oberflächenanisotropie
STM	Rastertunnel-Mikroskopie
UHV	Ultrahoch-Vakuum
UPS	Ultraviolett-Photoelektronenspektroskopie
XPS	Röntgen-Photoelektronenspektroskopie



## Literaturverzeichnis

- [1] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon Press, Oxford (1964). Zitiert auf S. 7.
- [2] F. Abelès. *An. de Physique* **5**, 596 (1950). Zitiert auf S. 8.
- [3] F. Abelès. *An. de Physique* **5**, 706 (1950). Zitiert auf S. 8.
- [4] M.-A. Schroeder. Magnetooptische Kerr-Effekte im VUV an Eisen und Eisensystemen. Dissertation an der Universität Hamburg (2000). Zitiert auf S. 9.
- [5] J. Zak, E.R. Moog, C. Liu, and S.D. Bader. *J. Magn. Magn. Mater.* **89**, 107 (1990). Zitiert auf S. 11.
- [6] J. Zak, E. R. Moog, C. Liu, and S. D. Bader. fundamental magneto-optics. *J. Appl. Phys.* **68(8)** (1990). Zitiert auf S. 11.
- [7] J. Zak, E.R. Moog, C. Liu, and S.D. Bader. *Phys. Rev. B* **43**, 6423 (1991). Zitiert auf S. 11 und 77.
- [8] Š. Višňovský. *Optics in Magnetic Multilayers and Nanostructures*. CRC, Taylor & Francis Group (2006). Zitiert auf S. 11.
- [9] R. Zeller. Bandmagnetismus. 30. IFF-Ferienkurs: Magnetische Schichtsysteme, Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich GmbH (1998). Zitiert auf S. 12.
- [10] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenburg Verlag München, 1 edition (2001). Zitiert auf S. 12.
- [11] V. L. Moruzzi, J. F. Janak, and A.R. Williams. *Calculated Electronic Properties of Metals*. Pergamon, New York (1978). Zitiert auf S. 13.
- [12] S. Blügel. Bandmagnetismus II. 24. IFF-Ferienkurs: Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen, Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich GmbH (1993). Zitiert auf S. 12.
- [13] R. Vollmer and J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **61(6)** (1999). Zitiert auf S. 13.
- [14] K. Baberschke. *Appl. Phys. A* **62**, 417–427 (1995). Zitiert auf S. 13.
- [15] S. Blügel. Magnetische Anisotropie und Magnetostriktion. 30. IFF-Ferienkurs: Magnetische Schichtsysteme, Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich GmbH (1998). Zitiert auf S. 13 und 14.

- [16] B. Bruno. Physical origins and theoretical models of magnetic anisotropy. 24. IFF-Ferienkurs: Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen, Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich GmbH (1993). Zitiert auf S. 14.
- [17] K. Baberschke, M. Donath, and W. Nolting, editors. *Band-Ferromagnetism*. Springer (2001). Zitiert auf S. 14.
- [18] S. Püttner. Spinreorientierungsübergänge in ultradünnen Filmen: Der Einfluß von äußeren Feldern. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2000). Zitiert auf S. 14.
- [19] L. Néel. *J. Phys. Rad* **15**, 225 (1954). Zitiert auf S. 14.
- [20] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth. *Phil. Trans. R. Soc.* **240(599)** (1948). Zitiert auf S. 14.
- [21] F. C. Frank and J. H. van der Merwe. *Proc. Roy. Soc. London A* **198**, 205 (1949). Zitiert auf S. 16.
- [22] J. H. van der Merwe. *J. Appl. Phys.* **34**, 117 (1963). Zitiert auf S. 16.
- [23] J. H. van der Merwe. *J. Appl. Phys.* **34**, 123 (1963). Zitiert auf S. 16.
- [24] M. Vollmer and A. Weber. *Z. Phys. Chem.* **119**, 277 (1926). Zitiert auf S. 16.
- [25] I. N. Stranski and L. Krastanow. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften* **146**, 797 (1938). Zitiert auf S. 16.
- [26] D. Hull and D.J. Bacon. *Introduction to Dislocations*. Pergamon Press, 4th edition (2001). Zitiert auf S. 17.
- [27] K. Nordlund and R. S. Averback. *Phys. Rev. Lett.* **80(19)**, 4201 (1998). Zitiert auf S. 18.
- [28] N.M. Ghoniem, D. Walgraef, and S.J. Zinkle. *J. Comp.-Aided Mat. Design* **8**, 1 (2002). Zitiert auf S. 18.
- [29] D. Mordehai, Y. Ashkenazy, I. Kelson, and G. Makov. *Phys. Rev. B* **67(2)**, 024112 (2003). Zitiert auf S. 18.
- [30] T. Rasmussen, K. W. Jacobsen, T. Leffers, O. B. Pedersen, S. G. Srinivasan, and H. Jónsson. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3676 (1997). Zitiert auf S. 18.
- [31] T. Rasmussen, T. Vegge, T. Leffers, O.B. Pedersen, and K.W. Jacobsen. *Philos. Mag. A* **80**, 1273 (2000). Zitiert auf S. 18.
- [32] M. Garfinkel, J.J. Tiemann, and W.E. Engeler. *Phys. Rev.* **148**, 695 (1966). Zitiert auf S. 18 und 37.
- [33] R.J. Cole, S. Kheradmand, D.D. Higgins, F. Madani, B.F. Macdonald, V. Koutsos, and J.R. Blackford. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, L115 (2003). Zitiert auf S. 18 und 37.

## Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen

### LITERATURVERZEICHNIS

---

- [34] K. Hingerl, R.E. Balderas-Navarro, A. Bonanni, P. Tichopadek, and W.G. Schmidt. *Appl. Surf. Sci.* **175-176**, 769 (2001). Zitiert auf S. 18.
- [35] K. Hingerl, R.E. Balderas-Navarro, A. Bonanni, and D. Stifter. *J. Vac. Sci. Technol. B* **19** (4), 1650 (2001). Zitiert auf S. 18.
- [36] J. Ortega-Gallegos, A. Lastras-Martínez, L. F. Lastras-Martínez, and R. E. Balderas-Navarro. *phys. stat. sol. (c)* **5(8)**, 2561 (2008). Zitiert auf S. 18.
- [37] B. R. Bennett, J. A. del Alamo, M. T. Sinn, F. Peiró, A. Cornet, and D. E. Aspnes. *J. of El. Materials* **23(4)**, 423 (1994). Zitiert auf S. 18.
- [38] J. Fassbender, G. Guntherodt, C. Mathieu, B. Hillebrands, R. Jungblut, J. Kohlhepp, M.T. Johnson, D.J. Roberts, and G.A. Gehring. *Phys. Rev. B* **57(10)**, 5870 (1998). Zitiert auf S. 18 und 56.
- [39] A.I. Shkrebtii, N. Esser, W. Richter, W.G. Schmidt, F. Bechstedt, A. Kley, B.O. Fimland, and R. Del Sole. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 721 (1998). Zitiert auf S. 19 und 28.
- [40] W. Richter and J.-T. Zettler. *Appl. Surf. Sci.* **100**, 465 (1996). Zitiert auf S. 19.
- [41] K. Stahrenberg, Th. Herrmann, N. Esser, Sahn J., and W. Richter. Ag(110). *Phys. Rev. B* **58**, R10207 (1998). Zitiert auf S. 19.
- [42] K. Stahrenberg, Th. Herrmann, N. Esser, and W. Richter. Surface optical properties of clean cu(110) and cu(110)-(2×1)-o. *Phys. Rev. B* **61**, 3043 (2000). Zitiert auf S. 19,26 und 28.
- [43] Ph. Hofmann, K. C. Rose, V. Fernandez, A. M. Bradshaw, and W. Richter. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2039 (1995). Zitiert auf S. 19,26 und 28.
- [44] J.-K. Hansen, J. Bremer, and O. Hunderi. *Surf. Sci.* **418**, L58 (1998). Zitiert auf S. 19,26 und 28.
- [45] K. Hingerl, D. E. Aspnes, I. Kamiya, and L. T. Florez. *Appl. Phys. Lett.* **63**, 885 (1993). Zitiert auf S. 19.
- [46] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth. *Phil. Trans. R. Soc.* **240**, 599 (1948). Zitiert auf S. 21.
- [47] Katsuaki Sato. *Jap. J. Appl. Phys.* **20**, 2403 (1981). Zitiert auf S. 22.
- [48] D. E. Aspnes, J. P. Harbison, A. A. Studna, and L. T. Florez. *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 1327 (1988). Zitiert auf S. 22.
- [49] D. J. Coulman, J. Winterlin, R. J. Behm, and G. Ertl. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1761 (1990). Zitiert auf S. 23 und 26.
- [50] K. Kern, H. Niehus, A. Schatz, P. Zeppenfeld, J. George, and G. Comsa. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 855 (1991). Zitiert auf S. 23 und 26.

- [51] Knut Stahrenberg. PhD thesis, Technische Universität Berlin, Germany (2000).  
Zitiert auf S. 23,29,57 und 79.
- [52] C. Tölkes, R. Struck, R. David, P. Zeppenfeld, and G. Comsa. *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1059 (1998).  
Zitiert auf S. 24,79 und 82.
- [53] P. Monachesi, M. Palummo, R. Del Sole, A. Grechnev, , and O. Eriksson. *Phys. Rev. B* **68**, 035426 (2003).  
Zitiert auf S. 25,26 und 27.
- [54] Jin-Cheng Zheng, Hui-Qiong Wang, A.T.S. Wee, and C.H.A. Huan. *Surf. Rev. and Lett.* **8**, 541 (2001).  
Zitiert auf S. 26.
- [55] G.Prèvot, B.Croset, Y.Girard, A.Coati, Y.Garreau, M.Hohage, L.D. Sun, and P.Zeppenfeld. *Surf. Sci.* **549**, 52 (2004).  
Zitiert auf S. 26.
- [56] R. Schuster and I. K. Robinson. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1671 (1996).  
Zitiert auf S. 26.
- [57] B. G. Frederick, J. R. Power, R. J. Cole, C. C. Perry, Q. Chen, S. Haq, Th. Bertrams, N. V. Richardson, and P. Weightman. *Phys. Rev. Lett.* **80(20)**, 4490 (1998).  
Zitiert auf S. 26.
- [58] D. S. Martin, A. M. Davarpanah, S. D. Barrett, and P. Weightman. *Phys. Rev. B* **62(23)**, 15417 (2000).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [59] A. W. Robinson, J. S. Somers, D. E. Ricken, A. M. Bradshaw, A.L. D. Kilcoyne, and D. P. Woodruff. *Surf. Sci.* **227**, 237 (1990).  
Zitiert auf S. 26.
- [60] S. R. Parkin, H. C. Zeng, M. Y. Zhou, and K. A. R. Mitchell. *Phys. Rev. B* **41**, 5432 (1990).  
Zitiert auf S. 26.
- [61] S. Y. Liem, G. Kresse, and J. H. R. Clarke. *Surf. Sci.* **415**, 194 (1998).  
Zitiert auf S. 26.
- [62] J. Bremer, J.K. Hansen, and O. Hunderi. *Surf. Sci. Lett.* **436**, L735 (1999).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [63] J. Bremer, J.K. Hansen, and O. Hunderi. *Appl. Surf. Sci.* **142**, 286 (1999).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [64] D. S. Martin, A. Maunder, and P. Weightman. *Phys. Rev. B* **63**, 155403 (2001).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [65] L. D. Sun, M. Hohage, P. Zeppenfeld, R. E. Balderas-Navarro, and K. Hingerl. *Phys. Rev. Lett.* **90(10)**, 106104 (2003).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [66] L.D. Sun, M. Hohage, P. Zeppenfeld, R.E. Balderas-Navarro, and K. Hingerl. *Surf. Sci. Lett.* **527**, L184 (2003).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [67] L.D. Sun, M. Hohage, P. Zeppenfeld, and R.E. Balderas-Navarro. *Surf. Sci.* **589**, 153 (2005).  
Zitiert auf S. 26 und 28.
- [68] A. Ziane and S. Bouarab. *Phys. Rev. B* **67**, 235419 (2003).  
Zitiert auf S. 26 und 27.

## Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen

### LITERATURVERZEICHNIS

---

- [69] W. L. Mochán and R. G. Barrera. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1192 (1985). Zitiert auf S. 28.
- [70] K. Hingerl, R.E. Balderas-Navarro, W. Hilber, A. Bonanni, and D. Stifter. *Phys. Rev. B* **62**, 13048 (2000). Zitiert auf S. 28.
- [71] W.G. Schmidt, N. Esser, A.M. Frisch, P. Vogt, J. Bernholc, F. Bechstedt, M. Zorn, Th. Hannappel, S. Visbeck, F. Willig, and W. Richter. *Phys. Rev. B* **61**, R16335 (2000). Zitiert auf S. 28.
- [72] U. Rossow, L. Mantese, and D.E. Aspnes. *J. Vac. Sci. Technol.* **123/124**, 237 (1998). Zitiert auf S. 28.
- [73] S. Rusponi, G. Costantini, C. Boragno, and U. Valbusa. *Phys. Rev. Lett.* **81(13)**, 2735 (1998). Zitiert auf S. 28,35 und 38.
- [74] S. Rusponi, G. Costantini, C. Boragno, and U. Valbusa. *Phys. Rev. Lett.* **81(19)**, 4184 (1998). Zitiert auf S. 28,35 und 38.
- [75] R. Courths, S. Hüfner, P. Kemkes, and G. Wiesen. *Surf. Sci.* **376**, 43 (1997). Zitiert auf S. 31.
- [76] N. P. Blanchard, D. S. Martin, A. M. Davarpanah, S. D. Barrett, and P. Weightman. *Phys. Stat. Sol. (a)* **188(4)**, 1505 (2001). Zitiert auf S. 32.
- [77] J. Camarero, J. de la Figuera, J.J. de Miguel, R. Miranda, J. Álvarez, and S. Ferrer. *Surf. Sci.* **459**, 191 (2000). Zitiert auf S. 40.
- [78] J.E. Prieto, Ch. Rath, S. Müller, R. Miranda, and K. Heinz. *Surf. Sci.* **401**, 248 (1998). Zitiert auf S. 40.
- [79] F. Jona and P.M. Marcus. In J.F. van der Veen and M.A. van Hove, editors, *The Structure of Surfaces II*. Springer, Berlin (1987). Zitiert auf S. 40.
- [80] M.A. van Hove, S.W. Wang, D.F. Ogletree, and G.A. Somorwill. *Adv. Quantum Chem.* **20**, 1 (1989). Zitiert auf S. 40.
- [81] F. Baumberger, Th. Herrmann, A. Kara, S. Stolbov, N. Esser, T. S. Rahman, J. Osterwalder, W. Richter, and T. Greber. *Phys. Rev. Lett.* **90(17)**, 177402 (2003). Zitiert auf S. 41,45 und 46.
- [82] A. Mugarza and J. E. Ortega. *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 3281 (2003). Zitiert auf S. 41.
- [83] R. Eder and H. Winter. *Phys. Rev. B* **70(8)**, 085413 (2004). Zitiert auf S. 41.
- [84] Ludwig Bartels, S. W. Hla, A. Kuhnle, G. Meyer, K.-H. Rieder, and J. R. Manson. *Phys. Rev. B* **67(20)**, 205416 (2003). Zitiert auf S. 41.
- [85] O. Sánchez, J. M. García, P. Segovia, J. Alvarez, A. L. Vázquez de Parga, J. E. Ortega, M. Prietsch, and R. Miranda. *Phys. Rev. B* **52**, 7894 (1995). Zitiert auf S. 41.
- [86] F. Baumberger, T. Greber, and J. Osterwalder. *Phys. Rev. B* **62(23)**, 15431 (2000). Zitiert auf S. 41.

- [87] F. Baumberger, T. Greber, and J. Osterwalder. *Phys. Rev. B* **64**, 195411 (2001).  
Zitiert auf S. 41.
- [88] J. E. Ortega, S. Speller, A. R. Bachmann, A. Mascaraque, E. G. Michel, A. Närmann, A. Mugarza, A. Rubio, and F. J. Himpsel. *Phys. Rev. Lett.* **84(26)**, 6110 (2000).  
Zitiert auf S. 41.
- [89] S. Vollmer, A. Birkner, S. Lukas, G. Witte, and Ch. Wöll. *Appl. Phys. Lett.* **76(19)**, 2686 (2000).  
Zitiert auf S. 45 und 46.
- [90] M. B. Sobnack, W. C. Tan, N. P. Wanstall, T. W. Preist, and J. R. Sambles. *Phys. Rev. Lett.* **80(25)**, 5667 (1998).  
Zitiert auf S. 46 und 48.
- [91] I. R. Hooper and J. R. Sambles. *Phys. Rev. B* **66**, 205408 (2002).  
Zitiert auf S. 46 und 48.
- [92] J. A. Porto, F. J. Garcia-Vidal, and J. B. Pendry. *Phys. Rev. Lett.* **83(14)**, 2845 (1999).  
Zitiert auf S. 46 und 48.
- [93] De-Er Yi, Ying-Bai Yan, Hai-Tao Liu, Si-Lu, and Guo-Fan Jin. *Opt. Comm.* **227**, 49 (2003).  
Zitiert auf S. 46 und 48.
- [94] G. Witte, J. Braun, D. Nowack, L. Bartels, B. Neu, and G. Meyer. *Phys. Rev. B* **58**, 13224 (1998).  
Zitiert auf S. 46.
- [95] Jon-Kåre Hansen. *Electronic and Optical Surface Properties of Noble Metals Studied by Reflection Anisotropy Spectroscopy*. PhD thesis, Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet, Trondheim, Norway (2000).  
Zitiert auf S. 51,52 und 53.
- [96] D. S. Martin, S. D. Barrett, and P. Weightman. *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 9847 (2001).  
Zitiert auf S. 51,52 und 53.
- [97] Krinchik and V.A. Artem'ev. *Soviet Physics JETP* **26**, 1080 (1968).  
Zitiert auf S. 51,53 und 54.
- [98] S. D. Bader. Online kerr-calculator. <http://www.msd.anl.gov/groups/mf/JMKerrCalc/> (2004).  
Zitiert auf S. 51,53 und 54.
- [99] H. Bu, C.D. Roux, and J.W. Rabalais. *J. Chem. Phys.* **97**, 1465 (1992).  
Zitiert auf S. 51.
- [100] M. Henzler and W. Göpel. *Oberflächenphysik des Festkörpers*. B. G. Teubner, Stuttgart, 2 edition (1994). ISBN 3-519-13047-5.  
Zitiert auf S. 55.
- [101] W. Platow, U. Bovensiepen, P. Pouloupoulos, M. Farleand K. Baberschke, L. Hammer, S. Walter, S. Müller, and K. Heinz. *Phys. Rev. B* **59**, 12641 (1999).  
Zitiert auf S. 55.
- [102] S. Müller, B. Schulz, G. Kostka, M. Farle, K. Heinz, and K. Baberschke. *Surf. Sci.* **364**, 235 (1996).  
Zitiert auf S. 55.
- [103] F. Huang, M.T. Kief, G.J. Mankey, and R.F. Willis. *Phys. Rev. B* **49**, 3962 (1994).  
Zitiert auf S. 55.

## Optische Spektroskopie an Metallen und ferromagnetischen Filmen

### LITERATURVERZEICHNIS

---

- [104] K. Nakajima, H. Sawada, T. Katayama, and T. Miyazaki. *Phys. Rev. B* **54**(22), 15950 (1996). Zitiert auf S. 55,74,75,76,78 und 89.
- [105] W. L. O'Brien and B. P. Tonner. *Phys. Rev. B* **49**, 15370 (1994). Zitiert auf S. 55.
- [106] W. L. O'Brien, T. Droubay, and B. P. Tonner. *Phys. Rev. B* **54**, 9297 (1996). Zitiert auf S. 55,56 und 73.
- [107] L.H. Tjeng, Y.U. Idzerda, P. Roudolf, F. Sette, and C.T. Chen. *J. Magn. Magn. Mater.* **54**, 288 (1992). Zitiert auf S. 55.
- [108] P. Shrivastava, F. Wilhelm, A. Ney, M. Farle, H. Wende, N. Haack, G. Ceballos, and K. Baberschke. *Phys. Rev. B* **58**, 5701 (1998). Zitiert auf S. 55.
- [109] B. Schulz and K. Baberschke. *Phys. Rev. B* **50**, 13467 (1994). Zitiert auf S. 55.
- [110] S. van Dijken, R. Vollmer, B. Poelsema, and J. Kirschner. *J. Magn. Magn. Mater.* **210**, 316 (2000). Zitiert auf S. 55.
- [111] M. Farle, W. Platow, A.N. Anisimov, P. Pouloupoulos, and K. Baberschke. *Phys. Rev. B* **56**, 5100 (1997). Zitiert auf S. 55.
- [112] O. Hjortstam, K. Baberschke, J.M. Wills, B. Johansson, and O. Eriksson. *Phys. Rev. B* **55**, 15026 (1997). Zitiert auf S. 55.
- [113] S.Z. Wu, G.J. Mankey, F. Huang, and R.F. Willis. *J. Appl. Phys.* **76**, 6434 (1994). Zitiert auf S. 55.
- [114] R. Naik, C. Kota, J.S. Payson, and G.L. Dunifer. *Phys. Rev. B* **48**, 1008 (1993). Zitiert auf S. 55.
- [115] K. Baberschke and M. Farle. *J. Appl. Phys* **81**, 5038 (1997). Zitiert auf S. 55.
- [116] Xiangdong Liu, Andreas Berger, and Matthias Wuttig. *Phys. Rev. B* **63**, 144407 (2001). Zitiert auf S. 55.
- [117] R. Nünthel, T. Gleitsmann, P. Pouloupoulos, A. Scherz, J. Lindner, E. Kosubek, Ch. Litwinski, Z. Li, H. Wende, K. Baberschke, S. Stolbov, and T.S. Rahman. *Surf. Sci.* **531**, 53 (2003). Zitiert auf S. 55.
- [118] J. Lindner, P. Pouloupoulos, R. Nünthel, E. Kosubek, H. Wende, and K. Baberschke. *Surf. Sci. Lett.* **523**, L65 (2003). Zitiert auf S. 55.
- [119] J. Lindner, P. Pouloupoulos, M. Farle, and K. Baberschke. *J. Magn. Magn. Mater.* **218**, 10 (2000). Zitiert auf S. 56.
- [120] P. Pouloupoulos, M. Farle, U. Bovensiepen, and K. Baberschke. *Phys. Rev. B* **55**, R11961 (1997). Zitiert auf S. 56.

- [121] M. Sacchi, A. Minore, and S. Iacobbucci. *Surf. Sci.* **442**, 349 (1999).  
Zitiert auf S. 56,59,63 und 77.
- [122] S.Z. Wu, G.J. Mankey, and R.F. Willis. *J. Vac. Sci. Technol. A* **13(3)**, 1497 (1995).  
Zitiert auf S. 56,59,63 und 77.
- [123] M. Wahl, Th. Herrmann, N. Esser, and W. Richter. *phys. stat. sol. (c)* **0(8)**, 3002 (2003).  
Zitiert auf S. 56.
- [124] Th. Herrmann, K. Lüdge, W. Richter, K. G. Georganakis, P. Pouloupoulos, J. Lindner, Nünthel R., Wahl M., and N. Esser. *Phys. Rev. B* **73**, 134408 (2006).  
Zitiert auf S. 56.
- [125] R. Nünthel, J. Lindner, P. Pouloupoulos, and K. Baberschke. *Surf. Sci.* **566**, 100 (2004).  
Zitiert auf S. 56.
- [126] R. M. A. Azzam and N. B. Bashara. *Ellipsometry and polarized light, paperback edition*. North-Holland Personal Library, Amsterdam (1987).  
Zitiert auf S. 56.
- [127] E.D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids II*. Academic Press, San Diego C.A. (1991). pp. 435-448.  
Zitiert auf S. 57,76,78 und 79.
- [128] K. Stahrenberg, Th. Herrmann, K. Wilmers, N. Esser, and W. Richter. *Phys. Rev. B* **64**, 115111 (2001).  
Zitiert auf S. 57,76 und 79.
- [129] J. Pommier, P. Meyer, G. Pénissard, J. Ferré, P. Bruno, and D. Renard. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2054 (1990).  
Zitiert auf S. 73.
- [130] S. D. Bader. *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 440 (1991).  
Zitiert auf S. 75 und 76.
- [131] J. J. de Miguel, A. Cebollada, J. M. Gallego, R. Miranda, C. M. Schneider, P. Schuster, and J. Kirschner. *J. Magn. Magn. Mater.* **93**, 1 (1991).  
Zitiert auf S. 78.
- [132] U. Bovensiepen, P. Pouloupoulos, W. Platow, M. Farle, and K. Baberschke. *J. Magn. Magn. Mater.* **192**, L386 (1999).  
Zitiert auf S. 78.
- [133] T. Bernhard, R. Pfandzelter, M. Gruyters, and H. Winter. *Surf. Sci.* **575**, 154 (2005).  
Zitiert auf S. 78.
- [134] R. Allensbach, J. Fassbender, and U. Dürig. *Surf. Sci.* **383** (1997).  
Zitiert auf S. 78.
- [135] S. Hope, M. Tselepi, E. Gu, T. M. Parker, , and J. A. C. Bland. *J. Appl. Phys.* **85**, 6094 (1999).  
Zitiert auf S. 78 und 80.
- [136] C. Tölkes, R. Struck, R. David, P. Zeppenfeld, and G. Comsa. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2877 (1998).  
Zitiert auf S. 79.
- [137] C. Tölkes, R. David, M.A. Kryzowski, and P. Zeppenfeld. *Surf. Sci.* **454-456**, 741 (2000).  
Zitiert auf S. 79.

- [138] W. L. Ling, O. Takeuchi, D.F. Ogletree, Z.Q. Qiu, and M. Salmeron. *Surf. Sci.* **450**, 227 (2000).  
Zitiert auf S. 79,82,84 und 85.
- [139] W. L. Ling, Z.Q. Qiu, O. Takeuchi, D.F. Ogletree, and M. Salmeron. *Phys. Rev. B* **63**, 024408 (2001).  
Zitiert auf S. 79 und 80.
- [140] C. Tölkes, R. David, K. G. Tschersich, G. Comsa, and P. Zeppenfeld. *Europhys. Lett.* **46**, 589 (1999).  
Zitiert auf S. 83.

---

---

---

# Danksagung

**Herzlichen Dank möchte ich aussprechen an:**

Professor Dr. Wolfgang Richter und Professor Dr. Norbert Esser für unendliche Geduld,

Knut Stahrenberg, Matthias Wahl, Michael Gensch und Kathy Lüdge für die tatkräftige Unterstützung der Messungen,

Der gesamten Arbeitsgruppe Richter für das äußerst angenehme Arbeitsklima,

Der AG. Baberschke und AG. Osterwalder für die Kooperationen,

Bert Rähmer, Karsten Hinrichs, Claudia Hinrichs, Michael Gensch, Sandhya Chandola, Christoph Cobet, und Munise Rakel für stetes Ermahnen,

Daniela Zankl für das Korrigieren unerträglicher Rechtschreibfehler,

und Beatrix Pollakowski für unermüdliche Beharrlichkeit.

---